

# MODELLIERUNG DER WASSERSTOFF-LOX-VERBRENNUNG MIT REAL-GASEFFEKTEN IN RAKETENBRENNKAMMERN

I. Zimmermann, M. Pfitzner  
 Universität der Bundeswehr, München  
 Fakultät für Luft- und Raumfahrttechnik  
 Institut für Thermodynamik  
 Werner-Heisenberg-Weg 39, 85577 Neubiberg

## ÜBERSICHT

Um den spezifischen Impuls zu erhöhen, werden moderne Raketenbrennkammern mit kryogenen Treibstoffen bei hohen Kammerdrücken betrieben. In der Regel wird kryogener Wasserstoff als Brennstoff und flüssiger Sauerstoff als Oxidator nicht vorgemischt in die Raketenbrennkammer eingespritzt und verbrannt. Dabei ist die Temperatur des Sauerstoffs unterkritisch, der Druck jedoch überkritisch.

Diese extremen Bedingungen können bisher mit kommerziellen CFD Codes nicht vollständig korrekt abgebildet werden, da die im Tieftemperaturbereich auftretenden Realgaseffekte bei der Mischung von Wasserstoff und Sauerstoff in den verfügbaren Codes thermodynamisch nicht korrekt berechnet werden.

Im Folgenden sollen daher die Materialeigenschaften von Wasserstoff und Sauerstoff bei geringen Temperaturen untersucht werden, wobei speziell auf die Realgaseigenschaften und deren Implementierung in kommerzielle CFD-Codes eingegangen wird. Des Weiteren wird ein Verbrennungsmodell für Diffusionsflammen und partiell vorgemischte Verbrennung vorgestellt, das am Institut für Thermodynamik der Universität der Bundeswehr München speziell für die Verbrennung für Wasserstoff entwickelt wurde. Da für die Verbrennung in Raketenbrennkammern keine umfangreichen Datensätze vorhanden sind, wird dieses Modell zunächst anhand einer gut dokumentierten Wasserstoff-Diffusionsflamme des TNF-Workshops [1-4] validiert.

## 1. EINLEITUNG

Die Brennkammern moderner großer Raketenantriebe werden mit dem Brennstoff-Oxidatorgemisch gasförmiger Wasserstoff ( $\text{GH}_2$ ) – flüssiger Sauerstoff ( $\text{LOx}$ ) bei Drücken über 200 bar betrieben. Experimentell ist bekannt, dass sich bei Drücken oberhalb des kritischen Drucks von Sauerstoff bereits keine Grenzflächen mehr ausbilden, obwohl innerhalb der Mischung der kritische Druck weit höher als der kritische Druck der Einzelkomponenten ist. Allerdings bilden sich Regionen mit sehr hohen Dichtegradienten, und insbesondere in der Nähe der Injektoren treten sehr komplexe Strömungssphänomene auf. Neben den Problemen der Modellierung der turbulenten Mischung in Wechselwirkung mit den chemischen Reaktionen sind hier noch die Realgaseigenschaften der Einzelkomponenten und des Gemisches zu berücksichtigen.

Oberhalb des kritischen Drucks findet keine Unterscheidung mehr zwischen flüssiger und gasförmiger

Phase statt [5], die Verdampfungsenthalpie wird zu Null und es existiert keine Oberflächenspannung mehr [6]. Nahe des kritischen Punkts variieren die Zustandsgrößen (spezifische Wärmekapazität, Dichte) und Transportgrößen (Viskosität, Wärmeleitfähigkeit) stark bei kleinen Zustandsänderungen. Dies führt in der Mischung zweier überkritischer Fluide zu hohen Gradienzen in der Dichte und anderen thermodynamischen Größen [7]. Turbulente Strukturen in der Scherschicht können sowohl bei der unterkritischen als auch bei der überkritischen Einspritzung von Sauerstoff beobachtet werden. Bei der unterkritischen Einspritzung beobachtet man Ligamente und Tröpfchenbildung an den Rändern des LOx-Jets, die bei der überkritischen Einspritzung durch längliche Filamente und größere Ballen hoher Dichte ersetzt werden [8]. Obwohl im Bereich zwischen dem kritischen Druck des Sauerstoffs und dem (höheren) maximalen kritischen Druck des Gemisches Grenzflächenspannungen auftreten können, scheinen diese nicht zur Bildung von Tropfen auszureichen.

Die Verbrennung in einer Raketenbrennkammer bei Verwendung konventioneller Einspritzelemente erfolgt als Diffusionsflamme oder als partiell vorgemischte Flamme. Ein Verbrennungsmodell, welches diese beiden Flammenregime darstellen kann, benötigt mindestens zwei Parameter, welche den Ablauf der Verbrennung kontrollieren: einen Mischungsbruch zur Beschreibung der Mischung von Brennstoff und Oxidator und eine Reaktionsfortschrittsvariable zur Beschreibung von Zündprozessen. Im Folgenden wird ein Verbrennungsmodell beschrieben, welches diese beiden Prozesse mittels Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen in turbulenter Strömung beschreiben kann. Da keine ausreichenden Datensätze zur Validierung dieses Modells für Raketenbrennkammern zur Verfügung stehen, wird das Modell anhand einer Wasserstoff-Diffusionsflamme des TNF-Workshops [1-4] überprüft.

Das Paper ist folgendermaßen gegliedert: die Realgaseigenschaften von Wasserstoff und Sauerstoff und deren Implementierung in kommerzielle CFD-Codes werden in Kapitel 2 beschrieben. Das Verbrennungsmodell wird in Kapitel 3, die Randbedingungen der Diffusionsflamme in Kapitel 4 erläutert. Die Ergebnisse dieses Modells werden in Kapitel 5 mit einem Eddy Dissipation Modell [9] verglichen, Kapitel 6 enthält die Zusammenfassung und einen Ausblick auf weitere Arbeiten.

## 2. REALGASEIGENSCHAFTEN VON H<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>

Die Phase, in der ein reiner Stoff bei gegebenen Bedingungen vorliegt, kann anhand eines Phasendiagramms festgestellt werden. Bild 1 zeigt das Phasendiagramm für Wasserstoff (blau) und Sauerstoff (grün). Die Daten des Diagramms für Wasserstoff und Sauerstoff sind dem Buch „Encyclopédia des gaz“ [10] entnommen, welches die experimentellen Daten verschiedener Substanzen zusammengestellt.

Die Schmelzkurve stellt den Phasenübergang eines Fluids von fest nach flüssig (bzw. überkritisch) dar, die Sublimationskurve von fest nach gasförmig, und die Dampfdruckkurve von flüssig nach gasförmig. Am Tripelpunkt liegen die drei Phasen (fest, flüssig und gasförmig) gleichzeitig vor. Der kritische Punkt, der sich am Ende der Dampfdruckkurve befindet, wird durch die kritische Temperatur T<sub>c</sub>, den kritischen Druck p<sub>c</sub>, sowie die kritische Dichte ρ<sub>c</sub> definiert. Oberhalb des kritischen Punkts findet keine Phasentrennung in flüssige und gasförmige Anteile mehr statt. Bei einem Druck oder einer Temperatur oberhalb der kritischen Werte befindet sich ein Stoff demnach in der überkritischen Phase.

Der kritische Punkt von Wasserstoff liegt bei T<sub>c</sub> = 33,25 K, p<sub>c</sub> = 12,97 bar und ρ<sub>c</sub> = 31,014 kg/m<sup>3</sup>. Der kritische Punkt von Sauerstoff liegt bei T<sub>c</sub> = 154,58 K, p<sub>c</sub> = 50,43 bar und ρ<sub>c</sub> = 436,129 kg/m<sup>3</sup> [6].

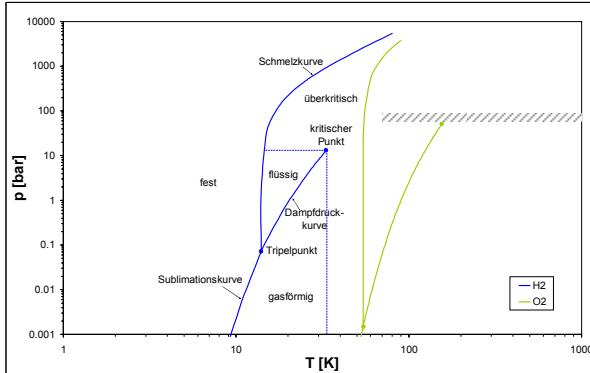


BILD 1: Phasendiagramm von Wasserstoff und Sauerstoff

Bild 2 und 3 vergleicht die Datensätze des „National Institute of Standards and Technology (NIST)“ [11] für reinen Sauerstoff mit denen, welche aus einer Zustandsgleichung für ideale Gase pV = RT und der Redlich-Kwong Zustandsgleichung [12] gewonnen wurden, welche in zahlreichen CFD-Codes verwendet wird:

$$(1) \quad p = \frac{RT}{v - b} - \frac{a}{v(v + b)\sqrt{T}}$$

p ist hierbei der Druck, T die Temperatur, v das spezifische Volumen, R die spezifische Gaskonstante und a und b sind Konstanten, welche abhängig vom verwendeten Medium sind.

Die Datensätze des NIST basieren hauptsächlich auf einer modifizierten Benedict-Webb-Rubin (BWR) Zustandsgleichung. Dabei liegen die Fehler für Sauerstoff bei 0,1 % für die Dichte, 2 % für die Wärmekapazität und 1 % in der Schallgeschwindigkeit. Für Wasserstoff

ist der Fehler für die Dichte 0,2 %, für die Wärmekapazität 3 % und für die Schallgeschwindigkeit 1 %

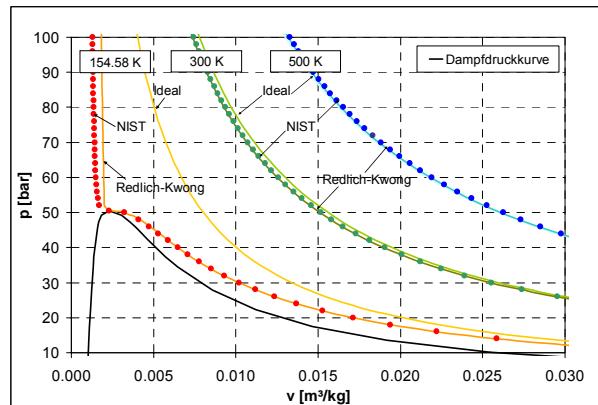


BILD 2: pv-Diagramm von Sauerstoff

Im pv-Diagramm von Sauerstoff (Bild 2) stellen die Punkte die Daten aus der NIST-Tabelle dar, die dunklen Kurven repräsentieren die Redlich-Kwong und die helleren Kurven die Idealgas-Zustandsgleichung. Auf Isothermen mit T > 500 K ist der Unterschied zwischen Idealgas und Redlich-Kwong vernachlässigbar. Auch bei T = 300 K sind nur geringfügige Unterschiede festzustellen. Bei der kritischen Temperatur von 154,58 K jedoch weicht die Idealgasgleichung stark von den NIST Datensätzen und der Redlich-Kwong Gleichung ab. Die Redlich-Kwong Gleichung gibt zwar das Verhalten im Vergleich zur Idealgasgleichung qualitativ korrekt wieder, doch werden die Ergebnisse vor allem für v < v<sub>c</sub> nicht korrekt vorhergesagt.

Für Wasserstoff (Bild 3) ergibt die Realgasgleichung von Redlich-Kwong (gestrichelte Linie) gute Übereinstimmung mit den NIST Daten (durchgezogene Linie), wobei die Idealgasgleichung (gepunktete Linie) wieder große Abweichungen vor allem nahe des kritischen Punkts vorhersagt. In diesem Fall zeigen die Isothermen bei 100 K kaum Abweichungen. Die Realgaseffekte gewinnen für geringere Temperaturen an Bedeutung, was auf die geringere kritische Temperatur von Wasserstoff im Vergleich zu Sauerstoff zurückzuführen ist.

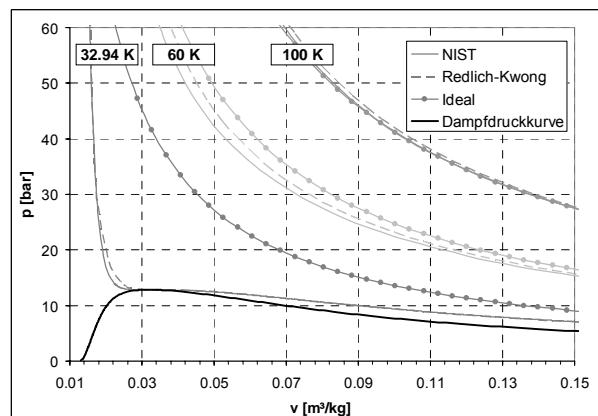


BILD 3: pv-Diagramm von Wasserstoff

Wasserstoff existiert in zwei verschiedenen Modifikationen, welche sich durch die relative Ausrichtung der Kernspins unterscheiden: der ortho- und der para-Wasserstoff. Da diese beiden Modifikationen erhebliche Unterschiede in der spezifischen Wärmekapazität aufweisen, muss vor allem bei geringen Temperaturen darauf geachtet werden, dass der temperaturabhängige Verlauf der spezifischen Wärmekapazität bei konstantem Druck im Idealgasbereich  $c_p^0(T)$  korrekt wiedergegeben wird. Der  $c_p^0(T)$  Verlauf von ortho, para und normalem (= 25 % para + 75 % ortho) Wasserstoff ist in Bild 4 für einen Temperaturbereich zwischen 0 K und 1000 K dargestellt. Es werden zusätzlich die JANAF-Tabellen [13] mit den NIST Daten [11] und experimentellen Ergebnissen aus [14] mit Polynomen aus [6] und Chemkin [15] verglichen. Die Chemkin-Polynome sind nur für die Bereiche zwischen 300 K -1000 K und 1000 K – 5000 K definiert. Poling [14] gibt für sein Polynom einen Gültigkeitsbereich zwischen 50 K und 1000 K an, wobei unterhalb 300 K deutliche Abweichungen vom normal Wasserstoff festzustellen sind.

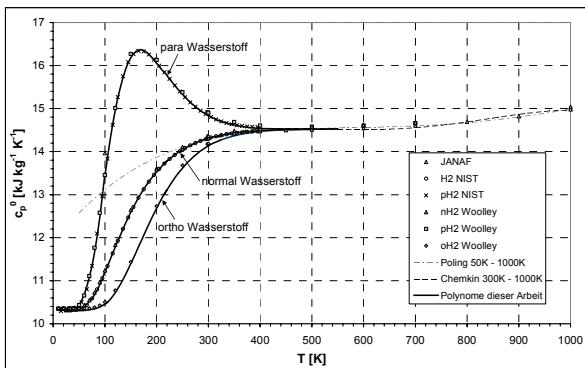


BILD 4: Vergleich der spezifischen Wärmekapazität von para (obere Kurve), ortho (untere Kurve) und normal (mittlere Kurve) Wasserstoff

Da die in der Literatur verwendeten Polynome nicht ausreichend sind, um das Niedertemperaturverhalten von Wasserstoff abzubilden, wurden in dieser Arbeit  $c_p^0(T)$ -Polynome für para- und ortho-Wasserstoff erzeugt. Diese wurden aufgrund der komplexen Form der  $c_p^0(T)$ -Kurven in sechs Temperaturintervalle unterteilt [15; 100; 215; 320; 500; 1000; 5000]. Mit der Implementierung von  $c_p^0$  in das CFD Programm ANSYS CFX können nun Mischungsvorgänge bei geringen Temperaturen korrekt simuliert werden.

Die verwendeten Polynome haben die Form

$$(2) \quad \frac{c_p^0}{R} = a_1 + a_2 T + a_3 T^2 + a_4 T^3 + a_5 T^4$$

Zur Validierung des Realgasmodells in ANSYS CFX wurde der „Mascotte single injector, Test Case RCM3-2 C60“ [16-19] ausgewählt. Die Randbedingungen dieses Testfalls sind in Tabelle 1 aufgelistet.

	$\text{H}_2$	$\text{O}_2$
Druck [MPa]	6	6
Massenfluss [g/s]	42	105
Temperatur [K]	257	83
Dichte [ $\text{kg/m}^3$ ]	5.66	1188.3
cp [J/kg/K]	14412	1663
Geschwindigkeit [m/s]	138	4.5
Viskosität [ $\text{kg/m/s}$ ]	8.61e-4	2.57e-4

TAB. 1: Randbedingungen des Mascotte Testfalls

Der Injektor besteht aus einem Sauerstoffinjektorelement mit dem Durchmesser 3,6 mm, der sich am Austritt auf 5,0 mm aufweitert. Der Wasserstoff wird gasförmig koaxial eingespritzt. Der innere Durchmesser des Wasserstoff-Ringkanals beträgt 5,6 mm, dessen äußerer Durchmesser 10 mm. Die Länge des Injektors beträgt in der Simulation 50 mm, da die restliche Geometrie unbekannt ist.

Der Querschnitt der Brennkammer ist quadratisch mit den Abmessungen 50 x 50 mm, wobei für die zweidimensionale Simulation ein runder Querschnitt (mit dem Durchmesser 56,42 mm) angenommen mit demselben Volumen verwendet wurde, um eine Simulation auf zweidimensionalen Rechennetzen zu ermöglichen. Die Länge der Kammer beträgt 478 mm. Da eine echte 2D Simulation mit CFX nicht möglich ist, wurde das Rechennetz um die Symmetriearchse um 3° gedreht, um ein 3D-Netz zu erhalten. Um schlechte Netzqualität und numerische Probleme an der Rotationsachse zu vermeiden, wird diese durch einen dünnen, adiabaten,reibungsfreien Stab ersetzt.

Das Rechennetz ist strukturiert mit 29650 Knoten und 14335 Elementen, wobei über den Radius von Sauerstoff und Wasserstoff Injektor jeweils 11 Knoten verteilt wurden. Die Wände werden als adiabat angenommen. Als Einlassrandbedingung wird der Massenfluss, am Auslass eine Druckrandbedingung vorgegeben. Da die Temperatur des eingeblasenen Wasserstoffs über 100 K liegt, kann bei Wasserstoff eine Idealgaszustandsgleichung verwendet werden. Aufgrund der unbekannten Zusammensetzung des Wasserstoffs wird normal Wasserstoff angenommen, welcher sich bei rascher Abkühlung von höheren Temperaturen bildet. Sauerstoff liegt mit 83 K unterhalb der kritischen Temperatur, und ist somit ein Realgas. Der Druck liegt mit 6 MPa über dem kritischen Druck für Sauerstoff und Wasserstoff. Somit findet die Einspritzung im überkritischen Bereich bezüglich der Einzelkomponenten statt.

Die Einspritzung wurde mit dem kommerziellen CFD-Code ANSYS-CFX durchgeführt, wobei die korrekten  $c_p^0(T)$ -Polynome und eine Redlich-Kwong Zustandsgleichung für den Sauerstoff verwendet wurden. Die aus der Realgassimulation resultierende Verteilung des Massenbruchs von Sauerstoff ist in Bild 5 dargestellt.

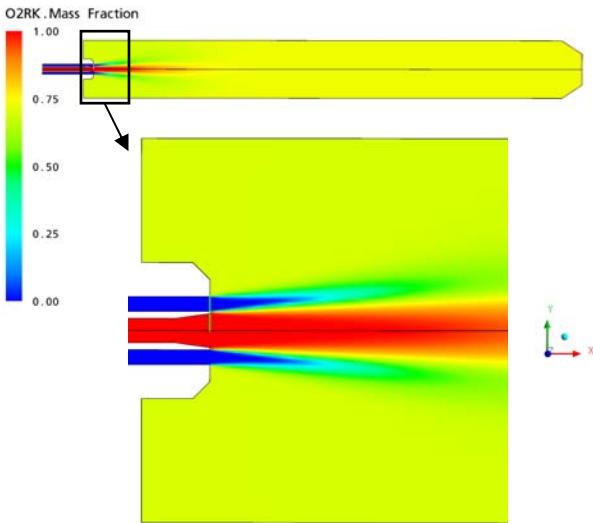


BILD 5: Massenbruch von Sauerstoff in der Darstellung der kompletten Brennkammer sowie in einem Vergrößerten Bereich nahe dem Injektoraustritt

Bild 6 und 7 zeigen die aus der Idealgas- und Realgas-simulation resultierende radiale Verteilung von Geschwindigkeit und Dichte am Auslass des Injektors. Die Position des Auslasses ist in Bild 5 mit einer grünen Linie markiert. Wie bereits beschrieben, tritt zwischen  $r = 0$  und  $r = 2,5$  mm reiner Sauerstoff, und zwischen  $r = 2,8$  und  $5$  mm reiner Wasserstoff aus dem Injektor aus. Da Wasserstoff als Idealgas vorliegt, sind in diesem Bereich keine Unterschiede zwischen den beiden Simulationen vorhanden.

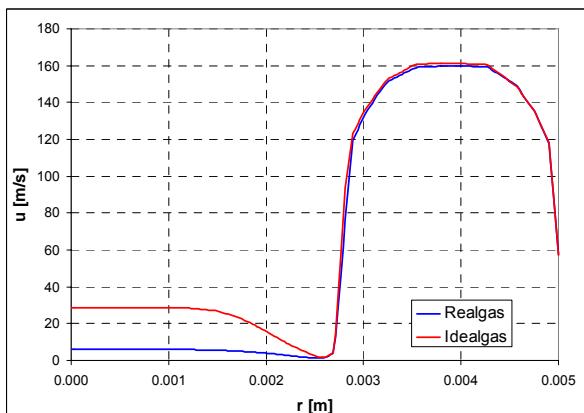


BILD 6: Geschwindigkeit am Injektoraustritt

Die maximale Geschwindigkeit des Wasserstoffs liegt am Austritt bei 160 m/s, die mittlere Geschwindigkeit beträgt 147 m/s. Verglichen mit der Geschwindigkeit aus den Vorgaben (siehe Tab. 1) ergibt sich eine Differenz von 11 m/s, was einer Abweichung von 8 % entspricht. Der Unterschied erklärt sich aus der Tatsache, dass die Dichte in der Simulation mit einem Mittelwert von 5,29 kg/m<sup>3</sup> geringer ist als die Vorgabe von 5,66 kg/m<sup>3</sup>. Aufgrund des vorgegebenen Massenflusses und unter Berücksichtigung der Massenerhaltung muss

daher die Geschwindigkeit in der Simulation bei konstantem Massenfluss ( $\dot{m} = \rho v A$ ) höher sein. Die Dichte, die sich aus dem NIST Datensatz für 6 MPa und 275 K ergibt, liegt bei 5,09 kg/m<sup>3</sup>.

Die Realgaseffekte werden vor allem in der gezeigten Dichte und Geschwindigkeitsverteilung des Sauerstoffs deutlich. Die mittlere Geschwindigkeit für ideales Gas 19,34 m/s die maximale Geschwindigkeit an der Achse ist 28,6 m/s. Unter Berücksichtigung der Realgaseigenschaften ist die Geschwindigkeit deutlich geringer. In diesem Fall ist die mittlere Geschwindigkeit 4,42 m/s, die maximale Geschwindigkeit 6,08 m/s. Die Geschwindigkeit der Vorgabe ist 4,5 m/s. Die Idealgasgleichung überschätzt also deutlich die Geschwindigkeit, während sie mit der Realgasgleichung relativ gut getroffen wird. Da bei gegebenem Massenstrom unter Verwendung einer Idealgaszustandsgleichung wesentlich zu hohe Geschwindigkeiten im Vergleich zum Experiment resultieren, ergeben sich in diesem Fall auch deutlich zu hohe Impulsströme. Das Eindringen des Sauerstoffstrahls und auch die Vermischung mit dem umgebenden Wasserstoff hängt wesentlich vom Impulsstrom der beiden Gase und deren Verhältnis ab. Daher kann bei Verwendung von Idealgas-Zustandsgleichungen die Mischung und Verbrennung zumindest im Nahbereich der Injektoren nicht korrekt reproduziert werden.

Die etwas geringere Geschwindigkeit der Realgasrechnung im Vergleich zu den Angaben resultiert aus der etwas zu hohen mittleren Dichte von 1208,87 kg/m<sup>3</sup> der Simulation. Diese liegt um 20,57 kg/m<sup>3</sup> über dem Wert der Vorgabe.

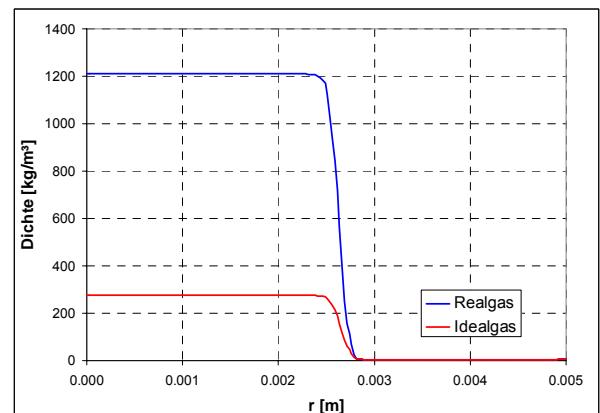


BILD 7: Dichte am Injektoraustritt

Bemerkenswert sind die sehr hohen Dichteunterschiede im Strömungsfeld unter Verwendung von Realgaszustandsgleichungen, welche um 1-2 Größenordnungen über denen liegen, die in gasdynamisch typischen Verbrennungsströmungen auftreten. Für die Beschreibung der Gemischzustandsgleichung wird in ANSYS-CFX derzeit die Annahme additiver Partialdrücke verwendet, welche im Realgasbereich nicht korrekt ist, da sich hier nur die Partialdichten additiv verhalten. Zudem sind noch keine Mischungsregeln für Zustandsgleichungen realer Gemische implementiert.

### 3. VERBRENNUNGSMODELL FÜR PARTIELL VORGEMISCHTE FLAMMEN

Da die Verbrennung in einer Raketenbrennkammer sowohl nicht vorgemischt als auch partiell vorgemischt stattfinden kann, soll das verwendete Verbrennungsmodell auf beide Regime anwendbar sein.

Um beiden Bedingungen zu genügen, sind mindestens zwei Kontrollparameter notwendig, welche die Mischung und Zündung des Gemisches beschreiben. Hier wird ein Mischungsbruch  $Z(x,t)$ , und eine einzelne Reaktionsfortschrittsvariable  $c(Z;x,t)$  verwendet. Für ein System mit einem Strom von Brennstoff (Index 1) und einem von Oxidationsmittel (Index 2), lässt sich der Mischungsbruch wie folgt definieren:

$$(3) \quad Z = \frac{Y_1}{Y_1 + Y_2}$$

mit einem Massenbruch  $Y$  der Brennstoffkomponenten. Somit gilt im Brennstoffstrom  $Z = 1$  und im Strom des Oxidationsmittels  $Z = 0$ . Da der Mischungsbruch eine Erhaltungsgröße ist, ist in der Transportgleichung kein Quellterm vorhanden. Um auch die turbulenten Fluktuationen von Mischungsbruch und Dichte zu berücksichtigen, wird eine Transportgleichung für den Favre-gemittelten Mischungsbruch  $\tilde{Z}$  und dessen Varianz  $\tilde{Z}''^2$  gelöst [20]:

$$(4) \quad \frac{\partial(\rho\tilde{Z})}{\partial t} + \frac{\partial(\rho\tilde{u}_j\tilde{Z})}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \bar{\mu} + \frac{\mu_i}{\sigma_z} \right) \frac{\partial\tilde{Z}}{\partial x_j} \right]$$

(5)

$$\frac{\partial(\rho\tilde{Z}'')}{\partial t} + \frac{\partial(\rho\tilde{u}_j\tilde{Z}'')}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \bar{\mu} + \frac{\mu_i}{\sigma_{\tilde{Z}''}} \right) \frac{\partial\tilde{Z}''}{\partial x_j} \right] + 2 \frac{\mu_i}{\sigma_z} \left( \frac{\partial\tilde{Z}}{\partial x_j} \right)^2 - \bar{\rho}\tilde{\chi}$$

Dabei ist  $\mu$  die molekulare dynamische Viskosität,  $\mu_i$  die turbulente Viskosität,  $\tilde{\chi}$  die skalare Dissipationsrate und  $\sigma_z$ ,  $\sigma_{\tilde{Z}''}$  und  $C_z$  sind Modellkonstanten. Der erste Term auf der rechten Seite von Gleichung (5) beschreibt die Produktion von Varianz, der letzte Term modelliert deren Dissipation.

Die Reaktionsfortschrittsvariable  $c$  beschreibt den Reaktionsfortschritt innerhalb eines Flamelets. Sie ist 0 im unverbrannten Gas, und 1 im komplett verbrannten Gas.

Der mittlere Speziesmassenbruch  $\tilde{Y}_i$  kann durch den Massenbruch des unverbrannten Gemisches  $\tilde{Y}_{i,a}$ , durch den Massenbruch des vollständig verbrannten Gemisches  $\tilde{Y}_{i,b}$  und die Reaktionsfortschrittsvariable angenähert werden:

$$(6) \quad \tilde{Y}_i = (1 - \tilde{c})\tilde{Y}_{i,a} + \tilde{c}\tilde{Y}_{i,b},$$

alternativ können sie auch aus einer Flamelet-Tabelle ausgelesen werden, falls genauere Speziesinformationen benötigt werden.

Die Transportgleichung der Favre gemittelten Reaktionsfortschrittsvariable ist [21]

$$(7) \quad \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{c})}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_j\tilde{c})}{\partial x_j} = - \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \bar{\rho}\tilde{u}_j\tilde{c}'' \right) + \bar{w}_c$$

Der Term  $\bar{\rho}\tilde{u}_j\tilde{c}''$  wird durch die Annahme eines Gradienten-Transports modelliert.

Um den Quellterm  $\bar{w}_c$  zu schließen, schlägt Zimont [22,23] ein Modell mit der turbulenten Flammengeschwindigkeit vor:

$$(8) \quad \bar{w}_c = \rho_u s_t |\nabla \tilde{c}|$$

Die Korrelation für die turbulente Flammengeschwindigkeit  $s_t$  ist:

$$(9) \quad s_t = AG u'^\lambda s_t^\lambda \lambda_u^\lambda l_t^\lambda$$

Die Modellkonstante  $A$  ist im Falle von Wasserstoffverbrennung  $A = 0.6$  [23].  $u'$  ist die turbulente Geschwindigkeitsintensität und  $l_t$  ist das turbulente integrale Längenmaß, welches durch die turbulente kinetische Energie und die Dissipationsrate definiert ist.  $\lambda_u$  ist die Temperaturleitfähigkeit der unverbrannten Mischung. Der Streckungsfaktor  $G$  modelliert die Verlöschung und die Krümmung der Kurve.

Bei einer Flammenausbreitung in partiell vorgemischter Strömung können sich Flammenfronten in Bereichen mit unterschiedlichem Brennstoff-Oxidatorgemisch ausbreiten. Im vorliegenden Modell wird angenommen, dass diese Flammenausbreitung mit der laminaren Flammengeschwindigkeit des lokalen Brennstoff-Oxidatorverhältnisses stattfindet. Da dieses turbulenten Schwankungen unterliegt, wird der gemittelte Quellterm durch eine Integration der PDF der Brennstoff-Oxidatormischung erhalten:

$$(10) \quad \tilde{s}_t(\mathbf{x}, t) = \int s_t(Z) \tilde{P}_{Z,\tilde{Z}''}(Z; \mathbf{x}, t) dZ$$

Die für Gleichung (10) benötigten Korrelationen für die laminare Flammengeschwindigkeit  $s_t(Z)$  wurden für die vorgemischte Verbrennung entwickelt und decken nicht den gesamten möglichen Bereich des Äquivalenzverhältnisses von Brennstoff/Luft in Diffusionsflammen  $0 \leq Z \leq 1$  ab. Um die Integration durchführen zu können, werden die Gültigkeitsgrenzen der verwendeten Korrelationen für  $s_t(Z)$  im mageren und fetten Bereich linear auf  $s_t = 0$  an den jeweiligen mageren und fetten Zündgrenzen extrapoliert; außerhalb der Zündgrenzen wird  $s_t(Z) = 0$  angenommen. Da die Zündgrenzen selbst von Druck und Temperatur abhängen, wurden Korrelationen für diese Druck- und Temperaturabhängigkeit mit Daten aus der Literatur entwickelt und in das Verfahren integriert.

Um die effektiv resultierende Flammengeschwindigkeit effizient innerhalb eines CFD-Codes verwenden zu können, wird eine Tabelle vorintegriert, welche auf einer angenommenen  $\beta$ -pdf des Mischungsbruchs basiert:

$$(11) \quad \tilde{P}(Z, x, t) = \frac{Z^{\alpha-1} (1-Z)^{\beta-1}}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)} \Gamma(\alpha + \beta)$$

$\Gamma$  ist die Gammafunktion,  $\alpha$  und  $\beta$  können durch den Favre gemittelten Mischungsbruch und dessen Varianz ausgedrückt werden.

$$(12) \quad \alpha = \tilde{Z}\gamma$$

$$(13) \quad \beta = (1 - \tilde{Z})\gamma \quad \text{mit}$$

$$(14) \quad \gamma = \frac{\tilde{Z}(1 - \tilde{Z})}{\tilde{Z}^2} - 1 \geq 0$$

Die resultierende Tabelle ist eine Funktion von mittlerem Mischungsbruch, dessen Varianz, sowie Druck und Temperatur des unverbrannten Gemischs.

#### 4. VALIDIERUNGSFALL

Um das oben beschriebene Verbrennungsmodell bewerten zu können, wird als Testfall eine Wasserstoff-Diffusionsflamme verwendet, welche innerhalb des TNF Workshops [1-4] sehr umfangreich untersucht wurde. Der Aufbau des Experiments ist in Bild 8 zu sehen. Durch eine zentral angeordnete Lanze wird Wasserstoff mit hoher Geschwindigkeit in eine langsamere Luftströmung eingeblasen. Der Wasserstoffinjektor hat einen Innendurchmesser von 3,75 mm, der Wasserstoff wird mit einer maximalen Geschwindigkeit von 302,21 m/s eingeblasen. Die koaxiale Luftströmung besitzt eine mittlere Einlass-Geschwindigkeit von 1 m/s. Die horizontale weiße Linie zeigt die Position, an der später die Ergebnisse verglichen werden.

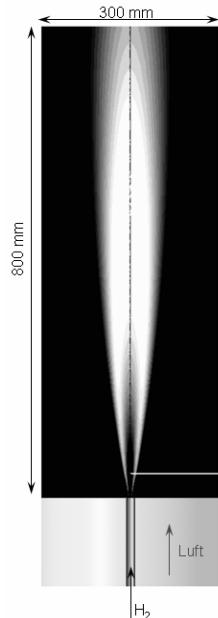


BILD 8: Aufbau der Wasserstoff Diffusionsflamme

Auch in diesem Fall wurde ein quasi-2D-Rechennetz erzeugt, bei dem ein 2-D-Netz um die Rotationsachse um zwei Grad rotiert wurde. Das Netz wurde in der Nähe der Flamme verfeinert. Es besteht aus 87200 Knoten und 131518 Elementen. Die Achse ist durch einen reibungsfreien, adiabaten Stab ersetzt. Die Außenwand ist adiabat, und am Auslass herrscht ein Druck von 1 bar. Für den Wasserstoff Jet wurde das Geschwindigkeitsprofil und ein Profil für die turbulente kinetische Energie auf Basis von Messergebnissen vorgegeben. Die Temperatur von Wasserstoff und Luft beträgt am Einlass 298 K.

Als Turbulenzmodell wurde das  $k-\varepsilon$ -Modell verwendet, wobei  $C_{\varepsilon 1} = 1,5$  gewählt wurde, um die Ausbreitung des runden Jets besser wiederzugeben. Die Simulation wurde mit dem Diskretisierungsschema ‚High Resolution‘ durchgeführt. Dieses Schema ist eine Mischung aus 1. Ordnung und 2. Ordnung Genauigkeit. Das Konvergenzkriterium für alle Transportgleichungen ist 1e-6.

Für die laminare Flammengeschwindigkeit wird die Korrelation von Iijima & Takeno [24] verwendet:

$$(15) \quad s_i = S_{i_0} \left[ 1 + \beta \ln \left( \frac{p}{p_0} \right) \right] \left( \frac{T_u}{T_0} \right)^a \quad \text{mit}$$

$$(16) \quad S_{i_0} = 2.98 - (\phi - 1.70)^2 + 0.32(\phi - 1.70)^3 \left[ \frac{m}{s} \right]$$

$$\alpha = 1.54 + 0.026(\phi - 1)$$

$$\beta = 0.43 + 0.003(\phi - 1)$$

$$p_0 = 1 \text{ atm}, T_0 = 291 \text{ K}$$

Der Gültigkeitsbereich dieser Korrelation ist für das Äquivalenzverhältnis  $0.5 \leq \phi \leq 4.0$ , für den Druck  $0.5 \text{ atm} < p < 25 \text{ atm}$  und für die Temperatur des Unverbrannten  $291 \text{ K} \leq T_u \leq 500 \text{ K}$ .

Die vorintegrierte Tabelle der laminaren Flammengeschwindigkeit und der Extrapolation der Korrelation mit den Zündgrenzen ist in Bild 9 dargestellt.

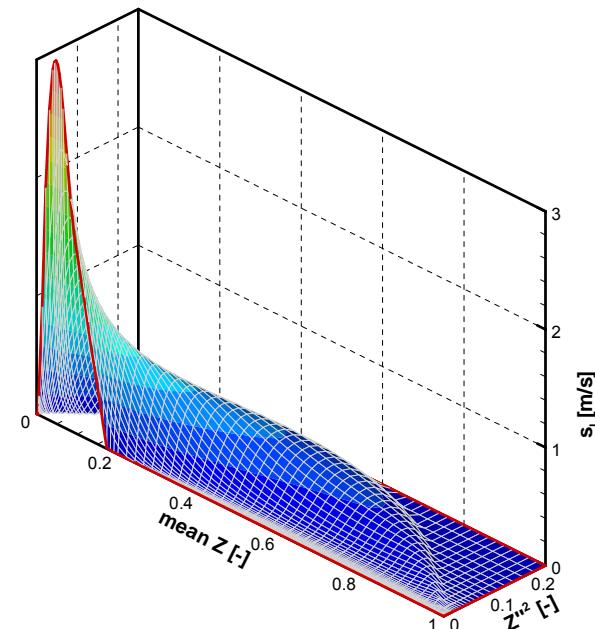


BILD 9: Tabelle der laminaren Flammengeschwindigkeit in Abhängigkeit vom Favre gemittelten Mischungsbruch und dessen Varianz

Zusätzlich zu Rechnungen mit dem oben beschriebenen Verbrennungsmodell wurden Simulationen unter Verwendung des Eddy Dissipation Modells (EDM) [25] und des Laminar Flamelet Modells [26] durchgeführt.

Das Eddy Dissipation Modell basiert auf einer Einschrittreaktion und der Annahme schneller Chemie. Zwar ist dieses Modell sehr robust, doch es vernachlässigt die chemische Kinetik und es überschätzt die Reaktionsrate in stark gestreckten Strömungen. Die Ergebnisse sind zudem stark von der Modellkonstante abhängig und lassen sich nicht ohne weiteres auf andere Betriebszustände übertragen.

Für das Laminar Flamelet Modell wird eine Transportgleichung für den gemittelten Mischungsbruch und für die Varianz des Mischungsbruchs gelöst. Die Massenbrüche der einzelnen Spezies können dann aus einer Flamelet-Tabelle ausgelesen werden.

## 5. ERGEBNISSE

Die Ergebnisse der Simulation (Bild 10 und 11) werden entlang der horizontalen weißen Linie (siehe Bild 8) mit den Messergebnissen verglichen. Die Linie entspricht einem Abstand  $y/L = 1/8$ , wobei  $y$  der Abstand vom Injektor aus in axialer Richtung ist.  $L$  ist die sichtbare Flammenlänge. Diese wurde im Experiment zu  $L = 675 \text{ mm}$  ermittelt.

Bild 10 zeigt die radiale Temperaturverteilung.  $R$  bezeichnet den Radius des Wasserstoffinjektors. Die schwarzen Punkte repräsentieren die Messwerte [1-4], die Dreiecke die Ergebnisse des Eddy Dissipation Modells, die Vierecke diejenigen des Laminar Flamelet Modells, und die Rauten diejenigen des Flamelet Modells mit einer Reaktionsfortschrittsvariablen.

Das Eddy Dissipation Modell überschätzt stark die maximale Temperatur des Experiments. Zusammen mit dem Laminar Flamelet Modell zeigt es jedoch gute Übereinstimmung in der Nähe der Mittellinie.

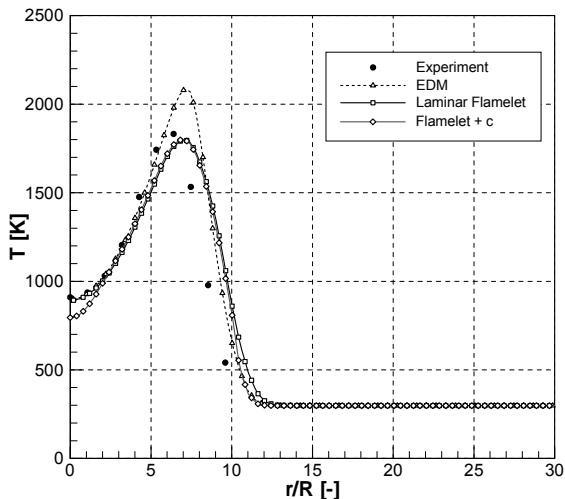


BILD 10: Temperaturverteilung bei  $y/L = 1/8$

Zwischen  $r/R = 10$  und  $12$  zeigt das Flamelet + Reaktionsfortschrittsvariablen Modell etwas bessere Übereinstimmung als das Laminar Flamelet Modell.

In der Nähe der maximalen Temperatur zeigen diese beiden Modelle nahezu das gleiche Verhalten, jedoch wird die maximale Temperatur des Experiments nicht erreicht.

Bild 11 zeigt die Verteilung des Massenbruchs von Sauerstoff der verschiedenen Verbrennungsmodelle im Vergleich zum Experiment bei  $y/L = 1/8$ .

In der Nähe der Mittellinie, zwischen  $r/R = 0$  und  $5$  ist nur das Flamelet Modell mit der Reaktionsfortschrittsvariablen in der Lage, den erhöhten Massenbruch von Sauerstoff vorherzusagen. Bei Verwendung des Eddy Dissipation Modells kann Luft nicht zur Mittellinie diffundieren, da die Verbrennung durch die Spezies kontrolliert wird, welche die kleinste Reaktionsrate liefert. In diesem Modell wird also die Luft verbraucht, bevor sie in der Lage ist, zur Mittellinie zu diffundieren.

Zwischen  $r/R = 5$  und  $r/R = 8$  zeigen die beiden Flamelet Modelle etwas bessere Übereinstimmung mit dem

Experiment als das Eddy Dissipation Modell. Letzteres zeigt dagegen im Bereich zwischen  $r/R = 8$  und  $r/R = 10$  eine leicht bessere Übereinstimmung mit den Meßwerten.

Sowohl in Bild 10 als auch in Bild 11 ist zu erkennen, dass die CFD Ergebnisse im Vergleich zum Experiment leicht zur Seite des Oxidators verschoben sind. Das kann einerseits ein Effekt des verwendeten Turbulenzmodells sein, es kann aber auch an der Art der Mittellinie der experimentellen Daten liegen, die die resultierenden gemittelten Punkte hin zur wasserstoffreichen Seite schiebt [1].

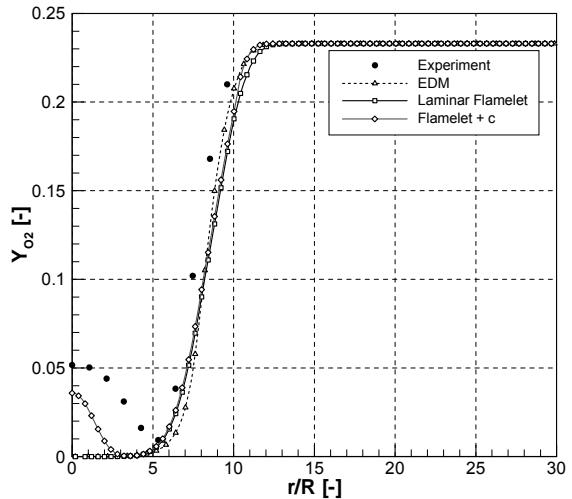


BILD 11: Verteilung des Massenbruchs von Sauerstoff bei  $y/L = 1/8$

Bild 12 und Bild 13 zeigen die Daten entlang radialer Richtung in einem Abstand von  $y/L = 3/8$  von der Düse.

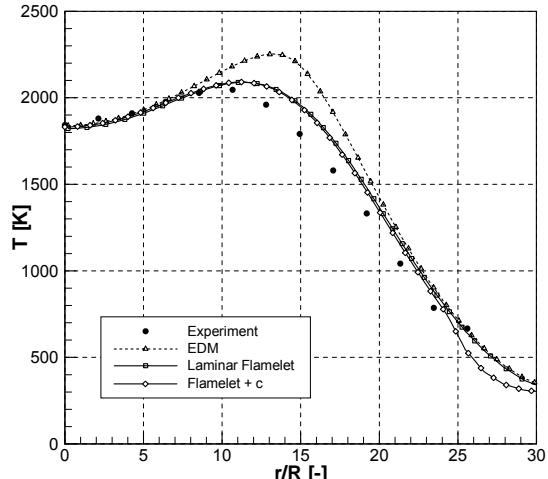


BILD 12: Temperaturverteilung bei  $y/L = 3/8$

Bild 12 zeigt den Temperaturverlauf, der von den verschiedenen Verbrennungsmodellen vorhergesagt wird. Der Wert von allen drei Modellen stimmt nahe der Mittellinie gut mit den Experimenten überein. Ab ca.  $r/R = 6$  weicht das Eddy Dissipation Modell von den

anderen Modellen ab, wobei die maximale Temperatur stark vom Experiment abweicht, diese überschätzt und zur Seite des Oxidators verschiebt. Bis zu  $r/R = 24$  weichen die beiden Flamelet Modelle kaum voneinander ab, wobei auch diese zur Seite des Oxidationsmittels verschoben sind. Die maximale Temperatur wird leicht überschätzt. Ab  $r/R = 24$  zeigen das Laminar Flamelet Modell und das Eddy Dissipation Modell gleiches Verhalten, während das Flamelet + c Modell geringere Temperaturen berechnet.

Der Massenbruch von Sauerstoff als Funktion des Radius wird in Bild 13 gezeigt. Bis  $r/R = 24$  weichen die beiden Flamelet Modelle wieder kaum voneinander ab, und zeigen allgemein eine gute Übereinstimmung mit dem Experiment, wobei zwischen  $r/R = 10$  und  $r/R = 17$  die Werte für den Sauerstoff Massenbruch leicht unter denen des Experiments liegen. In diesem Bereich liefert das Eddy Dissipation Modell die schlechtesten Ergebnisse. Ab  $r/R = 24$  zeigen das Laminar Flamelet und das Eddy Dissipation Modell den gleichen Verlauf. Das Flamelet + c Modell überschätzt diesen Bereich leicht.

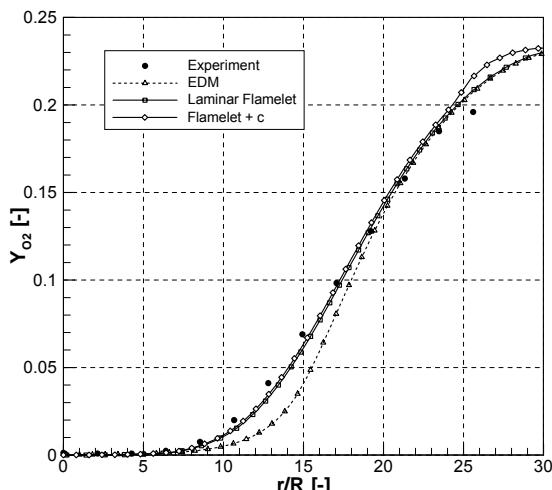


BILD 13: Verteilung des Massenbruchs von Sauerstoff bei  $y/L = 3/8$

## 6. ZUSAMMENFASSUNG UND AUSBLICK

Da moderne Raketenbrennkammern inzwischen bei sehr hohen Drücken (zwischen 100 bis über 300 bar) und sehr niedrigen Temperaturen betrieben werden, ist es notwendig, die bei diesen Bedingungen auftretenden komplexen thermochemischen Phänomene in die Simulationsverfahren zu integrieren. Zusätzlich zur turbulenten Mischung und der Verbrennung müssen die Realgaseigenschaften berücksichtigt werden.

Die Realgaseigenschaften von Wasserstoff und Sauerstoff wurden in Kapitel 2 erläutert. Aus den  $pV$ -Diagrammen beider Stoffe, in denen Daten aus NIST mit der Zustandsgleichung für ideale Gase und der Redlich-Kwong Gleichung verglichen werden, wird deutlich, dass die Realgaseigenschaften für Sauerstoff unter 300 K und für Wasserstoff unter 100 K nicht mehr vernachlässigbar sind. Zwar wird das spezifische Volumen für hohe Dichten und überkritische Drücke für Sauerstoff nicht exakt wiedergegeben, allerdings kann diese Gleichung zumindest als Basis für eine genauere

Bestimmung verwendet werden, sofern eine Korrektur des spezifischen Volumens bereitgestellt wird. Allerdings sollten in Zukunft nicht additive Partialdrücke nach dem Daltonschen Gesetz, sondern Mischungsregeln für reale Gase verwendet werden.

Bei der Berechnung des thermodynamischen Zustands von Wasserstoff bei Temperaturen unter 400 K muss darauf geachtet werden, dass die temperaturabhängige Wärmekapazität bei konstantem Druck bereits im Ideal-gasbereich bei den beiden Molekülarten ortho- und para-Wasserstoff stark voneinander abweichen. Da in der Literatur keine Polynome für diesen tiefen Temperaturbereich verfügbar waren, wurden insgesamt sechs Polynome generiert (zwischen 15 K und 5000 K), um die komplexe Form des  $c_p$ -Verlaufs korrekt wiederzugeben.

Da in einer Raketenbrennkammer sowohl nicht vorgemischte als auch vorgemischte Verbrennung stattfinden kann, wurde in Kapitel 3 ein Modell vorgestellt, das beide Regime berücksichtigt. Dieses wurde in Kapitel 5 mit dem Eddy Dissipation Modell und dem Laminar Flamelet Modell anhand einer Wasserstoff Diffusionsflamme des TNF Workshops validiert, dessen Randbedingungen in Kapitel 4 beschrieben wurde. Das Eddy Dissipation Modell zeigt im Vergleich zum Experiment insgesamt die schlechteste Übereinstimmung. Die beiden Flamelet-Modelle zeigen ein ähnliches Verhalten, allerdings konnte der erhöhte Massenbruch von Sauerstoff in Achsen Nähe nur von dem hier vorgestellten Modell (Flamelet + Reaktionsfortschrittsvariable) vorhergesagt werden. Das Zünden von Brennstoff-Oxidatorgemisch kann vom reinen Flameletmodell ebenfalls nicht berechnet werden, da dieses als reines Diffusionsflammenmodell keine Reaktionsfortschrittsvariable besitzt.

## DANKSAGUNGEN

Die Arbeiten dieses Projekts wurden zum Teil aus dem EU-Projekt HyICE (Optimization of a Hydrogen Powered Internal Combustion Engine) finanziert. Die Autoren danken für die finanzielle Unterstützung und den Herren Ferreira, Bender, Forkel (ANSYS-CFX) für anregende Diskussionen und Unterstützung bei der Implementierung der Modelle.

## LITERATUR

- [1] R.S. Barlow, C.D. Carter (1994) *Raman/Rayleigh/LIF Measurements of Nitric Oxide Formation in Turbulent Hydrogen Jet Flames* Combustion and Flame, 97: 261-280
- [2] R.S. Barlow (1996) *Relationship among Nitric Oxide, Temperature and Mixture Fraction in Hydrogen Jet Flames* Combustion and Flame, 104: 261-280
- [3] R.S. Barlow (2003) *Sandia H<sub>2</sub>/He flame Data – Release 2.0* <http://www.ca.sandia.gov/TNF>, Sandia National Laboratories
- [4] M. Flury (1999) *Experimentelle Analyse der Mischungsstruktur in turbulenten nicht vorgemischten Flammen*

- Dissertation, ETH Zürich
- [5] J.O. Hirschfelder, C.F. Curtis, R.B. Bird (1964)  
*Molecular theory of gases and liquids*  
 New York: Wiley
- [6] B.E. Poling, J.M. Prausnitz, J.P. O'Connel (2001)  
*The Properties of Gases and Liquids, 5<sup>th</sup> Edition*  
 McGraw-Hill
- [7] J. Bellan (2000)  
*Supercritical (and subcritical) fluid behavior and modeling: drops, streams, shear and mixing layers, jets and sprays*  
 Progress in Energy and Combustion Science 26: 329-366
- [8] M. Habiballah, M. Orain, F. Grisch, L. Vingert, P. Gicquel (2006)  
*Experimental Studies of High-Pressure Cryogenic Flames on the Mascotte Facility*  
 Combust. Sci. and Tech., 178: 101-128
- [9] B.F. Magnussen, B.H. Hjertager (1976)  
*On Mathematical Modeling of Turbulent Combustion with Special Emphasis on Soot Formation and Combustion*  
 16<sup>th</sup> Symposium (International) on Combustion, 719-729, The Combustion Institute, Pittsburgh
- [10] Division Scientific of L'Air Liquid (1976)  
*Encyclopedie des Gaz*  
 Elsevier, Amsterdam
- [11] E.W. Lemmon, M.O. McLinden, D.G. Friend (2005)  
*Thermophysical Properties of Fluid Systems*  
 NIST Chemistry WebBook, NIST Standard Reference Database Number 69, National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg MD, 20899 (<http://webbook.nist.gov>)
- [12] O. Redlich, J.N.S. Kwong (1949)  
*On the Thermodynamics of Solutions. V – An Equation of State. Fugacities of Gaseous Solutions*  
 Chemical Reviews, 44: 233-244
- [13] M.W. Chase Jr., C.A. Davies, J.R. Downey Jr., D.J. Frurip, R.A. McDonald, A.N. Syverud (1985)  
*JANAF, Thermochemical Tables, 3<sup>rd</sup> Edition*  
 Journal of Physical and Chemical Reference Data, 14, NBS
- [14] H.W. Woolley, R.B. Scott, F.G. Brickwedde (1948)  
*Compilation of Thermal Properties of Hydrogen in its Various Isotopic and Ortho-Para Modifications*  
 National Bureau of Standards, 41, RP1932, 379-475
- [15] R.J. Kee, F.M. Rupley, J.A. Miller, M.E. Coltrin, J.F. Grcar, E. Meeks, H.K. Moffat, A.E. Lutz, G. Dixon-Lewis, M.D. Smooke, J. Warnatz, G.H. Evans, R.S. Larson, R.E. Mitchell, L.R. Petzold, W.C. Reynolds, M. Caracotsios, W.E. Stewart, P. Glarborg, C. Wang, O. Adigun, W.G. Houf, C.P. Chou, S.F. Miller, P. Ho, D.J. Young (2004)  
 CHEMKIN Release 4.0, Reaction Design, Inc., San Diego, CA
- [16] M. Habiballah, L. Vingert, J.C. Trainau, P. Vuillermoz (1996)  
*MASCOTTE: a test bench for cryogenic combustion research*  
 IAF-96-S.2.03, 47<sup>th</sup> International Astronautical Congress, Beijing, China
- [17] L. Vingert, M. Habiballah, P. Hervat, F. Dugue, P. Vuillermoz (1997)  
*Evolution of the MASCOTTE test bench to high pressure operation and related combustor technology*  
 3<sup>rd</sup> French-German Colloquium on Rocket Engine Propulsion, Marseille, Frankreich
- [18] L. Vingert, M. Habiballah, J.C. Trainau (1999)  
*MASCOTTE, a research test facility for high pressure combustion of cryogenic propellants*  
 12<sup>th</sup> European Aerospace Conference, 3<sup>rd</sup> European Conference on Space Transportation Systems, Paris, Frankreich
- [19] L. Vingert, M. Habiballah, P. Vuillermoz, S. Zurbach (2000)  
*MASCOTTE, a test facility for cryogenic combustion research at high pressure*  
 51<sup>st</sup> International Astronautical Congress, Rio de Janeiro, Brasilien
- [20] N. Peters (2000)  
*Turbulent Combustion*  
 Cambridge University Press
- [21] K.N.C. Bray (1980)  
*Turbulent Flow with Premixed Reactants*  
 Turbulent Reacting Flows, P.A. Libby, F.Y. Williams, eds., Springer Verlag, New York
- [22] V. Zimont (1979)  
*Theory of Turbulent Combustion of a Homogeneous Fuel Mixture at High Reynolds Numbers*  
 Combus. Expl. and Shock Waves 15, 305-311
- [23] V. Zimont, W. Polifke, M. Bettelini, W. Weisenstein (1998)  
*An Efficient Computational Model for Premixed Turbulent Combustion at High Reynolds Numbers Based on a Turbulent Flame Speed Closure*  
 J. Engineering for Gas Turbines and Power (Transactions of the ASME), 120, 526-532
- [24] T. Iijima, T. Takeno (1986)  
*Effects of temperature and pressure on burning velocity*  
 Combustion and Flame, 65: 35-43
- [25] B.F. Magnussen, B.H. Hjertager (1976)  
*On the Mahematical Modeling of Turbulent Combustion with Special Emphasis on Soot Formation and Combustion*  
 16<sup>th</sup> Symposium (International) on Combustion, 719-278, The Combustion Institute, Pittsburgh
- [26] N. Peters (1984)  
*Laminar Diffusion Flamelet Models in Non-Premixed Turbulent Combustion*  
 Prog. Energy Combustion Sci., 10: 319-339