

**INAUGURAL–DISSERTATION**  
**zur**  
**Erlangung der Doktorwürde**  
**der**  
**Naturwissenschaftlich–Mathematischen**  
**Gesamtfakultät**  
**der Ruprecht–Karls–Universität**  
**Heidelberg**

vorgelegt von  
Dipl.–Phys. Markus Vogelgesang  
aus Landau / Pfalz

Tag der mündlichen Prüfung: 19. Oktober 2005



**Entwicklung eines  
Reynolds–Spannungs–Modells  
zur Modellierung  
turbulenter Sprayflammen**

Gutachter: Prof. Dr. Eva Gutheil  
Prof. Dr. Bernd Jähne



## Zusammenfassung

In der vorliegenden Arbeit wird ein Reynolds–Spannungs–Modell (RSM) zur Beschreibung turbulenter Sprayflammen entwickelt. Aus einem RSM für reine Gasphasen werden erweiterte Gleichungen unter Berücksichtigung von zusätzlichen Quelltermen durch die flüssige Phase hergeleitet. Für die Gasphase werden die Erhaltungsgleichungen der Favre–gemittelten physikalischen Größen in einer Eulerschen Betrachtungsweise numerisch gelöst. Mit der Annahme eines dünnen Sprays wird die flüssige Phase durch eine endliche Anzahl von Tropfenpaketen beschrieben, die in der turbulenten Gasphase verdampfen. Die Trajektorien der Tropfen werden in einer Lagrange–Formulierung berechnet und ihre Wechselwirkung mit der Gasphase über statistische Methoden modelliert. Hierzu werden neue Modellierungsansätze formuliert. Die chemischen Reaktionen des Verbrennungsprozesses werden über das Flamelet–Modell für laminare Spraydiffusionsflammen erfasst. Hierbei liefern die Sprayflammenbibliotheken über statistische Verteilungsfunktionen des Mischungsbruchs und der skalaren Dissipationsrate die Gastemperatur und die Gemischzusammensetzung der Gasphase. Der Einfluss der Abhängigkeit der Spraybibliotheken von der Tropfengröße auf turbulente Sprayflammen wurde untersucht. Das neue RSM wurde durch Vergleiche mit Simulationen, die das  $k$ - $\varepsilon$ -Modell verwenden, sowie Experimenten an einem reagierenden und nicht reagierenden Methanolspray verifiziert. Numerische Simulationen mit dem neuen RSM für Sprayflammen liefern im Vergleich zum  $k$ - $\varepsilon$ -Modell zusätzlich die Varianzen und Korrelationen der Gasgeschwindigkeit und steigern die Qualität der Ergebnisse.

## Abstract

This work presents the development of a Reynolds–Stress–Model (RSM) to describe turbulent spray flames. Based on a RSM for gas phases enhanced equations have been developed considering additional source terms for the liquid phase. Using an Eulerian formalism differential equations of the Favre–averaged physical quantities for the gas phase are solved numerically. On the assumption of thin spray, the liquid phase can be described by a number of droplet packages, evaporating in the turbulent gas. Their trajectories can be described by a Lagrangian formalism. Their interaction with the gas phase is modelled by statistical methods. Herefore new ways of modelling the terms of interaction have been invented. The chemical reactions are considered using the flamelet–model for laminar diffusion flames. With the help of statistical probability distribution functions of the mixture fraction and the scalar dissipation rate, the gas temperature and the species mass fractions of the turbulent gas phase can be received out of the laminar spray flame libraries. The effect of the dependance of the spray flame libraries from the droplet size to the turbulent spray flames has been investigated. The new RSM has been verified by comparison to numerical simulations based on the  $k$ - $\varepsilon$ -model, as well as to experiments of a reacting and a non–reacting methanol spray. Numerical simulations using the new RSM for turbulent spray flames instead of the  $k$ - $\varepsilon$ -model deliver additional information about the variances and correlations of the gas velocity and improve the quality of the results.



# Inhaltsverzeichnis

<b>1. Einleitung</b> . . . . .	1
<b>2. Thermophysikalische Grundlagen turbulenter, chemisch reaktiver Systeme</b> . . . . .	5
2.1 Gasphasengleichungen mit Spray-Quelltermen . . . . .	7
2.1.1 Massenerhaltung . . . . .	7
2.1.2 Mischungsbruch . . . . .	10
2.1.3 Impulserhaltung . . . . .	11
2.1.4 Energieerhaltung . . . . .	12
2.1.5 Allgemeine Form der Erhaltungsgleichungen . . . . .	12
2.2 Phänomene und Beschreibungsweise turbulenter Strömungen . . . . .	15
2.2.1 Turbulente Skalen . . . . .	16
2.2.2 Reynolds- und Favre-Mittelung . . . . .	18
2.2.3 Erhaltungsgleichungen für Favre-Mittelwerte . . . . .	21
2.2.4 Überblick über verschiedene Turbulenzmodelle . . . . .	23
2.2.5 Reynolds-Spannungs-Modell für turbulente Sprayflammen . . . . .	26
2.3 Beschreibung der flüssigen Phase . . . . .	35
2.3.1 LHF- und SF-Modelle . . . . .	37
2.3.2 Tropfenbewegung und turbulente Dispersion . . . . .	38
2.3.3 Tropfenverdampfung . . . . .	41
2.3.4 Tropfenerwärmung . . . . .	43
2.3.5 Statistische Beschreibung eines Sprays . . . . .	45
2.3.6 Sprayquellterme in den Gasphasengleichungen . . . . .	46
2.4 Modellierung der chemischen Reaktionen . . . . .	48
2.4.1 Skalare Dissipationsgeschwindigkeit . . . . .	50
2.4.2 Kopplung der laminaren Flamelets an das turbulente Strömungsfeld . . . . .	51
2.4.3 Klassifizierung turbulenter Flammen im Peters-Diagramm . . . . .	53
2.4.4 Flamelet-Modell für Spraydiffusionsflammen . . . . .	56

---

<b>3. Angewandte numerische Methoden</b> . . . . .	61
3.1 Stationäre, axialsymmetrische Form der Differentialgleichungen . . . . .	61
3.2 Randbedingungen . . . . .	63
3.3 Diskretisierung und Lösungsalgorithmus . . . . .	64
<b>4. Ergebnisse der Simulationsrechnungen</b> . . . . .	67
4.1 Definition der Anfangs- und Randbedingungen . . . . .	68
4.1.1 Versuchsaufbau . . . . .	68
4.1.2 Erzeugung der Tropfenverteilung und Randbedingungen . . . . .	69
4.2 Simulation eines nicht reagierenden Methanolsprays . . . . .	71
4.3 Simulation eines reagierenden Methanolsprays . . . . .	89
4.4 Einfluss verschiedener Bibliotheken . . . . .	104
4.4.1 Einfluss der Auswahl der Spraybibliotheken . . . . .	104
4.4.2 Einfluss der Konfiguration der Gegenstromanordnung der lamina- ren Bibliotheken . . . . .	109
4.5 Vorbereitung zur Simulation eines reagierenden Ethanol-sprays . . . . .	112
4.5.1 Laminare Sprayflammenbibliothek für den Brennstoff Ethanol . . . . .	113
4.5.2 Auswertung der turbulenten Ethanol-Sprayflamme . . . . .	115
<b>5. Zusammenfassung und Ausblick</b> . . . . .	119
<b>Anhang</b> . . . . .	123
<b>A. Symbolverzeichnis</b> . . . . .	A-1
<b>B. Koeffizienten der Turbulenzmodelle</b> . . . . .	B-1

# Tabellenverzeichnis

2.1	Diffusions- und Quellterme . . . . .	13
2.2	Stoffeigenschaften von Methanol und Ethanol . . . . .	43
B.1	Turbulenzparameter, viskose Spannungen . . . . .	B-1
B.2	Turbulenzparameter, Dissipationsrate . . . . .	B-1
B.3	Turbulenzparameter, skalare Größen . . . . .	B-1



# Abbildungsverzeichnis

2.1	Turbulentes Energiespektrum . . . . .	17
2.2	Schema einer rotationssymmetrischen Spraydiffusionsflamme . . . . .	36
2.3	Schema des Zweifilm-Modells . . . . .	39
2.4	Schematische Tröpfchenbahn durch mehrere Wirbel . . . . .	40
2.5	Verteilung der Tropfengrößen für ein Wasserspray in Luft . . . . .	45
2.6	Turbulente Diffusionsflamme und Flammenschichten ( <i>Flamelet</i> ) . . . . .	49
2.7	Schematische Darstellung einer laminaren Gegenstromdiffusionsflamme	50
2.8	Schematischer Temperaturverlauf von Flamelets über dem Mischungs- bruch $\xi_C$ . . . . .	51
2.9	Mischungsbruchverlauf über einer Ortskoordinate . . . . .	54
2.10	Peters-Diagramm: Verschiedene Bereiche einer turbulenten Diffusions- flamme . . . . .	55
2.11	Struktur laminarer Methanol-Luft-Gasflammen in der Gegenstromkon- figuration . . . . .	59
2.12	Struktur laminarer Methanol-Luft-Sprayflammen in der Gegenstrom- konfiguration . . . . .	60
3.1	Randbedingungen des Berechnungsgebietes . . . . .	63
3.2	Gitteranordnung der versetzten Gitter ( <i>staggered grid</i> ) . . . . .	64
4.1	Skizze des Versuchsaufbaus von McDonell und Samuelsen . . . . .	68
4.2	Temperaturverteilung eines verdampfenden, nicht reagierenden Metha- nolsprays mit RS-Modell . . . . .	72
4.3	Temperaturverteilung eines verdampfenden, nicht reagierenden Metha- nolsprays mit $k$ - $\varepsilon$ -Modell . . . . .	73
4.4	Sauterradien eines verdampfenden, nicht reagierenden Methanolsprays im Vergleich . . . . .	74
4.5	Massenbrüche $\tilde{Y}_{\text{CH}_3\text{OH}}$ eines verdampfenden, nicht reagierenden Metha- nolsprays bei $x = 25$ mm im Vergleich . . . . .	75
4.6	Massenbrüche $\tilde{Y}_{\text{CH}_3\text{OH}}$ eines verdampfenden, nicht reagierenden Metha- nolsprays bei $x = 100$ mm im Vergleich . . . . .	75

4.7	Geschwindigkeiten $\tilde{u}$ und $\tilde{v}$ eines verdampfenden, nicht reagierenden Methanolsprays bei $x = 25$ mm . . . . .	76
4.8	Geschwindigkeiten $\tilde{u}$ und $\tilde{v}$ eines verdampfenden, nicht reagierenden Methanolsprays bei $x = 100$ mm . . . . .	76
4.9	Axiale Gasgeschwindigkeit $\tilde{u}$ eines verdampfenden, nicht reagierenden Methanolsprays auf der Symmetrieachse . . . . .	77
4.10	Normierte axiale Gasgeschwindigkeit eines turbulenten Methanolsprays	78
4.11	Normierte axiale Gasgeschwindigkeit eines turbulenten Strahls . . . . .	79
4.12	Geschwindigkeitsvarianzen eines verdampfenden, nicht reagierenden Methanolsprays auf der Symmetrieachse . . . . .	80
4.13	Geschwindigkeitsvarianzen eines verdampfenden, nicht reagierenden Methanolsprays bei $x = 25$ mm . . . . .	80
4.14	Geschwindigkeitsvarianzen eines verdampfenden, nicht reagierenden Methanolsprays bei $x = 100$ mm . . . . .	81
4.15	Normierte Korrelationen eines turbulenten, axialsymmetrischen Strahls	82
4.16	Normierte Korrelationen eines turbulenten Methanolsprays . . . . .	82
4.17	Korrelationskoeffizient $\rho_{uv}$ und $\tilde{u''v''}/\tilde{k}$ eines verdampfenden, nicht reagierenden Methanolsprays bei $x = 25$ mm . . . . .	83
4.18	Korrelationskoeffizient $\rho_{uv}$ und $\tilde{u''v''}/\tilde{k}$ eines verdampfenden, nicht reagierenden Methanolsprays bei $x = 100$ mm . . . . .	83
4.19	Korrelationskoeffizient $\rho_{uv}$ und $\tilde{u''v''}/\tilde{k}$ eines turbulenten, axialsymmetrischen Strahls . . . . .	84
4.20	Anfangsprofile der Gasgeschwindigkeit . . . . .	86
4.21	Gasgeschwindigkeitsfeld eines turbulenten nicht reagierenden Methanolsprays ohne Rezirkulationszone . . . . .	86
4.22	Gasgeschwindigkeitsfeld eines turbulenten nicht reagierenden Methanolsprays mit Rezirkulationszone . . . . .	87
4.23	Gasgeschwindigkeiten $\tilde{u}$ und $\tilde{v}$ eines verdampfenden, nicht reagierenden Methanolsprays mit und ohne Rezirkulationszone . . . . .	87
4.24	Sauterradien eines verdampfenden, nicht reagierenden Methanolsprays mit und ohne Rezirkulation . . . . .	88
4.25	Massenbrüche $\tilde{Y}_{\text{CH}_3\text{OH}}$ eines verdampfenden, nicht reagierenden Methanolsprays mit und ohne Rezirkulation bei $x = 25$ mm . . . . .	89
4.26	Die im Peters–Diagramm eingezeichneten Punkte identifizieren die simulierte Flamme . . . . .	90
4.27	Temperaturverteilung eines reagierenden Methanolsprays mit RS–Modell	91
4.28	Temperaturverteilung eines reagierenden Methanolsprays mit $k$ - $\epsilon$ -Modell	91

4.29 Radiale Profile von $\tilde{T}$ , $\tilde{\xi}_C$ , $\tilde{Y}_{CO_2}$ und $\tilde{Y}_{OH}$ eines reagierenden Methanol- sprays bei $x = 25$ mm . . . . .	92
4.30 Radiale Profile von $\tilde{T}$ , $\tilde{\xi}_C$ , $\tilde{Y}_{CO_2}$ und $\tilde{Y}_{OH}$ eines reagierenden Methanol- sprays bei $x = 75$ mm . . . . .	92
4.31 Radiale Profile von $\tilde{T}$ , $\tilde{\xi}_C$ , $\tilde{Y}_{CO_2}$ und $\tilde{Y}_{OH}$ eines reagierenden Methanol- sprays bei $x = 100$ mm . . . . .	93
4.32 Radiale Profile von $r_S$ und $\bar{L}_v$ eines reagierenden Methanolsprays bei $x = 25$ mm . . . . .	95
4.33 Radiale Profile $r_S$ und $\bar{L}_v$ eines reagierenden Methanolsprays bei $x =$ $75$ mm . . . . .	95
4.34 Radiale Profile $r_S$ und $\bar{L}_v$ eines reagierenden Methanolsprays bei $x =$ $100$ mm . . . . .	96
4.35 Gasgeschwindigkeit $\tilde{u}$ eines reagierenden Methanolsprays bei $x = 25$ mm	97
4.36 Gasgeschwindigkeit $\tilde{u}$ eines reagierenden Methanolsprays bei $x = 75$ mm	97
4.37 Gasgeschwindigkeit $\tilde{u}$ eines reagierenden Methanolsprays bei $x = 100$ mm	98
4.38 Normierte axiale Gasgeschwindigkeit eines reagierenden Methanolsprays	99
4.39 Geschwindigkeitsfeld der Gasphase einer turbulenten Methanol-Spray- flamme . . . . .	99
4.40 Korrelationen eines reagierenden Methanolsprays bei $x = 25$ mm . . . .	101
4.41 Korrelationen eines reagierenden Methanolsprays bei $x = 75$ mm . . . .	101
4.42 Korrelationen eines reagierenden Methanolsprays bei $x = 100$ mm . . .	102
4.43 Korrelationskoeffizienten eines reagierenden Methanolsprays . . . . .	102
4.44 Radiale $r_S$ -Profile bei unterschiedlicher Auswahl der Spraybibliotheken	105
4.45 Radiale $\tilde{u}$ -Profile bei $x = 25$ mm bei unterschiedlicher Auswahl der Spraybibliotheken . . . . .	106
4.46 Radiale Profile von $\tilde{T}$ , $\tilde{\xi}_C$ und $\tilde{Y}_{OH}$ bei $x = 25$ mm bei unterschiedlicher Auswahl der Spraybibliotheken . . . . .	106
4.47 Radiale $\tilde{u}$ -Profile bei $x = 75$ mm bei unterschiedlicher Auswahl der Spraybibliotheken . . . . .	107
4.48 Radiale Profile von $\tilde{T}$ , $\tilde{\xi}_C$ und $\tilde{Y}_{OH}$ bei $x = 75$ mm bei unterschiedlicher Auswahl der Spraybibliotheken . . . . .	107
4.49 Radiale $r_S$ -Profile bei unterschiedlicher Konfiguration der Spraybiblio- theken . . . . .	109
4.50 Radiale $\tilde{u}$ -Profile bei $x = 25$ mm bei unterschiedlicher Konfiguration der Spraybibliotheken . . . . .	110
4.51 Radiale Profile von $\tilde{T}$ , $\tilde{\xi}_C$ und $\tilde{Y}_{OH}$ bei $x = 25$ mm bei unterschiedlicher Konfiguration der Spraybibliotheken . . . . .	110

4.52	Radiale $\tilde{u}$ -Profile bei $x = 75$ mm bei unterschiedlicher Konfiguration der Spraybibliotheken . . . . .	111
4.53	Radiale Profile von $\tilde{T}$ , $\tilde{\xi}_C$ und $\tilde{Y}_{OH}$ bei $x = 75$ mm bei unterschiedlicher Konfiguration der Spraybibliotheken . . . . .	111
4.54	Laminare Sprayflammenstruktur einer rotationssymmetrischen Gegenstromdiffusionsflamme mit Brennstoff Ethanol . . . . .	114
4.55	Gastemperaturverteilung eines reagierenden Ethanolstrahls . . . . .	115
4.56	Normierte axiale Gasgeschwindigkeit eines reagierenden Ethanolstrahls .	116

# 1. Einleitung

Der Energieverbrauch einer Gesellschaft kann als Maß der Lebensqualität angesehen werden. Die weltweit steigenden Ansprüche an Lebensqualität und Mobilität bedingen stetig wachsenden Energiebedarf. Nach wie vor spielt die Energiegewinnung aus fossilen Energieträgern eine Schlüsselrolle bei der Deckung des weltweiten Energiebedarfs. Angesichts der begrenzten Ressourcen an fossilen Energieträgern wächst die Bedeutung alternativer Konzepte. Diese sind jedoch auch in absehbarer Zeit nicht in der Lage, die fossilen Primärenergieträger abzulösen und die Energieversorgung zu sichern.

Neben den immer schneller abnehmenden Vorräten an fossilen Brennstoffen ist bei der Energiegewinnung durch Verbrennung fossiler Energieträger die Emission von Schadstoffen, die zunehmend das Klima beeinflussen sowie Mensch und Umwelt gefährden, problematisch. Wegen der großen Bedeutung der Verbrennungsprozesse sind hohe Anforderungen an die technische Realisierung des jeweiligen Energiegewinnungsprozesses zu stellen.

Zur Optimierung der Verbrennungsprozesse durch Verbesserung der Gesamtwirkungsgrade bei gleichzeitiger Reduzierung der Schadstoffe ist ein detailliertes Verständnis der chemischen und physikalischen Prozesse unabdingbar. Dabei werden, bedingt durch die immense Entwicklung der Rechnerkapazitäten, neben experimentellen Untersuchungen vor allem numerische Simulationen von Verbrennungsvorgängen immer wichtiger und leisten einen wesentlich Beitrag. Mittels Simulationen sind die Variation und Optimierung von die Verbrennung beeinflussenden Parametern in der Regel sehr viel einfacher und ohne aufwändige Änderungen am Versuchsaufbau möglich. Es sind hierzu ausgereifte und leistungsstarke physikalisch–chemisch–mathematische Modelle und numerische Methoden zur Beschreibung der verschiedensten Zusammenhänge notwendig. In der Entwicklung solcher Modelle wurde in den vergangenen Jahren große Fortschritte erzielt.

Bei turbulenten Verbrennungsprozessen flüssiger Brennstoffe, wie sie in der vorliegenden Arbeit untersucht werden und beispielsweise in Öfen oder Verbrennungsmotoren ablaufen, müssen vielfältige komplexe Phänomene beschrieben und modelliert werden:

- Turbulenz: Wegen der hohen Leistungen und Energiefreisetzung verlaufen die meisten Verbrennungsprozesse turbulent. Neben der Beschreibung des turbulenten

ten Strömungsverhaltens müssen komplexe Wechselwirkungen von turbulentem Stoff- und Wärmetransport mit chemischen Reaktionen berücksichtigt werden ([1–3]).

- Mehrphasensysteme mit Spray: Wird ein flüssiger Brennstoff verwendet, so wird dieser aufgeheizt und verdampft in einer turbulenten, konvektiven Umgebung. Es genügt nicht jede Phase für sich zu betrachten, die Modelle müssen auch die Einflüsse der verschiedenen Phasen aufeinander abdecken ([4–7]).
- Chemische Reaktionen: Eine detaillierte Beschreibung der chemischen Reaktionsmechanismen unter Berücksichtigung von Nichtgleichgewichtsprozessen und der Wechselwirkung der chemischen Reaktionen mit der Turbulenz ist notwendig ([2, 4]).

Die hier verwendete Formulierung der Erhaltungsgleichungen zur Beschreibung der turbulenten Gasphase basiert auf einem Reynolds–Spannungs–Modell (RSM) für reine Gasphasen; dabei werden Transportgleichungen für Momente zweiter Ordnung gelöst und es können anisotrope Effekte turbulenter Strömungen erfasst werden (Kapitel 2). Wesentlicher Inhalt dieser Arbeit ist die Entwicklung eines RSM für turbulente Spraydiffusionsflammen. Aufbauend auf einem RSM für turbulente gasförmige Strömungen [1,2,8] wurden neue Erhaltungsgleichungen entwickelt. Dabei sind erstmals zusätzliche Quellterme zur Beschreibung der Wechselwirkungen zwischen Turbulenz und flüssiger Phase enthalten (Abschnitte 2.1 und 2.2).

Die Anwendbarkeit der Modelle zur Beschreibung der flüssigen Phase und ihrer Interaktion mit der Gasphase hängt sehr stark vom Volumenverhältnis der flüssigen zur gasförmigen Phase ab. In den hier betrachteten Fällen wird grundsätzlich davon ausgegangen, dass die flüssige Phase in Form eines dünnen Sprays vorliegt und das flüssige Sprayvolumen gegenüber dem Gasvolumen vernachlässigbar ist. Die Beschreibung der flüssigen Phase erfolgt in Abschnitt 2.3 über Modelle zur Dynamik ([9]), Aufheizung und Verdampfung von Einzeltropfen in einer konvektiven Umgebung ([10,11]). Zur Betrachtung der Gesamtheit der Tropfen finden statistische Methoden Anwendung, die auch die Wechselwirkungen mit der Turbulenz der Gasphase berücksichtigen. Desweiteren werden Modellierungsansätze für die neu eingeführten Sprayquellterme in den Gasphasengleichungen gegeben.

Lässt sich eine turbulente Flamme lokal in dünne, laminare Flämmchen zerlegen, so kann das sogenannte Flamelet–Modell (Flammenschichten–Modell) für turbulente Diffusionsflammen zur Modellierung der chemischen Reaktionen angewendet werden [2, 12]. Die Voraussetzungen werden anhand des Peters–Diagramms [13] geprüft und sind für die hier betrachteten Fälle erfüllt. Es werden Sprayflammenbibliotheken für laminare Diffusionsflammen verwendet ([12,14]), die Abhängigkeiten von der Trop-

fengröße sowie der Streckungsrate enthalten und in denen detaillierte Reaktionsmechanismen ([15]) berücksichtigt sind. Aus den lokal vorliegenden physikalischen Eigenschaften im turbulenten Strömungsfeld werden die Gemischzusammensetzung und die Temperatur aus den laminaren Spraybibliotheken bestimmt. Dabei wird über statistische Verteilungen des Mischungsbruchs ([2, 12, 16]) und der skalaren Dissipationsgeschwindigkeit ([17–19]) die Wechselwirkung zwischen Turbulenz und chemischen Reaktionen beschrieben (Abschnitt 2.4).

Das folgende Kapitel 3 geht auf die wesentlichen Grundzüge der verwendeten numerischen Methoden ein.

Die Ergebnisse verschiedener Simulationsrechnungen sind in Kapitel 4 gezeigt und ausgewertet. Das neu entwickelte Modell wird anhand eines turbulenten, nicht reagierenden (Abschnitt 4.2) sowie reagierenden (Abschnitt 4.3) Freistahls mit verdampfendem Methanol-Spray getestet und mit experimentellen Messungen [20] sowie einer Simulation mit dem  $k$ - $\varepsilon$ -Modell [12] verglichen. Für den Brennstoff Methanol wird in Abschnitt 4.4 der Einfluss unterschiedlicher Auswahlkriterien für die Sprayflammenbibliotheken untersucht. In Abschnitt 4.5 sind die Vorbereitung des verwendeten Computerprogramms auf den Brennstoff Ethanol, die Einbindung der Sprayflammenbibliotheken für den neuen Brennstoff sowie eine erste Simulationsrechnung dargestellt.



## 2. Thermophysikalische Grundlagen turbulenter, chemisch reaktiver Systeme

Bei der mathematischen Beschreibung von turbulenten (Spray-)Flammen besteht die Aufgabe darin, Lösungen der Felder  $\vec{u}(\vec{x}, t)$ ,  $p(\vec{x}, t)$ ,  $\rho(\vec{x}, t)$ ,  $T(\vec{x}, t)$  und  $Y_{\alpha=1, \dots, N}(\vec{x}, t)$  zu berechnen. Hierbei bezeichnen  $\vec{u}$  die Geschwindigkeit,  $p$  den Druck,  $\rho$  die Dichte,  $T$  die Temperatur,  $N$  die Anzahl der beteiligten Spezies und  $Y_{\alpha}$  den Massenbruch der Spezies  $\alpha$  am Ort  $\vec{x}$  zur Zeit  $t$ .

In fast allen praktischen Anwendungen, wie auch in den in dieser Arbeit betrachteten Fällen, kann von der Vorstellung ausgegangen werden, dass das Berechnungsgebiet von einem Kontinuum durchströmt wird (*continuum hypothesis*) [1]. Dies ist immer dann gerechtfertigt, wenn das Verhältnis von mittlerer freier Weglänge  $\lambda$  der Atome bzw. Moleküle zur kleinsten geometrischen Längeneinheit  $l$  der Strömung (*Knudsen-Zahl* Kn) viel kleiner als eins ist:

$$\text{Kn} \equiv \frac{\lambda}{l} \ll 1. \quad (2.1)$$

Werden mehrphasige Systeme betrachtet, so ist zur vollständigen Beschreibung zusätzlich zu den oben genannten Feldern die Angabe über den Phasenzustand (flüssig oder gasförmig) am Ort  $\vec{x}$  zur Zeit  $t$  gefordert und die Interaktion der verschiedenen Phasen muss erfasst werden. Die Verbrennung flüssigen Brennstoffs ist ein komplexer Vorgang, der verschiedene physikalische und chemische Prozesse umfasst. Von *Spray* spricht man dann, wenn so viele flüssige Teilchen vorhanden sind, dass zu ihrer Beschreibung statistische Modelle erforderlich sind. Zum Verständnis der Sprayverbrennung sind die Mechanismen der Aufheizung, Verdampfung und Verbrennung von Einzeltröpfchen sowie statistische Methoden zur Beschreibung der Gesamtheit der Tröpfchen nötig. Hierzu existieren verschiedene Modelle, deren Anwendbarkeit von den Bedingungen und Eigenschaften des Systems abhängen (Kapitel 2.3).

In der vorliegenden Arbeit wird zur Behandlung der gasförmigen und flüssigen Phasen von der Annahme eines *dünnen Sprays* ausgegangen, d.h. einem gegenüber dem Gasvolumen vernachlässigbaren Volumen der flüssigen Tropfen, sodass die Einflüsse der Tröpfchen auf die Gasphase als Punktquellterme in den jeweiligen Gasgleichungen auftreten und die Wechselwirkungen der Tröpfchen untereinander vernachlässigt

## 6 2. Thermophysikalische Grundlagen turbulenter, chemisch reaktiver Systeme

werden können; ein diskretes Tröpfchenmodell kann verwendet werden. Hieraus begründet sich eine *Euler–Lagrange–Formulierung* der mathematischen Grundgleichungen: Während in der Notation der Gasphasengleichungen (Kapitel 2.1 und 2.2) die zeitliche Änderung der die Strömung charakterisierenden Größen betrachtet wird (Euler–Formulierung), werden für die flüssige Phase (Kapitel 2.3) die Trajektorien der Tropfen verfolgt (Lagrange’sche Betrachtungsweise). Die Kopplung der beiden Phasen erfolgt mittels zusätzlicher Quellterme in den Gasphasengleichungen. Eine solche Betrachtungsweise bietet einen engen Bezug zur experimentellen Untersuchung turbulenter Sprayflammen: Messungen der Gaseigenschaften werden meist an räumlich konstanten Punkten vorgenommen, und die Trajektorien und Größenverteilung der flüssigen Brennstofftropfen werden mittels optischer Methoden bestimmt. Dazu gehören z.B. das Phasen–Doppler–Anemometer (PDPA) [70, 95, 96], das differentielle optische Verfahren *particle image velocimetry* PIV zur Geschwindigkeitsbestimmung der Tropfen und das *Laserinduzierte Fluoreszenz* LIF–Verfahren, bei dem die Größeninformation der Tröpfchen über einen in die nicht-fluoreszierenden Brennstofftropfen beigemengten fluoreszierenden Farbstoff ermittelt wird [21–23].

In Kapitel 2.1 werden die ungemittelten Erhaltungsgleichungen für die Gasphase aufgestellt, wobei Sprayquellterme mitgeführt werden.

Für die Erfassung anisotroper Effekte in turbulenten Strömungen sind Momentenmodelle erster Ordnung nicht ausreichend [24, 25], da Korrelationen zweiter Ordnung algebraisch mit Größen der Hauptströmung verknüpft sind (Kapitel 2.2). Deshalb wird zur Beschreibung der Turbulenz ein Reynolds–Spannungs–Modell (RSM) verwendet, in dem im Unterschied zu den Momentenmodellen erster Ordnung Transportgleichungen für die Korrelationen zweiter Ordnung gelöst werden; dieses RSM wird um die Einflüsse der flüssigen Phase ergänzt (Kapitel 2.2).

Dazu ist die Erfassung der flüssigen Phase und die Modellierung zusätzlicher Quellterme zur Beschreibung der Wechselwirkung von Turbulenz und Spray nötig. Darauf wird in Kapitel 2.3 eingegangen.

Die Behandlung der chemischen Reaktionen und deren Kopplung an das Strömungsfeld geschieht über ein Flamelet–Modell (Flammenschichten–Modell) für turbulente Sprayflammen (Kapitel 2.4). Dieses wurde aufbauend auf einem Flamelet–Modell für Gasdiffusionsflammen [2] von Hollmann und Gutheil [12, 26] auf Zweiphasenströmungen erweitert. Es ermöglicht die Beschreibung einer dreidimensionalen Diffusionsflamme mit Hilfe eines eindimensionalen Systems [2]. Die Voraussetzungen seiner Anwendbarkeit werden über das Peters–Diagramm [13] klassifiziert und sind in den hier betrachteten Fällen gegeben.

## 2.1 Gasphasengleichungen mit Spray–Quelltermen

Inhalt dieses Kapitels ist das Aufstellen der Erhaltungsgleichungen der physikalisch-chemischen Größen für die Gasphase. Dabei werden Quellterme der flüssigen Phase unter der Voraussetzung eines dünnen Sprays in die Differentialgleichungen integriert.

Ausgangspunkt zur Berechnung der gesuchten Felder der Gasphase sind die Erhaltungssätze von Masse, Impuls und Energie. Nach den Erhaltungssätzen der Gesamtmasse (Kapitel 2.1.1.1) und der Speziesmassen (Kapitel 2.1.1.2) werden in den Abschnitten 2.1.1.3 und 2.1.2 die Bilanzgleichungen der Elementmassen und des Mischungsbruchs hergeleitet, deren Struktur sich analog zu den Speziesgleichungen verhält. Zusammen mit den Gleichungen für Impuls (Kapitel 2.1.3) und Energie (Kapitel 2.1.4) lassen sie sich in einer einheitlichen Form darstellen (Kapitel 2.1.5). Die aus dem verdampfenden Spray resultierenden Quellterme ( $L_\phi$ ) werden in den hier dargestellten Erhaltungsgleichungen mitgeführt, ohne zunächst ihre exakte Form anzugeben; dies geschieht im Zusammenhang mit der Spraymodellierung, die in Kapitel 2.3 behandelt wird.

### 2.1.1 Massenerhaltung

#### 2.1.1.1 Gesamtmasse

Da unter der Annahme eines dünnen Sprays das Volumen der verdampfenden flüssigen Phase relativ zur gasförmigen Phase vernachlässigbar klein ist, können die Tropfen in der Bilanzierung der Massen als Massenpunkte betrachtet werden. Mit dem Quellterm  $L_v$  der verdampfenden flüssigen Phase ergibt sich aus der Erhaltung der Gesamtmasse für die Gasphase

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \vec{u}) = L_v. \quad (2.2)$$

Um eine Aussage über die Zusammensetzung des Gemischs treffen zu können, müssen die Bilanzgleichungen der Speziesmassen betrachtet werden:

#### 2.1.1.2 Speziesmassen

Die Speziesmassendichten  $\rho_\alpha$  sind gegeben durch

$$\rho_\alpha = \rho Y_\alpha, \quad \alpha = 1, \dots, N \quad (2.3)$$

mit der Normierungsbedingung

$$\sum_{\alpha=1}^N Y_\alpha = 1. \quad (2.4)$$

## 8 2. Thermophysikalische Grundlagen turbulenter, chemisch reaktiver Systeme

Zur Betrachtung ihrer Erhaltungsgleichungen werden zunächst die Geschwindigkeiten der einzelnen Spezies und die spezifischen Reaktionsgeschwindigkeiten der chemischen Reaktionen eingeführt:

Die Speziesgeschwindigkeiten  $\vec{u}_\alpha$  setzen sich zusammen aus der Schwerpunktschwindigkeit  $\vec{u}$  und einer Diffusionsgeschwindigkeit  $\vec{U}_{\alpha,\text{Diff}}$  relativ zum Schwerpunkt:

$$\vec{u}_\alpha = \vec{u} + \vec{U}_{\alpha,\text{Diff}}. \quad (2.5)$$

Die Definition der Schwerpunktschwindigkeit

$$\vec{u} = \sum_{\alpha=1}^N Y_\alpha \vec{u}_\alpha \quad (2.6)$$

führt zu

$$\sum_{\alpha} Y_\alpha \vec{U}_{\alpha,\text{Diff}} = 0. \quad (2.7)$$

Die spezifische Reaktionsgeschwindigkeit  $\omega_\alpha$  gibt die Produktionsrate der Spezies  $\alpha$  bei den chemischen Reaktionen an. Sie ergibt sich aus der Summe über die Reaktionsgeschwindigkeiten der Elementarreaktionen

$$\omega_\alpha = \sum_{r=1}^R \omega_{\alpha r}, \quad (2.8)$$

wobei  $R$  die Anzahl der Elementarreaktionen angibt. Die Elementarreaktionen werden beschrieben durch [27]

$$\sum_{\alpha=1}^N \nu'_{\alpha r} S_\alpha \rightleftharpoons \sum_{\alpha=1}^N \nu''_{\alpha r} S_\alpha, \quad r = 1, \dots, R \quad (2.9)$$

mit den chemischen Symbolen  $S_\alpha$  und den stöchiometrischen Koeffizienten  $\nu'_{\alpha r}$  bzw.  $\nu''_{\alpha r}$  der Reaktanden  $\alpha$  bei der Elementarreaktion  $r$ . Die Reaktionsgeschwindigkeiten  $\omega_{\alpha r}$  der Elementarreaktionen sind gegeben durch [27]

$$\omega_{\alpha r} = M_\alpha (\nu''_{\alpha r} - \nu'_{\alpha r}) k_r \prod_{\beta=1}^N \left( \frac{\rho Y_\beta}{M_\beta} \right)^{\nu'_{\beta r}}. \quad (2.10)$$

Hierbei bezeichnet  $M_\alpha$  die molare Masse der Spezies  $\alpha$ . Die Reaktionsgeschwindigkeitskoeffizienten  $k_r$  der einzelnen Reaktionen sind als Funktionen der Temperatur  $T$  in der Form  $k_r = A_r T^{\gamma_r} \exp\left(-\frac{E_{ar}}{RT}\right)$  gegeben mit den Parametern  $A_r$ ,  $\gamma_r$ , der Aktivierungsenergie  $E_{ar}$  sowie der allgemeinen Gaskonstanten  $R$  [3, 27]. Durch chemische Reaktionen wird in der Summe zwar Masse weder erzeugt noch vernichtet, d.h.

$$\sum_{\alpha=1}^N \omega_\alpha = 0, \quad (2.11)$$

jedoch werden Spezies ineinander umgewandelt (i.Allg.:  $\omega_\alpha \neq 0$ ).

Mit dem Verdampfungsquellterm  $L_{v,\alpha}$  der Spezies  $\alpha$  lautet nun die Bilanzgleichung für die Speziesmassen

$$\frac{\partial(\rho Y_\alpha)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho Y_\alpha \vec{u}) = -\operatorname{div}(\rho Y_\alpha \vec{U}_{\alpha,\text{Diff}}) + \omega_\alpha + L_{v,\alpha}. \quad (2.12)$$

Summiert man diese Gleichung (2.12) über alle Spezies  $\alpha$  auf, so resultiert wegen der Gleichungen (2.7), (2.11) und

$$\sum_{\alpha} L_{v,\alpha} = L_v \quad (2.13)$$

die Kontinuitätsgleichung (2.2). In den in dieser Arbeit betrachteten Fällen liegt lediglich eine Spezies, der Brennstoff (“fuel”), in flüssiger Phase vor, sodass

$$L_{v,\alpha} = L_v \cdot \delta_{\alpha,\text{fuel}} \text{ und } L_v = L_{v,\text{fuel}}. \quad (2.14)$$

Unter Vernachlässigung der Thermodiffusion (Stoffdiffusion aufgrund von Temperaturgradienten: *Soret-Effekt*) und der Druckdiffusion, lässt sich die Diffusionsstromdichte  $\vec{j}_\alpha = \rho_\alpha \vec{U}_{\alpha,\text{Diff}}$  vereinfacht durch das *Fick'sche Gesetz* für die molekulare Diffusion

$$\vec{j}_\alpha = -\rho D_{\alpha,M} \operatorname{grad} Y_\alpha \quad (2.15)$$

darstellen mit dem Diffusionskoeffizienten  $D_{\alpha,M}$  der Spezies  $\alpha$  in die Mischung. Hiermit wird Gleichung (2.12) zu

$$\frac{\partial(\rho Y_\alpha)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho Y_\alpha \vec{u}) = \operatorname{div}(\rho D_{\alpha,M} \operatorname{grad} Y_\alpha) + \omega_\alpha + L_{v,\alpha}, \quad (2.16)$$

die als Basis für die weiteren Betrachtungen dient.

### 2.1.1.3 Elementmassen

Nachdem in den voran gegangenen Abschnitten die Erhaltungsgleichungen für die Gesamtmasse und die Speziesmassen aufgestellt wurden, werden nun die Bilanzgleichungen der Elementmassen betrachtet.

Einige Speziesmassenerhaltungsgleichungen können ersetzt werden durch Erhaltungsgleichungen der  $M$  beteiligten chemischen Elemente. Da bei chemischen Reaktionen keine Elemente erzeugt oder vernichtet werden, enthalten diese im Unterschied zu den Bilanzgleichungen der Spezies keine Quellen oder Senken durch chemische Reaktionen ( $\omega_\alpha$ ). Um die Erhaltungsgleichungen der Elementmassenbrüche

$$Z_j = \sum_{\alpha=1}^N a_{j,\alpha} Y_\alpha, \quad j = 1, \dots, M \quad (2.17)$$

mit der Normierung

$$\sum_{j=1}^M Z_j = 1 \quad (2.18)$$

abzuleiten, wird die entsprechende Spezieserhaltungsgleichung (2.16) mit dem Massenanteil  $a_{j,\alpha}$  des Elements  $j$  in der Spezies  $\alpha$  multipliziert und anschließend über alle Spezies  $\alpha = 1, \dots, N$  aufsummiert. Mit der Annahme gleicher Diffusionskoeffizienten

$$D_{\alpha,M} \equiv D, \quad \forall \alpha, \quad (2.19)$$

ergibt sich somit

$$\frac{\partial(\rho Z_j)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho Z_j \vec{u}) = \operatorname{div}(\rho D \operatorname{grad} Z_j) + \sum_{\alpha} a_{j,\alpha} L_{v,\alpha} \quad (2.20)$$

$$\stackrel{\text{Gl. (2.14)}}{=} \operatorname{div}(\rho D \operatorname{grad} Z_j) + a_{j,\text{fuel}} L_{v,\text{fuel}}, \quad j = 1, \dots, M \quad (2.21)$$

Die Summe der chemischen Quellterme liefert dabei Null für alle Elemente  $j$ :

$$\sum_{\alpha} a_{j,\alpha} \omega_{\alpha} = 0. \quad (2.22)$$

Ist die Annahme (2.19) nicht zulässig, so entstehen zusätzliche Terme, was die Gleichung (2.21) verkompliziert und dadurch keine Vorteile mehr bringt [28].

Insbesondere die Einführung des Kohlenstoffmassenbruchs

$$Z_C = \sum_{\alpha=1}^N a_{C,\alpha} Y_{\alpha} \quad (2.23)$$

erweist sich im Hinblick auf die Formulierung des Flamelet-Modells (Kapitel 2.4) als nützlich: Mit Hilfe des Kohlenstoffmassenbruchs  $Z_C$  wird im folgenden Abschnitt 2.1.2 der Mischungsbruch  $\xi_C$  definiert und eine Erhaltungsgleichung für  $\xi_C$  hergeleitet. Der Mischungsbruch stellt eine zentrale Größe bei der Verwendung des Flamelet-Modells dar.

### 2.1.2 Mischungsbruch

Das in dieser Arbeit verwendete Flamelet-Modell zur Behandlung der chemischen Reaktionen (beschrieben in Kapitel 2.4) ermöglicht eine Reduzierung der dreidimensionalen Diffusionsflamme auf ein eindimensionales System. Der Skalar, der dieses eindimensionale System beschreibt, ist der im Folgenden eingeführte Mischungsbruch.

Wird eine Versuchsanordnung mit zwei getrennt eintretenden Strömen betrachtet, so lässt sich ein Mischungsbruch  $\xi \in [0, 1]$  definieren, der angibt, wie stark sich die beiden Ströme am Ort  $\vec{x}$  zur Zeit  $t$  vermischt haben. Bei der Gegenstromdiffusionsflamme strömt der Brennstoffstrom (Strom  $I$ ) gegen den Luftstrom (Strom  $II$ ). Der Mischungsbruch wird so definiert, dass  $\xi = 1$  im Brennstoffstrom und  $\xi = 0$  im Luftstrom ist. Bezogen auf das Element Kohlenstoff  $C$  ist  $\xi_C$  dann definiert durch

$$\xi_C := \frac{Z_C - Z_{C,II}}{Z_{C,I} - Z_{C,II}}, \quad (2.24)$$

wobei  $Z_{C,I}$  und  $Z_{C,II}$  die Massenbrüche von  $C$  im Strom  $I$  bzw. im Strom  $II$  sind. Der Kohlenstoffmassenbruch eignet sich deshalb so gut zur Definition des Mischungsbruches, da sein Anteil im Luftstrom den Minimalwert Null ( $Z_{C,II} = 0$ ) und im Brennstoffstrom den Maximalwert (abhängig vom Brennstoff,  $Z_{C,I} = a_{C,\text{fuel}}$ ) hat und der Mischungsgrad der beiden Ströme sich linear mit  $Z_C$  ändert; die Monotonie des Massenbruchs von Kohlenstoff ermöglicht eine eindeutige räumliche Zuordnung der Mischungsbruchwerte. Da  $Z_C$  auch in reaktiven Strömungen immer zwischen  $Z_{C,I}$  und  $Z_{C,II}$  liegt, ist gewährleistet, dass  $\xi_C$  immer im Intervall  $[0, 1]$  bleibt. Wegen der genannten Eigenschaften vereinfacht sich Gleichung (2.24) zu

$$\xi_C = \frac{Z_C}{a_{C,\text{fuel}}}. \quad (2.25)$$

Aus der Erhaltungsgleichung für den Elementmassenbruch des Kohlenstoffs (2.21) erhält man hiermit die Bestimmungsgleichung für den Mischungsbruch:

$$\frac{\partial(\rho\xi_C)}{\partial t} + \text{div}(\rho\xi_C\vec{u}) = \text{div}(\rho D \text{grad} \xi_C) + \sum_{\alpha} \frac{a_{C,\alpha}}{a_{C,\text{fuel}}} L_{v,\alpha} \quad (2.26)$$

$$\text{Gl. (2.14)} \quad \underline{=} \quad \text{div}(\rho D \text{grad} \xi_C) + L_{v,\text{fuel}}. \quad (2.27)$$

In der hier verwendeten Nomenklatur beziehen sich  $Z_C$  und  $\xi_C$  lediglich auf die Gasphase. Der Einfluss des Sprays manifestiert sich im Quellterm  $\sum_{\alpha} \frac{a_{C,\alpha}}{a_{C,\text{fuel}}} L_{v,\alpha}$ .

### 2.1.3 Impulserhaltung

Die Impulserhaltung liefert die Gleichung

$$\frac{\partial(\rho\vec{u})}{\partial t} + \text{div}(\rho\vec{u}\vec{u}) = \text{div} \vec{\tau} - \text{grad} p + \vec{F}_{ex} + \vec{L}_m, \quad (2.28)$$

in der  $\vec{L}_m$  den Quellterm durch das verdampfende Spray wieder gibt und  $\vec{F}_{ex}$  die Impulsänderung durch externe Kräfte, die sich hier auf die Gravitation

$$\vec{F}_{ex} = \rho\vec{g} \quad (2.29)$$

mit der Erdbeschleunigung  $\vec{g}$  beschränken. Der Tensor der viskosen Spannungen  $\vec{\tau}$  beschreibt die durch die Zähigkeit des Fluids entstehenden Kräfte und ist gegeben durch

$$\vec{\tau} = \mu \left( (\text{grad} \vec{u}) + (\text{grad} \vec{u})^T \right) - \frac{2}{3}(\mu - \kappa)(\text{div} \vec{u}) \vec{\overline{E}}, \quad (2.30)$$

wobei  $\mu$  die dynamische Zähigkeit des Fluids ist. Der Exponent  $T$  kennzeichnet die transponierte Größe und  $\vec{\overline{E}}$  bezeichnet den Einheitstensor. Im Allgemeinen sind Reibungskräfte aufgrund der Expansion des Fluids ( $\kappa$ ) gegenüber Reibungskräften durch dynamische Viskosität ( $\mu$ ) vernachlässigbar; somit braucht die Druckzähigkeit (“bulk viscosity”)  $\kappa$  in Gleichung (2.30) nicht berücksichtigt zu werden:  $\kappa \approx 0$ .

### 2.1.4 Energieerhaltung

Nach der Beschreibung der Erhaltungsgleichungen für die Massenbrüche, den Mischungsbruch und den Impuls wird im Folgenden auf die Energieerhaltungsgleichung eingegangen.

Das Prinzip der Energieerhaltung formuliert für die spezifische Enthalpie  $h$  der Gasmischung führt zu

$$\frac{\partial(\rho h)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \vec{u} h) = \operatorname{div} \left[ \frac{\lambda}{c_p} \operatorname{grad} h + \left( \rho D - \frac{\lambda}{c_p} \right) \sum_{\alpha=1}^N h_{\alpha} \operatorname{grad} Y_{\alpha} \right] + \frac{\partial p}{\partial t} + L_h, \quad (2.31)$$

wobei  $L_h$  den Sprayquellterm bezeichnet und  $h_{\alpha}$  die spezifische Enthalpie der Spezies  $\alpha$ ,  $c_p$  ist die spezifische Wärmekapazität der Gasmischung bei konstantem Druck und  $\lambda$  die Wärmeleitfähigkeit der Gasmischung. Vernachlässigt sind mit Körperkräften verbundene Arbeit, Energietransport durch Strahlung (nur in optisch dichten Medien wichtig) und Wärmetransport durch Thermodiffusion (*Dufour*-Effekt). Ferner bleiben die Terme der kinetischen Energie der Strömung und der viskosen Dissipation unberücksichtigt, da sie bei den hier betrachteten niedrigen *Mach*-Zahlen relativ zur Gesamtenthalpie vernachlässigbar sind ([3]). Bei Annahme von lokaler Gleichheit von Massen- und Wärmetransport

$$\rho D = \frac{\lambda}{c_p}, \quad (2.32)$$

was der Gleichheit von *Schmidt*- und *Prandtl*-Zahl

$$\frac{\mu}{\rho D} \equiv \operatorname{Sc} = \operatorname{Pr} \equiv \frac{\mu}{\lambda/c_p} \quad (2.33)$$

und einer *Lewis*-Zahl von

$$\operatorname{Le} \equiv \frac{\operatorname{Sc}}{\operatorname{Pr}} = 1 \quad (2.34)$$

entspricht, vereinfacht sich die Enthalpiegleichung (2.31) zu

$$\frac{\partial(\rho h)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \vec{u} h) = \operatorname{div} \left( \frac{\lambda}{c_p} \operatorname{grad} h \right) + \frac{\partial p}{\partial t} + L_h. \quad (2.35)$$

Die Gleichung (2.35) beschreibt somit die Enthalpieänderung durch Konvektion und Wärmeleitung mit den Quelltermen des Sprays und der Volumenarbeit durch Druckänderungen.

### 2.1.5 Allgemeine Form der Erhaltungsgleichungen

Die Erhaltungsgleichungen für Masse (2.2), Massenbrüche (2.16) und (2.21), Mischungsbruch (2.27), Impuls (2.28) und Enthalpie (2.35) lassen sich durch ihre einheitliche Form

zu folgender Gleichung zusammenfassen:

$$\underbrace{\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t}}_{\text{Akkumulation}} + \underbrace{\text{div}(\rho\vec{u}\phi)}_{\text{Konvektion}} = \underbrace{-\text{div}(\vec{j}_\phi)}_{\text{Diffusion}} + \underbrace{T_\phi}_{\text{sonst. Quellen}} + \underbrace{S_\phi}_{\text{Chemie-Quellen}} + \underbrace{L_\phi}_{\text{Sprayquellen}} \quad (2.36)$$

Tabelle 2.1 fasst die in Gleichung (2.36) auftretenden Terme für die verschiedenen physikalisch-chemischen Größen zusammen.

	$\phi$	$\vec{j}_\phi$	$T_\phi$	$S_\phi$	$L_\phi$
Gesamtmasse	1	0	0	0	$L_{v,\text{fuel}}$
Speziesmassenbr.	$Y_\alpha$	$-\rho D \text{ grad } Y_\alpha$	0	$\omega_\alpha$	$L_{v,\alpha} \delta_{\alpha,\text{fuel}}, \alpha = 1 \dots N$
Elementmassenbr.	$Z_j$	$-\rho D \text{ grad } Z_j$	0	0	$a_{j,\text{fuel}} L_{v,\text{fuel}}, j = 1 \dots M$
Mischungsbruch	$\xi_C$	$-\rho D \text{ grad } \xi_C$	0	0	$L_{v,\text{fuel}}$
Impuls	$\vec{u}$	0	$\text{div } \vec{\tau} - \text{grad } p + \rho \vec{g}$	0	$\vec{L}_m$
Enthalpie	$h$	$-\frac{\lambda}{c_p} \text{ grad } h$	$\frac{\partial p}{\partial t}$	0	$L_h$

Tab. 2.1: Diffusions- und Quellterme

Die Quellterme werden beschrieben durch  $L_\phi$  für die Sprayquellterme,  $S_\phi$  für die Quellen der chemischen Reaktionen und  $T_\phi$  für alle weiteren Quellen.

Im Gleichungssystem (2.36) kann jeweils eine der  $N$  Erhaltungsgleichungen der Spezies bzw. eine der  $M$  Gleichungen für die Elemente durch die Normierungsbedingungen (2.4) bzw. (2.18) ersetzt werden. Die ideale Gasgleichung

$$p = \rho \frac{RT}{\overline{M}} \quad (2.37)$$

mit der universellen Gaskonstanten  $R$  und der mittleren Molmasse

$$\overline{M} = \left( \sum_{\alpha=1}^N \frac{Y_\alpha}{M_\alpha} \right)^{-1} \quad (2.38)$$

verknüpft den Druck  $p$  mit der Dichte  $\rho$ . Bei den in dieser Arbeit betrachteten Systemen liegt der Druck im Bereich des Atmosphärendrucks, sodass das Eigenvolumen der Atome und Moleküle vernachlässigbar ist und sie, außer durch elastische Stöße, keine Wechselwirkungen untereinander haben; die Annahme eines idealen Gases (Gleichung (2.37)) ist daher gerechtfertigt [29]. Der Zusammenhang zwischen Temperatur  $T$  und der spezifischen Enthalpie  $h$

$$h(T) = h^0 + \int_{298 \text{ K}}^T c_p(T') dT' \quad (2.39)$$

## 14 2. Thermophysikalische Grundlagen turbulenter, chemisch reaktiver Systeme

liefert eine implizite Gleichung zur Bestimmung der Temperatur aus der Enthalpie. Die spezifische Standardbildungsenthalpie  $h^0$  der Gasmischung ist definiert bei den Standardbedingungen  $T = 298 \text{ K}$  und  $p = 1 \text{ bar}$ . Sie setzt sich zusammen aus den spezifischen Standardbildungsenthalpien  $h_\alpha^0$  der einzelnen Spezies  $\alpha$  über die Gleichung

$$h^0 = \sum_{\alpha=1}^N h_\alpha^0 Y_\alpha. \quad (2.40)$$

Ihre Werte lassen sich in thermodynamischen Tabellen nachschlagen [30]. Ganz analog ist auch die spezifische Wärmekapazität  $c_p$  der Mischung bei konstantem Druck gegeben durch

$$c_p = \sum_{\alpha=1}^N c_{p,\alpha} Y_\alpha, \quad (2.41)$$

wobei die spezifischen Wärmekapazitäten  $c_{p,\alpha}$  der Spezies mittels eines Polynomansatzes als Funktion der Temperatur bestimmt werden [31]

$$c_{p,\alpha}(T) = \sum_{n=0}^4 a_{n,\alpha} T^n. \quad (2.42)$$

Burcat und McBride [31] liefern Datensätze für die Koeffizienten  $a_{n,\alpha}$ , wobei sie zwei Temperaturgültigkeitsbereiche,  $T > 1000 \text{ K}$  und  $T < 1000 \text{ K}$ , unterscheiden. Mit Hilfe der Gleichungen (2.40), (2.41) und (2.42) lässt sich die spezifische Gesamtenthalpie  $h$  in Gleichung (2.39) ausdrücken als gewichtete Summe der spezifischen Enthalpien  $h_\alpha$  der Spezies

$$h = \sum_{\alpha=1}^N Y_\alpha \left( \underbrace{h_\alpha^0 + \sum_{n=0}^4 \frac{a_{n,\alpha}}{n+1} T^{n+1} \Big|_{298\text{K}}^T}_{=: h_\alpha} \right) = \sum_{\alpha=1}^N Y_\alpha h_\alpha \quad (2.43)$$

oder als Polynom der Temperatur

$$h = \sum_{\alpha=1}^N \underbrace{\sum_{n=0}^5 a'_{n,\alpha} T^n}_{=: h_\alpha} Y_\alpha \quad (2.44)$$

mit den neuen Koeffizienten  $a'_{n,\alpha}$  [32].

Auch die Fluideigenschaften der Mischung wie Diffusionskoeffizienten (Annahme:  $D = D_{\alpha,M}, \forall \alpha$ ), Viskosität  $\mu$  und Wärmeleitfähigkeit  $\lambda$  sind, wie die Wärmekapazität  $c_p$ , im Allgemeinen Funktionen von Temperatur und Zusammensetzung des Gemischs. Ihre Berechnung ergibt sich aus der Theorie verdünnter Gase [34] zu

$$\ln D_{\alpha\beta} = \sum_{n=0}^3 b_{n,\alpha\beta} (\ln T)^n \quad (2.45)$$

für die binären Diffusionskoeffizienten  $D_{\alpha\beta}$  der Spezies  $\alpha$  in Spezies  $\beta$ ,

$$\ln \mu_\alpha = \sum_{n=0}^3 c_{n,\alpha} (\ln T)^n \quad (2.46)$$

für die dynamischen Viskositäten  $\mu_\alpha$  und

$$\ln \lambda_\alpha = \sum_{n=0}^3 d_{n,\alpha} (\ln T)^n \quad (2.47)$$

für die Wärmeleitfähigkeiten  $\lambda_\alpha$  der Spezies. Die Koeffizienten  $b_{n,\alpha\beta}$ ,  $c_{n,\alpha}$  und  $d_{n,\alpha}$ , können aus Tabellen entnommen werden können, beispielsweise aus [34].

Die Berechnung des Diffusionskoeffizienten  $D_{\alpha,M}$  einer Spezies  $\alpha$  in eine Mischung  $M$  erfolgt aus den binären Diffusionskoeffizienten  $D_{\alpha\beta}$  nach der Gleichung [33, 35]

$$D_{\alpha,M} = \frac{1 - Y_\alpha}{\sum_{\alpha \neq \beta} \frac{X_\beta}{D_{\alpha\beta}}} \quad (2.48)$$

Die hier auftretenden Molenbrüche  $X_\alpha$  hängen über die Gleichung

$$X_\alpha = Y_\alpha \frac{\bar{M}}{M_\alpha} \quad (2.49)$$

mit den Massenbrüchen  $Y_\alpha$  zusammen.

Die mittlere dynamische Viskosität einer Gasmischung von  $N$  Spezies berechnet sich nach [34] zu

$$\mu = \frac{1}{2} \left( \sum_{\alpha=1}^N (X_\alpha \mu_\alpha) + \frac{1}{\sum_{\alpha=1}^N \left( \frac{X_\alpha}{\mu_\alpha} \right)} \right) \quad (2.50)$$

analog der mittleren Wärmeleitfähigkeit

$$\lambda = \frac{1}{2} \left( \sum_{\alpha=1}^N (X_\alpha \lambda_\alpha) + \frac{1}{\sum_{\alpha=1}^N \left( \frac{X_\alpha}{\lambda_\alpha} \right)} \right) \quad (2.51)$$

Hiermit ist das Gleichungssystem (2.36) bis auf die Sprayquellterme  $L_\phi$  geschlossen. Ihre Behandlung erfolgt in Kapitel 2.3.

## 2.2 Phänomene und Beschreibungsweise turbulenter Strömungen

Bevor in diesem Kapitel der konkrete Weg zur Lösung des Differentialgleichungssystems 2.36 beschrieben wird, werden im Folgenden einige grundlegende Eigenschaften turbulenter Strömungen erläutert.

Sobald Massenträgheitskräfte die viskosen Kräfte in einer Strömung weit übersteigen, werden kleine Störungen des Strömungsfeldes nicht mehr durch die Dämpfung des Fluids kompensiert und es tritt Turbulenz auf [1,25,36]. Turbulenz ist eine zeitlich und räumlich nicht stationäre, unregelmäßige Bewegungsform. Ein ortsfester Beobachter (*Euler'sche* Betrachtungsweise) wird in turbulenten Strömungen zufällige Schwankungen physikalischer Größen feststellen [3]. Die *Reynolds*-Zahl  $Re$  einer Strömung ist definiert als das Verhältnis von Trägheitskräften zu viskosen Kräften [37]

$$Re = \frac{\rho u^2 / l}{\nu \rho u / l^2} = \frac{ul}{\nu}, \quad (2.52)$$

wobei  $u$  die Strömungsgeschwindigkeit des Gases und  $l$  eine charakteristische Länge der Strömung bezeichnen, auf der sich die Geschwindigkeit in charakteristischer Weise ändert. Die kinematische Viskosität  $\nu$  ist durch die Dichte mit der dynamischen Viskosität  $\mu$  verknüpft:

$$\nu = \frac{\mu}{\rho}. \quad (2.53)$$

Die Reynolds-Zahl dient zur Beschreibung des Übergangs von laminaren zu turbulenten Strömungen und gilt als Maß für die Stärke der Turbulenz. Je nach Versuchsanordnung geschieht der Umschlag von laminarer zu turbulenter Strömung bei einer Reynolds-Zahl von 2000 bis 3000. [23].

Auf die Möglichkeiten der Charakterisierung turbulenter Systeme und der darin auftretenden typischen Wirbel anhand entsprechender Längen- und Zeitskalen wird in Kapitel 2.2.1 eingegangen. Da die Lösung der ungemittelten Gleichungen (2.36) zur Beschreibung turbulenter Strömungen über große Berechnungsgebiete, wie in dieser Arbeit betrachtet, wegen der notwendigen feinen Diskretisierung und des damit verbundenen hohen Rechenaufwandes nicht zweckmäßig ist, werden in Kapitel 2.2.2 Methoden der Mittelung eingeführt. Mit diesen lassen sich Erhaltungsgleichungen der Mittelwerte herleiten (Kapitel 2.2.3). Das so erlangte Gleichungssystem ist nicht geschlossen. Es enthält neue Terme, die durch Turbulenzmodelle behandelt werden müssen. Hierzu gehören beispielsweise die Momentenmodelle erster oder zweiter Ordnung. Kapitel 2.2.4 gibt einen kurzen Überblick über verschiedene Turbulenzmodelle und stellt ihre Vor- und Nachteile gegenüber. Das in dieser Arbeit benutzte Turbulenzmodell ist ein Reynolds-Spannungs-Modell, das für turbulente Sprayflammen weiter entwickelt wird und erstmals Sprayquellterme in einem Reynolds-Spannungs-Modell enthält. Darauf wird in Kapitel 2.2.5 eingegangen.

### 2.2.1 Turbulente Skalen

Eine mögliche Ursache von Turbulenz liegt in Scherschichten an Wänden (induzierte Turbulenz) oder zwischen Fluiden unterschiedlicher Geschwindigkeit begründet (freie

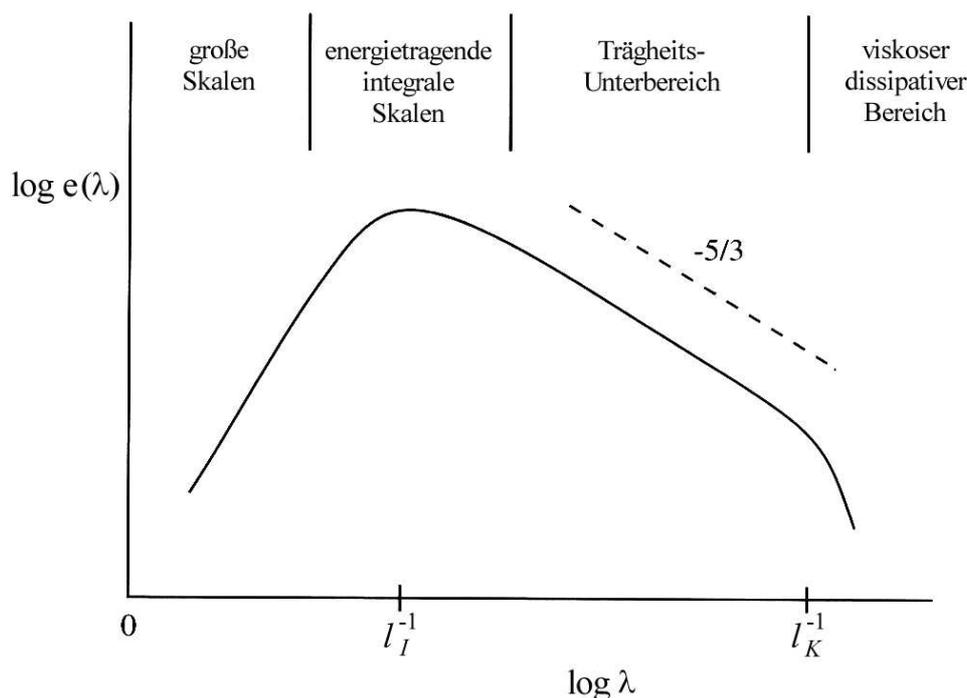


Abb. 2.1: Schematische Darstellung der Energiedichte  $e(\lambda)$  der turbulenten kinetischen Energie in Abhängigkeit der Wellenzahl  $\lambda$  in einem doppelt-logarithmischen Koordinatensystem [2]

Turbulenz) [38]. Eine charakteristische Eigenschaft turbulenter Strömungen ist das Auftreten von Wirbel unterschiedlicher Längenskalen [2], die durch die Scherschichten verursacht werden. Kolmogorov nimmt in seiner Theorie für homogene, isotrope Turbulenz [39] einen ständigen Transfer kinetischer Energie von Wirbeln großer Skalen (*integrales Längenmaß*  $l_I$ ) zu kleinen Skalen (*Kolmogorov-Länge*  $l_K$ ) an bis die Energie schließlich bei kleinen Skalen durch viskose Kräfte in Wärme dissipiert wird (Hypothese der *Energiekaskade*) [2, 40, 41]. Das integrale Längenmaß  $l_I$  ist ein Maß für die Dimension der zu Beginn entstehenden Wirbel; es ist durch die Systemabmessungen bestimmt. Die Kolmogorov-Länge  $l_k$  charakterisiert die Größe der kleinsten Wirbel am Ende der Energiekaskade. Die Wellenzahl  $\lambda$  ist definiert als das Inverse der Wirbelgröße  $l$ :  $\lambda = l^{-1}$ . In Abbildung 2.1 ist der Logarithmus der Energiedichte  $e(\lambda)$  der turbulenten kinetischen Energie über dem Logarithmus der Wellenzahl dargestellt. Der Bereich kleiner Wellenzahlen ( $\lambda < l_I^{-1}$ ) umfasst die großen Skalen, bei denen Wirbel abhängig von den Randbedingungen entstehen. Wirbel mit  $\lambda \approx l_I^{-1}$  besitzen die größte Energie; dort hat das Energiespektrum ein Maximum. Im sogenannten Trägheits-Unterbereich  $l_I^{-1} \leq \lambda \leq l_K^{-1}$  ist die Dissipationsgeschwindigkeit der turbulenten kinetischen Energie

$\varepsilon$  konstant und für die Energiedichte gilt die Proportionalität [2]

$$e(\lambda) \propto \varepsilon^{\frac{2}{3}} \lambda^{-\frac{5}{3}}. \quad (2.54)$$

Jenseits der zur Kolmogorov–Länge korrespondierenden Wellenzahlen  $\lambda > l_K^{-1}$  fällt die Energiedichte aufgrund viskoser Effekte viel steiler exponentiell ab.

Neben der Kolmogorov–Länge, die gegeben ist durch [42]

$$l_K = \left( \frac{\nu^3}{\varepsilon} \right)^{\frac{1}{4}}, \quad (2.55)$$

ist die *Kolmogorov–Zeitskala*  $\tau_K$  bestimmt durch

$$\tau_K = \left( \frac{\nu}{\varepsilon} \right)^{\frac{1}{2}} = l_K (\nu \varepsilon)^{-\frac{1}{4}}. \quad (2.56)$$

Ein Zusammenhang zwischen der Dissipationsgeschwindigkeit  $\varepsilon$ , der turbulenten kinetische Energie  $k$  und dem integralen Längenmaß  $l_I$  ist durch die Gleichung

$$l_I = \frac{\left( \frac{2}{3} k \right)^{\frac{3}{2}}}{\varepsilon} \quad (2.57)$$

gegeben. Die integrale Zeitskala  $\tau_I$  ist definiert durch

$$\tau_I = \frac{\frac{2}{3} k}{\varepsilon}. \quad (2.58)$$

In Analogie zur allgemeinen Reynolds–Zahl (Gleichung (2.52)) lässt sich die *Turbulenz–Reynolds–Zahl* als Maß der Turbulenzintensität definieren als ([4, 43])

$$\text{Re}_t := \frac{\sqrt{\frac{2}{3} k} l_I}{\nu} = \left( \frac{l_I}{l_K} \right)^{\frac{4}{3}} = \left( \frac{\tau_I}{\tau_K} \right)^2. \quad (2.59)$$

### 2.2.2 Reynolds – und Favre –Mittelung

Die Turbulenzeigenschaft einer Strömung spielt bei reaktiven Systemen eine wesentliche Rolle. Der Transport skalarer Größen wie auch der Impulsaustausch mit der Umgebung werden erheblich beeinflusst. Zur Lösung des Differentialgleichungssystems (2.36) mittels direkter numerischer Simulation (DNS) müssen daher auch die kleinsten turbulenten Skalen aufgelöst werden, was eine außerordentlich feine sowohl räumliche als auch zeitliche Diskretisierung mit einem Gitterabstand  $\Delta x < l_K$  sowie einem Zeitschritt  $\Delta t < \tau_K$  erforderlich macht [1]. Der Rechenaufwand steigt damit so stark an, dass selbst mit moderner Rechnertechnologie dieses Vorgehen zur Zeit nur für kleine Berechnungsgebiete erfolgsversprechend ist [1, 44, 45]. Häufig sind außerdem nicht die Momentanwerte der physikalisch–chemischen Größen von Interesse, sondern das

Verhalten der gemittelten Werte, die im Wesentlichen die Eigenschaften der Strömung wieder spiegeln. Deshalb werden im Folgenden die zeitliche *Reynolds-Mittelung* (Kapitel 2.2.2.1) sowie die dichtegewichtete *Favre-Mittelung* (Kapitel 2.2.2.2) eingeführt und ihre Unterschiede sowie Vorteile erläutert. Aus den Grundgleichungen (2.36) werden in Kapitel 2.2.3 Reynolds-gemittelte Erhaltungsgleichungen für die Favre-Mittelwerte der die Strömung beschreibenden physikalisch-chemischen Größen hergeleitet.

### 2.2.2.1 Reynolds-Mittelung

Bei der Reynolds-Mittelung ist die Zerlegung des Momentanwertes einer Größe  $\phi$  gegeben durch

$$\phi = \bar{\phi} + \phi' \quad \text{mit} \quad (2.60)$$

$$\bar{\phi} = \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} \phi dt. \quad (2.61)$$

Für das Rechnen mit diesen Mittelwerten und Schwankungen der Größen  $\phi$  und  $\psi$  gelten die Vorschriften

$$\overline{\bar{\phi}} = \bar{\phi}, \quad (2.62)$$

$$\overline{\phi'} = 0, \quad (2.63)$$

$$\overline{\phi + \psi} = \bar{\phi} + \bar{\psi}, \quad (2.64)$$

$$\overline{\phi\psi} = \overline{\phi\psi}, \quad (2.65)$$

$$\overline{\frac{\partial\phi}{\partial s}} = \frac{\partial\bar{\phi}}{\partial s}, \quad (2.66)$$

$$\overline{\int \phi ds} = \int \bar{\phi} ds, \quad (2.67)$$

wobei  $s$  die Zeit oder eine Ortsvariable sein kann. Ist die Statistik einer Größe  $\phi$  durch eine Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion  $P(\phi)$  (*probability density function, pdf*) gegeben, so berechnet sich der Mittelwert  $\bar{\phi}$  aus [2]

$$\bar{\phi} = \int \phi P(\phi) d\phi. \quad (2.68)$$

Wird die Mittelung auf den Konvektionsterm

$$\begin{aligned} \overline{\rho u \phi} &= \overline{(\bar{\rho} + \rho')(\bar{u} + u')(\bar{\phi} + \phi')} \\ &= \bar{\rho} \bar{u} \bar{\phi} + \bar{\rho} \overline{u' \phi'} + \bar{u} \overline{\rho' \phi'} + \overline{\phi \rho' u'} + \overline{\rho' u' \phi'} \end{aligned} \quad (2.69)$$

angewendet, so führt dies auf das allgemeine Schließungsproblem der Transportgleichungen für turbulente Größen [3]: Neben den gemittelten Skalaren  $(\bar{\rho}, \bar{u}, \bar{\phi})$  erscheinen unbekannte Korrelationen zweiter  $(\overline{\rho' u'}, \overline{\rho' \phi'}, \overline{u' \phi'})$  und dritter Ordnung  $(\overline{\rho' u' \phi'})$  als neue,

zusätzliche Variablen, sodass nun die Anzahl der Unbekannten größer ist als die Anzahl der Gleichungen. Zwar ist es möglich, für diese neuen Korrelationen Bestimmungsgleichungen herzuleiten, diese enthalten dann aber ihrerseits wieder Korrelationen der nächst höheren Ordnung. Das Schließungsproblem ist damit nicht gelöst, sondern nur verschoben. Nach Einführen der Mittelwerte und der Schwankungen wird es nötig, dass Annahmen für die Korrelationen ab einer bestimmten Ordnung gemacht werden und Modellvorstellungen entwickelt werden.

Im nächsten Abschnitt wird sich zeigen, dass hier bei der Favre–Mittelung die Anzahl der zu modellierenden Korrelationen geringer ist und sich somit das Schließungsproblem vereinfacht.

### 2.2.2.2 Favre–Mittelung

Im Unterschied zur Reynolds–Mittelung sind Favre gemittelte Größen  $\tilde{\phi}$  dichtegewichtet [46] (Gasdichte:  $\rho$ ):

$$\tilde{\phi} = \frac{\overline{\rho\phi}}{\bar{\rho}}. \quad (2.70)$$

Durch chemische Reaktionen verursachte Dichteschwankungen sind somit durch die Favre–Mittelung berücksichtigt, was die Reynolds–Mittelung nicht leistet. Bei der Beschreibung von Gasströmungen mit chemischen Reaktionen ist deshalb die Favre–Mittelung vorzuziehen. Die Zerlegung der Momentanwerte  $\phi$  in Favre–Mittelwert  $\tilde{\phi}$  und Favre–Schwankung  $\phi''$  erfolgt analog zu Gleichung (2.60)

$$\phi = \tilde{\phi} + \phi'', \quad (2.71)$$

wobei über

$$\tilde{\phi} = \bar{\phi} + \frac{\overline{\rho'\phi'}}{\bar{\rho}} \quad \text{und} \quad (2.72)$$

$$\phi'' = \phi' - \frac{\rho'\phi'}{\bar{\rho}} \quad (2.73)$$

der Zusammenhang zu Reynolds–Mittelwerten und –Schwankungen hergestellt ist. Ähnlich den Beziehungen für die Reynolds gemittelten Werte (Gleichungen (2.62) bis (2.65) ) gelten bei der Favre–Mittelung

$$\tilde{\tilde{\phi}} = \tilde{\phi}, \quad (2.74)$$

$$\tilde{\phi}'' = \frac{\overline{\rho\phi''}}{\bar{\rho}} = 0, \quad (2.75)$$

$$\widetilde{\phi + \psi} = \tilde{\phi} + \tilde{\psi}, \quad (2.76)$$

$$\widetilde{\phi\psi} = \bar{\phi}\tilde{\psi}. \quad (2.77)$$

Die Favre–pdf  $\tilde{P}(\phi)$  lässt sich aus der Reynolds–pdf ableiten [47]:

$$\bar{\rho}\tilde{P}(\phi) = \int \rho P(\rho, \phi) d\rho. \quad (2.78)$$

Aus  $\tilde{P}(\phi)$  ist analog zur Berechnung des Reynolds–Mittelwertes in Gleichung (2.68) der Favre–Mittelwert  $\tilde{\phi}$  zu bestimmen:

$$\tilde{\phi} = \int \phi \tilde{P}(\phi) d\phi. \quad (2.79)$$

Bei Anwendung der Favre–Zerlegung auf den schon in Gleichung (2.69) betrachteten gemittelten Konvektionsterm

$$\begin{aligned} \overline{\rho u \phi} &= \overline{\rho(\tilde{u} + u'')(\tilde{\phi} + \phi'')} \\ &= \overline{\tilde{\rho}\tilde{u}\tilde{\phi}} + \overline{\tilde{u}\rho\phi''} + \overline{\tilde{\phi}\rho u''} + \overline{\rho u''\phi''} \\ \text{Gl. (2.75)} \quad &\stackrel{=}{=} \overline{\tilde{\rho}\tilde{u}\tilde{\phi}} + \overline{\rho u''\phi''} \end{aligned} \quad (2.80)$$

fällt auf, dass neben den gemittelten Größen  $\bar{\rho}$ ,  $\tilde{u}$  und  $\tilde{\phi}$  lediglich ein weiterer Term ( $\overline{\rho u''\phi''} = \overline{\tilde{\rho} u''\phi''}$ ) an Stelle der vier zusätzlichen Terme in Gleichung (2.69) auftritt. Das Schließungsproblem vereinfacht sich, was für die Verwendung der Favre–Mittelung spricht.

Ein weiterer Aspekt bei der Wahl der Mittelungsmethode ist die Vergleichbarkeit mit experimentell ermittelten Daten [4]. Je nach Messmethode können dichtegewichtete Messwerte vorliegen. So werden beispielsweise bei der Geschwindigkeitsmessung mittels Laser–Doppler–Anemometrie, Hitzedrahtanemometern oder Prandtl–Sonden zumindest teilweise dichtegewichtete Werte gemessen [3, 48]. Ebenso ergeben sich bei der Messung von Konzentrationen durch Pitot–Rohre oder isokinetische Sonden Messwerte, die zur Dichte proportional sind [49]. Auch bei Temperaturmessungen mit Thermoelementen entsprechen die gemessenen Werte eher den Favre gemittelten Werten [50]. Somit ist für den Vergleich mit Messwerten eine Verwendung von Favre–Mittelwerten in vielen Fällen gerechtfertigt und insbesondere bei Strömungen mit hohen Dichteschwankungen vorteilhaft [3, 43, 48, 51–53]. Aus diesen Gründen wird im Folgenden die Favre–Mittelung verwendet. In anderen Fällen müssen gegebenenfalls Favre– und Reynolds–Mittelwerte über die Beziehungen (2.72) und (2.73) ineinander umgerechnet werden.

### 2.2.3 Erhaltungsgleichungen für Favre–Mittelwerte

Werden nun die Erhaltungsgleichungen (2.36) zeitlich gemittelt (Reynolds–Mittelung) und die Variablen  $Y_\alpha$ ,  $Z_j$ ,  $\xi_C$ ,  $\vec{u}$  sowie  $h$  in Favre–Mittelwert und –Schwankung zerlegt

$\phi = \tilde{\phi} + \phi''$ , so folgen die Erhaltungsgleichungen der Mittelwerte:

$$\frac{\partial \bar{p}}{\partial t} + \operatorname{div}(\bar{\rho} \tilde{u}) = \bar{L}_{v,\text{fuel}} \quad (2.81)$$

$$\frac{\partial(\bar{\rho} \tilde{Y}_\alpha)}{\partial t} + \operatorname{div}(\bar{\rho} \tilde{u} \tilde{Y}_\alpha) = \operatorname{div}(\overline{\rho D \operatorname{grad} Y_\alpha} - \bar{\rho} \tilde{u}'' \tilde{Y}_\alpha'') + \bar{\omega}_\alpha + \bar{L}_{v,\alpha} \cdot \delta_{\alpha,\text{fuel}} \quad (2.82)$$

$$\frac{\partial(\bar{\rho} \tilde{Z}_j)}{\partial t} + \operatorname{div}(\bar{\rho} \tilde{u} \tilde{Z}_j) = \operatorname{div}(\overline{\rho D \operatorname{grad} Z_j} - \bar{\rho} \tilde{u}'' \tilde{Z}_j'') + \sum_\alpha a_{j,\alpha} \bar{L}_{v,\alpha} \quad (2.83)$$

$$\frac{\partial(\bar{\rho} \tilde{\xi}_C)}{\partial t} + \operatorname{div}(\bar{\rho} \tilde{u} \tilde{\xi}_C) = \operatorname{div}(\overline{\rho D \operatorname{grad} \xi_C} - \bar{\rho} \tilde{u}'' \tilde{\xi}_C'') + \bar{L}_{v,\text{fuel}} \quad (2.84)$$

$$\frac{\partial(\bar{\rho} \tilde{u})}{\partial t} + \operatorname{div}(\bar{\rho} \tilde{u} \tilde{u}) = \operatorname{div}(\bar{\tau} - \bar{\rho} \tilde{u}'' \tilde{u}'') - \operatorname{grad} \bar{p} + \bar{\rho} \vec{g} + \bar{L}_m \quad (2.85)$$

$$\frac{\partial(\bar{\rho} \tilde{h})}{\partial t} + \operatorname{div}(\bar{\rho} \tilde{u} \tilde{h}) = \operatorname{div}\left(\frac{\lambda}{c_p} \operatorname{grad} h - \bar{\rho} \tilde{u}'' \tilde{h}''\right) + \frac{\partial \bar{p}}{\partial t} + \bar{L}_h \quad (2.86)$$

Analog erhält man aus der idealen Gasgleichung (2.37) und der Bestimmungsgleichung der mittleren Molmasse (2.38) die Gleichung

$$\bar{p} = R \sum_\alpha \frac{\bar{\rho} \tilde{T} \tilde{Y}_\alpha + \bar{\rho} \tilde{T}'' \tilde{Y}_\alpha''}{M_\alpha} \quad (2.87)$$

Mit der Annahme, dass aufgrund ähnlicher molarer Massen der wichtigsten Spezies die mittlere molare Masse  $\bar{M}$  nur wenig fluktuiert, lässt sich die gemittelte ideale Gasgleichung (2.37) auch vereinfacht schreiben als [43]

$$\bar{p} = \bar{\rho} \frac{R \tilde{T}}{\bar{M}} \quad (2.88)$$

Die in den Gleichungen (2.82) bis (2.84) und (2.86) neu auftauchenden Korrelationsterme  $\bar{\rho} \tilde{u}'' \phi''$  heißen turbulente Flüsse der skalaren Größen  $\phi$ ,  $\phi \in \{Y_\alpha, Z_j, \xi_C, h\}$ . Sie tragen dem im Vergleich zu laminaren Strömungen erhöhten Austausch der Größe  $\phi$  durch die turbulenten Schwankungsbewegungen der Strömung Rechnung. Der in der gemittelten Impulsgleichung (2.85) neue Term  $\bar{\rho} \tilde{u}'' \tilde{u}''$  hat die gleiche Einheit wie der Spannungstensor  $\bar{\tau}$ . Er wird als *Reynolds*-Spannungstensor bezeichnet und beschreibt analog dem erhöhten Austausch der skalaren Größen den verstärkten Impulsaustausch bei Turbulenz. Seine Komponenten werden auch turbulente oder *Reynolds*-Spannungen genannt.

In den gemittelten Gleichungen hat sich die Anzahl der Variablen um die der Korrelationen erhöht, für deren Bestimmung neue Gleichungen gefunden oder Modellannahmen gemacht werden müssen. Darüber hinaus müssen die gemittelten Reaktionsgeschwindigkeiten  $\bar{\omega}_\alpha$  und Sprayquellterme  $\bar{L}_\phi$  sowie die gemittelten laminaren Flüsse  $\overline{\rho D \operatorname{grad} Y_\alpha}$ ,  $\overline{\rho D \operatorname{grad} Z_j}$ ,  $\overline{\rho D \operatorname{grad} \xi_C}$  und  $\overline{\lambda/c_p \operatorname{grad} h}$  behandelt werden. Diese Aufgaben werden von chemischen Reaktionsmodellen (für  $\bar{\omega}_\alpha$ ) und Turbulenzmodellen übernommen.

### 2.2.4 Überblick über verschiedene Turbulenzmodelle

Dieses Kapitel liefert einen Überblick über verschiedene Turbulenzmodelle. Es werden sogenannte *Momentenmodelle erster* und *zweiter Ordnung* vorgestellt und auf die Grundzüge der *large eddy simulation* (LES) eingegangen. Die *Reynolds–Spannungs–Modelle* (RSM) werden hier im Rahmen der anderen Turbulenzmodelle eingeordnet; da bei den Simulationsrechnungen der vorliegenden Arbeit ein RSM zur Anwendung kommt, erfolgt im Kapitel 2.2.5 eine ausführliche Beschreibung hierüber.

Das Gleichungssystem (2.82) bis (2.86) ist wegen der neu auftretenden Korrelationen zweiter Ordnung, auch Momente zweiter Ordnung genannt, nicht geschlossen. Zur Modellierung der neuen Terme existieren verschiedene Ansätze, die nach der Anzahl der zusätzlich gelösten Transportgleichungen oder auch nach der höchsten Ordnung der unbekanntenen Korrelationen, für die eigene Transportgleichungen gelöst werden, unterteilt werden können. Bei *Null–*, *Ein–* und *Zweigliedungsmodellen* werden die Korrelationen zweiter Ordnung über ein charakteristisches turbulentes Längenmaß  $l$  und Zeitmaß  $\tau$  mit bekannten Größen des Hauptströmungsfeldes algebraisch verknüpft. Diese Modelle werden auch als *Momentenmodelle erster Ordnung* bezeichnet.

Bei Momentenmodellen erster Ordnung ist das von Boussinesq 1877 eingeführte *Wirbelviskositätsprinzip* von entscheidender Bedeutung. Darin wird die Annahme gemacht, dass die turbulenten Reynolds–Spannungen ( $-\overline{\rho \tilde{u}'' \tilde{u}''}$ ) in Analogie zu den viskosen Spannungen ( $\bar{\tau}$ , Gleichung (2.30)) proportional den Geschwindigkeitsgradienten sind:

$$-\overline{\rho \tilde{u}'' \tilde{u}''} = \mu_t \operatorname{grad} \tilde{u}, \quad (2.89)$$

wobei die Wirbelviskosität  $\mu_t$  keine Stoffgröße ist, sondern von der Turbulenzstruktur abhängt [1, 24, 43]. Anstelle der turbulenten Reynolds–Spannungen ist nun jedoch die neu eingeführte Wirbelviskosität zu bestimmen. Entsprechend wird bei der Behandlung der turbulenten skalaren Flüsse ( $-\overline{\rho \tilde{u}'' \tilde{\phi}''}$ ) nach dem Prinzip der Wirbeldiffusivität davon ausgegangen, dass der turbulente Transport proportional dem Gradienten der transportierten Größe ist:

$$-\overline{\rho \tilde{u}'' \tilde{\phi}''} = \Gamma_{t,\phi} \operatorname{grad} \tilde{\phi}. \quad (2.90)$$

Es wird dabei üblicherweise die Wirbeldiffusivität  $\Gamma_{t,\phi}$  über die turbulente *Prandtl–Schmidt–Zahl*  $\sigma_\phi$  mit der Wirbelviskosität in Beziehung gesetzt

$$\Gamma_{t,\phi} = \frac{\mu_t}{\sigma_\phi}, \quad (2.91)$$

wobei der Parameter  $\sigma_\phi$  je nach Skalar  $\phi$  unterschiedliche Werte annimmt und experimentell bestimmt wird [3, 24].

In den Nullgleichungsmodellen wie beispielsweise dem *Prandtl'schen Mischungswegansatz* wird keine zusätzliche Transportgleichung gelöst. Es werden stattdessen in

Abhängigkeit der Geometrie und der Reynolds-Zahl das charakteristische turbulente Längenmaß  $l$  und Zeitmaß  $\tau$  problemangepasst empirisch abgeschätzt und damit die Wirbelviskosität

$$\mu_t \propto \bar{\rho} \frac{l^2}{\tau} \quad (2.92)$$

ermittelt [24, 54, 55]. Allerdings ist dieser Ansatz nur bei sehr einfachen Strömungen anwendbar, da  $l$  und  $\tau$  zum Teil schwer bestimmbar sind und der Transport von Turbulenz völlig vernachlässigt wird.

Bei Eingleichungsmodellen wird nur noch einer der Parameter  $l$  und  $\tau$  empirisch modelliert, während der andere aus der turbulenten kinetischen Energie  $\tilde{k}$ , für die eine Transportgleichung gelöst wird, hervor geht. Nach der Kolmogorov-Prandtl-Beziehung gilt für die Wirbelviskosität [24, 39, 56, 57]

$$\mu_t \propto \bar{\rho} \sqrt{\tilde{k} l}. \quad (2.93)$$

Dieses Modell bietet gegenüber den Nullgleichungsmodellen Vorteile, da es den Transport von  $\tilde{k}$  beschreibt. Jedoch bleibt ein schwer bestimmbarer strömungsabhängiger Parameter  $l$ .

Wird neben der  $\tilde{k}$ -Gleichung noch eine weitere Transportgleichung gelöst, so spricht man von Zweigleichungsmodellen. Im  $k$ - $\omega$ -Modell geschieht dies für die mittlere Frequenz  $\omega$  der Turbulenz, die über die Beziehung

$$\omega \propto \frac{\sqrt{\tilde{k}}}{l} \quad (2.94)$$

mit der charakteristischen Länge  $l$  zusammenhängt [24, 39]. Beim bekanntesten Zweigleichungsmodell, dem  $k$ - $\varepsilon$ -Modell [58–60] wird statt für  $\omega$  für die Dissipationsgeschwindigkeit der turbulenten kinetischen Energie  $\tilde{\varepsilon}$  eine Transportgleichung gelöst. Diese ist über die Gleichung (2.57) mit der charakteristischen Länge verknüpft, sodass sich für die Wirbelviskosität der Zusammenhang

$$\mu_t = C_D \bar{\rho} \frac{\tilde{k}^2}{\tilde{\varepsilon}} \quad (2.95)$$

ergibt, mit der Proportionalitätskonstanten  $C_D$  [3, 12]. Ihr Wert bestimmt sich aus ebenen grenschichtartigen Strömungen mit der Annahme der Gleichheit der Produktionsrate von  $\tilde{k}$  und seiner Dissipationsgeschwindigkeit  $\tilde{\varepsilon}$  zu  $C_D = 0.09$  [56, 61]. Der Vorteil solcher Zweigleichungsmodelle liegt darin, dass der Transport von Turbulenz im Strömungsfeld berücksichtigt wird und kein strömungsabhängiger Parameter mehr zu ermitteln ist. Da jedoch die Größen  $\tilde{k}$  und  $\tilde{\varepsilon}$  Skalare sind, können sie lediglich isotrope Eigenschaften der Turbulenz wiedergeben. Die Zweigleichungsmodelle versagen bei der Beschreibung von Anisotropie, Einflüssen durch Rotation oder der sogenannten

*counter-gradient diffusion* (Gegen-Gradient Diffusion) [2]. Darüber hinaus werden wegen der Beschränkung durch die Prinzipien der Wirbelviskosität und der Wirbeldiffusivität der Transport der turbulenten Spannungen  $\overline{\rho \widetilde{u'' \widetilde{u''}}}$  bzw. der turbulenten skalaren Flüsse  $\overline{\rho \widetilde{u'' \phi''}}$  nicht korrekt beschrieben [24].

Werden diese Momente zweiter Ordnung ( $\overline{\rho \widetilde{u'' \widetilde{u''}}$  und  $\overline{\rho \widetilde{u'' \phi''}}$ ) nicht über skalare Größen modelliert, sondern Transportgleichungen — die *Reynolds-Spannungs-Gleichungen* — für sie gelöst, können anisotrope Effekte, wie sie in den meisten dreidimensionalen turbulenten Strömungen wichtig werden, erfasst und beschrieben werden [56]. Solche Modelle heißen *Momentenmodelle zweiter Ordnung*; zu diesen gehören auch die *Reynolds-Spannungs-Modelle* (RSM).

Numerisch deutlich aufwändiger als RS-Modelle ist die sogenannte *large eddy simulation* (LES) [1]. Sie ist sowohl vom Modellierungsgrad als auch vom Rechenaufwand zwischen den RS-Modellen und der direkten numerischen Simulation (DNS) anzusetzen. Mit der immensen Entwicklung der Leistungsfähigkeit der Computerprozessoren ist zu erwarten, dass die Bedeutung der LES weiter steigt und sie zusammen mit RS-Modellen als *subgrid-Modell* (Feinstruktur-Modell) eingesetzt werden. Im Unterschied zu den Mittelungsmethoden werden bei der LES die physikalischen Größen nicht in Mittelwert und Schwankung zerlegt, sondern es wird ein Filter definiert, über den die physikalischen Größen in einen auflösbaren (Grobstruktur, *grid scale*) und einen nicht auflösbaren (Feinstruktur, *subgrid scale*) Anteil aufgeteilt werden. Für den Grenzübergang der Filterweite  $\Delta \rightarrow 0$  geht die LES in eine DNS über. Als Vorteil gegenüber den RS-Modellen, in denen Instabilitäten auf großen Skalen gedämpft werden, sind diese in der LES explizit repräsentiert [1, 2]. Bei Umströmungen von Staukörpern (*bluff bodies*) oder in Strömungen mit Verbrennung können diese Effekte signifikante Bedeutung erlangen. Die Grobstruktur umfasst inhomogene und anisotrope Strukturen sowie energiereiche Wirbel, die größer als die Filterweite sind; diese Strukturen sind von der LES direkt berechenbar. Kleinere Strukturen, wie z.B. kleine energiearme Wirbel, können nicht aufgelöst werden. Ihr Einfluss und die Wechselwirkung der Feinstruktur mit der Grobstruktur müssen modelliert werden. Die Filterweite  $\Delta$  muss also entsprechend der gewünschten Größe der aufzulösenden Strukturen gewählt werden. Jedoch wird mit kleinerem  $\Delta$  das Berechnungsgitter feinmaschiger und die Rechenzeit länger. Verschiedene LES-Methoden unterscheiden sich zum einen in der Filteroperation und zum anderen in der Art der Modellierung, wie die turbulente Feinstruktur die Grobstruktur beeinflusst. Eine Übersicht über verschiedene LES-Methoden ist beispielsweise in [1] zu finden.

## 2.2.5 Reynolds–Spannungs–Modell für turbulente Sprayflammen

Aufbauend auf dem RS–Modell für reine Gasphasenströmungen wird in diesem Kapitel ein RS–Modell für turbulente Sprayflammen entwickelt. Da in der dabei angewandten Vorgehensweise, die flüssige Phase in Form von punktförmigen Quelltermen an die Gasphase gekoppelt wird, stehen auf der rechten Seite der Kontinuitätsgleichung wie auch in den Erhaltungsgleichungen der Massenbrüche, des Impulses und der Enthalpie (Gleichung (2.36)) zusätzliche Sprayquellterme  $L_\phi$ . Diese verschwinden bei der Herleitung der Transportgleichungen für die Korrelationen nicht, sodass dort zusätzliche Terme bleiben. Diese neuen Sprayquellterme werden hier konsequent mitgeführt; ihre detaillierte Behandlung und Modellierung wird in Kapitel 2.3 beschrieben.

Die exakte Beschreibung der Quellterme durch chemische Reaktionen ist durch das jeweils verwendete Reaktionsmodell gegeben. Wie sich im Abschnitt 2.4 zeigen wird, ist eine Modellierung der chemischen Reaktionsquellterme in den Transportgleichungen bei dem in dieser Arbeit verwendeten Ansatz zur Erfassung der Chemie nicht nötig, da keine Transportgleichung gelöst werden muss, die einen Quellterm der chemischen Reaktionen enthält. Statt dessen erfolgt die Bestimmung der Massenbrüche mit Hilfe von Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen in Abhängigkeit des Mischungsbruchs und seiner Varianz über das *Flamelet*–Modell. Deshalb erfolgt hier keine tiefer gehende Diskussion der chemischen Quellterme.

### 2.2.5.1 Turbulente viskose Spannungen

Zum Aufstellen der Transportgleichung für die Komponenten  $\overline{\rho u_i'' u_j''}$ ,  $i, j = 1, \dots, 3$ , des turbulenten Spannungstensors wird die  $i$ -te Komponente der Impulsgleichung (2.28) mit  $u_j$  multipliziert und die  $j$ -te Komponente mit  $u_i$  multipliziert. Nach Addition der beiden Gleichungen und weiteren Umformungen unter Verwendung der Kontinuitätsgleichung (2.2) ergibt sich

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho u_i u_j) + \frac{\partial}{\partial x_k} (\rho u_i u_j u_k) = & \left[ u_j \frac{\partial \tau_{ik}}{\partial x_k} + u_i \frac{\partial \tau_{jk}}{\partial x_k} \right] - \left[ u_j \frac{\partial p}{\partial x_i} + u_i \frac{\partial p}{\partial x_j} \right] \\ & + (u_j \rho g_i + u_i \rho g_j) - u_i u_j L_v + u_j L_{m,i} + u_i L_{m,j}. \end{aligned} \quad (2.96)$$

Hierbei wird die Einsteinsche Summenkonvention verwendet. Werden nun die Geschwindigkeitskomponenten in Favre–Mittelwert und –Schwankung zerlegt (Gleichung (2.71)) und die Gleichung zeitlich gemittelt, so folgt nach weiteren Umformungen<sup>1</sup> mit

<sup>1</sup> Symbolisch beschrieben erhält man die Gleichung (2.97) wie folgt:

$$(2.97) = \overline{(2.96)} - \tilde{u}_j \cdot (2.85)_i - \tilde{u}_i \cdot (2.85)_j + \tilde{u}_i \tilde{u}_j \cdot (2.81) .$$

Dabei bezeichnet  $\overline{(2.96)}$  die Mittelung der Gleichung (2.96),  $(2.85)_i$  die  $i$ -te Komponente der schon gemittelten Impulsgleichung (2.85) und (2.81) ist die bereits gemittelte Kontinuitätsgleichung.

Hilfe der gemittelten Impulsgleichung (2.85) und der gemittelten Kontinuitätsgleichung (2.81):

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\overline{\rho u_i'' \widetilde{u_j''}}) + \frac{\partial}{\partial x_k} (\overline{\rho \widetilde{u_k} u_i'' \widetilde{u_j''}}) &= - \frac{\partial}{\partial x_k} (\overline{\rho u_i'' u_j'' u_k''}) - \overline{\rho \widetilde{u_j} u_k''} \frac{\partial \widetilde{u_i}}{\partial x_k} - \overline{\rho u_i'' \widetilde{u_k}} \frac{\partial \widetilde{u_j}}{\partial x_k} \\ &+ \left[ \overline{u_j'' \frac{\partial \tau_{ik}}{\partial x_k}} + \overline{u_i'' \frac{\partial \tau_{jk}}{\partial x_k}} \right] - \left[ \overline{u_j'' \frac{\partial p}{\partial x_i}} + \overline{u_i'' \frac{\partial p}{\partial x_j}} \right] \quad (2.97) \\ &- \overline{(u_i'' u_j'' + \widetilde{u_i} u_j'' + \widetilde{u_j} u_i'')} L_v + \overline{u_j'' L_{m,i}} + \overline{u_i'' L_{m,j}}. \end{aligned}$$

Wegen  $\overline{\rho u_i''} = 0$  entfallen in Gleichung (2.97) nach der Mittelung die Summanden, die die Gravitation enthalten. Der Druck kann geschrieben werden als  $p = \bar{p} + p'$  und die Korrelation der Geschwindigkeitsfluktuation mit dem Gradient der Druckschwankung können nach Lumley [8, 62] in einen Umverteilungsterm und einen weiteren Term wie folgt zerlegt werden:

$$\overline{u_j'' \frac{\partial p'}{\partial x_i}} + \overline{u_i'' \frac{\partial p'}{\partial x_j}} = \underbrace{\left( \overline{u_j'' \frac{\partial p'}{\partial x_i}} + \overline{u_i'' \frac{\partial p'}{\partial x_j}} \right)}_{\text{Umverteilung}} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \overline{u_k'' \frac{\partial p'}{\partial x_k}} + \frac{2}{3} \delta_{ij} \overline{u_k'' \frac{\partial p'}{\partial x_k}}. \quad (2.98)$$

Der Umverteilungsterm ist so konstruiert, dass er bei Summation über seine Diagonalelemente verschwindet. Der zusätzliche Term kann geschrieben werden als Summe eines Transportterms und eines Rauschterms

$$\frac{2}{3} \delta_{ij} \overline{u_k'' \frac{\partial p'}{\partial x_k}} = \underbrace{\frac{2}{3} \delta_{ij} \overline{\frac{\partial u_k'' p'}{\partial x_k}}}_{\text{Transport}} - \underbrace{\frac{2}{3} \delta_{ij} \overline{p' \frac{\partial u_k''}{\partial x_k}}}_{\text{Rauschen}}. \quad (2.99)$$

Somit lässt sich Gleichung (2.97) umformen in

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\overline{\rho u_i'' \widetilde{u_j''}}) + \frac{\partial}{\partial x_k} (\overline{\rho \widetilde{u_k} u_i'' \widetilde{u_j''}}) &= - \frac{\partial}{\partial x_k} \left( \underbrace{\overline{\rho u_i'' u_j'' u_k''}}_{T_{ijk}^{(u)}} + \underbrace{\frac{2}{3} \delta_{ij} \overline{u_k'' p'}}_{T_{ijk}^{(p')}} \right) - \underbrace{\overline{\rho \widetilde{u_j} u_k''} \frac{\partial \widetilde{u_i}}{\partial x_k} - \overline{\rho u_i'' \widetilde{u_k}} \frac{\partial \widetilde{u_j}}{\partial x_k}}_{P_{ij}} \\ &+ \underbrace{\left[ \overline{u_j'' \frac{\partial \tau_{ik}}{\partial x_k}} + \overline{u_i'' \frac{\partial \tau_{jk}}{\partial x_k}} \right]}_{D_{ij}} - \underbrace{\left[ \overline{u_j'' \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i}} + \overline{u_i'' \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j}} \right]}_{\Pi_{ij}^{(\bar{p})}} \quad (2.100) \\ &- \underbrace{\left[ \overline{u_j'' \frac{\partial p'}{\partial x_i}} + \overline{u_i'' \frac{\partial p'}{\partial x_j}} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \overline{u_k'' \frac{\partial p'}{\partial x_k}} \right]}_{\Pi_{ij}} + \underbrace{\frac{2}{3} \delta_{ij} \overline{p' \frac{\partial u_k''}{\partial x_k}}}_{R_{ij}} \\ &- \underbrace{\overline{(u_i'' u_j'' + \widetilde{u_i} u_j'' + \widetilde{u_j} u_i'')}}_{\overline{L_{u_i'' u_j''}}} L_v + \overline{u_j'' L_{m,i}} + \overline{u_i'' L_{m,j}}. \end{aligned}$$

Die beiden Terme der linken Seite von Gleichung (2.100) beschreiben die zeitliche Änderung und die Konvektion von  $\overline{\rho u_i'' u_j''}$ . Der Produktionsterm

$$P_{ij} := -\overline{\rho u_j'' u_k''} \frac{\partial \widetilde{u}_i}{x_k} - \overline{\rho u_i'' u_k''} \frac{\partial \widetilde{u}_j}{x_k} \quad (2.101)$$

ist der einzige geschlossene Term auf der rechten Seite. Er beschreibt die Produktion der Reynolds–Spannungen durch die Scherung der mittleren Strömung.

Offensichtlich werden bei der Herleitung der Transportgleichung (2.100) für die Geschwindigkeitskorrelationen zweiter Ordnung Momente dritter Ordnung erzeugt:  $T_{ijk}^{(u)} = \overline{\rho u_i'' u_j'' u_k''}$ . Sie werden als turbulente Flüsse oder als turbulenter Transport der viskosen Spannungen  $u_i'' u_j''$  interpretiert in Analogie zur Interpretation der Terme  $\overline{\rho \vec{u}'' \phi''}$  als turbulente Flüsse der skalaren Größe  $\phi$ . Mit dem Ansatz von Daly und Harlow [63] wird der turbulente Transport durch Geschwindigkeitsfluktuationen  $T_{ijk}^{(u)}$  zusammen mit dem turbulenten Transport durch Druckschwankungen  $T_{ijk}^{(p')}$  modelliert durch

$$T_{ijk} := T_{ijk}^{(u)} + T_{ijk}^{(p')} = -C_S \overline{\rho} \frac{\widetilde{k}}{\widetilde{\varepsilon}} \overline{u_k'' u_l''} \frac{\partial \widetilde{u}_i'' \widetilde{u}_j''}{\partial x_l}, \quad (2.102)$$

wobei die Modellkonstante den Wert  $C_S = 0,22$  hat [63].

Der Kopplungsterm  $D_{ij}$  der Geschwindigkeitsfluktuationen mit dem laminaren viskosen Spannungstensor kann umgeschrieben werden in

$$D_{ij} := \overline{u_j'' \frac{\partial \tau_{ik}}{\partial x_k}} + \overline{u_i'' \frac{\partial \tau_{jk}}{\partial x_k}} \quad (2.103)$$

$$= \underbrace{\overline{\frac{\partial u_j'' \tau_{ik}}{\partial x_k}} + \overline{\frac{\partial u_i'' \tau_{jk}}{\partial x_k}}}_{\text{Transport}} - \underbrace{\overline{(\tau_{ik}' + \tau_{ik}') \frac{\partial u_j''}{\partial x_k}} - \overline{(\tau_{jk}' + \tau_{jk}') \frac{\partial u_i''}{\partial x_k}}}_{\text{Dissipation}}. \quad (2.104)$$

Effekte, die auf der molekularen Viskosität beruhen, können in turbulenten Strömungen mit hohen Reynolds–Zahlen nur dann von Bedeutung sein, wenn gleichzeitig große Gradienten vorliegen. Somit überwiegt bei großen Reynolds–Zahlen der Dissipations-term den Transportterm, der ausschließlich Gradienten von Mittelwerten aufweist. Es müssen also lediglich die Terme  $-\tau_{ik}' \frac{\partial u_j''}{\partial x_k} - \tau_{jk}' \frac{\partial u_i''}{\partial x_k}$  betrachtet werden. Sie beschreiben die viskose Dissipation von  $u_i'' u_j''$  [3, 8]. Unter der Annahme lokaler Isotropie bei feinen Skalen folgt, dass nur die Diagonalelemente von  $D_{ij}$  ungleich Null sind und man kann schreiben

$$D_{ij} = -\tau_{ik}' \frac{\partial u_j''}{\partial x_k} - \tau_{jk}' \frac{\partial u_i''}{\partial x_k} = -\frac{2}{3} \delta_{ij} \overline{\rho} \widetilde{\varepsilon}, \quad \text{mit} \quad (2.105)$$

$$\widetilde{\varepsilon} = \frac{1}{\overline{\rho}} \left( \overline{\tau_{lk}' \frac{\partial u_l''}{\partial x_k}} \right). \quad (2.106)$$

Die Erzeugung bzw. Vernichtung von  $\widetilde{u''_i u''_j}$  durch mittlere Druckgradienten lassen sich mittels [61]

$$\overline{u''_i} = \frac{1}{4,3\bar{\rho}} \frac{\widetilde{k}}{\widetilde{\varepsilon}} \widetilde{u''_i u''_l} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_l} \quad (2.107)$$

modellieren durch

$$\Pi_{ij}^{(\bar{p})} := - \left[ \overline{u''_j \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i}} + \overline{u''_i \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j}} \right] = - \frac{1}{4,3\bar{\rho}} \frac{\widetilde{k}}{\widetilde{\varepsilon}} \left( \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} \widetilde{u''_j u''_l} + \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j} \widetilde{u''_i u''_l} \right) \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_l}. \quad (2.108)$$

Sehr oft haben sie aber nur einen geringen Einfluss und können vernachlässigt werden [8].

Der Umverteilungsterm durch Druckfluktuationen  $\Pi_{ij}$  kann nach Jones [8] in drei Teile aufgespalten werden

$$\Pi_{ij} := - \left[ \overline{u''_j \frac{\partial p'}{\partial x_i}} + \overline{u''_i \frac{\partial p'}{\partial x_j}} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \overline{u''_k \frac{\partial p'}{\partial x_k}} \right] \quad (2.109)$$

$$= \Pi_{ij}^{\text{Return}} + \Pi_{ij}^{\text{Rapid}} + \Pi_{ij}^{\text{Auftrieb}}. \quad (2.110)$$

Der *Return*-Term  $\Pi_{ij}^{\text{Return}}$  beschreibt die Tendenz der Turbulenz zur Isotropie zurückzukehren. Nach dem hier verwendeten Ansatz von Rotta [25] ist er proportional zum Grad der Anisotropie  $\left( \frac{\widetilde{u''_i u''_j}}{\widetilde{k}} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \right)$ :

$$\Pi_{ij}^{\text{Return}} = -C_1 \bar{\rho} \widetilde{\varepsilon} \left( \frac{\widetilde{u''_i u''_j}}{\widetilde{k}} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \right). \quad (2.111)$$

Andere auch nichtlineare Ansätze finden sich z.B. in [54, 56, 61]. Der sogenannte *Rapid*-Term  $\Pi_{ij}^{\text{Rapid}}$  beinhaltet die Einflüsse der mittleren Scherung der Strömung und ist gegeben durch [64]

$$\Pi_{ij}^{\text{Rapid}} = -C_2 \left( P_{ij} - \frac{1}{3} P_{ll} \right), \quad (2.112)$$

wobei  $P_{ij}$  nach Gleichung (2.101) berechnet wird. Gibson und Younis [65] schlagen für die Werte der Konstanten  $C_1 = 3,0$  und  $C_2 = 0,33$  vor. Im dritten Term  $\Pi_{ij}^{\text{Auftrieb}}$  gehen die Auftriebseffekte ein. Nach Launder [66] ist er gegeben durch

$$\Pi_{ij}^{\text{Auftrieb}} = C_3 \left( \overline{\bar{\rho} g_i u''_j} + \overline{\bar{\rho} g_j u''_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \overline{\bar{\rho} g_l u''_l} \right), \quad (2.113)$$

wobei  $C_3 = 0,5$  ist.

Der Term  $R_{ij}$  in Gleichung (2.100) kann hier für kleine Mach-Zahlen vernachlässigt werden [8]

$$R_{ij} := \frac{2}{3} \delta_{ij} \overline{p' \frac{\partial u''_k}{\partial x_k}} \approx 0. \quad (2.114)$$

Für die Behandlung der Sprayquellen  $\overline{L}_{u_i''u_j''}$  sei auf das Kapitel 2.3 verwiesen. Mit diesen Modellierungsansätzen wird Gleichung (2.100) zur endgültigen Transportgleichung für die Geschwindigkeitsvarianzen:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} (\overline{\rho u_i'' u_j''}) + \frac{\partial}{\partial x_k} (\overline{\rho u_k u_i'' u_j''}) \\ &= -\frac{\partial}{\partial x_k} (T_{ijk}^{(u)} + T_{ijk}^{(p')}) + P_{ij} + D_{ij} + \Pi_{ij} + \Pi_{ij}^{(\overline{p})} + \overline{L}_{u_i''u_j''} \end{aligned} \quad (2.115)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{\partial}{\partial x_k} \left( C_S \overline{\rho} \frac{\tilde{k}}{\varepsilon} u_k'' u_l'' \frac{\partial u_i'' u_j''}{\partial x_l} \right) + P_{ij} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \overline{\rho} \tilde{\varepsilon} \\ & - C_1 \overline{\rho} \tilde{\varepsilon} \left( \frac{u_i'' u_j''}{\tilde{k}} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \right) - C_2 \left( P_{ij} - \frac{1}{3} P_u \right) + C_3 \left( \overline{\rho} g_i u_j'' + \overline{\rho} g_j u_i'' - \frac{2}{3} \delta_{ij} \overline{\rho} g_l u_l'' \right) \\ & - \frac{1}{4, 3\overline{\rho} \tilde{\varepsilon}} \left( \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_i} u_j'' u_l'' + \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_j} u_i'' u_l'' \right) \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_l} + \overline{L}_{u_i''u_j''}. \end{aligned} \quad (2.116)$$

### 2.2.5.2 Turbulente kinetische Energie und ihre Dissipationsgeschwindigkeit

Im Anschluß an die obige Herleitung der Transportgleichung für die Geschwindigkeitskorrelationen folgen die Erhaltungsgleichungen der turbulenten kinetischen Energie  $\tilde{k}$  sowie ihrer Dissipationsrate  $\tilde{\varepsilon}$ .

Die turbulente kinetische Energie  $\tilde{k}$  ist definiert als die Hälfte der Summe der Geschwindigkeitsvarianzen

$$\tilde{k} := \frac{1}{2} (\overline{u_1''^2} + \overline{u_2''^2} + \overline{u_3''^2}) = \frac{1}{2} \overline{u_i''^2}. \quad (2.117)$$

Ihre Transportgleichung erhält man durch Summation über  $i = j = 1, \dots, 3$  aus Gleichung (2.100) unter Verwendung von Gleichung (2.105) und (2.114) zu

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\overline{\rho \tilde{k}}) + \frac{\partial}{\partial x_k} (\overline{\rho u_k \tilde{k}}) &= -\frac{\partial}{\partial x_k} \left( \frac{1}{2} \overline{\rho u_l'' u_l'' u_k''} + \overline{u_k'' p'} \right) - \overline{\rho u_l'' u_k''} \frac{\partial \tilde{u}_l}{\partial x_k} \\ & - \overline{\rho} \tilde{\varepsilon} - \overline{u_k''} \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_k} + \overline{L}_{\tilde{k}} \end{aligned} \quad (2.118)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{\partial}{\partial x_k} \left( C_S \overline{\rho} \frac{\tilde{k}}{\varepsilon} u_k'' u_l'' \frac{\partial \tilde{k}}{\partial x_l} \right) - \overline{\rho u_l'' u_k''} \frac{\partial \tilde{u}_l}{\partial x_k} \\ & - \overline{\rho} \tilde{\varepsilon} - \frac{1}{4, 3\overline{\rho} \tilde{\varepsilon}} \overline{u_k'' u_l''} \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_l} \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_k} + \overline{L}_{\tilde{k}}, \end{aligned} \quad (2.119)$$

wobei

$$\overline{L}_{\tilde{k}} = \frac{1}{2} \overline{L}_{u_i''^2}. \quad (2.120)$$

Eine Transportgleichung für die in (2.106) definierte Dissipationsgeschwindigkeit der turbulenten kinetischen Energie  $\tilde{\varepsilon}$  lässt sich unter Verwendung der gemittelten Kontinuitätsgleichung und der mit  $\overline{\tau}_{ij}$  multiplizierten gemittelten Impulsgleichung durch

Ableiten der  $i$ -ten Komponente der Impulsgleichung nach  $x_j$  und Multiplikation mit  $\tau_{ij}$  herleiten. Die dort auftretenden Terme der Produktion, der Dissipation, der molekularen Diffusion und des turbulenten Transports sind experimentell nicht befriedigend bestimmbar. Daher ist die Modellierung dieser Korrelationen sehr schwierig und es wird in Anlehnung an die Erhaltungsgleichung (2.118) für  $\tilde{k}$  eine Transportgleichung für  $\tilde{\varepsilon}$  formuliert: [1, 3, 8, 61, 67]

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\overline{\rho \tilde{\varepsilon}}) + \frac{\partial}{\partial x_k} (\overline{\rho u_k \tilde{\varepsilon}}) &= \frac{\partial}{\partial x_k} \left( C_{\tilde{\varepsilon}} \overline{\rho \frac{\tilde{k}}{\tilde{\varepsilon}} u_k'' u_l''} \frac{\partial \tilde{\varepsilon}}{\partial x_l} \right) - C_{\tilde{\varepsilon}_1} \overline{\rho \frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{k}} u_k'' u_l''} \frac{\partial \tilde{u}_l}{\partial x_k} \\ &\quad - C_{\tilde{\varepsilon}_2} \overline{\rho \frac{\tilde{\varepsilon}^2}{\tilde{k}}} + C_{\tilde{\varepsilon}_3} \frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{k}} \frac{\mu_t}{\rho^2} \frac{\partial \overline{\rho}}{\partial x_i} \frac{\partial \overline{\rho}}{\partial x_i} + C_{\tilde{\varepsilon}_4} \underbrace{\overline{\frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{k}} \overline{L_k}}}_{\overline{L_{\tilde{\varepsilon}}}}. \end{aligned} \quad (2.121)$$

Auch hier sind die Terme der gemittelten Druckgradienten wie schon in Gleichung (2.100) der Geschwindigkeitskorrelationen häufig vernachlässigbar. Nach [8] nehmen die Parameter folgende Werte an:  $C_{\tilde{\varepsilon}} = 1,3$ ,  $C_{\tilde{\varepsilon}_1} = 1,44$ ,  $C_{\tilde{\varepsilon}_2} = 1,92$  und  $C_{\tilde{\varepsilon}_3} = 1,0$  sowie  $C_{\tilde{\varepsilon}_4} = 1,0$ . Die Sprayquellterme  $\overline{L_k}$  und  $\overline{L_{\tilde{\varepsilon}}}$  gehen aus  $\overline{L_{u_l''^2}}$  hervor und werden in Kapitel 2.3 eingehender behandelt.

### 2.2.5.3 Turbulente Flüsse skalarer Größen

Analog zur Herleitung der Transportgleichung für die Reynolds–Spannungen erhält man die Transportgleichungen der turbulenten skalaren Flüsse  $\overline{\rho u_i'' \phi''}$ ,  $\phi \in \{h, Y_\alpha, Z_j, \xi\}$ . Zunächst gewinnt man die Gleichung

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho u_i \phi) + \frac{\partial}{\partial x_k} (\rho u_k u_i \phi) &= \left[ \phi \frac{\partial \tau_{ik}}{\partial x_k} - u_i \frac{\partial j_{\phi,k}}{\partial x_k} \right] - \phi \frac{\partial p}{\partial x_i} + \phi \rho g_i + u_i S_\phi \\ &\quad - u_i \phi L_v + \phi L_{m,i} + u_i L_\phi, \end{aligned} \quad (2.122)$$

indem man  $\phi$  mit der Impulsgleichung (2.28) der Komponente  $i$  multipliziert, die Transportgleichung der Größe  $\phi$  (Gleichung (2.16), (2.21), (2.27) bzw. (2.35)) mit  $u_i$  multipliziert und die beiden Gleichungen unter Verwendung der Kontinuitätsgleichung (2.2) addiert. Die Größen  $j_{\phi,k}$ ,  $S_\phi$  und  $L_\phi$  sind der Tabelle 2.1 zu entnehmen. Nach der Zerlegung in Favre–Mittelwert und –Schwankung (Gleichung (2.71)) und weiteren Umformungen folgt unter Berücksichtigung der gemittelten Gleichungen für  $\phi$  und  $u_i$  sowie der gemittelten Kontinuitätsgleichung (2.81) die Transportgleichung der turbulenten skalaren Flüsse

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\overline{\rho u_i'' \phi''}) + \frac{\partial}{\partial x_k} (\overline{\rho u_k u_i'' \phi''}) &= - \frac{\partial}{\partial x_k} (\overline{\rho u_k'' u_i'' \phi''}) - \overline{\rho u_i'' u_k''} \frac{\partial \phi}{\partial x_k} - \overline{\rho u_k'' \phi''} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_k} \\ &\quad - \phi'' \frac{\partial p}{\partial x_i} + \phi'' \frac{\partial \tau_{ik}}{\partial x_k} - u_i'' \frac{\partial j_{\phi,k}}{\partial x_k} + \underbrace{\overline{\rho \phi''}}_{=0} g_i \end{aligned} \quad (2.123)$$

$$-\overline{u_i'' S_\phi} - \underbrace{\overline{(u_i'' \phi'' + \widetilde{u}_i \phi'' + \widetilde{\phi} u_i'')} L_v + \overline{\phi'' L_{m,i}} + \overline{u_i'' L_\phi}}_{\overline{L_{u_i'' \phi''}}}.$$

Ähnlich wie bei der Transportgleichung (2.97) der Reynolds–Spannungen lassen sich die Terme der rechten Seite interpretieren. Der erste Term der rechten Seite lässt sich als turbulenter Transport der skalaren Flüsse  $\overline{\rho u_i'' \phi''}$  verstehen. Er wird modelliert durch

$$\overline{\rho u_i'' u_i'' \phi''} = -C_S \overline{\rho} \frac{\widetilde{k}}{\widetilde{\varepsilon}} \overline{u_k'' u_m''} \frac{\partial \widetilde{u_i'' \phi''}}{\partial x_m}. \quad (2.124)$$

Die Terme zwei und drei der rechten Seite sind geschlossen; sie beschreiben die Produktion der skalaren Flüsse durch Gradienten der mittleren Geschwindigkeit bzw. des gemittelten Skalars. Die Wechselwirkungen der Druckgradienten mit den Fluktuationen der Skalare werden ausgedrückt durch

$$-\overline{\phi'' \frac{\partial p}{\partial x_i}} = -\overline{\phi'' \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_i}} - \overline{\phi'' \frac{\partial p'}{\partial x_i}} \quad (2.125)$$

$$= -\overline{\phi'' \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_i}} - C_{\phi_1} \overline{\rho} \frac{\widetilde{\varepsilon}}{\widetilde{k}} \overline{u_i'' \phi''} + C_{\phi_2} \overline{\rho} \overline{u_j'' \phi''} \frac{\partial \widetilde{u}_j}{\partial x_i} + C_{\phi_3} \overline{\rho} g_i \overline{\phi''}, \quad (2.126)$$

wobei für den Term der Druckschwankung der Ansatz

$$\overline{\phi'' \frac{\partial p'}{\partial x_i}} = C_{\phi_1} \overline{\rho} \frac{\widetilde{\varepsilon}}{\widetilde{k}} \overline{u_i'' \phi''} - C_{\phi_2} \overline{\rho} \overline{u_j'' \phi''} \frac{\partial \widetilde{u}_j}{\partial x_i} - C_{\phi_3} \overline{\rho} g_i \overline{\phi''} \quad (2.127)$$

und für  $\overline{\phi''}$  in Analogie zu Gleichung (2.107) der Ansatz

$$\overline{\phi''} = \frac{1}{4,3} \frac{\widetilde{k}}{\overline{\rho} \widetilde{\varepsilon}} \overline{u_k'' \phi''} \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_k} \quad (2.128)$$

verwendet werden. Für die Konstanten in Gleichung (2.127) schlagen Jones und Kakhi [8] die Werte  $C_{\phi_1} = 3$ ,  $C_{\phi_2} = 0,5$  und  $C_{\phi_3} = 0,5$  vor.

Die Annahme lokaler Isotropie und Analyse der Größenordnung der Terme aus Gleichung (2.123) führt zu dem Ergebnis, dass die Ausdrücke zur Beschreibung der Dissipation der skalaren Flüsse vernachlässigt werden können [8]:

$$+\overline{\phi'' \frac{\partial \tau_{ik}}{\partial x_k}} - \overline{u_i'' \frac{\partial j_{\phi,k}}{\partial x_k}} \approx 0. \quad (2.129)$$

Der Wechselwirkungsterm der Geschwindigkeitsschwankungen mit dem chemischen Quellterm  $S_\phi$  taucht nur für  $\phi = Y_\alpha$  auf. Diese Differentialgleichungen brauchen nach dem verwendeten Modell zur Beschreibung der Chemie nicht gelöst zu werden (Kapitel 2.4). Für alle anderen Skalare  $\phi = h, Z_j, \xi$  liefert er keinen Beitrag (Tabelle 2.1). Die Beschreibung der Sprayquellen  $\overline{L_{u_i'' \phi''}}$  erfolgt zusammen mit den anderen Sprayquelltermen in Abschnitt 2.3. Mit den beschriebenen Modellierungsansätzen und Annahmen ist somit auch die Transportgleichung 2.123 für die turbulenten Flüsse  $\overline{\rho u_i'' \phi''}$  der skalaren Größen geschlossen.

## 2.2.5.4 Varianzen und Kovarianzen skalarer Größen

Entsprechend dem skizzierten Weg zur Herleitung der Transportgleichungen der Reynolds–Spannungen (Gleichung (2.97)) und der turbulenten Flüsse skalarer Größen (Gleichung (2.123)) lassen sich auch Transportgleichungen der Varianzen  $\overline{\rho\phi''^2}$  und Kovarianzen  $\overline{\rho\phi''\psi''}$  der skalaren Größen ableiten ( $\phi, \psi \in \{h, Y_\alpha, Z_j, \xi\}$ ). So wird im ersten Schritt die Erhaltungsgleichung des Skalars  $\phi$  (Gleichung (2.16), (2.21), (2.27) bzw. (2.35)) mit  $\psi$  multipliziert und zur mit  $\phi$  multiplizierten Erhaltungsgleichung von  $\psi$  addiert. Hieraus erhält man die Gleichung

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi\psi) + \frac{\partial}{\partial x_k}(\rho u_k\phi\psi) = -\psi \frac{\partial j_{\phi,k}}{\partial x_k} - \phi \frac{\partial j_{\psi,k}}{\partial x_k} + \psi S_\phi + \phi S_\psi - \phi\psi L_v + \psi L_\phi + \phi L_\psi. \quad (2.130)$$

Zerlegung der Skalare in Favre–Mittelwert und –Schwankung (Gleichung (2.71)) führt nach weiteren Umformungen unter Verwendung der gemittelten Gleichungen der Skalare  $\phi$  und  $\psi$  sowie der Kontinuitätsgleichung (2.81) zur Transportgleichung der Kovarianzen

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\overline{\rho\phi''\psi''}) + \frac{\partial}{\partial x_k}(\overline{\rho u_k\phi''\psi''}) &= -\frac{\partial}{\partial x_k}(\overline{\rho u_k''\phi''\psi''}) - \overline{\rho u_k''\psi''} \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial x_k} - \overline{\rho u_k''\phi''} \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial x_k} \\ &\quad - \overline{\psi'' \frac{\partial j_{\phi,k}}{\partial x_k}} - \overline{\phi'' \frac{\partial j_{\psi,k}}{\partial x_k}} - \overline{\psi'' S_\phi} - \overline{\phi'' S_\psi} \quad (2.131) \\ &\quad - \underbrace{(\overline{\phi''\psi''} + \overline{\tilde{\phi}\psi''} + \overline{\tilde{\psi}\phi''})}_{\overline{L_{\phi''\psi''}}} L_v + \overline{\phi'' L_\psi} + \overline{\psi'' L_\phi}. \end{aligned}$$

Auch hier lassen sich die einzelnen Terme wie schon in den Transportgleichungen der Reynolds–Spannungen und der turbulenten skalaren Flüsse interpretieren. Die linke Seite enthält die zeitliche Änderung und Konvektion der Korrelationen. Der erste Term der rechten Seite beschreibt den turbulenten Transport, der zweite und dritte Term die Produktion durch Gradienten der mittleren Skalare, die folgenden beiden Ausdrücke kennzeichnen die Dissipation durch molekulare Effekte, es folgen zwei Terme zur Beschreibung der Wechselwirkungen der turbulenten Schwankungen mit den Quellen der chemischen Reaktionen (Terme sechs und sieben auf der rechten Seite der Gleichung) und zuletzt die Interaktion der turbulenten Schwankungen mit den Sprayquelltermen  $\overline{L_{\phi''\psi''}}$ .

Der turbulente Transportterm wird analog dem Transportterm in Gleichung (2.123) modelliert durch [3, 8]

$$\overline{\rho u_k''\phi''\psi''} = -C_S \overline{\tilde{k}} \overline{\rho} \frac{\tilde{\epsilon}}{\tilde{\epsilon}} \overline{u_k'' u_m''} \frac{\partial \overline{\phi''\psi''}}{\partial x_m}. \quad (2.132)$$

Entsprechende Überlegungen, wie sie zur Behandlung des Dissipationsterms  $D_{ij}$  in Gleichung (2.105) beitragen, sind auch hier anwendbar [3]. Mit ihnen lassen sich die

Dissipationsterme in Gleichung (2.131) umschreiben in

$$-\overline{\psi'' \frac{\partial j_{\phi,k}}{\partial x_k}} - \overline{\phi'' \frac{\partial j_{\psi,k}}{\partial x_k}} = -\overline{\frac{\partial \psi'' j_{\phi,k}}{\partial x_k}} - \overline{\frac{\partial \phi'' j_{\psi,k}}{\partial x_k}} + \overline{j_{\phi,k} \frac{\partial \psi''}{\partial x_k}} + \overline{j_{\psi,k} \frac{\partial \phi''}{\partial x_k}} \quad (2.133)$$

$$\approx \overline{j_{\phi,k} \frac{\partial \psi''}{\partial x_k}} + \overline{j_{\psi,k} \frac{\partial \phi''}{\partial x_k}} \quad (2.134)$$

$$\approx -2\rho D \overline{\frac{\partial \phi''}{\partial x_k} \frac{\partial \psi''}{\partial x_k}} = -\overline{\rho \tilde{\varepsilon}_{\phi\psi}} \quad (2.135)$$

mit der neuen Unbekannten  $\tilde{\varepsilon}_{\phi\psi}$  zur Beschreibung der Dissipation der skalaren Korrelationen. Die Erweiterung des Gleichungssystems um eine Differentialgleichung für  $\tilde{\varepsilon}_{\phi\psi}$  kann meist umgangen werden, wenn die Mischungslängen der turbulenten Geschwindigkeitsschwankungen und der turbulenten Schwankungen der Skalare in einem konstanten Verhältnis stehen [3]. Dann lässt sich schreiben

$$\overline{\rho \tilde{\varepsilon}_{\phi\psi}} = \overline{\rho} C_{\tilde{\varepsilon}_{\phi\psi}} \frac{\tilde{\varepsilon}}{k} \overline{\phi'' \psi''}, \quad (2.136)$$

wobei für den Modellparameter  $C_{\tilde{\varepsilon}_{\phi\psi}}$  häufig der Wert 2 benutzt wird [2,3]. Die Quellterme durch chemische Reaktionen verschwinden für  $\phi, \psi = h, Z_j, \xi$ . Nur für die Massenbrüche  $\phi, \psi = Y_\alpha$  liefern sie einen Beitrag, der durch das verwendete Reaktionsmodell gegeben ist (s. Kapitel 2.4). Für die Sprayquellterme sei wieder auf das Kapitel 2.3 verwiesen.

Mit den beschriebenen Modellierungsansätzen wird Gleichung (2.131) zu

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\overline{\rho \phi'' \psi''}) + \frac{\partial}{\partial x_k} (\overline{\rho u_k \phi'' \psi''}) &= C_S \overline{\rho} \frac{\tilde{k}}{\tilde{\varepsilon}} \overline{u_k'' u_m''} \frac{\partial \overline{\phi'' \psi''}}{\partial x_m} - \overline{\rho u_k'' \psi''} \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial x_k} - \overline{\rho u_k'' \phi''} \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial x_k} \\ &\quad - 2\overline{\rho} C_{\tilde{\varepsilon}_{\phi\psi}} \frac{\tilde{\varepsilon}}{k} \overline{\phi'' \psi''} - \overline{\psi'' S_\phi} - \overline{\phi'' S_\psi} + \overline{L_{\phi'' \psi''}}. \end{aligned} \quad (2.137)$$

Für  $\phi = \psi$  ergibt sich aus Gleichung (2.131) die Erhaltungsgleichung für die Varianzen ohne Modellansätze

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\overline{\rho \phi''^2}) + \frac{\partial}{\partial x_k} (\overline{\rho u_k \phi''^2}) &= -\frac{\partial}{\partial x_k} (\overline{\rho u_k'' \phi''^2}) - 2\overline{\rho u_k'' \phi''} \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial x_k} \\ &\quad - 2\overline{\phi'' \frac{\partial j_{\phi,k}}{\partial x_k}} - 2\overline{\phi'' S_\phi} - \underbrace{\overline{(\phi''^2 + 2\tilde{\phi} \phi'')}}_{\overline{L_{\phi''^2}}} L_v + 2\overline{\phi'' L_\phi} \end{aligned} \quad (2.138)$$

bzw. aus (2.137) die modellierte Variante zu

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\overline{\rho \phi''^2}) + \frac{\partial}{\partial x_k} (\overline{\rho u_k \phi''^2}) &= C_S \overline{\rho} \frac{\tilde{k}}{\tilde{\varepsilon}} \overline{u_k'' u_m''} \frac{\partial \overline{\phi''^2}}{\partial x_m} - 2\overline{\rho u_k'' \phi''} \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial x_k} \\ &\quad - 2\overline{\rho} C_{\tilde{\varepsilon}_{\phi^2}} \frac{\tilde{\varepsilon}}{k} \overline{\phi''^2} - 2\overline{\phi'' S_\phi} + \overline{L_{\phi''^2}}. \end{aligned} \quad (2.139)$$

Der Quellterm der chemischen Reaktionen  $S_\phi$  ist nach Tabelle 2.1 nur für  $\phi = Y_\alpha$  ungleich Null. Für alle anderen Größen  $\phi$  verschwindet der Term  $\overline{\psi'' S_\phi}$  in Gleichung (2.137) bzw.  $\overline{\phi'' S_\phi}$  in (2.139). Die Bestimmung der Gemischzusammensetzung ( $Y_\alpha$ ) erfolgt in dieser Arbeit über die Modellierung der chemischen Reaktionen durch das *Flamelet*-Modell, das in Kapitel 2.4 beschrieben ist. Die Differentialgleichungen der Speziesmassenbrüche  $Y_\alpha$  brauchen dazu nicht gelöst werden.

Hiermit ist die Aufstellung eines geschlossenen Systems von Erhaltungsgleichungen in den Abschnitten 2.2.3 bis 2.2.5 für alle RS-Größen ( $\bar{\rho}$ ,  $\tilde{Y}_\alpha$ ,  $\tilde{Z}_C$ ,  $\tilde{\xi}_C$ ,  $\tilde{u}$ ,  $\tilde{h}$ ,  $\tilde{k}$ ,  $\tilde{\varepsilon}$ ,  $\bar{\rho} \tilde{u}_i'' \tilde{u}_j''$ ,  $\bar{\rho} \tilde{u}_i'' \phi''$ ,  $\bar{\rho} \phi'' \psi''$ ) abgeschlossen (vgl. [12, 43]). In allen Transportgleichungen sind dabei die Sprayquellterme berücksichtigt. Die Darstellung der exakten Form der Sprayquellen ist Inhalt des folgenden Kapitels 2.3, wo auf die Beschreibung der flüssigen Phase eingegangen wird.

## 2.3 Beschreibung der flüssigen Phase

Nach der Beschreibung der Gasphase in den voran gegangenen Kapiteln wird hier die flüssige Phase, ihre Wechselwirkung mit der Turbulenz und die Modellierung der Sprayquellterme in den Gasphasengleichungen betrachtet. Der Ablauf von Sprayverbrennung kann untergliedert werden in die Schritte [12, 68]:

- Einspritzen und Zerstäubung des flüssigen Brennstoffs
- Verteilung der Tropfen mit der umgebenden Luft
- Wärmeaustausch der Tropfen mit der Umgebung und Tropfenverdampfung
- Vermischung des gasförmigen Brennstoffs mit dem oxidierenden Gas
- Zündung und Verbrennung in einer vorgemischten Flamme oder einer Diffusionsflamme

Verschiedene Einflüsse wie endliche chemische Reaktionsgeschwindigkeiten, Verlöschprozesse, Bildung von Schadstoffen und Auswirkungen der Turbulenz auf die Tröpfchenbewegung haben Rückwirkungen auf die genannten Prozesse. Ein detailliertes chemisches Reaktionsmodell, das auch Nichtgleichgewichtsprozesse berücksichtigt, ist zur korrekten Voraussage der Schadstoffbildung nötig. Abbildung 2.2 zeigt schematisch verschiedene Bereiche einer Sprayflamme und skizziert Verläufe radialer Temperatur-, Geschwindigkeits- und Massenbruchprofile. Bei detaillierter Untersuchung einer rotationssymmetrischen Sprayflamme [12, 69] ist zu sehen, dass in der Nähe der Symmetrieachse die Gastemperatur niedrig ist und eine hohe Tropfendichte vorliegt. Dieser

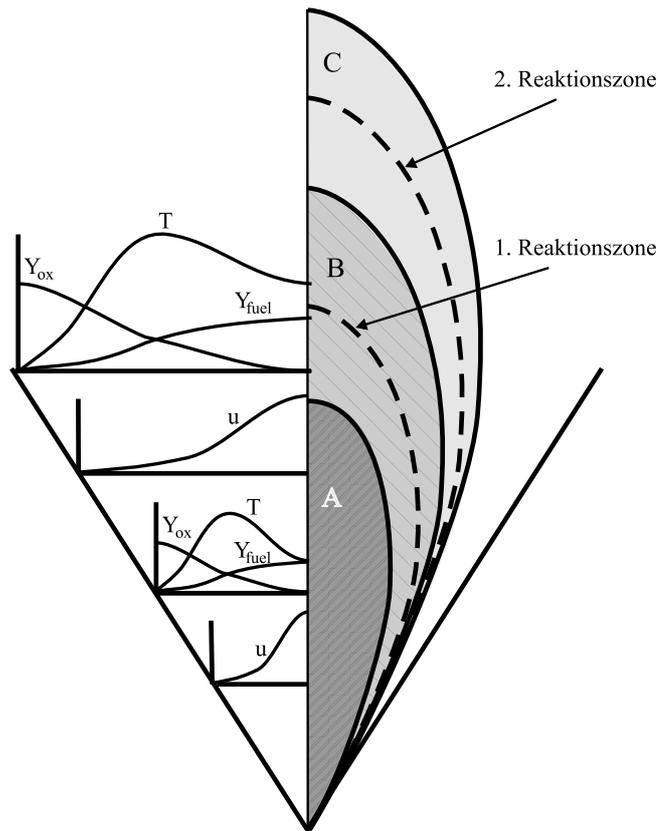


Abb. 2.2: Schema einer rotationssymmetrischen Spraydiffusionsflamme (nach [71, 72])

Bereich markiert den kalten Kern des Sprays (Abbildung 2.2, Bereich A). Er wird umrandet von einem Gebiet, wo Brennstoffdampf und Tropfen sich mit der umgebenden Luft vermischt haben (Bereich B). Die Tropfendichte ist stark verringert und es bildet sich eine erste Reaktionszone aus. Große Tropfen durchdringen diese Reaktionszone und verdampfen dabei sehr rasch. In dem äußeren Bereich, wo keine Tropfen mehr vorliegen (Bereich C), ist häufig eine zweite Reaktionszone vorzufinden. Die experimentelle Untersuchung mittels laseroptischer Methoden gestaltet sich in Regionen mit dichtem Spray, insbesondere in Düsennähe, wegen starker Streuung und Absorption der Laserstrahlen als sehr schwierig [70].

Im Folgenden werden zunächst verschiedene Modellierungsansätze der flüssigen Phase aufgezeigt (Abschnitt 2.3.1) und Gleichungen für die Tropfendynamik in einer turbulenten Umgebung aufgestellt (Abschnitt 2.3.2). Danach sind die hier verwendeten Modelle der Tropfenverdampfung (Abschnitt 2.3.3), Tropfenerwärmung (Abschnitt 2.3.4), statistischen Beschreibung des Sprays (Abschnitt 2.3.5) sowie der Sprayquellterme in den Gasphasengleichungen beschrieben (Abschnitt 2.3.6).

### 2.3.1 LHF – und SF – Modelle

Die Hauptansätze der Spraymodellierung lassen sich in zwei Kategorien einteilen, den Einphasen – Modellen oder *Locally Homogeneous Flow (LHF)* – Modellen und den Zweiphasen – Modellen oder *Seperated Flow (SF)* – Modellen [6]. Den LHF – Modellen liegt die Annahme zugrunde, dass sich flüssige Phase und Gasphase im dynamischen und thermodynamischen Gleichgewicht befinden, d.h. der Austausch von Masse, Impuls und Wärme zwischen den beiden Phasen ist relativ zum Transport durch die Strömung sehr schnell. In jedem Punkt der Strömung haben beide Phasen gleiche Temperatur und Geschwindigkeit. Der Vorteil dieser Modelle liegt in ihrem relativ geringen Rechenaufwand, jedoch sind ihre Voraussetzungen nur für nicht reaktive Sprays mit sehr kleinen Tropfen erfüllt.

Die SF – Modelle dagegen betrachten die flüssige Phase und Gasphase getrennt und behandeln den Austausch von Masse, Impuls und Wärme zwischen den beiden Phasen. Es werden drei Arten von SF – Modellen unterschieden:

#### 2.3.1.1 Kontinuumsformulierung (CFM *continuum – formulation model*)

Bei Modellen der Kontinuumsformulierung wird von der Vorstellung ausgegangen, dass sich die flüssige Phase und die Gasphase wie zwei Kontinua durchdringen [6]. Für beide Phasen resultieren ähnliche Erhaltungsgleichungen. Problematisch bei diesem Ansatz ist die Formulierung des Aufheizprozesses und der Verdampfung sowie der Wechselwirkung zwischen Turbulenz und Tröpfchen und des turbulenten Transports der physikalischen Größen.

#### 2.3.1.2 Kontinuierliche Tröpfchenmodelle (CDM *continuous droplet model*)

Die große Anzahl von Einzeltropfen unterschiedlicher Eigenschaften im Spray legen eine statistische Behandlung nahe [4]. Bei Vernachlässigung von Abweichungen von der Kugelform sind die Eigenschaften eines Tropfens gegeben durch seinen Radius  $r_d$ , seine Position  $\vec{x}_d$  und seine Geschwindigkeit  $\vec{v}_d$  (Index “d” für *droplet*: Tröpfchen). Mit der das Spray beschreibenden Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung  $f_d(r_d, \vec{x}_d, \vec{v}_d, t)$  lässt sich die Wahrscheinlichkeit angeben, zur Zeit  $t$  einen Tropfen einer Größe zwischen  $r_d$  und  $r_d + dr_d$  mit der Geschwindigkeit im Interval  $[\vec{v}_d, \vec{v}_d + d\vec{v}_d]$  im Ortsbereich  $[\vec{x}_d, \vec{x}_d + d\vec{x}_d]$  zu finden:

$$f_d(r_d, \vec{x}_d, \vec{v}_d, t) dr_d d\vec{x}_d d\vec{v}_d. \quad (2.140)$$

Die sogenannte Spraygleichung in [4] beschreibt eine Transportgleichung für die Wahrscheinlichkeitsdichte  $f_d$  und bestimmt somit die räumliche und zeitliche Änderung des

Sprays. Ihre numerische Lösung ist wegen der hohen Dimension des Variablenvektors  $(r_d, \vec{x}_d, \vec{v}_d, t)$  enorm aufwändig, weshalb häufig auf das diskrete Tröpfchenmodell zurückgegriffen wird, bei dem der numerische Aufwand ungleich niedriger ist.

### 2.3.1.3 Diskrete Tröpfchenmodelle (DDM *discrete droplet model*)

In der vorliegenden Arbeit wird das Diskrete Tröpfchenmodell verwendet. Dieses beinhaltet wie schon das CDM die Annahmen eines dünnen Sprays und vernachlässigbarer Wechselwirkungen der Tropfen untereinander [6, 7, 73]. In unmittelbarer Düsen­nähe ist die Tropfendichte meist sehr hoch und es liegen ligamentartige Strukturen vor, so dass dort die Voraussetzungen dieser Annahmen im Allgemeinen nicht gegeben sind. Mit Hilfe eines Korrekturfaktors, der das tatsächliche lokal vorliegende Verhältnis von gasförmiger und flüssiger Phase berücksichtigt, können auch dichtere Sprays behandelt werden [74–76]. Es wird eine endliche Anzahl von Tröpfchen betrachtet, die in ihren Eigenschaften das gesamte Spray charakterisieren. Die Änderung der Tropfengrößen, Positionen und Geschwindigkeiten werden über einen Lagrangeformalismus berechnet. Durch die Erweiterung der Eulerschen Gasphasengleichungen um die Quellterme des Sprays wird der Austausch der Masse, des Impulses und der Energie zwischen den Phasen wiedergegeben. Auch turbulente Wechselwirkungen zwischen Tropfen und Gasphase können im DDM mittels statistischer Betrachtungen und neuen Quelltermen in den Gasphasengleichungen behandelt werden.

## 2.3.2 Tropfenbewegung und turbulente Dispersion

Mittels einer Lagrange-Formulierung wird die Trajektorie der Tröpfchen berechnet. Die Tropfengeschwindigkeit ist gegeben durch

$$\vec{v}_d = \frac{d\vec{x}_d}{dt}. \quad (2.141)$$

Durch Gravitations- und Reibungskräfte erfahren die Tröpfchen die Beschleunigung

$$\vec{a}_d = \frac{d\vec{v}_d}{dt} = \frac{3}{8} \frac{\bar{p}}{\rho_l} C_d \frac{(\tilde{u} + \vec{u}'') - \vec{v}_d}{r_d} |(\tilde{u} + \vec{u}'') - \vec{v}_d| + \vec{g}. \quad (2.142)$$

Es zeigt sich, dass weitere Kräfte wie etwa durch Druckgradienten im Gas oder durch Rotation der Tröpfchen im Allgemeinen wesentlich kleinere Beiträge liefern und vernachlässigt werden können [4, 68]. Die Reibungskraft führt zum ersten Term der rechten Seite von Gleichung (2.142); sie wirkt in Richtung der Geschwindigkeitsdifferenz zwischen Gasphase und Tröpfchen  $(\tilde{u} - \vec{v}_d)$  und ist proportional zu ihrem Quadrat. Mit  $\rho_l$  ist die Dichte der Tröpfchenflüssigkeit bezeichnet (Index “l” für *liquid*: Flüssigkeit).

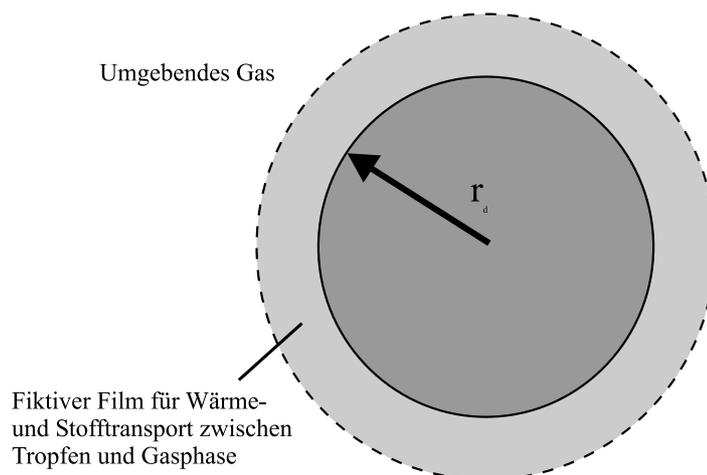


Abb. 2.3: Schema des Zweifilm-Modells [12]

Der Reibungsfaktor  $C_d$ , auch Widerstandsbeiwert genannt, folgt aus dem Stokeschen Gesetz für die Umströmung einer Kugel zu [72]

$$C_d = \begin{cases} \frac{24}{\text{Re}_d} \left(1 + \frac{1}{6}\text{Re}_d^{2/3}\right) & : \text{Re}_d < 1000 \\ 0,424 & : \text{Re}_d > 1000 \end{cases}, \quad (2.143)$$

wobei die *Tröpfchen-Reynolds-Zahl*  $\text{Re}_d$  analog zur allgemeinen Reynolds-Zahl (Gleichung (2.52)) definiert ist als

$$\text{Re}_d := 2r_d \rho \frac{\vec{u} - \vec{v}_d}{\mu_f}. \quad (2.144)$$

Zur Bestimmung der Tröpfchen-Reynolds-Zahl wird eine fiktive dynamische Viskosität  $\mu_f$  in einem fiktiven Film (Index "f"), der zwischen Tropfenoberfläche und Gasphase liegt, herangezogen (Abbildung 2.3). Als Funktion der Temperatur  $\mu_f = \mu_f(T_f)$  (Gleichung (2.46)) wird sie ermittelt aus der Referenztemperatur des Films  $T_f$ , die aus der Gastemperatur  $\tilde{T}$  und der Tropfentemperatur  $T_d$  mit Hilfe der  $\frac{1}{3}$ -Regel bestimmt wird zu [77]

$$T_f = \frac{\tilde{T} + 2T_d}{3}. \quad (2.145)$$

In Gleichung (2.142) erscheint zur Berechnung der Reibungskraft die Momentangeschwindigkeit  $\vec{u} = \tilde{\vec{u}} + \vec{u}''$  der Gasphase. Die Lösung der gemittelten Gasphasengleichungen liefern jedoch nur die gemittelten Werte  $\tilde{\vec{u}}$ . Würde in Gleichung (2.142) die mittlere statt der momentanen Gasgeschwindigkeit herangezogen ( $\vec{u} \rightarrow \tilde{\vec{u}}$ ), so ließen sich lediglich gemittelte Tröpfchentrajektorien berechnen und die Dispersion der Tröpfchen durch die Turbulenz könnte nicht erfasst werden. Bei LHF-Modellen andererseits werden die Tropfen wie auch die Gasphase in gleichem Maße von der Turbulenz

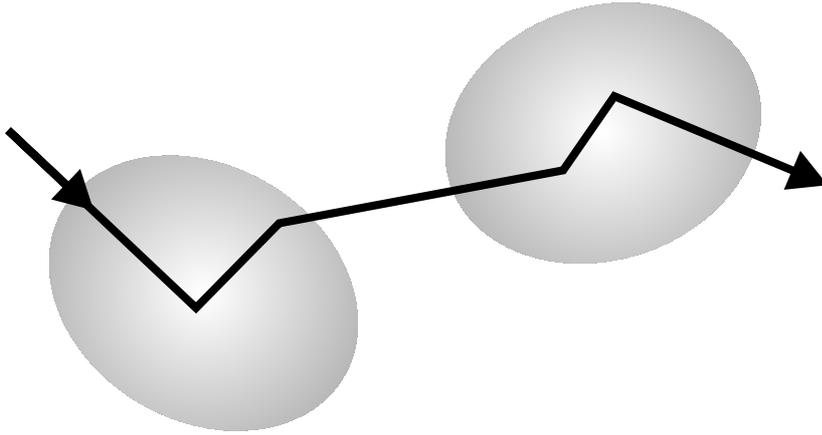


Abb. 2.4: Schematische Tröpfchenbahn durch mehrere Wirbel [12]

beeinflusst. Das tatsächliche Verhalten der Tropfen in turbulenter Umgebung ist demnach zwischen diesen beiden Extrema zu erwarten [6]. In der vorliegenden Arbeit wird die Wechselwirkung zwischen der Gasphase und dem Spray durch einen statistischen Ansatz beschrieben, in dem die momentanen Tropfenbahnen durch die Gasphase turbulenten Schwankungen unterliegen [12]. Hierzu werden die Schwankungen  $\vec{u}''$  nach einem statistischen Zweiphasenmodell (*Stochastic Separated Flow SSF*) aus einer Wahrscheinlichkeitsverteilung ermittelt. In einer Vorstellung von Gosman und Ioannidis [78] wird davon ausgegangen, dass Tröpfchen entlang ihrer Bahn durch die Gasphase mit einzelnen Wirbeln oder Turbulenzballen wechselwirken und bei konstanten Strömungseigenschaften innerhalb eines Turbulenzballens entsprechend der Wirbelintensität abgelenkt werden (Abbildung 2.4). Isotrope Turbulenz vorausgesetzt, kann eine Gaußverteilung für die Schwankungen  $\vec{u}''$  mit der Varianz  $\frac{2}{3}\tilde{k}$  formuliert werden:

$$f_v(|\vec{u}''|^2) = \left(\frac{4}{3}\pi\tilde{k}\right) \exp\left(-\frac{3}{4\tilde{k}}|\vec{u}''|^2\right). \quad (2.146)$$

Über ein Monte-Carlo Verfahren sind daraus die statistischen Schwankungen  $\vec{u}''$  der mittleren Geschwindigkeit zu bestimmen. Mit den Gleichungen (2.141) und (2.142) werden momentane Trajektorien der Tropfen errechnet und aus einer anschließenden Mittelung über eine statistisch signifikante Anzahl von Tropfenbahnen wird das mittlere Verhalten der Tropfen gewonnen [12].

Die mittlere Aufenthaltszeit  $t_A$  eines Partikels in einem Turbulenzwirbel und damit seine Wechselwirkungs- oder Korrelationszeit mit dem Turbulenzwirbel ist begrenzt durch die Lebensdauer  $\tau_W$  eines Wirbels sowie durch die Durchgangszeit  $t_D$ , die ein Partikel zum Durchqueren des Wirbels benötigt [79]:

$$t_A = \min(\tau_W, t_D). \quad (2.147)$$

Da das Ausmaß eines Turbulenzballens  $l_W$  von der Größenordnung des integralen Längenmaßes  $l_I$  (Gleichung (2.57)) ist und nach [80] gegeben ist durch

$$l_W = c_W \frac{\tilde{k}^{\frac{3}{2}}}{\tilde{\varepsilon}} \quad \text{mit } c_W = 0,16432, \quad (2.148)$$

folgt für die Durchgangszeit

$$t_D = \frac{l_W}{|\vec{u} - \vec{v}_d|} = c_W \frac{\tilde{k}^{\frac{3}{2}}}{\tilde{\varepsilon} |\vec{u} - \vec{v}_d|}. \quad (2.149)$$

Die Lebensdauer eines Wirbels ist bestimmt durch die Zeitdauer, die benötigt wird bis seine gesamte Energie in thermische Energie dissipiert ist. Sie berechnet sich zu

$$\tau_W = \frac{\tilde{k}}{\tilde{\varepsilon}}. \quad (2.150)$$

Während der mittleren Korrelationszeit  $t_A$  eines Partikel im Turbulenzwirbel bleibt die Schwankung  $\vec{u}''$  konstant. Sie wird für jeden neuen Wirbel nach der Verteilung  $f_v$  (Gleichung (2.146)) neu ermittelt.

### 2.3.3 Tropfenverdampfung

Auf seiner Bahn durch die Gasphase verändert ein Tropfen seinen Radius durch Verdampfung. Als Verdampfungsgeschwindigkeit wird die Änderung des Tropfenradius pro Zeiteinheit  $\frac{dr_d}{dt}$  bezeichnet. Sie hängt ab von den Eigenschaften des Tropfens, wie etwa seinem Radius oder seinem Siedepunkt, sowie von den Eigenschaften des umgebenden Gases, wie z.B. den Transporteigenschaften, dem Druck oder der Relativgeschwindigkeit des Gases zum Tropfen. Im Folgenden wird von einem von Abramzon und Sirignano entwickelten *Zweifilm*-Modell für die Einzeltropfenverdampfung in einer konvektiven Umgebung ausgegangen [11]. In dieser Filmtheorie wird die Vorstellung benutzt, dass das Tröpfchen von einem Film umgeben ist, der dem Austausch von Masse und Wärme mit der umgebenden Gasphase einen Widerstand entgegensetzt. Das Verhältnis von Stoffübergangs- zu Diffusionsstrom wird von der *Sherwood*-Zahl

$$\text{Sh}_0 = 1 + (1 + \text{Re}_d \text{Sc}_f)^{\frac{1}{3}} f(\text{Re}_d) \quad (2.151)$$

beschrieben. Die *Nusselt*-Zahl

$$\text{Nu}_0 = 1 + (1 + \text{Re}_d \text{Pr}_f)^{\frac{1}{3}} f(\text{Re}_d) \quad (2.152)$$

gibt das Verhältnis von Wärmeübergangs- zu Wärmeleitstrom an. Dabei ist die Funktion der Tröpfchen-Reynolds-Zahl gegeben durch [11]

$$f(\text{Re}_d) = \begin{cases} \text{Re}_d^{0,077} & : \text{Re}_d \geq 1 \\ 1 & : \text{Re}_d \leq 1. \end{cases} \quad (2.153)$$

## 42 2. Thermophysikalische Grundlagen turbulenter, chemisch reaktiver Systeme

Zur Berechnung der Schmidt-  $Sc_f$  und Prandtl-Zahl  $Pr_f$  (Gleichung (2.33)) im Film [11]

$$Pr_f = \mu_f \frac{c_{p,f}}{\lambda_f} \quad (2.154)$$

und

$$Sc_f = \frac{\mu_f}{\rho_f D_{\text{fuel},f}} \quad (2.155)$$

werden die Stoffeigenschaften des Films herangezogen, die mittels der  $\frac{1}{3}$ -Regel (Gleichung (2.145)) bestimmt werden. Der Index "0" in den Gleichungen (2.151) und (2.152) kennzeichnet, dass es sich um ein ruhendes Tröpfchen handelt. Bei Verdampfung in einer konvektiven Umgebung werden die Sherwood- und Nusselt-Zahlen korrigiert zu [81]

$$\widetilde{Sh} = 2 + \frac{Sh_0 - 2}{F_M} \quad (2.156)$$

bzw.

$$\widetilde{Nu} = 2 + \frac{Nu_0 - 2}{F_T}. \quad (2.157)$$

Die hier im Nenner auftauchenden Korrekturfunktionen  $F_M = F(B_M)$  und  $F_T = F(B_T)$  gehen aus der universellen Funktion

$$F(B) = (1 + B)^{0,7} \frac{\ln(1 + B)}{B}, \quad B = B_M, B_T \quad (2.158)$$

hervor [11]. Zur Berechnung von  $F_M$  und  $F_T$  sind die Spalding-Transferzahlen der Masse  $B_M$  und der Wärme  $B_T$  notwendig, die aus den Massenbrüchen des Brennstoffs an der Tropfenoberfläche  $Y_{\text{fuel},s}$  und in entfernter Umgebung  $Y_{\text{fuel},\infty}$  ermittelt werden [11]

$$B_M = \frac{Y_{\text{fuel},s} - Y_{\text{fuel},\infty}}{1 - Y_{\text{fuel},s}} \quad (2.159)$$

bzw.

$$B_T = (1 + B_M)^\Phi - 1, \quad (2.160)$$

wobei der Exponent  $\Phi$  berechnet wird aus

$$\Phi = \frac{c_{p,f} \rho_f D_{\text{fuel},f} \widetilde{Sh}}{\lambda_f \widetilde{Nu}}. \quad (2.161)$$

Mittels der Beziehung von *Clausius-Clapeyron* bestimmt sich der Massenbruch des Brennstoffs an der Tropfenoberfläche zu [11]

$$Y_{\text{fuel},s} = \frac{M_{\text{fuel}}}{M_{\text{fuel}} + \overline{M} \left( \frac{\overline{p}}{p_{\text{fuel}}} - 1 \right)}, \quad (2.162)$$

	$M_{\text{fuel}}$ [kg/kmol]	$L_V$ [J/kg]	$p_{\text{krit}}$ [bar]	$T_{\text{krit}}$ [K]	$T_b$ [K]
Methanol	32,04	$1,185 \cdot 10^6$	81,9	512,6	337,7
Ethanol	46,07	$1,0246 \cdot 10^6$	61,4	513,9	351,4
	$A$ [-]	$B$ [-]	$C$ [-]	$D$ [-]	
Methanol	-8,54796	0,76982	-3,10850	1,54481	
Ethanol	-8,51838	0,34163	-5,73683	8,32581	

Tab. 2.2: Stoffeigenschaften von Methanol und Ethanol [68, 83]

wobei der Dampfdruck  $p_{\text{fuel}}$  des Brennstoffs abhängt vom kritischen Brennstoffdruck  $p_{\text{krit}}$ , der Tropfentemperatur  $T_d$  und einer Tropfenreferenztemperatur

$$T_{d,\text{ref}} = 1 - \frac{T_d}{T_{\text{krit}}}, \quad (2.163)$$

in die ihrerseits wieder die kritische Brennstofftemperatur  $T_{\text{krit}}$  eingeht [82, 83]:

$$p_{\text{fuel}} = \exp\left(\frac{f(T_d)}{1 - T_{d,\text{ref}}}\right) p_{\text{krit}} \quad (2.164)$$

mit der Polynomentwicklung [83]

$$f(T) = AT + BT^{\frac{3}{2}} + CT^3 + DT^6. \quad (2.165)$$

Die benötigten Stoffeigenschaften für Methanol und Ethanol sind in Tabelle 2.2 zusammengefasst. Mit den obigen Beziehungen lässt sich nun über die Masse  $m_d$  eines Tröpfchens

$$m_d = \frac{4}{3}\pi\rho_l r_d^3 \quad (2.166)$$

und seiner Änderung  $\dot{m}_d$ , die gegeben ist durch [11]

$$\dot{m}_d = 2\pi\rho_f D_{\text{fuel},f} r_d \widetilde{\text{Sh}} \ln(1 + B_M), \quad (2.167)$$

die Verdampfungsgeschwindigkeit eines Tropfens bestimmen zu

$$\frac{dr_d}{dt} = -\frac{\dot{m}_d}{4\pi\rho_l r_d^2}. \quad (2.168)$$

### 2.3.4 Tropfenerwärmung

Je nach Eigenschaften der Tröpfchen, wie z.B. Größe oder Wärmeleitfähigkeit, sind unterschiedliche Modelle der Tropfenaufheizung anwendbar [84]. So wird beim *Thin Skin (TS)* Modell davon ausgegangen, dass die Verdampfung an der Tropfenoberfläche sehr viel schneller geschieht, als der Wärmetransport ins Tropfeninnere. Die Temperatur im Tropfenzentrum ändert sich nicht; alle vom Tropfen aufgenommene Energie

steht für die Verdampfung zur Verfügung. Das hierzu gegensätzliche *Uniform Temperature (UT)* oder *Rapid Mixing* Modell macht die Annahme einer unendlich hohen Wärmeleitfähigkeit der Tropfenflüssigkeit, sodass die Temperatur im gesamten Tropfen uniform ist. Dazwischen liegt das realistischere *Conduction Limit (CL)* Modell, in dem ein endlicher Wärmetransport ins Tropfeninnere berücksichtigt wird und die zeitliche und räumliche Verteilung der Tropfentemperatur berechnet wird.

In der vorliegenden Arbeit findet das UT Modell Anwendung, was sich dadurch rechtfertigt, dass nur kleine Tropfen mit hoher Flüchtigkeit, also großer Wärmeleitfähigkeit, betrachtet werden. Die dem Tropfen pro Zeiteinheit zugeführte Wärmemenge teilt sich auf in einen Beitrag zur Verdampfung und zur Aufheizung [11]:

$$\underbrace{\dot{m}_d \frac{c_{p,f}(T_\infty - T_d)}{B_T}}_{\text{zugeführte Wärme pro Zeit}} = \underbrace{\dot{m}_d L_V(T_d)}_{\text{Verdampfung}} + \underbrace{m_d c_{p,l} \frac{dT_d}{dt}}_{\text{Aufheizung}}. \quad (2.169)$$

Die spezifische Wärmekapazität  $c_{p,l}$  der Tröpfchenflüssigkeit ist temperaturabhängig. Ihre Werte werden nach einer Tabelle von Misenard [82] für Temperaturen im Intervall  $T \in (248 \text{ K}, 323 \text{ K})$  interpoliert. Die spezifische Verdampfungswärme  $L_V$  ist eine Funktion der Tropfentemperatur  $T_d$  und ist definiert als Differenz der spezifischen Enthalpie der Gasphase  $h(T_d)$  und der flüssigen Phase  $h_l(T_d)$ :

$$L_V(T_d) = h(T_d) - h_l(T_d). \quad (2.170)$$

Weiter bezeichnen in Gleichung (2.169)  $T_\infty$  die weit entfernte Gastemperatur und  $c_{p,f}$  die Film-Wärmekapazität. Nach einem Verfahren von Riedel in Reid *et al.* [83] wird zur Berechnung von  $L_V(T_d)$  zunächst die molare Verdampfungsenthalpie  $L_{V,m}$  am Siedepunkt  $T_b$  in Einheiten  $\frac{\text{J}}{\text{mol}}$  ermittelt [83]:

$$L_{V,m}(T_b) = \frac{1,093 R T_d \ln(p_{\text{krit}}[\text{bar}] - 1,013)}{0,930 - T_d/T_{\text{krit}}}. \quad (2.171)$$

Über die empirische Beziehung [82]

$$L_{V,m}(T_2) = \left( \frac{1 - T_2/T_{\text{krit}}}{1 - T_1/T_{\text{krit}}} \right)^{\kappa_d} L_{V,m}(T_1) \quad \text{mit} \quad (2.172)$$

$$\kappa_d = \left( 0,00264 \frac{L_{V,m}(T_b)}{R T_b} + 0,8794 \right)^{10} \quad (2.173)$$

lässt sich dann aus gegebener molarer Verdampfungsenthalpie bei Temperatur  $T_1$  die molare Verdampfungsenthalpie bei Temperatur  $T_2$  berechnen. Somit ist  $L_{V,m}(T_d)$  bei beliebiger Tropfentemperatur  $T_d$  aus Gleichung (2.171) kombiniert mit (2.172) und dem Startwert  $T_1 = T_b$  bestimmbar. Die molare Verdampfungsenthalpie wird über die Molmasse  $M_{\text{fuel}}$  umgerechnet in die spezifische Verdampfungsenthalpie  $L_V = L_{V,m}/M_{\text{fuel}}$ .

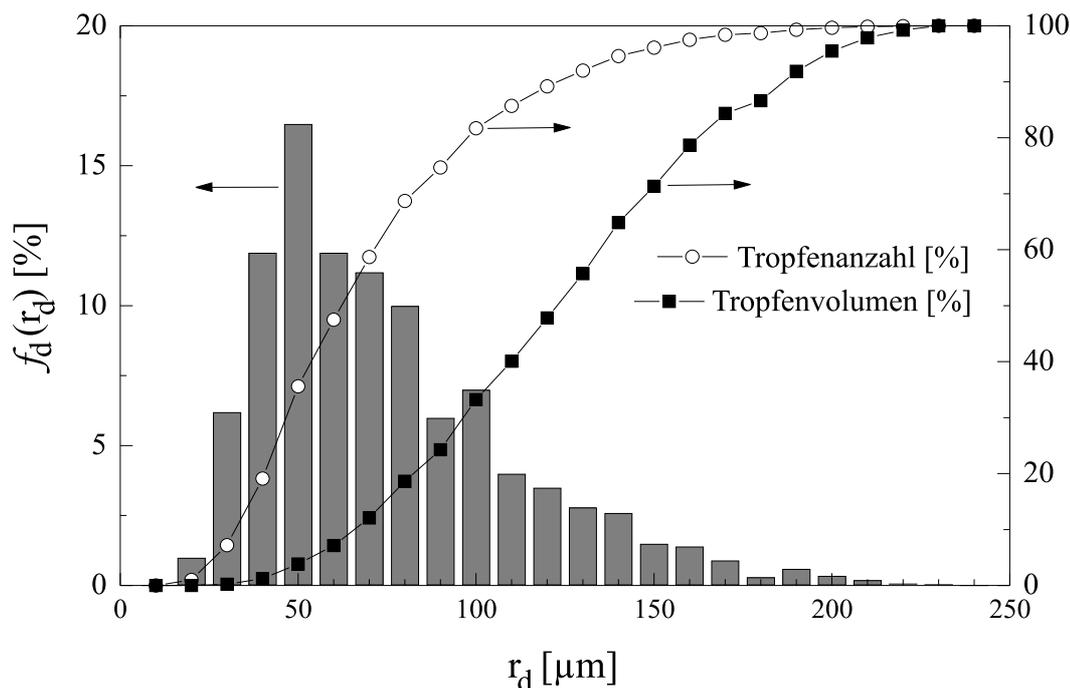


Abb. 2.5: Verteilung der Tropfengrößen für ein Wasserspray in Luft [85]

Aus der so gewonnenen spezifischen Verdampfungswärme  $L_V$  und der mittels Gleichung (2.39) bestimmten spezifischen Enthalpie der Gasphase  $h(T_d)$  folgt aus (2.170) die spezifische Enthalpie der Tröpfchenflüssigkeit  $h_l(T_d)$ .

### 2.3.5 Statistische Beschreibung eines Sprays

Bei der folgenden statistischen Beschreibung eines Sprays wird von sphärischen Tropfen ausgegangen. Die Verteilung der eingedüsten Tropfen und ihrer Eigenschaften hängt im Wesentlichen von den Einspritzbedingungen und der Düsencharakteristik ab. In Abbildung 2.5 ist eine typische Verteilung der Tröpfchenanzahl und des Tröpfchenvolumens über dem Radius für in Luft eingedüstes Wasser gezeigt [12, 68]. Die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion  $f_d(r_d)$  ist dort als diskrete Stufenfunktion eingezeichnet. Für sie gilt die Normierungsbedingung

$$\sum_i f_d(r_{d,i}) = 1 \quad (2.174)$$

für diskrete Tropfenradien  $r_{d,i}$  bzw.

$$\int_0^{\infty} f_d(r_d) dr_d = 1 \quad (2.175)$$

bei kontinuierlichen Tropfenradien  $r_d$ . Mit ihrer Hilfe lassen sich die Momente der Tropfenverteilung definieren zu [86]

$$(r_d)_{jk}^{j-k} = \frac{\int_0^\infty r_d^j f_d(r_d) dr_d}{\int_0^\infty r_d^k f_d(r_d) dr_d}. \quad (2.176)$$

Der mittlere Radius  $\bar{r}_d$  der Tropfenverteilung ist demnach für  $j = 1$  und  $k = 0$  gegeben durch

$$\bar{r}_d = (r_d)_{10}^1. \quad (2.177)$$

Die Momente  $4\pi(r_d)_{20}^2$  und  $\frac{4\pi}{3}(r_d)_{30}^3$  geben die mittlere Tröpfchenoberfläche bzw. das mittlere Tröpfchenvolumen an. Als wichtige Kenngröße eines Sprays hat sich der *Sauter*-Radius  $r_S \equiv (r_d)_{32}$  erwiesen. Ein Tropfen mit diesem Radius hat das gleiche Verhältnis von Volumen zu Oberfläche wie das gesamte Spray. Er wird häufig verwendet, um ein polydisperses Spray durch ein äquivalentes monodisperses Spray zu beschreiben und kann experimentell durch laserspektroskopische Methoden aus dem zur Tropfenoberfläche proportionalen Signal der Mie-Streuung und dem zum Tropfenvolumen proportionalen Signal der laserinduzierten Fluoreszenz bestimmt werden [23]. Das in Abbildung 2.5 dargestellte Spray hat einen mittleren Radius von etwa  $(r_d)_{10} = 37 \mu\text{m}$  und einen Sauterradius von etwa  $(r_d)_{32} = 55 \mu\text{m}$ .

### 2.3.6 Sprayquellterme in den Gasphasengleichungen

Da die Tropfenzahl in einem Spray sehr groß ist, ist es nicht praktikabel, die Bahn jedes einzelnen Tropfens zu berechnen. Statt dessen werden die Tropfen in Pakete  $p$  gleicher Eigenschaften (Temperatur, Größe, Geschwindigkeit) zusammengefasst, sodass alle Pakete zusammen die Sprayeigenschaften repräsentieren [12]. Die Anzahl der Tröpfchen  $n_p^{(k)}$  im Paket  $k$  hängt von den Einlassbedingungen ab und bleibt konstant. Die Masse eines Tropfens im Paket  $k$  wird mit  $m_p^{(k)}$  bezeichnet, seine Geschwindigkeit mit  $\vec{v}_p^{(k)}$  und seine gesamte spezifische Enthalpie mit  $h_p^{(k)}$ . Auf der Bahn eines Tropfenpakets  $k$  durch das Berechnungsgebiet ergibt sich nach dem *PSI-Cell* Modell (Particle-Source-In Cell) [9] der Austausch der Masse ( $\phi = 1$ ,  $L_\phi = L_v$  und  $L_v = L_{v,\text{fuel}}$  bei einem Einkomponentenspray), des Impulses ( $\phi = \vec{v}_p^{(k)}$ ,  $L_\phi = \vec{L}_m$ ) und der Enthalpie ( $\phi = h_p^{(k)}$ ,  $L_\phi = L_h$ ) mit der Gasphase in jeder durchlaufenen Gitterzelle aus der Differenz der physikalischen Größen beim Eintritt in die Zelle (Index: "ein") und beim Austritt aus der Zelle (Index: "aus") [12]:

$$\overline{L_\phi^{(k)}} = n_p^{(k)} \left[ \left( m_p^{(k)} \phi \right)_{\text{ein}} - \left( m_p^{(k)} \phi \right)_{\text{aus}} \right], \quad \phi \in \left\{ 1, \vec{v}_p^{(k)}, h_p^{(k)} \right\}. \quad (2.178)$$

Die Summation über alle die Gitterzelle durchquerenden Pakete liefert dann die Gesamtbilanz der ausgetauschten physikalischen Größe [12]:

$$\overline{L_\phi} = \sum_k \overline{L_\phi^{(k)}} = \sum_k n_p^{(k)} \left[ \left( m_p^{(k)} \phi \right)_{\text{ein}} - \left( m_p^{(k)} \phi \right)_{\text{aus}} \right]. \quad (2.179)$$

Unter Vernachlässigung des Einflusses durch das Gravitationspotential, der wegen der kleinen Tröpfchenmassen nur sehr gering ist, setzt sich die gesamte spezifische Enthalpie eines Tropfens  $h_p^{(k)}$  zusammen aus der spezifischen Enthalpie der Flüssigkeit  $h_l$ , seiner kinetischen Energie und einem Beitrag durch die Reibung mit der Gasphase [12]:

$$h_p^{(k)} = h_l + \frac{\overline{v_p^{(k)}}^2}{2} + \frac{\left( \overline{v_p^{(k)}} - \tilde{u} \right)^2}{2} - \overline{v_p^{(k)}} \left( \tilde{u} + \tilde{u}'' \right). \quad (2.180)$$

Außer den Quelltermen  $\overline{L_v}$ ,  $\overline{L_m}$  und  $\overline{L_h}$  in den Erhaltungsgleichungen (2.81) bis (2.86) tauchen in den gemittelten Transportgleichungen der Korrelationen (2.100) und (2.123) noch die Sprayquellen

$$\overline{L_{\widetilde{u_i'' u_j''}}} = - \overline{\left( u_i'' u_j'' + \widetilde{u_i'' u_j''} + \widetilde{u_j'' u_i''} \right)} L_v + \overline{u_j'' L_{m,i}} + \overline{u_i'' L_{m,j}} \quad (2.181)$$

und

$$\overline{L_{\widetilde{\phi'' u_i''}}} = - \overline{\left( u_i'' \phi'' + \widetilde{u_i'' \phi''} + \widetilde{\phi'' u_i''} \right)} L_v + \overline{\phi'' L_{m,i}} + \overline{u_i'' L_\phi} \quad (2.182)$$

auf, die Terme der Form  $\overline{u_i'' L_\phi}$ ,  $\overline{\phi'' L_{m,i}}$  und  $\overline{u_i'' u_j'' L_v}$  enthalten. In ihnen kommt die Wechselwirkung der turbulenten Schwankungen mit dem Spray in den Transportgleichungen der Korrelationen zum Ausdruck. Unter Vernachlässigung von Termen, die Korrelationen dritter Ordnung enthalten, kann der letztgenannte Ausdruck umgeschrieben werden in

$$\overline{u_i'' u_j'' L_v} = \overline{u_i'' u_j'' \rho \left( \frac{L_v}{\rho} \right)} \approx \overline{u_i'' u_j''} \overline{L_v} \quad (2.183)$$

und ist damit im Rahmen des RS-Modells geschlossen. Bei der Beschreibung der Ausdrücke  $\overline{u_i'' L_\phi}$  wird wieder die Vorstellung herangezogen, dass die Tropfenpakete auf ihrer Bahn durch einen Turbulenzballen entsprechend der Wirbelintensität von der Turbulenz beeinflusst werden (vgl. Kapitel 2.3.2) [12]. Dazu wird für jedes Tropfenpaket  $k$ , das die betrachtete Gitterzelle durchquert, eine Gasgeschwindigkeitsschwankung  $\tilde{u}''^{(k)}$  nach der in Gleichung (2.146) angegebenen Gaussverteilung über eine Monte-Carlo Methode ermittelt. Der Quelltermbeitrag eines Pakets ergibt sich somit zu  $u_i''^{(k)} n_p^{(k)} \left[ \left( m_p^{(k)} \phi \right)_{\text{ein}} - \left( m_p^{(k)} \phi \right)_{\text{aus}} \right]$  und die Summe über alle Pakete liefert den Gesamtbeitrag

$$\overline{u_i'' L_\phi} = \sum_k u_i''^{(k)} n_p^{(k)} \left[ \left( m_p^{(k)} \phi \right)_{\text{ein}} - \left( m_p^{(k)} \phi \right)_{\text{aus}} \right]. \quad (2.184)$$

Als Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion  $\tilde{P}_{\xi_C}(\xi_C)$  des Mischungsbruchs  $\xi_C$  wird in dieser Arbeit nach der Methode der *angenommenen pdf* [2, 16] eine  $\beta$ -Funktion

$$\tilde{P}_{\xi_C}(\xi_C) = \xi_C^{\alpha-1} (1 - \xi_C)^{\beta-1} \frac{\Gamma(\alpha + \beta)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)} \quad (2.185)$$

mit der Gamma-Funktion  $\Gamma$  und den Parametern

$$\alpha = \tilde{\xi}_C \gamma \quad \text{und} \quad (2.186)$$

$$\beta = (1 - \tilde{\xi}_C) \gamma \quad , \quad \text{wobei} \quad (2.187)$$

$$\gamma = \frac{\tilde{\xi}_C(1 - \tilde{\xi}_C)}{\xi_C''^2} - 1 \geq 0, \quad (2.188)$$

angenommen [12]. Aus der pdf  $\tilde{P}_{\xi_C}(\xi_C)$  des Mischungsbruchs  $\xi_C$  folgt die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion seiner Schwankung zu

$$\tilde{P}_{\xi_C''}(\xi_C'') = \tilde{P}_{\xi_C}(\xi_C - \tilde{\xi}_C), \quad (2.189)$$

über die durch eine Monte-Carlo Methode für jedes die Gitterzelle durchquerende Tropfenpaket  $k$  eine Massenbruchschwankung  $\xi_C''^{(k)}$  gewonnen wird. Die Summe über alle Pakete liefert den Gesamtbeitrag des Sprayquellterms:

$$\overline{\xi_C'' L_\phi} = \sum_k \xi_C''^{(k)} n_p^{(k)} \left[ \left( m_p^{(k)} \phi \right)_{\text{ein}} - \left( m_p^{(k)} \phi \right)_{\text{aus}} \right]. \quad (2.190)$$

## 2.4 Modellierung der chemischen Reaktionen

Nach der Beschreibung der turbulenten Gasphase in Kapitel 2.2 sowie der flüssigen Phase in 2.3 beschäftigt sich dieses Kapitel mit der Modellierung der chemischen Reaktionen. Es wird im Folgenden das *Flamelet*-Modell (Flammenschichten-Modell) für Spraydiffusionsflammen und seine Ankopplung an die zu lösenden Gasphasengleichungen beschrieben [12].

Zur Bestimmung der Gemischzusammensetzung und der Schadstoffbildung in chemisch reaktiven Strömungen ist ein Modell der chemischen Prozesse und deren Wechselwirkungen mit der turbulenten Strömung notwendig. Solange die Zeitskalen der chemischen Reaktionen so klein sind, dass die Reaktionszone dünn ist verglichen mit der Kolmogorov-Länge  $l_K$  (Gleichung (2.55)), kann man sich eine turbulente Diffusionsflamme als Ensemble gestreckter laminarer Flämmchen (*laminar flamelets*) vorstellen, die in das quasi-laminare Strömungsfeld eines Wirbels eingebettet sind [2] (Abbildung 2.6). Zentrale Größen des laminaren *Flamelet*-Modells sind der in Abschnitt 2.1.2 definierte Mischungsbruch  $\xi_C$  und die skalare Dissipationsgeschwindigkeit  $\chi$ , die in Kapitel 2.4.1 eingeführt wird. Aus dem gemittelten Mischungsbruch  $\tilde{\xi}_C$ , seiner Varianz  $\widetilde{\xi_C''^2}$  und

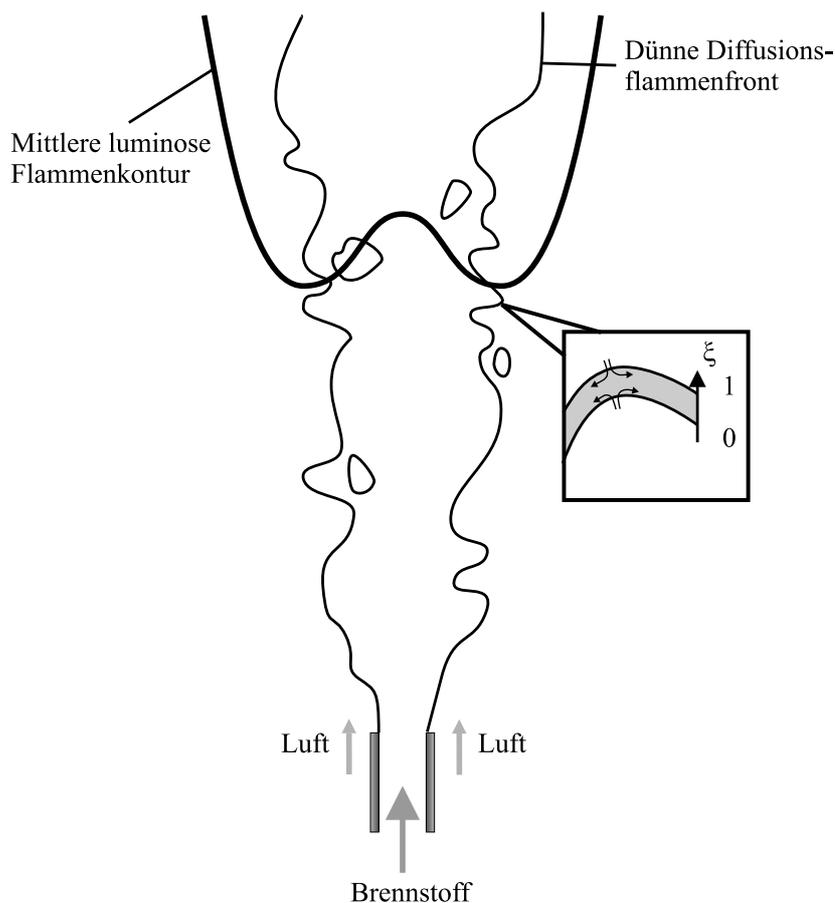


Abb. 2.6: Turbulente Diffusionsflamme und Flammenschichten (*Flamelet*) [12]

der gemittelten skalaren Dissipationsgeschwindigkeit  $\tilde{\chi}$  im turbulenten Strömungsfeld werden angenommene Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen für die statistischen Verteilungen der ungemittelten Größen  $\xi$  ( $\beta$ -Funktion) und  $\chi$  (logarithmische Normalverteilung) gewonnen. Über diese werden aus den laminaren Flamelets die Profile der reaktiven Skalare und der Temperatur in der turbulenten Flamme errechnet (Kapitel 2.4.2).

Ist die Turbulenz so stark, dass die Kolmogorov-Wirbel kleiner werden als die Dicke der Reaktionszone, dann können diese Wirbel die Reaktionszone durchdringen, die Flammenstruktur zerstören und bis zur Verlöschung führen. Die Klassifizierung der turbulenten Flamme und Untersuchung der Anwendbarkeit des Flamelet-Modells geschieht in Abschnitt 2.4.3.

Auf die Struktur laminarer Flamelets von Gasdiffusionsflammen und die Unterschiede zu Spray-Flamelets wird in Kapitel 2.4.4 eingegangen.

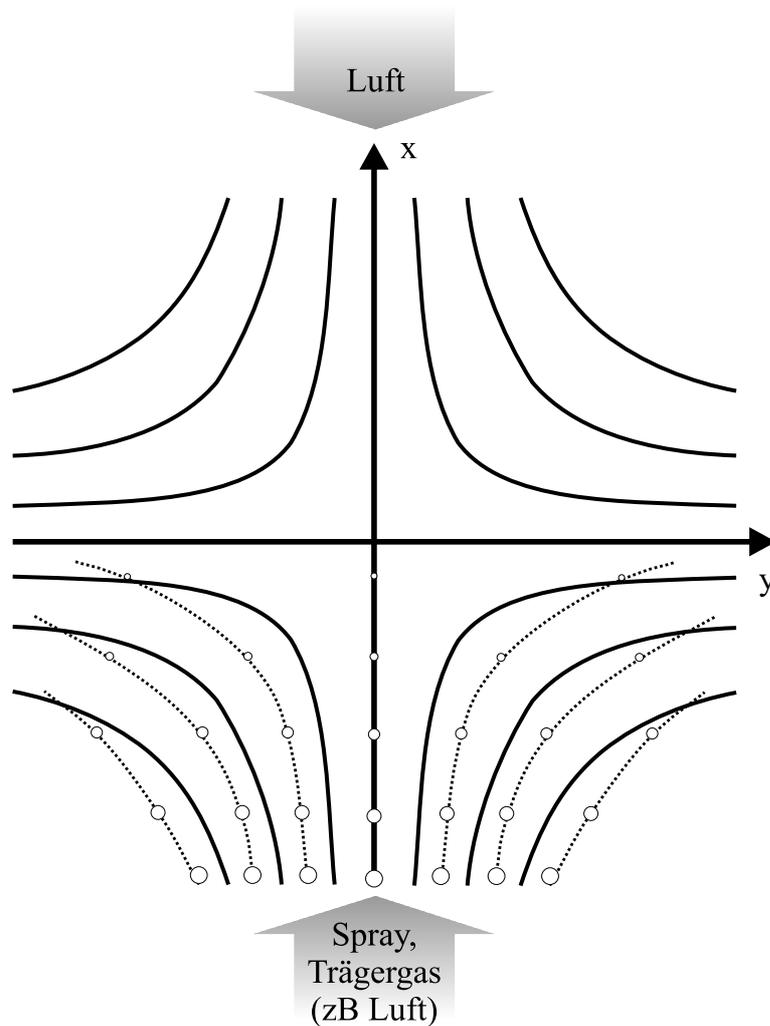


Abb. 2.7: Schematische Darstellung einer laminaren Gegenstromdiffusionsflamme [68]

### 2.4.1 Skalare Dissipationsgeschwindigkeit

Die Struktur laminarer Diffusionsflammen in der Gegenstromkonfiguration (Abbildung 2.7) kann durch zwei Parameter charakterisiert werden: Den Mischungsbruch  $\xi_C$  und die skalare Dissipationsgeschwindigkeit  $\chi$  [68]. Die Hauptreaktionszone und damit das Temperaturmaximum befinden sich im Bereich, wo Brennstoff und Sauerstoff in stöchiometrischer Mischung vorliegen ( $\xi_C = \xi_{C,st}$ ). Durch Änderung der Zuströmgeschwindigkeit von Luft oder Brennstoff kann die Streckung der Gegenstromdiffusionsflamme verändert werden. Eine erhöhte Streckung der Flamme führt zur Verringerung der Temperatur bis hin zur Verlöschung der Flamme. Zur Beschreibung der Flammenstreckung dient die skalare Dissipationsgeschwindigkeit  $\chi$ . Sie ist definiert durch [2]

$$\chi := 2D (\text{grad } \xi_C)^2 . \quad (2.191)$$

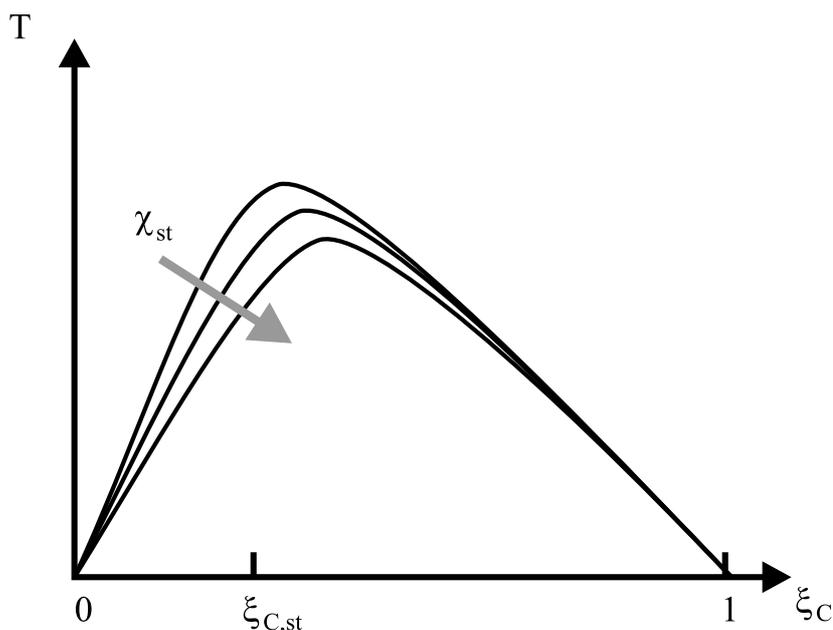


Abb. 2.8: Schematischer Temperaturverlauf von Flamelets über dem Mischungsbruch  $\xi_C$  [87]

Am Punkt der stöchiometrischen Mischung  $\xi_{C,st}$  ist ihr Wert  $\chi_{st} = \chi(\xi_C)|_{\xi_C=\xi_{C,st}}$ . Durch Erhöhung der Flammenstreckung erhöht sich auch die skalare Dissipationsgeschwindigkeit bei Stöchiometrie  $\chi_{st}$ , und der Temperaturverlauf  $T(\xi_C)$  über dem Mischungsbruch ändert sich (Abbildung 2.8): Eine größere Streckung führt zur Verringerung der Temperatur und zur Verschiebung ihres Maximums in Richtung des fetteren Bereiches (zu größeren  $\xi_C$ -Werten). Mit der physikalischen Einheit  $\frac{1}{s}$  kann  $\chi$  als inverse charakteristische Diffusionszeit interpretiert werden [2]. Große Dissipationsgeschwindigkeiten entsprechen kurzen Diffusionszeiten und damit einer kurzen Aufenthaltsdauer der Spezies in der Reaktionszone. Ist die Aufenthaltszeit so kurz, dass keine chemischen Reaktionen mehr möglich sind und die Flamme verlöscht, so wird die korrespondierende skalare Dissipationsgeschwindigkeit mit  $\chi_q$  bezeichnet (*quenching*).

### 2.4.2 Kopplung der laminaren Flamelets an das turbulente Strömungsfeld

Durch Lösen der Erhaltungsgleichungen des gemittelten Mischungsbruchs  $\tilde{\xi}_C$  und seiner Varianz  $\tilde{\xi}_C''^2$  werden ihre Werte im turbulenten Strömungsfeld bestimmt. Aus

$$\bar{\rho}\tilde{\chi} = \overline{2\rho D(\text{grad } \xi_C)^2} \quad (2.192)$$

oder der empirischen Beziehung

$$\tilde{\chi} = C_\chi \frac{\tilde{\varepsilon}}{k} \tilde{\xi}_C''^2 \quad (2.193)$$

erhält man die skalare Dissipationsgeschwindigkeit an jedem Ort des Strömungsfeldes. Für die empirische Konstante  $C_\chi$  schlägt Peters [2] einen Wert von  $C_\chi = 2$  vor. Nach der Theorie laminarer Flamelets ist die Struktur einer laminaren Gasdiffusionsflamme durch die beiden Variablen  $\xi_C$  und  $\chi_{st}$  bestimmt. Im turbulenten Feld sind diese beiden Größen statistisch verteilt mit der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion  $\tilde{P}(\xi_C, \chi_{st})$ . Hierbei variiert  $\tilde{P}$  mit dem Ort  $\vec{x}$  sowie der Zeit  $t$  und hängt ab von gemittelten Größen des turbulenten Strömungsfeldes:  $\tilde{\xi}_C(\vec{x}, t)$ ,  $\tilde{\xi}_C''^2(\vec{x}, t)$  und  $\tilde{\chi}(\vec{x}, t)$ .

$$\tilde{P}(\xi_C, \chi_{st}) = \tilde{P}_{\tilde{\xi}_C(\vec{x}, t), \tilde{\xi}_C''^2(\vec{x}, t), \tilde{\chi}(\vec{x}, t)}(\xi_C, \chi_{st}). \quad (2.194)$$

Der Übersichtlichkeit halber werden die Indizes im Folgenden weggelassen.

Die Favre–Mittelwerte der Speziesmassenbrüche  $\tilde{Y}_\alpha$  und der Temperatur  $\tilde{T}$  in der turbulenten Flamme errechnen sich mit Hilfe der pdf  $\tilde{P}$  aus den Massenbrüchen  $Y_{\alpha, \text{lam}}$  bzw. der Temperatur  $T_{\text{lam}}$  der laminaren Flamelets (Index: “lam”) zu

$$\tilde{Y}_\alpha(\tilde{\xi}_C, \tilde{\chi}) = \int_0^\infty \int_0^1 Y_{\alpha, \text{lam}} \tilde{P}(\xi_C, \chi_{st}) d\xi_C d\chi_{st} \quad \text{und} \quad (2.195)$$

$$\tilde{T}(\tilde{\xi}_C, \tilde{\chi}) = \int_0^\infty \int_0^1 T_{\text{lam}} \tilde{P}(\xi_C, \chi_{st}) d\xi_C d\chi_{st}. \quad (2.196)$$

Wird vereinfachend statistische Unabhängigkeit der Variablen von  $\tilde{P}$  angenommen [12], so lässt sich die gebundene Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion  $\tilde{P}(\xi_C, \chi_{st})$  als Produkt eindimensionaler Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen schreiben [49]:

$$\tilde{P}(\xi_C, \chi_{st}) = \tilde{P}_{\xi_C}(\xi_C) \tilde{P}_\chi(\chi_{st}). \quad (2.197)$$

Für den Mischungsbruch wird üblicherweise die schon in Abschnitt 2.3.6, Gleichung (2.185) eingeführte  $\beta$ –Funktion angenommen [2, 12, 16]

$$\tilde{P}_{\xi_C}(\xi_C) = \xi_C^{\alpha-1} (1 - \xi_C)^{\beta-1} \frac{\Gamma(\alpha + \beta)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)}. \quad (2.198)$$

Als Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion der skalaren Dissipationsgeschwindigkeit dient die logarithmische Normalverteilung [17–19]

$$\tilde{P}_\chi(\chi_{st}) = \left( \chi_{st} \sigma_{\log} \sqrt{2\pi} \right)^{-1} \exp \left( - \frac{[\ln \chi_{st} - \mu_{\log}]^2}{2\sigma_{\log}^2} \right), \quad (2.199)$$

---

<sup>2</sup> In Untersuchungen zur Annahme der statistischen Unabhängigkeit dieser Variablen wird in [88] eine schwache statistische Abhängigkeit zwischen  $\xi_C$  und  $\chi_{st}$  bei moderaten Reynolds–Zahlen gefunden und nach [88, 89] ist die Annahme für einen turbulenten Methanstrahl für Düsenentfernungen  $x > 20d$  ( $d$ : Düsendurchmesser) zu rechtfertigen.

wobei  $\mu_{\log}$  durch den Zusammenhang

$$\tilde{\chi} = \exp\left(\mu_{\log} + \frac{\sigma_{\log}^2}{2}\right) \quad \text{bzw.} \quad (2.200)$$

$$\mu_{\log} = \ln \tilde{\chi} - \frac{\sigma_{\log}^2}{2} \quad (2.201)$$

gegeben ist, und die Varianz  $\sigma_{\log}^2$  der Verteilung nach [2, 17, 90] den Wert  $\sigma_{\log}^2 = 2$  hat. Aus dieser logarithmischen Normalverteilung lässt sich die Wahrscheinlichkeit  $p_b$  eines brennenden Flamelets (d.h.  $\chi_{\text{st}} \leq \chi_q$ ) berechnen zu [2]

$$p_b = \int_0^{\chi_q} \tilde{F}_\chi(\chi_{\text{st}}) d\chi_{\text{st}} = \frac{1}{2} \left\{ 1 + \operatorname{erf} \left( \frac{[\ln \chi_q - \mu_{\log}]}{\sqrt{2\sigma_{\log}^2}} \right) \right\}, \quad (2.202)$$

wobei die Gaußsche Fehlerfunktion definiert ist als

$$\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt. \quad (2.203)$$

Mit  $(1 - p_b)$  ist die Wahrscheinlichkeit einer verlöschten Flamme ( $\chi_{\text{st}} > \chi_q$ ) bezeichnet. Somit kann nun über [2, 12]

$$\tilde{\phi} = p_b \phi_{b,\text{lam}} + (1 - p_b) \phi_{q,\text{lam}} \quad (2.204)$$

der Favre gemittelte Wert des Skalars  $\tilde{\phi}$  im turbulenten Strömungsfeld aus den Werten des Skalars bei brennendem Flamelet ( $\phi_{b,\text{lam}}$ , d.h.  $\chi_{\text{st}} \leq \chi_q$ ) und bei verlöschtem Flamelet ( $\phi_{q,\text{lam}}$ , d.h.  $\chi_{\text{st}} > \chi_q$ ) bestimmt werden. Die Werte  $\phi_{q,\text{lam}}$  stammen hierbei aus einer Flamelet-Bibliothek, die lediglich die Vermischung der beiden eintretenden Ströme enthält, jedoch keine chemischen Reaktionen.

### 2.4.3 Klassifizierung turbulenter Flammen im Peters–Diagramm

Die Anwendung des Flamelet-Modells ist dann gerechtfertigt, wenn man sich die turbulente Flamme aus vielen laminaren Flämmchen zusammengesetzt denken kann und die Flammenstruktur nicht wegen der zu hohen Intensität der Turbulenz durch die kleinsten Wirbel aufgerissen wird.

Bei der nicht vorgemischten Verbrennung in Diffusionsflammen ist die Verbrennung bestimmt durch die Geschwindigkeit, mit der sich die Reaktanden mischen. Im Unterschied zur vorgemischten Verbrennung gibt es keine vom Strömungsfeld unabhängige charakteristische Längenskala im physikalischen Raum zur Beschreibung der Reaktionszonenbreite [13]. Jedoch ist die Breite der Reaktionszone  $\sigma_R$  gemessen im Mischungsbruchraum unabhängig vom Strömungsfeld. Sie kann bestimmt werden aus dem

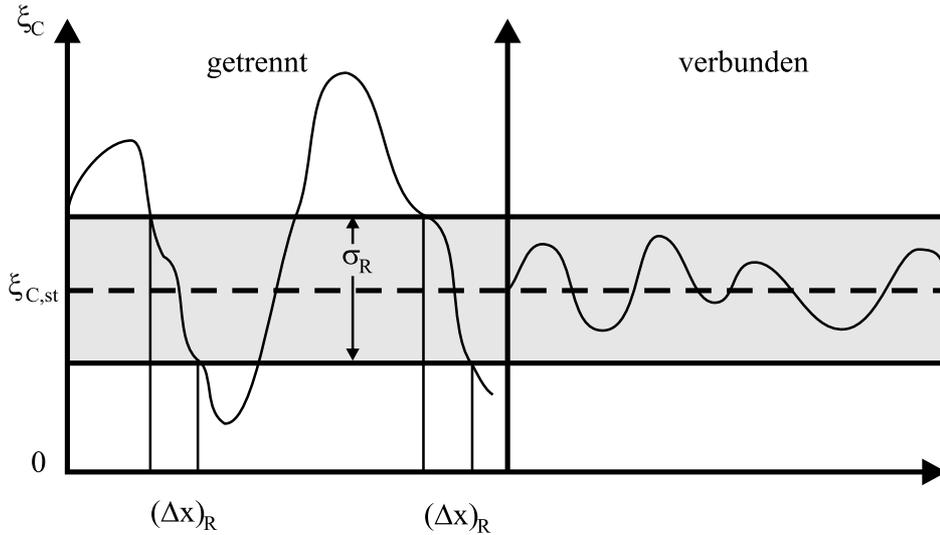


Abb. 2.9: Mischungsbruchverlauf über einer Ortskoordinate. Links: Getrennte Reaktionszonen ( $\sqrt{\xi_{C,st}''^2} > \sigma_R$ ). Rechts: Verbundene Reaktionszonen ( $\sqrt{\xi_{C,st}''^2} < \sigma_R$ ) [13]

Wärmefreisetzungsprofil der Reaktion. Wird für dieses Profil eine Gaußkurve angenommen, so liefert die Standardabweichung der Gaußverteilung die Reaktionszonenbreite  $\sigma_R$ . Die Breite der Reaktionszone im physikalischen Raum  $(\Delta x)_R$  hängt über den Mischungsbruchgradient im turbulenten Strömungsfeld mit  $\sigma_R$  durch die Beziehung

$$(\Delta x)_R = \frac{\sigma_R}{\left(\frac{\partial \xi_C}{\partial x}\right)_{st}} = \sigma_R \sqrt{\frac{2D}{\chi_{st}}} \quad (2.205)$$

zusammen. In Abbildung 2.9 ist der Mischungsbruch über einer Ortskoordinate für zwei unterschiedliche Bereiche aufgetragen. Ist bei einem Mischungsbruchverlauf um den Mittelwert  $\tilde{\xi}_C = \xi_{C,st}$  die Schwankung  $\sqrt{\xi_{C,st}''^2}$  größer als  $\sigma_R$ , wie links dargestellt, so kommt es zu getrennten Reaktionszonen. Im Falle  $\sqrt{\xi_{C,st}''^2} < \sigma_R$  bleiben die Reaktionszonen verbunden.

Die chemische Zeitskala  $\tau_c$  bei Verlöschung charakterisiert die Aufenthaltsdauer der Spezies in der Reaktionszone bei einer Streckung nahe der Verlöschungsgrenze,  $\chi \approx \chi_q$ . Sie ist definiert durch [13]

$$\tau_c = \frac{\xi_{C,st}^2 (1 - \xi_{C,st})^2}{\chi_q} \quad (2.206)$$

Die Karlowitz-Zahl  $Ka$  mißt  $\tau_c$  in Einheiten der Kolmogorov-Zeitskala  $\tau_K$  (Gleichung (2.56))

$$Ka = \frac{\tau_c}{\tau_K} \quad (2.207)$$

und gibt ein Maß für die Flammenstreckung an. Bei Werten der Karlowitz-Zahl von  $Ka > 1$  durchdringen turbulente Störungen die Flammenstruktur und zerstören sie,

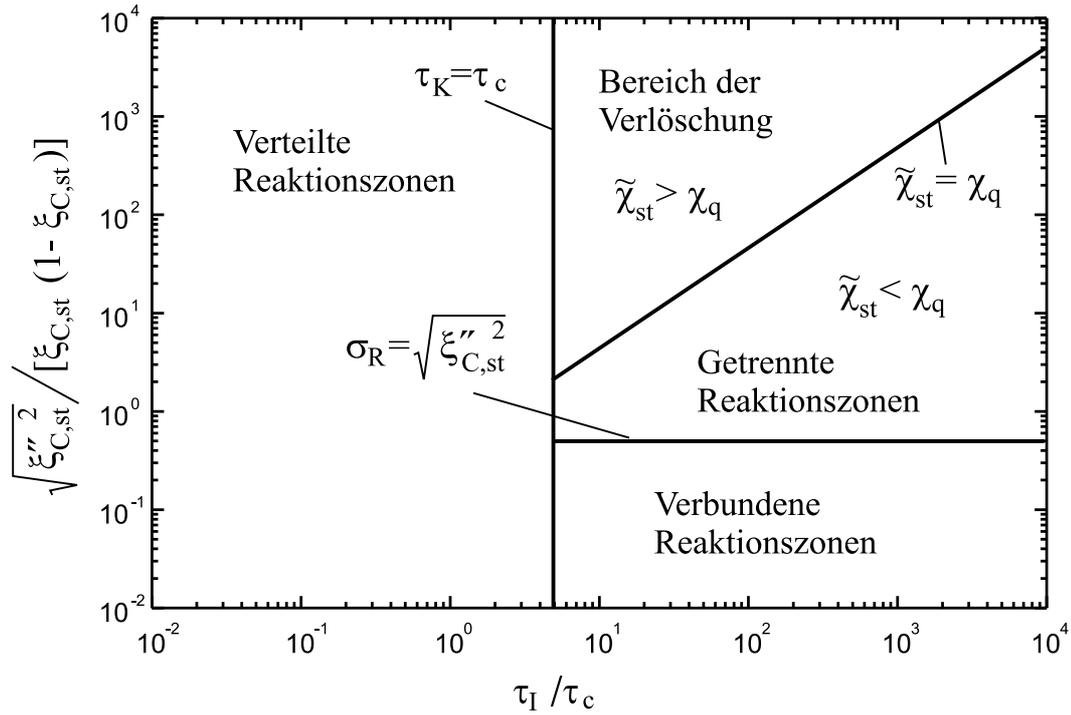


Abb. 2.10: Peters–Diagramm: Verschiedene Bereiche einer turbulenten Diffusionsflamme [13]

bevor chemische Reaktionen einsetzen; es bilden sich verteilte Reaktionszonen aus. Bleibt  $Ka < 1$ , so ist die chemische Reaktionszeit der Spezies bei Verlöschung kürzer als die durch Turbulenz verursachten Störungen und es können sich Flamelets ausbilden.

Im Peters–Diagramm (Abbildung 2.10), anhand dessen eine turbulente Diffusionsflamme in verschiedene Bereiche eingeteilt werden kann, ist die mittlere Mischungbruchschwankung bei Stöchiometrie  $\sqrt{\xi''^2}$  normiert durch  $\xi_{C,st}(1 - \xi_{C,st})$  über dem Verhältnis  $\frac{\tau_I}{\tau_c}$  aufgetragen. Nach Gleichung (2.59) hängt die integrale Zeitskala  $\tau_I$  über

$$\tau_I = \tau_K \sqrt{\text{Re}_t} \quad (2.208)$$

mit  $\tau_K$  zusammen. Die in Abbildung 2.10 durch  $\tau_K = \tau_c$  (d.h.  $Ka = 1$ ) gegebene Vertikale trifft somit bei  $\tau_I/\tau_K = \sqrt{\text{Re}_t}$  auf die  $x$ -Achse. Sie trennt die Bereiche verteilter ( $\frac{\tau_I}{\tau_c} < \sqrt{\text{Re}_t}$ ) und verbundener ( $\frac{\tau_I}{\tau_c} > \sqrt{\text{Re}_t}$ ) Reaktionszonen. Aus den Gleichungen (2.193) und (2.206) folgt am Ort der Stöchiometrie die Beziehung

$$\frac{\tilde{\chi}_{st}}{\chi_q} = \frac{2}{3} C_\chi \frac{\tau_c}{\tau_I} \frac{\xi''^2}{\xi_{C,st}^2 (1 - \xi_{C,st})^2}. \quad (2.209)$$

Wird die empirische Konstante  $C_\chi = 3/2$  gewählt [13], so erhält man im Peters–Diagramm für  $\tilde{\chi}_{st} = \chi_q$  eine Gerade der Steigung 1/2. Oberhalb dieser Geraden ( $\tilde{\chi}_{st} > \chi_q$ ) und im Bereich  $\tau_K > \tau_c$  verlöschen die Flämmchen wegen zu großer Mischungs-

bruchgradienten. Im physikalischen Raum wird die Reaktionszone so dünn, dass diffusive Wärmeverluste das Flamelet zum Verlöschen bringen [13]. Der Flamelet-Bereich liegt unterhalb dieser Geraden ( $\tilde{\chi}_{st} < \chi_q$ ) und bei Werten der Kolmogorov-Zeitskala  $\tau_K > \tau_c$ . Typischerweise ist dieser Bereich gültig für Strahl-Diffusionsflammen, wie sie in dieser Arbeit betrachtet werden [13]. Im Bereich oberhalb der Horizontalen gegeben durch  $\sqrt{\xi_{C,st}''^2} = \sigma_R$  ist lokale Verlöschung möglich, jedoch brennen die meisten Flamelets, da die mittlere Streckungsgeschwindigkeit kleiner als  $\chi_q$  ist. Der Bereich verbundener Reaktionszonen ist gegeben durch  $\sqrt{\xi_{C,st}''^2} < \sigma_R$  und  $\tau_K > \tau_c$ .

#### 2.4.4 Flamelet-Modell für Spraydiffusionsflammen

Um über das Flamelet-Modell die gemittelten Massenbrüche der Spezies in der turbulenten Flamme zu erlangen, müssen die Funktionen  $Y_{\alpha, \text{lam}}(\xi_C, \chi_{st})$  der laminaren Flamelets bekannt sein. Diese wurden von Gutheil [14] berechnet und in sogenannten Flamelet-Bibliotheken abgelegt. Hierzu wurden die Strukturen laminarer Diffusionsflammen in der Gegenstromkonfiguration für verschiedene Flammenstreckungen bestimmt. Der verwendete Methanol-Luft-Mechanismus von Chevelier [15] umfasst 168 Elementarreaktionen und 23 Spezies:  $\text{CH}_3\text{OH}$ ,  $\text{CH}$ ,  $1\text{-CH}_2$ ,  $3\text{-CH}_2$ ,  $\text{H}$ ,  $\text{CH}_3$ ,  $\text{CH}_2\text{OH}$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{CH}_2\text{O}$ ,  $\text{O}_2$ ,  $\text{OH}$ ,  $\text{HO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}_2$ ,  $\text{O}$ ,  $\text{CH}_3\text{O}$ ,  $\text{CH}_3\text{O}_2$ ,  $\text{CH}_3\text{O}_2\text{H}$ ,  $\text{CH}_4$ ,  $\text{H}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{CHO}$  und  $\text{N}_2$ . Für Ethanol werden 342 Reaktionen und 15 weitere Spezies berücksichtigt [102]:  $\text{C}_2\text{H}$ ,  $\text{HCCO}$ ,  $\text{C}_2\text{H}_2$ ,  $\text{CH}_2\text{CO}$ ,  $\text{C}_2\text{H}_3$ ,  $\text{CH}_3\text{CO}$ ,  $\text{CH}_2\text{CHO}$ ,  $\text{C}_2\text{H}_4$ ,  $\text{CH}_3\text{CHO}$ ,  $\text{C}_2\text{H}_5$ ,  $\text{C}_2\text{H}_5\text{O}$ ,  $\text{CH}_3\text{CHOH}$ ,  $\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}$ ,  $\text{C}_2\text{H}_6$  und  $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ .

Unabhängig von der Flammenstreckung erreicht das Temperaturprofil eines laminaren Gas-Flamelets bei etwa  $\xi_C = \xi_{C,st}$  ihr Maximum. Je höher allerdings die Streckung ist, desto niedriger wird der Maximalwert (Abbildung 2.8). Jeweils am Staupunkt treten die größten Mischungsbruchgradienten auf; somit hat dort die skalare Dissipationsgeschwindigkeit ein Maximum (vgl. Gleichung (2.191)). Da die skalare Dissipationsgeschwindigkeit einer laminaren Flamme bei gegebener Streckung der Gegenstromanordnung bei variierendem Mischungsbruch nicht konstant ist, ist die Zuordnung einer skalaren Dissipationsgeschwindigkeit zu einer vorgegebenen Streckung nicht eindeutig. Jedoch liefert der Wert der skalaren Dissipationsgeschwindigkeit am Punkt der Stöchiometrie  $\chi_{st} = \chi|_{\xi_C = \xi_{C,st}}$  den benötigten geeigneten Bezugspunkt [87].

In den Berechnungen der Bibliotheken der laminaren Gasphasendiffusionsflammen bleiben Zweiphaseneffekte, wie etwa der Einfluss der Tropfen auf die Flammenstreckung oder eine Abkühlung der Gasphase durch Tropfenverdampfung unberücksichtigt. Gutheil und Hollmann [26] zeigten in ihren Untersuchungen, dass die Strukturen von Gasphasen- und Spraydiffusionsflammen in der Gegenstromanordnung prinzipielle Unterschiede aufweisen. Die Abbildungen 2.11 und 2.12 zeigen Bibliotheken laminarer Methanol-Luft-Gegenstromdiffusionsflammen bei verschiedenen Streckungsgeschwin-

digkeiten  $a$  für reine Gasflammen (Abbildung 2.11) sowie für Sprayflammen (Abbildung 2.12). In beiden Abbildungen strömt der Brennstoff von links ein.

Wird der Brennstoff nicht gasförmig, sondern unverdampft in Tropfenform mit einem Trägergas (z.B. Luft) eingeströmt, so ist der auf Basis des gasförmig vorliegenden Kohlenstoffanteils definierte Mischungsbruch  $\xi_C$  sowohl auf der Luftseite als auch auf der Brennstoffseite gleich Null. Im Gegensatz zur Monotonie des  $\xi_C$ -Profils bei der Gegenstrom-Gasdiffusionsflamme hat das Mischungsbruchprofil der Gegenstrom-Spraydiffusionsflamme ein Maximum. Aufgrund der einsetzenden Tropfenverdampfung steigt sein Wert zunächst an; die Vermischung mit dem entgegengesetzten Luftstrom bewirkt wieder ein Absinken auf  $\xi_C = 0$ . Falls Brennstoff in ausreichender Menge einströmt, wird der stöchiometrische Wert  $\xi_C = \xi_{C,st}$  zweimal erreicht: Zum einen in der Vorverdampfungszone auf der Seite des einströmenden Sprays, zum anderen in der Hauptreaktionszone, wo der meiste Brennstoff verdampft ist. Während bei laminaren Gasflammen in der Gegenstromkonfiguration wegen der strengen Monotonie von  $\xi_C$  jedem Mischungsbruch eindeutig ein Ort zugeordnet werden kann, ist dies bei Sprayflammen nicht mehr global möglich. Teilt man jedoch die Flammenstruktur am Maximalwert von  $\xi_C$  in zwei Bereiche, so steigt der Mischungsbruch auf der Sprayseite streng monoton an, während er auf der Gasseite streng monoton abfällt. Die Eindeutigkeit der Zuordnung von Ort und Mischungsbruch ist somit innerhalb jedes Teilbereichs wieder gegeben.

Die skalare Dissipationsgeschwindigkeit besitzt bei der Spraydiffusionsflamme zwei Maxima anstelle von einem. Hierbei korrespondiert das Maximum auf der Luftseite mit dem Maximum am Staupunkt der Gasdiffusionsflamme. Falls Tropfen den Staupunkt durchqueren, verschiebt sich die Lage des Maximums mit steigender Streckung zur Luftseite. Ferner hängt  $\chi$  nicht nur von der Gasgeschwindigkeit, sondern auch von der Geschwindigkeit und Größe der Tropfen, sowie dem globalen Äquivalenzverhältnis ab. Da  $\xi_C = \xi_{C,st}$  im Allgemeinen an zwei verschiedenen Orten erreicht wird, gibt es auch zwei Werte von  $\chi$  bei Stöchiometrie: Einen auf der Sprayseite und einen auf der Luftseite.

Der Temperaturverlauf bei Gasflammen besitzt ein Maximum. Bei Sprayflammen kann er ein oder zwei Maxima besitzen. Bei geringer Streckung lassen sich zwei Reaktionszonen beobachten. Sobald nach eingesetzter Verdampfung im Brennstoffstrom eine stöchiometrische Mischung erreicht ist, wird die Temperatur in der ersten Reaktionszone maximal. Die hohe Temperatur führt zu erhöhter Verdampfungsgeschwindigkeit und einem brennstoffreichen Gemisch. Durch die stark angestiegene Verdampfungswärme wird der Gasphase Wärme entzogen; sie kühlt sich ab. Die Vermischung mit dem Luftstrom führt wiederum zum Absinken des Mischungsbruchs. An der Stelle, wo er wieder den stöchiometrischen Wert erreicht hat, befindet sich die Hauptreaktionszone und das

zweite Temperaturmaximum. Bei hohen Flammenstreckungen verlöscht die gasseitige Flamme bzw. die beiden Reaktionszonen fallen zusammen, da die erste Reaktionszone durch die höheren Geschwindigkeiten der Gasphase und Tropfen zum Staupunkt verschoben wird.

In ersten Untersuchungen von Hollmann [12] sowie von Gutheil und Sirignano [14] wurden laminare Flammenbibliotheken für zwei Tropfengrößen ( $r_d = 10\ \mu\text{m}$  und  $r_d = 25\ \mu\text{m}$ ) bei einem gegebenen Äquivalenzverhältnis von  $E_R = 3$  für Flammenstreckungen von  $a = 55\ \text{s}^{-1}$  bis zur Verlöschung ( $a = 1330\ \text{s}^{-1}$  bei  $r_d = 10\ \mu\text{m}$  bzw.  $a = 2000\ \text{s}^{-1}$  bei  $r_d = 25\ \mu\text{m}$ ) berechnet. Wegen der Abhängigkeit der Sprayflammenbibliotheken von der Tropfengröße sowie aufgrund der besonderen Form des Mischungsbruchprofils sind Auswahlkriterien für die Verwendung der Sprayflammenbibliotheken zu formulieren. Die Auswahl der laminaren Spraybibliothek richtet sich nach dem Sauterradius des Sprays  $r_S$  in der turbulenten Flamme. Für große Sauterradien  $r_S > 10\ \mu\text{m}$  wird die sprayseitige Flanke der Bibliothek mit  $r_d = 25\ \mu\text{m}$  ausgewählt. Liegt  $r_S$  im Bereich  $1\ \mu\text{m} < r_S < 10\ \mu\text{m}$ , so wird auf die Sprayseite der Bibliothek mit  $r_d = 10\ \mu\text{m}$  zurückgegriffen. Für sehr kleine Sauterradien  $r_S < 1\ \mu\text{m}$  wird die Gasseite verwendet.

Mit dem Aufstellen der Gleichungen für die Gasphase (Abschnitt 2.2) und die flüssige Phase (Abschnitt 2.3) sowie der Modellierung der chemischen Reaktionen (Abschnitt 2.4) und der jeweiligen Wechselwirkungen ist die analytische Problembeschreibung abgeschlossen. Im folgenden Kapitel 3 werden die Konzepte zur numerischen Lösung der gewonnenen Gleichungen vorgestellt, bevor im Kapitel 4 Simulationsrechnungen mit dem eingeführten Modell durchgeführt und analysiert werden.

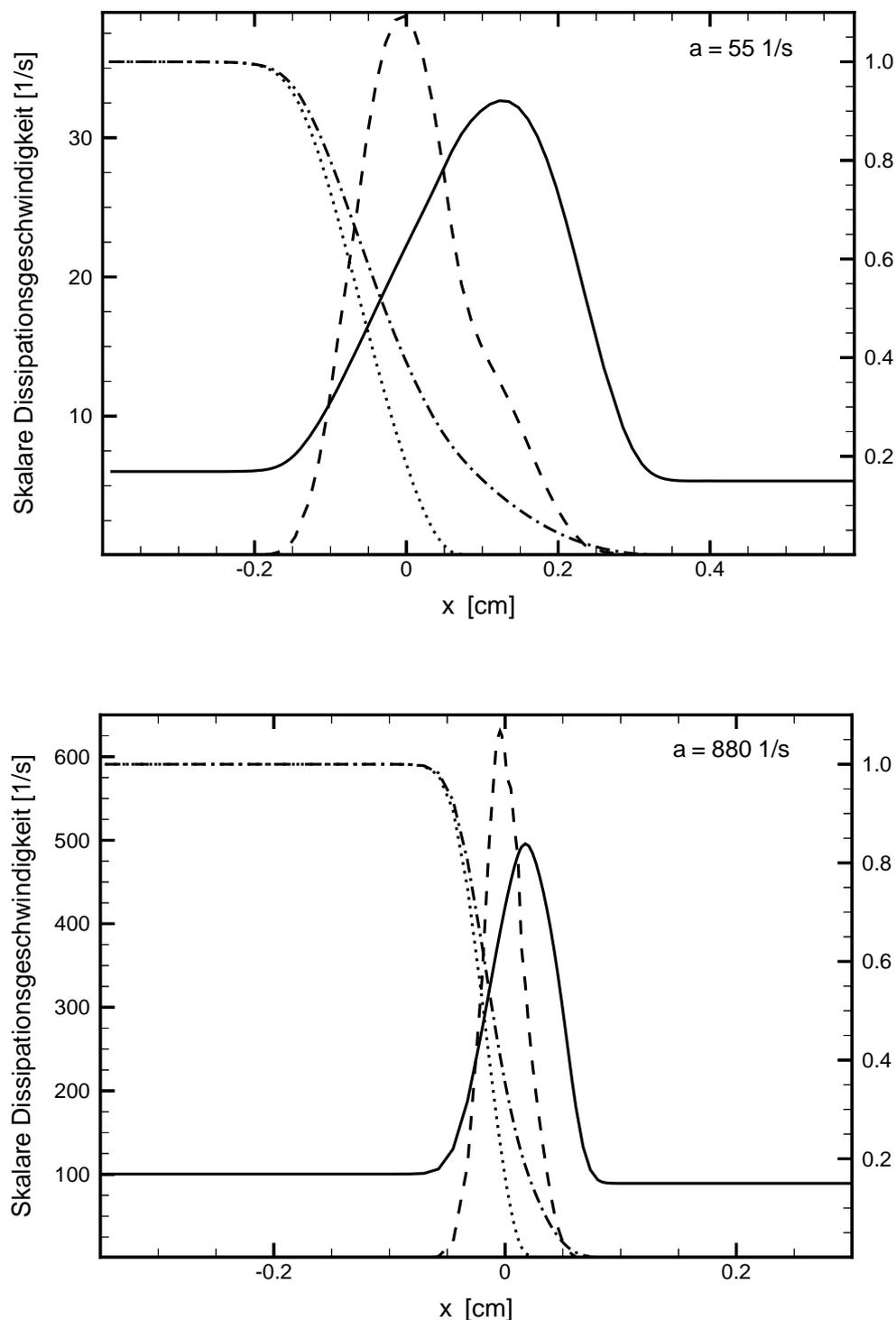


Abb. 2.11: Struktur laminarer Methanol-Luft-Gasflammen in der Gegenstromkonfiguration für niedrige (oben:  $a = 55 \text{ s}^{-1}$ ) und hohe Streckung (unten:  $a = 880 \text{ s}^{-1}$ ). Eingezeichnete Profile: Gastemperatur normiert auf 2000 K (durchgezogene Linie), Mischungsbruch (---), skalare Dissipationsgeschwindigkeit (···), und Methanolmassenbruch (· · ·) [12]

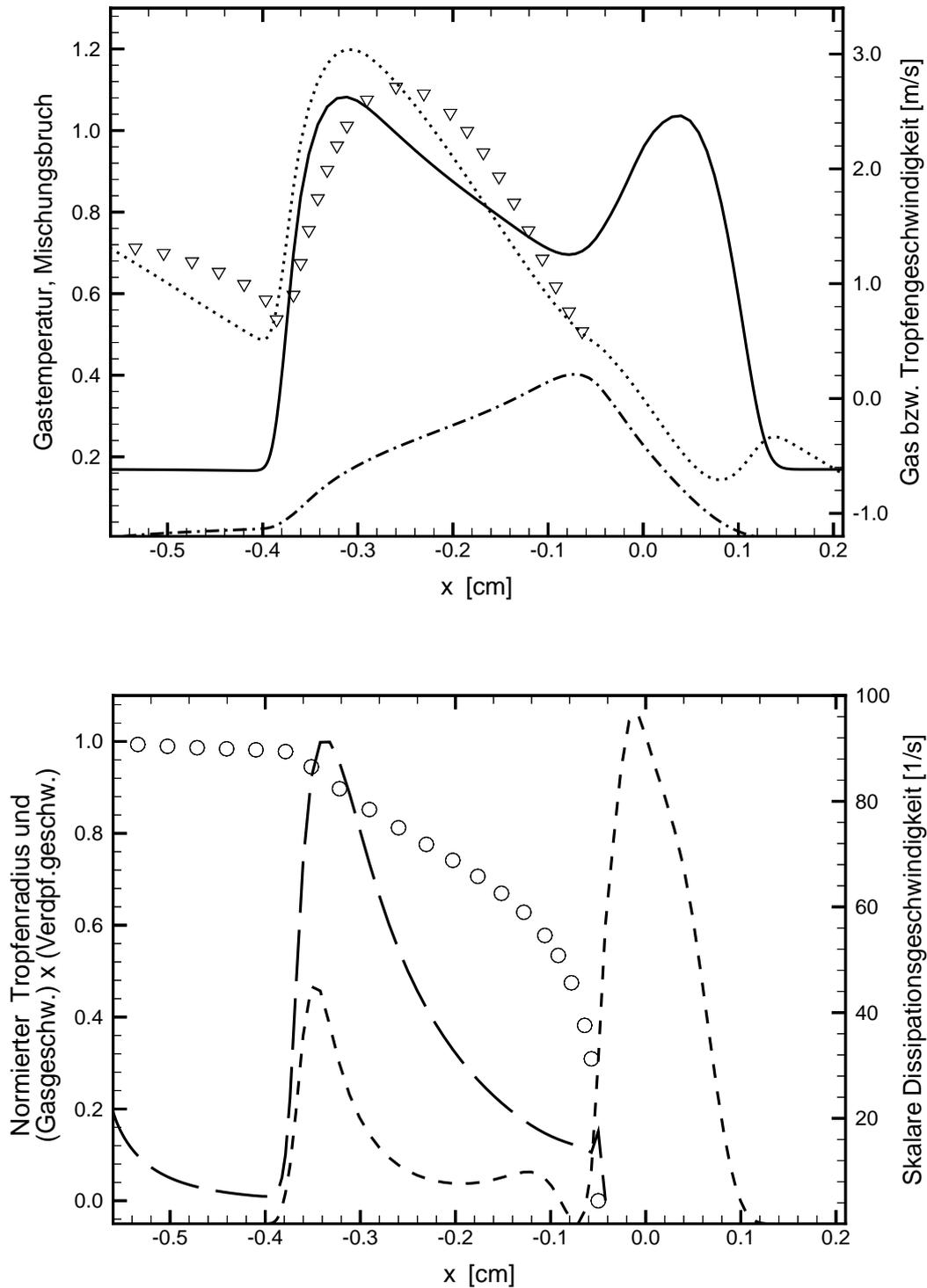


Abb. 2.12: Struktur laminarer Methanol-Luft-Sprayflammen in der Gegenstromkonfiguration bei einem Tropfenradius von  $r_d = 10 \mu\text{m}$  für eine Streckung von  $a = 500 \text{s}^{-1}$ . Eingezeichnete Profile: Oben: Gastemperatur normiert auf 2000 K (durchgezogene Linie), Mischungsbruch (— · —), Gasgeschwindigkeit (· · ·) und Tropfengeschwindigkeit ( $\nabla$ ). Unten: Skalare Dissipationsgeschwindigkeit (— —), das Produkt  $L_v v$  normiert auf sein Maximum (— · —) und den auf Eins normierten Tropfenradius ( $\circ$ ) [12]

### 3. Angewandte numerische Methoden

Im vorangegangenen Kapitel 2 wurde ein Satz neuer Erhaltungsgleichungen entwickelt. Hiermit steht zur Berechnung der physikalischen Größen  $\tilde{u}(\vec{x}, t)$ ,  $\tilde{p}(\vec{x}, t)$ ,  $\tilde{\rho}(\vec{x}, t)$ ,  $\tilde{T}(\vec{x}, t)$ ,  $\tilde{Y}_{\alpha=1,\dots,N}(\vec{x}, t)$ ,  $\tilde{k}$  und  $\tilde{\varepsilon}$  mit den Gleichungen (2.81) bis (2.86), (2.88), (2.118), (2.121) sowie den Erhaltungsgleichungen der Varianzen und Korrelationen  $\widetilde{u_i''u_j''}$ ,  $\widetilde{u_i''\phi''}$  und  $\widetilde{\phi''\psi''}$  (2.116), (2.123), (2.137) und (2.139) ein System von partiellen, gekoppelten, nichtlinearen Differentialgleichungen zur Verfügung. Dieses Gleichungssystem muss numerisch gelöst werden, da eine analytische Lösung nicht möglich ist. Die wesentlichen Grundzüge der Vorgehensweise zur numerischen Lösung und die speziellen Erfordernisse des RSM an den Lösungsalgorithmus sind Inhalt dieses Kapitels. Zum vertieften Verständnis sei auf folgende Literatur verwiesen: [12, 91, 92].

#### 3.1 Stationäre, axialsymmetrische Form der Differentialgleichungen

Die Grundlage zur Durchführung der numerischen Simulationen bildet das von Hollmann [12] um die Sprayanteile erweiterte Strömungsprogramm CORA 2 (*COmbustion and Radiation Analyser, 2-dimensional*) [92], das zur Simulation achsensymmetrischer Flammen das  $k$ - $\varepsilon$ -Modell verwendet. Der ursprüngliche Code diente zur Berechnung reiner Gasflammen. Die Erweiterung des Codes für Sprayflammen und die Integration laminarer Spraybibliotheken wurde von Hollmann durchgeführt [12]. Darauf aufbauend wurde im Rahmen dieser Arbeit das neu entwickelte RSM für Sprayflammen in den Code eingebunden. Zusätzliche Differentialgleichungen (siehe Kapitel 2.1 und 2.2) werden gelöst und neue Sprayquellterme berechnet.

Beim  $k$ - $\varepsilon$ -Modell werden die in den Gleichungen (2.82) bis (2.86), (2.118) und (2.121) auftretenden Terme  $\text{div} \left( \overline{\Gamma_{\phi,l} \text{grad } \phi} - \overline{\rho \tilde{u}'' \phi''} \right)$ , mit dem laminaren Diffusionskoeffizienten  $\Gamma_{\phi,l}$  und  $\phi \in \{\vec{u}, Y_\alpha, Z_j, \xi_C, h, k, \varepsilon\}$  zu

$$\text{div} \left( \overline{\Gamma_{\phi,l} \text{grad } \phi} - \overline{\rho \tilde{u}'' \phi''} \right) = \text{div} \left( \Gamma_{\phi,\text{eff}} \text{grad } \tilde{\phi} \right) \quad (3.1)$$

zusammengefasst. Hierbei setzt sich der effektive Diffusionskoeffizient  $\Gamma_{\phi,\text{eff}}$  aus laminarem und turbulentem (Index “t”) Anteil zusammen:

$$\Gamma_{\phi,\text{eff}} = \Gamma_{\phi,l} + \Gamma_{\phi,t}. \quad (3.2)$$

Die hier vorliegende Betrachtung beschränkt sich auf stationäre, axialsymmetrische Sprayflammen ohne Drall. Es bietet sich somit die Notation in Zylinderkoordinaten an, wobei die Ableitungen nach der Zeit und nach der Winkelkoordinaten entfallen. Die für das  $k$ - $\varepsilon$ -Modell im Code umgesetzten Differentialgleichungen lassen sich damit schreiben als

$$\begin{aligned}
& \operatorname{div} (\bar{\rho} \tilde{u} \tilde{\phi}) - \operatorname{div} (\Gamma_{\phi, \text{eff}} \operatorname{grad} \tilde{\phi}) \\
&= \underbrace{\frac{\partial}{\partial x} (\bar{\rho} \tilde{u} \tilde{\phi}) + \frac{1}{y} \frac{\partial}{\partial y} (y \bar{\rho} \tilde{v} \tilde{\phi}) - \frac{\partial}{\partial x} (\Gamma_{\phi, \text{eff}} \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial x}) - \frac{1}{y} \frac{\partial}{\partial y} (y \Gamma_{\phi, \text{eff}} \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial y})}_{=: L(\tilde{\phi})} \quad (3.3) \\
&= S_{\tilde{\phi}, k-\varepsilon} + L_{\tilde{\phi}},
\end{aligned}$$

wobei  $x$  und  $y$  die axiale bzw. radiale Koordinate bezeichnen und  $\tilde{u}$  bzw.  $\tilde{v}$  die Geschwindigkeitskomponenten in axialer bzw. radialer Richtung. In  $L_{\tilde{\phi}}$  sind die Quelltermbeiträge durch das Spray und in  $S_{\tilde{\phi}, k-\varepsilon}$  alle weiteren Quellterme der Gasphase zusammengefasst. Die linke Seite der Gleichung definiert den Transportoperator  $L(\tilde{\phi})$ .

Da nun in der RSM-Formulierung eigene Differentialgleichungen für die Größen  $\tilde{u}'' \tilde{\phi}''$  gelöst werden, braucht ihr Einfluss nicht über den effektiven Diffusionskoeffizienten modelliert werden. Die entsprechende zu diskretisierende Transportgleichung für das RSM lautet

$$\begin{aligned}
& \operatorname{div} (\bar{\rho} \tilde{u} \tilde{\phi}) - \operatorname{div} (\overline{\Gamma_{\phi, t} \operatorname{grad} \tilde{\phi}} - \bar{\rho} \tilde{u}'' \tilde{\phi}'') \\
&= \operatorname{div} (\bar{\rho} \tilde{u} \tilde{\phi}) - \operatorname{div} (\Gamma_{\phi, \text{eff}} \operatorname{grad} \tilde{\phi}) + \operatorname{div} (\Gamma_{\phi, t} \operatorname{grad} \tilde{\phi}) + \operatorname{div} (\bar{\rho} \tilde{u}'' \tilde{\phi}'') \quad (3.4) \\
&= S_{\tilde{\phi}, k-\varepsilon} + L_{\tilde{\phi}}
\end{aligned}$$

oder umgeformt

$$\begin{aligned}
& \operatorname{div} (\bar{\rho} \tilde{u} \tilde{\phi}) - \operatorname{div} (\Gamma_{\phi, \text{eff}} \operatorname{grad} \tilde{\phi}) \\
&= S_{\tilde{\phi}, k-\varepsilon} - \operatorname{div} (\Gamma_{\phi, t} \operatorname{grad} \tilde{\phi}) - \operatorname{div} (\bar{\rho} \tilde{u}'' \tilde{\phi}'') + L_{\tilde{\phi}}. \quad (3.5)
\end{aligned}$$

Die Erweiterung der im Code für das  $k$ - $\varepsilon$ -Modell gelösten Differentialgleichungen auf das RSM erfolgt durch Modifikation der Quellterme für die Gasphase. Anstelle von  $S_{\tilde{\phi}, k-\varepsilon}$  lautet nun der Gesamtterm der Gasphasenquellen im RS-Modell

$$S_{\tilde{\phi}, \text{RS}} = S_{\tilde{\phi}, k-\varepsilon} - \operatorname{div} (\Gamma_{\phi, t} \operatorname{grad} \tilde{\phi}) - \operatorname{div} (\bar{\rho} \tilde{u}'' \tilde{\phi}''). \quad (3.6)$$

Mit den Modellannahmen des  $k$ - $\varepsilon$ -Modells wird im Unterschied zum RS-Modell der Term  $\operatorname{div} (\Gamma_{\phi, t} \operatorname{grad} \tilde{\phi}) + \operatorname{div} (\bar{\rho} \tilde{u}'' \tilde{\phi}'')$  gleich Null, was zur ursprünglichen Gleichung führt.

Auch die für das RSM zusätzlich zu lösenden Differentialgleichungen ( $\tilde{\phi} \in \{\tilde{u}_i''^2, \tilde{u}_i'' \tilde{u}_j'', \tilde{u}_i'' \tilde{\psi}''\}$ ) lassen sich auf die durch Gleichung (3.5) festgelegte Form bringen. Es werden hierzu jeweils alle Gasphasenterme, die nicht durch den Transportoperator erfasst

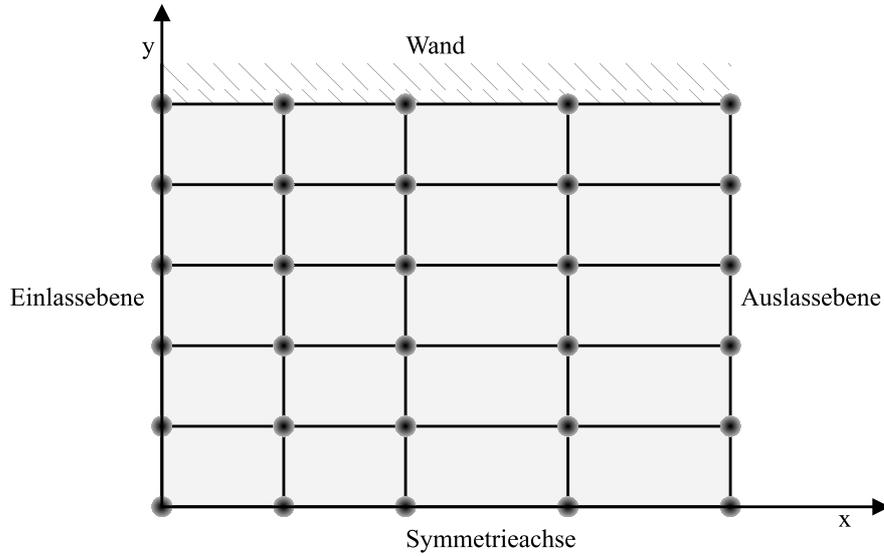


Abb. 3.1: Randbedingungen des Berechnungsgebietes

sind, im Quellterm  $S_{\phi,RS}^{\sim}$  zusammengefasst. Die aus der flüssigen Phase resultierenden Quellterme sind jeweils in  $L_{\phi}^{\sim}$  berücksichtigt.

## 3.2 Randbedingungen

Das Berechnungsgebiet einer axialsymmetrischen Anordnung, wie sie hier betrachtet wird, ist begrenzt durch die Symmetrieachse, einer Wand im Außenbereich sowie die Einlass- und Auslassebene (Abbildung 3.1).

Wegen der Axialsymmetrie ergibt sich auf der Symmetrieachse für die radiale Geschwindigkeitskomponente  $\tilde{v} = 0$  und für die Korrelation  $\tilde{u}''\tilde{v}'' = 0$  [1]. Für alle anderen Größen  $\tilde{\phi}$  folgt aus der Symmetrieeigenschaft die Neumannsche Randbedingung  $\partial\tilde{\phi}/\partial y = 0$  [1, 3].

Die Auslassebene ist so gewählt, dass keine Änderungen der physikalischen Größen mehr erfolgen, sodass dort für alle Größen  $\partial\tilde{\phi}/\partial x = 0$  gilt [91, 92].

Wie Werte der Variablen in der Einlassebene sind durch die Anfangsbedingungen festgelegt. Diese ergeben sich aus den experimentellen Daten eines Vergleichsexperiments und werden in Kapitel 4.1 erläutert.

An festen Wänden werden die Randbedingungen durch ihre Undurchlässigkeit und Haftbedingungen bestimmt. Im Code wird dort für die Größen  $\tilde{u}$ ,  $\tilde{v}$ ,  $\tilde{k}$ ,  $\tilde{\varepsilon}$ ,  $\tilde{u}''^2$  und  $\tilde{v}''^2$  das logarithmische Wandgesetz verwendet [1, 92]. Die Wandtemperatur  $T_W$  ist bekannt, woraus für die spezifische Enthalpie an der Wand  $\tilde{h} = c_p T_W$  folgt. Für den Mischungsbruch und seine Varianz gilt an den Wänden  $\partial\tilde{\xi}_C/\partial y = 0$  bzw.  $\partial\tilde{\xi}_C''^2/\partial y = 0$  [12] sowie für die Korrelationen  $\tilde{u}''\tilde{v}'' = 0$ ,  $\tilde{u}''\tilde{\xi}_C'' = 0$ ,  $\tilde{v}''\tilde{\xi}_C'' = 0$ ,  $\tilde{u}''\tilde{h}'' = 0$  und  $\tilde{v}''\tilde{h}'' = 0$  [1, 3].



laren Größen  $\phi$  sowie für die Geschwindigkeiten  $\tilde{u}$  und  $\tilde{v}$  wird ein sogenanntes *staggered grid* (versetztes Gitter) zugrunde gelegt [91, 92] (Abbildung 3.2). Dies bedeutet, dass das Gitter und damit auch die Kontrollvolumina für die Geschwindigkeitskomponenten gegenüber dem Ursprungsgitter der skalaren Größen, wie in Abbildung 3.2 dargestellt, verschoben sind. Hierbei ist das Gitter für die Axialgeschwindigkeit  $\tilde{u}$  in axialer Richtung und das Gitter der radialen Geschwindigkeit  $\tilde{v}$  in radialer Richtung verschoben, sodass die versetzten Gitterpunkte jeweils auf den Kontrollflächen des Ursprungsgitters liegen. Durch diese Vorgehensweise werden physikalisch unrealistische, oszillierende Druckfelder ausgeschlossen [91], da sich Druckgradienten am Gitterpunkt der Geschwindigkeit durch die Differenz zweier benachbarter Gitterpunkte des Drucks (der als skalare Größe an Gitterpunkten des nicht verschobenen Gitters gespeichert ist) ergeben. Bei identischen Gitterpunkten für Druck und Geschwindigkeit, könnten schwankende Druckfelder in der Impulsgleichung wie konstante Druckfelder wirken, da sich der Druckgradient an einem Gitterpunkt  $i$  aus den Drücken der (nicht direkt nebeneinander liegenden) Gitterpunkte  $i-1$  und  $i+1$  ergeben würde. Ein weiterer Vorteil liegt in einer vereinfachten Berechnung der Massenflüsse durch die Kontrollflächen. Eine Interpolation der Geschwindigkeit für die Grenzflächen ist nicht mehr nötig, was gewisse physikalisch unrealistische numerische Lösungen für die Geschwindigkeitsfelder (wie z.B. alternierende Geschwindigkeitswerte) vermeidet [91].

Für die Diskretisierung der konvektiven Flüsse wird ein *upwind*-Verfahren benutzt, dem der physikalisch plausible Sachverhalt zugrunde liegt, dass der Wert einer physikalischen Größe in einem Kontrollvolumen vom Transport durch die stromaufwärts liegende Kontrollfläche bestimmt ist [91]. Je mehr konvektive Effekte über diffusive Effekte dominieren, desto mehr ist dies der Fall.

Die Lösung der diskretisierten Gleichungen erfolgt mittels des *Tri-Diagonal-Matrix* (TDM) Algorithmus. Die Anwendung dieses Algorithmus auf ein zweidimensionales Gitter erfolgt so, dass zunächst alle Gitterlinien in einer Richtung (z.B.  $x$ -Richtung) durchlaufen werden, wobei die Werte der benachbarten Punkte der jeweils betrachteten Gitterlinie als Parameter eingehen. Sind alle Linien einer Richtung durchlaufen, so wird die Richtung gewechselt und alle Gitterlinien der anderen Richtung (z.B.  $y$ -Richtung) durchlaufen. Dieses Vorgehen wird bis zum Erreichen von Konvergenz wiederholt [92].

Die Berechnung der physikalisch-chemischen Felder geschieht iterativ in einem Hybridverfahren aus wechselseitigem Lösen der Gleichungen für flüssige und gasförmige Phase sowie Bestimmung der Gaszusammensetzung über das Flamelet-Modell: Jeder Iterationsschritt gliedert sich in die folgenden Teilschritte:

- Zunächst erfolgt die Lösung der flüssigen Phase. Die Eigenschaften und Trajektorien der Tropfen werden nach den Gleichungen aus Kapitel 2.3 ermittelt und die Sprayquellterme  $L_{\tilde{\phi}}$  für die Gasphasengleichungen bestimmt.

- Danach wird das Strömungsfeld basierend auf dem SIMPLE (*Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations*) Algorithmus [91, 92] berechnet: Ausgehend von einem geschätzten Druckfeld werden die Impulsgleichungen gelöst. Dies führt zu genäherten Geschwindigkeiten, die im Allgemeinen nicht die Kontinuitätsgleichung erfüllen. Aus der Kontinuitätsgleichung jedoch lässt sich eine Druckkorrekturgleichung ableiten, über die wiederum die korrigierten Drücke  $\bar{p}$  und damit die korrigierten Geschwindigkeiten  $\tilde{u}$  und  $\tilde{v}$  bestimmt werden. Danach werden die Erhaltungsgleichungen der übrigen Variablen gelöst ( $\tilde{h}$ ,  $\tilde{\xi}_C$ ,  $\tilde{\xi}_c''^2$ ,  $\tilde{k}$ ,  $\tilde{\varepsilon}$ ,  $\tilde{u}''^2$ ,  $\tilde{v}''^2$ ,  $\tilde{u}''\tilde{v}''$ ,  $\tilde{u}''\tilde{h}''$ ,  $\tilde{v}''\tilde{h}''$ ,  $\tilde{u}''\tilde{\xi}_C''$ ,  $\tilde{v}''\tilde{\xi}_C''$ ). Die Lösung der jeweiligen Differentialgleichungen geschieht mit dem oben beschriebenen TDM Algorithmus.
- Aus Gleichung (2.193) wird die skalare Dissipationsgeschwindigkeit  $\tilde{\chi}$  bestimmt. Sie dient zusammen mit dem Mischungsbruch  $\tilde{\xi}_C$  und den statistischen Verteilungsfunktionen (2.198) und (2.199) zur Anbindung an das Flamelet-Modell, das über Gleichung (2.195) die Gaszusammensetzung ( $\tilde{Y}_\alpha$ ) liefert.
- Unter Verwendung der Gleichung (2.44) kann aus der Gemischzusammensetzung die Gastemperatur  $\tilde{T}$  und mit Hilfe der idealen Gasgleichung (2.88) die Dichte  $\bar{\rho}$  berechnet werden.

Mit dem korrigierten Druckfeld als neue Anfangsschätzwerte werden die Iterationsschritte solange wiederholt, bis eine konvergente Lösung erreicht ist. Das Konvergenzverhalten des nichtlinearen, gekoppelten Systems partieller Differentialgleichungen ist kritisch [91]. Über Relaxationsparameter besteht die Möglichkeit stabilere, aber langsamere Konvergenz zu erreichen [92].

## 4. Ergebnisse der Simulationsrechnungen

Basis der folgenden Simulationsrechnungen bildet der von Hollmann [12] um die Sprayingteile erweiterte Computercode CORA 2 zur Simulation turbulenter Sprayflammen mittels des  $k$ - $\varepsilon$ -Modells. Dieser Code wurde im Rahmen dieser Arbeit um das in Kapitel 2.2.5 entwickelte RS-Modell zur Beschreibung turbulenter Sprayflammen erweitert und mit den Sprayquelltermen aus Kapitel 2.3.6 für das RS-Modell ergänzt. Die Erzeugung der Anfangsbedingungen und der Tropfenverteilung wird in Kapitel 4.1 erläutert. Durch Vergleiche mit bisherigen Simulationen, die das  $k$ - $\varepsilon$ -Modell verwendeten [12, 26] sowie anhand der Messungen von McDonell und Samuelsen [20] wird das neue Modell validiert. Dabei werden sowohl nicht reagierende (Kapitel 4.2) als auch reagierende (Kapitel 4.3) Sprays untersucht.

Im Fall von reagierenden Sprays wird das Flamelet-Modell zur Modellierung der chemischen Reaktionen verwendet. Die eingebundenen Flamelet-Bibliotheken sind von Gutheil [14] berechnet worden. In Untersuchungen von Hollmann und Gutheil [12, 26] stellte sich heraus, dass durch die Erweiterung von Gasflammenbibliotheken auf Sprayflammenbibliotheken eine deutliche Verbesserung der Simulationsergebnisse erreicht wird. Dabei hat die Gasseite der Spraybibliotheken für verschiedene Tropfenradien immer die Form einer reinen Gasflamme. Daher ist es für das Ergebnis der Simulation nicht von Bedeutung, ob die verwendete Bibliothek für die Gasseite von der Spraybibliothek der Anfangs-Tropfengröße  $r_d = r_{d,1} = 10\ \mu\text{m}$  oder  $r_d = r_{d,2} = 25\ \mu\text{m}$  stammt [26]. Sie kann auch durch eine reine Gasflammenbibliothek ersetzt werden [93]. Die Auswahl der sprayseitigen Bibliotheken dagegen hat einen Einfluss auf die Simulationsergebnisse. Der Einfluss ihrer Auswahl wird in Abschnitt 4.4.1 untersucht.

Hollmann [12] verwendete in seinen Simulationen Spraybibliotheken laminarer Gegenstromdiffusionsflammen für planare (zweidimensionale) Sprayflammen. In einem weiteren Schritt werden diese im Rahmen dieser Arbeit durch Bibliotheken für rotationssymmetrische Flammen ersetzt, die von Gutheil [93] zur Verfügung gestellt wurden. Der Einfluss der Konfiguration (planar/rotationssymmetrisch) der Spraybibliotheken auf die Simulationsergebnisse ist Gegenstand des Abschnitts 4.4.2.

Um auch reagierende und nicht reagierende Ethanol sprays simulieren zu können, wurde der Code für den Brennstoff Ethanol vorbereitet und ein erster Testlauf für eine turbulente Ethanol-Sprayflamme durchgeführt (Abschnitt 4.5).

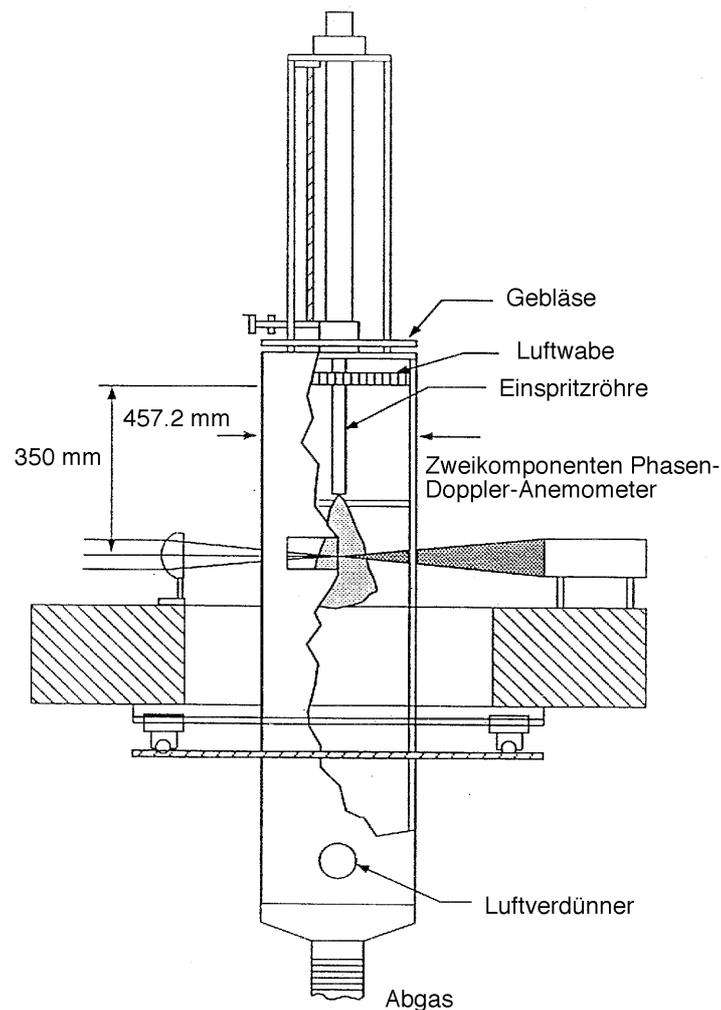


Abb. 4.1: Skizze des Versuchsaufbaus von McDonell und Samuelsen [94] (aus [12])

## 4.1 Definition der Anfangs – und Randbedingungen

### 4.1.1 Versuchsaufbau

Als experimentelle Vergleichswerte für die Simulationen eines reagierenden wie auch nicht reagierenden Methanolsprays werden die Daten von McDonell und Samuelsen [94] herangezogen, die hierzu an einem in Abbildung 4.1 skizzierten Versuchsaufbau Messungen durchführten. Dabei wurden für die Gasphase die axialen und radialen Geschwindigkeitskomponenten, der Methanolmassenbruch sowie im reaktiven Fall auch die Temperatur gemessen. Für die flüssige Phase stehen experimentelle Daten für die

axialen und radialen Geschwindigkeiten der Tropfen unterteilt in verschiedene Tropfengrößenklassen zur Verfügung. Ferner wurden im Experiment die Verteilungen der Tropfengrößen sowie der Volumenfluss und die Anzahldichte ermittelt. Zur Messung der Gas- und Tropfengeschwindigkeiten, der Tropfengrößen und des Volumenflusses diente ein Phasen-Doppler-Anemometer (PDPA) [70,95,96]. Die Bestimmung der Gastemperatur erfolgt über ein Thermoelement und die Erfassung des gasförmigen Methanolanteils erfolgte durch die IRES-Methode [97]. Bei der IRES-Methode wird hier ein Laserstrahl der Wellenlänge  $3,3\ \mu\text{m}$  bis  $3,5\ \mu\text{m}$  auf ein Probenvolumen gerichtet. Setzt man die Intensität des gestreuten Laserlichts zum absorbierten und gestreuten Laserlicht ins Verhältnis, so läßt sich auf den Anteil des absorbierten Laserstrahls schließen und hieraus die Konzentration des Methanoldampfes in der Gasphase bestimmen. Nach McDonell und Samuelsen [20] liegt der Fehler dieser Methode bei 10 % im nicht reagierenden bis 20 % im reaktiven Fall.

Mit Ausnahme der Gastemperatur wurden an den axialen Positionen  $x = 7,5\ \text{mm}$ ,  $15\ \text{mm}$ ,  $25\ \text{mm}$ ,  $35\ \text{mm}$ ,  $50\ \text{mm}$ ,  $75\ \text{mm}$ ,  $100\ \text{mm}$  und  $150\ \text{mm}$  jeweils radiale Profile der entsprechenden physikalisch-chemischen Größen vermessen. Für die Gastemperatur liegen bei  $x = 7,5\ \text{mm}$  und  $15\ \text{mm}$  keine Messungen vor, statt dessen bei  $x = 2,5\ \text{mm}$  jedoch nur im Bereich außerhalb des Spraykegels. Temperaturwerte an den fehlenden Positionen müssen daher interpoliert werden. Im Spraybereich sind Messungen der Gastemperatur über ein Thermoelement problematisch, da Benetzung des Thermoelements die Messwerte verfälscht. Deshalb sind alle Temperaturmesswerte in Achsennähe im Bereich des Sprays mit erheblichen Unsicherheiten behaftet.

Im Experiment [94] (siehe Abbildung 4.1) wird das Methanolspray unter einem Druck von 4,2 bar vertikal von oben eingedüst und mit Luft zerstäubt. Die Brennkammer hat einen quadratischen Querschnitt der Kantenlänge  $L = 0,5\ \text{m}$ . Der Durchmesser der runden Eintrittsöffnung für das Spray beträgt  $d = 4,9\ \text{mm}$ . Bei Massenflüssen von  $1,26\ \text{g/s}$  für Methanol und  $1,32\ \text{g/s}$  für Luft hat die Reynolds-Zahl einen Wert von etwa  $Re = 19000$ . Durch ein Gebläse wird ein umgebender Luftstrom mit einer Geschwindigkeit von maximal  $0,8\ \text{m/s}$  erzeugt, der im äußeren Bereich ( $y \geq 0,18\ \text{m}$ ) keine radialen Geschwindigkeitsgradienten aufweist.

#### 4.1.2 Erzeugung der Tropfenverteilung und Randbedingungen

An der Eintrittsquerschnittsfläche werden im Experiment etwa  $10^6$  Tropfen pro Sekunde gezählt. Da es aus rechentechnischen Gründen nicht möglich ist für jeden einzelnen Tropfen seine Trajektorie zu berechnen, wird für die Simulation eine Tropfenverteilung ermittelt, die in ihren Eigenschaften die gemessene Verteilung der Tropfen wieder

spiegelt [12]. Hierzu werden die Tropfen zu Tropfenpaketen mit Tropfenradien  $2,75\ \mu\text{m}$ ,  $7,75\ \mu\text{m}$ ,  $12,75\ \mu\text{m}$ ,  $17,75\ \mu\text{m}$ ,  $22,75\ \mu\text{m}$ ,  $27,75\ \mu\text{m}$ ,  $34,0\ \mu\text{m}$ ,  $41,5\ \mu\text{m}$ ,  $49,0\ \mu\text{m}$  und  $76,5\ \mu\text{m}$  zusammengefasst. An jeder radialen Position werden 500 Pakete erzeugt [12]. Die Anzahl der Tropfenpakete  $N_{p,k}^j$  der Größenklasse  $k$  am radialen Ort  $j$  ergibt sich aus

$$N_{p,k}^j = 500 \frac{N_{\text{exp},k}^j}{N_{\text{exp}}^j}, \quad (4.1)$$

wobei  $N_{\text{exp},k}^j$  die experimentell (Index: "exp") erfasste Anzahl der Tropfen pro Größenklasse  $k$  am Ort  $j$  ist und  $N_{\text{exp}}^j = \sum_k N_{\text{exp},k}^j$  die Summe aller Tropfen an dieser Position. Somit wird an jeder radialen Position  $j$  die Größenverteilung der Tropfen durch die  $N_{p,k}^j$  wieder gegeben. In den folgenden Simulationen beträgt die Anzahl der berechneten Tropfenpakete insgesamt 4479; es zeigt sich, dass Rechnungen mit mehr Tropfenpaketen keinen wesentlichen Vorteil bringen [12]. Der im Experiment gemessene Massenfluss  $\dot{m}_{\text{exp},k}^{l,j}$  der flüssigen Phase (Index: "l") durch Tropfen der Größenklasse  $k$  an der radialen Position  $j$  wird auf die erzeugten Pakete verteilt. Der Massenfluss  $\dot{m}_{p,k}^j$  je Tropfenpaket (Index: "p") und Größenklasse  $k$  an der Stelle  $j$  beträgt dann

$$\dot{m}_{p,k}^j = K_F \frac{\dot{m}_{\text{exp},k}^{l,j}}{N_{p,k}^j} = K_F \frac{\left(\frac{4}{3}\pi\rho_l r_{d,k}^3\right)^j N_{\text{exp},k}^j}{N_{p,k}^j}, \quad (4.2)$$

wobei der Korrekturfaktor  $K_F \geq 1$  eingeführt wurde, um die globale Massenerhaltung zu gewährleisten [20, 94]. Er berücksichtigt, dass im Experiment nicht alle Tropfen erfasst werden und somit der gemessene Massenfluss  $\dot{m}_{\text{exp},k}^{l,j}$  nur einen Teil des wirklichen Massenflusses der flüssigen Phase ausmacht. Würden alle Tropfen erfasst werden, so wäre  $K_F = 1$ . Es wird angenommen, dass  $K_F$  über die gesamte Eintrittsfläche und für alle Tropfengrößen konstant ist [20]. Dies ist eine Näherung, da der experimentelle Fehler der erfassten flüssigen Masse lokal variiert und damit tatsächlich  $K_F$  nicht überall konstant ist. Zur Bestimmung des Korrekturfaktors wird der gesamte in der Eintrittsebene in flüssiger Phase vorliegende Brennstoffmassenfluss  $(1 - Y_F)\dot{m}_{\text{fuel}}^l$  durch den experimentell ermittelten  $\dot{m}_{\text{exp}}^l = \sum_{k,j} \dot{m}_{\text{exp},k}^{l,j}$  dividiert [12]:

$$K_F = \frac{(1 - Y_F)\dot{m}_{\text{fuel}}^l}{\dot{m}_{\text{exp}}^l}. \quad (4.3)$$

Hierbei bezeichnet  $\dot{m}_{\text{fuel}}^l$  den Massenfluss des durch die Düse einströmenden Brennstoffs und  $Y_F$  den in der Eintrittsebene bereits verdampften Anteil. Der verdampfte Brennstoffanteil ergibt sich aus dem Verhältnis des gasförmigen Massenflusses an der Eintrittsebene  $\dot{m}_{\text{exp}}^g$  zum gesamten eingedüsten Brennstoffmassenfluss  $\dot{m}_{\text{fuel}}^l$  zu

$$Y_F = \frac{\dot{m}_{\text{exp}}^g}{\dot{m}_{\text{fuel}}^l}, \quad (4.4)$$

wobei  $\dot{m}_{\text{exp}}^g$  aus den an der Eintrittsebene gemessenen Profilen der Gasgeschwindigkeit und des Brennstoffmassenbruchs bestimmt wird:

$$\dot{m}_{\text{exp}}^g = \sum_j \left( \bar{\rho} \tilde{u} \tilde{Y}_{\text{fuel}} \right) \Big|_j A_j. \quad (4.5)$$

Mit  $A_j$  ist das Flächenelement der radialen Position  $j$  bezeichnet. Die benötigte Dichte  $\bar{\rho}$  lässt sich aus dem idealen Gasgesetz bei konstantem Druck  $p = 1$  bar mit den interpolierten Temperaturwerten der Eintrittsfläche und der mittleren Molmasse  $\bar{M} \approx \bar{M}_{\text{air}} \approx 29$  g/mol berechnen:

$$\bar{\rho}|_j = \frac{\bar{p} \bar{M}}{R \tilde{T}|_j}. \quad (4.6)$$

Wegen ähnlicher Molmassen von Luft und Brennstoff Methanol ( $\bar{M}_{\text{Methanol}} = 32$  g/mol) und wegen der geringen Menge des bereits verdampften Brennstoffs beinhaltet die Näherung, die mittlere Molmasse gleich der Molmasse von Luft zu setzen, im Vergleich zu den experimentellen Fehlern der PDPA- und der IRES-Methode nur einen vernachlässigbaren Fehler [12]. Die ermittelten Korrekturfaktoren betragen für den nicht-reaktiven Fall  $K_F^{-1} = 0,24$  und im reaktiven Fall  $K_F^{-1} = 0,12$ . Das bedeutet, dass nur 24% bzw. 12% der gesamten Tropfenmasse durch das PDPA erfasst werden.

In der numerischen Simulation werden Achsensymmetrie angenommen und bei der radialen Position  $y = 0,23$  m eine Wand als Randbedingung eingefügt. Da bei der axialen Position  $x = 7,5$  mm die ersten Messwerte vorliegen, dienen diese als Anfangswerte der Simulation. Hierbei liegen Messungen der axialen ( $\tilde{u}$ ) und radialen ( $\tilde{v}$ ) Gasgeschwindigkeit sowie der Korrelationen ( $\tilde{u}''^2$ ,  $\tilde{v}''^2$  und  $\tilde{u}''\tilde{v}''$ ) vor [20]. Ferner sind die Tropfeneigenschaften (Temperatur, Geschwindigkeit und Größe), der Methanolanteil in der Gasphase und im reagierenden Fall die Gastemperatur experimentell gegeben; im nicht reagierenden Fall wird für die Gas- und Tropfentemperatur die für das Experiment angegebene Raumtemperatur verwendet [?]. Für düsennähere Regionen werden die experimentellen Messungen mittels PDPA sehr stark fehlerbehaftet, weil dort die Spraydichte sehr hoch wird. In diesem Bereich ist die im numerischen Modell verwendete Annahme eines dünnen Sprays nicht mehr gegeben. Auch aus diesem Grund ist es sinnvoll, die Anfangswerte der Simulation nicht zu nahe an die Düse zu legen.

## 4.2 Simulation eines nicht reagierenden Methanolsprays

Zunächst wird ein verdampfendes, nicht reagierendes Methanolspray nach dem in Abschnitt 4.1.1 beschriebenen Experiment von McDonell und Samuelson [20] betrachtet. Die Simulationsergebnisse mit dem neuen RS-Modell werden mit dem Experiment

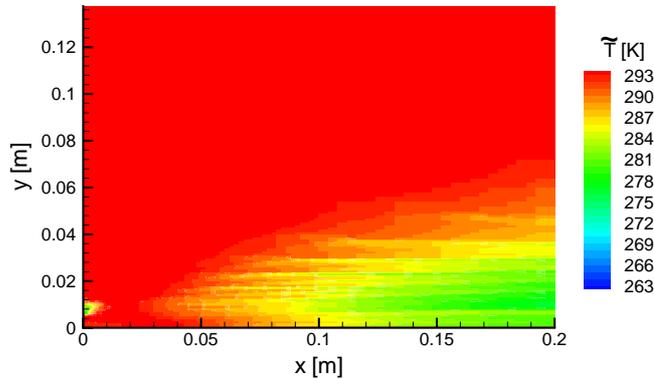


Abb. 4.2: Temperaturverteilung eines verdampfenden, nicht reagierenden Methanolsprays, mit RS-Modell

verglichen und mit Blick auf die Simulationsergebnisse von Hollmann [12], der ein  $k$ - $\varepsilon$ -Modell verwendete, bewertet. Es liegen keine Temperaturmessungen innerhalb des Strahls für den nicht reagierenden Fall nicht vor, sodass als Gas- und Tropfentemperatur die angegebene Raumtemperatur ( $T = 293 \text{ K}$ ) angenommen wird. Die tatsächliche Gastemperatur liegt wegen des schon verdampften Brennstoffs, der der Umgebung Verdampfungswärme entzogen hat, darunter.

Die simulierte Temperaturverteilung des verdampfenden Sprays ist in den Abbildungen 4.2 und 4.3 für das RS-Modell bzw.  $k$ - $\varepsilon$ -Modell dargestellt und zeigt die Abkühlung der Gasphase durch die verdampfenden Tropfen. Dabei ist die axiale Koordinate mit  $x$  und die radiale Koordinate mit  $y$  bezeichnet. Die Hauptströmungsrichtung verläuft von links nach rechts; das Spray wird auf der Symmetrieachse eingedüst. Die beiden gezeigten Temperaturverteilungen ähneln sich. Die Sättigungstemperatur des Gases bei einem Methanoldampfanteil von 3 % liegt bei ca.  $\tilde{T} \approx 270 \text{ K}$ , was nach [82] bestätigt wird. Allerdings liefert das  $k$ - $\varepsilon$ -Modell niedrigere Minimaltemperaturen als das RS-Modell. Dies ist dadurch zu erklären, dass beim RS-Modell ein im Vergleich zum  $k$ - $\varepsilon$ -Modell erhöhter räumlicher Transport der physikalisch-chemischen Größen erfolgt und dadurch ein schnellerer Temperatúrausgleich stattfindet.

Einen Überblick über die Entwicklung des Sauterradius  $r_S$  an verschiedenen axialen Positionen im Spray gibt Abbildung 4.4. Die aus den Modellrechnungen beider Modelle gewonnenen Daten unterliegen dabei sehr starken Schwankungen, die auf statistische Einflüsse zurückzuführen sind: Die Anzahl der das jeweils betrachtete Kontrollvolumen durchquerenden Tropfen ist meist sehr gering und erheblichen Schwankungen unterworfen. Deshalb wirkt es sich erheblich auf die Berechnung des Sauterradius und der Bilanz der Verdampfungsgeschwindigkeit aus, ob ein Tropfen das betrachtete oder nur

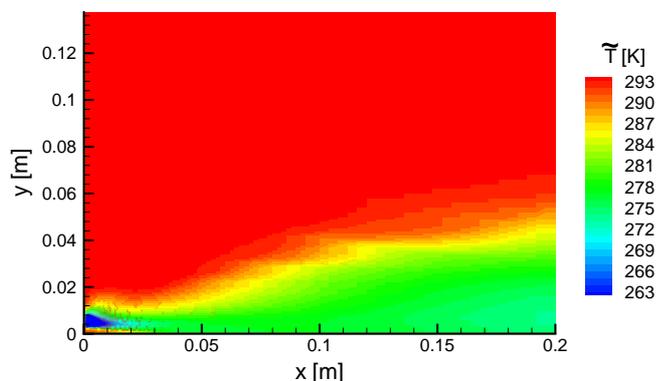


Abb. 4.3: Temperaturverteilung eines verdampfenden, nicht reagierenden Methanolsprays, mit  $k$ - $\epsilon$ -Modell

das angrenzende Kontrollvolumen durchquert. Insbesondere in den Randbereichen des Sprays, wo nur noch wenige Tropfen gezählt werden und typischerweise relativ große Tropfen vorherrschen, sind diese Effekte besonders deutlich und führen für benachbarte Zellen zu großen Sprüngen in den berechneten Werten. Die dargestellten Kurven des Sauterradius sind daher polynomiale Fitkurven der aus den Modellrechnungen gewonnenen Daten [12]. Ihr Vergleich mit den experimentellen Daten besitzt deshalb hauptsächlich qualitativen Wert. Auch für andere in den Simulationen berechnete physikalische Größen sind die statistischen Schwankungen der Tröpfchen von Bedeutung: Sie können zu erheblichen Unstetigkeiten in den Sprayquelltermen dieser Größen führen und somit starke Sprünge in den jeweiligen Profilen verursachen.

Sowohl für das RS-Modell als auch für das  $k$ - $\epsilon$ -Modell bestätigen die gefitteten Kurven des Sauterradius die experimentellen Werte in düsen nahen Bereichen. Für eine Entfernung von der Düse von  $x = 25$  mm, aber auch bei  $x = 75$  mm und  $x = 100$  mm werden über fast den ganzen radialen Bereich zu kleine Sauterradien durch die Modelle angegeben. Das bedeutet, dass in der Simulation mehr kleinere Tropfen vorhanden sind, also die Tropfen im Modell schneller verdampfen, als dies im Experiment der Fall ist. Dieses Verhalten schlägt sich auch in den Profilen der Methanoldampfkonzentration nieder (siehe Abbildungen 4.5, 4.6): Die berechneten Profile der Sauterradien korrelieren mit denen des Methanolmassenbruches. In Achsennähe stimmen die numerischen Methanolmassenbrüche für  $x=100$  mm recht gut mit den experimentellen Werten überein, bei  $x=25$  mm liegen sie etwa 15 % (beim RSM) bzw. 20 % (beim  $k$ - $\epsilon$ -Modell) darunter. Die simulierten Profile des Methanoldampfes verbreitern sich durch die höhere Verdampfungsrate schneller als im Experiment beobachtet. Erst in den äußeren Randbereichen des Sprays werden die im Modell ausgegebenen Sauterradien größer

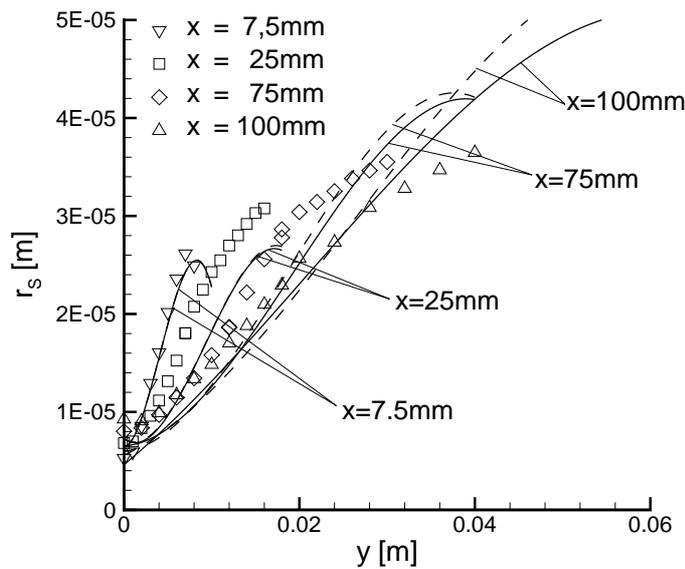


Abb. 4.4: Radiale Profile der Sauterradien  $r_s$  eines verdampfenden, nicht reagierenden Methanolsprays an verschiedenen axialen Positionen  $x$  im Vergleich. Symbole: Experiment [20], durchgezogene Linien: RS-Modell und gestrichelte Linien:  $k$ - $\varepsilon$ -Modell [12]

als die gemessenen. Dort treten nur noch relativ wenige große Tropfen auf, während die kleineren praktisch alle verdampft sind.

Die Profile der axialen ( $\tilde{u} \equiv \tilde{u}_1$ ) und radialen Geschwindigkeit ( $\tilde{v} \equiv \tilde{u}_2$ ) stimmen an der axialen Position  $x = 25$  mm gut mit den experimentellen Werten überein (Abbildung 4.7). Im Einklang mit dem Experiment ist bei der radialen Position  $y \approx 10$  mm eine durch Turbulenz verursachte Unregelmäßigkeit im Abfall sowohl der Axial- als auch der Radialgeschwindigkeit erkennbar: Während sich die Verringerung der Axialgeschwindigkeit kurzfristig verlangsamt, ist im Profil der Radialgeschwindigkeit ein kurzer Anstieg und ein schwach ausgebildetes lokales Maximum zu sehen. Diese Unregelmäßigkeit zeigt sich auch nochmal in den Profilen der Korrelationen (Abbildung 4.13).

Für größere Entfernungen von der Düse (Abbildung 4.8,  $x = 100$  mm) liefern beide Simulationen zu geringe Axialgeschwindigkeiten  $\tilde{u}$  nahe der Symmetrieachse und eine zu langsame Abnahme im  $\tilde{u}$ -Profil für wachsende radiale Positionen  $y$ , sodass in äußeren Gebieten die Axialgeschwindigkeit wieder sehr gut passt und im Bereich  $0,015 < y < 0,03$  sogar ganz leicht zu hoch ausfällt. Es fällt auf, dass die aus dem RS-Modell berechneten Axialgeschwindigkeiten schlechter mit den experimentellen Werten übereinstimmen als die aus dem  $k$ - $\varepsilon$ -Modell. Die Profile der Radialgeschwindigkeiten aus der Simulation haben die gleiche Form wie beim Experiment, jedoch werden die positiven Beträge viel zu gering angegeben. Im äußeren Bereich stimmen sie dagegen mit den experimentellen Werten wieder überein. Zur Erklärung dieser Diskrepanzen wird im Folgenden eine genauere Untersuchung des Profils der axialen Gasgeschwindigkeit  $\tilde{u}$  auf der Symmetrieachse ( $y = 0$  mm) durchgeführt.

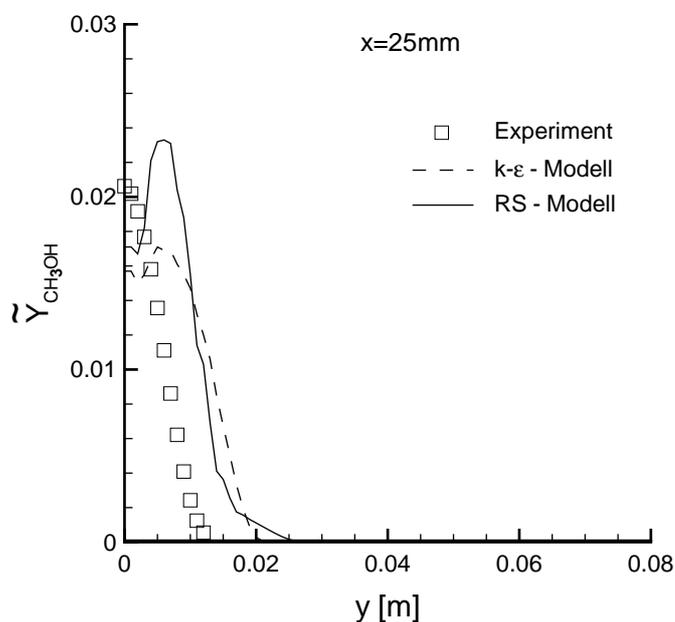


Abb. 4.5: Radiale Profile der Massenbrüche  $\tilde{Y}_{\text{CH}_3\text{OH}}$  eines verdampfenden, nicht reagierenden Methanolsprays bei der axialen Position  $x = 25 \text{ mm}$  im Vergleich. Symbole: Experiment [20], durchgezogene Linien: RS-Modell und gestrichelte Linien:  $k\text{-}\varepsilon$ -Modell [12]

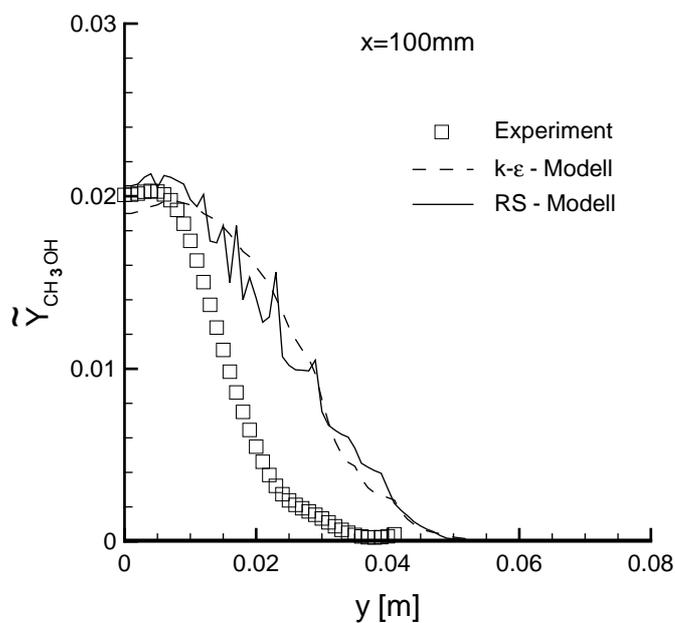


Abb. 4.6: Radiale Profile der Massenbrüche  $\tilde{Y}_{\text{CH}_3\text{OH}}$  eines verdampfenden, nicht reagierenden Methanolsprays bei der axialen Position  $x = 100 \text{ mm}$  im Vergleich. Symbole: Experiment [20], durchgezogene Linien: RS-Modell und gestrichelte Linien:  $k\text{-}\varepsilon$ -Modell [12]

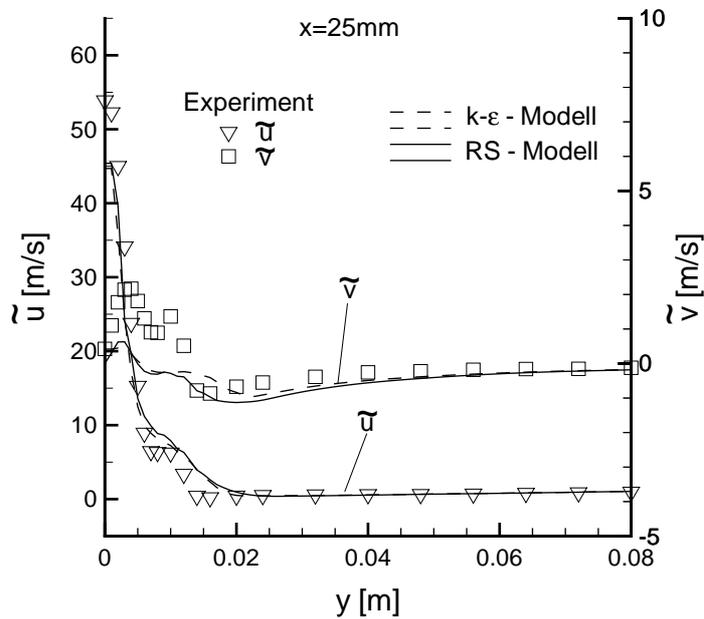


Abb. 4.7: Axiale ( $\tilde{u}$ ) und radiale ( $\tilde{v}$ ) Gasgeschwindigkeit eines verdampfenden, nicht reagierenden Methanolsprays bei der axialen Position  $x = 25\text{ mm}$  im Vergleich. Symbole: Experiment [20], durchgezogene Linien: RS-Modell und gestrichelte Linien:  $k-\varepsilon$ -Modell [12]

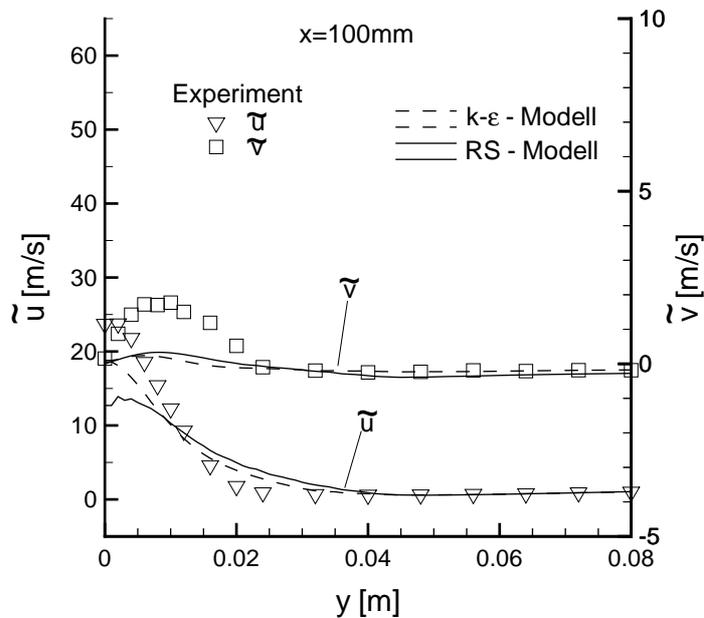


Abb. 4.8: Axiale ( $\tilde{u}$ ) und radiale ( $\tilde{v}$ ) Gasgeschwindigkeit eines verdampfenden, nicht reagierenden Methanolsprays bei der axialen Position  $x = 100\text{ mm}$  im Vergleich. Symbole: Experiment [20], durchgezogene Linien: RS-Modell und gestrichelte Linien:  $k-\varepsilon$ -Modell [12]

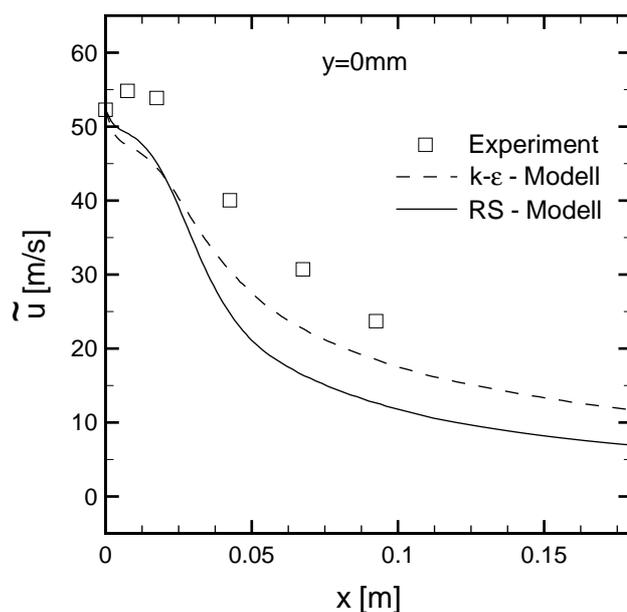


Abb. 4.9: Axiale Gasgeschwindigkeit  $\tilde{u}$  eines verdampfenden, nicht reagierenden Methanolsprays auf der Symmetrieachse im Vergleich. Symbole: Experiment [20], durchgezogenen Linien: RS-Modell und gestrichelte Linien:  $k$ - $\varepsilon$ -Modell [12]

Betrachtet man das  $\tilde{u}$ -Profil auf der Symmetrieachse (Abbildung 4.9), so sieht man, dass die experimentellen Werte zunächst einen Anstieg aufweisen, der weder vom RS-Modell noch vom  $k$ - $\varepsilon$ -Modell wieder gegeben wird; in beiden Modellen fallen die Profile sofort stark ab, wobei der Abfall im  $k$ - $\varepsilon$ -Modell zunächst noch steiler ausfällt, als beim RS-Modell, im weiteren Verlauf aber flacher wird und näher bei den experimentellen Werten verläuft. Die Gründe für den viel zu schnellen Abfall der Axialgeschwindigkeit auf der Achse und die damit einhergehende Verbreiterung ihrer radialen Profile sind in den gemachten Annahmen des Modells zu suchen. Insbesondere die Annahme eines konstanten Drucks führt in Düsennähe über seinen Zusammenhang mit der Dichte und über die Kontinuitätsgleichung zu großen Fehlern in den Geschwindigkeiten. Betrachtet man die Kontinuitätsgleichung (2.81) im stationären Fall

$$\operatorname{div} (\bar{\rho} \tilde{\vec{u}}) = \bar{L}_{v,\text{fuel}}, \quad (4.7)$$

so kann der Anstieg der Axialgeschwindigkeit auf der Symmetrieachse bei gleichzeitigen positiven radialen Gradienten der Radialgeschwindigkeit (d.h.  $\operatorname{div} \tilde{\vec{u}} > 0$ ), wie im Experiment beobachtet, nur mit großen Sprayquelltermen oder starken negativen Dichtegradienten einhergehen. Da die Verdampfungsquellterme wie oben beschrieben im Modell tendenziell überschätzt werden, liegt der Fehler in den Dichtegradienten. Diese werden im Modell unterschätzt, was durch die Berechnung der Dichte über die ideale Gasgleichung (Gleichung (2.37)) mit der Annahme eines konstanten Drucks zu erklären ist. Eine Untersuchung der Größenordnungen der Quellterme durch Druckgradienten in den Impulsgleichungen (2.85) zeigt, dass dort ihr Einfluss vernachlässigbar gering bleibt. Eine weitere Fehlerursache im Modell, die sich besonders in der Nähe

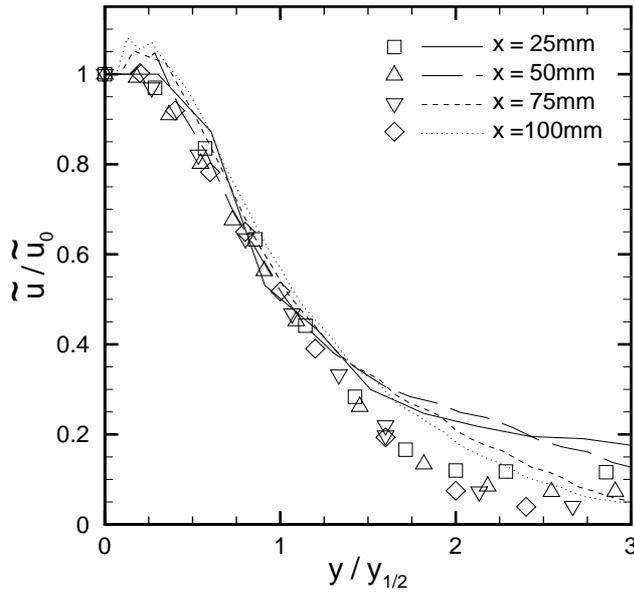


Abb. 4.10: Normierte axiale Gasgeschwindigkeit  $\tilde{u}/\tilde{u}_0$  eines turbulenten Methanolsprays über der normierten radialen Koordinate  $y/y_{1/2}$  im Vergleich. Symbole: Experiment [20] und Linien: RS-Modell

der Düse niederschlägt, ist, dass dort die Annahme eines dünnen Sprays nicht als erfüllt angesehen werden kann und Wechselwirkungen der Tropfen untereinander nicht berücksichtigt werden.

Die im betrachteten Fall relativ zum  $k$ - $\varepsilon$ -Modell größere Abweichung der Axialgeschwindigkeiten aus dem RS-Modell erklärt sich, wenn man die entsprechenden Quellterme

$$\underbrace{-\operatorname{div}(\overline{\rho \tilde{u}'' \tilde{u}''})}_{\text{RS-Modell}} \cong \underbrace{\operatorname{div}\left(C_D \overline{\rho} \frac{\tilde{k}^2}{\tilde{\varepsilon}} \operatorname{grad} \tilde{u}\right)}_{k-\varepsilon\text{-Modell}} \quad (4.8)$$

in der Impulsgleichung (2.85) näher untersucht. Im RS-Modell enthalten diese Quellterme Ableitungen der Korrelationen  $\tilde{u}_i'' \tilde{u}_j''$ . Diese liefern einen wesentlich stärkeren Beitrag als die Gradienten der Geschwindigkeit  $\tilde{u}$  und der turbulenten kinetischen Energie  $k$  beim  $k$ - $\varepsilon$ -Modell. Während sie im RS-Modell die Axialgeschwindigkeit auf der Achse stärker verringern, ist die radiale Komponente der Geschwindigkeit größer als im  $k$ - $\varepsilon$ -Modell. Die Umverteilung der kinetischen Energie auf die verschiedenen Richtungen ist im RS-Modell deutlich größer als beim  $k$ - $\varepsilon$ -Modell [1]. Durch Berücksichtigung der Druckgradienten könnte die Anpassung der Axialgeschwindigkeiten verbessert werden.

Die Halbwertsbreite  $y_{1/2}$  des Strahls ist definiert durch den Wert der radialen Position  $y$ , an dem die Axialgeschwindigkeit  $\tilde{u}$  auf die Hälfte ihres Maximalwertes  $\tilde{u}_0$  auf der Symmetrieachse abgefallen ist:

$$y_{\frac{1}{2}} := y \Big|_{\tilde{u} = \frac{1}{2} \tilde{u}_0} . \quad (4.9)$$

In Abbildung 4.10 sind radiale Profile der auf  $\tilde{u}_0$  normierten Axialgeschwindigkeit  $\tilde{u}$

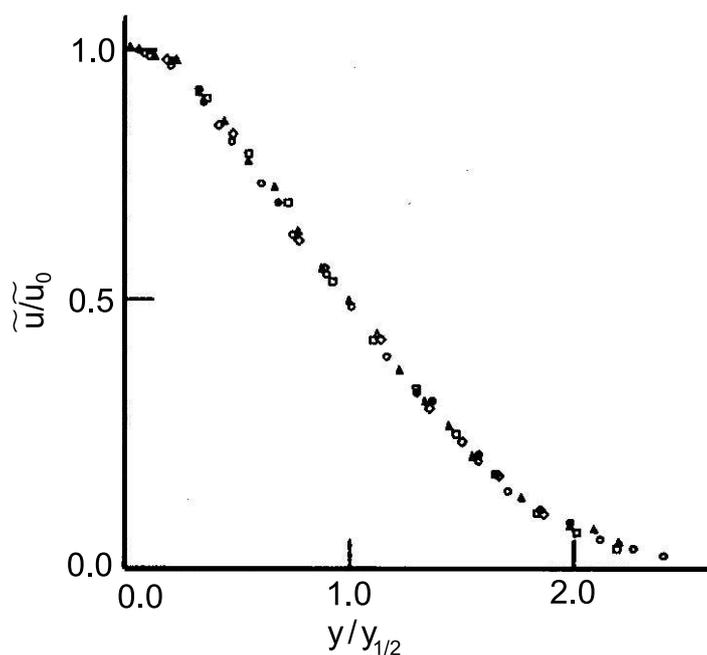


Abb. 4.11: Normierte axiale Gasgeschwindigkeit  $\tilde{u}/\tilde{u}_0$  eines turbulenten, axialsymmetrischen Strahls über der normierten radialen Koordinate  $y/y_{1/2}$  nach Experimenten von Wygnanski und Fiedler [98]

über der radialen Koordinate  $y$ , die mit der Halbwertsbreite  $y_{1/2}$  des Strahls an der jeweiligen axialen Position normiert ist, aufgetragen. Für alle axiale Positionen ergibt sich eine einheitliche Kurve, wobei die simulierten Profile den experimentellen Werten entsprechen. Wie aus den voran gegangenen Abbildungen 4.7, 4.8 und 4.9 hervorgeht, fällt die Axialgeschwindigkeit auf der Symmetrieachse ab, während sich gleichzeitig das Geschwindigkeitsprofil verbreitert. Die Grafik 4.10 zeigt, dass dabei die Form der radialen  $\tilde{u}$ -Profile erhalten bleibt; sie sind selbstähnlich [1]. Die gleiche Eigenschaft haben Wygnanski und Fiedler [98] in ihrem Experiment an einem runden, turbulenten Gasstrahl mit Reynolds-Zahl  $Re \approx 10^5$  gefunden (siehe Abbildung 4.11).

Im Unterschied zum  $k$ - $\varepsilon$ -Modell liefert das RS-Modell zusätzlich Aussagen über die eben schon erwähnten Korrelationen  $\widetilde{u_i'' u_j''}$ . In den Abbildungen 4.12, 4.13 und 4.14 sind die Geschwindigkeitsvarianzen  $\sqrt{\widetilde{u''^2}}$  und  $\sqrt{\widetilde{v''^2}}$  im Vergleich mit den experimentell ermittelten Werten dargestellt. Sowohl bei den axialen Profilen auf der Symmetrieachse (Abbildung 4.12), als auch bei den radialen Profilen bei  $x = 100$  mm (Abbildung 4.14) sind die Übereinstimmungen recht gut. Bei den axialen Profilen fehlt ein Messpunkt genau dort, wo das Maximum der Varianzen in der Simulation liegt, wodurch ein Vergleich erschwert wird. Beim Vergleich der radialen Profile an der Position  $x = 25$  mm (Abbildung 4.13) wird die Varianz der Radialgeschwindigkeit deutlich überschätzt, während sie für die Axialgeschwindigkeit in Achsennähe sehr gut zum Experiment passt. Das zweite Maximum der experimentellen Daten bei  $y \approx 10$  mm korreliert mit den Eigenschaften der radialen Geschwindigkeitsprofile in Abbildung 4.7 und ist in den numerischen Profilen nicht ausgeprägt; es wird dort jedoch durch ein Plateau in der fallenden

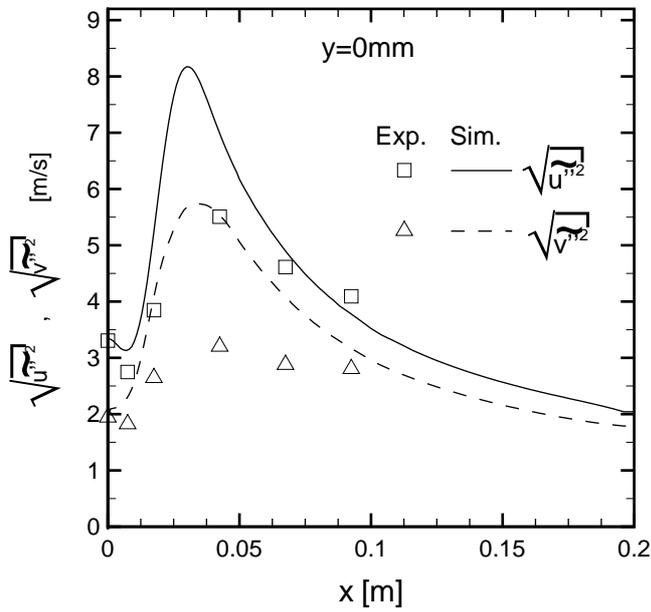


Abb. 4.12: Geschwindigkeitsvarianzen  $\sqrt{u'^2}$  und  $\sqrt{v'^2}$  eines verdampfenden, nicht reagierenden Methanolsprays auf der Symmetrieachse im Vergleich. Symbole: Experiment [20] und Linien: RS-Modell

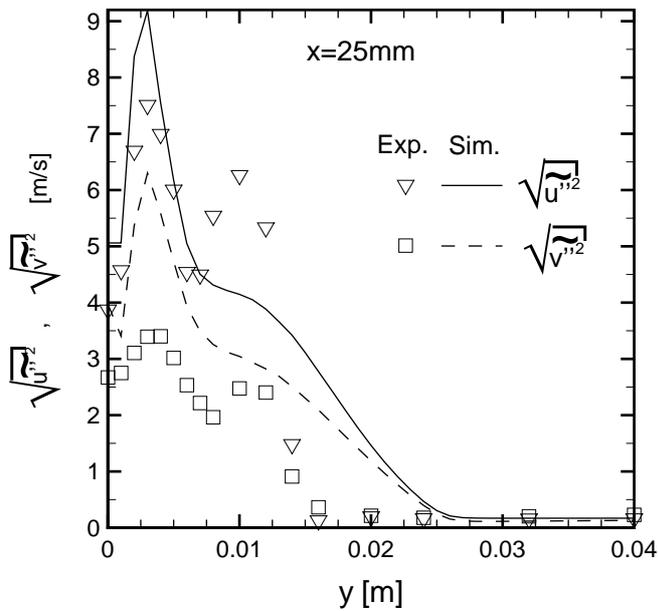


Abb. 4.13: Geschwindigkeitsvarianzen  $\sqrt{u'^2}$  und  $\sqrt{v'^2}$  eines verdampfenden, nicht reagierenden Methanolsprays an der axialen Position  $x = 25\text{mm}$  im Vergleich. Symbole: Experiment [20] und Linien: RS-Modell

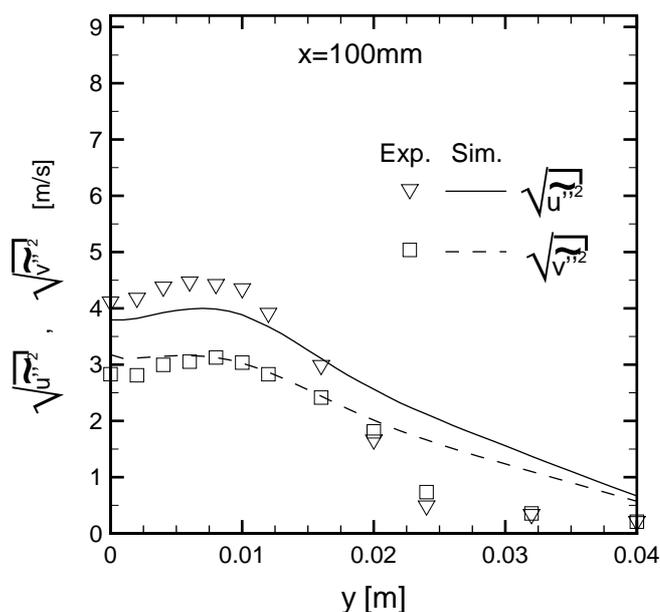


Abb. 4.14: Geschwindigkeitsvarianzen  $\sqrt{u''^2}$  und  $\sqrt{v''^2}$  eines verdampfenden, nicht reagierenden Methanolsprays an der axialen Position  $x = 100$  mm im Vergleich. Symbole: Experiment [20] und Linien: RS-Modell

Flanke angedeutet.

In Abbildung 4.15 sind die Korrelationen eines turbulenten, axialsymmetrischen Gasstrahls bei voll ausgebildeter Turbulenz nach einem Experiment von Hussein *et al.* [99] gezeigt. Dabei sind die Fitkurven der auf die Axialgeschwindigkeit  $\tilde{u}_0$  normierten Reynolds-Spannungen  $\widetilde{u''_i u''_j}$  über der mit der Strahlhalbwertsbreite  $y_{1/2}$  normierten radialen Koordinate  $y$  aufgetragen. Die Normierung auf die Hauptachsengeschwindigkeit  $\tilde{u}_0$  bzw. auf die Strahlhalbwertsbreite  $y_{1/2}$  ermöglicht einen Vergleich der Daten aus unterschiedlichen Experimenten und Konfigurationen. Zum Vergleich dieser Kurven mit denen aus der Simulation des Methanolsprays sind in Abbildung 4.16 dieselben Größen in der gleichen Darstellungsweise für die axiale Position  $x = 100$  mm gezeigt. Da sich die Daten in 4.15 auf einen reinen Gasstrahl beziehen, ist der Vergleich mit den berechneten Profilen in 4.16 nur qualitativer Natur. Damit der Einfluss des Sprays nicht mehr allzu bedeutend ist, wurde mit  $x = 100$  mm ein recht großer Abstand zur Düse für den Vergleich der Profile gewählt. Für alle dargestellten Größen besitzen die abgebildeten Kurven übereinstimmende Verläufe; auch die Positionen und Höhen der Maxima in den Profilen von  $\widetilde{u''^2}/\tilde{u}_0^2$  und  $\widetilde{u''v''}/\tilde{u}_0^2$  entsprechen sich.

Die relative Größe der Scherspannungen kann durch den Korrelationskoeffizienten [1]

$$\rho_{uv} := \frac{\widetilde{u''v''}}{\sqrt{\widetilde{u''^2 v''^2}}} \quad (4.10)$$

oder durch das Verhältnis  $\widetilde{u''v''}/\tilde{k}$  quantifiziert werden. Beide Größen haben einen ähnlichen Verlauf und sind in den Abbildungen 4.17 und 4.18 an den axialen Positionen

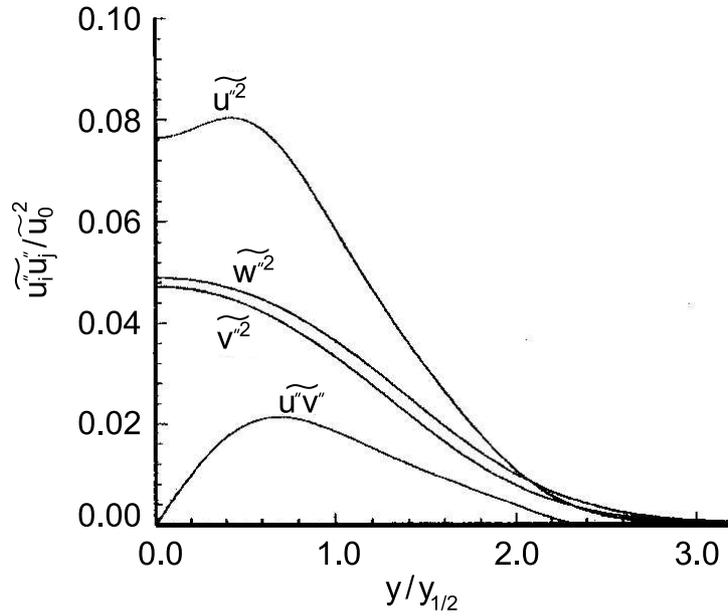


Abb. 4.15: Auf die Hauptachsengeschwindigkeit  $\widetilde{u}_0$  normierte Korrelationen  $\widetilde{u_i'' u_j''} / \widetilde{u_0^2}$  eines turbulenten, axialsymmetrischen Strahls. Radiale Fitkurven aus experimentellen Daten von Hussein [99]

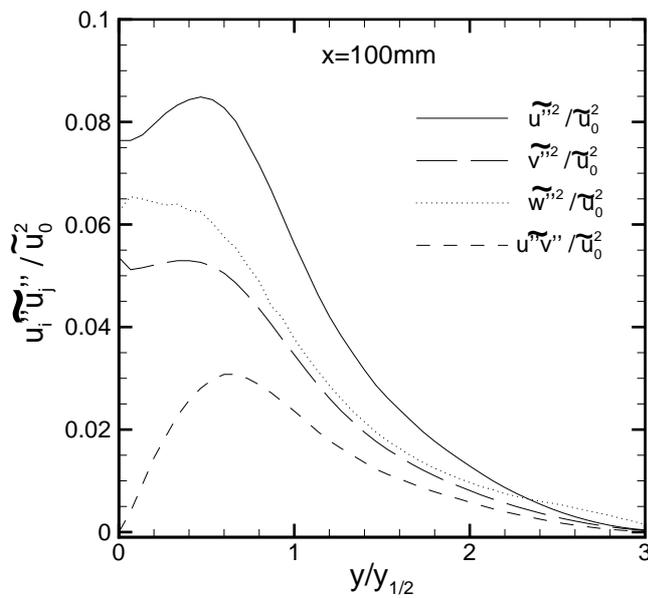


Abb. 4.16: Auf die Hauptachsengeschwindigkeit  $\widetilde{u}_0$  normierte Korrelationen  $u_i'' u_j'' / \widetilde{u_0^2}$  eines turbulenten Methanolsprays

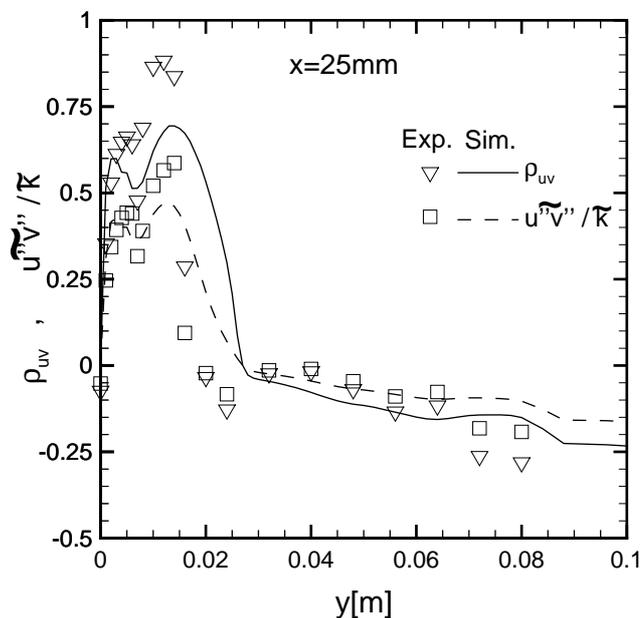


Abb. 4.17: Korrelationskoeffizient  $\rho_{uv}$  und  $\widetilde{u''v''}/\widetilde{k}$  eines verdampfenden, nicht reagierenden Methanolsprays an der axialen Position  $x = 25\text{ mm}$  im Vergleich. Symbole: Experiment [20] und Linien: RS-Modell

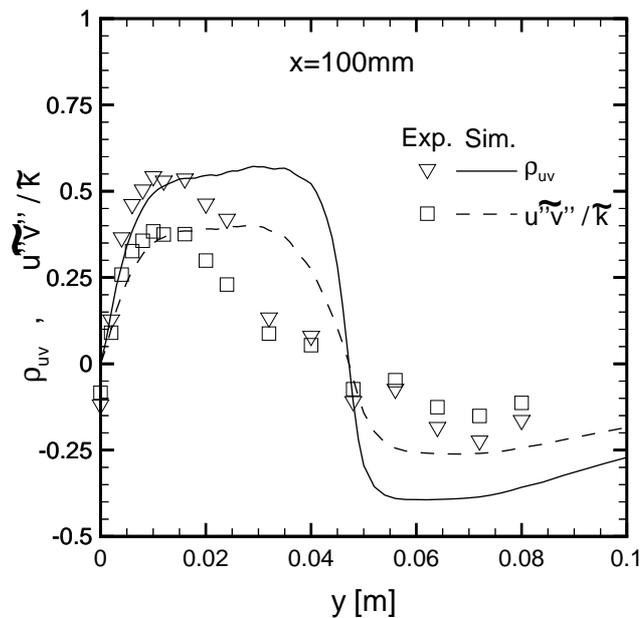


Abb. 4.18: Korrelationskoeffizient  $\rho_{uv}$  und  $\widetilde{u''v''}/\widetilde{k}$  eines verdampfenden, nicht reagierenden Methanolsprays an der axialen Position  $x = 100\text{ mm}$  im Vergleich. Symbole: Experiment [20] und Linien: RS-Modell

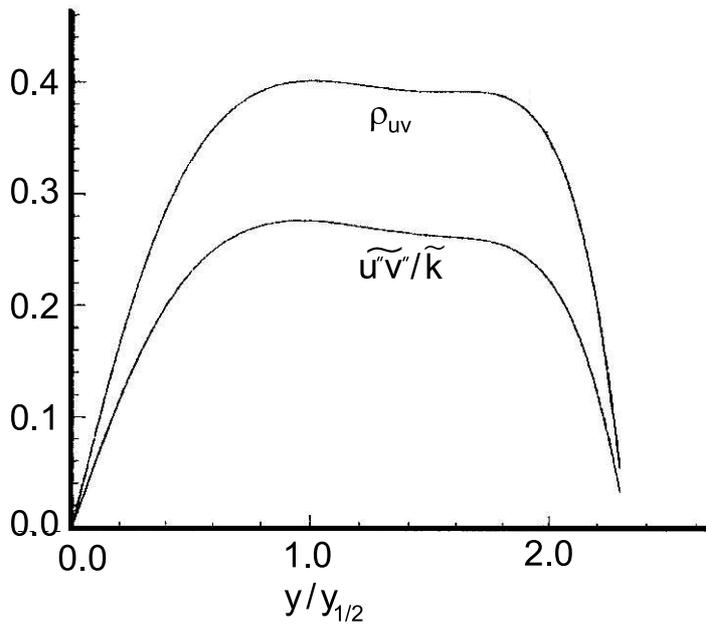


Abb. 4.19: Korrelationskoeffizient  $\rho_{uv}$  und  $\widetilde{u''v''}/\widetilde{k}$  eines turbulenten, axialsymmetrischen Strahls. Radiale Fitkurven aus experimentellen Daten von [99]

$x = 25$  mm bzw.  $x = 100$  mm für Simulation und Experiment dargestellt. Beide Kurven steigen in ihrem radialen Verlauf in Übereinstimmung mit dem Experiment zunächst sehr steil an. An der axialen Position  $x = 25$  mm sind sowohl im Experiment wie auch in der Simulation zwei deutlich ausgeprägte Maxima der Profile erkennbar, die mit den in Abbildung 4.7 gezeigten Geschwindigkeitsprofilen korrelieren. Während sich das Niveau des ersten Maximums nur knapp unterhalb den experimentellen Daten befindet, liegt das Niveau des zweiten Maximums etwa 20% unterhalb den experimentellen Werten. Die Scherspannungen sind positiv, wo  $\partial\tilde{u}/\partial y < 0$  ist. Das lokale Minimum bei  $y \approx 10$  mm korrespondiert mit der flacheren radialen Steigung von  $\tilde{u}$  an dieser Stelle (siehe Abbildung 4.7). Bei  $x = 100$  mm (Abbildung 4.18) bildet sich in der Simulation ein ausgedehntes Plateau bei Werten von  $\rho_{uv} \approx 0,55$  bzw.  $\widetilde{u''v''}/\widetilde{k} \approx 0,4$  aus, das bis zu einer radialen Position leicht oberhalb der doppelten Strahlhalbwertsbreite von  $2y_{1/2} \approx 38$  mm reicht. Danach fallen beide Profile steil ab bis auf Werte von etwa  $-0,25$  für  $\widetilde{u''v''}/\widetilde{k}$  bzw. auf ca.  $-0,4$  für  $\rho_{uv}$ . Anstieg und Maximalwert der Profile sind in Übereinstimmung mit dem Experiment, jedoch ist dort das ausgeprägte Plateau nicht gegeben. Im Experiment ist die fallende Kante nicht so deutlich ausgeprägt, wie in der Simulation: Der Abfall der Werte beginnt schon bei etwas kleineren radialen Positionen, ist jedoch nicht so steil wie in der Simulation, sodass der Übergang zu negativen Werten in Simulation und Experiment in etwa an der gleichen radialen Position geschieht.

An der axialen Position  $x = 25$  mm ist das Plateau weniger stark ausgeprägt; die Werte von  $\rho_{uv}$  und  $\widetilde{u''v''}/\widetilde{k}$  bewegen sich auf gleichem Niveau wie bei  $x = 100$  mm,

jedoch ist bei  $y \approx 10$  mm eine lokale Vertiefung auf hohem Niveau sichtbar. Dieses lokale Minimum korrespondiert mit den oben beschriebenen Unregelmäßigkeiten in den Geschwindigkeitsprofilen. Auch hier fallen anschließend die Werte von  $\rho_{uv}$  und  $\widetilde{u''v''}/\widetilde{k}$  steil ab bis leicht unterhalb der Nulllinie.

In Abbildung 4.19 sind radiale Fitkurven des Korrelationskoeffizienten  $\rho_{uv}$  und von  $\widetilde{u''v''}/\widetilde{k}$  aus den experimentellen Daten von Hussein *et al.* [99] für einen achsensymmetrischen turbulenten Gasstrahl dargestellt. Wegen des gewählten großen Abstands zur Düse ist, wie oben erwähnt, ein qualitativer Vergleich mit dem turbulenten verdampfenden Methanolspray in Abbildung 4.18 möglich. Die sich entsprechenden Formen und Verläufe der Grafen in den beiden Abbildungen 4.18 und 4.19 verifizieren die Funktionalität des entwickelten RS-Modells.

Insgesamt liefert das neu formulierte und hier verwendete RS-Modell für turbulente Sprays sehr ähnliche Ergebnisse wie das von Hollmann [12] entwickelte  $k$ - $\varepsilon$ -Modell für turbulente Sprays: Die Axialgeschwindigkeiten auf der Symmetrieachse werden im RS-Modell schlechter vorhergesagt, was wie oben erläutert, aus der Annahme eines konstanten Drucks resultiert. Keine wesentlichen Unterschiede ergeben sich in der Qualität der Aussagen über die Anteile des verdampfenden Brennstoffsprays in der Gasphase, die Übereinstimmung in den Radialgeschwindigkeiten ist verbessert. Bei den zusätzlich berechneten Korrelationen  $\widetilde{u''_i u''_j}$  findet sich eine sehr gute Übereinstimmung mit den experimentellen Daten von McDonell und Samuelsen.

Auch der Vergleich mit Experimenten an Gasstrahlen [98] und [99] liefert für große Abstände zur Düse, wo der Einfluss des Sprays relativ gering ist, gute Resultate.

## Simulation eines nicht reagierenden Methanolsprays mit Rezirkulation

Der im obigen Kapitel 4.2 beschriebene Fall eines nicht reagierenden Methanolsprays enthält keine Rezirkulationszonen. Um dennoch die Möglichkeit der Simulation eines turbulenten Sprays mit Wirbel zu demonstrieren, wurden die Anfangsbedingungen des nicht reagierenden Methanolsprays so verändert, dass Rezirkulation auftritt. Hierzu wurden die Anfangsprofile ( $x = 0$  mm) der Gasgeschwindigkeiten wie in Abbildung 4.20 dargestellt modifiziert: Die Radialgeschwindigkeit wird über den gesamten Einlassbereich als Null angenommen. Für die Axialgeschwindigkeit wird ein Rechteckprofil verwendet, was zu hohen radialen Geschwindigkeitsgradienten führt. Wegen den vom Experiment abweichenden Anfangsbedingungen ist ein Vergleich mit den experimentellen Profilen nicht aussagekräftig. Es werden hier daher exemplarisch einige Unterschiede zur Simulation des Experiments von McDonell ohne Rezirkulationszonen (Kapitel 4.2) aufgezeigt.

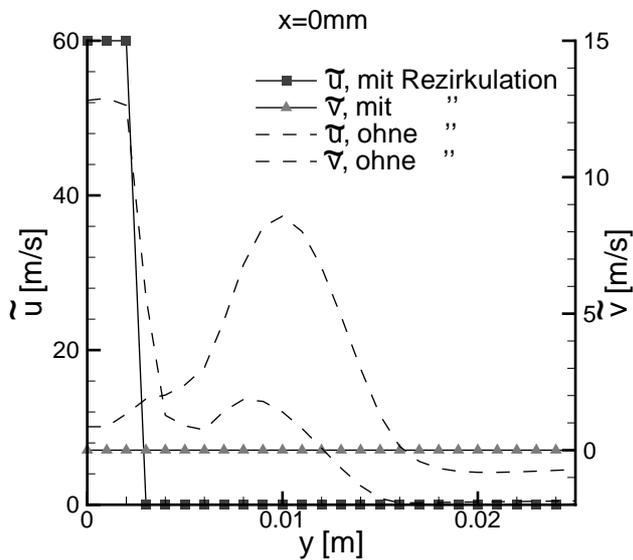


Abb. 4.20: Anfangsprofile der axialen ( $\tilde{u}$ ) und radialen ( $\tilde{v}$ ) Gasgeschwindigkeit: Gestrichelte Linien: wie in Kapitel 4.2 ohne Rezirkulationszone, durchgezogene Linien: modifizierte Profile, sodass eine Rezirkulationszone entsteht

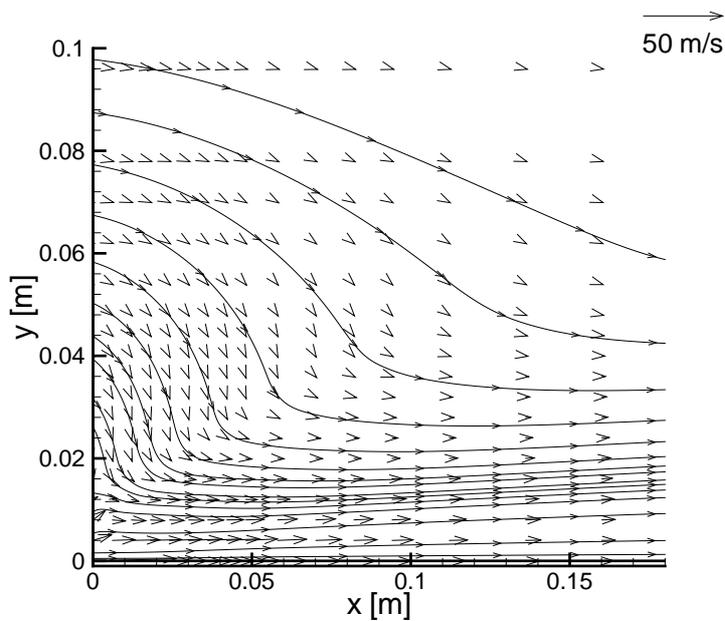


Abb. 4.21: Gasgeschwindigkeitsfeld eines turbulenten nicht reagierenden Methanolsprays ohne Rezirkulationszone

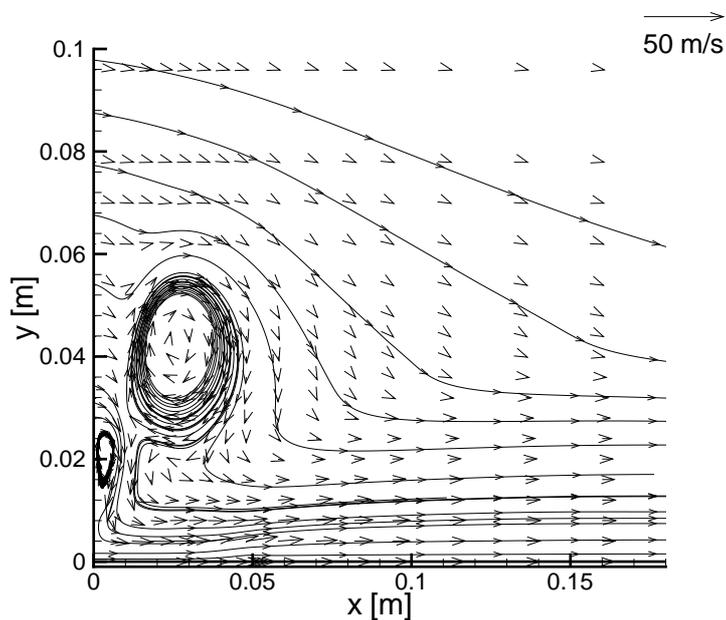


Abb. 4.22: Gasgeschwindigkeitsfeld eines turbulenten nicht reagierenden Methanolsprays mit Rezirkulationszone

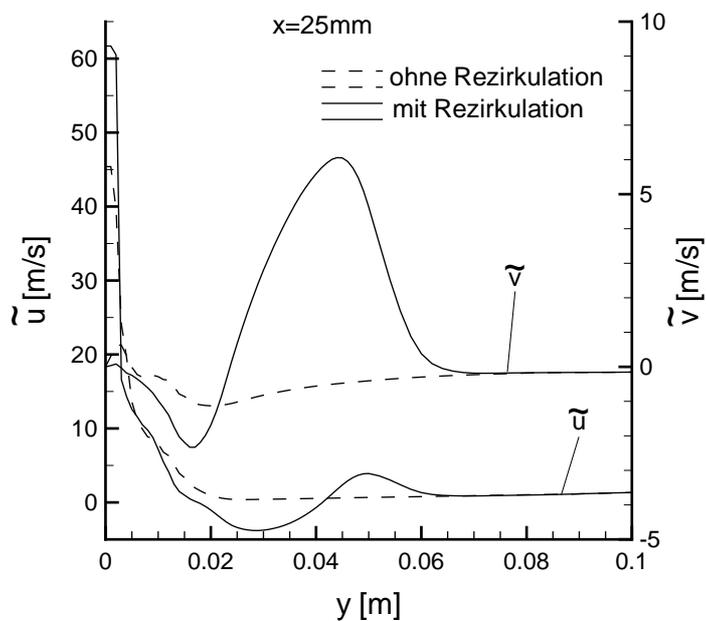


Abb. 4.23: Axiale  $\tilde{u}$  und radiale  $\tilde{v}$  Gasgeschwindigkeit eines verdampfenden, nicht reagierenden Methanolsprays mit und ohne Rezirkulationszone bei der axialen Position  $x = 25$  mm im Vergleich. Durchgezogene Linien: RS-Modell mit Rezirkulation und gestrichelte Linien: RS-Modell ohne Rezirkulation

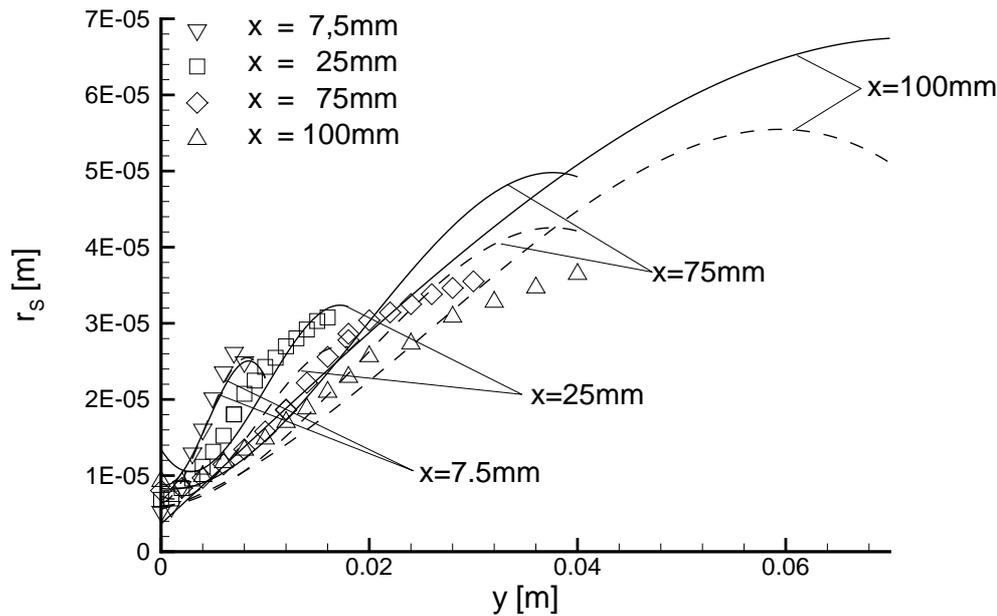


Abb. 4.24: Radiale Profile der Sauterradien  $r_s$  eines verdampfenden, nicht reagierenden Methanolsprays mit und ohne Rezirkulation an verschiedenen axialen Positionen  $x$  im Vergleich. Symbole: Experiment [20], durchgezogene Linien: RS-Modell mit Rezirkulation und gestrichelte Linien: RS-Modell ohne Rezirkulation

In Abbildung 4.21 ist das Geschwindigkeitsfeld der Simulation ohne Wirbel dargestellt. Im Unterschied dazu erkennt man in Abbildung 4.22, dass die hohen Geschwindigkeitsgradienten in der Einlassebene der Simulation mit modifizierten Anfangsgeschwindigkeiten zu Wirbelbildung nahe des Einlasses führen. Die Geschwindigkeitsprofile bei einem radialen Schnitt durch einen Wirbel zeigen charakteristische Merkmale auf. Im Unterschied zur Simulation ohne Wirbel ist insbesondere der Bereich negativer Axialgeschwindigkeit  $\tilde{u}$  im Wirbelbereich zu nennen (siehe Abbildung 4.23). Das Profil der Radialgeschwindigkeit  $\tilde{v}$  durch den Wirbel zeigt deutlich ausgeprägte Extrema mit Vorzeichenwechsel in  $\tilde{v}$ , was im Fall ohne Wirbel nicht auftritt.

Anhand von Abbildung 4.24 lässt sich der Einfluss der Wirbel auf die Entwicklung des Sauterradius  $r_s$  erkennen: Zum einen werden durch die Wirbel große Tropfen schneller nach außen transportiert; desweiteren wird die Verdampfung durch die Wirbel beeinflusst: Durch die erhöhte Verdampfung nimmt die Anzahl der kleinen Tropfen schneller ab als die der großen. Deshalb ist der Sauterradius bei der Simulation mit Rezirkulation in den äußeren Bereichen deutlich größer als ohne Rezirkulation. Auch beim Vergleich der radialen Profile des Methanolmassenbruchs (siehe Abbildung 4.25) wird der durch die Wirbel erhöhte radiale Transport und die erhöhte Verdampfung des Methanols deutlich, was sich in dem verbreiterten Profil niederschlägt.

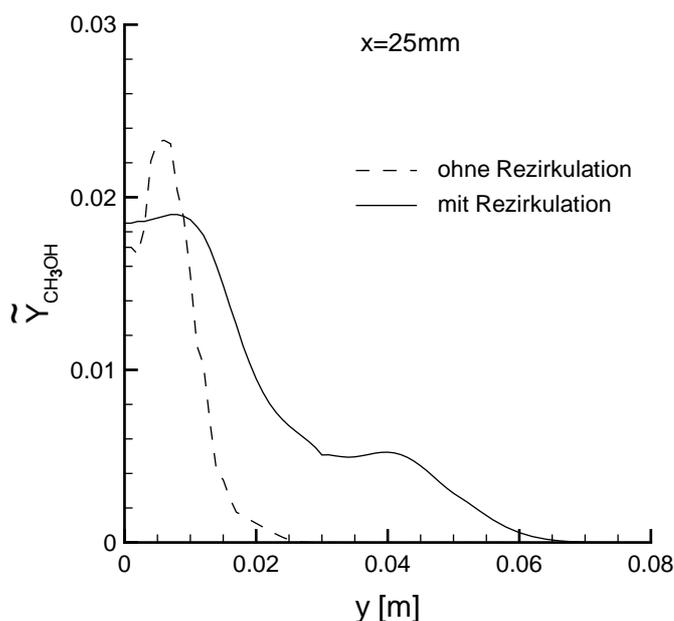


Abb. 4.25: Radiale Profile der Massenbrüche  $\tilde{Y}_{\text{CH}_3\text{OH}}$  eines verdampfenden, nicht reagierenden Methanolsprays mit und ohne Rezirkulation bei der axialen Position  $x = 25\text{mm}$  im Vergleich. Durchgezogene Linien: RS-Modell mit Rezirkulation und gestrichelte Linien: RS-Modell ohne Rezirkulation

### 4.3 Simulation eines reagierenden Methanolsprays

Im Folgenden wird eine turbulente Methanol-Sprayflamme simuliert, die von McDonell und Samuelsen [20] am gleichen Versuchsaufbau wie das nicht reaktive Methanolspray (Kapitel 4.2) untersucht wurde. Bei der Simulation turbulenter Flammen mit Hilfe des Flamelet-Modells muss zunächst seine Anwendbarkeit untersucht werden. Die Voraussetzungen hierzu wurden schon von Hollmann [12] für die hier simulierte Sprayflamme geprüft: In Abbildung 4.26 sind die Reaktionsbedingungen zur Klassifizierung der simulierten Flamme als Punkte in das Peters-Diagramm (Kapitel 2.4.3, Abbildung 2.10) eingezeichnet. Es zeigt sich, dass die Flamme vollständig im Flamelet-Bereich liegt, wodurch die Anwendung des Reaktionsmodells gerechtfertigt ist.

Der Sauterradius des im Experiment eingedüsten Sprays beträgt ca.  $23\mu\text{m}$ . Nach den in Kapitel 2.4.4 beschriebenen Auswahlkriterien werden 14 monodisperse laminare Sprayflammen für einen Anfangstropfenradius von  $r_{d,1} = 10\mu\text{m}$  und 21 für einen Anfangstropfenradius von  $r_{d,2} = 25\mu\text{m}$  eingesetzt. Damit werden zwar im Wesentlichen die im Experiment vorkommenden Tropfengrößen abgedeckt, bezüglich der Beschreibung der Abhängigkeit der Flammenstruktur von Tropfengröße und Tropfengeschwindigkeit kann dieser Ansatz nur eine Näherung sein. Für beide Tropfengrößen decken die eingesetzten Bibliotheken einen Bereich der Flammenstreckungen von  $a = 55\text{s}^{-1}$  bis zur Verlöschung ab. Diese wird bei den Tropfen von  $r_{d,1} = 10\mu\text{m}$  bei  $a = 1330\text{s}^{-1}$  erreicht und bei den großen Tropfen bei  $a = 2000\text{s}^{-1}$ . Bei einem Äquivalenzverhältnis von  $E_R = 3$  werden Mischungsbrüche von bis zu  $\tilde{\xi}_C = 0,4$  erreicht, was ausreicht, die in der Flamme auftretenden Mischungsbrüche abzudecken.

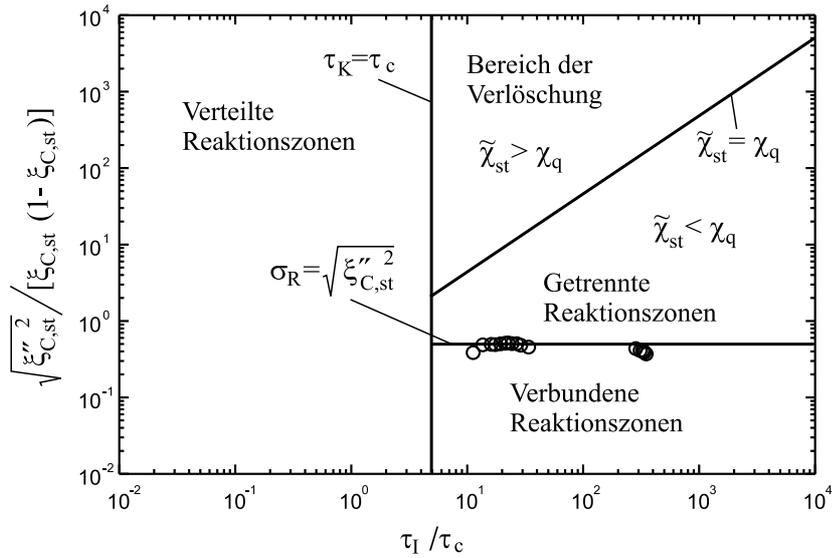


Abb. 4.26: Die im Peters–Diagramm eingezeichneten Punkte identifizieren die simulierte Flamme [12]

Analog zum nicht reagierenden Fall (Kapitel 4.2) werden die Anfangsbedingungen auch für den reagierenden Fall aus den experimentellen Daten von McDonell und Samuelsen [20] erzeugt [12].

Die Abbildungen 4.27 und 4.28 zeigen Konturplots der Gastemperatur für eine Simulation mit dem RS–Modell bzw. mit dem  $k$ - $\varepsilon$ -Modell. Beide liefern gleiche Charakteristika und gleiche Form der Sprayflamme. In beiden Fällen sind in radialer Richtung zwei Temperaturmaxima erkennbar, wie es für Sprayflammen typisch ist. Die Abhebehöhe der Flamme von der Düse liegt in beiden Simulationen bei etwa 5 mm.

In den Abbildungen 4.29, 4.30 und 4.31 sind neben den Temperaturprofilen auch die Profile des Mischungsbruchs  $\tilde{\xi}_C$  sowie der Massenbrüche der Spezies OH und  $\text{CO}_2$  an verschiedenen axialen Positionen dargestellt. Ein Vergleich der Ergebnisse des RS–Modells mit dem  $k$ - $\varepsilon$ -Modell ergibt, dass beide sehr ähnliche Aussagen über den Verlauf der Profile machen. Die Profile der Temperatur und des OH–Massenbruches an den verschiedenen axialen Positionen machen die Verbreiterung der Reaktionszone mit wachsender axialer Koordinate deutlich. An allen axialen Schnittpositionen sind bei beiden Modellrechnungen zwei Hauptreaktionszonen erkennbar, die durch die beiden Temperaturmaxima gekennzeichnet sind. Die Vorhersagen der Simulationen beider Modelle stimmen dabei sowohl in den Positionen als auch in den Höhen der Maxima recht gut überein.

Der Vergleich mit den experimentellen Temperaturwerten gestaltet sich schwieriger: Bei  $x = 25$  mm (Abbildung 4.29) liegen in der Umgebung der Symmetrieachse keine Temperturmessungen vor, sodass das Experiment dort keine Bestätigung der maximalen Gastemperaturen in der Reaktionszone liefert.

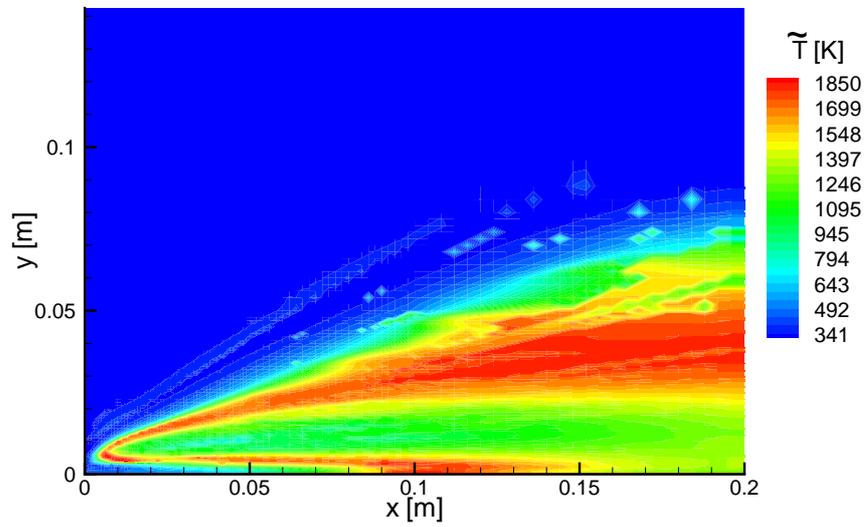


Abb. 4.27: Temperaturverteilung eines reagierenden Methanolsprays mit RS-Modell

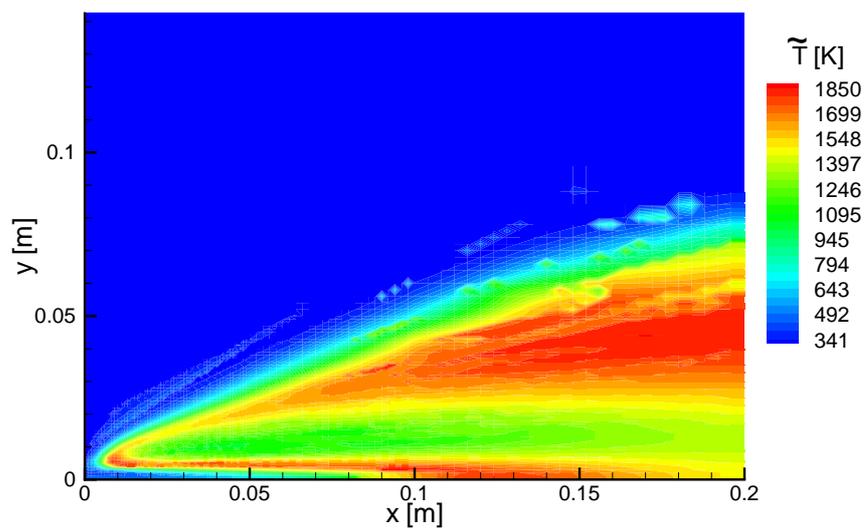


Abb. 4.28: Temperaturverteilung eines reagierenden Methanolsprays, mit  $k-\varepsilon$ -Modell

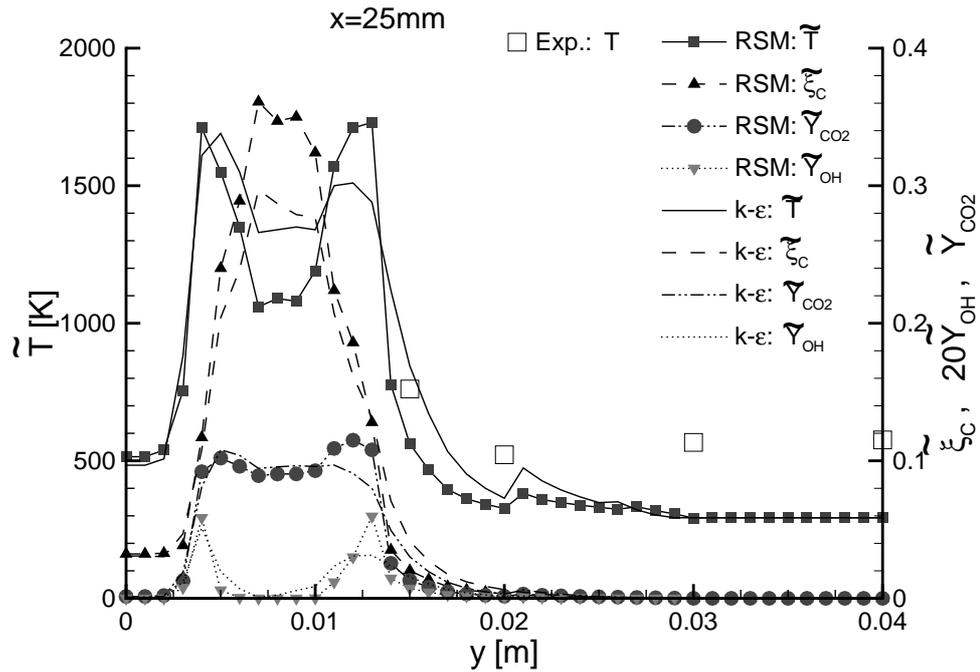


Abb. 4.29: Radiale Profile der Gastemperatur  $\tilde{T}$ , des Mischungsbruchs  $\tilde{\xi}_{\text{C}}$  sowie der Massenbrüche  $\tilde{Y}_{\text{CO}_2}$  und  $\tilde{Y}_{\text{OH}}$  eines reagierenden Methanolsprays bei  $x = 25$  mm: Linien mit Symbolen: RS-Modell, Linien:  $k$ - $\epsilon$ -Modell und Symbole: Experiment [20]

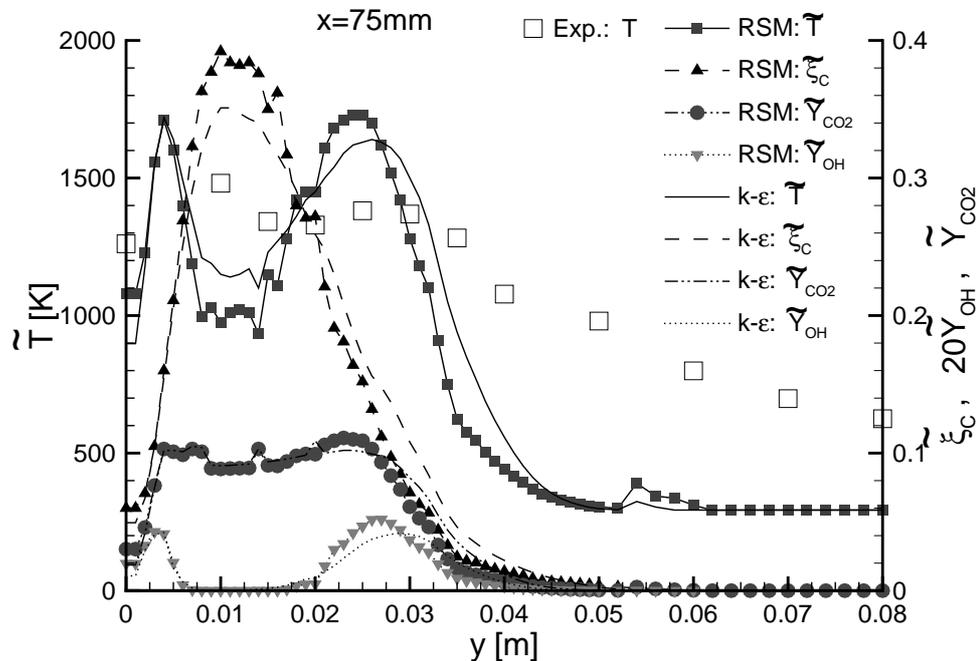


Abb. 4.30: Radiale Profile der Gastemperatur  $\tilde{T}$ , des Mischungsbruchs  $\tilde{\xi}_{\text{C}}$  sowie der Massenbrüche  $\tilde{Y}_{\text{CO}_2}$  und  $\tilde{Y}_{\text{OH}}$  eines reagierenden Methanolsprays bei  $x = 75$  mm: Linien mit Symbolen: RS-Modell, Linien:  $k$ - $\epsilon$ -Modell und Symbole: Experiment [20]

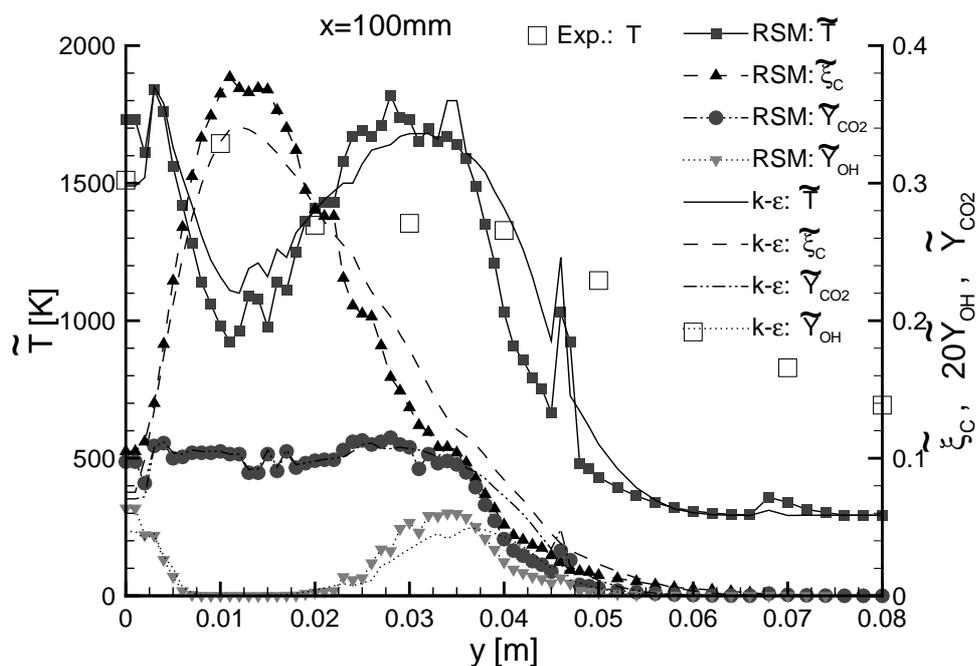


Abb. 4.31: Radiale Profile der Gastemperatur  $\tilde{T}$ , des Mischungsbruchs  $\tilde{\xi}_C$  sowie der Massenbrüche  $\tilde{Y}_{\text{CO}_2}$  und  $\tilde{Y}_{\text{OH}}$  eines reagierenden Methanolsprays bei  $x = 100\text{ mm}$ : Linien mit Symbolen: RS-Modell, Linien:  $k-\varepsilon$ -Modell und Symbole: Experiment [20]

Für  $x = 75\text{ mm}$  (Abbildung 4.30) zeigen auch die experimentellen Werte zwei Maxima der Gastemperatur und bestätigen die grundlegende Form der Sprayflamme mit ihren zwei Hauptreaktionszonen. Allerdings sind sie im Experiment nicht so stark ausgeprägt, wie in den Simulationen: Die beiden gemessenen Maximalwerte fallen etwas niedriger aus und auch der Temperaturabfall zwischen den Maxima ist nicht so deutlich wie in den Rechnungen. Jedoch findet sich eine qualitative Übereinstimmung in der Form der Profile; auch die Größenordnung der Temperaturpeaks sowie deren Positionen sind in den Simulationen korrekt wieder gegeben. Während das  $k-\varepsilon$ -Modell auf der Symmetrieachse einen um ca.  $\Delta\tilde{T} \approx 250\text{ K}$  zu niedrigen Wert angibt, trifft die Simulation mit RS-Modell den experimentellen Wert deutlich besser.

An der axialen Position bei  $x = 100\text{ mm}$  (Abbildung 4.31) liegen die simulierte Temperaturwerte auf der Symmetrieachse bis zu ca. 15% über dem gemessenen Wert, wobei das RS-Modell noch einen größeren Wert als das  $k-\varepsilon$ -Modell liefert. Der zweite Temperaturpeak ist hier bei den experimentellen Werten nicht ersichtlich; statt dessen findet sich dort ein schwach ausgeprägtes Plateau auf hohem Temperaturniveau. An allen axialen Positionen sagen sowohl  $k-\varepsilon$ -Modell als auch RS-Modell für große Abstände zur Symmetrieachse im Vergleich zum Experiment zu kleine Temperaturen voraus.

Die Kurven der Massenbrüche von OH und  $\text{CO}_2$  folgen an allen axialen Positionen

jeweils dem Temperaturverlauf. Das OH–Radikal dient als Indikator für chemische Reaktionszonen; seine Maxima markieren, wie schon die Gastemperatur, die Hauptreaktionszonen. Höhere Temperaturwerte korrelieren mit höheren OH–Massenbrüchen, wie jeweils an der zweiten Hauptreaktionszone (besonders bei  $x = 25$  mm Abbildung 4.29, aber auch bei  $x = 75$  mm und  $x = 100$  mm, Abbildungen 4.30 und 4.31) zu sehen ist. Dort sagt das RS–Modell gegenüber dem  $k$ - $\varepsilon$ -Modell eine höhere Maximaltemperatur voraus, was sich in einer ebenfalls höheren OH–Konzentration niederschlägt. Ebenso zeigen die CO<sub>2</sub>–Profile dieselbe Korrelation zum  $\tilde{T}$ -Profil. Während die Massenbruchwerte des OH–Radikals zwischen den Hauptreaktionszonen bei den radialen Profilen an allen axialen Positionen auf Null gehen, ist in den CO<sub>2</sub>–Profilen lediglich ein leichter Abfall zwischen den beiden Maxima erkennbar.

Die Mischungsbruchkurve durchläuft in den Abbildungen 4.29, 4.30 und 4.31 jeweils zweimal den stöchiometrischen Wert von  $\tilde{\xi}_C = \tilde{\xi}_{C,st} = 0,135$ . In diesen Bereichen finden sich stets die Temperaturmaxima und somit die Hauptreaktionszonen. Dazwischen besitzt die  $\tilde{\xi}_C$ -Kurve ein Maximum; es liegt bei allen radialen Schnittposition im Bereich zwischen  $\tilde{\xi}_C \in (0,3;0,4)$ . Dabei ist der durch das RS–Modell berechnete Wert wegen der relativ zum  $k$ - $\varepsilon$ -Modell größeren Durchmischung der physikalischen Größen jeweils höher als beim  $k$ - $\varepsilon$ -Modell. Die Unterschiede sind bei  $x = 25$  mm am größten und werden mit wachsendem Abstand von der Düse geringer. Die Mischungsbruchmaxima korrespondieren mit den lokalen Temperaturminima zwischen den Hauptreaktionszonen. Die Ursache liegt darin, dass die Mischungsbruchmaxima Bereiche mit brennstoffreichem Gemisch markieren, was bedeutet, dass dort sehr viel Methanol verdampft und somit wegen der benötigten Verdampfungsenthalpie lokal die Temperatur sinkt. Außerdem wird anhand von Abbildungen 4.32, 4.33 und 4.34 deutlich, dass die hohe Gastemperatur in der ersten Hauptreaktionszone die Verdampfungsgeschwindigkeit ( $\bar{L}_v$ ) beschleunigt; die zur Verdampfung benötigte Energie wird der Gasphase entzogen, was eine Abkühlung zur Folge hat.

Die Abbildungen 4.32, 4.33 und 4.34 zeigen zur Charakterisierung des Sprays neben den radialen Profilen des Verdampfungsterms  $\bar{L}_v$  auch den Verlauf des Sauterradius  $r_S$  an verschiedenen axialen Positionen  $x$ . Wie auch schon für das nicht reagierende Spray beschrieben (Abschnitt 4.2) sind die gezeigten Kurven polynomiale Fitkurven aus den Simulationsdaten. Insbesondere in Randgebieten des Sprays führt die geringe Anzahl der dort vorhandenen Tröpfchen zu enormen statistischen Schwankungen. Dies wird dadurch verstärkt, dass bei der experimentellen Erfassung der Tropfen mittels PD-PA Messungen mit zu geringer Tropfenzahl und Messungen von nicht–runden Tropfen verworfen werden, was vor allem in den Randgebieten des Sprays mit geringer Tropfendichte auftritt. Die quantitative Aussagekraft der experimentellen und numerischen Ergebnisse ist dort gering. Der Vergleich mit dem Experiment hat deshalb vor allem

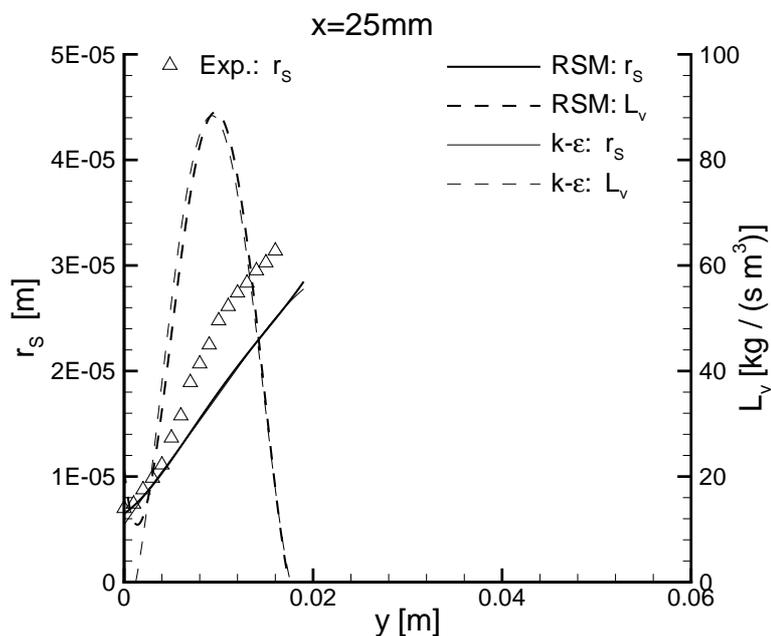


Abb. 4.32: Radiale Profile des Sauterradius  $r_s$  und der Verdampfungsgeschwindigkeit  $\bar{L}_v$  eines reagierenden Methanolsprays bei  $x = 25\text{ mm}$ : fette Linien: RS-Modell, dünne Linien:  $k-\epsilon$ -Modell und Symbole: Experiment [20]

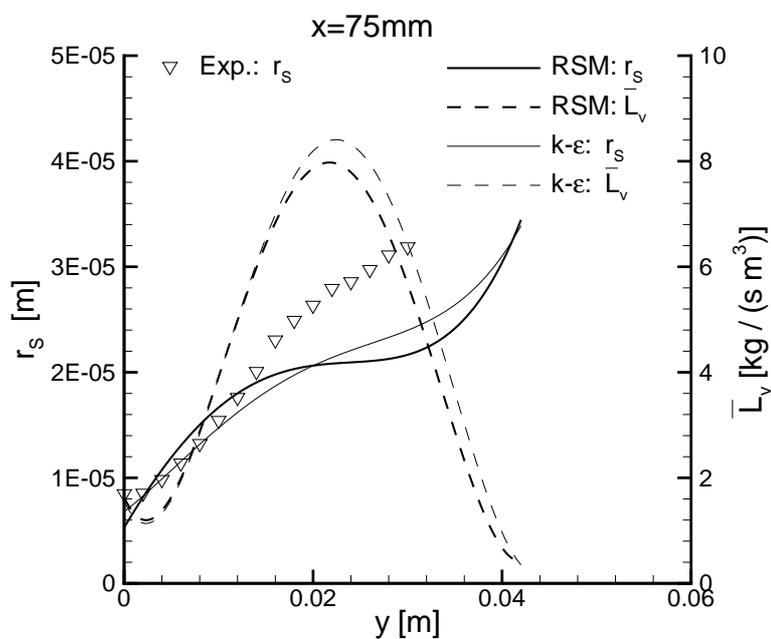


Abb. 4.33: Radiale Profile des Sauterradius  $r_s$  und der Verdampfungsgeschwindigkeit  $\bar{L}_v$  eines reagierenden Methanolsprays bei  $x = 75\text{ mm}$ : fette Linien: RS-Modell, dünne Linien:  $k-\epsilon$ -Modell und Symbole: Experiment [20]

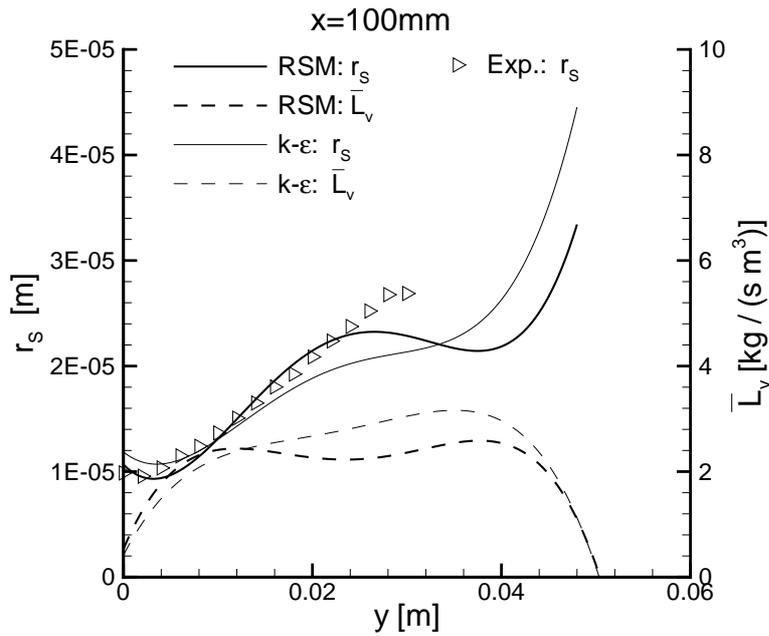


Abb. 4.34: Radiale Profile des Sauterradius  $r_s$  und der Verdampfungsgeschwindigkeit  $\bar{L}_v$  eines reagierenden Methanolsprays bei  $x = 100\text{ mm}$ : fette Linien: RS-Modell, dünne Linien:  $k-\varepsilon$ -Modell und Symbole: Experiment [20]

in diesen Randregionen nur qualitativen Charakter.

Wie im Experiment beobachtet, wächst auch der berechnete Sauterradius mit steigendem Abstand zur Symmetrieachse. Da die kleinen Tropfen recht schnell verdampfen, überwiegt bei wachsenden radialen Positionen die Anzahl der größeren Tropfen. In Achsennähe ist die Übereinstimmung der beiden Modelle mit dem Experiment für alle  $x$ -Positionen gut. Während bei  $x = 25\text{ mm}$  noch kein wesentlicher Unterschied zwischen den Profilen des RS-Modells und des  $k-\varepsilon$ -Modells ersichtlich ist, kann man bei  $x = 75\text{ mm}$  und vor allem bei  $x = 100\text{ mm}$  sehen, dass die Profile des RS-Modells meist deutlich näher an den experimentellen Werten verlaufen. Für größere radiale Positionen  $y$  werden jedoch die Modellaussagen und insbesondere die experimentellen Daten der PDPA-Messung unzuverlässiger (siehe oben) und die Diskrepanz zu den Messwerten wächst. Die Modelle sagen dort tendenziell kleinere Tropfengrößen voraus. Bei der Betrachtung der Spraygrenzen fällt auf, dass in beiden Modellrechnungen bei  $x = 75\text{ mm}$  und  $x = 100\text{ mm}$  große Tropfen die beiden Reaktionszonen deutlich durchqueren und im umgebenden Gas verdampfen. Im Experiment tauchen keine Tropfen außerhalb der Flamme mehr auf.

In den Abbildungen 4.35, 4.36 und 4.37 sind die radialen Profile der axialen Gasgeschwindigkeit abgebildet. Die Symbole stellen die experimentellen Werte aus [20] dar, die Linien zeigen die numerischen Resultate des RS-Modells (durchgezogen) sowie des  $k-\varepsilon$ -Modells (gestrichelt). An der axialen Position  $x = 25\text{ mm}$  stimmen experimentelle und simulierte Ergebnisse in unmittelbarer Achsennähe überein. Der radiale Abfall der Axialgeschwindigkeit fällt in beiden Simulationen nicht so steil aus, wie im Expe-

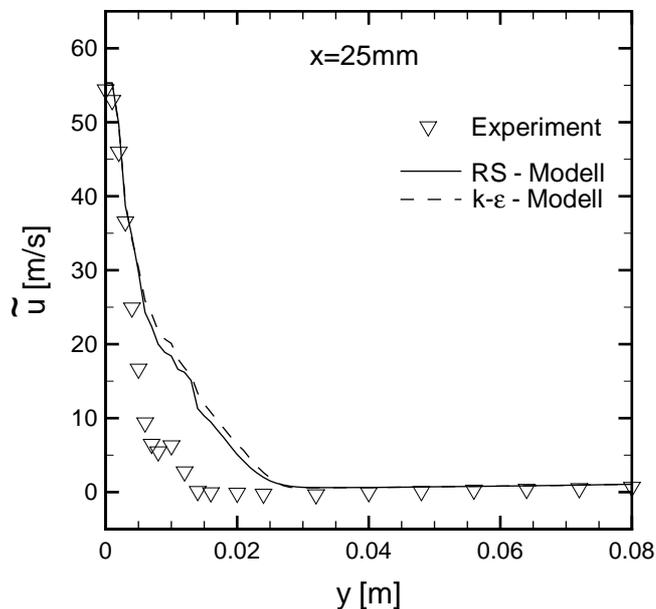


Abb. 4.35: Radiale Profile der axialen Gasgeschwindigkeit  $\tilde{u}$  eines reagierenden Methanolsprays bei der axialen Position  $x = 25$  mm. Symbole: Experiment [20], durchgezogene Linien: RS-Modell und gestrichelte Linien:  $k-\varepsilon$ -Modell

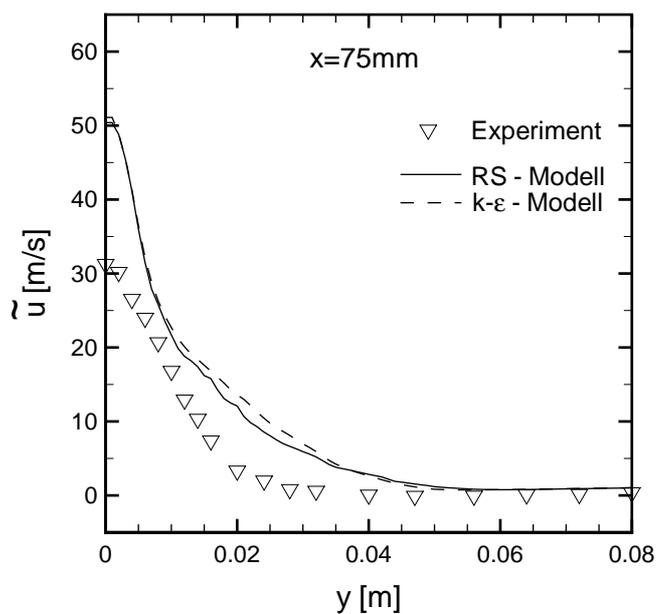


Abb. 4.36: Radiale Profile der axialen Gasgeschwindigkeit  $\tilde{u}$  eines reagierenden Methanolsprays bei der axialen Position  $x = 75$  mm. Symbole: Experiment [20], durchgezogene Linien: RS-Modell und gestrichelte Linien:  $k-\varepsilon$ -Modell

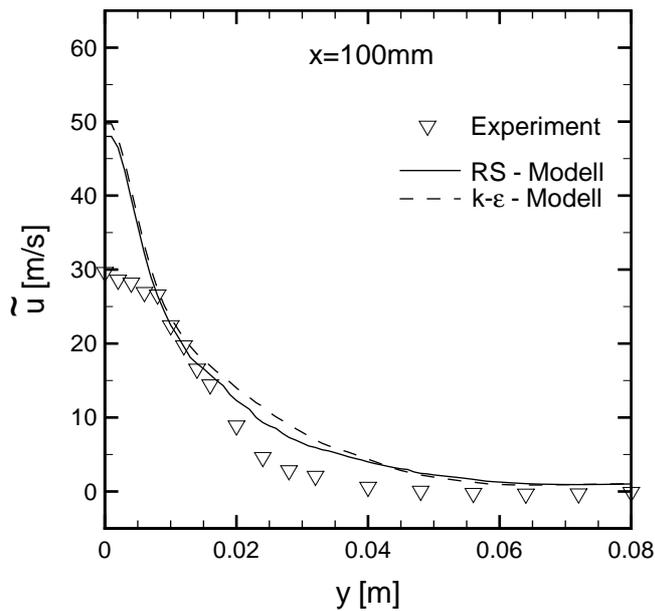


Abb. 4.37: Radiale Profile der axialen Gasgeschwindigkeit  $\tilde{u}$  eines reagierenden Methanolsprays bei der axialen Position  $x = 100$  mm. Symbole: Experiment [20], durchgezogene Linien: RS-Modell und gestrichelte Linien:  $k$ - $\epsilon$ -Modell

riment, sodass dort deutliche Abweichungen auftreten. Für die beiden Positionen bei  $x = 75$  mm und  $x = 100$  mm fällt auf, dass die Hauptachsengeschwindigkeit im Experiment wesentlich stärker abgefallen ist, als dies in den Simulationen wieder gegeben wird; in unmittelbarer Achsennähe sind die numerisch ermittelten Geschwindigkeitswerte deutlich zu groß, jedoch findet man schon ab einer geringen Entfernung zur Symmetrieachse, insbesondere bei  $x = 100$  mm, wieder eine gute Übereinstimmung. Hollmann [12] stellte in Untersuchungen fest, dass die Diskrepanz der Axialgeschwindigkeiten auf der Achse bei Verwendung von Gasflammenbibliotheken an Stelle der hier verwendeten Sprayflammenbibliotheken sehr stark reduziert ist. Offensichtlich muss der Impulsübertrag des Sprays auf die Gasphase bei Benutzung von Sprayflammenbibliotheken überschätzt werden. Tolpadi [100] führte unter Verwendung eines vergleichbaren Spraymodells ebenfalls Simulationen des Experiments von McDonnell und Samuelsen [20] durch und erhielt ebenso zu hohe Gasgeschwindigkeiten in der Nähe der Symmetrieachse, was er auf Asymmetrien im Spray zurück führte [100].

Im Vergleich der beiden Modelle finden sich lediglich geringfügige Unterschiede; leichte Vorteile des RS-Modells gegenüber dem  $k$ - $\epsilon$ -Modell im Vergleich mit dem Experiment lassen sich für mittlere radiale Positionen feststellen.

Während in den Grafiken 4.35 bis 4.37 die axialen Gasgeschwindigkeiten über der radialen Koordinate  $y$  aufgetragen ist, zeigt Abbildung 4.38 Profile der auf die Hauptachsengeschwindigkeit normierten Axialgeschwindigkeit  $\tilde{u}/\tilde{u}_0$  über der normierten radialen Koordinate  $y/y_{1/2}$  an verschiedenen axialen Schnitten. In dieser Darstellung ist zu erkennen, dass die grundlegende Form der Geschwindigkeitsprofile unabhängig vom

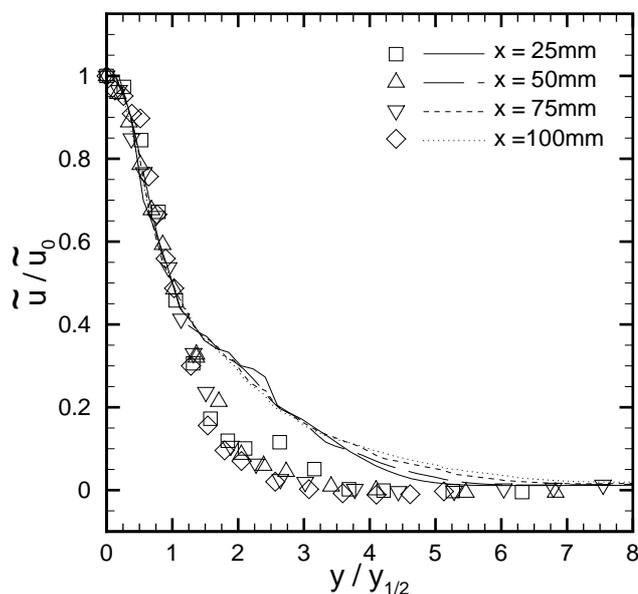


Abb. 4.38: Auf die Hauptachsengeschwindigkeit normierte axiale Gasgeschwindigkeit  $\tilde{u}/\tilde{u}_0$  eines reagierenden Methanolsprays über der normierten radialen Koordinate  $y/y_{1/2}$  im Vergleich. Symbole: Experiment [20] und Linien: RS-Modell

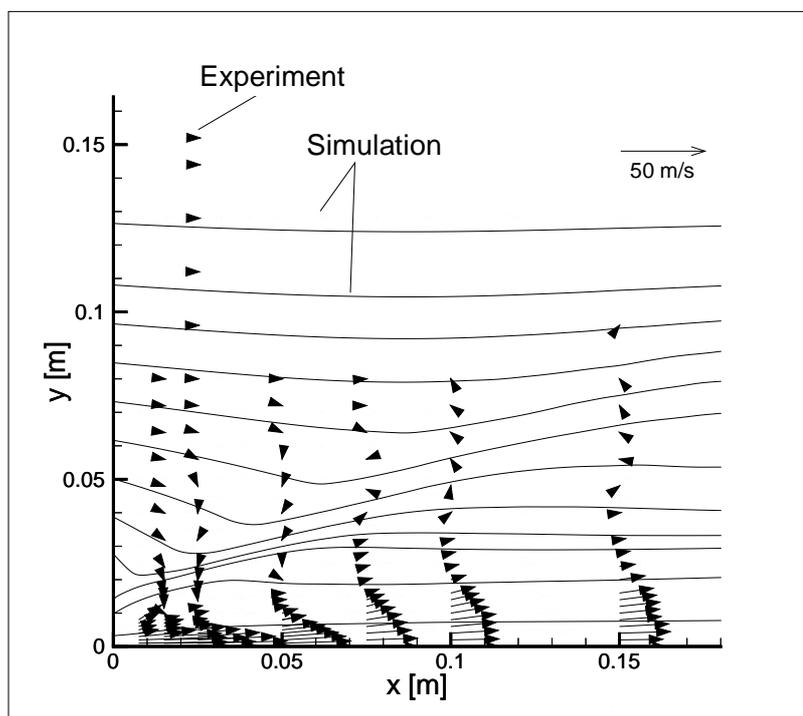


Abb. 4.39: Geschwindigkeitsfeld der Gasphase einer turbulenten Methanol-Sprayflamme nach dem Experiment von McDonell und Samuelsen [20]. Experiment: durchgezogene Vektoren, Simulation mit RS-Modell: gepunktete Vektoren und Stromlinien

Düsenabstand ist und sich die numerische Rechnung mit dem Experiment vor allem in Achsennähe in gutem Einklang befindet. Lediglich in den Strahlbereichen der 1,5 bis 4-fachen Strahlbreite liegen die Werte der Simulation leicht oberhalb des Experiments, was sich mit den Profilen der Abbildungen 4.35 bis 4.37 deckt. Insgesamt gibt also die Simulation ein im äußeren Strahlbereich leicht verbreitertes Strömungsprofil wieder, das ansonsten weitgehend dem experimentellen Profil entspricht.

Abbildung 4.39 veranschaulicht die Geschwindigkeitsvektoren der experimentellen sowie Geschwindigkeitsvektoren und Stromlinien der numerischen Ergebnisse für die Gasphase. Das im Experiment gemessene Geschwindigkeitsfeld zeigt im Bereich der axialen Positionen  $x \geq 75$  mm entgegen der Hauptströmungsrichtung orientierte Geschwindigkeitsvektoren, was auf eine Rezirkulationszone schließen lässt. Das  $k$ - $\varepsilon$ -Modell ist bekanntermaßen nicht in der Lage, Rezirkulationszonen zu beschreiben [68]. Auch mit dem RS-Modell konnte hier keine Rezirkulationszone in diesen Bereichen wieder gegeben werden. Die Rezirkulationszone ist im Experiment extrem schwach ausgebildet und die Umkehrgeschwindigkeit nur sehr klein: Über den gesamten Bereich der Rezirkulation ( $y = 30$  mm bis 50 mm) variiert die axiale Geschwindigkeit lediglich im Intervall  $\tilde{u} \in [-0,1 \text{ m/s}; 0,8 \text{ m/s}]$ . Eine sehr hohe Genauigkeit der Simulation und der Messdaten zur Bestimmung der Anfangsbedingungen für die Simulation ist erforderlich, um diese Rezirkulation wiedergeben zu können. Allerdings liegen schon in den Anfangsprofilen der Temperatur und der Methanolmassenbrüche sowie in der Tropfenverteilung so große Messungenauigkeiten (bis zu ca. 20 %, siehe Kapitel 4.1) und so viele Unsicherheiten, dass die notwendige Genauigkeit von der durchgeführten Simulation nicht zu erwarten ist.

Die Fähigkeit des hier entwickelten RS-Modells für turbulente Sprays, prinzipiell Rezirkulationszonen beschreiben zu können, wurde in Abschnitt 4.2 demonstriert, wo eine numerische Berechnung mit veränderten (konstruierten) Anfangsbedingungen für ein nicht reagierendes Methanolspray durchgeführt wurde.

Im Unterschied zum  $k$ - $\varepsilon$ -Modell liefert das RS-Modell auch Profile der verschiedenen Korrelationen der Gasgeschwindigkeit. In den Abbildungen 4.40, 4.41 und 4.42 sind die normierten Geschwindigkeitsvarianzen  $\widetilde{u''^2}/(2\tilde{k})$ ,  $\widetilde{v''^2}/(2\tilde{k})$  und  $\widetilde{w''^2}/(2\tilde{k})$  sowie die normierten Korrelationen  $\widetilde{u''v''}/\tilde{k}$  für verschiedene radiale Schnittpositionen im Vergleich mit dem Experiment eingezeichnet. Für  $\widetilde{w''^2}$  liegen keine Messdaten vor; aus der Simulation wird  $\widetilde{w''^2}$  aus  $\widetilde{w''^2} = 2\tilde{k} - \widetilde{u''^2} - \widetilde{v''^2}$  berechnet. Alle Größen sind über der mit der Strahlhalbwertsbreite normierten radialen Position  $y/y_{1/2}$  aufgetragen. Insgesamt findet man über alle axiale Positionen eine gute Übereinstimmung der in der Simulation berechneten Profile mit den experimentell ermittelten Werten. Insbesondere die Scherspannungen  $\widetilde{u''v''}$  werden über alle axiale Positionen  $x$  gut von den Berechnungen vorhergesagt. Lediglich bei  $x = 25$  mm (Abbildung 4.40) fallen die

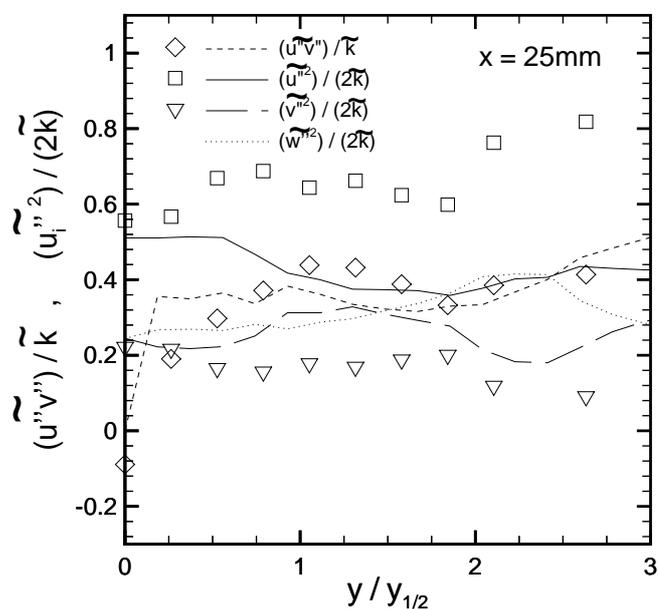


Abb. 4.40: Korrelationen  $\overline{u''v''}/\tilde{k}$ ,  $\overline{u''^2}/(2\tilde{k})$ ,  $\overline{v''^2}/(2\tilde{k})$  und  $\overline{w''^2}/(2\tilde{k})$  eines reagierenden Methanolsprays über der normierten radialen Koordinate  $y/y_{1/2}$  bei der axialen Position  $x = 25 \text{ mm}$ . Symbole: Experiment [20] und Linien: RS-Modell

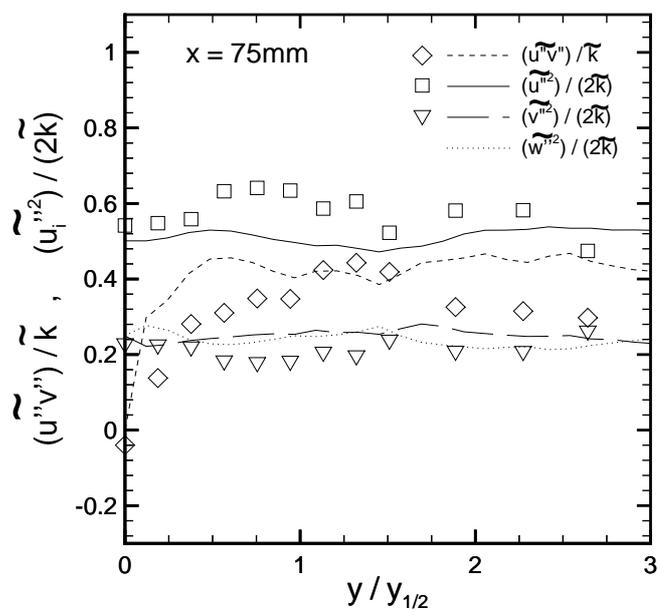


Abb. 4.41: Korrelationen  $\overline{u''v''}/\tilde{k}$ ,  $\overline{u''^2}/(2\tilde{k})$ ,  $\overline{v''^2}/(2\tilde{k})$  und  $\overline{w''^2}/(2\tilde{k})$  eines reagierenden Methanolsprays über der normierten radialen Koordinate  $y/y_{1/2}$  bei der axialen Position  $x = 75 \text{ mm}$ . Symbole: Experiment [20] und Linien: RS-Modell

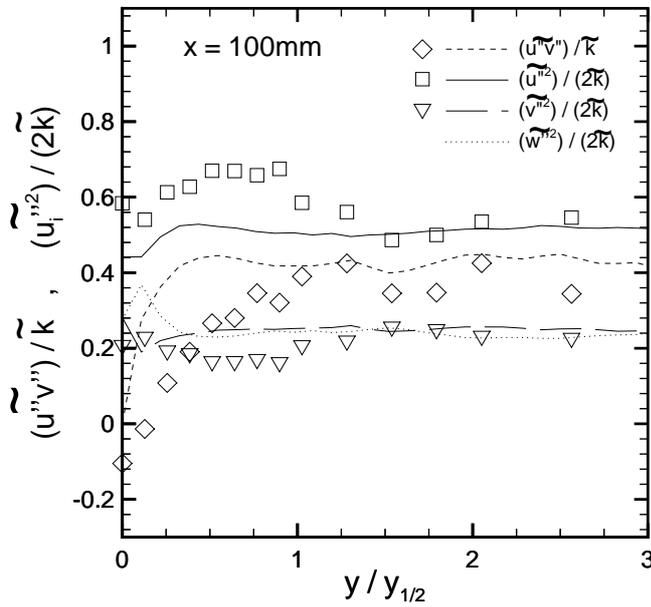


Abb. 4.42: Korrelationen  $\overline{u''v''}/\tilde{k}$ ,  $\overline{u''^2}/(2\tilde{k})$ ,  $\overline{v''^2}/(2\tilde{k})$  und  $\overline{w''^2}/(2\tilde{k})$  eines reagierenden Methanolsprays über der normierten radialen Koordinate  $y/y_{1/2}$  bei der axialen Position  $x = 100\text{ mm}$ . Symbole: Experiment [20] und Linien: RS-Modell

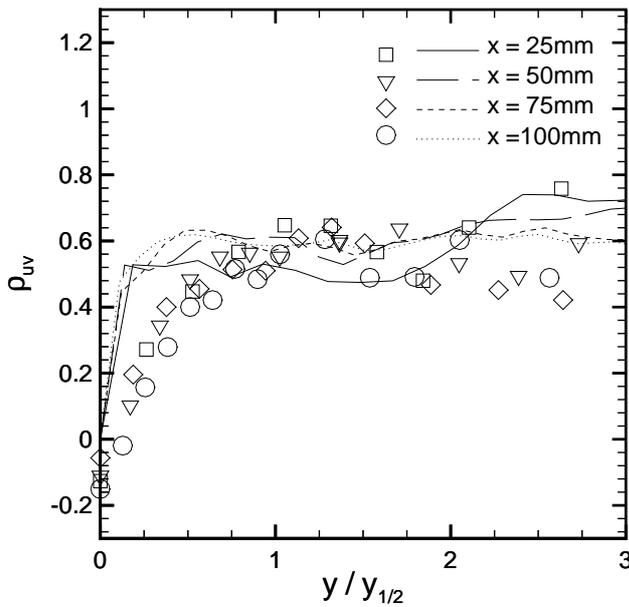


Abb. 4.43: Korrelationskoeffizienten  $\rho_{uv}$  eines reagierenden Methanolsprays über der normierten radialen Koordinate  $y/y_{1/2}$  bei verschiedenen axialen Position. Symbole: Experiment [20] und Linien: RS-Modell

berechneten Geschwindigkeitsvarianzen  $\widetilde{u''^2}$  in  $x$ -Richtung für größeren Abstand zur Symmetrieachse deutlich zu klein aus. Dies korreliert mit den überschätzten Werten für die Varianzen  $\widetilde{v''^2}$  in radialer Richtung. Da die Profile der Varianzen  $\widetilde{v''^2}$  und  $\widetilde{w''^2}$  zumeist ähnliche Verläufe haben [1], muss angenommen werden, dass auch diese in der Simulation überschätzt werden, womit die recht große Diskrepanz der  $\widetilde{u''^2}$ -Werte bei relativ kleinem Unterschied in den  $\widetilde{v''^2}$ -Werten erklärt werden kann. Jedoch gibt die Simulation auch für den Düsenabstand  $x = 25$  mm die korrekten Tendenzen der Varianzen wieder. Bei den weiteren axialen Schnittpositionen von  $x = 75$  mm (Abbildung 4.41) und  $x = 100$  mm (Abbildung 4.42) stimmen nicht nur die Tendenzen, sondern es ist auch eine gute quantitative Übereinstimmung zwischen Experiment und Simulation zu sehen.

Die Abbildung 4.43 zeigt die Korrelationskoeffizienten  $\rho_{uv}$  über der normierten radialen Position  $y/y_{1/2}$ . Auch dort ist eine sehr gute Übereinstimmung der experimentellen Messdaten mit dem numerischen Ergebnis zu erkennen.

Insgesamt lässt sich feststellen, dass das neu eingeführte RS-Modell zur Simulation turbulenter Spraydiffusionsflammen sehr gute Übereinstimmung mit dem Vergleichsexperiment von McDonell und Samuelsen liefert. Im Vergleich mit dem  $k$ - $\varepsilon$ -Modell ist die Beschreibung der Sprayflamme verbessert: Neben einer leichten Verbesserung der Profile des Sauterradius (Abbildungen 4.32, 4.33 und insbesondere 4.34) sowie der Geschwindigkeit (Abbildungen 4.35 bis 4.37) liefern vor allem die neu hinzu gekommenen Aussagen über die Korrelationen und Varianzen (Abbildungen 4.40 bis 4.42) eine gesteigerte Qualität der Simulation und bessere Interpretation der Experimente.

Wichtige Voraussetzung für einen quantitativen Vergleich der Simulation mit dem Experiment ist die exakte Kenntnis der Anfangsdaten sowohl für die Gasphase als auch für die flüssige Phase. Problematisch gestaltet sich dabei beispielsweise die experimentelle Temperaturbestimmung über ein Thermoelement. Im Bereich, wo flüssige und gasförmige Phase vorliegen, verfälscht die Benetzung des Thermoelements die Messergebnisse. Sind für gewisse Bereiche des Berechnungsgebietes keine vernünftigen Messungen möglich, müssen für die numerische Simulation Werte interpoliert werden. Ein grundsätzliches Problem des hier verwendeten Spraymodells ist, dass es nicht in der Lage ist, dichte Sprays zu behandeln. Deshalb müssen Messungen in einem gewissen Abstand zur Einspritzdüse als Anfangswerte der Simulationsrechnung genommen werden. Die Erfassung der Eigenschaften der flüssigen Phase (Geschwindigkeiten, Größenverteilung und räumliche Verteilung der Tröpfchen) geschieht über ein PDPA (Phasen-Doppler-Anemometer), welches lediglich einen kleinen Teil der Tropfen registriert, was für die Erzeugung der Tropfenanfangsverteilung für die Simulation problematisch ist und zu gewissen Unsicherheiten führt. Hier zeigt sich, dass sowohl für die experimentellen Methoden, als auch für die physikalisch-chemisch-mathematischen

Modelle Weiterentwicklungsbedarf besteht.

Eine zu der in dieser Arbeit benutzten ähnliche Vorgehensweise zur Beschreibung eines dünnen Sprays in einer turbulenten Gasphase und der Kopplung der beiden Phasen wird in [103] beschrieben. Jedoch erfolgt die Beschreibung der Wechselwirkung zwischen Tropfen und Turbulenz über ein so genanntes *Modulationsmodell* [103]. Die Validierung des Modells wird dort anhand einer nicht reagierenden Kanalströmung vorgenommen, die nicht mit den hier betrachteten Fällen vergleichbar ist. Wegen der Ähnlichkeit der Modelle wären vergleichende Simulationsrechnungen desselben Experiments für zukünftige Arbeiten von Interesse.

## 4.4 Einfluss verschiedener Bibliotheken

### 4.4.1 Einfluss der Auswahl der Spraybibliotheken

Bei der Integration des laminaren Flamelet-Modells in den turbulenten Code erfolgt die Auswahl der Bibliotheken über den lokalen Sauterradius  $r_S(\vec{x})$  im turbulenten Strömungsfeld. In den Untersuchungen von Hollmann und Gutheil [26] standen hierfür monodisperse Bibliotheken für laminare Sprayflammen mit Tropfenanfangsradien von  $r_{d,1} = 10\mu\text{m}$  und  $r_{d,2} = 25\mu\text{m}$  zur Verfügung. Für jeden Tropfenradius enthält die laminare Spraybibliothek eine Gasseite und eine Sprayseite. In den numerischen Simulationen der Kapitel 4.2 und 4.3 wurden jeweils die Spraybibliotheken beider Tropfenradien gemeinsam verwendet; die Auswahl der Bibliotheken erfolgt dabei entsprechend den in Abschnitt 2.4.4 erläuterten Regeln:

- (i) Ist der Sauterradius im turbulenten Strömungsfeld größer als  $10\mu\text{m}$ , dann wird zur Bestimmung der Speziesmassenbrüche und der Temperatur die Sprayseite aus der Bibliothek für den großen Tropfenradius herangezogen.
- (ii) Für Sauterradien zwischen einem und zehn Mikrometern wird entsprechend die Sprayseite der Bibliothek für den kleinen Tropfenradius verwendet.
- (iii) Ist der Sauterradius kleiner als ein Mikrometer, so wird die Gasseite ausgewählt.

Dabei stellten Hollmann und Gutheil [26] in Untersuchungen fest, dass es für die Simulationsergebnisse keine Rolle spielt, ob die verwendete Gasbibliothek aus der  $10\mu\text{m}$  Bibliothek oder aus der  $25\mu\text{m}$  Bibliothek stammt.

Im Folgenden wird nun der Einfluss bei der Auswahl der Sprayseite untersucht. Hierzu wurden die Bibliotheken für die beiden Tropfenanfangsradien nicht nur gemeinsam benutzt, sondern auch Simulationsrechnungen durchgeführt, bei denen die Bibliotheken für den kleinen bzw. den großen Tropfenradius einzeln verwendet wurden. Die Simulationsrechnungen wurden dabei mit dem  $k$ - $\varepsilon$ -Modell durchgeführt.

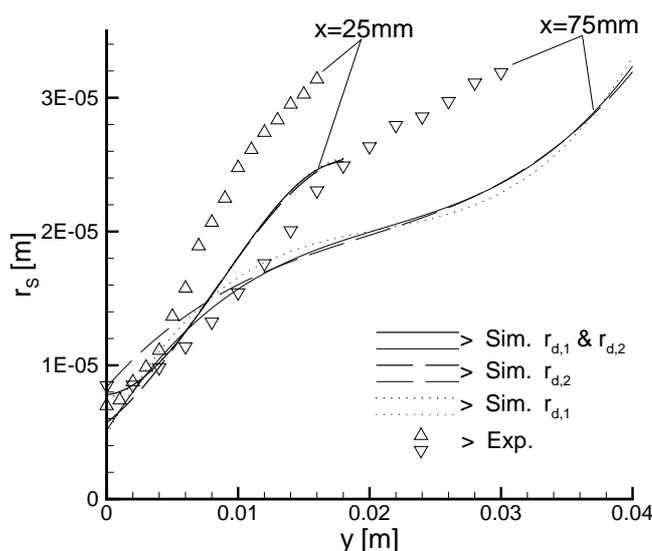


Abb. 4.44: Radiale Profile des Sauterradius  $r_s$  bei unterschiedlicher Auswahl der Spraybibliotheken für die Tropfenanfangsradien  $r_{d,1} = 10 \mu\text{m}$  und  $r_{d,2} = 25 \mu\text{m}$ .  $\triangle, \nabla$  Experiment [20], —  $r_{d,1}$  und  $r_{d,2}$ ,  $\cdots$  nur  $r_{d,1}$ ,  $- -$  nur  $r_{d,2}$

Abbildung 4.44 zeigt die gemittelten Sauterradien der Tropfen an verschiedenen axialen Positionen. Jeweils nahe der Symmetrieachse ( $y = 0 \text{ m}$ ) liegen die kleinsten Sauterradien vor; die meisten kleinen Tropfen befinden sich dort. Vorwiegend große Tropfen können die heißen Flammzonen durchqueren und in äußere, achsenferne Bereiche vordringen, während die kleinen Tropfen auf dem Weg dorthin bereits vollständig verdampfen. So nimmt der Sauterradius mit wachsendem Abstand zur Symmetrieachse zu.

In den Abbildungen 4.45 bis 4.48 sind jeweils radiale Profile der axialen Gasgeschwindigkeit  $\tilde{u}$ , der Gastemperatur  $\tilde{T}$ , des Mischungsbruchs  $\tilde{\xi}_C$  und des Speziesmassenbruchs  $\tilde{Y}_{\text{OH}}$  der Spezies OH als Beispiel eines Reaktionsprodukts an verschiedenen axialen Positionen  $x$  gezeigt. Dabei kennzeichnen Symbole die experimentellen Werte der Gasgeschwindigkeit  $\tilde{u}$  bzw. der Gastemperatur  $\tilde{T}$ ; für Mischungsbruch und Massenbrüche liegen keine experimentellen Daten vor. Die durchgezogenen Linien resultieren aus der Simulation, in der die Bibliotheken beider Tropfenradien nach den beschriebenen Auswahlkriterien gemeinsam verwendet wurden. Simulationsergebnisse mit der Bibliothek für den kleineren Tropfenradius  $r_{d,1}$  sind gepunktet dargestellt, für den größeren Tropfenradius  $r_{d,2}$  gestrichelt.

Vergleicht man die beiden numerischen Rechnungen, in denen jeweils nur eine Bibliothek für einen Tropfenradius alleine verwendet wurde (zum einen nur der kleine und zum anderen nur der große Tropfenradius), so findet man Differenzen der Profile in verschiedenen Gebieten der Berechnung: Dies sind insbesondere Bereiche, wo (vgl. Abbildung 4.44)

- einerseits sehr viele kleine Tropfen vorliegen ( $r_s$  klein), d.h. nahe der Düse und in unmittelbarer Nähe zur Symmetrieachse,

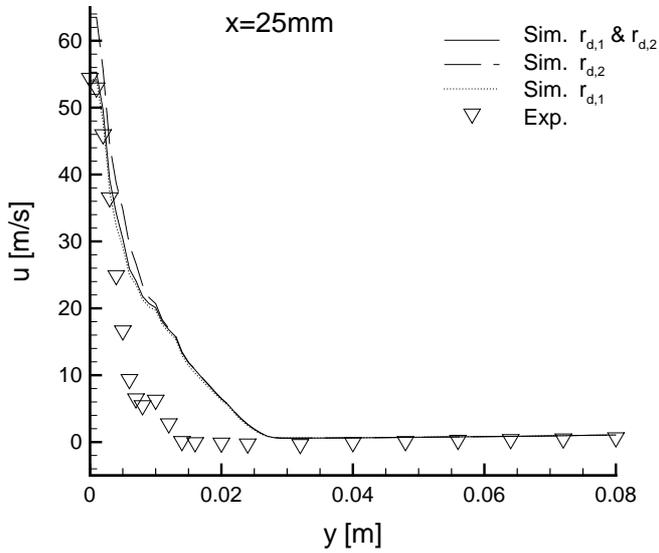


Abb. 4.45: Radiale Profile der Gasgeschwindigkeit  $\tilde{u}$  bei  $x = 25\text{ mm}$  bei unterschiedlicher Auswahl der Spraybibliotheken für die Tropfenanfangsradien  $r_{d,1} = 10\text{ }\mu\text{m}$  und  $r_{d,2} = 25\text{ }\mu\text{m}$ .  $\nabla$  Experiment [20],  $\text{---}$   $r_{d,1}$  und  $r_{d,2}$ ,  $\text{\cdots}$  nur  $r_{d,1}$ ,  $\text{- - -}$  nur  $r_{d,2}$

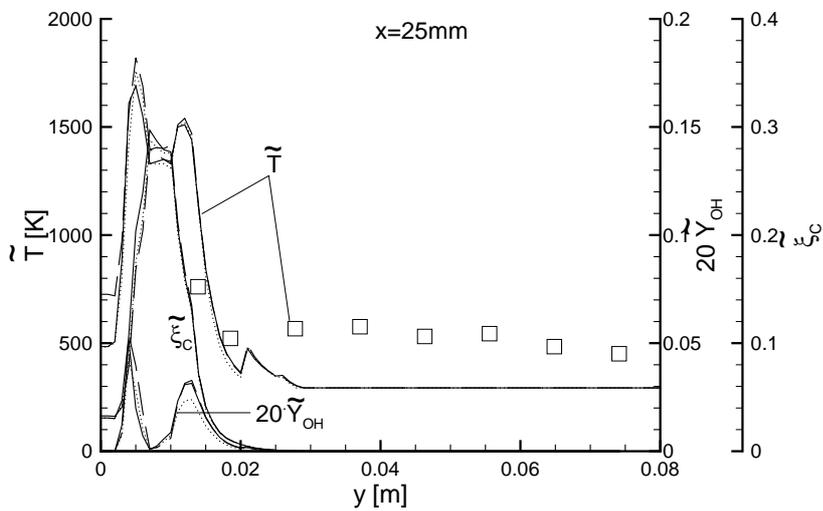


Abb. 4.46: Radiale Profile der Gastemperatur  $\tilde{T}$ , des Mischungsbruchs  $\tilde{\xi}_C$  und des Speziesmassenbruchs  $\tilde{Y}_{\text{OH}}$  bei  $x = 25\text{ mm}$  bei unterschiedlicher Auswahl der Spraybibliotheken für die Tropfenanfangsradien  $r_{d,1} = 10\text{ }\mu\text{m}$  und  $r_{d,2} = 25\text{ }\mu\text{m}$ .  $\square$  Experiment [20],  $\text{---}$   $r_{d,1}$  und  $r_{d,2}$ ,  $\text{\cdots}$  nur  $r_{d,1}$ ,  $\text{- - -}$  nur  $r_{d,2}$

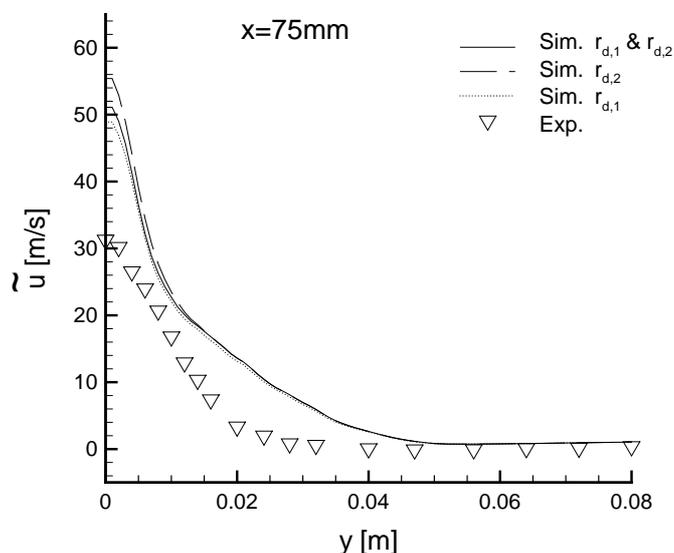


Abb. 4.47: Radiale Profile der Gasgeschwindigkeit  $\tilde{u}$  bei  $x = 75$  mm bei unterschiedlicher Auswahl der Spraybibliotheken für die Tropfenanfangsradien  $r_{d,1} = 10 \mu\text{m}$  und  $r_{d,2} = 25 \mu\text{m}$ .  $\nabla$  Experiment [20], —  $r_{d,1}$  und  $r_{d,2}$ ,  $\cdots$  nur  $r_{d,1}$ ,  $-\ -$  nur  $r_{d,2}$

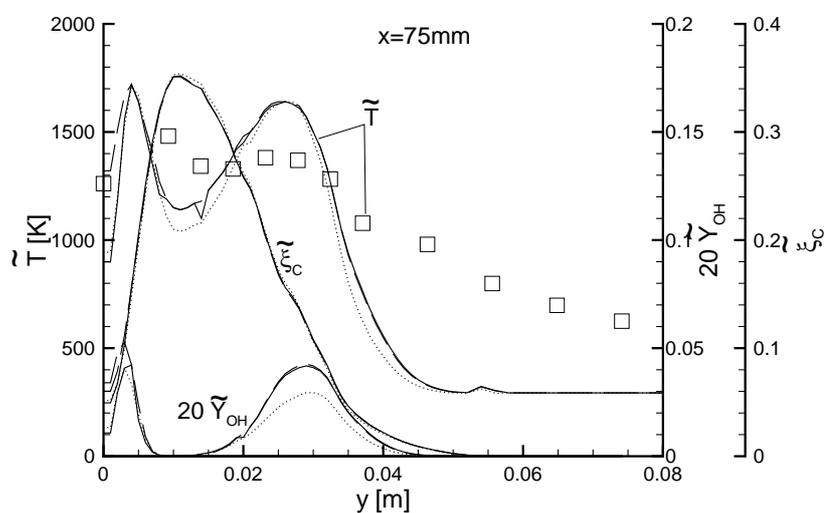


Abb. 4.48: Radiale Profile der Gastemperatur  $\tilde{T}$ , des Mischungsbruchs  $\tilde{\xi}_C$  und des Speziesmassenbruchs  $\tilde{Y}_{\text{OH}}$  bei  $x = 75$  mm bei unterschiedlicher Auswahl der Spraybibliotheken für die Tropfenanfangsradien  $r_{d,1} = 10 \mu\text{m}$  und  $r_{d,2} = 25 \mu\text{m}$ .  $\square$  Experiment [20], —  $r_{d,1}$  und  $r_{d,2}$ ,  $\cdots$  nur  $r_{d,1}$ ,  $-\ -$  nur  $r_{d,2}$

- oder andererseits dort, wo die großen Tropfen stark überwiegen ( $r_S$  groß), d.h. bei großen axialen Positionen und in Achsenferne.

In diesen Bereichen zeigt sich die Notwendigkeit der Verwendung verschiedener Flammenbibliotheken für unterschiedliche Tropfenanfangsradien. Lediglich der Mischungsbruch wird in beiden Rechnungen im Wesentlichen identisch wieder gegeben.

In den Simulationsrechnungen mit den Bibliotheken des großen Tropfenradius wird im Vergleich zur Rechnung mit den Bibliotheken des kleinen Tropfenradius die Gastemperatur nahe der Symmetrieachse überschätzt. Dies liegt darin begründet, dass dort der Wärmeentzug der Gasphase durch die Aufheizung und Verdampfung der kleinen Tropfen unterschätzt wird: Bei kleinen Tropfen ist das Verhältnis von Oberfläche zu Volumen größer als bei großen Tropfen, wodurch sich die kleinen Tropfen schneller aufheizen und verdampfen. Mit der höheren Temperatur in Achsennähe bei der Simulation mit der Bibliothek der größeren Tropfen korrelieren auch die in diesen Bereichen überschätzten Werte der Gasgeschwindigkeit, da eine erhöhte Temperatur zu einer Verringerung der Dichte und damit über die Kontinuitätsgleichung zu einer höheren Geschwindigkeit führt. Einen ähnlichen Effekt beobachtete auch Hollmann [12] beim Vergleich von Simulationsrechnungen, in denen zum einen Gasflammenbibliotheken und zum anderen Sprayflammenbibliotheken herangezogen wurden: Durch die Verwendung der Spraybibliotheken werden dort die axialen Gasgeschwindigkeiten in der Nähe der Symmetrieachse relativ zur Simulation mit Gasbibliotheken überschätzt.

Da mit wachsendem Abstand zur Düse immer mehr kleine Tropfen verdampft sind und die großen Tropfen kleiner geworden sind, unterscheiden sich die Profile für wachsende axiale Positionen  $x$  immer weniger: In den Grafiken ist erkennbar, dass die relativen Temperaturdifferenzen  $\Delta\tilde{T}/\tilde{T}$  wie auch Geschwindigkeitsdifferenzen  $\Delta\tilde{u}/\tilde{u}$  mit steigendem Düsenabstand  $x$  auf der Achse sinken.

Als allgemeine Tendenz für die Profile aller dargestellten physikalischen Größen ist erkennbar, dass im Bereich der kleinen Sauterradien die unter simultaner Verwendung beider Tropfenbibliotheken berechneten Profile den Profilen der Rechnung mit dem kleineren Tropfenradius folgen, während sie in Bereichen großer Sauterradien den Profilen der Rechnung mit dem großen Tropfenradius entsprechen.

Da in den vorliegenden Untersuchungen nur monodisperse Flammenbibliotheken für zwei verschiedene Tropfenradien benutzt wurden und jeweils immer entweder die Bibliothek des kleinen Radius oder des großen Radius verwendet wurde, ist eine Verbesserung der Ergebnisse dadurch zu erwarten, dass die Bibliotheken um weitere Tropfenradien erweitert werden und die Temperatur wie auch die Massenbrüche nicht jeweils aus nur einer einzigen Spraybibliothek bestimmt werden, sondern beispielsweise als gewichtete Summe aus Bibliotheken unterschiedlicher Tropfenradien. Hierbei ersetzen die Wichtungsfaktoren die oben beschriebenen Auswahlkriterien der Bibliotheken; sie

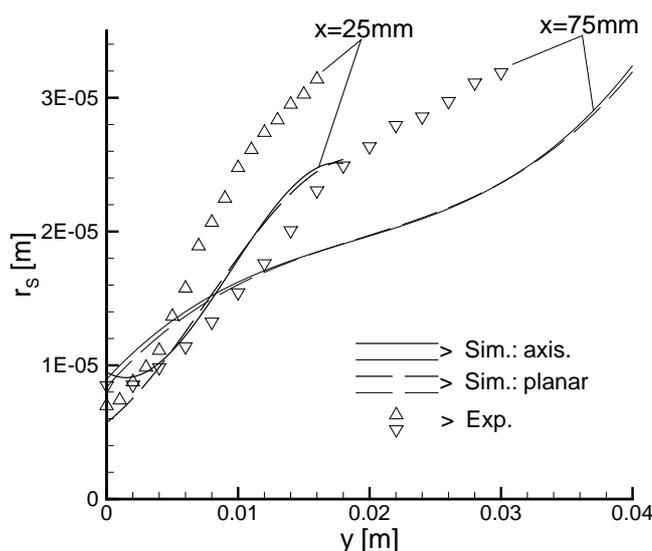


Abb. 4.49: Radiale Profile des Sauterradius  $r_s$  bei unterschiedlicher Konfiguration der Spraybibliotheken mit Tropfenanfangsradius  $r_{d,2} = 25 \mu\text{m}$ .  $\triangle$ ,  $\nabla$  Experiment [20], — rotationssymmetrische, - - planare Spraybibliothek

werden so gewählt, dass sie der örtlichen Tropfengrößenverteilung entsprechen. Ein alternativer Ansatz ist die Verwendung laminarer Flammenbibliotheken polydisperser Sprays anstelle von verschiedenen monodispersen Spraybibliotheken mit einem festen Tropfenanfangsradius [101]. Die Verteilung der Tropfenanfangsgrößen der laminaren Flamme sollte dabei die Verteilung in der turbulenten Flamme wiedergeben.

#### 4.4.2 Einfluss der Konfiguration der Gegenstromanordnung der laminaren Bibliotheken

In einem weiteren Schritt der Untersuchungen zur Bedeutung der Spraybibliotheken wurde der Einfluss der in den Bibliotheken vorliegenden Flammenkonfiguration näher betrachtet. Hierzu standen Spraybibliotheken mit zum einen planarer und zum anderen rotationssymmetrischer Flammenkonfiguration zur Verfügung. Zum Vergleich wurden zwei Simulationen herangezogen, in denen jeweils nur Sprayflammenbibliotheken für den Tropfenradius  $r_{d,2} = 25 \mu\text{m}$  verwendet wurden. Zum einen jedoch mit planarer Flammenkonfiguration, wie in allen zuvor beschriebenen Simulationsrechnungen auch, und zum anderen mit rotationssymmetrischer Flammenkonfiguration. In beiden Rechnungen fand das  $k-\varepsilon$ -Modell Anwendung. Die Auswertungen erfolgen analog zu Kapitel 4.4.1.

Radiale Profile der Sauterradien  $r_s$  sind in Abbildung 4.49 dargestellt. Zum Vergleich sind neben den Simulationsergebnissen (durchgezogene Linien: rotationssymmetrische Flammenkonfiguration, gestrichelte Linien: planare Flammenkonfiguration) auch die experimentellen Werte eingezeichnet. Hier findet sich kein wesentlicher Einfluss der Konfiguration der laminaren Sprayflammenbibliotheken auf die Profile.

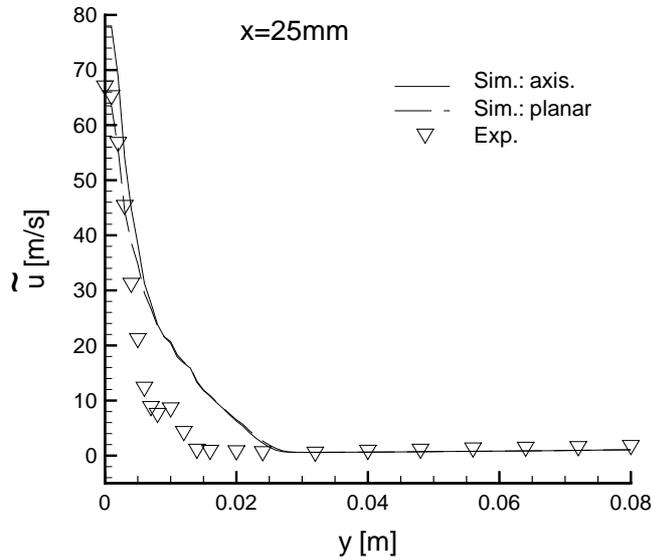


Abb. 4.50: Radiale Profile der Gasgeschwindigkeit  $\tilde{u}$  bei  $x = 25\text{ mm}$  bei unterschiedlicher Konfiguration der Spraybibliotheken mit Tropfenanfangsradius  $r_{d,2} = 25\text{ }\mu\text{m}$ .  $\nabla$  Experiment [20], — rotationssymmetrische, -- planare Spraybibliothek

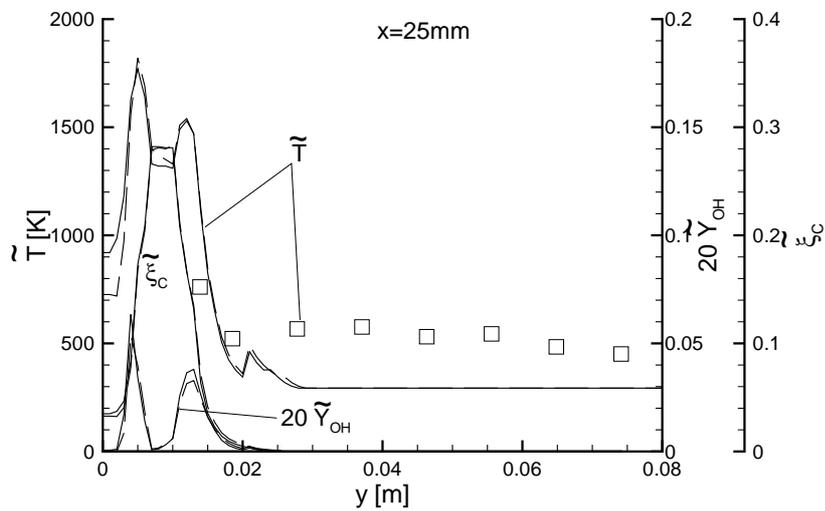


Abb. 4.51: Radiale Profile der Gastemperatur  $\tilde{T}$ , des Mischungsbruchs  $\tilde{\xi}_C$  und des Speziesmassenbruchs  $\tilde{Y}_{OH}$  bei  $x = 25\text{ mm}$  bei unterschiedlicher Konfiguration der Spraybibliotheken mit Tropfenanfangsradius  $r_{d,2} = 25\text{ }\mu\text{m}$ .  $\square$  Experiment [20], — rotationssymmetrische, -- planare Spraybibliothek

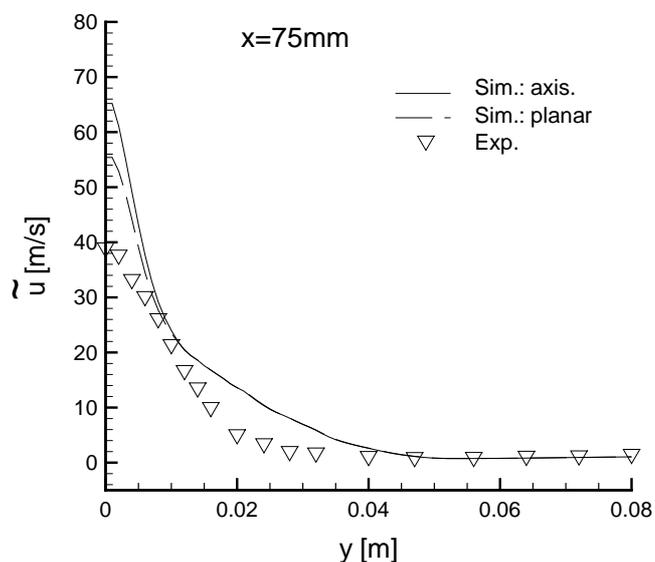


Abb. 4.52: Radiale Profile der Gasgeschwindigkeit  $\tilde{u}$  bei  $x = 75$  mm bei unterschiedlicher Konfiguration der Spraybibliotheken mit Tropfenanfangsradius  $r_{d,2} = 25 \mu\text{m}$ .  $\nabla$  Experiment [20], — rotationssymmetrische, - - planare Spraybibliothek

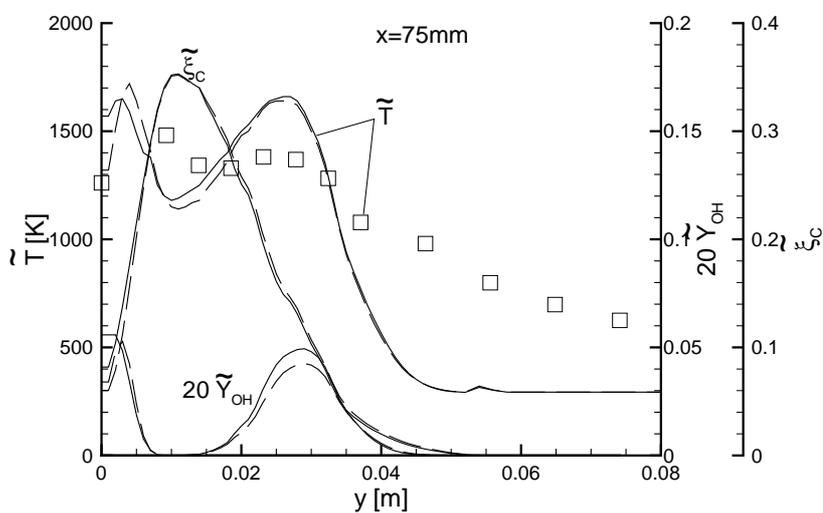


Abb. 4.53: Radiale Profile der Gastemperatur  $\tilde{T}$ , des Mischungsbruchs  $\tilde{\xi}_C$  und des Speziesmassenbruchs  $\tilde{Y}_{OH}$  bei  $x = 75$  mm bei unterschiedlicher Konfiguration der Spraybibliotheken mit Tropfenanfangsradius  $r_{d,2} = 25 \mu\text{m}$ .  $\square$  Experiment [20], — rotationssymmetrische, - - planare Spraybibliothek

Wie schon bei den Sauterradien, so verlaufen auch die Mischungsbruchkurven bei den verschiedenen axialen Positionen praktisch identisch (Abbildungen 4.51 und 4.53). Der Mischungsbruch wird neben dem Sauterradius in den Sprayflammenbibliotheken zur Bestimmung der Gastemperatur und der Speziesmassenbrüche herangezogen. In großen Abständen zur Symmetrieachse sind auch die Verläufe der Temperatur  $\tilde{T}$  und des Speziesmassenbruchs  $\tilde{Y}_{\text{OH}}$  für beide Simulationen nicht zu unterscheiden (Abbildungen 4.51 und 4.53). Für kleine Abstände zur Symmetrieachse sind in den  $\tilde{T}$ -Profilen deutliche Unterschiede der beiden Berechnungen auszumachen: Die Berechnung mit der rotationssymmetrischen Bibliothek liefert sowohl für  $x = 25$  mm als auch für  $x = 75$  mm größere Temperaturen auf der Achse. Da die Spezies OH als Indikator chemischer Reaktion gilt, ist dort auch ihr Massenbruchwert  $\tilde{Y}_{\text{OH}}$  gegenüber der Simulation mit planarer Bibliothek erhöht; da die absoluten Temperaturen bei  $x = 25$  mm noch recht gering sind, ist dieser Effekt vor allem in Abbildung 4.53 zu erkennen. Ebenso fällt das lokale Minimum zwischen den beiden Hauptreaktionszonen für den Fall der rotationssymmetrischen Bibliotheken beim Düsenabstand  $x = 75$  mm weniger tief aus. Entsprechend verläuft das  $\tilde{Y}_{\text{OH}}$ -Profil in der Folge auf leicht höherem Niveau.

Aufgrund der höheren Gastemperaturen  $\tilde{T}$  auf der Achse bei der Simulation mit rotationssymmetrischen Bibliotheken resultieren dort auch größere Geschwindigkeitswerte  $\tilde{u}$  (vergleiche Abschnitt 4.4.1). Im äußeren Strahlbereich sind die Verläufe der Geschwindigkeiten identisch.

Insgesamt lässt sich sagen, dass der Einfluss der Konfiguration der Gegenstromanordnung der verwendeten Sprayflammenbibliothek auf den achsennahen Bereich beschränkt bleibt. Dort werden für die rotationssymmetrische Konfiguration höhere Flammentemperaturen vorhergesagt als für die planare Konfiguration. Allerdings wurde in der vorliegenden Simulation lediglich eine Sprayflammenbibliothek für den großen Tropfenradius  $r_{d,2} = 25 \mu\text{m}$  eingebunden. Nach Kapitel 4.4.1 sollten die Temperaturwerte auf der Achse durch das Einbinden weiterer Bibliotheken mit kleinerem Tropfenradius verringert werden können, was sich auch positiv auf die Geschwindigkeitsprofile auswirkt.

## 4.5 Vorbereitung zur Simulation eines reagierenden Ethanolstrahls

Innerhalb des Sonderforschungsbereichs (SFB) 359, in dessen Rahmen diese Arbeit entstand, fand eine Kooperation zwischen den Arbeitsgruppen von Prof. Dr. Wolfrum und Prof. Dr. Gutheil mit dem Ziel, ein reagierendes, turbulentes Ethanolstrahl experimentell zu vermessen und numerisch zu beschreiben, statt. Im Hinblick auf diese Zusammenarbeit wurden die seitens der numerischen Simulation nötigen Voraussetzungen

geschaffen: Der verwendete Spraycode wurde erweitert, sodass damit außer Methanolflammen auch Flammen mit dem Brennstoff Ethanol simuliert werden können. Hierzu wurde der Code um die entsprechenden Spezies und die brennstoffspezifischen Daten erweitert. Die Umstellung der Sprayflammenbibliotheken zur Beschreibung der chemischen Reaktionen für den neuen Brennstoff Ethanol (siehe Kapitel 4.5.1) wurde durchgeführt [102] und das Simulationsprogramm entsprechend angepasst. Im Hinblick auf die im Experiment vorliegende Flamme wurde ein Äquivalenzverhältnis der Sprayflammenbibliotheken von  $E_R = 1$  verwendet.

Da die experimentellen Daten über die Ethanolflamme zum Zeitpunkt der Simulationsrechnungen nicht in ausreichendem Maße vorlagen, war eine Anpassung der Stöchiometrie und der gasdynamischen wie auch tropfendynamischen Rand- und Anfangsbedingungen nicht möglich. Daher wurde eine Simulationsrechnung mit dem auf den Brennstoff Ethanol umgestellten Code unter Verwendung derselben Randbedingungen, wie für die Methanolflamme (Kapitel 4.1), durchgeführt.

Aus diesen Gründen ergibt die hier durchgeführte Simulation des turbulenten, reagierenden Ethanolsprays, wie in Abschnitt 4.5.2 ausgeführt, keine voll ausgeprägte Reaktionszone, sondern lediglich eine "heiße Strömung" mit Maximaltemperaturen unter 1000 K. Die strömungsdynamischen Eigenschaften des Methanol-Experiments von McDonell und Samuelsen [20] lassen sich wegen den identisch gewählten Randbedingungen in der Ethanol-Simulationsrechnung und wegen ähnlicher Eigenschaften der Brennstoffe Ethanol und Methanol (Tabelle 2.2) formal vergleichen.

### 4.5.1 Laminare Sprayflammenbibliothek für den Brennstoff Ethanol

Die verwendeten Sprayflammenbibliotheken sind mit einem Äquivalenzverhältnis von  $E_R = 1$  für eine rotationssymmetrische Gegenstromdiffusionsflamme mit einer Tropfenanfangsgröße von  $r_{d0} = 50 \mu\text{m}$  berechnet [102]. Sie enthalten Flammenstreckungen von  $a = 50 \text{ s}^{-1}$  bis  $a = 250 \text{ s}^{-1}$  (vgl. Kapitel 2.4, 2.4.1). Die Konfiguration der Gegenstromflamme zur Berechnung der Ethanol-Flammenbibliotheken entspricht der für die Methanol-Flammenbibliotheken (Kapitel 2.4.4, [14]).

Exemplarisch ist in Abbildung 4.54 die laminare Ethanol-Sprayflammenstruktur für eine Streckung von  $a = 250 \text{ s}^{-1}$  gezeigt, wobei das Brennstoffspray von links einströmt. Es ist deutlich die Oszillation der verdampfenden Tropfen um den Staupunkt bei  $x = 0 \text{ mm}$  zu erkennen. Jeweils an den Umkehrpunkten der Tropfen befinden sich Extremwerte des Produkts aus der Verdampfungsgeschwindigkeit und der Gasgeschwindigkeit ( $\bar{L}_v \cdot \tilde{u}$ ) [102]. Diese Extrema korrelieren, wie schon bei den Spraybibliotheken für den Brennstoff Methanol (siehe Kapitel 2.4.4), mit den Maxima der

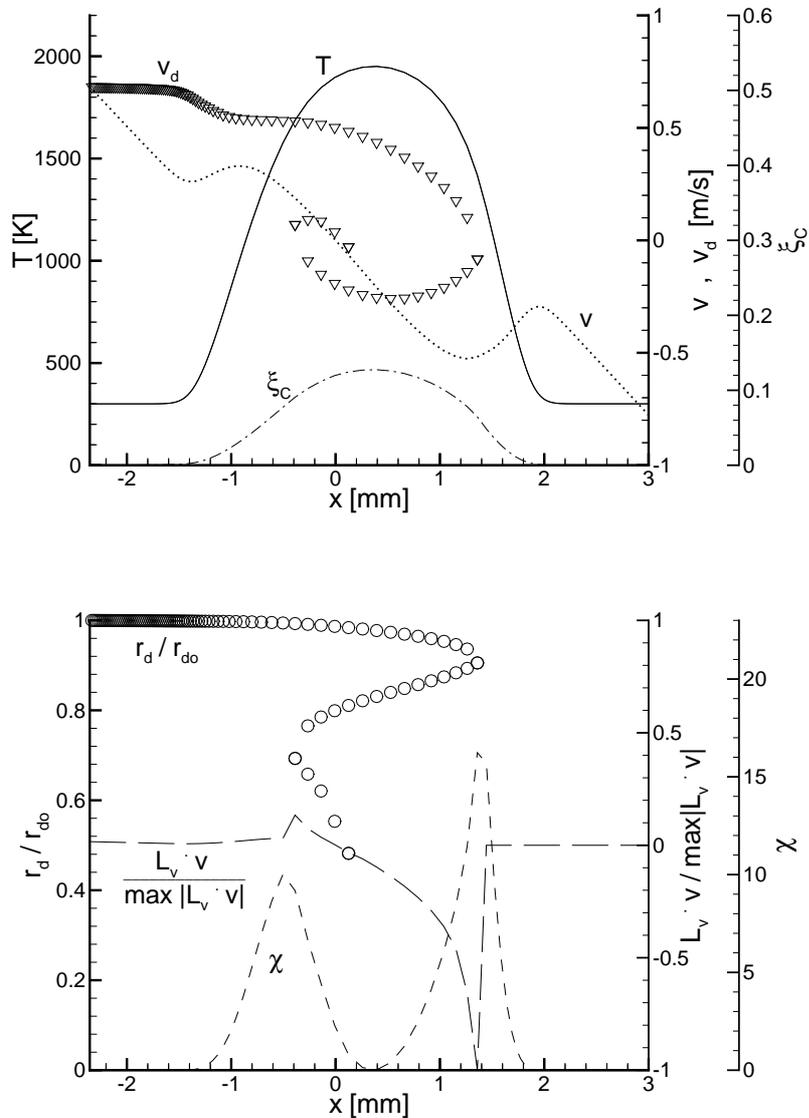


Abb. 4.54: Laminare Sprayflammenstruktur einer rotationssymmetrischen Gegenstromdiffusionsflamme mit Brennstoff Ethanol, einer Tropfenanfangsgröße von  $r_{d0} = 50 \mu\text{m}$  und einer Streckung von  $a = 250 \text{s}^{-1}$ . Dargestellt sind die Gastemperatur  $T$ , die Gas- ( $u$ ) und Tropfengeschwindigkeit ( $v_d$ ), der Mischungsbruch  $\xi_C$ , die normierte Tropfengröße  $r_d/r_{d0}$ , die skalare Dissipationsgeschwindigkeit  $\chi$  und das normierte Produkt der Verdampfungs geschwindigkeit mit der Gasgeschwindigkeit  $L_v \cdot u$  [102]

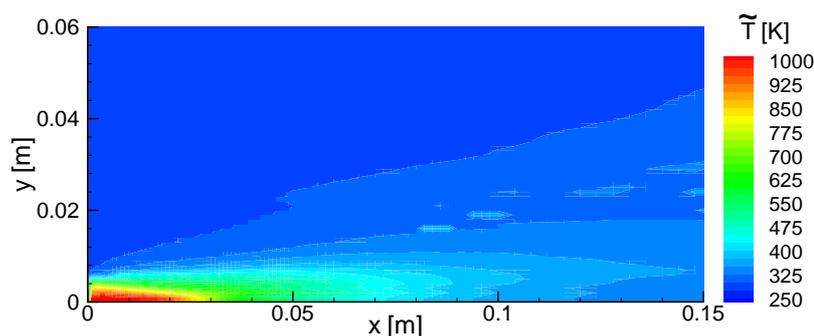


Abb. 4.55: Gastemperaturverteilung eines reagierenden Ethanolstrahls

skalaren Dissipationsgeschwindigkeit  $\tilde{\chi}$  [12].

Wie es typisch für Gegenstromspraydiffusionsflammen ist, so besitzt auch hier der Mischungsbruch  $\tilde{\xi}_C$  basierend auf der Spezies C ein Maximum. An diesem Maximum kann die Flammenstruktur in eine Gasseite und eine Sprayseite aufgeteilt werden. Die Entscheidung, ob im turbulenten Code die Sprayseite der Bibliothek verwendet wird erfolgt nach den gleichen Kriterien über den lokal vorliegenden Sauterradius wie bei den Simulationen der Methanolf Flamme in Kapitel 4.3. Für die Gasseite steht eine Flammenbibliothek einer reinen Ethanol–Gasflamme zur Verfügung [102].

Im Unterschied zu den Methanol–Bibliotheken aus Kapitel 2.4.4 liegt in der laminaren Ethanol–Flammenstruktur hier nur ein Temperaturmaximum vor. Dies ist durch die Werte des Mischungsbruchs zu erklären, die in der Ethanol–Flamme auch im Maximum den stöchiometrischen Wert von  $\xi_{C,st} \approx 0,1$  nur wenig überschreiten; auf der Gasseite wird keine stöchiometrische Mischung erreicht (Abbildung 4.54 oben). Somit verlöscht die gasseitige Hauptreaktionszone und es bilden sich keine zwei separierten Hauptreaktionszonen aus, wie bei den betrachteten Methanol–Bibliotheken (Abbildung 2.12, Abschnitt 2.4.4). Dies resultiert aus dem Äquivalenzverhältnis der Ethanol–Bibliotheken von  $E_R = 1$ , das deutlich unter dem Äquivalenzverhältnis der Methanol–Bibliotheken von  $E_R = 3$  liegt (Abschnitt 2.4.4). In den Methanol–Bibliotheken liegen die beiden Hauptreaktionszonen in Bereichen, in denen der Mischungsbruch den stöchiometrischen Wert durchläuft. Zwischen den beiden Temperaturmaxima der Methanol–Bibliotheken liegt dort der Mischungsbruch deutlich über seinem stöchiometrischen Wert.

#### 4.5.2 Auswertung der turbulenten Ethanol–Sprayflamme

Abbildung 4.55 zeigt die Gastemperaturverteilung der berechneten turbulenten Ethanolflamme. Wie in den laminaren Sprayflammenbibliotheken sind auch im turbulenten Fall als Unterschied zur Methanolf Flamme in radialer Richtung keine zwei separier-

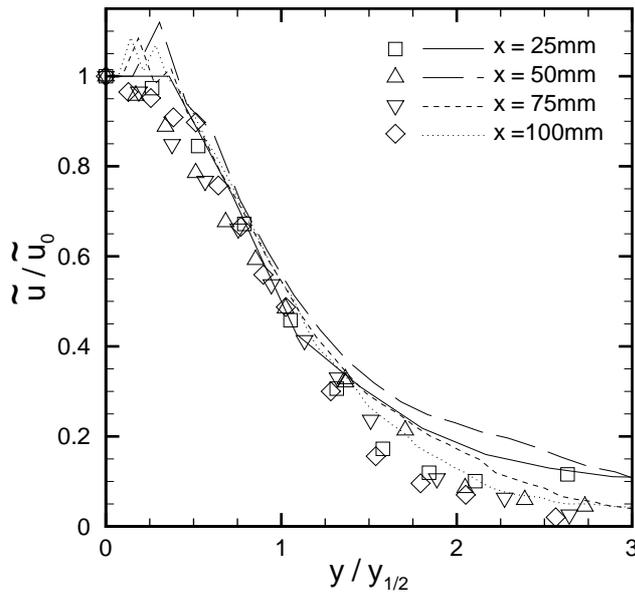


Abb. 4.56: Auf die Gasgeschwindigkeit der Symmetrieachse normierte axiale Gasgeschwindigkeit  $\tilde{u}/\tilde{u}_0$  eines reagierenden Ethanolstrahls über der normierten radialen Koordinate  $y/y_{1/2}$ . Symbole: Methanol-Experiment [20] und Linien: RS-Modell

ten Hauptreaktionszonen erkennbar. Das Maximum der Gastemperatur liegt mit etwa 1000 K deutlich unter der Maximaltemperatur der in Kapitel 4.3 beschriebenen Methanolflamme. Dies ist durch die Benutzung der gleichen Rand- und Anfangsbedingungen und wie bei der Methanolflamme zu erklären: Die Verwendung der gleichen Tropfenverteilung bedeutet wegen der höheren Ethanolmasse einen um den Faktor  $M_{\text{Ethanol}}/M_{\text{Methanol}} \approx 1,5$  erhöhten Massenfluss mit der Folge, dass die Stöchiometrie der Flamme nicht der in den Flammenbibliotheken entspricht. Die größere verdampfende Masse bewirkt eine stärkere Abkühlung der Gasphase.

In Abbildung 4.56 sind Profile der normierten Axialgeschwindigkeit gezeigt. Da die gleichen strömungsdynamischen Randbedingungen wie bei der zuvor betrachteten Methanol-Flamme vorliegen (Kapitel 4.3), sind neben den Ergebnissen der Ethanol-Simulation die experimentellen Daten der Methanol-Flamme von McDonell und Samuelsen [20] aus Kapitel 4.3 eingezeichnet.

Für die Axialgeschwindigkeit ergeben sich formal ähnliche Profile wie im Falle der turbulenten Methanolflamme. In Abbildung 4.56 sind die Axialgeschwindigkeiten bei verschiedenen Düsenabständen  $x$ , normiert auf die jeweilige Axialgeschwindigkeit auf der Symmetrieachse ( $\tilde{u}/\tilde{u}_0$ ), über der auf die Strahlhalbwertsbreite normierten radialen Position ( $y/y_{1/2}$ ) eingezeichnet. Die Normierung der Achsen ermöglicht den Vergleich der simulierten Ethanol-Flamme (Linien in Abbildung 4.56) mit den experimentellen Untersuchungen der Methanol-Flamme von McDonell und Samuelsen [20] (Symbole in Abbildung 4.56). Die Geschwindigkeitsprofile beider Flammen zeigen eine gute Übereinstimmung.

Da jedoch lediglich Rand- und Anfangsbedingungen der experimentell untersuchten Methanolflamme in die Simulation übernommen wurden und die Simulation mit neuen Flammenbibliotheken für Ethanol durchgeführt wurde, darf der Vergleich zwischen Simulation und Experiment nicht überbewertet werden. Die prinzipielle Funktionalität des Codes für Ethanolflammen ist mit den dargestellten Resultaten gezeigt. Eine vertiefte Auswertung ohne Vergleichsexperiment ist an dieser Stelle nicht angebracht.



## 5. Zusammenfassung und Ausblick

Inhalt dieser Arbeit ist die Entwicklung eines Reynolds–Spannungs–Modells (RSM) für turbulente Sprayflammen. Ausgehend von einem RSM für reine Gasphasen werden erweiterte Gleichungen mit neuen Sprayquelltermen hergeleitet. Für die Sprayquellterme werden Modellierungsansätze formuliert. Das neu entwickelte RSM für Sprayflammen wird zur numerischen Simulation eines turbulenten Freistrahls mit reagierendem und nicht reagierendem Methanolspray herangezogen. Hierzu wurde der von Hollmann [12] um die Sprayanteile ergänzte Computercode CORA 2 zur Simulation turbulenter Methanol–Sprayflammen mittels des  $k$ - $\varepsilon$ -Modells um das RS–Modell erweitert. In einem weiteren Schritt wird das Program zur Simulation turbulenter Ethanol–Sprayflammen vorbereitet, indem der Code um die entsprechenden Spezies erweitert und ein erster Testlauf mit den eingebundenen laminaren Sprayflammenbibliotheken für den neuen Brennstoff durchgeführt wird.

Desweiteren wird der Einfluss der Auswahlkriterien für die Flammenbibliotheken bezüglich der Flammenkonfiguration und der Abhängigkeit vom Tropfenanfangsgröße in den laminaren Spraydiffusionsflammenbibliotheken untersucht.

Die mathematisch–physikalische Beschreibung des Zweiphasensystems bestehend aus einer turbulenten Gasphase und einem dünnen Spray erfolgt über einen Euler–Lagrange–Formalismus. Für die Gasphase werden die Erhaltungsgleichungen der Favre–gemittelten physikalischen Größen in einer Eulerschen Betrachtungsweise gelöst. Das verwendete RS–Modell hat gegenüber dem  $k$ - $\varepsilon$ -Modell den Vorteil, dass anisotrope Effekte der turbulenten Strömung sowie Einflüsse durch Rotation oder der sogenannten counter–gradient diffusion (Gegen–Gradient Diffusion) [2]. erfasst werden und die zusätzlich berechneten physikalischen Größen wie die Geschwindigkeitsvarianzen und –Korrelationen mit dem Experiment verglichen werden können.

Mit der Annahme eines dünnen Sprays wird das flüssige Volumen gegenüber dem Gasvolumen vernachlässigt und der Sprayeinfluss auf die Gasphase wird in Form von Punktquelltermen in den Gasphasengleichungen realisiert. Die Gesamtheit des Sprays wird durch eine endliche Anzahl von Tropfenpaketen beschrieben. Unter der Annahme unendlich schneller Wärmeleitung innerhalb der Flüssigkeit wird die Erwärmung der Tropfen berechnet. Zur Beschreibung der Tropfenverdampfung wird das Zweifilm–Modell angewendet. Die Trajektorien der Tropfen werden in einer Lagrange–Formulierung errechnet, wobei die Wechselwirkung zur turbulenten Gasphase über statistische

Methoden modelliert werden.

Die Chemie des Verbrennungsprozesses wird über das Flamelet-Modell erfasst. In den dabei verwendeten Bibliotheken für laminare Spraydiffusionsflammen in der Gegenstromkonfiguration sind detaillierte chemische Reaktionsmechanismen verwendet. Die Bibliotheken beinhalten Abhängigkeiten vom Tropfenanfangsradius sowie von der Flammenstreckung. In Abhängigkeit des lokal im turbulenten Strömungsfeld vorliegenden Sauterradius, der skalaren Dissipationsrate, des Mischungsbruchs und seiner Varianz liefern die Sprayflammenbibliotheken die Gemischzusammensetzung der Gasphase. Über statistische Verteilungsfunktionen des Mischungsbruchs ( $\beta$ -Funktion) und der skalaren Dissipationsrate (logarithmische Normalverteilung) wird dabei die Wechselwirkung zwischen den chemischen Reaktionen und der Turbulenz der Gasphase erfasst.

Zur numerischen Lösung des Differentialgleichungssystems findet ein Finite-Volumen-Verfahren in Verbindung mit einem SIMPLE (*Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations*) Algorithmus und der *Upwind*-Methode Anwendung. Iterativ werden die Gleichungen der flüssigen Phase und der Gasphase mit den Sprayquelltermen gelöst bis Konvergenz erreicht ist.

Für die Validierung des neuen RS-Modells für turbulente Spraydiffusionsflammen werden Mischungsbruch, Temperatur- und Geschwindigkeitsfelder der Gasphase sowie Sauterradien der verdampfenden Tropfen und der gasförmige Brennstoffanteil untersucht und mit experimentellen Werten sowie einer Simulation mit  $k$ - $\varepsilon$ -Modell verglichen. Ferner werden die im RS-Modell berechneten Geschwindigkeitskorrelationen und -Varianzen im Vergleich mit verschiedenen Experimenten betrachtet.

Zunächst wird ein rotationssymmetrisches, nicht reagierendes turbulentes Methanolspray nach einem Experiment von McDonell und Samuleson [20] simuliert und sowohl mit den Messdaten als auch einer Simulation mit dem  $k$ - $\varepsilon$ -Modell von Hollmann [12] verglichen. Beide Simulationen liefern hierbei ähnlich gute Übereinstimmung mit dem Experiment. Der Vorteil der Simulation mit dem RSM gegenüber der Simulation mit dem  $k$ - $\varepsilon$ -Modell liegt hier vor allem in den zusätzlich berechneten Geschwindigkeitsvarianzen und -Korrelationen, die eine gute Übereinstimmung mit den experimentellen Werten zeigen. Durch eine normierte Darstellung der Ergebnisse ist ein Vergleich mit Experimenten mit ähnlichen Anfangs- und Randbedingungen möglich. Ein Vergleich der Profile mit turbulenten Gasstrahlen von Wygnanski [98] und Hussein [99] in großem Düsenabstand, wo der Einfluss des Sprays vernachlässigbar ist, zeigt qualitativ übereinstimmende Resultate. Eine im Experiment von McDonell und Samuelson [20] beobachtete leichte Rezirkulationszone kann in der numerischen Berechnung nicht bestätigt werden. Jedoch wird anhand einer Simulationsrechnung mit modifizierten Anfangsbedingungen gezeigt, dass das verwendete RSM prinzipiell in der Lage ist,

auch Strömungen mit Rezirkulationen zu beschreiben.

Für das rotationssymmetrische, reagierende turbulente Methanolspray ist analog dem nicht reagierenden Fall die Simulationsrechnung mit dem RSM einer Simulation mit dem  $k$ - $\varepsilon$ -Modell von Hollmann [12] und den experimentellen Messungen von McDonnell und Samuelson [20] gegenüber gestellt. Auch hier findet sich eine gute Übereinstimmung zwischen Experiment und Simulationen, wobei sich die verbesserte Qualität der numerischen Berechnung mit dem RSM gegenüber dem  $k$ - $\varepsilon$ -Modell nicht nur in den zusätzlich berechneten Geschwindigkeitsvarianzen und -Korrelationen zeigt; darüber hinaus beschreiben die Profile des Sauterradius besser den Verlauf der experimentell ermittelten Werte.

Die durchgeführte Untersuchung des Einflusses der Auswahlkriterien der Spraybibliotheken auf die Simulationsergebnisse zeigt, dass in verschiedenen Flammenbereichen mit unterschiedlichen Sauterradien der Tropfen der Einsatz von Bibliotheken mit unterschiedlichen Tropfengrößen notwendig ist. Eine weitere Verbesserung der Simulationsergebnisse ist durch die Ergänzung der verwendeten monodispersen Spraybibliotheken um weitere Tropfenradien zu erwarten. Als alternativer Ansatz kann, statt vieler monodisperser Spraybibliotheken verschiedener Tropfenradien, eine polydisperse Spraybibliothek verwendet werden, deren Tropfengrößenverteilung die Verteilung im Vergleichsexperiment wieder spiegelt.

Die Konfiguration der Gegenstromanordnung der eingebundenen Sprayflammenbibliothek wirkt sich hauptsächlich auf den achsennahen Bereich des Berechnungsgebietes aus. Die Integration einer Sprayflammenbibliothek mit Rotationssymmetrie führt im Vergleich zur planaren Sprayflammenbibliothek zu einer erhöhten Verbrennungstemperatur in der Nähe der Symmetrieachse.

Allgemein gilt, dass durch die Verwendung des RS-Modells im Vergleich zum  $k$ - $\varepsilon$ -Modell die Qualität der numerischen Simulation eines turbulenten Strömungsfeldes gesteigert wird, was mit erhöhten Berechnungszeiten einhergeht. Mit weiter wachsenden Computerkapazitäten werden noch rechenintensivere Methoden, wie beispielsweise LES-Methoden (*large eddy simulation*), bei denen das RS-Modell als *subgrid*-Modell verwendet werden kann, an Bedeutung gewinnen.

Zusätzlich wurde der Code um die Möglichkeit ergänzt, auch Simulationen für den Brennstoff Ethanol durchzuführen. Entsprechende Spraybibliotheken für Ethanol sind integriert und eine erste Simulationsrechnung, die die Funktionalität verifiziert, ist durchgeführt. Im nächsten Schritt sind hier die Anfangsbedingungen der Gas- und Tropfeneigenschaften an ein Experiment mit einer Ethanolflamme anzupassen, um die Simulationsergebnisse mit experimentellen Messungen zu vergleichen.



# Anhang



# A. Symbolverzeichnis

Symbol	Einheit	Bedeutung
$A$		Koeffizient einer Polynomentwicklung
$A_r$	$(\text{kmol}/\text{m}^3)^{m_r-1} \cdot 1/(\text{s K}^{\gamma_r})$	Frequenzfaktor in der parametrisierten Form der Reaktionsgeschwindigkeitskoeffizienten $k_r$ der Elementarreaktion $r$
$a_{j,\alpha}$		Massenanteil des Elements $j$ in der Spezies $\alpha$
$a_{n,\alpha}$	nach Verwendung	Koeffizienten zur Berechnung der spezifischen Wärmekapazität der Spezies $\alpha$
$a'_{n,\alpha}$	nach Verwendung	Koeffizienten zur Berechnung der spezifischen Enthalpie der Spezies $\alpha$
$\vec{a}$	$\text{m}/\text{s}^2$	Beschleunigung
$B$		Koeffizient einer Polynomentwicklung
$B_M$		Spalding–Massentransferzahl
$B_T$		Spalding–Wärmetransferzahl
$b_{n,\alpha\beta}$	nach Verwendung	Koeffizienten zur Berechnung der binären Diffusionskoeffizienten der Spezies $\alpha$ in Spezies $\beta$
$C$		Koeffizient einer Polynomentwicklung
$C_D$	$\text{m}^2/\text{s}^2$	Empirische Viskositätskonstante des $k$ - $\varepsilon$ -Modells
$C_d$		Widerstandsbeiwert
$C_\chi$		Konstante der Dissipationshypothese
$c_{n,\alpha}$	nach Verwendung	Koeffizienten zur Berechnung der dynamischen Viskosität der Spezies $\alpha$
$c_p$	$\text{J}/(\text{kg K})$	Spezifische Wärmekapazität bei konstantem Druck
$c_{p,\alpha}$	$\text{J}/(\text{kg K})$	spez. Wärmekapazität bei konstantem Druck der Spezies $\alpha$
$c_{\varepsilon,1}$		Konstante in der Transportgleichung für $\varepsilon$
$c_{\varepsilon,2}$		Konstante in der Transportgleichung für $\varepsilon$

Symbol	Einheit	Bedeutung
$D$		Koeffizient einer Polynomentwicklung
$D$	$\text{m}^2/\text{s}$	Diffusionskoeffizient
$D_{ij}$	$\text{kg}/(\text{m s}^3)$	Kopplungsterm der Geschwindigkeitsfluktuationen mit dem laminaren viskosen Spannungstensor
$D_{\alpha\beta}$	$\text{m}^2 / \text{s}$	binärer Diffusionskoeffizient der Spezies $\alpha$ in die Spezies $\beta$
$D_{\alpha,M}$	$\text{m}^2 / \text{s}$	Diffusionskoeffizient der Spezies $\alpha$ in die Mischung
$d_{n,\alpha}$	nach Verwendung	Koeffizienten zur Berechnung der Wärmeleitfähigkeit der Spezies $\alpha$
$d$	$\text{m}$	Düsendurchmesser
Da		Damköhler-Zahl
$\overline{\overline{E}}$		Einheitstensor
$E_{ar}$	$\text{J}/\text{mol}$	Aktivierungsenergie der Elementarreaktion $r$
$E_r$		Äquivalenzverhältnis
$e$	$\text{m}^3/\text{s}^2$	turbulente spektrale Energiedichte
$f$		Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion
$\vec{F}$	$\text{N}$	Kraft
$\vec{F}_d$	$\text{N}$	auf einen Tropfen einwirkende Kraft
$\vec{F}_{ex}$	$\text{N}$	externe Kräfte
$\vec{g}$	$\text{m}/\text{s}^2$	Vektor der Gravitationsbeschleunigung
$g_i$	$\text{m}/\text{s}^2$	$i$ -te Komponente der Gravitationsbeschleunigung
$h$	$\text{J}/\text{kg}$	spezifische Enthalpie
$h_\alpha$	$\text{J}/\text{kg}$	spezifische Enthalpie der Spezies $\alpha$
$h^0$	$\text{J}/\text{kg}$	spezifische Standardbildungsenthalpie
$h_\alpha^0$	$\text{J}/\text{kg}$	spezifische Standardbildungsenthalpie der Spezies $\alpha$
$\vec{j}_\phi$	$[\phi]/(\text{m}^2 \text{s})$	Stromdichte der physikalischen Größe $\phi$
Kn		Knudsen-Zahl
$k_r$	$(\text{kmol}/\text{m}^3)^{m_r-1} \cdot 1/\text{s}$	Reaktionsgeschwindigkeitskoeffizient der Elementarreaktion $r$
$K_F$		Massenkorrekturfaktor
$k$	$\text{m}^2/\text{s}^2$	turbulente kinetische Energie
$L_V$	$\text{J} / \text{kg}$	spezifische Verdampfungswärme
$L_\phi$	$[\phi]/(\text{m}^3 \text{s})$	Sprayquellterm der physikalischen Größe $\phi$
Le		Lewis-Zahl
$l$	$m$	charakteristische Längeneinheit der Strömung
$l_I$	$m$	integrales Längenmaß
$l_K$	$m$	Kolmogorov-Längenmaß

Symbol	Einheit	Bedeutung
$M$	1	Anzahl der Elemente
$\bar{M}$	kg/mol	Mittlere molare Masse
$M_j$	kg/mol	Molare Masse des Elements $j$
$M_\alpha$	kg/mol	Molare Masse der Spezies $\alpha$
$m$	kg	Masse
$m_\alpha$	kg	Masse der Spezies $\alpha$
$\dot{m}_l$	kg/s	Massenfluss der flüssigen Phase
$m_r$	1	Summe der stöchiometrischen Koeffizienten bei Elementarreaktion $r$ : $m_r = \sum_{\alpha=1}^N \nu'_{\alpha r}$
$N$	1	Anzahl der Spezies
Nu		Nusselt-Zahl
Pr		Prandtl-Zahl
$p$	N/m <sup>2</sup>	Druck
$P_\phi$	nach Verwendung	Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion eines beliebigen Skalars $\phi$
$P_{ij}$	kg/(m s <sup>3</sup> )	Produktionsterm
$R$	1	Anzahl der Elementarreaktionen
$R$	J/(mol K)	allgemeine Gaskonstante
Re		Reynolds-Zahl
$r$	m	Tropfenradius
Sc		Schmidt-Zahl
Sh		Sherwood-Zahl
$S_\alpha$	1	Symbole der chemischen Spezies $\alpha$
$S_\phi$	$[\phi]/(\text{m}^3 \text{s})$	Quellterme der chemischen Reaktionen der physikalischen Größe $\phi$
$t$	s	Zeit
$T$	K	Temperatur
$T_\phi$	$[\phi]/(\text{m}^3 \text{s})$	Gasphasenquellterm der physikalischen Größe $\phi$
$T_{ijk}$	kg/(m s <sup>3</sup> )	turbulenter Transportterm
$\vec{u}$	m/s	Gasgeschwindigkeit
$u_i$	m/s	$i$ -te Koordinate der Gasgeschwindigkeit
$u$	m/s	axiale Gasgeschwindigkeit
$\vec{U}$	m/s	Diffusionsgeschwindigkeit
$v$	m/s	radiale Gasgeschwindigkeit
$\vec{x}$	m	Ortsvektor
$X_\alpha$	1	Molenbruch der Spezies $\alpha$
$x$	m	axiale Koordinate
$Y_\alpha$	1	Massenbruch der Spezies $\alpha$
$y$	m	radiale Koordinate
$Z_j$	1	Elementmassenbruch des Elements $j$

Symbol	Einheit	Bedeutung
$\alpha$		Parameter der Gamma-Funktion
$\beta$		Parameter der Gamma-Funktion
$\gamma$		Parameter der Gamma-Funktion
$\gamma_r$	1	Temperaturerponent zur Berechnung des Elementarreaktionsgeschwindigkeitskoeffizienten $k_r$ bei der Elementarreaktion $r$
$\Gamma$	kg/(m s)	Austauschkoeffizient
$\delta_{ij}$		Komponente $ij$ des Einheitstensors (Kronecker-Symbol)
$\Delta$	m	Filterweite
$\varepsilon$	m <sup>2</sup> /s <sup>3</sup>	Dissipationsgeschwindigkeit der turbulenten kinetischen Energie
$\kappa$	kg/(m s)	Druckzähigkeit
$\lambda$	$m$	mittlere freie Weglänge der Atome bzw. Moleküle
$\lambda$	J/(m K s)	Wärmeleitfähigkeitskoeffizient
$\lambda$	1/m	Wellenzahl
$\lambda_\alpha$	J/(m K s)	Wärmeleitfähigkeitskoeffizient der Spezies $\alpha$
$\mu$	kg/(m s)	dynamische Viskosität
$\mu_\alpha$	kg/(m s)	dynamische Viskosität der Spezies $\alpha$
$\nu$	m <sup>2</sup> /s	kinematische Viskosität
$\nu'_{\alpha r}$	1	stöchiometrische Koeffizienten der Elementarreaktion $r$
$\nu''_{\alpha r}$	1	stöchiometrische Koeffizienten der Elementarreaktion $r$
$\Pi_{ij}$	kg/(m s <sup>3</sup> )	Umverteilungsterm
$\phi$	nach Verwendung	Variable
$\psi$	nach Verwendung	Variable
$\rho$	kg/m <sup>3</sup>	Dichte
$\overline{\tau}$	N/m <sup>2</sup>	Tensor der viskosen Spannungen
$\tau$	s	Zeitskala
$\sigma_R$		Breite der Reaktionszone im Mischungsbruchraum
$\chi$	1/s	skalare Dissipationsgeschwindigkeit
$\xi$		Mischungsbruch
$\xi_C$		Mischungsbruch basierend auf dem Element Kohlenstoff C
$\omega$	kg/(m <sup>3</sup> s)	spezifische Reaktionsgeschwindigkeit

---

**Häufig verwendete Indizes**


---

$C$		Kohlenstoff
$D$		Durchgangszeit [s]
$d$		Tropfen ( <i>droplet</i> )
Diff		Diffusion
$f$		Film
fuel		Brennstoff ( <i>fuel</i> )
$I$		Integral
$i$	$i = 1, \dots, 3$	Index für Vektorkoordinaten
$j$	$j = 1, \dots, M$	Index für chemische Elemente
$K$		Kolmogorov
$k$	$k = 1, \dots, M$	Index für Tropfenpakete
krit		kritische Stoffeigenschaften
$l$		Flüssigkeit ( <i>liquid</i> )
$M$		Mischung
$n$		Index bei Summen
$p$		Tropfenpaket ( <i>parcel</i> )
$r$	$r = 1, \dots, R$	Index für Elementarreaktionen
$S$		Sauter
st		stöchiometrisch
$t$		Turbulenz
$v$		Verdampfung ( <i>vaporization</i> )
$W$		Wirbel, Wand
$\alpha$	$\alpha = 1, \dots, N$	Index für Spezies
$\beta$	$\beta = 1, \dots, N$	Index für Spezies
$\phi$		Index für physikalische Größe

---

## B. Koeffizienten der Turbulenzmodelle

$C_D$ [56, 61]	$C_S$ [63]	$C_1$ [65]	$C_2$ [65]	$C_3$ [66]
0,09	0,22	3,0	0,33	0,5

Tab. B.1: Turbulenzparameter, viskose Spannungen

$C_\varepsilon$ [8]	$C_{\varepsilon_1}$ [8]	$C_{\varepsilon_2}$ [8]	$C_{\varepsilon_3}$ [8]	$C_{\varepsilon_4}$
1,3	1,44	1,92	1,0	1,0

Tab. B.2: Turbulenzparameter, Dissipationsrate

$C_{\phi_1}$ [8]	$C_{\phi_2}$ [8]	$C_{\phi_3}$ [8]	$C_{\tilde{\varepsilon}_{\phi\psi}}$ [2, 3]
3,0	0,5	0,5	2

Tab. B.3: Turbulenzparameter, skalare Größen

# Literaturverzeichnis

- [1] S. B. POPE: *Turbulent Flows*. University Press, Cambridge (2000)
- [2] N. PETERS: *Turbulent Combustion*. University Press, Cambridge (2000)
- [3] H. BOCKHORN: *Zur Struktur turbulenter Diffusionsflammen*. Habilitationsschrift, TU Darmstadt (1989)
- [4] F. A. WILLIAMS: *Combustion Theory*. Benjamin/Cummings Publishing Company, Menlo Park, CA (1985)
- [5] W. SIRIGNANO: *Fluid Dynamics And Transport of Droplets And Sprays*. University Press, Cambridge (1999)
- [6] G. M. FAETH: *Evaporation and Combustion of Sprays*. Prog. Energy Combust. Sci. **9**, 1–76 (1983)
- [7] C. K. LAW: *Recent Advances in Droplet Vaporization and Combustion*. Prog. Energy Combust. Sci. **8**, 171–201 (1982)
- [8] W. P. JONES, M. KAKHI: *Mathematical Modeling of Turbulent Flames*. In: F. C. ET AL. (Eds.), *Unsteady Combustion*. 411–491, Kluwer Academic Publishers, Netherlands (1996)
- [9] C. T. CROWE, M. P. SHARMA, D. E. STOCK: *The Particle–Source–In–Cell (PSI–Cell) Model for Gas–Droplet Flow*. J. Fluids Engin., 325–332 (1977)
- [10] B. ABRAMZON, W. A. SIRIGNANO: *Approximate Theory of a Single Droplet Vaporization in a Convective Field: Effects of Variable Properties, Stefan Flow, and Transient Liquid Heating*. Proc. 2nd ASME–JSME Thermal Eng. Joint Conf. **1**, 11–18, Honolulu Hawaii (1987)
- [11] B. ABRAMZON, W. A. SIRIGNANO: *Droplet Vaporization Model for Spray Combustion Calculations*. Int. J. Heat Mass Transfer **32**(9), 1605–1618 (1989)
- [12] C. HOLLMANN: *Modellierung turbulenter Sprayflammen unter Verwendung detaillierter chemischer Reaktionsmechanismen*. Dissertation, Universität Heidelberg (1997)

- 
- [13] N. PETERS: *Length Scales in Laminar Turbulent Flames*. In: E. S. ORAN, J. P. BORIS (Eds.), *Numerical Approaches to Combustion Modeling*. 155–182, Progress in Astronautics and Aeronautics, London (1991)
- [14] E. GUTHEIL, W. A. SIRIGNANO: *Counterflow Spray Combustion Modeling Including Detailed Transport and Detailed Chemistry*. *Combust. Flame* **113**(1–2), 92–105 (1998)
- [15] C. CHEVALIER: *Entwicklung eines detaillierten Reaktionsmechanismus zur Modellierung der Verbrennungsprozesse von Kohlenwasserstoffen bei Hoch- und Niedertemperaturbedingungen*. Dissertation, Universität Stuttgart (1992)
- [16] J. M. RICHARDSON, H. C. HOWARD, R. W. SMITH: *The Relation Between Sampling-Tube Measurements and Concentration Fluctuations in a Turbulent Gas Jet*. In: WILLIAMS, WILKINS (Eds.), *Proc. Comb. Inst.* Vol. **4**, 814–817, Baltimore (1953)
- [17] P. J. MASSIELLO: *Intermittency of the Fine Structure of Turbulent Velocity and Temperature Field Measured at High Reynolds Number*. Dissertation, University of California, San Diego (1974)
- [18] R. A. ANTONIA, K. R. SREENIVASAN: *Log-Normality of Temperature Dissipation in a Turbulent Boundary Layer*. *Phys. Fluids* **20**, 1500–1504 (1977)
- [19] A. R. KERSTEIN, W. T. ASHURST: *Lognormality of Gradients of Diffusive Scalars in Homogeneous, Two-Dimensional Mixing Systems.*, Sandia National Laboratories (1983)
- [20] V. G. McDONELL, G. S. SAMUELSEN: *Detailed Data Set: PDI and IRES Measurements in Methanol Sprays Under Reacting and Nonreacting Conditions, Case A–C*. Report UCI-ARTR-90-17A-C, UCI Combustion Laboratory Irvine (1990)
- [21] M. RAFFEL, C. WILLERT, J. KOMPENHANS: *Particle Image Velocimetry*. Springer-Verlag (1998)
- [22] P. LEGAL, N. FARRUGIA, D. A. GREENHALGH: *Development of Laser Sheet Dropsizing (LSD) for Spray Characterisation*. *Proc. ILASS-Europe 1998*, 469–474 (1998)
- [23] T. KUNZELMANN: *Charakterisierung von Sprayflammen mittels abbildender Laserspektroskopie*. Dissertation, Universität Heidelberg (2002)
- [24] W. RODI: *Numerische Berechnung turbulenter Strömungen in Forschung und Praxis*. Hochschulkurs, Institut für Hydromechanik Universität Karlsruhe (1996)

- [25] J. C. ROTTA: *Turbulente Strömungen*. Teubner Verlag, Stuttgart (1972)
- [26] C. HOLLMANN, E. GUTHEIL: *Flamelet-Modeling of Turbulent Spray Diffusion Flames Based on a Laminar Spray Flame Library*. *Combust. Sci. and Tech.* **135**, 175–192 (1998)
- [27] P. A. LIBBY, F. A. WILLIAMS: *Fundamental Aspects*. In: P. A. LIBBY, F. A. WILLIAMS (Eds.), *Turbulent Reacting Flows*. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York (1980)
- [28] R. W. BILGER: *Molecular Transport Effects in Turbulent Diffusion Flames at Moderate Reynolds Number*. *AIAA Journal* **20**, 962–970 (1982)
- [29] C. GERTHSEN, H. VOGEL: *Physik*. Springer-Verlag, Berlin (1993)
- [30] M. W. CHASE, C. A. DAVIS, J. R. DOWNEY, D. J. FRURIP, R. A. McDONALD, A. N. SYVERUD: *JANAF Thermodynamical Tables, 3rd. ed.* *J. Phys. Chem. Ref. Data* **14** Suppl. 1, Am. Chem. Soc. and Am. Inst. of Physics, Washington, D. C. (1985)
- [31] A. BURCAT, B. MCBRIDE: *1994 Ideal Gas Thermodynamic Data for Combustion and Air-Pollution Use*. Report TAE 697, TECHNION – Israel Institute of Technology Haifa, Israel (1993)
- [32] A. BURCAT: *Thermochemical Data for Combustion Calculations*. In: W. C. GARDINER (Eds.), *Combustion Chemistry*. Springer-Verlag, New York, Berlin, Heidelberg, Tokyo (1984)
- [33] J. O. HIRSCHFELDER, C. F. CURTIS, R. B. BIRD: *Molecular Theory of Gases and Liquids*. Wiley, New York (1954)
- [34] R. J. KEE, J. WARNATZ, J. A. MILLER: *A Fortran Computer Code Package for the Evaluation of Gas-Phase Viscosities, Conductivities, and Diffusion Coefficients*. Report SAND83–8209, Sandia Nat. Lab. Livermore (1983)
- [35] R. B. BIRD, W. E. STEWART, E. N. LIGHTFOOT: *Transport Phenomena*. John Wiley & Sons Inc., New York (1960)
- [36] J. O. HINZE: *Turbulence*. McGraw-Hill Book Company, New York (1975)
- [37] W. ROEDEL: *Physik unserer Umwelt: Die Atmosphäre*. Springer-Verlag, Heidelberg (1994)
- [38] K. GOERNER: *Technische Verbrennungssysteme*. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg (1991)

- 
- [39] A. N. KOLMOGOROV: *Equations of Tubulent Motion of an Incompressible Turbulent Fluid*. Izv. Akad. Nauk SSSR Seria Fizicheska VI, **56**(1–2), 56–58 (1942)
- [40] J. WARNATZ, U. MAAS, R. W. DIBBLE: *Verbrennung*. Springer–Verlag, Heidelberg (1996)
- [41] A. E. ATANIA, C. DONGIOVANNI, A. MITTICA: *Further Investigation into the Statistical Properties of Reciprocating Engine Turbulence*. International Symposium COMODIA **90**, 449–456 (1990)
- [42] W. RODI: *Turbulence Model And Their Application In Hydraulics*. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering **27**(1), 121–122 (1981)
- [43] A. GILL: *Modellierung der Verbrennung in einem Schichtlade–Motor unter Verwendung detaillierter chemischer Reaktionsmechanismen*. Dissertation, Universität Stuttgart (1995)
- [44] T. KATZENMEIER: *Simulation einer turbulenten reaktiven Kanalströmung mit Monte–Carlo–PDF–Methoden*. Dissertation, Universität Karlsruhe (2005)
- [45] M. LESIEUR: *Turbulence in Fluids*. Martinus Nijhoff Publishers, Dordrecht (1987)
- [46] A. FAVRE: *Statistical Equations of Turbulent Gases*. In: *Problems of Hydrodynamics and Continuous Mechanics*. 231–266. Society of Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, PA (1969)
- [47] R. W. BILGER: *A Note on Favre Averaging in Variable Density Flows*. Combust. Sci. Technol. **11**, 215–217 (1975)
- [48] R. W. BILGER: *Probe Measurements in Turbulent Combustion*. In: B. T. ZINN (Ed.), *Experimental Diagnostics in Gas Phase Combustion Systems*, AIAA, New York (1977)
- [49] R. W. BILGER: *Turbulent Reacting Flows with Nonpremixed Reactants*. In: P. A. LIBBY, F. A. WILLIAMS (Eds.), *Turbulent Reacting Flows*. Springer–Verlag, Berlin, Heidelberg, New York (1980)
- [50] W. P. JONES, J. H. WHITELOW: *Calculation Methods for Reacting Turbulent Flows: A Review*. Combustion and Flame **48**, 1–26 (1982)
- [51] J. WARNATZ, U. MAAS: *Technische Verbrennung*. Springer–Verlag, Berlin, Heidelberg (1993)

- [52] A. FAVRE: *Equations des gaz turbulents compressibles. I. Form generales.* J. de Mech. **4**(3), 361–390 (1965)
- [53] A. FAVRE: *Equations des gaz turbulents compressibles. II. Methodes de vitesse moyennes; methodes des vitesse macroscopiques ponderees par la masse volumique.* J. de Mech. **4**(4), 391–421 (1965)
- [54] D. PFUDERER: *Über das Potential klassischer statistischer Modelle zur Beschreibung turbulenter Strömungen.* Dissertation, TU Darmstadt (1997)
- [55] H. SCHADE, E. KUNZ: *Strömungslehre.* de Gruyter Lehrbuch Verlag (2000)
- [56] C. EIFERT: *Numerische Simulation dreidimensionaler turbulenter Strömungen mittels Momentenmodellen zweiter Ordnung.* Dissertation, TU Darmstadt (1997)
- [57] L. PRANDTL: *Über ein Formelsystem für die ausgebildete Turbulenz.* Mathe.–Phys. Klasse, Nachr. Akad. Wiss. Göttingen (1945)
- [58] B. E. LAUNDER, G. J. REECE, W. RODI: *Progress in the Development of a Reynolds–Stress Turbulence Closure.* J. Fluid Mech. **68**(3), 537–566 (1974)
- [59] F. H. HARLOW, P. I. NAKAYAMA: *Transport of Turbulence Energy Decay Rate.* Report LA–3854, Los Alamos Sci. Lab. Univ. California (1968)
- [60] W. P. JONES, B. E. LAUNDER: *The Prediction of Laminarization with a Two–Equation Model of Turbulence.* Int. J. Heat Mass Transfer **15**, 301–314 (1972)
- [61] T. LANDENFELD: *Numerische Beschreibung turbulenter Methandiffusionsflammen mit Schliessungsmodellen zweiter Ordnung und angenommenen Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen.* Dissertation, TU Darmstadt (1999)
- [62] J. L. LUMLEY: *Prediction Methods for Turbulent Flows. Introduction.* Lecture series no. **76**, Von Karman Institutes (1975)
- [63] B. J. DALY, F. H. HARLOW: *Transport Equations in Turbulence.* Phys. Fluids **13**, 2634–2649 (1970)
- [64] M. M. GIBSON, B. E. LAUNDER: *Ground Effects on Pressure Fluctuations in the Atmospheric Boundary Layer.* Journal of Fluid Mechanics **86**(3), 491–511 (1978)
- [65] M. M. GIBSON, B. A. YOUNIS: *Calculation of Swirling Jets with a Reynolds Stress Closure.* Physics of Fluid **29**(1), 38–48 (1986)

- 
- [66] B. E. LAUNDER: *On the Effects of a Gravitational Field on the Turbulent Transport of Heat and Momentum*. Journal of Fluid Mechanics **67**(3), 569–581 (1975)
- [67] K. HANJALIC, B. E. LAUNDER: *A Reynolds Stress Model of Turbulence and its Application to Thin Shear Flows*. Journal of Fluid Mechanics **52**(4), 609–638 (1972)
- [68] E. GUTHEIL: *Modellierung technischer Sprayflammen*. Fortschrittsberichte VDI–Reihe 6, Nr. 390, VDI–Verlag, Düsseldorf (1998)
- [69] Y. MIZUTANI, G. YASUMA, M. KATSUKI: *Stabilization of Spray Flames in a High-Temperature Stream*. In: Proc. Comb. Inst. Vol. **16**, 631–638, Pittsburgh (1977)
- [70] W. D. BACHALO: *Method for Measuring the Size and Velocity of Spheres by Dual-Beam Lightscatter Interferometry*. Appl. Opt. **19**, 363–370 (1980)
- [71] Y. ONUMA, M. OGASAWARA: *Studies on the Structure of a Spray Combustion Flame*. In: Proc. Comb. Inst. Vol. **15**, 453–465, Pittsburgh (1975)
- [72] G. M. FAETH: *Current Status of Droplet and Liquid Combustion*. Prog. Energy Combust. Sci. **3**, 191–224 (1977)
- [73] W. A. SIRIGNANO: *Fluid Dynamics of Spray — 1992 Freeman Scholar Lecture*. J. Fluids Engin. **115**, 345–378 (1992)
- [74] J. K. DUKOWICZ: *A Particle-Fluid Numerical Model for Liquid Sprays*. Journal of Computational Physics **35**, 229–253 (1980)
- [75] T. D. BUTLER, L. D. CLOUTMAN, J. K. DUKOWICZ, J. D. RAMSHAW, R. B. KRIEGER: In: J. N. MATTAVI, C. A. AMANN (Eds.), *Combustion Modeling in Reciprocating Engines*. 231–264, Plenum Press, New York (1980)
- [76] A. D. GOSMAN, R. J. R. JOHNS: *Computer Analysis of Fuel-Air Mixing in Direct-Injection Engines*. Paper 800091, SAE (1980)
- [77] G. L. HUBBARD, V. E. DENNY, A. F. MILLS: *Droplet Evaporation: Effects on Transients and Variable Properties*. Heat Mass Transfer **18**, 1003–1008 (1975)
- [78] A. D. GOSMAN, E. IOANNIDIS: *Aspects of Computer Simulation of Liquid-Fueled Combustors*. Paper 81-0323, AIAA (1981)
- [79] D. J. BROWN, P. HUTCHINSON: *The interaction of solid or liquid particles and turbulent fluid flow fields—a numerical simulation*. J. Fluids Engin. **101**, 265–269 (1979)

- [80] A. A. AMSDEN, P. J. O'ROURKE, T. D. BUTLER: *KIVA II: A Computer Program for Chemically Reactive Flows with Sprays.*, Los Alamos National Laboratory New Mexico (1989)
- [81] H. SCHLICHTING, K. GERSTEN: *Grenzschicht-Theorie*. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg (1997)
- [82] N. B. VARGAFTIK: *Handbook of Physical Properties of Liquids and Gases: Pure Substances and Mixtures*. Hemisphere Publ. Corp., Washington (1986)
- [83] R. C. REID, J. M. PRAUSNITZ, B. E. POLING: *The Properties of Gases and Liquids*. McGraw Hill, New York (1988)
- [84] R. SCHMEHL, G. KLOSE, R. KOCH, S. WITTICH: *Droplet Evaporation and Transport*. Brite Euram Report, Low Emission Combustor Technology Program — Phase III, Aeronautics Contract BRPR-CT95-0122 (1998)
- [85] R. MELLOR, N. A. CHIGIER, J. M. BEER: *Pressure Jet Spray in Air Stream*. Paper 70-GT-101, ASME (1970)
- [86] R. MUGGELE, H. D. EVANS: *Droplet Size Distribution in Sprays*. Ind. Engr. Chem. **43**(6), 1317–1324 (1951)
- [87] N. PETERS: *Laminar Diffusion Flamelet Models in Non-Premixed Turbulent Combustion*. Prog. Energy Combust. Sci. **10**, 319–339 (1984)
- [88] R. E. MEYERS, E. E. O'BRIEN: *The Joint PDF of a Scalar and Its Gradient at a Point in a Turbulent Fluid*. Combust. Sci. and Tech. **26**, 123–134 (1981)
- [89] J. JANICKA, N. PETERS: *Prediction of Turbulent Jet Diffusion Flame Lift-off Using a PDF Transport Equation*. In: Proc. Comb. Inst. Vol. **19**, 367–374, Pittsburgh (1982)
- [90] K. R. SREENIVASAN, R. A. ANTONIA, H. Q. DANH: *Temperature Dissipation Fluctuations in a Turbulent Boundary Layer*. Phys. Fluids **20**, 1238–1249 (1977)
- [91] S. V. PATANKAR: *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. Hemisphere Publishing Corporation, New York (1980)
- [92] S. K. SRIVATSA: *CORA 2: A Computer Code for Axi-Symmetrical Combustion Chambers*. CHAM, London (1977)
- [93] E. GUTHEIL: *Multiple Solutions for Structures of Laminar Counterflow Spray Flames*. Progress in Computational Fluid Dynamics, **5**(7), 414–419 (2005)

- 
- [94] V. G. McDONELL, G. S. SAMUELSEN: *An Experimental Data Base for the Computational Fluid Dynamics of Reacting and Nonreacting Methanol Sprays*. J. Fluids Engin. **117**, 145–153 (1995)
- [95] W. D. BACHALO, M. J. HAUSER: *Development of the Phase/Doppler Spray Analyzer for Liquid Drop Size and Velocity Characterizations*. In: Proc. AIAA/SAE/ASME 20th Joint Propulsion Conf., Cincinnati, Ohio (1984)
- [96] V. G. McDONELL, G. S. SAMUELSEN: *Application of Two-Component Phase Doppler Interferometry to the Measurement of Particle Size Mass Flux and Velocities in Two-Phase Flows*. In: Proc. Comb. Inst. Vol. **22**, 1961–1971, (1988)
- [97] M. ADACHI, V. G. McDONELL, G. S. SAMUELSEN: *Non-Intrusive Measurement of Gaseous Species in Reacting and Non-Reacting Sprays*. Combust. Sci. and Tech. **75**, 179–194 (1991)
- [98] I. WYGNANSKI, H. FIEDLER: *Some Measurements in the Self-Preserving Jet*. J. Fluid Mech. **38**, 577–612 (1969)
- [99] H. J. HUSSEIN, S. CAPP, W. K. GEORGE: *Velocity Measurements in a High-Reynolds-Number, Momentum-Conserving Axisymmetric, Turbulent Jet*. J. Fluid Mech. **258**, 31–75 (1994)
- [100] A. K. TOLPADI: *Two-Phase Flow Calculation of Reacting and Nonreacting, Nonswirling, Air-Assisted Methanol Sprays*. Atomiz. and Sprays **4**, 303–323 (1994)
- [101] J. RODE: *Simulation von Brennstoff-Luft-Sprayflammen unter Verwendung detaillierter chemischer Reaktionsmechanismen*. Zulassungsarbeit, Universität Heidelberg (2001)
- [102] E. GUTHEIL: *Structure and Extinction of Laminar Ethanol/Air Spray Flames*. Combustion Theory and Modeling **5**, 1–15 (2001)
- [103] A. SADIKI, A. DREIZLER: *Teilprojekt A4: Thermodynamisch konsistente Momentenmodellierung der Tropfen-Turbulenzwechselwirkung in Gasturbinen-Sprays*. “Strömung und Verbrennung in zukünftigen Gasturbinenbrennkammern”, Arbeits- und Ergebnisbericht für die Jahre 2001–02–03, SFB 568, Darmstadt (2003)