

REALGAS CFD-SIMULATION DER ÜBERKRITISCHEN VERBRENNUNG VON H₂ UND LOX AM MASCOTTE HOCHDRUCK PRÜFSTAND

M. Poschner und M. Pfitzner
Universität der Bundeswehr München
Fakultät für Luft- und Raumfahrttechnik
Institut für Thermodynamik (LRT-10)
Werner-Heisenberg-Weg 39, 85577 Neubiberg, Deutschland

Zusammenfassung

Moderne Hochleistungsraketenantriebe operieren bei sehr hohen Drücken bis zu 20 MPa. Der vorherrschende Druck in der Brennkammer liegt sowohl für den Brennstoff als auch für den Oxidator, typischer Weise Wasserstoff und Sauerstoff, im überkritischen Bereich ($p_{\text{kritisch, O}_2} = 50,43 \text{ bar}$). Gleichzeitig werden die Treibstoffe jedoch bei sehr niedrigen Temperaturen, unterhalb der kritischen Temperatur von Sauerstoff (154,581 K) eingespritzt, so dass Mischung und Verbrennung unter transkritischen Bedingungen ablaufen. Die Stoffeigenschaften und das Verhalten der Zustandsgrößen unterscheiden sich in diesem Gebiet deutlich von denen bei niedrigen Drücken und hohen Temperaturen. Diese Arbeit präsentiert die Validierung verschiedener Realgasmodelle des kommerziellen CFD-Lösers ANSYS CFX anhand experimenteller Daten, die am Mascotte-Prüfstand (V03) der ONERA gemessen wurden und dem 2nd und 3rd International Workshop on Rocket Combustion Modelling als Validierungsgrundlage dienen. Ein Augenmerk wird hier auf spezielle Mischungsphänomene bei hohen Drücken gelegt und die Implementierung in den gewählten kommerziellen Löser diskutiert.

1. EINLEITUNG

Moderne Hochleistungsraketenantriebe werden bei sehr hohen Drücken bis zu 20 MPa betrieben. Die Treibstoffe werden gleichzeitig bei sehr niedrigen Temperaturen in die Brennkammer eingebracht. Typischerweise werden moderne Raketenantriebe mit kryogenem Wasserstoff und flüssigem Sauerstoff verwendet. Für Sauerstoff gelten hierbei für gewöhnlich transkritische Bedingungen, da der Druck einen überkritischen Wert annimmt ($p > p_{k, \text{O}_2} = 50.43 \text{ bar}$) wohingegen die Temperatur unterkritisch ist ($T_k = 154,581 \text{ K}$). Wasserstoff nimmt nahezu immer einen überkritischen Zustand ein.

Für Drücke oberhalb des kritischen Druckes werden flüssige und gasförmige Phase nicht länger unterschieden. Auf der flüssigen Seite der kritischen Isothermen kommen die Stoffeigenschaften denen eines Gases mit sehr hoher Dichte wesentlich näher als denen einer Flüssigkeit. In der Nähe des kritischen Punktes treten große Gradienten in der Dichte und den Transporteigenschaften auf, so dass sehr kleine Temperaturänderungen erhebliche Auswirkungen auf die resultierende Strömung haben können. In diesem Zustand unterscheiden sich die Abhängigkeit der Dichte sowie der Transporteigenschaften von Druck und Temperatur erheblich von denen bei atmosphärischem Druck. Die Verwendung spezieller Zustandsgleichungen sowie spezieller Korrelationen für die Transporteigenschaften wird somit unumgänglich.

Weitere physikalische Besonderheiten ergeben sich für die Mischung zweier nichtidealer Stoffe. Wechselwirkungen auf molekularer Ebene führen dazu, dass die Dichte des Gemisches deutlich von der idealen Mischungsichte

abweicht und deshalb nicht mehr über das Raoult'sche oder Daltonsche Gesetz bestimmt werden kann. Hierfür müssen spezielle Mischungsregeln angewendet werden. Viele davon beruhen auf dem Prinzip der korrespondierenden Zustände und gehen davon aus, dass sich die Mischung in einer bestimmten Zusammensetzung wie ein Reinstoff verhält. Eine weitere Besonderheit liegt im kritischen Punkt der Mischung. Die kritische Temperatur der Mischung verläuft erwartungsgemäß nahezu linear mit der Zusammensetzung, wohingegen der kritische Druck der Mischung für ein bestimmtes Mischungsverhältnis ein deutliches Maximum aufweist, das die kritischen Drücke der beiden Reinstoffe deutlich übersteigt. Dieses Verhalten ist für Mischungen von Wasserstoff und Sauerstoff sehr ausgeprägt, was dazu führen kann, dass bei überkritischer Injektion von Treibstoff und Oxidator dennoch im Mischungsbereich Zweiphasengebiete auftreten können.

Kryogene Hochdruck-Raketenverbrennungsmotoren werden bereits seit vielen Jahren in mehreren Raumfähren (Ariane 1 bis 5, Space Shuttle, ...) erfolgreich eingesetzt. Heute besteht eine neue Herausforderung darin, Leistung und Funktionssicherheit der bestehenden Antriebe, bei gleichzeitig immer geringer werdenden Entwicklungsbudgets und immer kürzeren Entwicklungszeiten weiter zu verbessern. Aus diesem Grund gewinnt die Anwendung computergestützter Entwicklungsmethoden innerhalb des gesamten Entwicklungsprozesses immer mehr an Bedeutung, allerdings ist die korrekte thermodynamische Modellierung der komplexen Vorgänge die bei der überkritischen Mischung und Verbrennung nach wie vor eine Herausforderung.

Heute gibt es bereits neben mehreren experimentellen einige sehr detaillierte numerische Untersuchungen dieses Mischungsprozesses. Es gibt Studien über Verdampfung, Mischung und Verbrennung von flüssigen oder überkritischen Tröpfchen sowohl in ruhender Umgebung als auch innerhalb einer Strömung (Miller et. al. 1998 [16]; Yang 2000 [17]; Delplanque and Sirignano 1993 [18]; Daou et. Al. 1995 [19]). Es wurden auch überkritische Scherströmungen untersucht, wie sie bei der coaxialen Einspritzung in eine Raketenbrennkammer auftreten. Diese Scherströmungen wurden sowohl durch direkte numerische Simulation (DNS) (Miller et. al. 2000 [14]; Oefelein 2006 [15]) als auch durch Large Eddy Simulation LES (Zong and Yang 2005 [20]; Oefelein 2006 [15]) analysiert. Derart detaillierte Untersuchungen sind sehr wichtig für das Verständnis des komplexen Mischungs- und Verbrennungsprozesses, wie er in Raketenbrennkammern auftritt, allerdings sind diese Methoden heutzutage noch zu rechenintensiv, um sie für industrielle Anwendungen zu nutzen. Hier kommen immer noch bevorzugt RANS-Methoden (Reynolds Averaged Navier Stokes) zum Einsatz. Meist werden zur Unterstützung des Entwicklungsprozesses kommerzielle CFD-Löser herangezogen.

In diesem Paper soll ein kommerzieller CFD-Löser (ANSYS CFX [5]) auf seine Anwendbarkeit für Strömungen unter den beschriebenen Bedingungen untersucht werden. Hierzu sollen zur Validierung experimentelle Daten dienen, die am Mascotte Prüfstand V03 gemessen wurden. An diesem Prüfstand wurde die überkritische Verbrennung von Wasserstoff und flüssigem Sauerstoff an einem einzelnen Koaxialinjektor untersucht. Ergebnisse dazu wurden und im 2nd und 3rd International Workshop on Rocket Combustion Modelling veröffentlicht [2, 3].

In früheren Arbeiten wurden bereits verschiedene Realgasmodelle für die Transporteigenschaften der einzelnen Spezies implementiert und validiert [21]. In dieser Veröffentlichung soll ein spezielles Augenmerk auf die Modellierung der realen Mischung gelegt werden und die Auswirkung verschiedener Mischungsregeln auf die Strömung überprüft werden.

2. THEORETISCHE FORMULIERUNG

2.1. System von Erhaltungsgleichungen

Dem kommerziellen Strömungslöser ANSYS CFX liegt folgendes Gleichungssystem zu Grunde. Die Kontinuitätsgleichung für Mehrkomponenten-Strömungen ist gegeben durch:

$$(1) \quad \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_i}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{U}_j \tilde{Y}_i)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Gamma_i \frac{\partial \tilde{Y}_i}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{Y}_i \tilde{U}_j) + S_i$$

mit

$$(2) \quad \bar{\rho} \tilde{Y}_i \tilde{U}_j = \frac{\eta_i}{Sc_i} \frac{\partial \tilde{Y}_i}{\partial x_j}$$

Hier ist $\tilde{\rho}_i$ die massengemittelte Dichte der Komponente i , $\bar{\rho}$ ist die mittlere Mischungsdichte und $\tilde{Y}_i = \tilde{\rho}_i / \bar{\rho}$ ist der massengemittelte Massenbruch der Komponente i , \tilde{U}_j ist das massengemittelte Geschwindigkeitsfeld, und S_i ist der Quellterm für Komponente i mittels dessen Stoffumwandlungen aufgrund von Reaktionen und Verbrennung im Strömungsfeld berücksichtigt werden. η_t ist die turbulente Viskosität und Sc_t ist die turbulente Schmidtzahl, die hier identisch der turbulenten Prandtlzahl ist, um die turbulente Diffusion von Wärme und Spezies identisch zu behandeln.

Die turbulenten skalaren Flüsse $\bar{\rho} \tilde{Y}_i \tilde{U}_j$ werden mittels einer Wirbelzerfallsannahme modelliert (Gleichung 2). Molekulare Diffusion, die durch Temperatur-Gradienten hervorgerufen wird (Thermodiffusion - Soret Effekt) so wie Wärmediffusion auf Grund von Konzentrationsgradienten (Dufoureffekt) werden vernachlässigt. Der molekulare Diffusionskoeffizient Γ_i , der gleich dem Produkt aus Dichte und kinematische Diffusivität angenommen wird ($\Gamma_i = \rho D_i$), wird in CFX aus der mittleren Viskosität bestimmt.

In CFX werden für inkompressible Strömungen die folgenden Reynoldsgemittelten Gleichungen für Impuls und Energie gelöst:

$$(3) \quad \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_i)}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j)}{\partial x_j} = - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\tau_{ij} - \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j) + \bar{S}_{M,i}$$

$$(4) \quad \tau_{ij} = \eta \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right)$$

$$(5) \quad \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{h}_{tot})}{\partial t} - \frac{\partial \bar{p}}{\partial t} + \sum_j \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{h}_{tot})}{\partial x_j} =$$

$$\sum_j \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\lambda \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_j} - \bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{h} \right) + \sum_i \frac{\partial}{\partial x_i} \sum_j (\tilde{u}_j \tau_{ij}) + \bar{S}_E$$

Hier ist ρ die Dichte und u_i sind die Geschwindigkeitskomponenten in Richtung positiver Koordinatenachsen. τ ist der Spannungstensor, mittels dessen die molekulare Viskosität η eines Fluids berücksichtigt wird. In der Energiegleichung ist h_{tot} die Totalenthalpie und λ ist die Wärmeleitfähigkeit. S_M und S_E sind Quellterme für Impuls und Energie. Strahlungseffekte werden in den hier gezeigten Untersuchungen vernachlässigt.

Die Reynoldsfluss- und Reynoldsspannungsterme $-\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j$ und $-\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j$ werden mittels einer Wirbel-diffusivitätshypothese ($-\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j = \Gamma_i \cdot (\partial \tilde{h} / \partial x_j)$) und der Wirbelviskositätshypothese

$$(-\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j = \eta_t (\partial \tilde{u}_i / \partial x_j + \partial \tilde{u}_j / \partial x_i - \frac{2}{3} \cdot (\partial \tilde{u}_k / \partial x_k) \delta_{ij}) - \frac{2}{3} \delta_{ij} \rho k)$$

modelliert. Der turbulente Diffusionsfaktor Γ_t wird als

$\Gamma_t = \eta_t / \Pr_t$ modelliert mit der turbulenten Prandtl Zahl \Pr_t . Diese ist eine Modellkonstante (CFX default = 0.9). Das System kann mit der Wahl eines Modells für die turbulente Viskosität η_t geschlossen werden. Dies geschieht in dieser Arbeit durch ein einfaches Zweigleichungsturbulenzmodell, das zwei zusätzliche Transportgleichungen für die turbulente kinetische Energie k und die Wirbeldissipation ε löst. Es gilt $\eta_t = (C_\eta \rho k^2) / \varepsilon$ [5].

Für kompressible Strömungen wird die Reynoldsmittelung durch eine Massenmittelung (Favre) ersetzt.

2.2. Thermodynamik

2.2.1. Zustandsgleichung

Das oben beschriebene System von Gleichungen muss mit einem Ausdruck geschlossen werden, der einen Zusammenhang zwischen Temperatur T , Druck p und molarem Volumen V herstellt. Für geringe Drücke kann diese Beziehung näherungsweise durch die ideale Zustandsgleichung (Gl. 6) angenommen werden.

$$(6) \quad pV = RT$$

Mit der universellen Gaskonstante $R = 8.314472 \text{ [J/mol K]}$.

Bei hohen Drücken und niedrigen Temperaturen weicht diese Beziehung deutlich von der Idealgasgleichung ab. In den hier gezeigten Untersuchungen wurden zwei unterschiedliche Zustandsgleichungen verwendet. Eine davon ist eine Zwei-Parametergleichung, die Redlich-Kwong Zustandsgleichung:

$$(7) \quad p = \frac{RT}{(V-b)} - \frac{a}{\sqrt{TV}(V+b)}$$

Mit $a = 0.42748 R^2 T_c^{2.5} / p_c$ und $b = 0.08664 RT_c / p_c$. Der Index c bezeichnet hier die kritischen Größen.

Die zweite Realgasgleichung ist die Peng-Robinson Gleichung. Diese Gleichung ist eine Drei-Parameter Gleichung, die zusätzlich die Abweichung der Molekülform von einer Kugel berücksichtigt. Dies wird über die Verwendung des azentrischen Faktors von Pitzer ω gewährleistet.

$$(8) \quad p = \frac{RT}{(V-b)} - \frac{a\alpha(T)}{V^2 + 2Vb - b^2}$$

Mit $a = 0.457235 R^2 T_c^2 / p_c$, $b = 0.077796 RT_c / p_c$ und $\alpha = (1 + \chi(1 - \sqrt{T/T_c}))^2$. Durch χ geht der azentrische Faktor nach Pitzer in die Zustandsgleichung mit ein: $\chi = 0.37464 + 1.54226\omega - 0.26992\omega^2$.

Auch Mischungsvorgänge unterscheiden sich in Zuständen niedrigen und hohen Druckes. Bei geringem Druck ist eine Mischung über Partialvolumina näherungsweise zutreffend. Dieses Gesetz nimmt an, dass sich die partiellen Volumina der einzelnen Mischungskomponenten bei einem bestimmten Druck und bestimmter Temperatur zum Gesamtvolumen der Mischung summieren.

Bei hohen Drücken interagieren die Moleküle der Mischungskomponenten und das Mischungsvolumen weicht von dieser idealen Annahme ab. Zwei gebräuchliche Modelle sind die Mischung über Parameter und über kritische Eigenschaften, es wird angenommen, dass eine Mischung bei einer gegebenen Zusammensetzung das Prinzip der korrespondierenden Zustände befolgt.

Für die Mischung über Parameter im Fall der Peng-Robinson Gleichung werden a , b und ω für die Mischung bestimmt. Es sind viele unterschiedliche Mischungsregeln in Gebrauch. In dieser Arbeit werden die klassischen Mischungsregeln angewendet.

$$(9) \quad a = \sum_i \sum_j y_i y_j a_{ij}$$

$$(10) \quad b = \sum_i y_i b_i$$

$$(11) \quad \omega = \sum_i y_i \omega_i$$

a_{ij} wird berechnet als $a_{ii} = a_i$ und $a_{ij} = \sqrt{a_i a_j} (1 - k_{ij})$ für $i \neq j$ wobei k_{ij} den binären Interaktionskoeffizienten repräsentiert, die hier zu Null gesetzt wurden, da keine Werte verfügbar waren.

Wenn eine Mischungsregel über kritische Eigenschaften [14] im Fall der Peng-Robinson Gleichung angewendet wird, wird Gleichung (8) benutzt, aber die Berechnung von a_{ij} erfolgt folgendermaßen:

$$(12) \quad a_{ij} = a(T_{c(i,j)}, p_{c(i,j)}) \alpha(T_{r(i,j)})$$

$$(13) \quad \alpha(T_{r(i,j)}) = (1 + \chi(\omega_{ij})(1 - \sqrt{T_{r(i,j)}}))^2$$

$$(14) \quad a(T_{c(i,j)}, p_{c(i,j)}) = 0.457236 R^2 T_{c(i,j)}^2 / p_{c(i,j)}$$

$$(15) \quad \chi(\omega_{ij}) = 0.3796 + 1.4850\omega_{ij} - 0.1644\omega_{ij}^2 + 0.016\omega_{ij}^3$$

Die Berechnung der Werte für b unterscheidet sich ebenfalls von der Mischung über Parameter

$$(16) \quad b = 0.077796 RT_{c(i,j)} / p_{c(i,j)}$$

Die Mischung kritischer Eigenschaften befolgt die Regeln von Harstadt et. al. [12]. Hier ist $T_{c,(ij)} = T_{ci}$ und $T_{c,(ij)} = \sqrt{T_{ci} T_{cj}} (1 - k_{ij})$ für $i \neq j$ mit k_{ij} als binärem Interaktionsparameter, der nach Tsonopoulos und Heidman [13] auf den Wert $k_{ij} = 0.07447$ gesetzt wurde für die Mischung von Wasserstoff und Sauerstoff. Die kritischen Drücke werden wie folgt berechnet: $p_{c,(ij)} = p_{ci}$ und $p_{c,(ij)} = Z_{c(ij)} RT_{c(ij)} / V_{c(ij)}$ für $i \neq j$, mit $Z_{c(ij)} = \frac{1}{2} (Z_{ci} + Z_{cj})$, $V_{c(ij)} = \frac{1}{8} \left(V_{ci}^{1/3} + V_{cj}^{1/3} \right)^3$ und $\omega_{c(ij)} = \frac{1}{2} (\omega_{ci} + \omega_{cj})$ für $i \neq j$.

2.2.2. Wärmekapazität

Die spezifische Wärmekapazität realer Gase bei konstantem Druck weist für hohe Drücke ebenfalls ein Verhalten auf, das deutlich von dem eines idealen abweicht. Sie hat im kritischen Punkt eine Unstetigkeitsstelle und weist oberhalb des kritischen Druckes ein deutliches Maximum bei der

„Verdampfungstemperatur“ auf. Man kann $c_p(T, p)$ ebenfalls aus einer gegebenen thermischen Zustandsgleichung analytisch berechnen. Für eine der sehr üblichen druckexpliziten Formen bietet es sich an, dabei einen Weg über die Berechnung der Inneren Energie und der spezifischen Wärmekapazität bei konstantem Volumen zu wählen. Für den Zusammenhang der beiden Wärmekapazitäten ergibt sich für reale Gase der folgende Zusammenhang.

$$(17) \quad c_p(T, p) = c_v(T, v) - T \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_v \left(\frac{\partial p}{\partial v} \right)_T$$

Hierbei kann die spezifische Wärmekapazität bei konstantem Volumen über ihre Definition (Gl. 18) aus der inneren Energie berechnet werden.

$$(18) \quad c_v = \left(\frac{\partial u}{\partial T} \right)_v$$

Für diese kann aus dem totalen Differential mittels einer gegebenen druckexpliziten Zustandsgleichung (Gl. 7 oder 8) und einer Maxwellbeziehung (Gl. 20) ein analytischer Ausdruck gewonnen werden.

$$(19) \quad du = \left(\frac{\partial u}{\partial T} \right)_v dT + \left(\frac{\partial u}{\partial v} \right)_T dv$$

$$(20) \quad \left(\frac{\partial u}{\partial v} \right)_T = T \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_v - p$$

2.2.3. Phasengleichgewicht

Speziell die Mischung von Wasserstoff und Sauerstoff bei den hier betrachteten Testfällen ist die Abweichung vom idealen Mischverhalten sehr deutlich. Neben der abweichenden Mischungsdichte im Allgemeinen, ergibt sich für die Mischung dieser beiden Komponenten ein kritischer Druck der Mischung, der deutlich oberhalb des kritischen Druckes der Reinstoffe liegt. Dies führt dazu, dass für spezielle Zusammensetzungen die Mischung einen unterkritischen Zustand einnimmt und somit möglicherweise in zwei Phasen zerfällt. Die Phasengrenzen für eine spezielle Mischungszusammensetzung können im Überkritischen durch die Lösung des Gleichungssystems 21 mittels der Fugazitäten der Einzelkomponenten der Mischung berechnet werden [18].

$$(21) \quad \begin{aligned} \phi_{O_2}^l \cdot x_{O_2}^l - \phi_{O_2}^g \cdot x_{O_2}^g &= 0 \\ \phi_{H_2}^l \cdot (1 - x_{O_2}^l) - \phi_{H_2}^g \cdot (1 - x_{O_2}^g) &= 0 \end{aligned}$$

Diese können ebenfalls für die jeweilige Phase aus der gegebenen Zustandsgleichung ermittelt werden. Es gilt:

$$(22) \quad RT \ln \phi_i = \int_v^\infty \left[\left(\frac{\partial p}{\partial n_i} \right)_{T, v, n_j} - RT/v \right] dv$$

2.3. Numerisches Lösungsschema

Der Strömungslöser ANSYS CFX ist ein druckbasierter gekoppelter Löser. Hier wird anfangs ein hydrodynamisches System bestehend aus den Gleichungen für die Impulserhaltung und einer Druckgleichung gelöst. Anschließend werden nacheinander Gleichungen für die Energie, die Turbulenz und die Massenbrüche der einzelnen Komponenten gelöst.

Ein druckbasierter Ansatz bietet sich für die Simulation des gegebenen Problems an, da die im Strömungsgebiet auftretenden Machzahlen deutlich unterhalb der Schallgeschwindigkeit liegen ($Ma < 0.2$). Für derart geringe Strömungsgeschwindigkeiten laufen dichte-basierte Löser nur bei sehr geringen Zeitschritten stabil, was sehr lange Rechenzeiten bedeutet.

Nachteilig am druckexpliziten Ansatz ist, dass häufig ein serielles Lösungsverfahren angewendet wird, was einen rechnerischen Mehraufwand zu den meist gekoppelt gelösten dichte-basierten Systemen bedeutet. Dies ist in CFX nicht der Fall, da hier ein gekoppeltes druck-basiertes Gleichungssystem gelöst wird. Ein nahezu unumgänglicher Nachteil des druck-basierten Ansatzes ist jedoch die im Vergleich zum dichte-basierten Ansatz aufwendigere Ermittlung der Dichte aus einer druckexpliziten kubischen Zustandsgleichung.

3. EXPERIMENTELLER AUFBAU

3.1. Experimenteller Aufbau

Zur Validierung des kommerziellen CFD-Lösers ANSYS-CFX wurden zwei verschiedene Betriebspunkte des Mascotte Prüfstandes der ONERA verwendet. Die Randbedingungen für die Simulation wurden den Proceedings zum 2nd und 3rd IWRCM entnommen [2,3]. Hier wurden die Betriebspunkte A-60 und C-60 [6] des Mascotte-Prüfstandes V03 als Testfälle RCM-3 und RCM-2 veröffentlicht. Die Einspritzung von Brennstoff und Oxidator in einen modernen Hochdruck Raketenantrieb erfolgt über eine Vielzahl von Koaxialinjektoren, hinter denen Wasserstoff und Sauerstoff als Diffusionsflamme abbrennen. Am Mascotte-Prüfstand wird die Flamme an einem dieser Koaxialinjektoren untersucht. Der Injektor (Abb. 2) besteht aus einem Zentralrohr für Sauerstoff mit einem Durchmesser von 3.6 mm am Einlass, der sich mit einem Winkel von 8° auf einen Durchmesser von 5 mm am Kammereintritt aufweitet. Der Wasserstoff wird koaxial durch einen Ring eingespritzt, der einen Innendurchmesser von 5.6 mm und einen Außendurchmesser von 10 mm aufweist [3].

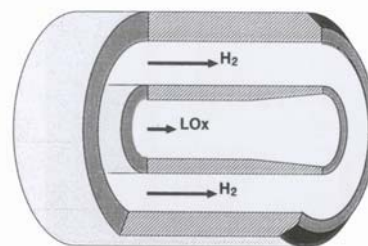


BILD 1. Mascotte Koaxialinjektor [3]

Die Hochdruckbrennkammer ist in Abbildung 3 dargestellt. Sie besitzt einen quaderförmigen Brennraum der Länge 458 mm mit einem quadratischen Querschnitt von 50 mm Seitenlänge. Am unteren Ende wird die Brennkammer von einer Düse variabler Form abgeschlossen.

Für den zur Validierung verwendeten Testfall ist bekannt, dass eine Düse mit einer konvergenten Länge von 20 mm und einem minimalen Durchmesser von 9 mm verwendet wurde, um einen Kammerdruck von ca. 60 bar zu erreichen [2]. Die Kammer besteht aus rostfreiem Stahl

und ist mit 4 Quarz Fenstern für optischen Zugang bestückt, deren Innenseiten mit Hilfe eines Heliumfilms gekühlt werden. Die zwei Seitenfenster sind 50 mm hoch und 100 mm lang. Die Fenster an Kammerdecke und -boden sind bei gleicher Länge nur 10 mm breit und dienen als Laserzugang [1].

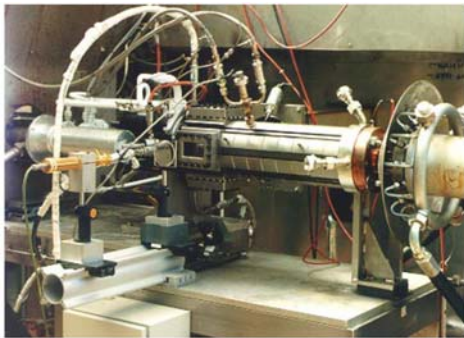


BILD 2. Mascotte Hochdruck Prüfstand V03 [1]

Der Prüfstand wird mit flüssigem Sauerstoff bei ca. 85 K und gasförmigem Wasserstoff bei ca. 280 K betrieben. Diese Version V03 des Prüfstandes erlaubt Betriebszustände oberhalb des kritischen Druckes von Sauerstoff ($p_{c,O_2} = 50,43 \text{ bar}$). In der Brennkammer können hier Drücke bis zu 100 bar erreicht werden [1]. Dies bedeutet für Wasserstoff überkritische und für Sauerstoff transkritische ($T < T_{\text{kritisch}}$) Einspritzbedingungen. Die Randbedingungen, die sich aus den Messungen für den simulierten Fall A-60 ergeben, sind in Tabelle 1 zusammengefasst. Die Helium-Filmkühlung wird in diesem Fall vernachlässigt.

A-60 (RCM-3 – 2 nd IWRCM)		
Betriebszustand	H2	O2
Druck [bar]	60	
Massenstrom [g/s]	70	100
Temperatur [K]	287	85
Dichte [kg/m ³]	5,51	1177,8
Velocity [m/s]	236	4,35

TAB 1. Mascotte-Betriebspunkt A-60 (RCM-3) [2]

Für den Fall C-60 ergeben sich zwei unterschiedliche Sätze von Randbedingungen, je nach dem ob die Filmkühlung berücksichtigt wird oder nicht. Die Randbedingungen sind in Tabelle 2 zusammengefasst.

C-60 (RCM-2 – 3 rd IWRCM)			
Betriebszustand	H2	O2	He
Druck [bar]	57,7 / 67		
Massenstrom [g/s]	45/42	100/10 5	-/24,5
Temperatur [K]	275	83	280

TAB 1. Mascotte-Betriebspunkt C-60 (RCM-2) ohne und mit Filmkühlung. [3]

3.2. Rechengebiet

Für erste Untersuchungen des A-60 Testfalls wurde die Kammer rotationssymmetrisch mit einem Radius von 28,81 mm modelliert, um das Kammervolumen zu reproduzieren. Am unteren Ende wird die Kammer von einer Düse mit minimalem Radius von 15 mm abgeschlossen, um Rückströmungen ins Rechengebiet zu

vermeiden. Der Injektor wurde realistisch modelliert und hat eine Länge von 50 mm, um ein möglichst voll ausgebildetes turbulentes Rohrprofil zu erreichen.

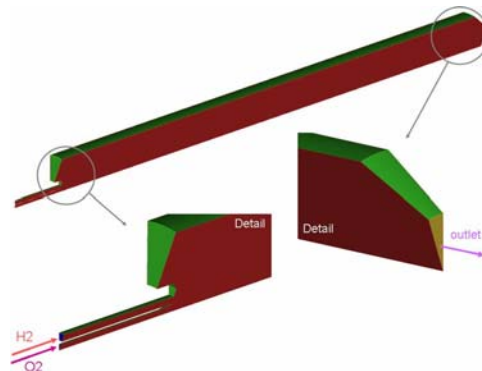


BILD 3. 20°-Sektor des rotations-symmetrischen Modells der Brennkammer für die CFD-Simulation

Für erste Untersuchungen wurde ein 20° Sektor modelliert. Dieser wurde anfänglich unstrukturiert vernetzt. Anschließend wurde das Netz in mehreren Schritten lösungsadaptiv verfeinert. Später wurde die Kammer mit einem weniger diffusiven strukturierten Netz aufgelöst. Eine genauere Darstellung der verwendeten Netze ist in Abbildung 9 zu finden.

Der modellierte Sektor wurde anschließend auf einen Winkel von 2° reduziert, um eine quasi zweidimensionales Modell zu erzeugen. Dieses wurde mit einer Schicht Quaderelemente vernetzt. Dies ist die einzige Möglichkeit, um in CFX ein zweidimensionales Problem zu lösen, da kein echter 2D-Löser verfügbar ist. Das Strömungsgebiet wurde mit 200 x 1700 Elementen aufgelöst (radiale x axiale Richtung). Als Einlassrandbedingungen wurden die in Tabelle 1 gegebenen Massenströme aufgeprägt. Am Auslass wurde ein statischer Druck von 60 bar vorgegeben. Die Kammerwände wurden als glatt und adiabatisch angenommen.

Für die Simulation des Falles C-60 wurde ein realistisches 3D-Modell der Brennkammer erzeugt, um auch Filmkühlungseffekte realistisch abbilden zu können. Da sich die ovale Form der Öffnungen für die Filmkühlung nur schwer mit einem strukturierten Netz reproduzieren lässt, wurden sie rechteckig modelliert. Hierbei wurde die Breite der Schlitze dahingehend modifiziert, dass die gesamte Einlassfläche erhalten bleibt, um den Impuls auf die Kammerströmung trotz der modifizierten Form realistisch abzubilden.

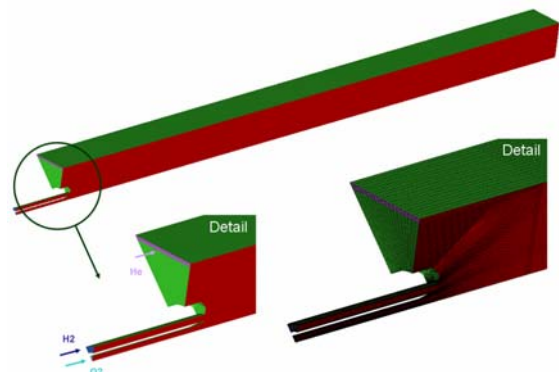


BILD 4. 45°-Sektor der realen Kammergeometrie für die CFD-Simulation

die Simulation des C-60 Falles

4. ERGEBNISSE

4.1. Modellierung der Edukte

Für die Druck- und Temperaturbedingungen, die bei der Einspritzung von Brennstoff und Oxidator am Mascotte Prüfstand vorherrschen, weicht der Zusammenhang zwischen Druck, Dichte und Temperatur speziell für Sauerstoff sehr deutlich vom Verhalten eines idealen Gases ab.

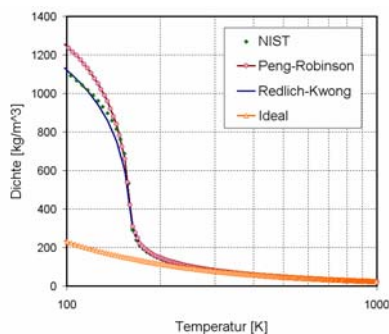


BILD 5. Sauerstoff Dichte bei konstantem Druck von 60 bar aus der idealen, Redlich-Kwong und Peng-Robinson Zustandsgleichung verglichen mit NIST [8]

Auch bei moderaten Temperaturen sind noch Abweichungen vom idealen Gasverhalten aufgrund der hohen Drücke zu beobachten. Deshalb wird auch Wasserstoff mittels einer Realgaszustandsgleichung modelliert. Hier liefert allerdings auch die ideale Zustandsgleichung eine sehr gute Übereinstimmung mit den von NIST [8] zur Verfügung gestellten Werten. Alle Verbrennungsprodukte werden aufgrund der hohen Temperaturen als ideale Gase modelliert. Für die Berechnung der Dichte von Wasserstoff und Sauerstoff sind in CFX zwei verschiedene Zustandsgleichungen verfügbar; die Redlich-Kwong Zustandsgleichung und die Peng-Robinson Gleichung (Gleichung 7 und 8). Die Dichten, welche aus diesen Zustandsgleichungen resultieren, sind in Abbildungen 6 und 7 mit denen der NIST Datenbank [8] und der aus der idealen Zustandsgleichung (Gl. 6) resultierenden Dichte verglichen.

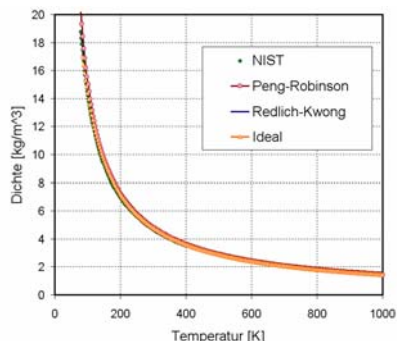


BILD 6. Wasserstoff Dichte bei konstantem Druck von 60 bar aus der idealen, Redlich-Kwong und Peng-Robinson Zustandsgleichung verglichen mit NIST [8]

Für Sauerstoff liefert die Redlich-Kwong Zustandsgleichung die beste Übereinstimmung mit den NIST Daten. Die Peng-Robinson Gleichung überschätzt die Dichte um ca. 200 kg/m³ bei der Einspritztemperatur von Sauerstoff ($T=80\text{K}$), dies ist eine Abweichung von den bei NIST gegebenen Werten um 15% und führt zu einer unterschätzten Geschwindigkeit am Injektoraustritt und dadurch zu einem zu kleinen Impulsfluss, der in einer kürzeren Flamme resultiert. Die Idealgas-Formulierung unterschätzt die Sauerstoffdichte nahe und unterhalb der kritischen Temperatur. Wie Abbildung 7 zeigt, wird die Wasserstoffdichte von allen Zustandsgleichungen sehr gut wiedergegeben.

Eine andere Stoffgröße, die die Flammenform und die Temperatur beeinflussen könnte, ist die Wärmekapazität. Diese kann (wie in 2.3 beschrieben) aus der verwendeten Zustandsgleichung berechnet werden. Ergebnisse für die die dort beschriebenen kubischen Zustandsgleichungen für Wasserstoff und Sauerstoff sind in den Abbildungen 8 und 9 aufgetragen. Bild 7 zeigt, dass die Wärmekapazität von Sauerstoff, die aus der Redlich-Kwong Gleichung resultiert die NIST Daten unterhalb der kritischen Temperatur deutlich um einen Faktor 2 überschätzt. Der kalte Sauerstoff-Jet erwärmt sich dadurch langsamer, was zu einer Überschätzung der Dichte führt. Dies könnte sich in gegenteiliger Weise zur Dichte auf die Flammenlänge auswirken. Die Wärmekapazität von Wasserstoff wird durch beide Zustandsgleichungen ziemlich gut abgeschätzt.

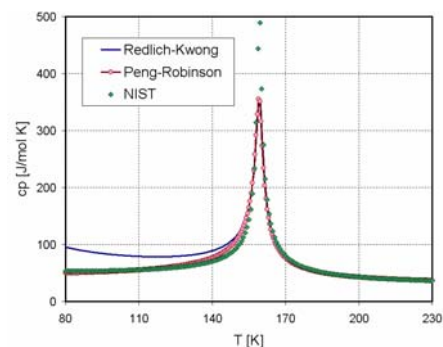


BILD 7. Sauerstoff-Wärmekapazität bei konstantem Druck von 60 bar aus der idealen, Redlich-Kwong und Peng-Robinson Zustandsgleichung verglichen mit NIST-Daten [8]

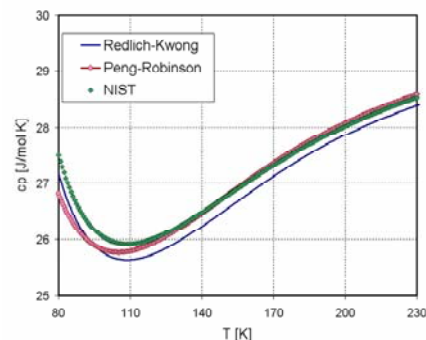


BILD 8. Wasserstoff Wärmekapazität bei konstantem Druck von 60 bar aus der idealen, Redlich-Kwong und Peng-Robinson-Zustandsgleichung verglichen mit NIST-Daten [8]

4.2. Netzstudie

Für erste Untersuchungen wurde ein 20° Sektor des rotationssymmetrischen Modells unstrukturiert vernetzt. Die Netzfeinheit wurde hierbei in mehreren Schritten an die Lösung adaptiert (Abb. 9). Es konnte jedoch keine netzkonvergente Lösung zu erzielt werden. Aus diesem Grund wurde die Kammer anschließend mit einem weniger diffusiven strukturierten Netz aufgelöst. Hier konnte sehr schnell eine netzunabhängige Lösung erzielt werden. Um den Rechenaufwand weiter zu verringern wurde der modellierte Sektor anschließend auf 2° reduziert.

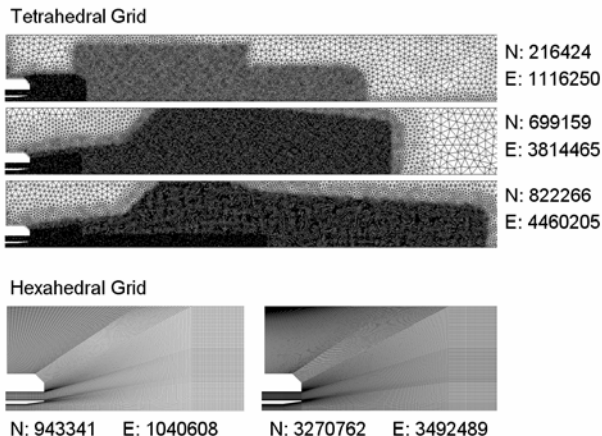


BILD 9. Strukturierte und unstrukturierte Netzkonfiguration der Netzstudie

Die drei linken Flammen zeigen sehr starke Effekte der Netzdichte auf das Ergebnis der Simulation. Bei jeder weiteren Verfeinerung wurde die Flamme länger. Der Versuch, eine netzunabhängige Lösung zu erreichen wurde bei einer Netzgröße von fast 5 Mio. Elementen erfolglos abgebrochen und vom Tetraedernetz wurde auf ein weit weniger diffusives strukturiertes Gitter übergegangen. Hier konnte bereits für ein Netz mit einer Elementanzahl von 1 Mio. eine netzkonvergente Lösung erreicht werden. Zusätzlich bietet ein strukturiertes Netz die Möglichkeit, ein quasi 2D Modell mit einer Elementschicht in radialer Richtung zu erzeugen, was den Rechenaufwand nochmals deutlich reduziert.

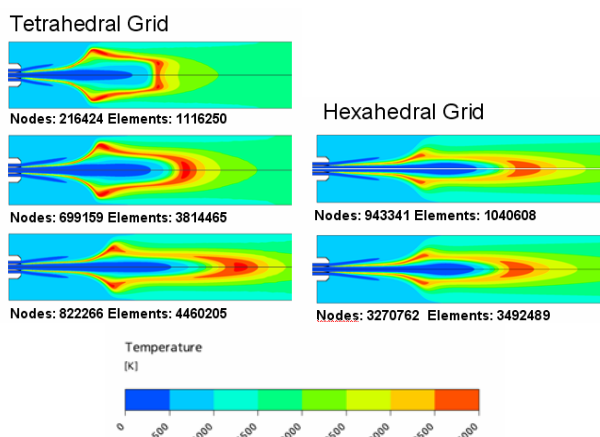


BILD 10. Aus Netzstudien resultierende Temperaturverteilungen in der Flamme für strukturierte und unstrukturierte Gitter.

4.3. Vergleich Simulation Experiment

Für die in 4.2 gezeigten Ergebnisse wurde die turbulente Verbrennung mittels eines einfachen Eddy Dissipation Modells mit Ein-Schritt Chemie ($2\text{H}_2 + \text{O}_2 \rightarrow 2\text{H}_2\text{O}$) modelliert. Dieses Modell führt zu maximalen Temperaturen bis zu 4200 K (Bild 10), die die adiabate Flammentemperatur von Wasserstoff und Sauerstoff von 3600 K deutlich übersteigen.

Die Temperaturverteilung in der Flamme kann durch die Anwendung einer Flamelet Models verbessert werden, welches mehr Spezies berücksichtigt. Hier wurde das Representative Interactive (RIF) Flamelet Modell (Peters^{17/18}), das bereits in CFX implementiert ist, verwendet. Dieses Modell berücksichtigt zusätzlich zu den Hauptspezies die Radikale H, O, OH, H₂O₂, und HO₂. Bei der Verwendung von CFX-RIF ist es nicht möglich, reinen Sauerstoff als Oxidator vorzugeben. Stattdessen muss immer eine Mischung aus Sauerstoff und Stickstoff vorgegeben werden. Der Massenbruch von Stickstoff wurde auf den minimal möglichen Wert von 0.001 gesetzt. Die maximalen Temperaturen, die sich aus dem Flameletmodell ergeben liegen ca. 1000 K unterhalb derer, die sich aus dem Eddy Dissipation Modell ergeben. Mit einem Wert von maximal 3200 K sind die Temperaturen wesentlich realistischer. Frühere Untersuchungen haben gezeigt, dass die Wahl des Verbrennungsmodells nur vernachlässigbare Effekte auf die Flammenform hat [21].

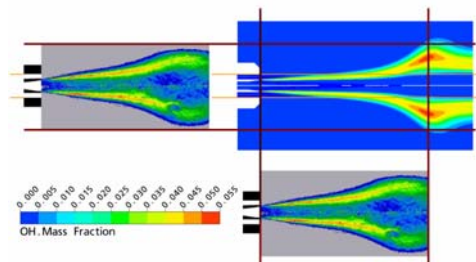


BILD 11. Vergleich der resultierenden OH-Verteilung aus der CFD mit Chemolumineszenz Messungen [6]

In Abbildung 11 ist eine Chemolumineszenz-Messung des OH Radikals mit der aus der Simulation resultierenden OH Verteilung verglichen. Die Flamme in der CFD Simulation ist länger als die im Experiment beobachtete. Auch der Öffnungswinkel der Flamme wird von der CFD nicht richtig wiedergegeben. Direkt hinter dem Injektoraustritt ist der Öffnungswinkel deutlich zu klein, wohingegen die maximale radiale Ausdehnung etwas zu groß vorausgesagt wird. Ein quantitativer Vergleich der OH-Verteilung ist nicht möglich, da das verwendete Messverfahren nur eine qualitative Aussage erlaubt. Allerdings gibt es auch in der qualitativen Verteilung Unterschiede zwischen Experiment und CFD. Die maximalen OH- Konzentrationen treten im Experiment in den dünnen Verbrennungsgebieten direkt hinter dem Injektoraustritt auf, wohingegen die Maxima in der Simulation in der Region der maximalen radialen Ausdehnung der Flamme und in der Flammenspitze liegen. Diese Abweichung lässt sich möglicher Weise durch die Vernachlässigung der Spezies OH* erklären, die durch molekulare Schwingungen entsteht.

Beim Vergleich der axialen Temperaturverteilung der Flammen aus beiden Verbrennungsmodellen zeigt sich, dass das Temperaturmaximum auf der Rotationsachse, welches die Flammenspitze kennzeichnet, für beide Modelle dieselbe axiale Position hat. Allerdings liegt diese deutlich weiter stromab als im Experiment. Das EDM überschätzt die Temperatur in der Flammenspitze, wohingegen sie durch das RIF-Modell signifikant unterschätzt wird. Dies liegt sehr wahrscheinlich an einer überschätzten skalaren Dissipationsrate, die zur Kopplung des Strömungsfeldes mit den Flamelet-Tabellen dient, was durch eine noch zu verbessernde Turbulenzmodellierung hervorgerufen werden könnte.

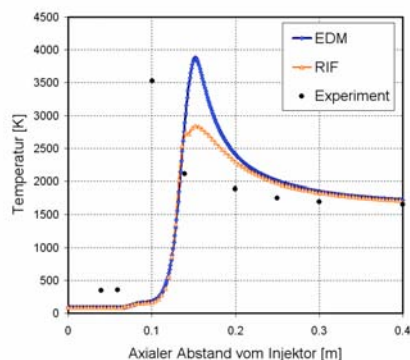


BILD 12. Vergleich der axialen Temperaturverteilung aus Simulation und Experiment [7,9]

Da die Stoffeigenschaften in CFX in den Standardeinstellungen meist sehr einfach modelliert sind, kommt es häufig zu einer signifikanten Abweichung zu den realen Stoffeigenschaften, besonders in trans- und überkritischen Regionen. Die Einflüsse der getroffenen Vereinfachungen in der Modellierung der Transportgrößen, Diffusionskoeffizienten und der Verwendung unterschiedlicher Zustandsgrößen wurden in [21] eingehend untersucht, leider konnte keine nennenswerte Verbesserung der Flammenform erzielt werden.

Bild 13 zeigt, dass die überschätzte Dichte, welche aus der Peng-Robinson Formulierung hervorgeht, den größeren Einfluss auf die Flammenlänge hat. Die Flammenspitze ist ein kleines bisschen weiter stromauf, aber die axiale Position der maximalen radialen Ausbreitung bleibt nahezu die gleiche. Leider ist die kleine Verbesserung der Übereinstimmung mit dem Experiment der unphysikalischen Überschätzung der Sauerstoffdichte durch die Peng-Robinson Gleichung zuzuschreiben und somit hinfällig.

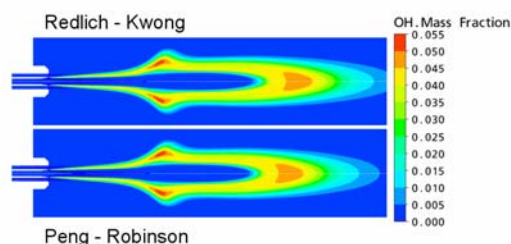


BILD 13. Vergleich der OH-Verteilungen aus Simulationen mit Redlich-Kwong und Peng-Robinson Zustandsgleichung

Die Überschätzung der Flammenlänge zeigt sich im Fall C-60, der dem 3rd International Workshop on Rocket Combustion Modelling als Grundlage diente, ebenfalls sehr deutlich. Dieser Testfall zeichnet sich dadurch aus, dass bei gleichem Sauerstoffmassenstrom ein wesentlich weniger Wasserstoff injiziert wird. Da sich der komprimierende Effekt des Wasserstoff Coflows verringert wird, ist die entstehende Flamme im Vergleich zum A-60 Fall deutlich länger.

Für diesen Testfall wurden Simulationen mit und ohne Filmkühlungseffekte durchgeführt. Es zeigt sich, dass der zusätzliche Kühlluft-Massenfluss, der die Flamme einschließt, einen komprimierenden Effekt hat, was dazu führt, dass die sich die maximale radiale Ausdehnung für den Fall mit Filmkühlung verringert.

Abbildung 14 vergleicht zur Abschätzung der Flammenform die aus den Simulationen resultierenden Temperaturverteilungen mit gemessenen OH-Verteilungen. Wie bereits beschrieben zeigt sich auch hier, dass die axiale Position der maximalen radialen Ausdehnung der Flamme in der Simulation verglichen mit dem Experiment wesentlich weiter stromab liegt. Die maximale radiale Ausdehnung der Flamme wird jedoch unter Berücksichtigung von Filmkühlungseffekten sehr gut wiedergegeben.

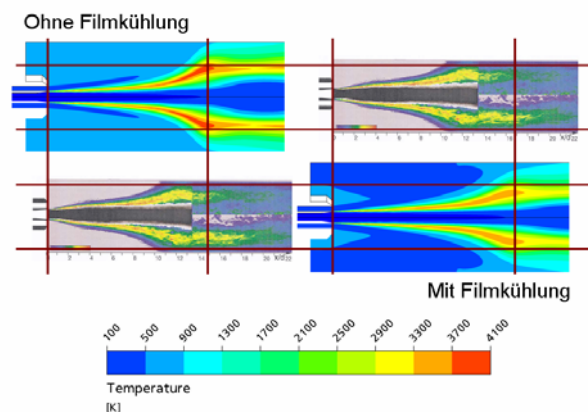


BILD 14. Vergleich der resultierenden OH-Verteilungen aus der CFD mit Chemolumineszenz Messungen

Eine konkrete Aussage über die Abweichung der gesamten Flammenlänge resultierend aus Experiment und CFD ist nicht möglich, da keine gemessene axiale Temperaturverteilung für diesen Fall verfügbar ist.

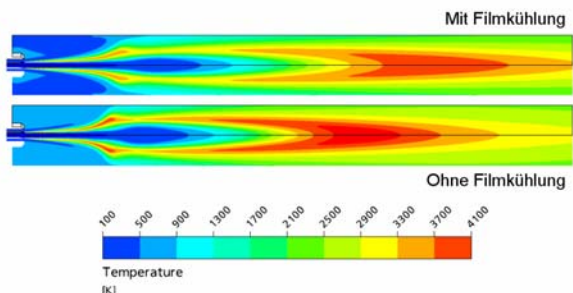


BILD 15. Vergleich der Temperaturverteilungen des C-60 Testfalles mit und ohne Filmkühlung.

4.4. Mischung realer Gase

Die generelle Überschätzung der Flammenlänge für die oben beschriebenen Testfälle kann möglicherweise durch die Annahme idealen Mischungsverhaltens in CFX erklärt werden. Diese sehr gravierende Vereinfachung wird in diesem Code bis jetzt nicht nur für Gemische idealer Gase, sondern auch für Realgas-Mischungen in Regionen hohen Druckes und niedriger Temperatur angewendet. Dies kann momentan noch nicht umgangen werden, da dem Nutzer noch kein direkter Zugang zum internen Mischungsprozess gewährt wird. Diese Annahme führt zu einer signifikanten Fehlrepräsentation der Gesamtdichte der Mischung. In Bild 16 ist für eine Wasserstoff-Sauerstoff-Mischung mit einem molaren Anteil von Sauerstoff von 75% die von CFX berechnete Mischungsdichte Ergebnissen gewöhnlicher Mischungsregeln (über die kritischen Eigenschaften oder über Parameter im Fall der Peng-Robinson Gleichung) gegenübergestellt. Diese beiden Herangehensweisen liefern sehr ähnliche Ergebnisse für die Mischungsdichte, die sehr deutlich von den von CFX berechneten abweichen. Diese enorme Unterschätzung führt zu einer Überschätzung im Impulsfluss und ist dadurch möglicherweise der Grund für die Abweichung zum Experiment in der Flammenlänge.

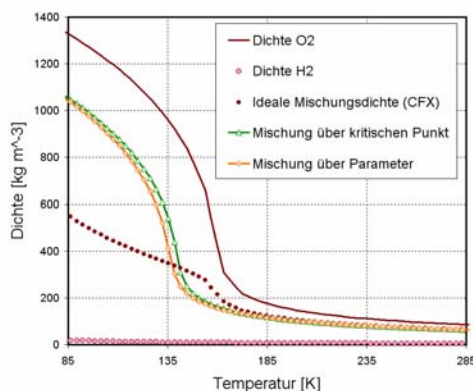


BILD 16. Vergleich der Mischungsdichten aus verschiedenen Realgasmischungsregeln mit den Ergebnissen aus CFX.

5. ZUSAMMENFASSUNG UND AUSBLICK

In diesem Paper, wurde Realgas Verbrennung mittels des kommerziellen CFD-Lösers ANSYS CFX an zwei verschiedenen Testfällen validiert, die am Mascotte Hochdruckprüfstand V03 der ONERA gemessen wurden. Hierbei handelt es sich um die Fälle A-60 und C-60, die dem 2nd und 3rd International Workshop on Rocket Combustion Modelling zu Grunde lagen.

Am Testfall A-60 wurde eine spezielle Vorgehensweise für spätere Simulationsvorhaben entwickelt. Hierzu wurde zu Beginn der Untersuchungen eine Netzstudie durchgeführt, die zu dem Ergebnis kam, das nur eine strukturierte Diskretisierung des Rechengebietes die Grundlage zu netzunabhängigen numerischen Untersuchungen bietet.

Darauf aufbauend wurden sowohl Effekte des

verwendeten Verbrennungs- und Turbulenzmodells als auch der Realgasformulierung in Dichte, Diffusivität und Transporteigenschaften durchgeführt [21].

Trotz einer sehr exakten Formulierung der realen Eigenschaften der Strömung konnte die für den A-60 Fall gemessenen Flammenlängen nicht vollständig reproduziert werden. Die qualitative Form konnte sehr gut wiedergegeben werden.

In ähnlicher Weise weicht auch die für den C-60 Fall resultierende Flamme von den Messergebnissen ab. Dieser Fall wurde mit und ohne Berücksichtigung von Filmkühlungseffekten untersucht. Hierbei konnten deutliche Effekte der Filmkühlung auf die Flamme beobachtet werden. Der zusätzliche Helium-Coflow hat eine komprimierende Wirkung auf die Flamme und die radiale Flammenausbreitung stimmt dadurch mit der Messung sehr gut überein. Die axiale Flammenlänge weicht für diesen Fall jedoch sowohl mit als auch ohne Filmkühlung noch weiter von der gemessenen ab, als für den A-60 Fall.

Der Hauptgrund für diese Abweichung liegt wahrscheinlich in der Annahme einer idealen Mischung in CFX begründet. Wie Abbildung 16 zeigt, entstehen hieraus beträchtliche Abweichungen zu den aus konventionellen Mischungsregeln resultierenden Ergebnissen für die Mischungsdichte, was zweifellos einen enormen Effekt auf die Flammenlänge hat. Um dieses Problem zu beheben wird in Zusammenarbeit mit ANSYS wird diese Annahme demnächst überarbeitet werden und mittels einer zur Verfügung gestellten Schnittstelle eine konsistente Formulierung für die realen Mischungsgrößen implementiert werden.

Die Implementierung dieser Mischungsregeln in einen druckbasierten Strömungslöser stellt allerdings aufgrund der speziellen physikalischen Abläufe in diesem transkritischen Gebiet neue Herausforderungen an die Modellierung der Mischungsdichte, -enthalpie und -entropie.

Bei der Mischung von Wasserstoff und Sauerstoff speziell unter den im Mascottefall vorherrschenden Bedingungen, kann es unter Umständen dazu kommen, dass obwohl für die Reinstoffe ein überkritischer Zustand vorherrscht, der kritische Druck der Mischung für spezielle Zusammensetzungen von Wasserstoff und Sauerstoff deutlich über dem vorherrschenden Kammerdruck im Versuchsstand liegen und somit die vorherrschende Mischung in wiederum in zwei Phasen zerfällt.

Abbildung 17 zeigt die, aus der Peng-Robinson Gleichung berechneten temperaturabhängigen Gleichgewichtszusammensetzungen, die sich für eine Mischung von Wasserstoff und Sauerstoff bei verschiedenen Drücken oberhalb des kritischen Druckes von Sauerstoff ergeben. Für einen Druck von 60 bar ergibt sich ein sehr ausgeprägtes Zweiphasengebiet (blaue Kurve). Zusätzlich ist für einen Druck von 60 bar die Mischungstemperatur von Wasserstoff und Sauerstoff dargestellt, die sich für Reinstofftemperaturen entsprechend denen des Testfalls ergibt. Die Kurve der Mischungstemperaturen schneidet sehr deutlich das Zweiphasengebiet für den gleichen Druck.

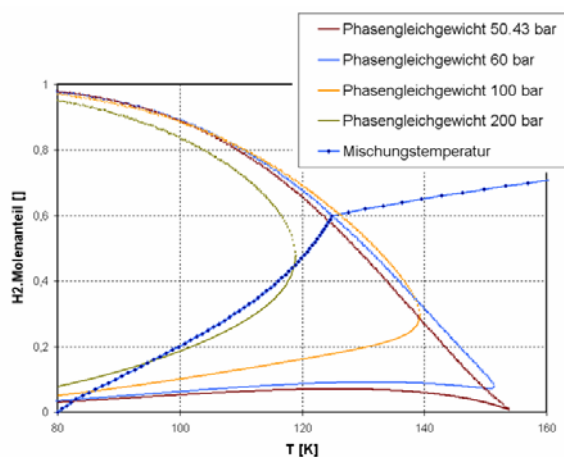


BILD 17. Phasengleichgewicht für H₂/O₂ Mischungen aus Peng-Robinson Zustandsgleichung (___ Gas, ___ Flüssigkeit) mit realer Mischungstemperatur für Reinstofftemperaturen $T_{H_2} = 280$ K und $T_{O_2} = 80$ K

Auch wenn im Experiment an diesem Versuchsaufbau keine Zweiphasenbildung beobachtet werden konnte stellt dieses Phänomen dennoch eine Herausforderung für Modellierung der Mischung in der CFD dar. Für die Implementierung in einen CFD-Code ergibt sich die Problematik, dass bei der Berechnung des spezifischen Volumens aus der kubischen Zustandsgleichung für Zustände im Zweiphasengebiet mehr als ein reelles Ergebnis existiert. Dies erfordert eine gesonderte Behandlung.

Da in der vorliegenden Arbeit jedoch darauf verzichtet werden soll, eine komplette Mehrphasensimulation durchzuführen, muss eine effiziente Modellierung gefunden werden, die diesem Phänomen Rechnung trägt und einen konsistenten, realistischen Wert für die Mischungsdichte und -temperatur liefert.

Auch für die Enthalpie und Entropie der Mischung müssen Formulierungen gefunden werden, die aus den konkreten Werten für die einzelnen Phasen einen korrekten Wert für die Mischung modellieren.

6. REFERENZEN

- [1] Habiballah, M., Orain, M., Grisch, F., Vingert, L., and Gicquel, P., "Experimental studies of high-pressure cryogenic flames on the Mascotte facility" *Combustion Science and Technology*, Vol. 178, 2006, 101-128.
- [2] Habiballah, M., Zurbach, S., "Test Case RCM-3, Mascotte single injector" *Proceedings of the 2nd International Workshop on Rocket Combustion Modeling*, Lampoldshausen 2001
- [3] Vingert, L., Nicole, A., Habiballah, M., "Test Case RCM-2, Mascotte single injector" *Proceedings of the 3rd International Workshop on Rocket Combustion Modeling*, Vernon, France 2006
- [4] Vingert, L., Habiballah, M., Vuillermoz, P. and Zurbach, S., "Mascotte, a test facility for cryogenic combustion research at high pressure" 51st *International Astronautical Congress (IAF)*, 2000.
- [5] CFX, Software Package, Ver. 11.0, ANSYS Germany, 2007.
- [6] Candel, S., Herding, G., Synder, R., Scoufflaire, P.,

- Rolon, C., Vingert, L., Habiballah, M., Grisch, F., Péalat, M., Bouchardy, P., Stepowski, D., Cessou, A., Colin, P., "Experimental Investigation of Shear Coaxial Cryogenic Jet Flames", *Journal of Propulsion and Power*, Vol. 14, No. 5, 1998, 826-834.
- [7] Bouchardy, P., Grisch, F., Clauss, W., *International Workshop on Research Status and Perspectives in Liquid Rocket Combustion Chamber Flow Dynamics*, Paris, 1999, p.345.
- [8] E.W. Lemmon, M.O. McLinden, D.G. Friend. 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>), 2005
- [9] Benarous, A., Liazid, A. and Karmed, D., "H₂/O₂ Combustion under Supercritical Conditions", Third European Combustion Meeting ECM, 2007.
- [10] Peters, N., "Turbulent Combustion," Cambridge University Press, Cambridge, 2002.
- [11] Peters, N., "Laminar Diffusion Flamelet Models in Non-Premixed Turbulent Combustion," *Prog. Energy Combust. Sci.*, Vol. 10, 1984, 319-339
- [12] Harstad, G., Miller, R. S., and Bellan J., "Efficient high pressure equations of state", *AIChE Journal*, Vol. 43, No. 6, 1997, 703-723.
- [13] Tsonopoulos, C. and Heidman J. L., "High pressure vapor-liquid equilibria with cubic equations of state", *Fluid Phase Equilibria*, Vol. 29, 1986, 391-414.
- [14] Miller, R. S., Harstad, G. and Bellan, J., "Direct numerical simulations of supercritical fluid mixing layers applied to heptane-nitrogen", *J. Fluid Mech.*, Vol. 436, No. 6, 2001, 1-39.
- [15] Oefelein, J., "Mixing and combustion of cryogenic oxygen-hydrogen shear-coaxial jet flames at supercritical pressure", *Combustion Science and Technology*, Vol. 178, 2006, 229-252.
- [16] Miller, R. S., Harstad, G. and Bellan, J., "Evaluation of equilibrium and non-equilibrium evaporation models for many-droplet gas-liquid flow simulations", *International Journal of Multiphase Flow*, Vol. 24, 1998, 1025-1055.
- [17] Yang, V., "Modeling of Supercritical Vaporization, Mixing, and Combustion Processes in Liquid-Fueled Propulsion Systems", *Proceedings of the Combustion Institute*, Vol. 28, 2000, 925-942.
- [18] Delplanque, J.-P. and Sirignano, W. A., "Numerical study of the transient vaporization of an oxygen droplet at sub- and super-critical conditions", *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 36, No. 2, 1993, 303-314.
- [19] Daou, J., Haldenwang, P. and Nicoli, C., "Supercritical Burning of Liquid Oxygen (LOX) Droplet with Detailed Chemistry", *Combustion and Flame*, Vol. 101, 1995, 153-169.
- [20] Zong, N. and Yang, V., "Cryogenic Fluid Jets and Mixing Layers in Transcritical and Supercritical Environments", *Combustion Science and Technology*, Vol. 178, 2006, 193-227.
- [21] Poschner, M. und Pfitzner, M., "Real gas CFD simulation of supercritical H₂-LOX combustion in the Mascotte single-injector combustor using a commercial CFD code", 46th AIAA Aerospace Science Meeting and Exhibit, 7.-10.1.2008, Reno, USA. AIAA-2008-952.