

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

**Numerische Modellierung und Untersuchung  
der Hochdruckeindüsung nicht-idealer Fluide  
bei überkritischen Druckverhältnissen**

M.Sc. Matthias Banholzer

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

Doktor-Ingenieurs (Dr.-Ing.)

genehmigten Dissertation.

Vorsitzender: Prof. Dr.-Ing. Christian Mundt  
1. Berichterstatter: Prof. Dr. rer. nat. Michael Pfitzner  
2. Berichterstatter: Prof. Dr.-Ing. habil. Bernhard Weigand

Die Dissertation wurde am 06.03.2019 bei der Universität der Bundeswehr München eingereicht und durch die Fakultät für Luft- und Raumfahrttechnik am 01.08.2019 angenommen.

Tag der Prüfung: 02.08.2019



## Vorwort

Die vorliegende Arbeit ist im Rahmen meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Thermodynamik der Universität der Bundeswehr München entstanden. Ich möchte mich an dieser Stelle bei all denjenigen bedanken, die zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben.

Mein besonderer Dank gilt Prof. Dr. rer. nat. Michael Pfitzner für die Betreuung, die fachliche Unterstützung und das entgegengesetzte Vertrauen, wodurch die Arbeit besonders angenehm war und nicht an Reiz verloren hat. Weiterhin möchte ich mich bei Prof. Dr.-Ing. habil. Bernhard Weigand für die Übernahme des Koreferats sowie Prof. Dr.-Ing. Christian Mundt für die Übernahme des Vorsitzes des Promotionsausschusses bedanken.

Gefördert wurde die Arbeit unter anderem von der Forschungsvereinigung Verbrennungskraftmaschinen e.V. im Rahmen des Projekts Gas-Diesel-Brennverfahren, das von uns und dem Labor für Aerothermochemie und Verbrennungssysteme der Eidgenössischen Technischen Hochschule Zürich akademisch betreut wurde. Dem begleitenden Arbeitskreis mit diversen Vertretern aus der Industrie unter der Leitung des Obmanns Herrn Dr. Michael Willmann von der Woodward L'Orange GmbH möchte ich für die konstruktiven Diskussionen und Impulse danken. Den Kollegen aus Zürich danke ich für die zur Verfügung gestellten Mess- und Validierungsdaten.

Ein weiterer Dank gehört meinen Kolleginnen und Kollegen am Institut, die über die Jahre zu einer sehr angenehmen Arbeitsatmosphäre beigetragen haben und von denen ich mittlerweile viele zu meinem Freundeskreis zählen darf. Unvergessen bleiben die Kletterausflüge, Hüttengaudis, Schlauchboottouren und vieles mehr. Besonders hervorheben möchte ich dabei Julian Zips, mit dem ich vom ersten Tag an das Büro geteilt habe, und Christoph Traxinger, ohne dessen Thermodynamikexpertise und Mehrphasenimplementierung die Arbeit in diesem Umfang nicht möglich gewesen wäre. Ich hoffe, dass wir auch weiterhin einen engen Kontakt pflegen werden. Vielen Dank an Euch!

Nicht zuletzt möchte ich mich bei meiner Familie, meiner Freundin und meinen Freunden bedanken. Ihr habt mich insbesondere in den letzten Monaten gestärkt und motiviert, habt euch in arbeitsintensiven Wochen verständlich gezeigt und wusstet, wann man mir den nötigen Freiraum geben muss.

München, den 13.08.2019

Matthias Banholzer



## Kurzzusammenfassung

Um die steigenden Mobilitäts- und Wohlstandsbedürfnisse der Bevölkerung und den damit einhergehenden Energiebedarf im Verkehrs- und Stromerzeugungssektor zu decken, müssen Lösungen gefunden werden. Dabei sollen die Belastungen für Mensch und Umwelt unter Beibehaltung eines hohen thermischen Wirkungsgrades deutlich reduziert werden. Eine Alternative zu den konventionellen Kraftstoffen Benzin, Diesel und Schweröl ist Erdgas. Hier kann bei gleicher mechanischer Leistung der Ausstoß von CO<sub>2</sub>, Stickoxiden und Ruß deutlich gesenkt werden. Um einerseits die benötigte Masse an Brennstoff in den Zylinder zu befördern und andererseits den hohen Zylinderdrücken während der Verdichtungs- und Verbrennungsphase entgegen zu wirken, wird der Brennstoff bei der Direkteindüsing im Vergleich zur Saugrohreinblasung unter hohem Druck in die Brennkammer eingeblasen. Obwohl diese Methode in der Industrie schon zur Anwendung kommt, fehlt es jedoch an einem umfassenden Verständnis der einzelnen Phänomene. Die Komplexität der Teilspekte und die nicht-linearen Stoffeigenschaften des Fluids bei hohen Drücken und/oder niedrigen Temperaturen stellen dabei eine besondere Herausforderung dar.

Da die Annahme eines thermisch idealen Gases für die in der Arbeit betrachteten Zustände nicht mehr zulässig ist, wurde auf Basis der kubischen Zustandsgleichung von Soave, Redlich und Kwong eine konsistente Realgasthermodynamik in das quelloffene Softwarepaket von OpenFOAM implementiert. Die mit der Zustandsgleichung berechneten Stoffeigenschaften zeigen dabei eine ausreichend genaue Übereinstimmung mit Werten der CoolProp-Datenbank. Außerdem ist durch die Verwendung der kubischen Form der erhöhte Rechenbedarf in der Strömungssimulation vertretbar. Auftretende Expansionen im Injektor und im Freistrahl kühlen das Fluid ab, wodurch die Sättigungsdampflinie unterschritten wird und ein Phasenzerfall erfolgt. Dieser wird unter der Annahme eines Dampf-Flüssigkeit-Gleichgewichts berücksichtigt. Soll die Kondensation der Gasphase nicht berücksichtigt werden, kann ein einphasiger Ansatz angewandt werden.

Um die stark gekoppelten Strömungsgrößen des kompressiblen Prozesses korrekt sowie auftretende Diskontinuitäten exakt und ohne unphysikalische Oszillationen wiederzugeben, wurde ein druckbasierter Strömungslöser in Kooperation mit einem Forschungsinstitut aus Moskau für die Anwendung der Realgasthermodynamik weiterentwickelt. Die Stärke des Lösen ist eine hybride Methode, in der ein Umschalten zwischen dem PISO-Verfahren und dem hochgenauen Verfahren von Kurganov und Tadmor stattfindet. Dadurch eignet sich die Anwendung des Lösen für alle Strömungsgeschwindigkeiten. Zusätzlich wurde zur Simulation des Öffnungsprozesses der Gasnadel eine Netzbewegung implementiert.

Der kritische Massenstrom und Impulsfluss sind die für die Eindüsung relevanten Größen, die die Gemischbildung maßgeblich beeinflussen. Eine explizite Berechnung dieser Größen ist nur unter der Annahme des idealen Gasgesetzes möglich, da der zweite, temperaturabhängige Term der kubischen Zustandsgleichung die analytische Bestimmung der Werte verhindert. Auf Grundlage eines mehrdimensionalen Newton-Verfahrens und der bereits vorgestellten Realgasthermodynamik wurde ein Algorithmus entwickelt, der die Strömungsgrößen bei kritischer Düsenströmung im engsten Querschnitt berechnet. Mit einer auf wenige fluidspezifische Modellkonstanten reduzierten Korrelation können diese beiden Größen auch ohne Anwendung des iterativen Algorithmus ermittelt werden.

Im letzten Schritt kam die implementierte Thermodynamik zusammen mit dem Strömungslöser zur Anwendung. Es wurden sowohl generische Testfälle als auch anwendungs-

nahe Hochdruckeindüsungen mit verfügbaren Vergleichsdaten simuliert. Die Ergebnisse der RANS-Simulationen zeigen, dass für eine korrekte Vorhersage der Gemischbildung sowohl die Realgasthermodynamik als auch die Kompressibilitätskorrektur im Turbulenzmodell zwingend erforderlich ist. Der Vergleich mit verfügbaren experimentellen Messdaten zeigt eine sehr gute Übereinstimmung bezüglich der Struktur des Potenzialkerns und die wichtigsten Charakteristiken des Freistrahls werden erfasst. Während die Düsenkontur entscheidend auf die Eindringtiefe und das volumetrische Wachstum Einfluss nimmt, beeinflussen unterschiedliche Gegendrücke die von der ersten Expansion dominierte Strömungsstruktur im Nahfeld der Düse, was sich auch auf das Zweiphasengebiet auswirkt. Eine Variation des Totaldrucks unter Beibehaltung des Druckverhältnisses, eine Veränderung der Totaltemperatur und eine andere Zusammensetzung des Brennstoffs wirken sich unterschiedlich auf die Gemischbildung und die Kondensationsneigung im Potenzialkern aus. Alle Effekte werden physikalisch korrekt von der entwickelten numerischen Methode, bestehend aus dem hybriden Strömungslöser und der konsistenten Realgasthermodynamik mit den inkludierten Phasengleichgewichtsberechnungen, wiedergegeben.

## Abstract

The ever increasing mobility and prosperity demands of the society lead to more and more energy consumption in the transport and power generation sector. In order to fulfill those needs, solutions have to be found which can reduce the pollution on people and environment while maintaining a high thermal efficiency. One of the most promising alternative fuel besides gasoline, diesel and heavy oil is natural gas. It shows the same performance as the conventional fuels and has the ability to reduce the CO<sub>2</sub>- nitric oxides- and soot-emissions significantly. In contrast to the port fuel injection, the direct injection method is applied at high pressures. Thus the cylinder can be fed with the required amount of fuel and the high pressure level helps to overcome the high chamber pressures during the compression stroke and during the combustion stroke. Although this technique is already common in industry, there's still a lack of understanding of the underlying phenomena, which is mainly due to the complexity of the single aspects and the non-linear fluid properties at high pressures and/or low temperatures.

Since the ideal gas assumption for the operating points considered in this work is not valid anymore, consistent real gas thermodynamics were implemented in OpenFOAM based on the equation of state of Soave, Redlich and Kwong. Using the cubic equation of state, the fluid properties can be calculated in a sufficiently accurate manner while the additional computational time for the numerical simulations is still acceptable. Expansions lead to a temperature and pressure decrease in the flow field and the fluid state falls below the saturation vapor pressure. This results in a phase separation which is modeled under the assumption of an instantaneous vapor-liquid equilibrium. If the occurring condensation of the gas phase is not of interest, a single-phase approach is used.

The high pressure injection of a gaseous fuel is a compressible process with strongly coupled flow properties, where numerical solutions of the flow field can exhibit unphysical oscillations. Therefore a pressure-based solver was advanced in cooperation with a research institute in Moscow by implementing the before mentioned real gas thermodynamics. The underlying hybrid approach switches between the PISO- and the highly accurate Kurganov-Tadmor-method, resulting in a numerical scheme capable of simulating fluid flows at all speeds. Additionally a mesh motion procedure was implemented in order to simulate the opening process of the needle of the injector.

The mixture formation inside the combustion chamber is mainly influenced by the critical mass flow and momentum flux provided at the nozzle exit. Under the assumption of an ideal gas the respective values can be calculated using explicit formulas. For cubic equations of state this is not the case because of the temperature dependency of the second term. However, an iterative algorithm was developed using a multi-dimensional Newton method in order to calculate the flow properties for the choked flow. A newly derived formulation correlates the properties in the plenum with the critical flow properties and is therefore able to predict the mass flow and the momentum flux without applying the iterative algorithm.

Finally the solver including the implemented real gas thermodynamics was applied to numerical simulations. The RANS-results of generic test cases and engine-relevant cases where experimental data is available show, that the consistent modeling of real gas effects cannot be neglected. A compressibility correction within the turbulence model leads to more physical results compared to experimental data. The nozzle geometry can affect the

injection characteristics considerably. Furthermore, comparing the results of the near nozzle flow field with the experimental findings, a very good agreement regarding the structure of the potential core can be achieved where all of the important characteristics match quite well. The flow structure in the potential core is dominated by the first expansion downstream of the nozzle exit, hence different values for the chamber pressure influence the potential core and therefore the two-phase regions. A variation of the total pressure while maintaining the pressure ratio, a variation of the total temperature and a variation of the composition of the fuel affect the mixture formation and the affinity to build a second, liquid phase differently. The developed numerical method, consisting of the hybrid solver and the consistent real gas thermodynamics including phase separation calculations, is able to predict the flow in the injector and the resulting mixture formation in the combustion chamber precisely.

# Inhaltsverzeichnis

<b>Abbildungsverzeichnis</b>	<b>ix</b>
<b>Tabellenverzeichnis</b>	<b>xv</b>
<b>Symbolverzeichnis</b>	<b>xvii</b>
<b>Abkürzungsverzeichnis</b>	<b>xxi</b>
<b>1 Einleitung</b>	<b>1</b>
1.1 Motivation . . . . .	1
1.2 Stand der Forschung . . . . .	3
1.2.1 Unterexpandierte Gasfreistrahlen . . . . .	3
1.2.2 Phasenzerfall in Gasfreistrahlen . . . . .	8
1.2.3 Eindimensionale Düsenströmung . . . . .	10
1.3 Gliederung der Arbeit . . . . .	12
<b>2 Grundlagen</b>	<b>15</b>
2.1 Grundgleichungen . . . . .	15
2.2 Abgrenzung thermodynamischer Bereiche . . . . .	17
2.3 Thermodynamik realer Gase . . . . .	19
2.3.1 Reinstoffe . . . . .	19
2.3.2 Mischungen . . . . .	21
2.3.3 Transporteigenschaften . . . . .	21
2.4 Thermodynamik mehrphasiger Fluide . . . . .	22
2.4.1 Reinstoffe . . . . .	22
2.4.2 Mischungen . . . . .	23
2.4.3 Phasengleichgewicht und Berechnungsmethoden . . . . .	26
2.4.4 Kompressibilität und Schallgeschwindigkeit . . . . .	33
2.4.5 Validierung . . . . .	34
2.4.6 Einphasiger Ansatz . . . . .	37
2.5 Turbulenzmodellierung . . . . .	38
2.6 Unterexpandierte Gasfreistrahlen . . . . .	42
2.6.1 Gesperrte Düse . . . . .	43
2.6.2 Freistrahllstruktur . . . . .	43
2.6.3 Eigenschaften . . . . .	44
<b>3 Strömungslöser</b>	<b>47</b>
3.1 Methodik und Herleitung . . . . .	47
3.2 Netzbewegung . . . . .	55
3.3 Validierung . . . . .	56
3.3.1 Konvergent-divergente Düse . . . . .	57
3.3.2 Unterexpandierter Freistrahrl . . . . .	58
3.3.3 Eindimensionales, kartesisches Riemann-Problem . . . . .	58

<b>4 Eindimensionale Düsenströmung</b>	<b>65</b>
4.1 Thermodynamisches Modell . . . . .	65
4.2 Algorithmus . . . . .	66
4.3 Validierung . . . . .	68
4.4 Kritische Größen . . . . .	70
4.5 Relative Massenstrom- und Impulsflussdichte . . . . .	72
4.6 Korrelation . . . . .	73
<b>5 Ergebnisse</b>	<b>75</b>
5.1 Referenzinjektor . . . . .	75
5.2 Modellierungseinflüsse . . . . .	83
5.2.1 Realgasthermodynamik . . . . .	84
5.2.2 Turbulenzmodellierung . . . . .	88
5.3 Generische Studien . . . . .	93
5.3.1 Geometrievariation . . . . .	93
5.3.2 Temperaturvariation . . . . .	96
5.3.3 Einfluss des Fluids - Reinstoff . . . . .	97
5.3.4 Einfluss des Fluids - Mischungen . . . . .	99
5.4 Testfälle . . . . .	101
5.4.1 Experimenteller Aufbau . . . . .	101
5.4.2 Validierung . . . . .	104
5.4.3 Diskussion der Testfälle . . . . .	108
5.4.4 Einphasiger Ansatz . . . . .	117
5.4.5 Temperaturvariation . . . . .	120
5.4.6 Druckvariation . . . . .	122
5.4.7 Einfluss des Fluids - Mischungen . . . . .	125
5.4.8 Rechenzeit . . . . .	126
<b>6 Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>129</b>
<b>A Thermodynamische Zusammenhänge und Validierung der Zustandsgleichung</b>	<b>135</b>
<b>B Methodik und Validierung des Strömungslösers</b>	<b>141</b>
<b>C Zusätzliche Abbildungen für die eindimensionale Düsenströmung</b>	<b>145</b>
<b>D Experimenteller Aufbau und Messverfahren der ETH Zürich</b>	<b>149</b>
<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>151</b>

# Abbildungsverzeichnis

1.1	Gegenüberstellung der zwei unterschiedlichen Gemischbildungarten [25]. . . . .	2
2.1	<i>pT</i> -Diagramm für Methan berechnet mit der SRK-ZGL. . . . .	18
2.2	Zustandsdiagramme für Methan. . . . .	23
2.3	Zustandsdiagramme für eine Methan-Stickstoff-Mischung: 80 mol-% Methan, 20 mol-% Stickstoff. Der Pfad von Punkt $D'$ über Punkt $E'$ und $F'$ zu Punkt $G'$ stellt eine isotherme Kompression bei 170 K dar. Grau dargestellt sind die Kurven des Reinstoffs Methan. . . . .	25
2.4	<i>pz</i> -Diagramm für eine Methan-Stickstoff-Mischung. . . . .	26
2.5	<i>pv</i> -Diagramm für Methan mit eingezeichneter Spinodale und metastabilem Zweiphasengebiet. . . . .	28
2.6	Schematische Darstellung der implementierten Phasengleichgewichtsberechnung. . . . .	29
2.7	TPD-Analyse nach Michelsen [110] für eine 80 %ige Methan- und 20 %ige Stickstoff-Mischung bei 35 bar. Die TPD wird an die vorgegebene Zusammensetzung mit $w_{N_2} = 0.2$ angelegt. . . . .	32
2.8	Vergleich des Phasengleichgewichts der mit der SRK-ZGL berechneten Daten mit verfügbaren Messdaten [32, 22, 27, 156]. . . . .	35
2.9	<i>px</i> -Diagramm für das ternäre Gemisch Methan-Ethan-Stickstoff. . . . .	36
2.10	Validierung der Berechnung der Kompressibilität und der Schallgeschwindigkeit für die Prudhoe Bay-Zusammensetzung [130]. . . . .	37
2.11	<i>pv</i> -Diagramm für Methan. . . . .	38
2.12	Schematische Darstellung eines moderat unterexpandierten Freistrahls. . . . .	44
2.13	Repräsentation eines transienten turbulenten Freistrahls nach Turner [164].	45
3.1	Eindimensionale Darstellung der Gebietsunterteilung für das KT-Verfahren.	50
3.2	Zelle (P) und Nachbarzelle (N) mit den negativen und positiven Richtungen zur Aufteilung des Flussberechnung. . . . .	51
3.3	Lösungsalgorithmus <code>realMixtureHybridFoam</code> . . . . .	54
3.4	Lineare Rekonstruktion einer eindimensionalen Stufenfunktion. . . . .	55
3.5	Veranschaulichung der Netzbewegung mittels Topologieänderung. Im linken Teil der Abbildung wird eine Zellschicht hinzugefügt, grün schraffiert dargestellt, da eine gewisse Dicke $\Delta_{max}$ überschritten wurde. Der rechte Teil zeigt das Entfernen der Zellschicht aufgrund des Unterschreitens des Limits $\Delta_{min}$ .	56
3.6	Vergleich der numerischen mit den analytischen Ergebnissen für die konvergent-divergente Düse: Druckverhältnis $p/p_0$ (links) und Nahaufnahme des Stoßes aus Betriebspunkt (II) (rechts). . . . .	57
3.7	Vergleich des simulativ gemittelten Dichtegradienten ( $ \nabla\rho $ , unten) mit dem experimentell aufgezeichneten Schlierenbild (oben). Die Skala des berechneten Dichtegradienten reicht von 1 bis $1000 \text{ kg/m}^4$ . . . . .	58
3.8	Definition und Strömungsform des eindimensionalen Riemann-Problems mit $p_L > p_R$ und $u_L = u_R = 0$ . . . . .	60

3.9 Vergleich der normierten Lösungen für das eindimensionale Riemann-Problem, Momentaufnahmen nach $t = 0.5$ ms. (E), (K) und (S) markieren die Expansion, die Kontaktdiskontinuität und den Stoß. Das Ergebnis des Riemann-Lösers ist mit 1D-RG und 1D-IG (RG - Realgasthermodynamik, IG - Ideal-gasthermodynamik), die Lösung des Strömungslösers mit CFD-RG gekennzeichnet. . . . .	64
3.10 Nahaufnahme des Stoßes (links) und der Kontaktdiskontinuität (rechts) des Testfalls für verschiedene Auflösungen. . . . .	64
4.1 Beschränkung des Lösungsintervalls mittels der Sättigungsgrößen für $p$ und $T$ . Die grau hinterlegte Fläche kennzeichnet das Zweiphasengebiet. . . . .	68
4.2 Maximierung des Massenstroms für die SRK-ZGL. . . . .	68
4.3 Vergleich der Ergebnisse der eindimensionalen Berechnungsmethode mit Literatur-Daten. . . . .	69
4.4 Kritische Größen für Methan bei einer Totaltemperatur von 300 K. . . . .	70
4.5 Vergleich der Massenstrom- und Impulsflussdichte für verschiedene ZGL. . .	71
4.6 Relative Massenstrom- und Impulsflussdichte für Methan bei einem reduzierten Druck von $0.2 \leq p_{r,0} \leq 17.4$ und einer reduzierten Total-Temperatur $T_{r,0}$ von 1.2, 1.4, 1.6, 2.0 und 2.6. . . . .	72
4.7 Relative Massenstrom- und Impulsflussdichte für Methan bei einem reduzierten Druck von $0.2 \leq p_{r,0} \leq 17.4$ und einer reduzierten Totaltemperatur $T_{r,0}$ von 1.2, 1.4, 1.6, 2.0 und 2.6. . . . .	74
5.1 Schematische Darstellung des in dieser Arbeit verwendete Referenzinjektors.	76
5.2 Netzunabhängigkeitstudie für die trans-/supersonische Injektordurchströmung. . . . .	78
5.3 Darstellung der Strömungsgrößen im Nahbereich der Düse für die Referenz-simulation mit einem Totaldruck von 300 bar bei einem Gegendruck von 100 bar ( $T_0 = T_{ch} = 294$ K). . . . .	79
5.4 Strömungsgrößen auf der Symmetriearchse des Injektors. . . . .	80
5.5 Brennstofffeinhüllende für den ersten Testfall. . . . .	81
5.6 Axiale Eindringtiefe und volumetrisches Wachstum für den ersten Testfall. .	81
5.7 Alternative Darstellungen der axiale Eindringtiefe für den ersten Testfall. .	82
5.8 Konzentrationsverteilung des Brennstoffs auf der Symmetriearchse und in ra-dialer Richtung für verschiedene axiale Abstände. Verglichen wird mit den Korrelationen von Molkov [115], Birch <i>et al.</i> [19] und Wu <i>et al.</i> [180]. . . . .	83
5.9 Einfluss der Idealgasmodellierung auf Massenstrom und Impulsfluss bei kri-tischer ( $Ma = 1$ ) Durchströmung. Normalisiert mit den Werten für die Re-algasmodellierung. . . . .	84
5.10 Einfluss der Idealgasmodellierung auf Eindringtiefe, volumetrisches Wachs-tum und Machzahl. Normalisiert mit den Werten für die Realgasmodellierung.	86
5.11 Einfluss der Idealgasmodellierung auf Eindringtiefe und volumetrisches Wachs-tum. . . . .	87
5.12 Einfluss der Idealgasmodellierung auf die Gemischbildung. Momentaufnahme für $t = 0.85$ ms. . . . .	88
5.13 Einfluss der Idealgasmodellierung auf die Strömungsgrößen auf der Symme-trieachse. Momentaufnahme nach $t = 2$ ms. . . . .	89

5.14 Einfluss der Turbulenzmodellierung auf die Mach-Zahl der düsennahen Strömung. . . . .	90
5.15 Einfluss des Turbulenzmodells auf die Eindringtiefe und das volumetrische Wachstum des Brennstofffreistrahls. . . . .	91
5.16 Einfluss des Turbulenzmodells auf gewählte Strömungsgrößen auf der Symmetrieachse. . . . .	92
5.17 Schematische Darstellung der fünf untersuchten Düsengeometrien. . . . .	94
5.18 Einfluss der Düsengeometrie auf die Durchströmung des Spritzloches. Dargestellt ist der Kontur-Plot der Mach-Zahl mit einer schwarzen Iso-Linie für $Ma = 1$ . . . . .	95
5.19 Einfluss der Düsengeometrie auf die Eindringtiefe und den volumetrischen Zuwachs. . . . .	95
5.20 Einfluss der Brennstofftemperatur auf den Massenstrom und Impulsfluss bei kritischer Durchströmung mit $Ma = 1$ . . . . .	96
5.21 Einfluss des Fluids auf den Massenstrom und Impulsfluss bei kritischer Durchströmung mit $Ma = 1$ . . . . .	97
5.22 Einfluss des Reinstoffs auf das volumetrische Wachstum und die Dichteverteilung entlang der Symmetrieachse. Ergebnisse aus der 3D-CFD. . . . .	98
5.23 Einfluss der Brennstoff-Qualität auf den Massenstrom und Impulsfluss bei kritischer Durchströmung mit $Ma = 1$ ( $T_0 = 300$ K). . . . .	100
5.24 Einfluss der Brennstoffzusammensetzung auf das Zweiphasengebiet und die Strömung im Düsennahbereich. . . . .	100
5.25 Betrachtung des Nadelsitzes: Geometrie (a) und Transitionsvorgang (b). . . . .	103
5.26 Gemessener und für die Simulationen aufbereiteter Nadelhubverlauf und Nadelgeschwindigkeit der fünf Testfälle. . . . .	104
5.27 Gegenüberstellung der experimentell und numerisch ermittelten Eindringtiefen. . . . .	105
5.28 Vergleich der zeitlichen Eindringtiefe $Z_t/d$ für die fünf definierten Testfälle mit Gegendrücke von 12 bis 60 bar. . . . .	106
5.29 Vergleich der Miestreuungsmessungen (linke Spalte) mit den numerisch erzielten Ergebnissen (rechte Spalte) für die Methaneindüsing bei $p_0 = 300$ bar und $T_0 = 294$ K in ruhende Luft mit verschiedenen Gegendrücken und einer Temperatur von $T_\infty = 294$ K. Für den letzten Testfall mit einem Gegendruck von 12 bar ist zusätzlich das Ergebnis der Strömungssimulation mit dem Standard- $k\omega$ SST-Turbulenzmodell dargestellt. . . . .	107
5.30 Nahaufnahme des p300020-Testfalls: Konturplot für den Massenbruch $w_{CH_4}$ , den Dampfgehalt $\beta_v$ , die Mach-Zahl $Ma$ , den Druck $p$ und die Temperatur $T$ . . . . .	108
5.31 Gesonderte Darstellung des Zweiphasengebiets. Jede Markierung stellt einen kondensierten Zustand dar. . . . .	109
5.32 Nahaufnahme des p300012-Testfalls: Konturplot für den Massenbruch $w_{CH_4}$ , den Dampfgehalt $\bar{\beta}_v$ , die Machzahl $Ma$ , den Druck $p$ und die Temperatur $T$ . . . . .	110
5.33 Verlauf einiger Strömungsgrößen entlang der Symmetrieachse des Injektors. Die farbig hinterlegten Bereiche kennzeichnen die jeweiligen Zweiphasengebiete im Freistrahl. . . . .	112
5.34 Geschwindigkeitskomponente senkrecht zur Hauptströmungsrichtung $u_y$ . In der oberen Hälfte sind zusätzlich Isokurven für den Brennstoff bei $w_{CH_4} = 0.5, 0.7$ und $0.9$ eingetragen. In der unteren Hälfte wurde die Darstellung auf die Kondensationsgebiete reduziert. . . . .	113

5.35 Strömungsgrößen im Injektor (oben) und Nadelsitz (unten) zu Beginn der Öffnung der Gasnadel. Jede Spalte entspricht einem Zeitschritt, verschiedene Strömungsgrößen können den einzelnen Reihen entnommen werden. . . . .	114
5.36 Vergleich des transienten Verhaltens der beiden Freistrahlen mit (obere Hälfte der einzelnen Momentaufnahmen) und ohne simulierter Nadelöffnung (untere Hälfte). Die schwarze Linie markiert die Isokontur für den Brennstoff mit $w_{\text{CH}_4} = 0.005$ . Zusätzlich ist die massengemittelte Temperatur $\bar{T}$ und der volumengemittelte Druck $\bar{p}$ des Sacklochs mit angegeben. Im oberen Bild rechts ist der Massenstrom zu finden, die fünf Zeitpunkte für die dargestellten Momentaufnahmen sind markiert. . . . .	116
5.37 Einfluss des Nadelhubverlaufs auf die Eindringtiefe und das volumetrische Wachstum des Brennstofffreistrahls (Gerold und Pfitzner [56], Vuorinen <i>et al.</i> [171]). . . . .	117
5.38 Vergleich der düsennahen Strömungsstruktur des p300012-Testfalls für die beiden unterschiedlichen thermodynamischen Modelle. In der linken Spalte wurden Kondensationseffekte ( $0.68 < \bar{\beta}_v < 1$ ) mit den Phasengleichgewichtsberechnungen berücksichtigt, die rechte Spalte spiegelt die Ergebnisse des einphasigen Ansatzes wieder. . . . .	118
5.39 Einfluss der einphasigen Modellierung auf Eindringtiefe und Impulsfluss. . .	119
5.40 Vergleich der numerisch erzielten Ergebnissen für die Methaneindüsung bei $p_0 = 300 \text{ bar}$ und $T_0 = 363 \text{ K}$ in ruhende Luft mit verschiedenen Gegendrücken und einer Temperatur von $T_{ch} = 363 \text{ K}$ und $T_{ch} = 294 \text{ K}$ , $t = 2 \text{ ms}$ . . .	121
5.41 Einfluss der Temperaturerhöhung des Brennstoffs und der Kammer auf die Eindringtiefe und das volumetrische Wachstum des Brennstoff-Freistrahls. .	122
5.42 Einfluss der Druckerhöhung des Brennstoffs auf die Kondensationsgebiete und die Struktur des Potenzialkerns. . . . .	124
5.43 Einfluss der Brennstoffdruckerhöhung auf die Eindringtiefe und das volumetrische Wachstum des Brennstofffreistrahls unter konstantem Druckverhältnis. . . . .	125
5.44 Einfluss der Brennstoffmischung auf die Kondensationsgebiete und die Struktur des Potenzialkerns. Die linke Spalte zeigt das Ergebnis der Strömungssimulation der Methanersatzmischung, die rechte Spalte das Ergebnis mit der Russland H-Zusammensetzung. . . . .	126
5.45 Einfluss der Brennstoffmischung auf die Verteilung des zündfähigen Gemisches für die drei Druckverhältnisse $\Pi = 5, 10$ und $20$ . Momentaufnahmen nach 1 ms Simulationszeit. . . . .	127
A.1 Dichte, Schallgeschwindigkeit, Kompressibilitätsfaktor und dynamische Viskosität von Methan bei $p_1 = 100 \text{ bar}$ , $p_2 = 300 \text{ bar}$ und $p_3 = 500 \text{ bar}$ . . . . .	138
A.2 Dichte, Schallgeschwindigkeit, Kompressibilitätsfaktor und dynamische Viskosität von Ethan bei $p_1 = 100 \text{ bar}$ , $p_2 = 300 \text{ bar}$ und $p_3 = 500 \text{ bar}$ . . . . .	139
A.3 Dichte, Schallgeschwindigkeit, Kompressibilitätsfaktor und dynamische Viskosität von Stickstoff bei $p_1 = 40 \text{ bar}$ , $p_2 = 80 \text{ bar}$ und $p_3 = 120 \text{ bar}$ . . . . .	139
B.1 Druckfeld nach einer Iteration. . . . .	142
B.2 Vergleich der Ausdrücke im Konvektionsterm für die hybride Druckgleichung und die PISO-Formulierung. . . . .	143

B.3 Vergleich der Lösungen für das eindimensionale Riemann-Problem, Momentaufnahmen nach $t = 0.5$ ms. Das Ergebnis des Riemann-Lösers ist mit 1D-RG und 1D-IG (RG - Realgasthermodynamik, IG - Idealgasthermodynamik), die Lösung des Strömungslösers mit CFD-RG gekennzeichnet. . . . .	144
B.4 Vergleich der Lösungen für das eindimensionale Riemann-Problem, Momentaufnahmen nach $t = 0.4$ ms. . . . .	144
C.1 Kritische Größen für Stickstoff bei einer Total-Temperatur von 300 K. . . . .	145
C.2 Kritische Größen für Wasserstoff bei einer Total-Temperatur von 300 K. . .	146
C.3 Relative Massenstrom- und Impulsflussdichte für Stickstoff bei einem reduzierten Druck von $0.2 \leq p_{r,0} \leq 23.6$ und einer reduzierten Total-Temperatur $T_{r,0}$ von 1.3, 1.5, 1.7, 2.0 und 4.0. . . . .	146
C.4 Relative Massenstromdichte $\Gamma$ und relative Impulsflussdichte $\Psi$ für Stickstoff bei einem reduzierten Druck von $0.2 \leq p_{r,0} \leq 23.6$ und einer reduzierten Total-Temperatur $T_{r,0}$ von 1.3, 1.5, 1.7, 2.0 und 4.0. . . . .	147
C.5 Funktionen für die Koeffizienten $A, B, C, D, E, F, G$ und $H$ der beiden Fluide Methan und Stickstoff in dem jeweils gültigen Temperaturbereich. . . . .	148
D.1 Experimenteller Aufbau. . . . .	149
D.2 Nachbearbeitung der Schlierenaufnahmen in drei Schritten. . . . .	149



# Tabellenverzeichnis

1.1	Literaturübersicht experimenteller Arbeiten bzgl. expandierten/unterexpandierten Gasfreistrahlen. . . . .	4
1.2	Literaturübersicht numerischer Arbeiten bzgl. expandierten/unterexpandierten Gasfreistrahlen. . . . .	7
1.3	Literaturübersicht bzgl. des Phasenzerfalls in Gasfreistrahlen. . . . .	10
1.4	Literaturübersicht bzgl. der eindimensionalen Düsenströmung. . . . .	11
5.1	Details des Berechnungsnetzes für die Netzunabhängigkeitsstudie bei einem Gegendruck von 100 bar. . . . .	78
5.2	Gegenüberstellung der verwendeten Modellierung für die Realgas- und die Idealgasthermodynamik. . . . .	85
5.3	Massenstrom und Impulsfluss für die Geometrievariation. . . . .	94
5.4	Gasbeschaffenheit der zu untersuchenden Erdgasmischungen. Der Molembrech wird mit $z_i$ , der Massenbruch mit $w_i$ bezeichnet. . . . .	99
5.5	Definierte Testfälle für den Vergleich zwischen Experiment und Simulation. . . . .	103
5.6	Massenstrom, Impulsfluss und die zugehörigen Kennzahlen für die vier Betriebspunkte mit einer Brennstofftemperatur von 294 bzw. 363 K und einem Brennstoffdruck von 300 bzw. 500 bar. Zusätzlich werden die Quotienten für die Größen im engsten Querschnitt zu den Plenumsbedingungen angegeben. . . . .	123
5.7	Vorhersagen der Korrelationen auf die durch die Druckänderung induzierte Änderung der Eindringtiefe und des volumetrischen Wachstums. Werte sind mit der Annahme des thermisch idealen Gases (IG) und der SRK-ZGL (RG) gegeben. . . . .	124
5.8	Vergleich der Rechenzeiten der drei in dieser Arbeit vorgestellten Modellierungsansätze. Normiert wurden die Werte mit der benötigten Rechenzeit für die Simulation mit Idealgastthermodynamik. . . . .	127
A.1	Modellparameter der in dieser Arbeit verwendeten Fluide. . . . .	135
A.2	Modellkoeffizienten für die NASA-Polynome. . . . .	136
C.1	Fluid-abhängige Koeffizienten für die Temperaturabhängigkeit von $A$ , $B$ , $C$ , $D$ , $E$ , $F$ , $G$ und $H$ . . . . .	147
C.2	Maximaler Fehler, mittlerer Fehler und Standardabweichung der Korrelation ( $\Gamma$ , $\Psi$ ) für Methan und Stickstoff. . . . .	148



# Symbolverzeichnis

## Lateinische Symbole

$a$	$\text{m}^3/\text{mol}$	Modellparameter für Zustandsgleichung
$a_f$	$\text{m}/\text{s}$	Charakteristische Ausbreitungsgeschwindigkeit
$a_s$	$\text{m}/\text{s}$	Schallgeschwindigkeit
$A$	$\text{m}^2$	Fläche
$A_p$	$\text{kg}/(\text{m}^3 \text{s})$	Koeffizientenmatrix der Impulsgleichung
$b$	$\text{m}^3/\text{mol}$	Modellparameter für Zustandsgleichung
$c_p$	$\text{J}/(\text{kg K})$	Spezifische Wärmekapazität bei konstantem Druck
$c_v$	$\text{J}/(\text{kg K})$	Spezifische Wärmekapazität bei konstantem Volumen
$C$	$\text{m}$	Phasenraumkurve
$C$	$\text{kg}/\text{s}$	Massenstrom
$C_d$	—	Durchflusskoeffizient
$C_M$	—	Impulsflusskoeffizient
$C^*$	—	Kritischer Strömungsfaktor
$d$	$\text{m}$	Düsendurchmesser
$d_e$	$\text{m}$	Effektiver Durchmesser
$d_{ps}$	$\text{m}$	Pseudodurchmesser
$D$	$\text{m}$	Durchmesser der Brennkammer
$D_{ij}$	$\text{m}^2/\text{s}^3$	Dilatationsanteil des Diffusionsterms in der RST
$D_{p,ij}$	$\text{m}^2/\text{s}^3$	Druckdilatationsanteil des Diffusionsterms in der RST
$D_k$	$\text{m}^2/\text{s}$	Diffusionskoeffizient
$D_{k,i}$	$\text{m}/\text{s}$	Diffusionsfluss
$E_{\text{pot}}$	$\text{kg m}^2/\text{s}^2$	Potenzielle Energie
$f$	$\text{Pa}$	Fugazität
$\mathbf{f}(\mathbf{u})$	div.	Flüsse der Erhaltungsgrößen
$F$	—	Funktionsgleichung
$F_1$	—	Mischfunktion für Turbulenzmodell
$g$	$\text{J}/\text{mol}$	Gibbs-Energie
$G$	$\text{kg}/(\text{m}^2 \text{s})$	Massenstromdichte
$h$	$\text{J}/\text{mol}$	Spezifische Enthalpie
$h_t$	$\text{J}/\text{mol}$	Totale spezifische Enthalpie
$H_p$	$\text{kg}/(\text{m}^2 \text{s}^2)$	Quellterm der Impulsgleichung
$k$	$\text{m}^2/\text{s}^2$	Turbulente kinetische Energie
$k_{ij}$	—	Binärer Interaktionsparameter
$\mathbf{K}$	—	Gleichgewichtsverhältnis
$K_{ij}$	$\text{m}^2/\text{s}^3$	Konvektionsterm in der RST
$l$	$\text{m}$	Länge
$l_n$	$\text{m}$	Nadelhub
$L$	$\text{m}$	Länge
$\dot{m}$	$\text{kg}/\text{s}$	Massenstrom
$M_n$	$\text{m}^4/\text{s}^2$	Kinetischer Impulsfluss
$M_w$	$\text{kg}/\text{mol}$	Molares Gewicht
$\dot{M}_n$	$\text{kg m}/\text{s}^2$	Impulsfluss am Düsenaustritt
$p$	$\text{Pa}$	Druck

$p$	$\text{W}/\text{m}^2$	Wärmestromdichte
$P$	$\text{kg}/(\text{m s}^2)$	Impulsflussdichte
$P_{ij}$	$\text{m}^2/\text{s}^3$	Produktionsterm in der RST
$Q$	J	Wärmemenge
$r$	m	Radius
$s$	$\text{J}/(\text{mol K})$	Spezifische Entropie
$S_{ij}$	1/s	Scherspannungstensor
$S_\beta$	$\text{kg}/(\text{m}^3 \text{s})$	Quellterm
$S_f$	$\text{m}^2$	Zellfläche eines KV
$t$	s	Zeit
$T$	K	Temperatur
$T_{ij}$	$\text{m}^2/\text{s}^3$	Turbulenter Diffusionsterm in der RST
$TV$	—	Totale Variation
$u$	$\text{m}/\text{s}$	Geschwindigkeit
$\mathbf{u}$	div.	Erhaltungsgrößen
$u_{\text{eff}}$	$\text{m}/\text{s}$	Effektive Geschwindigkeit
$u_s$	$\text{m}/\text{s}$	Stoßgeschwindigkeit
$U$	J	Innere Energie
$v$	$\text{m}^3/\text{kg}$	Spezifisches Volumen
$V$	$\text{m}^3$	Volumen
$V_j$	$\text{m}^3$	Volumetrisches Wachstum
$\tilde{V}_j$	—	Normiertes volumetrisches Wachstum
$V_n$	$\text{m}^3/\text{s}$	Volumenstrom
$w, \mathbf{w}$	—	Massenbruch
$w, \mathbf{w}$	—	Molare Ersatzzusammensetzung
$w_f$	$\text{m}^3/\text{s}$	Volumenfluss
$W, \mathbf{W}$	—	Molenzahl
$x, y, z$	m	Kartesische Raumrichtung
$x, \mathbf{x}$	—	Flüssiger Molanteil
$y, \mathbf{y}$	—	Gasförmiger Molanteil
$z, \mathbf{z}$	—	Molanteil
$Z$	—	Kompressibilitätsfaktor
$Z_t$	m	Eindringtiefe

## Griechische Symbole

$\alpha$	—	Modellparameter für Zustandsgleichung
$\alpha_f$	—	Gewichtungsfaktor KT-Verfahren
$\alpha_P$	1/K	Isobarer Expansionskoeffizient
$\beta$	—	Molanteil
$\beta$	—	Gedachte, intensive Größe
$\gamma$	—	Verhältnis der spezifischen Wärmekapazitäten
$\Gamma$	—	Relativer Massenstrom
$\delta_{ij}$	—	Kronecker-Delta
$\epsilon$	—	Fehler
$\epsilon$	$\text{m}^2/\text{s}^3$	Dissipation
$\epsilon_c$	$\text{m}^2/\text{s}^3$	Kompressible Dissipation

$\bar{\epsilon}$	—	Mittlerer Fehler
$\kappa$	—	Modellparameter für Zustandsgleichung
$\kappa_f$	—	Mischfunktion
$\lambda$	$\text{W}/(\text{m K})$	Wärmeleitfähigkeit
$\lambda$	$\text{m/s}$	Eigenwerte der Jacobimatrix
$\lambda$	—	Verbrennungsluftverhältnis
$\mu_i$	$\text{J/mol}$	Chemisches Potential
$\mu$	$\text{kg}/(\text{m s})$	Dynamische Dichte
$\mu_t$	$\text{kg}/(\text{m s})$	Turbulente, dynamische Dichte
$\nu_t$	$\text{m}^2/\text{s}$	Kinematische Wirbelviskosität
$\xi$	$1/\text{Pa}$	Kompressibilität
$\rho$	$\text{kg}/\text{m}^3$	Dichte
$\sigma$	—	Standardabweichung
$\sigma_{ij}$	$\text{kg}/(\text{m s}^2)$	Viskoser Spannungstensor
$\phi_f$	$\text{kg}/\text{s}$	Massenfluss
$\Phi_f$	$\text{kg}/\text{s}$	Massenfluss
$\Phi_{ij}$	$\text{m}^2/\text{s}^3$	Druck-Scher-Korrelation in der RST
$\varphi$	—	Fugazitätskoeffizient
$\psi$	$\text{s}^2/\text{m}^2$	Kompressibilität
$\Psi$	—	Relative Impulsflussdichte
$\omega$	—	Azentrischer Faktor
$\omega$	$1/\text{s}$	Spezifische Dissipationsrate

## Kennzahlen

ACo	Akustische Courant-Friedrichs-Lowy-Zahl
CFL	Courant-Friedrichs-Lowy-Zahl
Le	Lewis-Zahl
Ma	Machzahl
Ma <sub>t</sub>	Turbulente Machzahl

## Konstanten

$A$	= 5.4	Modellkonstante Konzentrationsverteilung
$\pi$	= 3.14	Kreiszahl
$\alpha_1$	= 1	Modellkonstante Turbulenzmodell
$\alpha_2$	= 0.4	Modellkonstante Turbulenzmodell
$\alpha_3$	= 0.2	Modellkonstante Turbulenzmodell
$\beta$		Modellkonstante volumetrisches Wachstum
$\beta_{\text{SST}}$	= $F_1\beta_1 + (1 - F_1)\beta_2$	Modellkonstante Turbulenzmodell
$\beta_1$	= 0.075	Modellkonstante Turbulenzmodell
$\beta_2$	= $\beta^*(C_{\epsilon 2} - 1)$	Modellkonstante Turbulenzmodell
$\beta^*$	= 0.09	Modellkonstante Turbulenzmodell
$C_\mu$	= 0.09	Modellkonstante Turbulenzmodell
$C_{\epsilon 1}$	= 1.44	Modellkonstante Turbulenzmodell
$C_{\epsilon 2}$	= 1.92	Modellkonstante Turbulenzmodell
$C_T$	= 0.0161	Modellkonstante Eindringtiefe

$\gamma$	= 0.44	Modellkonstante Turbulenzmodell
$\gamma_{\text{SST}}$	= $\gamma_1 \Phi_1 + (1 - F_1) \gamma_2$	Modellkonstante Turbulenzmodell
$\gamma_1$	= $\beta_1 / \beta^* - \sigma_{\omega 1} K^2 / \sqrt{\beta^*}$	Modellkonstante Turbulenzmodell
$\gamma_2$	= $C_{\epsilon 1} - 1$	Modellkonstante Turbulenzmodell
$\Gamma$		Modellkonstante Eindringtiefe
$\sigma_k$	= 1.0	Modellkonstante Turbulenzmodell
$\sigma_{k1}$	= 0.5	Modellkonstante Turbulenzmodell
$\sigma_{k2}$	= $1 / \sigma_k$	Modellkonstante Turbulenzmodell
$\sigma_{\omega 1}$	= 0.5	Modellkonstante Turbulenzmodell
$\sigma_{\omega 2}$	= $1 / \sigma_{\epsilon}$	Modellkonstante Turbulenzmodell
$\sigma_{\omega, \text{SST}}$	= $F_1 \sigma_{\omega 1} + (1 - F_1) \sigma_{\omega 2}$	Modellkonstante Turbulenzmodell
$k$		Modellkonstante Konzentrationsverteilung
$K$	= 0.41	Modellkonstante Turbulenzmodell
$\sigma_{\epsilon}$	= 0.0	Modellkonstante Turbulenzmodell
$\mathcal{R}_u$	= 8.314 J/(molK)	Universelle Gaskonstante
$x_d$	= 6.7 mm	Fiktiver Düsenursprung

## Indizes

$ch$	Werte in der Kammer
$cl$	Wert auf der Symmetrieachse
$c$	Kritische Größen (thermodynamisch)
$f$	Interpolierte Größen auf den Zellflächen eines KV
$F$	Fluid
$h$	Bei konstanter Enthalpie
$ig$	Idealgasanteil
$i,j,k$	Vektorkomponenten
$k$	Anzahl der Spezies
$l$	flüssig
$n$	Werte am Düsenaustritt
$n$	Zeitschritt
$r$	Reduzierte Größen
$rg$	Realgasanteil
$R$	Relativer Anteil
$S$	Oberfläche
$T$	Bei konstanter Temperatur
$v$	dampfförmig
$z$	Bei konstanter Zusammensetzung
$0$	Totalgrößen
*	Kritische Größen (strömungsmechanisch)

# Abkürzungsverzeichnis

<b>BWR</b>	Benedict-Webb-Rubin
<b>C<sub>2</sub>H<sub>6</sub></b>	Ethan
<b>C<sub>3</sub>H<sub>8</sub></b>	Propan
<b>C<sub>4</sub>H<sub>10</sub></b>	Butan
<b>C<sub>5</sub>H<sub>12</sub></b>	Pentan
<b>C<sub>6</sub>H<sub>14</sub></b>	Hexan
<b>CAD</b>	Rechnerunterstütztes Konstruieren (engl. <i>Computer-aided design</i> )
<b>CC</b>	Kompressibilitätskorrektur (engl. <i>Compressibility correction</i> )
<b>CFD</b>	Numerische Strömungssimulation (engl. <i>Computational fluid dynamics</i> )
<b>CFL</b>	Courant-Friedrichs-Lowy
<b>CH<sub>4</sub></b>	Methan
<b>CO<sub>2</sub></b>	Kohlenstoffdioxid
<b>CPU</b>	Hauptprozessor (engl. <i>Central processing unit</i> )
<b>DEM</b>	Dominante Eigenwert Methode
<b>DI</b>	Direkteinspritzung/-eindüsung (engl. <i>Direct injection</i> )
<b>DNS</b>	Direkte numerische Simulation
<b>ETHZ</b>	Eidgenössische Technische Hochschule Zürich
<b>FVM</b>	Finite-Volumen-Methode
<b>FVV</b>	Forschungsvereinigung Verbrennungskraftmaschinen e.V.
<b>H<sub>2</sub></b>	Wasserstoff
<b>HH</b>	Helmholtz
<b>HPC</b>	Großrechner (engl. <i>High performance computer</i> )
<b>IG</b>	Idealgas
<b>KT</b>	Kurganov-Tadmor
<b>KNP</b>	Kurganov-Noelle-Petrova
<b>KV</b>	Kontrollvolumen
<b>LAV</b>	Labor für Aerothermochemie und Verbrennungssysteme
<b>LES</b>	Grobstruktursimulation (engl. <i>Large eddy simulation</i> )
<b>LIF</b>	Laserinduzierte Fluoreszenz
<b>N<sub>2</sub></b>	Stickstoff
<b>NASA</b>	engl. <i>National Aeronautics and Space Administration</i>
<b>NM</b>	Newton Methode
<b>NO<sub>x</sub></b>	Stickoxid (auch Stickstoffoxide) NO und NO <sub>2</sub>
<b>NPR</b>	Totaldruckverhältnis (engl. <i>Nozzle pressure ratio</i> )
<b>NPR<sub>n</sub></b>	Düsendruckverhältnis (engl. <i>Nozzle pressure ratio</i> )
<b>O<sub>2</sub></b>	Sauerstoff
<b>PFI</b>	Saugrohreindüsung/-einblasung (engl. <i>Port fuel injection</i> )
<b>PISO</b>	Druckkorrekturverfahren (engl. <i>Pressure-Implicit with Splitting of Operators</i> )
<b>PKW</b>	Personenkraftwagen
<b>PR</b>	Peng-Robinson
<b>RANS</b>	Reynolds-gemittelte Navier-Stokes (engl. <i>Reynolds-averaged Navier-Stokes</i> )
<b>RST</b>	Reynoldsspannungstransportgleichung
<b>RG</b>	Realgas
<b>SIMPLE</b>	Druckkorrekturverfahren (engl. <i>Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations</i> )

<b>SRK</b>	Soave-Redlich-Kwong
<b>SSM</b>	Sukzessive Substitutionsmethode
<b>SST</b>	Subspannungstransport (engl. <i>Shear stress transport</i> )
<b>TKE</b>	Turbulente Kinetische Energie
<b>TPD</b>	Abstand der Tangente von der Fläche (engl. <i>Tangent plane distance</i> )
<b>TVD</b>	engl. <i>Total Variation Diminishing</i>
<b>UniBwM</b>	Universität der Bundeswehr München
<b>vdW</b>	van der Waals
<b>ZGL</b>	Zustandsgleichung/en

# Kapitel 1

## Einleitung

### 1.1 Motivation

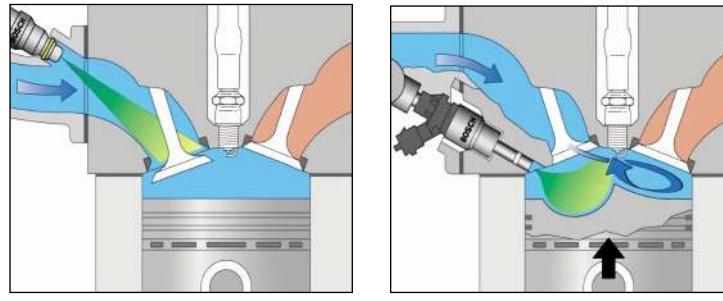
Die Mobilität ist in Deutschland und Europa ein wichtiger Antrieb der Wirtschaft und für viele Menschen Grundbedürfnis und Freiheitsgefühl gleichermaßen. Damit dies so bleibt und der steigende Mobilitäts- und Wohlstandsanspruch der Bevölkerung gedeckt werden kann, müssen die Verkehrssysteme leistungsfähig bleiben und die damit einhergehenden Herausforderungen gemeistert werden. Dazu gehört insbesondere der Energiebedarf des Verkehrssektors, der in der Europäischen Union ein Drittel der Gesamtenergie beträgt. Verbesserte Antriebstechnologien erzielen zwar deutliche Einsparungen gegenüber konventionellen Verfahren, sie werden allerdings vom stetig wachsenden Güterverkehr kompensiert. Hinzu kommt die Ungleichverteilung des Ressourcenverbrauchs im Verkehrssektor mit einer 96 %igen Abhängigkeit von Erdöl. Diese führt zu knapper werdenden Rohstoffvorkommen, welche die Ausweitung der Förderung und steigende Preise zur Folge haben. Durch die Verursachung von einem Viertel der gesamten Treibhausgasemissionen und weiteren verkehrsbedingten Luftschadstoffen wie Feinstaub oder Stickoxiden, werden die Menschen und die Umwelt einer großen Belastung ausgesetzt. Deshalb hat die Europäische Union zugesichert, die verkehrsbedingten Treibhausgasemissionen bis 2050 um mindestens 60 % gegenüber dem Stand von 1990 zu senken. Ähnliches gilt für die Stromerzeugung und -verteilung, die bis 2050 fast vollständig CO<sub>2</sub>-frei sein könnte. Hier soll Strom aus erneuerbaren oder anderen emissionsarmen Quellen die konventionellen Methoden der elektrischen Energieerzeugung ersetzen<sup>1</sup>.

Mit dem Ziel der Emissionsreduzierung werden seit Jahren und Jahrzehnten die Gesetzgebungen verschärft. Die führenden Motorenhersteller werden dadurch gezwungen, neue Technologien zu entwickeln, um die aktuell gültigen Grenzwerte für den Schadstoffausstoß im Allgemeinen und den Kohlenstoffdioxidausstoß im Speziellen einzuhalten. Dies gilt nicht nur für den PKW-Bereich, generell im Verkehrs- und Stromerzeugungssektor müssen Lösungen gefunden werden, damit die vorgegebenen Maximalgrenzwerte nicht überschritten werden. Einer dieser Lösungsansätze besteht darin, bestehende Brennverfahren für fossile Brennstoffe zu überdenken und diese neu- bzw. weiterzuentwickeln. Neben den konventionellen Kraftstoffen Benzin, Diesel und Schweröl gehört Erdgas, mit Methan als Hauptbestandteil, zu den vielversprechendsten Alternativen. Hier kann der CO<sub>2</sub>-Ausstoß bei gleicher mechanischer Leistung gesenkt werden und eine weitere Absenkung von Stickoxid- und/oder Rußemissionen ist möglich. Als weitere Alternativen gelten zudem Biogas und mit Wasserstoff angereicherte Brennstoffgemische. Dieser Sachverhalt wurde von der Forschungsvereinigung Verbrennungskraftmaschinen (FVV) erkannt und die Gasgemischbildung wurde in einem Forschungsprojekt mit dem Titel *Gas-Diesel-Brennverfahren* von der Universität der Bundeswehr München (UniBwM) und der Eidgenössischen Technischen Hochschule Zürich (ETHZ) zusammen mit mehreren Vertretern aus der Industrie untersucht. Die vorliegende Dissertation entstand im Rahmen dieses Projekts und spiegelt die Haupterkenntnisse der numerischen Untersuchungen wider.

---

<sup>1</sup>Aus den 2011 und 2012 verfassten Beschlüssen *A Roadmap for moving to a competitive low carbon economy in 2050* [35] und *Energy Roadmap 2050* [36].

Bei der Verbrennung eines gasförmigen Brennstoffs mit Luft wird zwischen zwei verschiedenen Brennverfahren unterschieden, siehe Abbildung 1.1. Für das erste Verfahren wird der gasförmige Brennstoff zuerst mit Luft vermischt und anschließend in den Zylinder bzw. die Brennkammer geführt. Das so entstandene, fast homogene Grundgemisch wird durch besondere Zündsysteme, wie beispielsweise einem Pilotstrahl<sup>2</sup> oder einer gespülten/unge-spülten Vorkammerverbrennung<sup>3</sup>, gezündet. Die Vormischverbrennung wird mit der zuerst stattfindenden Saugrohreinblasung (PFI für engl. *port fuel injection*, Abbildung 1.1a) kombiniert. Vorteile der PFI sind die einfache Implementierung in bestehende Systeme und die geringen Einblasdrücke. Dies vereinfacht die Auslegung der Injektoren erheblich, da diese keine oder nur geringe Anforderungen an die Temperatur- und Druckbeständigkeit erfüllen müssen. Des Weiteren besitzen diese Systeme das Potenzial sehr niedriger NO<sub>x</sub>-Emissionen und können daher ohne Abgasnachbehandlungseinheiten betrieben werden. Nachteile dieses Verfahrens stellen mögliche Frühzündungen des Brennstoff-Luft-Gemisches und Rückzündungen in den Ansaugtrakt dar. Da der Brennstoff bereits vor der Brennkammer mit dem Oxidator gemischt wird, ist die volumetrische Effizienz sehr gering. Zusammen mit der wirkungsgrad- und leistungslimitierenden Gefahr des Klopfens resultieren die Nachteile in einer schlechteren Motorleistung im Vergleich zum zweiten Brennverfahren.



(a) Saugrohreinblasung PFI. (b) Direkteindüsung DI.

Abbildung 1.1. Gegenüberstellung der zwei unterschiedlichen Gemischbildungsarten [25].

Bei der zweiten Methode wird der gasförmige Brennstoff direkt in den Zylinder einge-düst (DI für engl. *direct injection*, Abbildung 1.1b) und es erfolgt eine sogenannte Diffusionsverbrennung. Aufgrund der ungünstigen Selbstzündeneigenschaften von Methan bedarf es auch bei dieser Methode einer Fremdzündung, die meistens durch das Einspritzen kleiner Dieselmengen bewerkstelligt wird. Solche Systeme sind oft als Dual-Fuel-Brennverfahren ausgelegt, so dass im Grenzfall auch 100 % Diesel verbrannt werden kann. Die Direkteindüsung ist technisch aufwendiger, zeichnet sich aber durch eine deutlich höhere spezifische Leistung aus. Um einerseits den hohen Zylinderdrücken während der Verdichtungs- und Verbrennungsphase entgegen zu wirken und andererseits die benötigte Menge an Brennstoff in möglichst kurzer Zeit in den Brennraum zu befördern, wird der Kraftstoff bei sehr hohen Drücken eingeblassen. Dies bedeutet allerdings auch, dass die Injektoren sowohl den hohen Temperaturen als auch den hohen Drücken standhalten müssen. Da die DI erst nach Schließen der Einlassventile stattfindet, können Verbrennungsanomalien, wie bspw. uner-

<sup>2</sup>Aufgrund der schlechten Zündeneigenschaften von Methan muss das Gemisch mit einem Dieselstrahl oder anderen Maßnahmen gezündet werden.

<sup>3</sup>Die Zündung findet in einer dafür vorgesehenen Vorkammer statt. Das Gemisch im Zylinder wird durch den aus der Vorkammer propagierenden Strahl mit Heißgasen und Radikalen entflammt.

wünschte Rückzündungen, vermieden werden. Bei der Verbrennung gasförmiger Brennstoffe können ähnliche thermodynamische Leistungsdaten wie bei der Dieselverbrennung realisiert werden. Letztere besitzt aber ein höheres innermotorisches  $\text{NO}_x$ -Reduktionspotenzial, wodurch bei der DI unter Umständen eine nachgeschaltete Abgasnachbehandlungseinheit erforderlich sein kann.

Obwohl die Hochdruckeindüsung gasförmiger Brennstoffe bereits in der Industrie Verwendung findet, fehlt es noch an einem umfassenden Verständnis der auftretenden physikalischen Phänomene. Diese werden von der Strömungsmechanik und der Thermodynamik beeinflusst. Die Komplexität der einzelnen Teilespektre und deren Wechselwirkungen stellt dabei eine besondere Herausforderung dar. Bei bestehenden, bekannten Systemen erfolgt die Eindüsung des Brennstoffs bei moderaten Drücken. Die in diesem Projekt betrachteten Druckniveaus übersteigen diese aber signifikant. Die dadurch erreichten und erreichbaren Zustände unterscheiden sich durch ihr nicht-lineares Verhalten maßgeblich von dem Verhalten der Gase bei Umgebungsbedingungen. Um eine zielgerichtete Entwicklung robuster Brennverfahren vorantreiben zu können, müssen diese Aspekte in der Anwendung und in der Modellierung berücksichtigt und verstanden werden. Von besonderem Interesse ist somit die Aerodynamik und Gemischaufbereitung der Gasfreistrahlen, die unter Hochdruck und bei überkritischen Druckverhältnissen in den Brennraum eingedüst werden. Dazu zählen zum einen die trans- und überkritischen Zustände in der Düse und im Düsenbereich, zum anderen die Gemischbildung im Fernfeld der Düse. Wichtige Charakteristika wie die Strahleindringtiefe, die Strahlkontur, das volumetrische Wachstum, der Einfluss der Brennstoffzusammensetzung und der maximal erreichbare Massen- und Impulsfluss müssen hierfür untersucht werden. Der Fokus dieser Arbeit liegt in der thermodynamischen Modellierung und numerischen Simulation der Hochdruckeindüsung. Geeignete Modelle sollen gefunden und in der Simulation angewandt werden um so das Verständnis der komplexen Phänomenologie zu verbessern.

## 1.2 Stand der Forschung

Um die angesprochene Komplexität der auftretenden physikalischen Prozesse besser verstehen zu können, ist es hilfreich, diese in Teilbereiche zu unterteilen und gesondert zu betrachten. Dieses Kapitel dient dazu, die wichtigsten Erkenntnisse der einzelnen Teilprozesse aus experimentellen und numerischen Arbeiten vorzustellen. Dabei liegt der Schwerpunkt auf den unterexpandierten Gasfreistrahlen<sup>4</sup>, dem auftretenden Phasenzerfall und der eindimensionalen Betrachtung der kritischen Strömungsgrößen im engsten Querschnitt. In jedem Teilbereich wird zusätzlich auf die verwendete Modellierung eingegangen.

### 1.2.1 Unterexpandierte Gasfreistrahlen

#### Experimentelle Untersuchungen

Eine Übersicht über wichtige experimentelle Arbeiten im Bereich der unterexpandierten Gasfreistrahlen ist in Tabelle 1.1 aufgeführt. Es wird darauf hingewiesen, dass nur Freistrahlen bei kritischer Durchströmung betrachtet werden. Für die in der Tabelle aufgelisteten

<sup>4</sup>Ein unterexpandierter Freistahl entsteht, wenn der Druck nach der Düse  $p$  kleiner ist als der strömungsmechanisch kritische Druck  $p^*$ , welcher von den Plenumsbedingungen im Injektor abhängig ist, siehe Abschnitt 2.6. Im engsten Querschnitt wird die Düse mit einer Mach-Zahl gleich eins durchströmt.

teten Arbeiten wird zusätzlich das Druckverhältnis und das verwendete Fluid angegeben. Sind entsprechende Messdaten der Machscheibe bzw. des Nah- oder Fernfeldes vorhanden, wird dies mit einem X gekennzeichnet.

Unterexpandierte Freistrahlen werden im Nahfeld der Düse von kompressiblen Effekten dominiert. An der Düsenkante bildet sich ein Prandtl-Mayer-Expansionsfänger, der die Strömung in den Überschall beschleunigt. Durch Reflexionen an Stromlinien und/oder Symmetriechse entstehen diamantförmige Expansionsstrukturen, die sich durch die Position und Größe der ersten Mach-Scheibe und durch andere Eigenschaften wie beispielsweise den Strahlwinkel ausgehend von der Düsenkante charakterisieren lassen. Eine der bedeutendsten experimentellen Untersuchungen bezüglich der Struktur von unterexpandierten Freistrahlen wurde von Crist *et al.* [40] durchgeführt, die in ihrer Arbeit die spezielle Charakteristik eines unterexpandierten Freistrahls unterschiedlicher Fluide herausarbeiten. Verschiedene Fluide wurden unter sehr hohen Druckverhältnissen von 10 bis  $3 \times 10^5$  eingedüst, um die Struktur des Freistrahls im Nahfeld der Düse zu untersuchen. Es zeigte sich, dass der axiale Abstand der Machscheibe zum Düsenaustritt hauptsächlich vom Druckverhältnis beeinflusst wird. Das Verhältnis der spezifischen Wärmekapazitäten  $\gamma$ , auftretende Kondensationseffekte, die Düsenaustrittskontur und der absolute Druck im Plenum haben wenig bis keinen Einfluss auf die axiale Position des ersten Stoßes. Der Durchmesser der Machscheibe und der Winkel des Freistrahls werden mit sinkendem  $\gamma$  und auftretenden Kondensationseffekten größer. Das Verhältnis des Durchmessers der Machscheibe zum axialen Abstand der Machscheibe ist für hohe Druckverhältnisse nahezu konstant. In etwa um die gleiche Zeit führten Adamson und Nicholls [2] und Lewis und Carlson [66] ähnliche Experimente durch, die zur gleichen Erkenntnis der Proportionalität der axialen Machscheibenposition hinsichtlich des Druckverhältnisses kommen. Ashkenas und Sherman [6] und Love *et al.* [104] bestätigen die Unabhängigkeit der axialen Position von dem Verhältnis der spezifischen Wärmekapazitäten  $\gamma$ . Adamson und Nicholls und Love *et al.* kommen aber auch zu der Feststellung, dass die Düsengeometrie, insbesondere der Düsenaustrittswinkel, die Dimensionen des Potenzialkerns beeinflusst. Dies steht im Widerspruch zu den Erkenntnissen von Crist *et al.*.

Ref.	NPR*	NPR <sub>n</sub> <sup>†</sup>	Spezies	Mach-Scheibe	Nahfeld ax.   rad.	Fernfeld ax.   rad.
[40]	$10\text{-}2 \times 10^5$	-	He,He-Ar,Ar, N <sub>2</sub> ,CO <sub>2</sub> ,Freon22	X	-   -	-   -
[2]	3.8-133	2-70	Luft	X	-   -	-   -
[66]	-	2-100	N <sub>2</sub> ,CO <sub>2</sub> ,He	X	-   -	-   -
[6]	$15\text{-}17 \times 10^3$	-	Luft,Ar,N <sub>2</sub>	X	-   X	-   -
[104]	-	1-107	Luft	X	-   -	-   -
[19, 20]	2-70	-	Erdgas,C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	-	-   -	X   -
[50]	-	2-13	Luft	X	-   -	X   -

\* Totaldruckverhältnis  $\text{NPR} = p_0/p_{ch}$

<sup>†</sup> Düsendruckverhältnis  $\text{NPR}_n = p_n/p_{ch}$

Tabelle 1.1. Literaturübersicht experimenteller Arbeiten bzgl. expandierten/unterexpandierten Gasfreistrahlen.

Wichtige Größen in Bezug auf die spätere Bewertung der Gemischbildung ist die transiente Eindringtiefe  $Z_t$ , das volumetrische Wachstum  $V_j$  sowie die axiale und radiale Konzen-

trationsverteilung des Brennstoffs. Die transiente Eindringtiefe beschreibt das axiale Eindringverhalten des Brennstoffs, das volumetrische Wachstum gibt die räumliche Füllung des Brennstoffs bezogen auf die Mischkammer an. Für die Herleitung von Korrelationen bezüglich der axialen Verteilung der Strömungsgrößen wird oft ein Ersatzdurchmesser der Düse definiert, der unabhängig von der Nahfeldstruktur auf den Plenumsbedingungen bzw. den Düsenaustrittsbedingungen basiert. Für die Berechnung des Ersatzdurchmessers existieren verschiedene Modelle, die hier nur kurz erwähnt und später im Detail aufgegriffen werden. Zu den bekanntesten Ansätzen zählen die Modelle von Birch *et al.* [19, 20] und Ewan und Moodie [50]. Für die axiale Verteilung des Brennstoffs auf der Symmetriearchse sind die Arbeiten von Kleinstein [90] und Chen und Rodi [29] bedeutend. Für die transiente Eindringtiefe  $Z_t$  seien die Modelle von Abraham [1] und Hill und Ouellette [72] erwähnt, die jeweils von einer Proportionalität der axialen Freistrahlausbreitung zur Wurzel der Zeit ausgehen. Das Modell von Abraham basiert auf den Gleichungen von Schlichting [145] und definiert die Spitze des Freistrahls als Punkt, wo die Geschwindigkeit auf der Symmetriearchse einen gewissen Anteil der stationären Geschwindigkeit auf der Symmetriearchse annimmt. Die Korrelation von Hill und Ouellette [72] entstammt einer Dimensionsanalyse. Gerold *et al.* [56] übernehmen den Ansatz von Hill und Ouellette [72] und ordnen den Dichten am Düsenaustritt und im umgebenden Fluid eine höhere Bedeutung zu. Der Durchflusskoeffizient sorgt für einen geringfügig kleineren Anteil des Impulseinflusses.

## Numerische Simulationen

In den letzten Jahrzehnten rückten vermehrt numerische Simulationen anstelle experimenteller Untersuchungen in den Fokus. Dies kann einerseits mit der Entwicklung moderner Computer, andererseits mit der Fülle an Informationen, die durch die Simulationen gewonnen werden können, erklärt werden. Weitere Aspekte, die diesen Trend begründen, sind der zeitliche Vorteil einer Simulation gegenüber dem Prüfstandsaufbau sowie der Sicherheitsaspekt, da Experimente für Hochdruckanwendungen mit entzündlichen Gasen oder Flüssigkeiten problematisch sind. Dennoch sind experimentelle Daten weiterhin unabdingbar, um die numerischen Modelle zu entwickeln und auf ihre physikalische Korrektheit zu überprüfen. Für den Stand der Forschung werden die ersten numerischen Simulationen, die auf den parabolischen Navier-Stokes-Gleichungen oder den Euler-Gleichungen basieren, nicht beachtet. Diese Modelle sind zwar sehr genau bezüglich der Stoßstruktur und generell den Strömungsgrößen im Potenzialkern, die Physik im Fernfeld der Düse wird aber oft nicht korrekt wiedergegeben, da viskose Effekte hier dominant sind und diese von den entsprechenden Modellen nur durch die Navier-Stokes-Gleichungen abgebildet werden können. Eine Übersicht über die wichtigsten numerischen Arbeiten bezüglich der expandierten und unterexpandierten Freistrahlen ist in Tabelle 1.2 zu finden. Kategorisiert werden die Arbeiten nach Druckverhältnis, verwendeter Spezies und die zur Verfügung stehenden Daten. Zusätzlich wird der maximale Injektionsdruck  $p_0$ , die Art der Simulation (RANS, LES, etc.) sowie die Modellierung (Idealgasthermodynamik - IG, Realgasthermodynamik - RG) angegeben.

Die numerische Simulation von Gasfreistrahlen ist bereits seit den 90er Jahren etabliert. Aufgrund des sehr großen Rechenaufwandes und der damals zur Verfügung stehenden Rechenleistung wurden zu Beginn ausschließlich RANS-Simulationen durchgeführt. Da der numerische Aufwand zur direkten Lösung der Navier-Stokes-Gleichungen zu der Zeit viel zu groß war, wurden die bis dato entwickelten Turbulenzmodelle weiterentwickelt und ste-

tig verbessert. Zu den bekanntesten Ansätzen zählt das  $k\epsilon$ -Turbulenzmodell von Jones und Launder [83] und das  $k\omega$ -Turbulenzmodell von Wilcox [173], die die turbulente kinetische Energie  $k$  und die Dissipationsrate  $\epsilon$  bzw. die spezifische Dissipationsrate  $\omega$  transportieren. Die Kalibrierung der Modelle erfolgt dabei meist an einfachen Strömungen, weshalb es für die Modellkonstanten verschiedene Datensätze gibt. Des Weiteren sind die Ansätze nur für subsonische, inkompressible Strömungen konzipiert, wodurch es im Überschall zu einem zu schnellen Wachstum der Scherschicht kommt. Sarkar und Lakshmanan [144] begründen dies mit dem in inkompressiblen Strömungen vernachlässigbaren Dilatationsanteil der Dissipation. Das gleichnamige Modell für die Kompressibilitätskorrektur führt zu deutlich physikalischeren Ergebnissen. Zu den ersten durchgeführten Arbeiten gehören die Simulationen von Cumber *et al.*, die sowohl moderat unterexpandierte [42] als auch stark unterexpandierte Freistrahlen [43] simuliert haben. Als Turbulenzmodell kam das  $k\epsilon$ -Modell von Jones und Launder zum Einsatz. Eine weitere Simulation wurde mit dem korrigierten Modell nach Sarkar und Lakshmanan durchgeführt, welches zu einer deutlichen Verbesserung des Geschwindigkeitsprofils auf der Symmetrieachse führte. Die Werte der Geschwindigkeit sowie die Struktur des Freistrahls bis zum ersten Stoß bleiben von dem Modell unbeeinflusst. Da der maximale Totaldruck im Plenum  $\approx 8$  bar betrug, wurde die Annahme eines thermisch idealen Gases getroffen. Zu ähnlichen Erkenntnissen kamen Birkby und Page [21] und Fairweather und Ranson [51], die Druckverhältnisse von 5 bis 30 (Birkby und Page) und den Seiner-Testfall<sup>5</sup> [148] (Fairweather und Ranson) simulierten. Auch hier wurde aufgrund des moderaten Totaldrucks das ideale Gasgesetz angewandt. Als weiteres Korrekturmödell für die kompressiblen Effekte kam das Modell von Zeman [182] zum Einsatz. Während die meisten Simulationen mit dem  $k\epsilon$ -Turbulenzmodell durchgeführt wurden, welches seine Stärken in der Turbulenzmodellierung wandferner Strömungen besitzt, existieren nur wenige Simulationen mit dem  $k\omega$ SST-Modell von Menter und Esch<sup>6</sup> [109]. Im Rechengebiet der referenzierten Arbeiten existieren keine Wände, die Verwendung des  $k\epsilon$ -Turbulenzmodells ist somit gerechtfertigt. In der Arbeit von Otobe *et al.* [125] wird erstmals der Einfluss der Düsenkontur auf das Strahlbild untersucht. Das Arbeitsmedium ist Luft bei einem Druckverhältnis von 4 bis 12. Es wird vermerkt, dass der axiale Abstand der Machscheibe eine Funktion des Druckverhältnisses, aber nicht der Düsenkontur ist. Der Durchmesser der Machscheibe ändert sich hingegen durch das Druckverhältnis und die Düsengeometrie. Dies ist im Einklang mit den bereits dargelegten experimentellen Erkenntnissen. In der Arbeit von Velikorodny und Kudriakov [168] wird Luft und Helium in Luft bei einem Druckverhältnis von 30 und einem Totaldruck von 30 bar eingeblasen. Es wird zwar darauf hingewiesen, dass Diskrepanzen der Fluideigenschaften aufgrund der Idealgasmodellierung existieren, auf diese wird allerdings nicht im Detail eingegangen. Keskinen *et al.* [86] und Deshmukh *et al.* [46] führten erste anwendungsnahe numerische Simulationen unter Verwendung von Methan durch. Sie untersuchten dabei den Einfluss der Düsengeometrie, des Injektionsdrucks und des Injektionszeitpunkts auf die Gemischbildung. Für die unterschiedlichen Düsenkonturen und Injektorwinkel ist für eine Optimierung der Gemischbildung insbesondere der Zeitpunkt der Eindüsung entscheidend. Die Öffnung des Injektors mit der bewegten Nadel zeigte deutliche Unterschiede in der Ausbreitung des Brennstoffs. Folglich muss diesem Aspekt in der Auslegung der Injektoren eine hohe Priorität zugeordnet werden.

Einhergehend mit der Weiterentwicklung der Großrechner werden auch aufwendigere

<sup>5</sup>Experimente an einer Laval-Düse mit einer Ausströmgeschwindigkeit von  $Ma = 2$ .

<sup>6</sup>Das  $k\omega$ SST-Modell verknüpft die wandferne Turbulenzmodellierung des  $k\epsilon$ -Modells mit der wandnahen Formulierung des  $k\omega$ -Modells.

Ref.	NPR	$p_0$ [bar]	Sim.- Art	Mod.	Spezies	Ma.- Sch.	Nahfeld ax.   rad.	Fernfeld ax.   rad.
[42, 43]	2-70	70	RANS	IG	Luft Erdgas	- -	X   X	X   X
[21]	3.5-30	30	RANS	IG	Luft	X	X   -	X   -
[51]	2.7-6.8	6.8	RANS	IG	Luft	-	X   X	X   X
[125]	4-12	12	RANS	IG	Luft	X	X   -	-   -
[168]	30	30	RANS	IG	Luft,He	X	X   X	-   -
[181]	200	200	RANS LES	IG	H <sub>2</sub>	-	X   -	X   -
[123]	1-250	250	RANS	IG	N <sub>2</sub> ,He	X	-   -	-   -
[60]	30	12	LES	IG	H <sub>2</sub>	X	-   -	-   -
[114]	345	345	1D	RG	H <sub>2</sub>	-	-   -	-   -
[30]	400	400	1D	RG	H <sub>2</sub>	-	-   -	-   -
[87]	100-700	700	RANS	IG,RG	H <sub>2</sub>	X	X   -	-   -
[118]	2	280	RANS	RG	H <sub>2</sub> ,N <sub>2</sub> , CH <sub>4</sub> ,CO <sub>2</sub>	-	X   X	-   -
[23]	15	750	RANS	RG	H <sub>2</sub>	-	X   X	X   -
[68, 69, 67]	8.5-70	70	LES	IG	H <sub>2</sub> ,CH <sub>4</sub>	X	X   X	X   -
[171, 170]	4.5-10.5	4.5-10.5	LES	IG	H <sub>2</sub> ,CH <sub>4</sub>	X	X   X	X   -

Tabelle 1.2. Literaturübersicht numerischer Arbeiten bzgl. expandierten/unterexpandierten Gasfreistrahlen.

thermodynamische Modelle verwendet. Die Simulation austretenden Wasserstoffs aus einem Hochdrucktank von Mohamed [114] gehört zu einer der ersten Veröffentlichungen, die die Realgasthermodynamik auf Grundlage der Beattie-Bridgeman Zustandsgleichung (ZGL) [16] berücksichtigen. Unter Verwendung von analytischen Modellen und der Lösung der Strömungsgleichungen unter Vernachlässigung der Reibungsterme wird herausgearbeitet, dass bei einem Druck von 345 bar und einer Temperatur von 300 K die Austrittsgeschwindigkeit des Wasserstoffs mit der Annahme eines idealen Gases um 14 % unterschätzt wird. Weitere Abweichungen werden für den strömungsmechanisch kritischen Druck und die strömungsmechanisch kritische Temperatur am Düsenaustritt festgestellt. Ein ähnlicher Ansatz wird von Cheng *et al.* [30] verfolgt, die dafür die Noble-Abel ZGL verwenden und ebenfalls Unterschiede im Massenstrom von bis zu 35 % feststellen. Khaksarfard *et al.* [87] simulieren die Einblasung von Wasserstoff mit einem Totaldruck von bis zu 700 bar in Wasserstoff und Luft mit 1 bar mit zwei verschiedenen ZGL, der Beattie–Bridgeman ZGL und der Abel-Noble ZGL. Die Ergebnisse zeigen ähnliche Diskrepanzen unter Einbeziehung der Realgasmödellierung. In weiteren Arbeiten von Xu *et al.* [181], Gorlé *et al.* [60], Orescanin und Austin [123] oder Velikorodny und Kudriakov [168] findet die Realgasthermodynamik trotz erhöhten Drücken keine Beachtung. Den Einfluss der Realgaseffekte auf die kritische Düsenströmung von Wasserstoff in Bezug auf den Durchflusskoeffizienten untersucht Nagao *et al.* [119] anhand mehrerer ZGL. Die Reynolds-Zahl in der Düse wurde dabei kontinuierlich mit dem Totaldruck erhöht, das Druckverhältnis blieb mit 2 konstant. Es zeigt sich, dass Realgaseffekte mit zunehmender Reynolds-Zahl größer werden, resultierend in kleineren

Durchflusskoeffizienten im Vergleich zu Simulationen unter Idealgasannahme. Eine weitere Veröffentlichung von Bonelli *et al.* [23] behandelt den Einfluss der Realgasmodellierung auf die Wasserstoffeinblasung mit 750 bar in Stickstoff mit 50 bar. Es wird sehr deutlich aufgezeigt, dass die Berücksichtigung der konsistenten Realgasmodellierung unabdingbar ist.

Durch den hohen Modellierungsanteil der RANS-Simulationen und der Abhängigkeit einer korrekten Validierung der Modellkonstanten des Turbulenzmodells, besteht das Verlangen, die Hochdruckeindüsungen mit skalenauf lösenden Verfahren abzubilden. Für eine direkte numerische Simulation (DNS) fehlt auch heute noch die entsprechende Hardware und der Fokus geht von den RANS- zu den Grobstruktursimulationen über. Diese Verfahren werden bereits für die Simulation von Raketenbrennkammern angewandt (u.a. Oefelein und Yang [122], Schmitt und Cuenot [146], Müller *et al.* [117]), in denen Realgaseffekte aufgrund des hohen Druckniveaus ebenso eine nicht zu vernachlässigende Bedeutung haben. Auch für die Hochdruckeindüsung wurden in den letzten Jahren erste Grobstruktursimulationen durchgeführt, wobei auf eine Modellierung der Realgasthermodynamik verzichtet wurde. Zu den bekanntesten Untersuchungen gehören die Arbeiten von Hamzehloo *et al.*, die die Hochdruckeinblasung von Wasserstoff und Methan mit dem LES-Verfahren simulieren. In der Veröffentlichung von 2014 [68] wird Wasserstoff unter vier verschiedenen Druckverhältnissen und Methan unter einem Druckverhältnis in Luft eingeblasen. Ein direkter Vergleich zeigt, dass das Verhältnis der spezifischen Wärmekapazitäten einen merklichen Einfluss auf die Stoßstruktur im Nahfeld der Düse als auch auf die Dimensionen der Machscheibe hat. Die unterschiedlichen Eindringtiefen und volumetrischen Wachstumsraten werden mit den abweichenden sonischen Eigenschaften und den Diffusivitäten der beiden Fluide begründet. Für beide Fälle zeigte sich eine erste Mischung mit dem umgebenden Fluid nach der ersten Machscheibe. Des Weiteren wurden die numerischen Daten mit diversen Korrelationen für die Machscheibe, die Eindringtiefe und das volumetrische Wachstum in der Literatur verglichen. Von einer Implementierung der Realgasthermodynamik wurde aufgrund des maximalen Druckes von 70 bar abgesehen. In zwei weiteren Arbeiten von Hamzehloo *et al.* [69, 67] werden Effekte zusätzlicher Parameter betrachtet wie beispielsweise die Erhöhung des Gegendrucks, die Verwendung unterschiedlicher Strömungslöser und die Implementierung eines adaptiven Gitter-Verfeinerungs-Algorithmus. Gleichbedeutend mit den Hamzehloo-Simulationen sind die Arbeiten von Vuorinen *et al.* [171, 170] zu nennen, in denen ebenfalls Methan- und Wasserstofffreistrahlen untersucht wurden.

### 1.2.2 Phasenzerfall in Gasfreistrahlen

Wird in Folge einer Änderung der Temperatur, des Drucks oder der Zusammensetzung ein instabiler thermodynamischer Zustand erreicht, kommt es zu einem Phasenzerfall<sup>7</sup> und mehrere Phasen treten koexistent auf. Dieser Vorgang ist insbesondere in der Prozessindustrie ein bekanntes Phänomen, wobei der instabile Zustand durch die Mischung mehrerer Komponenten auftritt und als mischungsbedingt bezeichnet werden kann. Ist die Zusammensetzung während des Prozesses konstant und ein Phasenübergang wird durch die Änderung des Drucks und der Temperatur hervorgerufen, lässt sich dies als expansionsbedingten Phasenzerfall deklarieren. Der Kondensations-<sup>8</sup> und Verdunstungsvorgang<sup>9</sup> stellt

<sup>7</sup>Die für diese Arbeit wichtigsten Phasenzerfallsprozesse sind die Kondensation und das Verdampfen.

<sup>8</sup>Kondensation bezeichnet den Phasenübergang eines Stoffes vom gasförmigen in den flüssigen Zustand.

<sup>9</sup>Verdunstung bezeichnet den Phasenübergang eines Stoffes vom flüssigen in den gasförmigen Zustand.

ein allgegenwärtiges Phänomen dar, dessen zu Grunde liegende physikalische Beschreibung bei hohen Drücken zwar erfasst, aber noch nicht oder nur in Einzelfällen auf die numerische Strömungssimulation übertragen wurde. Eine Literaturübersicht bezüglich des mischungs- und expansionsbedingten Phasenzerfalls ist in Tabelle 1.3 zu finden und wird im Folgenden kurz zusammengefasst. Für eine Einteilung in Gas- und Flüssigkeitsphase wird auf das Phasendiagramm von Methan in Abbildung 2.1 verwiesen.

### Mischungsbedingter Phasenzerfall

Eine sehr bekannte Arbeit von Chehroudi [28] fasst die experimentellen Erkenntnisse der letzten Jahre zusammen und konzentriert sich auf die inerte Eindüsung von kryogenen Fluide in Hochdruckumgebungen. Dabei wird der thermodynamische kritische Punkt von mindestens einem Fluid überschritten und die Schatten-Visualisierungs-Messtechnik erlaubt die Identifizierung klassischer Zweiphaseneffekte. Feine Ligamente und/oder Tröpfchen verlassen die Düse, verschwinden aufgrund der minimalen Druck- und Temperaturänderungen und fingerartige Strukturen bilden sich aus. Weitere erwähnenswerte Veröffentlichungen entstammen von Oschwald *et al.* [124], So *et al.* [150], Richards und Pitts [138] sowie Dahms und Oefelein [44] und zeigen die gleiche Phänomenologie. In Roy *et al.* [141] wird ein superkritisches Fluid in eine superkritische Umgebung eingedüst, was zu einer Ausbildung von Ligamenten und Tröpfchen führt, dem umgekehrten Prozess wie er in Chehroudi [28] zu finden ist. Erst in 2015 gelang es Qiu und Reitz [134] unter Annahme eines Dampf-Flüssigkeit-Gleichgewichts den *Spray A*-Testfall des *Engine Combustion Networks* numerisch darzustellen. Dem thermodynamischen Modell von Qiu und Reitz folgten Matheis und Hickel [107] und Traxinger *et al.* [161], die ebenfalls eine sehr gute Übereinstimmung der numerischen Ergebnisse mit den experimentellen Messdaten erzielten. In Traxinger *et al.* wurde n-Hexan in eine mit Stickstoff gefüllte Kammer mit einem Druck von  $p_{ch} = 50$  bar eingedüst. Drei verschiedene Temperaturen des Injektanten sorgen für drei unterschiedliche Strömungsszenarien mit einer steigenden Ausprägung der Kondensationseffekte. Dabei erfolgt der Phasenzerfall nur in den Mischungsbereichen der beiden Komponenten.

### Expansionsbedingter Phasenzerfall

In unterexpandierten Gasfreistrahlen vorkommende Kondensationseffekte wurden experimentell bereits von Crist *et al.* [40] berichtet, jedoch nicht detailliert untersucht. Smith [149] fügt weiter an, dass die Kondensation aufgrund starker Expansion zuerst in der Mitte des Freistrahls, nicht aber zwingend im Gleichgewicht ablaufen muss und eine Übersättigung stattfinden kann. In den experimentellen Arbeiten von Krothapalli *et al.* [94] und Arnette *et al.* [5] werden Kondensationseffekte in Längswirbeln visualisiert. Für die axiale Eindüsung eines Fluids ist insbesondere die Arbeit von Wu *et al.* [179] interessant, die den Druck des Brennstoffs auf anwendungsbezogene Betriebspunkte anheben und den Einfluss des Kammerdrucks und der Ethylentemperatur auf die Kondensationseffekte untersuchen. In einer neueren Arbeit von Kim *et al.* [88] wird der Einfluss der Nicht-Gleichgewichts-Kondensation auf das Hysteresephänomen experimentell und numerisch untersucht. Dabei wird analysiert, wie der Freistahl auf eine zeitliche Änderung des Druckverhältnisses reagiert und ob die stationäre Strömungsstruktur der Momentaufnahme während des Transitionsprozesses entspricht. In den numerischen Simulationen verzichten die Autoren allerdings auf die Modellierung des Phasenzerfalls. Luft wird bereits mit im Plenum vorgemischten Tröpfchen simuliert und die Kondensation wird über Nukleationsraten- und Tröpfchenwachstums-

delle approximiert. In der Arbeit von Baab *et al.* [8] wurde Hexan in Argon eingedüst. Dabei stand die experimentelle Untersuchung des Strahlaufrucks mittels eines kombinierten Schatten- und Miestreuungsverfahrens im Fokus. Der Strahlaufruck wird vorwiegend von dem Expansionsprozess in der Düse, welcher von den thermodynamischen Zuständen im Hochdruckreservoir und in der Kammer und den thermodynamischen Eigenschaften des Fluids abhängig ist, dominiert. Zudem wird gezeigt, dass schräge Expansionsfächer im Potenzialkern zu einer erneuten Kondensation des Fluids führen können.

	Autor	$p_0$ [bar]	$p_{ch}$ [bar]	Art	Spezies
mischungsbed.	Chehroudi [28]	-	15,69	Exp.	$N_2/N_2$
	Oschwald <i>et al.</i> [124]	40	40	Exp.	$N_2/N_2$
	So <i>et al.</i> [150]	-	1	Exp.	(He+Luft)/Luft
	Richards und Pitts [138]	-	1	Exp.	(He,C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> )/Luft
	Roy <i>et al.</i> [141]	-	-	Exp.	Fluoreketone/ $N_2$
	Qiu und Reitz [134]	bis 60	bis 60	Num.	C <sub>12</sub> H <sub>26</sub> / $N_2$
	Matheis und Hickel [107]	-	60	Num.	C <sub>12</sub> H <sub>26</sub> / $N_2$
exp. bed.	Traxinger <i>et al.</i> [161]	55	50	Exp./Num.	C <sub>6</sub> H <sub>14</sub> / $N_2$
	Smith [149]	-	-	Exp.	(N <sub>2</sub> ,CO <sub>2</sub> )/(N <sub>2</sub> ,CO <sub>2</sub> )
	Krothapalli <i>et al.</i> [94]	155	15-52	Exp.	Luft/Luft
	Arnette <i>et al.</i> [5]	bis 165	-	Exp.	Luft/Luft
	Wu <i>et al.</i> [179]	57	1.4-34	Exp.	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> /Luft
	Kim <i>et al.</i> [88]	1	0.16-0.33	Exp./Num.	Luft/Luft
	Baab <i>et al.</i> [8]	bis 214	0.001-24	Exp.	C <sub>6</sub> H <sub>14</sub> /Ar

Tabelle 1.3. Literaturübersicht bzgl. des Phasenzerfalls in Gasfreistrahlen.

### 1.2.3 Eindimensionale Düsenströmung

Die korrekte thermodynamische Modellierung spielt auch für die Berechnung der strömungsmechanisch kritischen Größen in der gesperrten Düse eine wichtige Rolle. Im Vergleich zur numerischen Strömungsmechanik (CFD für engl. *Computational fluid dynamics*) entstanden die ersten vielversprechenden Untersuchungen unter Berücksichtigung der Realgasthermodynamik bereits in den 40er Jahren. Eine Übersicht über die wichtigsten Arbeiten kann der Tabelle 1.4 entnommen werden.

Unter Anwendung der ZGL von van der Waals beschreibt Tsien [162] eine analytische Methode zur Berechnung der kritischen Größen im engsten Querschnitt. Mit der Annahme, dass die spezifische Wärmekapazität eine quadratische Funktion der Temperatur ist, wird die Analyse, die in fluidabhängigen Korrekturtermen für die kritischen Strömungsgrößen resultiert, vereinfacht. Die Annahme einer konstanten beziehungsweise temperaturabhängigen spezifischen Wärmekapazität führt jedoch zu großen Diskrepanzen bezüglich den kritischen Strömungsgrößen und die Methode von Tsien ist für größer werdende van der Waals-Kräfte nur bedingt genau, siehe Donaldson [48].

Die ZGL von van der Waals gehört zu den einfachsten ihrer Art und zeigt für einen weit gefassten Druck- und Temperaturbereich steigende, nicht zu vernachlässigende Fehler in der Approximation der Stoffeigenschaften. Seit den 40er Jahren wurden ZGL neu- und

weiterentwickelt, was zu einer deutlichen Verbesserung der Modellierung führte. Die verbesserten Modelle kamen auch in den Untersuchungen von Johnson zum Einsatz, der in mehreren Arbeiten eine sehr detaillierte Analyse der Realgaseffekte bei kritischer Durchströmung durchführte. In [78] wird die Abweichung des Massenstroms bei Mach gleich eins für sieben verschiedene Fluide (Luft, Stickstoff, Sauerstoff, Wasserstoff, Argon, Helium und Wasserdampf) numerisch mit zwei unterschiedlichen ZGL berechnet. In dem untersuchten Druckbereich zwischen 1 und 100 bar und dem Temperaturbereich von 222 bis 389 K ergeben sich Abweichungen im Massenstrom von bis zu 7%. Des Weiteren zeigte sich, dass das Verhältnis der berechneten Massenstromabweichung und der Abweichung des Kompressibilitätsfaktors für beide ZGL die gleiche Größenordnung besitzt. In [79] wurde der Druck- und Temperaturbereich für Stickstoff und Helium auf 300 bar und 100 bis 400 K für Stickstoff bzw. 15 bis 400 K für Helium mit speziell dafür angepassten ZGL ausgeweitet (Stickstoff [155] und Helium [105]). Der kritische Strömungsfaktor wurde unter der Bedingung, dass die Plenumsbedingungen bekannt sind, tabelliert aufgeführt. Erste Betrachtungen bezüglich Methan und mehreren Erdgasvarianten auf Grundlage der ZGL von Benedict, Webb und Rubin folgten 1970 [77] und es wurde erstmals eine empirische Formel für die Berechnung des kritischen Massenstroms unter Verwendung zahlreicher Koeffizienten vorgeschlagen. 1972 wurden die Tabellen für Methan und Erdgas durch eine genauerer ZGL [169] mit 24 Koeffizienten auf einen größeren Gültigkeitsbereich ergänzt [81].

Ref.	ZGL*	Annahmen†	Betrachtung
Tsien [162]	IG, vdW	$c_v = f(T)$	Korrekturterme
Donaldson [48]	IG, vdW	$c_p = c, f(T)$	Unterschied IG $\leftrightarrow$ vdW
Johnson [78, 79, 77, 81]	Fit, BB, BWR	$c_p = c, f(T)$	Krit. Strömungsfaktor
Leung [102]	Mod. RK	$c_p = c$	Allgemeine Form, Krit. Größen
Maytal [108]	Hoch-genau	-	Krit. Größen, Massenstrom
Ding [47]	HH	-	Durchflusskoeffizient
[157, 98, 38, 91, 147]		Betrachtung mittels der Fundamental-Ableitung $\Gamma$	
Colonna [34]	vdW	-	$\Gamma$ , Schallgeschw.
Harinck [71]	vdW	-	$\Gamma$ , Schallgeschw.
Guardone [64, 63]	IG, vdW	-	$\Gamma$ , Modellierung, Anwendungsfall

\* vdW = van der Waals, IG = Ideales Gasgesetz, Fit = speziell für eine Spezies angepasste ZGL., BB = Beattie-Bridgemen, BWR = Benedict-Webb-Rubin, RK = Redlich-Kwong, HH = Helmholtz

†  $c_p = c$  als konstant angenommen

Tabelle 1.4. Literaturübersicht bzgl. der eindimensionalen Düsenströmung.

Die Untersuchungen von Johnson waren sehr gründlich und aufschlussreich, beschränkten sich aber durch die Verwendung fluidspezifischer ZGL und zahlreicher Koeffizienten auf spezielle Fluide. Um allgemeingültige und fluidunabhängige Aussagen treffen zu können, wurde von Leung und Epstein [102] eine modifizierte Form der kubischen ZGL von Redlich und Kwong angewendet, die auf dem Prinzip der korrespondierenden Zustände [65, 131] beruht. Um die Integration und somit die Berechnung des Massenstromverhältnisses der Realgas- und der Idealgasmodellierung zu vereinfachen, wurde die spezifische Wärmekapazität wiederum konstant gesetzt. Ein Vergleich mit den Ergebnissen von Johnson zeigt eine sehr gute Übereinstimmung, für eine höhere Genauigkeit wird aber auf fluidspezifische ZGL

verwiesen. Dieser Ansatz wird von Maytal [108] umgesetzt, der die kritischen Größen und den kritischen Massenstrom in der Düse für neun verschiedene Fluide unter Verwendung von hochgenauen ZGL [89] berechnet. Zusätzlich werden die Abhängigkeiten der kritischen Größen der einzelnen Fluide bei gleicher reduzierter Temperatur untereinander verglichen und für einen ähnlichen azentrischen Faktor Übereinstimmungen festgestellt. Von Ding *et al.* [47] wird der Einfluss der Realgaseffekte auf den Durchströmungskoeffizienten von Wasserstoff untersucht.

Ein anderer Ansatz, der das Verhalten von dichten Gasen mittels der Fundamentalableitung  $\Gamma$  beschreibt, wird von Thompson [157] untersucht. Thermodynamische Größen und Prozesse werden dabei abschnittsweise in bestimmten Wertebereichen der Fundamentalableitung beschrieben. Während Lambrakis und Thompson [98] den Beweis anführen, dass  $\Gamma$  für komplexe, organische Komponenten auch negative Werte annehmen kann, greifen andere Autoren den gleichen Ansatz auf [38, 91, 147]. Da aber keine der Veröffentlichungen die kritischen Größen betrachtet, werden diese nicht weiter diskutiert. Der Einfluss der anziehenden und abstoßenden Kräfte und der Molekülform auf die kritische Düsenströmung wurde zuerst von Colonna und Guardone [34] untersucht, der dafür das polytropen Gasmodell von van der Waals nutzte. Grundlage für die Betrachtungen bildet wiederum die Fundamentalableitung. Ein besonderes Augenmerk liegt auf den Effekten der Schallgeschwindigkeit resultierend in der Aussage, dass isentrope Vorgänge für komplexe Moleküle nahezu isotherm ablaufen. Weitere Studien wurden von Harinck *et al.* [71] und Guardone *et al.* [64, 63] durchgeführt, einhergehend mit der Untersuchung mehrerer Fluide und des Einflusses der Modellierung auf Anwendungsfälle. In [63] wird erstmalig ein analytischer Ausdruck für den Durchflusskoeffizienten hergeleitet, der eine lineare Proportionalität zu der Fundamentalableitung aufweist. Mit größer werdenden Werten für  $\Gamma$ , die sich insbesondere für Flüssigkeitsphasen und für Zustände in der Nähe der Sättigungsdampfkurve ergeben, nimmt der Durchflusskoeffizienten deutlich ab.

### 1.3 Gliederung der Arbeit

Im ersten Teil der vorliegenden Arbeit werden die Grundlagen der Thermodynamik und der entwickelten Löser vorgestellt. Dazu gehört die Theorie zur Beschreibung der Strömung mittels den Navier-Stokes-Gleichungen, die Approximation der Stoffeigenschaften über geeignete ZGL, die Beschreibung und Berechnung des Phasenübergangs sowie die Struktur und zeitliche Entwicklung des Freistrahls, siehe Kapitel 2. Mit einem gesonderten Kapitel wird der verwendete Strömungslöser in Kapitel 3 und das entwickelte eindimensionale Berechnungstool in Kapitel 4 hergeleitet und validiert.

Im zweiten Teil wird der entwickelte Strömungslöser zur Simulation der Hochdruckeindüsung verwendet, siehe Kapitel 5. Im ersten Schritt werden dazu die Unterschiede der Modellierung sowie verschiedener Einflussfaktoren auf die Düsenströmung und die Gemischbildung diskutiert. Im anschließenden Testfall werden die an der ETHZ stattgefundenen Experimente nachgerechnet. Gleichzeitig dienen die Vergleichsdaten einer detaillierten Validierung der numerischen und thermodynamischen Modellierung. Es wird ein Verfahren vorgestellt und verglichen, mit dem etwaige Kondensationseffekte numerisch vernachlässigt werden können und das Fluid trotz des Betretens des Zweiphasengebiets als einphasig behandelt werden kann. Das abschließende Kapitel 6 fasst die wichtigsten Erkenntnisse der Arbeit zusammen und gibt einen Ausblick auf ausstehende Punkte und Verbesserungspo-

tenziale der Methodik.



## Kapitel 2

# Grundlagen

Im ersten Abschnitt des Grundlagenkapitels 2.1 werden die für die numerische Simulation relevanten Gleichungen beschrieben. Dazu zählen die Erhaltungsgleichungen für die Masse, den Impuls, die Energie und die Spezies. Im Anschluss daran erfolgt die Abgrenzung thermodynamischer Bereiche 2.2, gefolgt von der Thermodynamik realer Gase 2.3 und der Thermodynamik mehrphasiger Fluide 2.4. Hier werden insbesondere die verwendete Zustandsgleichung, die kalorischen Größen, das unterschiedliche Fluidverhalten des Reinstoffs und der Mischung im Zweiphasengebiet als auch die Berechnungsmethoden für den Phasenübergang beschrieben. In einem weiteren Abschnitt werden die Turbulenzmodelle 2.5 diskutiert sowie die Grundlagen unterexpandierter Freistrahlen 2.6 erläutert.

## 2.1 Grundgleichungen

Für die Beschreibung des physikalischen Verhaltens von Fluiden werden die Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls und Energie auf ein diskretes Kontrollvolumen (KV) angewandt. Die zu lösenden Gleichungen werden als Navier-Stokes-Gleichungen bezeichnet. Als Lösung des Gleichungssystems erhält man die zeitliche Änderung des Fluids und deren Eigenschaften im KV.

Die Gleichung der **Massenerhaltung**, auch Kontinuitätsgleichung genannt, besagt, dass die zeitliche Änderung der Masse in einem KV den durch die Oberfläche des KV ein- und ausfließenden Massen entspricht:

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

Gleichung 2.1 stellt dabei die differentielle Schreibweise dar, in der die Dichte mit  $\rho$  und die Zeit mit  $t$  bezeichnet wird. Die Koordinaten der drei Raumrichtungen werden mit  $x_i$  ( $i = 1,2,3$ ) und die Geschwindigkeit in die jeweilige Raumrichtung mit  $u_i$  angegeben. Es gilt die Einsteinsche Summenkonvention.

In der **Impulserhaltung** wird die zeitliche Änderung des Impulses und der konvektive Transport durch die Oberfläche des KV den am KV und somit am Fluid wirkenden Oberflächenkräften gleichgesetzt:

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

Die Oberflächenkräfte umfassen dabei alle Kräfte, die von der Umgebung auf das KV ausgeübt werden und setzen sich aus dem Druck  $p$  und dem Spannungstensor  $\sigma_{ij}$  zusammen. Volumenkräfte, wie beispielsweise die Gravitationskraft, können für die in dieser Arbeit behandelten Anwendungen vernachlässigt werden. Der Spannungstensor wird für ein Newtonsches Fluid mit der Stokesschen Hypothese mit

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

beschrieben. Das Kronecker-Delta ist mit  $\delta_{ij}$  angegeben. Der Scherspannungstensor ist definiert als:

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

Für die Berechnung der dynamischen Viskosität  $\mu$  siehe Abschnitt 2.3.3.

Als dritte Navier-Stokes Gleichung wird die Erhaltungsgleichung für die **Energie** gelöst, die in dieser Arbeit in der Enthalpieform verwendet wird:

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

Dabei ist die zeitliche Änderung der Energie des KV gleich der Leistung der äußeren Kräfte und der pro Zeiteinheit von außen eingebrachten Energie. Quellterme, die etwa bedingt durch chemische Reaktionen auftreten können, werden vernachlässigt. Die totale spezifische Enthalpie ist gegeben als  $h_t = h + u_i^2/2$ , wobei  $h$  die spezifische Enthalpie darstellt. Der erste Term des Wärmeflusses  $q_i$  gleicht dem Fourierschen Gesetz:

$$q_i = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} + \sum_i D_{k,i} h_k. \quad (2.6)$$

$\lambda$  gibt die thermische Wärmeleitfähigkeit an und  $T$  bezeichnet die Temperatur. Der zweite Term in Gleichung 2.6, der sich aus dem Diffusionsfluss  $D_{k,i}$  der Spezies  $k$  bzgl. der Raumrichtung  $i$  und der spezifischen Enthalpie  $h_k$  der Spezies  $k$  zusammensetzt<sup>1</sup>, beschreibt den diffusionsbedingten Enthalpietransport und wird in der vorliegenden Arbeit vernachlässigt [171, 170]. Aus Stabilitätsgründen wird der Wärmefluss als Enthalpiediffusionsterm umgeschrieben [93].

Zusätzlich zu den drei Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls und Energie werden weitere Gleichung für den **Speziestransport** gelöst:

$$\frac{\partial(\rho w_k)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i w_k)}{\partial x_i} = -\frac{\partial D_{k,i}}{\partial x_i}. \quad (2.7)$$

Der Massenbruch  $w_k$  ist dabei mit  $w_k = m_k/m$  definiert, wobei  $m_k$  die Masse der Spezies  $k$  und  $m$  die Gesamtmasse darstellt. Die Berechnung des Diffusionsflusses  $D_{k,i}$  erfolgt mit dem Fickschen Diffusionsgesetz

$$D_{k,i} = -D_k \frac{\partial w_k}{\partial x_i} \quad (2.8)$$

und vernachlässigt Massenflüsse aufgrund von Temperatur- und Druckgradienten [85]. Zusätzliche Quellterme, die beispielsweise bei reagierenden Strömungen beachtet werden müssen, werden wiederum vernachlässigt. Für den Diffusionskoeffizienten  $D_k$  wird die Gleichheit von Wärmeleitung und Diffusion mit einer Lewis-Zahl von eins vorausgesetzt:

$$\text{Le} = \frac{\lambda}{D_k c_p \rho} = 1. \quad (2.9)$$

$\lambda$  ist die Wärmeleitfähigkeit und  $c_p$  die spezifische Wärmekapazität bei konstantem Druck. Für eine ausführliche Herleitung der Navier-Stokes Gleichungen wird auf die Bücher von Anderson *et al.* [4] und Schlichting [145] verwiesen.

---

<sup>1</sup>Die partielle Enthalpie entspricht nur für die Annahme eines idealen Gases der Enthalpie der Spezies.

Für die Schließung der Erhaltungsgleichungen werden in dieser Arbeit die thermischen und kalorischen ZGL der Thermodynamik verwendet. Für die thermische ZGL lässt sich der Druck  $p$  allgemein als Funktion der Dichte  $\rho$ , der Temperatur  $T$  und der Zusammensetzung  $\mathbf{w}$  als

$$p = p(\rho, T, \mathbf{w}) \quad (2.10)$$

schreiben. Beziehungen, die die kalorischen Zustandsgrößen der Energie, Enthalpie oder Entropie beschreiben, werden als kalorische ZGL bezeichnet. Beide ZGL werden im Abschnitt 2.3 genauer erläutert.

## 2.2 Abgrenzung thermodynamischer Bereiche

Ein thermisch ideales Gas wird über die ZGL

$$pv = \mathcal{R}_u T \quad (2.11)$$

beschrieben. Dabei werden die Gasteilchen als starre Kugeln betrachtet, die sich frei im Raum bewegen können und keine Kräfte aufeinander auswirken. Diese Annahmen sind für Gase unter Umgebungsbedingungen, d.h. bei moderaten Drücken und Temperaturen, gerechtfertigt. Die thermischen Zustandsgrößen des Drucks  $p$ , des spezifischen Volumens  $v$  und der Temperatur  $T$  werden über die universelle Gaskonstante  $\mathcal{R}_u$  miteinander verknüpft. Obwohl ein Gas mit den getroffenen Annahmen in der Realität nicht bzw. nur für den Fall für  $p \rightarrow 0$  existiert, beschreibt Gleichung 2.11 die unter diese Modellvorstellungen fallenden Gase mit einer für die Anwendung ausreichend guten Genauigkeit. Eine Aussage, ob der thermodynamische Zustand eines Gases mit den vereinfachten Modellvorstellungen des thermisch idealen Gases beschrieben werden kann, kann mit dem Kompressibilitätsfaktor

$$Z = \frac{pv}{\mathcal{R}_u T} \quad (2.12)$$

getroffen werden. Für ein thermisch ideales Gas nimmt dieser den Wert eins an, in der Realität kann der Wert allerdings deutlich von eins abweichen. Um dies zu illustrieren wird das  $pVT$ -Diagramm in Abbildung 2.1 betrachtet. Es zeigt vier farbig markierte Flächen, die jeweils einen thermodynamischen Bereich kennzeichnen. Für den Moment wird nur die blaue Fläche, die Gasphase, betrachtet. Um den Gültigkeitsbereich des thermisch idealen Gases zu verdeutlichen sind drei Isolinien für je einen konstanten Wert des Kompressibilitätsfaktors  $Z$  eingezeichnet, 0.99, 0.98 und 0.95. Für  $Z = 0.99$  entspricht die Abweichung der Zustände von der Annahme des thermisch idealen Gases 1 %. Es wird schnell ersichtlich, dass die Diskrepanzen mit größer werdenden Drücken und/oder kleiner werdenden Temperaturen zunehmen und die Modellierung ungenau und für die Anwendung unzureichend werden kann. Die thermische ZGL des idealen Gases ist somit nur für einen sehr begrenzten Gültigkeitsbereich anwendbar.

Das  $pVT$ -Diagramm für Methan zeigt drei weitere, voneinander abgrenzbare Bereiche, deren Zustände sich grundsätzlich unterscheiden. Im Gegensatz zu der Gasphase werden alle Zustände der Flüssigkeitsphase grün dargestellt. Das Zweiphasengebiet ist grau eingefärbt und wird durch die Siedelinie von der Flüssigkeitsphase und durch die Kondensations- bzw. TauLinie von der Gasphase separiert. Im Zweiphasengebiet sind beide Phasen koexistent. Wird der kritische Punkt, welcher durch den kritischen Druck  $p_c$  und die kritische

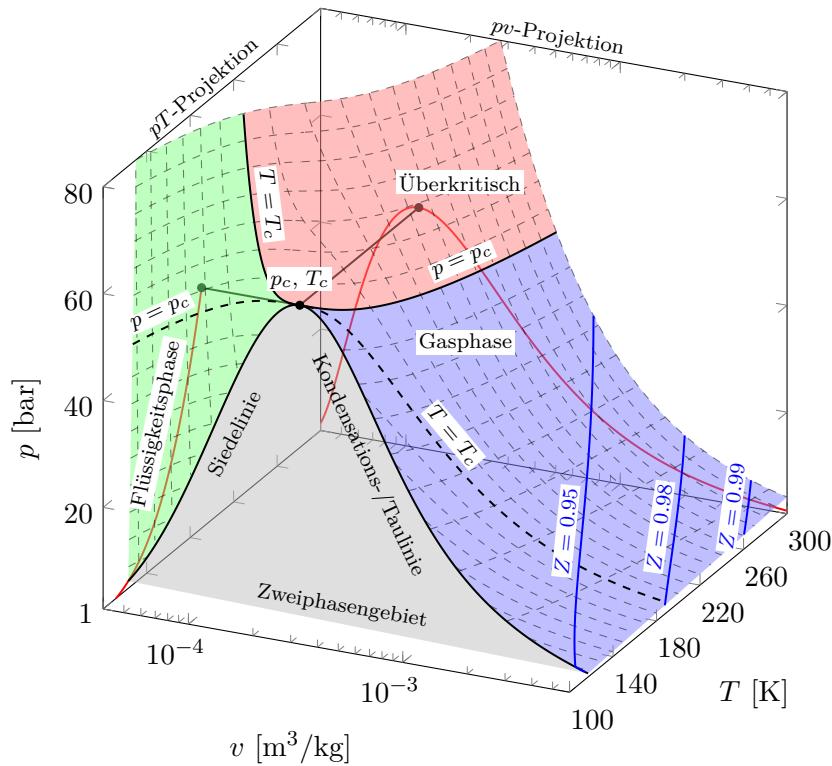


Abbildung 2.1.  $pVT$ -Diagramm für Methan berechnet mit der SRK-ZGL.

Temperatur  $T_c$  definiert ist, überschritten, beginnt das überkritische Gebiet. Fluide in einem überkritischen Zustand besitzen Eigenschaften der Flüssigkeitsphase, wie beispielsweise die Dichte, und Eigenschaften der Gasphase, wie beispielsweise die Viskosität. Um den flüssigkeits- und den gasähnlichen Bereich im überkritischen Gebiet zu unterteilen, wird die Widom-Linie<sup>2</sup> verwendet (nicht dargestellt). Zwischen der Flüssigkeitsphase und der überkritischen Phase sowie zwischen der Gasphase und der überkritischen Phase gibt es keine Phasengrenzflächen, da am kritischen Punkt die Oberflächenspannung verschwindet. Für die partiellen Ableitungen des Drucks nach der Dichte am kritischen Punkt gilt:

$$\frac{\partial p}{\partial v} \Big|_{p_c, T_c} = \frac{\partial^2 p}{\partial v^2} \Big|_{p_c, T_c} = 0. \quad (2.13)$$

Zusätzlich zu den vier thermodynamisch differenzierbaren Gebieten sind Isothermen und Isobaren im Abstand von  $\Delta T = 10$  K bzw.  $\Delta p = 5$  bar dargestellt. Diese werden zur genaueren Beschreibung des Phasenübergangsprozesses im weiteren Verlauf der Arbeit nochmals aufgegriffen.

Bei den in dieser Arbeit betrachteten Betriebspunkten übersteigen die Bedingungen im Plenum den kritischen Punkt von Methan mit  $p_c = 46.0$  bar und  $T_c = 190.6$  K deutlich. Die ZGL, die zur Berechnung der jeweiligen Stoffeigenschaften dient, muss diese sowohl für die Plenumsbedingungen als auch für den gesamten Expansions- und Gemischbildungsprozess korrekt wiedergeben. Die Beschreibung der für die Arbeit relevanten Zustände und deren Modellierung erfolgt in den nächsten beiden Abschnitten. Das beschriebene  $pVT$ -Diagramm

<sup>2</sup>Definiert durch  $\max(c_p)$  (auch möglich:  $v = v_c$ ).

wurde bereits mit einer ZGL für reale Fluide berechnet. Dadurch ergeben sich quantitative Diskrepanzen im Vergleich zu den experimentellen Messwerten, der Charakter der einzelnen Kurven und Flächen ist jedoch identisch.

## 2.3 Thermodynamik realer Gase

### 2.3.1 Reinstoffe

Für die physikalisch genauere Beschreibung der thermischen Zustände gibt es eine Vielzahl an ZGL, die sich in ihrer Komplexität und Genauigkeit unterscheiden. Die bekannteste ZGL für reale Gase wurde 1873 von van der Waals [166] postuliert und enthält bereits Korrekturen für die zwischen den Gasteilchen wirkenden anziehenden und abstoßenden Kräfte. Aufgrund ihrer Einfachheit ist sie aber nur sehr limitiert einsetzbar. Seit der Einführung der ZGL von van der Waals sind mehr als 140 Jahre vergangen, in denen eine Vielzahl an ZGL entwickelt wurden. Sie basieren meist auf den beiden ersten Formen, der ZGL von van der Waals oder der Virialgleichung, und ermöglichen unter Zuhilfenahme spezifischer Parameter eine genauere Beschreibung der Stoffeigenschaften. Eine Übersicht ist in dem Buch von Poling *et al.* [132] zu finden. Die ZGL lassen sich in drei Klassen einteilen: Erweiterte Virialgleichungen, kubische ZGL und auf der molekularen Thermodynamik basierende ZGL. Die erweiterten Virialgleichungen sind Adaptionen der Gleichung des thermisch idealen Gases und erweitern diese durch eine Reihenentwicklung nach Potenzen von  $1/v$ . Als bekanntester Vertreter sei die ZGL von Benedict, Webb und Rubin [18] genannt. Die kubischen ZGL sind eine Weiterentwicklung der Gleichung von van der Waals und beruhen größtenteils auf dem Korrespondenzprinzip [65], welches besagt, dass alle Fluide nach einer geeigneten Normierung durch dieselbe ZGL beschrieben werden können. Verbesserungen werden durch eine Temperaturabhängigkeit des attraktiven Terms erzielt, die in der ursprünglichen Formulierung nicht enthalten ist. Ein wesentlicher Vorteil der kubischen ZGL ist, dass sowohl die Eigenschaften der Gasphase als auch der Flüssigkeitsphase eines Stoffes beschrieben werden können. Nachteile sind bei der Berechnung der Siede- und Flüssigkeitsdichten sowie bei Berechnungen in der Nähe des kritischen Punktes zu verzeichnen. Die am weitesten verbreiteten Modelle sind von Redlich und Kwong [136] (RK), Soave, Redlich und Kwong [151] (SRK) und Peng und Robinson [129] (PR). Für eine genauere Erläuterung der dritten Klasse der ZGL, der Gleichungen die auf der molekularen Thermodynamik basieren, wird auf das Buch von Sandler [143] verwiesen.

In dieser Arbeit fiel die Wahl auf die ZGL von Soave, Redlich und Kwong [151]. Sie gehört zu der Klasse der kubischen ZGL und ermöglicht so die Berechnung der Gas- und Flüssigkeitsphase eines Stoffes, eine Eigenschaft die für die Phasengleichgewichtsberechnungen (siehe Abschnitt 2.4) erfüllt sein muss. Dies ist zwar auch mit anderen ZGL möglich, durch die Einfachheit der kubischen ZGL wird die Effizienz der Berechnung aber deutlich gesteigert. Des Weiteren ist mit ihr eine sehr genaue Berechnung der Stoffeigenschaften kurzkettiger Kohlenwasserstoffe möglich [33]. Es können somit alle in dieser Arbeit betrachteten Fluide modelliert werden. Die Berechnung beider Phasen kann auch mit je einer dafür vorgesehenen ZGL durchgeführt werden, wodurch die Effizienz des Verfahrens allerdings beeinträchtigt wird [143]. Die SRK-ZGL basiert auf dem Prinzip der korrespondierenden Zustände und kann beispielsweise in einer im Druck expliziten Form wie folgt geschrieben

werden:

$$p = \frac{\mathcal{R}_u T}{v - b} - \frac{a(T)}{v(v + b)}. \quad (2.14)$$

Der Modell-Parameter  $a(T) = a_c \alpha(T)$  berücksichtigt die intermolekularen Wechselwirkungen und  $b$  das Eigenvolumen der Moleküle. Bei beiden Parametern handelt es sich um semi-empirische Korrelationen, die mit den kritischen Größen des jeweiligen Fluids normiert werden:

$$a(T) = \underbrace{0.42748 \frac{\mathcal{R}_u^2 T_c^2}{p_c}}_{a_c} \underbrace{\left[ 1 + \kappa \left( 1 - \sqrt{\frac{T}{T_c}} \right) \right]^2}_{\alpha(T)}, \quad b = 0.08664 \frac{\mathcal{R}_u T_c}{p_c}. \quad (2.15)$$

Mit der Funktion  $\kappa = 0.480 + 1.574\omega - 0.176\omega^2$  wird die Abweichung der Molekülform von einer perfekten, sphärischen Form berücksichtigt. Dabei ist  $\omega$  der azentrische Faktor.

Die kalorischen Größen wie die spezifische Enthalpie  $h$ , die spezifische Wärmekapazität bei konstantem Druck  $c_p$  und die spezifische Entropie  $s$  können in einen idealen Referenzzustand und in einen druckabhängigen Korrekturterm unterteilt werden, siehe beispielsweise Elliott and Lira [49] oder Poling *et al.* [132]:

$$h = h_{\text{ig}} + h_{\text{rg}}, \quad c_p = c_{p,\text{ig}} + c_{p,\text{rg}} \quad \text{und} \quad s = s_{\text{ig}} + s_{\text{rg}}. \quad (2.16)$$

Die Größen mit dem unteren Index  $_{\text{ig}}$  bezeichnen den Referenzzustand und werden unter Idealgasbedingungen bei einem Druck von 1 bar unter Verwendung der NASA-Polynome [58, 59] mit sieben Koeffizienten beschrieben. Der untere Index  $_{\text{rg}}$  bezieht sich auf die Abweichung der Fluideigenschaften vom Referenzzustand. Für die SRK-ZGL ergeben sich:

$$h_{\text{rg}} = pv - \mathcal{R}_u T + \int_{\infty}^v \left[ T \frac{\partial p}{\partial T} \Big|_v - p \right] dv = pv - \mathcal{R}_u T - \frac{a - T da/dT}{b} \ln \left( 1 + \frac{b}{v} \right), \quad (2.17)$$

$$c_{p,\text{rg}} = \frac{\partial h_{\text{rg}}}{\partial T} \Big|_p = -\mathcal{R}_u - T \frac{\partial p / \partial T \Big|_v^2}{\partial p / \partial v \Big|_T} - \frac{d^2 a}{dT^2} \frac{T}{b} \ln \left( \frac{v}{v + b} \right) \quad \text{und} \quad (2.18)$$

$$s_{\text{rg}} = \mathcal{R}_u \ln(Z) + \int_{\infty}^v \left[ \frac{\partial p}{\partial T} \Big|_v - \frac{\mathcal{R}_u}{v} \right] dv = \mathcal{R}_u \ln \left( \frac{p_{\text{ref}}(v - b)}{\mathcal{R}_u T} \right) + \frac{da/dT}{b} \ln \left( \frac{v + b}{v} \right). \quad (2.19)$$

Das Quadrat der Schallgeschwindigkeit  $a_s$  entspricht der partiellen Ableitung des Drucks nach der Dichte bei konstanter Entropie und lässt sich folglich als

$$a_s = \sqrt{\left. \frac{\partial p}{\partial \rho} \right|_s} = \sqrt{-v^2 \left. \frac{\partial p}{\partial v} \right|_s} = v \sqrt{\frac{c_p}{c_v} \left( -\left. \frac{\partial p}{\partial v} \right|_T \right)} \quad (2.20)$$

schreiben. Die Modellparameter, die für den Strömungslöser verwendete einphasige Kompressibilität, die in den kalorischen Größen vorkommenden thermodynamischen Zusammenhänge und die Validierung der ZGL anhand der Reinstoff-Daten von Methan, Ethan und Stickstoff sind in Anhang A aufgeführt.

Aufgrund des zur Verwendung kommenden druckbasierten Strömungslösers muss die im Druck explizite Form der ZGL 2.14 nach dem spezifischen Volumen  $v$  bzw. dem Kompressibilitätsfaktor  $Z$  umgestellt und gelöst werden. Dadurch ergeben sich aufgrund der

kubischen Form je nach Temperatur- und Druckbereich drei Lösungen. Ist die Temperatur  $T$  größer als die kritische Temperatur  $T_c$ , ist die Lösung der Gleichung mit einem reellen Wert eindeutig. Am kritischen Punkt mit  $T = T_c$  sind die gasförmigen und flüssigen Eigenschaften des Fluids identisch, entsprechend sind die drei Lösungen der Gleichung auch identisch. Für Temperaturen mit  $T < T_c$  kommt es im Zweiphasengebiet zu der Ausbildung eines Minimums und eines Maximums, siehe Abbildung 2.5. Ist der Wert des Drucks zwischen den beiden Extrema, ergeben sich für die Lösung drei reelle Werte. Der kleinste Wert ist das spezifische Volumen für die Flüssigkeitsphase, der größte Wert für die Gasphase. Wird die einphasige Thermodynamik verwendet, erfolgt die Berechnung des spezifischen Volumens bzw. des Kompressibilitätsfaktors über die Minimierung der Gibbs Energie, siehe Elliott und Lira [49]. Die Rückrechnung der transportierten Enthalpie (Gleichung 2.5) auf die Temperatur erfolgt mit dem Dekker-Verfahren [45]. Es könnten zwar effizientere Methoden wie beispielsweise eine Newton-Methode verwendet werden, da aber insbesondere in der Nähe des kritischen Punktes große Dichtegradienten auftreten und die spezifische Wärmekapazität ein lokales Maximum aufweist, hat die Stabilität des Verfahrens Vorrang.

### 2.3.2 Mischungen

Für mehrkomponentige Mischungen werden Mischungsregeln angewandt, sodass die Berechnung der Fluideigenschaften nach dem gleichen, einkomponentigen Ansatz erfolgen kann. Die Modellparameter der SRK-ZGL lauten nun

$$a = \sum_k^{N_c} \sum_l^{N_c} z_k z_l a_{kl} \quad \text{und} \quad b = \sum_k^{N_c} z_k b_k. \quad (2.21)$$

Die Parameter  $a_{kl}$  und  $b_k$  werden über die korrespondierenden Zustände und somit über die ZGL berechnet. Für die Einträge  $a_{kl}$  in der Diagonale mit  $k = l$  werden die kritischen Werte der jeweiligen Einzelkomponente verwendet. Die Einträge der Nebendiagonale in der Matrix ergeben sich mit den pseudo-kritischen Kombinationsregeln nach Reid *et al.* [137] zu:

$$\omega_{kl} = 0.5 (\omega_k + \omega_l), \quad v_{c,kl} = \frac{1}{8} \left( v_{c,k}^{1/3} + v_{c,l}^{1/3} \right)^3, \quad Z_{c,kl} = 0.5 (Z_{c,k} + Z_{c,l}) \quad (2.22)$$

$$T_{c,kl} = \sqrt{T_{c,k} T_{c,l}} (1 - k_{kl}) \quad \text{und} \quad p_{c,kl} = Z_{c,kl} \mathcal{R}_u T_{c,kl} / v_{c,kl} \quad \text{mit} \quad k_{kl} = 0.$$

Der binäre Interaktionsparameter  $k_{kl}$  wird für alle Berechnungen vernachlässigt.

### 2.3.3 Transporteigenschaften

Nicht nur die thermischen Zustandsgrößen der Fluide werden durch das stark nicht-lineare Verhalten beeinflusst, sondern auch die Transporteigenschaften in Form der Viskosität und der thermischen Leitfähigkeit. Für die Modellierung dieser wird auf das empirische Modell von Chung [31] zurückgegriffen, welches die beiden Eigenschaften mittels einer Vielzahl an Koeffizienten an experimentelle Daten angleicht. Eine Validierung wird in Anhang A durchgeführt.

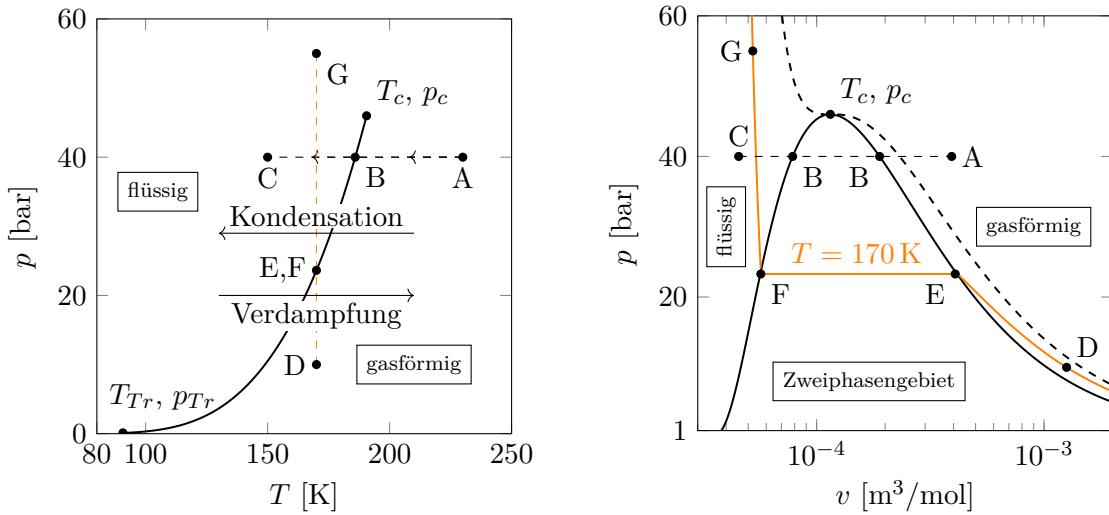
## 2.4 Thermodynamik mehrphasiger Fluide

Die Thermodynamik mehrphasiger Fluide ist ein elementarer und sehr komplexer Bestandteil dieser Arbeit. Zu Beginn werden die Unterschiede des Verhaltens im mehrphasigen Gebiet des Reinstoffs 2.4.1 und der mehrkomponentigen Mischung 2.4.2 mittels geeigneter Abbildungen erläutert. Im Anschluss wird auf die Theorie des Phasengleichgewichts sowie die implementierten Berechnungsmethoden 2.4.3 eingegangen. Die Berechnung wichtiger thermodynamischer Zustandsgrößen wird in Abschnitt 2.4.4 aufgezeigt. Von besonderem Interesse sind hier die Kompressibilitäts- und Schallgeschwindigkeitsberechnungen. Ein besonderer Abschnitt 2.4.5 ist der Validierung des Phasenzerfalls und den Stoffeigenschaften des mehrphasigen Fluids gewidmet. In Abschnitt 2.4.6 wird ein Ansatz beschrieben, der die Simulation zweiphasiger Zustände im metastabilen Bereich mit einer vereinfachten einphasigen Annahme ermöglicht.

### 2.4.1 Reinstoffe

Für die Beschreibung der Reinstoffthermodynamik mehrphasiger Fluide wird wiederum Methan verwendet. Ausgehend von dem mit der SRK-ZGL berechneten  $pVT$ -Diagramm in Abbildung 2.1 lässt sich durch die Projektion der Kurven auf die entsprechende Ebene ein  $pT$ -Diagramm erzeugen, siehe Abbildung 2.2a. Das grau eingefärbte Zweiphasengebiet im  $pT$ -Diagramm entspricht nun einer Linie, die sich vom Tripelpunkt, gekennzeichnet mit  $T_{Tr}$  und  $p_{Tr}$ , zum kritischen Punkt, gekennzeichnet mit  $T_c$  und  $p_c$ , erstreckt. Um den Phasenübergang besser erläutern zu können wird dies anhand einer gedachten, isobaren Kondensation veranschaulicht. Der Phasenübergang von der Gasphase zur Flüssigkeitsphase ist durch den Pfad  $ABC$  gekennzeichnet. In Punkt  $A$  befindet sich Methan bei einem Druck von 40 bar und einer Temperatur von 230 K in einem gasförmigen Zustand. Dem System wird Wärme entzogen, was einer Abkühlung und einer Absenkung der Temperatur entspricht. Ist die Absenkung der Temperatur stark genug wird Punkt  $B$  erreicht, ein Zustand der gleichzeitig die Verdampfungs- und die Kondensationslinie markiert. Rechts von diesem Punkt ist das Fluid in der Gasphase, links davon in der Flüssigkeitsphase vorhanden. Während dem Fluid weiter Wärme entzogen wird findet der Phasenübergang statt, die Gasphase kondensiert, die Temperatur und der Druck bleiben aber konstant. Die entzogene Wärme wird demnach nicht zur Abkühlung des Fluids, sondern für den Phasenübergang von der Gasphase zur Flüssigkeitsphase aufgewendet. Ist der Phasenwechsel vollzogen und wird dem System weiter Wärme entzogen, kühlt das Fluid weiter ab und erreicht schließlich Punkt  $C$ . Gleichermaßen gilt für den Verdampfungsprozess von  $C$  über  $B$  nach  $A$ . Ausgehend vom Punkt  $C$  resultiert eine Wärmezufuhr in einer Temperaturerhöhung. Im Punkt  $B$  bildet sich die Gasphase neu und bei weiterer Wärmezufuhr wird schließlich Punkt  $A$  erreicht.

Um das spezifische Volumen  $v$  in die Betrachtung miteinzubeziehen, wird anstelle des  $pT$ -Diagramms das  $pv$ -Diagramm dargestellt, siehe Abbildung 2.2b. Das  $pv$ -Diagramm geht aus dem  $pVT$ -Diagramm durch die Projektion auf die  $pv$ -Ebene hervor. Die Kondensations- und die Verdampfungslinie sind nun nicht mehr deckungsgleich, sie teilen sich in einen linken Ast, der Verdampfungslinie, und einen rechten Ast, der Kondensationslinie, auf. Beide Linien laufen in dem kritischen Punkt zusammen. Mit der isobaren Abkühlung  $ABC$  wird ersichtlich, dass sich während des Kondensationsprozesses nur das Volumen ändert, Druck und Temperatur bleiben konstant. Zur weiteren Veranschaulichung soll ein zusätzlicher Prozess, der mit Pfad  $DEFG$  eingezeichnete, isotherme Kompressionsprozess von einem



(a)  $pT$ -Diagramm mit eingezeichneter isobarer Abkühlung bei 40 bar von Punkt  $A$  über Punkt  $B$  zu Punkt  $C$ .

(b)  $pv$ -Diagramm mit eingezeichneter isothermer Kompression bei 170 K von Punkt  $D$  über Punkt  $E$  und  $F$  zu Punkt  $G$ .

Abbildung 2.2. Zustandsdiagramme für Methan.

Druck mit 10 bar zu einem höheren Druck mit 55 bar dienen. Das Fluid im gasförmigen Zustand  $D$  wird komprimiert. Aufgrund der Kompressibilität des Gases, der sich weit voneinander entfernt befindlichen Moleküle, führt ein geringer Druckzuwachs zu einer großen Volumenverkleinerung. Am Punkt  $E$  ist die Kondensationslinie erreicht und die Gasphase ist gesättigt. Durch eine weitere Komprimierung des Fluids bilden sich nun erste Tröpfchen und das Zweiphasengebiet bildet sich aus. Am Punkt  $F$ , an der Verdampfungslinie, ist bereits keine gasförmige Phase mehr vorhanden. Ein Druckzuwachs in der Flüssigkeitsphase führt, aufgrund der näherungsweise inkompressiblen Eigenschaft der Flüssigkeit, zu einer sehr kleinen Volumenänderung. Bei einer ausreichend starken Komprimierung wird Punkt  $G$  erreicht. Der Vollständigkeit halber wurde der isotherme Kompressionsprozess  $DEFG$  auch im  $pT$ -Diagramm in Abbildung 2.2a eingezeichnet. Die Punkte  $E$  und  $F$  befinden sich zusammen auf der Sättigungskurve, während Punkt  $D$  den gasförmigen Zustand und Punkt  $G$  den flüssigen Zustand widerspiegelt.

### 2.4.2 Mischungen

Reinstoffe, so wie sie im Unterabschnitt 2.4.1 behandelt wurden, kommen in der Realität sehr selten vor. Entweder werden die Reinstoffe in der Anwendung durch Leckagen und diffusive Vorgänge mit dem umgebenden Fluid vermischt, oder der Brennstoff besteht aufgrund der Gewinnung, Herstellung oder anderen prozessbedingten Faktoren aus einem mehrkomponentigen Gemisch. Um die Thermodynamik mehrphasiger und mehrkomponentiger Fluide zu beschreiben, gehen wir für die Erklärung von einem binären Gemisch aus, einer Mischung von zwei Komponenten. Sind mehr Spezies in einer Mischung vorhanden ändern sich die grundlegenden Prinzipien nicht. Durch jede zusätzliche Komponente erweitert sich der Zustandsraum um eine Dimension und eine anschauliche Beschreibung der Vorgänge wird erschwert. Der Zustand im binären Gemisch lässt sich nicht mehr nur durch die

zwei Größen ( $p, T$ ) charakterisieren, wie für den Reinstoff, sondern durch die drei Größen ( $p, T, \mathbf{z}$ ), wobei  $\mathbf{z}$  der molaren Zusammensetzung entspricht. Als Beispiel soll eine Mischung mit 80 mol-% Methan und 20 mol-% Stickstoff dienen. Um die Unterschiede zwischen der Mehrkomponenten- und der Reinstoffthermodynamik deutlich zu machen, beginnen wir dieses Mal mit dem  $pv$ -Diagramm, siehe Abbildung 2.3b, in der die Reinstoffkurven grau hinterlegt sind. Wiederum wird der isotherme Kompressionsvorgang  $D'E'F'G'$  betrachtet. Beginnend bei Punkt  $D'$  ändert sich bei der Kompression der Gasphase im Vergleich zum Reinstoff wenig und ein geringer Druckunterschied führt zu einer großen Volumenänderung. Ist der Kondensationspunkt  $E'$  erreicht und wird das Gemisch weiter komprimiert, bilden sich die ersten Flüssigkeitströpfchen im Zweiphasengebiet. Während des Phasenübergangs kommt es zu einer Druckänderung. Ab dem Verdampfungspunkt  $F'$  gleicht der Verlauf der Kurve wieder dem Verlauf der Kurve des Reinstoffs. Der Druckanstieg während der Kompressionsphase ist auf die Zusammensetzung des Gemisches zurückzuführen. Während einige Moleküle der Mischung es bevorzugen in der gasförmigen Phase zu bleiben, vollziehen andere bereits den Phasenübergang zur Flüssigkeit, ein für sie präferierter Zustand was auch als Volatilität bezeichnet wird. Dabei verbleiben die leichten Moleküle länger im gasförmigen Zustand als die schweren Moleküle. Der Druckanstieg eines mehrkomponentigen Systems führt zu der Trennung von Kondensations- und Verdampfungslinie im  $pT$ -Diagramm, siehe Abbildung 2.3a. Hier ist die Kondensations- bzw. Verdampfungslinie des Reinstoffs Methan weiterhin grau dargestellt. Die Phaseneinhüllende der definierten Mischung (80 mol-% Methan, 20 mol-% Stickstoff) ist in schwarz eingetragen, die Kondensationslinie gestrichelt, die Verdampfungslinie durchgängig dargestellt. Aufgrund der niedrigeren kritischen Temperatur von Stickstoff mit  $T_c = 126.19\text{ K}$  ist die neue Einhüllende nach links verschoben, zu niedrigeren Temperaturen hin. Es wird klar, dass der kritische Druck für eine beliebige Zusammensetzung höher sein kann als die kritischen Drücke der Einzelspezies. Die maximale kritische Temperatur der Einzelspezies bleibt jedoch die obere Temperaturgrenze für einen Phasenübergang bei Mischungen der in dieser Arbeit betrachteten Komponenten.

Zusätzlich zu dem  $pT$ - und dem  $pv$ -Diagramm und zur weiteren Definition wichtiger Größen lässt sich auch ein Druck-Molenbruch-Diagramm (kurz  $pz$ -Diagramm) zeichnen, in dem isotherme Verläufe eingezeichnet werden. Wiederum kennzeichnen die gestrichelten Linien die Kondensationslinien, die molare Zusammensetzung der Mischung, des Dampf- und des Flüssigkeitsgehalts von Stickstoff sind auf der Koordinatenachse eingetragen. Die gasförmige Phase bei konstanten Temperaturen befindet sich unterhalb der jeweiligen Blase, die flüssige Phase oberhalb der Verdampfungslinie. Mit dem  $pz$ -Diagramm lässt sich bei gegebener Temperatur herausarbeiten, für welche Zusammensetzung und bei welchem Druck die einzelnen Phasen bzw. das Zweiphasengebiet existiert. Zur besseren Anschauung wurde der Kompressionsprozess  $D'E'F'G'$  bei  $170\text{ K}$  von Abbildung 2.3a und 2.3b auf Abbildung 2.4a übertragen. Für einen Druck von  $10\text{ bar}$  in Punkt  $D'$  ist die Mischung in einem gasförmigen Zustand. Bei  $30.66\text{ bar}$  ist die Kondensationslinie erreicht und es bilden sich die ersten Tröpfchen, das Zweiphasengebiet beginnt (Punkt  $E'$ ). Bis zu einem Druck von  $39.10\text{ bar}$  verläuft der Phasenübergang, die Mischung kondensiert und befindet sich am Punkt  $F'$  in der gesättigt flüssigen Phase bis hin zu Punkt  $G'$ . Während des Prozesses von  $D'$  nach  $G'$  werden die isothermen Blasen der anderen dargestellten Temperaturen  $150\text{ K}$ ,  $160\text{ K}$  und  $180\text{ K}$  ebenfalls durchlaufen. Für eine Temperatur von  $150\text{ K}$  erfolgt die Kondensation bei einem deutlich niedrigeren Druck, für eine Temperatur von  $180\text{ K}$  entsprechend bei einem höheren Druck.

Um weitere, die Zweiphasigkeit beschreibende nützliche Begriffe einzuführen, wird die

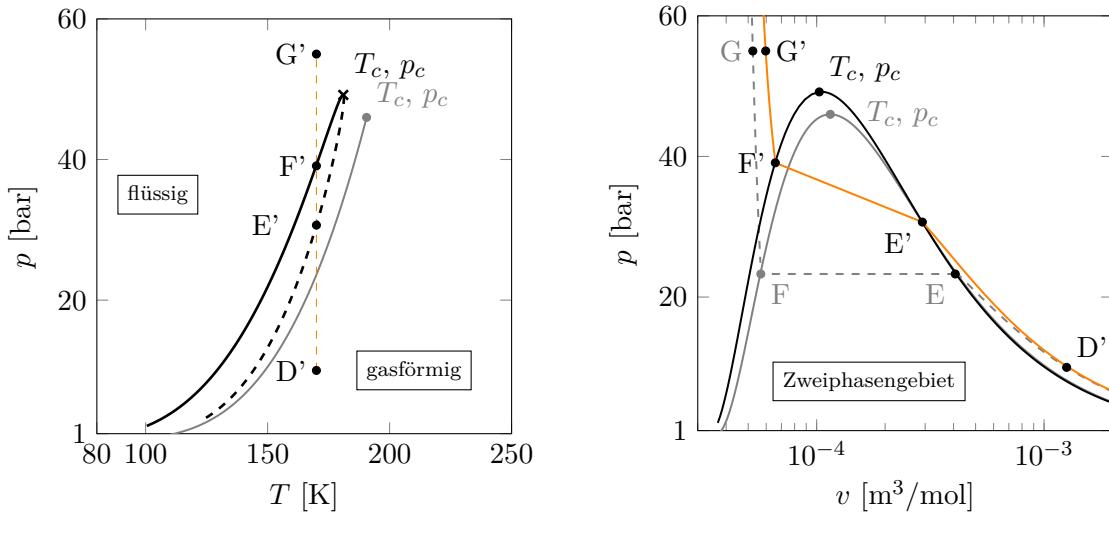


Abbildung 2.3. Zustandsdiagramme für eine Methan-Stickstoff-Mischung: 80 mol-% Methan, 20 mol-% Stickstoff. Der Pfad von Punkt  $D'$  über Punkt  $E'$  und  $F'$  zu Punkt  $G'$  stellt eine isotherme Kompression bei 170 K dar. Grau dargestellt sind die Kurven des Reinstoffs Methan.

isotherme Blase für  $T = 160$  K aus Abbildung 2.4a gesondert dargestellt, siehe Abbildung 2.4b. Für den betrachteten Zustand mit einem Druck von 35 bar und einer Temperatur von  $T = 170$  K ergibt sich für die definierte Methan-Stickstoff-Mischung (80 mol-% Methan, 20 mol-% Stickstoff) ein zweiphasiger Zustand. In diesem beträgt der molare flüssige Anteil von Stickstoff  $x_{\text{N}_2} = 0.144$  und von Methan  $x_{\text{CH}_4} = 0.856$ , es gilt  $\sum x_k = 1$ . Die molaren gasförmigen Anteile betragen  $y_{\text{N}_2} = 0.281$  und  $y_{\text{CH}_4} = 0.719$ , wiederum gilt  $\sum y_k = 1$ . Für den gasförmigen und flüssigen Molenbruch ergeben sich mit dem Hebelgesetz

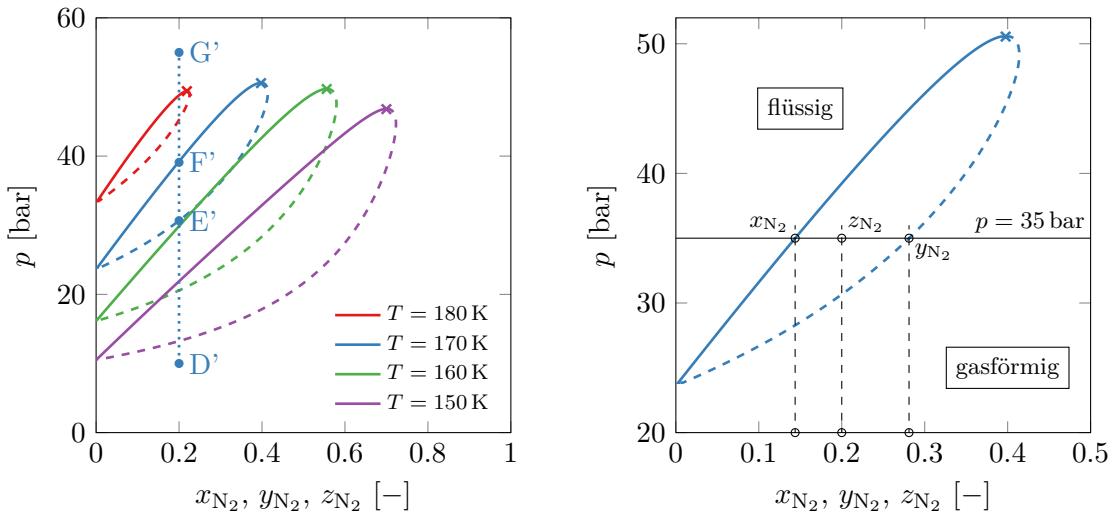
$$\beta_v = \frac{z_{\text{N}_2} - x_{\text{N}_2}}{y_{\text{N}_2} - x_{\text{N}_2}} = 0.409 \quad \text{und} \quad \beta_l = \frac{y_{\text{N}_2} - z_{\text{N}_2}}{y_{\text{N}_2} - x_{\text{N}_2}} = 0.591, \quad (2.23)$$

wobei der Molenbruch des Flüssigkeitsgehalts  $\beta_l$  nach Berechnen von  $\beta_v$  auch mit  $\beta_v + \beta_l = 1$  ausgewertet werden kann. Für die molare Zusammensetzung  $z_k$  gilt

$$z_k = x_k \beta_l + y_k \beta_v. \quad (2.24)$$

Wird für den betrachteten Zustand bei konstantem Druck und konstanter Temperatur die molare Zusammensetzung des Methan-Stickstoff-Gemisches variiert, befindet sich die Mischung für  $x_{\text{N}_2} < z_{\text{N}_2} < y_{\text{N}_2}$  weiterhin im Zweiphasengebiet. Der molare Dampfgehalt  $\beta_v$  und Flüssigkeitsgehalt  $\beta_l$  ändern sich entsprechend. Für  $z_{\text{N}_2} < x_{\text{N}_2}$  befindet sich das Fluid in der Flüssigkeitsphase, für  $z_{\text{N}_2} > y_{\text{N}_2}$  in der Gasphase. Das Verhältnis von  $y_k$  zu  $x_k$  wird Gleichgewichtsverhältnis  $K_k = y_k/x_k$  genannt und spielt in der Berechnung des Phasengleichgewichts eine elementare Rolle. Weitere Informationen bezüglich der mehrphasigen Thermodynamik können den Büchern von Stephan et al. [153, 154] entnommen werden.

Die Berechnung der thermodynamischen Größen im Zweiphasengebiet erfolgt, bis auf wenige Ausnahmen (siehe Unterabschnitt 2.4.4), anhand einfacher Mischungsregeln. Als



(a) Einhüllende des Zweiphasengebiets für verschiedene Temperaturen mit eingezeichneter isothermer Kompression bei 170 K von Punkt D' über Punkt E' und F' zu Punkt G'.

(b) Einhüllende des Zweiphasengebiets für  $T = 170\text{ K}$ . Bei 35 bar und  $z_{N_2} = 0.2$  ergibt sich ein Phasengleichgewicht mit  $x_{N_2} = 0.144$ ,  $y_{N_2} = 0.281$  und  $\beta_v = 0.358$ .

Abbildung 2.4.  $pz$ -Diagramm für eine Methan-Stickstoff-Mischung.

Beispiel sei hier die Dichte genannt:

$$\rho = \frac{1}{\frac{1-\bar{\beta}_v}{\rho_l} + \frac{\bar{\beta}_v}{\rho_v}}. \quad (2.25)$$

In dieser Arbeit wird die Viskosität  $\mu$  mit der gleichen Annahme gewichtet [7]. Als Gewichtungsfaktor dient hier der massenspezifische Dampfgehalt  $\bar{\beta}_v$ , da sowohl die Dichte als auch die Viskosität in der vorliegenden Arbeit als massenspezifische Größen hinterlegt sind.  $\bar{\beta}_v$  und  $\bar{\beta}_l$  ergeben sich aus den molaren Anteilen  $x_i$ ,  $y_i$ ,  $z_i$  und aus den Molmassen  $M_{w,k}$  zu

$$\bar{\beta}_v = \frac{\frac{z_{N_2}}{\sum_k z_k M_{w,k}} - \frac{x_{N_2}}{\sum_k x_k M_{w,k}}}{\frac{y_{N_2}}{\sum_k y_k M_{w,k}} - \frac{x_{N_2}}{\sum_k x_k M_{w,k}}} = 0.431 \quad \text{und} \quad \bar{\beta}_l = 1 - \bar{\beta}_v = 0.569 \quad (2.26)$$

Die Werte für  $\beta_v$  und  $\bar{\beta}_v$  sind aufgrund der leicht unterschiedlichen Molmassen von Stickstoff und Methan ebenfalls verschieden. Da in der Simulation eine Transportgleichung für den Massenbruch der Spezies  $w_k$  gelöst wird, siehe Gleichung 2.7, wird in der späteren Präsentation der Ergebnisse, falls nicht gesondert markiert, der Massenbruch  $w_k$  und der massenspezifische Dampfgehalt  $\bar{\beta}_v$  verwendet.

### 2.4.3 Phasengleichgewicht und Berechnungsmethoden

#### Stabilitätsbedingung

Bevor die Berechnung des Phasengleichgewichts und der jeweiligen Methoden beschrieben werden kann, wird der Zustand des Gleichgewichts definiert. Dazu wird analog zur Mechanik ein Gleichgewichtszustand als stabil, instabil, neutral und metastabil beschrieben.

Als stabil wird ein Zustand bezeichnet, in dem das System nach allen vorübergehend erzwungenen Änderungen wieder von selbst in die ursprüngliche Position zurückfindet. Ist dies nicht der Fall und der Punkt entspricht nach einer erzwungenen Verschiebung nicht mehr dem Ausgangspunkt, so wird dieser als instabil bezeichnet. Bei einem neutralen Gleichgewichtszustand verharrt das System in seiner erzwungenen Auslenkung, beim metastabilen Zustand findet das System einen in unmittelbarer Nähe befindlichen stabilen Zustand. In der Mechanik mit dem Beispiel einer Kugel, die sich auf einer beliebig formbaren Kurve befindet, lassen sich die drei Gleichgewichtszustände stabil, neutral und metastabil anhand der potentiellen Energie  $E_{\text{pot}}$  beschreiben. Für alle drei Bedingungen gilt  $\partial E_{\text{pot}}/\partial z = 0$ . Für den stabilen Gleichgewichtszustand besitzt die potentielle Energie ein Minimum, für den metastabilen Zustand ein lokales Minimum und für den neutralen Zustand einen Sattelpunkt. Diese Definitionen lassen sich auch auf die Thermodynamik übertragen, wobei die betrachtete Energieform nicht mehr der potentiellen Energie, sondern einem thermodynamischen Potenzial, welches im Gleichgewicht Extremwerte annimmt, entspricht. In der Thermodynamik wird ein stabiler Zustand dann erreicht, wenn die Entropie eines abgeschlossenen Systems für gegebene Werte der inneren Energie und des Volumens ein Maximum erreicht. Dies ist gleichbedeutend mit der Aussage, dass die Gibbs-Energie  $g$  (auch freie Enthalpie genannt) eines geschlossenen Systems für gegebene Werte der Temperatur und des Druckes der einzelnen Phasen im Gleichgewicht ein Minimum besitzt. Ähnliche Stabilitätsbedingungen lassen sich unter geeigneten Nebenbedingungen für die verbleibenden thermodynamischen Potenziale der inneren Energie  $u$ , der freien Energie  $f$  und der spezifischen Enthalpie  $h$  treffen. Durch Überlegungen anhand zweier Teilsysteme können so mechanische, thermische und chemische Stabilitätsbedingungen abgeleitet werden [154]:

$$\underbrace{\frac{\partial p}{\partial v} \Big|_{T,z_k}}_{\text{mechanisch}} < 0, \quad \underbrace{\frac{\partial T}{\partial s} \Big|_{v,z_k}}_{\text{thermisch}} > 0 \quad \text{und} \quad \underbrace{\frac{\partial \mu_k}{\partial z_k} \Big|_{T,p,z_l \neq k}}_{\text{chemisch}} > 0. \quad (2.27)$$

Führen wir uns nun nochmal das bekannte  $pv$ -Diagramm vor Augen, können wir dieses mit einer Isotherme  $T = 175\text{ K} < T_c$  ergänzen, siehe Abbildung 2.5. Zusätzlich zu der Isotherme sind das Zweiphasengebiet, deren Phasengrenzlinien und die Sättigungspunkte  $A$  und  $D$  dargestellt. Zwischen dem lokalen Minimum  $B$  und dem lokalen Maximum  $C$  ist die Steigung der Isothermen positiv

$$\frac{\partial p}{\partial v} \Big|_T > 0 \quad (2.28)$$

und widerspricht der mechanischen Stabilitätsbedingung. Diese Betrachtung ist durch die Verwendung einer kubischen ZGL besonders einfach, da sich mit dieser der gesamte Zustandsraum von der Gasphase bis zur Flüssigkeitsphase berechnen lässt<sup>3</sup>. Um die Kurve, die die metastabilen von den instabilen Zuständen abgrenzt, zu erhalten, werden die Maxima und Minima aller Isothermen mit  $T < T_c$  verbunden. Die resultierende Kurve wird Spinodale genannt. Das Gebiet zwischen den Phasengrenzkurven und der Spinodale ist metastabil und entspricht der thermodynamischen Stabilitätstheorie.

<sup>3</sup>Für ZGL höherer Ordnung sind mehrere Über- und Unterschwinger vorhanden, welche gesondert betrachtet und modifiziert werden müssen.

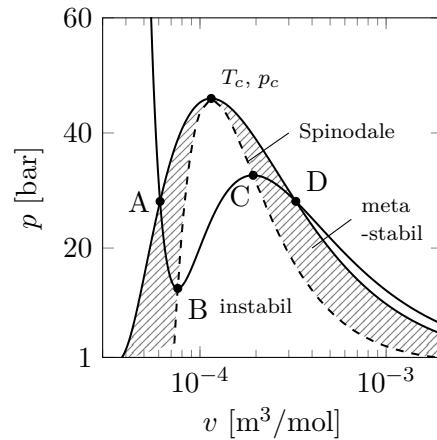


Abbildung 2.5.  $pv$ -Diagramm für Methan mit eingezeichneter Spinodale und metastabilem Zweiphasengebiet.

### Definition und Berechnungsvorgehen des Phasengleichgewichts

Das Phasengleichgewicht wird unter der Annahme eines instantanen Gleichgewichts berechnet. Diese Annahme kann in erster Linie dann getroffen werden, wenn die Zeitskalen für den Phasenübergang kleiner sind als die in der Strömungssimulation vorkommenden Zeitskalen. Jarczyk [75] zeigt beispielsweise anhand einer binären  $\text{O}_2/\text{H}_2$ -Mischung, dass der Phasenzerrfall in weiten Teilen des Zweiphasengebiets instantan abläuft und die Zeitskalen nur in unmittelbarer Nähe zur Phasengrenzfläche in die Größenordnung von für die Strömung relevante Werte kommen. Da die Strömungsgeschwindigkeiten unterexpandierter Freistrahlen insbesondere im Nahbereich der Düse sehr groß sind, können hier Nichtgleichgewichtseffekte auftreten. Baab *et al.* [8] vermuten, dass die metastabilen Zustände in der Düse nicht ausreichen, um eine Nukleation auszulösen. Das unterkühlte bzw. überhitzte Fluid bleibt am Düsenaustritt einphasig und ein Phasenübergang findet erst später statt. Zur Vereinfachung der Methodik werden Nichtgleichgewichtseffekte in der vorliegenden Arbeit aber nicht betrachtet.

Für den Gleichgewichtszustand im Zweiphasengebiet wird die Gleichheit von Temperatur, Druck und Gibbs Energie von flüssiger und gasförmiger Phase vorausgesetzt. Die partielle molare Gibbs Energie stellt das chemische Potenzial dar. In Abbildung 2.6 ist das Vorgehen der in dieser Arbeit verwendeten Gleichgewichtsberechnung zu sehen. Ausgehend von einem aus der Strömungssimulation stammenden Zustand, definiert durch den Druck  $p$ , die spezifische Enthalpie  $h$  und die molare Zusammensetzung  $\mathbf{z}$ , wird im ersten Schritt überprüft, ob die sich aus dem einphasigen Zustand ergebende Temperatur  $T$  kleiner ist als die kritische Temperatur  $T_{c,k}$  einer in der Mischung vorkommenden Komponente  $k$ . Ist dies nicht der Fall, kann eine Mehrphasigkeit ausgeschlossen werden (siehe Abschnitt 2.4.2). Die Zusammensetzung befindet sich in einem einphasigen Zustand und die thermodynamischen Größen werden direkt mit der kubischen ZGL von SRK gelöst. Ist die Temperatur kleiner als die kritische Temperatur  $T < \max(T_{c,k})$ , erfolgt eine Stabilitätsanalyse in drei Schritten. Im ersten Schritt wird eine Ersatzzusammensetzung nach Michelsen und Mollerup [111] definiert, mit deren Hilfe der zweite Schritt, die TPD-Analyse von Michelsen [110], durchgeführt wird. Im dritten Schritt der Stabilitätsanalyse wird für das Minimum der TPD-Funktion überprüft, ob dieses einen negativen Wert aufweist. Resultiert das Vorge-

hen in einem stabilen Zustand, werden die Stoffeigenschaften mit dem einphasigen Ansatz berechnet. Für den Fall eines instabilen/metastabilen Zustands wird ein isoenergetischer und isobarer Flash<sup>4</sup> berechnet. Dieser ist in zwei ineinander verschachtelten Iterationen aufgebaut, bei dem die äußere Iteration, der sogenannte *hpn*-Flash<sup>5</sup>, das Energiekriterium, die innere Iteration, der sogenannte *Tpn*-Flash<sup>6</sup>, das Temperaturkriterium über die Gleichheit der Fugazitäten erfüllt. Der neue Zustand, bestehend aus einer flüssigen Phasenzusammensetzung  $\mathbf{x}$  und einer gasförmigen Phasenzusammensetzung  $\mathbf{y}$ , wird über die Gleichungen in Abschnitt 2.4.2 berechnet.

Die Methodik wurde dem Vorgehen von Qiu und Reitz [134] nachempfunden und von Christoph Traxinger in OpenFOAM implementiert. Da erste Simulationen von Hexan-Freistrahlen sehr gute Übereinstimmungen mit experimentellen Daten zeigten [161], wurde die Implementierung übernommen und mit dem in dieser Arbeit entwickelten Strömungs löser (siehe Kapitel 3) gekoppelt. Durch die Anwendung von Methan anstelle Hexan und der unterschiedlichen Betriebsbedingungen (Hexan-Freistahl: subsonisch, isobar; Methan-Freistahl: trans-/supersonisch, unterexpandiert) musste das Berechnungsvorgehen nochmals angepasst und ausführlich validiert werden (siehe Abschnitt 2.4.5). Dies wurde zusammen durchgeführt und in Teilen in Traxinger *et al.* [160] veröffentlicht. Genauere Er läuterungen der einzelnen Berechnungsschritte werden im Folgenden ausgeführt.

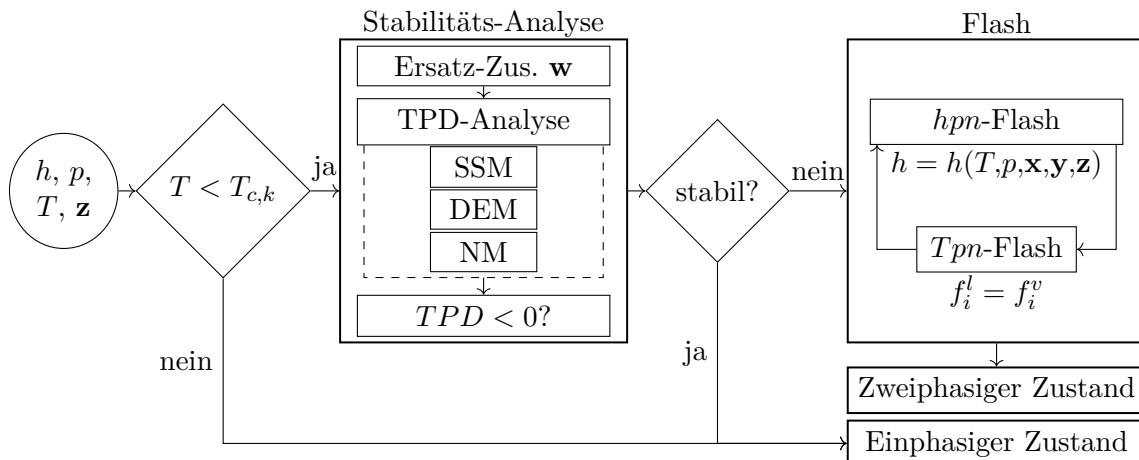


Abbildung 2.6. Schematische Darstellung der implementierten Phasengleichgewichtsberechnung.

### Stabilitätsanalyse

Eine Mischung mit gegebenem Druck  $p$ , gegebener Temperatur  $T$  und Zusammensetzung  $\mathbf{z}$  ist stabil, wenn die totale Gibbs Energie im globalen Minimum ist. Ein Phasenübergang bzw. -zerfall findet nur dann statt, wenn die Gibbs Energie des Systems durch eine Aufspaltung in mehrere Phasen abnimmt [113]. Ob dies der Fall ist, wird mit der sogenannten **TPD-Analyse** (TPD für engl. *Tangent Plane Distance*) von Michelsen [110] überprüft, in

<sup>4</sup> Als Flash wird ein Prozess bezeichnet, bei dem eine Mischung mit gegebenem Zustand in mindestens zwei Phasen unterschiedlicher Zusammensetzung zerfällt.

<sup>5</sup> Enthalpie, Druck und molare Zusammensetzung bleiben konstant.

<sup>6</sup> Temperatur, Druck und molare Zusammensetzung bleiben konstant.

welcher die Gibbs Energie einer angenommenen Testzusammensetzung  $\mathbf{w}$  mit der Gibbs Energie der Mischung  $\mathbf{z}$  verglichen wird. Dazu wird eine Tangente an die Oberfläche der Gibbs Energie der Mischung angelegt und der Abstand der Tangente zur Oberfläche ausgewertet:

$$TPD(\mathbf{w}) = \sum_k w_k [\mu_k(\mathbf{w}) - \mu_k(\mathbf{z})]. \quad (2.29)$$

Nimmt die Funktion einen negativen Wert an, ist der Zustand instabil und es erfolgt ein Phasenzerfall in die Flüssigkeits- und die Gasphase. Für eine alternative Formulierung [112] wird das chemische Potenzial  $\mu_k$  mit dem Fugazitätskoeffizienten  $\varphi_k$  ersetzt:

$$tpd(\mathbf{w}) = \frac{TPD(\mathbf{w})}{\mathcal{R}_u T} = \sum_k w_k [\ln w_k + \ln \varphi_k(\mathbf{w}) - \ln z_k - \ln \varphi_k(\mathbf{z})]. \quad (2.30)$$

Der Fugazitätskoeffizient ist definiert als  $\varphi_k(\mathbf{z}) = f_k/(z_k p)$  bzw.  $\varphi_k^l = f_k^l/(x_k p)$  für die flüssige und  $\varphi_k^v = f_k^v/(y_k p)$  für die gasförmige Phase. Für die Testphase lautet der Ausdruck entsprechend  $\varphi_k(\mathbf{w}) = f_k/(w_k p)$ .  $f_k$  bezeichnet die Fugazität der jeweiligen Komponente in der Mischung. Die Fugazität eines Reinstoffs unter der Annahme eines thermisch idealen Gases gleicht dem Druck, für eine Komponente  $k$  in der Zusammensetzung  $\mathbf{z}$  ist sie gleich dem Partialdruck der jeweiligen Komponente. Der Fugazitätskoeffizient kann somit als normierter Druck angesehen werden, der auf die nicht-idealen Abweichungen zurückzuführen ist. Der natürliche Logarithmus des Fugazitätskoeffizienten einer Komponente in der Mischung wird mit der SRK-ZGL mit

$$\ln(\varphi_k) = -\ln(1 - b\rho) + \frac{b_k}{b} (Z - 1) - \frac{a}{b\mathcal{R}_u T} \left( \frac{2 \sum_l z_l a_{kl}}{a} - \frac{b_k}{b} \right) \ln \left( 1 + \frac{b}{v} \right) \quad (2.31)$$

berechnet. Theoretisch müssten für die TPD-Analyse alle möglichen Zusammensetzungen  $\mathbf{w}$  untersucht werden. Da dies allgemein und insbesondere in der CFD aufgrund des erheblichen Rechenaufwandes jedoch nicht praktikabel ist, wird das Minimum der TPD gesucht [111]. Ist der Wert der TPD für alle Minima positiv, so ist die TPD auch für alle möglichen Zusammensetzungen  $\mathbf{w}$  positiv und der Zustand somit stabil. Im Umkehrschluss resultiert ein negativer Wert der TPD in einem instabilen Zustand. Um die Minima zu berechnen, wird eine modifizierte Form der TPD mit der Molenzahl  $\mathbf{W}$  verwendet:

$$tm = 1 + \sum_i W_k [\ln W_k + \ln \varphi_k(\mathbf{W}) - \ln z_k - \ln \varphi_k(\mathbf{z}) - 1]. \quad (2.32)$$

Dadurch ergibt sich ein uneingeschränktes Minimierungsproblem, dessen Lösung die Bedingung

$$\frac{\partial tm}{\partial W_k} = \ln(W_k) + \ln(\varphi_k(\mathbf{W})) - \ln z_k - \ln \varphi_k(\mathbf{z}) = 0 \quad (2.33)$$

erfüllt. Für die Definition der Ersatzzusammensetzung wäre es hilfreich zu wissen, ob die Mischung  $\mathbf{z}$  einen höheren Flüssigkeitsanteil oder Gasanteil besitzt. Bei einer flüssigen bzw. flüssigkeitsähnlichen Zusammensetzung startet man mit einer gasförmigen Ersatzzusammensetzung, bei einer gasähnlichen mit einer flüssigkeitsähnlichen Ersatzzusammensetzung. Da diese aufgrund der erhöhten Drücke nicht immer zuverlässig bestimmt werden können, geht man von zwei Ersatzzusammensetzungen aus, einer gasähnlichen  $\mathbf{W}_v$  und einer flüssigkeitsähnlichen Ersatzzusammensetzung  $\mathbf{W}_l$ . Die Berechnung von  $\mathbf{W}_v = \mathbf{z}\mathbf{K}$

und  $\mathbf{W}_l = \mathbf{z}/\mathbf{K}$  erfolgt über die Abschätzung des Gleichgewichtsverhältnisses  $K_k$  mit der Wilson-Gleichung [175]

$$K_k = \frac{p_{c,k}}{p} \exp \left[ 5.373 (1 + \omega_k) \left( 1 - \frac{T_{c,k}}{T} \right) \right]. \quad (2.34)$$

Für die Berechnung des Minimums werden nun zunächst wenige Schritte  $n$  mit der **Sukzessiven Substitutionsmethode** (SSM) durchgeführt, mit der die initialisierten Ersatzzusammensetzungen verbessert werden können:

$$\ln (W_k^{n+1}) = \ln z_k + \ln \varphi_i (\mathbf{z}) - \ln \varphi_k (\mathbf{W}^n). \quad (2.35)$$

Aufgrund der Einfachheit und Robustheit gegenüber schlechten Startwerten wird die SSM für den Beginn des Lösungsalgorithmus präferiert. Die SSM weist ein lineares Konvergenzverhalten auf, weshalb in der Nähe des kritischen Punktes viele Iterationen benötigt werden um eine definierte Toleranz zu erreichen. Um das Verfahren zu beschleunigen, werden auf Grundlage der ersten SSM-Iterationen die neuen Werte für die Ersatzzusammensetzungen mit Hilfe der **Dominanten Eigenwert Methode** (DEM) von Crowe und Nishio [41] extrapoliert. Die DEM zählt zu den neueren Methoden und zeichnet sich durch ihr sehr gutes Konvergenzverhalten aus. Ist weder die SSM, noch die DEM zielführend wird eine Newton-Methode angewandt, siehe beispielsweise Fussel und Yanosik [55]. Die **Newton-Methode** (NM) konvergiert in der Nähe des kritischen Punktes in der Regel schneller als die SSM. In dem implementierten Algorithmus wird die SSM vier mal wiederholt bevor zu der DEM höherer Ordnung gewechselt wird. Um das Verfahren zu beschleunigen wird diese einmal ausgeführt und es folgt wieder die SSM. Kann mit der DEM keine Konvergenz erzielt werden, wird schließlich die NM verwendet. Wird auch mit der NM keine Konvergenz erzielt, erfolgt die TPD-Analyse nur mit der SSM. Mit Erreichen des Minimums wird überprüft, ob der Wert der TPD negativ ist. Ist dies der Fall, erfolgt die Phasengleichgewichtsberechnung mit dem isoenergetischen und isobaren Flash.

Ein Beispiel einer TPD-Analyse ist in Abbildung 2.7 für die bereits diskutierte 80 %ige Methan- und 20 %ige Stickstoff-Mischung bei 35 bar zu sehen. In der oberen Darstellung ist die Gibbs Energie der jeweiligen Mischung  $\Delta g_{mix}$  zusammen mit der an die Zusammensetzung angelegten Tangente dargestellt. Die TPD, unteres Bild, ergibt sich nun aus dem Abstand der Gibbs Energie zur Tangente, welche für eine Temperatur von 160 K positiv und der Zustand somit stabil bleibt. Wird die Temperatur um 10 K auf 170 K erhöht, dem zuvor betrachteten Betriebspunkt, werden die Werte der TPD negativ und der Zustand wird als instabil deklariert. Das ermittelte Minimum der TPD ist mit einer roten Markierung eingezeichnet.

### Isoenergetischer und isobarer Flash

Die Berechnung des isoenergetischen und isobaren Flashes erfolgt unter der Voraussetzung des bereits angesprochenen mechanischen, thermischen und chemischen Gleichgewichts [52]:

$$T^v = T^l = T, \quad p^v = p^l = p \quad \text{und} \quad \mu_k^v(\mathbf{y}, p, T) = \mu_k^l(\mathbf{x}, p, T). \quad (2.36)$$

Ausgehend von den Ergebnissen der TPD-Methode der Stabilitäts-Analyse wird der *hpn*-Flash aufgerufen, der das Enthalpie-Kriterium

$$F = h(p, T, \mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}) - h(p, T, \mathbf{z}) = \epsilon, \quad \epsilon = 1 \times 10^{-12} \quad (2.37)$$

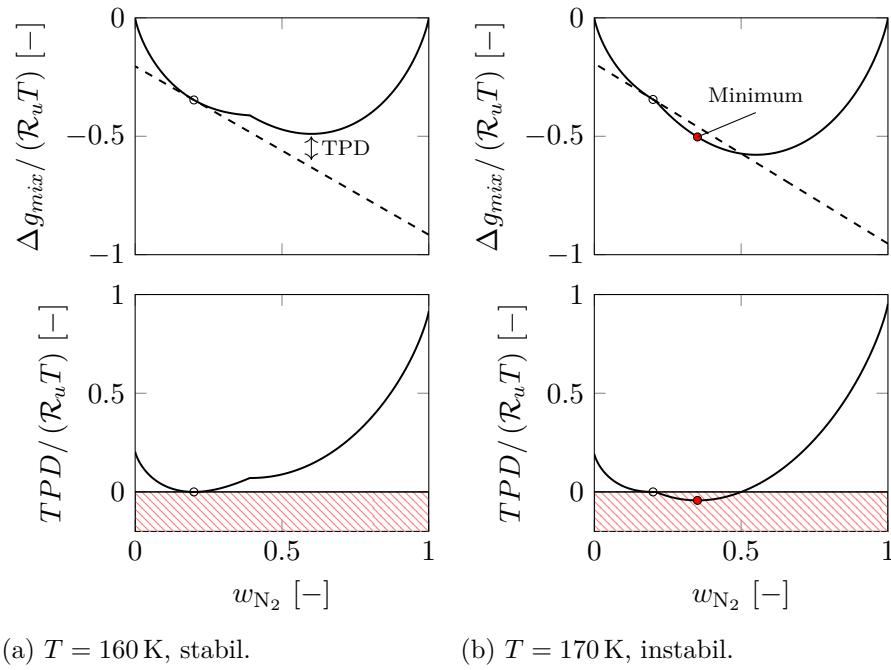


Abbildung 2.7. TPD-Analyse nach Michelsen [110] für eine 80 %ige Methan- und 20 %ige Stickstoff-Mischung bei 35 bar. Die TPD wird an die vorgegebene Zusammensetzung mit  $w_{N_2} = 0.2$  angelegt.

löst. Dazu wird die Intel MKL Programmbibliothek<sup>7</sup> verwendet, die für die Berechnung eine Vertrauensbereichsmethode anwendet.  $h(p,T,\mathbf{z})$  entspricht dabei der Enthalpie der Mischung aus dem Strömungslöser bei gegebener Zusammensetzung  $\mathbf{z}$ . Die Enthalpie  $h(p,T,\mathbf{x},\mathbf{y},\mathbf{z})$  berechnet sich aus den Einzenthalpien der Flüssigkeits- und der Gasphase:

$$h(p,T,\mathbf{x},\mathbf{y},\mathbf{z}) = \beta_v h(p,T,\mathbf{y}) + (1 - \beta_v) h(p,T,\mathbf{x}). \quad (2.38)$$

Die Temperaturiteration wird mit der bekannten Vertrauensbereichsmethode umgesetzt. Um die Einzenthalpien der beiden Phasen zu bestimmen, muss  $\beta_v$ ,  $\mathbf{x}$  und  $\mathbf{y}$  über den  $Tpn$ -Flash bestimmt werden. Dazu wird das dritte Gleichgewichtskriterium als Funktion der Fugazität geschrieben:

$$F_k = f_k(p,T,\mathbf{x}) - f_k(p,T,\mathbf{y}) = \epsilon, \quad \epsilon = 1 \times 10^{-12}, \quad \text{mit } k = 1, \dots, N. \quad (2.39)$$

Wiederum wird die Methodik der Vorgehensweise von Michelsen und Mollerup [111] nachempfunden, in der die Berechnung der Phasenzusammensetzung über das Gleichgewichtsverhältnis  $K_k$  erfolgt:

$$K_k = \frac{y_k}{x_k} = \frac{\varphi_k^l}{\varphi_k^v}. \quad (2.40)$$

Ausgehend von  $K_k$  kann mit der **Rachford-Rice-Gleichung** [135] der molare Dampfgehalt  $\beta_v$  ermittelt werden:

$$\sum \frac{z_k (K_k - 1)}{1 + \beta_v (K_k - 1)} = \epsilon, \quad \epsilon = 1 \times 10^{-6}. \quad (2.41)$$

<sup>7</sup>Programmbibliothek für mathematische Berechnungen (<https://software.intel.com/en-us/mkl>).

Dies erfolgt aufgrund des monotonen Verhaltens von Gleichung 2.41 mit der Newton-Methode. Als Startwert für  $K_k$  dient dabei das Ergebnis der TPD-Analyse. Mit  $\beta_v$  ergibt sich die Phasenzusammensetzung zu:

$$x_k = \frac{z_k}{1 + \beta_v (K_k - 1)} \quad \text{und} \quad y_k = \frac{K_k z_k}{1 + \beta_v (K_k - 1)}. \quad (2.42)$$

Ist der molare Dampfgehalt und die Phasenzusammensetzung bekannt, wird die Bedingung in Gleichung 2.39 überprüft. Ist die nötige Toleranz  $\epsilon$  noch nicht erreicht, wird das Gleichgewichtsverhältnis mit Gleichung 2.40 neu berechnet. Es ergeben sich verbesserte Werte für den Dampfgehalt und die Phasenzusammensetzung. Wiederum limitiert das lineare Konvergenzverhalten der SSM-Methode die Effizienz des Verfahrens, weshalb für eine Extrapolation der  $K_k$ -Werte die bekannten DEM- und NM-Methoden angewandt werden.

#### 2.4.4 Kompressibilität und Schallgeschwindigkeit

Die Berechnung einiger Stoffeigenschaften im Zweiphasengebiet erfolgt anhand einfacher Mischungsregeln, siehe Abschnitt 2.4.2. Für die Kompressibilität im Zweiphasengebiet, der relativen Änderung des Volumens bei einer Druckänderung, kann diese Annahme nicht getroffen werden. Es gilt:

$$\psi = \frac{\partial \rho}{\partial p} = -\frac{1}{v^2} \frac{\partial v}{\partial p} = \frac{1}{v} \xi. \quad (2.43)$$

Die Kompressibilität ist somit invers proportional zu der Steigung der Isothermen im  $pv$ -Diagramm. Mit Bezug auf Abbildung 2.2b wird klar, dass die Kompressibilität der Gasphase deutlich größer ist als die der Flüssigkeit, da der Betrag der Steigung der Isothermen kleiner ist. Folglich ist die Zweiphasenkompressibilität mit einer Steigung  $\rightarrow 0$  größer als die der Gasphase und bekannte Mischungsregeln können nicht angewandt werden. Da die Volumenänderung durch verschiedene Prozesse durchgeführt werden kann, muss zwischen der isothermen  $\xi_T$ , der isenthalpen  $\xi_h$  und der isentropen Kompressibilität  $\xi_s$  unterschieden werden:

$$\xi_T = -\frac{1}{v} \frac{\partial v}{\partial p} \Big|_{T,z_k}, \quad \xi_h = -\frac{1}{v} \frac{\partial v}{\partial p} \Big|_{h,z_k} \quad \text{und} \quad \xi_s = -\frac{1}{v} \frac{\partial v}{\partial p} \Big|_{s,z_k}. \quad (2.44)$$

Für die vorliegende Arbeit sind zwei der drei vorgestellten Kompressibilitäten von besonderem Interesse. Da die Energieerhaltungsgleichung in Enthalpieform gelöst wird, wird für die Druckgleichung im Strömungslöser die isenthalpe Kompressibilität verwendet, siehe Abschnitt 3.1. Für die Schallgeschwindigkeit ist die isentrope Kompressibilität von Bedeutung, es gilt:

$$a_s = \sqrt{\frac{\partial p}{\partial \rho} \Big|_{s,z_k}} = \sqrt{-v^2 \frac{\partial p}{\partial v} \Big|_{s,z_k}} = \frac{1}{\sqrt{\rho \xi_s}}. \quad (2.45)$$

Da die Berechnung der isentropen Kompressibilität und der daraus abgeleiteten Schallgeschwindigkeit im Zweiphasengebiet nicht trivial ist, gibt es eine Vielzahl an Korrelationen, die die entsprechenden Eigenschaften modellieren. In dem Ansatz von Wood [176] wird die isentrope Kompressibilität mit den molaren Gehalten der Gasphase  $\beta_v$  und der Flüssigkeitsphase  $\beta_l$  gewichtet und abgebildet:

$$\xi_s = (1 - \beta_v) \xi_{s,l}(\mathbf{x}, p, T) + \beta_v \xi_{s,v}(\mathbf{y}, p, T) = \frac{1 - \beta_v}{\rho_l a_{s,l}^2} + \frac{\beta_v}{\rho_v a_{s,v}^2}, \quad (2.46)$$

wobei die Werte für die Gasphase mit dem Index  $v$ , die für die Flüssigkeitsphase mit dem Index  $l$  bezeichnet werden. Für die Schallgeschwindigkeit ergibt sich folglich:

$$a_s = \left[ \rho \left( \frac{1 - \beta_v}{\rho_l a_{s,l}^2} + \frac{\beta_v}{\rho_v a_{s,v}^2} \right) \right]^{-\frac{1}{2}}. \quad (2.47)$$

Die Korrelation gibt dabei die Tendenz der Schallgeschwindigkeit wieder, überschätzt die Werte allerdings zum Teil deutlich und kann Diskontinuitäten nicht wiedergeben. Dies wird bei der Validierung in Abschnitt 2.4.5 ersichtlich.

Zu den Ansätzen für eine konsistente Modellierung der Kompressibilität und somit der Schallgeschwindigkeit zählen die Arbeiten von Picard und Bishnoi [130], Firoozabadi und Pan [53], Nichita *et al.* [120] sowie Castier [26]. Die Herangehensweise von Nichita *et al.* [120] hat sich als zielführend und effizient erwiesen und wurde deshalb für diese Arbeit übernommen. Die isentrope Kompressibilität kann mit dem isobaren Expansionskoeffizienten  $\alpha_P = \frac{1}{v} \frac{\partial v}{\partial T} \Big|_{p,z_k}$  als Funktion der isothermen Kompressibilität mit

$$\xi_s = \xi_T - \frac{\alpha_P^2 T v}{c_p} = -\frac{1}{v} \frac{\partial v}{\partial p} \Big|_T - \frac{\alpha_P^2 T v}{c_p} \quad (2.48)$$

ausgedrückt werden. Werden die Größen in Gleichung 2.48 unter Beachtung des Phasenübergangs berechnet, ist die Formulierung auch für das mehrphasige Fluid gültig. Die isenthalpe Kompressibilität ist gegeben als [160]:

$$\xi_h = \xi_s \left( 1 + \frac{\alpha_P a_s^2}{c_p} \right). \quad (2.49)$$

Unter Verwendung von Gleichung 2.48 und der Definition der Schallgeschwindigkeit  $a_s^2 = 1 / (\rho \xi_s)$  ergibt sich die finale Gleichung für  $\xi_h$  zu [160]

$$\xi_h = \frac{-c_p \frac{\partial v}{\partial p} \Big|_T / \frac{\partial v}{\partial T} \Big|_p - T \frac{\partial v}{\partial T} \Big|_p + v}{v c_p / \frac{\partial v}{\partial T} \Big|_p}. \quad (2.50)$$

Sie enthält somit nur noch partielle Ableitungen bei konstanter Temperatur oder bei konstantem Druck. Diese werden in unserem Fall durch die in Unterabschnitt 2.4.3 eingeführte Phasengleichgewichtsberechnung numerisch berechnet, indem die Phasengleichgewichte der Zustände  $(p, T \pm \epsilon)$  und  $(p \pm \epsilon, T)$  ermittelt werden.

#### 2.4.5 Validierung

##### Binäres Zweiphasengebiet

Für die Validierung der Berechnung des Zweiphasengebiets wird zuerst das  $pT$ -Diagramm in Abbildung 2.8a betrachtet. Es zeigt die Sättigungslinien von Stickstoff und Methan, in schwarz dargestellt, zusammen mit den Einhüllenden des Zweiphasengebiets der binären Mischung bei konstanter Zusammensetzung. Die Einhüllenden setzen sich aus der Verdampfungslinie (durchgezogene Linie) und der Kondensationslinie (gestrichelte Linie) zusammen. Am Übergang ist der kritische Punkt der jeweiligen Zusammensetzung gekennzeichnet. Der kritische Lokus für alle möglichen Zusammensetzungen der beiden Fluide ist in grau dargestellt. Zusätzlich zu den mit der SRK-ZGL berechneten Werten wurden einzelne Punkte

aus experimentellen Messreihen [32, 22, 27, 156] eingetragen, die als geschlossene Punktwolke den Verlauf des kritischen Lokus darstellen. Es zeigt sich, dass die durch die ZGL berechneten Werte die experimentellen Daten sehr gut wiedergeben. Die auftretenden Abweichungen des kritischen Lokus sind gering, wobei die Diskrepanzen für einen molaren Stickstoffanteil von  $0.4 < z_{N_2} < 0.6$  etwas zunehmen.

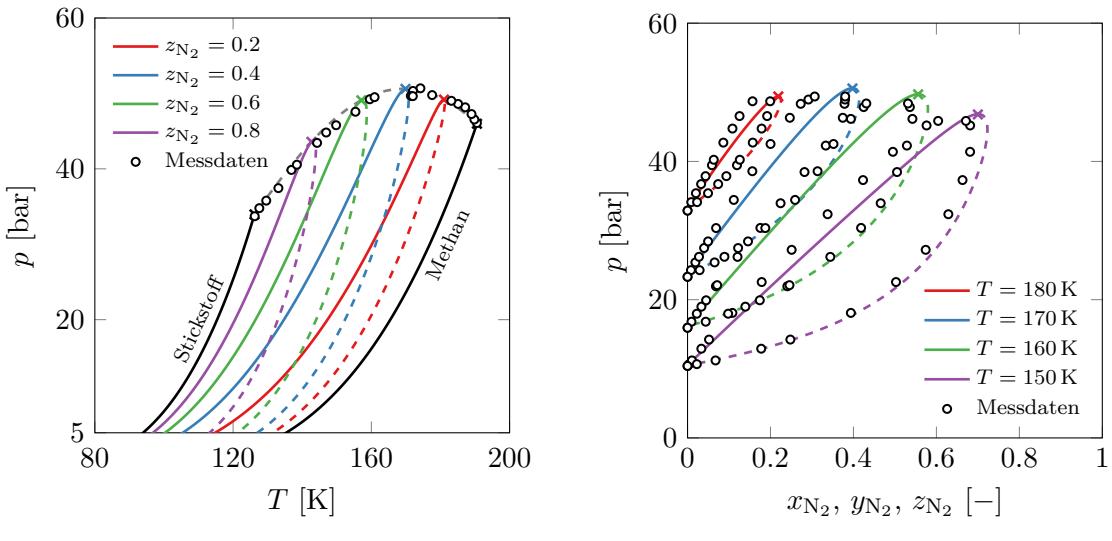


Abbildung 2.8. Vergleich des Phasengleichgewichts der mit der SRK-ZGL berechneten Daten mit verfügbaren Messdaten [32, 22, 27, 156].

Als weitere Validierung dient das  $pz$ -Diagramm in Abbildung 2.8b. Es zeigt die isothermen Verdampfungs- und Kondensationslinien für eine Methan-Stickstoff-Mischung. Wiederum in schwarz dargestellt sind die verfügbaren experimentellen Daten [32, 22, 27, 156]. Unabhängig von der Temperatur und vom Druck ist die Übereinstimmung für niedrige Stickstoffanteile in der Mischung sehr gut. Mit höheren Stickstoffanteilen in der Zusammensetzung ergeben sich vergleichsweise große Diskrepanzen. Diese können in dieser Arbeit aber aufgrund des niedrigen Stickstoffanteils in der Brennstoffzusammensetzung und des ausschließlich im Potenzialkern stattfindenden Phasenzerfalls vernachlässigt werden. Zusammenfassend kann für die binäre  $\text{CH}_4\text{-N}_2$ -Mischung von einer sehr guten Übereinstimmung und Validierung der SRK-ZGL gesprochen werden. Die Verläufe werden sowohl qualitativ als auch quantitativ mit einer für die Anwendung ausreichend guten Genauigkeit wiedergegeben.

### Ternäres Zweiphasengebiet

Als Validierung für eine ternäre Mischung wird Methan, Ethan und Stickstoff betrachtet, siehe Abbildung 2.9a und 2.9b. Um das Lesen des Diagramms zu vereinfachen wurde ein Referenzpunkt mit einer Zusammensetzung von  $x_{N_2} = 0.5$ ,  $x_{\text{CH}_4} = 0.2$  und  $x_{\text{C}_2\text{H}_6} = 0.3$  eingezeichnet. In jeder der beiden Abbildungen, die sich im Druck unterscheiden, sind die Kondensations- (gestrichelt) und die Verdampfungslinie für zwei Temperaturen  $T = 200\text{ K}$  und  $T = 160\text{ K}$  dargestellt. Bei einem Druck von 20 bar ist die Übereinstimmung der SRK-

ZGL mit den experimentellen Messdaten in Bezug auf die Kondensationslinie für beide ausgewählten Temperaturen sehr gut. Lediglich für die niedrigere Temperatur von  $T = 160\text{ K}$  kommt es für die Verdampfungslinie zu kleineren Differenzen, eine ähnliche Erscheinung wie bei der binären Methan-Stickstoff-Mischung. Für den höheren Druck von 40 bar können für beide Temperaturen die gleichen Aussagen getroffen werden. Während der Verlauf der Kondensationslinie sehr gut zu den einzelnen Messdaten passt, lassen sich für die Verdampfungslinie Diskrepanzen erkennen, die auf die ungenauere Modellierung des Zustands der Flüssigkeitsphase durch die SRK-ZGL zurückgeführt werden können. Die Abweichungen können allerdings vernachlässigt werden, da in den verwendeten Erdgasmischungen der Ethangehalt sehr gering ist und der Phasenübergang von der gasförmigen Phase in das Zweiphasengebiet stattfindet, welches sich im ternären Diagramm zwischen der Kondensations- und der Verdampfungslinie befindet. Auch hier kann somit von einer guten Übereinstimmung und einer zuverlässigen Berechnungsmethode gesprochen werden.

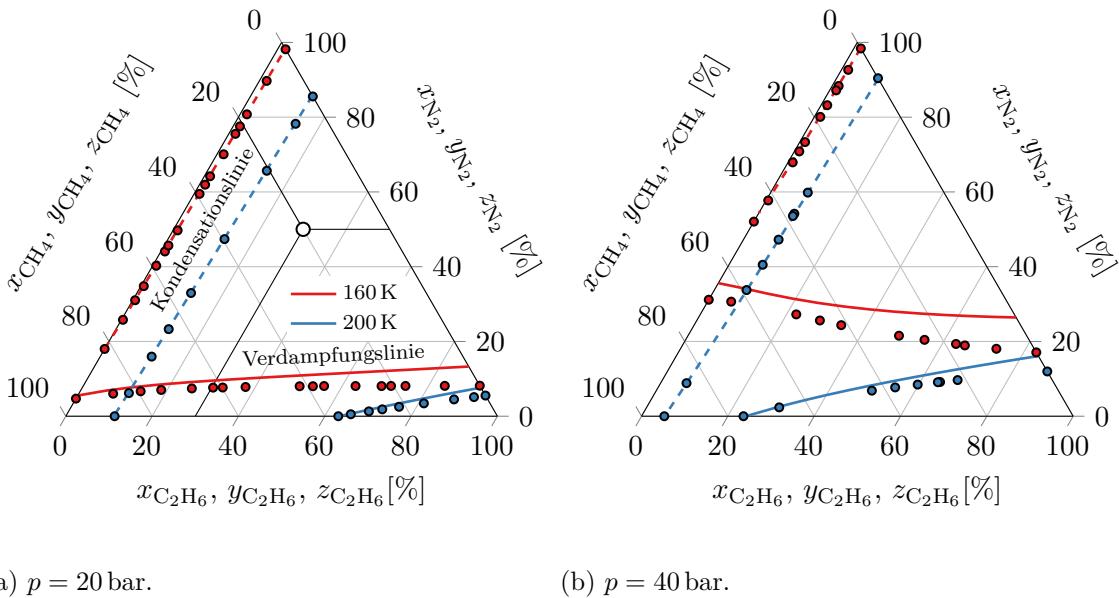
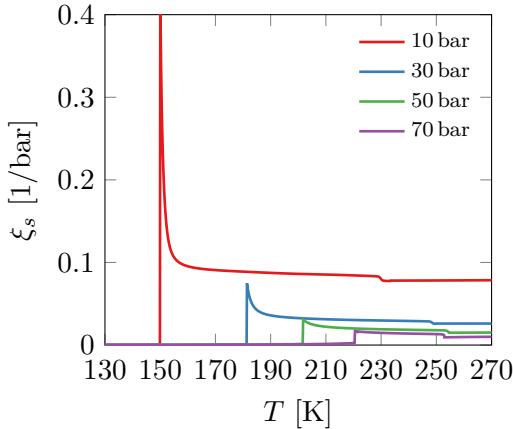


Abbildung 2.9.  $px$ -Diagramm für das ternäre Gemisch Methan-Ethan-Stickstoff.

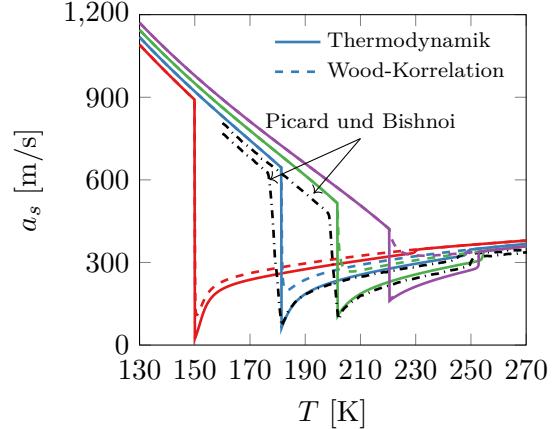
### Kompressibilität und Schallgeschwindigkeit

Für die Validierung der Berechnung der Kompressibilität und der Schallgeschwindigkeit wird die aus der Literatur bekannte Prudhoe Bay-Zusammensetzung [130] verwendet. Sie besteht aus den Einzelkomponenten Methan (83.3310 mol-%), Ethan (9.6155 mol-%), Propan (3.5998 mol-%), Iso-Butan (0.3417 mol-%), n-Butan (0.4585 mol-%), Iso-Pentan (0.0403 mol-%), n-Pentan (0.0342 mol-%), n-Hexan (0.0046 mol-%), n-Heptan (0.0003 mol-%), n-Oktan (0.0001 mol-%), Toluol (0.0002 mol-%), Stickstoff (1.4992 mol-%), Sauerstoff (0.0008 mol-%) und Kohlenstoffdioxid (1.0738 mol-%). Der Verlauf der isentropen Kompressibilität entlang konstanten Drucks (10, 30, 50 und 70 bar) in Abbildung 2.10a zeigt im Zweiphasengebiet mit abnehmender Temperatur ein monoton steigendes Verhalten. Je höher der Anteil der Flüssigkeitsphase ist, desto größer ist die Kompressibilität. Die Werte erreichen an der Siedelinie ihr Maximum. Bei voll ausgebildeter Flüssigkeitsphase ( $\beta_v = 0$ ) kommt es

zu einem sehr starken Abfall, da die Volumenänderung der Flüssigkeit bei Druckänderung sehr gering ist. Der Abfall der Kompressibilität fällt für niedrigere Drücke größer aus als für hohe Drücke. Für den Übergang von der Gasphase zum Zweiphasengebiet ist zudem eine Unstetigkeit zu verzeichnen, die auf den Phasenwechsel zurückzuführen ist.



(a) Isentrope Kompressibilität.



(b) Schallgeschwindigkeit.

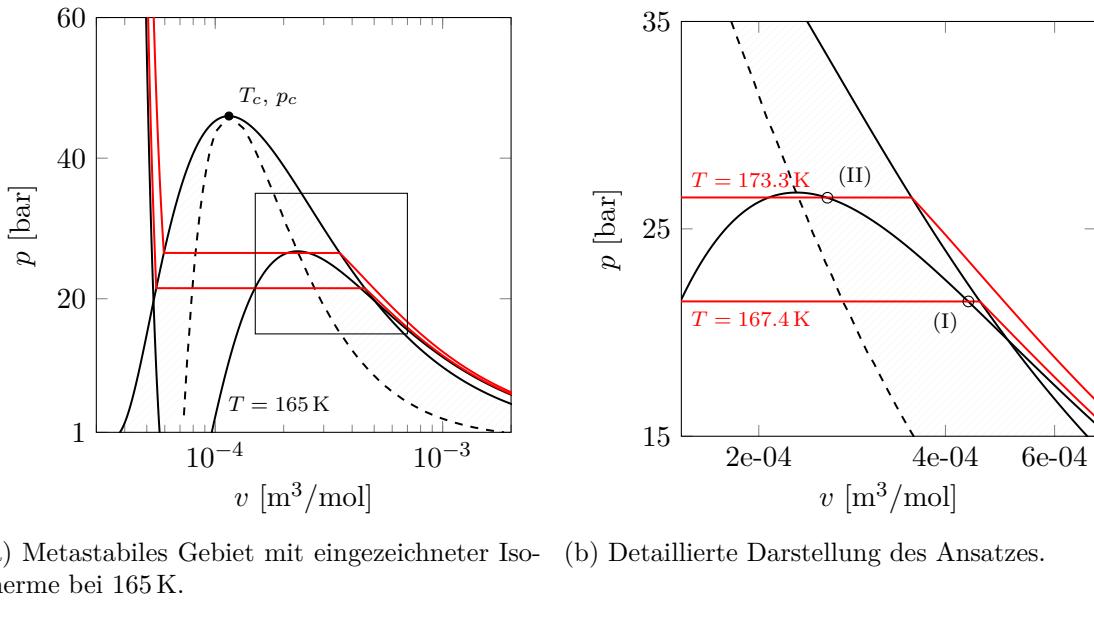
Abbildung 2.10. Validierung der Berechnung der Kompressibilität und der Schallgeschwindigkeit für die Prudhoe Bay-Zusammensetzung [130].

Die Schallgeschwindigkeit der Mischung ist in Abbildung 2.10b dargestellt. Dazu wurden die gleichen Kurven konstanten Drucks aus Abbildung 2.10a verwendet. Die Werte der Schallgeschwindigkeit für die konsistente Modellierung ergeben sich aus den Werten der Kompressibilität und der Dichte mit Gleichung 2.45. Zusätzlich zu den Verläufen, die mit der konsistenten Modellierung berechnet wurden, ist die Korrelation von Wood [176] eingezeichnet. Für den Phasenwechsel an der Kondensationslinie kommt es zu keinem abrupten Abfall der Werte und die Schallgeschwindigkeit im Zweiphasengebiet wird generell überschätzt. Dies ist insbesondere für sehr niedrige Druckwerte zu verzeichnen. Die Tendenz der Korrelation stimmt gut mit der Thermodynamik überein. Ein Vergleich mit den Ergebnissen von Picard und Bishnoi [130] für die zwei Isobaren  $p = 30 \text{ bar}$  und  $p = 50 \text{ bar}$  zeigt kleine Diskrepanzen im Bereich der Gas- und der Flüssigkeitsphase, die auf die Unterschiede in der ZGL zurückzuführen sind. Picard und Bishnoi [130] verwendeten für ihre Analyse die ZGL von Peng und Robinson [129].

#### 2.4.6 Einphasiger Ansatz

Sind Kondensationseffekte nicht von Interesse bzw. sollen metastabile Zustände zugelassen werden, kann der einphasige Ansatz zur Berechnung der Fluideigenschaften verwendet werden, siehe Abbildung 2.11a. Eingezeichnet ist in schwarz die Isotherme für Methan bei  $T = 165 \text{ K}$ . Aufgrund des kubischen Charakters der ZGL kommt es im Zweiphasengebiet zu einem lokalen Minimum und Maximum. Die beiden Extrema kennzeichnen, wie bereits erwähnt, den metastabilen Raum. Für das Überschreiten der Kondensationslinie wird die größte der drei möglichen Lösungen ermittelt und für die Strömungssimulation retourniert. Dadurch befindet man sich immer auf dem aufsteigenden, ins metastabile Gebiet laufenden Ast mit  $\partial p / \partial v|_T < 0$  und die richtige Lösung wird zurückgegeben. Nachteil dieser Methode

ist, dass die Enthalpie und somit die Temperatur mit dem einphasigen Ansatz zum Teil deutlich unterschätzt wird und sich dies auch auf andere Strömungsgrößen auswirkt. Dies soll Abbildung 2.11b illustrieren, in der der Verlauf der Isothermen mit 165 K im metastabilen Gebiet detailliert dargestellt wird (Rechteck aus Abbildung 2.11a). Ist der betrachtete Zustand (I) nahe an der Sättigungsdampflinie, ergibt sich mit dem zweiphasigen Ansatz eine Temperatur von 167.4 K, der Fehler ist somit noch relativ gering. Wandert der Zustand weiter in Richtung der Spinodalen, wird der Fehler maximiert. Für den eingezeichneten Zustand (II) ergibt sich dann eine Abweichung von  $\Delta T = 8.3$  K. Das Unterschätzen der mit dem einphasigen Ansatz berechneten Temperatur ist auf die während der Kondensation frei werdende Wärmemenge zurückzuführen und wurde bereits von Qiu und Reitz [134], Mattheis [106] und Traxinger *et al.* [161] aufgezeigt. Beim Überschreiten der Kondensationslinie wird die Unterschätzung der Temperatur Unterkühlung genannt, beim Überschreiten der Verdampfungslinie wird die Überschätzung der Temperatur Überhitzung genannt. Ein Überschreiten der Spinodale ist mit dem vorgestellten einphasigen Ansatz nicht möglich. Ein Vergleich der Ergebnisse beider Methoden, dem einphasigen Ansatz und der Berücksichtigung des Phasenzerfalls unter der Annahme eines Gas-Flüssigkeit-Gleichgewichts, wird im Ergebniskapitel in Abschnitt 5.4.3 gezeigt und diskutiert.



(a) Metastabiles Gebiet mit eingezeichneter Isotherme bei 165 K. (b) Detaillierte Darstellung des Ansatzes.

Abbildung 2.11.  $pv$ -Diagramm für Methan.

## 2.5 Turbulenzmodellierung

Die bei der Eindüsung entstehende Strömung zeichnet sich durch ein transientes und sehr chaotisches Verhalten aus, welches Turbulenz genannt wird. Diese Eigenschaft wird zwar von den Erhaltungsgleichungen abgebildet, eine direkte Lösung derer mittels einer DNS (Direkter Numerischer Simulation) ist jedoch sehr aufwendig und für den Anwendungsfalls in dieser Arbeit nicht umsetzbar. Abhilfe schaffen hier die Reynolds-gemittelten Navier-Stokes-Gleichungen (RANS für engl. *Reynolds-Averaged-Navier-Stokes*), in denen die tur-

bulenten Strukturen der Strömung nicht aufgelöst, sondern modelliert werden. Die Turbulenzmodelle enthalten zusätzliche Gleichungen, mit denen die durch die zeitliche Mittelung entstandenen unbekannten Terme geschlossen werden können. Im Gegensatz zu den RANS-Modellen ist die Grundidee bei den Grobstruktursimulationen (LES für engl. *Large Eddy Simulation*) eine Zerlegung des Strömungsfeldes in zwei Anteile. Die groben Strukturen nehmen den auflösaren Anteil ein und können direkt berechnet werden. Die Feinstruktur ist jedoch nicht auflösbar und muss modelliert werden. Bei den RANS-Gleichungen wird das komplette turbulente Spektrum modelliert, wobei die turbulenten Skalen bei der LES gefiltert werden und teilweise direkt berechnet, teilweise modelliert werden müssen. Für die Simulationen in dieser Arbeit kommt aufgrund des erheblichen Rechenaufwandes der thermodynamischen Modellierung und des geringen Zeitschritts nur die Turbulenzmodellierung durch den RANS-Ansatz in Frage.

Für die zeitliche Mittelung der in Abschnitt 2.1 vorgestellten Navier-Stokes-Gleichungen werden die Momentanwerte der Strömungsgrößen  $\varphi = \bar{\varphi} + \varphi'$  in Mittelwert  $\bar{\varphi}$  und Fluktuation  $\varphi'$  unterteilt. Die Reynolds-Mittelung entspricht dabei einer orthogonalen Projektion mit  $\bar{\varphi}' = 0$  und  $\bar{\varphi} = \bar{\varphi}$ . Setzt man die Summe aus Mittelwert und Fluktuation in die Navier-Stokes-Gleichungen ein und führt eine zeitliche Mittelung durch, ergeben sich die RANS-Gleichungen. Der durch die Mittelung entstandene und nicht zu vernachlässigende Term  $-\rho\bar{u}_i' u_j'$  wird Reynoldsspannungstensor genannt. Für die Reynoldsspannungen lässt sich eine exakte Transportgleichung herleiten, die als Reynoldsspannungstransportgleichung (RST) bekannt ist und allgemein als

$$\underbrace{K_{ij}}_{\text{Konvektion}} = \underbrace{P_{ij}}_{\text{Produktion}} + \underbrace{T_{ij} + D_{ij} + D_{p,ij}}_{\text{Diffusion}} + \underbrace{\Phi_{ij}}_{\text{Druck-Scher-Korrelation}} - \underbrace{\epsilon_{ij}}_{\text{Dissipation}} \quad (2.51)$$

geschrieben werden kann. Sie lässt sich in fünf verschiedene Komponenten unterteilen, den konvektiven Term  $K_{ij}$ , den Produktions-Term  $P_{ij}$ , den Diffusionsterm  $T_{ij} + D_{ij} + D_{p,ij}$ , den Term für die Druck-Scher-Korrelation  $\Phi_{ij}$  und der Dissipation  $\epsilon_{ij}$ . Viele der Terme in der RST enthalten jedoch weitere Unbekannte und müssen daher mittels semi-empirischen Schliessungsannahmen modelliert werden. Diese unterscheidet man in Wirbelviskositäts- und Reynoldsspannungsmodelle. In dieser Arbeit werden aufgrund ihrer Einfachheit im Vergleich zu den Reynoldsspannungsmodellen nur Wirbelviskositätsmodelle verwendet. Die Grundidee dieser Modelle ist eine angenommene Proportionalität der Reynoldsspannungen zur mittleren Scherrate:  $\overline{u_i' u_j'} = -2\nu_t S_{ij} + \frac{2}{3}\delta_{ij}k$ . Die turbulente kinetische Energie wird mit  $k = \frac{1}{2}\overline{u_i u_i}$  berechnet. Die neu eingeführte Wirbelviskosität  $\nu_t$  muss mittels Gleichungen modelliert werden. Die Anzahl der verwendeten Differentialgleichungen für die Modellierung der Wirbelviskosität gibt den Modelltyp an: Nullgleichungs-, Eingleichungs- oder Zweigleichungsmodell. Bekannte Vertreter des Zweigleichungsmodells sind das  $k\epsilon$ - und das  $k\omega$ -Modell, welche im Folgenden genauer diskutiert werden. Das in dieser Arbeit zur Anwendung kommende  $k\omega$ -Turbulenzmodell vereint die Vorteile beider Turbulenzmodelle durch die Einführung einer geeigneten Übergangsfunktion. Es wird im Anschluss an die beiden Grundmodelle diskutiert.

Das am wahrscheinlich weitesten verbreitete Turbulenzmodell ist das  **$k\epsilon$ -Turbulenzmodell** von Jones und Launder [83], welches die Turbulenzproduktion mit der Dissipation gleichsetzt. Für isotrope Turbulenz folgt somit eine lineare Beziehung für die Reynolds- und die Schubspannungen. Die Wirbelviskosität ist gegeben als  $\nu_t = C_\mu \frac{k^2}{\epsilon}$ . Für die Berechnung von  $\nu_t$  wird eine Differentialgleichung für die turbulente kinetische Energie  $k$  und eine

Differentialgleichung für die turbulente Dissipationsrate  $\epsilon$  benötigt und gelöst. Wird in der RST  $i = j$  gesetzt und die Definition der turbulenten kinetischen Energie angewandt, erhält man die Transportgleichung für die turbulente kinetische Energie, welche im  $k\epsilon$ -Modell mit

$$\underbrace{\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i k)}{\partial x_i}}_{\text{Konvektion}} = \underbrace{\rho \bar{u}'_i \bar{u}'_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j}}_{\text{Produktion}} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_i} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right]}_{\text{Diffusion}} - \underbrace{\rho \epsilon}_{\text{Dissipation}} \quad (2.52)$$

modelliert wird. Da die Dissipation Teil der Lösung ist, muss sie nicht modelliert werden. Die Druck-Scher-Korrelation entfällt. Die Transportgleichung für die turbulente Dissipation kann ebenfalls exakt hergeleitet werden. Die Modellierung der einzelnen Terme der exakten Transportgleichung ist allerdings sehr komplex, weshalb diese Vorgehensweise oft umgangen wird. Abhilfe schafft hier die Postulierung einer zu  $k$  ähnlichen Transportgleichung:

$$\underbrace{\frac{\partial(\rho \epsilon)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i \epsilon)}{\partial x_j}}_{\text{Konvektion}} = \underbrace{C_{\epsilon 1} \frac{\epsilon}{k} \rho \bar{u}'_i \bar{u}'_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j}}_{\text{Produktion}} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \right) \frac{\partial \epsilon}{\partial x_i} \right]}_{\text{Diffusion}} - \underbrace{C_{\epsilon 2} \rho \frac{\epsilon^2}{k}}_{\text{Dissipation}}. \quad (2.53)$$

Die Modellkoeffizienten in den beiden Differentialgleichungen ( $C_\mu = 0.09$ ,  $C_{\epsilon 1} = 1.44$ ,  $C_{\epsilon 2} = 1.92$ ) werden mit einfachen Referenzströmungen kalibriert. Um komplexe Strömungen physikalisch korrekt vorherzusagen, müssen die Konstanten oft abgeändert werden. Durch die stark vereinfachenden Annahmen ist der Anwendungsbereich des beschriebenen Modells eingeschränkt. Es eignet sich insbesondere für Strömungen im Fernfeld von Wänden, in denen keine großen Druckgradienten und/oder Ablösungen vorhanden sind. Durch das Gleichgewicht von Produktion und Dissipation und die linearen Beziehungen werden anisotrope Einflüsse, die beispielsweise in Grenzschichten auftreten, nicht erfasst. Die Einfachheit des Modells, es müssen lediglich zwei Gleichungen gelöst werden, spiegelt sich auch in dem vergleichsweise geringen numerischen Rechenaufwand wieder. Für wandferne Strömungen wird dem Modell eine hohe numerische Stabilität zugesprochen. Für wandnahe Strömungen sind Dämpfungsfunktionen für die  $\epsilon$ -Transportgleichung notwendig. Alternativ können auch Wandfunktionen verwendet werden.

Das von Wilcox [173] entwickelte  **$k\omega$ -Turbulenzmodell** findet ebenfalls häufig Verwendung und behebt einige Schwachpunkte des Modells von Jones und Launder. Es basiert auf Transportgleichungen für die turbulente kinetische Energie und für die spezifische turbulente Dissipationsrate  $\omega = \frac{1}{C_\mu k} \epsilon$ :

$$\underbrace{\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i k)}{\partial x_i}}_{\text{Konvektion}} = \underbrace{\rho \bar{u}'_i \bar{u}'_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j}}_{\text{Produktion}} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_j} \left[ (\mu + \sigma_{k1} \mu_t) \frac{\partial k}{\partial x_i} \right]}_{\text{Diffusion}} - \underbrace{\beta^* \rho k \omega}_{\text{Dissipation}}, \quad (2.54)$$

$$\underbrace{\frac{\partial(\rho \omega)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i \omega)}{\partial x_i}}_{\text{Konvektion}} = \underbrace{\frac{\gamma_1}{\nu_t} \rho \bar{u}'_i \bar{u}'_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j}}_{\text{Produktion}} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_j} \left[ (\mu + \sigma_{\omega 1} \mu_t) \frac{\partial \omega}{\partial x_i} \right]}_{\text{Diffusion}} - \underbrace{\beta_1 \rho \omega^2}_{\text{Dissipation}}. \quad (2.55)$$

Die Wirbelviskosität wird mittels  $\nu_t = k/\omega$  berechnet, die Modellkoeffizienten sind  $\sigma_{k1} = 0.5$ ,  $\sigma_{\omega 1} = 0.5$ ,  $\beta_1 = 0.075$ ,  $\beta^* = 0.09$ ,  $K = 0.41$  und  $\gamma_1 = \beta_1/\beta^* - \sigma_{\omega 1} K^2 / \sqrt{\beta^*}$ . Es eignet sich sehr gut für Grenzschichtströmungen und für Strömungen mit Druckgradienten und Ablösungen, Effekte die im  $k\epsilon$ -Modell schlecht aufgelöst werden. Für wandnahe Bereiche wird keine Dämpfungsfunktion benötigt, für die turbulente Wirbelfrequenz  $\omega$  kann

direkt eine Dirichlet-Randbedingung gesetzt werden. Das Modell reagiert sehr sensitiv auf Einström- und Freiströmrundbedingungen und ist daher für Aussenströmungen weniger geeignet. Des Weiteren wird die Turbulenz an Staupunkten unterschätzt.

Eine Kombination beider Modelle, dem  $k\epsilon$ -Modell von Jones und Launder und dem  $k\omega$ -Modell von Wilcox, stellt das  **$k\omega$ SST-Turbulenzmodell** von Menter und Esch [109] dar. Es liefert ähnliche Ergebnisse wie das von Wilcox verbesserte  $k\omega$ -Turbulenzmodell [174]. Um die beiden Modelle in Einklang zu bringen wird die Dissipation als  $\epsilon = \beta^* \omega k$  geschrieben und im Jones-Launder Modell eingesetzt:

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i k)}{\partial x_i} = \rho \overline{u'_i u'_j} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \beta^* \rho k \omega + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ (\mu + \sigma_{k2} \mu_t) \frac{\partial k}{\partial x_i} \right], \quad (2.56)$$

$$\frac{\partial(\rho \omega)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i \omega)}{\partial x_i} = \frac{\gamma_2}{\nu_t} \rho \overline{u'_i u'_j} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \beta_2 \rho \omega^2 + 2\rho \sigma_{\omega 2} \frac{1}{\omega} \frac{\partial k}{\partial x_j} \frac{\partial \omega}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ (\mu + \sigma_{\omega 2} \mu_t) \frac{\partial \omega}{\partial x_i} \right]. \quad (2.57)$$

Die zweite Transportgleichung basiert nun nicht mehr auf der Dissipation  $\epsilon$ , sondern auf der turbulenten Dissipationsrate  $\omega$ . Entsprechend der Gleichungsumformung müssen auch die Modellkoeffizienten umgeschrieben werden:  $\sigma_{k2} = 1/\sigma_k$ ,  $\sigma_{\omega 2} = 1/\sigma_\epsilon$ ,  $\beta_2 = \beta^*(C_{\epsilon 2} - 1)$ ,  $\gamma_2 = C_{\epsilon 1} - 1$  und  $\beta^* = C_\mu$ . Das Umschalten der Gleichungen in der Modellierung erfolgt über die Funktion  $F_1$ , welche in wandnahen Bereichen den Wert 1 annimmt und das  $k\omega$ -Modell aktiviert. Für die wandfernen Regionen wird das transformierte Modell aktiviert. Dazu werden die Differentialgleichungen des Wilcox-Modells mit  $F_1$  multipliziert, die des modifizierten Jones-Launder Modells mit  $(1 - F_1)$ . Die Addition der jeweiligen Gleichungen führt zu:

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i k)}{\partial x_i} = \rho \overline{u'_i u'_j} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \beta^* \rho k \omega + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ (\mu + \sigma_{k,SST} \mu_t) \frac{\partial k}{\partial x_i} \right], \quad (2.58)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho \omega)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i \omega)}{\partial x_i} &= \frac{\gamma_{SST}}{\nu_t} \rho \overline{u'_i u'_j} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \beta_{SST} \rho \omega^2 \\ &\quad + 2\rho(1 - F_1) \sigma_{\omega 2} \frac{1}{\omega} \frac{\partial k}{\partial x_j} \frac{\partial \omega}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ (\mu + \sigma_{\omega,SST} \mu_t) \frac{\partial \omega}{\partial x_i} \right]. \end{aligned} \quad (2.59)$$

Die Modellkoeffizienten in den beiden Gleichungen werden dabei linear gemischt:  $\Phi_{SST} = F_1 \Phi_1 + (1 - F_1) \Phi_2$ .  $\Phi_1$  entspricht dabei einem Koeffizienten im originalen Modell,  $\Phi_2$  einem Koeffizienten im modifizierten Modell,  $\Phi_{SST}$  dem Koeffizienten im neuen Modell. Die Modellkonstanten des Wilcox-Modells bleiben gleich, die für das Jones-Launder Modell lauten nun  $\sigma_{k2} = 1.0$ ,  $\sigma_{\omega 2} = 0.856$ ,  $\beta_2 = 0.0828$ ,  $\beta^* = 0.09$  und  $\gamma = 0.44$ . Die Misch-Funktion  $F_1$  ist definiert als:

$$F_1 = \tanh \left\{ \left\{ \min \left[ \max \left( \frac{\sqrt{k}}{\beta^* \omega y}, \frac{500\nu}{y^2 \omega} \right), \frac{4\rho \sigma_{\omega 2} k}{CD_{k\omega} y^2} \right] \right\}^4 \right\} \quad (2.60)$$

mit

$$CD_{k\omega} = \max \left( 2\rho \sigma_{\omega 2} \frac{1}{\omega} \frac{\partial k}{\partial x_i} \frac{\partial \omega}{\partial x_i}, 10^{-10} \right). \quad (2.61)$$

Ein weiterer, von Menter nicht beachteter Effekt auf die Turbulenz in trans- und supersonischen Strömungen hat die **Kompressibilität**. Experimente haben gezeigt, dass

die Scherschicht in kompressiblen Strömungen langsamer anwächst als bei inkompressiblen Strömungen. Für die Ansätze von Zeman [182] und Sarkar und Lakshmanan [144] wird dazu ein Dilatationsterm der Dissipationsrate in der turbulenten kinetischen Energie eingeführt, welcher diese reduziert. Durch die Reduzierung der turbulenten kinetischen Energie sinkt das Wachstum der Scherschicht. Der Dilatationsterm wird für die inkompressible Formulierung der Turbulenzmodelle nicht beachtet. Für diese Arbeit wurde das Modell von Sarkar und Lakshmanan [144] ausgewählt, in dem die turbulente Machzahl mit  $\text{Ma}_t = \sqrt{2k}/a_s$  als korrelierender Parameter dient. Um die Kompressibilitätskorrektur in die Transportgleichungen einzupflegen, wird der gleiche Ansatz wie von Menter und Esch angewandt. Die Modellgleichungen für das  $k\omega$ -Turbulenzmodell von Wilcox werden übernommen. Die Gleichung für  $k$  des  $k\epsilon$ -Turbulenzmodells beinhaltet bereits zusätzliche Terme für die Kompressibilitätskorrektur:

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i k)}{\partial x_i} = \rho \overline{u'_i u'_j} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] - \underbrace{\rho (\epsilon + \epsilon_c) + \overline{p'' d''}}_{\text{Korrektur}} \quad (2.62)$$

Der zur Dissipationsrate addierte, kompressible Teil der Dissipation ist definiert als  $\epsilon_c = \alpha_1 \text{Ma}_t^2 \epsilon$ . Der zweite hinzukommende Term wird als Druckdilatation bezeichnet und mittels einer DNS isotroper Turbulenz als

$$\overline{p'' d''} = -\alpha_2 P_k \text{Ma}_t^2 + \alpha_3 \rho \epsilon \text{Ma}_t^2 \quad (2.63)$$

definiert. Die Koeffizienten lauten  $\alpha_1 = 1$ ,  $\alpha_2 = 0.4$  und  $\alpha_3 = 0.2$ . Die Dissipationsrate wird wiederum als  $\epsilon = \beta^* \omega k$  geschrieben und in die Gleichungen eingesetzt. Die Multiplikation der originalen  $k\omega$ -Gleichungen mit  $F_1$  und der modifizierten Gleichungen mit  $(1 - F_1)$  sowie Addition resultiert in den finalen Modellgleichungen für die Kompressibilitätskorrektur des  $k\omega$ -Turbulenzmodells:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i k)}{\partial x_i} &= \rho \overline{u'_i u'_j} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \beta^* \rho k \omega [1 + \alpha_1 \text{Ma}_t^2 (1 - F_1)] \\ &\quad + (1 - F_1) \overline{p'' d''} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ (\mu + \sigma_{k,SST} \mu_t) \frac{\partial k}{\partial x_i} \right], \end{aligned} \quad (2.64)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho \omega)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i \omega)}{\partial x_i} &= \frac{\gamma_{SST}}{\nu_t} \rho \overline{u'_i u'_j} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \beta_{SST} \rho \omega^2 - (1 - F_1) \frac{\overline{p'' d''}}{\nu_t} \\ &\quad + (1 - F_1) \beta^* \alpha_1 \text{Ma}_t^2 \rho \omega^2 + 2\rho (1 - F_1) \sigma_{\omega 2} \frac{1}{\omega} \frac{\partial k}{\partial x_j} \frac{\partial \omega}{\partial x_i} \\ &\quad + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ (\mu + \sigma_{\omega,SST} \mu_t) \frac{\partial \omega}{\partial x_i} \right]. \end{aligned} \quad (2.65)$$

Sowohl die Übergangsfunktion  $F_1$ , als auch die Modellkoeffizienten sind identisch zum Menter-Modell.

## 2.6 Unterexpandierte Gasfreistrahlen

Freistrahlen treten immer dann auf, wenn der Totaldruck vor der Düse  $p_0$  größer ist als der umgebende statische Druck. Ist das Druckverhältnis  $\Pi = p_0/p_{ch}$  oder auch  $\text{NPR} = p_0/p_{ch}$  ( $\text{NPR}$  für engl. *nozzle pressure ratio*) größer als das kritische Druckverhältnis  $\Pi^* = p_0/p^*$ ,

so spricht man von expandierten/unterexpandierten Freistrahlen bei überkritischen Druckverhältnissen. Die in dieser Arbeit betrachteten Druckverhältnisse führen zu moderat unterexpandierten und stark unterexpandierten Freistrahlen. Im Folgenden werden die gesperrte Düse, die Struktur des Freistrahls, die transiente Eindringtiefe sowie die Konzentrationsverteilung genauer betrachtet.

### 2.6.1 Gesperrte Düse

Die gesperrte Düse ist durch den Zustand definiert, bei dem ein weiteres Absenken des Gegendrucks in keiner Erhöhung des Massenstroms resultiert und der maximal mögliche Massenstrom erreicht ist. Dies ist damit zu erklären, dass die Geschwindigkeit im engsten Querschnitt der Schallgeschwindigkeit gleicht und sich eine Machzahl von eins einstellt. Durch Erreichen der Schallgeschwindigkeit ist eine Informationsausbreitung stromauf nicht mehr möglich und die Zustände links und rechts des engsten Querschnitts sind isoliert zu betrachten. Die Zustandsgrößen, für die die Düse mit einer Machzahl von eins durchströmt wird, werden als kritische Größen bezeichnet und mit dem oberen Index \* markiert. Die Bezeichnung *kritischer Punkt* bezieht sich bei der Düsenströmung auf den strömungsmechanisch kritischen Punkt.

### 2.6.2 Freistahlstruktur

Die Struktur des Freistrahls lässt sich grob in drei Regionen aufteilen: Nahfeld, Transitionszone und Fernfeld. Das schematische Strömungsfeld in Düsennähe ist in Abbildung 2.12 zu sehen. Moderat unterexpandierte und stark unterexpandierte Freistrahlen weisen diamantförmige Strukturen auf, die im Nahfeld der Düse von kompressiblen Effekten dominiert werden. Bereits kurz nach Erreichen des bei instationärem Aufbau der Strömung maximalen Massenstroms kann sie als stationäre Strömung betrachtet werden. Im engsten Querschnitt/Am Düsenaustritt (1) wird bei einem ausreichend großen Druckverhältnis eine Machzahl von 1 erreicht. In Folge dessen führt eine Prandtl-Mayer-Expansion (2) zur Beschleunigung des Fluids, die bis zum Rand des Freistrahls anhält. Erreicht der Expansionfächer die Isolinien konstanten Drucks (3), werden sie als Kompressionswellen reflektiert. Der Druck der Stromlinien in Punkt (3) entspricht dabei dem umgebenden statischen Druck. Die Wechselwirkung der Kompressionswellen mit der Hauptströmung führt zu einem schrägen Stoß (4), welcher auf der Symmetriearchse des Freistrahls zusammenläuft und als schräger Stoß wieder reflektiert wird (5) und nach außen wandert. Trifft dieser auf die äußeren Stromlinien bildet sich ein neuer Expansionfächer und ein weiterer Diamant entsteht. Für ein höheres Druckverhältnis verläuft der Stoß in Punkt (4) parallel zur Achse, er kann somit nicht mehr an dieser in Punkt (5) reflektiert werden. Es bildet sich ein gerader Stoß, die sogenannte Machscheibe, und die Strömung direkt nach dem Stoß ist subsonisch.

Im beschriebenen Nahfeld des Freistrahls erfolgt keine Durchmischung mit dem umgebenden Fluid. Die Transitionszone knüpft an das Nahfeld an und erstreckt sich in axialer Richtung bis zur sonischen Linie, einer Isokontur mit  $Ma = 1$ . In dieser führen Turbulenzeffekte zu einer ersten Vermischung des Injektanten mit dem Kammerfluid. Sich wenig ändernde Strömungseigenschaften in der Transitionszone begünstigen die Gemischbildung. Im Fernfeld der Düse ist das Strömungsfeld entwickelt und der Freistahl selbstähnlich. Geschwindigkeits- und Temperaturverläufe entlang der Symmetriearchse sind inversproportional zum Düsenabstand und das radiale Geschwindigkeits- und Temperaturprofil des Freistrahls kann mit Gauss-Kurven approximiert werden.

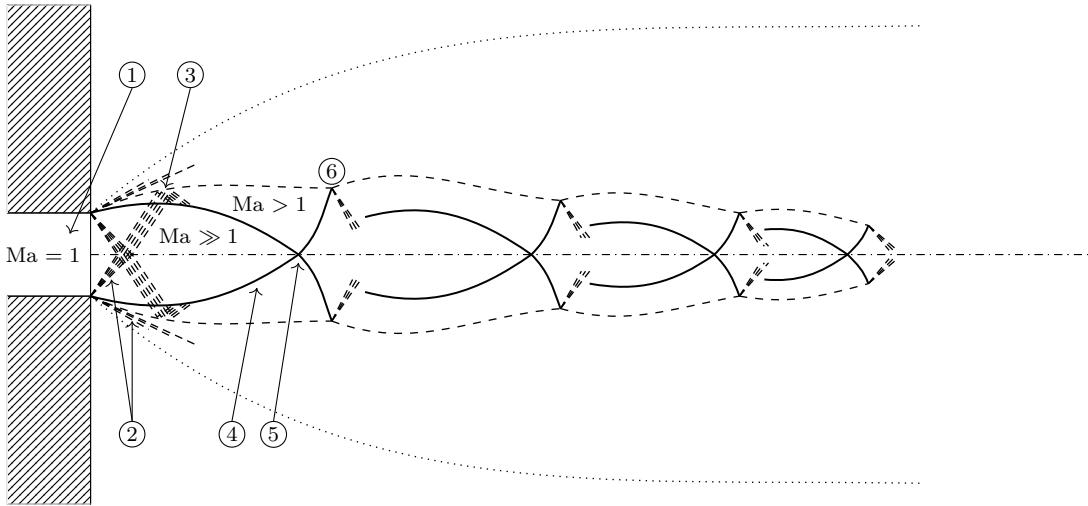


Abbildung 2.12. Schematische Darstellung eines moderat unterexpandierten Freistrahls.

### 2.6.3 Eigenschaften

Eigenschaften des Freistrahls und der Gemischbildung, die insbesondere im Hinblick auf den Anwendungsfall sehr wichtig werden, sind die transiente Eindringtiefe  $Z_t$ , das volumetrische Wachstum  $V_j$  sowie die Konzentrationsverteilung in axialer und radialer Richtung. Im Folgenden werden diese Charakteristiken kurz beschrieben und mit Korrelationen aus der Literatur belegt.

#### Transiente Eindringtiefe

Die transiente Eindringtiefe des Freistrahls  $Z_t$  beschreibt das zeitliche Fortschreiten des Brennstoffs in axialer Richtung. Als Grundlage für die Arbeit von **Abraham** [1] gelten die Gleichungen zur Berechnung der stationären Strahlgeschwindigkeit auf der Symmetriechse von Schlichting [145]. Die Spitze des Freistrahls wird als Punkt festgelegt, wo die axiale Geschwindigkeit  $C_f = 0.7$  der stationären Geschwindigkeit  $u_c$  auf der Symmetriechse beträgt. Für den transienten Eindringtiefenverlauf folgt:

$$Z_t = \sqrt{\frac{3C_f d_e u_c}{8\pi^{1/2} C_t}} \sqrt{t}. \quad (2.66)$$

Für den *equivalenten Durchmesser*  $d_e$  wird das Modell von Thring und Newby [158] verwendet:  $d_e = d\sqrt{\rho_n/\rho_{ch}}$ .  $C_t$  bezeichnet eine die Diffusivität des Freistrahls mit dem kinetischen Impuls verbindende Konstante und wird zu 0.0161 gesetzt,  $d$  ist der Düsendurchmesser,  $\rho_n$  gibt die Dichte am Düsenaustritt und  $\rho_{ch}$  die Dichte des umgebenden Fluids an.

Das Modell zur Berechnung der transientes Eindringtiefen von **Hill und Ouellette** [72] basiert auf einer Dimensionsanalyse:

$$Z_t = \Gamma \left( \frac{\dot{M}_n}{\rho_{ch}} \right)^{1/4} \sqrt{t}. \quad (2.67)$$

Die Konstante  $\Gamma$  wird mit dem Modell von Turner [164], in welchem der Freistrahls in einen stationären Bereich und einen fortschreitenden sphärischen Wirbel aufgeteilt werden kann,

siehe Abbildung 2.13, berechnet. Der stationäre Bereich erstreckt sich dabei vom Ende des Potenzialkerns bis zum Beginn des Wirbels. Die Impulserhaltung setzt sich aus zwei Termen zusammen, dem stationären Anteil  $M_s$  und dem Anteil des Wirbels  $M_w$ :

$$\dot{M}_n t = M_s + M_w. \quad (2.68)$$

Der instationäre Anteil  $M_w$  setzt sich mit der mittleren Geschwindigkeit des Wirbels  $u_m = \frac{\partial}{\partial t}(Z_t - D/2)$  zu  $M_w = \rho\pi/6D^3u_m$  zusammen. Der stationäre Anteil  $M_s$  kann mit dem Integral

$$M_s = \int_0^{Z_t-D} \int_0^\infty 2\pi r dr \rho U dx \quad (2.69)$$

dargestellt werden, die Impulserhaltung von Gleichung 2.68 wird geschrieben als:

$$\dot{M}_n t = \rho \frac{\pi}{6} \left( \frac{D}{Z_t} \right)^3 \frac{\partial Z_t}{\partial t} \left( 1 - \frac{1}{2} \frac{D}{Z_t} \right) + \int_0^{Z_t-D} \dot{m} dx. \quad (2.70)$$

Der Massenstrom der eingesaugten Umgebungsluft wird mit dem Modell von Ricou und Spalding [139] approximiert. Mit der Annahme, dass das Verhältnis des Durchmessers des Wirbels  $D$  zur Eindringtiefe  $Z_t$  konstant ist, und der Dimensionsanalyse von Gleichung 2.67 erhält man als Wert für die Konstante  $\Gamma = 3 \pm 0.1$ , welcher vom Verhältnis  $D/Z_t$  abhängig ist.

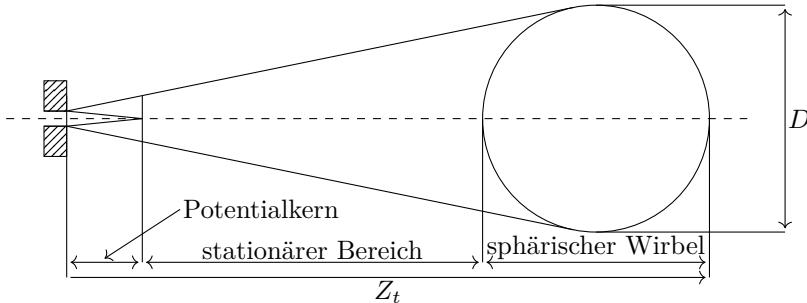


Abbildung 2.13. Repräsentation eines transienten turbulenten Freistrahls nach Turner [164].

**Gerold und Pfitzner** [56] führten weitere Messungen von unterexpandierten Gasfreistrahlen durch und entwickelten eine Modifikation des Modells von Hill *et al.*, die auf ihren experimentellen Daten, aber auch auf den zur Verfügung stehenden Literaturdaten basiert. Um eine bessere Übereinstimmung zu erzielen, wurde der Exponent der Dichte, die im Impulsfluss enthalten ist, angepasst. Für einen Wertebereich des Exponenten zwischen  $1/2$  und  $1/6$  zeigten sich für einen Wert von  $1/3$  die besten Ergebnisse. Die resultierende Gleichung lautet

$$Z_t = \Gamma \frac{\left( \dot{M}_n C_d \right)^{1/4} \rho_n^{1/12}}{\rho_{ch}^{1/3}} \sqrt{t}. \quad (2.71)$$

### Volumetrisches Wachstum

Da das volumetrische Wachstum in experimentellen Untersuchungen nicht bzw. nur sehr schwer bestimmbar ist, gibt es hierzu keine Vergleichsdaten. In der numerischen Arbeit

von **Vuorinen et al.** [171] wird das vom Freistrahrl umfassende Volumen mit einem Konus verglichen und postuliert, dass dieses proportional zur Eindringtiefe (als Konushöhe) sein muss:  $V_j \propto Z_t^3$ . Da die Eindringtiefe mit der Wurzel der Zeit  $\sqrt{t}$  skaliert ergibt sich die Korrelation für das volumetrische Wachstum des Freistrahls zu:

$$V_j = \Gamma \left( \frac{\rho_0}{\rho_{ch}} \right)^{3/4} t^{3/2}. \quad (2.72)$$

Für den Skalierungsfaktor  $\Gamma$  wird kein Wert genannt. Die Arbeit von **Hamzehloo und Aleiferis** [67] baut auf der Gleichung von Vuorinen *et al.* auf. Der Skalierungsfaktor  $\Gamma$  wird mit einem zweiten Skalierungsfaktor  $\beta$  dividiert, wobei dieser für Wasserstoff gleich 1.35 und für Methan gleich 3 gesetzt wird.  $\beta$  soll dabei die Vergleichbarkeit des volumetrischen Wachstums zwischen unterschiedlichen Spezies ermöglichen, da sich die sonischen Strömungseigenschaften und die Diffusion zweier verschiedener Komponenten stark von einander unterscheiden können.

### Konzentrationsverteilung

Die Konzentrationsverteilung auf der Symmetriearchse kann für stationäre impulsdominierte Mischung nach **Chen und Rodi** [29] mit

$$w_{cl} = A \left( \frac{\rho_n}{\rho_{ch}} \right)^{0.5} \left( \frac{d}{x} \right) \quad (2.73)$$

beschrieben werden.  $A$  bezeichnet eine skalierende Konstante,  $\rho_n$  die Dichte am Düsenaustritt und  $\rho_{ch}$  die Dichte des umgebenden Fluids. Von **Molkov** [115] wurde gezeigt, dass die ursprünglich für expandierte Strömungen gefundene Korrelation mit einem Wert von 5.4 für die Konstante  $A$  auch für unterexpandierte Freistrahlen gilt. **Birch et al.** [19] führt eine axiale Verschiebung des Düsenursprungs mit einer Skalierung  $x_d$  ein:

$$w_{cl} = A \left( \frac{\rho_n}{\rho_{ch}} \right)^{0.5} \left( \frac{d}{x - x_d} \right). \quad (2.74)$$

Die bessere Übereinstimmung des Konzentrationsprofils durch den virtuellen Düsenursprung wird von **Wu et al.** [180] bestätigt, der seinerseits eine Konzentrationsverteilung in radialer Richtung vorschlägt:

$$\frac{z}{z_{cl}} = \exp \left( -\frac{r^2}{k^2} \right). \quad (2.75)$$

Da die molare Konzentrationsverteilung mit dem maximalen Wert  $z_{cl}$  auf der Symmetriearchse normiert wird, ist sie für alle axialen Position im Freistrahrl gültig.  $k$  bezeichnet wiederum einen skalierenden Faktor, der auf die Topologie des Strömungsproblems angepasst werden muss.

## Kapitel 3

# Strömungslöser

In diesem Kapitel wird der für die Strömungssimulation verwendete Löser hergeleitet, beschrieben und validiert. Die Funktionsweise des Strömungslösers kann dem Abschnitt 3.1 entnommen werden, die implementierte Netzbewegung ist in 3.2 und die ausführliche Validierung des CFD-Verfahrens in 3.3 zu finden. Alle Gleichungen werden dabei mittels der Finiten-Volumen-Methode (FVM) diskretisiert und gelöst. Zur Lösung des Gleichungssystems wird das quelloffene Softwarepaket OpenFOAM<sup>1</sup> in der Version 4.1 verwendet, in das auch die Realgas- und Mehrphasenthermodynamik implementiert wurde.

### 3.1 Methodik und Herleitung

Bei der in dieser Arbeit behandelten Hochdruckeindüfung handelt es sich um einen kompressiblen Prozess bei überkritischen Druckverhältnissen, wodurch sich bei der numerischen Approximation der Strömung besondere Herausforderungen ergeben. Zum einen sind die Strömungsgrößen wie bspw. Dichte, Druck und Geschwindigkeit stark gekoppelt, und zum anderen müssen die durch das hohe Druckverhältnis hervorgerufenen und auftretenden Stöße sowie Diskontinuitäten physikalisch korrekt und exakt wiedergegeben werden. Für die Lösung der in Kapitel 2 vorgestellten Gleichungen gibt es zwei unterschiedliche Ansätze, die sich in dichtebasierter und druckbasierter Verfahren einteilen lassen. Während die dichtebasierten Verfahren historisch bedingt für kompressible Strömungen mit großen Machzahlen ( $Ma > 0.3$ ) entwickelt wurden, kamen die druckbasierten Methoden für inkompressible Strömungen mit niedrigen Geschwindigkeiten zum Einsatz. Über die letzten Jahrzehnte wurden aber beide Verfahren weiterentwickelt, sodass heutzutage eine strikte Trennung bezüglich der Anwendung nicht mehr erfolgt. Bei einem dichtebasierter Strömungslöser wird die Dichte über die Kontinuitätsgleichung bestimmt und der Druck wird mit der Zustandsgleichung aus der Dichte zurückgerechnet. Durch die simultane Lösung der Gleichungen wird ein sehr gutes Konvergenzverhalten erzielt. Für niedrige Geschwindigkeiten muss allerdings ein aufwendiges Prädiktionsverfahren angewandt werden, da die geringen Geschwindigkeiten und die Dichteänderungen in der Strömung klein sind. Dadurch wird die Dichte-Druck-Kopplung sehr schwach, die Steifigkeit des Gleichungssystems nimmt zu und der Konvergenzprozess verlangsamt sich [172]. Das Prädiktionsverfahren umfasst zusammen mit einem schlechten Stabilitätsverhalten die wesentlichen Nachteile des Lösen. In einem druckbasierten Verfahren erfolgt die Lösung der Gleichungen entkoppelt. Die Kontinuitätsgleichung dient als Limitierung für das Geschwindigkeitsfeld und wird in Kombination mit der Impulsgleichung zu einer Gleichung für den Druck umgeschrieben. Die Entkopplung der Gleichungen führt zwar zu einer Beeinträchtigung des Konvergenzverhaltens des Strömungslösers, die Stabilität des Verfahrens für niedrige Machzahlen wird aber positiv beeinflusst.

In dieser Arbeit soll ein druckbasiertes Verfahren angewandt werden, da dieses in der Lage ist, die Strömung für alle auftretenden Geschwindigkeitsbereiche zu approximieren, ohne dass künstliche Viskositätsterme oder andere stabilitiesfördernde Maßnahmen verwendet

---

<sup>1</sup><https://openfoam.org/>

werden müssen. Dies wird durch den von der Strömungsgeschwindigkeit abhängigen Einfluss des Drucks in kompressiblen Strömungen deutlich. Für geringe Machzahlen ist der Druckgradient in der Impulsgleichung sehr klein. Die Dichte wird somit nicht maßgeblich vom Druck beeinflusst und die Strömung kann als inkompressibel angesehen werden. Entsprechend ist die Kopplung zwischen Druck und Dichte und Dichte und Geschwindigkeit relativ gering. Die Kontinuitätsgleichung dient nicht mehr als Gleichung für die Dichte sondern limitiert vielmehr das Geschwindigkeitsfeld. Bei hohen Strömungsgeschwindigkeiten sind die Geschwindigkeitsänderungen im Vergleich zur absoluten Strömungsgeschwindigkeit relativ gering, wodurch sich Druckänderungen deutlicher auf die Dichte auswirken. Der Druck bzw. die Druckänderungen beeinflussen die Dichte über die ZGL, während die Kontinuitätsgleichung als Gleichung für die Dichte dient.

Da es bei Verfahren höherer Ordnung zu unphysikalischen, durch Diskontinuitäten hervorgerufenen Überschwingern der transportierten Feldgrößen kommen kann, müssen diese besonders diskretisiert werden. Eine Möglichkeit, die Vorteile beider druckbasierten Ansätze zu vereinen, stellt die **hybride Methode** von Kraposhin *et al.* [92] dar. Sie basiert auf dem druckbasierten PISO-Verfahren von Issa [74] und kombiniert dieses mit dem zentralen räumlichen Diskretisierungsverfahren von Kurganov und Tadmor [96]. Der Strömungslöser wurde im Rahmen dieser Arbeit in einer Kooperation der beiden Forschungsstellen, des Instituts für Thermodynamik der UniBwM und des Instituts für Systemprogrammierung der Russischen Akademie der Wissenschaften in Moskau, durch eine konsistente Implementierung der Realgasthermodynamik weiterentwickelt, siehe Kraposhin *et al.* [93]. Die adaptierte Version wurde wiederum der Allgemeinheit zugängig gemacht<sup>2</sup>, wobei die implementierte Realgasthermodynamik auf die Noble-Able ZGL von Johnston [82] reduziert wurde. Im Folgenden werden die beiden Ansätze, das PISO-Verfahren und das Kurganov-Tadmor-Verfahren, sowie deren Kombination im Detail erläutert.

Bei dem **PISO**-Verfahren handelt es sich um eine Weiterentwicklung des SIMPLE-Verfahrens (engl. für *Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations*) von Patankar und Spalding [126], ein Schema zum Lösen instationärer Strömungsvorgänge. Dazu wird die Kontinuitätsgleichung in die diskretisierte Impulserhaltungsgleichung eingesetzt und gelöst. In einem Korrekturschritt wird das Geschwindigkeitsfeld und die Dichte mit dem berechneten Druck so lange verbessert, bis die Massenerhaltung erfüllt und alle Felder konvergiert sind. Das PISO-Verfahren enthält eine zusätzliche Korrekturschleife, die zu einem effizienteren Lösen des Iterationsprozesses führt.

Für die folgende Erläuterung des implementierten Verfahrens des hybriden Strömungslösers wird die Konvektions-Diffusions-Gleichung einer gedachten, intensiven Größe  $\beta$  eingeführt:

$$\frac{\partial(\rho\beta)}{\partial t} + \frac{\partial(u_i\rho\beta)}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i}\left(D_\beta \frac{\partial\beta}{\partial x_i}\right) = S_\beta. \quad (3.1)$$

$D_\beta$  bezeichnet den Diffusionskoeffizienten,  $S_\beta$  den Quellterm. Der Zeitableitungsterm wird in dieser Arbeit mit einer Mischfunktion des impliziten Euler- und des semiimpliziten Crank-Nicolson-Verfahrens [39] mit einer Gewichtung von 0.5 diskretisiert, die durch die Anwendung beider Verfahren zur Stabilität und Genauigkeit des Lösungsverfahrens beiträgt.

$$\frac{\partial(\rho\beta)}{\partial t} \approx 0.5 \frac{\rho^{n+1}\beta^{n+1} - \rho^n\beta^n}{t^{n+1} - t^n} + 0.5 \frac{\rho^{n+1}\beta^{n+1} - \rho^{n-1}\beta^{n-1}}{t^{n+1} - t^{n-1}}. \quad (3.2)$$

---

<sup>2</sup><https://github.com/unicfdlab>

Für die weitere Herleitung der diskretisierten Impulsgleichung wird aber das einfache, implizite Euler-Verfahren verwendet. Für den Diffusions- und den Konvektionsterm ergeben sich unter Verwendung des Gauss-Theorem die Approximationen

$$\int_V \frac{\partial}{\partial x_i} \left( D_\beta \frac{\partial \beta}{\partial x_i} \right) dV = \int_{\partial V} D_\beta \frac{\partial \beta}{\partial x_i} dS \approx \sum_f \left( D_\beta \frac{\partial \beta}{\partial x_i} \right)_f S_f. \quad (3.3)$$

und

$$\int_V \frac{\partial (u_i \rho \beta)}{\partial x_i} dV = \int_{\partial V} (u_i \rho \beta) n dS \approx \sum_f (u_i S_f) (\rho \beta)_f. \quad (3.4)$$

$S_f$  bezeichnet die Zellflächen des diskretisierten Volumens. Der Index  $f$  gibt die jeweiligen, auf die Zellflächen projizierten, Größen an. Der Quellterm aus Gleichung 3.1 wird mit dem Mittelpunktsintegral  $\int_V S_\beta dV \approx VS_\beta$  gelöst.

Der Ansatz von **Kurganov und Tadmor** (KT) [96] verfolgt die Grundidee aller Finiten-Volumen-Methoden zur Lösung nicht-linearer Erhaltungsgleichungen, indem das Rechengebiet in Bereiche mit abschnittsweise konstanten Anfangsbedingungen zerlegt wird. Um dies zu erreichen, wird an den Zellflächen die Lösung des Riemann-Problems der zugrunde liegenden Gleichungen berechnet. Da die exakte Berechnung des Riemann-Problems einen erheblichen Rechenaufwand darstellt, siehe Godunov [57], und nicht für alle physikalischen Probleme bekannt ist, wurde versucht, das Verfahren mittels approximativen Riemann-Lösern zu vereinfachen, siehe Roe [140] oder Harten *et al.* [3]. Die ersten zentralen Verfahren von Lax [100] und Friedrichs [54], die keine approximativen Riemann-Löser benötigen, besitzen eine hohe künstliche Viskosität. Diese verhindert, dass Unstetigkeiten scharf aufgelöst werden können. Im Vergleich zum MUSCL-Verfahren von van Leer [167], bei dem zum ersten Mal die Anfangsdaten mit stückweise linearen Funktionen rekonstruiert wurden, zeichnet sich das KT-Verfahren durch seine Einfachheit und seinen semi-diskreten Charakter aus. Es eignet sich somit sehr gut als zentrales Verfahren mit sehr geringer numerischer Viskosität in Verbindung mit dem PISO-Verfahren. Zur Erläuterung des Verfahrens wird das Kontrollvolumen der Einfachheit halber in einer Dimension betrachtet, siehe Abbildung 3.1. Eine Erweiterung in zwei zusätzliche Raumrichtungen stellt kein Problem dar [97]. Dargestellt sind drei Zellen  $i-1$ ,  $i$  und  $i+1$  mit den Zellmittelpunkten  $x_{i-1}$ ,  $x_i$  und  $x_{i+1}$  und den entsprechenden Erhaltungsgrößen  $\mathbf{u}_{i-1}$ ,  $\mathbf{u}_i$  und  $\mathbf{u}_{i+1}$ . Die rot markierten Rechtecke sind Teilgebiete, die aus den jeweiligen Nachbarzellen zusammengesetzt werden und welche die nicht-stetigen Anfangsbedingungen darstellen. Die blau markierten Rechtecke, die stetigen Anfangsbedingungen, ergeben sich aus dem Rest der übrig bleibt, wenn die roten Teilgebiete von der gesamten Zelle subtrahiert werden. Um die Größe des roten Teilgebietes zu ermitteln werden die Maxima und Minima der lokalen Ausbreitungs geschwindigkeiten an den Zellrändern mit

$$a_{s,i \pm \frac{1}{2}}^+ = \max_{\mathbf{u} \in \mathcal{C} \left( \mathbf{u}_{i \pm \frac{1}{2}}^+, \mathbf{u}_{i \pm \frac{1}{2}}^- \right)} \left( \lambda_{max} \left( \frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{u})}{\partial \mathbf{u}} \right), 0 \right) \quad \text{und} \quad (3.5)$$

$$a_{s,i \pm \frac{1}{2}}^- = \min_{\mathbf{u} \in \mathcal{C} \left( \mathbf{u}_{i \pm \frac{1}{2}}^+, \mathbf{u}_{i \pm \frac{1}{2}}^- \right)} \left( \lambda_{min} \left( \frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{u})}{\partial \mathbf{u}} \right), 0 \right) \quad (3.6)$$

bestimmt.  $\lambda_{min}$  und  $\lambda_{max}$  bezeichnen dabei die maximalen Eigenwerte der Jacobimatrizen, wenn  $\mathbf{u}$  entlang der Phasenraumkurve  $\mathcal{C}$  variiert wird. Die Phasenraumkurve verbindet

die links- und rechtsseitigen Zellrandwerte  $\mathbf{u}_{i\pm\frac{1}{2}}^+$  bzw.  $\mathbf{u}_{i\pm\frac{1}{2}}^-$  bei  $x_{i\pm 1/2}$ . Mit  $\mathbf{f}(\mathbf{u})$  werden die Flüsse der Erhaltungsgrößen bezeichnet. Für den Anwendungsfall können die lokalen Ausbreitungsgeschwindigkeiten mit

$$a_{s,i\pm\frac{1}{2}}^+ = \max \left( \lambda_{\max} \left( \frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{u}_{i\pm\frac{1}{2}}^-)}{\partial \mathbf{u}} \right), \lambda_{\max} \left( \frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{u}_{i\pm\frac{1}{2}}^+)}{\partial \mathbf{u}} \right) \right) \quad \text{und} \quad (3.7)$$

$$a_{s,i\pm\frac{1}{2}}^- = \min \left( \lambda_{\min} \left( \frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{u}_{i\pm\frac{1}{2}}^-)}{\partial \mathbf{u}} \right), \lambda_{\min} \left( \frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{u}_{i\pm\frac{1}{2}}^+)}{\partial \mathbf{u}} \right) \right) \quad (3.8)$$

vereinfacht werden,  $\lambda_{\min}$  und  $\lambda_{\max}$  werden somit nur noch an den Zellrandwerten berechnet und nicht mehr entlang der Phasenraumkurve. Die im eindimensionale Fall benötigte Breite zur Gebietsunterteilung (vgl. blaue/rote Bereiche in Abbildung 3.1) ergibt sich nun aus dem Zeitschritt  $\Delta t$  und den zuvor bestimmten Ausbreitungsgeschwindigkeiten:

$$x_{i\pm\frac{1}{2},l} = x_{i\pm\frac{1}{2}} + a_{s,i\pm\frac{1}{2}}^- \Delta t \quad \text{und} \quad x_{i\pm\frac{1}{2},r} = x_{i\pm\frac{1}{2}} + a_{s,i\pm\frac{1}{2}}^+ \Delta t. \quad (3.9)$$

Die Erhaltungsgrößen werden über das gesamte Zellvolumen rekonstruiert, die Teilgebiete werden gemittelt [96] und nochmals rekonstruiert. Eine abschließende Mittelung über das gesamte Zellvolumen führt zu den neuen Zellmittelpunktwerten  $\mathbf{u}_i^{n+1}$  zum Zeitpunkt  $n+1$ . Die einzelnen Zwischenschritte mit den entsprechenden Gleichungen können der Arbeit von Kurganov und Tadmor [96] entnommen werden.

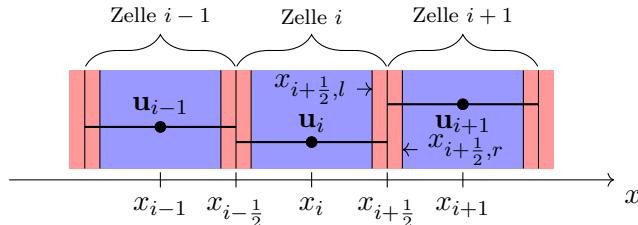


Abbildung 3.1. Eindimensionale Darstellung der Gebietsunterteilung für das KT-Verfahren.

Die Anwendung des KT-Verfahrens in der Strömungssimulation gestaltet sich schwieriger. Bei der Methode wird ein zweites, versetztes Rechengitter erzeugt, welches der Mittelung und Rekonstruktion der unstetigen Anfangsbedingungen dient. Ein solches Vorgehen ist für die dreidimensionale Strömungssimulation mit komplexen Geometrien nicht zielführend, da die Qualität des Rechengitters nicht für jeden Zeitschritt gewährleistet werden kann. Um den Charakter des KT-Verfahrens zu erhalten, wird der konvektive Term in Gleichung 3.1 mit den lokalen Ausbreitungsrichtungen und -geschwindigkeiten stabilisiert, siehe Greenshields *et al.* [62]. Dazu wird die Flussberechnung über die Flächen einer Zelle in zwei Richtungen aufgeteilt:

$$\frac{\partial (u_i \rho \beta)}{\partial x_i} \approx \frac{1}{V} \sum_f \phi_f^P \beta_f + \frac{1}{V} \sum_f \phi_f^N \beta_f. \quad (3.10)$$

Die beiden Richtungen  $P$  und  $N$  sind in Abbildung 3.2 dargestellt und entsprechen den Nachbarzellen der Zellfläche.  $\beta_f$  wird von der Zellmitte auf die Zellflächen interpoliert. Die Massenflüsse  $\phi_f^P$  und  $\phi_f^N$  ergeben sich zu

$$\phi_f^P = (\alpha_f w_f^P - \bar{a}_{S,f}) \rho_f^P \quad \text{und} \quad \phi_f^N = ((1 - \alpha_f) w_f^N + \bar{a}_{S,f}) \rho_f^N. \quad (3.11)$$

Die Gewichtung erfolgt mit dem Faktor  $\alpha_f$  und den mit der charakteristischen Ausbreitungsgeschwindigkeit berechneten Volumenflüssen  $a_f^P$  und  $a_f^m$  über die Gewichtungsfunktion  $\bar{a}_{S,f} = f(a_f^P, a_f^m)$ :

$$a_f^P = \max \left( \max \left( w_f^P + a_{s,f}^P |\vec{S}_f|, w_f^N + a_{s,f}^N |\vec{S}_f| \right), 0 \right), \quad (3.12)$$

$$a_f^m = \min \left( \min \left( w_f^P - a_{s,f}^P |\vec{S}_f|, w_f^N - a_{s,f}^N |\vec{S}_f| \right), 0 \right). \quad (3.13)$$

Für den Gewichtungsfaktor  $\alpha_f$  gibt es zwei unterschiedliche Ansätze. Im KT-Verfahren [96] wird dieser konstant gleich 0.5 gesetzt, im Kurganov-Noelle-Petrova-Verfahren (KNP) [95] ist  $\alpha_f = a_f^P / (a_f^P - a_f^m)$ . Während die Gewichtung im KT-Verfahren zu gleichen Teilen erfolgt und somit von einem zentralen Verfahren gesprochen werden kann, basiert die Gewichtung für das KNP-Verfahren auf einseitig charakteristischen Geschwindigkeiten und das Verfahren wird als einseitig zentral deklariert. Die Gewichtungsfunktion  $\bar{a}_{S,f}$  ist ebenso abhängig von der Wahl des Verfahrens:

$$\bar{a}_{S,f} = \begin{cases} -\frac{1}{2} \max(|a_f^P|, |a_f^m|) & \text{für KT} \\ \alpha_f a_f^m & \text{für KNP.} \end{cases} \quad (3.14)$$

In dieser Arbeit wird für alle Simulationen die zentrale Formulierung von KT verwendet. Die von den Nachbarzellen auf die Zellflächen projizierten Volumenflüsse werden mit  $w_f^P = u^P \vec{S}_f$  und  $w_f^N = u^N \vec{S}_f$  bezeichnet, die auf die Zellflächen projizierten Schallgeschwindigkeiten sind mit  $a_{s,f}^P$  und  $a_{s,f}^N$  gegeben.

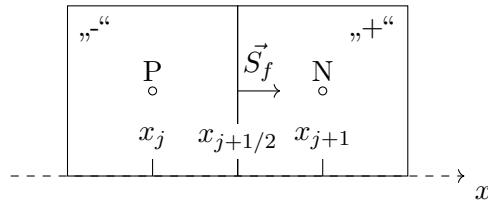


Abbildung 3.2. Zelle (P) und Nachbarzelle (N) mit den negativen und positiven Richtungen zur Aufteilung des Flussberechnung.

Für die Approximation der konvektiven Flüsse im **hybriden Ansatz** werden die Massenflüsse  $\phi_f^P$  und  $\phi_f^N$  in Gleichung 3.10 mit  $\Phi_f^P$  und  $\Phi_f^N$  ersetzt:

$$\frac{\partial (u_i \rho \beta)}{\partial x_i} \approx \frac{1}{V} \sum_f \Phi_f^P \beta_f + \frac{1}{V} \sum_f \Phi_f^N \beta_f. \quad (3.15)$$

In der Formulierung ist darauf zu achten, dass einer der beiden Flüsse für niedrige Geschwindigkeiten gleich null, der zweite der Summe der beiden Flüsse entspricht. Für hohe

Machzahlen werden die Flüsse gleich gewichtet. Um dieses Verhalten zu erreichen, werden die Massenflüsse des hybriden Verfahrens über eine Mischfunktion  $\kappa_f$  mit den Flüssen des KT-Verfahrens verknüpft:

$$\Phi_f^P = \phi_f^P + (1 - \kappa_f)\phi_f^N, \quad \Phi_f^N = \kappa_f\phi_f^N. \quad (3.16)$$

Nimmt die Funktion  $\kappa_f$  den Wert eins an, so entspricht die Berechnung des konvektiven Flusses der Berechnung des KT-Verfahrens. Für Werte die gegen null streben, entspricht die Formulierung der PISO/PIMPLE-Methode. Mit diesen Überlegungen wird die Berechnung der  $\kappa_f$ -Werte als eine zur lokalen Machzahl  $Ma_f$  proportionale und zur akustischen CFL-Zahl  $ACo_f$  inversproportionale Funktion definiert:

$$\kappa_f = \min \left( \frac{Ma_f}{ACo_f}, 1 \right). \quad (3.17)$$

$Ma_f$  wird über den Betrag der lokalen Geschwindigkeit  $u$  und über die Schallgeschwindigkeit an der Zellfläche  $a_{s,f}$  definiert,  $ACo_f$  wird entsprechend mit der Schallgeschwindigkeit gebildet:  $ACo_f = a_{s,f}\Delta t/\Delta x$ .

Mit den neu formulierten konvektiven Termen kann die diskretisierte Impulsgleichung als

$$\Delta V \frac{\rho^{n+1} u^{n+1} - \rho^n u^n}{\Delta t} + \sum_f \Phi_f^P u^{n+1} + \sum_f \Phi_f^N u^{n+1} - \sum_f \sigma_f^{n+1} S_f = -\nabla p \quad (3.18)$$

geschrieben werden. Alle Diagonalelemente der semi-diskreten Impulsgleichung werden nun in der Koeffizientenmatrix  $A_p$  zusammengefasst, der Gradient des Drucks auf der rechten Seite bleibt intakt. Die nicht-diagonalen Elemente ergeben zusammen mit den expliziten Quelltermen den Quellterm  $H_p$ . Die Geschwindigkeit lässt sich folglich als

$$u^{n+1} = \frac{H_p}{A_p} - \frac{\nabla p}{A_p} \quad (3.19)$$

schreiben. Mit der Geschwindigkeit aus Gleichung 3.19 und den konvektiven Massenflüssen aus den Gleichungen 3.16 ergibt sich die diskretisierte Druckgleichung aus der diskretisierten Kontinuitätsgleichung für das hybride Verfahren zu:

$$\begin{aligned} \Delta V \frac{\rho^{n+1} - \rho^n}{\Delta t} + \sum_f & \left( \alpha_f \left( \rho \frac{H_p}{A_p} - \frac{\rho}{A_p} \nabla p \right)_f^P \cdot \frac{\vec{S}_f}{\rho_f^P} - \bar{a}_{S,f} \right) \rho_f^P \\ & + \sum_f \left( (1 - \alpha_f) \left( \rho \frac{H_p}{A_p} - \frac{\rho}{A_p} \nabla p \right)_f^N \cdot \frac{\vec{S}_f}{\rho_f^N} + \bar{a}_{S,f} \right) \rho_f^N = 0. \end{aligned} \quad (3.20)$$

Als Letztes muss nun noch die allgemeine Beziehung der Dichte eingesetzt werden, da diese für die Realgasthermodynamik nicht mehr direkt proportional zum Druck ist:

$$\hat{\rho}(p,T) = \rho(p,T) - \psi_h(p,T)p(\rho,T). \quad (3.21)$$

Ein ähnlicher Ansatz wird von Jarczyk und Pfitzner [76] gewählt, die die Dichte mit einer Taylorreihe approximieren:

$$\rho = \rho_0 + \frac{\partial \rho}{\partial p} \Big|_0 (p - p_0) = \rho_0 + \psi_{h,0}(p - p_0). \quad (3.22)$$

Da die Druckkorrekturgleichung bei konstanter Enthalpie gelöst wird, müssen die thermodynamischen Ableitungen in der Druckgleichung bei isenthalpen Bedingungen berechnet werden. Einsetzen der Gleichung 3.21 in 3.20 liefert schließlich die zu lösende, diskretisierte Druckgleichung mit konvektiven und diffusiven Termen:

$$\begin{aligned} & \Delta V \frac{(\hat{\rho}^{n+1} - \hat{\rho}^n)}{\Delta t} + \Delta V \frac{(\psi_h^{n+1} p^{n+1} - \psi_h^n p^n)}{\Delta t} \\ & + \sum_f \left( \alpha_f \left( \rho \frac{H_p}{A_p} \right)_f^P \frac{\vec{S}_f}{\rho_f^P} - \bar{a}_{S,f} \right) \hat{\rho}_f^P + \sum_f \left( \alpha_f \left( \rho \frac{H_p}{A_p} \right)_f^P \frac{\vec{S}_f}{\rho_f^P} - \bar{a}_{S,f} \right) (\psi_h p)_f^P \\ & + \sum_f \left( (1 - \alpha_f) \left( \rho \frac{H_p}{A_p} \right)_f^N \frac{\vec{S}_f}{\rho_f^N} + \bar{a}_{S,f} \right) \hat{\rho}_f^N + \sum_f \left( (1 - \alpha_f) \left( \rho \frac{H_p}{A_p} \right)_f^N \frac{\vec{S}_f}{\rho_f^N} + \bar{a}_{S,f} \right) (\psi_h p)_f^N \\ & - \sum_f \left( \alpha_f \left( \frac{\rho}{A_p} \nabla p \right)_f^P \vec{S}_f \right) - \sum_f \left( (1 - \alpha_f) \left( \frac{\rho}{A_p} \nabla p \right)_f^N \vec{S}_f \right) = 0. \end{aligned} \quad (3.23)$$

Über die Diffusionsterme werden die Änderungen der Geschwindigkeit mit dem Druckgradienten in Beziehung gesetzt. Eine Besonderheit in Gleichung 3.23 sind alle Terme mit  $(\rho H_p A_p^{-1})_f \vec{S}_f / \rho_f$ , die im Gegensatz zu der imkompressiblen Formulierung eine Korrektur der Dichte darstellen [116]. In Anhang B wird die Lösung der hybriden Druckgleichung 3.23 anhand eines Zeitschritts eines initialisierten Stoßes analysiert. Des Weiteren werden die Unterschiede gegenüber der  $\kappa = 0$ -Formulierung ohne Aufteilung der Flüsse und mit einer linearen Interpolation auf die Zellflächen aufgezeigt.

Die Lösung der Gleichung 3.23 liefert das Druckfeld, welches konsistent mit der Kontinuitätsgleichung und der gewählten ZGL ist. Das Geschwindigkeitsfeld wird aus der diskretisierten Impulsgleichung 3.19 gewonnen. Der komplette Lösungsalgorithmus ist in Abbildung 3.3 dargestellt. Nach der Initialisierung (1) wird zu Beginn des Zeitschritts die Impulserhaltungsgleichung mit dem Druck und der Dichte aus dem vorherigen Zeitschritt gelöst (2). Mit der berechneten Geschwindigkeit wird die Spezies- (3) und die Energiegleichung in Enthalpieformulierung (4) gelöst. Mit den neu bestimmten Feldern erfolgt die Thermodynamikberechnung (5), die basierend auf den Stabilitätsanalysen und den Phasengleichgewichtsberechnungen (Abschnitt 2.4) den einphasigen oder zweiphasigen Strömungszustand retourniert. Nach der Lösung der Druckgleichung (6) wird die Mischfunktion für das hybride Verfahren aktualisiert (7) und die mechanischen Felder (8) werden berechnet. Im Anschluss wird das Geschwindigkeits- und das Druckfeld korrigiert (9). Ist die Druckkorrektur zu Ende (10) werden die turbulenten Größen ermittelt (11) und der nächste Zeitschritt beginnt.

Für das von KT vorgestellte Verfahren und für die Implementierung der Methodik in den Strömungslöser bedarf es vieler Rekonstruktionen und Interpolationen auf Flächen. Dabei muss darauf geachtet werden, dass unerwünschte Oszillationen unterdrückt werden. Nur so kann ein Verfahren zweiter Ordnung erreicht und die hohen künstlichen Viskositäten bei Verfahren erster Ordnung vermieden werden. Da lineare Rekonstruktionen in der Nähe von Unstetigkeiten immer zu lokalen Maxima und Minima führen [57], bedarf es sogenannter Limitierungen. Zur besseren Vorstellung dient Abbildung 3.4, die eine eindimensionale Stufenfunktion und somit eine Unstetigkeit zeigt. Die upwind-Steigung ergibt sich bei einer Bewegung der Unstetigkeit von links nach rechts zu  $\Delta_i = (u_i - u_{i-1}) / (x_i - x_{i-1})$ . Mit der

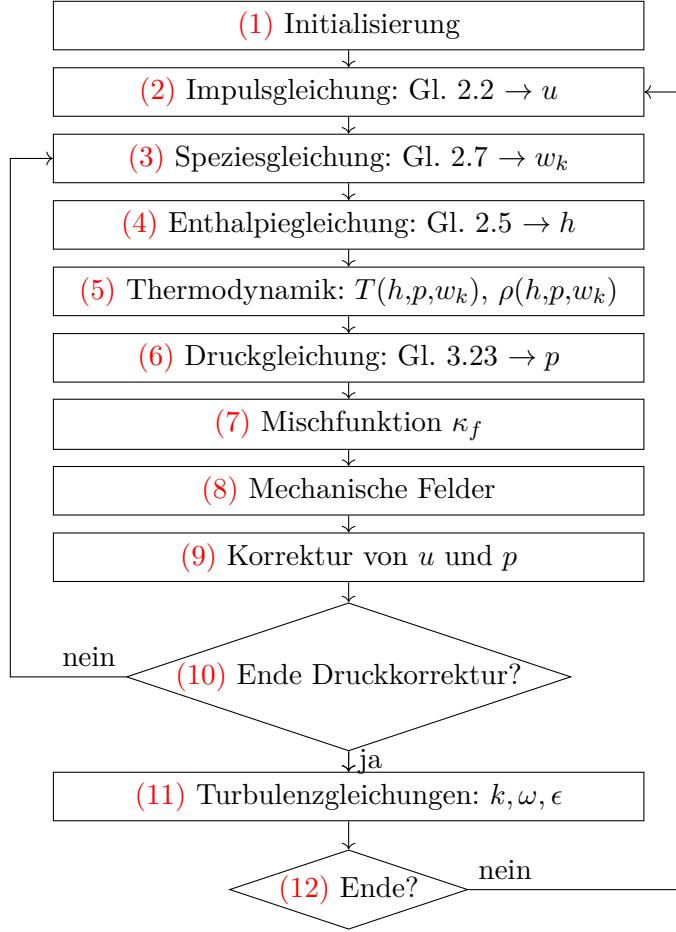


Abbildung 3.3. Lösungsalgorithmus realMixtureHybridFoam.

linearen Rekonstruktion  $\tilde{u}_i(x) = u_i + \Delta_i(x - x_i)$  führt dies zu einem Zellrandwert von

$$\tilde{u}_{i+\frac{1}{2}} = u_i + \Delta_i \left( x_{i+\frac{1}{2}} - x_i \right) = \frac{3}{2}u_i - \frac{1}{2}u_{i-1}. \quad (3.24)$$

Dieser Wert ist für unser Beispiel jedoch kleiner als  $u_i$  und ein ungewünschtes, lokales Minimum entsteht. Die gleichzeitig von van Leer [101] und Boris und Book [24] entwickelten Limitierungen werden als TVD (engl. für *Total Variation Diminishing*) bezeichnet und unterdrücken die ungewollten Oszillationen in den numerischen Lösungen. Dazu wird die Totale Variation der diskreten Lösung zu den Zeitpunkten  $n$  und  $n+1$  berechnet und es gilt  $TV(u^{n+1}) \leq TV(u^n)$ , wobei die Totale Variation mit  $TV(u^n) = \sum_{i=-\infty}^{\infty} |u_{i+1}^n - u_i^n|$  gegeben ist. Die TVD-Verfahren sind monotonieerhaltend, es können somit keine neuen lokalen Minima und Maxima entstehen und der Wert eines Minimums/Maximums wird nicht kleiner/größer. Greenshields *et al.* [62] empfiehlt in seiner Veröffentlichung die Verwendung der van Leer-Limitierung. Für den Anwendungsfall in dieser Arbeit zeigten sich allerdings unphysikalische Oszillationen im Nachlauf der Expansions- und Kompressionsstrukturen, die auf die Limitierung zurückzuführen waren. Ein Vergleich verschiedener Limitierungen führte zu dem Modell von van Albada [165], da es sich gleichermaßen durch Stabilität und Genauigkeit auszeichnete. Darüber hinaus wurden alle Simulationen mit einer maximalen CFL-Zahl von 0.5 durchgeführt. Eine weitere Verringerung der CFL-Zahl führt zu besser

aufgelösten Diskontinuitäten und Gradienten. Aufgrund der Erhöhung der Rechenzeit wird darauf verzichtet.

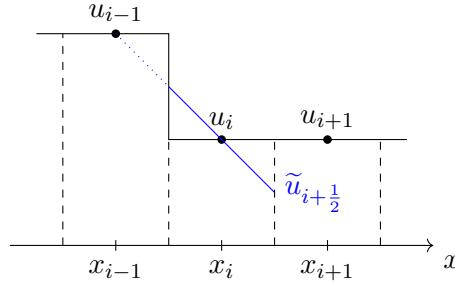


Abbildung 3.4. Lineare Rekonstruktion einer eindimensionalen Stufenfunktion.

## 3.2 Netzbewegung

Bedingt durch die Bewegung der Gasnadel und die Öffnung des Injektors ist eine Netzbewegung erforderlich. Diese kann prinzipiell auf zwei verschiedene Arten erfolgen. Bei der ersten Methode werden die einzelnen Zellen verzerrt. Wird eine Bewegung ausgeführt, die das Volumen vergrößert, werden die Zellen gestreckt. Im Falle einer Volumenverkleinerung werden die einzelnen Zellquader gestaucht. Die Bewegung des Berechnungsnetzes wird dabei über die Lösung einer Bewegungsgleichung berechnet, deren Matrixeinträge die Koordinaten der einzelnen Zelleckpunkte darstellen. Als Randbedingung wird die Bewegung der jeweiligen Geometrie vorgegeben. Diese Netzbewegung ist bereits in OpenFOAM implementiert. Der bedeutendste Vorteil dieser Methodik ist die Einfachheit bzgl. der Skalierbarkeit der Berechnungsgitter, da die Simulationen weiterhin auf zahlreichen Prozessoren parallelisiert durchgeführt werden können. Nachteil dieser Methode ist die sich verändernde Netzqualität. Durch die Bewegung der Gitterpunkte können Zellen in Regionen gestaucht oder verzerrt werden, wo eine hohe Netzqualität benötigt wird um die komplexe Strömung korrekt abzubilden. Daher wird bei einer zu schlechten Netzqualität das Berechnungsgitter neu erzeugt und die Lösung des bewegten Netzes wird auf die neue Rechendomain interpoliert. Durch die Interpolation können die Übertragungsfehler signifikant gegenüber einer einfachen Kopie der Strömungsgrößen basierend auf der Zellkoordinate verringert werden. Bei der zweiten Methode handelt es sich um eine Topologieänderung, siehe Abbildung 3.5. Dabei wird wie zuvor die Geometrie bewegt, überschreitet/unterschreitet eine Zellschicht aber ein gewisses Limit wird diese gelöscht beziehungsweise es wird eine neue Zellschicht eingefügt. Bei dieser Methodik besticht die gleichbleibend hohe Netzqualität. Probleme bereitet die Zerlegung der Domain für die Parallelisierung, da, abhängig von der Geometrie, die Bewegungsrichtung des Netzes in einer Domain erhalten bleiben muss. Auch diese Methodik ist bereits in OpenFOAM implementiert. Hier musste die Implementierung aber so angepasst werden, dass auch komplexe Geometrien, wie beispielsweise die Injektorwand, bewegt werden können.

In einem Vergleichsfall konnten keine signifikanten Unterschiede bezüglich der Strömungsstruktur im Nadelsitz ausgemacht werden. Da die Rechenzeit für den zweiten Ansatz durch das Hinzufügen neuer Zellschichten geringer größer sehr viel länger ist als für den ersten Ansatz, wird ausschließlich der Ansatz mit Streckung der Zellen weiter betrachtet.

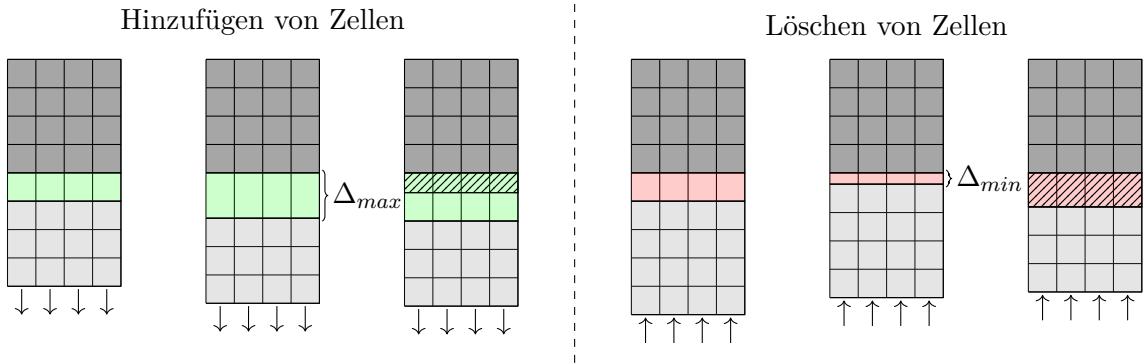


Abbildung 3.5. Veranschaulichung der Netzbewegung mittels Topologieänderung. Im linken Teil der Abbildung wird eine Zellschicht hinzugefügt, grün schraffiert dargestellt, da eine gewisse Dicke  $\Delta_{max}$  überschritten wurde. Der rechte Teil zeigt das Entfernen der Zellschicht aufgrund des Unterschreitens des Limits  $\Delta_{min}$ .

Die diskretisierte Kontinuitätsgleichung für ein bewegtes Volumen  $V$  lautet:

$$\frac{V^n \rho^n - V^{n-1} \rho^{n-1}}{\Delta t} + \sum_f \rho_f^n u_{f,R}^n \vec{S}_f = 0. \quad (3.25)$$

Die relative Geschwindigkeit an den Zellflächen wird mit  $u_{f,R}^n = u_{f,F}^n - u_{f,S}^n$  bezeichnet, wobei  $u_{f,F}^n$  die Geschwindigkeit des Fluids und  $u_{f,S}^n$  die Geschwindigkeit der Oberfläche beschreibt. Der Massenfluss ergibt sich zu  $\phi_{f,R}^n = \rho_f^n (u_{f,F}^n - u_{f,S}^n) \vec{S}_f$ . In der hybriden Methode erfolgt eine getrennte Betrachtung der Flüsse an den Zellflächen bezüglich der bereits bekannten Richtungen  $P$  und  $N$ . Diese Zerlegung muss auch für die Flüsse, die aufgrund der Netzbewegung entstehen, umgesetzt werden. Die Gewichtung erfolgt identisch zu den Gleichungen 3.11:

$$\phi_{f,R}^n = (\alpha_f (u_{f,F}^P - u_{f,S}^n) \vec{S}_f - \alpha_f a_f^m \vec{S}_f) \rho_f^P + ((1 - \alpha_f) (u_{f,F}^N - u_{f,S}^n) + \alpha_f a_f^m \vec{S}_f) \rho_f^N.$$

Weitere Informationen über die Implementierung der Netzbewegung in OpenFOAM können der Arbeit von Tukovic [163] entnommen werden.

### 3.3 Validierung

Die Validierung des oben beschriebenen Strömungslösers erfolgte anhand mehrerer Testfälle, deren Ergebnis sich entweder analytisch berechnen lässt oder für die experimentell ermittelte Daten zur Verfügung stehen. In dieser Arbeit werden drei Validierungsfälle im Detail betrachtet: Die Durchströmung einer konvergent-divergenten Düse (3.3.1), ein unterexpandierter Wasserstofffreistrahler bei einem Druckverhältnis von  $\Pi = 10$  (3.3.2) und das eindimensionale, kartesische Riemann-Problem, auch als Stoßrohr bekannt (3.3.3). Weitere Validierungstestfälle lassen sich in der Veröffentlichung des Strömungslösers finden [92, 93]. Die Netzbewegung wurde mit Vergleichsdaten der OpenFOAM-Standardlöser durchgeführt, auf eine Darstellung wird verzichtet.

### 3.3.1 Konvergent-divergente Düse

Der erste Testfall betrachtet die stationäre Strömung in einer konvergent-divergenten Düse. Die Geometrie der Düse wurde der Arbeit von Liou [103] entnommen. Der engste Querschnitt  $A^* = 2/5 \cdot A_{x/L=0} = 2/3 \cdot A_{x/L=1}$  befindet sich in der Mitte der Düse an der normierten Position  $x/L = 0.5$ . Unter konstanten Plenumsbedingungen mit  $p_0 = 1$  bar und  $T_0 = 298$  K wurden drei Gegendrücke am Auslass aufgeprägt,  $p_{\infty,I} = 0.89$  bar,  $p_{\infty,II} = 0.75$  bar und  $p_{\infty,III} = 0.16$  bar. Die verschiedenen Gegendrücke sorgen dafür, dass die Durchströmung der Düse auf unterschiedliche Arten erfolgt, subsonisch im Unterschall (I), mit Verdichtungsstoß im divergenten Teil der Düse (II) und supersonisch im Überschall am Auslass (III). Die Düse wird reibungsfrei mit Luft (ideales Gas mit  $M_w = 28.97$  g/mol) durchströmt und mit 1000 Zellen in axialer Richtung eindimensional diskretisiert.

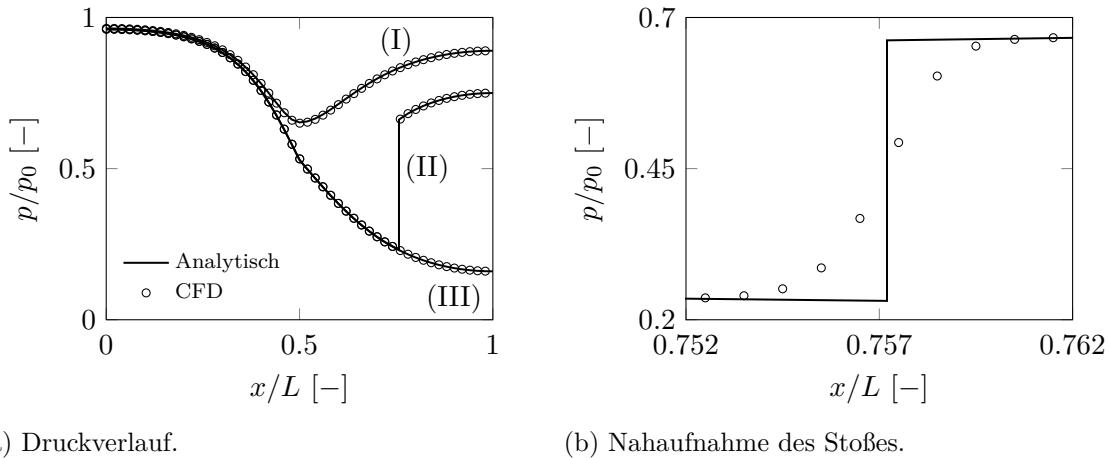


Abbildung 3.6. Vergleich der numerischen mit den analytischen Ergebnissen für die konvergent-divergente Düse: Druckverhältnis  $p/p_0$  (links) und Nahaufnahme des Stoßes aus Betriebspunkt (II) (rechts).

Die Ergebnisse und der Vergleich mit den analytischen Daten sind in Abbildung 3.6a zu sehen. In der linken Graphik ist das Druckverhältnis  $p/p_0$  auf der Symmetrieachse dargestellt. Für Betriebspunkt (I) expandiert das Fluid bis zum engsten Querschnitt auf ein Druckverhältnis von 0.65, bevor es im divergenten Teil der Düse wieder verzögert wird. Für den zweiten Betriebspunkt (II) mit einem Gegendruck von  $p_{\infty,II} = 0.75$  bar wird die Luft im konvergenten Teil der Düse auf  $Ma = 1$  beschleunigt. Im divergenten Teil erfolgt eine weitere Beschleunigung, bis das Fluid abrupt durch einen Stoß in den Unterschall verzögert wird. Für den dritten und letzten Betriebspunkt ist die Beschleunigung bis zum Stoß identisch zum zweiten Betriebspunkt, der Stoß bleibt aber aufgrund des niedrigeren Drucks am Auslass aus und das Fluid bleibt im Überschall. Für alle drei Testfälle (I)-(III) sind die numerischen Resultate in sehr guter Übereinstimmung mit den analytischen Ergebnissen. Sowohl die Beschleunigung im konvergenten, als auch die Verzögerung im divergenten Teil der Düse werden sehr genau wiedergegeben. Abbildung 3.6b zeigt eine Nahaufnahme des Stoßes aus Betriebspunkt (II), wobei jede Markierung eine Berechnungszelle darstellt. Sowohl die Position, als auch die Stärke des Stoßes passen sehr gut mit den analytischen Ergebnissen überein. Der Stoß wird dabei mit 4-6 Zellen aufgelöst.

### 3.3.2 Unterexpandierter Freistrahrl

Der zweite Testfall wurde der Arbeit von Ruggles und Ekoto [142] entnommen. Wasserstoff mit einem Totaldruck von 9.832 bar und einer Totaltemperatur von 295.4 K wurde mit einer Düse ( $d = 1.5$  mm) in Luft unter Umgebungsbedingungen ( $p = 0.9837$  bar,  $T = 296$  K) eingeblasen. Der durch das hohe Druckverhältnis von  $\Pi \approx 10$  entstehende unterexpandierte Freistrahrl wurde mit der Schlierenmesstechnik erfasst. Für die numerische Strömungssimulation wurden Wasserstoff und Luft als thermisch ideales Gas modelliert, die Turbulenzmodellierung erfolgte mit dem  $k\omega$ SST-Modell von Menter und Esch [109]. Abbildung 3.7 zeigt den Vergleich der gemittelten Schlierenaufnahme und des mit in dieser Arbeit verwendeten Strömungslösers erzeugten Ergebnisses. Der simulativ ermittelte Dichtegradient unten im Bild wurde dabei von 1 bis  $1000 \text{ kg/m}^4$  skaliert. Die Übereinstimmung ist auch hier sehr gut. Sowohl die Kontur des Freistrahls, als auch die Position der Machscheibe sind in einer sehr guten Übereinstimmung mit den Messungen.

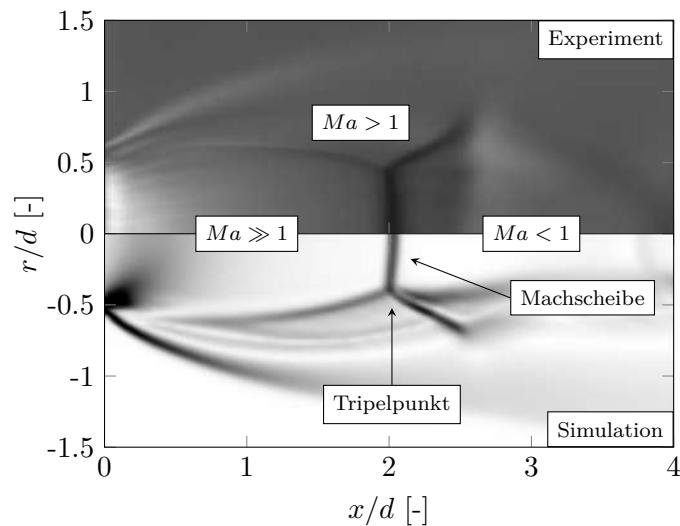


Abbildung 3.7. Vergleich des simulativ gemittelten Dichtegradienten ( $|\nabla\rho|$ , unten) mit dem experimentell aufgezeichneten Schlierenbild (oben). Die Skala des berechneten Dichtegradienten reicht von 1 bis  $1000 \text{ kg/m}^4$ .

### 3.3.3 Eindimensionales, kartesisches Riemann-Problem

Für die Validierung der CFD-Ergebnisse des eindimensionalen, kartesischen Riemann-Problems wurde basierend auf der Arbeit von Kamm [84] ein Riemann-Löser entwickelt, welcher die eindimensionalen und kompressiblen Euler-Gleichungen für die Erhaltung der Masse, des Impulses und der Energie löst:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u)}{\partial x} = 0, \quad (3.26)$$

$$\frac{\partial (\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u^2 + p)}{\partial x} = 0, \quad (3.27)$$

$$\frac{\partial (\rho E)}{\partial t} + \frac{\partial [u(\rho E + p)]}{\partial x} = 0. \quad (3.28)$$

$x$  bezeichnet dabei die räumliche, eindimensionale Koordinate,  $t$  die Zeitkomponente,  $\rho$  die Dichte,  $u$  die Geschwindigkeit,  $p$  den Druck und  $E$  die spezifische totale Energie mit  $E = e + \frac{1}{2}u^2$ . Das Fluid wird als reibungsfrei, wärmeleitungsfrei, strahlungsfrei und nicht reaktiv betrachtet. Die Dichte, der Druck und die spezifische innere Energie  $e$  werden mit Hilfe der ZGL in Verbindung gesetzt, die sich in allgemeiner Form mit

$$p = p(\rho, e) \quad \text{oder} \quad e = e(\rho, p) \quad (3.29)$$

schreiben lässt. Die Erhaltungs-Gleichungen 3.26 - 3.28 können dabei auch in Charakteristikenform geschrieben werden

$$du - \frac{dp}{\rho a_s} = 0 \quad \text{entlang} \quad dx - (u - a_s) dt = 0, \quad (3.30)$$

$$d\rho - \frac{dp}{a_s^2} = 0 \quad \text{entlang} \quad dx - u dt = 0, \quad (3.31)$$

$$du + \frac{dp}{\rho a_s} = 0 \quad \text{entlang} \quad dx - (u + a_s) dt = 0, \quad (3.32)$$

wodurch die Form der Lösung des eindimensionalen Problems ersichtlicher wird.

Das eindimensionale Riemann-Problem beschreibt die zeitliche Entwicklung einer zu Beginn definierten Kontaktdiskontinuität, wobei die beiden thermodynamischen Zustände links ( $p_L, T_L, u_L$ ) und rechts ( $p_R, T_R, u_R$ ) der Membran als konstant und gleichmäßig angenommen werden, siehe Abbildung 3.8 (oben,  $t = 0$ ). Durch die Initialbedingungen im Stoßrohr lässt sich die Entwicklung der verschiedenen Strömungsformen steuern. Für unseren Anwendungsfall von besonderem Interesse ist die instationäre Ausbreitung eines Hochdruckfluids in ein Umgebungsfluid mit niedrigerem Druck. Beide Fluide sind zu Beginn in Ruhe. Die Initialbedingungen lauten somit allgemein formuliert  $p_L > p_R$  und  $u_L = u_R = 0$ . Über die Temperatur muss keine Aussage getroffen werden. Die bei  $t = 0$  s initialisierte Unstetigkeit äußert sich in drei Strömungsformen: der Expansionswelle, der Kontaktunstetigkeit und der Stoßfront. Somit lassen sich die Zustände in der Strömung in vier Regionen einteilen, siehe Abbildung 3.8. Ausgehend von der Initialbedingung läuft die Stoßwelle nach rechts weg, der Zustand vor dem Stoß (1) gleicht dabei der Initialbedingung (R). Hinter dem Stoß bildet sich ein Nachlaufgebiet (2) und (3), welches weiterhin durch die Kontaktdiskontinuität getrennt ist. Zwischen den Zuständen (3) und (4) bildet sich der Expansionfänger, wobei der Beginn dessen an die Region (3) und das Ende an den Zustand (4) anknüpft. Der Verlauf der einzelnen Zustände ist dabei linear, wie in dem  $t$ - $x$ -Diagramm zu sehen ist. Für die Strömungsformen anderer Initialbedingungen siehe bspw. Gottlieb und Groth [61]. Die Kontaktunstetigkeit zeichnet sich dadurch aus, dass kein Massentransport stattfindet und der Druck  $p$  sowie die Geschwindigkeit  $u$  über die Diskontinuität hinweg konstant bleiben. Dies ist für die numerische Lösung des Problems wichtig und notwendig. Nicht nur die Diskontinuität, auch der Stoß und der Expansionfänger besitzen Eigenschaften, die die Lösung dieses Problems numerisch ermöglichen. Der Stoß gleicht dabei einer Kompressionswelle, über die, im Unterschied zur Diskontinuität, ein Massenstrom fließt. Die Rankine-Hugoniot Gleichungen [99] helfen dabei, den thermodynamischen Zustand vor bzw. nach dem Stoß unter Einhaltung der Erhaltungsgleichungen für den Massen-, Impuls- und Energiefluss zu

bestimmen:

$$\rho_1 (u_s - u_1) = \rho_2 (u_s - u_2), \quad (3.33)$$

$$\rho_1 (u_s - u_1)^2 + p_1 = \rho_2 (u_s - u_2)^2 + p_2, \quad (3.34)$$

$$e_1 + \frac{p_1}{\rho_1} + \frac{1}{2} (u_s - u_1)^2 = e_2 + \frac{p_2}{\rho_2} + \frac{1}{2} (u_s - u_2)^2. \quad (3.35)$$

$u_s$  bezeichnet dabei die Stoßgeschwindigkeit, der Index <sub>1</sub> bezeichnet den thermodynamischen Zustand vor, der Index <sub>2</sub> nach dem Stoß, siehe auch Abbildung 3.8. Für den Expansionsfänger gilt ein kontinuierlich steigender Druck bei gleichbleibender Entropie mit einer finiten räumlichen Ausbreitung. Beginn und Ende des Expansionsfängers können klar definiert werden. Die Lösung der Strömungszustände im Expansionsfänger ergibt sich aus den charakteristischen Gleichungen 3.30-3.32:

$$\frac{dp}{d\rho} = a_s^2 \quad \text{und} \quad \frac{du}{d\rho} = \pm \frac{a_s}{\rho}. \quad (3.36)$$

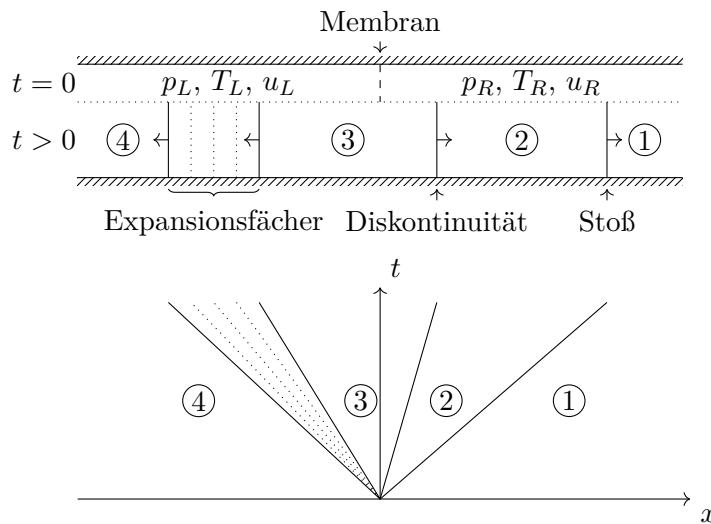


Abbildung 3.8. Definition und Strömungsform des eindimensionalen Riemann-Problems mit  $p_L > p_R$  und  $u_L = u_R = 0$ .

Der Algorithmus zur numerischen Lösung des definierten Problems lässt sich in vier Schritte unterteilen.

### 1) Zielfunktion

Im ersten Schritt wird die zu lösende Zielfunktion und die Schrittweite des Korrekturschritts definiert. Druck und Geschwindigkeit vor bzw. hinter der Kontaktdiskontinuität müssen, wie bereits beschrieben, den gleichen Wert aufweisen. Der Zustand ist dabei abhängig von der Initialbedingung zum Zeitpunkt  $t = 0$  und wird mit  $p^*$  und  $u^*$  bezeichnet. Die Zielfunktion stellt die Differenz der beiden Geschwindigkeiten vor und nach dem Stoß zu dem besagten Druck dar:

$$f(p^*) = u_L^*(p^*) - u_R^*(p^*). \quad (3.37)$$

Der Korrekturschritt für den Druck nach der Sekanten-Methode lautet:

$$p^{*(k+1)} = p^{*(k)} - f(p^{*(k)}) \frac{p^{*(k)} - p^{*(k-1)}}{f(p^{*(k)}) - f(p^{*(k-1)})}. \quad (3.38)$$

Es müssen somit zwei Startlösungen  $k$  und  $k - 1$  für den Iterationsprozess vorhanden sein.

## 2) Startlösungen

Als erste Startlösung ( $k = 0$ ) für den Druck dient die akustische Approximation von Toro [159] mit

$$p^{*(0)} = \frac{C_R p_L + C_L p_R + C_L C_R (u_L - u_R)}{C_L + C_R} = \frac{C_R p_L + C_L p_R}{C_L + C_R}. \quad (3.39)$$

$C = \rho a_s$  bezeichnet den Massenstrom, der für die Initialbedingungen (R) und (L) ausgewertet wird. Alle Zustandsgrößen werden mit der SRK-ZGL berechnet. Für die zweite Startlösung mit  $k = 1$  dient die gleiche Annahme, wobei die Massenflüsse  $C_L$  und  $C_R$  mit einer genaueren Approximation  $\bar{C}_L$  und  $\bar{C}_R$  ersetzt werden:

$$\bar{C}_l^{(0)} = \begin{cases} |p^{*(0)} - p_l| / |u^{*(0)} - u_l| & \text{falls } u_l^{*(0)} \neq u_l \\ \rho_l a_{s,l} & \text{falls } u_l^{*(0)} = u_l. \end{cases} \quad (3.40)$$

Der Index  $l$  stellt die linksseitigen (L) und rechtsseitigen (R) Größen dar. Die restlichen Größen wie Geschwindigkeit und Dichte werden über die folgenden Berechnungsschritte ermittelt.

## 3) Berechnung des Stoßes/Expansionsfächers

Für die Berechnung des Stoßes bedienen wir uns den Rankine-Hugoniot Gleichungen [99] 3.33-3.35, die die Zustände vor dem Stoß (1) mit den Zuständen nach dem Stoß (2) in Verbindung setzen. Aus der dritten Gleichung, dem Energienfluss, folgt:

$$e_1 + \frac{p_1}{\rho_1} + \frac{1}{2} \frac{\rho_2}{\rho_1} \frac{p^{*(k)} - p_1}{\rho_2 - \rho_1} = e_2 + \frac{p^{*(k)}}{\rho_2} + \frac{1}{2} \frac{\rho_1}{\rho_2} \frac{p^{*(k)} - p_1}{\rho_2 - \rho_1}. \quad (3.41)$$

In der Gleichung sind alle Zustände mit dem Index 1, die der Initialbedingung (R) gleichen, bekannt. Einzige Unbekannte ist die Dichte  $\rho_2$  als Funktion des Drucks  $p^{*(k)}$  und der Temperatur  $T_2$ . Nachdem die Dichte  $\rho_2$  mit Gleichung 3.41 unter Anwendung der SRK-ZGL gelöst wurde, kann die Stoßgeschwindigkeit  $u_s$  und die Geschwindigkeit der Strömung nach dem Stoß  $u_2$ , welche als Konvergenzkriterium für den gesamten Iterationsschritt dient, berechnet werden:

$$u_s = u_1 + \left[ \left( \frac{\rho_2}{\rho_1} \right) \left( \frac{p^{*(k)} - p_1}{\rho_2 - \rho_1} \right) \right]^{1/2}, \quad u_2 = u_s - \left[ \left( \frac{\rho_1}{\rho_2} \right) \left( \frac{p^{*(k)} - p_1}{\rho_2 - \rho_1} \right) \right]^{1/2}. \quad (3.42)$$

Die Differentialgleichung zur Berechnung des Expansionsfächers lautet:

$$\frac{dp}{d\rho} = a_s^2(\rho, p). \quad (3.43)$$

Der Zustand am Anfang des Expansionsfächers gleicht dabei dem  $\star$ -Zustand für den Druck, das Ende des Fächers der Initialbedingung ( $L=4$ ). Um Gleichung 3.43 integrieren zu können, müssen die Integrationsgrenzen bekannt sein. In der Arbeit von Kamm [84] wird eine zusätzliche Gleichung zur Berechnung der Schrittweite  $\Delta\rho$  gelöst, ein Vorgehen das durchaus effizienter gestaltet werden kann. Die Dichte am Ende des Fächers entspricht der Dichte der Initialbedingung ( $L=4$ ) und kann als untere Integrationsgrenze verwendet werden. Als obere Grenze, die Dichte im Zustand (3), wird der zuvor berechnete Druck  $p^{*(k)}$  und die über die Entropiebedingung gewonnene Temperatur  $T_2$  verwendet. Der für die Integration konstante Dichteschritt ergibt sich somit zu  $\Delta\rho = (\rho_3 - \rho_4)/M$  mit  $M$  Integrationsschritten. Es folgt die Integration von Gleichung 3.43, die mit einem Runge-Kutta Verfahren vierter Ordnung berechnet wird:

$$\hat{p}^{(1)} = p^{(m-1)}, \quad a^{(1)} = a_s \left( \rho_3^{(m-1)}, \hat{p}^{(1)} \right), \quad (3.44)$$

$$\hat{p}^{(2)} = p^{(m-1)} + \frac{1}{2} \Delta\rho \left( a^{(1)} \right)^2, \quad a^{(2)} = a_s \left( \rho_3^{(m-1)} + \frac{1}{2} \Delta\rho, \hat{p}^{(2)} \right), \quad (3.45)$$

$$\hat{p}^{(3)} = p^{(m-1)} + \frac{1}{2} \Delta\rho \left( a^{(2)} \right)^2, \quad a^{(3)} = a_s \left( \rho_3^{(m-1)} + \frac{1}{2} \Delta\rho, \hat{p}^{(3)} \right), \quad (3.46)$$

$$\hat{p}^{(4)} = p^{(m-1)} + \Delta\rho \left( a^{(3)} \right)^2, \quad a^{(4)} = a_s \left( \rho_3^{(m-1)} + \Delta\rho, \hat{p}^{(4)} \right), \quad (3.47)$$

$$\Rightarrow p^{(m)} = p^{(m-1)} + \frac{1}{6} \Delta \left[ \left( a^{(1)} \right)^2 + 2 \left( a^{(2)} \right)^2 + 2 \left( a^{(3)} \right)^2 + \left( a^{(4)} \right)^2 \right]. \quad (3.48)$$

Für die Koeffizienten  $a^{(1)}$  bis  $a^{(4)}$  muss die Schallgeschwindigkeit für den jeweiligen Zustand mit der Dichte und dem Druck ausgewertet werden. Die Integration der zweiten Differentialgleichung in 3.36 führt zu der Geschwindigkeit:

$$\begin{aligned} u^{(m)} = & u^{(m-1)} - \frac{1}{6} \Delta \left[ \left( a^{(1)} / \rho_3^{(m-1)} \right) + 2 \left( a^{(2)} / \left( \rho_3^{(m-1)} + \frac{1}{2} \Delta\rho \right) \right) \right] \\ & - \frac{1}{6} \Delta \left[ 2 \left( a^{(3)} / \left( \rho_3^{(m-1)} + \frac{1}{2} \Delta\rho \right) \right) + \left( a^{(4)} / \left( \rho_3^{(m-1)} + \Delta\rho \right) \right) \right]. \end{aligned} \quad (3.49)$$

Die Geschwindigkeiten der Ränder des Expansionsfächers ergeben sich dann zu

$$u_{H,L} = u_4 - a_{s,4} \quad \text{und} \quad u_{T,L} = u_3 - a_{s,3}. \quad (3.50)$$

#### 4) Iterationsschritt und Konvergenz

Im vierten Schritt des Lösungsverfahrens wird das Konvergenzkriterium überprüft und die  $\star$ -Zustände aktualisiert. Ist die Druckdifferenz der beiden berechneten Zustände (2) und (3) größer als die vorgegebene Toleranz von  $1 \times 10^{-8}$ , wird der Druck mit Gleichung 3.38 korrigiert. Hat das Verfahren das Konvergenzkriterium erreicht, sind Druck und Geschwindigkeit in Zustand (3) und (4) identisch und der Iterationsschritt terminiert. Nach Erreichen der Konvergenz können alle Zustände des eindimensionalen Strömungsproblems berechnet werden. Die Position des Stoßes kann über die Stoßgeschwindigkeit  $u_s$  bestimmt werden, die der Kontaktdiskontinuität über die Geschwindigkeit in der Strömung nach dem Stoß  $u_2$ . Die Endpunkte des Expansionsfächers wurden bereits mit den Geschwindigkeiten  $u_{H,L}$  und  $u_{T,L}$  definiert. Da die Integration der Gleichung 3.43 mit äquidistantem Dichteschritt erfolgt ist, werden die Daten zusätzlich auf den äquidistanten Achsenabschnitt interpoliert.

### Testfall

Für die Validierung des Strömungslösers mit dem eindimensionalen Riemann-Löser wird Methan bei 300 bar und 294 K in Methan bei 60 bar und gleicher Temperatur simuliert, einer Initialbedingung, die einem der späteren Betriebspunkte gleicht. Die CFD Simulation wurde mit 800 Berechnungszellen in axialer Richtung diskretisiert. Auf eine Modellierung mehrerer Spezies wurde hier verzichtet, da es nichts an der Vergleichbarkeit der Ergebnisse ändert. Abbildung 3.9 zeigt den Vergleich der beiden mit der SRK ZGL erzielten Lösungen (Riemann und CFD) nach einer Zeit von 0.5 ms. Zusätzlich zu den Lösungen ist die Initialisierung für  $t = 0$  dargestellt sowie die drei auftretenden Strömungsformen: Stoß (S), Kontaktdiskontinuität (K) und Expansionswelle (E). Die Kurven sind jeweils mit der Initialbedingung links von der Membran normiert. Das transiente Verhalten des Druckverlaufs der CFD passt sehr gut mit den Ergebnissen des Riemann-Lösers überein. Sowohl der Stoß als auch die Expansionswelle werden gut in Position und Stärke wiedergegeben. Für den Beginn und das Ende der Expansionswelle lassen sich kleinere Abweichungen, der Diffusivität des Strömungslösers geschuldet, erkennen. Es wird auch ersichtlich, dass die Strömungsgrößen im Expansionsfächern, bis auf die Geschwindigkeit, nicht linear variieren. In den Zuständen nach dem Stoß und vor der Expansionswelle (Vergleich (2) und (3) bei der Herleitung des Riemann-Lösers) herrscht der gleiche Druck und die gleiche Geschwindigkeit, auch dies wird von der Strömungssimulation sehr gut abgebildet. Im Dichteverlauf ist zusätzlich die Kontaktdiskontinuität zu sehen, die wiederum, bis auf Diffusivitätserscheinungen, sehr gut wiedergegeben wird. Ähnliche Schlussfolgerungen lassen sich für die Verläufe der Temperatur und der Geschwindigkeit treffen. Zusätzlich zu den Ergebnissen der Realgasthermodynamik ist die Lösung der Idealgasthermodynamik zu sehen. Die Werte für die Dichte, die Temperatur und die Geschwindigkeit wurden mit den jeweiligen Idealgasgrößen normiert. Es wird sofort ersichtlich, dass sich die beiden Lösungen (IG und RG) grundlegend voneinander unterscheiden und eine korrekte Modellierung der Thermodynamik unabdingbar ist. Der Vergleich der beiden Lösungen ohne eine Normierung und ein weiterer Testfall mit noch stärkeren Realgaseinflüssen ist in Anhang B zu finden.

Zusätzlich zu den vier bereits diskutierten Strömungsgrößen ist der Verlauf der Machzahl und der Mischfunktion  $\kappa_f$  (Gleichung 3.17) dargestellt. Aufgrund der hohen Geschwindigkeiten im Nachstoßzustand steigt die Machzahl, von rechts nach links betrachtet, über den Stoß an. Bis zur Kontaktdiskontinuität ist diese dann konstant, bevor es zu einem erneuten Anstieg kommt, der auf die abfallende Temperatur und der daraus resultierenden niedrigeren Schallgeschwindigkeit bei gleicher Strömungsgeschwindigkeit zurückzuführen ist. Vom rechten zum linken Rand des Expansionsfächers nimmt die Strömungsgeschwindigkeit langsam ab, die Temperatur wieder zu und die Machzahl wird 0. Der Verlauf der Machzahl spiegelt sich in Teilen im Verlauf der Mischfunktion  $\kappa_f$  wieder. Da der Wert für  $\kappa_f$  auf den Zellflächen berechnet wird, ist hier der maximale Wert einer Berechnungszelle der benachbarten Zellflächen dargestellt. Für zweidimensionale und dreidimensionale Simulationen wird  $\kappa_f$  immer mit der richtungsbezogenen Machzahl berechnet. D.h. für die Berechnung des  $\kappa_f$ -Wertes wird nur der Anteil der Strömungsgeschwindigkeit in die jeweilige Raumrichtung verwendet. Die akustische CFL-Zahl  $ACof = a_{s,f} \Delta t / \Delta x$  ist kleiner als die Machzahl, entsprechend werden  $\kappa_f$ -Werte von 1 erreicht. Der Bereich vom Stoß bis zum rechten Rand der Expansion wird somit mit dem KT-Verfahren diskretisiert, im Expansionsfächern erfolgt eine Gewichtung der Massenströme mit  $\kappa_f$ .

Abbildung 3.10 zeigt den Stoß (links) und die Kontaktdiskontinuität (rechts) in der

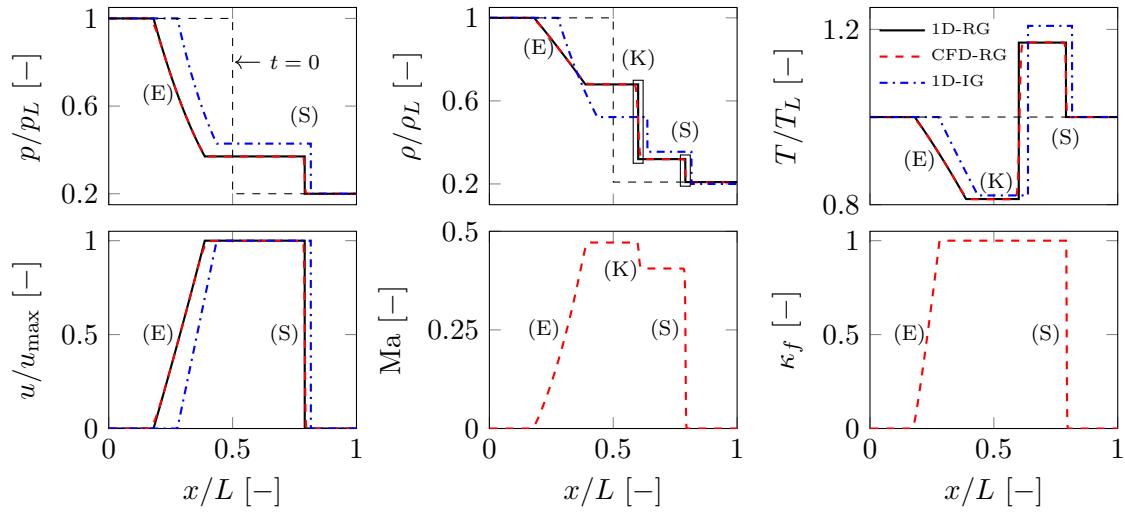


Abbildung 3.9. Vergleich der normierten Lösungen für das eindimensionale Riemann-Problem, Momentaufnahmen nach  $t = 0.5$  ms. (E), (K) und (S) markieren die Expansion, die Kontaktdiskontinuität und den Stoß. Das Ergebnis des Riemann-Lösers ist mit 1D-RG und 1D-IG (RG - Realgasthermodynamik, IG - Idealgasthermodynamik), die Lösung des Strömungslösers mit CFD-RG gekennzeichnet.

Nahaufnahme für die drei verschiedenen Auflösungen mit 200, 400 und 800 Zellen in axialer Richtung. Für jeden Verlauf wird der jeweilige Zellmittelpunkt gesondert markiert. Die Position der Strömungsform, ob Stoß oder Kontaktdiskontinuität, wird von allen Auflösungen sehr exakt wiedergegeben und ist von dieser unabhängig. Der Stoß wird von drei bis vier Zellen aufgelöst, auch diese Anzahl ist unabhängig von der gewählten Auflösung. Für die Kontaktdiskontinuität ergibt sich ein sehr guter Wert von fünf bis acht, hier können geringfügige Unterschiede bezüglich der Auflösung ausgemacht werden.

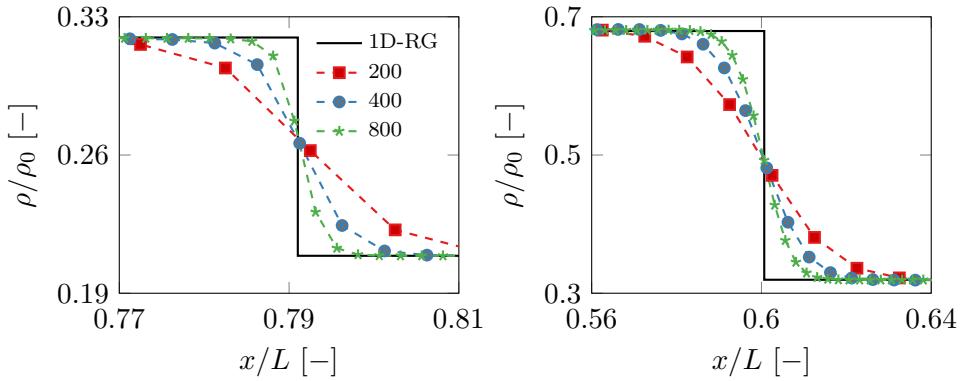


Abbildung 3.10. Nahaufnahme des Stoßes (links) und der Kontaktdiskontinuität (rechts) des Testfalls für verschiedene Auflösungen.

## Kapitel 4

# Eindimensionale Düsenströmung

Basierend auf dem thermodynamischen Modell in Abschnitt 4.1 wird der entwickelte Algorithmus zur Berechnung der eindimensionalen Düsenströmung in Abschnitt 4.2 erläutert. Im Anschluss daran erfolgt die Validierung in 4.3 und die Diskussion der kritischen Strömungsgrößen in 4.4. Die relativen Massenstrom- und Impulsflussdichten, und somit die Abweichung der von der Idealgasthermodynamik bestimmten Werte, werden in Abschnitt 4.5 analysiert, bevor eine Korrelation zur einfachen Berechnung der beiden relativen Größen in 4.6 beschrieben wird.

### 4.1 Thermodynamisches Modell

Für die Berechnung der kritischen Größen im engsten Querschnitt der Düse wird eine isentrope und isenthalpe Zustandsänderung angenommen:

$$\underbrace{h_0}_{\text{Plenum}} = h_0(p_0, T_0) = \underbrace{h(p, T)}_{\text{Düse}} + \frac{1}{2}u^2, \quad (4.1)$$

$$s_0 = s_0(p_0, T_0) = s(p, T). \quad (4.2)$$

Die spezifische Totalenthalpie im Plenum  $h_0$  ist abhängig von dem Totaldruck  $p_0$  und der Totaltemperatur  $T_0$  und mit der spezifischen Totalenthalpie in der Düse gleichzusetzen, welche sich aus der statischen Enthalpie  $h$  und der Geschwindigkeitskomponente  $1/2u^2$  zusammensetzt [4]. Die spezifische Entropie im Plenum  $s_0$  entspricht aufgrund der isentropen Zustandsänderung der spezifischen statischen Entropie in der Düse  $s$ . In der Anwendung auftretende Verluste, wie beispielsweise Reibungsverluste an der Wand oder Ablösungerscheinungen, werden durch diese Modellierung nicht beachtet. Die Absenkung des Gegendrucks  $p$  führt zu einer Expansion in der Düse, einhergehend mit einer Erhöhung der Geschwindigkeit und einer Reduzierung der Temperatur und des Drucks. Unterschreitet der Gegendruck den strömungsmechanisch kritischen Druck, entspricht die in der Expansion vorkommende Geschwindigkeit  $u$  der Schallgeschwindigkeit  $a_s$  und man spricht von einer gesperrten Düse mit

$$u^2 = \left. \frac{\partial p}{\partial \rho} \right|_s = a_s^2(p, T), \quad (4.3)$$

siehe Abschnitt 2.6.1. Die Machzahl im engsten Querschnitt beträgt 1 und der maximale Massenstrom  $\dot{m}^*$  ist erreicht. Für die gesperrte Düsenströmung werden die Gleichungen 4.1 und 4.2 mit dem entsprechenden hochgestellten Index \* ergänzt:

$$h_0(p_0, T_0) = h(p, T) + \frac{1}{2}u^2 = h^*(p^*, T^*) + \frac{1}{2}a_s^{*2}(p^*, T^*), \quad (4.4)$$

$$s_0(p_0, T_0) = s(p, T) = s^*(p^*, T^*). \quad (4.5)$$

Der maximal zureichende Massenstrom bei gegebenen Plenumsbedingungen unter Vernachlässigung von Verlusten ergibt sich aus der Kontinuitätsgleichung und berechnet sich mit  $\dot{m}^* = \rho^* a_s^* A^*$ , wobei  $\rho^*$  die kritische Dichte und  $A^*$  den engsten Querschnitt bezeichnet.

Die Normierung des Massenstroms  $\dot{m}^*$  mit der Querschnittsfläche  $A^*$  wird als Massenstromdichte  $G^*$  bezeichnet:

$$G^*(p_0, T_0) = \frac{\dot{m}^*}{A^*} = \rho^* a_s^*. \quad (4.6)$$

Der Impulsfluss  $\dot{M}^*$  und die Impulsflussdichte  $P^*$  sind wie folgt definiert:

$$\dot{M}^*(p_0, T_0) = \rho^* a_s^{*2} A^*, \quad P^*(p_0, T_0) = \frac{\dot{M}^*}{A^*} = \rho^* a_s^{*2}. \quad (4.7)$$

## 4.2 Algorithmus

### Idealgasthermodynamik

Unter der Annahme eines thermisch idealen Gases mit konstanten Wärmekapazitäten  $c_p$  und  $c_v$  (perfektes Gas) lassen sich die kritischen Größen  $p^*$ ,  $T^*$ ,  $\rho^*$  und  $a_s^*$  und alle abgeleiteten Größen (Massenstrom  $\dot{m}^*$ , Massenstromdichte  $G^*$ , ...) explizit berechnen. Beginnend mit dem ersten Hauptsatz der Thermodynamik in differentieller Schreibweise, unter der Annahme eines adiabaten Prozesses mit  $dQ = 0$  und mit der Volumenänderungsarbeit  $dW = -pdV$  folgt

$$dU = -p dV. \quad (4.8)$$

Wird die Änderung der inneren Energie  $dU$  mit dem Produkt der spezifischen Wärmekapazität bei konstantem Volumen und der Temperatur ersetzt und werden die thermodynamischen Zusammenhänge  $pV = n\mathcal{R}_u T$  und  $n\mathcal{R}_u = c_p - c_v$  eingesetzt, erhalten wir:

$$\frac{1}{T} dT = -\frac{n\mathcal{R}_u}{c_v} \frac{1}{V} dV \quad \rightarrow \quad \ln(T) + \frac{c_p - c_v}{c_v} \ln(V) = \text{const.} \quad (4.9)$$

Mit  $\gamma = c_p/c_v$ , dem Verhältnis der spezifischen Wärmekapazitäten, und weiteren Umformungen enden wir schließlich bei dem Poisson'schen Gesetz:

$$\frac{p}{\rho^\gamma} = \text{const.} \quad (4.10)$$

Als Zustandsänderung wird nun die Expansion in besagter, gesperrter Düse betrachtet und die kritischen Düsengrößen können durch Einsetzen der idealen Gasgleichung unter Berücksichtigung der konstanten Wärmekapazitäten und der Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls und Energie explizit berechnet werden:

$$p_{ig}^* = p_0 \left(1 + \frac{\gamma_0 - 1}{2}\right)^{\frac{\gamma_0}{\gamma_0 - 1}}, \quad \rho_{ig}^* = \rho_0 \left(\frac{2}{\gamma_0 + 1}\right)^{\frac{1}{\gamma_0 - 1}}, \quad (4.11)$$

$$T_{ig}^* = \frac{2T_0}{\gamma_0 + 1}, \quad a_{s,ig}^* = \sqrt{\gamma_0 R_m T_{ig}^*}. \quad (4.12)$$

Die Massenstromdichte und die Impulsflussdichte lauten

$$G_{ig}^* = \rho_{ig}^* a_{s,ig}^* = C_{ig}^* \frac{p_0}{\sqrt{R_m T_0}} \quad \text{mit} \quad C_{ig}^* = \sqrt{\gamma_0} \left(\frac{2}{1 + \gamma_0}\right)^{\frac{\gamma_0 + 1}{2(\gamma_0 - 1)}}, \quad (4.13)$$

$$P_{ig}^* = \rho_0 R_m T_0 \gamma_0 \left(\frac{2}{\gamma_0 + 1}\right)^{\frac{\gamma_0}{\gamma_0 - 1}}, \quad (4.14)$$

und sind somit abhängig von den Bedingungen im Plenum ( $p_0, T_0, \gamma_0$ ) und dem betrachteten Fluid ( $R_m = \mathcal{R}_u/M_w$ ).

## Realgasthermodynamik

Um das nicht-lineare Verhalten von Fluiden bei erhöhten Drücken und/oder niedrigen Temperaturen zu berücksichtigen, wird die in Kapitel 2 eingeführte SRK ZGL verwendet. Wie bereits ausgeführt werden die kalorischen Größen der Enthalpie  $h$  und der Entropie  $s$  mittels einer druckabhängigen Korrektur berechnet. Dies führt dazu, dass sich die Gleichungen 4.1 und 4.2 nicht mehr explizit lösen lassen. Diese Problematik ist in der Literatur bekannt und verschiedene Autoren haben Algorithmen entwickelt, die die gesuchten kritischen Größen iterativ lösen. Zu diesen gehören u.a. die Veröffentlichungen von Johnson *et al.* [78, 80, 79, 77] und Maytal [108]. In dieser Arbeit wird ein ähnlicher Ansatz unter Verwendung eines mehrdimensionalen Newton-Verfahrens [133] verfolgt, welches mit einem zuvor definierten Intervall im Lösungsraum begrenzt wird. Das Intervall wird durch die gegebenen Druck- und Temperaturwerte im Plenum nach oben, und durch die Sättigungsgrößen des jeweiligen Fluids nach unten beschränkt. Eine durch starke Expansionsvorgänge hervorgerufene Zweiphasigkeit im engsten Querschnitt wird somit ausgeschlossen. Dies ist insofern gerechtfertigt, da die Phasenübergänge aufgrund der deutlich stärkeren Expansion im Freistrahl für  $Ma \gg 1$  und nicht im engsten Querschnitt für  $Ma \approx 1$  erwartet werden. Für den Algorithmus werden die Gleichungen 4.3, 4.4 und 4.5 als Funktionsgleichungen  $F_1 \dots F_3$  umgeschrieben:

$$F_1(p^*, T^*, a_s^*) = h_0(p_0, T_0) - h^*(p^*, T^*) - \frac{1}{2}u^2 = 0, \quad (4.15)$$

$$F_2(p^*, T^*, a_s^*) = s_0(p_0, T_0) - s^*(p^*, T^*) = 0, \quad (4.16)$$

$$F_3(p^*, T^*, a_s^*) = a_s^{*2} - u^2 = 0. \quad (4.17)$$

Die zu bestimmenden Unbekannten sind  $p^*$ ,  $T^*$  und  $a_s^*$ . In Funktionsgleichung  $F_3$  wird die Geschwindigkeit und die Schallgeschwindigkeit zwecks Genauigkeit und Stabilität des Lösungsverfahrens quadriert. Ausgehend von einem Startwert wird dieser mithilfe einer Taylor-Reihe von  $F$  um  $\mathbf{x}$  verbessert:  $F(\mathbf{x} + \delta\mathbf{x}) \approx F(\mathbf{x}) + J(\mathbf{x})\delta\mathbf{x} = 0$ . Der zu lösende Vektor  $\mathbf{x}$  beinhaltet dabei die gesuchten Unbekannten, die Funktionalmatrix/Jacobimatrix mit den Einzeleinträgen  $J_{ij}$  ist gegeben als:

$$J = \begin{pmatrix} \frac{\partial F_1}{\partial p} & \frac{\partial F_1}{\partial T} & \frac{\partial F_1}{\partial a_s} \\ \frac{\partial F_2}{\partial p} & \frac{\partial F_2}{\partial T} & \frac{\partial F_2}{\partial a_s} \\ \frac{\partial F_3}{\partial p} & \frac{\partial F_3}{\partial T} & \frac{\partial F_3}{\partial a_s} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{\partial h}{\partial p}|_T & -\frac{\partial h}{\partial T}|_p & -u \\ -\frac{\partial s}{\partial p}|_T & -\frac{\partial s}{\partial T}|_p & 0 \\ 2a_s \frac{\partial a_s}{\partial p}|_T & 2a_s \frac{\partial a_s}{\partial T}|_p & -2u \end{pmatrix} \quad (4.18)$$

Es wird somit die linearisierte Gleichung  $J(\mathbf{x})\delta\mathbf{x} = -F(\mathbf{x})$  mit  $\mathbf{x} + \delta\mathbf{x} = \mathbf{x} - J(\mathbf{x})^{-1}F(\mathbf{x})$  gelöst. Als Startwerte werden die Lösungen der Gleichungen 4.11 und 4.12 unter der Annahme eines thermisch idealen Gases verwendet.

Abbildung 4.1 zeigt die Begrenzung des Lösungsraums mittels der Sättigungsgrößen für das bereits verwendete Beispiel mit Methan ( $p_0 = 300$  bar,  $T_0 = 300$  K). Die grau hinterlegte Fläche kennzeichnet das mit der SRK-ZGL berechnete Zweiphasengebiet. Die gestrichelten Linien markieren die Totalentropie  $s_0 = 50.1 \text{ J}/(\text{mol K})$ . Für die gekennzeichneten Werte für  $T_{min}$  und  $p_{min}$  entspricht die Entropie der Totalentropie. Findet das Newton-Verfahren keine Lösung im angegebenen Bereich, befindet sich diese im Zweiphasengebiet, welches im Algorithmus zur Berechnung der kritischen Größen nicht beachtet wird. Der Algorithmus bricht ab und der nächste Betriebspunkt wird berechnet.

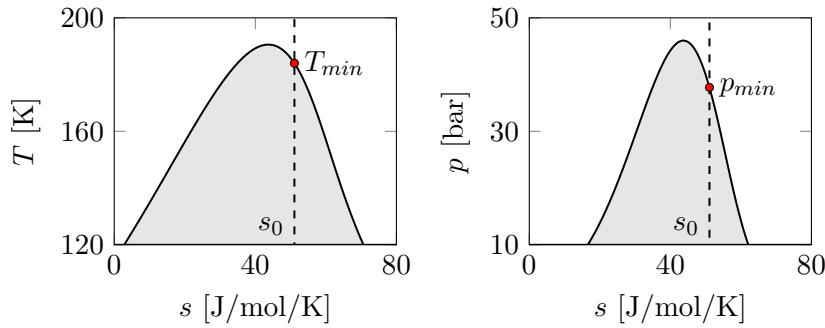


Abbildung 4.1. Beschränkung des Lösungsintervalls mittels der Sättigungsgrößen für  $p$  und  $T$ . Die grau hinterlegte Fläche kennzeichnet das Zweiphasengebiet.

Das Maximum des Massenstroms für die Modellvorstellung eines idealen Gases wird bei einer Düsendurchströmung von  $Ma = 1$  erreicht. Dies ist bekannt und lässt sich analytisch herleiten. Unter Anwendung der SRK-ZGL ist diese Herleitung nicht möglich, ein ähnlicher Nachweis kann aber mit Abbildung 4.2 durchgeführt werden. Wiederum wird der Betriebspunkt mit Methan mit  $p_0 = 300$  bar und  $T_0 = 300$  K herangezogen. Ausgehend von dem Totaldruck von 300 bar wird der Druck in der Düse abgesenkt und zu jedem Druckwert wird die entsprechende Temperatur, die sich aus der Entropiebedingung ergibt, berechnet. Mit gegebenem Druck und gegebener Temperatur kann dann die Geschwindigkeit, die Schallgeschwindigkeit, die Dichte und der Massenstrom berechnet werden. Aus der Geschwindigkeit und der Schallgeschwindigkeit folgt die Machzahl. Es zeigt sich, dass das Verhalten bzgl. der maximalen Durchströmung bei  $Ma = 1$  identisch für beide Modellierungsannahmen ist. Auch für die Betrachtung des Fluids mit der SRK-ZGL wird die Massenstromdichte  $G$  maximal für  $Ma = 1$ .

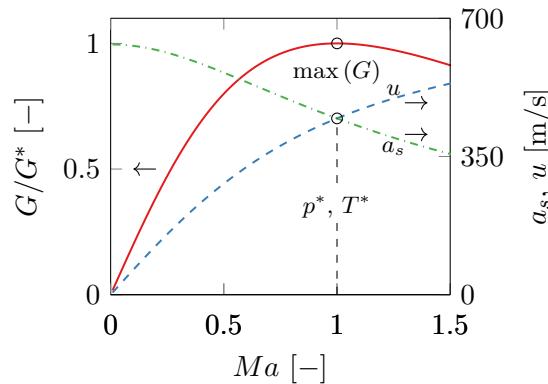


Abbildung 4.2. Maximierung des Massenstroms für die SRK-ZGL.

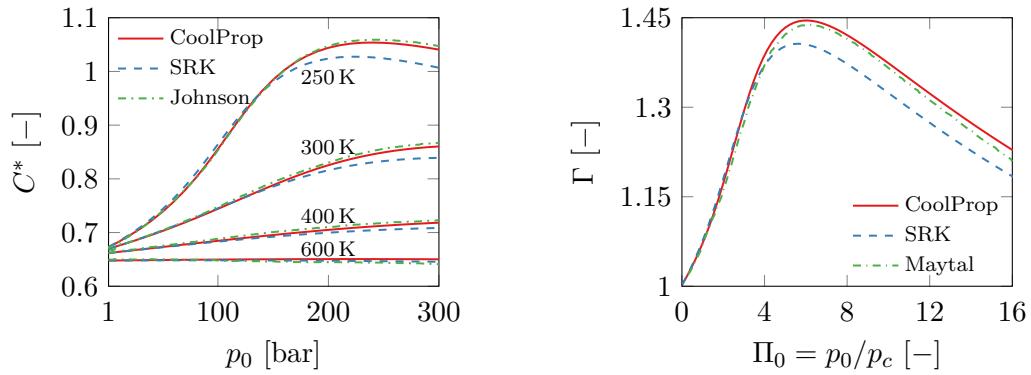
### 4.3 Validierung

Zur Validierung der eindimensionalen Berechnungsmethode werden die Arbeiten von Johnson [81] und Maytal [108] herangezogen. In beiden Veröffentlichungen wurde die kritische Düsenströmung von Methan untersucht. In der Arbeit von Johnson wird die Abhängigkeit

des kritischen Strömungsfaktors  $C^*$  vom Totaldruck  $p_0$  dargestellt. Der kritische Strömungsfaktor wird dabei definiert als:

$$C^* = \rho^* a_s^* \frac{\sqrt{R_u T_0}}{p_0}. \quad (4.19)$$

Zum Vergleich stehen die Verläufe für vier Totaltemperaturen 250 K, 300 K, 400 K und 600 K zur Verfügung. Als Grundlage der Berechnungen von Johnson dient die ZGL von Vennix und Kobayashi [169], die speziell für Methan angepasst wurde und 24 Koeffizienten enthält. Abbildung 4.3a zeigt den Verlauf von  $C^*$  für die vier Temperaturen zusammen mit den Verläufen, die mit der in Abschnitt 4.2 vorgestellten Methode berechnet wurden. Hierbei wurde als Grundlage für die Berechnung der thermodynamischen Größen nicht nur die SRK-ZGL, sondern auch die hochgenaue ZGL der CoolProp-Datenbank [17] verwendet. Die Übereinstimmung der Johnson- mit den CoolProp-Daten ist dabei sehr gut und zeigt, dass die ZGL von Vennix und Kobayashi [169] zur Berechnung der Fluideigenschaften von Methan besser geeignet ist als die ZGL von Soave, Redlich und Kwong [151]. Für die mit der SRK-ZGL berechneten Werte ergeben sich Diskrepanzen, die für niedrige Temperaturen und höher werdende Drücke zunehmen. Aufgrund der deutlich höheren Komplexität der Vennix und Kobayashi-ZGL ist diese aber keine Alternative für die Implementierung in der CFD.



(a) Kritischer Strömungsfaktor (Johnson [81]). (b) Relativer Massenstrom (Maytal [108]).

Abbildung 4.3. Vergleich der Ergebnisse der eindimensionalen Berechnungsmethode mit Literatur-Daten.

Für einen Vergleich mit den Ergebnissen von Maytal [108] dient der relative Massenstrom  $\Gamma$ , der sich aus dem Quotient der mit der Realgasthermodynamik und der Idealgasthermodynamik berechneten Massenstrom zusammensetzt:

$$\Gamma = \frac{G_{\text{rg}}^*}{G_{\text{ig}}^*}. \quad (4.20)$$

Abbildung 4.3b zeigt den Verlauf des relativen Massenstroms  $\Gamma$  für Methan mit  $T_0 = 267$  K und einem reduzierten Totaldruck  $\Pi_0 = p_0/p_c$  von 0 bis 16. Weitere Temperaturen sind in der Veröffentlichung nicht enthalten. Als Vergleich dienen wiederum die SRK- und CoolProp-Daten des eindimensionalen Algorithmus. Die in der Abbildung auftretenden Abweichungen lassen sich abermals durch die unterschiedlichen ZGL erklären. Die Ergebnisse von Maytal wurden basierend auf hochgenauen ZGL [89] erzeugt. Beide Vergleiche

zeigen aber, dass die kritischen Zustände mit der entwickelten eindimensionalen Methode physikalisch korrekt berechnet werden und die in Abbildung 4.3 aufgezeigten Unterschiede auf die ZGL zurückzuführen sind.

## 4.4 Kritische Größen

Der in dem letzten Abschnitt erfolgreich validierte Algorithmus wird nun für eine detaillierte Analyse der kritischen Größen von Methan verwendet. In Kapitel 5 wird die Methode wiederholt herangezogen, um Tendenzen bzgl. der kritischen Größen einer anderen Spezies oder eines anderen Betriebspunktes zu treffen. In dieser ersten Betrachtung werden die Verläufe der kritischen Größen für Methan und einen sehr weit gefassten Druckbereich von 1 bis 600 bar bei einer Totaltemperatur von 300 K diskutiert, siehe Abbildung 4.4. Zusätzlich zu den Werten, die mit der SRK-ZGL berechnet wurden, wird der gleiche Algorithmus unter Verwendung der CoolProp-Datenbank verwendet. Dies ermöglicht einen Vergleich und eine Beurteilung der in dieser Arbeit verwendeten Modellierung zur Berechnung der Zustandsgrößen. Weitere Vergleichsdaten, die auf Grundlage des idealen Gasgesetzes berechnet wurden (siehe Gleichungen 4.11 und 4.12), sind ebenfalls in den Abbildungen enthalten.

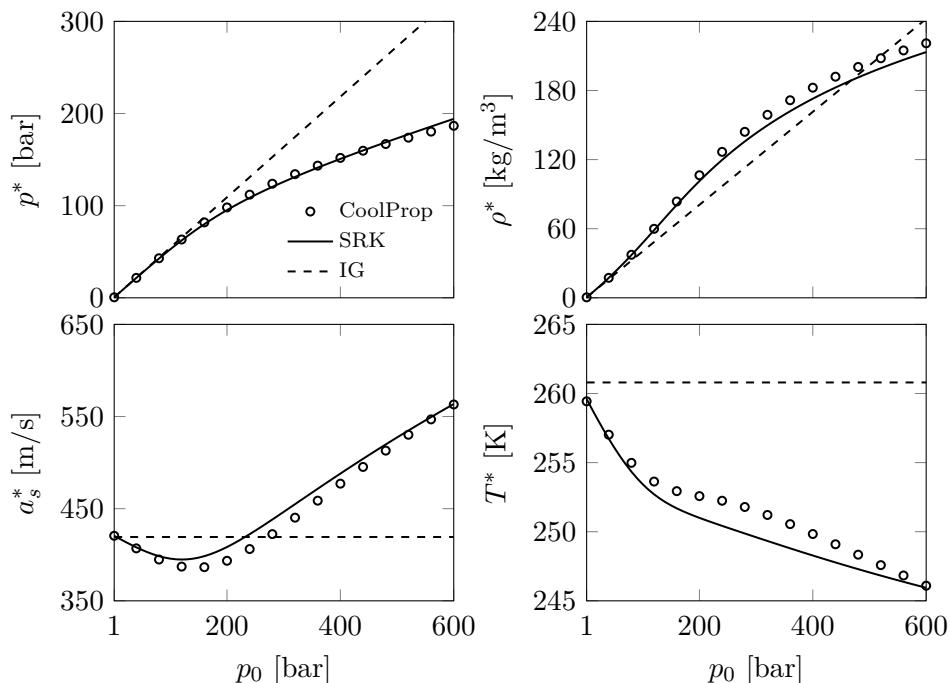


Abbildung 4.4. Kritische Größen für Methan bei einer Totaltemperatur von 300 K.

Der kritische Druck  $p^*$  von Methan zeigt bis zu einem Totaldruck von 150 bar einen linearen Anstieg. Danach flacht der Verlauf leicht ab und es wird ein maximaler kritischer Druck von 194 bar bei  $p_0 = 600$  bar erreicht. Es ist eine sehr gute Übereinstimmung der SRK-Werte mit den CoolProp-Werten festzustellen. Die maximale Abweichung beträgt 4.0 % bei 600 bar, dem höchsten hier betrachteten Druck. Wird der kritische Druck mit dem idealen Gasgesetz berechnet, kommt es zu einer Überschätzung über den gesamten Druckbereich, wobei die Diskrepanzen bis zu einem Druck von 150 bar zu vernachlässigen sind.

Die expliziten Gleichungen für die Berechnung der kritischen Größen sind Funktionen des Verhältnisses der spezifischen Wärmekapazitäten bei Totalbedingungen, welche wiederum eine Temperatur-, aber keine Druckabhängigkeit aufweisen. Dies führt zu einem linearen Verlauf aller kritischen Größen unter Anwendung der Idealgasthermodynamik.

Für die kritische Dichte zeigt sich ein ähnlicher, monoton steigender Verlauf. Die Werte der SRK-ZGL werden über den kompletten Druckbereich mit einer maximalen Abweichung von  $-5.8\%$  bei einem Totaldruck von 300 bar leicht unterschätzt. Der Verlauf der kritischen Schallgeschwindigkeit unterscheidet sich grundlegend von den bis dato diskutierten Verläufen für den Druck und die Dichte und wird von der SRK-ZGL mit maximal  $4.0\%$  überschätzt. Die Werte für die IG-ZGL bleiben auf einem Wert konstant und sind somit nicht in der Lage den Verlauf weder qualitativ noch quantitativ wiederzugeben. Die kritische Temperatur zeigt einen monotonen Abfall. Im mittleren Totaldruckbereich wird die Temperatur um maximal  $-0.8\%$  von der SRK-ZGL unterschätzt. Die kritischen Größen von Stickstoff sind in Abbildung C.1 dargestellt und werden in Kapitel 5 diskutiert.

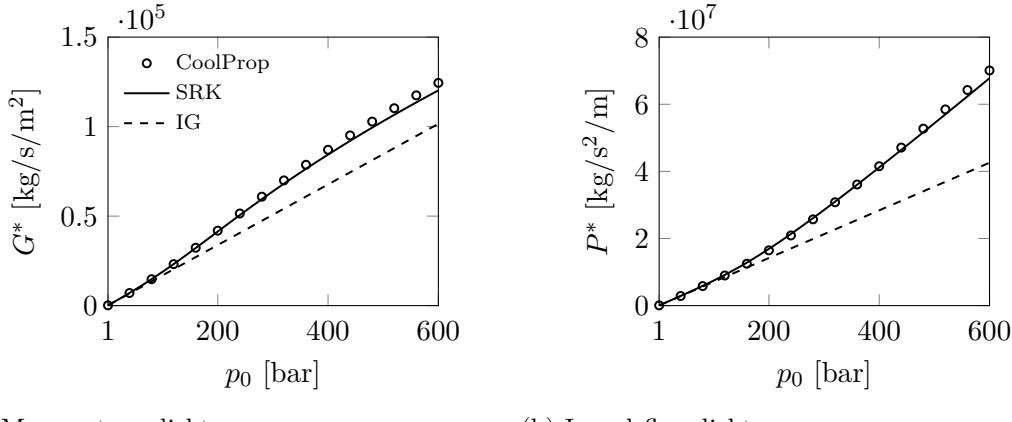


Abbildung 4.5. Vergleich der Massenstrom- und Impulsflussdichte für verschiedene ZGL.

Wichtige Kenngrößen für die Beurteilung der Hochdruckeindüsung sind der von den kritischen Größen abgeleitete Massenstrom  $\dot{m}^*$  und Impulsfluss  $\dot{M}^*$ . Sie werden aufgrund der eindimensionalen Betrachtung in ihrer normierten Form, als Massenstromdichte  $G^*$  und Impulsflussdichte  $P^*$ , diskutiert. Die Massenstromdichte für Methan bei den bekannten Totalbedingungen ist in Abbildung 4.5a zu sehen. Die Übereinstimmung des SRK-Verlaufs mit den CoolProp-Daten ist über den gesamten Druckbereich sehr gut, positiv bedingt durch die sich ausgleichenden Über- und Unterschätzungen der Schallgeschwindigkeit und der Dichte. Die maximale Abweichung der SRK- von den CoolProp-Werten beträgt  $-3.4\%$  für den größten betrachteten Druck. Die Massenstromdichte der IG-ZGL weicht um maximal  $-22.6\%$  bei einem Druck von 340 bar von den CoolProp-Werten ab. Für die Impulsflussdichte in Abbildung 4.5b steigen die Diskrepanzen der von der IG-ZGL berechneten Werte auf bis zu  $-39.2\%$  für  $p_0 = 600$  bar. Mit der SRK-ZGL gelingt wiederum eine sehr gute Vorhersage, die größte Abweichung von den CoolProp-Daten beträgt  $-3.3\%$  bei  $p_0 = 600$  bar. Wird die Modellierung als Gesamtes betrachtet zeigt sich, dass die Berechnung der kritischen Größen mit der kubischen ZGL von SRK sehr gelungen ist. Es ließen sich zwar ZGL finden, die die Eigenschaften besser wiedergeben, allerdings müsste die Umsetzbarkeit in

Bezug auf Mischungen, Phasengleichgewichtsberechnung und insbesondere Rechenaufwand für die CFD genauer untersucht werden.

## 4.5 Relative Massenstrom- und Impulsflussdichte

Für den Vergleich der beiden Modellierungen, der Realgasthermodynamik und der Idealgasthermodynamik, bietet sich die relative Massenstromdichte  $\Gamma$ , deren Definition von Maytal [108] übernommen wurde, und die analog dazu deklarierte relative Impulsflussdichte  $\Psi$  an:

$$\Gamma = \frac{G_{\text{rg}}^*}{G_{\text{ig}}^*}, \quad \Psi = \frac{P_{\text{rg}}^*}{P_{\text{ig}}^*}. \quad (4.21)$$

Ist der Wert von  $\Gamma$  und/oder  $\Psi$  kleiner 1 wird der Massenstrom/Impulsfluss unter Anwendung des idealen Gasgesetzes überschätzt, im Umkehrschluss für Werte größer 1 unterschätzt. Die relativen Massenstrom- und Impulsflussdichten von Methan bei verschiedenen Temperaturen sind in Abbildung 4.6 dargestellt. Die Verläufe sind dabei in ihren reduzierten Größen dargestellt, für die Temperatur wird die reduzierte Temperatur  $T_r = T/T_c$ , für den Druck wird der reduzierte Druck  $p_r = p/p_c$  verwendet. Aufgrund der möglichen Betriebspunkte in der Anwendung wurde die maximale Temperatur auf  $T_0 = 500$  K und der maximale Druck auf  $p_0 = 800$  bar festgelegt. In reduzierten Größen ergibt dies eine maximale reduzierte Temperatur von 2.6 und einen reduzierten Druck von 17.4. Alle dargestellten Verläufe für die relative Massenstromdichte  $\Gamma$  zeigen ein lokales Maximum zwischen  $p_{r,0} \approx 3.5$  und  $p_{r,0} \approx 8$ , siehe Abbildung 4.6a. Dabei verschiebt sich die Position des Maximums für höhere Temperaturen zu höheren Drücken und die Absolutwerte nehmen stetig ab. Bei der niedrigsten Totaltemperatur von  $T_{r,0} = 1.2$  wird ein Maximum von 1.79 erreicht. Der Wert, der mit der Realgasthermodynamik berechneten Massenstromdichte, ist somit um 79 % größer als derjenige der Idealgasthermodynamik. Für höhere Totaltemperaturen nehmen die Abweichungen ab. Für die höchste Totaltemperatur die im Rahmen dieser Diskussion betrachtet wird, beträgt die Diskrepanz noch 2.2 %.

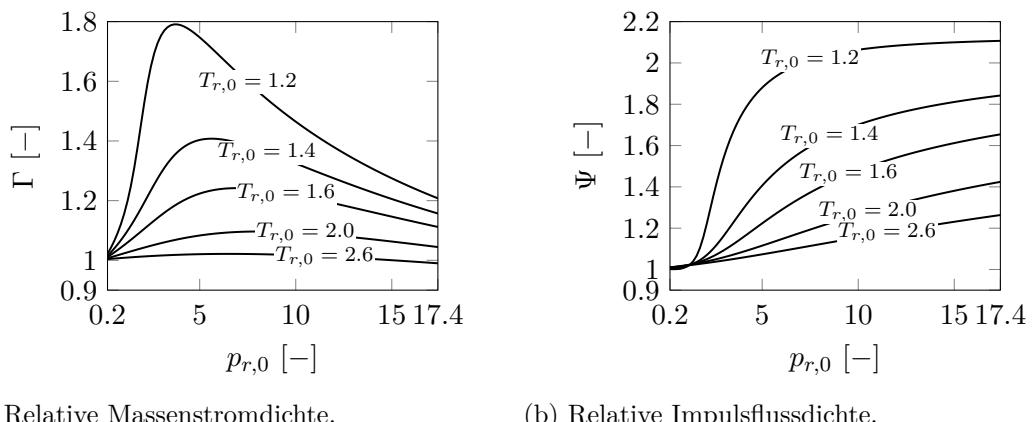


Abbildung 4.6. Relative Massenstrom- und Impulsflussdichte für Methan bei einem reduzierten Druck von  $0.2 \leq p_{r,0} \leq 17.4$  und einer reduzierten Total-Temperatur  $T_{r,0}$  von 1.2, 1.4, 1.6, 2.0 und 2.6.

Für die relative Impulsflussdichte in Abbildung 4.6b sind noch größere Abweichungen von der Idealgasmodellierung zu verzeichnen. Wiederum sind die Diskrepanzen für die niedrigste Temperatur am größten und für die höchste Temperatur am kleinsten. Die Kurvenverläufe zeigen aber kein Extremum sondern steigen monoton bis zum maximalen Totaldruck. Für die niedrigste reduzierte Totaltemperatur von 1.2 ergibt sich ein maximaler Wert von 2.11 bei  $p_{r,0} = 17.4$ . Da nicht nur Methan als Brennstoff, sondern auch Stickstoff als Testgas für die Prüfstände interessant ist, wurde die gleiche Auswertung für Stickstoff vorgenommen, siehe Abbildung C.3. Der betrachtete Bereich erstreckt sich dabei von einer reduzierten Temperatur von 1.3 bis 4.0 und einen maximalen Druck von  $p_{r,0} = 23.6$ . Die Abweichungen zwischen Ideal- und Realgas sind geringer als bei Methan.

## 4.6 Korrelation

In der Industrie und/oder in eindimensionalen Auslegungstools ist es wenig vorteilhaft, einen iterativen Algorithmus zur Berechnung der kritischen Massen- und Impulsflussdichte zu verwenden. Entweder sind unter Umständen die nötigen thermodynamischen Beziehungen nicht bekannt, oder die Rechenzeiten, die durch die Ausführung des Algorithmus entstehen, müssen angesichts der Gesamteffizienz vermieden werden. Da es aufgrund der Temperatur- und Druckabhängigkeit der kubischen ZGL von Soave, Redlich und Kwong [151] keine analytische Lösung für das Problem gibt, wurde eine Korrelation für die beiden Größen entwickelt. Betrachtet man die Verläufe der relativen Impulsflussdichte von Methan in Abbildung 4.6b und Stickstoff in Abbildung C.3b, lässt sich ein strikt monotones Verhalten mit einem Wendepunkt feststellen. Die Werte für niedrige und hohe Drücke streben dabei einem Grenzwert entgegen. Ein solches Verhalten kann von der vier-parametrischen logistischen Regressionsfunktion [15] abgebildet werden und lautet für die relative Impulsflussdichte:

$$\Psi(p_{r,0}, T_{r,0}) = \left( \frac{E - H}{1 + \left(\frac{p_{r,0}}{G}\right)^F} + H \right). \quad (4.22)$$

Die Temperaturabhängigkeit wird von den Modellparametern  $E$  bis  $H$  wiedergegeben. Die relative Massenstromdichte  $\Gamma$  kann mittels einer Übertragungsfunktion  $\tilde{\Gamma}$ , einer Funktion des reduzierten Kompressibilitätsfaktors bezogen auf die Plenumsbedingungen  $Z_{r,0}$  und der reduzierten Totaltemperatur  $T_{r,0}$ , in die gleiche, s-förmige Form gebracht werden:

$$\tilde{\Gamma} = \Gamma \sqrt{Z_{r,0}} + T_{r,0} = \left( \frac{A - D}{1 + \left(\frac{p_{r,0}}{C}\right)^B} + D \right) \quad \text{mit} \quad \Gamma = \frac{\tilde{\Gamma} - T_{r,0}}{\sqrt{Z_{r,0}}}. \quad (4.23)$$

Die s-förmige, logistische Regressionsfunktion wird durch die untere  $A(E)$  und obere Asymptote  $D(H)$  charakterisiert. Die Steigung  $B(F)$  gibt den Gradienten und  $C(G)$  den Wendepunkt an, der durch einen Vorzeichenwechsel charakterisiert wird. Jede der acht Charakteristiken  $A$  bis  $H$  wird als Funktion der reduzierten Totaltemperatur und der fluidabhängigen Koeffizienten  $a_1$  bis  $a_4$  dargestellt:

$$A = f(T_{r,0}) = a_1 e^{(a_2 T_{r,0})} + a_3 e^{(a_4 T_{r,0})} \quad (4.24)$$

Für die Massenstromdichte  $G_{\text{rg}}^*$  und die Impulsflussdichte  $P_{\text{rg}}^*$  ergeben sich folgende explizite Gleichungen:

$$G_{\text{rg}}^* = \Gamma G_{\text{ig}}^* = \Gamma C_{\text{ig}}^* \frac{p_0}{\sqrt{R_m T_0}} = \Gamma \gamma_0^{1/2} \left( \frac{2}{1 + \gamma_0} \right)^{\frac{\gamma_0 + 1}{2(\gamma_0 - 1)}} \frac{p_0}{\sqrt{R_m T_0}} \quad (4.25)$$

und

$$P_{\text{rg}}^* = \Psi P_{\text{ig}}^* = \Psi \rho_0 R_m T_0 \gamma_0 \left( \frac{2}{\gamma_0 + 1} \right)^{\frac{\gamma_0}{\gamma_0 - 1}}. \quad (4.26)$$

Abbildung 4.7 zeigt einen Vergleich der für Methan erzielten Korrelationen. Für Stickstoff wird auf Abbildung C.4 verwiesen. Für beide Korrelationen kann eine sehr gute Übereinstimmung mit den iterativ erzeugten Daten erzielt werden. Durch die Dominanz der nicht-linearen Effekte für niedrige Temperaturen kommt es in diesen Bereichen zu größeren Diskrepanzen.

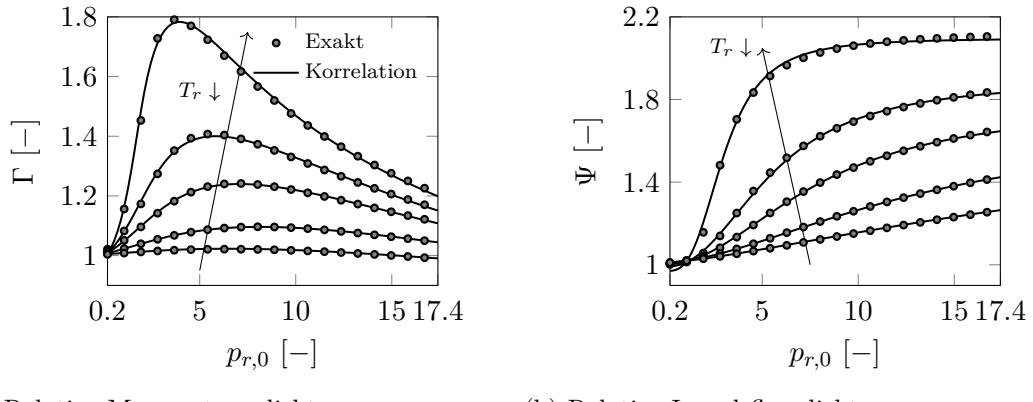


Abbildung 4.7. Relative Massenstrom- und Impulsflussdichte für Methan bei einem reduzierten Druck von  $0.2 \leq p_{r,0} \leq 17.4$  und einer reduzierten Totaltemperatur  $T_{r,0}$  von 1.2, 1.4, 1.6, 2.0 und 2.6.

Um die vorgeschlagenen Korrelationen zu bewerten, wird eine quantitative Evaluierung durchgeführt. Dazu wird der maximale Fehler  $\max(\epsilon)$ , der mittlere Fehler  $\bar{\epsilon}$  und die Standardabweichung  $\sigma$  berechnet. Bezugswerte sind jeweils die Werte für  $\Gamma$  und  $\Psi$ , die sich aus dem eindimensionalen Algorithmus ergeben:

$$\epsilon = \frac{\phi_{\text{Exakt}} - \phi_{\text{Korrelation}}}{\phi_{\text{Exakt}}}, \quad \bar{\epsilon} = \frac{1}{N} \sum_i^N \epsilon_i, \quad \sigma = \sqrt{\frac{1}{N-1} \sum_i^N (\epsilon_i - \bar{\epsilon})^2}.$$

Die maximale Abweichung der Korrelation für Methan beträgt  $-2.69\%$  für die Massenstromdichte und  $-4.75\%$  für die Impulsflussdichte. Beide Werte werden für die niedrigste Temperatur und für einen niedrigen reduzierten Druck erzielt. Der mittlere Fehler und die Standardabweichung ist mit  $0.0\%$  und  $0.18\%$  für die Impulsflussdichte als sehr gering zu bezeichnen. Die Werte sind zusammen mit den Werten für Stickstoff in Tabelle C.2 aufgelistet. Für die fluidabhängigen Koeffizienten siehe Tabelle C.1 und Abbildung C.5. Der Algorithmus zur Berechnung der kritischen Größen, die Korrelation sowie eine Validierung mittels CFD wurde in Banholzer und Pfitzner [11] vorveröffentlicht.

## Kapitel 5

# Ergebnisse

Das Ergebniskapitel ist in vier Abschnitte unterteilt. Zu Beginn wird im ersten Teil 5.1 die Geometrie des Referenzinjektors vorgestellt und eine erste detaillierte Betrachtung der Hochdruckeindüsung durchgeführt, die unter anderem eine Netzunabhängigkeitsstudie und Verläufe für die transiente Eindringtiefe und das volumetrische Wachstum des Brennstoff-Freistrahls enthält. Im folgenden Abschnitt 5.2 werden die Einflüsse der Realgas- und der Turbulenzmodellierung auf den Gemischbildungsprozess untersucht. Eine ähnliche Diskussion wird in Teil 5.3 durchgeführt, in dem nicht der Modellierungseinfluss, sondern der Einfluss von Düsengeometrie, Temperatur und Fluid untersucht wird. Der größte Abschnitt, die Betrachtung von anwendungsrelevanten Testfällen in 5.4, vergleicht die durchgeführten Simulationen mit den Experimenten, validiert die entwickelten numerischen Methoden und geht nochmals auf beeinflussende Faktoren ein.

### 5.1 Referenzinjektor

Der in dieser Arbeit verwendete Referenzinjektor wurde von der Woodward L'Orange GmbH<sup>1</sup> zur Verfügung gestellt und an der ETH in Zürich am Prüfstand verbaut. Das Unternehmen mit Sitz in Stuttgart ist führend in der Einspritztechnologie großer Dieselmotoren und betreute das FVV-Projekt<sup>2</sup> [13] über die gesamte Laufzeit. Bei dem Injektor handelt es sich um einen ausrangierten Dieselinjektor mit einem einzigen, in der Mitte des Sacklochs zentral angeordneten Spritzloch. Die durch ein Magnetventil erzeugten Kräfte öffnen und schließen die Nadel, welche den Nadelsitz freigibt und so die Injektion des Brennstoffs ermöglicht. Abbildung 5.1 zeigt eine zweidimensionale schematische Darstellung des Injektors zusammen mit der verwendeten Brennkammer. Die schraffierte Flächen kennzeichnen das Vollmaterial, die weißen Flächen das Gasvolumen. Der Brennstoff strömt vom Einlass kommend durch den Ringspalt zwischen Injektor und Nadel, dem sogenannten Nadelsitz, in das Sackloch und expandiert durch die Düse in die Brennkammer. Der maximale Nadelhub, gemessen als kürzeste axiale Distanz zwischen Nadel und Injektor, beträgt  $l_{n,\max} = 0.4$  mm. Die Düse hat einen Durchmesser von  $d = 0.7$  mm. Die Länge der Düse entspricht dem Durchmesser  $l = d = 0.7$  mm. Die Brennkammer wird als Zylinder mit konstantem Volumen mit einer axialen und radialen Ausdehnung von  $L/d = 160$  und  $D/d = 85$  modelliert.

#### Auswertekriterien

Bevor die Simulationsergebnisse vorgestellt und diskutiert werden, bedarf es einer kurzen Erläuterung der verschiedenen Größen, welche zur Auswertung der Daten dienen. Der Massenstrom wird direkt am Düsenaustritt ausgewertet und berechnet sich mit:

$$\dot{m} = \int_A \rho u \, dA = \int_r 2\pi r \rho u \, dr. \quad (5.1)$$

---

<sup>1</sup><http://www.lorange.com>

<sup>2</sup>Forschungsbereich - Motoren, Planungsgruppe 3 - Selbstzündung, Name des Projekts - Gas-Diesel-Brennverfahren, Vorhaben Nr. 1236.

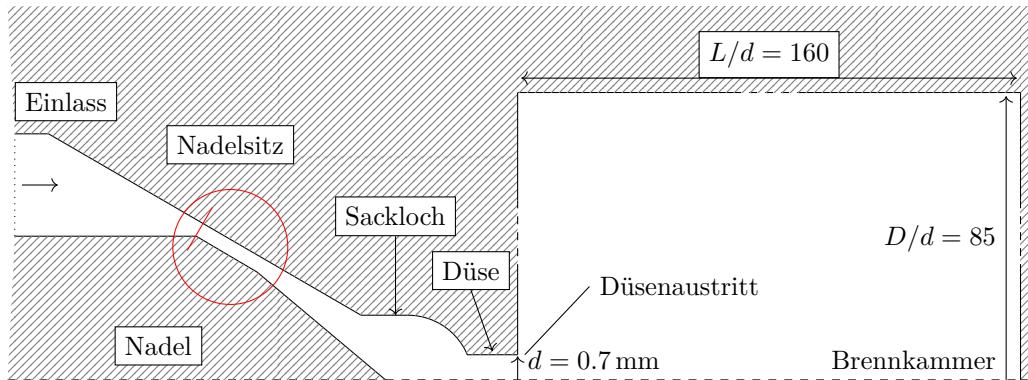


Abbildung 5.1. Schematische Darstellung des in dieser Arbeit verwendete Referenzinjektors.

Das Integral für den Impulsfluss gleicht dem Massenstrom mit quadrierter Geschwindigkeit:

$$\dot{M}_n = \int_A \rho u^2 dA = \int_r 2\pi r \rho u^2 dr. \quad (5.2)$$

Der Durchflusskoeffizient beschreibt das Verhältnis des in der CFD erreichten Massenstroms am Düsenaustritt zum maximal bei  $Ma = 1$  erreichbaren Massenstrom unter Annahme eines Blockprofils:

$$C_d = \frac{\dot{m}}{\dot{m}^*}. \quad (5.3)$$

Ein ähnlicher Koeffizient lässt sich für den Impulsfluss definieren. Wichtig hierbei ist, dass dieser Koeffizient nicht auf einen Maximalwert von 1 beschränkt ist sondern durchaus Werte größer 1 annehmen kann. Die in dieser Arbeit verwendete Definition des Koeffizienten ist

$$C_M = \frac{\dot{M}_n}{\dot{M}_n^*}. \quad (5.4)$$

Die axiale Position des Brennstoffstrahls, die sogenannte Eindringtiefe  $Z_t$ , wird bei einem Massenbruch von  $w_{\text{Brennstoff}} = 0.005$  auf der Symmetriearchse gesetzt. Dieser Wert wird auch für die Brennstoffeinhüllende verwendet, einer Kurve, bei der der Massenbruch des Brennstoffs konstant 0.005 beträgt. Als weiterer Parameter dient das volumetrische Strahlwachstum, welches das vom Brennstoff einschließende Volumen wiedergibt und mit dem Kamervolumen normiert wird:

$$\tilde{V}_j = V_j / V_{ch}. \quad (5.5)$$

### Wahl des Betriebspunktes

Für eine erste Betrachtung der Hochdruckeindüsing von Methan in ruhende Luft unter Verwendung des Referenzinjektors wurde ein Betriebspunkt ausgewählt, deren Charakteristik zum späteren realen Anwendungsfall passt, bei dem aber Kondensationseffekte ausgeschlossen werden können. Für die Auswahl des Betriebspunktes wurden die Prüfstandbedingungen der ETHZ herangezogen. Durch die Verwendung eines Maximators<sup>3</sup> wird das aus der Gasflasche kommende Methan nochmals komprimiert und auf einen Totaldruck von bis zu 300 bar

<sup>3</sup>Hochdruckkompressor zum Verdichten von Gasen (Druckübersetzer)

verdichtet. Dieser wurde zusammen mit der Totaltemperatur von 294 K für die Simulationen übernommen. Die generische Brennkammer kann bis zu einem maximalen Druck von 75 bar betrieben werden. Da sich bei diesen Bedingungen bereits Kondensationseffekte zeigten und diese bei einer ersten Betrachtung nicht beachtet werden sollen, wurde der Gegendruck auf 100 bar erhöht. Ein Vergleich mit experimentellen Daten ist für diesen Betriebspunkt somit nicht mehr möglich. Es können aber generische Studien durchgeführt werden, die die Kondensationsneigung erhöhen, ohne das diese Effekte aber tatsächlich auftreten. Der strömungsmechanische kritische Druck für Methan bei den genannten Plenumsbedingungen beträgt 122.67 bar, es ist somit von einem moderat expandierten Freistrahrl auszugehen. Für die Berechnung des Wertes wurde die SRK-ZGL verwendet. Da für die ersten Simulationen die Netzbewegung noch nicht implementiert und das simulierte Öffnen der Gasnadel nicht möglich war, wird diese zu Beginn der Arbeit mit einer Druckerhöhung am Nadelsitz modelliert (siehe rote Linie in Abbildung 5.1 bzw. Fläche  $A_{n,1}$  in Abbildung 5.25a). Dazu wird der Druck über die Randbedingung von dem Kammerdruck auf den Brennstoffdruck innerhalb 0.1 ms linear erhöht.

### Netzunabhängigkeitsstudie

Die Netzunabhängigkeitsstudie wurde mit drei unterschiedlichen Auflösungen durchgeführt, deren Eigenschaften der Tabelle 5.1 entnommen werden können. Das größte Gitter mit einer Düsenauflösung von 20 Zellen in radialer und 28 Zellen in axialer Richtung und linear größer werdenden Zellen im Fernfeld des Injektors enthält 54 690 Gitterzellen. Für die zwei Verfeinerungsstufen wird die Zellgröße in axialer und radialer Richtung jeweils halbiert. Aufgrund des rotationssymmetrischen Aufbaus der Rechendomain werden so Gittergrößen von 218 760 und 875 040 erzielt. Eine Studie zu Beginn zeigte, dass die Ergebnisse des rotationssymmetrischen Gitters identisch mit den Ergebnissen eines dreidimensionalen Gitters sind und diese Vereinfachung getroffen werden kann. Da die Ziele dieser Arbeit die numerische Modellierung und Simulation des Freistrahls und die Beurteilung der Gemischbildung sind, wurde die Netzunabhängigkeit auf die für die Eindüsung wichtigsten Charakteristiken bezogen: den Massenstrom  $\dot{m}$  und den Impulsfluss  $\dot{M}_n$  am Düsenaustritt, den zeitlichen Eindringtiefenverlauf  $Z_t$  sowie die axiale und radiale Konzentrationsverteilung des Gemisches in Form des volumetrischen Wachstums  $\tilde{V}_j$ . Für die Simulationen in dieser Arbeit werden zur räumlichen Diskretisierung zentrale Differenzen zweiter Ordnung mit der Limitierung von van Albada [165] verwendet. Der Zeitableitungsterm wird mit einer Mischfunktion des impliziten Euler- und des semiimpliziten Crank-Nicolson-Verfahrens [39] mit einer Gewichtung von 0.5 diskretisiert. Am Einlass wird eine Totaldruck-Randbedingung aufgeprägt. Aufgrund des geschlossenen Kamervolumens ist keine Auslassrandbedingung notwendig. Die drei untersuchten Berechnungsgitter wurden in der Nähe der Wände so verfeinert, dass die wandnahe Strömung mit einer Wandfunktion beschrieben werden konnte ( $y^+ \approx 30 - 70$ ). Für die ersten Simulationen wurde die Turbulenz mit dem  $k\omega$ SST-Modell von Menter und Esch [109] modelliert.

Der Verlauf der normierten Eindringtiefe  $Z_t/d$  über der Zeit  $t$  ist in Abbildung 5.2a zu sehen. Vergleicht man die Eindringtiefe der drei verschiedenen Auflösungen *Gitter1-Gitter3* lassen sich nur marginale Unterschiede feststellen. Die transienten Verläufe sind sehr ähnlich. Lediglich für den Beginn der Eindüsung sowie für die maximale Eindringtiefe nach 2 ms können geringe Unterschiede herausgearbeitet werden, die Charakteristik bleibt aber erhalten. Die zeitliche Vorhersage der axialen Ausbreitung des Brennstoffs ist bereits für

Auflösung	<i>Gitter1</i>	<i>Gitter2</i>	<i>Gitter3</i>
$\Delta r/d$ in Düse [-]	20	40	80
$\Delta x/d$ in Düse [-]	28	56	112
Gitterzellen [-]	54 690	218 760	875 040
$\dot{m}$ [g/s]	21.00	21.43	21.48
$\dot{M}_n$ [kgm/s <sup>2</sup> ]	9.23	9.34	9.37
$\max(Z_t/d)$ [-]	83.92	84.89	85.25
$\max(\tilde{V}_j)$ [%]	2.95	3.15	3.19

Tabelle 5.1. Details des Berechnungsnetzes für die Netznahängigkeitsstudie bei einem Gegendruck von 100 bar.

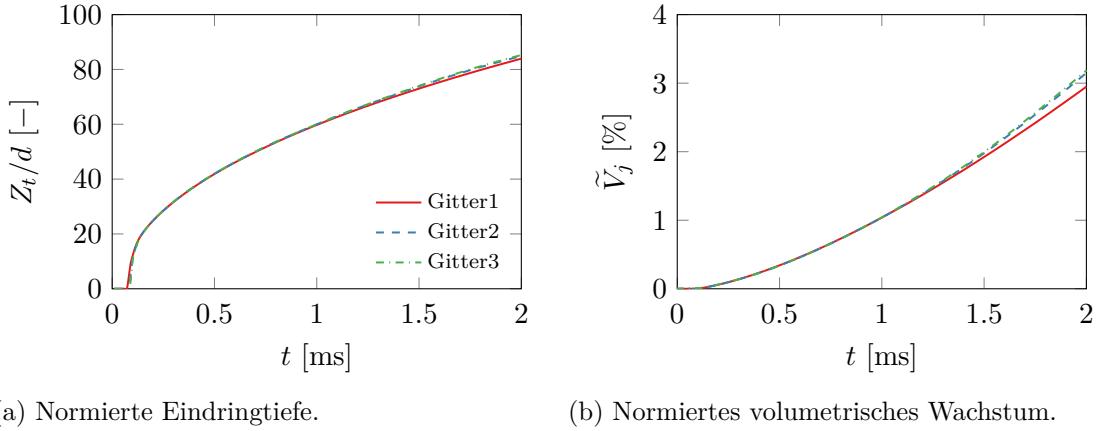


Abbildung 5.2. Netznahängigkeitsstudie für die trans-/supersonische Injektordurchströmung.

eine eher grobe Auflösung möglich. Das volumetrische Wachstum des Freistrahls normiert mit dem Kamervolumen  $\tilde{V}_j$  ist in Abbildung 5.2b dargestellt. Wiederum ist die Form der Kurven für alle drei Gitter identisch. *Gitter2* zeigt im Vergleich zu *Gitter1* eine um nach 2 ms 6.8 % höhere Füllung der Mischkammer, was zum einen auf die höhere axiale Eindringtiefe zurückzuführen ist, aber auch auf eine höhere radiale Brennstoffausbreitung deutet. Für *Gitter3* hingegen sind die Änderungen wiederum sehr klein, hier beträgt der Zuwachs des volumetrischen Wachstums 1.3 %. Für die Auswertung des Massenstroms wird die stationäre Injektordurchströmung betrachtet. Der zugehörige Wert wird über einen Zeitraum von 0.5 ms gemittelt. Der stationäre Massenstrom für *Gitter1* beträgt 21.00 g/s. Durch eine erste Verfeinerung auf *Gitter2* erhöht sich der Massenstrom um 2.0 % auf 21.43 g/s, die zweite Verfeinerung steigert den Wert nochmals leicht auf 21.48 g/s. Sehr ähnlich verhält sich der Impulsfluss  $\dot{M}_n$  mit Werten von 9.23 kg m/s<sup>2</sup>, 9.34 kg m/s<sup>2</sup> und 9.37 kg m/s<sup>2</sup> für die drei Verfeinerungsstufen. Da alle betrachteten Charakteristiken, der Massenstrom, der Impulsfluss, die Eindringtiefe als auch die Füllung der Mischkammer, von *Gitter2* sehr gut wiedergegeben werden, basieren alle in dieser Arbeit behandelten Simulationen mit einem Gegendruck von 100 bar auf der zweiten Auflösung *Gitter2*. Der Massenstrom, der Impulsfluss und die nach 2 ms erreichte Eindringtiefe sowie die maximale volumetrische

Ausbreitung des Freistrahls sind in Tabelle 5.1 zusammengefasst.

### Erste Betrachtung

Der stationäre Massenstrom für die Eindüsung von Methan bei  $p_0 = 300$  bar und  $T_0 = 294$  K in Luft bei  $p_{ch} = 100$  bar und gleicher Temperatur beträgt 21.43 g/s und wird ca. 0.25 ms nach Eindüsungsbeginn erreicht. Der theoretisch zu erreichende Massenstrom mit einer Machzahl von 1 beträgt 25.26 g/s, der Durchflusskoeffizient des Injektors berechnet sich somit zu  $C_d = 0.85$ . Der stationäre Impulsfluss beträgt 9.34 kg m/s<sup>2</sup> und wird zum gleichen Zeitpunkt erreicht wie der Massenstrom. Mit der Annahme, dass der Düsenaustritt mit  $\text{Ma} = 1$  durchströmt wird, lässt sich der theoretisch zu erreichende Impulsfluss mit  $\dot{M}_n^* = \rho^* a_s^* A^* = 11.20$  kg m/s<sup>2</sup> berechnen. Der zuvor definierte Impulskoeffizient  $C_M$  beträgt 0.83.

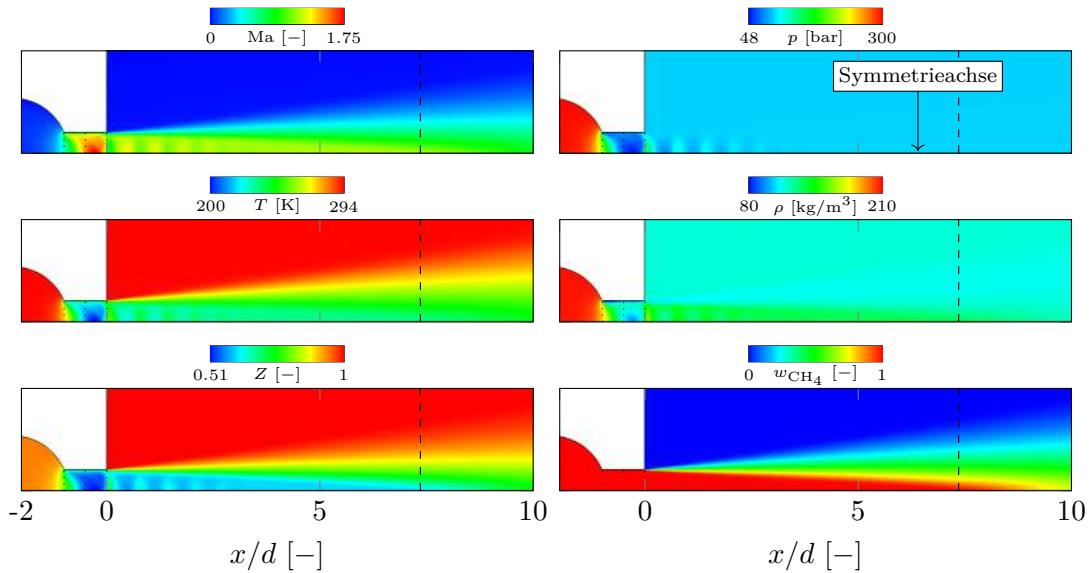


Abbildung 5.3. Darstellung der Strömungsgrößen im Nahbereich der Düse für die Referenzsimulation mit einem Totaldruck von 300 bar bei einem Gegendruck von 100 bar ( $T_0 = T_{ch} = 294$  K).

Abbildung 5.3 zeigt die Machzahl  $\text{Ma}$ , den Druck  $p$ , die Temperatur  $T$ , die Dichte  $\rho$ , den Kompressibilitätsfaktor  $Z$  und den Massenbruch von Methan  $w_{\text{CH}_4}$  im Nahbereich der Düse. Vom Nadelsitz kommend wird das Fluid am Übergang von Sackloch zu Spritzloch umgelenkt und beschleunigt, es bildet sich eine Prandtl-Meyer Expansion. Diese führt zu einer ersten Erhöhung der Geschwindigkeit, sodass die Strömung auf  $\text{Ma} > 1$  beschleunigt wird. Die scharfe Kante am Übergang führt zu einer Ablösung der Strömung in der ersten Hälfte der Düse, in welcher der Druck auf  $\approx 60$  bar sinkt. Die von der Kante initiierte Expansion setzt sich fort und in der zweiten Hälfte der Düse werden Machzahlen von 1.77 erreicht, Druck und Temperatur sinken auf 52 bar bzw. 200 K. Diese durch die Expansion hervorgerufenen Effekte lassen sich auch in den abgeleiteten Größen der Dichte und des Kompressibilitätsfaktors erkennen. In der Düse fallen die Werte von  $Z$  auf 0.51 ab. Kurz nach dem Düsenaustritt kommt es zu einem Stoß, die Strömung wird in den Unterschall auf  $\text{Ma} = 0.85$  verzögert. Der niedrige Umgebungsdruck in der Kammer sorgt für eine erneute Beschleunigung in den Überschall und es bildet sich die für einen Freistrahl typische

Stoßwellenstruktur, einer Abfolge von Expansions- und Verzögerungsvorgängen. Der letzte Konturplot in Abbildung 5.3 zeigt den Massenbruch von Methan. Der Potenzialkern des Freistrahls hat eine Länge von  $7.35x/d$  und ist als gestrichelte Linie eingezeichnet. Dessen Position wird über den Wert für den Massenbruch von Methan von  $w_{CH_4} = 0.995$  auf der Symmetrieachse bestimmt.

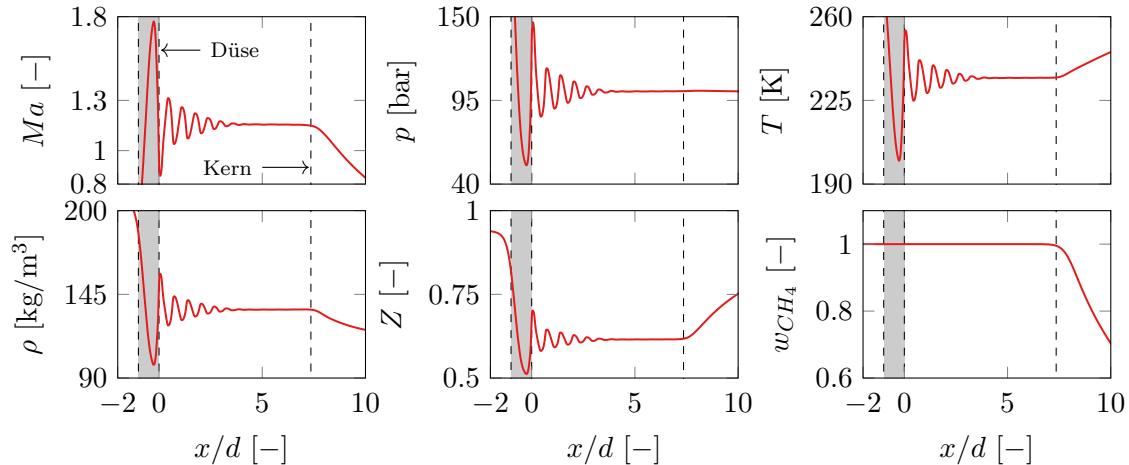


Abbildung 5.4. Strömungsgrößen auf der Symmetrieachse des Injektors.

Ein genaueres Bild der verschiedenen Strömungsgrößen auf der Symmetrieachse ist in Abbildung 5.4 dargestellt. Auch hier wurde die Darstellung auf den Düsenbereich von  $-2x/d$  bis  $10x/d$  eingegrenzt. Die grau hinterlegte Fläche markiert die Düse, die gestrichelte Linie die Länge des Potenzialkerns. Durch die eindimensionale Darstellung kann der Expansionsvorgang in und außerhalb der Düse gesondert betrachtet werden. In Folge der Umlenkung des Fluids vom Sackloch ins Spritzloch und der damit verbundenen Expansion kommt es zu sehr hohen Geschwindigkeiten mit maximalen Machzahlen von 1.77. Einhergehend mit den hohen Geschwindigkeiten nehmen Druck und Temperatur ab. Am Düsenaustritt wird der Brennstoff in den Unterschall verzögert, bevor eine erneute Expansion stattfindet. Es bilden sich insgesamt sechs Expansions- und Kompressionswellen, die zur Hälfte des Potenzialkerns abgeklungen sind. Das Fluid besitzt in der zweiten Hälfte des Potenzialkerns mit  $Ma = 1.16$  noch ein sehr hohes Geschwindigkeitsniveau. Mit Erreichen des Potenzialkernendes setzt die Mischung ein ( $w_{CH_4} < 1$ ), die Geschwindigkeit nimmt ab und das umgebende Kammerfluid und der Brennstoff vermischen sich. Des Weiteren steigt der Kompressibilitätsfaktor wieder an, da die Kammerbedingungen mit 100 bar und 294 K sehr nahe an den Idealgasbedingungen sind.

Die Brennstoffeinhüllenden für  $w_{CH_4} = 0.005$  und vier verschiedene Zeitpunkte sind in Abbildung 5.5 zu sehen. Bereits bei der ersten Momentaufnahme bei 0.5 ms hat der Brennstoff mit  $x/d = 42.0$  49 % von der maximalen Eindringtiefe  $x/d = 84.9$  bei  $t = 2$  ms erreicht. Dies stimmt sehr gut mit der Annahme überein, dass die axiale Eindringtiefe mit der Wurzel der Zeit skaliert. Diese Annahme ist Grundlage für alle verfügbaren Modelle zur korrelierenden Beschreibung der Eindringtiefe  $Z_t$ , siehe Abschnitt 2.6.3. Doch nicht nur für die axiale, auch für die radiale Ausbreitung lässt sich diese Wurzelabhängigkeit feststellen. Für die erste Momentaufnahme beträgt der radiale Abstand der Einhüllenden 7.7 bei einem maximalen Wert von 16.6 für 2 ms. Die Form des Freistrahls passt sehr gut zu der von Turner [164] vorgeschlagenen Einteilung des Strahlbilds in einen Potenzialkern, einen

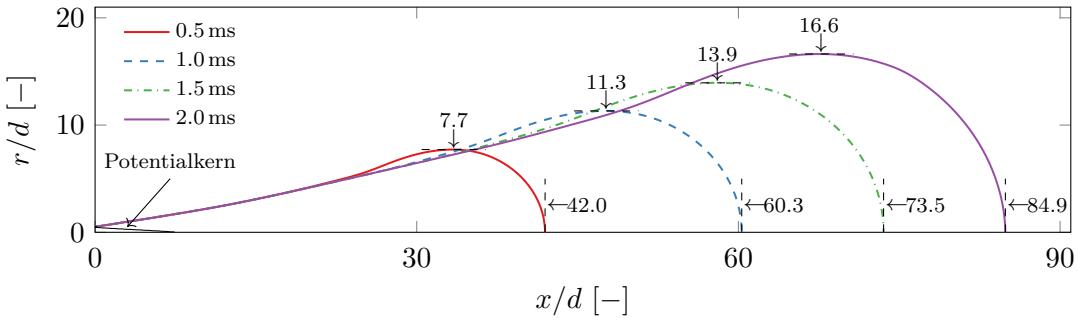


Abbildung 5.5. Brennstofffeinhüllende für den ersten Testfall.

stationären Anteil und einen sphärischen Wirbel, siehe Abbildung 2.13. Der Potenzialkern wird dabei über eine Isokontur von  $w_{\text{CH}_4} = 0.995$  definiert.

Aus der Brennstofffeinhüllenden ergibt sich durch die Reduktion der Ausbreitung auf die axiale Richtung die Eindringtiefe  $Z_t$ , die normiert mit dem Durchmesser in Abbildung 5.6a dargestellt ist. Nach einer gewissen Totzeit, in der der Brennstoff das Volumen des Nadel- sitzes und das Volumen des Sacklochs füllt, erfolgt in der ersten Zeit, bis  $\approx 0.2$  ms, eine sehr schnelle Ausbreitung in der Brennkammer. Nach Erreichen des maximalen Massenstroms flacht der Verlauf ab und gleicht der bereits angesprochenen Wurzeldarstellung. Zusätzlich zu dem simulativ bestimmten Verlauf der Eindringtiefe sind die Korrelationen aus Abschnitt 2.6.3 eingezeichnet, wobei für die Verläufe von Hill und Oullette [72] und Gerold und Pfitzner [56] die jeweiligen Grenzen der Konstante mit  $\Gamma = 2.9$  und  $\Gamma = 3.1$  verwendet wurden und der Bereich dazwischen farbig markiert wurde. Die in den Korrelationen vor kommenden Strömungsgrößen werden konsistent mit der SRK-ZGL berechnet. Die in der Simulation auftretende Totzeit des Brennstoffs bis zum Erreichen der Kammer wird für die Korrelationen übernommen. Es zeigt sich, dass alle Modelle die numerisch erzielte Eindringtiefe überschätzen. Bei der Modellierung von Abraham [1] treten die größten Diskrepanzen auf, für die Approximation von Gerold und Pfitzner [56] wird die beste Übereinstimmung mit einer maximalen Abweichung von 15 % zu Ende der Simulationszeit erzielt.

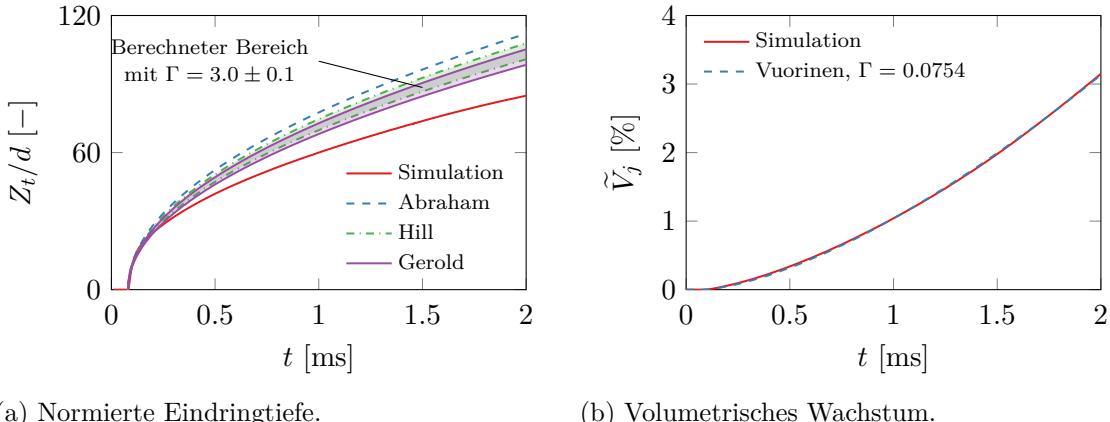


Abbildung 5.6. Axiale Eindringtiefe und volumetrisches Wachstum für den ersten Testfall.

Eine alternative Darstellung der Eindringtiefe ist in Abbildung 5.7a dargestellt. Um die

Proportionalität des Kurvenverlaufs von der Wurzel der Zeit zu verdeutlichen, wird diese auf der Abszisse aufgetragen, die Totzeit wird wiederum übernommen. Mit der Korrelation von Hill und Ouellette [72] und Gerold und Pfitzner [56] ist eine weitere Normierung der Eindringtiefen möglich:

$$\text{Hill: } \tilde{Z}_t = Z_t \left( \frac{\rho_{ch}}{\dot{M}_n} \right)^{1/4} \quad \text{und} \quad \text{Gerold: } \tilde{Z}_t = Z_t \left( \frac{\rho_{ch}^{1/3}}{\left( \dot{M}_n C_d \right)^{1/4} \rho_n^{1/12}} \right). \quad (5.6)$$

In der so entstandenen Abbildung 5.7b entspricht der Gradient dem Skalierungsfaktor  $\Gamma$  der Korrelationen. Für beide Modellierungen muss der Wert von  $\Gamma$  nach unten korrigiert werden, um eine Übereinstimmung mit der Simulation zu erzielen (Hill:  $\Gamma_H = 2.34$ , Gerold:  $\Gamma_G = 2.39$ ). Für die Darstellung und die Bestimmung von  $\Gamma$  mit der Methode der kleinsten Quadrate wurde der Beginn der Eindüsung auf den zeitlichen Nullpunkt verschoben.

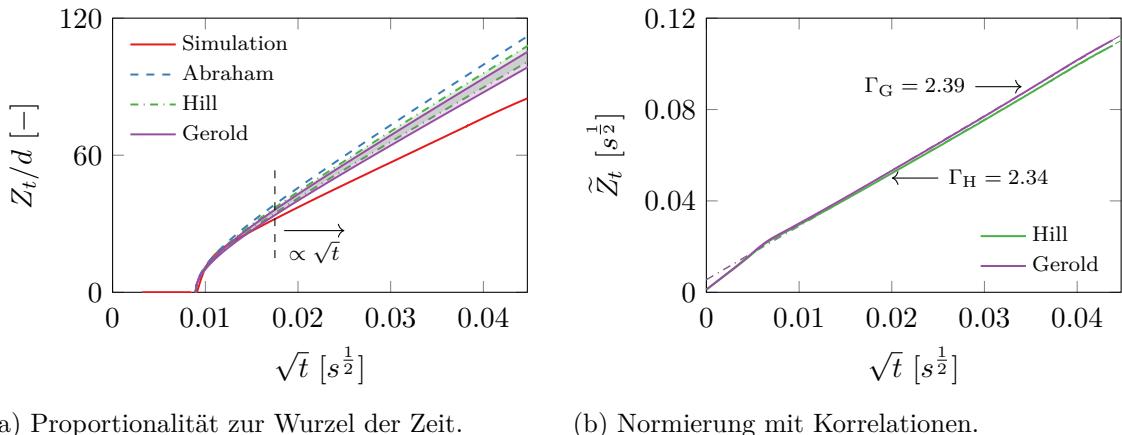


Abbildung 5.7. Alternative Darstellungen der axiale Eindringtiefe für den ersten Testfall.

Das volumetrische Wachstum ist in Abbildung 5.6b dargestellt. Für die Korrelation von Vuorinen [171] wurde der Skalierungsfaktor  $\Gamma$  mit der Methode der kleinsten Quadrate zu 0.0754 bestimmt. Durch den Skalierungsfaktor wird eine sehr gute Übereinstimmung der beiden Kurven erzielt. Sowohl das transiente Verhalten des volumetrischen Wachstums, als auch die absoluten Werte werden, bezogen auf die Ergebnisse der Simulation, korrekt wiedergegeben.

Im nächsten Schritt wird der Blick auf die Konzentrationsverläufe von Methan gerichtet. Der axiale Verlauf auf der Symmetriearchse kann Abbildung 5.8a entnommen werden. Mit Erreichen des Endes des Potenzialkerns setzt die Mischung ein und die Abnahme der Konzentration entspricht der Inversproportionalen des Düsenabstandes  $x$ , siehe Abschnitt 2.6.3. Die Ergebnisse der Simulation bestätigen dabei die Verbesserung des Ursprungsmodells von Chen und Rodi [29] durch Molkov [115] und Birch *et al.* [19]. Während das Modell von Birch *et al.* eine weitere Konstante, die axiale Verschiebung des Düsenursprungs hin zu einem virtuellen Ursprung, benötigt, wird im Molkov-Modell lediglich die Skalierungskonstante  $A$  angepasst. Ein angepasster Wert von  $A = 4.5$  führt für unseren Anwendungsfall zusammen mit einer Verschiebung des virtuellen Ursprungs um  $x_d = 2.5d$  für das Modell von Birch *et al.* zu einer sehr guten Übereinstimmung des Konzentrationsverlaufs. Sowohl das Ende

des Potenzialkerns und somit der Beginn der Mischung, als auch das Mischungsverhalten entlang der Symmetriearchse werden korrekt abgebildet. Für das Modell von Molkov wird die Länge des Potenzialkerns unterschätzt, wodurch es zu einer schnelleren Abnahme des Brennstoffs kommt. Ab einem axialen Düsenabstand von  $x/d \approx 35$  passt auch hier der Verlauf gut zu den Simulationsergebnissen. Die radialen Konzentrationsverläufe für fünf verschiedene Düsenabstände  $x/d = 20$  bis  $60$  im Abstand von  $\Delta x/d = 10$  sind in Abbildung 5.8b dargestellt. Die Profile wurden dabei in vertikaler Richtung mit dem Wert des Molenbruchs auf der Symmetrielinie normiert. In horizontaler, radialer Richtung erfolgt die Normierung mit dem maximalen radialen Abstand, für den in der Simulation ein Molenbruch für Methan größer  $1 \times 10^{-5}$  erzielt wird. Auch hier zeigt die Korrelation von Wu *et al.* [180] gute Übereinstimmungen und die Selbstähnlichkeit des Freistrahls für verschiedene Positionen wird bestätigt. Für die Korrelation wurde der positionsabhängige Skalierungsfaktor  $k = 0.5 \pm 0.1$  mit der Methode der kleinsten Quadrate bestimmt.

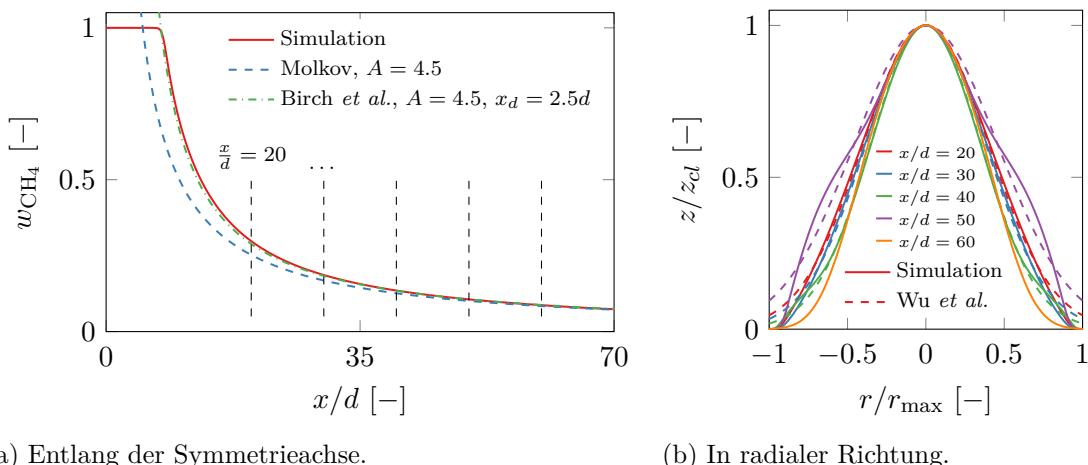


Abbildung 5.8. Konzentrationsverteilung des Brennstoffs auf der Symmetriearchse und in radialer Richtung für verschiedene axiale Abstände. Verglichen wird mit den Korrelationen von Molkov [115], Birch *et al.* [19] und Wu *et al.* [180].

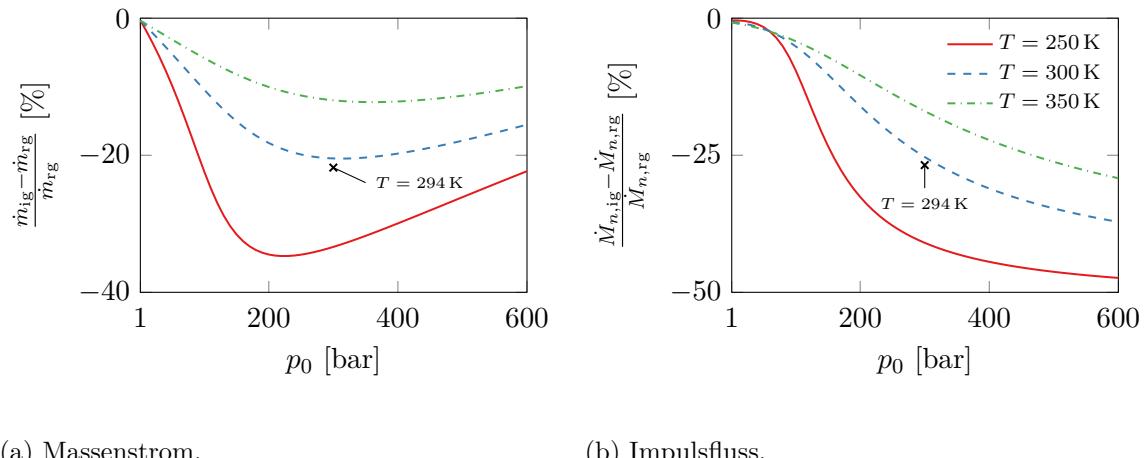
## 5.2 Modellierungseinflüsse

Die in dieser Arbeit durchgeführten Simulationen basieren auf vielen Modellen, die zu einem Gesamtpaket zusammengefügt wurden. Zwei Modellierungsaspekte lassen sich dabei besonders herausstellen. Der schon oft genannte thermodynamische, überkritische Betriebspunkt erzwingt die Verwendung einer konsistenten Realgasthermodynamik. Wie unterschiedlich die Ergebnisse der Simulation unter Verwendung der Idealgasmodellierung ausfallen und welche Fehler maximiert werden, zeigt Unterabschnitt 5.2.1. Der zweite wichtige Modellierungsaspekt bezieht sich auf die Turbulenzmodellierung des Freistrahls. Verschiedene Studien haben gezeigt, dass die Modellierung dieser entscheidend für den zeitlichen Verlauf und die radiale Ausbreitung des Freistrahls ist. Welche Unterschiede sich für den Referenzfall ergeben, wird in Unterabschnitt 5.2.2 beschrieben. Die einzelnen Untersuchungen werden, falls möglich, zuerst mit einer null- und eindimensionalen Betrachtung diskutiert und im

Anschluss mit der CFD modelliert. Dies wird in diesem und im folgenden Abschnitt 5.3 so gehandhabt.

### 5.2.1 Realgasthermodynamik

Eine erste Abschätzung der Modellierungsungenauigkeiten wird mit dem eindimensionalen Algorithmus aus Kapitel 4 getroffen. Abbildung 5.9 zeigt den mit der Realgasmodellierung normierten Massenstrom und Impulsfluss bei gesperrter Düse für drei verschiedene Totaltemperaturen 250 K, 300 K und 350 K und einen Druckbereich von 1 bis 600 bar. Für den Massenstrom in Abbildung 5.9a zeigt sich, dass dieser für alle aufgezeigten Betriebspunkte unterschätzt wird. Für niedrige Drücke und/oder hohe Temperaturen, Bereiche in denen die Idealgastthermodynamik durchaus Gültigkeit besitzt, ist die Abweichung vom Realgaswert geringer. Bei geringer werdenden Temperaturen, Bereiche in denen die Nichtlinearität der Fluideigenschaften zunimmt, nehmen auch die Diskrepanzen zu. Bezogen auf die drei Temperaturen 350 K, 300 K und 250 K werden die Massenströme um maximal  $-12.2\%$ ,  $-20.5\%$  und  $-34.7\%$  unterschätzt. Für hohe Drücke ist die Abweichung weniger groß als für mittlere Drücke, da hier zwar die Schallgeschwindigkeit stärker unterschätzt, die Dichte aber wesentlicher besser approximiert wird als für den mittleren Druckbereich, siehe Abbildung 4.4.



(a) Massenstrom.

(b) Impulsfluss.

Abbildung 5.9. Einfluss der Idealgasmodellierung auf Massenstrom und Impulsfluss bei kritischer ( $\text{Ma} = 1$ ) Durchströmung. Normalisiert mit den Werten für die Realgasmodellierung.

Ein sehr ähnliches Bild zeigt sich für den Impulsfluss in Abbildung 5.9b, der wiederum mit den Werten der SRK-ZGL normiert wurde. Da die Schallgeschwindigkeit im Impulsfluss quadratisch eingeht kann die etwas bessere Approximation der Dichte die sehr ungenauen Werte der Schallgeschwindigkeit nicht mehr ausgleichen, was zu einem monoton fallenden Kurvenverlauf führt. Die maximale Diskrepanz beträgt  $-47.4\%$  bei einer Totaltemperatur von 250 K. Für den betrachteten Betriebspunkt mit  $p_0 = 300$  bar und  $T_0 = 294$  K ergibt sich eine Abweichung von  $-21.8\%$  für den Massenstrom und  $-26.8\%$  für den Impulsfluss. Die eindimensionale Analyse kann allerdings nur dann auf die CFD übertragen werden, wenn die Durchströmung des Injektors, charakterisiert mit den beiden Kennzahlen  $C_d$  und

$C_M$ , identisch ist. Der strömungsmechanisch kritische Druck  $p^*$  wird für die IG-ZGL mit 162.5 bar berechnet, auch dies weicht signifikant von dem SRK-Wert mit 122.7 bar ab.

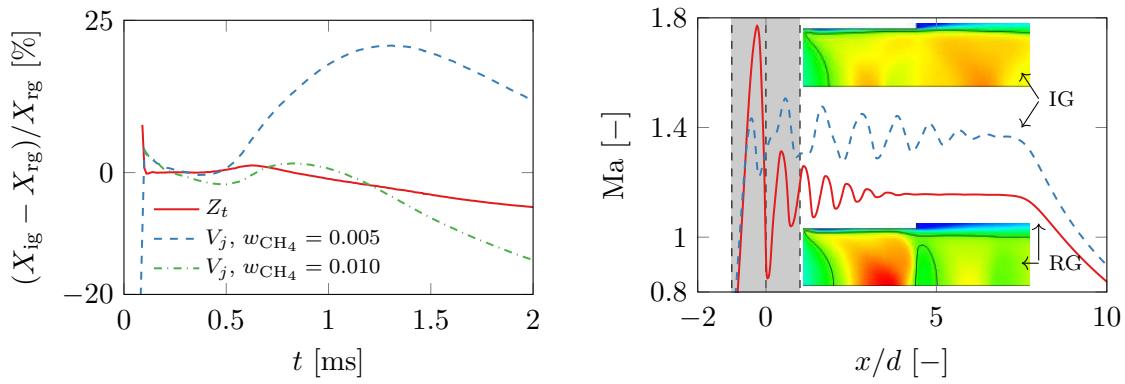
Nach der ersten Tendenz, welche durch die eindimensionale Betrachtung abgeschätzt wurde, wird diese nun mit der Strömungssimulation überprüft. Tabelle 5.2 zeigt die in beiden Fällen verwendete Modellierung. Für die ZGL kam die Annahme eines idealen Gases zum Einsatz, die Transportgrößen Viskosität und Leitfähigkeit wurden mit dem Sutherland-Modell, die kalorischen Größen  $c_p$ ,  $h$  und  $s$  mit den NASA-Polynomen approximiert.

	Realgasthermodynamik	Idealgasthermodynamik
ZGL	Soave-Redlich-Kwong	Ideales Gas
Viskosität, Leitfähigkeit	Chung	Sutherland
Spez. Wärmekapazität $c_{p,0}$	NASA-Polynome	NASA-Polynome
Kalorische Größen	Superposition	NASA-Polynome

Tabelle 5.2. Gegenüberstellung der verwendeten Modellierung für die Realgas- und die Idealgasthermodynamik.

Aus der CFD ergibt sich der Massenstrom zu 17.24 g/s und der Durchflusskoeffizient mit einem theoretisch möglichen Massenstrom von 19.75 g/s zu  $C_d = 0.87$ . Der Massenstrom weicht somit um  $-19.6\%$  von dem mit der Realgasthermodynamik simulierten Wert ab und spiegelt sehr gut die Tendenz von  $-21.8\%$  wider. Für den Impulsfluss ergibt sich mit einem Wert von  $8.80 \text{ kg m/s}^2$  allerdings ein um nur  $-5.8\%$  niedrigerer Wert, während das 1D-Modell einen Abfall um  $-26.8\%$  vorhergesagt hat. Der Verlauf der Eindringtiefe und des volumetrischen Wachstums des Freistrahls ist in Abbildung 5.10a dargestellt. Die Kurven wurden jeweils mit den durch die Realgasthermodynamik ermittelten Verläufen normiert. Durch den niedrigeren Massenstrom und Impulsfluss ergibt sich eine nach 2 ms  $-5.7\%$  geringere axiale Eindringtiefe. Im Gegensatz zur Eindringtiefe erhöht sich das volumetrische Wachstum um bis zu  $20.9\%$ , was aufgrund der niedrigeren Eindringtiefe auf eine größere radiale Ausbreitung deutet und etwas verwunderlich erscheint. Eine Erhöhung des minimalen Massenbruchs für die Volumenintegration von  $w_{CH_4} = 0.005$  auf  $w_{CH_4} = 0.01$  zeigt die erwartete Tendenz und das volumetrische Wachstum ist im Vergleich zur Realgasthermodynamik um  $-14.3\%$  geringer. Dies lässt die Schlussfolgerung zu, dass sich die unterschiedliche Modellierung auch auf die Gemischbildung und auf stattfindende Diffusionsprozesse auswirkt. Dieser Aspekt wird später nochmals aufgefasst.

Der Verlauf der Machzahl entlang der Symmetrieachse kann der Abbildung 5.10b entnommen werden. Im Unterschied zum Realgasfall ist die Idealgas-Expansion in der Düse mit einer maximalen Machzahl von 1.43 deutlich schwächer. In Folge der weniger starken Expansion wird der im Anschluss auftretende Stoß abgeschwächt und die Strömung bleibt im Überschall. Eine durch die Düsenaustrittsebene stattfindende Expansion beschleunigt das Fluid schließlich auf ein höheres Geschwindigkeitsniveau im Vergleich zum Realgasfall. Dies lässt sich auch in dem Machzahlkonturplot für die beiden Fälle aufzeigen, die von  $x/d = -1$  bis  $x/d = 1$  dargestellt sind. Die schwarze Linie stellt die Isolinie für  $\text{Ma} = 1$  dar. Während der Stoß für den Realgasfall kurz vor Düsenaustritt stattfindet, befindet sich die Strömung im Idealgasfall durchweg im Überschall und es findet keine Einschnürung statt. Dies hat zur Folge, dass der Impulsfluss im Vergleich gesteigert wird und die Kennzahl ergibt sich zu  $C_M = 1.07$  im Vergleich zu 0.83 für den Realgasfall, einer Steigerung um  $28.9\%$ .



(a) Eindringtiefe und volumetrisches Wachstum. (b) Machzahlverlauf auf der Symmetriearchse.

Abbildung 5.10. Einfluss der Idealgasmodellierung auf Eindringtiefe, volumetrisches Wachstum und Machzahl. Normalisiert mit den Werten für die Realgasmodellierung.

Durch die Anwendung der Realgasthermodynamik erhöht sich die Rechenzeit für den aktuellen Betriebspunkt deutlich. In Abschnitt 5.4.8 wird gesondert darauf eingegangen. Es stellt sich die Frage, ob durch geeignete Maßnahmen mit der Idealgasthermodynamik ähnlich gute Ergebnisse erzielen werden können wie mit der Realgasthermodynamik. Dies ist insbesondere für die Industrie relevant, da dort unter Umständen schnell Ergebnisse vorliegen müssen und ein HPC (Großrechner, engl. *High performance cluster*) nicht immer zur Verfügung steht. Die zwei wichtigsten Kennzahlen der Eindüsung sind der Massenstrom und der Impulsfluss am Düsenaustritt. Diese werden von der aktuellen Idealgasrechnung zum Teil wesentlich unterschätzt. Um dies auszugleichen, wird der Druck bei konstanter Temperatur so weit erhöht, dass diese Werte übereinstimmen. Zusätzlich müssen noch die Durchflusskoeffizienten  $C_d$  und  $C_M$  miteinbezogen werden, da sich diese wie bereits gezeigt insbesondere für den Impulsfluss signifikant unterscheiden. Für eine Übereinstimmung des Massenstroms ergibt sich ein neuer Druck von  $p_{0,M} = 372.9$  bar, eine Übereinstimmung des Impulsflusses führt zu einem Druck von  $p_{0,M_n} = 318.4$  bar. Durch die Erhöhung des Kesseldrucks auf 372.9 bar stimmt zwar der mit der CFD ermittelte Idealgas-Massenstrom mit dem Ergebnis der Realgasthermodynamik überein, der Impulsfluss wird aber um 18.78 % überschätzt. Dies führt dazu, dass die normierte Eindringtiefe des Freistahls über die gesamte Simulationsdauer größer ist im Vergleich zum Realgasfall, siehe Abbildung 5.11a. Hingegen führt die Anpassung des Kesseldrucks zur Reproduktion des Realgas-Impulsflusses ( $p_{0,M_n} = 318.4$  bar) zu einer besseren Übereinstimmung des Eindringtiefenverlaufs über die gesamte Dauer. Nachteilig wirkt sich die Änderung auf den Massenstrom aus, der um -14.6 % unterschätzt wird (nicht dargestellt).

Für das volumetrische Wachstum in Abbildung 5.11b lassen sich die gleichen Schlussfolgerungen ziehen. Wiederum fällt auf, dass das volumetrische Wachstum für die gewählte Isolinie mit  $w_{CH_4} = 0.005$  deutlich größer ist als im Realgasfall, was trotz der geringeren Eindringtiefen unphysikalisch erscheint. Mit einer Anpassung des Wertes auf  $w_{CH_4} = 0.01$  zeigen auch die Kurven für das volumetrische Wachstum die erwartete Tendenz. Dennoch lässt sich kein Betriebspunkt finden, für den die Kurven eine ausreichend gute Übereinstimmung in beiden Fällen liefert. Hier führt eine Modifikation des Kesseldrucks zur Reproduktion des Massenstroms unter Berücksichtigung des Durchflusskoeffizienten zu einer

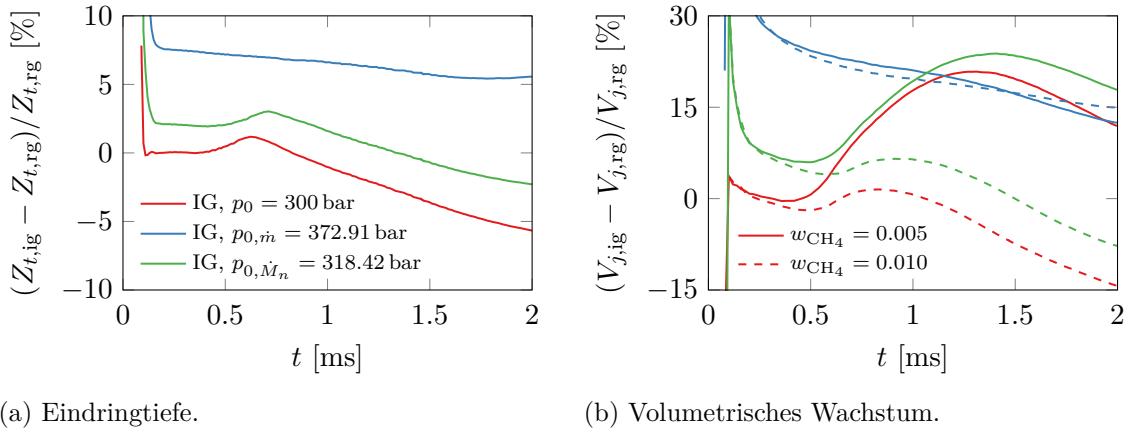


Abbildung 5.11. Einfluss der Idealgasmodellierung auf Eindringtiefe und volumetrisches Wachstum.

besseren Nachbildung des Realgasverhaltens als eine Anpassung des Druckes an den Impulsfluss. Für den Grenzwert der Volumenintegration für die Brennstofffeinhüllende muss ein Wert  $w_{CH_4} \geq 0.01$  gewählt werden.

Wie bereits erwähnt, ergeben sich für eine unterschiedliche Wahl des Isowertes für die Brennstofffeinhüllende sehr große Unterschiede im Verlauf des volumetrischen Wachstums, Unterschiede die für die Realgassimulation nicht festzustellen sind. Um diesem Phänomen nachzugehen, wird ein Zeitpunkt ausgewählt, für den die Ausbreitung des Freistrahls in axialer Richtung für beide Modellierungen in etwa identisch ist. In Abbildung 5.12 sind die Verläufe des Methanmassenbruchs auf der Symmetrieachse und in radialer Richtung für eine Momentaufnahme bei  $t = 0.85$  ms zu sehen. Große Unterschiede lassen sich bereits für den Verlauf in axialer Richtung feststellen, siehe Abbildung 5.12a. Die Länge des Potenzialkerns, gekennzeichnet mit einer gestrichelten Linie, ist für beide Simulationen identisch. Mit dem Einsetzen der Mischung verringert sich der Massenbruch invers proportional zum Düsenabstand. Im Idealgasfall fällt dieser Abfall aber deutlich stärker aus, was zu einem über den gesamten Bereich geringeren Massenbruch führt. Mit Ausnahme des sphärischen Wirbels an der Spitze des Freistrahls sind die Verläufe bis auf einen gewissen Offset sehr ähnlich. Für den sphärischen Wirbel zwischen  $x/d \approx 45$  und  $x/d \approx 55$  kommt es zu einem erneuten Abflachen des Konzentrationsverlaufs für den Idealgasfall.

Die Beobachtungen der axialen Brennstoffverteilung können mit den radialen Verläufen in Abbildung 5.12b nachvollzogen werden. Diese wurden in vertikaler Richtung mit dem jeweiligen Wert auf der Symmetrieachse normiert. Die radiale Normierung erfolgt mit der maximalen Breite des Freistrahls für den Realgasfall  $r_{max,rg}$ . Für die Verteilung bei einem axialen Abstand von  $x/d = 30$  zeigen beide Simulationen ein sehr ähnliches Ergebnis. Sowohl der Verlauf als auch die Ausbreitung in radialer Richtung stimmen überein. Für den radialen Verlauf im sphärischen Wirbel zeigt sich ein differenzierteres Bild. Hier nimmt die Konzentration von Methan in Bezug auf die radiale Komponente zu Beginn für den Realgasfall weniger stark ab als für den Idealgasfall. In den äußeren Regionen des Freistrahls wird die Methankonzentration für den Idealgastestfall länger aufrecht erhalten und der Brennstoff nimmt ein größeres Volumen ein. Für den Verlauf der weiteren Strömungsgrößen auf der Symmetrieachse des Freistrahls zum Zeitpunkt 2 ms zeigen sich noch größere Diskre-

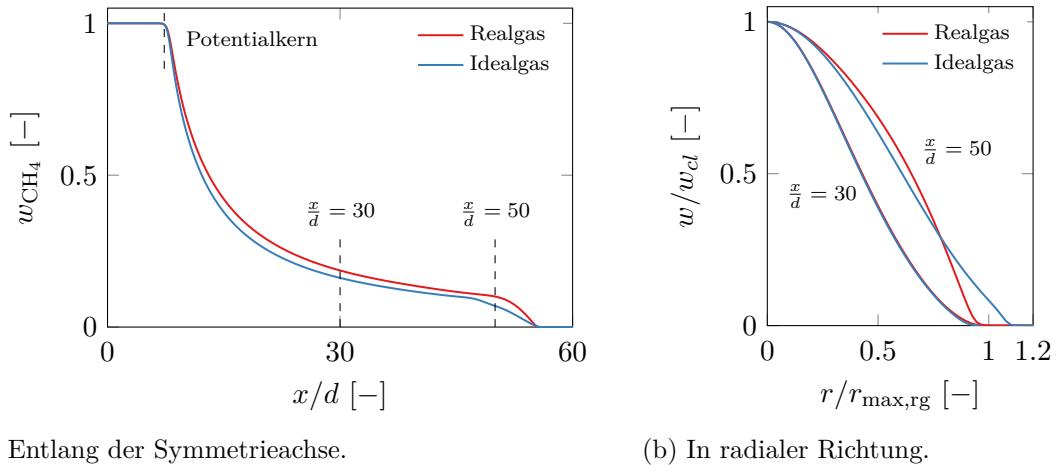


Abbildung 5.12. Einfluss der Idealgasmodellierung auf die Gemischbildung. Momentaufnahme für  $t = 0.85$  ms.

panzen, siehe Abbildung 5.13. Während die Strömung für den Realgastestfall in der Düse bereits sehr stark expandiert und kurz vor Düsenaustritt verzögert, welches in einem Druckanstieg resultiert, erfolgt die Verzögerung für den Idealgastestfall bereits in der Düsenmitte und das Fluid wird durch den Düsenaustritt hindurch expandiert. Dadurch kommt es im Potenzialkern zu längeren und stärkeren Expansions- und Verzögerungsstrukturen. Die Abweichungen des Idealgastestfalls vom Realgastestfall nehmen für den Dichteverlauf zu. Die Expansion senkt die gemittelte Dichte des Potenzialkerns auf  $86 \text{ kg/m}^3$  und damit unter die Kammerdichte von  $117.8 \text{ kg/m}^3$ , für den Realgasfall beträgt dieser Wert  $135 \text{ kg/m}^3$ . Für die spezifische Wärmekapazität zeigt sich ein ähnliches Bild. Mit der vereinfachten Modellierung unter Annahme eines thermisch idealen Gases ist die Berechnung aufgrund der Approximation mittels den NASA-Polynomen ungenau. Die Werte im Potenzialkern werden um den Faktor 2.5 unterschätzt. Mit der Le = 1-Annahme aus Abschnitt 2.1 ergibt sich der Diffusionskoeffizient zu  $D = \lambda/c_p/\rho$ . Alle zur Berechnung des Diffusionskoeffizienten relevanten Größen werden von der Idealgasmodellierung unterschätzt. Das Produkt aus spezifischer Wärmekapazität und Dichte ist dominant gegenüber der Wärmeleitfähigkeit  $\lambda$  und der Diffusionskoeffizient  $D$  wird folglich überschätzt, was zu einer stärkeren Mischung des Brennstoffs mit der umgebenden Luft führt. Die Konzentration des Methans entlang der Symmetrieachse nimmt schneller ab.

### 5.2.2 Turbulenzmodellierung

Nicht nur die Qualität der Modellierung bezüglich der Thermodynamik, auch die Approximation der Turbulenzeinflüsse mit geeigneten Modellen ist ein wichtiger Aspekt in der numerischen Simulation der Hochdruckeindüsung. Dazu werden die in Abschnitt 2.5 beschriebenen Modelle verwendet und untereinander verglichen. Bei drei der fünf Modelle ( $k\epsilon$ ,  $k\omega$  und  $k\omega$ SST) handelt es sich um Standard-Turbulenzmodelle, wie sie mittlerweile in jedem kommerziellen Strömungslöser implementiert sind. Basierend auf dem  $k\omega$ SST-Turbulenzmodell wurde zusätzlich die Kompressibilitätskorrektur ohne und mit Druckdilatation (Modell vier und fünf) von Sarkar und Lakshmanan [144] implementiert.

In Abbildung 5.14 ist die stationäre und düsennahe Strömung für die fünf Modelle an-

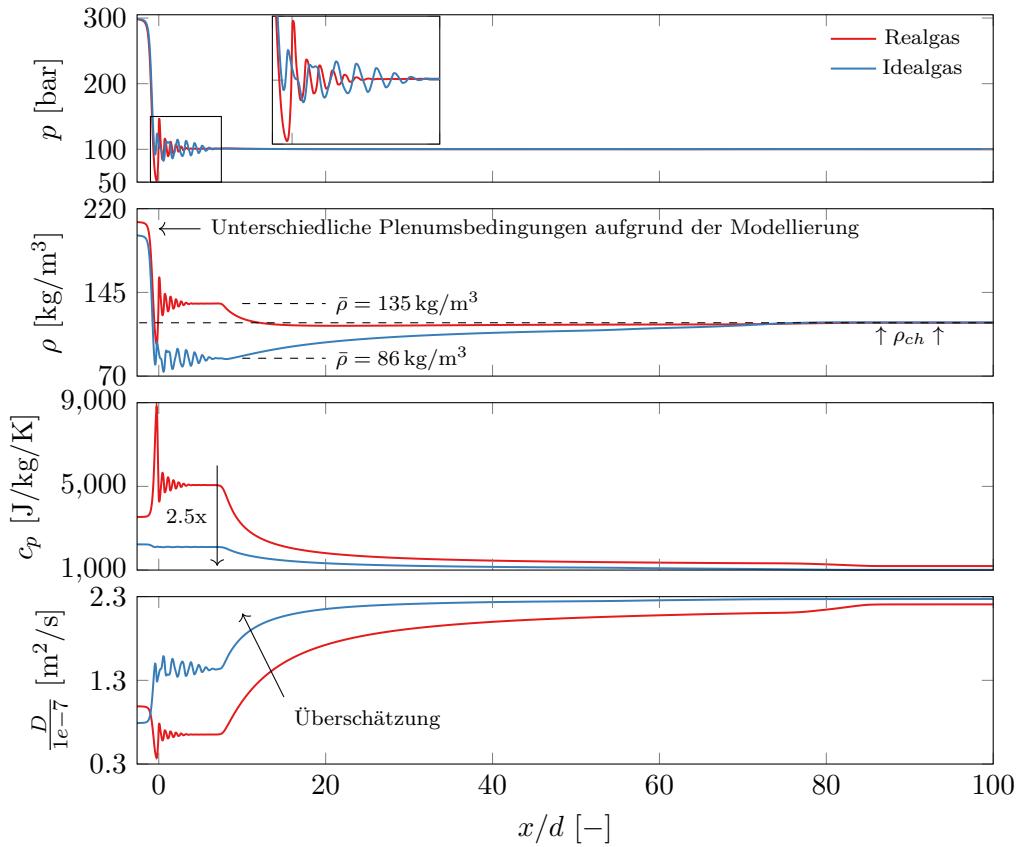


Abbildung 5.13. Einfluss der Idealgasmodellierung auf die Strömungsgrößen auf der Symmetrieachse. Momentenaufnahme nach  $t = 2 \text{ ms}$ .

hand der Machzahl  $\text{Ma}$  dargestellt. Zusätzlich wurde für jede Momentenaufnahme die Düse von  $x/d = -1$  bis  $1$  im Detail vergrößert und die Länge des Potenzialkerns markiert. Für das  $k\epsilon$ -Modell zeigt sich im Vergleich eine stärkere Ablösung der  $\text{Ma} = 1$ -Linie von der Düsenwand, wobei die Geschwindigkeiten im Ablösegebiet sehr hoch bleiben. Im hinteren Drittel der Düse legt die Strömung komplett an die Wand an und passiert den Düsenaustritt im Überschall. Im  $k\omega$ -Turbulenzmodell erstreckt sich das Ablösegebiet hinter der Verbindungskante zwischen Sackloch und Düse über einen Großteil der Düsenlänge, bevor es kurz vor dem Düsenaustritt durch ein Wiederanlegen der Strömung beendet wird. Die darin vorkommenden Geschwindigkeiten sind geringer als beim  $k\epsilon$ -Modell, was auf die deutlich bessere Modellierung der Grenzschicht in Wandnähe zu schließen ist. Stromab des Düsenaustritts kommt es zu einem kleinen Stoß. In einer erneuten Expansion wird  $\text{Ma} > 1$  erreicht und das Überschallgebiet bleibt bis hinter das Ende des Potenzialkerns bestehen. In den drei Simulationen, die auf Basis des  $k\omega$ SST-Modells durchgeführt wurden, ist die Strömung im Nahfeld der Düse identisch. Wiederum kommt es zu einer Ablösung der Strömung hinter der Kante, wodurch die Geschwindigkeiten im Ablösegebiet auf  $\text{Ma} = 0$  an der Wand verzögert werden. Das Ablösegebiet gleicht dabei dem des  $k\omega$ -Modells, wobei ein komplettes Wiederanlegen der Strömung an die Wand nicht stattfindet. In Höhe des Düsenaustritts verzögert ein senkrechter Stoß das Fluid in den Unterschall und die von der Düsenkante zur Symmetrieachse laufenden Expansionfächer beschleunigen die Strömung schließlich wie-

der. Die Kompressibilitätskorrektur führt in beiden Fällen zu einer axialen Streckung des Potenzialkerns und des Überschallgebietes. Wird die Druckdilatation, die Interaktion der Geschwindigkeits- mit den Druckschwankungen, nicht beachtet, vergrößert sich die Länge des Potenzialkerns um 18.3 %. Eine Beachtung derselben führt zu einer erneuten Streckung um 5.7 %. Durch die unterschiedlichen Strömungsformen im Düsenannahbereich wird auch der Massenstrom und der Impulsfluss beeinträchtigt. Für den Massenstrom ergeben sich sehr kleine Veränderungen mit  $\Delta\dot{m} = \pm 0.2\%$ . Die Werte für den Impulsfluss sind für die auf dem  $k\omega$ SST-Modell basierenden Simulationen nahezu identisch. Für das  $k\omega$ -Modell ergibt sich eine Verringerung des Impulsflusses von  $-8.6\%$ , für das  $k\epsilon$ -Modell von  $-3.4\%$ .

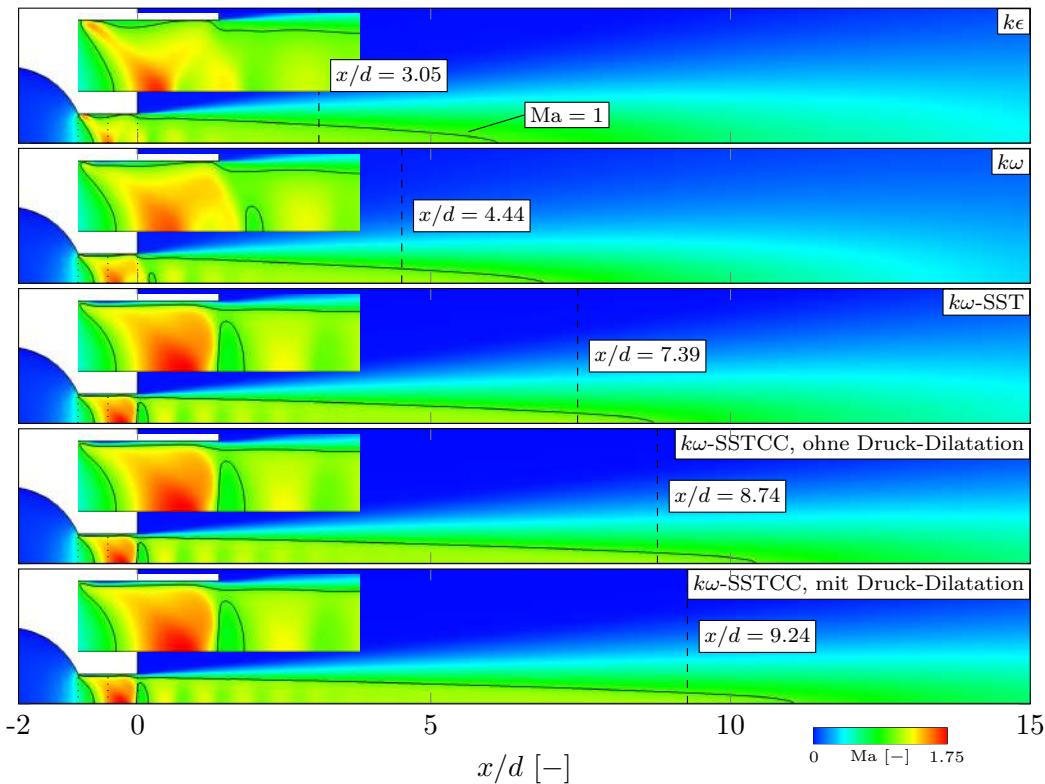
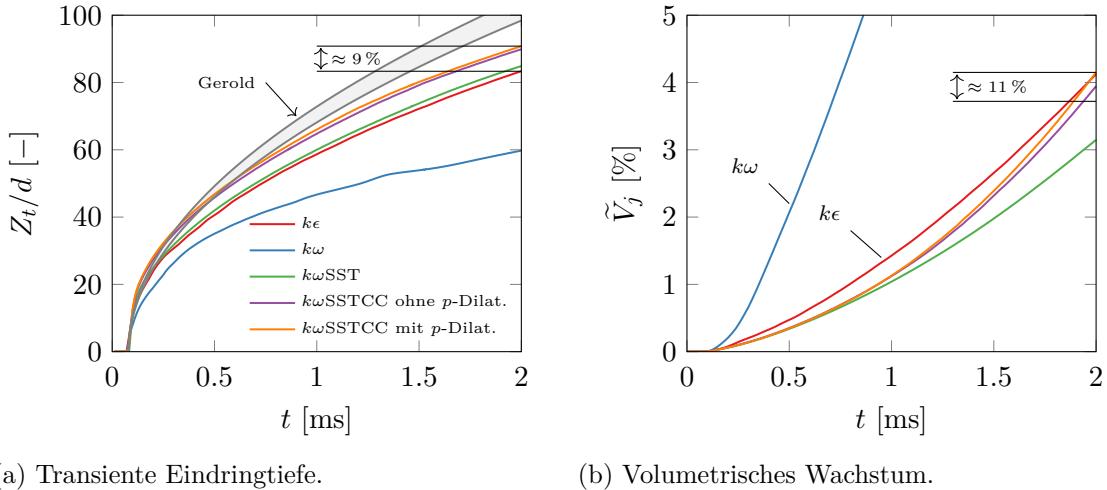


Abbildung 5.14. Einfluss der Turbulenzmodellierung auf die Mach-Zahl der düsennahen Strömung.

Wie bereits erwähnt, ist das  $k\epsilon$ -Modell für wandferne und das  $k\omega$ -Modell für wandnahe Strömungen besser geeignet. Dies zeigt sich insbesondere in der transienten Eindringtiefe in Abbildung 5.15a, bei dem der Verlauf des  $k\omega$ -Modells zu Beginn abknickt und eine maximale Eindringtiefe von  $x/d = 60$  erreicht wird. Für das  $k\epsilon$ -Modell wird eine deutliche Steigerung erzielt und der qualitative Verlauf gleicht den restlichen drei Simulationen, wobei die maximal erzielte Eindringtiefe, mit Ausnahme des  $k\omega$ -Modells, um  $\approx 9\%$  variiert. Im volumetrischen Wachstum in Abbildung 5.15b zeigen sich erneut die starken Abweichungen der Ergebnisse des  $k\omega$ -Modells. Die Kurve steigt trotz der geringeren Eindringtiefe überproportional an, der Freistrahrl breitet sich somit sehr schnell in radialer Richtung aus. Die Verläufe des Wachstums der verbleibenden vier Simulationen ähneln sich und erreichen mit einer Variation von  $\approx 11\%$  die Simulationszeit von 2 ms. Für das  $k\epsilon$ -Modell ist das volumetrische Wachstum zu Beginn deutlich größer. Mit einer geringeren Eindringtiefe

fe kommt es auch hier zu einer starken Ausbreitung des Fluids in radialer Richtung. Die durch die Kompressibilitätskorrektur erzielten höheren Eindringtiefen passen etwas besser zu den in Abschnitt 5.1 verglichenen Korrelationen (unter Beibehaltung der originalen Skalierungsfaktoren). Beispielhaft wurde die Korrelation von Gerold und Pfitzner [56] in Abbildung 5.15a übertragen.



(a) Transiente Eindringtiefe.

(b) Volumetrisches Wachstum.

Abbildung 5.15. Einfluss des Turbulenzmodells auf die Eindringtiefe und das volumetrische Wachstum des Brennstofffreistrahls.

Bei den zu lösenden Gleichungen der Turbulenzmodelle in Abschnitt 2.5 handelt es sich um Transportgleichungen für die turbulente kinetische Energie  $k$ , die Dissipation  $\epsilon$  bzw. die Dissipationsrate  $\omega$ . Der Produktionsterm in den Transportgleichungen setzt sich dabei unter anderem aus der Dichte und dem Reynoldsspannungstensor zusammen:  $P_k \propto \rho \bar{u}_i' u_j'$ . In Abbildung 5.16 wird die Entwicklung der beeinflussenden Strömungsgrößen auf der Symmetrieachse betrachtet. Zusätzlich stellen die vertikal gestrichelten Linien die Länge des Potenzialkerns dar. Bereits für den Betrag der modellierten Reynoldsspannungen  $\bar{u}_i' u_j'$  ergeben sich deutliche Abweichungen der fünf Modelle. Obwohl die Strömung im Düsenannahbereich eine Beschleunigung fast ausschließlich in Hauptströmungsrichtung erfährt, kommt es zu einer unphysikalischen Erhöhung des Spannungstensors im  $k\epsilon$ -Modell. In Folge dessen wird zu viel Turbulenz produziert und es kommt zu einem früheren Aufbruch des Potenzialkerns. Dadurch wird die Länge des Potenzialkerns verkürzt und das hohe Geschwindigkeitsniveau wird vorzeitig verlassen. Dies führt zu einer früh einsetzenden Mischung und zu einem Abfall des Brennstoffanteils in der Mischung. Mit der gleichen Argumentationsweise können die Ergebnisse der verbleibenden Modelle analysiert werden. Im  $k\omega$ -Modell bleibt der Betrag des Spannungstensors aufgrund der dominanten Strömungsrichtung in der Düse niedrig. Mit Verlassen des wandnahen Bereichs verliert die Modellierung ihre Genauigkeit, Geschwindigkeitsschwankungen werden initiiert und die TKE steigt.

Die Ergebnisse des  $k\omega$ -Modells und der zwei Modelle mit der Kompressibilitätskorrektur weisen für alle Größen die gleichen qualitativen Verläufe auf. Durch die Kompressibilitätskorrektur wird der Produktionszeitpunkt der TKE verzögert. Aufgrund der zwei zusätzlichen Terme in der Transportgleichung der TKE, die proportional zur turbulenten Machzahl  $Ma_t$  und zur Druckdilatation  $\bar{p}'' \bar{d}''$  sind, ergeben sich niedrigere Werte für die TKE. Für die

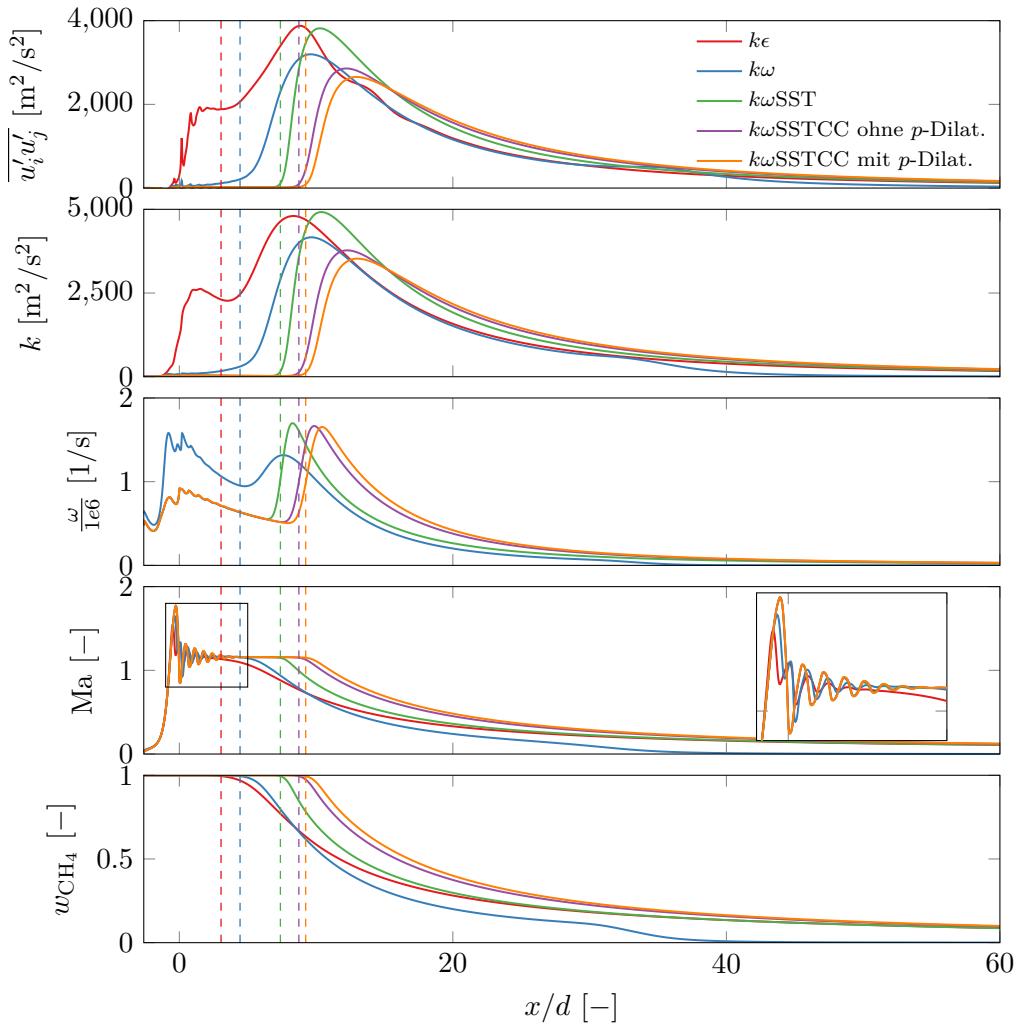


Abbildung 5.16. Einfluss des Turbulenzmodells auf gewählte Strömungsgrößen auf der Symmetriearchse.

Dissipationsrate  $\omega$  ergeben sich in etwa die gleichen Werte, allerdings wird das Maximum in axialer Richtung verschoben. Mit der späteren Erhöhung der TKE und der Dissipationsrate wird für alle Ergebnisse das Ende des Potenzialkerns stromab verschoben. Mit dem früheren Aufbruch des Potenzialkerns lassen sich auch die unterschiedlichen Eindringtiefen erklären. Je früher der Umschlag von der laminaren zur turbulenten Strömung erfolgt, desto früher wird der Brennstoff mit der Luft vermischt. Durch die Vermischung sinkt die Dichte des Gemisches und der axiale Impuls geht verloren.

Die aufgezeigten Tendenzen stimmen sehr gut mit Literatur-Ergebnissen überein. Unter anderem wurden in den Arbeiten von Cumber *et al.* [42, 43], Birk und Page [21] und Fairweather und Ranson [51] verschiedene Kompressibilitätskorrekturen in das  $k\epsilon$ -Turbulenzmodell implementiert. Die Korrekturen, die auf dem Ansatz von Sarkar *et al.* [144] und Zeman [182] basieren, zeigten dabei deutlich bessere Ergebnisse als Standard-Modelle sowie Modelle mit einfachen Korrekturen der jeweiligen Modellkoeffizienten. In allen Arbeiten kam es dadurch zu einer signifikant besseren Übereinstimmung der Simulationsergeb-

nisse mit den experimentellen Daten. Eine vergleichbare Implementierung der Kompressibilitätskorrektur im  $k\omega$ SST-Turbulenzmodell konnte in keiner Arbeit gefunden werden.

## 5.3 Generische Studien

Der Vergleich der Modellierungseinflüsse im vorangegangenen Abschnitt hat gezeigt, dass die Wahl des thermodynamischen Modells und die Wahl des Turbulenzmodells einen sehr großen Einfluss auf Massenstrom, Impulsfluss und Gemischbildung haben. Im nächsten Schritt werden nun generische Studien durchgeführt, die sich auf eine Variation der Geometrie, der Temperatur und des verwendeten Fluids beschränken. Für den aktuell behandelten Betriebspunkt mit einem Totaldruck von 300 bar und einem Kammerdruck von 100 bar sind keine experimentellen Daten vorhanden, eine Validierungsmöglichkeit für die Turbulenzmodelle fehlt. Da zum Zeitpunkt der Durchführung der generischen Studien die Herleitung und Implementierung der Kompressibilitätskorrektur noch nicht abgeschlossen war, wird in diesem Abschnitt weiterhin das Standard- $k\omega$ SST-Turbulenzmodell ohne Kompressibilitätskorrektur verwendet. In einer ersten Variation der Spritzlochgeometrie in Unterabschnitt 5.3.1 wird der Einfluss der Düsenform auf den Brennstofffreistrahl untersucht. Für die am meisten verbreiteten Kraftstoffe Benzin und Diesel wurde dies bereits ausführlich durchgeführt, siehe bspw. Han *et al.* [70], Payri *et al.* [127, 128] oder Som *et al.* [152]. Für die Hochdruckeindüsung von Methan bei überkritischen Betriebspunkten ist das Verhalten des Fluids im Injektor jedoch noch weitestgehend unklar. Während der Lagerung des Brennstoffs und durch die Peripherie im Motor kann es zu einer Erhöhung oder Absenkung der Brennstofftemperatur kommen. Die Einflüsse einer eventuellen Temperaturänderung werden in Unterabschnitt 5.3.2 betrachtet. Für die dritte Variation wird das einzudüsende Fluid geändert. Als Vergleichsfluid in Unterabschnitt 5.3.3 wird Stickstoff betrachtet, da dieser häufig aufgrund des Sicherheitsaspekts als Ersatzbrennstoff für den Betrieb im Prüfstand verwendet wird. In der letzten generischen Studie in Unterabschnitt 5.3.4 wird der Einfluss einer Brennstoffmischung auf das Verhalten während der Eindüsung betrachtet.

### 5.3.1 Geometrievariation

Um den Einfluss der Düsengeometrie auf den Massenstrom und den Impulsfluss sowie die Gemischbildung zu bewerten, wurden vier weitere, in Abbildung 5.17 dargestellte Geometrien untersucht. Ausgehend von der Standardkonfiguration mit einer geraden Düse und einem Verhältnis von Düsenlänge zu Düsendurchmesser von  $l/d = 1$  (1) wurde dieses auf  $l/d = 0.5$  verringert (2) und auf  $l/d = 2$  erhöht (3). Für eine konisch geformte Düse (4) wurde der innere Durchmesser des Spritzlochs um 20 % auf 0.84 mm vergrößert, der resultierende Winkel beträgt  $11.3^\circ$ . Für die fünfte Geometrie (5) wurde der Übergang des Sacklochs zum Spritzloch mit kubischen Splines verrundet. Für die Geometrien (1)-(3) und (5) erstreckt sich der engste Querschnitt über die gesamte Spritzlochlänge. Für die konische Form befindet sich dieser am Düsenaustritt. Die Geometrievariation wurde bei den bereits bekannten Bedingungen (Methan,  $p_0 = 300$  bar,  $p_{ch} = 100$  bar,  $T_0 = T_{ch} = 294$  K) durchgeführt.

Das Ergebnis der Geometrievariation bezüglich des Massenstroms und des Impulsflusses wurde in Tabelle 5.3 zusammengefasst. Die Variation der Spritzlochlänge (2) und (3) führt für beide Modifikationen zu einer Verringerung des Massenstroms und zu einer Zunahme des Impulsflusses. Für die Änderung der Spritzlochkontur (4) und (5) erhöht sich im Vergleich zum Referenzfall sowohl der Massenstrom für die konische Kontur mit bis zu 14.4 % als auch

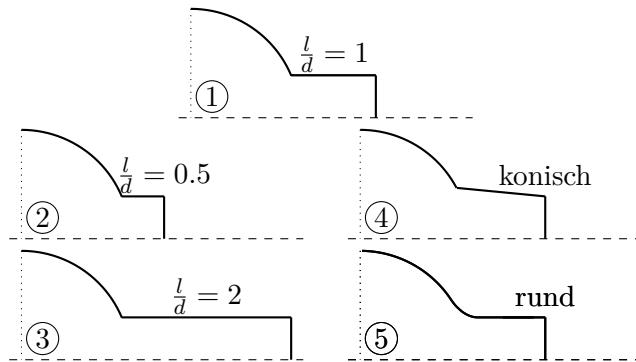


Abbildung 5.17. Schematische Darstellung der fünf untersuchten Düsengeometrien.

der Impulsfluss für die verrundete Geometrie um bis zu 23.7 %. Die Durchflusskoeffizienten werden folglich maximiert, gleiches gilt für den Impulsflusskoeffizienten  $C_M$ , wobei hier der Wert für die Verrundung zwischen Spritzloch und Düse mit  $C_M = 1.03 > 1$  hervorsticht.

	① Referenz	② $l/d = 0.5$	③ $l/d = 2$	④ konisch	⑤ verrundet
$\dot{m}^*$ [g/s]	25.26	25.26	25.26	25.26	25.26
$\dot{m}$ [g/s]	21.43	21.05	21.31	24.52	24.41
$C_d$ [-]	0.85	0.83	0.84	0.97	0.97
$\dot{M}_n^*$ [kgm/s <sup>2</sup> ]	11.20	11.20	11.20	11.20	11.20
$\dot{M}_n$ [kgm/s <sup>2</sup> ]	9.34	9.92	9.79	10.26	11.55
$C_M$ [-]	0.83	0.89	0.87	0.92	1.03

Tabelle 5.3. Massenstrom und Impulsfluss für die Geometrievariation.

Die Werte der Tabelle ergeben sich aus den unterschiedlichen Strömungsformen im Nahbereich der Düse, siehe Abbildung 5.18. Bei der verkürzten Düse mit  $l/d = 0.5$  kommt es nach der Verbindungskante zwischen Spritzloch und Düse wie im Referenzfall zu einer Ablösung. Das Ablösegebiet hat eine größere axiale Ausdehnung als die Länge der Düse und es erfolgt kein Wiederanlegen der Strömung an die Wand. Der schwache Stoß tritt erst stromab des Düsenaustritts auf. Durch die verlängerte Düse mit  $l/d = 2$  kommt es innerhalb der Düse zu einer Reihe von Expansions- und Kompressionsprozessen, die sich bis zum Düsenaustritt fortsetzen. Das Geschwindigkeitsprofil am Düsenaustritt unterscheidet sich leicht von der Referenzgeometrie, wodurch der Stoß etwas stromab des Düsenaustritts stattfindet und eine geringere radiale Ausbreitung hat. Für die verbleibenden Geometrien ④ und ⑤ ändert sich die Strömungsform signifikant. Für die konische Düse kommt es aufgrund des größeren Durchmessers am Übergang zum Spritzloch zu einer weniger starken Expansion. Diese nimmt mit der Verjüngung der Düse zu und Überschallzustände mit  $Ma > 1$  werden ausnahmslos außerhalb der Düse erreicht. Der Düsenaustritt ist im Vergleich zu der Referenzgeometrie fast ganz gefüllt, die Grenzschicht an der Wand wird auf ein Minimum reduziert. Durch dies ergeben sich die sehr hohen Werte für den Massenstrom und den Impulsfluss. Für die verrundete Düse wird das Ablösegebiet am Düseneintritt deutlich verringert und die Grenzschichtdicke ist sehr klein. Mit einer Geschwindigkeit von  $Ma > 1$  wird das Spritzloch verlassen, der Impulsfluss ist somit nochmals größer als für die konische Düse.

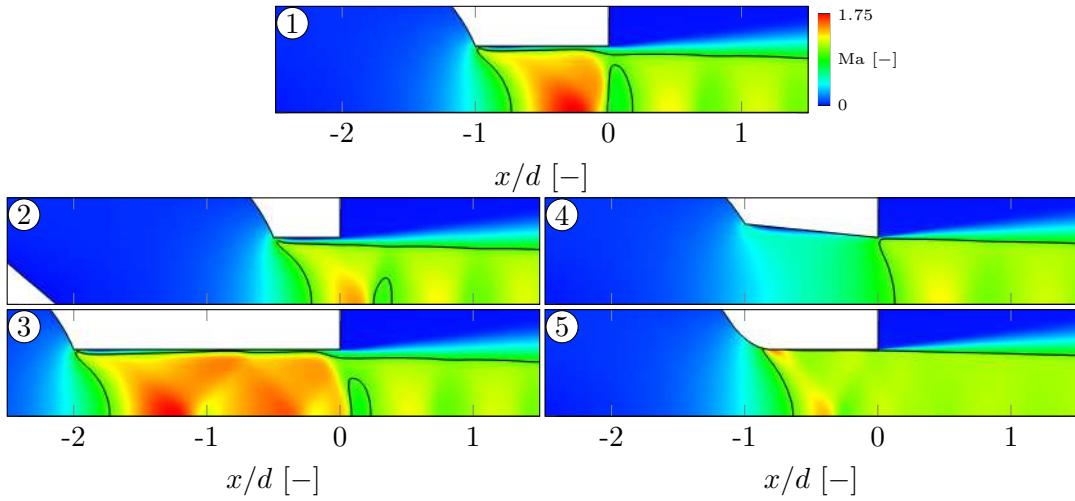


Abbildung 5.18. Einfluss der Düsengeometrie auf die Durchströmung des Spritzloches. Dargestellt ist der Kontur-Plot der Mach-Zahl mit einer schwarzen Iso-Linie für  $\text{Ma} = 1$ .

Mit den Werten aus der Tabelle können die unterschiedlichen transienten Eindringtiefen in Abbildung 5.19a erklärt werden. Dargestellt ist die mit der Variation erzielte Kurve normiert mit der Referenzgeometrie. Während die Simulation mit der kurzen Düsenform  $l/d = 0.5$  nahezu identisch zu der Referenz ist, ergibt sich für die lange Düse ein Über- und Unterschwinger, die aber beide vernachlässigt werden können. Für die konische und verrundete Düsengeometrie beträgt die Steigerung der Eindringtiefe  $\approx 4\%$ .

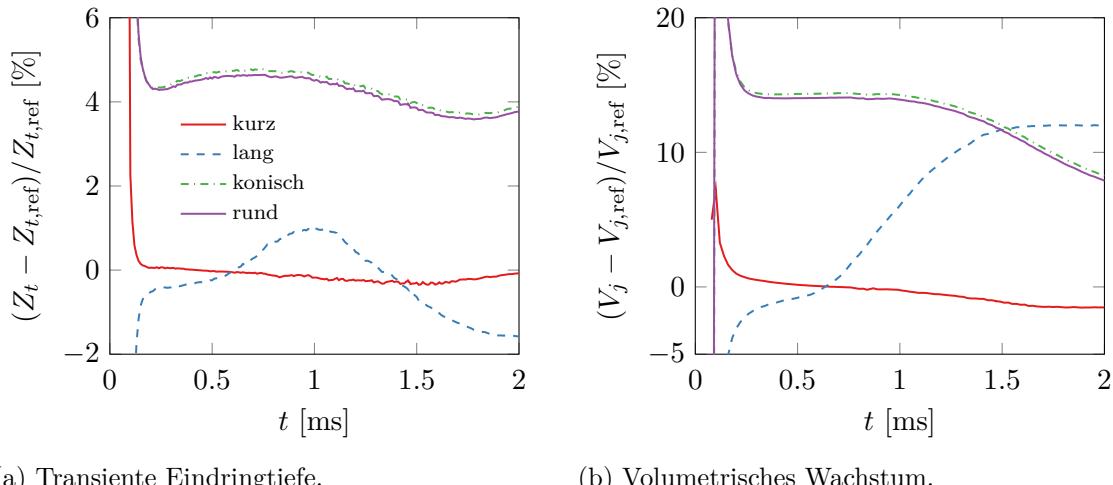


Abbildung 5.19. Einfluss der Düsengeometrie auf die Eindringtiefe und den volumetrischen Zuwachs.

Betrachtet man das volumetrische Wachstum in Abbildung 5.19b, ändert sich dieses für die verkürzte Düse kaum. Ein großer Unterschied lässt sich für die lange Düse mit  $l/d = 2$  ausmachen. Nach 2 ms wird eine Steigerung von  $\approx 12\%$  erzielt. Während der Winkel des stationären Bereichs (vgl. Abbildung 2.13) für alle Geometrien identisch ist, zeigt sich für die lange Düse eine größere Ausdehnung des sphärischen Wirbels in radialer Richtung. Hier

ist insbesondere die temporäre Erhöhung der Eindringtiefe bei  $\approx 1$  ms von Bedeutung, die sich im weiteren Verlauf der Simulation positiv auf die radiale Ausbreitung auswirkt. Eine ähnliche Steigerung des volumetrischen Wachstums kann durch die beiden Geometrien ④ und ⑤ erreicht werden, wobei das Wachstum zu Beginn mit einer Steigerung von  $\approx 14\%$  gegenüber der Referenzgeometrie deutlich größer ist. Die Steigerung des volumetrischen Wachstums für die konische und verrundete Form ist ausschließlich auf das schnellere Eindringverhalten zurückzuführen. Die Einflüsse der Düsengeometrie auf die Gemischbildung für einen Totaldruck von 500 bar bei Druckverhältnissen von 2.5 und 5 unter Verwendung von Methan, Wasserstoff und Stickstoff wurden in Banholzer *et al.* [12] veröffentlicht.

### 5.3.2 Temperaturvariation

Durch kalte oder heiße Peripherie sowie durch die Hitze des Zylinders kann es zu Abkühlungen und Aufheizungen des Injektors und des Brennstoffs kommen, die während des Auslegungsprozesses nicht oder nur sehr ungenau vorausgesagt werden können. Abbildung 5.20 zeigt die eindimensionale Betrachtung des Massenstroms und Impulsflusses bei der  $\text{Ma} = 1$  Durchströmung und verschiedenen Temperaturen von 250 K bis 350 K in einem Druckbereich von 1 bis 600 bar. Die Kurven wurden dabei mit dem Massenstrom und Impulsfluss für 300 K normiert. Es wird klar, dass bereits geringe Temperaturänderungen des Brennstoffs große Auswirkungen auf den Massenstrom haben. Durch eine Temperaturerhöhung auf 325 K oder 350 K sinkt sowohl der Massenstrom als auch der Impulsfluss signifikant und über den gesamten Druckbereich um bis zu  $-15\%$ . Für eine niedrigere Temperatur als 300 K nehmen die nicht-linearen Effekte des Fluids zu und die Änderungen im Vergleich zur Referenztemperatur werden noch ausgeprägter. Ursache hierfür ist die für geringere Temperaturen höhere Dichte und Schallgeschwindigkeit, die den Massenstrom und Impulsfluss um bis zu 35 % vergrößert. In der Strömungssimulation wird die Temperatur um ein  $\Delta T_0$  von 20 K variiert. Die neuen zu untersuchenden Temperaturen betragen somit 274 K und 314 K und sind in Abbildung 5.20 markiert. Bei einem Druck von 300 bar führt dies zu einer Massenstrom- und Impulsflussänderung von 10.8 % und 8.8 % für die niedrigere Temperatur und einer Änderung von  $-8.3\%$  und  $-6.0\%$  für die erhöhte Temperatur.

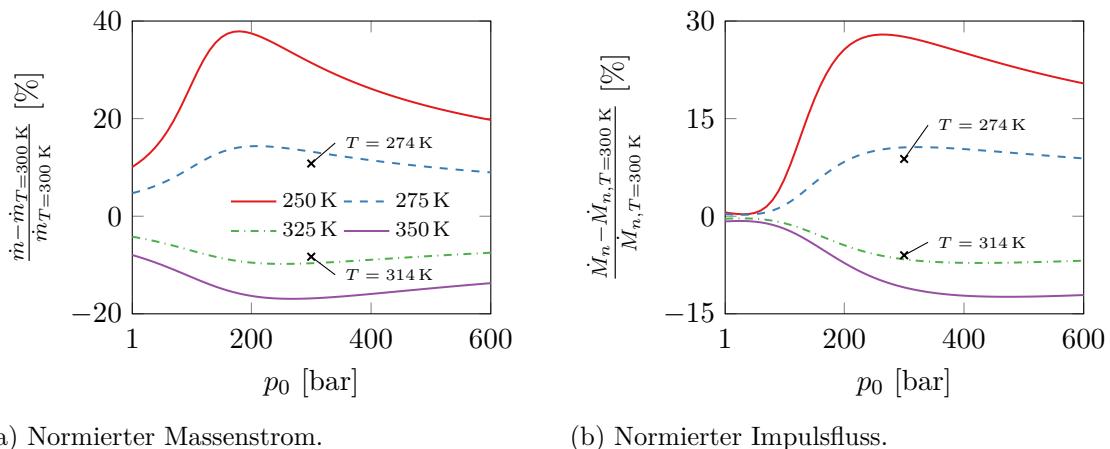
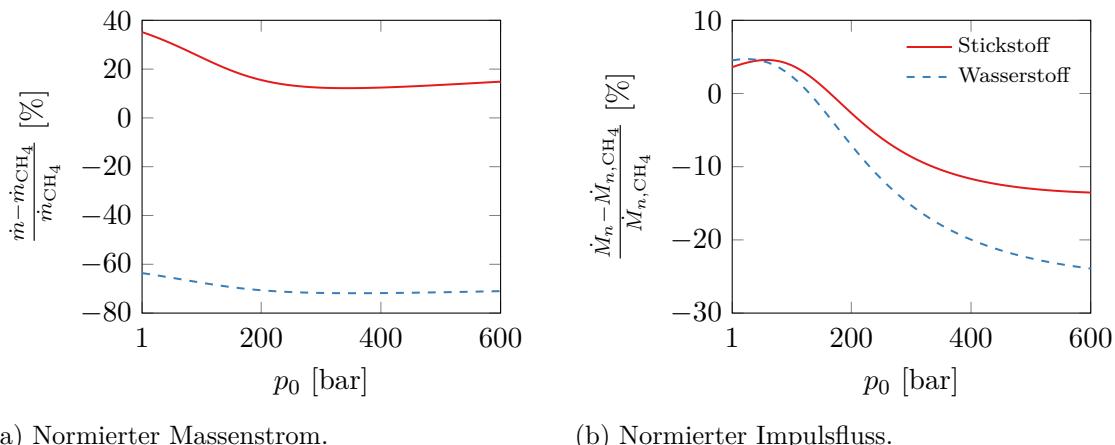


Abbildung 5.20. Einfluss der Brennstofftemperatur auf den Massenstrom und Impulsfluss bei kritischer Durchströmung mit  $\text{Ma} = 1$ .

Die Ergebnisse der CFD unterstreichen die Tendenz der eindimensionalen Berechnung bezüglich des Massenstroms. Wird die Temperatur um  $\Delta T_0 = 20\text{ K}$  auf  $274\text{ K}$  gesenkt, erhöht sich der Massenstrom um 7.1 %. Da die Schallgeschwindigkeit geringfügig kleiner wird, kommt es zu einer Erhöhung des Impulsflusses von 3.3 %, was sich deutlicher von den eindimensionalen Werten unterscheidet als die Vorhersage des Massenstroms. Für die erhöhte Temperatur mit  $T_0 = 314\text{ K}$  beträgt der in der CFD erreichte Massenstrom  $19.63\text{ g/s}$ . Wiederum wird die eindimensionale Tendenz bekräftigt ( $-8.4\%$  im Vergleich zu  $-8.3\%$  für die 1D-Werte). Ein in der CFD höherer Wert wird für den Impulsfluss erzielt. Dies widerspricht der 1D-Analyse, entsprechend ist das Strömungsprofil am Düsenaustritt unterschiedlich. Auf eine Darstellung der transienten Eindringtiefe und des volumetrischen Wachstums wird aufgrund der geringen Unterschiede von  $\Delta Z_{t,ref} = \pm 2\%$  und  $\Delta V_{j,ref} = \pm 2\%$  verzichtet.

### 5.3.3 Einfluss des Fluids - Reinstoff

Die strömungsmechanisch kritischen Größen von Stickstoff verhalten sich qualitativ ähnlich zu den Werten von Methan, vgl. Abbildung C.1 mit Abbildung 4.4. Durch die höhere kritische Dichte und die leicht niedrigere kritische Schallgeschwindigkeit ist der Massenstrom für Stickstoff über den gesamten Druckbereich größer, wobei die Werte für das geringere Drucklevel aufgrund des lokalen Minimums der Schallgeschwindigkeit von Methan größer sind, siehe Abbildung 5.21a. Im Verlauf für den Impulsfluss (Abbildung 5.21b) ist bis zu einem Druck von 160 bar ebenfalls ein leichter Anstieg zu erkennen. Der Wendepunkt im Impulsfluss lässt sich auf das lokale Minimum und die für größeren Drücke steigenden Schallgeschwindigkeiten zurückführen, die mit quadratischem Exponenten in die Berechnung des Impulsflusses eingehen. Für den Betriebspunkt mit einer Totaltemperatur von  $294\text{ K}$  und einem Druck von  $300\text{ bar}$  ergibt sich für Stickstoff eine Massenstromänderung von 11.0 % und eine Impulsflussänderung von  $-10.0\%$ . Die Verläufe für den Massenstrom und den Impulsfluss wurden mit den Werten von Methan normiert.



(a) Normierter Massenstrom.

(b) Normierter Impulsfluss.

Abbildung 5.21. Einfluss des Fluids auf den Massenstrom und Impulsfluss bei kritischer Durchströmung mit  $\text{Ma} = 1$ .

Zusätzlich zu den Verläufen von Stickstoff sind die Vergleichskurven von Wasserstoff eingetragen. Im Gegensatz zu Methan besitzt Wasserstoff eine um den Faktor 10 niedrigere kritische Dichte  $\rho^*$ , siehe Abbildung C.2. Zusammen mit der kritischen Schallgeschwindig-

keit, die um den Faktor 3 größer ist, ergibt sich für eine Totaltemperatur von 300 K und in einem Druckbereich von 1 bis 600 bar ein um maximal –71.8 % niedrigerer Massenstrom. Der Impulsfluss sinkt maximal um –24.0 %, siehe Abbildung 5.21. Auf eine numerische Strömungssimulation mit Wasserstoff wurde verzichtet. Da die eindimensionalen Berechnungen bis dato aber eine sehr gute Tendenz gezeigt haben, kann man hier von einem deutlich geringeren Massenstrom und Impulsfluss als bei Methan ausgehen. Für die numerische Simulation der Eindüsung von Wasserstoff bei 500 bar in Luft bei 100 bar wird auf Banholzer *et al.* [10] verwiesen. Eine direkte Gegenüberstellung der beiden Fluide kann den Arbeiten von Hamzehloo und Aleiferis [68, 69, 67] entnommen werden.

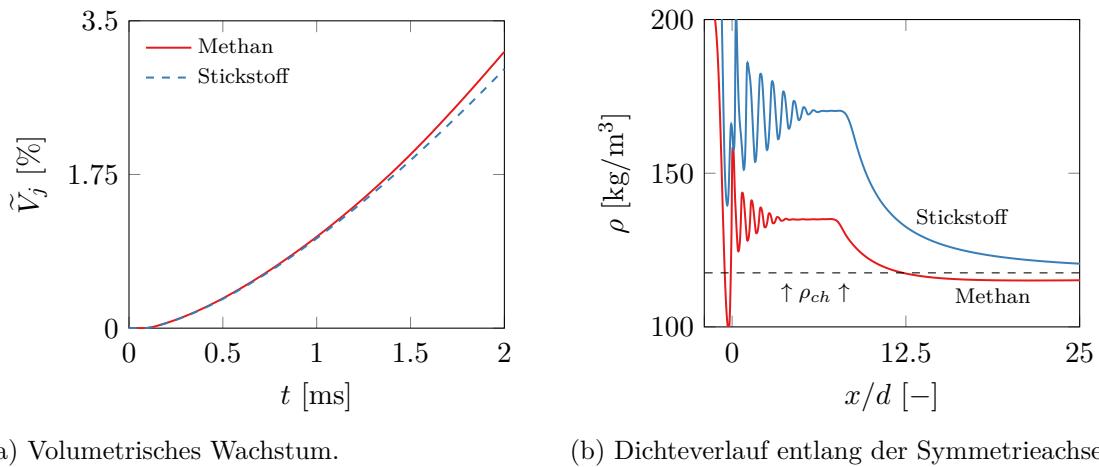


Abbildung 5.22. Einfluss des Reinstoffs auf das volumetrische Wachstum und die Dichte-Verteilung entlang der Symmetriearchse. Ergebnisse aus der 3D-CFD.

Aus der Strömungssimulation mit einem Totaldruck von  $p_0 = 300$  bar, einem Kammerdruck von  $p_{ch} = 100$  bar und einer Totaltemperatur von  $T_0 = 294$  K ergibt sich für Stickstoff ein Massenstrom von 23.91 g/s und ein Impulsfluss von 9.80 kg m/s<sup>2</sup>. Während die Tendenz des 1D-Modells für den Massenstrom mit 11.0 % im Vergleich zu der CFD mit 11.6 % sehr gut getroffen wird, zeigt sich für die Impulsflussänderung von 4.9 % wiederum eine Ungleichheit. Vergleicht man die Eindringtiefen und volumetrischen Wachstumskurven von Methan mit Stickstoff, lassen sich nur geringfügige Abweichungen feststellen. Die Eindringtiefen von Methan und Stickstoff sind deckungsgleich, auf eine Darstellung wird verzichtet. Für das volumetrische Wachstum in Abbildung 5.22a hingegen ergibt sich für Stickstoff ein um nach 2 ms –6.7 % niedrigeres Volumen. Dies suggeriert, dass die radiale Ausbreitung des Methanfreistrahls größer ist und Methan sich besser mit der Luft vermischt als Stickstoff. Einer der Gründe ist in Abbildung 5.22b dargestellt, in der für beide Fälle die Dichte-Verteilung des Freistrahls entlang der Symmetriearchse zu sehen ist. Aufgrund der viel größeren Stickstoffdichte im Plenum (42 %) ist die mittlere Dichte im Potenzialkern deutlich höher. Dies äußert sich in einem kompakteren Freistahl gegenüber Methan. Dadurch wird die Turbulenzproduktion in der Scherschicht verzögert und die Mischung mit der umgebenden Luft läuft langsamer ab. Nach Einsetzen der Mischung unterschreitet die Dichte des Methanfreistrahls die Kammerdichte von 117.6 kg/m<sup>3</sup>, der Stickstofffreistahl nähert sich der Kammerdichte von oben an. Beziiglich der axialen Eindringtiefe eignet sich Stickstoff gut als Ersatzbrennstoff im Prüfstandsbetrieb, die Gemischbildung und die Strö-

mungsgrößen im Freistrahrl unterscheiden sich aber signifikant. Ähnliche Ergebnisse werden in Vuorinen *et al.* [170] berichtet.

### 5.3.4 Einfluss des Fluids - Mischungen

Aufgrund von regionalen und zeitlichen Schwankungen in der Gasbeschaffenheit gibt es in Deutschland, aber auch weltweit, eine Vielzahl von Erdgasmischungen, die sich in ihren Komponenten und ihrer Zusammensetzung unterscheiden. Die Unternehmen und die anwendenden Industrien müssen daher sicherstellen, dass ihre Produkte eine hohe Flexibilität bezüglich der Erdgaszusammensetzung zeigen. Die in dieser Arbeit als Vergleich herangezogenen Zusammensetzungen wurden von der E.ON Ruhrgas AG in Essen [121] veröffentlicht und sind in Tabelle 5.4 aufgeführt. Es werden insgesamt drei verschiedene Zusammensetzungen verglichen, die sich in ihren Komponenten und ihrem Molenbruch deutlich unterscheiden: Bio-Erdgas, Russland H und Nordsee H. Zusätzlich zu den drei Erdgasmischungen ist eine Ersatzmethanmischung in der Tabelle aufgeführt. Diese besteht aus 99 mol-% Methan und 1 mol-% Luft. Für den aktuellen Betriebspunkt ist diese Zusammensetzung irrelevant.

Spezies [–]	Formel [–]	Bio-Erdgas		Russland H		Nordsee H		CH <sub>4</sub> -Ersatz	
		$z_i$ [%]	$w_i$ [%]	$z_i$ [%]	$w_i$ [%]	$z_i$ [%]	$w_i$ [%]	$z_i$ [%]	$w_i$ [%]
Methan	CH <sub>4</sub>	96.15	90.83	96.96	93.73	88.71	78.34	99.00	98.21
Ethan	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	0.00	0.00	1.37	2.48	6.93	11.47	0.00	0.00
Propan	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	0.00	0.00	0.45	1.20	1.25	3.03	0.00	0.00
Butan	C <sub>4</sub> H <sub>10</sub>	0.00	0.00	0.15	0.53	0.28	0.90	0.00	0.00
Pentan	C <sub>5</sub> H <sub>12</sub>	0.00	0.00	0.02	0.09	0.05	0.20	0.00	0.00
Hexan	C <sub>6</sub> H <sub>14</sub>	0.00	0.00	0.01	0.05	0.02	0.09	0.00	0.00
Stickstoff	N <sub>2</sub>	0.85	1.40	0.86	1.45	0.82	1.26	0.79	1.37
Kohlenstoffdioxid	CO <sub>2</sub>	3.00	7.77	0.18	0.47	1.94	4.71	0.00	0.00
Sauerstoff	O <sub>2</sub>	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.21	0.42

Tabelle 5.4. Gasbeschaffenheit der zu untersuchenden Erdgasmischungen. Der Molenbruch wird mit  $z_i$ , der Massenbruch mit  $w_i$  bezeichnet.

Durch die unterschiedlichen Zusammensetzungen der Erdgasmischungen wird der Massenstrom und der Impulsfluss beeinflusst, siehe Abbildung 5.23. Für die beiden Zusammensetzungen Bio-Erdgas und Russland H ergibt sich ein leicht höherer Massenstrom und Impulsfluss. Die Ergebnisse der Nordsee H-Mischung zeigen einen deutlich größeren Einfluss. Hier kann der Massenstrom unter Berücksichtigung des Totaldrucks um bis zu 12 % gesteigert werden. Für den Impulsfluss ergibt sich eine maximale Steigerung von 5.5 %. Die Steigerung der beiden Kennzahlen hängt maßgeblich mit der Dichte zusammen, die für die Zumischung der Alkane einen höheren Wert aufweist. Für den betrachteten Betriebspunkt in der CFD mit  $p_0 = 300$  bar und  $T_0 = 294$  K betragen die Änderungen des Massenstroms und des Impulsflusses 3.7 % und 1.0 % für das Bio-Erdgas, 2.8 % und 1.2 % für die Russland H-Mischung und 12.4 % und 6.2 % für die Nordsee H-Mischung.

Die mit dem 1D-Tool getroffenen Tendenzen für den Massenstrom werden für alle Erdgasmischungen bis auf kleinere Abweichungen durch die CFD bestätigt. Bezuglich des Impulsflusses am Düsenaustritt wird für alle Simulationen ein kleinerer Wert berechnet als

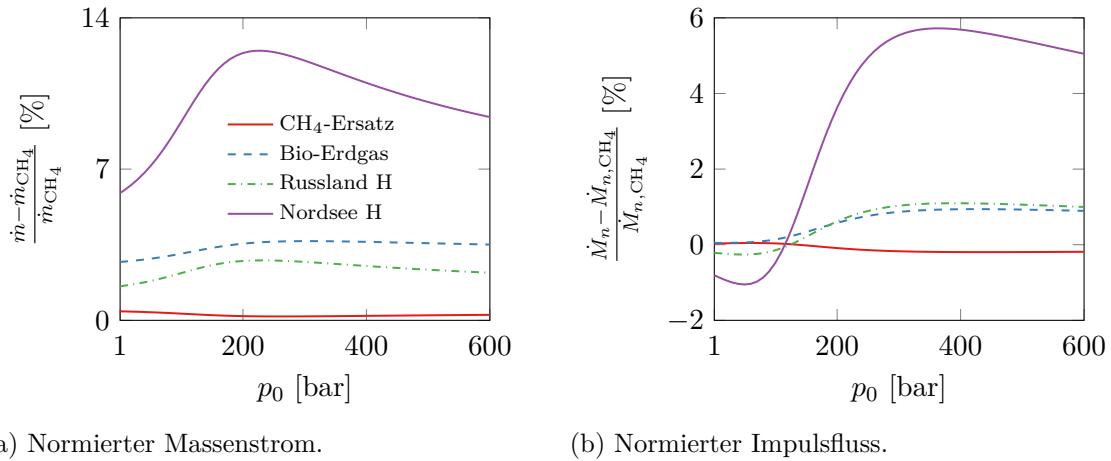


Abbildung 5.23. Einfluss der Brennstoff-Qualität auf den Massenstrom und Impulsfluss bei kritischer Durchströmung mit  $\text{Ma} = 1$  ( $T_0 = 300$  K).

bei der Referenz ( $\Delta \dot{M}_n \approx -2\%$ ). Dies widerspricht wieder deutlich der 1D-Tendenz. Entsprechend weichen die Kurven für die Eindringtiefe und für das volumetrische Wachstum nur geringfügig von den Referenzkurven ab und auf eine Darstellung wird verzichtet.

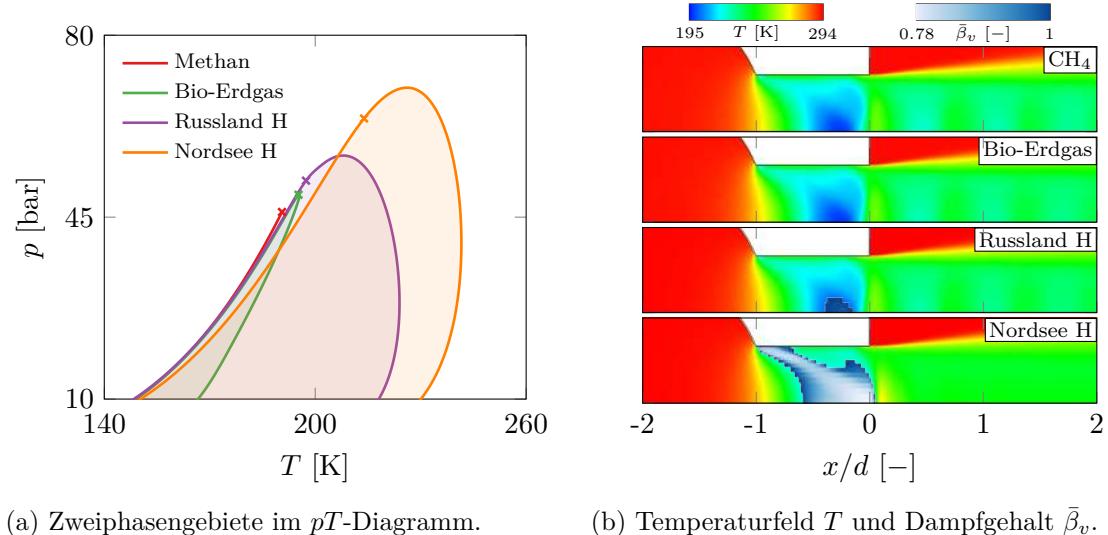


Abbildung 5.24. Einfluss der Brennstoffzusammensetzung auf das Zweiphasengebiet und die Strömung im Düsenannahmbereich.

Durch die verschiedenen Erdgaszusammensetzungen ändern sich nicht nur die strömungsmechanisch kritischen Größen für die Durchströmung, auch die thermodynamisch kritischen Größen bezüglich des Phasenübergangs werden beeinflusst und die Kondensations- und Verdampfungslinien verschieben sich. Abbildung 5.24a zeigt das  $pT$ -Phasendiagramm für die vier besagten Brennstoffe. Wird Methan mit einem geringen CO<sub>2</sub>- und N<sub>2</sub>-Anteil gemischt, zeigt sich dies bereits deutlich in der Phaseneinhüllenden, da die kritischen Werte  $T_c$  und  $p_c$  für Kohlenstoffdioxid höher sind als die für Methan, siehe Tabelle A.1. Für die

beiden Erdgasmischungen mit den zugesetzten Alkanen kommt es zu einer weiteren Ausweitung des Zweiphasengebiets. Mit dem Molekulargewicht der Alkane steigt auch die kritische Temperatur  $T_c$ . In Abbildung 5.24b ist der Temperaturplot der Strömung im Düsenannahmbereich dargestellt. Zusätzlich wird der massenspezifische Dampfgehalt  $\bar{\beta}_v$ , falls existent, überlagert. Das Ergebnis der Berechnung mit Bio-Erdgas gleicht der Referenzrechnung mit Methan. Für die Russland H-Mischung kommt es aufgrund der starken Expansion in der Düse zu einem Phasenzerfall und eine Flüssigkeitsphase bildet sich, welche einen kleinen Teil des Spritzlochs benetzt. Das Ergebnis der Nordsee H-Mischung zeigt ein sehr großes Kondensationsgebiet in der Düse. Dieses beginnt bereits im Expansionsfächer an der Verbindungskante zwischen Spritzloch und Düse und endet erst mit dem Stoß am Düsenaustritt, durch den das Fluid wieder in einen einphasigen Zustand verzögert wird.

## 5.4 Testfälle

Im vorliegenden Abschnitt wird zuerst der Versuchsaufbau und die Messtechnik der ETH in Zürich beschrieben. Mit einem Vergleich der numerischen Simulationen und der experimentellen Daten wird die entwickelte Methodik validiert und die fünf Testfälle werden ausführlich untersucht. Im Anschluss daran erfolgt nochmals eine Analyse beeinflussender Faktoren, die mit in Teilen vorhandenen Messdaten unterstützt wird. Im Gegensatz zu dem bereits betrachteten Betriebspunkt mit 100 bar Gegendruck findet die Eindüsung bei deutlich geringeren Kammerdrücken statt, wodurch sich stark unterexpandierte Freistrahlen mit Kondensationseffekten ausbilden. Ausgewählte Ergebnisse wurden in Banholzer *et al.* [9] vorveröffentlicht.

### 5.4.1 Experimenteller Aufbau

#### Prüfstand

Die in dieser Arbeit vorgestellten Experimente wurden vom Labor für Aerothermochemie und Verbrennungssysteme (LAV) an der ETH in Zürich durchgeführt, das zusammen mit dem Institut für Thermodynamik der Universität der Bundeswehr das FVV-Projekt akademisch bearbeitete. Der experimentelle Versuchsaufbau ist in Abbildung D.1a skizziert. Der maximale Druck für Methan, welches in transportablen Druckbehältern gelagert wird, beträgt 180 bar. Da dieses Drucklevel für die gewünschten Betriebspunkte nicht ausreicht, wird der Druck mit einem Maximator auf einen Totaldruck von 300 bar erhöht. Über eine elektronische Regelungseinheit gelangt das Methan zum Injektor, der seitlich in der Brennkammer integriert ist. Eine schematische CAD-Zeichnung der Kammer mit dem seitlich angebrachten Injektor ist in Abbildung D.1b illustriert. Die für die Messtechnik maximal sichtbare axiale Distanz beträgt  $\approx 80$  mm. Durch eine Bestromung des Injektors werden Magnetkräfte erzeugt, die die Öffnung der Gasnadel und somit die Injektion des Brennstoffs initiieren.

#### Messtechnik

Für die Visualisierung des Brennstoffstrahls kam die Schlierenmethode zum Einsatz, bei der die unterschiedlichen optischen Eigenschaften von Gebieten unterschiedlicher Dichte genutzt werden. Um die Qualität der Aufnahmen zu verbessern, werden diese in drei Schritten

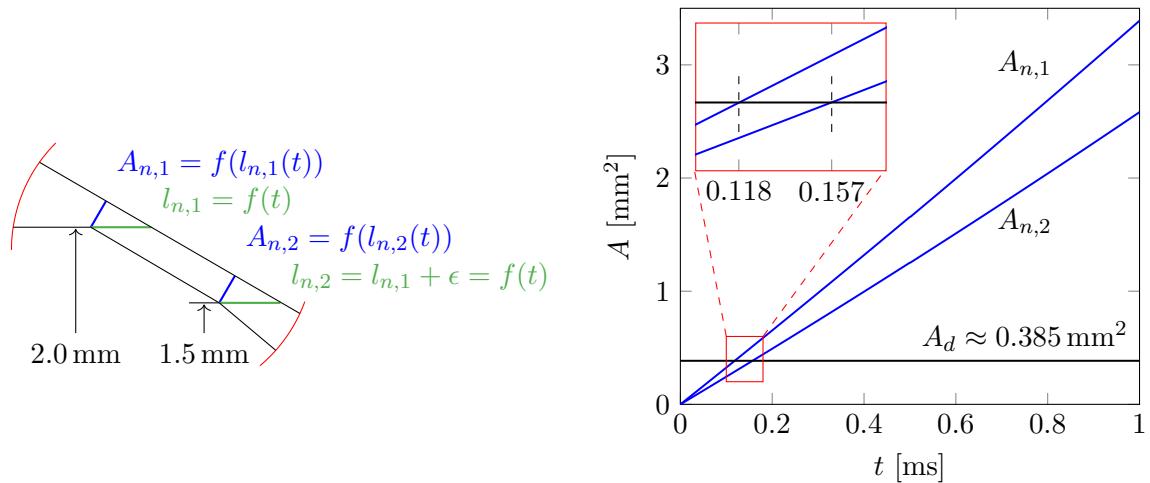
nachbearbeitet, siehe Anhang D. Im Gegensatz zur Simulation wird die zeitliche Eindringtiefe des Freistrahls nicht auf der Symmetrieachse des Freistrahles, sondern im gesamten Gebiet gemessen. Eine weitere Messtechnik, die zur Untersuchung möglicherweise auftretender Kondensationseffekte zur Anwendung kam, ist das Miestreuungsverfahren. Für eine detaillierte Beschreibung des Prüfstands und der Messtechniken wird auf die entsprechenden Veröffentlichung der ETHZ [178, 177, 14, 73] verwiesen.

### Nadelsitz

Eine detaillierte Darstellung des Nadelsitzes des Injektors ist in Abbildung 5.25a zu sehen. Für den verwendeten Injektor und die von Woodward L'Orange übernommenen geometrischen Abmessungen ergeben sich zwei axiale Abstände  $l_{n,1}$  und  $l_{n,2}$ , die sowohl in den Messungen, als auch in den Simulationen eine Funktion der Zeit sind. Die beiden Flächen verlaufen nicht exakt parallel zueinander, da der zweite Abstand mit  $l_{n,2} = l_{n,1} + \epsilon$  minimal größer ist. Wird in dieser Arbeit vom Nadelhub gesprochen, so ist dieser gleichbedeutend mit dem Abstand  $l_{n,1}$ . Ist die Nadel geschlossen, staut sich der Brennstoff am oberen Punkt  $l_{n,1}$ . Bedingt durch die beiden Abstände ergeben sich zwei unterschiedliche Flächen  $A_{n,1}$  und  $A_{n,2}$ , die wiederum eine Funktion des Nadelhubs sind und der Mantelfläche eines Kegelstumpfes entsprechen. Für eine angenommene, zur Veranschaulichung gewählte lineare Nadelöffnung innerhalb einer Millisekunde ergeben sich so die in Abbildung 5.25b ersichtlichen Flächen. Zusätzlich zu den Flächen, die durch die Bewegung der Nadel freigegeben werden, ist die Querschnittsfläche der Düse  $A_d$  eingezeichnet. Diese errechnet sich mit dem Düsendurchmesser von 0.7 mm zu  $\approx 0.385 \text{ mm}^2$ . In dem vergrößerten Rechteck in Abbildung 5.25b sind die Zeitpunkte markiert, ab wann die Querschnittsfläche der Düse kleiner ist als die Flächen  $A_{n,1}$  und  $A_{n,2}$  im Nadelsitz. Zwischen diesen beiden Zeitpunkten erfolgt bei der Öffnung der Nadel die Transition des gesperrten Querschnitts von der Nadel zur Düse. D.h. dass für  $t \geq 0.157 \text{ ms}$  der Düsenquerschnitt die kleinste Fläche ist und infolge dort Machzahlen  $\geq 1$  zu erwarten sind. Durch die weitere Nadelöffnung werden die Druckverluste über den Nadelsitz verringert und der Massenstrom wird vergrößert, bis der Maximaldruck im Sackloch dem Totaldruck im Plenum des Injektors entspricht. Der Nadelhubverlauf wird über einen Sensor am Prüfstand aufgezeichnet und für die Simulationen übernommen.

### Betriebspunkte und Nadelhubverlauf

Für die detaillierte Betrachtung der Eindüsung wurden fünf verschiedene Betriebspunkte definiert. Da die Mischkammer des Prüfstands bis zu einem maximalen Druck von  $\approx 75 \text{ bar}$  betrieben werden kann, einigte man sich im Projektarbeitskreis auf einen maximalen Kammerdruck von 60 bar, um den Prüfstand nicht an seinen Grenzen zu betreiben. In weiteren Betriebspunkten wird der Druck auf bis zu 12 bar abgesenkt, was bei einem Totaldruck des Brennstoffs von  $p_0 = 300 \text{ bar}$  zu Druckverhältnissen von  $\Pi = 5$  bis 25 führt. Die Temperaturen für den Brennstoff und die Luft in der Mischkammer wurden auf 294 K gesetzt. Für die Simulationen werden die Randbedingungen und der jeweilige am Prüfstand gemessene Nadelhubverlauf übernommen. Die Testfälle werden mit dem  $k\omega$ SSTCC-Turbulenzmodell berechnet, welches die in Abschnitt 2.5 beschriebene Kompressibilitätskorrektur enthält. Für den höchsten und niedrigsten Gegendruck wird zusätzlich eine Vergleichsrechnung mit dem Standard- $k\omega$ SST-Turbulenzmodell durchgeführt. Eine detaillierte Auflistung der Testfälle ist in Tabelle 5.5 zu finden. Wie der Tabelle zu entnehmen ist, wird als Brennstoff



(a) Detaillierte Darstellung des Nadelsitzes mit den beiden Abständen  $l_{n,1}$  und  $l_{n,2}$  und den daraus resultierenden Querschnittsflächen  $A_{n,1}$  und  $A_{n,2}$ .

(b) Verlauf der Querschnittsflächen während der Nadelöffnung. Der Transitionsvorgang für die gesperrte Strömung ist zwischen 0.118 ms und 0.157 ms zu erwarten.

Abbildung 5.25. Betrachtung des Nadelsitzes: Geometrie (a) und Transitionsvorgang (b).

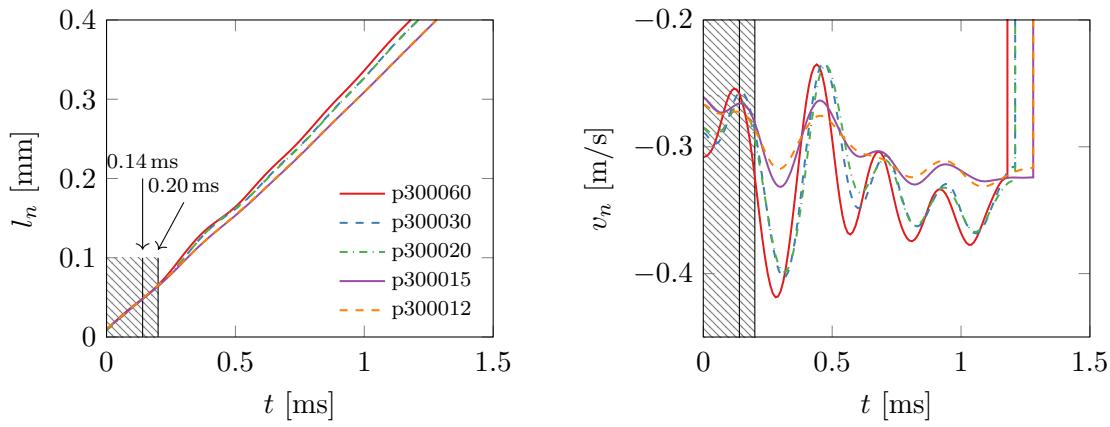
eine CH<sub>4</sub>-Ersatzmischung, bestehend aus 99 mol-% Methan und 1 mol-% Luft, verwendet. Dies hat den Hintergrund, dass die Phasengleichgewichtsberechnungen aufgrund der höheren Praxisrelevanz nur für mehrkomponentige Mischungen implementiert wurde. Durch die Beimischung von Luft werden die Eigenschaften von Methan minimal verändert. Eine Analyse des eindimensionalen Berechnungstools zeigt eine vernachlässigbare Erhöhung des Massenstroms um 0.17 % und eine Reduktion des Impulsflusses um -0.20 % gegenüber dem Reinstoff Methan. Die Gaszusammensetzung ist in Tabelle 5.4 zu finden, der Einfluss der Mischung auf den Massenstrom und den Impulsfluss über einen weit gefassten Druckbereich in Abbildung 5.23.

Testfall	Brennstoff	Ox.	$p_0$ [bar]	$p_\infty$ [bar]	$\Pi$ [-]	$T_0, T_\infty$ [K]	Turbulenzmodell
p300060	CH <sub>4</sub> -Ersatz	Luft	300	60	5	294	$k\omega$ SST, $k\omega$ SSTCC
p300030	CH <sub>4</sub> -Ersatz	Luft	300	30	10	294	$k\omega$ SSTCC
p300020	CH <sub>4</sub> -Ersatz	Luft	300	20	15	294	$k\omega$ SSTCC
p300015	CH <sub>4</sub> -Ersatz	Luft	300	15	20	294	$k\omega$ SSTCC
p300012	CH <sub>4</sub> -Ersatz	Luft	300	12	25	294	$k\omega$ SST, $k\omega$ SSTCC

Tabelle 5.5. Definierte Testfälle für den Vergleich zwischen Experiment und Simulation.

Der mit kubischen Splines geglättete und für die Simulationen aufbereitete Nadelhubverlauf ist in Abbildung 5.26a zu sehen. Für alle ausgewählten Testfälle ist der Nadelhub in etwa identisch. Er gleicht dabei einem fast linearen Verlauf, der von der für die CFD definierten Anfangsöffnung von 2 % des maximalen Nadelhubs beginnt und im Maximum bei  $l_{n,\max} = 400 \mu\text{s}$  endet. Die Anfangsöffnung der Nadel ist für die Bewegung des Netzes zwingend erforderlich, da diese über das Lösen einer Bewegungsgleichung erfolgt und

zu Beginn bereits diskretisierte Kontrollvolumina im Nadelstift enthalten sein müssen. Der Wert für die Anfangsöffnung von 2 % des maximalen Nadelhubs hat sich dabei aus numerischen Gründen ergeben, da für diesen die Spaltströmung bereits gut aufgelöst wird. Die Zeit für die Nadelöffnung beträgt 1.2 bis 1.25 ms. Bei höheren Gegendrücken erfolgt die Öffnung der Gasnadel aufgrund der höheren Druckkräfte an der Nadel etwas schneller. Des Weiteren sind für die Kammerdrücke von 20 bis 60 bar größere Schwingungen zu erkennen, die sich mit ausgeprägteren Maxima und Minima in der Nadelgeschwindigkeit äußern, siehe Abbildung 5.26b. Wird die Querschnittsfläche der Düse auf die Kegelstumpffläche und den Nadelhub im Nadelstift zurückgerechnet, ergeben sich für eine Transition des engsten Querschnitts zum Spritzloch die beiden Nadelhöhen  $l_{n,1} = 48.5 \mu\text{m}$  und  $l_{n,2} = 63.0 \mu\text{m}$ . Da die Öffnung der Nadel zu Beginn für alle Betriebspunkte sehr ähnlich ist, ergeben sich dadurch Zeiten von  $t_{n,1} = 0.14 \text{ ms}$  und  $t_{n,2} = 0.20 \text{ ms}$ . Der schraffierte Bereich in den Abbildungen 5.26a und 5.26b stellt die beiden Zeiten graphisch dar. Bis zum ersten vertikalen Strich wird der Nadelstift kritisch durchströmt. Die Transition der kritischen Strömung vom Nadelstift zum Spritzloch erfolgt zwischen der ersten und der zweiten vertikalen Markierung.



(a) Nadelhubverlauf.

(b) Nadelgeschwindigkeit.

Abbildung 5.26. Gemessener und für die Simulationen aufbereiteter Nadelhubverlauf und Nadelgeschwindigkeit der fünf Testfälle.

#### 5.4.2 Validierung

Für den Abgleich der Ergebnisse der numerischen Strömungssimulation mit den Experimenten dienen der von der ETHZ ermittelte Eindringtiefenverlauf, der aus den Schlierenaufnahmen extrahiert wurde, sowie die Aufnahmen des Miestreuungsverfahrens. Für die Validierung werden dabei nur die jeweiligen Ergebnisse miteinander verglichen. Eine detaillierte Diskussion der auftretenden Phänomene wird im nächsten Unterabschnitt durchgeführt. Eine Netzunabhängigkeitstudie mit den drei bekannten Auflösungen von Tabelle 5.1 wurde für den p300020-Testfall durchgeführt. Aufgrund der gleichen Schlussfolgerungen wird auf eine genaue Betrachtung verzichtet. Alle in dieser Arbeit diskutierten Simulationen basieren somit auf dem *Gitter2* mit einer Düsenauflösung von 40 Zellen in radialer und 56 Zellen in axialer Richtung.

Da die zeitliche Aufnahme des Nadelhubverlaufs von der Schlieren- und der Miestreu-

ungsmessmethode entkoppelt war, wurde für die Experimente der zeitliche Nullpunkt so deklariert, dass dieser mit dem ersten Erreichen des Brennstoffs der Mischkammer übereinstimmt. Mit dem gleichen Vorgehen werden die simulativ erzeugten Kurven verschoben. Eine Gegenüberstellung der transienten Eindringtiefen ist in Abbildung 5.27a und 5.27b dargestellt. Durch ein Absenken des Gegendrucks wird die Dichte in der Mischkammer verringert und der Brennstoffstrahl dringt folglich schneller in die Mischkammer ein. Die langsame Nadelöffnung verursacht zunächst eine lineare  $t$ -Abhängigkeit der Eindringtiefe. Erst zu einem späteren Zeitpunkt, mit Erreichen des maximalen Massenstroms, geht der Verlauf in eine  $\sqrt{t}$ -Abhängigkeit über. Dieses Verhalten ist für alle Betriebspunkte detektierbar, der Zeitpunkt des Umschlags von dem linearen zu dem wurzelförmigen Verlauf ist unabhängig von dem Druck in der Mischkammer und wird maßgeblich von dem Nadelhub beeinflusst. Beide Tendenzen, das schnellere Eindringen des Brennstoffstrahls bei niedrigeren Kammerdrücken und das zunächst lineare Eindringverhalten, spiegeln sich in den Ergebnissen der Experimente und den Resultaten der Simulationen wieder. Wie in Tabelle 5.5 angemerkt, wurden zwei weitere Simulationen mit dem Standard- $k\omega$ SST-Turbulenzmodell durchgeführt, welche zusätzlich der Abbildung zu entnehmen sind. Der bereits diskutierte Einfluss des Turbulenzmodells auf die Strömung im Potenzialkern und in der Gemischbildung (siehe Abschnitt 5.2.2) zeigt sich auch hier deutlich. Während der qualitative Kurvenverlauf identisch ist, werden für die beiden Testfälle p300060 und p300012 signifikant geringere Einträge in der Mischkammer berechnet.

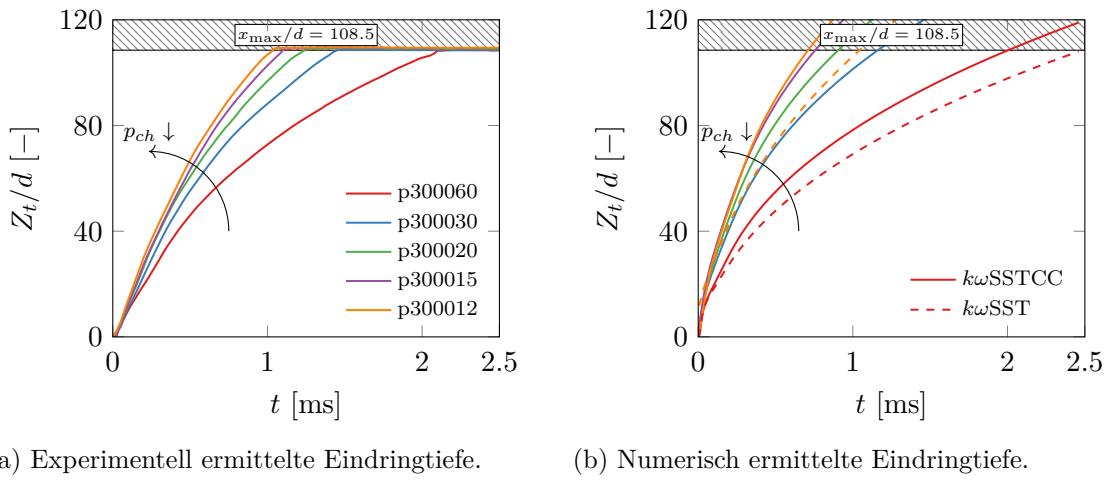


Abbildung 5.27. Gegenüberstellung der experimentell und numerisch ermittelten Eindringtiefen.

Eine gesonderte Betrachtung der fünf Betriebspunkte ist in Abbildung 5.28 dargestellt. Durch die Verschiebung der Kurven auf den Eindüsungsbeginn bei  $t = 0$  ms werden die Verläufe des Experiments für alle Betriebspunkte, die mit dem  $k\omega$ SSTCC-Turbulenzmodell berechnet wurden, überschätzt. Für den höchsten Kammerdruck von 60 bar zeigt sich eine sehr gute Übereinstimmung. Der zu Beginn größere Gradient der Eindringtiefe kann auf den in der Simulation modellierten Nadelöffnungsprozess zurückgeführt werden. Bei Verwendung des Standard- $k\omega$ SST-Turbulenzmodells entspricht der Verlauf zu Beginn dem  $k\omega$ SSTCC-Verlauf, die Transition zur  $\sqrt{t}$ -Proportionalität erfolgt jedoch früher und der Gradient der Brennstofftrajektorie ist geringer. Bezogen auf die transiente Eindringtiefe lie-

fert die Simulation mit dem  $k\omega$ SSTCC-Turbulenzmodell für den p300060-Testfall mit dem höchsten Gegendruck die besseren Ergebnisse, für den p300012-Testfall mit dem niedrigsten Gegendruck das  $k\omega$ SST-Turbulenzmodell. Für spätere Simulationszeiten mit  $t > 0.5$  ms passt die Steigung der Eindringtiefe des  $k\omega$ SSTCC-Turbulenzmodells gut mit den Messdaten überein.

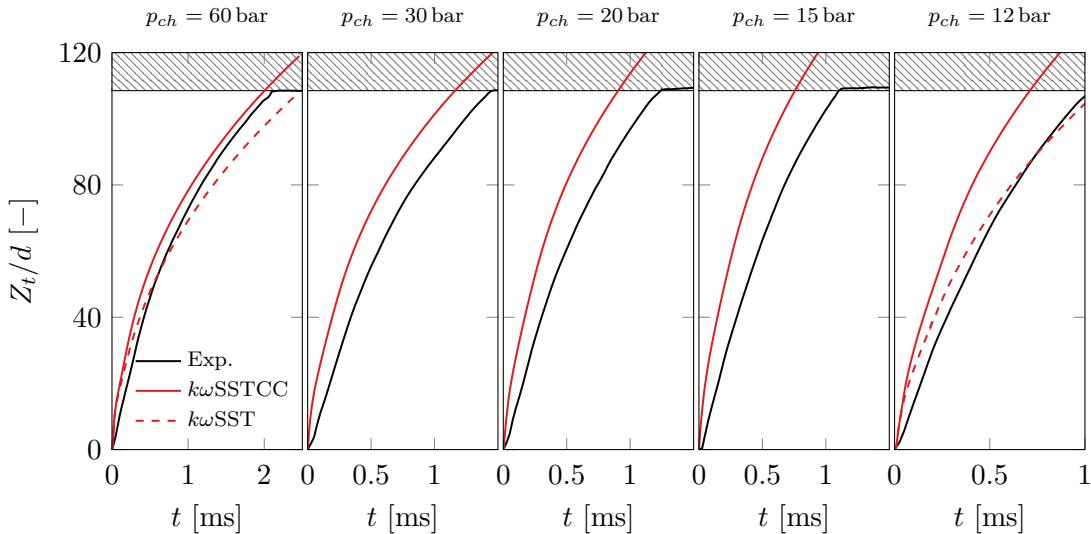


Abbildung 5.28. Vergleich der zeitlichen Eindringtiefe  $Z_t/d$  für die fünf definierten Testfälle mit Gegendrücke von 12 bis 60 bar.

Eine weitere Validierungsmöglichkeit besteht in dem Vergleich der zeitgemittelten Ergebnisse des Miestreungsverfahrens mit der Strömungssimulation, siehe Abbildung 5.29. Für die Ergebnisse der Simulation wurde der Massenbruch von Methan  $w_{\text{CH}_4}$  mit dem massenspezifischen Dampfgehalt  $\bar{\beta}_v$  überlagert. Für den höchsten Gegendruck von 60 bar kommt es zu keinen Kondensationseffekten im Brennstofffreistrahl. Durch eine Absenkung des Drucks in der Mischkammer auf 30 bar werden die Expansionsvorgänge verstärkt und es bildet sich eine zweite, flüssige Phase aus. Für den Testfall p300030 können in der gemittelten Aufnahme sieben hellere Bereiche ausgemacht werden, die mit einem Pfeil markiert sind und je einen diamantförmigen Expansionsvorgang repräsentieren. Das Gebiet mit den Kondensationseffekten erstreckt sich bis zu einem maximalen axialen Düsenabstand von  $x/d \approx 20$ . Auch in der Simulation kommt es zu der Ausbildung von diamantförmigen Expansionsstrukturen, in denen das Fluid einen Phasenübergang von der Gasphase zur Flüssigkeitsphase vollzieht. Für den maximalen axialen Düsenabstand der Zweiphasigkeit wird ein Wert von  $x/d = 20.7$  berechnet. Die vom Experiment übernommene Position der weißen, horizontalen Linien, die die maximale radiale Ausbreitung des Kondensationsgebietes angibt, stimmt mit den Ergebnissen der Simulation sehr gut überein. Für einen Druck von  $p_{ch} = 20$  bar werden die diamantförmigen Expansionsstrukturen in axialer Richtung gestreckt. In den Aufnahmen des Experiments sind die einzelnen Strukturen nicht mehr klar voneinander trennbar, die Verzögerungen des Fluids zwischen den Expansionsprozessen werden somit geringer und das Fluid bleibt präferiert in dem Zweiphasenzustand. Dieser Trend ist auch in der Simulation erkennbar und ein Anwachsen des Kondensationsgebietes mit einer maximalen axialen Ausdehnung von  $x/d = 26.5$  findet statt. Für einen Gegendruck von  $p_{ch} = 15$  bar unterscheidet sich die Struktur des Potenzialkerns signifikant von

den zuvor betrachteten Betriebspunkten. Sowohl in der Messung, als auch in der Simulation wird der Potenzialkern von einem Mantel eingehüllt, der sich durch eine existente Zweiphasenmischung auszeichnet.

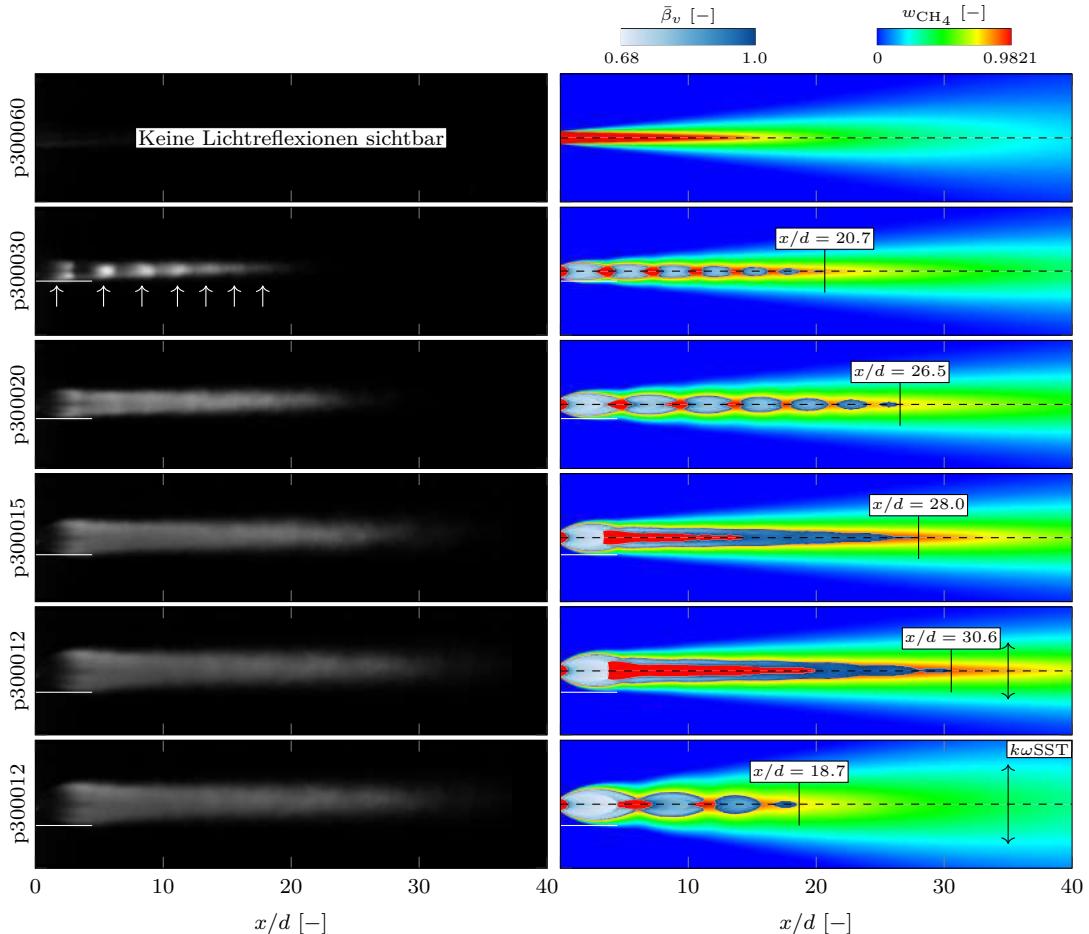


Abbildung 5.29. Vergleich der Miestreuungsmessungen (linke Spalte) mit den numerisch erzielten Ergebnissen (rechte Spalte) für die Methaneindüsung bei  $p_0 = 300$  bar und  $T_0 = 294$  K in ruhende Luft mit verschiedenen Gegendrücken und einer Temperatur von  $T_\infty = 294$  K. Für den letzten Testfall mit einem Gegendruck von 12 bar ist zusätzlich das Ergebnis der Strömungssimulation mit dem Standard- $k\omega$ SST-Turbulenzmodell dargestellt.

Für den letzten Testfall werden zusätzlich die Ergebnisse der beiden Turbulenzmodelle betrachtet. In der oberen Hälfte ist das  $k\omega$ SSTCC-Modell, in der unteren Hälfte das Standard- $k\omega$ SST-Modell dargestellt. Das Standard- $k\omega$ SST-Turbulenzmodell ist nicht in der Lage, die korrekte Physik der Strömung wiederzugeben. Dies lässt sich sowohl an der Struktur des Zweiphasengebiets, als auch an dessen Länge erkennen, die mit  $x/d = 18.7$  deutlich unterschätzt wird. Für das  $k\omega$ SSTCC-Modell zeigt sich eine sehr gute Übereinstimmung. Bei dem Vergleich der Experimente mit den Simulationen stellt sich somit heraus, dass die in dieser Arbeit entwickelte Modellierung sehr gut dafür geeignet ist, die wesentlichen Charakteristiken und Eigenschaften der Hochdruckeindüsung darzustellen. Für die Entwicklung des Freistrahls im Fernfeld des Injektors kommt es jedoch zu größeren, dem Turbulenzmodell geschuldeten Diskrepanzen.

### 5.4.3 Diskussion der Testfälle

In diesem Abschnitt werden die fünf Testfälle im Detail betrachtet. Mit Bezug auf Abbildung 5.29 zeigen sich für vier der fünf Testfälle Kondensationseffekte im Freistrahlgelände. Da sich die Struktur der beiden Testfälle mit  $p_{ch} = 30$  bar und  $p_{ch} = 20$  bar grundlegend von den Testfällen mit einem geringeren Kammerdruck unterscheidet, werden diese getrennt voneinander betrachtet.

#### Testfall p300030 und p300020

Für die beiden Simulationen mit den Kammerdrücken 30 und 20 bar kommt es zu einer Ausbildung von diamantförmigen Stoß- und Expansionsfiguren, die in ihrer Form und Charakteristik der Schematik in Abbildung 2.12 entsprechen. Zum besseren Verständnis wird der Testfall mit einem Gegendruck von 20 bar in Abbildung 5.30 gesondert diskutiert, limitiert auf den Nahbereich der Düse von  $x/d = -2.5$  bis 7.5. Zusätzlich zu dem bereits betrachteten Freistrahlgelände wird die Düsenströmung in die Betrachtung miteinbezogen. In allen vier Darstellungen wurde eine Isolinie für  $\text{Ma} = 1$  hinzugefügt. Aufgrund des sehr großen Druckverhältnisses von  $\Pi = 15$  kommt es bereits in der Düse zu Überschallgebieten und der gesperre Querschnitt verschiebt sich vom Düsenaustritt zum Düsenbeginn. Hinter der Verbindungskante zwischen dem Sackloch und der Düse kommt es aufgrund der Ablösung zu einem Rezirkulationsgebiet, welches aber sehr klein ausfällt. Am Düsenaustritt legt die Strömung wieder an die Wand an. Am Austritt beschleunigt eine Prandtl-Mayer-Expansion das Fluid auf sehr hohe Geschwindigkeiten mit Machzahlen von bis zu 3.75. Die hohen Machzahlen werden durch die einsetzenden Kondensationseffekte erzielt, da die Schallgeschwindigkeit im Zweiphasengebiet deutlicher niedriger ist als in der Gas- bzw. Flüssigkeitsphase. Der Expansionsfänger wird an den Isolinien konstanten Drucks reflektiert und die zur Symmetriechse laufenden Kompressionswellen engen den Freistrahlgelände ein und verzögern das Fluid. Durch die Spiegelung der Kompressionswellen an der Symmetriechse des Freistrahls kommt es zu einem nach außen laufenden Stoß, der an den äußeren Stromlinien als Expansionsfänger reflektiert wird. Die erneute Expansion resultiert in einem sich wiederholenden Diamanten und in einer erneuten Kondensation (vgl. Baab *et al.* [8], die ähnliche Ergebnisse berichten).

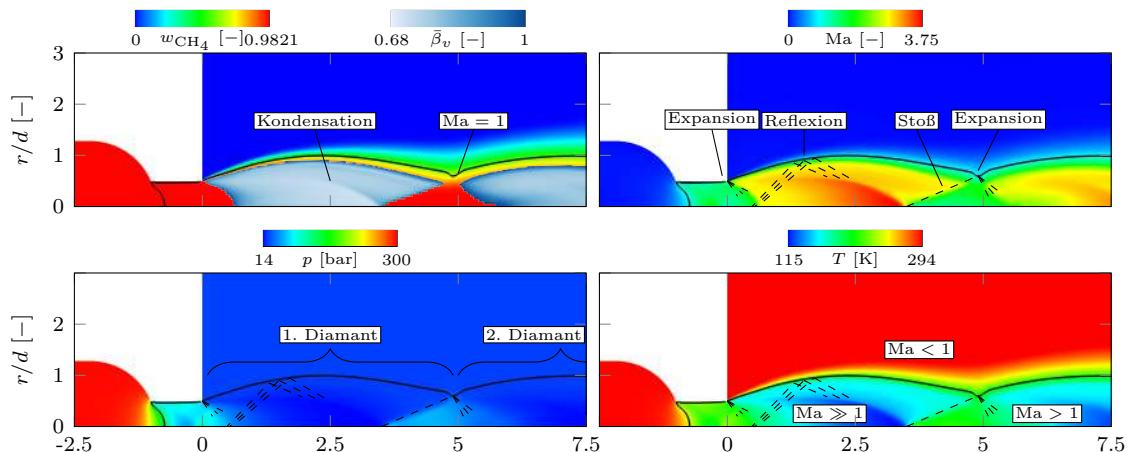
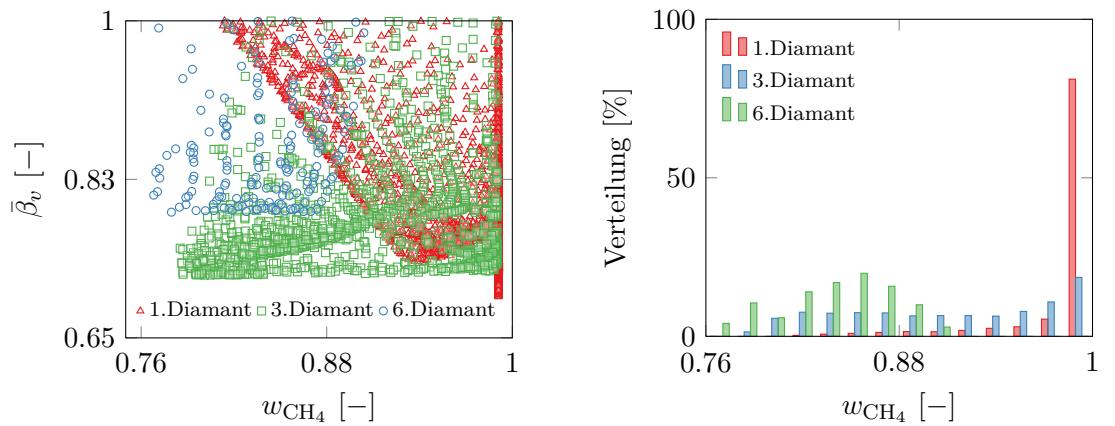


Abbildung 5.30. Nahaufnahme des p300020-Testfalls: Konturplot für den Massenbruch  $w_{\text{CH}_4}$ , den Dampfgehalt  $\bar{\beta}_v$ , die Mach-Zahl  $\text{Ma}$ , den Druck  $p$  und die Temperatur  $T$ .

Einen genaueren Überblick über die durch den Expansions- und Mischprozess auftretenden Kondensationseffekte erhält man, wenn die entsprechenden Zellen extrahiert und gesondert dargestellt werden, siehe Abbildung 5.31. Die Verteilung des Dampfgehalts  $\bar{\beta}_v$  bezogen auf den Massengehalt des Brennstoffs  $w_{\text{CH}_4}$  für drei der sieben diamantförmigen Expansionsstrukturen, die in Abbildung 5.29 zu sehen sind, ist in Abbildung 5.31a dargestellt. Jede Berechnungszelle entspricht dabei einer Markierung in der Abbildung. Für den ersten Diamanten, der die stärkste Expansion erfährt, sinkt der Dampfgehalt auf bis zu 0.68. Wenige Zellen am Rand der Expansion werden bereits mit dem umgebenden Fluid vermischt und der sich daraus ergebende Methangehalt sinkt auf  $\approx 0.82$ . Dies lässt sich gut mit der Verteilung in Abbildung 5.31b zeigen, in der mehr als 80 % der betrachteten Zellen nach wie vor die Zusammensetzung des Brennstoffs mit  $w_{\text{CH}_4} = 0.9821$  besitzen. Für den dritten Diamanten steigt der minimale Dampfgehalt auf 0.77 und es zeigt sich eine stärkere Mischung mit der Luft, der Massengehalt des Methans sinkt auf 0.79 am Rand des Kondensationsgebiets. Die Dominanz des expansionsbedingten Phasenzerfalls, wie sie für den ersten Diamanten ersichtlich wurde, lässt nach und Mischvorgänge sorgen für eine stärkere Beimischung des umgebenden Fluids. Der Wechsel vom rein expansionsbedingten zum expansions- und mischungsbedingten Phasenzerfall erfolgt schließlich für den sechsten Diamanten, in dem nur noch Zustände mit einer erhöhten Beimischung der Luft vorhanden sind.



(a) Dampfgehalt in Bezug auf den Massenbruch von Methan. (b) Verteilung der Zellen der drei betrachteten Diamanten.

Abbildung 5.31. Gesonderte Darstellung des Zweiphasengebiets. Jede Markierung stellt einen kondensierten Zustand dar.

### Testfall p300015 und p300012

Wird der Gegendruck auf 15 und 12 bar abgesenkt kommt es zu einer Änderung der Strömungsstruktur im Potenzialkern, siehe Abbildung 5.32. Die Düsenströmung gleicht dem p300020-Testfall. Aufgrund der stärkeren Expansion an der Düsenaustrittskante vergrößert sich der Winkel der Stromlinien und eine Reflexion des Expansionsfächers an den Stromlinien resultiert nun nicht mehr in zur Symmetriearchse laufenden Kompressionswellen, sondern in einem normalen Stoß, der sogenannten Mach-Scheibe. Der Punkt, an dem die Machscheibe und der schräge Stoß zusammen laufen, wird Tripel-Punkt genannt. Ausgehend von die-

sem bildet sich ein Stoß, der nach außen zur Stromlinie läuft und dort als Expansionsfänger reflektiert wird. Durch den starken Stoß befinden sich die Nachstoßzustände in einem einphasigen Zustand. Der vom Tripel-Punkt ausgehende Stoß ist deutlich schwächer und die Zustände in der Scherschicht sind weiterhin zweiphasig. Diese Struktur wird so jedoch nur vom  $k\omega$ SSTCC-Turbulenzmodell wiedergegeben, für das Standard- $k\omega$ SST-Modell bleibt es bei der für den p300020-Testfall diskutierten Form. Die verbesserte Modellierung durch die Kompressibilitätskorrektur wird zum einen von dem Vergleich mit den experimentellen Daten in Abbildung 5.29 gestützt, zum anderen sind ähnliche Effekte in den Veröffentlichungen von Vuorinen *et al.* [171, 170] dargestellt.

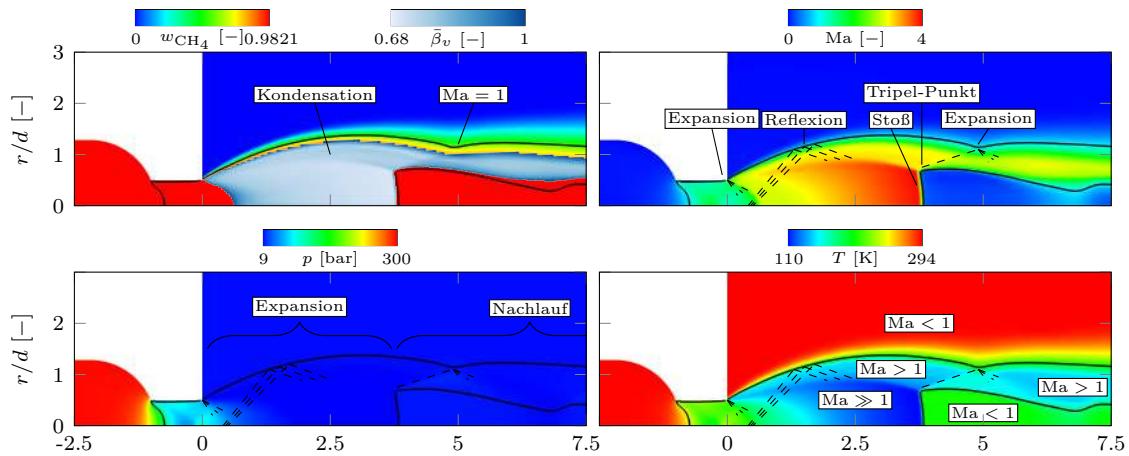


Abbildung 5.32. Nahaufnahme des p300012-Testfalls: Konturplot für den Massenbruch  $w_{\text{CH}_4}$ , den Dampfgehalt  $\bar{\beta}_v$ , die Machzahl  $\text{Ma}$ , den Druck  $p$  und die Temperatur  $T$ .

Eine gesonderte Betrachtung des Kondensationsgebiets führt zu den gleichen Erkenntnissen wie für den p300020-Testfall. In der einzigen diamantförmigen Expansionsstruktur findet nur in den äußeren Zonen eine Mischung mit der umgebenden Luft statt und der Phasenzerfall ist expansionsbedingt. Die Zellen im Nachlauf zeigen eine erhöhte Beimischung der Luft und der Phasenübergang findet bei höheren Drücken und Temperaturen statt als im Expansionsgebiet. Auf eine grafische Darstellung wird verzichtet.

### Gegenüberstellung p300020 und p300012

Ein direkter Vergleich einiger Strömungsgrößen auf der Symmetriearchse für die beiden Testfälle p300020 und p300012 zeigt weitere Besonderheiten, die sich unter anderem auf den Phasenzerfall und die Struktur im Freistrahler zurückführen lassen. Zusätzlich zu den axialen Verläufen wurde in jedem einzelnen Schaubild der zweiphasige Bereich mit  $\bar{\beta}_v < 1$  farbig hinterlegt, siehe Abbildung 5.33. Im ersten Teil des Potenzialkerns, bis zu einem axialen Abstand zum Düsenaustritt von  $x/d \approx 15$ , dominieren die Expansionsprozesse das Strömungsbild. Die Brennstoffzusammensetzung bleibt intakt und eine Mischung mit dem umgebenden Fluid findet noch nicht statt. In der ersten Expansion führt die Beschleunigung des Fluids zu einer starken Absenkung des Drucks und der Temperatur, einhergehend mit einer Unterschreitung der Sättigungspunkte und einem Phasenzerfall der Gasphase in Gas- und Flüssigkeitsphase. Bedingt durch die Zweiphasigkeit sinkt die Schallgeschwindigkeit deutlich ab, wodurch sich in der Machzahl ein Sprung ergibt und Werte von bis zu 4 erreicht werden. Durch die unterschiedlichen Gegendrücke in der Kammer ändert sich

der erste Expansionsprozess geringfügig. Für den niedrigeren Gegendruck werden höhere Machzahlen und niedrigere Drücke und Temperaturen erzielt, was sich auch im massenspezifischen Dampfgehalt ( $\min(\bar{\beta}_{v,12\text{ bar}}) = 0.683$ ,  $\min(\bar{\beta}_{v,20\text{ bar}}) = 0.697$ ) und in der axialen Länge bis zum ersten Stoß äußert. Für den niedrigeren Gegendruck von  $p_{ch} = 12\text{ bar}$  ist der Stoß am Ende der ersten Expansion sehr stark und der Nachstoßzustand subsonisch. Durch die fehlende, erneute Expansion in den supersonischen Bereich bleiben die Zustände stabil in der Gasphase. Im Gegensatz dazu kommt es für den p300020-Testfall zu einer erneuten Beschleunigung, durch die Druck und Temperatur wieder abgesenkt werden und sich der gleiche Expansionsprozess wie für den ersten Diamanten wiederholt.

Weitere interessante Effekte zeigen sich in den Darstellungen der Temperaturleitfähigkeit  $\alpha = \lambda/\rho/c_p$  und des Diffusionskoeffizienten  $D$ . Die Temperaturleitfähigkeit wird im Zweiphasengebiet analog zu den anderen Größen wie bspw. der Dichte linear abgemischt. Durch die Beimischung des Flüssigkeitsgehalts fällt diese auf einen sehr kleinen Wert. Der Diffusionskoeffizient  $D = \alpha/\text{Le}/\rho$  skaliert invers zur Lewis-Zahl Le und zur Dichte  $\rho$ . Die Lewis-Zahl wird für die gesamte Arbeit auf eins gesetzt, wodurch die Diffusion nur noch von der Temperaturleitfähigkeit  $\alpha$  und der Dichte  $\rho$  beeinflusst wird. Da die Dichte im Zweiphasengebiet weniger stark fällt, werden sehr kleine Werte für den Diffusionskoeffizienten in der Größenordnung von  $3 \times 10^{-10}$  bis  $5 \times 10^{-9}\text{ m}^2/\text{s}$  erzielt. An dieser Stelle soll dies als reines Ergebnis der Simulation betrachtet werden, zumal der Diffusionskoeffizient mit der  $\text{Le}=1$ -Annahme approximiert wird.

Ein Vergleich der Profile entlang der Symmetriearchse des Testfalls p300020 mit den Verläufen des ersten in dieser Arbeit betrachteten Betriebspunktes mit einem Gegendruck von 100 bar in Abbildung 5.4 zeigt, dass der quasi periodische Kurvenverlauf der Strömungsgrößen, der durch die wiederholte Expansion und Kompression des Fluids entsteht, verloren gegangen ist. Für den p300012-Testfall ist dieser Verlauf nicht zu erwarten, da hier ein einzelner Expansionsprozess die komplette Struktur der Freistrahls dominiert. Betrachtet man zusätzlich die Druck- und Temperaturprofile für den Testfall mit einem Gegendruck von 60 bar, bei dem keine Kondensation, aber auch eine Abfolge von Expansions- und Verzögerungsprozessen präsent ist, bleiben diese Diskrepanzen bestehen. In den ersten drei diamantförmigen Strukturen des Testfalls p300020 kommt es an deren Ende zu relativ starken, nicht geraden Stößen. Die schräg einlaufenden Kompressionswellen interagieren mit den Nachstoßzuständen und bilden das leicht chaotische Muster aus, das sich in den Druck- und Temperaturfeldern bemerkbar macht. Ein ähnliches Phänomen zeigt sich für den Brennstoffmassenbruch. Ab einem axialen Düsenabstand von  $x/d \approx 15$  setzt für den p300020-Testfall die Mischung ein und der Brennstoff vermischt sich mit der umgebenden Luft. Bei dem p300012-Testfall ist dies etwas später ab  $x/d \approx 20$  der Fall. Für den p300020-Testfall fällt auf, dass der Methanmassenbruch in den Expansionsfächern nicht invers proportional abnimmt. Vielmehr fällt dieser zu Beginn eines jeden Diamanten relativ gering ab und erfährt nach 2/3 einen Knick. Mit dem Konturplot der Geschwindigkeitskomponente senkrecht zur Hauptströmungsrichtung  $u_y$  in Abbildung 5.34 kann dieser Effekt erklärt werden. Für den ersten Diamanten zeigt sich eine sehr starke Prandtl-Mayer-Expansion, die sich bis zu den Kurven konstanten Drucks ausbreitet und von dort reflektiert wird, resultierend in einem zur Mitte laufenden, schrägen Stoß. Dadurch ergeben sich zwischen dem Stoß und den äußeren Stromlinien Gebiete mit einer sehr hohen negativen Geschwindigkeit, das Fluid strömt zur Symmetriearchse hin. Die Strömungsstruktur wird über alle Diamanten aufrecht erhalten und bei jeder Reflexion der nach außen laufenden Expansionswellen laufen diese als Kompressionswellen in die entgegengesetzte Richtung zur Symmetriearchse hin.

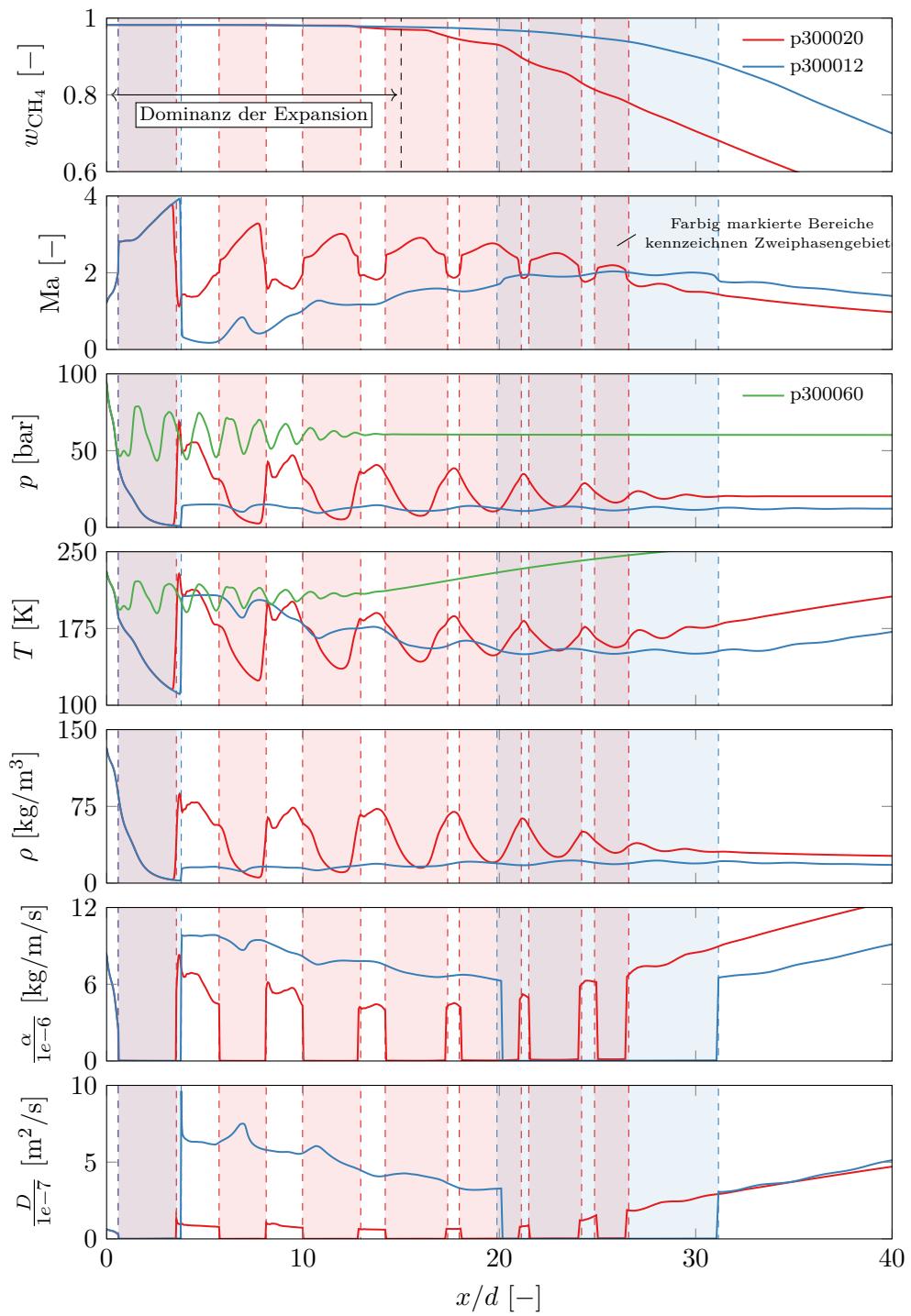


Abbildung 5.33. Verlauf einiger Strömungsgrößen entlang der Symmetrieachse des Injektors. Die farbig hinterlegten Bereiche kennzeichnen die jeweiligen Zweiphasengebiete im Freistrahrl.

Dadurch kommt es insbesondere in der zweiten Hälfte der diamantförmigen Strukturen zu einer schnelleren Vermischung des Brennstoffs mit dem umgebenden Fluid und der besagte Knick in Abbildung 5.33 entsteht. Bestätigt wird dies durch die Form der Brennstoffisokurven bei  $w_{\text{CH}_4} = 0.9$ , die zu Beginn eines jeden Diamanten nach außen, und mit den negativen radialen Geschwindigkeiten stärker nach innen verlaufen.

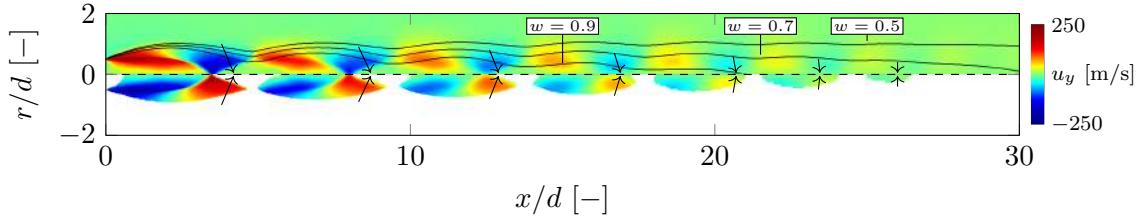


Abbildung 5.34. Geschwindigkeitskomponente senkrecht zur Hauptströmungsrichtung  $u_y$ . In der oberen Hälfte sind zusätzlich Isokurven für den Brennstoff bei  $w_{\text{CH}_4} = 0.5, 0.7$  und  $0.9$  eingetragen. In der unteren Hälfte wurde die Darstellung auf die Kondensationsgebiete reduziert.

Werden die Skalierungsfaktoren  $A$  und  $x_d$  der Konzentrationsverteilung entlang der Symmetriearchse des Modells von Birch *et al.* auf die Ergebnisse der Simulation angepasst, ergeben sich Werte für  $A$  von 5.51 bis 6.13 und Werte für  $x_d/d =$  von 5.91 bis 14.6. Problematisch ist hier vor allen Dingen der Abfall des Konzentrationsprofils, da dieser nicht mehr invers proportional zum Achsenabstand erfolgt. Für niedrigere Gegendrücke wird der Potenzialkern länger und die Mischung setzt bei größeren axialen Düsenabständen ein. Entsprechend muss die virtuelle Verschiebung des Düsenursprungs größer werden und die Modellkonstanten müssen für den jeweiligen Betriebspunkt skaliert werden. Auf eine Darstellung wird verzichtet.

### Phasenzerfall während der Nadelöffnung

Für alle fünf Testfälle erfolgt ein erster Phasenzerfall bereits zu Beginn der Simulation im Nadelsitz. Einzelne Momentaufnahmen während der Nadelöffnung werden anhand des p300020-Testfalls gezeigt, sind aber für alle Testfälle bis auf die Stärke der Expansion und des entsprechenden Phasenzerfalls identisch. Abbildung 5.35 zeigt eine Nahaufnahme des Injektors (oben) und des Nadelsitzes (unten) für vier verschiedene Zeitpunkte 0.01 ms, 0.05 ms, 0.09 ms und 0.13 ms. Bereits nach 0.01 ms benetzt der Brennstoff den kompletten Nadelsitz und ist bis zum Sackloch vorgedrungen. Direkt nach dem engsten Querschnitt zeigt sich aufgrund des hohen Druckverhältnisses eine sehr starke Expansion, durch die die Temperatur auf 130 K und der Druck auf 4 bar abgesenkt werden und eine Phasentrennung in eine Gasphase und in eine Flüssigkeitsphase (bis zu  $\beta_l = 0.25$ ) stattfindet. Durch die Kompression der Luft im Sackloch kommt es zu einer massengemittelten Temperaturerhöhung auf  $\bar{T} = 326$  K. Bedingt durch das Koexistieren beider Phasen sinkt die Schallgeschwindigkeit im Zweiphasengebiet auf  $\approx 230$  m/s ab. In Folge des nachströmenden Brennstoffs kommt es zu einer Druckerhöhung im Sackloch. Das Druckverhältnis zwischen Injektorplenum und Sackloch wird somit geringer und die Expansion und der Phasenzerfall nehmen ab. Für den letzten dargestellten Zeitschritt bei 0.13 ms beträgt der volumengemittelte Druck im Sackloch 182 bar und das Zweiphasengebiet ist auf eine Berechnungszelle geschrumpft. Der kritische Querschnitt verschiebt sich allmählich zur Düse, was sehr gut

mit der Vorabanalyse des Transitionsvorgangs in Abschnitt 5.4.1 übereinstimmt. Die Reduktion der Schallgeschwindigkeit stromab des Nadelsitzes verringert den Massenstrom zu Beginn der Nadelöffnung. Da der Massenstrom linear mit der Schallgeschwindigkeit skaliert, wird dieser mit dem gleichen Faktor beeinflusst.

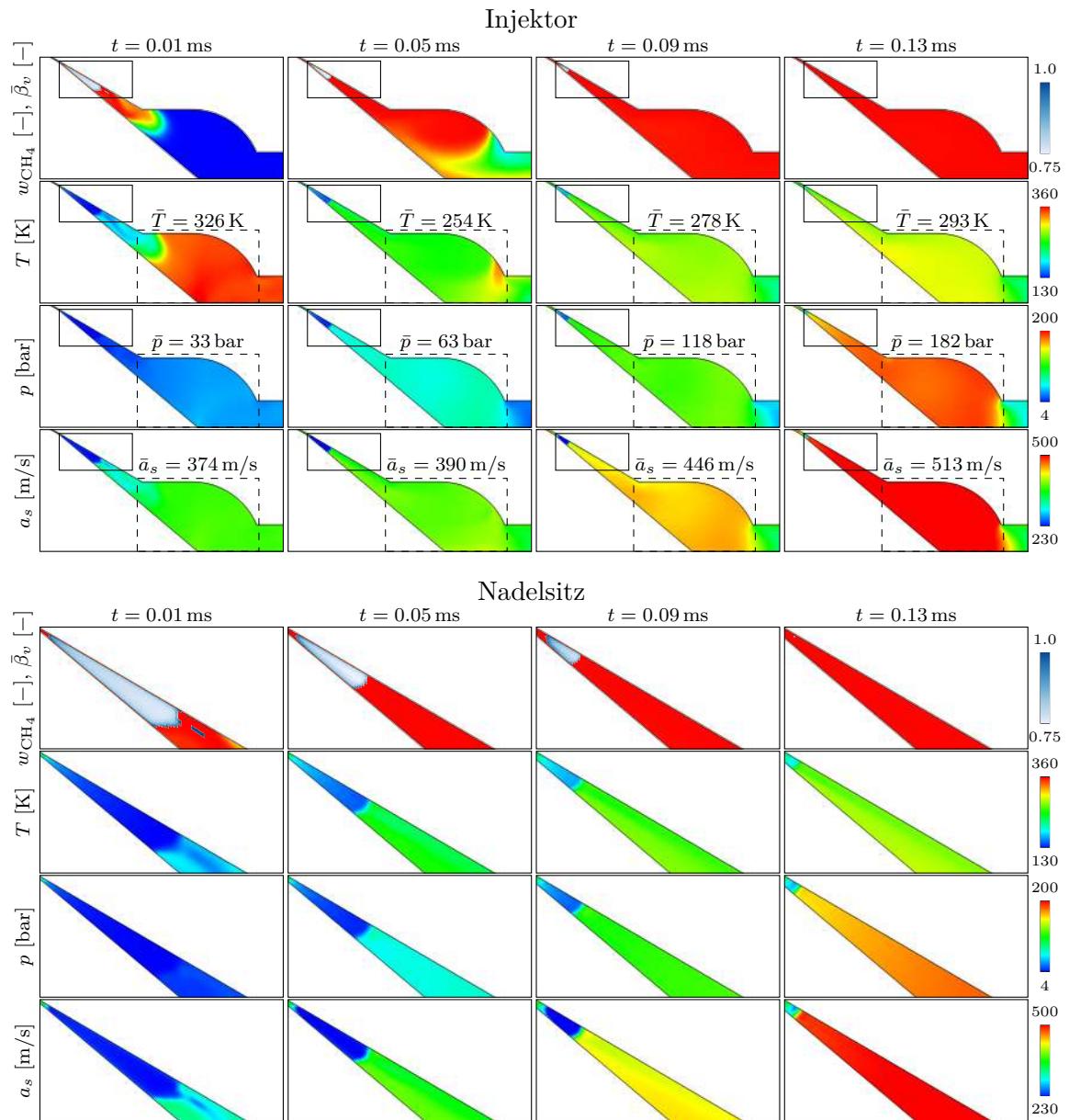


Abbildung 5.35. Strömungsgrößen im Injektor (oben) und Nadelsitz (unten) zu Beginn der Öffnung der Gasnadel. Jede Spalte entspricht einem Zeitschritt, verschiedene Strömungsgrößen können den einzelnen Reihen entnommen werden.

### Einfluss des Nadelhubverlaufs

Die bis dato vorgestellten Ergebnisse der anwendungsnahen Eindüsung resultieren aus einer simulierten Nadelöffnung mit einer maximalen Öffnungszeit von 1.25 ms. Da es sich bei dem Injektor um einen umfunktionierten Dieselinjektor handelt, wurde die Öffnungszeit der Gasnadel nicht für gasförmige Fluide konzipiert und ist für den Anwendungsfall zu lang. Neuere Konstruktionen ermöglichen eine deutlich schnellere Öffnung der Nadel. Des Weiteren ist die Simulation des Nadelöffnungsprozesses aufgrund der kleinen Zellen im Nadelsitz und dem daraus resultierenden Zeitschritt sehr rechenintensiv. Um diese Punkte zu umgehen und eine schnelle Öffnung der Gasnadel zu modellieren, wird die gleiche Approximation aus Abschnitt 5.1 verwendet (Druckrampe mit  $\Delta t = 0.1$  ms).

Der Phasenzerfall während der Nadelöffnung wurde bereits diskutiert und der Fokus liegt nun auf dem transienten Verhalten der beiden Freistrahlen (Nadelöffnung und Druckrampe) im Düsennahrbereich für den p300020-Testfall. Dazu wurden in Abbildung 5.36 die Momentaufnahmen der beiden Simulationen mit und ohne Nadelöffnung für fünf verschiedene Zeitschritte gegenübergestellt. Zusätzlich können der Abbildung der Massenstromverlauf für den Beginn der Eindüsung und die gemittelten Temperatur- und Druckwerte  $\bar{T}$  und  $\bar{p}$  im Sackloch entnommen werden. In den Ergebnissen mit simulierter Nadelöffnung existieren zum ersten dargestellten Zeitpunkt noch Kondensationsgebiete im Nadelsitz und die dort auftretenden Strömungsverluste lassen den Druck im Sackloch nur langsam ansteigen. Mit dem Auftreffen des Brennstoffs auf das Spritzloch wird ein erster Teil der Brennstoffmasse in die Brennkammer befördert, die Strömung im Spritzloch sperrt aber instantan und ein weiteres Nachströmen des Brennstoffs wird verzögert, wodurch es zu der dargestellten Ungleichverteilung für  $x/d < 10$  kommt. Wird die Nadelöffnung nicht simuliert, kommt es durch die schnelle Druckerhöhung am Nadelsitz zu einem deutlich schnelleren Druckaufbau und der Brennstoff im Sackloch wird aufgrund der gesperrten Düse komprimiert ( $\bar{T} = 390$  K). Die Maximaltemperatur des Brennstoffs wird mit fortschreitender Zeit langsam verringert, wodurch sich eine im Vergleich zur Nadelöffnungssimulation unterschiedliche Strömungsform im Nahfeld der Düse bildet. Kondensationseffekte zeigen sich erst später. Durch die langsame Nadelöffnung und die auftretenden niedrigen Schallgeschwindigkeiten im Nadelsitz wird der den Düsenaustritt passierende Massenstrom fast linear erhöht. Für die Zeitpunkte mit  $t > 0.5$  ms ist der maximale Massenstrom erreicht und die Strömung im Potenzialkern gleicht der bereits diskutierten Strömung in Abbildung 5.30 und 5.34.

Die Auswirkungen des schnelleren Gasnadelöffnens auf die Eindringtiefen sind in Abbildung 5.37a dargestellt. Der zu Beginn lineare Anstieg, der aus dem linear steigenden Massenstrom und Impulsfluss resultiert, entfällt und die Proportionalität zur Wurzelfunktion der Zeit ist sofort sichtbar. Dies führt insbesondere für die erste Millisekunde zu deutlich größeren Eindringtiefen. Mit der Zeit werden die Diskrepanzen der beiden Verläufe kleiner, da der maximale Massenstrom und der Impulsfluss für  $t > 0.5$  ms maximal werden. Der sphärische Wirbel wird in beiden Fällen durch die gleiche Düsenströmung vorangetrieben und die anfänglichen Unterschiede verschwinden mit fortschreitender Zeit. Ein ähnliches Bild ergibt sich für das volumetrische Wachstum in Abbildung 5.37b. Im Gegensatz zur Eindringtiefe wird die Differenz der jeweiligen Verläufe zueinander nicht kleiner, da mit der größeren axialen Eindringtiefe auch eine breitere, radiale Ausbreitung verbunden ist. Da die Nadelöffnungszeiten im Anwendungsfall eher kürzer gewählt werden, ist eine Modellierung der Nadelöffnung entscheidend für die Beurteilung der Gemischbildung. Zu ähnlichen Erkenntnissen kommen auch Keskinen *et al.* [86] und Deshmukh *et al.* [46].

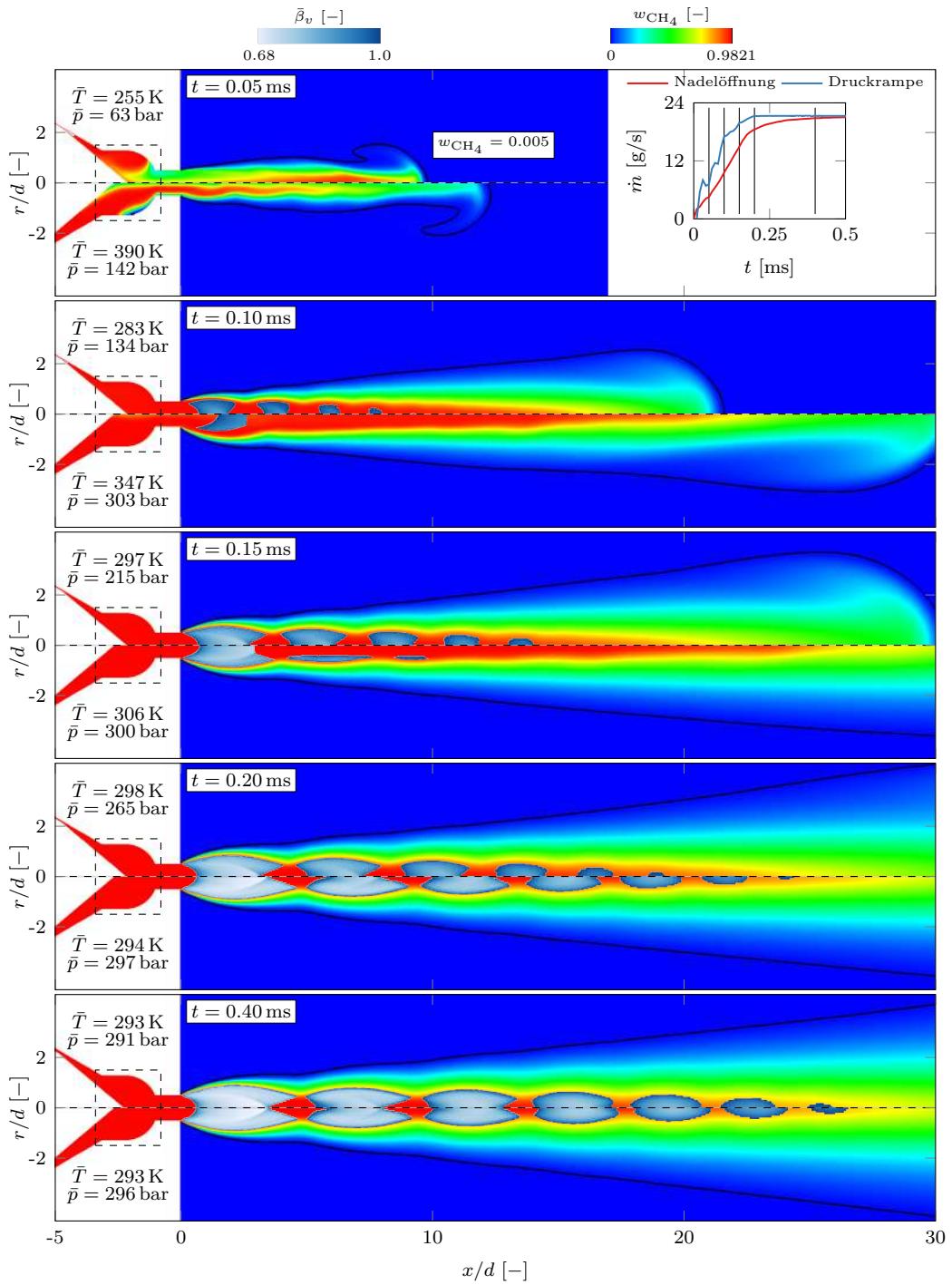


Abbildung 5.36. Vergleich des transienten Verhaltens der beiden Freistrahlen mit (obere Hälften der einzelnen Momentaufnahmen) und ohne simulierter Nadelöffnung (untere Hälften). Die schwarze Linie markiert die Isokontur für den Brennstoff mit  $w_{\text{CH}_4} = 0.005$ . Zusätzlich ist die massengemittelte Temperatur  $\bar{T}$  und der volumengemittelte Druck  $\bar{p}$  des Sacklochs mit angegeben. Im oberen Bild rechts ist der Massenstrom zu finden, die fünf Zeitpunkte für die dargestellten Momentaufnahmen sind markiert.

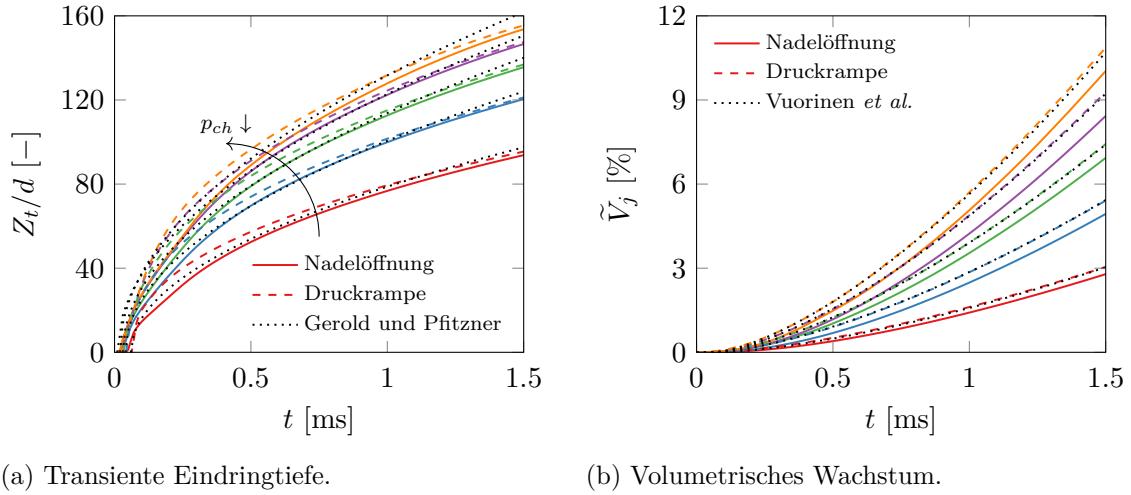


Abbildung 5.37. Einfluss des Nadelhubverlaufs auf die Eindringtiefe und das volumetrische Wachstum des Brennstofffreistrahls (Gerold und Pfitzner [56], Vuorinen *et al.* [171]).

Unter Einbeziehung der Korrelation von Gerold und Pfitzner [56] ergibt sich mit einem Skalierungsfaktor von  $\Gamma = 2.74 \pm 0.06$  eine insbesondere für hohe Gegendrücke gute Übereinstimmung der transientes Eindringtiefen. Die Eindringtiefe ist dabei laut Gerold abhängig von dem Impulsfluss und der Dichte am Düsenaustritt, dem Durchflusskoeffizienten, der Dichte in der Mischkammer und der Zeit, siehe Gleichung 2.71. Seine Messungen und die Daten der Experimente aus der Literatur, die zu der Korrelation geführt haben, fanden allerdings bei Betriebspunkten statt, für die die nicht-linearen thermodynamischen Effekte vernachlässigt werden können (Totaldrücke bis zu 40 bar [56]). Für die Dichten in der Kammer ist die Annahme eines thermisch idealen Gases durchaus gerechtfertigt. Für einen Totaldruck von 300 bar zeigt sich aber ein deutlich größerer Impulsfluss am Düsenaustritt und ein nicht-linearer Anstieg der Werte unter Anwendung der Realgasthermodynamik, siehe Abschnitt 5.2. Dieser verletzt die Annahmen des Modells und der Skalierungsfaktor muss entsprechend niedriger sein. Die Approximation des volumetrischen Wachstums von Vuorinen *et al.* [171] mit einer Abhängigkeit vom Dichtequotienten  $\rho_0/\rho_{ch}$  und der Zeit passt sehr gut zu den numerisch bestimmten Werten ( $\Gamma = 0.08 \pm 0.002$ ).

#### 5.4.4 Einphasiger Ansatz

Durch den einphasigen Ansatz aus Abschnitt 2.4.3 können zweiphasige Zustände, falls sich diese im metastabilen Bereich befinden, vermieden werden. Es bleibt zu klären, inwieweit die Zweiphasigkeit und die sich daraus ergebenden Stoffeigenschaften (Mischungsdichte, verringerte Schallgeschwindigkeit, etc.) die Gemischbildung beeinflussen und ob diese Unterschiede im Anwendungsfall vernachlässigt werden können. Dazu wird zunächst Abbildung 5.38 betrachtet, in der die Strömungsstruktur im Nahfeld der Düse mit und ohne Phasenzerfall verglichen wird. Dargestellt ist der p300012-Testfall mit einem Gegendruck von 12 bar und einer Brennstoff- und KammerTemperatur von 294 K. Die Resultate der anderen Testfälle fallen analog zu dem besprochenen Testfall aus und unterscheiden sich nur in ihren Größen. Da die Kondensation stromab des Düsenaustritts stattfindet, sind für die Injektorinnenströmung keine Abweichungen festzustellen. Strömungsgeschwindigkeiten mit

$\text{Ma} > 1$  werden aufgrund der Prandtl-Mayer-Expansion direkt am Übergang vom Sackloch zum Spritzloch erreicht und durch die weitere Expansion bleibt die Strömung bis zum ersten Stoß im Überschallbereich. Für den Kondensationsfall in der linken Spalte ergibt sich in der diamantförmigen Expansionsstruktur eine minimale größere Ausbreitung in radialer Richtung. Die Position der Machscheibe wird unbeträchtlich in axialer Richtung verschoben, wohin gegen die Vergrößerung des Radius deutlich sichtbarer ist. Dies ist im Einklang mit den Erkenntnissen von Crist *et al.* [40], die ebenso einen Einfluss der Kondensation auf die Dimension der Machscheibe, nicht aber auf deren Position beschreiben.

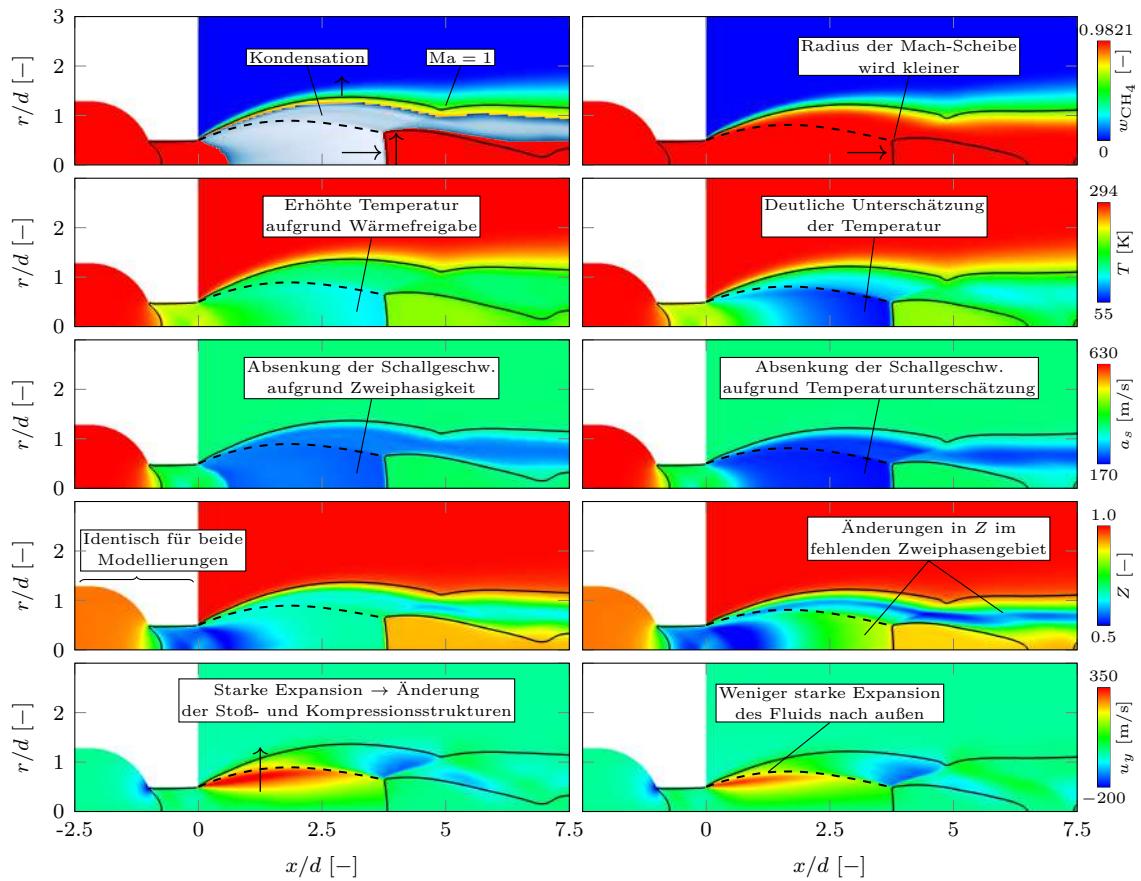
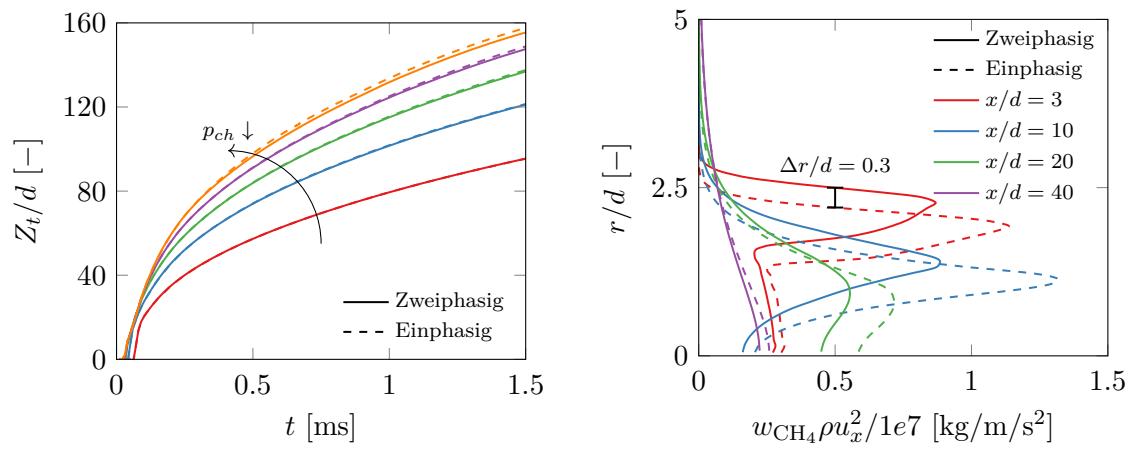


Abbildung 5.38. Vergleich der düsennahen Strömungsstruktur des p300012-Testfalls für die beiden unterschiedlichen thermodynamischen Modelle. In der linken Spalte wurden Kondensationseffekte ( $0.68 < \bar{\beta}_v < 1$ ) mit den Phasengleichgewichtsberechnungen berücksichtigt, die rechte Spalte spiegelt die Ergebnisse des einphasigen Ansatzes wieder.

Wie bereits angemerkt, wird die minimale Temperatur des Freistrahls mit  $T = 55\text{ K}$  für den einphasigen Testfall im Vergleich zu  $110\text{ K}$  für den Kondensationsfall deutlich unterschätzt. Mit einem minimalen Dampfgehalt von  $\bar{\beta}_v = 0.68$  wird durch den Kondensationsprozess viel Wärme freigegeben, wodurch die Temperatur im Zweiphasengebiet höher ist. Das sehr starke Absenken der Schallgeschwindigkeit auf  $200\text{ m/s}$  für den Kondensationsfall kann mit dem Eintritt ins Zweiphasengebiete erklärt werden, siehe Abschnitt 2.4.4 und 2.4.5. Für die Simulation mit dem einphasigen Ansatz ist die Verringerung der Schallgeschwindigkeit mit Werten von  $170\text{ m/s}$  sogar noch stärker. Dies resultiert rein aus der

dargelegten Temperaturunterschätzung. Im Kompressibilitätsfaktor  $Z = pv / (\mathcal{R}_u T)$  wird die getroffene Annahme mit dem maximalen Wert der drei Lösungen  $Z = \max(Z_1, Z_2, Z_3)$  nochmals deutlich. Obwohl die Temperatur für den einphasigen Ansatz zum Teil um 50 % unterschätzt wird, ist der Kompressibilitätsfaktor nur minimal geringer. Dies ist damit zu erklären, dass das spezifische Volumen ebenfalls unterschätzt wird und zusammen mit dem minimal kleineren Druck die niedrigere Temperatur ausgleicht. Die Abweichungen in  $Z$  sind insbesondere im Expansionskern und in der sich aufbauenden Scherschicht deutlich. Die Vergrößerung der Machscheibe in radialer Richtung kann mit der Konturdarstellung der Geschwindigkeit senkrecht zur Hauptströmungsrichtung  $u_y$  begründet werden. Der sich aufspannende Expansionsfänger von der Düsenaustrittskante aus ist in seinem Betrag aufgrund der unterschiedlichen Stoffeigenschaften im Zweiphasengebiet sehr viel stärker. Entsprechend werden die nach außen laufenden Expansionen später von den Isolinien konstanten Drucks als Kompressionswellen reflektiert.



(a) Transiente Eindringtiefe der fünf Testfälle. (b) Radiales Impulsprofil.

Abbildung 5.39. Einfluss der einphasigen Modellierung auf Eindringtiefe und Impulsfluss.

Der Einfluss des einphasigen Modells auf die transiente Eindringtiefe ist in Abbildung 5.39a dargestellt. Mit stärker werdenden Kondensationseffekten nimmt die Diskrepanz zwischen der zweiphasigen und der einphasigen Modellierung zu. Dies trifft ebenso auf das volumetrische Wachstum zu, auf eine zusätzliche Abbildung wird verzichtet. In Abbildung 5.38 wurde angesprochen, dass die Temperatur im einphasigen Ansatz deutlich unterschätzt wird und die abgeleiteten Größen ebenso variieren. Dazu zählt eine höhere Dichte und eine geringfügig niedrigere Geschwindigkeit im Potenzialkern des Freistrahls. Für den p300012-Testfall ist in Abbildung 5.39b der radiale Verlauf des Impulses für Methan  $w_{CH_4} \rho u_x^2$  und verschiedene axiale Abstände dargestellt. Für den ersten axialen Abstand mit  $x/d = 3$  lässt sich eine größere radiale Ausbreitung für den zweiphasigen Ansatz mit  $\Delta r/d = 0.3$  feststellen (stärkerer radialer Expansionsfänger an der Düsenaustrittskante). Die für den zweiphasigen Ansatz größeren Impulswerte im Zentrum des Freistrahls (kleinere Strömungsgeschwindigkeit, größere Dichte) führen zu einem schnelleren Eindringen des Brennstoffs. Für den axialen Abstand mit  $x/d = 10$  ist die Abweichung des Impulses in der Einhüllenden des Potenzialkerns nochmals deutlicher. Mit zunehmendem axialen Abstand nehmen die Diskrepanzen ab.

### 5.4.5 Temperaturvariation

Da für den weiteren Verlauf des Projekts LIF-Messungen (Laserinduzierte Fluoreszenz) geplant sind und für diese keine Flüssigkeitsphase in der Strömung präsent sein darf, wurde im Experiment und der Simulation eine Temperaturerhöhung, mit dem Ziel, die Kondensationseffekte zu verringern, durchgeführt, siehe Abbildung 5.40. Für die Simulation wurden beide Kammertemperaturen, 294 K und 363 K, bei erhöhter Brennstofftemperatur betrachtet. Da sich bereits nach sehr kurzer Zeit eine stationäre Strömung einstellt (simulierte Nadelöffnung innerhalb  $\Delta t = 0.1$  ms), wurde auf eine Mittelung der Konturplots verzichtet. Des Weiteren werden in den Konturplots nur die Testfälle mit einem Druckverhältnis von 5, 10 und 20 betrachtet. In den Aufnahmen der Experimente sind keine Lichtreflexionen zu erkennen, es treten somit keine Kondensationseffekte auf. Dies widerspricht in Teilen den Ergebnissen der Strömungssimulation und deutet auf eventuell vorhandene metastabile Phasen hin. Für das niedrigste Druckverhältnis von 5 bleiben auch in der Simulation Phasenübergänge aus. Für die restlichen Testfälle zeigen sich im ersten Diamanten der Expansionsstruktur Phasenübergänge, die jedoch in ihrer Intensität gegenüber der niedrigeren Brennstofftemperatur nachlassen. Mit einem minimalen Dampfgehalt von  $\bar{\beta}_v = 0.82$  ist der Anteil der Flüssigkeitsphase ungefähr zur Hälfte geringer als bei den niedrigeren Brennstoff- und Kammertemperaturen. Dies ist damit zu erklären, dass der Abstand zwischen der kritischen Temperatur des Brennstoffs  $T_c$  und der Totaltemperatur im Plenum  $T_0$  zu Beginn deutlich größer ist. Durch die Expansion wird das Fluid beschleunigt und die Temperatur nimmt ab. Geht man von einer gleichen Temperaturabnahme bei beiden Totaltemperaturen aus, wird die thermodynamisch kritische Temperatur bei niedrigeren Plenumsbedingungen schneller unterschritten als bei höheren. Die  $Ma = 1$ -Isolinien in der rechten Spalte sind für beide Temperaturen identisch. Die Temperatur in der Kammer hat somit keinen Einfluss auf den Potenzialkern. Für die Simulationen mit einem Gegendruck von 15 bar ist die in Abschnitt 5.4.3 besprochene Struktur des stark expandierten Freistrahls sichtbar, in der direkt nach dem Stoß ein subsonisches Gebiet erzeugt wird und sich am Tripelpunkt eine Einhüllende des Potenzialkerns bildet.

Während bei dem Vergleich der Kondensationsgebiete in Abbildung 5.29 eine sehr gute Übereinstimmung der CFD mit den Experimenten erzielt werden konnte, zeigen sich für die erhöhte Temperatur in Abbildung 5.40 kleinere Diskrepanzen im Zweiphasengebiet, die sich auf die erste Expansion beschränken. Diese könnten auf die anfangs getroffene Gleichgewichtsannahme und/oder übersättigte Gebiete zurückzuführen sein. In Abschnitt 2.4.3 wird beschrieben, dass bei den Phasenübergangsberechnungen von einem instantanen Gleichgewicht ausgegangen wird. Da in der ersten Expansionsstruktur sehr hohe Geschwindigkeiten mit Machzahlen  $> 3$  erreicht werden, wird der diskretisierte Zeitschritt aufgrund der  $CFL < 0.5$ -Bedingung sehr klein. Die beiden Zeitskalen nähern sich an und die Annahme des instantanen Phasenübergangs müsste nochmals untersucht werden. Ein weiterer Aspekt, den die verwendete Modellierung nicht beachtet, ist das Erreichen übersättigter Zustände, die sich nach dem Überschreiten der Sättigungsdampfkurve ergeben und metastabil sind.

Wird die Brennstofftemperatur auf 363 K erhöht, die Temperatur in der Kammer jedoch konstant bei 294 K gehalten, kommt es trotz des um  $-14.4\%$  niedrigeren Impulsflusses zu einer höheren Eindringtiefe, siehe Abbildung 5.41a. Dies widerspricht den bekannten Approximationen, da diese die Eindringtiefe proportional zum Impulsfluss setzen. Werden die Größen, die in die Impulsflussberechnung eingehen, einzeln betrachtet, beträgt die Steigerung des Quadrats der Schallgeschwindigkeit 20.6 %. Die kritische Dichte am Düsenaustritt

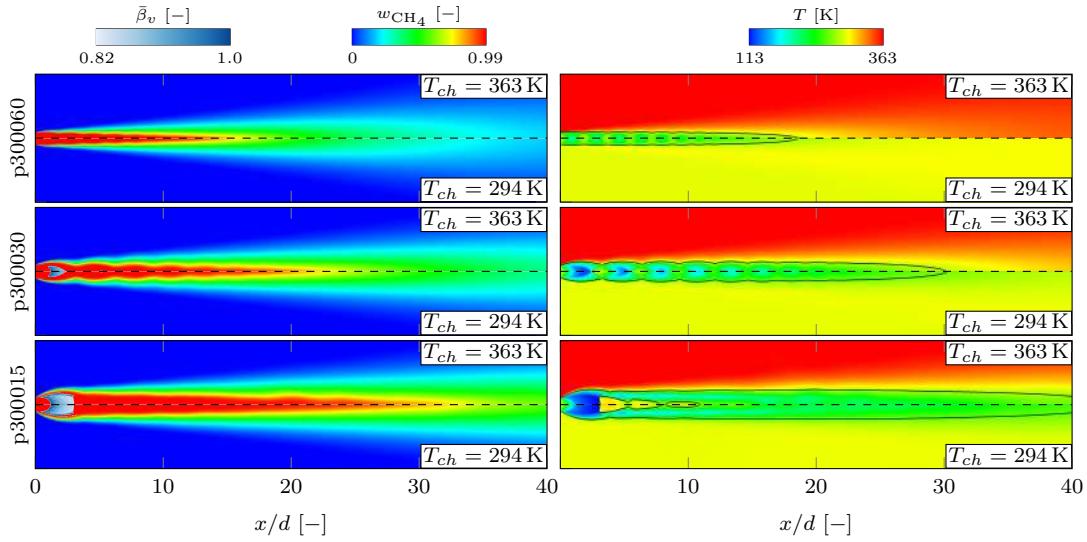


Abbildung 5.40. Vergleich der numerisch erzielten Ergebnissen für die Methaneindüsung bei  $p_0 = 300$  bar und  $T_0 = 363$  K in ruhende Luft mit verschiedenen Gegendrücken und einer Temperatur von  $T_{ch} = 363$  K und  $T_{ch} = 294$  K,  $t = 2$  ms.

sinkt hingegen um  $-29.1\%$  und ist somit dominierend in der Berechnung des Impulsflusses. Wird die Temperatur des Brennstoffs und der Luft in der Kammer gleichermaßen erhöht, kommt es zu einem deutlich schnelleren Eindringen, da durch die erhöhte Kammentemperatur zusätzlich die Kamerdichte für die fünf Gegendrücke um durchschnittlich  $19.8\%$  gesenkt wird. Der Term in der Korrelation von Hill und Ouellette [72] ergibt sich zu

$$\left[ \left( \frac{\dot{M}_n}{\rho_{ch}} \right)^{1/4} \right]_{T_0=T_{ch}=363\text{ K}} = 1.016 \left[ \left( \frac{\dot{M}_n}{\rho_{ch}} \right)^{1/4} \right]_{T_0=T_{ch}=294\text{ K}}. \quad (5.7)$$

Für die Korrelation von Gerold und Pfitzner [56] wird ein ähnlich niedriger Wert berechnet:

$$\left( \frac{\dot{M}_n^{1/4} \rho_n^{1/12}}{\rho_{ch}^{1/3}} \right)_{T_0=T_{ch}=363\text{ K}} = 1.006 \left( \frac{\dot{M}_n^{1/4} \rho_n^{1/12}}{\rho_{ch}^{1/3}} \right)_{T_0=T_{ch}=294\text{ K}}. \quad (5.8)$$

Aus den Korrelationen ergeben sich unter Beibehaltung des Skalierungsfaktors  $\Gamma$  Änderungen, die, im Gegensatz zu den Ergebnissen der Strömungssimulation, vernachlässigbar klein sind. Die gegebenen Approximationen für die Ermittlung der transienten Eindringtiefe können eine Änderung der Brennstoff- oder Kammentemperatur somit nicht wiedergeben. Vielmehr müsste für eine neue Korrelation Schallgeschwindigkeit und Dichte einzeln gewichtet werden. Noch signifikanter wirken sich die Änderungen auf das volumetrische Wachstum in Abbildung 5.41b aus. In allen fünf Testfällen kommt es zu einer deutlichen Steigerung des Wachstums und der damit verbundenen Gemischbildung. Mit der Modellierung von Vuorinen *et al.* [171] kann der Korrekturfaktor zu

$$\left[ \left( \frac{\rho_0}{\rho_{ch}} \right)^{3/4} \right]_{T_0=T_{ch}=363\text{ K}} = 0.947 \left[ \left( \frac{\rho_0}{\rho_{ch}} \right)^{3/4} \right]_{T_0=T_{ch}=294\text{ K}} \quad (5.9)$$

berechnet werden. Wiederum kann der Wert nicht die eigentliche Tendenz des Zuwachses widerspiegeln und sagt sogar eine geringere Gemischbildung voraus. Beide Korrelationen für die transiente Eindringtiefe und das volumetrische Wachstum sind für die nicht-linearen Betriebszustände unzureichend.

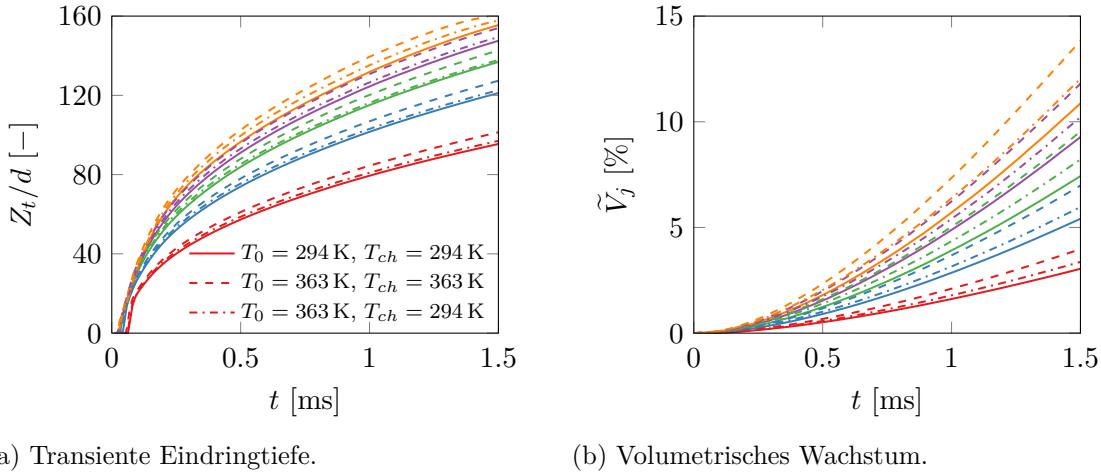


Abbildung 5.41. Einfluss der Temperaturerhöhung des Brennstoffs und der Kammer auf die Eindringtiefe und das volumetrische Wachstum des Brennstoff-Freistrahls.

Für die Beantwortung der Frage, warum die eindimensionale Analyse das transiente Verhalten der Brennstofffreistrahlen nicht korrekt wiedergeben kann, werden zunächst die Werte aus der Strömungssimulation betrachtet und mit der eindimensionalen Berechnung verglichen, siehe Tabelle 5.6. Des Weiteren ist der Quotient der kritischen Düsengrößen bezogen auf die Plenumsbedingungen mit aufgeführt. Für den Massenstrom ergibt sich für beide Werte ein in etwa gleich großer Durchflusskoeffizient. Der Koeffizient für den Impulsfluss ändert sich hingegen um 5.9 %, was auf eine unterschiedliche Strömungsform in der Düse schließen lässt. Mit den Quotienten in den letzten vier Tabellenspalten lässt sich erkennen, wie stark jede einzelne Strömungsgröße von der Brennstofftemperaturänderung beeinflusst wird. Diese führt für den kritischen Druck zu einem höheren Wert. Gleichermaßen gilt für die Schallgeschwindigkeit und die Temperatur, für die Dichte werden niedrigere Werte ermittelt. Während Dichte und Schallgeschwindigkeit direkt proportional zum Massenstrom sind, geht die Schallgeschwindigkeit bei der Berechnung des Impulsflusses quadratisch in die Gleichung ein. Entsprechend sind die Abweichungen des Impulsflusskoeffizienten  $C_M$  größer als die des Massenstromkoeffizienten  $C_d$ . Eine deutliche Verbesserung der Korrelationen kann erzielt werden, wenn kritische Dichte und Schallgeschwindigkeit einzeln gewichtet werden.

#### 5.4.6 Druckvariation

Die Ergebnisse der Brennstoffdruckerhöhung von 300 auf 500 bar bei gleichzeitiger Erhöhung des Gegendrucks unter Berücksichtigung der konstanten Druckverhältnisse 5, 10 und 20 sind in Abbildung 5.42 dargestellt. Für das niedrigste Druckverhältnis von 5 bleibt der gasförmige Brennstoff im einphasigen Zustand. Bei einem Druckverhältnis von 10 sind bei einer Temperatur von  $T_0 = T_{ch} = 294 \text{ K}$ , vergleichbar zum gleichen Druckverhältnis

$p_0$ [bar]	$T_0$ [K]	1D		3D		$C_d$ [-]	$C_M$ [-]	$\frac{p^*}{p_0}$ [-]	$\frac{\rho^*}{\rho_0}$ [-]	$\frac{a_s^*}{a_{s,0}}$ [-]	$\frac{T^*}{T_0}$ [-]
		$\dot{m}$ [g/s]	$\dot{M}_n$ [kgm/s <sup>2</sup> ]	$\dot{m}$ [g/s]	$\dot{M}_n$ [kgm/s <sup>2</sup> ]						
300	294	25.26	11.20	21.31	10.84	0.844	0.968	0.41	0.71	0.70	0.83
300	363	19.68	9.59	16.92	9.83	0.860	1.025	0.48	0.67	0.78	0.85
500	294	40.54	21.34	33.74	19.89	0.832	0.932	0.33	0.73	0.63	0.82
500	363	32.62	17.86	27.71	17.64	0.849	0.988	0.43	0.70	0.71	0.84

Tabelle 5.6. Massenstrom, Impulsfluss und die zugehörigen Kennzahlen für die vier Betriebspunkte mit einer Brennstofftemperatur von 294 bzw. 363 K und einem Brennstoffdruck von 300 bzw. 500 bar. Zusätzlich werden die Quotienten für die Größen im engsten Querschnitt zu den Plenumsbedingungen angegeben.

nis für 300 bar, fünf diamantförmige Expansionsstrukturen auszumachen, in denen es zu einem Phasenzerfall kommt. Die benetzten Gebiete sind zwar kleiner, jedoch sinkt der Dampfgehalt auf einen deutlich niedrigeren Wert von 0.6 ab. Für eine Temperatur von  $T_0 = T_{ch} = 363$  K kommt es ebenfalls zu einem Phasenübergang. Im Gegensatz zum Testfall mit 300 bar bilden sich zwei weitere Kondensationsgebiete in den Expansionsstrukturen zwei und drei. Für die niedrigere Temperatur des letzten Testfalls befindet sich fast der gesamte Potenzialkern im Zweiphasengebiet. Die einphasigen Abstände zwischen den Expansionsstrukturen werden dabei deutlich verkürzt. Im Gegensatz zum 300 bar-Testfall gleicht die Struktur weiterhin der eines moderat unterexpandierten Freistrahls und es kommt nicht zur Phaseneinhüllenden des Potenzialkerns. Im direkten Vergleich zeigt sich für jeden einzelnen Betriebspunkt eine, bezogen auf den niedrigeren Dampfgehalt, stärkere Expansion für den Fall mit 500 bar-Totaldruck. Durch die höhere Dichte in der Kammer wird der Freistahl für  $x/d < 20$  stärker in radialer Richtung eingeschnürt und die Expansionsstrukturen werden in axialer Richtung gestreckt.

Analog zu den Betrachtungen in Gleichung 5.7, 5.8 und 5.9 werden die Werte für den Druckvergleich mit 500 bar zu 300 bar ermittelt und in Tabelle 5.7 zusammengefasst. Zusätzlich wird die Berechnung mit der Annahme eines thermisch idealen Gases durchgeführt, die aufgrund der linearen Proportionalität von Druck, Temperatur und Dichte den Wert eins ergibt. Unter der Anwendung der SRK-ZGL ergeben sich von eins unterschiedliche Werte, die für die Eindringtiefe auf einen Zuwachs (Hill und Ouellette, Gerold und Pfitzner, Werte  $> 1$ ) und für das volumetrische Wachstum auf eine Reduzierung (Vuorinen *et al.*, Werte  $< 1$ ) deuten. Augenscheinlich steht die Approximation von Vuorinen *et al.* im Widerspruch zu den anderen beiden Modellen, da durch eine höhere Eindringtiefe auch das volumetrische Wachstum zunehmen muss. Die Vorhersagen der transienten Eindringtiefe passen gut zu den Ergebnissen der Strömungssimulation, siehe Abbildung 5.43a. Bei einer Temperatur von  $T_0 = T_{ch} = 294$  K wird für den höchsten Gegendruck noch keine Steigerung der Eindringtiefe erreicht, dies erfolgt erst mit dem Absenken des Drucks in der Kammer bei folglich höheren Druckverhältnissen. Die Erhöhung beider Temperaturen führt auch für den Testfall mit 500 bar Totaldruck zu einer Erhöhung der transienten Eindringtiefe. Die Argumentation ist dabei analog zu Abschnitt 5.4.5 und Tabelle 5.6.

Während die Kurven in Abbildung 5.43a bei einem Druckverhältnis von 5 nahezu deckungsgleich sind, wird bei einem Druckverhältnis von 20 nach 1.5 ms eine um 2.9 % größere

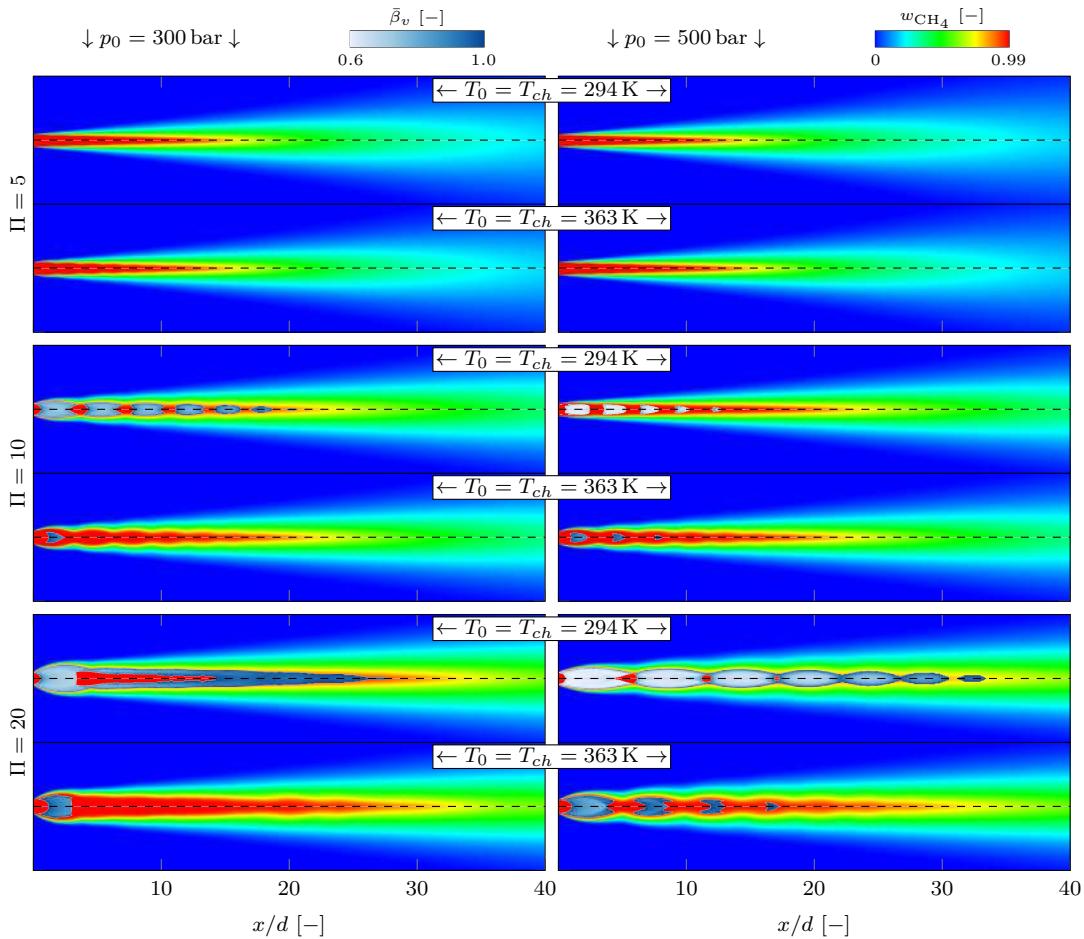


Abbildung 5.42. Einfluss der Druckerhöhung des Brennstoffs auf die Kondensationsgebiete und die Struktur des Potenzialkerns.

$T_0, T_{ch}$	Hill und Ouellette [72]		Gerold und Pfitzner [56]		Vuorinen <i>et al.</i> [171]	
	IG	RG	IG	RG	IG	RG
294 K	1.000	1.034	1.000	1.017	1.000	0.836
363 K	1.000	1.030	1.000	1.020	1.000	0.893

Tabelle 5.7. Vorhersagen der Korrelationen auf die durch die Druckänderung induzierte Änderung der Eindringtiefe und des volumetrischen Wachstums. Werte sind mit der Annahme des thermisch idealen Gases (IG) und der SRK-ZGL (RG) gegeben.

Eindringtiefe erreicht. Auch im volumetrischen Wachstum sind größere Abweichungen zu erkennen, die mit Abnahme des Gegendrucks anwachsen, siehe Abbildung 5.43b. Dies ist insofern schlüssig, da mit der Abnahme des Gegendrucks die nicht-linearen Effekte, die durch die Erhöhung des Brennstoffdrucks dominanter werden, ins Gewicht fallen und nicht von der erhöhten Dichte geschmälert werden. Für die erhöhte Temperatur von  $T_0 = T_{ch} = 363\text{ K}$  ist dieser Effekt ebenso sichtbar, wobei sich die Diskrepanzen gegenüber  $T_0 = T_{ch} = 294\text{ K}$  verringern. Für die Eindringtiefe wird ein kleines Plus von 1.9 % erzielt, das volumetrische Wachstum und die davon ableitbare Gemischbildung ist nahezu identisch. Die beiden Simu-

lationskampagnen, die Variation der Temperatur und die Variation des Drucks, bestätigen die in dieser Arbeit verwendete Modellierung und die Wichtigkeit der Realgasthermodynamik. Ein Abgleich mit Experimenten ist aufgrund fehlender Daten nicht möglich.

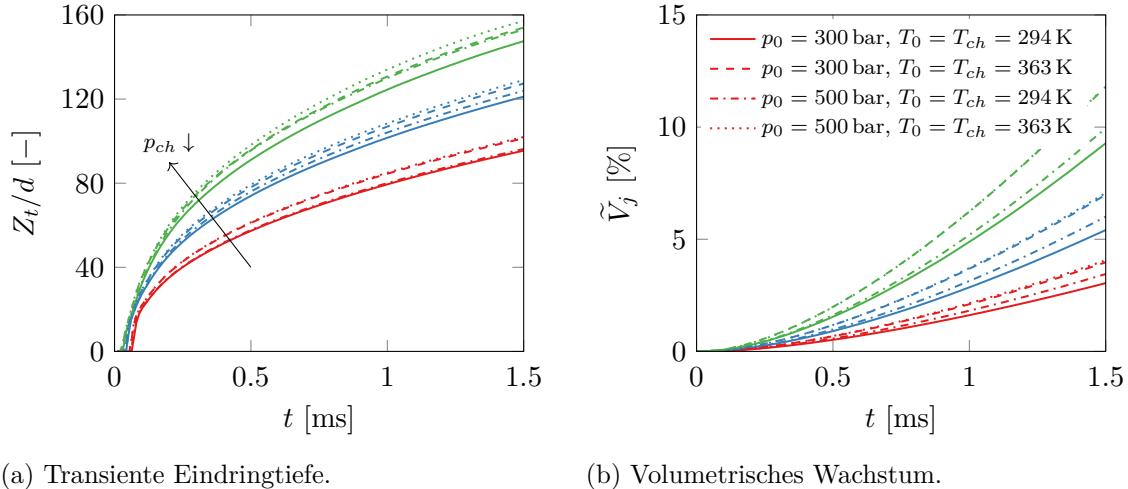


Abbildung 5.43. Einfluss der Brennstoffdruckerhöhung auf die Eindringtiefe und das volumetrische Wachstum des Brennstofffreistrahls unter konstantem Druckverhältnis.

#### 5.4.7 Einfluss des Fluids - Mischungen

Für die Variation der Brennstoffmischung wird die aus Abschnitt 5.3.4 bekannte Russland H-Zusammensetzung für die Simulation der Eindüsung mit den drei Gegendrücken 60 bar, 30 bar und 15 bar verwendet, siehe Tabelle 5.4. Durch die neue Zusammensetzung ergibt sich aus der eindimensionalen Betrachtung für den hier vorliegenden Betriebspunkt mit  $p_0 = 300 \text{ bar}$  und  $T_0 = 294 \text{ K}$  ein 2.8 % höherer Massenstrom und ein 1.2 % höherer Impulsfluss. Die Werte werden von der Strömungssimulation mit  $\Delta\dot{m} = 2.3 \%$  und  $\Delta\dot{M}_n = 1.3 \%$  bestätigt. Die Änderungen bezüglich der Eindringtiefe und des volumetrischen Wachstums sind marginal, weshalb auf eine Darstellung verzichtet wird. Zusätzlich zu den unterschiedlichen eindimensionalen Charakteristiken wird das Zweiphasengebiet signifikant in die Druck- und Temperaturrichtung gestreckt, wodurch die Kondensationsneigung aufgrund der höheren kritischen Werte für  $T_c$  und  $p_c$  steigt, siehe Abbildung 5.24a.

Dies zeigt sich auch in Abbildung 5.44. Vergleicht man die Kondensationsgebiete der neuen Russland H-Zusammensetzung mit den Zweiphasengebieten der Methanersatzmischung, sind für das kleinste Druckverhältnis die ersten Diskrepanzen zu verzeichnen. Hier sind bereits für  $x/d < 7.5$  kleinere Kondensationsgebiete präsent, die sich auf die maximale Expansion der ersten fünf Expansionsstrukturen beziehen. Für das zweite untersuchte Druckverhältnis unterscheidet sich die Freistahlstruktur in der axialen und radialen Ausbreitung. Für das Russland H-Gemisch kommt es zu einem deutlich längeren Potenzialkern, wobei die einphasigen Abstände zwischen den diamantförmigen Strukturen mit zunehmendem axialen Düsenabstand verschwinden. Während der Phasenzerfall bei der Ersatzmischung nur für einen sehr hohen Methananteil im Zentrum des Freistrahls auftritt, kommt es hier zu einer Ausweitung des Gebiets. Dies ist insbesondere auch für das höchste Druckverhältnis zu sehen. Die Struktur der ersten Expansion bis zum geraden Stoß ist,

mit Ausnahme der Randbereiche, identisch. Im Nachlauf des Stoßes wird der instabile, zweiphasige Zustand durch die höhere kritische Temperatur  $T_c$  schneller erreicht.

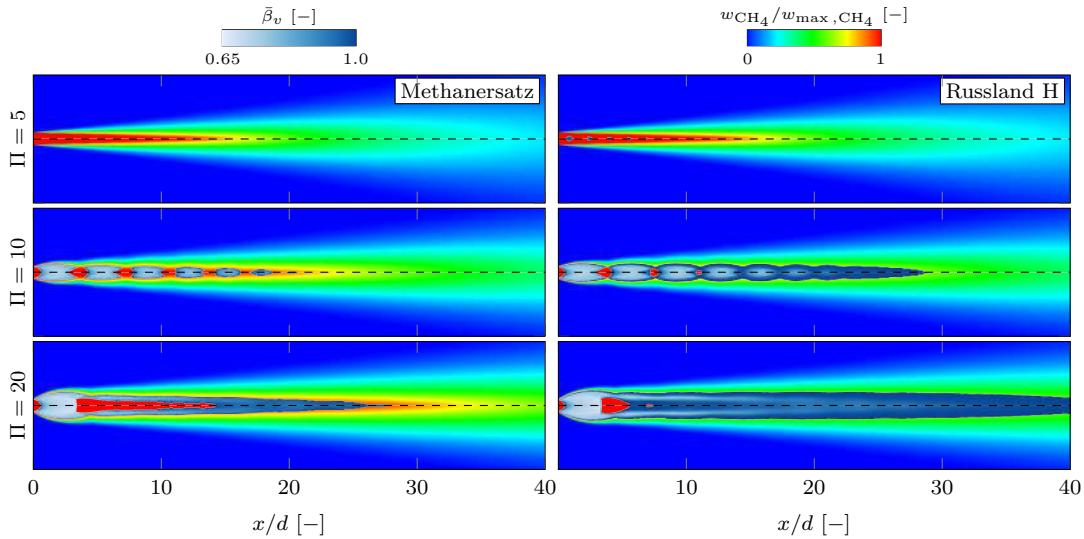


Abbildung 5.44. Einfluss der Brennstoffmischung auf die Kondensationsgebiete und die Struktur des Potenzialkerns. Die linke Spalte zeigt das Ergebnis der Strömungssimulation der Methanersatzmischung, die rechte Spalte das Ergebnis mit der Russland H-Zusammensetzung.

In der Literatur [37] ist die untere und obere Zündgrenze für die Verbrennung von Methan mit Luft bei Umgebungsbedingungen mit  $w_{\text{CH}_4} = 0.045$  bzw.  $w_{\text{CH}_4} = 0.15$  angegeben. Bei einer stöchiometrischen Verbrennung mit  $\lambda = 1$  beträgt der Methanmassenbruch  $w_{\text{CH}_4} = 0.0584$ . Diese Isolinien wurden in Abbildung 5.45 eingetragen und ein direkter Vergleich der zündfähigen Gebiete der beiden Brennstoffe Methanersatz und Russland H für drei verschiedene Gegendrücke nach einer Simulationszeit von 1 ms ist möglich. Obwohl sich die Zusammensetzung von Russland H durch die Beimischung verschiedener Alkane von Methan unterscheidet, werden der Einfachheit halber die gleichen Zündgrenzen angenommen. Die Unterschiede der jeweiligen Gebiete der beiden Fluide sind marginal und bei allen Druckverhältnissen präsent. Beim niedrigsten Gegendruck ist für den Methanersatz eine minimal größere axiale Eindringtiefe der unteren Zündgrenze und der stöchiometrischen Isolinie festzustellen. Alle Verschiebungen der Zündgrenzen können auf die unterschiedlichen Zusammensetzungen zurückgeführt werden, da dem Russland H-Gemisch weniger Methan beigemischt wurde. Für alle Simulationen zeigt sich, dass der Abstand der  $\lambda = 1$ -Linie von der Isolinie mit  $w_{\text{CH}_4} = 0.0584$  in axialer Richtung geringer ist als in radialer Richtung.

#### 5.4.8 Rechenzeit

Um die Rechenzeit der drei verschiedenen Modellierungen zu vergleichen, wurde der Testfall mit dem niedrigsten Gegendruck p300012, dem Brennstoff Methan und der Druckrampe am Nadelstift zusätzlich zu den bereits verwendeten Ansätzen (einphasige Realgasthermodynamik und zweiphasige Realgasthermodynamik) mit der Idealgasthermodynamik simuliert, siehe Tabelle 5.8. Die entsprechenden Modelle können der Tabelle 5.2 entnommen werden.

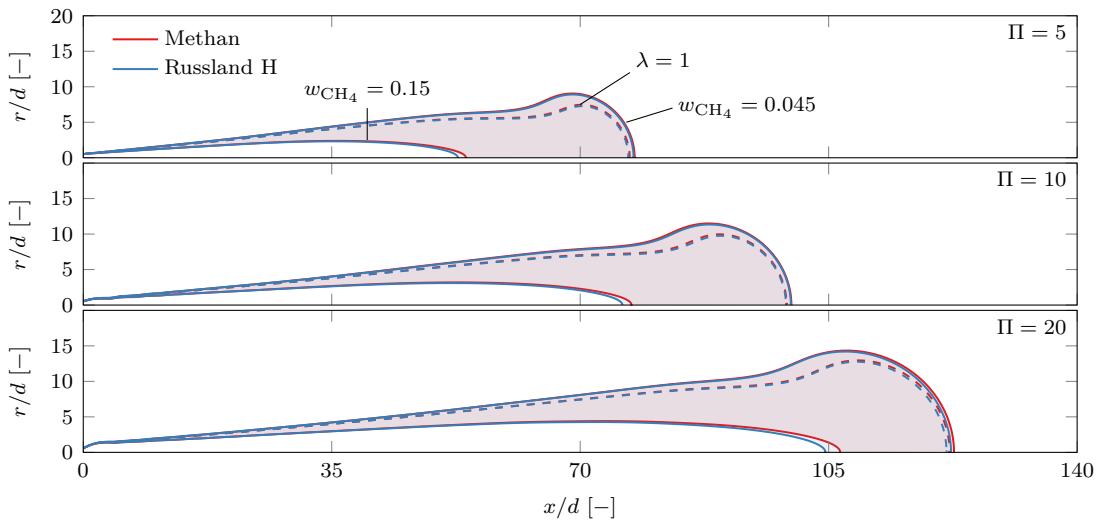


Abbildung 5.45. Einfluss der Brennstoffmischung auf die Verteilung des zündfähigen Gemisches für die drei Druckverhältnisse  $\Pi = 5, 10$  und  $20$ . Momentaufnahmen nach  $1\text{ ms}$  Simulationszeit.

Die simulierte Zeit betrug  $0.2\text{ ms}$  und wurde nach Erreichen eines auf den Potenzialkern bezogenen stationären Zustands von  $0.4$  bis  $0.6\text{ ms}$  aufgezeichnet. Die Simulation wurde parallelisiert auf  $168$  CPUs durchgeführt, als Berechnungsnetz wurde *Gitter2* mit  $218\,760$  Zellen verwendet (vgl. Abschnitt 5.1). Aufgrund der unterschiedlichen Modellierungen variiert auch der Zeitschritt, da dieser an eine maximale CFL-Zahl von  $0.5$  angepasst wird. Mit den unterschiedlichen Zeitschritten ergibt sich eine abweichende Iterationsanzahl, die zum Erreichen der simulierten Zeit benötigt wird. Trotz des größeren Zeitschritts in den Simulationen mit Realgasthermodynamik und der daraus resultierenden geringeren Anzahl an Iterationen ( $\approx -25\%$ ) steigt die Rechenzeit um  $126\%$ . Bezogen auf die Rechenzeit pro Iteration beträgt die Steigerung sogar  $203\%$ . Für die Berechnung der Zweiphasigkeit wird die Rechenzeit erneut um  $69\%$  erhöht.

Modellierung	Sim. Zeit	Zeitschritt	Iterationen	Rechenzeit
Idealgasthermo.	$0.2\text{ ms}$	$2.37 \times 10^{-9}\text{ s}$	84 400	1
Einphasige Realgasthermo.	$0.2\text{ ms}$	$3.18 \times 10^{-9}\text{ s}$	62 900	2.26
Zweiphasige Realgasthermo.	$0.2\text{ ms}$	$3.15 \times 10^{-9}\text{ s}$	63 500	3.83

Tabelle 5.8. Vergleich der Rechenzeiten der drei in dieser Arbeit vorgestellten Modellierungsansätze. Normiert wurden die Werte mit der benötigten Rechenzeit für die Simulation mit Idealgastthermodynamik.



## Kapitel 6

# Zusammenfassung und Ausblick

Die vorliegende Arbeit entstand im Rahmen des FVV-Projekts *Gas-Diesel-Brennverfahren* und befasst sich mit der numerischen Modellierung und Untersuchung der Hochdruckeindüsung nicht-idealer Fluide bei anwendungstypischen Betriebsbedingungen. Im Fokus dieser Arbeit steht einerseits die thermodynamische Modellierung der auftretenden Prozesse und andererseits die Bewertung mehrerer Einflussfaktoren auf die Strömung im Injektor und auf die Gemischbildung in der generischen Brennkammer mittels numerischer Strömungssimulation. Es werden unterschiedliche Modellierungsansätze zur Beschreibung der thermodynamischen und strömungsmechanischen Phänomene erläutert und auf Testfälle angewandt. Die numerischen Ergebnisse der Testfälle werden mit experimentellen Daten, falls verfügbar, verglichen.

### Erkenntnisse im Rahmen der Modellierung

Die Grundlage der numerischen Untersuchungen stellen die thermodynamischen Modelle dar, die die auftretenden Zustände und Zustandsänderungen möglichst korrekt approximieren. Bei den betrachteten Betriebspunkten kann aufgrund des nicht-linearen Verhaltens der Fluide bei hohen Drücken und/oder niedrigen Temperaturen die Annahme eines thermisch idealen Gases nicht getroffen werden. Zusätzlich muss für die Anwendung in der numerischen Strömungssimulation der Rechenaufwand möglichst gering gehalten werden. Unter Berücksichtigung dieser beiden Punkte fiel die Wahl auf die ZGL von Soave, Redlich und Kwong [151], die durch ihre kubische Form die Realgas-Zustandsänderungen ausreichend genau und numerisch effizient berechnet. In Folge der niedrigen Kammerdrücke und der daraus resultierenden hohen Druckverhältnisse kommt es zu sehr starken Expansionsvorgängen im Nadelsitz des Injektors und im Brennstofffreistahl, einhergehend mit niedrigen Drücken und Temperaturen. Dadurch wird der Sättigungsdampfdruck unterschritten und der Brennstoff kondensiert. Auch hier zeigen sich die kubischen ZGL als besonders vorteilhaft, da diese mit einer ausreichend guten Genauigkeit sowohl die Flüssigkeits- als auch die Gasphase abbilden. Basierend auf der SRK-ZGL wurde eine Methodik zur Berechnung des instantanen Phasengleichgewichts entwickelt, validiert und mit dem Strömungslöser gekoppelt. Die thermodynamische Modellierung enthält somit die konsistente Berechnung aller Stoffeigenschaften im einphasigen und zweiphasigen Zustand. Sollen Kondensationseffekte aus Gründen der längeren Rechenzeit nicht berücksichtigt werden, kann die Simulation mit einem einphasigen Ansatz durchgeführt werden, insofern sich die zweiphasigen Zustände im metastabilen Bereich befinden.

Für die numerische Strömungssimulation in OpenFOAM<sup>1</sup> wurde ein druckbasierter Strömungslöser [92] für die Anwendung der Realgasthermodynamik weiterentwickelt [93]. Die Besonderheit des Lösen besteht in dem hybriden Verfahren, das den PISO-Ansatz von Issa [74] für niedrige Strömungsgeschwindigkeiten mit dem hochauflösenden Verfahren von Kurganov und Tadmor [96] für trans- und supersonische Strömungen kombiniert. Der sich durch seine Robustheit und Genauigkeit auszeichnende Algorithmus wurde ausgiebig validiert und im Sinne des Open-Source-Gedankens mit wenigen Einschränkungen wieder

---

<sup>1</sup><https://www.openfoam.org>

frei zugänglich gemacht<sup>2</sup>. Bedingt durch die Öffnung der Gasnadel wurde zusätzlich eine Netzbewegung implementiert, für die eine Bewegungsgleichung der Zellkoordinaten gelöst wird.

Die drei bekanntesten Turbulenzmodelle von Jones and Launder ( $k\epsilon$ ) [83], Wilcox ( $k\omega$ ) [173] und Menter und Esch ( $k\omega$ SST) [109] wurden verglichen. Es konnte gezeigt werden, dass die Modellierung der Reynoldsspannungen einen signifikanten Einfluss auf die Strömungsform im Nahfeld der Düse und im Potenzialkern sowie auf die Strahlausbreitung hat. Die von Sarkar und Lakshmanan [144] vorgeschlagene Kompressibilitätskorrektur führt zu einer Reduzierung der turbulenten kinetischen Energie und zu einer deutlichen Verbesserung der Struktur im Potenzialkern des Freistrahls. Dies konnte mit Literaturdaten und einem Abgleich mit verfügbaren, experimentellen Messdaten gezeigt werden.

Mit einem auf der Realgasthermodynamik basierenden, eindimensionalen Algorithmus können die kritischen Strömungsgrößen für  $Ma = 1$  ermittelt und mit den Werten der Idealgasthermodynamik verglichen werden. Die iterative Methode wird dabei mit einem mehrdimensionalen Newton-Verfahren umgesetzt und mit Werten des Sättigungsdampfdrucks im Lösungsraum beschränkt. Die Verläufe der kritischen Größen, wie beispielsweise dem kritischen Massenstrom, zeigen offensichtliche und nicht zu vernachlässigende Diskrepanzen bezüglich den verschiedenen Modellierungsansätzen. Eine auf wenige stoffspezifische Konstanten reduzierte Korrelation ermöglicht die einfache und ausreichend genaue Berechnung von Massenstrom und Impulsfluss ausgehend von den Plenumsbedingungen, ohne dass die iterative Methode verwendet werden muss.

## Erkenntnisse im Rahmen der Strömungssimulation

Die Diskrepanzen in den Resultaten bei Verwendung unterschiedlicher ZGL zeigen sich auch in den Ergebnissen der Strömungssimulation. Wird der gleiche Betriebspunkt mit der Idealgasmodellierung anstelle der Realgasmodellierung simuliert, kommt es zu großen Unterschieden bezüglich der Eindringtiefe, des volumetrischen Wachstums, der Gemischbildung, des Massenstroms und des Impulsflusses. Mit einer Anpassung der Temperatur, um das mit der Realgasthermodynamik berechnete Verhalten der Strömung im kritischen Querschnitt nachzubilden, können die Ergebnisse geringfügig näher an das Realgas-Ergebnis angepasst werden. Dies erfolgt aber unter Vernachlässigung bestimmter charakteristischen Größen. Für eine physikalisch korrekte Beschreibung der Hochdruckeindüsung ist die Realgasthermodynamik unabdingbar.

Bei den generischen Studien stellte sich heraus, dass die Geometrie des Spritzloches entscheidend zum Massenstrom und zur Gemischbildung beiträgt. Während die Länge der Düse sehr wenig Einfluss auf die Eindringtiefe und den Durchsatz hat, wird das volumetrische Wachstum durch die Spritzlochlänge merklich beeinflusst. Die konische und verrundete Düsenform tragen zu einem größeren Massenstrom und Impulsfluss bei. In Folge kommt es zu einer schnelleren Gemischbildung mit dem umgebenden Fluid. Die Unterschiede im Ergebnis zwischen der konischen und der verrundeten Düsenform sind marginal. Eine Temperaturänderung im Plenum stromauf der Düse sorgt bei einer Absenkung für höhere, bei einer Erhöhung für niedrigere Massenströme. Änderungen in der Eindringtiefe und im volumetrischen Wachstum sind auszumachen, aber relativ gering. Zu ähnlichen Änderungen der charakteristischen Größen der Eindüsung kommt es durch die Verwendung eines anderen Fluids. Für Stickstoff weicht die transiente Eindringtiefe kaum von der für Methan ab,

<sup>2</sup><https://github.com/unicfdlab>

das volumetrische Wachstum verringert sich im Vergleich zu Methan aufgrund des dichten Freistrahls. Werden dem Methan längerkettige Alkane oder typische Komponenten einer Erdgasmischung beigemischt, erhöht sich der Massenstrom. Bedingt durch die höheren kritischen Temperaturen der beigemischten Komponenten vergrößert sich auch das Risiko einer sich durch die Expansion ausbildenden Flüssigkeitsphase.

Der Vergleich der Ergebnisse der Simulationen mit vorhandenen experimentellen Daten zeigt eine sehr gute Übereinstimmung der Strömungsstruktur im Potenzialkern. So wohl die Dimensionen, als auch die auftretenden Kondensationsgebiete werden physikalisch korrekt wiedergegeben. Hier führt die Kompressibilitätskorrektur im Turbulenzmodell zu einer entscheidenden Verbesserung. Die transiente Eindringtiefe wird für hohe Gegendrücke gut abgebildet, für niedrige Gegendrücke jedoch deutlich überschätzt. Eine Anpassung der Modellkonstanten des Turbulenzmodells könnte eine Verbesserung erzielen. Für die betrachteten Testfälle kann der Phasenzerfall im Freistahl in einen expansions- und einen mischungsbedingten Prozess unterteilt werden. Die im Nadsitz auftretende Zweiphasigkeit zu Beginn der Nadelöffnung resultiert in niedrigeren Schallgeschwindigkeiten und limitiert den Massenstrom.

Der direkte Vergleich der Ergebnisse des einphasigen Ansatzes mit den Ergebnissen der auf der Zweiphasenthermodynamik basierenden Simulationen zeigt marginale Unterschiede in Eindringtiefe und volumetrischem Wachstum. Durch die Annahme des einphasigen Zustands wird insbesondere die Temperatur deutlich unterschätzt, was sich ebenso auf die abgeleiteten Größen auswirkt und wodurch sich Diskrepanzen in der Struktur des Potenzialkerns ergeben. Dieser Ansatz ist besonders für die Industrie interessant, da die Charakteristiken der Eindüsung ausreichend genau wiedergegeben werden und sich die Rechenzeit im Vergleich zu den Phasengleichgewichtsberechnungen signifikant reduzieren lässt.

Eine Erhöhung der Temperatur in der Brennkammer hat keinen Einfluss auf die Struktur des Potenzialkerns. Eindringtiefe und Gemischbildung werden aufgrund der niedrigeren Dichte beschleunigt. Durch die Erhöhung der Brennstofftemperatur wird die Schwelle zum Erreichen der Sättigungsdampfelinie verschoben und Kondensationseffekte treten weniger stark auf. Eine Erhöhung des Brennstoff- und Kammerdrucks führt unter Beibehaltung der Druckverhältnisse zu dominanter werdenden nicht-linearen Effekten. Im Gegensatz zur Annahme eines thermisch idealen Gases wird aufgrund der Druckerhöhung ein schnelleres Eindringen und ein höheres volumetrisches Wachstum erreicht. Wird zudem die Temperatur der beiden Fluide angehoben, nehmen die Realgaseffekte wieder ab und die Skalierung der Eindringtiefe erfolgt mit dem Druckverhältnis.

## Ausblick

Die in dieser Arbeit entwickelten Modelle und Methoden und die daraus gewonnenen Simulationsergebnisse zeigen, dass die numerische Simulation in der Lage ist, die physikalischen Prozesse der Hochdruckeindüsung korrekt wiederzugeben. Sie bieten somit die Grundlage für weitere Untersuchungen und können als produktives Werkzeug eingesetzt werden. Besonders erwähnenswert ist die Berechnung und Vorhersage des expansionsbedingten Phasenübergangs, die anhand der Messdaten, die von der ETHZ zur Verfügung gestellt wurden, validiert werden konnte. Sie ist in dieser Form ein Alleinstellungsmerkmal der erfolgten Implementierung und bis dato in keiner anderen Arbeit zu finden. Aus den gewonnenen Erkenntnissen der Methodik können die nächsten Schritte bezüglich weiterer Maßnahmen und Fragestellungen wie folgt aussehen:

- Der vorgestellte Algorithmus hat sich als zielführend erwiesen, um die Modellierung der eindimensionalen Charakteristiken zu bewerten und entsprechende Abweichungen anzugeben. Die entwickelte Korrelation für die kritische Massenstrom- und Impulsflussdichte zeigt eine sehr gute Übereinstimmung mit den zugrunde liegenden, iterativen Daten. Während der Algorithmus zur Berechnung der kritischen Strömungsgrößen für alle möglichen Komponenten, Mischungen und Zustandsgleichungen angewendet werden kann, muss dies für die Korrelation noch überprüft werden. Darüber hinaus ist eine Weiterentwicklung der Berechnung für zweiphasige Zustände und im Unterschall stattfindende Düsenströmungen denkbar.
- Die implementierten thermodynamischen Modelle sind trotz der Anwendung einer kubischen ZGL mit einem hohen Rechenaufwand verbunden, was zum Großteil den Stabilitätsanalysen der Zustände und der anschließenden Berechnung des Phasengleichgewichts geschuldet ist. Um die Rechenzeit zu verringern und die Effizienz des Verfahrens zu verbessern, sind verschiedene Ansätze denkbar. Für die Auswertung der kubischen Zustandsgleichung und die Phasengleichgewichtsberechnungen sollte überprüft werden, ob diese mit einer Tabellierung der relevanten Werte oder über den Einsatz von Machine Learning effizienter gestaltet werden können. Da mit jeder Komponente in der Mischung die Dimension und somit die Komplexität der Berechnung steigt, wäre zunächst ein binäres Gemisch zu untersuchen.
- Die Berechnung des Phasenübergangs findet unter der Annahme eines instantanen Gleichgewichts statt. Diese Vereinfachung muss nicht unbedingt korrekt sein. Das zeigt die Gegenüberstellung der Kondensationsgebiete der experimentellen Messungen und der numerischen Ergebnisse. Insbesondere für sehr hohe Strömungsgeschwindigkeiten müsste die Vereinfachung gesondert betrachtet werden, da sich die Zeitskalen in der Strömungssimulation und für den Phasenübergang annähern. Ein erster Schritt könnte hier in einer detaillierten Auswertung der metastabilen Zustände liegen.
- Ist die korrekte Berechnung der Kondensationseffekte und der sich daraus ergebenden Stoffeigenschaften im Zweiphasengebiet nicht von Interesse, hat sich der vorgestellte einphasige Ansatz bewährt. Durch die Berechnung des ausschließlich größten Kompressibilitätsfaktors kann die Stabilität des Lösers, falls die Zustände im metastabilen Gebiet sind, verbessert werden. Es muss zusätzlich beachtet werden, ob das metastabile Gebiet mit dem Überschreiten der Siede- oder der Kondensationslinie betreten wird, um den entsprechend richtigen Wert für den Kompressibilitätsfaktor zu wählen. Hierfür fehlt noch die Implementierung in den betreffenden Funktionsaufrufen der Realgasthermodynamik. Es bleibt zudem zu klären, inwieweit die Methode für Reinstoffe und für Mischungen, in denen mehrere Komponenten dominant sind, geeignet ist.
- Ein weiterer Aspekt betrifft die Approximation der turbulenten Strömung, die in dieser Arbeit mit den RANS-Gleichungen erfolgte. Aufgrund des Verfahrens können durch den hohen Modellierungsanteil nur die gemittelten Strömungsgrößen dargestellt werden. Für die Struktur des Potenzialkerns zeigt sich zwar eine sehr gute Übereinstimmung mit den experimentellen Messdaten der ETH Zürich, die Vorhersage der transienten Eindringtiefe kann aber verbessert werden. Diese Diskrepanzen können allein der Turbulenzmodellierung zugeordnet werden. Es bleibt zu überprüfen, inwieweit vorhandene LES-Verfahren zu einer Verbesserung der Ergebnisse beitragen kön-

---

nen. Für einen ersten Vergleich kann der in dieser Arbeit entwickelte Strömungslöser verwendet werden. In Hinblick auf den sehr hohen Rechenaufwand, insbesondere bei auftretenden Kondensationseffekten, ist auch eine Kopplung der RANS-Methode mit bekannten LES-Verfahren denkbar, wobei das RANS-Verfahren für die wandgeführte Strömung bis zum Düsenaustritt zur Anwendung käme.

- Die in der Anwendung auftretenden Zeitskalen sind sehr klein und die Simulation ist dadurch mit einem entsprechend hohen Rechenaufwand verbunden. Für die Weiterentwicklung des Strömungslösers sollte überprüft werden, inwieweit sich die Effizienz des Lösen verbessern lässt. Ein erster Ansatz besteht hier in der Anwendung eines Runge-Kutta-Zeitschrittverfahrens. Dieses hat bei kleineren Vorstudien gute Ergebnisse erzielt und die Rechenzeit konnte merklich verringert werden.
- Der in dieser Arbeit betrachtete Injektor besitzt ein in der Mitte angeordnetes Spritzloch. Für Otto- und Dieselmotoren werden seit Jahrzehnten zur Optimierung der Gemischbildung Mehrlochinjektoren verwendet. Die Effekte, die sich in den generischen Studien gezeigt haben, werden auch für den Mehrlochinjektor erwartet. Ein interessanter Aspekt, der noch nicht betrachtet wurde und den es zu erforschen gilt, betrifft die Wechselwirkungen der einzelnen Zuströmungen zu den Spritzlöchern und die der Freistrahlen im Brennraum. Diese Untersuchungen könnten auch in einem größeren Projekt, in der zusätzlich der Einfluss der Ladungsbewegung auf die Freistrahlen berücksichtigt wird, durchgeführt werden.



## Anhang A

# Thermodynamische Zusammenhänge und Validierung der Zustandsgleichung

### Kritische Größen

Die für die Berechnung der Fluideigenschaften verwendeten kritischen Größen [17] sind in Tabelle A.1 gelistet.

Spezies [-]	Formel [-]	$T_c$ [K]	$p_c$ [bar]	$v_c$ [cm <sup>3</sup> /mol]	$Z_c$ [-]	$\omega$ [-]	$M_w$ [g/mol]
Methan	CH <sub>4</sub>	190.56	45.99	98.63	0.286	0.011	16.04
Ethan	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	305.32	48.72	145.84	0.280	0.099	30.07
Propan	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	369.89	42.51	200.00	0.276	0.152	44.10
Butan	C <sub>4</sub> H <sub>10</sub>	425.13	37.96	254.92	0.274	0.201	58.12
Pantan	C <sub>5</sub> H <sub>12</sub>	469.70	33.70	310.99	0.268	0.251	72.15
Hexan	C <sub>6</sub> H <sub>14</sub>	507.82	30.34	369.57	0.266	0.299	86.18
Stickstoff	N <sub>2</sub>	126.19	33.96	89.41	0.289	0.037	28.01
Sauerstoff	O <sub>2</sub>	154.58	50.43	73.37	0.288	0.022	32.00
Kohlenstoffdioxid	CO <sub>2</sub>	304.13	73.77	94.11	0.275	0.224	44.01
Wasserstoff	H <sub>2</sub>	33.15	12.96	64.48	0.303	-0.219	2.02

Tabelle A.1. Modellparameter der in dieser Arbeit verwendeten Fluide.

### NASA-Polynome

Da viele aus der Literatur stammende Koeffizienten zur Berechnung der NASA-Polynomen nicht für Niedertemperaturbereiche gültig sind, wurden diese neu berechnet, siehe Tabelle A.2. Dies erfolgte mit einer Polynomapproximation unter Minimierung der kleinsten Quadrate. Als Basis dienten die Werte der CoolProp-Datenbank [17]. Die Referenzzustände werden mit

$$c_{p,\text{ig}} = \mathcal{R}_u (a_1 + a_2 T + a_3 T^2 + a_4 T^3 + a_5 T^4), \quad (\text{A.1})$$

$$h_{\text{ig}} = \mathcal{R}_u T \left( a_1 + \frac{a_2 T}{2} + \frac{a_3 T^2}{3} + \frac{a_4 T^3}{4} + \frac{a_5 T^4}{5} + \frac{a_6}{T} \right) \quad \text{und} \quad (\text{A.2})$$

$$s_{\text{ig}} = \mathcal{R}_u \left( a_1 \ln T + a_2 \ln T + \frac{a_3 T^2}{2} + \frac{a_4 T^3}{3} + \frac{a_5 T^4}{4} + a_7 \right) \quad (\text{A.3})$$

berechnet.

Spezies	Temperaturbereich	$a_1$	$a_2$	$a_3$	$a_4$	$a_5$	$a_6$	$a_7$
$\text{CH}_4$	95 – 1000 K	4.682914e+00	-9.633131e-03	3.783066e-05	-3.576249e-08	1.163842e-11	-1.237940e+03	1.072089e+01
	> 1000 K	1.191153e+00	1.095544e-02	-4.066024e-06	7.252064e-10	-4.940202e-14	-8.495880e+02	2.596953e+01
$\text{C}_2\text{H}_6$	95 – 1000 K	4.272511e+00	-4.697308e-03	5.647976e-05	-6.591792e-08	2.460283e-11	-1.443506e+03	1.043177e+01
	> 1000 K	3.001928e+00	1.742336e-02	-6.835960e-06	1.234723e-09	-8.417374e-14	-1.958151e+03	1.255272e+01
$\text{C}_3\text{H}_8$	90 – 1000 K	4.066378e+00	4.042939e-03	6.152419e-05	-7.969727e-08	3.102589e-11	-1.790386e+03	1.169974e+01
	> 1000 K	5.083496e+00	2.354781e-02	-9.218804e-06	1.662886e-09	-1.132654e-13	-3.063363e+03	1.231345e+00
$\text{C}_4\text{H}_{10}$	135 – 1000 K	6.021985e+00	2.632298e-03	8.702606e-05	-1.121214e-07	4.378623e-11	-2.476521e+03	2.963703e+00
	> 1000 K	7.574687e+00	2.943543e-02	-1.163269e-05	2.112303e-09	-1.445712e-13	-4.278896e+03	-1.229549e+01
$\text{C}_5\text{H}_{12}$	145 – 1000 K	7.353065e+00	2.623586e-03	1.080414e-04	-1.363903e-07	5.222081e-11	-3.016324e+03	-1.372058e+01
	> 1000 K	9.958641e+00	3.596227e-02	-1.458005e-05	2.694486e-09	-1.867364e-13	-5.653853e+03	-3.695686e+01
$\text{C}_6\text{H}_{14}$	180 – 1000 K	8.244728e+00	5.715629e-03	1.251247e-04	-1.621411e-07	6.290760e-11	-3.525369e+03	-2.208153e+01
	> 1000 K	1.264940e+01	4.086267e-02	-1.648796e-05	3.037476e-09	-2.100495e-13	-6.911144e+03	-5.607305e+01
$\text{N}_2$	65 – 1000 K	3.503055e+00	5.360719e-05	-8.930310e-07	2.792332e-09	-1.523061e-12	1.043978e+03	2.611359e+01
	> 1000 K	2.859280e+00	1.594052e-03	-6.270857e-07	1.145234e-10	-7.868099e-15	-8.913279e+02	2.940228e+01
$\text{O}_2$	55 – 1000 K	3.590021e+00	-1.384112e-03	5.338923e-06	-4.562668e-09	1.212595e-12	-1.048233e+03	2.745591e+01
	> 1000 K	3.599207e+00	7.759599e-04	-2.159020e-07	3.839332e-11	-2.900072e-15	-1.190701e+03	2.678233e+01
$\text{CO}_2$	220 – 1000 K	2.192507e+00	1.026865e-02	-1.054267e-05	6.215182e-09	-1.601358e-12	-1.028442e+03	2.240050e+01
	> 1000 K	4.409874e+00	3.203525e-03	-1.307557e-06	2.434527e-10	-1.698449e-14	-1.610571e+03	1.113022e+01
$\text{H}_2$	15 – 1000 K	2.142009e+00	8.657646e-03	-1.946997e-05	1.865961e-08	-6.354464e-12	-8.867792e+02	2.190688e+01
	> 1000 K	3.137220e+00	4.171226e-04	1.335307e-07	-5.862254e-11	5.578518e-15	-8.919197e+02	1.811579e+01

Tabelle A.2. Modellkoeffizienten für die NASA-Polynome.

### Thermodynamische Zusammenhänge - Kalorische Größen

Die in den kalorischen Größen vorkommenden partiellen Ableitungen der SRK-ZGL nach der Temperatur bei konstantem Volumen bzw. nach dem Volumen bei konstanter Temperatur lauten

$$\left. \frac{\partial p}{\partial T} \right|_v = \frac{R_u}{v-b} - \frac{\partial a}{\partial T} \frac{1}{v(v+b)} \quad \text{und} \quad (\text{A.4})$$

$$\left. \frac{\partial p}{\partial v} \right|_T = -\frac{R_u T}{(v-b)^2} + \frac{a(2v+b)}{v^2(v+b)^2}. \quad (\text{A.5})$$

Die erste und zweite Ableitung des Modellparameters  $a(T)$  nach der Temperatur ist gegeben mit

$$\frac{\partial a}{\partial T} = 0.42748 \frac{\mathcal{R}_u^2 T_c^2}{p_c} \kappa \left( \frac{\kappa}{T_c} - \frac{1+\kappa}{\sqrt{T T_c}} \right) \quad \text{und} \quad (\text{A.6})$$

$$\frac{\partial^2 a}{\partial T^2} = 0.42748 \frac{\mathcal{R}_u^2 T_c^2}{p_c} \kappa \left( \frac{1+\kappa}{2\sqrt{T^3 T_c}} \right). \quad (\text{A.7})$$

Die zur Bestimmung der Schallgeschwindigkeit benötigte spezifische Wärmekapazität bei konstantem Volumen lautet

$$c_v = c_p + T \left. \frac{\partial p / \partial T}{\partial p / \partial v} \right|_T^2. \quad (\text{A.8})$$

Die spezifische Wärmekapazität bei konstantem Druck ist bereits in Abschnitt 2.3.1 enthalten.

### Thermodynamische Zusammenhänge - Isenthalpe Kompressibilität

Die isenthalpe Kompressibilität  $\psi_h$  ist für den einphasigen Zustand mit

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

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

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

mit

$$\left. \frac{\partial h}{\partial p} \right|_v = v - \frac{\mathcal{R}_u}{\partial p / \partial T|_v} - \frac{T \partial^2 a / \partial T^2}{b \partial p / \partial T|_v}, \quad (\text{A.11})$$

$$\left. \frac{\partial h}{\partial v} \right|_p = p - \frac{\mathcal{R}_u}{\partial v / \partial T|_p} + \frac{a - T \partial a / \partial T}{v(v+b)} - \frac{T \partial^2 a / \partial T^2}{b \partial v / \partial T|_p} \ln \left( \frac{v}{v+b} \right) \quad \text{und} \quad (\text{A.12})$$

$$\left. \frac{\partial v}{\partial T} \right|_p = \left. \frac{\partial p / \partial T}{\partial p / \partial v} \right|_T \quad (\text{A.13})$$

$$(\text{A.14})$$

ermittelt werden.

### Validierung der Zustandsgleichung - Reinstoffdaten

Die Validierung der Zustandsgleichung mit Reinstoffdaten ist in den Abbildung A.1, A.2 und A.3 zu sehen. Für Methan und Ethan wurden zur Anschauung drei Druckniveaus ausgewählt, die verschiedenen Zuständen während der Eindüsung entsprechen. Die Simulationen wurden bei einem Totaldruck von 300 bzw. 500 bar im Plenum durchgeführt. Der Druck des Brennstoffs bei kritischer Durchströmung bei 300 bar Totaldruck beträgt 122.67 bar (entsprechend wurde ein Druck von 100 bar für die Validierung gewählt). Bei Stickstoff wurde der Druck an die in der Anwendung auftretenden Gegendrücke angepasst.

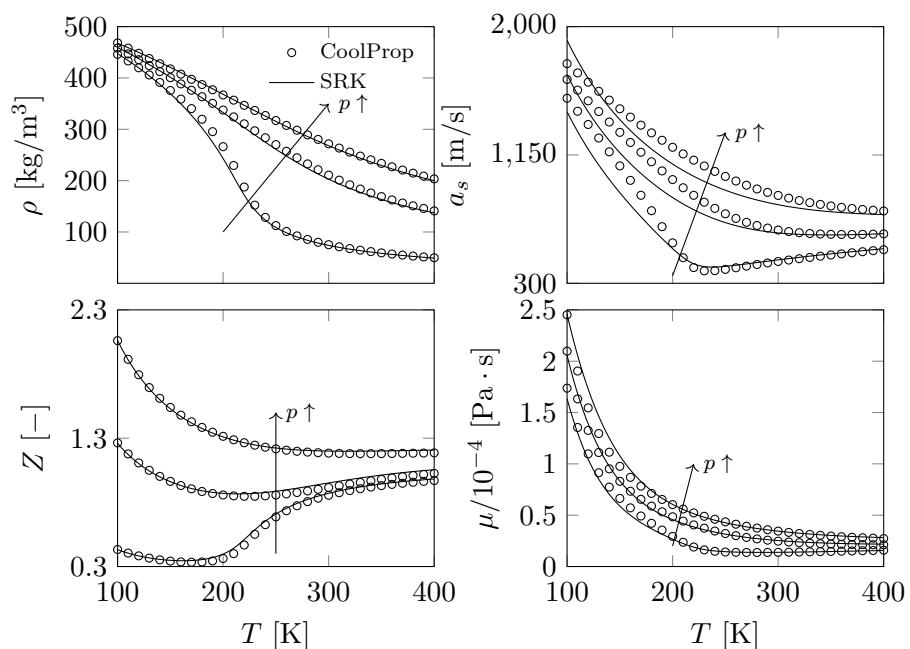


Abbildung A.1. Dichte, Schallgeschwindigkeit, Kompressibilitätsfaktor und dynamische Viskosität von Methan bei  $p_1 = 100$  bar,  $p_2 = 300$  bar und  $p_3 = 500$  bar.

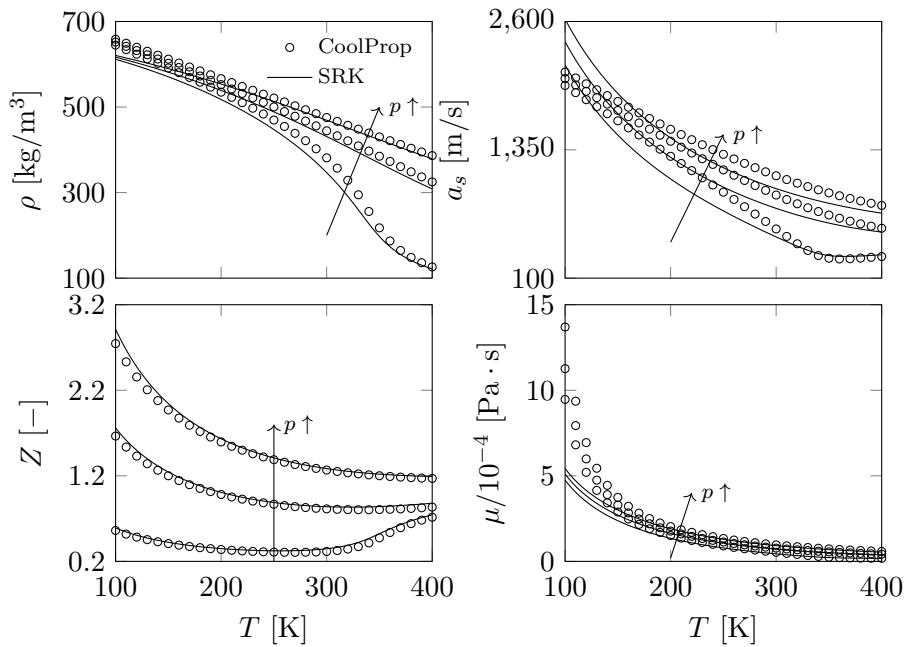


Abbildung A.2. Dichte, Schallgeschwindigkeit, Kompressibilitätsfaktor und dynamische Viskosität von Ethan bei  $p_1 = 100 \text{ bar}$ ,  $p_2 = 300 \text{ bar}$  und  $p_3 = 500 \text{ bar}$ .

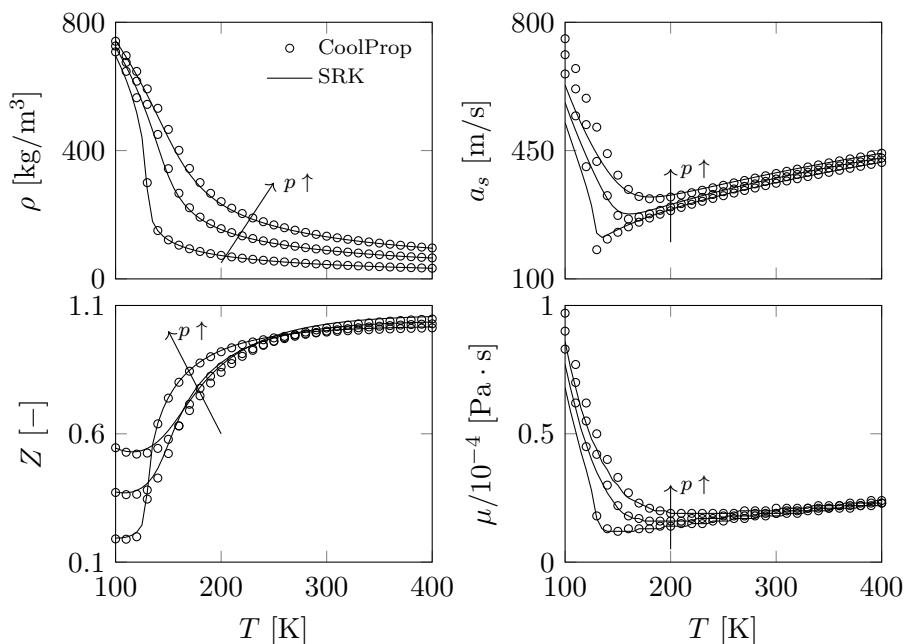


Abbildung A.3. Dichte, Schallgeschwindigkeit, Kompressibilitätsfaktor und dynamische Viskosität von Stickstoff bei  $p_1 = 40 \text{ bar}$ ,  $p_2 = 80 \text{ bar}$  und  $p_3 = 120 \text{ bar}$ .



## Anhang B

# Methodik und Validierung des Strömungslösers

### Analyse der Lösung der Druckgleichung

Zum besseren Verständnis der hergeleiteten Druckgleichung werden die einzelnen Terme der hybriden Druckgleichung zuerst mit der PISO-Druckgleichung von Jarczyk und Pfitzner [76]

$$\Delta V \frac{(\psi_h^{n+1} p^{n+1} - \psi_h^n p^n)}{\Delta t} + \sum_f \left( \rho \frac{H_p}{A_p} \right)_f \vec{S}_f - \sum_f \left( \frac{\rho}{A_p} \nabla p \right)_f \vec{S}_f = 0 \quad (\text{B.1})$$

verglichen. Durch die Annahme eines thermisch idealen Gases entfallen in der hybriden Druckgleichung 3.23 alle Terme mit  $\hat{\rho}$ , da  $\rho = \psi_h p$ , und die Gleichung vereinfacht sich zu:

$$\begin{aligned} & \Delta V \frac{(\psi_h^{n+1} p^{n+1} - \psi_h^n p^n)}{\Delta t} \\ & + \sum_f \left( \alpha_f \left( \rho \frac{H_p}{A_p} \right)_f^P \frac{\vec{S}_f}{\rho_f^P} - \bar{a}_{S,f} \right) (\psi_h p)_f^P + \sum_f \left( (1 - \alpha_f) \left( \rho \frac{H_p}{A_p} \right)_f^N \frac{\vec{S}_f}{\rho_f^N} + \bar{a}_{S,f} \right) (\psi_h p)_f^N \\ & - \sum_f \left( \alpha_f \left( \frac{\rho}{A_p} \nabla p \right)_f^P \vec{S}_f \right) - \sum_f \left( (1 - \alpha_f) \left( \frac{\rho}{A_p} \nabla p \right)_f^N \vec{S}_f \right) = 0. \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

Die direkte Gegenüberstellung der beiden Gleichungen verdeutlicht die Besonderheiten der hybriden Druckgleichung:

- Sowohl die konvektiven als auch die diffusiven Terme der Druckgleichung werden in die beiden Richtungen P und N (vgl. Abbildung 3.2) aufgeteilt.
- Die Gewichtung der konvektiven Terme erfolgt mit dem Faktor  $\alpha_f$  und der Funktion  $\bar{a}_{S,f}$ , beide sind abhängig von den mit den charakteristischen Ausbreitungsgeschwindigkeiten berechneten Volumenflüssen  $a_f^P$  und  $a_f^N$ .
- Die diffusiven Terme werden mit dem  $\alpha_f$ -Faktor gewichtet.
- Mit dem Ausdruck  $\frac{\vec{S}_f}{\rho_f} (\psi_h p)_f$  in den konvektiven Termen wird eine zusätzliche Korrektur der Dichte eingeführt, wodurch die Druckgleichung hyperbolisch wird [116].

Eine weitere Besonderheit, die nicht durch die Gleichungen ersichtlich wird, ist die Interpolation der Zellwerte auf die Zellflächen. Die lineare Zellflächeninterpolation, die bei der PISO-Formulierung verwendet wird, wird durch ein TVD-Verfahren [101, 24] ersetzt. Dadurch werden die jeweiligen Größen monotonieerhaltend auf die Zellflächen interpoliert und keine neuen Maxima und Minima entstehen (siehe Abschnitt 3.1).

Als eindimensionaler Testfall wird ein initialisierter Stoß, der mit einer Geschwindigkeit von 650 m/s von links nach rechts läuft, betrachtet. Der Druck vor dem Stoß (rechts) beträgt 60 bar, nach dem Stoß 300 bar. Das Methan wird unter der Annahme eines thermisch

idealnen Gases über den Stoß von 294 K auf 314 K komprimiert. Zusammengefasst wurden die folgenden Initialbedingungen definiert:

$$\begin{pmatrix} T_L \\ p_L \\ u_L \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 314 \text{ K} \\ 300 \text{ bar} \\ 650 \text{ m/s} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} T_R \\ p_R \\ u_R \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 294 \text{ K} \\ 60 \text{ bar} \\ 0 \text{ m/s} \end{pmatrix}.$$

Das Rechengebiet ( $1 \times 1 \times 1 \text{ m}$ ) wurde mit zehn Zellen in axialer Richtung aufgelöst. Verglichen werden die konvektiven Terme der hybriden Druckgleichung B.2 mit dem Ergebnis der gleichen Formulierung unter Annahme des PISO-Verfahrens ( $\kappa = 0$ , lineare Zellflächeninterpolation,  $a_f = 1$ ,  $\bar{a}_{S,f} = 0 \text{ m}^3/\text{s}$ ). Der Zeitableitungsterm wird mit dem impliziten Euler-Verfahren diskretisiert. Für die räumliche Diskretisierung werden zentrale Differenzen zweiter Ordnung verwendet. In der hybriden Methode werden die zentralen Differenzen durch die TVD-Limitierung von van Albada [165] ergänzt.

Abbildung B.1 zeigt den initialisierten Druckverlauf sowie das Ergebnis der Gleichung B.2 nach einer Iteration. Der Zeitschritt wurde so gewählt, dass die maximale CFL-Zahl im Strömungsgebiet  $\approx 0.4$  ist. Jede Markierung stellt den Wert am Zellmittelpunkt dar. Für das PISO-Verfahren kommt es zu unphysikalischen Oszillationen nach dem Stoß, welche bei dem Ergebnis der hybriden Druckgleichung nicht präsent sind.

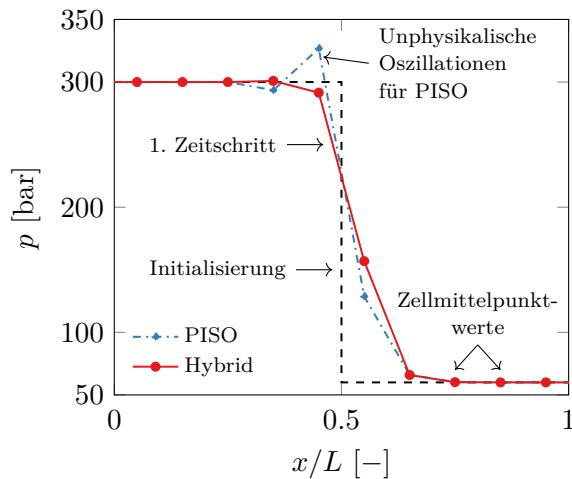


Abbildung B.1. Druckfeld nach einer Iteration.

Die konvektiven Terme in Gleichung B.2 bestehen aus der Summe der auf die Zellflächen interpolierten Volumenströme multipliziert mit der Dichte  $\psi_h p$ , wodurch sich der Massenstrom ergibt. Der Volumenstrom berechnet sich aus der Geschwindigkeit zum neuen Zeitschritt  $u^{n+1}$ , welche durch die Lösung der Impulsgleichung 3.19 vorhergesagt wird. Diese führt für die PISO-Formulierung mit der linearen Rekonstruktion bereits zu einem Überschwinger in der auf die Zellfläche projizierten Geschwindigkeit und folglich auch in dem Volumenfluss  $\phi_f = \left( \rho \frac{H_p}{A_p} \right)_f \frac{\vec{S}_f}{\rho_f}$ , siehe Abbildung B.2a. Durch die Aufteilung der Flüsse in der Impulsgleichung im hybriden Verfahren und die Anwendung der TVD-Limitierung werden bei der Berechnung der Geschwindigkeit  $u^{n+1}$  keine unphysikalischen Ergebnisse produziert ( $\kappa$  wird für die initialisierte Geschwindigkeit zu 1 ausgewertet, die Formulierung entspricht somit dem KT-Verfahren. Rechts vom Stoß ist  $\kappa = 0$ ). Um Gleichung B.2

lösen zu können, muss der Fluss  $\phi_f$  mit der Kompressibilität  $\psi_{h,f}$  multipliziert werden. In Abbildung B.2b ist zu sehen, dass der Überschwinger nach dem Stoß erhalten bleibt. Durch den Gradienten mit Vorzeichenwechsel kommt es zu der Oszillation im Druckfeld. Die gewichteten Flüsse der beiden Richtungen im hybriden Verfahren ergänzen sich zu einem Verlauf ohne Überschwinger, wobei der Gradient über zwei Zellen aufgelöst wird. Das TVD-Verfahren stabilisiert die Diskretisierung der hybriden Druckgleichung durch ein Verfahren erster Ordnung in der Nähe von großen Gradienten und Unstetigkeiten im Strömungsfeld. Es erhält die Monotonie und unterbindet unphysikalische Über- und Unterschwinger.

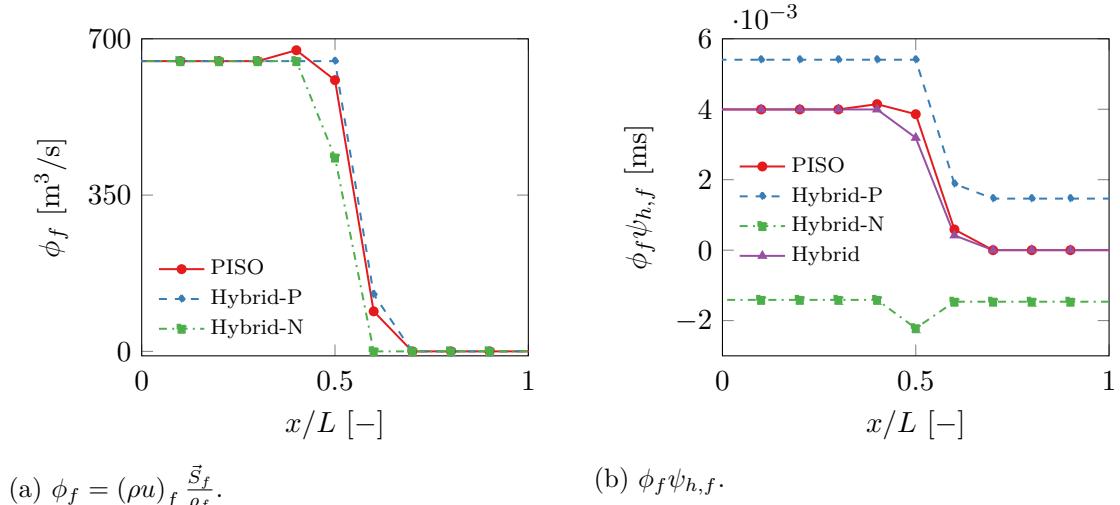


Abbildung B.2. Vergleich der Ausdrücke im Konvektionsterm für die hybride Druckgleichung und die PISO-Formulierung.

## Riemann-Testfälle

### Nicht normierter Testfall

Abbildung B.3 zeigt den bekannten Testfall für das eindimensionale, kartesische Riemann-Problem mit einem Druckverhältnis von 5 aus Abschnitt 3.3.3. Die Initialbedingungen für den Testfall lauten:

$$\begin{pmatrix} T_L \\ p_L \\ u_L \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 294 \text{ K} \\ 300 \text{ bar} \\ 0 \text{ m/s} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} T_R \\ p_R \\ u_R \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 294 \text{ K} \\ 60 \text{ bar} \\ 0 \text{ m/s} \end{pmatrix}.$$

Die Ergebnisse der Strömungssimulation mit Realgasthermodynamik sind fast deckungsgleich mit den Ergebnissen des Riemann-Lösers. Wird die Idealgastthermodynamik angewandt, verschlechtert sich die Übereinstimmung deutlich.

### Zusätzlicher Testfall mit stärkeren Realgas-Einflüssen

Ein weiterer Testfall ist in Abbildung B.4 dargestellt. Um den Realgaseinfluss nochmals zu steigern, wurde der initialisierte Druck links der Membran auf 500 bar erhöht. Bei einem

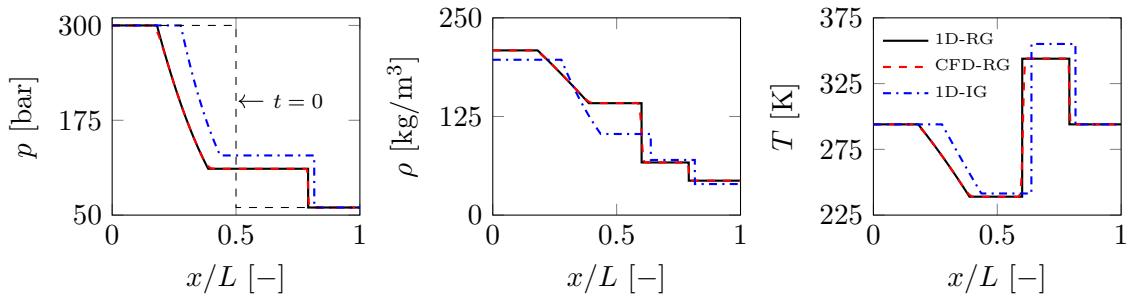


Abbildung B.3. Vergleich der Lösungen für das eindimensionale Riemann-Problem, Momentaufnahmen nach  $t = 0.5$  ms. Das Ergebnis des Riemann-Lösers ist mit 1D-RG und 1D-IG (RG - Realgasthermodynamik, IG - Idealgasthermodynamik), die Lösung des Strömungslösers mit CFD-RG gekennzeichnet.

Druckverhältnis von 20 beträgt der neue Druck rechts der Membran 25 bar ( $t = 0$  s). Die Initialtemperatur und -geschwindigkeit wurde übernommen:

$$\begin{pmatrix} T_L \\ p_L \\ u_L \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 294 \text{ K} \\ 500 \text{ bar} \\ 0 \text{ m/s} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} T_R \\ p_R \\ u_R \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 294 \text{ K} \\ 25 \text{ bar} \\ 0 \text{ m/s} \end{pmatrix}.$$

Wiederum stimmen die Ergebnisse des Riemann-Lösers und die der CFD für die Realgasthermodynamik sehr gut überein. Für den Idealgas-Testfall werden sowohl die absoluten Werte, die Positionen der Charakteristiken als auch die Größen vor und hinter dem Stoß/der Kontaktdiskontinuität mit einer großen Abweichung berechnet.

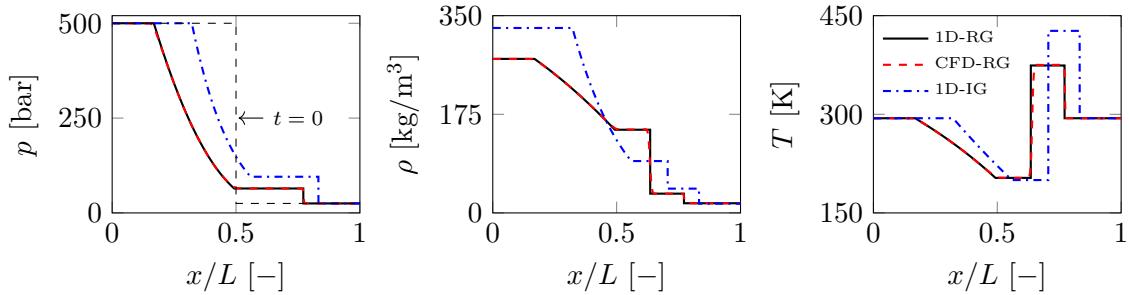


Abbildung B.4. Vergleich der Lösungen für das eindimensionale Riemann-Problem, Momentaufnahmen nach  $t = 0.4$  ms.

## Anhang C

# Zusätzliche Abbildungen für die eindimensionale Düsenströmung

In Abbildung C.1 und C.2 sind die kritischen Größen für Stickstoff und Wasserstoff dargestellt. Für die SRK-ZGL zeigt sich eine sehr gute Übereinstimmung der Werte mit den CoolProp-Daten, während es für das thermisch ideale Gas zu erheblichen Abweichungen kommt. Aufgrund der Stoffeigenschaften besitzt Wasserstoff eine deutlich geringere kritische Dichte als Methan und Stickstoff, die Werte für die Schallgeschwindigkeit sind hingegen viel größer.

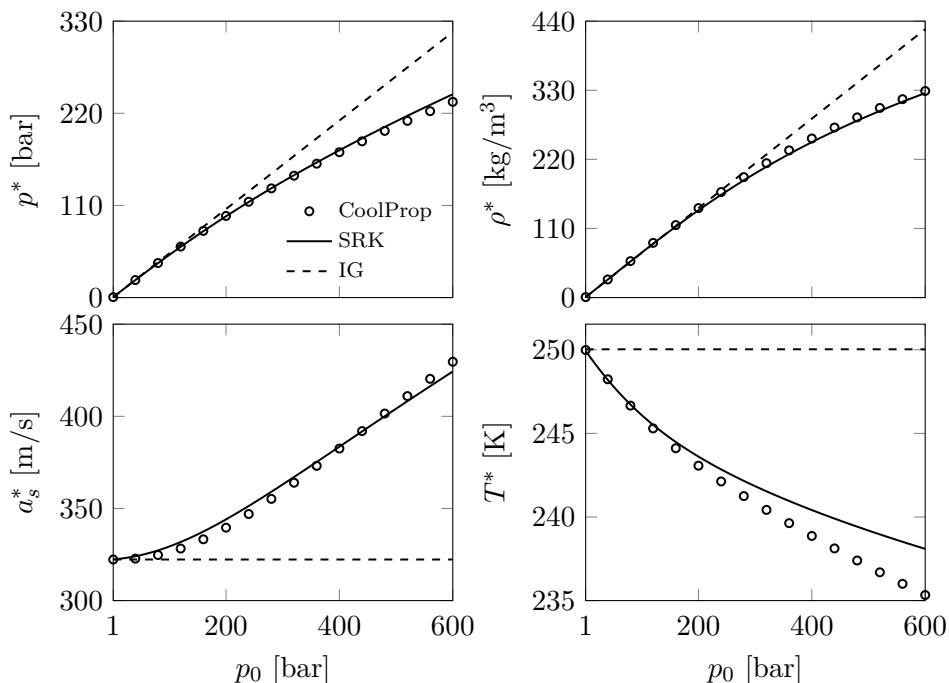


Abbildung C.1. Kritische Größen für Stickstoff bei einer Total-Temperatur von 300 K.

Die relative Massenstrom- und Impulsflussdichte für Stickstoff ist in Abbildung C.3 gezeigt. Ähnlich zu Methan ergeben sich für die relative Massenstromdichte Extremwerte in den Kurvenverläufen, die relative Impulsflussdichte zeigt ein strikt monotones Verhalten. Für die zugehörigen Korrelationen in Abbildung C.4 ist die Übereinstimmung geringfügig schlechter als bei Methan, aber immer noch ausreichend genau für die Anwendung in einem eindimensionalen Berechnungstool.

Die sich aus der Korrelation ergebenden fluidspezifischen Modellkoeffizienten sind in Tabelle C.1 aufgelistet. Sie wurden durch die Minimierung der kleinsten Fehlerquadrate bestimmt. Die entsprechenden Funktionen können der Abbildung C.5 entnommen werden. Die Koeffizienten  $A$ ,  $D$ ,  $E$  und  $H$  sind für Methan und Stickstoff sehr ähnlich. Dies liegt an der Form der Korrelation, da die besagten Koeffizienten den unteren und oberen Grenzwerte von  $\Gamma$  bzw.  $\tilde{\Gamma}$  angeben.

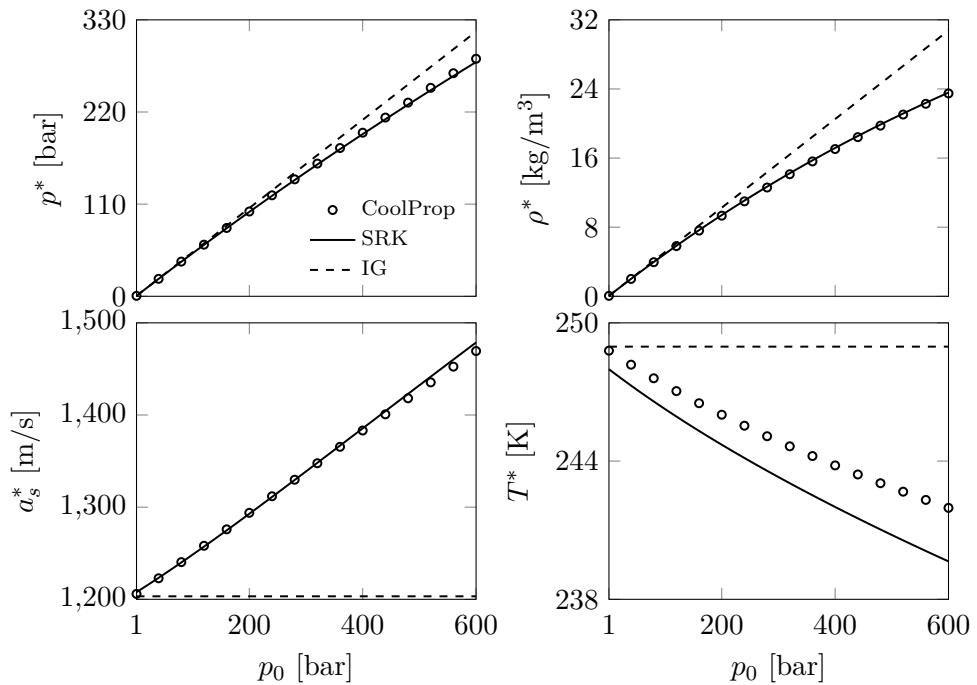
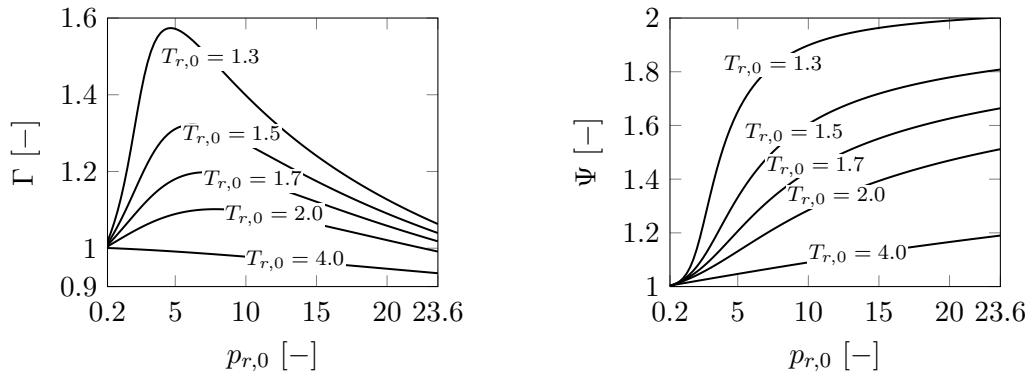


Abbildung C.2. Kritische Größen für Wasserstoff bei einer Total-Temperatur von 300 K.



(a) Relative Massenstromdichte.

(b) Relative Impulsflussdichte.

Abbildung C.3. Relative Massenstrom- und Impulsflussdichte für Stickstoff bei einem reduzierten Druck von  $0.2 \leq p_{r,0} \leq 23.6$  und einer reduzierten Total-Temperatur  $T_{r,0}$  von 1.3, 1.5, 1.7, 2.0 und 4.0.

Die maximale Abweichung  $\max(\epsilon)$ , der mittlere Fehler  $\bar{\epsilon}$  und die Standardabweichung  $\sigma$  der Korrelation sind in Tabelle C.2 aufgelistet.

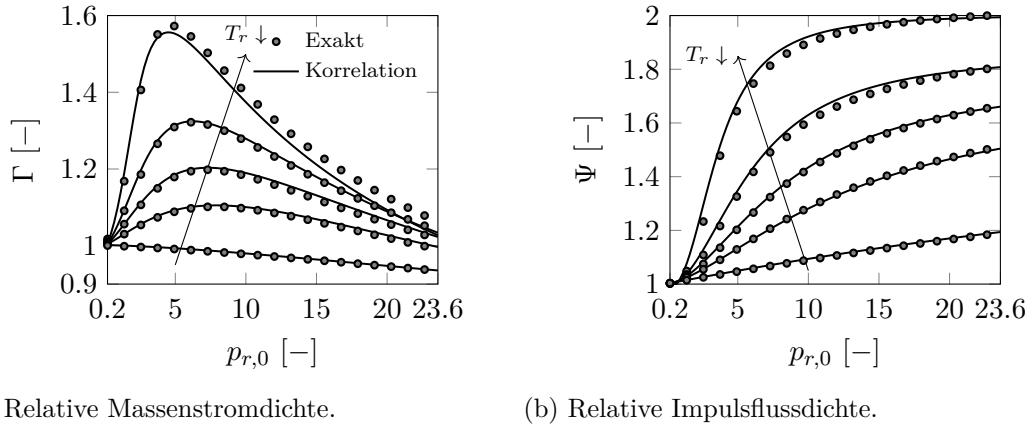


Abbildung C.4. Relative Massenstromdichte  $\Gamma$  und relative Impulsflussdichte  $\Psi$  für Stickstoff bei einem reduzierten Druck von  $0.2 \leq p_{r,0} \leq 23.6$  und einer reduzierten Total-Temperatur  $T_{r,0}$  von 1.3, 1.5, 1.7, 2.0 und 4.0.

	Methan	Stickstoff		Methan	Stickstoff
$a_1$	2.817117	3.933358	$e_1$	1.043372	1.007255
$a_2$	0.189955	0.125343	$e_2$	-0.011789	-0.001369
$a_3$	-1.519075	-2.125343	$e_3$	-1.396015	-2.476580
$a_4$	-0.921886	-0.318296	$e_3$	-2.639462	-3.579442
$b_1$	27923.254099	18.788905	$f_1$	159859.568666	29.753634
$b_2$	-8.973898	-2.788905	$f_2$	-10.375544	-2.770590
$b_3$	3.293808	1.716486	$f_3$	3.799343	1.918240
$b_4$	-0.342468	-0.129381	$f_3$	-0.393591	-0.156256
$c_1$	1.533820	1068681.1068681	$g_1$	1.246544	72590.093422
$c_2$	1.059837	0.301035	$g_2$	1.193596	0.327650
$c_3$	-34.689966	-1068687.445551	$g_3$	-146.989679	-72596.300834
$c_4$	-2.139403	0.301029	$g_4$	-3.500318	0.327559
$d_1$	8.154470	0.000000	$h_1$	8.500318	8.561969
$d_2$	-2.611397	-0.001369	$h_2$	-1.965470	-2.285907
$d_3$	2.929049	3.234770	$h_3$	1.079782	1.457432
$d_4$	0.228730	0.189980	$h_3$	0.173680	0.055655

Tabelle C.1. Fluid-abhängige Koeffizienten für die Temperaturabhängigkeit von  $A$ ,  $B$ ,  $C$ ,  $D$ ,  $E$ ,  $F$ ,  $G$  und  $H$ .

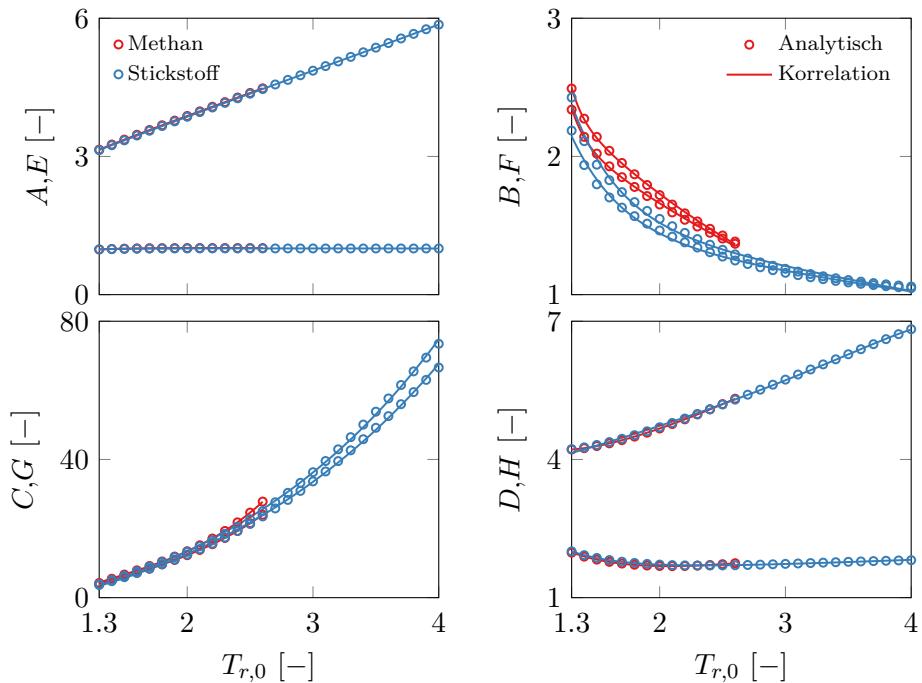


Abbildung C.5. Funktionen für die Koeffizienten  $A, B, C, D, E, F, G$  und  $H$  der beiden Fluide Methan und Stickstoff in dem jeweils gültigen Temperaturbereich.

		$\max(\epsilon)$ [%]	$\bar{\epsilon}$ [%]	$\sigma$ [%]	$T_{r,0}$	$p_{r,0}$
$\text{CH}_4$	$\Gamma$	-2.69	0.00	0.13	1.2	1.59
	$\Psi$	-4.75	0.00	0.18	1.2	1.76
$\text{N}_2$	$\Gamma$	3.37	-0.02	0.13	1.3	2.09
	$\Psi$	-5.48	-0.08	0.29	1.3	2.09

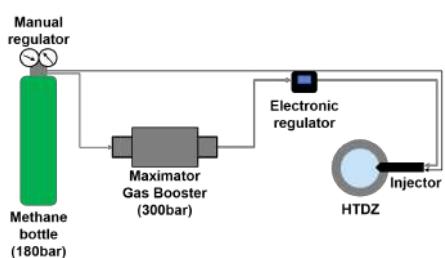
Tabelle C.2. Maximaler Fehler, mittlerer Fehler und Standardabweichung der Korrelation ( $\Gamma, \Psi$ ) für Methan und Stickstoff.

## Anhang D

# Experimenteller Aufbau und Messverfahren der ETH Zürich

### Prüfstand

Der experimentelle Versuchsaufbau für die Messungen der ETH Zürich ist in Abbildung D.1a skizziert. Eine schematische CAD-Zeichnung der Kammer mit dem seitlich angebrachten Injektor ist in Abbildung D.1b gezeigt.



(a) Schematische Skizze des Prüfstands.



(b) Kammer mit seitlich angebrachtem Injektor.

Abbildung D.1. Experimenteller Aufbau.

### Verbesserung der Schlierenaufnahmen

Die Verbesserung der Qualität der Schlierenaufnahmen ist in Abbildung D.2 dargestellt. Im ersten Schritt wird das Rauschen des Hintergrunds entfernt, wodurch dieser schwarz wird und die Konturen des Freistrahls deutlicher zu erkennen sind. Um diese weiter zu extrahieren, wird die Aufnahme des letzten Zeitschritts subtrahiert (Schritt 2). Dadurch werden die Änderungen in der Aufnahme auf die zeitlichen Änderungen einer Bildfolge reduziert. Im dritten und letzten Schritt werden die Aufnahmen nach der zweiten Bearbeitung schließlich auf das Resultat des ersten Schrittes addiert, was zu einer eindeutigen Trennung von Brennstoff und umgebendem Fluid führt.

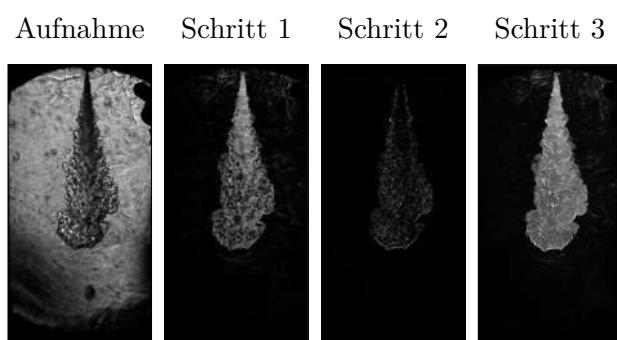


Abbildung D.2. Nachbearbeitung der Schlierenaufnahmen in drei Schritten.



# Literaturverzeichnis

- [1] ABRAHAM, J. : Entrapment characteristics of transient gas jets. In: *Numerical Heat Transfer; Part A: Applications* 30 (1996), Nr. 4, S. 347–364
- [2] ADAMSON, T. C. ; NICHOLLS, J. A.: On the Structure of Jets from Highly Underexpanded Nozzles Into Still Air. In: *Journal of the Aerospace Sciences* 26 (1959), Nr. 1, S. 16–24
- [3] AMIRAM HARTEN ; LAX, P. D. ; BRAM VAN LEER: On Upstream Differencing and Godunov-Type Schemes for Hyperbolic Conservation Laws. In: *SIAM review* 25 (1983), Nr. 1, S. 35–61
- [4] ANDERSON, D. ; TANNEHILL, J. C. ; PLETCHER, R. H.: *Computational fluid mechanics and heat transfer*. CRC Press, 2016
- [5] ARNETTE, S. a. ; SAMIMY, M. ; ELLIOTT, G. S.: On streamwise vortices in high Reynolds number supersonic axisymmetric jets. In: *Physics of Fluids A: Fluid Dynamics* 5 (1993), Nr. 1, S. 187–202
- [6] ASHKENAS, H. ; SHERMAN, F. S.: Structure and utilization of supersonic free jets in low density wind tunnels. In: *Rarefied Gasdynamics* 4 (1965)
- [7] AWAD, M. M. ; MUZYCHKA, Y. S.: Effective property models for homogeneous two-phase flows. In: *Experimental Thermal and Fluid Science* 33 (2008), Nr. 1, S. 106–113
- [8] BAAB, S. ; LAMANNA, G. ; WEIGAND, B. : Two-phase disintegration of high-pressure retrograde fluid jets at near-critical injection temperature discharged into a subcritical pressure atmosphere. In: *International Journal of Multiphase Flow* 107 (2018), S. 116–130
- [9] BANHOLZER, M. ; VERA-TUDELA, W. ; TRAXINGER, C. ; PFITZNER, M. ; WRIGHT, Y. ; BOULOUCHOS, K. : Numerical investigation of the flow characteristics of under-expanded methane jets. In: *Physics of Fluids* 31 (2019), Nr. 5, S. 056105
- [10] BANHOLZER, M. ; MÜLLER, H. ; PFITZNER, M. : Numerical investigation of the flow structure of underexpanded jets in quiescent air using real-gas thermodynamics. In: *23rd AIAA computational fluid dynamics conference*, 2017, S. 4289
- [11] BANHOLZER, M. ; PFITZNER, M. : Correlations for the choked mass and momentum flux density considering real-gas thermodynamics. In: *Journal of Fluids Engineering* 141 (2019), Nr. 8, S. 081202
- [12] BANHOLZER, M. ; PFITZNER, M. ; SAKELLARAKIS, D. ; WRIGHT, Y. M. ; VERA-TUDELA, W. ; BOULOUCHOS, K. : Numerical Investigation of Nozzle-Geometry Variations and Back-Pressure Changes on High Pressure Gas Injections under Application-Relevant Conditions. In: *SAE Technical Paper*, 2018
- [13] BANHOLZER, M. ; PFITZNER, M. ; SAKELLARAKIS, D. ; WRIGHT, Y. M. ; VERA-TUDELA, W. ; BOULOUCHOS, K. : Vertiefung des Verständnisses zu Eindringverhalten

- und Zündung von Hochdruck-Gasstrahlen in Gas Diesel Brennverfahren. Zwischenbericht über das Vorhaben Nr. 1236, Heft R 582. In: *Informationstagung Motoren* (2018)
- [14] BARRO, C. ; MEYER, P. ; BOULOUCHOS, K. : Optical investigations of soot reduction mechanisms using post-injections in a cylindrical constant volume chamber (CCVC) / SAE Technical Paper. 2014. – Forschungsbericht
  - [15] BAUD, M. : Data analysis, mathematical modeling. In: *Methods of immunological analysis* 1 (1993), S. 656–671
  - [16] BEATTIE, J. A. ; BRIDGEMAN, O. C.: A new equation of state for fluids. In: *Proceedings of the American Academy of Arts and Sciences* 63 (1928), Nr. 5, S. 229–308
  - [17] BELL, I. H. ; WRONSKI, J. ; QUOILIN, S. ; LEMORT, V. : Pure and pseudo-pure fluid thermophysical property evaluation and the open-source thermophysical property library CoolProp. In: *Industrial & engineering chemistry research* 53 (2014), Nr. 6, S. 2498–2508
  - [18] BENEDICT, M. ; WEBB, G. B. ; RUBIN, L. C.: An empirical equation for thermodynamic properties of light hydrocarbons and their mixtures. I. Methane, ethane, propane and n-butane. In: *The Journal of Chemical Physics* 8 (1940), Nr. 4, S. 334–345
  - [19] BIRCH, A. D. ; BROWN, D. R. ; DODSON, M. G. ; SWAFFIELD, F. : The Structure and Concentration Decay of High Pressure Jets of Natural Gas. In: *Combustion Science and Technology* 36 (1984), Nr. 5-6, S. 249–261
  - [20] BIRCH, A. D. ; HUGHES, D. J. ; SWAFFIELD, F. : Velocity Decay of High Pressure Jets. In: *Combustion Science and Technology* 52 (1987), Nr. 1-3, S. 161–171
  - [21] BIRKBY, P. ; PAGE, G. J.: Numerical predictions of turbulent underexpanded sonic jets using a pressure-based methodology. In: *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part G: Journal of Aerospace Engineering* 215 (2001), Nr. 3, S. 165–173
  - [22] BLOOMER, OT AND PARENT, J. : Liquid-vapor phase behavior of the methane-nitrogen system. In: *Chemical Engineering Progress Symposium Series* 49 (1953), Nr. 6, S. 11–24
  - [23] BONELLI, F. ; VIGGIANO, A. ; MAGI, V. : A Numerical Analysis of Hydrogen Underexpanded Jets Under Real Gas Assumption. In: *Journal of Fluids Engineering* 135 (2013), Nr. 12, S. 121101
  - [24] BORIS, J. P. ; BOOK, D. L.: Flux-corrected transport. I. SHASTA, a fluid transport algorithm that works. In: *Journal of computational physics* 11 (1973), Nr. 1, S. 38–69
  - [25] BOSCH, R. : *Bosch Automotive Handbook*. Robert Bosch, 2018
  - [26] CASTIER, M. : Thermodynamic speed of sound in multiphase systems. In: *Fluid Phase Equilibria* 306 (2011), Nr. 2, S. 204–211
  - [27] CHANG, SHINN-DER AND LU, B. : Vapor-liquid equilibriums in the nitrogen-methane-ethane system. In: *Chem. Eng. Prog., Symp. Ser.;(United States)* 63 (1967), Nr. 81

- [28] CHEHROUDI, B. : Recent Experimental Efforts on High-Pressure Supercritical Injection for Liquid Rockets and Their Implications. In: *International Journal of Aerospace Engineering* 2012 (2012), S. 1–31
- [29] CHEN, C. J. ; RODI, W. : Vertical turbulent buoyant jets: a review of experimental data. In: *Nasa STI/Recon Technical Report A* 80 (1980)
- [30] CHENG, Z. ; AGRANAT, V. M. ; TCHOUVELEV, A. V. ; HOUF ; ZHUBRIN, S. V.: Prd Hydrogen Release and Dispersion, a Comparison of Cfd Results Obtained From Using Ideal and Real Gas Law Properties. In: *International Conference on Hydrogen Safety, Pisa* (2005), S. 1–8
- [31] CHUNG, T. H. ; AJLAN, M. ; LEE, L. L. ; STARLING, K. E.: Generalized multiparameter correlation for nonpolar and polar fluid transport properties. In: *Industrial & Engineering Chemistry Research* 27 (1988), Nr. 4, S. 671–679
- [32] CINES, MR AND ROACH, JT AND HOGAN, RJ AND ROLAND, C. : Nitrogen-methane vapor-liquid equilibria. In: *Chemical Engineering Progress Symposium Series* 49 (1953), Nr. 6, S. 1–10
- [33] CISMONDI, M. ; MOLLERUP, J. : Development and application of a three-parameter RK-PR equation of state. In: *Fluid Phase Equilibria* 232 (2005), Nr. 1-2, S. 74–89
- [34] COLONNA, P. ; GUARDONE, A. : Molecular interpretation of nonclassical gas dynamics of dense vapors under the van der Waals model. In: *Physics of Fluids* 18 (2006), Nr. 5, S. 056101
- [35] COMMISSION, E. : *A Roadmap for moving to a competitive low carbon economy in 2050*. Publications Office of the European Union, 2011
- [36] COMMISSION, E. : *Energy roadmap 2050*. Publications Office of the European Union, 2012
- [37] COWARD, H. F. ; JONES, G. W.: Limits of flammability of gases and vapors / Bureau of Mines Washington DC. 1952. – Forschungsbericht
- [38] CRAMER, M. S. ; BEST, L. M.: Steady, isentropic flows of dense gases. In: *Physics of Fluids A* 3 (1991), Nr. 1, S. 219–226
- [39] CRANK, J. ; NICOLSON, P. ; HARTREE, D. R.: A practical method for numerical evaluation of solutions of partial differential equations of the heat-conduction type. In: *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society* 43 (1947), Nr. 01, S. 50
- [40] CRIST, S. ; GLASS, D. R. ; SHERMAN, P. M.: Study of the highly underexpanded sonic jet. In: *AIAA Journal* 4 (1966), Nr. 1, S. 68–71
- [41] CROWE, C. M. ; NISHIO, M. : Convergence promotion in the simulation of chemical processes - the general dominant eigenvalue method. In: *AIChE Journal* 21 (1975), Nr. 3, S. 528–533

- [42] CUMBER, P. S. ; FAIRWEATHER, M. ; FALLE, S. A. E. G. ; GIDDINGS, J. R.: Predictions of the Structure of Turbulent, Moderately Underexpanded Jets. In: *Journal of Fluids Engineering* 116 (1994), Nr. 4, S. 707
- [43] CUMBER, P. S. ; FAIRWEATHER, M. ; FALLE, S. A. E. G. ; GIDDINGS, J. R.: Predictions of the Structure of Turbulent, Highly Underexpanded Jets. In: *Journal of Fluids Engineering* 117 (1995), Nr. 4, S. 599
- [44] DAHMS, R. N. ; OEFELIN, J. C.: On the transition between two-phase and single-phase interface dynamics in multicomponent fluids at supercritical pressures. In: *Physics of Fluids* 25 (2013), Nr. 9
- [45] DEKKER, T. : Finding a zero by means of successive linear interpolation. In: *Constructive aspects of the fundamental theorem of algebra* (1969), S. 37–51
- [46] DESHMUKH, A. Y. ; VISHWANATHAN, G. ; BODE, M. ; PITSCHE, H. ; KHOSRAVI, M. ; BEBBER, D. van: Characterization of Hollow Cone Gas Jets in the Context of Direct Gas Injection in Internal Combustion Engines. In: *SAE Technical Papers*, 2018, S. 1–18
- [47] DING, H. ; WANG, C. ; ZHAO, Y. : Flow characteristics of hydrogen gas through a critical nozzle. In: *International Journal of Hydrogen Energy* 39 (2014), Nr. 8, S. 3947–3955
- [48] DONALDSON, C. D.: Note on the importance of imperfect-gas effects and variation of heat capacities on the isentropic flow of gases. In: *NACA RM L8J14* (1948)
- [49] ELLIOTT, J. R. ; LIRA, C. T.: *Introductory chemical engineering thermodynamics*. Bd. 184. Prentice Hall PTR Upper Saddle River, NJ, 1999
- [50] EWAN, B. C. R. ; MOODIE, K. : Structure and Velocity Measurements in Underexpanded Jets. In: *Combustion Science and Technology* 45 (1986), Nr. 5-6, S. 275–288
- [51] FAIRWEATHER, M. ; RANSON, K. : Prediction of underexpanded jets using compressibility-corrected, two-equation turbulence models. In: *Progress in Computational Fluid Dynamics, An International Journal* 6 (2006), Nr. 1/2/3, S. 122
- [52] FIROOZABADI, A. : *Thermodynamics and applications in hydrocarbon energy production*. McGraw-Hill Education New York, 2016
- [53] FIROOZABADI, A. ; PAN, H. : Two-Phase Isentropic Compressibility and Two-Phase Sonic Velocity for Multicomponent-Hydrocarbon Mixtures. In: *SPE Reservoir Evaluation & Engineering* 3 (2000), Nr. 04, S. 335–341
- [54] FRIEDRICH, K. O.: Symmetric hyperbolic linear differential equations. In: *Communications on pure and applied Mathematics* 7 (1954), Nr. 2, S. 345–392
- [55] FUSSELL, D. ; YANOSIK, J. : An Iterative Sequence for Phase-Equilibria Calculations Incorporating the Redlich-Kwong Equation of State. In: *Society of Petroleum Engineers Journal* 18 (1978), Nr. 03, S. 173–182

- [56] GEROLD, J. ; VOGL, P. ; PFITZNER, M. : New correlation of subsonic, supersonic and cryo gas jets validated by highly accurate schlieren measurements. In: *Experiments in Fluids* 54 (2013), Nr. 6, S. 1542
- [57] GODUNOV, S. K.: A difference method for numerical calculation of discontinuous solutions of the equations of hydrodynamics. In: *Matematicheskii Sbornik* 89 (1959), Nr. 3, S. 271–306
- [58] GOOS, E. ; BURCAT, A. ; RUSCIC, B. : New NASA thermodynamic polynomials database with active thermochemical tables updates. In: *Report ANL* 5 (2010), S. 20
- [59] GOOS, E. ; BURCAT, A. ; RUSCIC, B. : Extended third millennium thermodynamic database for combustion and air-pollution use with updates from active thermochemical tables. In: *Aerospace Engineering, Technion-IIT Haifa, Israel.* (2012)
- [60] GORLÉ, C. ; GAMBA, M. ; HAM, F. : Investigation of an underexpanded hydrogen jet in quiescent air using numerical simulations and experiments. In: *CTR Annual Research Briefs* (2010), S. 249–262
- [61] GOTTLIEB, J. ; GROTH, C. : Assessment of riemann solvers for unsteady one-dimensional inviscid flows of perfect gases. In: *Journal of Computational Physics* 78 (1988), Nr. 2, S. 437–458
- [62] GREENSHIELDS, C. J. ; WELLER, H. G. ; GASPARINI, L. ; REESE, J. M.: Implementation of semi-discrete, non-staggered central schemes in a colocated, polyhedral, finite volume framework, for high-speed viscous flows. In: *International journal for numerical methods in fluids* 63 (2010), Nr. 1, S. 1–21
- [63] GUARDONE, A. : Effects of molecular complexity and reservoir conditions on the discharge coefficient of adapted planar nozzles. In: *Journal of Physics: Conference Series* 633 (2015), Nr. 1, S. 8–13
- [64] GUARDONE, A. ; SPINELLI, A. ; DOSSENA, V. : Influence of Molecular Complexity on Nozzle Design for an Organic Vapor Wind Tunnel. In: *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power* 135 (2013), Nr. 4, S. 042307
- [65] GUGGENHEIM, E. A.: The principle of corresponding states. In: *The Journal of Chemical Physics* 13 (1945), Nr. 7, S. 253–261
- [66] H., L. C. ; CARLSON, D. J.: Normal shock location in underexpanded gas and gas-particle jets. In: *AIAA Journal* 2 (1964), Nr. 4, S. 776–777
- [67] HAMZEHLOO, A. ; ALEIFERIS, P. G.: Numerical modelling of transient under-expanded jets under different ambient thermodynamic conditions with adaptive mesh refinement. In: *International Journal of Heat and Fluid Flow* 61 (2016), S. 711–729
- [68] HAMZEHLOO, A. ; ALEIFERIS, P. : Large eddy simulation of highly turbulent under-expanded hydrogen and methane jets for gaseous-fuelled internal combustion engines. In: *International Journal of Hydrogen Energy* 39 (2014), Nr. 36, S. 21275–21296

- [69] HAMZEHLOO, A. ; ALEIFERIS, P. : Gas dynamics and flow characteristics of highly turbulent under-expanded hydrogen and methane jets under various nozzle pressure ratios and ambient pressures. In: *International Journal of Hydrogen Energy* 41 (2016), Nr. 15, S. 6544–6566
- [70] HAN, J.-S. ; LU, P.-H. ; XIE, X.-B. ; LAI, M.-C. ; HENEIN, N. : Investigation of Diesel Spray Primary Break-up and Development for Different Nozzle Geometries. In: *SAE Paper 2002-01-2775* (2002), Nr. 724
- [71] HARINCK, J. ; GUARDONE, A. ; COLONNA, P. : The influence of molecular complexity on expanding flows of ideal and dense gases. In: *Physics of Fluids* 21 (2009), Nr. 8
- [72] HILL, P. G. ; OUELLETTE, P. : Transient Turbulent Gaseous Fuel Jets for Diesel Engines. In: *Journal of Fluids Engineering* 121 (1999), Nr. 1, S. 93
- [73] IANNUZZI, S. E. ; BARRO, C. ; BOULOUCHOS, K. ; BURGER, J. : Combustion behavior and soot formation/oxidation of oxygenated fuels in a cylindrical constant volume chamber. In: *Fuel* 167 (2016), S. 49–59
- [74] ISSA, R. I.: Solution of the implicitly discretised fluid flow equations by operator-splitting. In: *Journal of Computational Physics* 62 (1986), Nr. 1, S. 40–65
- [75] JARCZYK, M. M.: *Numerische Modellierung von turbulenten Strömungen realer Gasgemische*, Universitätsbibliothek der Universität der Bundeswehr München, Diss., 2013
- [76] JARCZYK, M.-M. ; PFITZNER, M. : Large Eddy Simulation of Supercritical Nitrogen Jets. In: *50th AIAA Aerospace Sciences Meeting including the New Horizons Forum and Aerospace Exposition*. Reston, Virginia : American Institute of Aeronautics and Astronautics, 2012, S. 1–13
- [77] JOHNSON, R. C.: Calculations of the Flow of Natural Gas Through Critical Flow Nozzles. In: *Journal of Basic Engineering* 92 (1970), Nr. 3, S. 580
- [78] JOHNSON, R. C.: Calculations of Real-Gas Effects in Flow Through Critical-Flow Nozzles. In: *Journal of Basic Engineering* 86 (1964), Nr. 3, S. 519
- [79] JOHNSON, R. C.: Real-gas effects in critical flow through nozzles and thermodynamic properties of nitrogen and helium at pressures to 300x105 newtons per square meter (approx. 300 atm). In: *NASA Special Publication* 3046 (1968)
- [80] JOHNSON, R. C.: Real-gas effects in critical-flow-through nozzles and tabulated thermodynamic properties. In: *National Aeronautics and Space Administration* 2565 (1965)
- [81] JOHNSON, R. C.: Tables of critical-flow functions and thermodynamic properties for methane and computational procedures for both methane and natural gas. In: *NASA Special Publications* 3074 (1972)
- [82] JOHNSTON, I. A.: The Noble-Abel equation of state: Thermodynamic derivations for ballistics modelling. In: *Defence Science and Technology Organisation Edinburgh (Australia) Weapons Systems Div* (2005)

- [83] JONES, W. P. ; LAUNDER, B. E.: The prediction of laminarization with a two-equation model of turbulence. In: *International Journal of Heat and Mass Transfer* 15 (1972), Nr. 2, S. 301–314
- [84] KAMM, J. R.: An exact, compressible one-dimensional Riemann solver for general, convex equations of state / Los Alamos National Lab.(LANL), Los Alamos, NM (United States). 2015. – Forschungsbericht
- [85] KEE, R. J. ; COLTRIN, M. E. ; GLARBORG, P. : *Chemically reacting flow: theory and practice*. John Wiley & Sons, 2005
- [86] KESKINEN, K. ; KAARIO, O. ; NUUTINEN, M. ; VUORINEN, V. ; KÜNSCH, Z. ; LIAVÅG, L. O. ; LARMI, M. : Mixture formation in a direct injection gas engine: Numerical study on nozzle type, injection pressure and injection timing effects. In: *Energy* 94 (2016), S. 542–556
- [87] KHAKSARFARD, R. ; KAMESHKI, M. R. ; PARASCHIVOIU, M. : Numerical simulation of high pressure release and dispersion of hydrogen into air with real gas model. In: *Shock Waves* 20 (2010), Nr. 3, S. 205–216
- [88] KIM, H. D. ; KANG, M. S. ; OTOBE, Y. ; SETOGUCHI, T. : The effect of nonequilibrium condensation on hysteresis phenomenon of under-expanded jets. In: *Journal of Mechanical Science and Technology* 23 (2009), Nr. 3, S. 856–867
- [89] KLEIN, S. A. ; ALVARADO, F. : *EES: Engineering equation solver for the Microsoft Windows operating system*. F-Chart software, 1992
- [90] KLEINSTEN, G.: Mixing in turbulent axially symmetric free jets. In: *Journal of Spacecraft and Rockets* 1 (1964), Nr. 4, S. 403–408
- [91] KLUWICK, A. u. a.: Unsteady transonic nozzle flow of dense gases. In: *Journal of Fluid Mechanics* 310 (1996), S. 113–137
- [92] KRAPOSHIN, M. ; BOVTRIKOVA, A. ; STRIJHAK, S. : Adaptation of Kurganov-Tadmor Numerical Scheme for Applying in Combination with the PISO Method in Numerical Simulation of Flows in a Wide Range of Mach Numbers. In: *Procedia Computer Science* 66 (2015), S. 43–52
- [93] KRAPOSHIN, M. V. ; BANHOLZER, M. ; PFITZNER, M. ; MARCHEVSKY, I. K.: A hybrid pressure-based solver for nonideal single-phase fluid flows at all speeds. In: *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 88 (2018), Nr. 2, S. 79–99
- [94] KROTHAPALLI, A. ; BUZYNA, G. ; LOURENCO, L. : Streamwise vortices in an under-expanded axisymmetric jet. In: *Physics of Fluids A* 3 (1991), Nr. 8, S. 1848–1851
- [95] KURGANOV, A. ; NOELLE, S. ; PETROVA, G. : Semidiscrete central-upwind schemes for hyperbolic conservation laws and Hamilton–Jacobi equations. In: *SIAM Journal on Scientific Computing* 23 (2001), Nr. 3, S. 707–740
- [96] KURGANOV, A. ; TADMOR, E. : New high-resolution central schemes for nonlinear conservation laws and convection–diffusion equations. In: *Journal of Computational Physics* 160 (2000), Nr. 1, S. 241–282

- [97] KURGANOV, A. ; TADMOR, E. : Solution of two-dimensional Riemann problems for gas dynamics without Riemann problem solvers. In: *Numerical Methods for Partial Differential Equations* 18 (2002), Nr. 5, S. 584–608
- [98] LAMBRAKIS, K. C. ; THOMPSON, P. A.: Existence of real fluids with a negative fundamental derivative  $\Gamma$ . In: *Physics of Fluids* 15 (1972), Nr. 5, S. 933–935
- [99] LANEY, C. B.: *Computational gasdynamics*. Cambridge university press, 1998
- [100] LAX, P. D.: Weak solutions of nonlinear hyperbolic equations and their numerical computation. In: *Communications on pure and applied mathematics* 7 (1954), Nr. 1, S. 159–193
- [101] LEER, B. van: Towards the ultimate conservative difference scheme. II. Monotonicity and conservation combined in a second-order scheme. In: *Journal of Computational Physics* 14 (1974), Nr. 4, S. 361–370
- [102] LEUNG, J. C. ; EPSTEIN, M. : A generalized critical flow model for nonideal gases. In: *AIChe Journal* 34 (1988), Nr. 9, S. 1568–1572
- [103] LIOU, M.-S. : A generalized procedure for constructing an upwind-based TVD scheme. In: *25th AIAA Aerospace Sciences Meeting*. Reston, Virigina : American Institute of Aeronautics and Astronautics, 1987
- [104] LOVE, E. S. ; GRIGSBY, C. E. ; LEE, L. P. ; WOODLING, M. J.: Experimental and theoretical studies of axisymmetric free jets / Langley Research Center. 1959. – Forschungsbericht
- [105] MANN, D. B.: *The thermodynamic properties of helium from 3 to 300 [degrees] K between 0.5 and 100 atmospheres*. U.S. National Bureau of Standards, 1962
- [106] MATHEIS, J. : *Numerical Simulation of Fuel Injection and Turbulent Mixing Under High-Pressure Conditions*, Technische Universität München, Diss., 2018
- [107] MATHEIS, J. ; HICKEL, S. : Multi-component vapor-liquid equilibrium model for LES of high-pressure fuel injection and application to ECN Spray A. In: *International Journal of Multiphase Flow* 99 (2018), S. 294–311
- [108] MAYTAL, B.-Z. : Real gas choked flow conditions at low reduced-temperatures. In: *Cryogenics* 46 (2006), Nr. 1, S. 21–29
- [109] MENTER, F. ; ESCH, T. : Elements of industrial heat transfer predictions. In: *16th Brazilian Congress of Mechanical Engineering (COBEM)* Bd. 109, 2001, S. 650
- [110] MICHELSSEN, M. L.: The isothermal flash problem. Part I. Stability. In: *Fluid Phase Equilibria* 9 (1982), Nr. 1, S. 1–19
- [111] MICHELSSEN, M. L. ; MOLLERUP, J. : *Thermodynamic Modelling: Fundamentals and Computational Aspects*. Tie-Line Publications, 2004
- [112] MICHELSSEN, M. L. ; MOLLERUP, J. : *Thermodynamic Modelling: Fundamentals and Computational Aspects*. Tie-Line Publications, 2007

- [113] MODELL, M. ; REID, R. C.: *Thermodynamics and its Applications*. Prentice Hall, 1983
- [114] MOHAMED, K. : Simulation of Hydrogen Release from a High-Pressure Chamber Considering Real Gas Effects. In: *Concordia University* (2004), Nr. April, S. 3–5
- [115] MOLKOV, V. : Hydrogen Safety Engineering. In: *Comprehensive Renewable Energy* Bd. 4. Elsevier, 2012, S. 97–129
- [116] MOUKALLED, F. ; MANGANI, L. ; DARWISH, M. u. a.: *The finite volume method in computational fluid dynamics*. Springer, 2016
- [117] MÜLLER, H. : *Simulation turbulenter nicht-vorgemischter Verbrennung bei überkritischen Drücken*, Universität der Bundeswehr München, Diss., 2016
- [118] NAGAO, J. ; MATSUO, S. ; MOHAMMAD, M. ; SETOGUCHI, T. ; KIM, H. D.: Numerical Study on Characteristics of Real Gas Flow Through a Critical Nozzle. In: *Int. J. Turbo Jet-Engines* 29 (2012), Nr. 1, S. 21–27
- [119] NAGAO, J. ; MATSUO, S. ; SUETSUGU, S. ; SETOGUCHI, T. ; KIM, H. D.: Characteristics of high Reynolds number flow in a critical nozzle. In: *International Journal of Hydrogen Energy* 38 (2013), Nr. 21, S. 9043–9051
- [120] NICHITA, D. V. ; KHALID, P. ; BROSETA, D. : Calculation of isentropic compressibility and sound velocity in two-phase fluids. In: *Fluid Phase Equilibria* 291 (2010), Nr. 1, S. 95–102
- [121] NIETZSCHKE, P. ; SCHENK, J. ; SCHLEY, P. ; ALTFELD, K. : Gasbeschaffenheiten in Deutschland. 6/2012. – Forschungsbericht
- [122] OEFELIN, J. C. ; YANG, V. : Modeling High-Pressure Mixing and Combustion Processes in Liquid Rocket Engines. In: *Journal of Propulsion and Power* 14 (1998), Nr. 5, S. 843–857
- [123] ORESCANIN, M. M. ; AUSTIN, J. : Exhaust of underexpanded jets from finite reservoirs. In: *Journal of Propulsion and Power* 26 (2010), Nr. 4, S. 744–753
- [124] OSCHWALD, M. ; SCHIK, A. ; KLAR, M. ; MAYER, W. : Investigation of Coaxial LN<sub>2</sub>/GH<sub>2</sub>-Injection at Supercritical Pressure by Spontaneous Raman Scattering. In: *AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference & Exhibit* 35 (1999), Nr. June 1999, S. 6
- [125] OTOBE, Y. ; KASHIMURA, H. ; MATSUO, S. ; SETOGUCHI, T. ; KIM, H.-D. : Influence of nozzle geometry on the near-field structure of a highly underexpanded sonic jet. In: *Journal of Fluids and Structures* 24 (2008), Nr. 2, S. 281–293
- [126] PATANKAR, S. ; SPALDING, D. : A calculation procedure for heat, mass and momentum transfer in three-dimensional parabolic flows. In: *International Journal of Heat and Mass Transfer* 15 (1972), Nr. 10, S. 1787–1806
- [127] PAYRI, R. ; GARCÍA, J. M. ; SALVADOR, F. J. ; GIMENO, J. : Using spray momentum flux measurements to understand the influence of diesel nozzle geometry on spray characteristics. In: *Fuel* 84 (2005), Nr. 5, S. 551–561

- [128] PAYRI, R. ; SALVADOR, F. J. ; GIMENO, J. ; ZAPATA, L. D.: Diesel nozzle geometry influence on spray liquid-phase fuel penetration in evaporative conditions. In: *Fuel* 87 (2008), Nr. 7, S. 1165–1176
- [129] PENG, D.-Y. ; ROBINSON, D. B.: A New Two-Constant Equation of State. In: *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals* 15 (1976), Nr. 1, S. 59–64
- [130] PICARD, D. ; BISHNOI, P. : Calculation of the thermodynamic sound velocity in two-phase multicomponent fluids. In: *International Journal of Multiphase Flow* 13 (1987), Nr. 3, S. 295–308
- [131] PITZER, K. S. ; LIPPmann, D. Z. ; CURL, R. F. ; HUGGINS, C. M. ; PETERSEN, D. E.: The Volumetric and Thermodynamic Properties of Fluids. II. Compressibility Factor, Vapor Pressure and Entropy of Vaporization. In: *Journal of the American Chemical Society* 77 (1955), Nr. 13, S. 3433–3440
- [132] POLING, B. E. ; PRAUSNITZ, J. M. ; O'CONNELL, J. P. u. a.: *The properties of gases and liquids*. Bd. 5. McGraw-hill New York, 2001
- [133] PRESS, W. H. ; TEUKOLSKY, S. A. ; VETTERLING, W. T. ; FLANNERY, B. P.: *Numerical recipes 3rd edition: The art of scientific computing*. Cambridge university press, 2007
- [134] QIU, L. ; REITZ, R. D.: An investigation of thermodynamic states during high-pressure fuel injection using equilibrium thermodynamics. In: *International Journal of Multiphase Flow* 72 (2015), S. 24–38
- [135] RACHFORD, H. ; RICE, J. : Procedure for Use of Electronic Digital Computers in Calculating Flash Vaporization Hydrocarbon Equilibrium. In: *Journal of Petroleum Technology* 4 (1952), Nr. 10, S. 19–3
- [136] REDLICH, O. ; KWONG, J. N. S.: On the Thermodynamics of Solutions. V. An Equation of State. Fugacities of Gaseous Solutions. In: *Chemical Reviews* 44 (1949), Nr. 1, S. 233–244
- [137] REID, R. C. ; PRAUSNITZ, J. M. ; POLING, B. E.: *The properties of gases and liquids*. McGraw Hill Book Co., New York, NY, 1987
- [138] RICHARDS, C. D. ; PITTS, W. M.: Global density effects on the self-preservation behaviour of turbulent free jets. In: *Journal of Fluid Mechanics* 254 (1993), Nr. -1, S. 417
- [139] RICOU, F. P. ; SPALDING, D. B.: Measurements of entrainment by axisymmetrical turbulent jets. In: *International Journal of Fluid Mechanics* 11 (1961), S. 21–32
- [140] ROE, P. L.: Approximate Riemann solvers, parameter vectors, and difference schemes. In: *Journal of computational physics* 43 (1981), Nr. 2, S. 357–372
- [141] ROY, A. ; JOLY, C. ; SEGAL, C. : Disintegrating supercritical jets in a subcritical environment. In: *Journal of Fluid Mechanics* 717 (2013), S. 193–202
- [142] RUGGLES, A. ; EKOTO, I. : Ignitability and mixing of underexpanded hydrogen jets. In: *International Journal of Hydrogen Energy* 37 (2012), Nr. 22, S. 17549–17560

- [143] SANDLER, S. I.: *Models for thermodynamic and phase equilibria calculations*. 1994
- [144] SARKAR, S. ; LAKSHMANAN, B. : Application of a Reynolds stress turbulence model to the compressible shear layer. In: *AIAA Journal* 29 (1991), Nr. 5, S. 743–749
- [145] SCHLICHTING, H. ; GERSTEN, K. : *Grenzschicht-theorie*. Springer-Verlag, 2006
- [146] SCHMITT, T. ; CUENOT, B. : Large Eddy Simulation of transcritical flows. In: *21st ICDERS* (2007), S. 21–24
- [147] SCHNERR, G. H. ; MOLOKOV, S. : Exact solutions for transonic flows of dense gases in two-dimensional and axisymmetric nozzles. In: *Physics of Fluids* 6 (1994), Nr. 10, S. 3465–3472
- [148] SEINER, J. M. ; PONTON, M. K. ; JANSEN, B. J. ; LAGEN, N. T.: The effects of temperature on supersonic jet noise emission. In: *14th DGLR/AIAA aeroacoustics conference* Bd. 1, 1992, S. 295–307
- [149] SMITH, A. K.: A. K. Smith. In: *Technology* (1971), Nr. 1940, S. 222–228
- [150] SO, R. M. C. ; ÖTÜGEN, M. V. ; HWANG, B. C.: Diffuser stall and rotating zones of separated boundary layer. In: *Experiments in Fluids* 6 (1988), Nr. 8, S. 521–533
- [151] SOAVE, G. : Equilibrium constants from a modified Redlich-Kwong equation of state. In: *Chemical Engineering Science* 27 (1972), Nr. 6, S. 1197–1203
- [152] SOM, S. ; RAMIREZ, A. I. ; LONGMAN, D. E. ; AGGARWAL, S. K.: Effect of nozzle orifice geometry on spray, combustion, and emission characteristics under diesel engine conditions. In: *Fuel* 90 (2011), Nr. 3, S. 1267–1276
- [153] STEPHAN, K. ; MAYINGER, F. : *Thermodynamik: Band 1: Einstoffsysteme. Grundlagen und technische Anwendungen*. Springer-Verlag, 2013
- [154] STEPHAN, K. ; MAYINGER, F. : *Thermodynamik: Band 2: Mehrstoffsysteme und chemische Reaktionen. Grundlagen und technische Anwendungen*. Springer-Verlag, 2013
- [155] STROBRIDGE, T. R.: The Thermodynamic Properties of Nitrogen from 64 to 300 K between 0.1 and 200 Atmospheres. In: *US Department of Commerce, National Bureau of Standards* (1962)
- [156] STRYJEK, R. ; CHAPPELEAR, P. S. ; KOBAYASHI, R. : Low-temperature vapor-liquid equilibriums of nitrogen-methane system. In: *Journal of Chemical & Engineering Data* 19 (1974), Nr. 4, S. 334–339
- [157] THOMPSON, P. A.: A Fundamental Derivative in Gasdynamics. In: *Physics of Fluids* 14 (1971), Nr. 9, S. 1843
- [158] THRING, M. ; NEWBY, M. : Combustion length of enclosed turbulent jet flames. 4 (1953), Nr. 1, S. 789–796
- [159] TORO, E. F.: *Riemann solvers and numerical methods for fluid dynamics: a practical introduction*. Springer Science & Business Media, 2013

- [160] TRAXINGER, C. ; BANHOLZER, M. ; PFITZNER, M. : Real-Gas Effects and Phase Separation in Underexpanded Jets at Engine-Relevant Conditions. In: *2018 AIAA Aerospace Sciences Meeting* (2018), S. 1815
- [161] TRAXINGER, C. ; MÜLLER, H. ; PFITZNER, M. ; BAAB, S. ; LAMANNA, G. ; WEIGAND, B. ; MATHEIS, J. ; STEMMER, C. ; ADAMS, N. A. ; HICKEL, S. : Experimental and numerical investigation of phase separation due to multi-component mixing at high-pressure conditions. In: *arXiv preprint arXiv:1706.03923* (2017)
- [162] TSIEN, H.-S. : One-Dimensional Flows of a Gas Characterized by Vander Waal's Equation of State. In: *Journal of Mathematics and Physics* 25 (1946), Nr. 1-4, S. 301–324
- [163] TUKOVIC, Z. : *Finite volume method on domains of varying shape*, University of Zagreb, Diss., 2005
- [164] TURNER, J. S.: The ‘starting plume’ in neutral surroundings. In: *Journal of Fluid Mechanics* 13 (1962), Nr. 03, S. 356
- [165] VAN ALBADA, G. ; VAN LEER, B. ; ROBERTS, W. : A comparative study of computational methods in cosmic gas dynamics. In: *Upwind and High-Resolution Schemes*. Springer, 1997, S. 95–103
- [166] VAN DER WAALS, J. D. ; ROWLINSON, J. S.: *On the continuity of the gaseous and liquid states*. Courier Corporation, 2004
- [167] VAN LEER, B. : MUSCL, a new approach to numerical gas dynamics. In: *Computing in Plasma Physics and Astrophysics*, 1976
- [168] VELIKORODNY, A. ; KUDRIAKOV, S. : Numerical study of the near-field of highly underexpanded turbulent gas jets. In: *International Journal of Hydrogen Energy* 37 (2012), Nr. 22, S. 17390–17399
- [169] VENNIX, A. J. ; KOBAYASHI, R. : An equation of state for methane in the gas and liquid phases. In: *AIChe Journal* 15 (1969), Nr. 6, S. 926–931
- [170] VUORINEN, V. ; WEHRFRITZ, A. ; DUWIG, C. ; BOERSMA, B. J.: Large-eddy simulation on the effect of injection pressure and density on fuel jet mixing in gas engines. In: *Fuel* 130 (2014), S. 241–250
- [171] VUORINEN, V. ; YU, J. ; TIRUNAGARI, S. ; KAARIO, O. ; LARMI, M. ; DUWIG, C. ; BOERSMA, B. J.: Large-eddy simulation of highly underexpanded transient gas jets. In: *Physics of Fluids* 25 (2013), Nr. 1
- [172] WEISS, J. M. ; SMITH, W. A.: Preconditioning applied to variable and constant density flows. In: *AIAA journal* 33 (1995), Nr. 11, S. 2050–2057
- [173] WILCOX, D. : Reassessment of the scale-determining equation for advanced turbulence models. In: *AIAA Journal* 26 (1988), Nr. 11, S. 1299–1310
- [174] WILCOX, D. A.: Simulation of Transition with a Two-Equation Turbulence Model. In: *AIAA Journal* 32 (1994), Nr. 2, S. 247–255

- [175] WILSON, G. M.: A modified Redlich-Kwong equation of state, application to general physical data calculations. In: *65th National AIChE Meeting, Cleveland, OH* (1969), S. 15
- [176] WOOD, A. B.: A Textbook of Sound. In: *Nature* 177 (1956), Nr. 4514, S. 814–814
- [177] WRIGHT, Y. M. ; BORGHESI, G. ; MASTORAKOS, E. ; BOULOUCHOS, K. : Predicting the stochastic behaviour of autoignition in Diesel-like environments with LES-CMC. In: *Int. Conf. LES Intern. Combust. Engine Flows*, 2012
- [178] WRIGHT, Y. M. ; MARGARI, O.-N. ; BOULOUCHOS, K. ; DE PAOLA, G. ; MASTORAKOS, E. : Experiments and Simulations of n-Heptane Spray Auto-Ignition in a Closed Combustion Chamber at Diesel Engine Conditions. In: *Flow, Turbulence and Combustion* 84 (2010), Nr. 1, S. 49–78
- [179] WU, P.-K. ; CHEN, T. H. ; NEJAD, A. S. ; CARTER, C. D.: Injection of supercritical ethylene in nitrogen. In: *Journal of Propulsion and Power* 12 (1996), Nr. 4, S. 770–777
- [180] WU, P.-K. ; SHAHNAM, M. ; KIRKENDALL, K. A. ; CARTER, C. D. ; NEJAD, A. S.: Expansion and Mixing Processes of Underexpanded Supercritical Fuel Jets Injected into Superheated Conditions. In: *Journal of Propulsion and Power* 15 (1999), Nr. 5, S. 642–649
- [181] XU, B. P. ; ZHANG, J. P. ; WEN, J. X. ; DEMBELE, S. ; KARWATZKI, J. : Numerical study of a highly under-expanded hydrogen jet. In: *International Conference on Hydrogen Safety* (2005), Nr. 44
- [182] ZEMAN, O. : Dilatation dissipation: The concept and application in modeling compressible mixing layers. In: *Physics of Fluids A: Fluid Dynamics* 2 (1990), Nr. 2, S. 178–188