

# Numerisch effiziente Modellierung von Überschallbrennkammern mit detaillierter Kinetik

30. Januar 2005

Anatoliy Lyubar



Lehrstuhl für Thermodynamik  
Technische Universität München

Numerisch effiziente Modellierung von  
Überschallbrennkammern mit detaillierter Kinetik

Anatoliy Lyubar

Vollständiger Abdruck der von der Fakultät für Maschinenwesen  
der Technischen Universität München  
zur Erlangung des akademischen Grades eines  
DOKTOR – INGENIEURS  
genehmigten Dissertation.

Vorsitzender: Univ.-Prof. Dr.rer.nat. U. Walter  
Prüfer der Dissertation: 1. Univ.-Prof. Dr.-Ing. Th. Sattelmayer  
2. Univ.-Prof. Dr.-Ing. Chr. Mundt,  
Universität der Bundeswehr München

Die Dissertation wurde am 02.08.2004 bei der Technischen  
Universität München eingereicht und durch die Fakultät für  
Maschinenwesen am 13.12.2004 angenommen.



# Inhaltsverzeichnis

<b>Formelzeichen</b>		<b>vii</b>
<b>1 Einleitung</b>		<b>1</b>
1.1	Luftatmende Hyperschall-Transportsysteme . . . . .	1
1.2	Zielsetzung und Aufbau der Arbeit . . . . .	4
<b>2 Simulation der Strömungs- und Mischvorgänge</b>		<b>9</b>
2.1	Auswahl des Basiscodes . . . . .	11
2.2	Basiscode <i>FLUENT 5</i> . . . . .	12
2.2.1	Allgemeine Erhaltungsgleichungen . . . . .	12
2.2.2	Modellierung der Turbulenz . . . . .	15
<b>3 Modellierung der Verbrennung in Überschallströmungen</b>		<b>17</b>
3.1	Chemische Reaktionskinetik des Wasserstoff-Luft-Systems . . . . .	20
3.2	Berechnung der chemischen Reaktionsraten . . . . .	24
3.3	Auswahl des Reaktionsmechanismus . . . . .	27
3.4	Reduzierung der chemischen Reaktionskinetik . . . . .	35
3.5	Einfluss der Fluktuationen auf die Reaktionsraten . . . . .	41
3.6	Modellierung der chemischen Kinetik durch das <i>Reaction Mapping</i> . . . . .	51
3.7	Validierung des polynomialen <i>Reaction Mapping</i> . . . . .	72
3.8	Einsatz der Polynome zur Simulation der Überschallverbrennung . . . . .	75
3.9	Diskussion der Modellierungsstrategie für die Überschallverbrennung . . . . .	81
<b>4 Modellierte Konfigurationen</b>		<b>84</b>
4.1	Vorheizer . . . . .	84
4.2	SCRamjet-Modellbrennkammer . . . . .	86
4.3	Wasserstoffinjektoren . . . . .	87
<b>5 Untersuchung des Vorheizers</b>		<b>89</b>

---

5.1	Einfluss von Radikalen auf die Zündung . . . . .	89
5.2	Untersuchung der Radikalenquelle . . . . .	91
5.3	Modifizierung des Vorheizers . . . . .	97
5.4	Schlussfolgerungen . . . . .	99
<b>6</b>	<b>Strebenförmige Injektoren</b>	<b>101</b>
6.1	Rechengitter . . . . .	102
6.2	Stoßsystem . . . . .	103
6.3	Zündungszonen . . . . .	104
6.4	Grenzschichteffekte bei der Injektorumströmung . . .	106
6.5	Mischung und Zündung . . . . .	111
6.6	Zusammenfassung . . . . .	120
<b>7</b>	<b>Zweistrom-Injektor</b>	<b>122</b>
7.1	Funktionsprinzip des Zweistrom-Injektors . . . . .	124
7.2	Injektorstrom . . . . .	126
7.2.1	Diffusoren mit Innenverdichtung . . . . .	127
7.2.2	Auslegung des Diffusors . . . . .	132
7.2.3	Stoßstabilisierung . . . . .	138
7.3	Intensivierung der Mischung durch die Überströmung	143
7.4	Rechengitter . . . . .	146
7.5	Mischung, Zündung und Reaktionsausbreitung im In- jektorbereich . . . . .	148
7.6	Reaktionsausbreitung im Nachlauf des Injektors . . .	155
7.7	Parameterstudie . . . . .	160
7.8	Schlussfolgerungen . . . . .	163
<b>8</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>166</b>
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>170</b>
<b>A</b>	<b>Reaktionsschema von Warnatz</b>	<b>179</b>
<b>B</b>	<b>Orthogonale Polynome</b>	<b>181</b>

# Abbildungsverzeichnis

1.1	Modellierungskonzept . . . . .	5
3.1	Selbstzündung und Reaktionsverlauf im Konstantdruckreaktor. $p = 1 \text{ bar}$ , $T_0 = 1100 \text{ K}$ , $\phi = 1$ . . . . .	28
3.2	Zündverzugszeit in einem homogenen Konstantdruckreaktor mit verschiedenen Reaktionsmechanismen, $T_0 = 900 \text{ K}$ (oben), $T_0 = 1100 \text{ K}$ (unten) . . . . .	30
3.3	Zündverzugszeit in einem homogenen Konstantdruckreaktor mit verschiedenen Reaktionsmechanismen, $T_0 = 1500 \text{ K}$ . . . . .	31
3.4	Abhängigkeit des Zündverzugs von Temperatur und Äquivalenzverhältnis bei einem Druck von $1 \text{ bar}$ . . . . .	33
3.5	Abhängigkeit des Zündverzugs vom Äquivalenzverhältnis $\phi$ . . . . .	34
3.6	$B_i$ -Werte der Spezies in Bezug auf wichtige (oben) und notwendige (unten) Spezies während des Reaktionsverlaufs in einem Konstantdruckreaktor ( $P = 1 \text{ bar}$ ) mit den Anfangsbedingungen $T_0 = 1000 \text{ K}$ , $\phi = 1$ . . . . .	39
3.7	$B_i$ -Werte der Spezies in Bezug auf wichtige (oben) und notwendige (unten) Spezies während des Reaktionsverlaufs in einem Konstantdruckreaktor ( $P = 1 \text{ bar}$ ) mit den Anfangsbedingungen $T_0 = 1500 \text{ K}$ , $\phi = 1$ . . . . .	40
3.8	Hypothetischer zeitlicher Konzentrations- (links) und Temperaturverlauf (rechts) . . . . .	42
3.9	Temperaturverläufe im homogenen Konstantdruckreaktor für unterschiedliche Intensitäten der Temperaturfluktuationen . . . . .	48
3.10	Struktur der Lookup-Tabelle und Knotenstruktur in einem zweidimensionalen Raum . . . . .	60
3.11	Schematische Darstellung der rekursiven Auffüllung . . . . .	61

3.12	Auslegung neuer Knoten (links) und Definition des <i>realisierbaren</i> Bereiches (rechts) für einen zweidimensionalen Raum . . . . .	62
3.13	Projektion der Lookup-Tabelle in einen dreidimensionalen Raum . . . . .	64
3.14	Vereinfachte Darstellung einer multidimensionalen Zelle und Knotennummerierung innerhalb einer Zelle (links). Das lokale, normierte Zellenkoordinatensystem (rechts) . . . . .	67
3.15	Schematische Darstellung der Verbindung zwischen dem CFD-Code und dem <i>Reaction Mapping</i> . . . . .	70
3.16	Untersuchung der Interpolationsgenauigkeit für die Zeitschritte von 1e-9 s, 1e-8 s und 1e-7 s . . . . .	73
3.17	Reaktionsablauf in einem geschlossenen Behälter. Simulation mit dem CFD-Code <i>FLUENT</i> . Tabellierungszeitschritt 1e-8 s . . . . .	75
3.18	Geometrie und Eintrittsbedingungen des achsensymmetrischen Experiments von Evans . . . . .	76
3.19	Rechengitter für das Experiment von Evans. Gitterauflösung an der Injektorlippe ca. 1 $\mu m$ . . . . .	77
3.20	Vergleich der berechneten Temperaturkontur für das Experiment von Evans: oben — <i>Reaction Mapping</i> mit reduziertem Reaktionsschema, unten — <i>Finite-Rate</i> Modell mit vollständigem Reaktionsschema . . . . .	78
3.21	Berechnete und gemessene Profile der Speziesmassenbrüche entlang der Strömung. . . . .	79
3.22	Berechnete und gemessene Profile der Speziesmassenbrüche entlang der Strömung. . . . .	80
4.1	Schematische Darstellung der experimentellen Anlage	84
4.2	Geometrie der untersuchten SCRamjet-Brennkammer	86
4.3	Pylon-Injektor . . . . .	87
4.4	Keil-Injektor . . . . .	88
5.1	Reaktionskinetisches Modell zur Untersuchung des Einflusses von Radikalen und Wasser auf die Zündverzugszeit . . . . .	91



5.2	Abhängigkeit der Zündverzugszeit von den Radikalen und vom Wasser . . . . .	91
5.3	Reaktionskinetisches Modell des Vorheizers . . . . .	94
5.4	Temperatur (links), $H$ - und $OH$ -Radikale (rechts) am Austritt der Lavaldüse für verschiedene Mischungsraten . . . . .	94
5.5	Wasserstoffverbrauch in der Lavaldüse . . . . .	96
5.6	Konstruktion des Vormischers . . . . .	97
5.7	$OH-LIF$ Signal am Austritt der Lavaldüse: links - Mode 1 ohne Vormischung, rechts - Mode 2 mit Vormischung [San03] . . . . .	99
6.1	Gitterstruktur bei der Vernetzung der Rechengeometrie	103
6.2	Zweidimensionale Strömungssimulation in der Brennkammer . . . . .	105
6.3	Zündung im Nachlauf des Injektors (links) und Reaktionszone (rechts) . . . . .	106
6.4	Machzahlprofil am Austritt der Lavaldüse . . . . .	107
6.5	Untersuchung der Injektorumströmung, links Darstellung des gerechneten Dichtefeldes, rechts Schattenaufnahme . . . . .	108
6.6	Dreidimensionale Simulation des Dichtefelds bei der Injektorumströmung . . . . .	110
6.7	Unterschallzone in der Symmetrieebene 2 (s. Abbildung 6.6) . . . . .	110
6.8	Simulationsgebiet . . . . .	112
6.9	Temperaturkontur und Verteilung des eingedüsten Wasserstoffs. Luft: $T_0 = 1300\text{ K}$ $p_0 = 7.5\text{ bar}$ , $M = 2.1$ . Wasserstoff: $T_{0\text{ H}_2} = 300\text{ K}$ , $p_{0\text{ H}_2} = 24\text{ bar}$ , $M_{\text{H}_2} = 1$ . . . . .	113
6.10	Radikalenproduktion in der Symmetrieebene zwischen Eindüsungsöffnungen: Molenbruchskonturen der $H$ -, $OH$ -Radikale und des Wasserstoffs . . . . .	114
6.11	Zündung und Reaktion in Modus 1 und 2 für den strebenförmigen Injektor [San03] . . . . .	115
7.1	Zweistrom-Injektor . . . . .	124

7.2	Schematische Darstellung von Überschalldiffusoren mit gemischter Verdichtung links und mit Innenverdichtung rechts . . . . .	128
7.3	Änderung des Stoßsystems und vom Diffusor aufgenommener Massenstrom bei der Abweichung der Eintrittsbedingungen vom Auslegungspunkt. Das Stoßsystem beim Auslegungspunkt (links) und bei einer niedrigeren Anströmmachzahl (rechts) . . . . .	130
7.4	Ablenkung der Anströmung beim Geradstoß vor dem Diffusor. . . . .	131
7.5	Konstruktive Ausführung des Injektors . . . . .	133
7.6	Injektorstrom. Untersucher Bereich und analytisch berechnetes Stoßsystem (oben), numerische Simulation der Stoßwanderung (mitte), Schattenaufnahme des vor dem Injektor stabilisierten Stoßes (unten). Eintrittsbedingungen: $M = 2.1$ , $T_0 = 298 K$ , $p_0 = 7.5 bar$ . . . . .	135
7.7	Numerische Simulation des Injektorstroms. Machzahlverteilung. Eintrittsbedingungen: $M = 2.26$ , $T_0 = 298 K$ , $p_0 = 7.5 bar$ . . . . .	137
7.8	Konstruktive Ausführung der Bypassöffnungen. Draufsicht auf den Injektor. . . . .	139
7.9	Schematische Darstellung der Überströmung. Positionierung der Schnittebenen für die Darstellung der numerischen Ergebnisse. . . . .	140
7.10	Stoßstabilisierung. Numerische Strömungssimulation im Injektorbereich (oben) und Schattenaufnahme des Injektorstroms (unten). Eintrittsbedingungen: $M = 2.1$ , $T_0 = 298 K$ , $p_0 = 7.5 bar$ . . . . .	141
7.11	Schematische Darstellung der Strömungsstruktur an der ersten Eindüsungsposition im Hauptstrom . . . .	144
7.12	Mischungsverbesserung durch die Überströmung. Simulationsergebnisse. $M = 2.2$ , $p_0 = 10 bar$ , $T_0 = 1160 K$ , $p_{0,H_2} = 30 bar$ , $T_{0,H_2} = 300 K$ . . . . .	146
7.13	Rechengitter . . . . .	147

7.14	Nichtreagierende Strömung. Statische Temperatur in der Symmetrieebene ( $z = 0$ ). $M = 2.1$ , $p_0 = 7.5 \text{ bar}$ , $p_{0,H_2} = 20 \text{ bar}$ , $T_0 = 1160 \text{ K}$ , $T_{0,H_2} = 300 \text{ K}$ . . . . .	149
7.15	Reagierende Strömung. Wasserstoffverteilung, Machzahl und statische Temperatur in der Symmetrieebene ( $z = 0$ ). $M = 2.1$ , $p_0 = 7.5 \text{ bar}$ , $p_{0,H_2} = 20 \text{ bar}$ , $T_0 = 1160 \text{ K}$ , $T_{0,H_2} = 300 \text{ K}$ . . . . .	150
7.16	Reaktion im Injektorstrom. $M = 2.1$ , $p_0 = 7.5 \text{ bar}$ , $p_{0,H_2} = 20 \text{ bar}$ , $T_0 = 1150 \text{ K}$ , $T_{0,H_2} = 300 \text{ K}$ . . . . .	151
7.17	Reagierende Strömung. Wasserstoffverteilung. $M = 2.1$ , $p_0 = 7.5 \text{ bar}$ , $p_{0,H_2} = 20 \text{ bar}$ , $T_0 = 1160 \text{ K}$ , $T_{0,H_2} = 300 \text{ K}$ . . . . .	152
7.18	Reagierende Strömung. Konturdiagramm des $OH$ -Molenbruchs. $M = 2.1$ , $p_0 = 7.5 \text{ bar}$ , $p_{0,H_2} = 20 \text{ bar}$ , $T_0 = 1160 \text{ K}$ , $T_{0,H_2} = 300 \text{ K}$ . . . . .	153
7.19	Geometrie des Nachlaufsegments . . . . .	156
7.20	Reaktionsausbreitung im Nachlauf des Injektors . . . . .	157
7.21	Reaktionsausbreitung im Nachlauf des Injektors. Konturdiagramme $OH$ - (links) und $H_2$ -Molenbruch (rechts). . . . .	158
7.22	Beschleunigung der Strömung im Nachlauf des Injektors. Konturdiagramme der Machzahl. . . . .	159
7.23	Wasserstoffverteilung bei Aktivierung zusätzlicher Wasserstoffeindüsungsöffnungen. $M = 2.1$ , $p_0 = 7.5 \text{ bar}$ , $p_{0,H_2} = 20 \text{ bar}$ , $T_0 = 1160 \text{ K}$ , $T_{0,H_2} = 300 \text{ K}$ . . . . .	161
7.24	Verteilung des Wasserstoffs und der Reaktionszonen am Ende des Injektorbereichs. Konturdiagramme $OH$ - (links) und $H_2$ -Molenbruch (rechts). $M = 2.2$ , $p_0 = 10 \text{ bar}$ , $p_{0,H_2} = 30 \text{ bar}$ , $T_0 = 1160 \text{ K}$ , $T_{0,H_2} = 300 \text{ K}$ . . . . .	162

## Formelzeichen

Die folgende Liste umfasst alle in der Arbeit vorkommenden Formelzeichen und Abkürzungen. Abweichungen werden an den entsprechenden Stellen im Text erläutert.

### Lateinische Formelzeichen

$a$	$[-]$	Polynomkoeffizient
$b$	$[-]$	Temperaturexponent
$A$	$[div. Einheiten]$	Präexponentieller Faktor
$B$	$[-]$	Sensitivität
$c_p, \bar{c}_p$	$[J/kgK, J/kmolK]$	isobare spez. Wärmekapazität
$c_v, \bar{c}_v$	$[J/kgK, J/kmolK]$	isochore spez. Wärmekapazität
$D$	$[m^2/s]$	Diffusionskoeffizient
$E$	$[J/kg]$	spez. Totalenergie
$E_a$	$[J/kmol]$	Aktivierungsenergie
$h, \bar{h}$	$[J/kg, J/kmol]$	spezifische Enthalpie
$h^0, \bar{h}^0$	$[J/kg, J/kmol]$	Bildungsenthalpie
$H$	$[-]$	Heaviside-Funktion
$\mathbf{I}$	$[-]$	diskreter Koordinatenvektor
$I$	$[-]$	Einheitsvektor
$I_T$	$[-]$	Intensität der Temperaturfluktuationen
$J$	$[-]$	Impulsverhältnis
$\mathbf{J}$	$[1/s]$	Jacobi-Matrix
$\vec{J}$	$[kg/m s]$	Diffusionsfluss
$k$	$[m^2/s^2]$	turbulente kinetische Energie
$k$	$[div. Einheiten]$	Reaktionrate
$K_c$	$[div. Einheiten]$	Gleichgewichtskonstante einer Reaktion
$M$	$[-]$	Machzahl
$\mathcal{M}$	$[-]$	symbolischer Name einer Spezies
$Mi$	$[-]$	Michelsonzahl
$M_w$	$[kg/kmol]$	Molargewicht
$N$	$[-]$	Anzahl

$p$	$[Pa, bar]$	Druck
$p_{op}$	$[Pa, bar]$	Referenzdruck
$P$	$[-]$	Warscheinlichkeitsdichtefunktion
$\mathbf{P}$	$[-]$	Zeigervektor
$Pr$	$[-]$	Prandtlzahl
$\mathbf{r}$	$[-]$	Reaktionsvektor
$R$	$[J/kmol K]$	allgemeine Gaskonstante
$\hat{R}$	$[kmol/m^3 s]$	molare Speziesbildungsrate in einer Reaktion
$R$	$[kg/m^3 s]$	Bildungsgeschwindigkeit der Spezies $j$
$s^0, \bar{s}^0$	$[J/kg K, J/kmol K]$	Standard-Entropie
$Sc_t$	$[-]$	turbulente Schmidtzahl
$t$	$[s]$	Zeit
$T$	$[K]$	Temperatur
$u$	$[m/s]$	Geschwindigkeit
$\vec{v}$	$[m/s]$	Geschwindigkeitsvektor
$[X]$	$[kmol/m^3]$	molare Konzentration
$x, y, z$	$[m, mm]$	Ortskoordinate
$y^+$	$[-]$	dimensionsloser Wandabstand
$Y$	$[-]$	Massenbruch

### Griechische Formelzeichen

$\beta$	$[1/K]$	thermischer Ausdehnungskoeffizient
$\gamma$	$[-]$	Isentropenexponent
$\Gamma$	$[kmol/m^3]$	Einfluss von Stoßpartnern auf die Reaktionsrate
$\gamma$	$[-]$	Stoßpartnereffizienz
$\sigma$	$[u.E.]$	Varianz
$\delta$	$[-]$	Diracsche Deltafunktion
$\epsilon$	$[m^2/s^3]$	Dissipationsrate der turb. kin. Energie
$\theta$	$[^\circ]$	Winkel
$\lambda$	$[W/m K]$	thermische Leitfähigkeit
$\mu$	$[-]$	Durchsatzkoeffizient
$\mu$	$[kg/m s]$	dynamische Viskosität
$\mu_t$	$[kg/m s]$	turbulente Viskosität

$\nu'$	$[-]$	stöchiometrischer Koeffizient des Produktes
$\nu''$	$[-]$	stöchiometrischer Koeffizient des Reaktanden
$\Pi_E$	$[-]$	Gütegrad
$\rho$	$[kg/m^3]$	Dichte
$\mathfrak{R}$	$[-]$	<i>Reaction Mapping</i> Operator
$\bar{\tau}$	$[kg/m\ s^2]$	Spannungstensor
$\tau_{in}$	$[s]$	Induktionszeit
$\Phi$	$[\ ]$	Zustandsvektor
$\phi$	$[-]$	Äquivalenzverhältnis
$\chi$	$[kmol/m^3]$	Speziesmolenbruch
$\Omega$	$[1/s]$	Rotationstensor
$\omega$	$[1/s]$	spezifische Dissipationsrate
$\dot{\omega}_i$	$[kmol/m^3\ s]$	molare Bildungsgeschwindigkeit der Spezies $j$

## Indizes

0	Totalgröße oder Anfangszustand
01, 02	Bedingungen relativ zum Stoß
<i>AP</i>	Arbeitspunkt
<i>atm</i>	Atmosphäre
<i>auf</i>	Aufenthalt
<i>b</i>	rückwärts
<i>D</i>	Dimension
<i>E</i>	Einlauf
<i>eff</i>	effektiv
<i>f</i>	vorwärts
<i>f</i>	Freistrom
<i>i, j, k</i>	Raumrichtung
<i>i, j, k</i>	Spezies
<i>i, j, k, m</i>	Dimensionen des Zustandsvektors
<i>j</i>	Strahl (jet)
<i>lh</i>	links
<i>max</i>	maximal
<i>min</i>	minimal

<i>mis</i>	Mischung
<i>r, R</i>	Reaktion
<i>ref</i>	Referenz
<i>rh</i>	rechts
<i>sp</i>	Spezies
<i>t</i>	turbulent
<i>T</i>	Temperatur
<i>Z</i>	Zelle
'	Reynolds-Fluktuation
"	Favre-Fluktuation
-	Reynolds-Mittelwert
~	Favre-Mittelwert

### Allgemeine Abkürzungen

CFD	Computational Fluid Dynamic
ILD	Intrinsic Low-Dimensional Manifolds
ISAT	In Situ Adaptive Tabulation
ODE	Ordinary Differential Equation
PDF	Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (probability density function)
RM	Reaction Mapping
SFB	Sonderforschungsbereich

# 1 Einleitung

## 1.1 Luftatmende Hyperschall-Transportsysteme

Die Nutzlast ist der wichtigste Parameter bei der Entwicklung eines sparsamen Hyperschall-Transportsystems. Da der Oxidator bei raketenbasierenden Transportsystemen den dominierenden Massenanteil darstellt [Mü72], ist ein luftatmendes Triebwerk, das den Sauerstoff aus der Atmosphäre als Oxidationsmittel verwendet, eine viel versprechende Alternative. Ein weiterer Vorteil eines luftatmenden Transportsystems ist der durch die Flügel generierte Auftrieb, der die Transportkosten reduziert. Daneben bietet der Einsatz des luftatmenden Transportsystems gegenüber den derzeit verwendeten raketenbasierenden zweistufigen Transportsystemen TSTO (Two-Stage-To-Orbit) ein viel höheres Sicherheitsniveau und eine deutlich größere Missionsflexibilität, was durch die geringere Startmasse, das angetriebene Landen und den sicheren Missionsabbruch erreicht wird [McC02]. Die Wiederverwendbarkeit gehört ebenfalls zu den wichtigsten Vorteilen des luftatmenden Transportsystems.

Gasturbinen, Ram- und SCRamjets werden als Konzepte für ein zukünftiges Triebwerk diskutiert. Ab einer Machzahl von 3.5 sind Gasturbinen ineffizient und können mit Ram- und SCRamjets nicht konkurrieren. Während im ramjetbasierenden Triebwerk die Überschallströmung auf Unterschall verzögert wird, bleibt die Strömung im SCRamjet im Überschall. Das Ramjet-Triebwerk zeigt eine hohe Effizienz im Flugmachzahlbereich zwischen 3.5 und 6. Für Flugbedingungen ab Mach 6 ist das Potenzial des SCRamjet-Triebwerks höher als das eines Ramjets, da im SCRamjet thermische Probleme, die durch die Verzögerung der Überschallströmung auf Unterschall entstehen, vermieden werden [Swe93, Cur91].

Trotz der dreißigjährigen Entwicklungsgeschichte luftatmender Hyperschalltransportsysteme ist der derzeitige Entwicklungsstand noch weit von einem technisch relevanten und funktionsfähigen Prototy-



pen entfernt. Der Grund dafür liegt in den enormen Anforderungen an Konstruktion, Struktur, Material und Triebwerkssystem. Die Verwendung von Luft als Oxidator und der dadurch bedingte Flug in oberen Atmosphärenschichten mit Hyperschall bringt gewaltige Druckgradienten und Temperaturbelastungen für die Raumfähre mit sich. Ein großes Problem liegt darin, dass derzeit keine Erfahrung bezüglich eines Flugzeugdesigns für Hyperschall vorhanden ist. Die einzigen Dauerflüge mit einer Machzahl über 3 wurden mit der SR-71 (gasturbinengetriebenes Flugzeug) und der X-15 (raketengetriebenes Forschungsflugzeug) realisiert. Die Flüge bei höheren Machzahlen waren sehr kurz (X-15 bei  $M \sim 6.8$ ), wobei die Flugzeuge für ein solches Regime eher auf Belastbarkeit als auf Leistung optimiert worden waren [Bog02]. In Bezug auf die Triebwerkstechnologie liegen die Probleme in der hohen Strömungsgeschwindigkeit in der Brennkammer und dadurch in einem extrem kurzen Zeitintervall, innerhalb dessen die Mischung, Zündung und Flammenausbreitung erfolgen müssen. Die Effizienz des SCRamjet-Triebwerks ist direkt von den Totaldruckverlusten in der Brennkammer abhängig, so dass die Optimierung der Strömungs-, Mischungs- und Reaktionsvorgänge in Hinsicht auf den Gesamtwirkungsgrad (Maximierung des positiven Schubs) erfolgen muss.

In Deutschland konnten an verschiedenen Hochschulen luftatmende Raumtransportsysteme im Rahmen eines Verbundes aus drei Sonderforschungsbereichen (SFB) untersucht werden, wobei viele Themen des zukünftigen Hyperschallfluges erforscht wurden:

- Grundlagen des Entwurfs von Raumflugzeugen, SFB 253, Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen
- Transatmosphärische Flugsysteme, SFB 255, Technische Universität und Universität der Bundeswehr München
- Hochtemperaturprobleme rückkehrfähiger Raumtransportsysteme, SFB 259, Universität Stuttgart

In Hinblick auf die Antriebssysteme wurden im Rahmen des SFB 255

drei unterschiedliche Triebwerkskonzepte untersucht.

- HTSM–4: Turboluftstrahltriebwerk [Kop00]. Die Stufentrennung erfolgt bei einer Machzahl von vier. Die geringe Separationsmachzahl führt zu einer schweren Oberstufe.
- HTSM–6R: koaxial angeordnetes Turbolufttriebwerk und Ramjet [Bau94, Esc96, Hol97]. Dieses Konzept stellt eine Erweiterung des HTSM–4 Konzeptes dar. Der Ramjet übernimmt die Weiterbeschleunigung des Hyperschallflugzeugs ab einer Machzahl von drei bis vier und bis zu einer Machzahl von ca. 6.8, bei der die Stufentrennung erfolgen soll. Die höhere Machzahl bei der Stufentrennung führt zu einem geringeren Gewicht der Oberstufe. Die Nachteile liegen in dem komplexen Umschaltvorgang des Triebwerkes, da die koaxiale Anordnung der Triebwerke thermische Probleme verursacht.
- HTSM–8: parallel angeordnetes Turboluft- und Staustrahltriebwerk (Ram- und SCRamjet). Dieses Konzept erweitert das HTSM–6R Konzept durch den Einsatz des SCRamjetantriebs ab einer Machzahl von 5 – 6 und die Verschiebung der Stufentrennung auf eine Machzahl von ca. 8. Dadurch erreicht man eine weitere Reduzierung des Oberstufengewichtes. Die parallele Anordnung der Triebwerke erleichtert den Umstellvorgang.

Der Schwerpunkt bei der Entwicklung des HTSM–8 Triebwerkkonzeptes liegt in der Entwicklung der SCRamjet-Technologie. Die vorliegende Arbeit basiert auf den numerischen Forschungsaktivitäten im Teilprojekt B11 des SFB 255, in dem die Überschallbrennkammertechnologie erforscht und weiterentwickelt wurde.<sup>1</sup> Während der dritten Forschungsphase wurden unterschiedliche Wasserstoffinjektoren (Pylone) auf ihre Eigenschaften zur Flammenstabilisierung und den Einsatz von Kerosin als potenziellem Brennstoff von Grünig [Grü99]

---

<sup>1</sup>Projekt B11 *Selbstzündung, Flammenstabilisierung und Stoß-Flammen-Wechselwirkung in stoß-induzierten Überschallflammen* gehört zur vierten dreijährigen Forschungsphase des SFB 255 und folgt auf die vorherigen Arbeiten im Projektbereich B *Antriebsysteme*

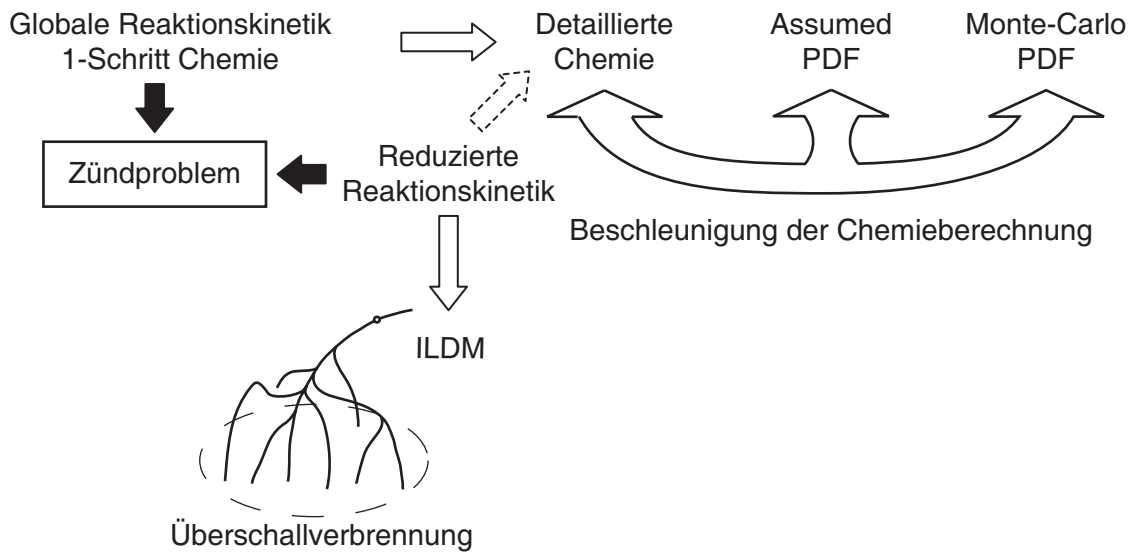
untersucht. Aus der Analyse des Brennverhaltens beim Einsatz von unterschiedlichen Injektoren wurde eine optimale Injektorgeometrie abgeleitet, die in Abschnitt 4.3 vorgestellt wird. Die Untersuchungen bei Einsatz von Kerosin und von einem Kerosin–Wasserstoff–Gemisch zeigten eine wesentlich höhere Induktionszeit im Vergleich zur Verwendung reinen Wasserstoffs, was bei der begrenzten Länge der Überschallbrennkammer und der kurzen Aufenthaltszeit sehr kritisch ist. Sowohl durch das Induktionszeitproblem als auch durch die wesentlich bessere Kühlungseigenschaften des Wasserstoffs wird Letzterer zur Zeit als Hauptbrennstoff für SCRamjets betrachtet [TDEN96].

## 1.2 Zielsetzung und Aufbau der Arbeit

Die Aufgabe für die vierte Phase war, die Strömungs- Mischungs- und Reaktionsvorgänge im Injektorbereich detailliert zu untersuchen. Dazu wurden numerische Untersuchungen parallel zu Experimenten, in denen optische Messmethoden eingesetzt wurden [San03], durchgeführt. Durch die enge Zusammenarbeit und gegenseitige Unterstützung von Rechnung und Experiment konnte ein wesentlich besseres physikalisches Verständnis von den thermofluidodynamischen Vorgängen gewonnen werden.

In der vorliegenden Arbeit werden hauptsächlich zwei wichtige Themen behandelt: die Weiterentwicklung der numerischen Methoden zur Simulation der Überschallverbrennung und der Einsatz dieser Methoden zur Untersuchung der Strömungs-, Mischungs- und Reaktionsvorgänge in Überschallströmungen. Schließlich wurden die numerischen Methoden erfolgreich zum Design einer neuen Brennkammerart eingesetzt.

Eine deutliche Weiterentwicklung der kommerziellen CFD-Codes im letzten Jahrzehnt ermöglicht deren Einsatz auch im Forschungsbereich. Insbesondere die Option zur Variierung der Gitterfeinheit während der Berechnung und dadurch die dynamische Anpassung



**Abbildung 1.1:** Modellierungskonzept

des Gitters an die Stöße ist ein wichtiges Kriterium bei der Auswahl eines CFD-Codes. Die Existenz von Modellen, die für die Berechnung von Überschallströmungen geeignet sind, und spezieller Löser mit Parallelisierungsmöglichkeit sind weitere wichtige Kriterien für die Nutzbarkeit eines kommerziellen Codes im Zusammenhang mit der Modellierung von Verbrennungsvorgängen in Überschallbrennkammern. Aus diesen Gründen wurde für die numerischen Arbeiten im Projekt durch ein Test-Benchmark-Verfahren der kommerzielle CFD-Code *FLUENT* als Basis-Code ausgewählt. Die Beschreibung des Codes und der Auswahlkriterien werden im Abschnitt 2 vorgestellt.

Bei der Simulation der reagierenden Überschallströmung in realen dreidimensionalen Geometrien liegt das größte Problem in der dafür benötigten Rechnerkapazität. Sowohl die Anwesenheit der Stöße und die damit verbundene sehr feine Diskretisierung des Rechenvolumens, als auch die für die Modellierung der Selbstzündvorgänge notwendige detaillierte Betrachtung der Reaktionskinetik stellen eine große Herausforderung an die Rechnerleistung. Die Verwendung der PDF-Methoden für die Berücksichtigung der Turbulenz-Chemie-

Wechselwirkung ist daher nur durch die Entwicklung und den Einsatz spezieller rechengünstiger numerischer Verfahren realisierbar. Aus diesem Grund war eine der Hauptaufgaben dieser Arbeiten die Entwicklung eines numerisch effizienten Modellierungskonzeptes (Abbildung 1.1).

Eine detaillierte Analyse der reaktionskinetischen Vorgänge bei der Selbstzündung zeigt, dass die Reduzierung der chemischen Kinetik unter aktuellen thermodynamischen Bedingungen in der Brennkammer ( $T = 800\text{--}1200\text{ K}$ ) einen inakzeptablen Fehler bei der Berechnung der Induktionszeit liefert. Die Verwendung der *ILDM*-Methode [MP92, MP94, OG99] bringt im Fall der Überschallverbrennung keinen Gewinn, da die Chemie sich weit entfernt vom Gleichgewichtszustand befindet, was bedeutet, dass die Dimensionalität des Problems hoch bleibt.

Die Eleganz des in dieser Arbeit verwendeten Konzeptes liegt in der Abspaltung der Lösung der steifen chemischen Reaktionskinetik aus dem eigentlichen Simulationsvorgang, in dem die Reaktionskinetik im Preprocessing gelöst und tabelliert wird. Außerdem erfolgt die Umwandlung der tabellierten Daten in lineare Polynome. Diese werden während der Simulation eingesetzt, anstatt die Reaktionskinetik zu lösen. Die Testsimulationen einer reagierenden Überschallströmung zeigen eine enorme Reduzierung der Simulationszeit, so dass die Rechenzeit für eine reagierende Strömung vergleichbar zu der Rechenzeit ohne Berücksichtigung der chemischen Reaktion wird. Das Einschließen zusätzlicher Variablen in das Preprocessing für die Beschreibung der Fluktuationen im Fall der Verwendung von *Assumed*-PDF-Verfahren ermöglicht dessen Einsatz für die Berechnung dreidimensionaler Geometrien auch auf mittleren Rechnersystemen.

Die detaillierte Analyse der Wasserstoff-Luft Kinetik und die Beschreibung der *Reaction Mapping* Methode mit der anschließenden Formulierung der Modellierungsstrategie für die Überschallverbrennung in realen dreidimensionalen Brennkammern wird in Abschnitt

3 vorgestellt.

In Abschnitt 4 wird die experimentelle Anlage kurz beschrieben und ein Überblick über das untersuchte Gesamtsystem gegeben. Die Simulation der Flugbedingungen erfolgt mit Hilfe eines wasserstoffbetriebenen Vorheizers, der eine kostengünstige Lösung im Vergleich zu einem elektrischen Vorheizern ist. Die potenzielle Gefahr bei der Verwendung solcher Vorheizern liegt aber in der Verunreinigung der Testluft sowohl durch Verbrennungsprodukte als auch durch Zwischenspezies, wobei Letztere durch deren Beeinflussung der Selbstzündung und der Reaktion in der Brennkammer besonders kritisch sind. Zur Unterstützung des Experiments [San03] wurde eine detaillierte Untersuchung des Vorheizers durchgeführt. Die daraus gewonnenen Daten zeigten eine hohe Konzentration chemisch aktiver Zwischenprodukte, die die Reaktionsvorgänge in der Brennkammer enorm beschleunigen. Die numerische Modellierung des Reaktionsverlaufs im Vorheizern und anschließend in der Laval-Düse unter Berücksichtigung eines kontinuierlichen Temperaturabfalls durch die Beschleunigung und die langsame Vermischung deckte das Kernproblem des Vorheizers auf, eine schlechte Vermischung der Reaktanden, welche bei der begrenzten Aufenthaltszeit eine dominante Rolle für den Ausbrand spielt. Als Ergebnis der Analyse wurde ein zusätzlicher Vermischer eingebaut, eine kostengünstige und sehr effiziente Lösung [San03]. Die detaillierte Beschreibung des numerischen Modells und seiner Anwendung sind in Abschnitt 5 zu finden.

Abschnitt 6 beinhaltet die Ergebnisse zur Untersuchung des Brennverhaltens bei Einsatz von strebenförmigen Injektoren, die auf den vorangegangenen Arbeiten von Grünig [Grü99] basieren. Für die numerischen Arbeiten wurde eine vereinfachte Version des von Grünig als Optimallösung bezeichneten Injektors verwendet, die einerseits geringere Totaldruckverluste produziert und andererseits durch Symmetrieeigenschaften die Reduzierung des Rechengebiets erlaubt. Experimentell wurden beide Injektoren unter dem Einfluss des Vorheizerausbrands untersucht. Die numerischen und experimentellen Ergebnisse zusammen lieferten eine detaillierte Darstellung der

Strömungs- Mischungs- und Reaktionsvorgänge im Nahbereich des Injektors. Die verlustarme Injektorversion zeigte eine starke Sensitivität auf die Verunreinigung der Testluft, d.h. keine Selbstzündung oder eine sehr instabile Zündung im radikalfreien Modus, während der sog. optimale Injektor durch enorme Totaldruckverluste auf die Verunreinigung unsensibel reagierte.

Die Untersuchung des Vorheizers und des Brennverhaltens von strebenförmigen Injektoren liefert die eindeutige Aussage, dass die Zündung- und Flammenstabilisierung mittels Zwischenprodukten eine Alternative für die Stoßstabilisierung bietet. Die Induktionszeit kann schon bei niedrigen Temperaturen bis auf wenige  $\mu s$  reduziert werden.

Aufbauend auf dieser Erkenntnis wurde das Problem der Zündung und Stabilisierung von Flammen im Überschall ganz grundsätzlich analysiert. Das Ergebnis dieser Analyse führte zu einer neuen Art der Stabilisierung, die mit einem stark verzögerten Teilstrom abeitet. Mit Hilfe numerischer Methoden wurde ein Zweistrom-Injektor entwickelt, der eine breitbandige radikalenstabilisierte Überschallverbrennung realisiert. Die enge Zusammenarbeit zwischen dem numerischen und dem experimentellen Projektteil ermöglichte eine schnelle Entwicklung und Optimierung des Injektors. Die Ergebnisse zur Untersuchung des Injektors zeigen, dass eine stabile Verbrennung schon bei einer Totaltemperatur von  $900\text{ K}$  erreicht wird, was in Hinsicht auf das HTSM-8 Triebwerkskonzept eine frühere Umschaltung (ca. Mach 4–5) in den SCRamjet-Modus und die Erhöhung des Wirkungsgrades des Triebwerkssystems erlaubt. Die konstruktive Ausführung des Injektors und die Ergebnisse zur Untersuchung der Strömungs-, Mischungs- und Reaktionsvorgänge werden in Abschnitt 7 vorgestellt.

Der letzte Abschnitt fasst die wichtigsten Schlussfolgerungen der Arbeit zusammen und gibt einen Ausblick für zukünftige Weiterentwicklungen der SCRamjet-Technologie.

---

## 2 Simulation der Strömungs- und Mischvorgänge

Die enorme Entwicklung der Rechnertechnologie in den letzten zwei Jahrzehnten ermöglicht den Einsatz numerischer Methoden zur detaillierten Untersuchung komplizierter Verbrennungsvorgänge in realen, dreidimensionalen Geometrien. Die Bedeutung dieser Entwicklung ist von hohem Wert, da einerseits eine wesentliche Kostenreduzierung in der Entwicklungsphase erreicht werden kann und andererseits die Verwendung numerischer Methoden mit hoher räumlicher Auflösung, wie z.B. CFD - Methoden, ein detailliertes Studium von Strömungs- und Reaktionsphänomenen ermöglicht. Bei der Untersuchung reagierender Überschallströmungen ist die Bedeutung der numerischen Methoden noch ausgeprägter: hohe Betriebskosten der Experimente, Probleme bei der Simulation von Flugbedingungen, Beschränkungen auf die für Überschallströmungen geeigneten Messmethoden und deren geringe Genauigkeit zwingen zu einem intensiven Einsatz von Numerik. Allerdings können die numerischen Modelle noch nicht alle Strömungs- und Reaktionsphänomene mit der entsprechenden Genauigkeit erfassen, eine Weiterentwicklung ist notwendig. Daraus folgt, dass die höchste Effizienz bei der Untersuchung und der Entwicklung von Überschallbrennkammern durch den parallelen Einsatz von experimentellen und numerischen Methoden erreicht wird. Die numerischen Methoden unterscheiden sich in Bezug auf die Genauigkeit, den Anwendungsbereich und den Bedarf an Rechnerressourcen. Im Rahmen dieser Arbeit wurden sowohl rechengünstige eindimensionale Methoden zum Studium der Grundlagen der Reaktionskinetik und der Gasdynamik als auch rechenaufwändige CFD-Methoden für die zwei- und dreidimensionale Simulation der Strömungs- und Verbrennungsvorgänge in der Brennkammer weiterentwickelt und verwendet. Die Zielsetzung für die numerischen Arbeiten war die effiziente Untersuchung der reagierenden Überschallströmung in einer Modellbrennkammer mit Hilfe der CFD-Methode. Hierauf waren die gewählten Ansätze auszurichten.



Bei der Simulation reagierender Überschallströmungen treten folgende Probleme auf:

- die Anwesenheit von Stößen und die komplizierte Stoß-Grenzschicht-Wechselwirkung benötigen ein extrem feines Gitter und ein spezielles Lösungsverfahren
- die Selbstzündung des Treibstoffs kann nur unter Verwendung der detaillierten chemischen Kinetik simuliert werden
- turbulente Fluktuationen können die Reaktionsvorgänge wesentlich beeinflussen

Schon die beiden erstgenannten Probleme machen die Simulation einer realen, dreidimensionalen Brennkammer auf Rechnersystemen mittlerer Kapazität unmöglich. Die Berechnung des Einflusses turbulenter Fluktuationen auf den Reaktionsverlauf durch die Verwendung von PDF (Probability Density Function)–Methoden können zur Zeit auch für einfache generische Geometrien nur mit Hilfe von Hochleistungsrechnersystemen realisiert werden. Trotz der schnellen Evolution der Rechnertechnologien, wird die Entwicklung von Rechenzeit sparenden Modellen und Algorithmen kurz- und mittelfristig von großer Bedeutung bleiben. Eine wichtige Methode ist zum Beispiel die Verwendung adaptiver Gitter, welche während der Simulation lokal ver- und entfeinert werden können. Dadurch wird die notwendige Stoßauflösung auch ohne eine enorme Erhöhung der Anzahl der Rechenzellen erreicht.

Zur Modellierung turbulenter Verbrennungsvorgänge bei geringeren Machzahlen wurden in den letzten Jahren mehrere Methoden zur Reduzierung des Rechenaufwands verwendet, die aber nicht auf die Überschallverbrennung übertragbar sind. Somit ist die Entwicklung rechenzeitgünstiger Verbrennungsmodelle für den Überschallbereich von großer Bedeutung. Die Lösung dieser Aufgabe war das zentrale Ziel der vorliegenden Arbeit. In diesem Zusammenhang war die Auswahl des optimalen Basiscodes von großer Bedeutung, da dieser

die Aufgabe übernehmen muss, die Transportgleichungen in einem Strömungsfeld mit Überschall- und Unterschallgebieten und dementsprechend komplizierten Stoßsystemen effizient zu lösen.

## 2.1 Auswahl des Basiscodes

Die Hauptkriterien bei der Auswahl des Basiscodes waren die Existenz eines für kompressible Strömungen geeigneten Löser, die adaptive Gitteradaption während der Simulation, die Fähigkeit zur Parallelberechnung auf Clustersystemen und die Möglichkeit zur Implementierung eigener Modelle. In dieser Kombination sind diese Anforderungen ungewöhnlich. Die zur Verfügung stehenden CFD-Programme wurden hauptsächlich für industrierelevante Anwendungen entwickelt, wo Überschallprobleme selten auftreten. In der Vergangenheit sind häufig spezielle Codes für Überschallaufgaben entwickelt worden, da kommerzielle Codes für derartige Strömungen ungeeignet waren. In letzter Zeit wurden aber Modelle zur Simulation kompressibler Strömungen in manchen kommerziellen CFD-Codes implementiert, was eine Alternative zur Verwendung und zur Weiterentwicklung eigener Codes bedeutet. Zusätzliche Eigenschaften, wie adaptives Gitter, Multigrid-Verfahren und parallele Berechnung, machen kommerzielle Codes zumindest für die Simulation nicht-reagierender Überschallströmungen attraktiver. Während eines Benchmark-Tests wurden die CFD-Codes *CFX-TASCflow 2.8* und *CFX-5* von der Firma AEA Technology GmbH sowie *FLUENT 5* der Firma Fluent Inc. geprüft, wobei nur der CFD-Code *FLUENT 5* alle Hauptkriterien erfüllte und deshalb als Basiscode für die numerischen Arbeiten ausgewählt wurde. Die Arbeit profitierte von der Weiterentwicklung von *FLUENT* während der Laufzeit des Vorhabens, da immer die allerneueste Version zur Verfügung stand.

## 2.2 Basiscode *FLUENT 5*

Der CFD-Code *FLUENT 5* gehört zur Familie der Finite Volumen CFD-Codes, der sowohl mit strukturierten als auch mit unstrukturierten Rechengittern arbeiten kann. *FLUENT 5* erlaubt die Änderung des Gitters während der Simulation, was die lokale Auflösung in den Rechenzonen mit großen Gradienten der Strömungsparameter wesentlich erhöht. *FLUENT 5* besitzt ein breites Modellspektrum [Flu00]. Dadurch wird ein Einsatz in verschiedenen Aufgabenbereichen ermöglicht. Nachfolgend sollen nur die Modelle in Hinsicht auf die Simulation von kompressiblen Strömungs-, Mischungs- und Reaktionsvorgängen vorgestellt werden. *FLUENT* löst implizit die kompressiblen Navier-Stokes Gleichungen (Erhaltungsgleichungen für die Masse, den Impuls und die Energie) gekoppelt mit den Erhaltungsgleichungen für die einzelnen Spezies. Die Verwendung des gekoppelten, impliziten Löser, wobei die Strömungs- und die Energiegleichung zusammen gelöst werden, führt zu einer schnelleren Konvergenz, was aber einen um den Faktor 1.5 – 2 höheren Arbeitsspeicherbedarf als die serielle Lösung der Gleichungen bewirkt. Im Folgenden werden die Gleichungen für kartesische Koordinaten vorgestellt.

### 2.2.1 Allgemeine Erhaltungsgleichungen

*Kontinuitätsgleichung*

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = 0 \quad (2.1)$$

mit der Dichte  $\rho$ , der Zeit  $t$  und dem Geschwindigkeitsvektor  $\vec{v}$ .

*Impulserhaltungsgleichung*

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \vec{v}) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) = -\nabla p + \nabla(\bar{\tau}) \quad (2.2)$$

wobei mit  $p$  der statische Druck bezeichnet wird und der Spannungs-

tensor  $\bar{\tau}$  folgendermaßen definiert wird:

$$\bar{\tau} = \mu [(\nabla \vec{v} + \nabla \vec{v}^T) - \frac{2}{3} \nabla \cdot \vec{v} I] \quad (2.3)$$

Hierbei bezeichnet  $\mu$  die dynamische Viskosität,  $I$  den Einheitstensor und der zweite Term auf der rechten Seite beschreibt die volumetrische Dilatation.

### *Energieerhaltungsgleichung*

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho E) + \nabla \cdot (\vec{v}(\rho E + p)) = \nabla \cdot \left( \lambda_{eff} \nabla T - \sum_j h_j \vec{J}_j + (\bar{\tau} \cdot \vec{v}) \right) + \sum_j h_j R_j \quad (2.4)$$

Dabei bezeichnet  $\lambda_{eff}$  die effektive, thermische Leitfähigkeit ( $\lambda_{eff} = \lambda + \lambda_t$ , wobei  $\lambda_t$  die turbulente, thermische Leitfähigkeit ist und entsprechend des verwendeten Turbulenzmodells bestimmt wird). Der Term  $\vec{J}_j$  bezeichnet den Diffusionsfluß der Spezies  $j$ . Die drei Terme auf der rechten Seite beschreiben den Energietransport durch die Leitfähigkeit, die Speziesdiffusion und die viskose Dissipation.  $\sum_j h_j R_j$  enthält die Wärmequelle infolge der chemischen Reaktion.  $R_j$  ist die Produktionsrate der Spezies  $j$  durch chemische Reaktion. Diese wird in Abschnitt 3.2 genauer beschrieben. Die Totalenergie  $E$  wird folgendermaßen definiert:

$$E = h - \frac{p}{\rho} + \frac{v^2}{2} \quad (2.5)$$

wobei die Enthalpie  $h$  für ideale Gase als Summe von Enthalpien der einzelnen Spezies  $h_j$  berechnet wird.  $Y_j$  bezeichnet den Massenbruch der Spezies.

$$h = \sum_j Y_j h_j \quad (2.6)$$

Die Enthalpien der Spezies lassen sich wie folgt berechnen:

$$h_j = h_j^0 + \int_{T_{ref}}^T c_{p,j} dT \quad (2.7)$$

### *Zustandsgleichung*

Die Kopplung zwischen den Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls und Energie liefert die Zustandsgleichung. Für kompressible Strömungen gilt:

$$\rho = \frac{p_{op} + p}{\frac{R}{M_w} T} \quad (2.8)$$

wobei  $p_{op}$  der Referenzdruck,  $p$  der lokale statische Druck relativ zum Referenzdruck,  $R$  die allgemeine Gaskonstante und  $M_w$  das Molargewicht ist. Die Temperatur  $T$  wird aus der Energieerhaltungsgleichung (2.4) berechnet.

### *Speziestransportgleichung*

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_j) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} Y_j) = -\nabla \cdot \vec{J}_j + R_j \quad (2.9)$$

Der Diffusionsfluß  $\vec{J}_j$  in turbulenten Strömungen wird folgendermaßen berechnet

$$\vec{J}_j = - \left( \rho D_{j,m} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \nabla Y_j \quad (2.10)$$

Hierbei bezeichnet  $Sc_t$  die turbulente Schmidtzahl (StandardEinstellung 0.7),  $\mu_t$  die turbulente Viskosität und  $D_{i,m}$  den Diffusionskoeffizienten der Spezies  $j$  in der Mischung.

### 2.2.2 Modellierung der Turbulenz

Entscheidend bei der Simulation der turbulenten Strömung mit Speziesmischung ist die Verwendung eines geeigneten Turbulenzmodells. Wichtigste Modelle für den Überschallbereich sind das  $\kappa$ - $\epsilon$ -, das  $\kappa$ - $\omega$ - und das Reynoldsspannungsmodell. Letzteres ist für eine Analyse von Überschallströmungen zu bevorzugen, da die Anisotropie der Turbulenz modelliert werden kann. Sowohl eine eigene Analyse als auch eine Literaturrecherche [LW94] zu diesem Thema zeigten, dass bei der aktuellen Modellauswahl das Reynoldsspannungsmodell eine bessere Vorhersage des Turbulenzfeldes liefert. Das liegt daran, dass Turbulenzgenerierung und Turbulenztransport in hohem Ausmaß aufgrund der Kopplung der mittleren Druckgradienten und Dichtefluktuationen bei der Hochgeschwindigkeitsturbulenz zu erwarten sind [LW94]. Da dieser Effekt im *Second Moment Closure* Modell explizit berücksichtigt ist, wird dieses Modell für Überschallströmungen empfohlen. Bei dem Test der zur Verfügung stehenden Modelle wurde auch festgestellt, dass die Grenzschichtablösung bei der Interaktion der Stöße mit der Wand unter Verwendung des RS-Modells korrekt berechnet werden konnte. Interessanterweise führte das RS-Modell bei den Berechnungen der nicht-reagierenden Strömung im Vergleich zum  $\kappa$ - $\epsilon$ -Modell sogar zu einer schnelleren Konvergenz.

Ein Nachteil des Reynoldsspannungsmodells ist, dass für eine 3D-Simulation sieben zusätzliche Gleichungen gelöst werden müssen, was aber nur 50-60% mehr CPU-Zeit pro Iteration und 15-20% mehr Arbeitsspeicher im Vergleich zum  $\kappa$ - $\epsilon$ -Modell benötigt. Dieser moderate Mehraufwand wurde in Kauf genommen.

Bei der Simulation turbulenter Strömungen müssen die Bilanzgleichungen (2.1 - 2.4) transformiert werden. Für diese Transformation wird die Favre-Mittelung [Flu00] angewandt.

#### *Reynoldsspannung-Transportgleichung*

Die exakte Transportgleichung für den Transport der Reynoldsspannung  $\rho \overline{u'_i u'_j}$  kann wie folgt geschrieben werden:

$$\begin{aligned}
& \underbrace{\frac{\partial}{\partial t}(\rho \overline{u'_i u'_j})}_{\text{Lokale zeitliche Ableitung}} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_k}(\rho u_k \overline{u'_i u'_j})}_{C_{ij} \equiv \text{Konvektion}} = \\
& - \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_k} \left[ \rho \overline{u'_i u'_j u'_k} + p (\delta_{kj} u'_i + \delta_{ik} u'_j) \right]}_{D_{T,ij} \equiv \text{Turbulente Diffusion}} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_k} \left[ \mu \frac{\partial}{\partial x_k} (\overline{u'_i u'_j}) \right]}_{D_{L,ij} \equiv \text{Molekulare Diffusion}} \\
& - \underbrace{\rho \left( \overline{u'_i u'_k} \frac{\partial u_j}{\partial x_k} + \overline{u'_j u'_k} \frac{\partial u_i}{\partial x_k} \right)}_{P_{ij} \equiv \text{Spannungsproduktion}} - \underbrace{\rho \beta (g_i \overline{u'_j \theta} + g_j \overline{u'_i \theta})}_{G_{ij} \equiv \text{Auftriebsproduktion}} \\
& + \underbrace{p \left( \frac{\partial u'_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u'_j}{\partial x_i} \right)}_{\phi_{ij} \equiv \text{Druckspannung}} - \underbrace{2\mu \frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \frac{\partial u'_j}{\partial x_k}}_{\epsilon_{ij} \equiv \text{Dissipation}} \\
& - \underbrace{2\rho \Omega_k (\overline{u'_j u'_m} \epsilon_{ikm} + \overline{u'_i u'_m} \epsilon_{jkm})}_{F_{ij} \equiv \text{Produktion bei der Systemrotation}} \quad (2.11)
\end{aligned}$$

Die Terme  $C_{ij}$ ,  $D_{L,ij}$ ,  $P_{ij}$  und  $F_{ij}$  erfordern keine Modellierung. Die Terme  $D_{Z,ij}$ ,  $G_{ij}$ ,  $\phi_{ij}$  und  $\epsilon_{ij}$  müssen dagegen modelliert werden, um die Gleichungen zu schließen. Es wird hier keine vollständige Beschreibung der Modellierungsannahmen gegeben, da diese in der Dokumentation von *FLUENT 5* [Flu00] zu finden ist.

### 3 Modellierung der Verbrennung in Überschallströmungen

Verbrennungsvorgänge in Überschallströmungen haben sehr spezifische Eigenschaften, die sie stark von der typischen Verbrennungsklassifizierung (laminar-turbulent, vorgemischt-diffusiv) unterscheiden. Die Geschwindigkeiten, die in SCRamjet-Brennkammern auftreten, liegen im Bereich von 1000 m/s, was viel größer ist als die deflagrativen Flammengeschwindigkeiten von typischen Brennstoffen. Das bedeutet, dass in solchen Strömungen die Reaktion sich nicht selbst durch die Wärmefreisetzung stabilisieren kann. Zusätzlich ist die Verwendung von Rückströmungen mit der Rezirkulation heißer ausgebrannter Produkte und Zwischenspezies, die normalerweise bei der Stabilisierung inkompressibler Flammen eingesetzt werden, aus Verlustgründen nicht möglich. Außerdem reicht die Aufenthaltszeit in Rückström- und Ablösezonen nicht aus, um eine ausreichende Wärmefreisetzung zu gewährleisten. Aus diesem Grund ist die Selbstzündung des Brennstoffs eine notwendige Bedingung für eine stabile Reaktion. Ein anderes Problem ist, dass die Aufenthaltszeit des Brennstoffs in der Brennkammer sehr kurz ist, was hohe Anforderungen an die Mischungsintensität und an die Reaktionszeit stellt. Demgemäß findet die Selbstzündung und die Reaktion parallel zur Mischung statt und führt zur partiell vorgemischten, diffusiven Verbrennung. Unter den derzeit für den Einsatz in SCRamjet-Brennkammern diskutierten Brennstoffen ist Wasserstoff wegen seiner kurzen Zündverzugszeit, seiner geringeren Zündenergie und seiner hohen Diffusivität am besten geeignet. Außerdem ist das Kühlvermögen des Wasserstoffs für die Lösung der thermischen Probleme des gesamten Flugsystems von großer Bedeutung. Die geometrischen Eigenschaften der Brennkammer und der Brennstoffinjektoren, die für Selbstzündung und Flammenstabilisierung dienen, werden in den folgenden Abschnitten dargestellt, hier werden lediglich die Modellierungsaspekte analysiert.

Die Selbstzündvorgänge in der Brennkammer können nur unter weit-



gehender Berücksichtigung der Elementarkinetik simuliert werden. Wenn die Strömungs- und die chemischen Zeitskalen von vergleichbarer Größe sind, müssen der Reaktionsablauf bzw. die Entstehung des Radikalenpools und die Energiefreisetzung sehr präzise modelliert werden. Die Elementarkinetik des Wasserstoff-Luft-Gemisches beinhaltet außer den Edukten ( $H_2, O_2$ ) und den Produkten ( $H_2O$ ) noch fünf Zwischenprodukte ( $H, OH, O, HO_2, H_2O_2$ ), wobei die Reaktionsbeteiligung des Stickstoffs vernachlässigt wird. Für die numerische Simulation der Strömungs- und Verbrennungsvorgänge in der Brennkammer bedeutet dies, dass für jede Spezies ein Skalarfeld berücksichtigt und eine Transportgleichung gelöst wird. Außerdem stellen die kinetischen Umwandlungsgleichungen ein steifes Differentialgleichungssystem dar, dessen Lösung einen speziellen numerischen Löser benötigt. Dadurch steigen die Anforderungen an die Rechnerkapazität hinsichtlich Speicherbedarf und CPU-Leistung.

Die Reaktionsvorgänge sind stets mehr oder weniger an die turbulenten Strömungsvorgänge gekoppelt. Die turbulente Flammenausbreitung ist 1–2 Größenordnungen schneller als die laminare. Der Grund dafür ist, dass die Wärmeleitung und der Radikalentransport, die bei der deflagrativen Flammenausbreitung als Reaktionspromoter dienen, durch das Auftreten von turbulenten Wirbelstrukturen erheblich ansteigen. Ein anderer Effekt der turbulenten Geschwindigkeitsfluktuationen ist die daraus folgende Fluktuation der Skalare Dichte, Temperatur und Konzentrationen. Da die chemische Reaktion stark von der Temperatur und der Zusammensetzung der Reaktionspartner abhängt, beeinflussen die Fluktuationen dieser Skalare den Reaktionsvorgang. Für die Modellierung bedeutet das, dass die Skalargrößen innerhalb einer Rechenzelle nicht konstant, wie es bei der Verwendung von gemittelten Erhaltungsgleichungen der Fall ist, sondern innerhalb eines begrenzten Bereiches verteilt sind, was mit Hilfe der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion PDF (Probability Density Function) beschrieben werden kann. Das heißt, die mittleren Reaktionsraten können durch Integration bestimmt werden, falls die PDF bekannt ist. Die zeitlichen Temperatur- und Konzentrationsfluktuationen haben aber eine gegensätzliche Auswirkung. Während

---

die Temperaturfluktuationen zur Intensivierung der Reaktion führen, haben die Konzentrationsfluktuationen eine schlechtere Vermischung der reagierenden Spezies und dadurch eine Reaktionsdrosselung zur Folge. Reaktionsvorgänge unter dem Einfluss von zeitlichen Fluktuationen wurden von Libby und Williams [LW94] und von Warnatz [WMD97] analysiert und beschrieben. Die gegensätzlichen Einflüsse können bei bestimmten Bedingungen einander kompensieren, wovon aber nicht ausgegangen werden kann. Es existieren zwei Methoden, die für die Modellierung der zeitlichen Fluktuationen von Skalaren häufig verwendet werden: die Lösung von PDF-Transportgleichungen und die empirische Konstruktion von PDF (assumed PDF).

Bei der ersten Methode handelt es sich um die Lösung der Erhaltungsgleichungen für die Teilchenmassen, die in einer direkten zeitlichen Entwicklung der PDF resultiert. Der große Vorteil dieses Verfahrens ist die exakte Behandlung der chemischen Reaktion. Die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion wird durch eine sehr große Anzahl stochastischer Partikel beschrieben. Die Lösung der PDF-Transportgleichung erfolgt mit Hilfe eines Monte-Carlo-Verfahrens. Das Verfahren ist sehr aufwändig und bei begrenzten Rechenkapazitäten auf kleine chemische Systeme und Rechengemetrien beschränkt.

Bei dem zweiten Verfahren werden Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen aus empirischen Daten rekonstruiert. Falls mit multidimensionaler Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion gearbeitet werden soll, entsteht das Problem der Berechnung der Korrelationen zwischen den einzelnen Variablen. Die Annahme, dass die Variablen voneinander unabhängig sind, führt zu einer Vereinfachung der PDF, da sich die multidimensionale PDF durch ein Produkt eindimensionaler PDFs berechnen lässt. Diese Annahme reduziert die Anforderungen an die Rechnerkapazität und ermöglicht auch die Simulation mit vollständiger Behandlung der chemischen Kinetik. Die durch diese Annahme entstehenden Fehler werden gegenwärtig untersucht [GMB01], [Ger02].

Die beiden Methoden sind ebenfalls sehr rechenintensiv und können nur durch die Verwendung von Hochleistungsrechnern angewandt werden. Neben den zusätzlichen Transportgleichungen und Skalaren müssen die mittleren Produktionsterme durch Integration (3.17) bestimmt werden.

Zur Zeit besteht ein großer Mangel an rechengünstigen Modellen für die Berechnung der chemischen Kinetik. Idealerweise soll das Modell auch den Einfluss der zeitlichen Fluktuationen auf die Kinetik beinhalten, damit man den Integrationsvorgang für die Berechnung der mittleren Reaktionsraten während der Simulation einsparen kann.

Ziel dieser Arbeit war, ein Modell mit den beschriebenen Eigenschaften zu entwickeln, das eine effiziente Simulation der Reaktionsvorgänge in der SCRamjet-Brennkammer ermöglicht. Zusätzlich musste die Modellierungsstrategie auf die Berechnung von technisch relevanten Brennkammern ausgerichtet werden. Daneben wurde das Ziel verfolgt, die Modellierungsmethode so zu strukturieren, dass sie in Zukunft auch mit hochpräzisen Rechenmethoden (PDF-Transportgleichung und assumed PDF) kombiniert werden kann, die so aufgrund der hohen Recheneffizienz auch auf komplizierte Brennkammergeometrien technischen Interesses angewandt werden können, ohne dass exzessive Anforderungen an die Rechenhardware gestellt werden.

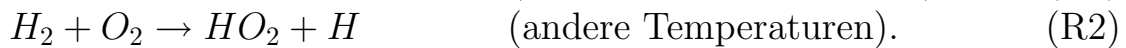
### 3.1 Chemische Reaktionskinetik des Wasserstoff-Luft-Systems

Die Zündung und der Verlauf der Reaktion erfolgen über die Radikalkettenmechanismen. Das heißt, dass das Reaktionsprodukt Wasser nicht direkt durch die Reaktion zwischen Wasserstoff und Sauerstoff gebildet wird, sondern dass mehrere Zwischenreaktionen stattfinden. Zuerst werden durch die Ketteneinleitungsschritte reaktive Spezies (Radikale) aus stabilen Spezies gebildet. Bei den Kettenfortpflanzungsschritten reagieren die Radikale mit den stabilen Spezies unter

Bildung einer anderen reaktiven Spezies. Die Kettenverzweigungsschritte, bei denen ein Radikal mit einer stabilen Spezies unter Bildung zweier neuer Radikale reagiert, führen zur Erhöhung der Radikalkonzentration und Intensivierung des Reaktionsverlaufs. Durch die Kettenabbruchschritte reagieren die Radikale zu stabilen Molekülen und beenden die Reaktion.

Der Radikalkettenmechanismus des Wasserstoff-Sauerstoff-Systems kann folgendermaßen dargestellt werden [Tur96]:

Die *Ketteneinleitungsreaktionen* sind:



Die *Kettenfortpflanzungs-* und *Kettenverzweigungsreaktionen*, die  $O$ ,  $H$  und  $OH$  Radikale involvieren lauten:



Die *Kettenabbruchschritte* von  $O$ ,  $H$  und  $OH$  Radikalen durch trimolekulare Rekombinationsreaktionen sind:



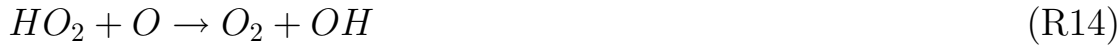
wobei  $M$  den dritten Stoßpartner repräsentiert.

Um den Mechanismus zu vervollständigen, müssen die Reaktionen, die das Hydroperoxi-Radikal  $HO_2$  und das Wasserstoffperoxid  $H_2O_2$  betrachten, eingeschlossen werden. Wenn die Reaktion



aktiv wird, treten die folgenden Reaktionen und die Rückwärtsreak-

tion von (R2) auf:



Der Verbrauch des Hydroperoxi-Radikals  $HO_2$  mit der Bildung des Wasserstoffperoxids  $H_2O_2$  erfolgt folgendermaßen:



mit nachfolgendem  $H_2O_2$ -Verbrauch durch:



Die Analyse der Zündung von Wasserstoff-Sauerstoff-Gemischen in einem heißen Gefäß [WMD97], [Tur96] zeigt eine starke Abhängigkeit der Zündung vom Druck und der Temperatur. In Bezug auf den Druck und die Temperatur existieren drei Zündgrenzen für Wasserstoff-Sauerstoff-Gemische, die durch verschiedene physikalische Vorgänge (Temperaturabhängigkeit der Elementarreaktionen, Wärmeleitung und Diffusion) zu erklären sind. Eine detaillierte Analyse der Zündgrenzen wurde von Maas und Warnatz [MW88] durchgeführt. Entsprechend dieser Einteilung liegen die thermodynamischen Bedingungen (T, P) in der Brennkammer im Bereich der dritten (thermischen) Zündgrenze, wobei die Zündung durch die Konkurrenz von Wärmeerzeugung infolge der chemischen Reaktion und von Wärmeabfuhr aus der Reaktionszone kontrolliert wird. Mit zunehmendem Druck steigt die Wärmeproduktion pro Volumeneinheit, so dass bei einem höheren Druck die Zündung schon bei einer niedrigeren Temperatur stattfindet. Diese Vorgänge werden durch den Einfluss unterschiedlicher chemischer Prozesse weitaus komplexer. Bei einem geringen statischen Druck in der Brennkammer, wie z.B. in den Rezirkulationszonen mit hohen Totaldruckverlusten,

können sich die thermodynamischen Bedingungen in den Bereich der zweiten Zündgrenze verschieben, die von der Konkurrenz zwischen Kettenverzweigungs- und Kettenabbruchsreaktionen bestimmt wird.

In Abhängigkeit von der Temperatur dominieren unterschiedliche Reaktionen im Radikalkettenmechanismus und bewirken folglich eine Dominanz unterschiedlicher Radikale. Es existieren viele experimentelle und numerische Untersuchungen zur Bedeutung von Reaktionswegen und Radikalen bei verschiedenen Temperaturen und Flammenarten, die in der letzten Zeit veröffentlicht wurden. Bei hohen Temperaturen (über 1100 K) und stöchiometrischen Gemischen dominieren die Kettenverzweigungsreaktionen (R3), (R4) und (R5) im Kettenzyklus, was zu einer hohen Konzentration von  $H$ -,  $O$ -Atomen und  $OH$ -Radikalen führt. Die Untersuchung von vorgemischten Flammen mit variabler Luftzahl von Fukutani et al. [FYJ90] zeigte eine starke Abhängigkeit der  $H$ -,  $O$ -,  $OH$ -Konzentration von der Luftzahl. Während bei der stöchiometrischen Flamme die  $H$ -Atome dominieren, überwiegen bei mageren Flammen  $OH$ -Radikale und atomarer Sauerstoff. Die Untersuchung der Wasserstoffverbrennung im Überschall-Luftstrom von Algermissen [AN70] zeigte, dass die Bedeutung der  $HO_2$ -Reaktionen mit fallender Temperatur wächst. Hauptsächlich wird die Zündung bei Temperaturen unter 1100 K durch die Konkurrenz zwischen der Kettenverzweigungsreaktion (R3) und der Kettenabbruchsreaktion R11 sowie die Rückwärtsreaktion von (R2) kontrolliert. Die experimentelle und numerische Untersuchung der laminaren Flammengeschwindigkeiten von Ergolfopoulos und Law [EL90] zeigte auch die Wichtigkeit von  $HO_2$  und  $H_2O_2$  bei sehr mageren Gemischen mit niedriger Flammentemperatur. Im Gegenteil dazu wird bei Hochtemperaturflammen der Reaktionsverlauf hauptsächlich von Kettenverzweigungs- und Kettenabbruchsreaktionen zwischen  $H$  und  $O_2$  beeinflusst. Die Analyse von fünf verschiedenen Reaktionsmechanismen für die Berechnung der laminaren Flammen zeigte einen Mangel der Reaktionskinetik bezüglich  $HO_2$  und  $H_2O_2$  bei allen Mechanismen und dadurch eine schlechte Korrelation zwischen numerischen und experimentellen Ergebnissen für magere Flammen. Die Untersuchung der

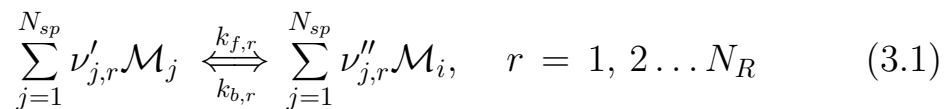
Zündgrenzen von nicht-vorgemischten Wasserstoff-Luft Gegenstrom-Flammenkonfigurationen von Kreuzt und Law [KL96] zeigte eine zusätzliche Kettenfortpflanzung durch (R15) - (R20) und Kettenverzweigung durch (R16) - (R20) für die dritte Zündgrenze, deren Bedeutung bei steigendem Druck zunimmt und zu einer Steigerung der  $HO_2$ - und  $H_2O_2$ -Konzentrationen führt.

Das Verständnis für die Reaktionskinetik spielt eine entscheidende Rolle für die Modellierung der Verbrennungsphänomene, wobei chemische Effekte von großer Bedeutung sind. Die Schwächen der Reaktionsmechanismen bei niedrigeren Temperaturen, bzw. der Mangel an der Beschreibung der  $HO_2$  und  $H_2O_2$  Kinetik bewirken eine Unsicherheit bei der Simulation reagierender Strömungen und führen zum Problem, dass die Ergebnisse deutlich vom ausgewählten Reaktionsmechanismus abhängen. Da in einer Überschallbrennkammer Zonen mit stark unterschiedlichen Temperaturen und Drücken existieren, laufen Zündung und Reaktionsausbreitung gleichzeitig durch verschiedene Kettenmechanismen ab, was die Möglichkeiten zur Reduzierung der Reaktionsmechanismen extrem einschränkt.

### 3.2 Berechnung der chemischen Reaktionsraten

Die Berechnung der reinen chemischen Reaktionsraten (ohne Berücksichtigung der turbulenten Fluktuationen) erfolgt nach dem Arrheniusgesetz.

Jede Elementarreaktion eines Reaktionsmechanismus, der aus  $N_R$  Elementarreaktionen von  $N_{sp}$  Spezies besteht, kann in allgemeiner Form folgendermaßen geschrieben werden:



mit

$\nu'_{j,r}$  – stöchiometrischer Koeffizient für Reaktand  $i$  in Reaktion  $r$ ,

$\nu''_{j,r}$  – stöchiometrischer Koeffizient für Produkt  $i$  in Reaktion  $r$ ,  
 $\mathcal{M}_i$  – Symbol für die Spezies  $i$ .

Die Summierung in Gleichung (3.1) erfolgt über alle chemischen Spezies im System, wobei aber nur die an der Reaktion beteiligten Spezies einen Koeffizienten besitzen, der ungleich Null ist. Deswegen werden alle an der Reaktion nicht beteiligten Spezies eliminiert.

Die Bildungsgeschwindigkeit einer Spezies  $i$ , die als der chemische Quellterm in Gleichung (2.9) bezeichnet wird, ergibt sich durch Summation über die Zeitgesetze in den einzelnen Elementarreaktionen:

$$R_j = M_{w,j} \hat{R}_j = M_{w,j} \sum_{r=1}^{N_R} \hat{R}_{j,r} \quad (3.2)$$

wobei  $M_{w,j}$  die molare Masse der Spezies  $j$  und  $\hat{R}_{j,r}$  die molare Bildungsrate der Spezies  $j$  in der Reaktion  $r$  sind.

Ist die Gleichung einer Elementarreaktion durch Gleichung (3.1) gegeben, dann folgt für das Zeitgesetz der Bildung der Spezies  $i$  in der Reaktion  $r$ :

$$\hat{R}_{i,r} = \Gamma_r (\nu''_{i,r} - \nu'_{i,r}) \left( k_{f,r} \prod_{j=1}^{N_{sp}} [X_j]^{\nu'_{j,r}} - k_{b,r} \prod_{j=1}^{N_{sp}} [X_j]^{\nu''_{j,r}} \right) \quad (3.3)$$

mit

$k_{f,r}$  – Vorwärtsgeschwindigkeitskoeffizient für Reaktion  $r$ ,

$k_{b,r}$  – Rückwärtsgeschwindigkeitskoeffizient für Reaktion  $r$ .

$\Gamma$  repräsentiert den gesamten Einfluss von Stoßpartnern auf die Reaktionsrate mit

$$\Gamma_r = \sum_j^{N_{sp}} \gamma_{j,r} [X_j] \quad (3.4)$$

$\gamma_{j,r}$  ist die Stoßpartnereffizienz der Spezies  $j$  in der Reaktion  $r$ .



Der Vorwärtsgeschwindigkeitskoeffizient  $k_{f,r}$  einer Elementarreaktion  $r$  ist temperaturabhängig und wird nach dem Arrheniusgesetz berechnet:

$$k_{f,r} = A_r T^{b_r} e^{-E_{a_r}/RT} \quad (3.5)$$

wobei

$A_r$  – präexponentieller Faktor,

$b_r$  – Temperaturexponent,

$E_{a_r}$  – Aktivierungsenergie der Reaktion,

$R$  – allgemeine Gaskonstante

sind.

Die Berechnung des Geschwindigkeitskoeffizienten für die Rückwärtsreaktion  $k_{b,r}$  erfolgt über das chemische Gleichgewicht. Es gilt

$$k_{b,r} = \frac{k_{f,r}}{K_{c,r}} \quad (3.6)$$

$K_{c,r}$  ist die Gleichgewichtskonstante für die Reaktion  $r$  und wird folgendermaßen berechnet:

$$K_{c,r} = \exp\left(\frac{\Delta S_r^0}{R} - \frac{\Delta H_r^0}{RT}\right) \left(\frac{p_{\text{atm}}}{RT}\right)^{\sum_{j=1}^{N_{sp}} (\nu''_{j,r} - \nu'_{j,r})} \quad (3.7)$$

$p_{\text{atm}}$  bezeichnet den Atmosphärendruck (101325 Pa). Die Terme im Exponenten repräsentieren die Änderung der Gibbs-Energie (Freie Enthalpie) und werden wie folgt bestimmt:

$$\frac{\Delta S_r^0}{R} = \sum_{j=1}^{N_{sp}} (\nu''_{j,r} - \nu'_{j,r}) \frac{\bar{s}_j^0}{R} \quad (3.8)$$

$$\frac{\Delta H_r^0}{RT} = \sum_{j=1}^{N_{sp}} (\nu''_{j,r} - \nu'_{j,r}) \frac{\bar{h}_j^0}{RT} \quad (3.9)$$

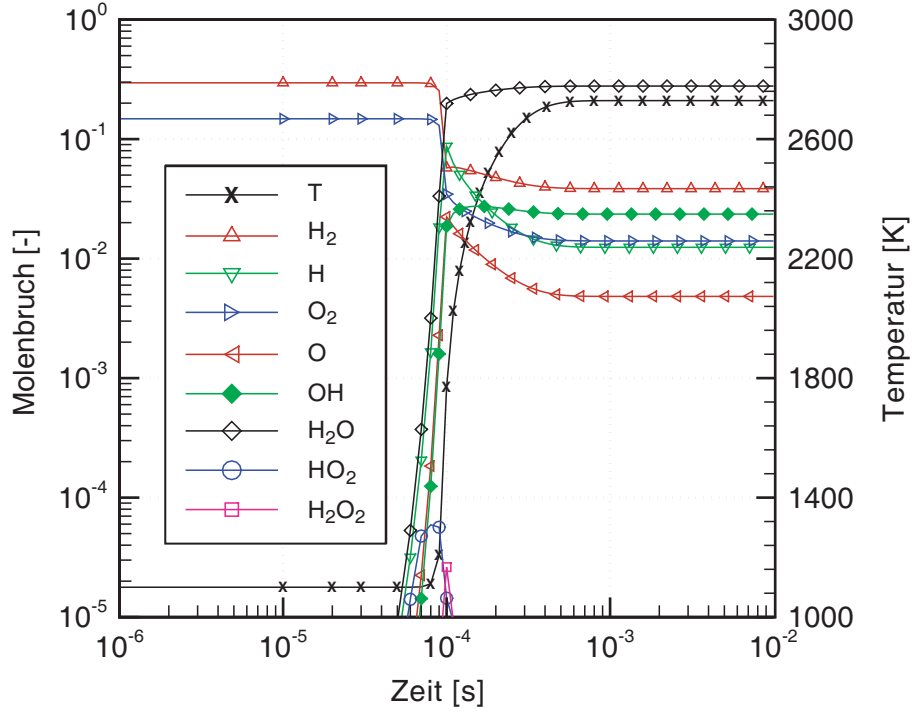
$\bar{s}_j^0$  und  $\bar{h}_j^0$  sind die Standard-Entropie bzw. Standard-Bildungsenthalpie, die aus der thermodynamischen Datenbank des *CHEMKIN II* Packages [San89] extrahierbar sind.

Der CFD-Code *FLUENT* stellt dem Benutzer das *Finite-Rate* Modell zu Verfügung, das die chemische Reaktionsrate gemäß obiger Beschreibung berechnet. Für die Berechnung benötigt das Modell einen Reaktionsmechanismus, der vom Benutzer eingegeben werden muss.

Das Modell beschreibt laminare Flammen mit einer hohen Genauigkeit und ist im Allgemeinen durch die hochgradig nicht-lineare Arrheniussche chemische Kinetik für turbulente Verbrennung nicht geeignet. Eine Ausnahme besteht aber für die Verbrennung mit relativ langsamer Chemie und kleinen turbulenten Fluktuationen, wie z.B. bei der Überschallverbrennung. Daher wird dieses Modell schon seit langer Zeit für die Modellierung der Verbrennung in Hochgeschwindigkeitsströmungen erfolgreich eingesetzt [MW90], [SMJ98], [GSB98], [Jac92].

### 3.3 Auswahl des Reaktionsmechanismus

Zur Untersuchung der Zündvorgänge werden seit längerer Zeit null-dimensionale Reaktorsysteme verwendet [San89], wobei die Reaktion eines homogenen Gemisches zeitabhängig betrachtet wird. Dabei wird der Einfluss der Strömung auf die Reaktion abgekoppelt, so dass nur rein thermodynamische und chemische Vorgänge stattfinden können. Für die Analyse der Reaktionsvorgänge wurde ein Konstantdruckreaktor verwendet, in dem die Reaktion unter konstantem Druck und adiabat stattfindet, was eine konstante Enthalpie des Gasgemisches während der Reaktion zur Folge hat. Da keine Gradienten der Temperatur und der Spezieskonzentrationen im Reaktor auftreten, kann die Evolution des Systems durch Spezieskonzentrationen und Temperatur beschrieben werden. Die zeitliche Änderung der Temperatur und der Spezieskonzentrationen im Konstantdruck-



**Abbildung 3.1:** Selbstzündung und Reaktionsverlauf im Konstantdruckreaktor.  $p = 1 \text{ bar}$ ,  $T_0 = 1100 \text{ K}$ ,  $\phi = 1$

reaktor [Tur96] kann durch die Lösung eines Differentialgleichungssystems erster Ordnung beschrieben werden. Die Temperatur wird durch

$$\frac{dT}{dt} = f([X_i], T) = -\frac{\sum_{i=1}^{N_{sp}} (\bar{h}_i \dot{\omega}_i)}{\sum_{i=1}^{N_{sp}} ([X_i] \bar{c}_{p,i})} \quad (3.10)$$

berechnet, während die Spezieskonzentrationen dem Zusammenhang

$$\frac{d[X_i]}{dt} = f([X_i], T) = \dot{\omega}_i - [X_i] \left[ \frac{\sum_{j=1}^{N_{sp}} \dot{\omega}_j}{\sum_{j=1}^{N_{sp}} [X_j]} + \frac{1}{T} \frac{dT}{dt} \right] \quad (3.11)$$

folgen. Als Anfangsbedingungen für die Temperatur und die Konzentrationen werden

$$T_{t=0} = T_0, \quad [X_i]_{t=0} = [X_i]_0 \quad (3.12)$$

gewählt.  $\dot{\omega}_i$  bezeichnet die molare Bildungsgeschwindigkeit einer Spezies  $i$ .

$$\dot{\omega}_i = \sum_{r=1}^{N_R} \hat{R}_{i,r} \quad (3.13)$$

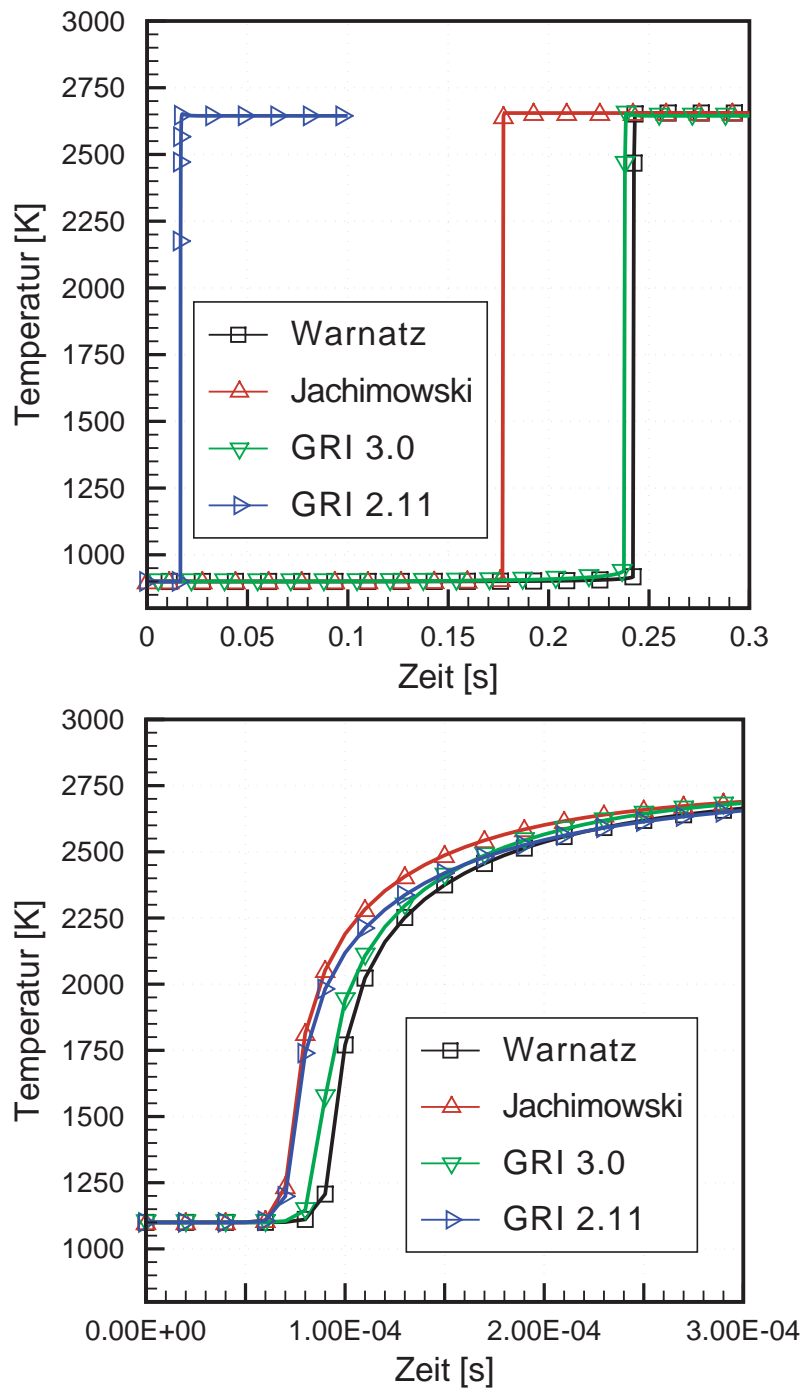
Der berechnete Reaktionsverlauf im Konstantdruckreaktor mit  $p = 1 \text{ bar}$  für ein stöchiometrisches Wasserstoff-Luft Gemisch mit der Anfangstemperatur  $1100 \text{ K}$  ist in Abbildung 3.1 dargestellt. Man sieht, dass die Zündung nach einer Induktionszeit von ca.  $0.1 \text{ ms}$  beginnt und einen explosiven Charakter besitzt. Der Grund dafür ist, dass während der Induktionszeit durch Kettenverzweigungsreaktionen Radikale gebildet werden, die das System zur Zündung führen. Die Radikalkonzentration erreicht während der Zündung ein Maximum von ca. 10%–15% des Gemischmolenbruchs.

Aus dem Verlauf der Temperatur lässt sich die Zündverzugszeit (Induktionszeit)  $\tau_{ind}$  bestimmen, die als der Wendepunkt des Temperaturverlaufs definiert wurde.

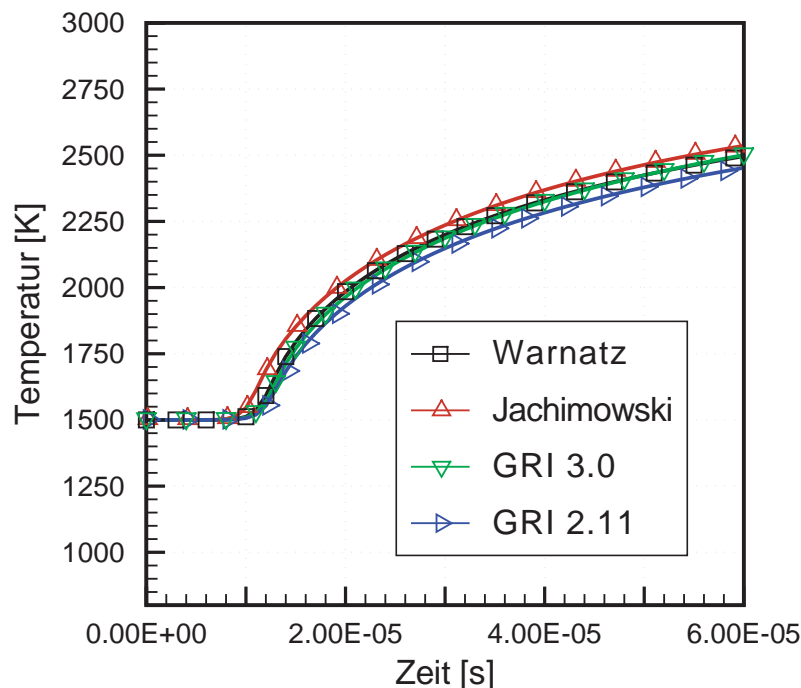
$$\frac{d^2T}{dt^2} = 0 \quad \Rightarrow \quad t = \tau_{ind} \quad (3.14)$$

Die Analyse der Induktionszeit in Bezug auf die Gemischzusammensetzung, den Druck und die Anfangstemperatur ermöglicht die Bestimmung der für die Selbstzündung in der Brennkammer notwendigen Bedingungen. Um eine stabile Zündung zu erreichen, muss sich das Gemisch länger als die Induktionszeit in der potenziellen Zündungszone aufhalten.

Sowohl für die Analyse der Induktionszeit als auch für die Verbren-



**Abbildung 3.2:** Zündverzugszeit in einem homogenen Konstantdruckreaktor mit verschiedenen Reaktionsmechanismen,  $T_0 = 900\text{ K}$  (oben),  $T_0 = 1100\text{ K}$  (unten)



**Abbildung 3.3:** Zündverzugszeit in einem homogenen Konstantdruckreaktor mit verschiedenen Reaktionsmechanismen,  $T_0 = 1500 \text{ K}$

nungssimulation in der Brennkammer ist ein Reaktionsmechanismus notwendig. Bei der Auswahl eines Reaktionsmechanismus tritt das Problem auf, dass bekannte Mechanismen sehr unterschiedliche Ergebnisse bzw. unterschiedliche Zündverzugszeiten im Temperaturbereich von 900 bis 1100 K liefern, obwohl im Hochtemperaturbereich (über 1100-1200 K) alle weitgehend identisch sind. Um dieses Phänomen zu untersuchen, wurden die Reaktionsmechanismen von Warnatz [WMD97], Jachimowski [GMB01] und vom *Gas Research Institute* (GRI 2.11 und GRI 3.0) [SGF<sup>+</sup>99] verwendet. Die Simulationsergebnisse für drei Anfangstemperaturen von 900 K, 1100 K und 1500 K unter einem konstanten Druck von 1 bar sind in Abbildungen 3.2 und 3.3 dargestellt. Man sieht, dass die Temperaturverläufe für alle vier Mechanismen bei den Anfangstemperaturen von 1100 K und 1500 K identisch sind und eine große Abweichung bei der Anfangstemperatur von 900 K zwischen dem GRI 2.11 Me-

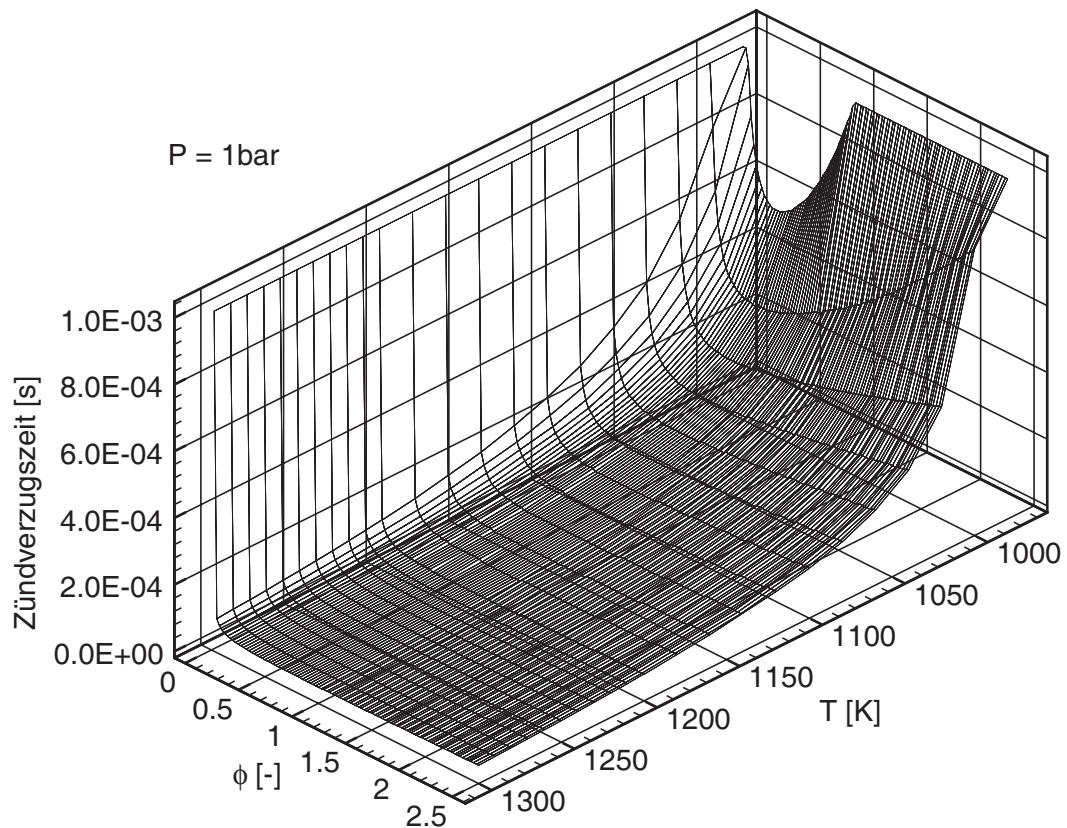
chanismus und den Mechanismen von Warnatz, Jachimowski und GRI 3.0 vorliegt. Der Grund für solche Abweichungen bei niedrigen Temperaturen liegt mit hoher Wahrscheinlichkeit in der  $HO_2$ - und  $H_2O_2$ -Reaktionskinetik, die in Abschnitt 3.1 analysiert wurde. Da die Zündbedingungen in der betrachteten Brennkammer im kritischen Bereich (900-1300 K) liegen, spielt der Reaktionsmechanismus eine große Rolle bei der Modellierung der Selbstzündvorgänge.

Die Recherche der veröffentlichten Ergebnisse zeigt, dass zur Zeit keine eindeutige Validierung der Reaktionsmechanismen bei niedrigen Temperaturen (unter 1100 K) existiert. Die Validierungsexperimente von Egolfopoulos et al. [EL90] und von Vandooren et al. [VB90], die unterschiedliche Reaktionsmechanismen<sup>2</sup> in Bezug auf die Berechnung der laminaren Flammengeschwindigkeit und der Konzentrationsverläufe von Radikalen in der Reaktionszone untersuchten, zeigen, dass in Abhängigkeit der analysierten Parameter (Konzentrationsverlauf einer Spezies, laminare Flammengeschwindigkeit) und Bedingungen (Äquivalenzverhältnis des Gemisches) jeder Reaktionsmechanismus Vorteile und Nachteile hat. Eine klare Aussage über den generellen Vorzug eines Mechanismus kann nicht getroffen werden.

Für die numerischen Arbeiten wurde von Anfang an das Reaktionsschema von Warnatz (Anhang A) eingesetzt, das für die numerischen Untersuchungen in Rahmen des Sonderforschungsbereichs 255 schon früher verwendet wurde [All99]. Eine Besonderheit dieses Mechanismus ist, dass Koeffizienten für die Berechnung der Rückwärtsreaktionen existieren [MW90], so dass die Berechnung der entsprechenden Raten sowohl aus dem chemischen Gleichgewicht, als auch mit dem Arrheniusgesetz erfolgen kann. Obwohl die direkte Berechnung der Geschwindigkeitskoeffizienten für die Rückwärtsreaktionen schneller sein sollte, zeigt die Testsimulation eine wesentlich bessere numeri-

---

<sup>2</sup>In der Arbeit von Egolfopoulos et al. wurde die laminare Flammengeschwindigkeit mit den Mechanismen von Maas und Warnatz, Tsang und Hampton, Dixon-Lewis und mit dem modifizierten Mechanismus von Yetter berechnet und mit den experimentellen Daten verglichen. In der Arbeit von Vandooren et al. wurden die Mechanismen von Miller, Dixon-Lewis, Westbrook und Warnatz untersucht, wobei die Verläufe der Spezieskonzentrationen in der Reaktionszone analysiert wurden

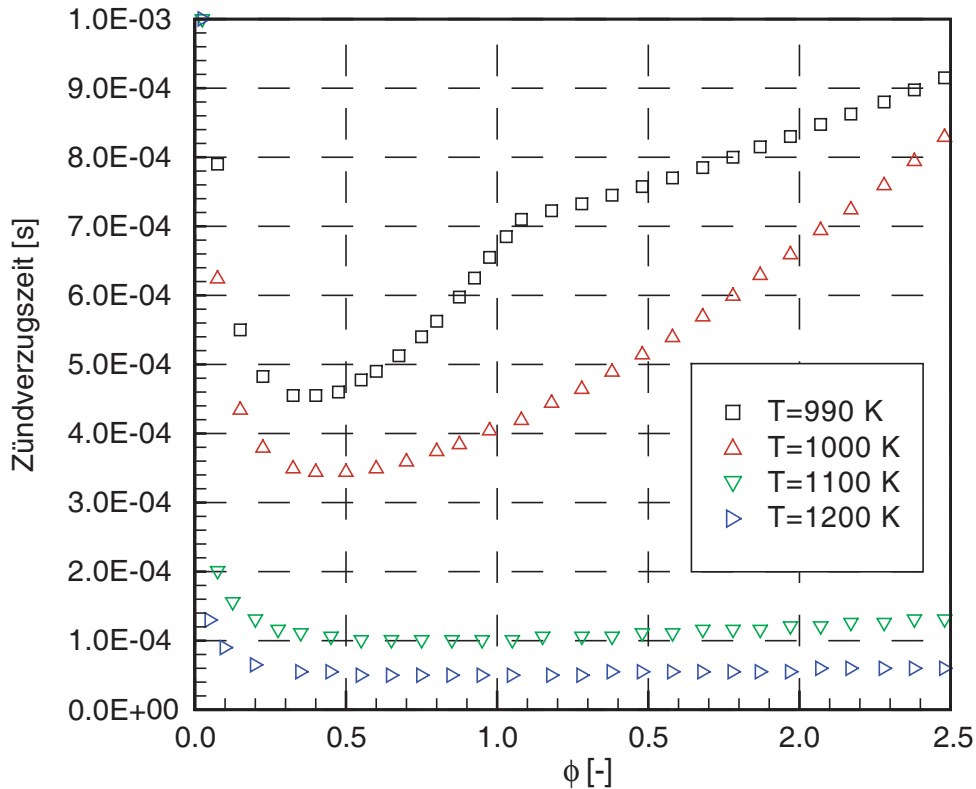


**Abbildung 3.4:** Abhängigkeit des Zündverzugs von Temperatur und Äquivalenzverhältnis bei einem Druck von 1 bar

sche Stabilität bei der Verwendung des chemischen Gleichgewichts als bei der expliziten Berechnung. Der weitere Vergleich der Reaktionsmechanismen von Warnatz mit dem von Jachimowski, der für die Simulation der Überschallverbrennung entwickelt [Jac88] und im SFB 259 eingesetzt wurde [GMB01], zeigt einen fast identischen Reaktionsverlauf in allen Temperaturbereichen.

Um den Einfluss der Temperatur, des Äquivalenzverhältnisses und des Drucks auf die Zündung zu quantifizieren, wurde die Induktionszeit in Abhängigkeit von diesen Parametern untersucht. Für den Druckbereich, der in SCRamjet-Brennkammer üblicherweise auftritt (0.7 – 1.5 bar) wurde keine wesentliche Änderung der Induktionszeit





**Abbildung 3.5:** Abhängigkeit des Zündverzugs vom Äquivalenzverhältnis  $\phi$

festgestellt. Durch die Änderung des Drucks in einem breiteren Bereich (0.1 – 100 *bar*) wird die Zündung natürlich stark beeinflusst [VFDD96]. Die Analyse der Induktionszeit beim konstanten Druck von 1 *bar* in Abhängigkeit von der Temperatur und dem Äquivalenzverhältnis zeigte, dass der Einfluss der Temperatur wesentlich größer ist als der des Äquivalenzverhältnisses (Abbildung 3.4). Man sieht extreme Gradienten im Zündverzug entlang der Temperaturachse im Bereich unterhalb 1100 *K*, der Einfluss des Äquivalenzverhältnisses ist deutlich geringer und nur in einem lokalen Bereich unter 1150 *K* deutlich zu erkennen.

Die Kurven für die konstanten Temperaturen von 990, 1000, 1100 und 1200 *K* sind nochmals in Abbildung 3.5 dargestellt. Für die Temperaturen 1100 und 1200 *K* ist ein Einfluss des Äquivalenzverhältnisses

nur bei extrem mageren Gemischen festzustellen. Mit der Absenkung der Temperatur unter  $1150\text{ K}$  ist ein Minimum beim Äquivalenzverhältnis von ca.  $0.3 - 0.4$  deutlich zu sehen. Das bestätigt auch Huber [HSM79], der findet, dass die Zündung in SCRamjet-Brennkammern meistens in den Zonen mit einem Äquivalenzverhältnis von ca.  $0.2$  stattfindet. Die starke Verschiebung des Minimums in den mageren Bereich in seiner Studie kann durch den Einfluss der Gemischtemperatur erklärt werden, da in der Brennkammer kalter Brennstoff mit dem heißen Luftstrom gemischt wird und unter mageren Bedingungen die höchsten Temperaturen zu erwarten sind.

### 3.4 Reduzierung der chemischen Reaktionskinetik

Für Verbrennungsprozesse, bei denen die chemische Kinetik eine wichtige Rolle spielt, werden schon seit längerer Zeit Methoden entwickelt, um den Reaktionsmechanismus und die Anzahl von Spezies zu reduzieren. Dadurch werden sowohl Speicherbedarf als auch die Simulationszeit reduziert. Es existieren mehrere Methoden zur Reduzierung der vollständigen Reaktionskinetik. Der Hintergrund bei allen Reduzierungsmethoden ist, dass bekannte vollständige Reaktionsmechanismen selbst schon reduziert sind, da sie nicht alle möglichen Spezies (Ionen) involvieren, und den Quantenzustand der Moleküle nicht berücksichtigen. Eine derartige Betrachtung des Problems ist aber sehr puristisch und für die technisch relevanten Verbrennungsprozesse uninteressant. Jede Reduzierungsmethode lässt sich wie folgt rechtfertigen: Alle Reaktionsmechanismen haben einen Anwendungsbereich im Temperatur-, Druck- und Konzentrationsraum. Sie werden an bestimmte experimentelle Ergebnisse angenähert und müssen gewisse Vorgänge, wie z.B. die Induktionszeit, reproduzieren. Das bedeutet, dass, falls ein Reaktionsmechanismus in einem breiteren Bereich funktioniert, ein reduzierter Mechanismus in einem schmaleren Bereich ohne Genauigkeitsverlust verwendet werden kann.

Eine oft verwendete Möglichkeit ist die Reduzierung des Reaktionsmechanismus durch die Annahme von Quasistationarität und partiellem Gleichgewicht, wobei die Nebenspezieskonzentrationen aus den Konzentrationen der Hauptspezies berechnet werden [Smo91]. Die Erstellung der reduzierten Mechanismen nach dieser Methode ist aber sehr zeitaufwändig und benötigt sowohl eine numerische Analyse als auch experimentelle Untersuchungen [MP92]. Solche reduzierten Mechanismen liefern normalerweise nur in einem sehr engen Zustandsbereich (Temperatur, Gemischzusammensetzung) eine akzeptable Genauigkeit [WMD97].

Eine andere Methode ist die Eliminierung der schnellen Prozesse durch Entkoppelung der Zeitskalen, die mit Hilfe der *CSP* (Computational Singular Perturbation Theory) durchgeführt wird. Eine ähnliche Methode ist die Verwendung von niedrigdimensionalen Mannigfaltigkeiten *ILDM* (Intrinsic Low-Dimensional Manifolds) [MP92], wobei die schnellen Reaktionstrajektorien von den langsamen entkoppelt werden. Die Verwendung solcher Methoden für die Modellierung der Überschallverbrennung ist nicht anzuraten, obwohl sie erfolgreich für die Berechnung von vorgemischten und nicht-vorgemischten turbulenten Flammen im Unterschall verwendet werden. Der Grund dafür ist das sehr breite Spektrum von Zustandsbedingungen in der SCRamjet-Brennkammer, das durch Stöße, Rezirkulationszonen und Mischungsvorgänge charakterisiert ist. Das bedeutet, dass bei der Zündung und Reaktionsausbreitung unterschiedliche Kettenmechanismen zum Einsatz kommen, wie in Abschnitt 3.1 gezeigt wurde. Da die Reaktion sowohl in lokalen Unterschallzonen als auch in der Überschallströmung stattfindet, sind auch die kleinsten chemischen Zeitskalen wirksam und können nicht entkoppelt werden. Zusätzlich führt die Eliminierung einer Spezies, die während der Reaktion eine hohe Konzentration erreicht, zu einer Änderung der gasdynamischen Vorgänge in der Reaktionszone.

Eine Alternative bietet die Methode von Pilling [Pil97], in der die Reduzierung der Reaktionsmechanismen ohne Analyse der Zeitskalen und zeitaufwändiger experimenteller Arbeiten erfolgt. Im Rahmen

der vorliegenden Arbeit wurde das Potenzial dieser Reduzierungsart für die Überschallverbrennung untersucht. Neben der Reduzierung des Reaktionsmechanismus mit der nachfolgenden Anwendung für die Simulation der Überschallverbrennung wurde das Ziel verfolgt, eine Reaktionsbeschreibung mit der reduzierten Dimensionalität für die Entwicklungszwecke des in Abschnitt 3.6 vorgestellten Tabellierungskonzeptes zu erstellen.

Das Funktionsprinzip der Methode kann folgendermaßen vorgestellt werden. Die im Reaktionsmechanismus beteiligten Spezies können in drei Kategorien eingeteilt werden: *wichtige* Spezies, die vom Mechanismus reproduziert werden müssen (normalerweise Edukte und Produkte  $H_2$ ,  $O_2$ ,  $H_2O$ ), *notwendige* Spezies, die zur Reproduzierungs-genauigkeit der wichtigen Spezies dienen und alle anderen *eliminierten* Spezies, die vernachlässigt werden können. Die Reduzierungsmethode basiert auf der Analyse der Jacobi-Matrix des chemischen Systems:

$$\mathbf{J} = \frac{\partial \dot{\omega}}{\partial [\mathbf{X}]} \quad (3.15)$$

Eine Spezies kann eliminiert werden, wenn ihre Konzentrationsänderung keinen bedeutenden Einfluss auf die Produktionsrate der wichtigen Spezies hat. Das Element der normierten Jacobi-Matrix  $(\partial \ln \dot{\omega}_j) / (\partial \ln [X_i])$  zeigt die partielle Änderung der Produktionsrate der Spezies  $j$ , verursacht durch die partielle Änderung der Spezieskonzentration  $i$ . Der Einfluss der Konzentrationsänderung der Spezies  $i$  auf die Produktionsrate der Gruppe aus den  $N_w$  wichtigen Spezies kann durch die Summe der Quadrate der normierten Jacobi-Elemente bewertet werden.

$$B_i = \sum_{j=1}^{N_w} \left( \frac{\partial \ln \dot{\omega}_j}{\partial \ln [X_i]} \right)^2 \quad (3.16)$$

Je höher der  $B_i$ -Wert, desto größer ist der Einfluss der Spezies  $i$  auf die Reproduzierung der wichtigen Spezies. Eine iterative Analyse

des Reaktionssystems ermöglicht, die Gruppen von notwendigen und eliminierten Spezies zu finden. Als Ergebnis dieser Analyse wurden die Spezies wie folgt eingeteilt:

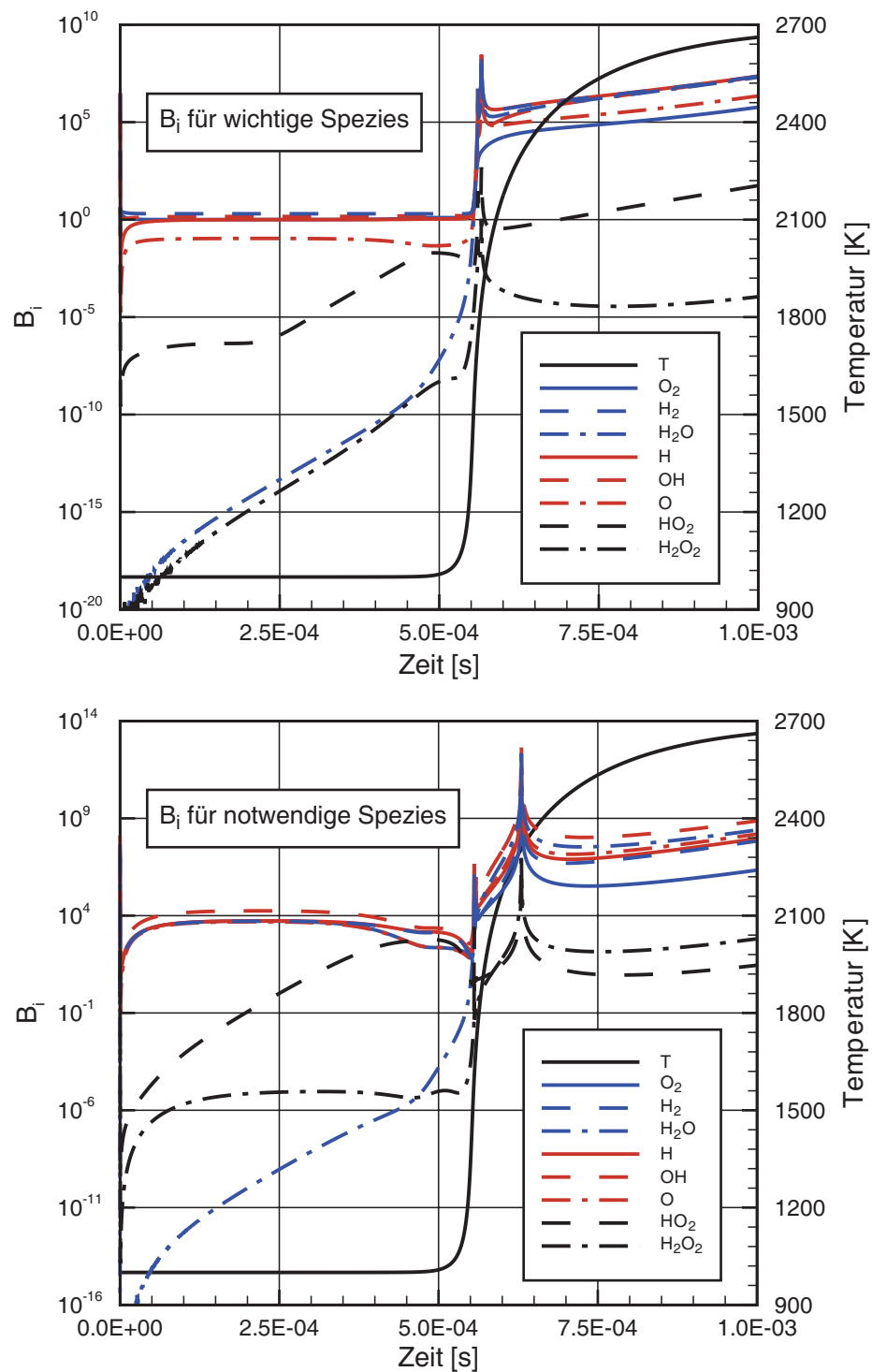
Wichtige Spezies :  $H_2, O_2, H_2O$

Notwendige Spezies :  $H, O, OH$

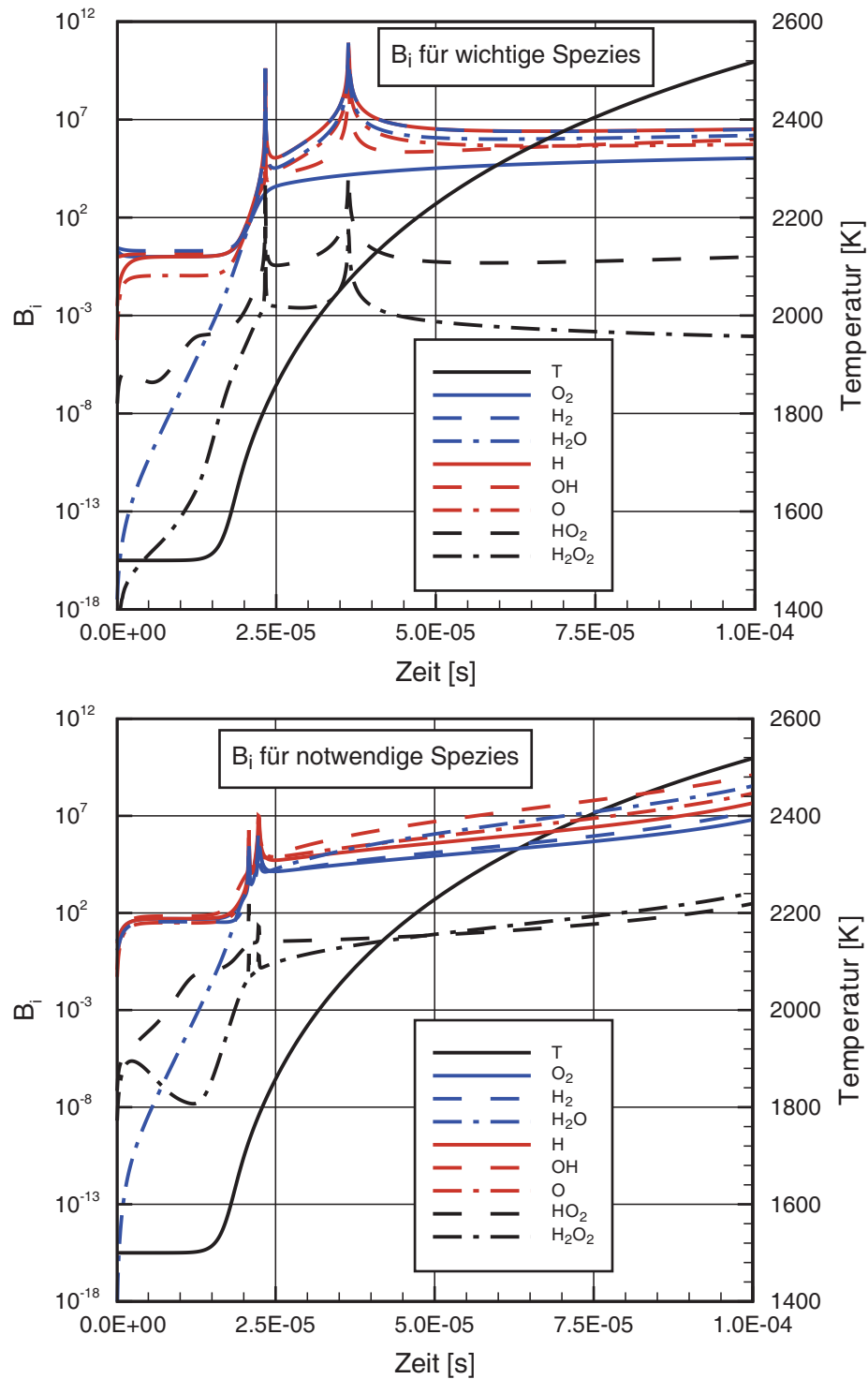
Eliminierte Spezies :  $HO_2, H_2O_2$

Die relativen Niveaus der  $B_i$ -Werte während der Reaktion in einem Konstantdruckreaktor sind für beide Temperaturbereiche (niedrige unter 1100 K und hohe über 1100 K) qualitativ sehr ähnlich und in Abbildung 3.6 für die Anfangstemperatur 1000 K und in Abbildung 3.7 für die Anfangstemperatur 1500 K dargestellt. Man sieht, dass in beiden Fällen die Änderungen der als unnötig bezeichneten Spezies ( $HO_2$  und  $H_2O_2$ ) den kleinsten Einfluss auf die wichtigen und notwendigen Spezies haben.

Obwohl die  $B_i$ -Werte des Hydroperoxi-Radikals und von Wasserstoffperoxid wesentlich kleiner als bei anderen Zwischenprodukten sind, kann deren Reduzierung zu Problemen im unteren Temperaturbereich führen. Um diese potenzielle Gefahr zu verringern, wurden diese Spezies nur aus der Strömung eliminiert (Transportgleichungen), wobei der Reaktionsmechanismus unverändert blieb. Die Konzentrationen von  $HO_2$  und  $H_2O_2$  während der Reaktion liegen unter ca.  $10^{-4}$  (volumetrischer Anteil), und deren Eliminierung aus der Strömung hat keinen Einfluss auf physikalische Eigenschaften des Gases. Bei der Berechnung wurden die  $HO_2$ - und  $H_2O_2$ -Konzentrationen immer am Ende des integrierten Zeitintervalls eliminiert, wobei sie aber an der Reaktion teilnahmen. Das bedeutet, dass wichtige Kettenreaktionen nicht unterbrochen wurden. In den nächsten Abschnitten wird die Genauigkeit dieser Art der Reduzierung für die Berechnung der Überschallverbrennung genauer untersucht.



**Abbildung 3.6:**  $B_i$ -Werte der Spezies in Bezug auf wichtige (oben) und notwendige (unten) Spezies während des Reaktionsverlaufs in einem Konstantdruckreaktor ( $P = 1 \text{ bar}$ ) mit den Anfangsbedingungen  $T_0 = 1000 \text{ K}$ ,  $\phi = 1$



**Abbildung 3.7:**  $B_i$ -Werte der Spezies in Bezug auf wichtige (oben) und notwendige (unten) Spezies während des Reaktionsverlaufs in einem Konstantdruckreaktor ( $P = 1 \text{ bar}$ ) mit den Anfangsbedingungen  $T_0 = 1500 \text{ K}$ ,  $\phi = 1$

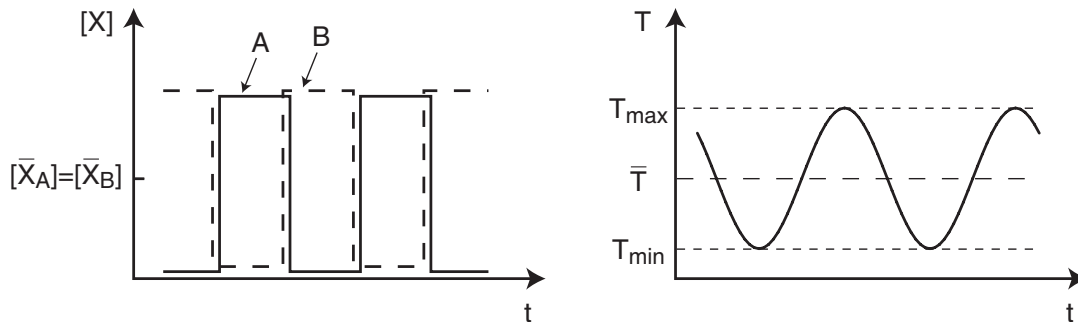
### 3.5 Einfluss der Fluktuationen auf die Reaktionsraten

Wie schon am Anfang dieses Kapitels erwähnt wurde, sind die Reaktionsvorgänge an die turbulenten Strömungsvorgänge gekoppelt. Bei der Berechnung der Überschallverbrennung wurde seit längerer Zeit standardmäßig das *Finite-Rate* Modell eingesetzt (Abschnitt 3.2) und die Turbulenz-Chemie-Wechselwirkung vernachlässigt. Im letzten Jahrzehnt wurde viel an der Methodenentwicklung zur Berücksichtigung der Turbulenz-Chemie-Wechselwirkung (sog. PDF(Probability Density Function)-Methoden) bei der Überschallverbrennung geforscht [Ger02, MGB03, MGB01], wobei aber mit diesen Methoden wegen extremen Rechenaufwands nur relativ kleine Verbrennungsaufgaben berechnet werden konnten. Im Rahmen dieser Arbeit bestand die Aufgabe der Entwicklung und des Einsatzes eines effizienten Konzeptes zur Modellierung der Überschallverbrennung in realen dreidimensionalen Brennkammern. In diesem Abschnitt werden die Methoden zur Berücksichtigung der Turbulenz-Chemie-Wechselwirkung analysiert. Es wird abgeklärt, inwieweit solche Methoden zur Simulation der realen dreidimensionalen Brennkammer eingesetzt werden können und welche Aufgaben gelöst werden müssen, um deren zukünftigen Einsatz zu ermöglichen. Außerdem ist es wichtig festzustellen, welche Folgen die Vernachlässigung dieser Wechselwirkung hat.

Bei der Berechnung der Strömungsvorgänge mit den gemittelten Erhaltungsgleichungen werden die Parameter innerhalb einer Rechenzelle und eines Zeitschrittes als konstant betrachtet. In Realität treten zeitliche Fluktuationen der Skalare ( $T$ ,  $[X_i]$ ) auf, die die Reaktionsraten beeinflussen [WMD97]. Die Auswirkung von Fluktuationen auf chemische Vorgänge kann mit Hilfe einer hypothetischen Reaktion  $A + B \rightarrow C$  demonstriert werden. Ein hypothetischer, zeitlicher Temperatur- und Konzentrationsverlauf in einer Rechenzelle ist in Abbildung 3.8 dargestellt.

Die dargestellten zeitlichen Konzentrationsverläufe der Spezies  $A$





**Abbildung 3.8:** Hypothetischer zeitlicher Konzentrations- (links) und Temperaturverlauf (rechts)

und  $B$  sind typisch für eine turbulente nicht-vorgemischte Verbrennung, wobei die Konzentrationen von  $A$  und  $B$  nie gleichzeitig von Null verschieden sind. Das bedeutet, dass die Reaktion nur lokal an der Trennfläche Brennstoff–Luft stattfinden kann und die Reaktionsgeschwindigkeit viel niedriger als bei der Annahme einer homogenen Mischung mit den Mittelwerten  $[X_A]$  und  $[X_B]$  ist. Derartige zeitliche Konzentrationsverläufe, die einen extremen Konzentrationsgradienten darstellen, sind typisch für die Eindüsungspositionen des Brennstoffs und werden strömungsabwärts geringer.

Zeitliche Temperaturschwankungen werden bei der Überschallverbrennung sowohl durch kompressible Strömungsvorgänge als auch durch die Reaktionsvorgänge verursacht. Der hypothetische sinusförmige Temperaturverlauf zeigt, dass die Temperatur zwischen  $T_{min}$  und  $T_{max}$  fluktuiert, obwohl die Lösung der gemittelten Erhaltungsgleichungen vom CFD-Code eine mittlere Temperatur  $\bar{T}$  liefert. Da der Geschwindigkeitskoeffizient einer Elementarreaktion stark nicht-linear temperaturabhängig ist (Gleichung (3.5)), ist der reale Geschwindigkeitskoeffizient größer als der Geschwindigkeitskoeffizient bei der mittleren Temperatur ( $k_r(\bar{T})$ ), was zu einer kürzeren Induktionszeit  $\tau$  führen kann.

Durch die komplexe Auswirkung auf die Reaktion ist die Berücksichtigung der Fluktuationen mit einem einfachen empirischen Modell

nicht möglich. Eine Lösung des Problems bietet die statistische Behandlung mit Hilfe von Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen (PDF). Falls die PDF bekannt ist, können mittlere Bildungsgeschwindigkeiten durch Integration bestimmt werden. Für die Beispielreaktion  $A + B \rightarrow C$  ergibt sich:

$$\bar{\omega} = \int \dot{\omega}(T, [X_A], [X_B]) P(T, [X_A], [X_B]) dT d[X_A] d[X_B] \quad (3.17)$$

wobei  $\dot{\omega}(T, [X_A], [X_B])$  die Bildungsgeschwindigkeit bei den Werten  $(T, [X_A], [X_B])$  und  $P(T, [X_A], [X_B])$  die Auftrittswahrscheinlichkeit dieser Werte ist. Das Hauptproblem bei der Integration besteht darin, dass die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion  $P$  bekannt sein muss.

Zur Bestimmung der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion existieren im Wesentlichen zwei Verfahren: die Lösung der PDF-Transportgleichungen (Monte-Carlo-Verfahren) und die empirische Konstruktion der PDF (assumed PDF). Für jedes Verfahren sind zahlreiche Varianten bekannt. Beide Methoden stellen sehr hohe Anforderungen an die benötigte Rechnerkapazität. In Hinsicht auf den Einsatz der numerischen Methode zur Untersuchung und Weiterentwicklung einer technisch-relevanten Überschallbrennkammer muss geprüft werden, ob das PDF-Verfahren bezüglich der Simulationse Genauigkeit und der notwendigen Rechnerleistung anwendbar ist. Um diese Frage zu beantworten, wurden sowohl Publikationen zu diesem Thema analysiert als auch eigene Untersuchungen durchgeführt.

Die Monte-Carlo-Methode, deren Vorteil in der exakten Behandlung der chemischen Reaktion liegt, ist viel rechenintensiver als die assumed PDF und kann sogar unter Verwendung von Hochleistungsrechnern nur bei der Simulation eines sehr beschränkten Rechen volumens eingesetzt werden. Eine andere Schwierigkeit beim Einsatz von Partikelmethode für die Berechnung der Überschallströmungen liegt in der Berechnung der Stöße, da die Partikellöser keine speziellen Methoden für die Stoßbehandlung besitzen [Ger02]. Die zur Zeit bekannten Arbeiten zur Simulation der Überschallverbrennung

mit dem Monte-Carlo-Verfahren von Möbus, Gerlinger und Brüggemann [MGB03], [MGB01] beschränken sich auf zweidimensionale Rechengemetrien, so dass die Verwendung dieses Verfahrens für die Berechnung einer dreidimensionalen Brennkammer in der nächsten Zeit als unrealistisch erscheint. Außerdem können durch den enormen Rechenzeitbedarf nur stark reduzierte Reaktionsmechanismen verwendet werden, die zu einem wesentlichen Verlust der Simulationsgenauigkeit von Zündvorgängen führen.

Bei dem assumed PDF-Verfahren wird die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion aus empirischen Daten konstruiert. Für eine analytische Beschreibung der Form der Wahrscheinlichkeitsfunktion werden meistens abgeschnittene Gauß-Funktionen oder  $\beta$ -Funktionen verwendet, die durch zwei Parameter (den Mittelwert und die Varianz) definiert werden. Daraus folgt, dass bei der eindimensionalen PDF eine zusätzliche Transportgleichung für die Varianz gelöst werden muss, wobei der Mittelwert aus der Lösung der gemittelten Navier–Stokes–Gleichungen erhalten wird. Das eindimensionale PDF-Verfahren wird oft für die Simulation reagierender turbulenter Strömungen mit Gleichgewichtschemie verwendet. Hierbei wird der Verbrennungsvorgang durch eine Fortschrittsvariable kontrolliert. In diesem Fall wird nur eine zusätzliche Transportgleichung gelöst und die Berechnung der Reaktionsgeschwindigkeit nach Gleichung (3.17) durch die Tabellierung im Preprocessing und die Interpolation während der Simulation ersetzt. Dadurch entsteht nur ein geringer Anstieg der Rechenzeit im Vergleich zur Berechnung mit z.B. den *Eddy–Break–Up* oder *Eddy–Dissipation* – Modellen.

Bei der Verwendung der assumed PDF für die Simulation einer reagierenden turbulenten Strömung, bei der die Chemie vom Gleichgewicht abweicht und die vollständige chemische Kinetik eingesetzt wird, wie es im Fall der Überschallverbrennung ist, muss man eine multidimensionale Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion konstruieren, wobei zahlreiche Kovarianzen durch die Korrelationen zwischen einzelnen Variablen eine Rolle spielen. Eine vollständige Berücksichtigung der Kovarianzen ist unter einem praktischen Gesichtspunkt

nicht sinnvoll, da die dafür notwendige Rechenleistung vergleichbar zur Rechenleistung bei der Verwendung des Monte–Carlo–Verfahrens wird. Eine Möglichkeit, dieses Problem zu lösen, bietet die Annahme der statistischen Unabhängigkeit bezüglich der einzelnen Variablen. In diesem Fall kann die PDF als ein Produkt der eindimensionalen PDFs berechnet werden:

$$P(T, [X_1], \dots, [X_{N_{sp}}]) = P(T)P([X_1]), \dots, P([X_{N_{sp}}]) \quad (3.18)$$

Diese Annahme führt zu einer wesentlichen Effizienzsteigerung, wobei die Genauigkeit aber deutlich abnimmt.

Eine Kompromisslösung bietet die Verwendung des Verfahrens von Gaffney [GWGD94] und Baurle [BAH94, BAH97], das von Gerlinger [GMB01] für die Berechnung der Überschallverbrennung eingesetzt wurde. Dabei wird eine Gauß-Funktion für die Temperaturverteilung und eine multidimensionale  $\beta$ -Funktion für die Verteilung der Speziesmassenbrüche unter der Annahme der statistischen Unabhängigkeit zwischen der Temperatur, der Mischung und der Dichte verwendet:

$$P(T, [X_1], \dots, [X_{N_{sp}}]) = P(T)P([X_1], \dots, [X_{N_{sp}}])\delta(\rho - \bar{\rho}) \quad (3.19)$$

Der Einfluss dieser Annahme auf die Genauigkeit wurde von Gerlinger analysiert [Ger02]. Die Ergebnisse der Analyse zeigen aber, dass die Berücksichtigung der Korrelation zwischen Temperatur- und Speziesfluktuationen zu einer schlechteren Genauigkeit führt. Dies deutet darauf hin, dass der momentane Entwicklungsstand noch gewisse Mängel hat. Die Vernachlässigung dieser Korrelation wird daher vom Autor empfohlen. Der große Vorteil dieser Methode liegt aber darin, dass für die Beschreibung der Form der multidimensionalen  $\beta$ -PDF außer dem ersten Moment der Speziesmassenbrüche nur ein zusätzliches zweites Moment, die Summe der Varianzen der Speziesmassenbrüche, notwendig ist. Außerdem existiert eine analytische Lösung des PDF-Integrals [GMB01].

Da bei der Simulation der Überschallverbrennung in einer realen Brennkammer die Rechnerleistung immer ein kritischer Punkt ist, wäre es für eine rechenzeitgünstige Beschreibung des Verbrennungsprozesses sinnvoll, die Einflüsse der einzelnen Fluktuationen auf die Reaktionsvorgänge zu quantifizieren. Wie aus der Analyse der hypothetischen Temperatur- und Konzentrationsverläufe folgt, beeinflussen die Fluktuationen der Temperatur und der Mischung den Reaktionsvorgang gegenläufig. Das heißt, die Reaktionsgeschwindigkeit steigt mit dem Anstieg der Temperaturvarianz und sinkt mit dem Anstieg der Mischungsvarianz. Diese Effekte wurden von Gaffney [GWGD94] in Bezug auf die Zündung und Flammenausbreitung in einer turbulenten Überschall-Mischungsschicht von Wasserstoff und Luft untersucht. Die Berechnungen mit laminarer Chemie, mit der Temperatur-PDF und schließlich mit der vollständigen Modellierung der Temperatur- und Konzentrationsfluktuationen wurden unter gleichen Bedingungen durchgeführt und verglichen. Durch die Berücksichtigung der Temperaturfluktuationen wird die Induktionslänge um den Faktor zwei kürzer im Vergleich zur Simulation mit laminarer Chemie. Die Speziesfluktuationen vergrößern die Zündungszeit unter gleichen Bedingungen, obwohl deren Einfluss viel geringer als der der Temperaturfluktuationen ist. Das kann dadurch erklärt werden, dass die Empfindlichkeit des Zündverzugs auf die Temperatur viel stärker als auf das Äquivalenzverhältnis ist, was schon in Abschnitt 3.3 beschrieben wurde. Aus diesem Grund ist bei begrenzten Rechnerkapazitäten die Berücksichtigung der Temperaturfluktuationen in Bezug auf die Reduzierung der Simulationsfehler zu bevorzugen. Wie in Abschnitt 3.3 gezeigt wurde, liegen die maximalen Gradienten der Zündverzugszeit in Bezug auf die Temperatur im Bereich unter ca. 1100–1200 K. Bei einer weiteren Temperaturerhöhung ändert sich der Zündverzug sehr gering. Das bedeutet, dass der Einfluss der Temperaturfluktuationen temperaturabhängig ist und sich am stärksten im unteren Temperaturbereich zeigen wird.

Entsprechend der Methode von Gerlinger [GMB01] erfolgt die Berücksichtigung der Temperaturfluktuationen bei der Berechnung

der Geschwindigkeitskoeffizienten der Elementarreaktionen:

$$\bar{k}_r = \int_{T=0}^{T=\infty} k_r(T)P(T)dT \quad (3.20)$$

wobei  $k_r(T)$  sowohl den Vorwärts- als auch den Rückwärtsgeschwindigkeitskoeffizienten einer Elementarreaktion darstellt, der mit Hilfe der Gleichungen (3.5) und (3.6) berechnet wird. Da für die Berechnung des Integrals keine analytische Lösung vorhanden ist, muss diese numerisch erfolgen. Um die numerische Integration zu ermöglichen, wurden eine untere und eine obere Temperaturgrenze definiert, die den relevanten Temperaturbereich umschließen. Eine zusätzliche Einschränkung besteht darin, dass die Berechnung der Geschwindigkeitskoeffizienten nach dem Arrheniusgesetz bei Temperaturen über 3000 K zu einem signifikanten Fehler führt. Deswegen wurde für die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion  $P(T)$ , die als Gauß-Verteilung angenommen wird [GMB01], eine obere Grenze  $T_{max}$  von 3000 K und eine untere Grenze  $T_{min}$  von 300 K eingesetzt und die abgeschnittenen Anteile der PDF durch die Addition der Diracschen Deltafunktion an den Rändern kompensiert

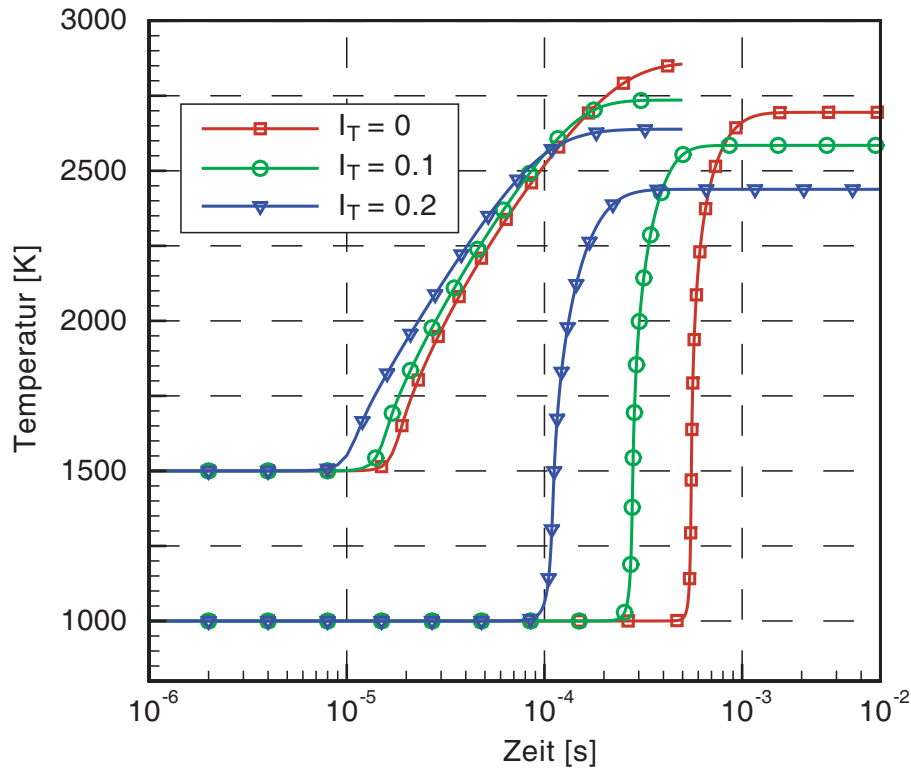
$$P(T) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_0} \left[ -\frac{(T - \tilde{T}_0)^2}{2\sigma_0} \right] [H(T - T_{min}) - H(T - T_{max})] \\ + A_1\delta(T - T_{min}) + A_2\delta(T - T_{max}) \quad (3.21)$$

wobei  $H$  die Heaviside-Funktion ist. Die Koeffizienten  $A_1$  und  $A_2$  entsprechen den abgeschnittenen Anteilen der PDF. Die freien Parameter  $\tilde{T}_0$  und  $\sigma_0$  sind so ausgewählt, dass korrekte Werte für das erste Moment ( $\tilde{T}$ ) und das zweite Moment

$$\sigma_T = \tilde{T}''^2 \quad (3.22)$$

erzielt werden und die Bedingung der PDF-Normierung erfüllt wird.

Der Einfluss der Temperaturfluktuationen auf den Zündvorgang in einem stöchiometrischen Wasserstoff-Luft-Gemisch wurde mit Hilfe eines homogenen Reaktors bei einem konstanten Druck von 1 bar für



**Abbildung 3.9:** Temperaturverläufe im homogenen Konstantdruckreaktor für unterschiedliche Intensitäten der Temperaturfluktuationen

unterschiedliche Anfangstemperaturen und Intensitäten der Temperaturfluktuationen  $I_T$  untersucht, wobei die Intensität der Temperaturfluktuationen folgendermaßen definiert wird:

$$I_T = \frac{\sqrt{\overline{T'^2}}}{\tilde{T}} \quad (3.23)$$

Im Vergleich zum Standardreaktor mit homogenem Gemisch und konstantem Druck werden hier nur die Geschwindigkeitskoeffizienten anders, bzw. nach Gleichung (3.20) berechnet. Die Intensität der Fluktuationen während des Reaktionsablaufs im Reaktor wurde als konstant betrachtet. Die Temperaturverläufe im Reaktor bei Anfangstemperaturen von 1000 und 1500 K und bei der Intensität

der Fluktuationen  $I_T$  von 0, 0.1 und 0.2 sind in Abbildung 3.9 dargestellt. Es ist deutlich zu erkennen, dass die Induktionszeit stark von den Temperaturfluktuationen abhängig ist. Bei der Fluktuationsintensität von 0.1 ist die Induktionszeit um den Faktor 3 und bei der Fluktuationsintensität von 0.2 um den Faktor 6 kürzer als bei einer konstanten Temperatur für die Anfangstemperatur  $T_0$  von 1000 K. Im Bereich höherer Temperaturen ist der Einfluss der Fluktuationen wie erwartet viel geringer. Das bedeutet, dass Temperaturfluktuationen bei Zündvorgängen in der Brennkammer bei niedrigen statischen Temperaturen eine entscheidende Rolle spielen können, falls die Selbstzündung über die anderen Mechanismen der Zündstabilisierung, wie z.B. die Stabilisierung der Zündung in Rezirkulationszonen, dominiert.

Die Implementierung der Temperatur-PDF in den CFD-Code erfolgt über die Lösung einer zusätzlichen Transportgleichung für die Energievarianz  $\sigma_e = \overline{e''^2}$ . Die Temperaturvarianz  $\sigma_T$  wird aus der Energievarianz folgendermaßen berechnet:

$$\sigma_T \approx \frac{\overline{e''^2}}{c_v^2} \quad (3.24)$$

wobei  $\hat{c}_v$  die mittlere spezifische Wärmekapazität des Gemisches ist. Entsprechend der Analyse von Gerlinger [GMB01, Ger02] wird die Transportgleichung für die Energievarianz wie folgt geschrieben:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \sigma_e) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j \sigma_e) - \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \frac{\mu}{Pr} + \frac{\mu_t}{Pr_t} \right) \frac{\partial \sigma_e}{\partial x_j} \right] = \\ \underbrace{2 \frac{\mu_t}{Pr_t} \left( \frac{\partial \tilde{e}}{\partial x_j} \right)^2}_{S_{e1}} - \underbrace{C_e \bar{\rho} \sigma_e \omega}_{S_{e2}} - \underbrace{2 (\gamma - 1) \bar{\rho} \sigma_e \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_j}}_{S_{e3}} \end{aligned} \quad (3.25)$$

wobei  $S_{e1}$  die Haupterzeugung von Fluktuationen durch Energiegradienten,  $S_{e2}$  — Dissipation und  $S_{e3}$  — Kompressibilität beschreiben. Die laminaren und turbulenten Prandtlzahlen  $Pr$  und  $Pr_t$  betragen



0.9 bzw. 1, und die Modellkonstante  $C_e$  0.5.  $\gamma$  bezeichnet den Isentropenexponenten und  $w = \epsilon/k$ , wobei  $k$  die turbulente kinetische Energie und  $\epsilon$  die Dissipationsrate von  $k$  sind.

Die Testsimulationen mit der T-PDF zeigten, dass der Anstieg der Rechenzeit und des Speicherbedarfs durch die Lösung einer zusätzlichen Transportgleichung und die Definition eines Skalarfeldes vernachlässigbar ist im Vergleich zu dem Rechenaufwand für die Simulation einer nicht reagierenden Überschallströmung in realen Brennkammergeometrien. Die Berechnung der Reaktion zeigt im Gegensatz dazu eine enorme Verringerung der Rechengeschwindigkeit durch die notwendige Integration. Bei der Verwendung von zehn Intervallen für die Berechnung des Integrals erhöht sich die Rechenzeit um den Faktor vierzig. Zusätzlich zeigen die Simulationen eines einfachen zweidimensionalen Falls, dass das Fluktuationfeld stark von den Randbedingungen abhängig ist. Das heißt, bei einer Erhöhung der Temperaturvarianz am Eintritt steigt die mittlere Varianzgröße im Rechenvolumen. Da die Größe der Fluktuationen die Verkürzung der Induktionszeit bestimmt, ist es erforderlich, ein richtiges, bzw. ein anlagenspezifisches Eintrittsprofil der Temperaturvarianz anzugeben, das natürlich für jedes Validierungsexperiment verschieden sein kann, wobei die Größenordnung vor allem von der Art der Vorheizung abhängig ist. Die Messung der Temperaturvarianz in der Brennkammer ist eine schwierige Aufgabe, da die Messmethoden entweder für Überschallströmungen nicht einsetzbar oder sehr ungenau sind. Es existiert ein veröffentlichtes Experiment von Cheng [CWP<sup>+</sup>94], in welchem die Werte der Temperaturvarianz in einem Überschallfreistrahler gemessen wurden. Dieses wird zur Zeit als Validierungsexperiment für die Weiterentwicklung der PDF-Methoden verwendet [Ger02, MGB01]. Bei Unkenntnis der exakten Eintrittsbedingungen für die Temperaturvarianz wäre eine Parameterstudie eine Alternative, die aber aufgrund einer enormen Rechenzeit schon für zweidimensionale Geometrien prohibitiv ist.

Das Rechenzeitproblem, das schon bei der Verwendung des *Finite-Rate* Modells existiert und bei der Verwendung von PDF-Methoden

noch aktueller wird, kann durch die Verschiebung der Lösung der steifen chemischen Kinetik und der Integration in das Preprocessing gelöst werden. Dadurch beschränkt sich die zusätzliche Rechnerleistung nur auf die Lösung der Varianztransportgleichung und die Änderung des thermochemischen Zustandes, der aus den im Preprocessing tabellierten Daten interpoliert wird. Die dafür entwickelte Methode wird im nächsten Abschnitt vorgestellt.

### 3.6 Modellierung der chemischen Kinetik durch das *Reaction Mapping*

Unter dem Begriff *Reaction Mapping*<sup>3</sup> werden Preprocessingprozeduren verstanden, die dazu dienen, die elementarkinetischen Zusammenhänge mit den Einflüssen der skalaren Fluktuationen in eine andere, numerisch effiziente Darstellung zu überführen. Diese Darstellung wird dann während der eigentlichen Strömungsberechnung dazu genutzt, die Quellen und Senken für die Spezies und die Wärmefreisetzungsraten zu berechnen. In diesem Abschnitt wird das entwickelte Verfahren detailliert beschrieben.

Wie in den vorherigen Abschnitten angedeutet, ist die Rechenzeit sowohl bei der Verwendung der laminaren Chemie als auch bei der Verwendung von PDF-Methoden das Hauptproblem. Die Lösung dieses Problems war eines der Hauptziele dieser Arbeit. Da eine vollständige chemische Kinetik relativ selten bei der Simulation von technisch relevanten Verbrennungsprozessen zum Einsatz kommt, wurde in der Vergangenheit das Rechenzeitproblem hauptsächlich für PDF-Methoden mit reduzierter Chemie analysiert. Die Standardtechnik dabei ist die Verwendung von strukturierten Lookup-Tabellen, wobei die Berechnung des chemischen Quellterms während der Simulation durch Interpolationsverfahren ersetzt wird. Dabei wird bei jeder Iteration für jede Rechenzelle die chemische Umsetzungsrate aus den tabellierten Daten interpoliert, wobei die dafür notwendi-

---

<sup>3</sup>Der Begriff *Reaction Mapping* wurde von Pope [Pop97] eingefügt

gen diskreten Stützpunkte relativ schnell im strukturierten Aufbau der Lookup-Tabelle gefunden werden können. Die relativ geringe Größe der Tabelle erlaubt auch, alle tabellierten Werte während der Simulation im Arbeitsspeicher zu lagern. Diese Methode ist aber mit der Erhöhung der Dimensionalität (Anzahl der Spezies) nicht mehr funktionsfähig. Betrachtet man nur die vollständige Kinetik der Wasserstoff-Luft-Reaktion ohne die für die PDF notwendigen Varianzen, so braucht man für eine eindeutige Beschreibung des Reaktionsvorganges die molaren Konzentrationen von neun Spezies ( $H_2, O_2, H, O, OH, HO_2, H_2O_2, H_2O, N_2$ ) und die Temperatur oder die Enthalpie des Gemisches. Das bedeutet, dass die Tabellierung in einem zehndimensionalen Raum durchgeführt werden muss. Eine einfache Abschätzung zeigt die Nichtrealisierbarkeit dieses Verfahrens sowohl jetzt als auch in der näheren Zukunft. Bei der Verwendung von zehn Diskretisierungspunkten für jede Dimension muss die Tabelle  $10^{10}$  Knoten beinhalten. Wenn ein Knoten zumindest die Größe eines Bytes hat, besitzt die Lookup-Tabelle eine Größe von 10 GB. In Realität benötigt man für die Beschreibung eines Knotens zumindest ca. 94 Byte (Knotenindex 4 Byte, die diskrete Beschreibung der Koordinaten  $10 \times 1$  Byte, die Beschreibung der Ergebnisfunktionen  $10 \times 8$  Byte), was zu einer Tabellengröße von 940 GB führt. Die Berechnung und das Speichern einer solchen Datenmenge sind nicht effektiv.

Eine Lösung dieses Problems bietet das *ISAT* (*in situ adaptive tabulation*) Verfahren von Pope [Pop97], wobei nur ein für die Simulation notwendiger Bereich während der Simulation abgebildet und in einer binären Baumstruktur gespeichert wird. Während der Simulation wird nicht der beste, sondern der erste mögliche Tabulationspunkt genommen, da die Suche nach dem am nächsten liegenden Tabulationspunkt bei solchen Strukturen ziemlich zeitaufwändig ist. Die Verwendung dieser Methode erfordert außerdem ein Integrationsverfahren, da dabei die Gradienten und die Sensitivitätskoeffizienten tabelliert werden.

Eine andere potenzielle Lösung bietet das *Repro-modelling*, ein Ver-

fahren von Turány [Tur94b, Tur94a]. Im Allgemeinen bedeutet das *Repro-modelling* die Approximation des komplizierten und zeitaufwendigen Rechenmodells durch ein einfaches empirisches Modell. Dieses Verfahren wird folgendermaßen für die Erstellung eines reduzierten Reaktionsmodells eingesetzt. Im Preprocessing werden mehrere hundert Simulationen mit dem vollständigen Reaktionsmechanismus durchgeführt und die Zustandsvariablen (Druck, Temperatur und Spezieskonzentrationen) und die diesen Zustandsvariablen entsprechenden Speziesbildungsraten gesammelt. Auf Basis dieser Daten werden die Approximationspolynome erzeugt, die während der CFD-Simulation auf jedem Iterationsschritt berechnet werden. Es ist wichtig zu bemerken, dass die im Preprocessing erzeugten Daten unstrukturiert gespeichert werden, so dass keine Möglichkeit für ein effizientes *Lookup* Verfahren besteht. Die Methode wurde vom Autor für die Beschreibung der oszillierenden Belousov-Zhabotinsky Reaktion eingesetzt. Der Vorteil dieses Verfahrens ist offensichtlich: keine Integration ist notwendig; die Berechnung der algebraischen Polynome ist effizient möglich. Zur Zeit sind aber keine Ergebnisse zur Verwendung dieser Methode für die Verbrennungsberechnung bekannt. Ein potenzielles Problem liegt darin, dass die für die Polymerzeugung notwendige Zeit exponentiell mit der Erhöhung der Dimensionalität steigt, und dass die Anwesenheit von starken Gradienten während der Zündung den Einsatz von Monomen<sup>4</sup> höherer Ordnung erfordert. Die Anwesenheit im Polynom der Monome höherer Ordnung kann Schwankungen der Polynomfunktion verursachen, die man nicht explizit detektieren kann. Die Berechnungszeit eines Punktes mit dem Polynom steigt durch die Erhöhung der Polynomordnung und überschreitet bei mehrdimensionalen Polynomen schnell die Rechenzeit der Integration.

In der Arbeit wurden unterschiedliche Aspekte zu den Tabellierungs-

---

<sup>4</sup>Laut [Sch02]:

- i. Ein *Literal* ist ein Ausdruck der Form  $x_i^1 = x_i$  bzw.  $x_i^0 = \bar{x}_i$ .
- ii. Ein *Monom* ist eine Konjunktion von Literalen (z.B.:  $x_1^{a_1} x_2^{a_2} x_3^{a_3}$  mit  $a_i \in \{0, 1\}$ ).
- iii. Ein *Polynom* ist eine Disjunktion von Monomen.

verfahren und zur Erstellung der Polynome in Hinsicht auf die Genauigkeit und die Rechenzeit analysiert, um eine optimale Methode zu finden. Die Analyse der auftretenden Probleme und die entwickelte Methode sind weiter unten dargestellt.

Wie schon erwähnt, wird bei der Simulation mit der laminaren Chemie bei jeder Iteration in jeder Rechenzelle die Reaktion durch die Lösung der ODE der chemischen Kinetik berechnet. Für die Berechnung der chemischen Reaktionsraten nach dem Arrheniussatz (3.5) sind nur die molaren Spezieskonzentrationen und die Temperatur notwendig. Das bedeutet, dass in jedem Punkt des Raumes und der Zeit der thermochemische Zustand einer reagierenden Gasmischung durch die molaren Konzentrationen der Spezies  $[X_i]$  und die Temperatur  $T$  beschrieben werden kann.

$$\boldsymbol{\phi} = \{\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_{N_{sp}+1}\} = \{[X_1], [X_2], \dots, [X_{N_{sp}}], T\} \quad (3.26)$$

Der Vektor  $\boldsymbol{\phi}$  definiert die Koordinaten eines Punktes in einem  $N_{sp} + 1$ -dimensionalen Kompositionsraum.

Laut *ISAT*-Verfahren von Pope [Pop97] wird die zeitliche Entwicklung des thermochemischen Zustandes eines Teilchens (PDF-Transportgleichung)  $\boldsymbol{\phi}$  durch die folgende Differentialgleichung definiert:

$$\frac{d\boldsymbol{\phi}(t)}{dt} = S(\boldsymbol{\phi}(t)) + M(t) \quad (3.27)$$

wobei  $S$  und  $M$  die Änderungsrate des thermochemischen Zustandes durch die chemische Reaktion und durch den Transport (Mischung) darstellen. Die Evolutionsgleichung (3.27) für die Teilchen wird üblicherweise getrennt gelöst [Pop97]. Das bedeutet, dass die Lösung der Gleichung vom Zeitpunkt  $t_0$  mit einem kleinem Zeitschritt  $\Delta t$  durch die folgenden Schritte erfolgt:

1. Von der Anfangsbedingung  $\phi(t_0)$  wird die Mischungsgleichung

$$\frac{d\phi(t)}{dt} = M(t) \tag{3.28}$$

für den Zeitschritt  $\Delta t$  integriert. Daraus ergibt sich die Lösung  $\phi^0$ .

2. Von der Anfangsbedingung  $\phi^0$  wird die Reaktionsgleichung

$$\frac{d\phi(t)}{dt} = S(\phi(t)) \tag{3.29}$$

für den gleichen Zeitschritt  $\Delta t$  integriert, um die Lösung  $\phi^*(t_0 + \Delta t)$ , die die Approximation der Lösung der Gleichung (3.27)  $\phi(t_0 + \Delta t)$  ist, zu erhalten.

Nach der Analyse von Pope hat das getrennte Lösungsverfahren eine Genauigkeit erster Ordnung.

Auf die gleiche Weise kann man die Erhaltungsgleichungen des CFD-Verfahrens umformen und getrennt lösen. Der thermochemische Zustand bezieht sich in diesem Fall auf eine Rechenzelle. Die chemische Reaktion betrifft nur die Speziestransportgleichung (2.9) und die Energieerhaltungsgleichung (2.4) des CFD-Verfahrens, die folgendermaßen umstrukturiert und getrennt gelöst werden:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_j) = \underbrace{-\nabla \cdot (\rho \vec{v} Y_j) - \nabla \cdot \vec{J}_j}_{M: \text{Konvektion und Diffusion}} + \underbrace{R_j}_{S: \text{Reaktion}} \tag{3.30}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho E) = \underbrace{-\nabla \cdot (\vec{v}(\rho E + p)) + \nabla \left( \lambda_{eff} \nabla T - \sum_j h_j \vec{J}_j + (\bar{\tau} \cdot \vec{v}) \right)}_{M: \text{Konvektion und Diffusion}}$$

$$+ \underbrace{\sum_j h_j R_j}_{S: \text{Reaktion}} \quad (3.31)$$

1. Im ersten Schritt erfolgt die Lösung der Gleichungen (3.30) und (3.31) ohne Berücksichtigung der Reaktion. Hieraus ergeben sich durch die Integration vom Zeitpunkt  $t_0$  mit einem Zeitschritt  $\Delta t$  die Zwischenlösungen  $\rho Y_j^0$  und  $\rho E^0$ . Der Zeitschritt  $\Delta t$  ist entweder ein reales Zeitintervall für die zeitabhängige Lösung oder ein Pseudo-Zeitintervall für die stationäre Lösung.
2. Im zweiten Schritt wird der Reaktionsterm berücksichtigt:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_j) = R_j \quad (3.32)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho E) = \sum_j h_j R_j \quad (3.33)$$

Die Integration mit den Anfangsbedingungen  $\rho Y_j^0$  und  $\rho E^0$  liefert die Lösungen  $\rho Y_j^*(t_0 + \Delta t)$  und  $\rho E^*(t_0 + \Delta t)$ , die die Lösungen der Gleichungen (3.30) und (3.31)  $\rho Y_j(t_0 + \Delta t)$  und  $\rho E(t_0 + \Delta t)$  approximieren:

$$\rho Y_j^*(t_0 + \Delta t) = \int_{t_0}^{t_0 + \Delta t} R_j dt + \rho Y_j^0 \quad (3.34)$$

$$= M_{wj} \int_{t_0}^{t_0 + \Delta t} \hat{R}_j dt + M_{wj} [X_j^0]$$

$$= M_{wj} [X_j(t_0 + \Delta t)]$$

$$\rho E^*(t_0 + \Delta t) = \sum_j h_j \int_{t_0}^{t_0 + \Delta t} R_j dt + \rho E^0 \quad (3.35)$$

$$= h_j M_{wj} ([X_j(t_0 + \Delta t)] - [X_j^0]) + \rho E^0$$

Die Hauptaufgabe besteht jetzt darin, eine numerisch effiziente Berechnung der Gleichungen (3.34) und (3.35) durch die Tabellierung zu gewährleisten. Für die Tabellierung bestehen zwei Möglichkeiten: Man kann den chemischen Quellterm  $R_j$  und die Wärmequelle infolge der chemischen Reaktion  $\sum_j h_j R_j$  berechnen und in der Tabelle speichern. Während der CFD-Simulation wird die explizite Berechnung der beiden Quellterme (Gleichungen (2.6), (2.7), (3.2-3.9)) durch die Interpolation ersetzt. Die vorgestellte getrennte Lösung der Spezies-transportgleichung (2.9) und der Energieerhaltungsgleichung (2.4) ist in diesem Fall nicht notwendig. Eine wesentlich höhere Effizienz wird aber erreicht, wenn man den thermochemischen Zustand zum Zeitpunkt  $t_0 + \Delta t$ , der für einen fixierten Zeitschritt  $\Delta t$  eine eindeutige Funktion des Anfangszustands  $\phi^0$  ist (bezeichnet durch  $\mathfrak{R}(\phi^0)$ ), in der Tabelle abbildet. Die Funktion  $\mathfrak{R}(\phi^0)$  heißt *Reaction Mapping* [Pop97] und bildet (*maps*) durch die Integration der Reaktionsgleichung (3.36) für den Zeitschritt  $\Delta t$  die Anfangsbedingungen  $\phi^0$  auf den reagierten Zustand  $\phi^*(t_0 + \Delta t)$  ab:

$$\phi^*(t_0 + \Delta t) = \int_{t_0}^{t_0 + \Delta t} S(\phi(t)) + \phi(t_0) = \mathfrak{R}(\phi^0) \quad (3.36)$$

Die Integration erfolgt im Preprocessing und in der Tabelle werden die Anfangszustände  $\phi^0$  und die den Anfangszuständen entsprechenden reagierten Zustände  $\phi^*(t_0 + \Delta t)$  gespeichert. Während der CFD-Simulation werden die reagierten Zustände  $\phi^*(t_0 + \Delta t)$  aus den tabellierten Werten interpoliert und für die getrennte Lösung der Spezies-transportgleichung und der Energieerhaltungsgleichung verwendet. Sind die molaren Konzentrationen zum Zeitpunkt  $t_0 + \Delta t$ , bzw. der Zustandsvektor  $\phi^*(t_0 + \Delta t)$  gegeben, entfällt der Integrationsvorgang bei der Lösung der Gleichungen (3.34) und (3.35).

Die Tabelle wird für einen fixierten Zeitschritt  $\Delta t$  erstellt. Die CFD-Simulation erfolgt mit einem gleichen oder größeren Zeitschritt ( $\Delta t_{CFD} = n \Delta t_{Tabelle}$ ,  $n = 1, 2, \dots$ ). Im letzten Fall ( $n > 1$ ) muss der zweite Schritt des getrennten Lösungsvorgangs, bzw. die Berechnung der Gleichungen (3.34) und (3.35) mehrmals durchgeführt werden.



Offensichtlich ist die Genauigkeit des getrennten Lösungsvorgangs vom Zeitschritt  $\Delta t$  abhängig. Der Empfehlungswert  $\Delta t = 1/\tau_{mix}$  [Pop97], wobei  $\tau_{mix}$  die Mischungszeitskala ist, kann aber für komplizierte Verbrennungsvorgänge, wie z.B. die Überschallverbrennung, analytisch nicht berechnet werden. Daher sind die Validierungssimulationen notwendig. Zusätzlich werden auch die Werte des Zustandsvektors, die im Rahmen der CFD-Simulation aus der Tabelle interpoliert werden, durch die Größe des Zeitintervalls  $\Delta t$  beeinflusst. Die Interpolationsgenauigkeit in Abhängigkeit vom Zeitschritt  $\Delta t$  wird in Abschnitt 3.7 detailliert untersucht.

Die Berechnung der Reaktion, bzw. des Zustandsvektors  $\phi(t_0 + \Delta t)$ , erfolgt während des Zeitintervalls  $\Delta t$  adiabatisch bei einem konstanten Druck. Das heißt, dass der Reaktionsablauf mit Hilfe eines Konstantdruckreaktors berechnet wird.

Für eine effizientere Tabellierung wird der thermochemische Zustand  $\phi$  durch die Speziesmolenbrüche  $\chi_i$  umgeschrieben. Die eindeutige Beschreibung des Zustands benötigt in diesem Fall zusätzlich die Angabe des Drucks.

$$\phi = \{\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_{N_{sp}+2}\} = \{\chi_1, \chi_2, \dots, \chi_{N_{sp}}, T, P\} \quad (3.37)$$

Die Komponenten  $\phi_1, \dots, \phi_{N_{sp}}$  sind nicht linear unabhängig, da die Summe von Speziesmolenbrüchen gleich eins ist. Das erlaubt, einen Speziesmolenbruch zu eliminieren und die Dimensionalität des Koordinatenvektors  $\phi$  auf  $N_{sp} + 1$  zu reduzieren. Häufig weicht der Druck sehr wenig vom Referenzdruck ab und die Reaktionssensitivität auf die Druckänderung ist gering im Vergleich zur Änderung anderer Parameter, was die Annahme eines konstanten Drucks für die Berechnung rechtfertigt. Dadurch wird die Dimensionalität der Zustandsbeschreibung weiter reduziert. In durch SCRamjet-Brennkammer angetriebenen Raumtransportsystemen treten während der ganzen Mission weder sehr hohe Drücke, noch wesentlich geringere Drücke als der Umgebungsdruck auf, weshalb es als ausreichend erscheint, die

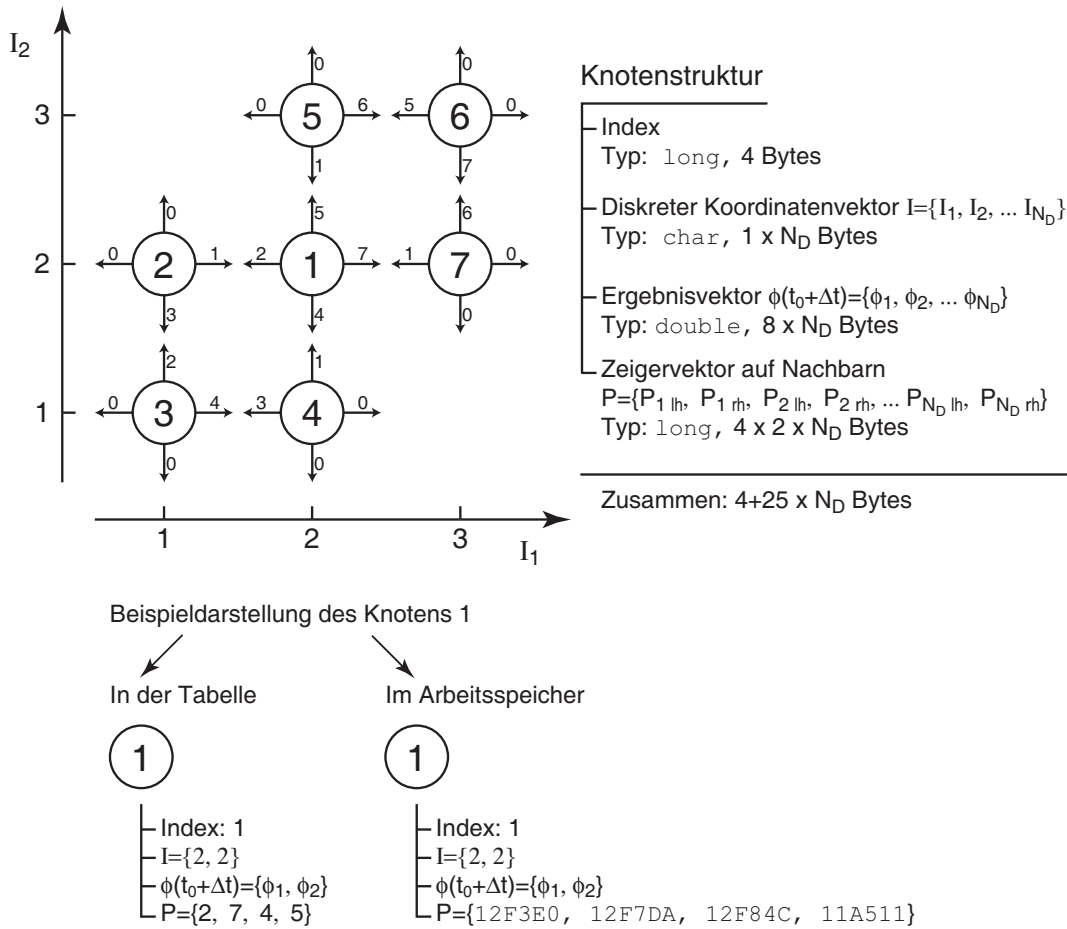
sich beim *Reaction Mapping* auf einen konstanten Druck von 1 bar zu beschränken. Ist der Druck konstant, hat der Zustandsvektor  $\phi$  eine Dimensionalität  $N_D = N_{sp}$ :

$$\phi = \{\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_{N_D}\} = \{\chi_1, \chi_2, \dots, \chi_{N_D-1}, T\} \quad (3.38)$$

Für die Tabellierung wird der Raum durch diskrete Punkte abgebildet. Die Größe der Tabelle und die Interpolationsgenauigkeit hängen gegensätzlich von der Diskretisierung ab, so dass ein Optimum zwischen Tabellengröße und Genauigkeit gefunden werden muss.

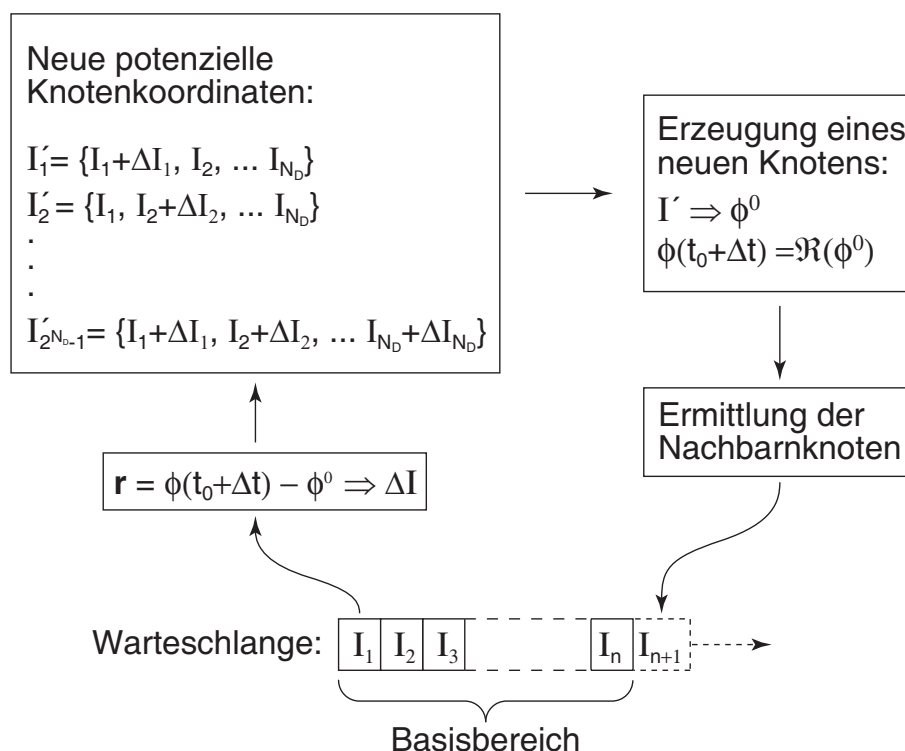
Wie bereits erwähnt, ist das vollständige Ausfüllen der Tabelle in strukturierter Form bereits bei grober Diskretisierung nicht möglich. Es ist auch bekannt, dass physikalisch relevante Zustände einen sehr schmalen *realisierbaren* Bereich im Raum einnehmen. Der Grund dafür ist, dass beispielsweise Zustände mit einer hohen Radikalkonzentration und einer geringen Konzentration an Produkten und Edukten nur künstlich und nie während eines realen Verbrennungsvorganges erreicht werden können. Das bedeutet, dass der realisierbare Bereich viel kleiner als der durch axiale Grenzwerte definierte Kompositionsraum ist. Um nur den realisierbaren Bereich effizient abzubilden, ist eine spezielle Struktur der Tabelle und des Knotens notwendig, die in Abbildung 3.10 vereinfacht in einem zweidimensionalen Raum dargestellt ist. Die Angaben zum Typ und zur Größe der Variablen sind in Fachwörter der C-Sprache angegeben.

Jeder Knoten hat einen eigenen Index, der die Knotennummer beinhaltet und die Position des Knotens in der Datei eindeutig definiert. Der Index ist in der Mitte jedes Kreises, der schematisch einen Knoten darstellt, eingezeichnet (Abbildung 3.10). Der Koordinatenvektor  $\mathbf{I}$  stellt den Zustandsvektor  $\phi(t_0)$  in diskreten Koordinaten dar. Der Ergebnisvektor  $\phi(t_0 + \Delta t)$  ist der neue Zustand nach dem Zeitintervall  $\Delta t$ . Da die Knoten in der Datei nicht strukturiert gespeichert sind, ist ein Zeigervektor notwendig, der die Nachbarknoten verbindet. Der Zeigervektor  $\mathbf{P}$  beinhaltet die Indizes der Nachbarknoten. Für jede Dimension werden zwei Zeiger (links  $lh$  und rechts



**Abbildung 3.10:** Struktur der Lookup-Tabelle und Knotenstruktur in einem zweidimensionalen Raum

*rh*) benötigt. Die Pfeile an den Kreisen stellen die Zeigervektoren dar und die Nummern an den Pfeilen bedeuten die Indizes der Nachbarknoten. In dieser Form werden die Knoten in der binären Tabelle gespeichert. Die Position des Knotens in der Datei lässt sich über den Knotenindex und die Knotengröße berechnen. Beim Einlesen eines Knotens in den Arbeitsspeicher werden die Indizes des Zeigervektors durch die physikalische Adresse des Knotens im Arbeitsspeicher ersetzt. Dies erlaubt einen direkten und folglich schnelleren Zugriff. Eine Beispieldarstellung eines Knotens in der Tabelle und im Arbeitsspeicher ist in Abbildung 3.10 zu sehen. Eine derartige Struktur erlaubt, sehr schnell den notwendigen Knoten zu finden und die Ta-



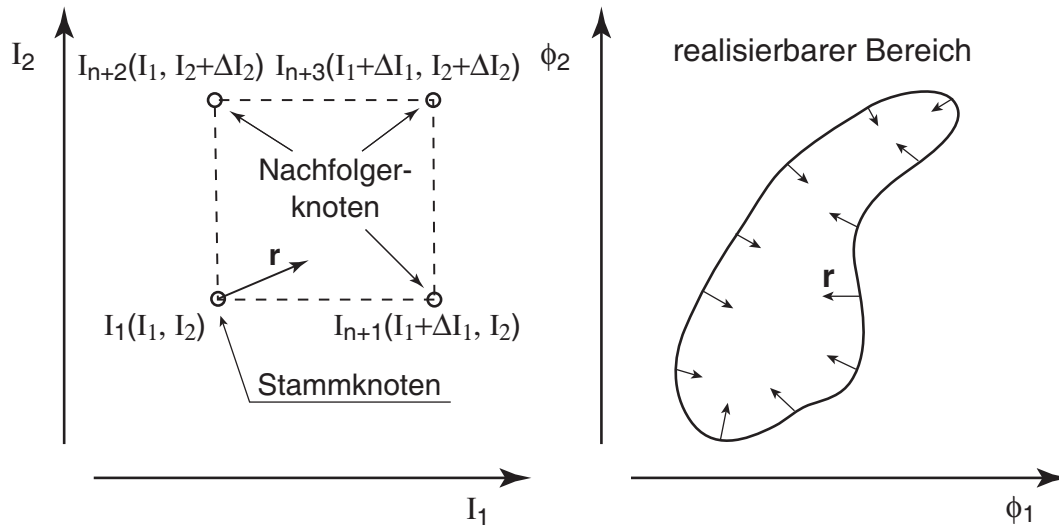
**Abbildung 3.11:** Schematische Darstellung der rekursiven Auffüllung

belle während der Simulation nur teilweise im Arbeitsspeicher zu halten, bzw. zu cachen.

Durch die Vorausberechnungen in einem Konstantdruckreaktor werden die Grenzwerte für jede Koordinatenachse abgeschätzt. Zuerst wird ein Basisbereich definiert. Dieser besteht aus den Knoten mit folgenden Anfangszuständen:

$$\text{Basisbereich} = \left\{ \phi^0 \mid T_{min} \leq T \leq T_{max}, 0 \leq \chi_{H_2, O_2, H_2O} \leq 1, \right. \\ \left. \chi_{H, O, OH, HO_2, H_2O_2} = 0 \right\} \quad (3.39)$$

Solche Zustände sind immer physikalisch relevant, da sie die Anfangsbedingungen der Verbrennung im gesamten Spektrum der Äquivalenzverhältnisse und Temperaturen darstellen. Die Knoten im Basis-

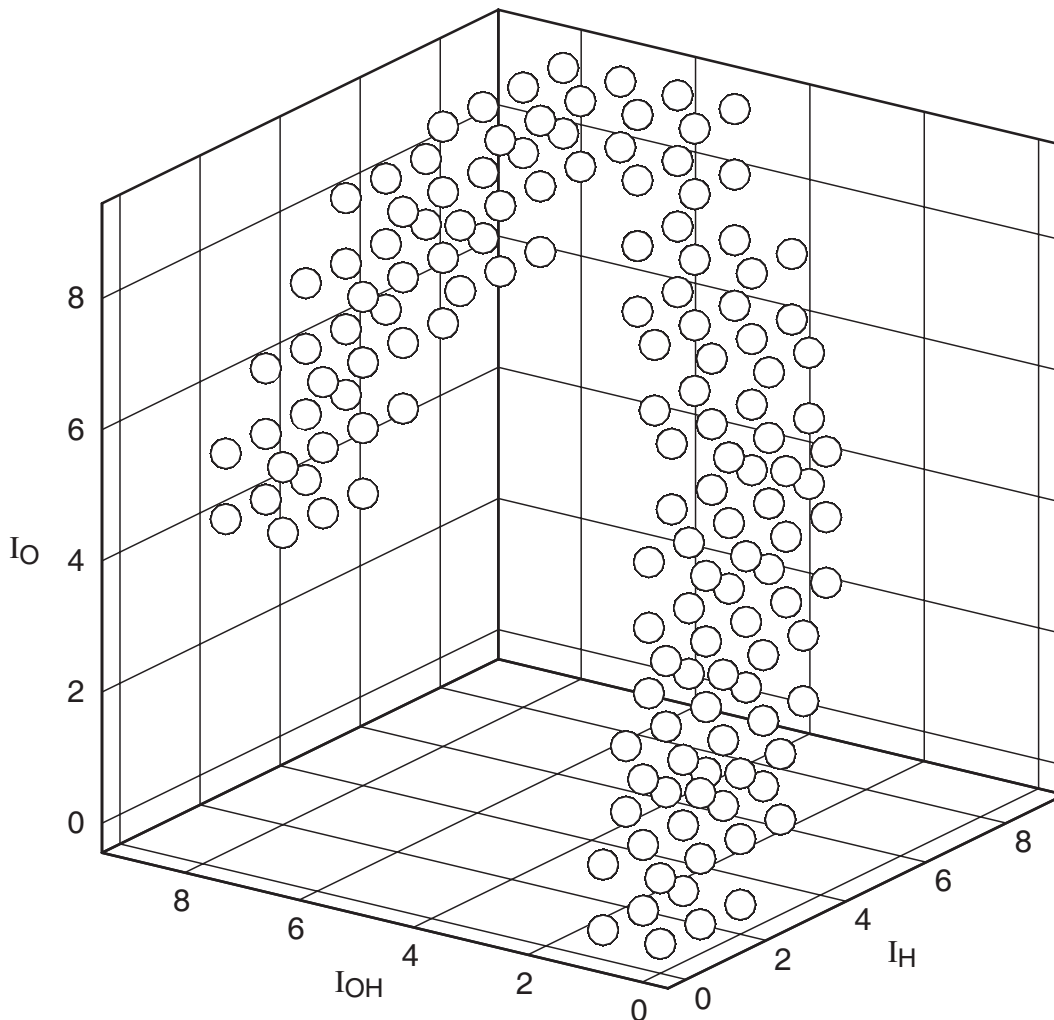


**Abbildung 3.12:** Auslegung neuer Knoten (links) und Definition des *realisierbaren* Bereiches (rechts) für einen zweidimensionalen Raum

bereich werden mit den vorgegebenen Diskretisierungsschritten erzeugt. Da der Basisbereich strukturiert ist und in Matrix-Form dargestellt werden kann, erfolgt die Ausfüllung seriell. Das Verbinden der Knoten aus dem Basisbereich ist eine triviale Aufgabe. Das weitere Auffüllen der Tabelle erfolgt rekursiv und ist schematisch in Abbildung 3.11 dargestellt. Es wird eine Warteschlange erzeugt und die Knoten aus dem Basisbereich werden in der Warteschlange entsprechend dem Knotenindex angeordnet. Die Knoten in der Warteschlange dienen als Stammknoten für die Bildung der Nachfolgerknoten. Aus der Warteschlange werden seriell die Knoten gezogen und bearbeitet. Zuerst wird für den aus der Warteschlange gezogenen Knoten durch die Differenz zwischen den Zuständen  $\phi(t_0 + \Delta t)$  und  $\phi^0$  der Reaktionsvektor  $\mathbf{r}$  definiert, der die Richtung der Zustandsevolution durch die Reaktion zeigt. Aus dem Reaktionsvektor wird ein Verschiebungsvektor  $\Delta I$  berechnet, der die Verschiebung der Nachfolgerkoordinaten relativ zu den Koordinaten des Stammknotens definiert. Der Koordinatenvektor des Stammknotens  $I$  und der Verschiebungsvektor  $\Delta I$  gestatten die Berechnung der  $2^{N_D} - 1$  potenziellen Koordinaten der Nachfolgerknoten (Abbildung 3.12 links).

Für jeden potenziellen Koordinatenvektor  $I'$  wird geprüft, ob ein Knoten mit den gleichen Koordinaten existiert. Dies erfolgt durch die Überprüfung der Verbindungen im Zeigervektor des Stammknotens und der Verbindungen in den Zeigervektoren der Nachbarknoten. Falls kein Knoten mit den gleichen Koordinaten gefunden wird, muss der Knoten erzeugt werden. Aus dem Koordinatenvektor  $I'$  erfolgt die Berechnung des Zustandsvektors  $\phi^0$  des Nachfolgerknotens und folglich wird der reagierte Zustand  $\phi(t_0 + \Delta t)$  berechnet. Der neue Knoten bekommt den Index  $n+1$ . Danach werden für den erzeugten Knoten die Nachbarknoten ermittelt und die entsprechenden Knotenindizes in den Verbindungsvektor des erzeugten Knotens und in die Verbindungsvektoren der Nachbarknoten eingetragen. Der neue Knoten wird gespeichert und am Ende der Warteschlange platziert. Das bedeutet, dass der neue Knoten jetzt auch zu den Stammknoten gehört. Danach wird der Vorgang für den nächsten Stammknoten aus der Warteschlange wiederholt. Der Prozess erfolgt, bis alle Knoten aus der Warteschlange bearbeitet werden. Der *realisierbare* Bereich ergibt sich so automatisch, da die Reaktionsvektoren der Randknoten immer ins Innere des *realisierbaren* Bereiches (Abbildung 3.12) zeigen. Am Anfang wächst die Warteschlange extrem schnell. Nach einer gewissen Zeit wird die Wachstumsrate geringer, da einerseits die aus der Warteschlange gezogenen Stammknoten schon die Nachbarknoten in der Reaktionsrichtung besitzen und keine neuen Knoten erzeugt werden und andererseits die Grenzen des *realisierbaren* Bereichs erreicht werden. Die Projektion einer Lookup-Tabelle in einen diskreten dreidimensionalen Raum mit  $I_{H^-}$ ,  $I_{O^-}$  und  $I_{OH^-}$ -Achsen ist in Abbildung 3.13 dargestellt. Man sieht, dass der *realisierbare* Bereich sehr klein im Vergleich zum gesamten Kompositionsraum ist.

Die Lookup-Tabelle ist in dieser Form für die CFD-Simulation einsetzbar. Die gesuchte Zustandsänderung wird durch die multilineare Interpolation aus den diskret ausgelegten Knoten berechnet [SLS01]. Die lineare Interpolation hat sich während der Testberechnungen in dem homogenen Konstantdruckreaktor gut bewährt. Die Zündung und der Reaktionsablauf werden mit einer guten Genauigkeit berechnet. Der Nachteil der Interpolation liegt darin, dass ein  $N_D$ -



**Abbildung 3.13:** Projektion der Lookup-Tabelle in einen dreidimensionalen Raum

dimensionales rechteckiges Element gefunden werden muss, innerhalb dessen sich die Koordinaten des gesuchten Zustandes befinden. Das Element besteht aus  $2^{N_D}$  Knoten, was bedeutet, dass für jeden Knoten ein Wichtungskoeffizient berechnet werden muss. Die Suche nach den Knoten und die Berechnung der Wichtungskoeffizienten ist sehr zeitaufwändig, weswegen der erzielte Gewinn durch die Interpolation nicht sehr groß ist im Vergleich zur Reaktionsberechnung mit dem *Finite-Rate* Modell.

Wie bereits erwähnt, kann man auf der Basis der Lookup-Tabelle in

Polynomordnung	Monomenanzahl			
	$N_D = 3$	$N_D = 5$	$N_D = 7$	$N_D = 9$
2	10	21	36	55
3	20	56	120	220
4	35	126	330	715
5	56	252	792	2002
6	84	462	1716	5005

**Tabelle 3.1:** Anzahl der Monome im orthogonalen Polynom in Abhängigkeit von der Dimensionalität und der Polynomordnung

einem nächsten Schritt orthogonale Polynome<sup>5</sup> nach dem Verfahren von Turánie [Tur94a, Tur94b] erstellen und dadurch die gesuchten Werte während der CFD-Rechnung explizit berechnen. Diese Methode wurde im Rahmen der Arbeit untersucht, um auf Basis der Lookup-Tabelle orthogonale Polynome zu erzeugen. Idealerweise bekommt man ein Polynom für den kompletten *realisierbaren* Bereich. Bei der Erstellung des Polynoms sind aber mehrere Probleme aufgetaucht. Es ist zu erwarten, dass die Lookup-Tabelle Bereiche mit extremen Gradienten beinhaltet, die sowohl durch Zündvorgänge als auch bei Abweichung des Zustandes vom chemischen Gleichgewicht entstehen. Das bedeutet, dass das Polynom eine sehr komplizierte Funktion abbilden muss. Um eine akzeptable Genauigkeit zu erhalten, die in den Knoten und in der Mitte der von den Knoten gebildeten multidimensionalen Rechtecke berechnet wurde, benötigt man Monome höherer Ordnung. Die Anzahl der Monome im Polynom in Abhängigkeit von der Dimensionalität und der Polynomordnung ist in Tabelle 3.1 dargestellt. Diese Werte wurden durch den Einsatz des von Turánie [Tur94b] beschriebenen Algorithmus zur Erzeugung der Polynome berechnet.

Man sieht, dass die Monomenanzahl sehr schnell mit der Erhöhung der Polynomordnung und der Dimensionalität steigt. Folglich steigt die Zeit für die Berechnung und die Optimierung der Koeffizienten

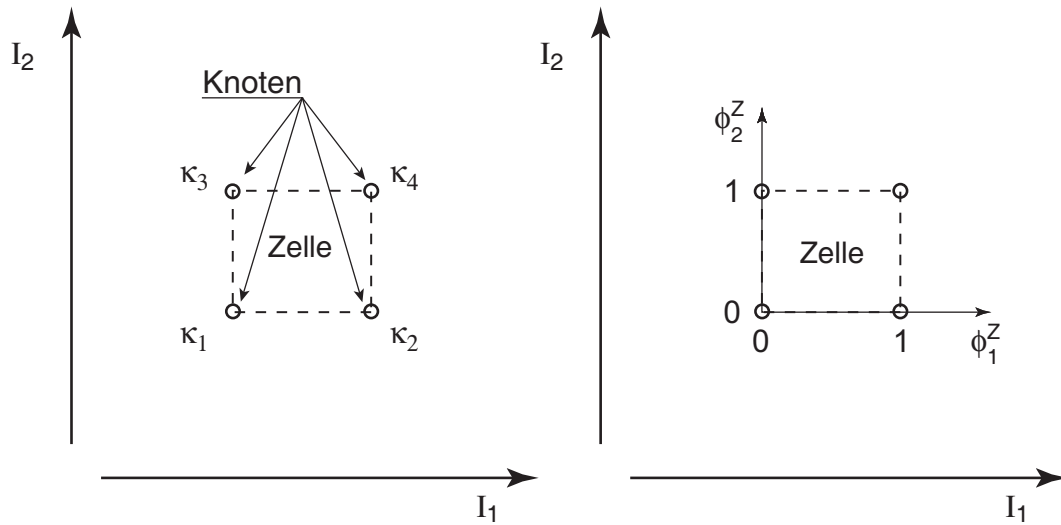
---

<sup>5</sup>Die Definition von orthogonalen Polynomen ist in Anhang B zu finden



der Monome, wobei die Optimierung bei einer größeren Monomenanzahl sehr ineffizient ist. Ein anderes Problem liegt darin, dass der gesamte *realisierbare* Bereich nicht mit einem Polynom erfasst werden kann. Das bedeutet, dass der *realisierbare* Bereich unterteilt und mit mehreren Interpolationspolynomen abgebildet werden muss. Da die unterteilten Bereiche hauptsächlich nicht rechteckig sind, ist es schwierig, die Bereichsgrenze im multidimensionalen Raum zu definieren und während der Simulation das notwendige Polynom zu finden. Die Simulation der Zündung in einem homogenen Konstantdruckreaktor zeigte auch ein Phänomen, das bei der Erstellung der Polynome nicht erkennbar war. Beim Reaktionsstart im Reaktor sinkt zu Beginn die Temperatur ab, da die Energie zur Erzeugung von Radikalen verbraucht wird. Diese Temperaturabsenkung ist sehr gering und liegt normalerweise im Bereich unter  $0.1\text{ K}$ . Es entsteht aber ein globales zeitliches Temperaturminimum zwischen dem Reaktionsstart und der Zündung. Obwohl die Polynome eine hohe Genauigkeit sowohl in den Knoten als auch in der Mitte der von den Knoten gebildeten multidimensionalen Rechtecke zeigen, konnte die Zündung nicht simuliert werden, da das Polynom nicht vollständig mit diesem Verlauf übereinstimmt. Die mit Hilfe der Polynome berechnete Reaktion wird bis zum Temperaturminimum sehr genau nachgerechnet, kommt aber aus dem Minimum nicht heraus. Die Erklärung dieses Phänomens liegt in der durch die Verwendung von Monomen hoher Potenz bedingten lokalen Minima und Maxima, die innerhalb des Diskretisierungsschritts liegen. Solche Minima und Maxima sind bei hochdimensionalen Funktionen schwierig zu erkennen und durch die Optimierung zu eliminieren.

Eine effiziente Lösung dieses Problems bietet die Verwendung linearer Polynome, wobei ein Polynom auf der multilineareren Interpolation basiert und die Funktion innerhalb eines multidimensionalen Rechtecks darstellt. Obwohl derartige Polynome den Verlauf nur linear abbilden, zeigen die Testberechnungen, dass die Genauigkeit sehr hoch ist, wobei die Genauigkeit direkt von der Diskretisierung abhängig ist. Die Genauigkeit entspricht der Interpolationsgenauigkeit aus der Lookup-Tabelle, wobei aber die für die Interpolation notwendigen



**Abbildung 3.14:** Vereinfachte Darstellung einer multidimensionalen Zelle und Knotennummerierung innerhalb einer Zelle (links). Das lokale, normierte Zellenkoordinatensystem (rechts)

Knoten nicht mehr gesucht werden müssen. Der Vorteil derartiger Polynome im Vergleich zu orthogonalen Polynomen liegt darin, dass sie eine relativ geringe Anzahl von Monomen haben und keine lokalen Schwankungen verursachen. Die Funktion verläuft kontinuierlich durch die Kanten der Rechtecke. Eine Diskontinuität existiert nur für Funktionsableitungen, die aber nicht relevant sind.

Für die Erzeugung der Polynome werden aus den Knoten multidimensionale Rechtecke (Zellen) gebildet (Abbildung 3.14). Die Zellen besitzen die gleiche Struktur wie die Knoten (Abbildung 3.10) und werden folgendermaßen im Arbeitsspeicher und in der Tabelle gelagert:

- Index  
Typ: `long`, 4 Bytes
- Diskreter Koordinatenvektor  $\mathbf{I} = \{I_1, I_2, \dots, I_{N_D}\}$   
Typ: `char`,  $1 \times N_D$  Bytes

- Vektor der Polynomkoeffizienten  $\mathbf{a} = \{a_{0,m}, \dots, a_{2^{N_D},m}\}$ ,  
 $m = 1 \dots N_D$   
 Typ: `double`,  $8 \times 2^{N_D} \times N_D$  Bytes
- Zeigervektor  $\mathbf{P} = \{P_{1lh}, P_{1rh}, P_{2lh}, P_{2rh}, \dots, P_{N_Dlh}, P_{N_Drh}\}$   
 Type: `long`,  $4 \times 2 \times N_D$  Bytes

Jede Zelle besitzt einen Index und wird durch die Koordinaten der linken unteren Ecke beschrieben, bzw. der Koordinatenvektor einer Zelle entspricht dem Koordinatenvektor eines Knotens, der zum Nullpunkt des Koordinatensystems die minimale Entfernung hat. Die Zellen werden nach dem gleichen Verfahren wie die Knoten mit einem Zeigervektor verbunden. Anstatt des Ergebnisvektors beim Knoten werden bei der Zelle die Polynomkoeffizienten gespeichert. Ein Polynom, das weiter unten vorgestellt wird, beschreibt eine Variable des Ergebnisvektors innerhalb einer Zelle und beinhaltet  $2^{N_D}$  Polynomkoeffizienten. Da der Zustandsvektor  $N_D$  Zustandsvariablen hat, werden folglich  $N_D$  Polynome gebraucht und somit  $2^{N_D} \times N_D$  Polynomkoeffizienten.

Jede Variable des Ergebnisvektors wird innerhalb einer Zelle durch ein lineares Polynom als Funktion des Anfangszustandes in lokalen, normierten Zellenkoordinaten  $\boldsymbol{\phi}^Z = \{\phi_1^Z, \phi_2^Z, \dots, \phi_{N_D}^Z\}$  dargestellt:

$$\begin{aligned} \phi_m(t + \Delta t) = f(\phi_1^Z, \phi_2^Z, \dots, \phi_{N_D}^Z) = & a_{0,m} + \sum_{i=1}^{N_D} a_{i,m} \phi_i^Z + \\ & \sum_{i=1}^{N_D-1} \sum_{j=i+1}^{N_D} a_{i,j,m} \phi_i^Z \phi_j^Z + \sum_{i=1}^{N_D-2} \sum_{j=i+1}^{N_D-1} \sum_{k=j+1}^{N_D} a_{i,j,k,m} \phi_i^Z \phi_j^Z \phi_k^Z + \dots, \\ & m = 1 \dots N_D \end{aligned} \quad (3.40)$$

Die lokalen Zellenkoordinaten sind die normierten Werte des Zustandes, so dass die Koordinaten des Zustandes innerhalb einer Zelle im Bereich von null bis eins liegen. Der Ursprung des lokalen Koordinatensystem hat die globalen Koordinaten des Knotens 1, wie in

Abbildung 3.14 dargestellt. Da diese normierten Koordinaten bei der Transformation des Zustandsvektors  $\phi$  in die diskreten Koordinaten  $I$  berechnet werden und immer zur Verfügung stehen, reduziert man mit deren Verwendung die Anzahl der Rechenoperationen für die Berechnung des Polynoms.

Die Koeffizienten  $a$  repräsentieren die entsprechenden partiellen Ableitungen und werden numerisch aus den Ergebnisvektoren  $\phi(t + \Delta t)$ , der zur Zelle gehörigen Knoten  $k_i$  berechnet. Im zweidimensionalen Fall (Abbildung 3.14) werden die Koeffizienten wie folgt berechnet:

$$a_{0, m} = \phi_m^{k_1}(t + \Delta t)$$

$$a_{i, m} = \frac{\partial \phi_m}{\partial \phi_i^Z} = \frac{\phi_m^{k_{i+1}}(t + \Delta t) - \phi_m^{k_1}(t + \Delta t)}{\Delta \phi_i^Z} = \phi_m^{k_{i+1}}(t + \Delta t) - \phi_m^{k_1}(t + \Delta t),$$

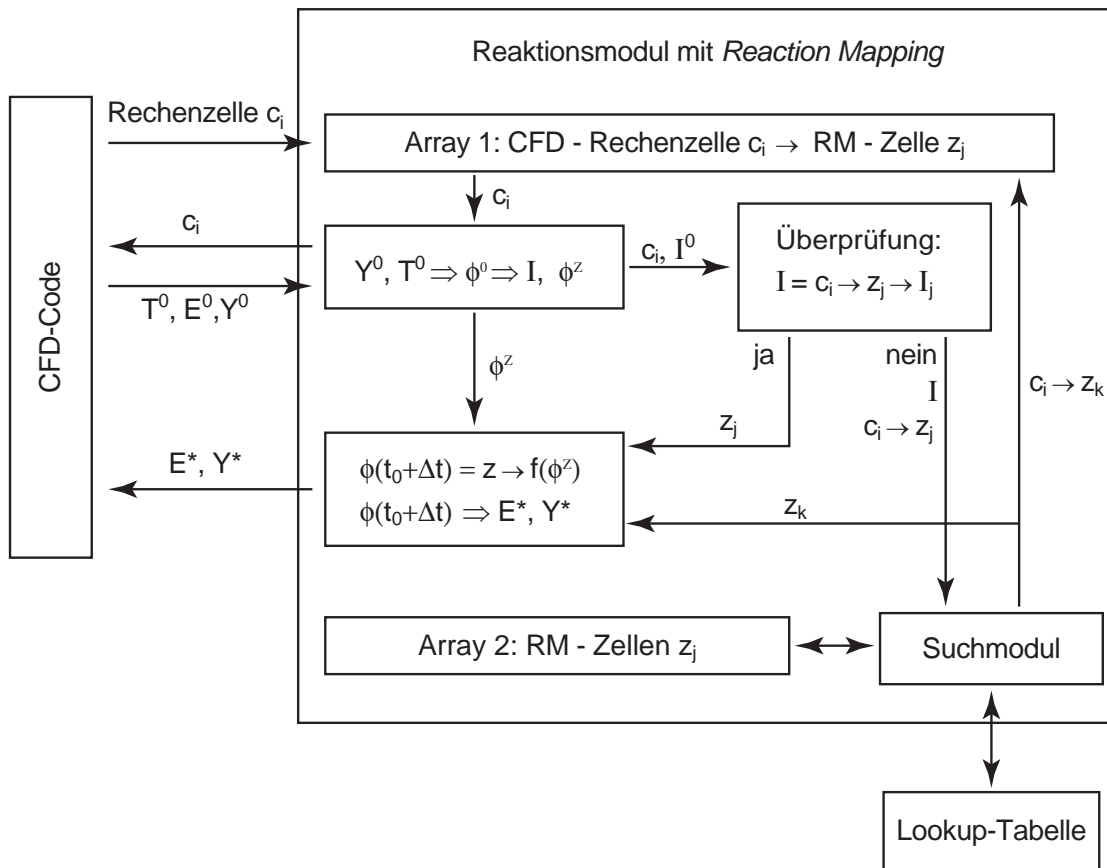
$$\Delta \phi_i^Z \equiv 1 \quad (3.41)$$

Die übrigen Koeffizienten  $a_{i,j} \dots$  bzw. die Ableitungen höherer Ordnung kann man rekursiv berechnen, wobei man die Funktionswerte  $\phi_m^{k_{i+1}}(t + \Delta t)$  und  $\phi_m^{k_1}(t + \Delta t)$  durch die Ableitungen niedrigerer Ordnung ersetzt. Zum Beispiel:

$$a_{i, j, m} = \frac{\partial \phi_m}{\partial \phi_i^Z, \partial \phi_j^Z} = \frac{\partial \phi_m}{\partial \phi_i^Z} \Big|_{\phi_j^Z=1} - \frac{\partial \phi_m}{\partial \phi_i^Z} \Big|_{\phi_j^Z=0} \quad (3.42)$$

Die Implementierung des *Reaction Mapping* in den CFD-Code ist schematisch in Abbildung 3.15 dargestellt. Die Aufgabe des Reaktionsmoduls besteht in der effizienten Berechnung der Gleichungen (3.34) und (3.35) mit Hilfe der in der Lookup-Tabelle gespeicherten Polynome.

Im CFD-Code sind alle Rechenzellen nummeriert, bzw. auf jede Rechenzelle kann durch eine eigene Nummer zugegriffen werden. Am



**Abbildung 3.15:** Schematische Darstellung der Verbindung zwischen dem CFD-Code und dem *Reaction Mapping*

Anfang der Simulation werden bei der Initialisierung die Zeiger  $c_i$  auf jede CFD-Rechenzelle im Array 1 gespeichert und jedem Zeiger  $c_i$  muss eine *Reaction Mapping* (RM)-Zelle  $z_j$ , die den thermochemischen Bedingungen in der CFD-Rechenzelle entspricht, zugewiesen werden,  $c_j \rightarrow z_j$ . Für die Suche nach den benötigten RM-Zellen wird am Anfang der Initialisierung die erste Zelle aus der Lookup-Tabelle eingelesen, die weiter als der Startpunkt für den Suchvorgang dient. Der Suchvorgang erfolgt durch die Zeigervektoren. Die gefundenen und zugewiesenen RM-Zellen werden im Array 2 gelagert. Es ist zu bemerken, dass eine RM-Zelle  $z_j$  aus dem Array 2 mehreren CFD-Rechenzellen  $c_i$  aus dem Array 2 zugewiesen werden kann. Während der Simulation wird in jedem Simulationsschritt die Be-

rechnung der Reaktion durchgeführt. Dies erfolgt folgendermaßen: Für jede CFD-Rechenzelle  $c_i$  aus dem Array 1 wird der derzeitige Zustand  $\phi^0 (T^0, Y^0)$  und  $E^0$  vom CFD-Code abgefragt und der diskrete Koordinatenvektor  $\mathbf{I}^0$  und die lokalen Zellenkoordinaten  $\phi^Z$  berechnet. Danach wird überprüft, ob die der CFD-Zelle  $c_i$  zugewiesene RM-Zelle  $z_j$  noch aktuell ist, bzw. ob der Berechnete Koordinatenvektor  $\mathbf{I}^0$  und der Koordinatenvektor  $\mathbf{I}_j$  der Zelle  $z_j$  gleich sind. Ist das der Fall, wird der neue Zustand  $\phi^*(t_0 + \Delta t)$  mit Hilfe der der Zelle zugehörigen Polynome (Gleichung (3.40)) und somit die  $Y^*$  und  $E^*$  mit den Gleichungen (3.34) und (3.35) berechnet. Falls die RM-Zelle  $z_j$  nicht mehr aktuell ist, startet der Suchvorgang, in dem die notwendige Zelle  $z_k$  mit den Koordinaten  $\mathbf{I}_k = \mathbf{I}^0$  entweder im Array 2 oder in der Lookup-Tabelle gefunden wird. Die gefundene Zelle  $z_k$  wird der CFD-Zelle  $c_i$  zugewiesen  $c_i \rightarrow z_k$  und der neue Zustand  $\phi(t_0 + \Delta t)$  mit Hilfe der gefundenen Zelle  $z_k$  berechnet. Falls die Zelle  $z_k$  in der Lookup-Tabelle gefunden wurde, wird sie in das Array 2 gestellt. Nachdem die Reaktion für alle CFD-Rechenzellen durchgeführt wurde, wird das Array 2 aufgeräumt. Das heißt, dass die RM-Zellen, die von keiner CFD-Rechenzelle zugewiesen sind, aus dem Arbeitsspeicher, bzw. aus dem Array 2 gelöscht werden und dass während der Berechnung nur die verwendeten Polynome, bzw. die Zellen mit den verwendeten Polynomen im Arbeitsspeicher behalten werden. Dadurch bleibt der Arbeitsspeicherbedarf gering, was für die Simulation der Überschallverbrennung von großer Bedeutung ist.

Die Testsimulationen, die in weiteren Abschnitten vorgestellt werden, zeigen, dass der thermochemische Zustand sich durch die Reaktion oder durch die Mischungsvorgänge so ändert, dass die gesuchte Zelle  $z_k$  in meisten Fällen die Nachbarzelle der vorherigen Zelle  $z_j$  ist. Zusätzlich befinden sich nach einer kurzen Simulationszeit fast alle notwendigen RM-Zellen im Arbeitsspeicher (Array 2). Dadurch erfolgt einerseits der Suchvorgang sehr schnell und andererseits wird auf die Lookup-Tabelle sehr selten zugegriffen.

Achse	Minimum	Maximum	Diskretisierungsschritt
T	300	3000	150
H2	0	1	0.1
O2	0	0.24	0.08
O	0	0.02	0.02
H	0	0.1	0.02
OH	0	0.04	0.04
H2O	0	0.55	0.05

**Tabelle 3.2:** Diskretisierung des durch Polynome abgebildeten Reaktionsbereiches

### 3.7 Validierung des polynomialen *Reaction Mapping*

Für die Erzeugung der Polynome wurde eine reduzierte Reaktionskinetik verwendet, die in Abschnitt 3.4 beschrieben wurde. Dadurch wurde die Dimensionalität um zwei Dimensionen ( $HO_2$  und  $H_2O_2$ ) reduziert, was für die Entwicklung dieser Methode sehr wichtig war. Benutzt man zum Beispiel zwei Diskretisierungsintervalle für die Molenbrüche von  $HO_2$  und  $H_2O_2$  in der vollständigen Tabelle, reduziert sich die Tabellengröße durch die Reduzierung der beiden Radikale um den Faktor vier. Durch die Testläufe wurde eine optimale Diskretisierung für die Temperatur und die Speziesmolenbrüche gefunden (Tabelle 3.2), wobei bei einer moderaten Zellenanzahl eine gute Interpolationsgenauigkeit erreicht wird. Ein adaptives Verfahren für die Tabellierung bei hoher Dimensionalität erscheint nicht sinnvoll, da z.B. die Verfeinerung einer Zelle im 10-D-Raum  $2^{10}$  neue Zellen bringt, wobei nicht alle Zellen verwendet werden. Das führt zu einer enormen Steigerung der Tabellengröße. Zusätzlich muss eine Hierarchie in der Tabellenstruktur eingebaut werden, um die Kopplung von Zellen unterschiedlicher Feinheitsniveaus zu ermöglichen. Das würde aber zu einer längeren Suchzeit führen.

Die Anzahl der Zellen, bzw. der Polynome, die auf Basis einer Lookup-Tabelle mit 226663 Knoten generiert wurden, beträgt 28969. Jede Zelle besteht aus 128 ( $2^7$ ) Knoten. Der Zusammenhang zwischen

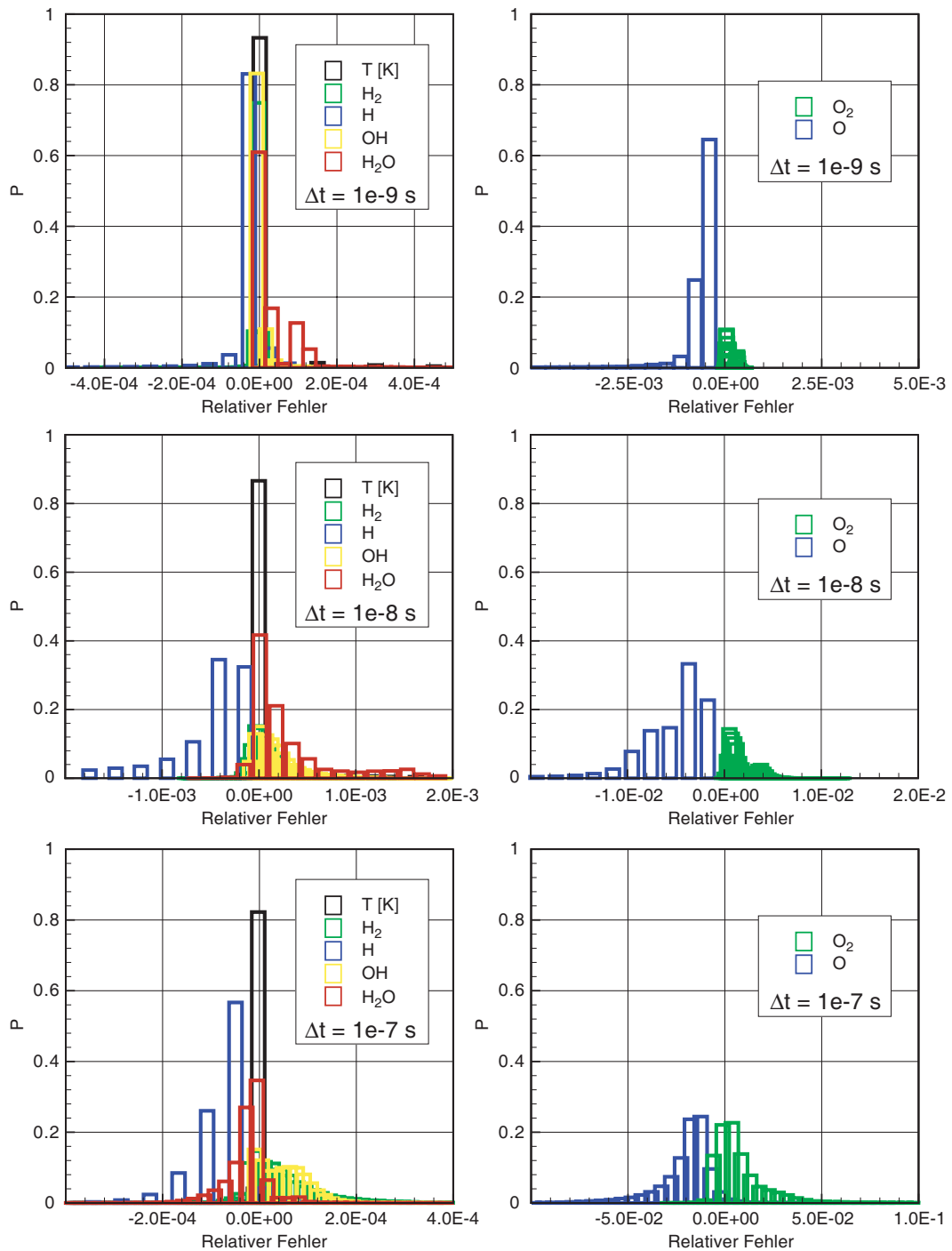
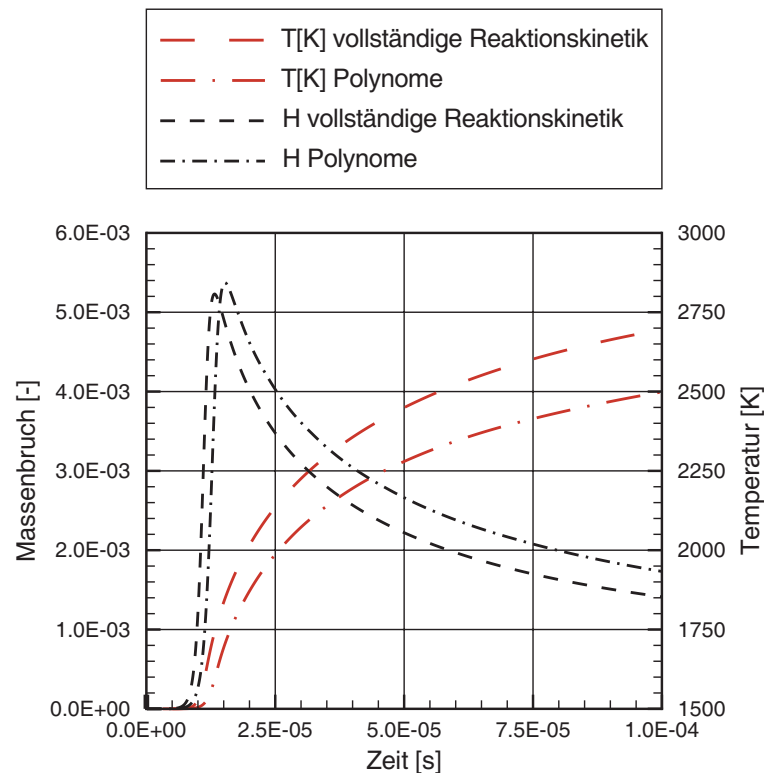


Abbildung 3.16: Untersuchung der Interpolationsgenauigkeit für die Zeitschritte von  $1e-9$  s,  $1e-8$  s und  $1e-7$  s



den Knoten und den Zellen kann aber nicht direkt bestimmt werden, da dieser von der Geometrie des *realisierbaren* Bereichs abhängig ist. Die Lookup-Tabelle und die Polynome wurden für drei verschiedene Zeitschritte von  $1e-9$  s,  $1e-8$  s und  $1e-7$  s generiert, um die Interpolationsgenauigkeit in Abhängigkeit des Zeitschritts zu untersuchen. Dafür wurde der relative Interpolationsfehler in der Mitte jeder Zelle berechnet. Die Zellenmitte wurde als Prüfpunkt ausgewählt, da hier der größte Interpolationsfehler zu erwarten ist. Die Wahrscheinlichkeitsverteilungen für den relativen Fehler sind für die untersuchten Zeitschritte in Abbildung 3.16 dargestellt. Die Analyse der Histogramme liefert die Information zur Fehlergröße für jede Spezies bei unterschiedlichen Zeitschritten. Für Zeitschritte von  $1e-9$  s und  $1e-8$  s bleibt der Interpolationsfehler im Wesentlichen unter 1% und für den Zeitschritt von  $1e-7$  s wird die Wahrscheinlichkeitsverteilung viel breiter. Der Interpolationsfehler für die Spezies  $O_2$  und  $O$  ist viel größer als für die anderen Spezies und für die Temperatur. Da die Interpolationsgenauigkeit auch von der Diskretisierung abhängig ist, besteht eine Möglichkeit, die Fehler für alle Spezies durch unterschiedliche Diskretisierungen auszugleichen.

Die Modellierung des Reaktionsablaufs in einem geschlossenen Behälter mit dem CFD-Code *FLUENT* und unter Verwendung der Polynome zeigt eine gute Übereinstimmung mit den Ergebnissen, die mit einer vollständigen chemischen Reaktionskinetik erzielt wurden. Der zweidimensionale Behälter beinhaltet ein homogen verteiltes Gemisch. Innerhalb des Behälters finden keine Strömungsvorgänge statt, so dass die Reaktion im Behälter analog der Reaktion in einem Konstantvolumenreaktor aus dem *CHEMKIN II* Package [San89] verläuft. Die Reaktionsverläufe für die Polynome mit dem Tabellierungszeitschritt von  $1e-8$  s sind in Abbildung 3.17 dargestellt. Die geringe Abweichung zwischen den Kurven entsteht sowohl durch den Interpolationsfehler als auch durch die Annahme eines konstanten Drucks bei der Polynombildung.

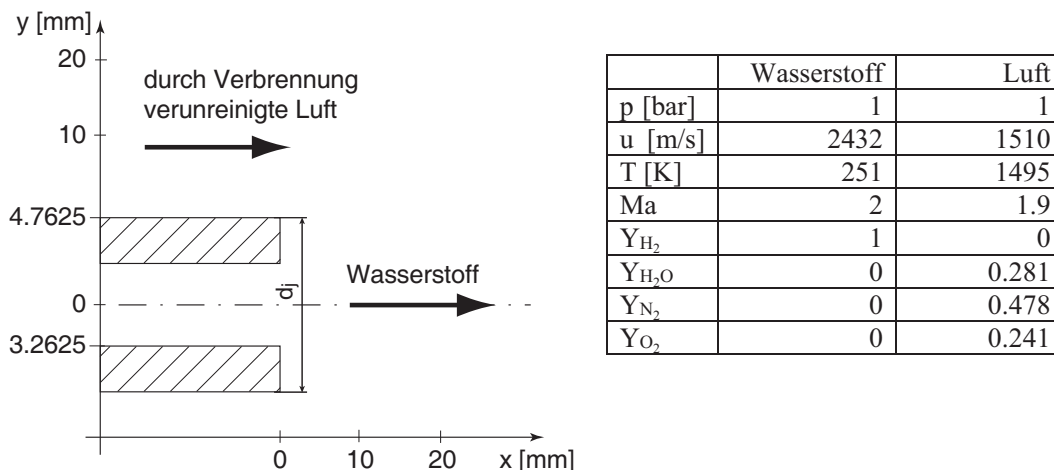


**Abbildung 3.17:** Reaktionsablauf in einem geschlossenen Behälter. Simulation mit dem CFD-Code *FLUENT*. Tabellierungszeitschritt  $1e-8$  s

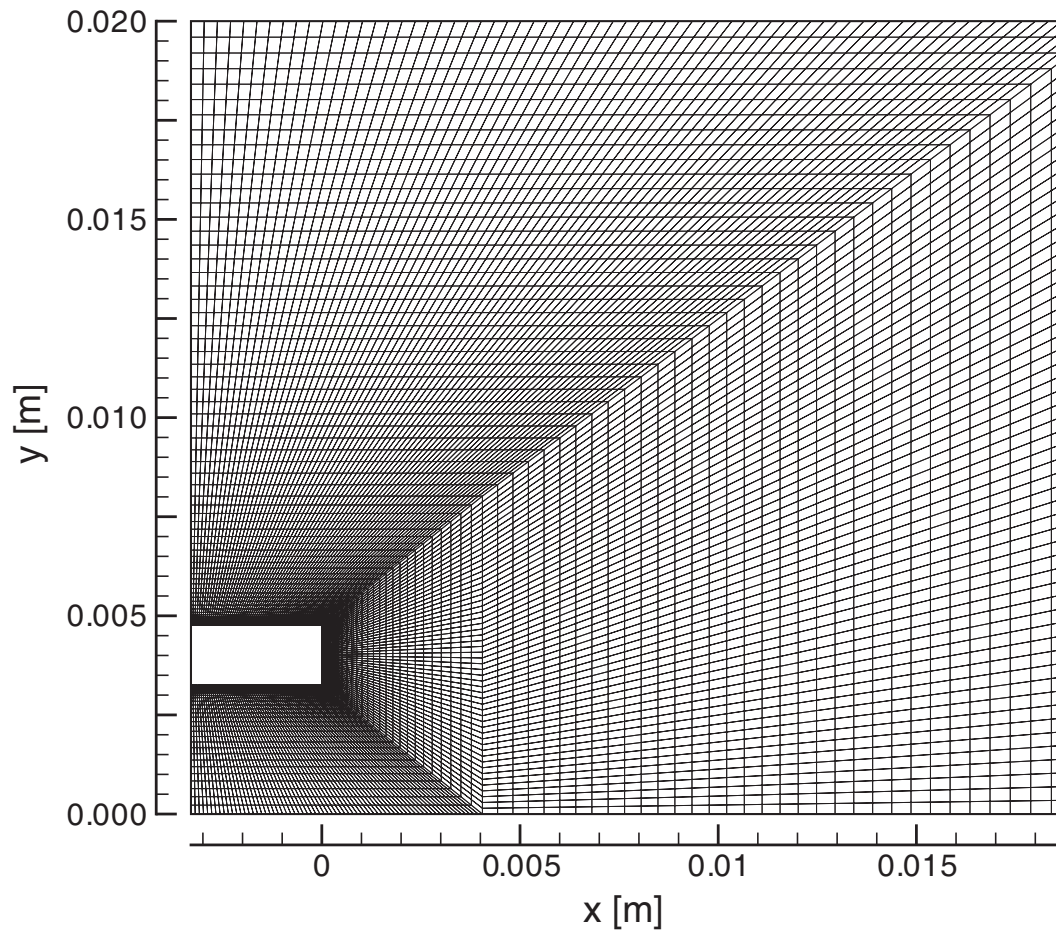
### 3.8 Einsatz der Polynome zur Simulation der Überschallverbrennung

Eines der häufigsten Probleme bei der Modellentwicklung ist das Fehlen eines geeigneten Validierungsexperiments. Das Problem liegt darin, dass Messungen in Überschallströmungen durch berührungslose, optische Methoden erfolgen, die aber eine relativ niedrige Genauigkeit besitzen. Infolgedessen sind derzeit nur wenige Experimente bekannt, die für eine Validierung verwendbar sind. Das Experiment von Evans [ESB78], bei dem Wasserstoff in eine vorgeheizte, verunreinigte Luftströmung eingedüst wird, wurde schon früher für Validierungszwecke verwendet. Die Geometrie und die Eintrittsbedingungen sind in Abbildung 3.18 dargestellt. Es ist wichtig anzumerken, dass

die Eintrittsbedingungen als angenäherte Werte angegeben sind. Aus der Beschreibung des Experiments folgt, dass die Eintrittsprofile eine sehr starke räumliche Inhomogenität haben. Zum Beispiel beträgt der geschätzte Temperaturanstieg für den durch den Injektor strömenden Wasserstoff ca.  $150\text{ K}$  [ESB78]. Da die Aufenthaltszeit des Wasserstoffs im Injektor sehr gering ist, wird eine starke axiale Temperaturverteilung erwartet. Demzufolge weicht die Austrittsmachzahl bzw. die Austrittsgeschwindigkeit des Wasserstoffjets von den angegebenen angenäherten Werten ab, was aber einen sehr großen Einfluss auf die Mischung und auf den Reaktionsvorgang hat. Leider wurden die Eintrittsprofile nicht gemessen. Um die Eintrittsprofile für die Simulation zu erhalten, wurde eine zusätzliche Berechnung der Strömung in einem axialsymmetrischen Rohr mit dem gleichen Durchmesser durchgeführt. Da die Geometrie axialsymmetrisch ist, wird ein zweidimensionales Rechennetz mit einer Symmetrieachse verwendet. Die Gitterauflösung liegt bei den Injektorlippen im Bereich von  $1\ \mu\text{m}$ , was die erforderlichen  $y^+$  Werte garantiert (Abbildung 3.19). Die ersten Simulationsergebnisse zeigten, dass die Eintrittsprofile die Mischung und den Reaktionsverlauf bestimmen, wobei bei der Annahme eines konstanten Eintrittsprofils keine Zündung im untersuchten räumlichen Bereich erfolgt. Die Eintrittsprofile sind sehr stark von



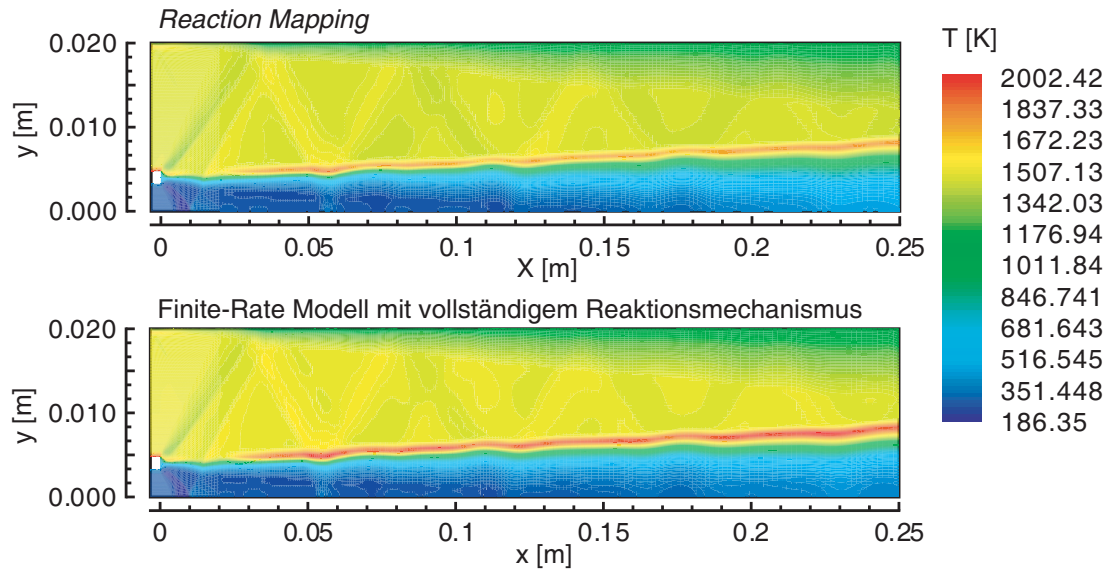
**Abbildung 3.18:** Geometrie und Eintrittsbedingungen des achsensymmetrischen Experiments von Evans



**Abbildung 3.19:** Rechengitter für das Experiment von Evans. Gitterauflösung an der Injektorlippe ca.  $1 \mu\text{m}$

der Länge des simulierten Rohrs abhängig, bzw. die Grenzschicht wächst sehr schnell mit der Länge. Deswegen muss man diese Unsicherheit bei der Interpretation der Simulationsergebnisse berücksichtigen.

Für die Simulation der Verbrennung wurden beide Methoden eingesetzt: das *Finite-Rate* Modell mit dem Reaktionsschema von Warnatz und das reduzierte polynomiale *Reaction Mapping* mit dem Tabellierungszeitschritt von  $1\text{e-}8 \text{ s}$ . Wie man aus der Darstellung der Temperaturkonturen in Abbildung 3.20 sieht, liefern beide Methoden identische Ergebnisse. Die Zündung findet kurz nach der Eindüsung aufgrund der hohen statischen Temperatur (ca.  $1500 \text{ K}$ ) in der Luft-



**Abbildung 3.20:** Vergleich der berechneten Temperaturkontur für das Experiment von Evans: oben — *Reaction Mapping* mit reduziertem Reaktionsschema, unten — *Finite-Rate* Modell mit vollständigem Reaktionsschema

strömung statt. Die Reaktionszone bleibt aber sehr schmal, da die Reaktion durch die Mischung kontrolliert wird, welche sehr moderat ist. Es ist wichtig anzumerken, dass die Simulationszeit bei der Verwendung der Polynome wenig von der Simulationszeit der nicht reagierenden Strömung abweicht, während die Verwendung des *Finite-Rate* Modells die Simulationszeit um den Faktor zwei verlängert.

Der Vergleich der radialen Profile der Hauptspezies ( $H_2$ ,  $O_2$ ,  $H_2O$ ) an drei Positionen  $x/d_j = 8.26$ ,  $15.5$  und  $21.7$  entlang der Strömung bei beiden Methoden und beim Experiment (Abbildungen 3.21 und 3.22) zeigt auch eine gute Übereinstimmung zwischen der vollständigen Kinetik und des polynomialen *Reaction Mapping*. Die einzige deutliche Abweichung zeigt der Sauerstoff, der bei der Verwendung von Polynomen unverbrannt in der Reaktionszone bleibt und zur Achse diffundiert. Der Grund dafür ist ein gegenüber den anderen Spezies deutlich größerer Interpolationsfehler, wie in Abschnitt 3.7

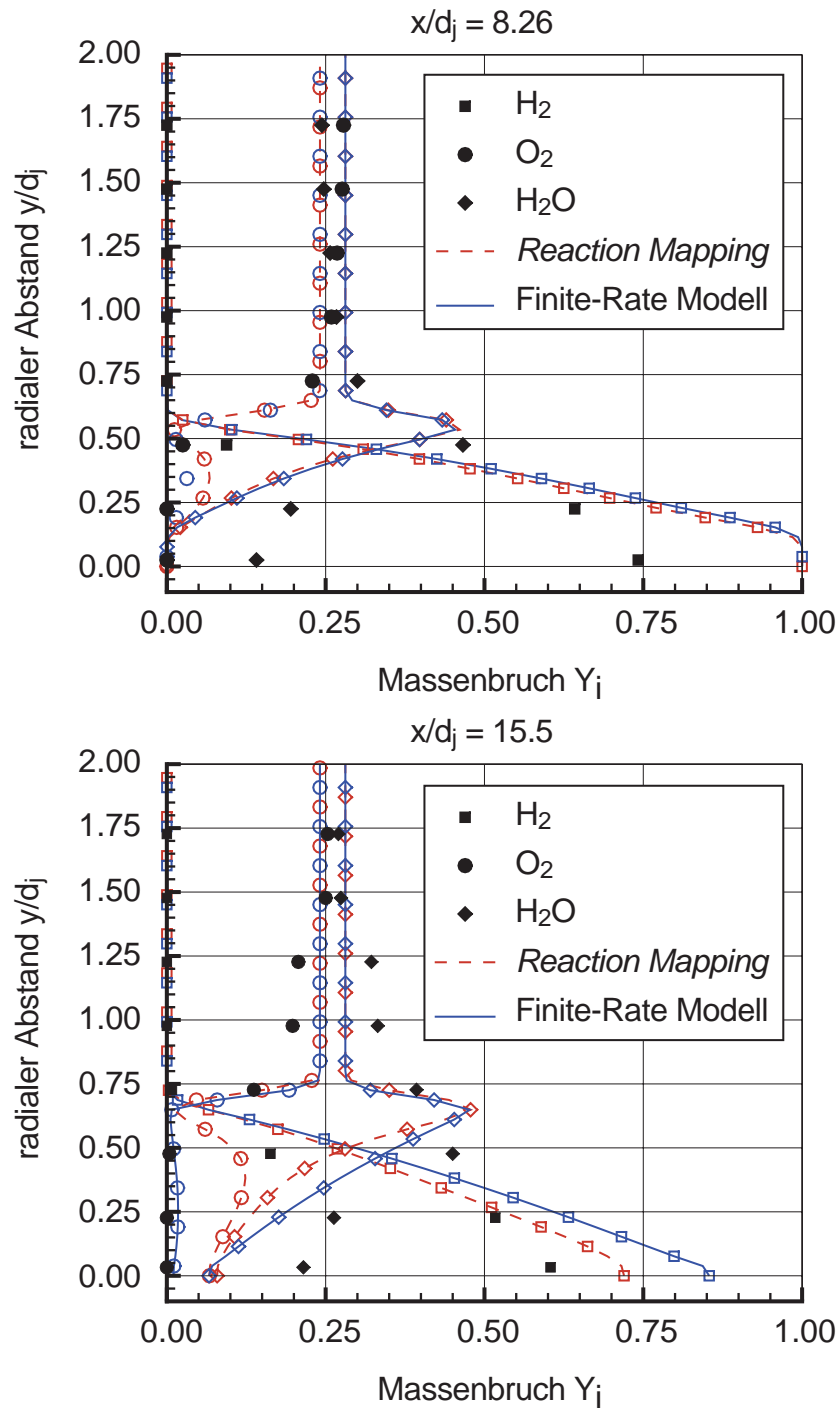
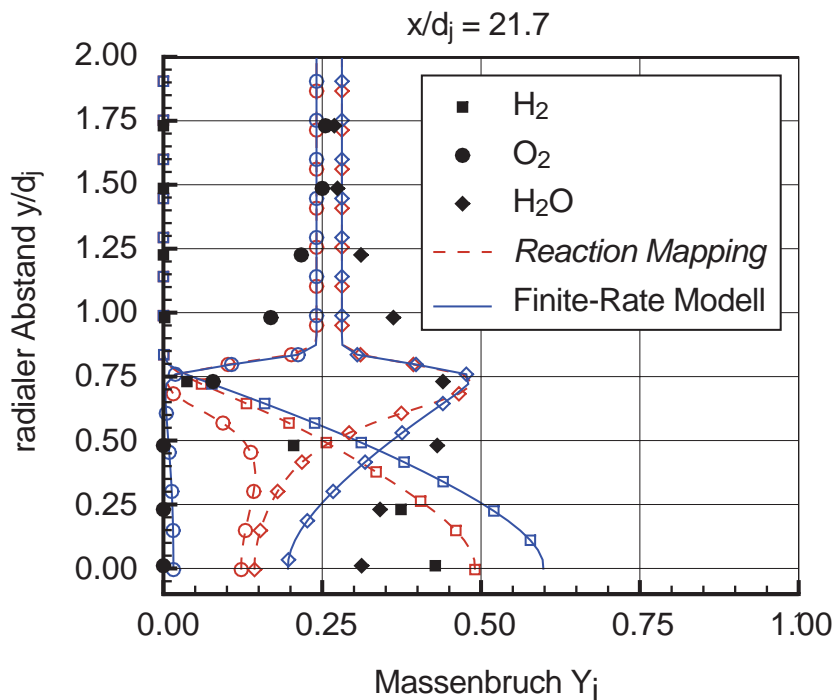


Abbildung 3.21: Berechnete und gemessene Profile der Speziesmassenbrüche entlang der Strömung.



**Abbildung 3.22:** Berechnete und gemessene Profile der Speziesmassenbrüche entlang der Strömung.

analysiert. Man sieht auch, dass beide numerischen Ergebnisse von den gemessenen Daten abweichen. Die Reaktion im Experiment läuft viel intensiver ab als in der Simulation, was durch die bessere Vermischung von Wasserstoff und Luft begründet ist. Wie schon erwähnt, liegt das Hauptproblem für solche Abweichungen in den Eintrittsprofilen, die man nicht vollständig numerisch nachrechnen kann. Ein ähnliches Ergebnis wurde auch von Gerlinger [GMB01, GSB98] erzielt, wobei für die Simulation der Verbrennung sowohl das *Finite-Rate* Modell als auch das assumed PDF-Verfahren eingesetzt und verglichen wurden. Die Reaktionszone ist viel schmaler als im Experiment und die Verwendung der PDF-Methode liefert das gleiche Ergebnis wie das *Finite-Rate* Modell.

In Bezug auf die Implementierungstechnik und die Weiterentwicklung des polynomialen *Reaction Mapping* lieferte die Simulation sehr interessante Ergebnisse. Obwohl die Reaktion einen diffusiven Cha-

rakter mit sehr breitem Spektrum von Temperaturen und Mischungs-raten hat, ist die Anzahl der verwendeten Polynome sehr klein. Es wurden ca. 180 Polynome während der Berechnung verwendet. Annähernd 165 Polynome befanden sich kontinuierlich im Arbeitsspeicher und ca. 1–2 Polynome wurden pro Zeitschritt gelesen und gelöscht. Das ermöglicht sowohl die Verfeinerung der Diskretisierung besonders für die  $O_2$ - und  $O$ -Spezies als auch die Erhöhung der Dimensionalität, bzw. das Einschließen des Drucks und der beiden eliminierten Spezies ( $HO_2$ ,  $H_2O_2$ ) ohne enormen Anstieg an erforderlichem Arbeitsspeicher und des Festplatte-Arbeitsspeicher-Datenverkehrs.

### 3.9 Diskussion der Modellierungsstrategie für die Überschallverbrennung

Die Analyse prinzipiell geeigneter Modellierungskonzepte (*Finite-Rate* Modell, assumed PDF und Monte-Carlo-Verfahren) zeigte, dass das *Finite-Rate* Modell zur Zeit die einzige anwendbare Methode für die dreidimensionale Berechnung von realen Überschallbrennkammern ist. Die mathematische Formulierung der assumed PDF-Methoden ermöglicht, den Einfluss von zeitlichen Inhomogenitäten auf den Reaktionsverlauf zu berücksichtigen, wobei deren Verwendung aber einerseits sehr hohe Rechenkapazitäten erfordert und andererseits nicht unbedingt eine bessere Übereinstimmung mit den experimentellen Ergebnissen liefert [GMB01, GSB98]. Die Erklärung dieses Phänomens liegt hauptsächlich darin, dass die Fluktuationen nicht immer eine entscheidende Rolle beim Reaktionsvorgang spielen, sondern andere Effekte, wie zum Beispiel ungenaue Eintrittsprofile (Nachrechnung des Experimentes von Evans), die Mischungsrate und den Reaktionsverlauf beeinflussen. Zusätzlich zeigt die Studie des assumed PDF-Verfahrens von Gerlinger [Ger02] einen Bedarf für die Weiterentwicklung der Skalar-Transportgleichungen. Das Monte-Carlo Verfahren ist zur Zeit wegen der benötigten Rechenkapazitäten für die Berechnung technisch relevanter Brennkammern nicht einsetz-



bar.

Erst die Entwicklung von speziellen Modellen zur Reduzierung der Rechenkosten und die Weiterentwicklung der Rechnertechnologien werden den Einsatz von PDF-Methoden zur Simulation einer realen Brennkammergeometrien ermöglichen. Das polynomiale *Reaction Mapping* erlaubt, den Rechenaufwand sowohl für das *Finite-Rate* Modell als auch für die PDF-Methoden zu minimieren. Im letzten Fall wird die höchste Effizienz durch das Einschließen der Fluktuationsvariablen in die Beschreibung des thermochemischen Zustandes erreicht. Dies führt zu Simulationsrechenzeiten für die assumed PDF Methode in der Größenordnung des *Finite-Rate* Modells.

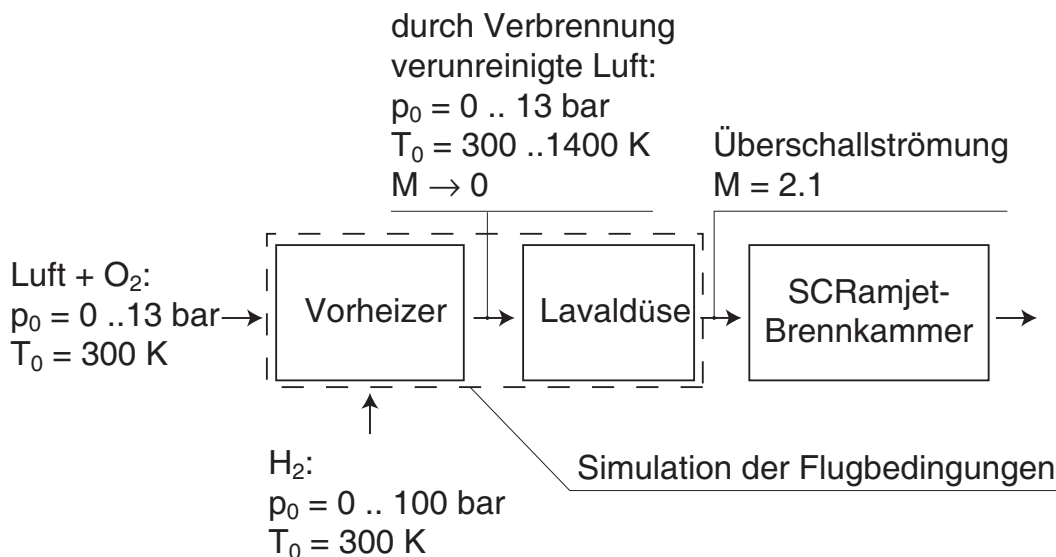
Die Reduzierung der chemischen Reaktionskinetik führt zu einer Begrenzung des Einsatzbereiches, so dass die Güte der reduzierten Reaktionsbeschreibung für jedes untersuchte Verbrennungsproblem analysiert werden muss. Die Verwendung des polynomialen *Reaction Mapping* ermöglicht nun, die Rechenzeit soweit zu verringern, dass die Reduzierung vollständig vermieden werden kann.

Sowohl bei der Entwicklung als auch bei der Analyse der vorhandenen Überschallbrennkammer ist es sinnvoll, zuerst die Simulation mit einer möglichst rechengünstigen Methode (*Finite-Rate* Modell) durchzuführen und danach bei Bedarf eine genauere Modellierungsmethode (assumed PDF, Monte-Carlo PDF) einzusetzen. Mit dieser Strategie wurde die Untersuchung sowohl des vorhandenen Brennkammerkonzepts von Grünig [Grü99] (Kapitel 6) als auch des in Kapitel 7 beschriebenen Konzepts realisiert. Das *Finite-Rate* Modell mit einem vollständigen Reaktionsschema von Warnatz (Anhang A) wurde in beiden Fällen als Standardmodell verwendet. Sowohl bei der Untersuchung des Konzeptes von Grünig als auch für die Entwicklung des ersten funktionsfähigen Prototyps des neuen Brennkammerkonzepts reichten die Simulationen mit dem *Finite-Rate* Modell aus, um die Hauptprobleme zu analysieren. Für die Weiterentwicklung des neuen Konzeptes wird der Einsatz von PDF-Methoden notwendig sein, um die komplizierten Mischvorgänge und deren Einfluss auf

den Reaktionsablauf zu untersuchen und die Brennkammergeometrie zu optimieren.

## 4 Modellierte Konfigurationen

Die experimentelle Anlage [San03] zur Untersuchung der SCRamjet-Brennkammer ist schematisch in Abbildung 4.1 dargestellt. Die Flugbedingungen werden mit Hilfe eines Vorheizers und einer Lavaldüse simuliert. Die gefilterte Luft, die mit einem Druck von bis zu 13 bar bereitgestellt werden kann, wird mit Sauerstoff angereichert, um dessen Verbrauch im Vorheizer zu kompensieren. Der Vorheizer kann die Strömung bis auf 1400 K aufheizen. Der Massenstrom durch den Kanal beträgt während des Experiments 300 g/s. Die vorgeheizte Strömung wird in der Lavaldüse beschleunigt und tritt in die Brennkammer mit einer Machzahl von 2.1 ein.



**Abbildung 4.1:** Schematische Darstellung der experimentellen Anlage

### 4.1 Vorheizer

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurden die Experimente [San03] durch reaktionskinetische Studien des Vorheizers mittels Reaktormodellen unterstützt. Es existieren mehrere Methoden, um die To-

taltemperatur (Enthalpie), die für experimentelle Untersuchung von luftatmenden Triebwerken bei hoher Flugmachzahl erforderlich ist, zu erreichen. Die Wichtigsten dabei sind:

- Wärmetauscher mit einem vorgeheizten keramischen Bett
- Direkte elektrische Aufheizung, z.B. Lichtbogenentladung
- Kompressionsaufheizung
- Vorverbrennung mit Sauerstoffzufuhr für die Anpassung des Luftzusammensetzung

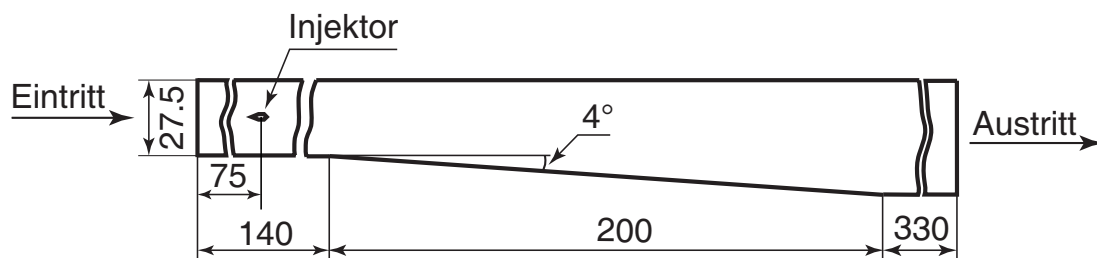
Jede der oben genannten Methoden hat Vorteile, Nachteile und Begrenzungen, die sehr detailliert von Pellett [PBC02] recherchiert wurden. Die letzte Methode, die Vorverbrennung, hat vor allem einen sehr wichtigen Vorteil; die Kosten für die Vorverbrennung sind um den Faktor größer 4 niedriger als bei allen anderen Methoden. Zusätzlich werden auch die längere Standzeit und die hohe Flexibilität als Stärken dieser Methode genannt. Im Fall der Vorverbrennung wird das Testmedium als "*vitiated air*" bezeichnet, was schon auf die Nachteile dieser Methode hindeutet. Der hohe Anteil des Wasserdampfes (bei der Simulation der Flugmachzahl von 8 mit einem Wasserstoff-Vorheizer beträgt der Wasserdampfanteil ca. 33%) beeinflusst die chemischen und thermodynamischen Parameter der Testluft. Falls die Verbrennung im Vorheizer nicht optimal verläuft, besteht zusätzlich die potenzielle Gefahr der Anwesenheit von Reaktionszwischenprodukten, die den Reaktionsvorgang in der Brennkammer wesentlich stärker beeinflussen als der Wasserdampf. Das heißt, dass die Untersuchung des Vorheizers aufgrund ihrer hohen Bedeutung parallel zu der Brennkammeruntersuchung stattfinden muss.

Die experimentelle Anlage wurde noch in der vorherigen Forschungsphase des SFB gebaut und für die weiteren Forschungsarbeiten übernommen. Für die Aufwärmung der Luft wird ein Wasserstoff-Vorheizer verwendet. Die Geometrie des Vorheizers ist detailliert in

[San03] beschrieben. Der für die Aufheizung der Luftströmung notwendige Wasserstoff wird am Eintritt in den Vorheizer gezündet. Die Flamme stabilisiert sich an den Flammenhaltern und hat einen diffusen Charakter. Die Aufenthaltszeit des Gasgemisches im Vorheizer ist relativ kurz, da die Vorheizerlänge nur  $380\text{ mm}$  beträgt. Während der Untersuchung des Vorheizerausbrands, die in Kapitel 5 noch detailliert vorgestellt wird, wurde ein Optimierungsbedarf am Reaktionsvorgang festgestellt. Dieser wurde durch die Verwendung eines Vormischers, der für die Vorbereitung des Wasserstoff-Luft-Gemisches dient, optimiert. Der Vormischer ist in Kapitel 5 detailliert beschrieben.

## 4.2 SCRamjet-Modellbrennkammer

Die Geometrie der Brennkammer ist in Abbildung 4.2 dargestellt. Die Querschnittsfläche am Eintritt der Brennkammer beträgt  $27,5\text{ mm} \times 25\text{ mm}$ . Der Wasserstoff wird über die untersuchten Injektoren  $75\text{ mm}$  stromabwärts vom Brennkammereintritt eingedüst. Der Wasserstoffmassenstrom kann durch die Änderung des Injektionsdrucks bis auf  $2,3\text{ g/s}$  erhöht werden.  $145\text{ mm}$  stromabwärts vom Brennkammereintritt expandiert die Strömung auf einer Länge von  $200\text{ mm}$  mit einem Winkel von  $4^\circ$ , um ein thermisches Blockieren der Strömung zu vermeiden [Grü99].



**Abbildung 4.2:** Geometrie der untersuchten SCRamjet-Brennkammer

### 4.3 Wasserstoffinjektoren

Während der vorherigen Phase des Forschungsprojektes wurde von Grünig ein Injektor (Pylon-Injektor) (Abbildung 4.3) entwickelt, der eine schnelle Zündung und eine intensive Reaktion innerhalb der Brennkammer ermöglichte. Er besteht aus einem massiven Körper, der durch eine Rampenstruktur an den Flanken Sekundärwirbel erzeugt. Der Wasserstoff wird mit einem Winkel von  $30^\circ$  zur Strömungsrichtung eingedüst. Eine detaillierte Beschreibung des Konzeptes und der Ergebnisse ist in [Grü99] zu finden.

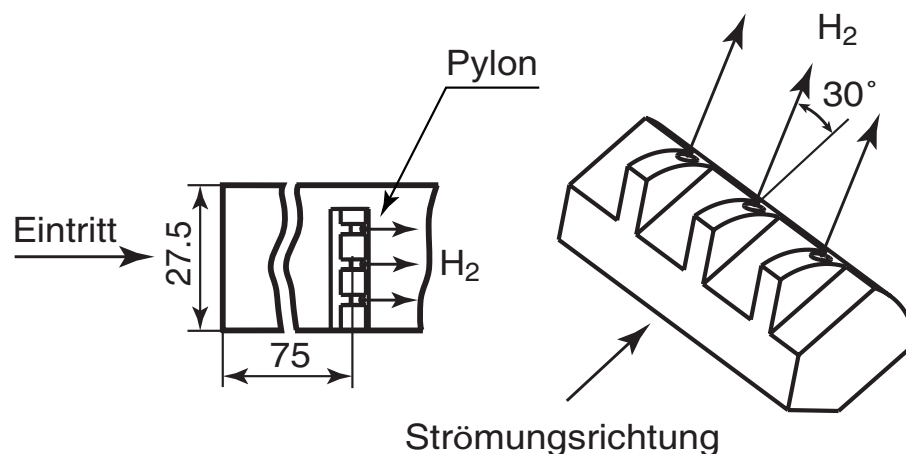
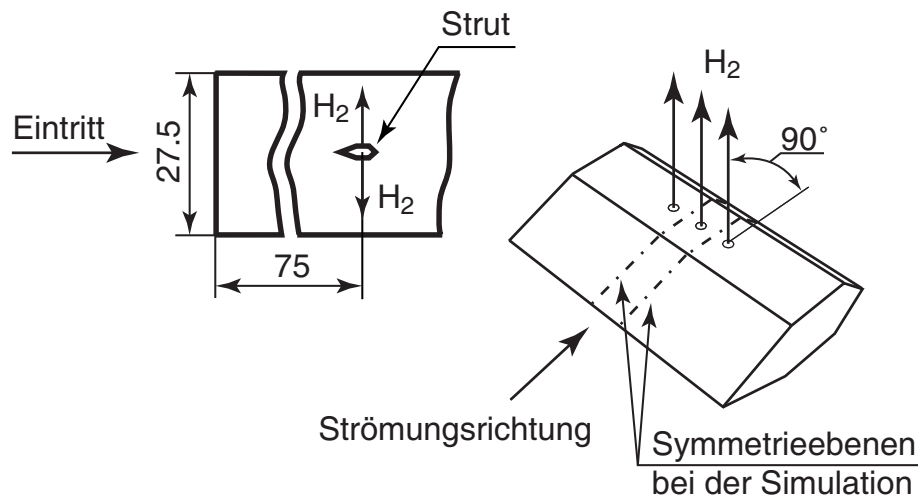


Abbildung 4.3: Pylon-Injektor

Der Pylon generiert eine sehr komplizierte dreidimensionale Strömung, die einen großen Einfluss auf die Mischungsvorgänge und folglich auf die Zündung und die Flammenausbreitung hat. Aufgrund der Schwierigkeit, bei einer so komplizierten Strömungsform die verschiedenen Einflüsse auf die Zündung und Flammenstabilisierung voneinander separieren zu können und weil der massive Querschnitt zu prohibitiv hohen Totaldruckverlusten führt, eignet sich diese Geometrie weder für die gezielte Verfahrensentwicklung, noch ist sie verbrennungstechnisch besonders interessant.

Aus diesem Grund wurde ein Keil-Injektor (Abbildung 4.4) entwickelt, der keine wirbelgenerierenden Elemente besitzt. Dieser ge-



**Abbildung 4.4:** Keil-Injektor

stattet, zunächst die Wechselwirkung zwischen den Druck- und Temperaturfeldern und der Zündung und der Flammenausbreitung zu studieren und dann die erworbenen Kenntnisse für die Untersuchung der Brennstoffinjektion nachfolgend einzusetzen. Der Querschnitt dieses Keil-Injektors ist schlanker als der des Pylon-Injektors und hat einen Winkel von  $45^\circ$  an der vorderen und  $90^\circ$  an der hinteren Kante. Die Eindüsung des Treibstoffs erfolgt durch drei Bohrungen auf jeder Seite senkrecht zur Strömungsrichtung in der Mitte der Strömung, um ein Eindringen des Wasserstoffs in die seitliche Grenzschicht und somit die Zündung an dieser Stelle zu vermeiden. Diese Injektorgeometrie erlaubt die Verwendung der in Abbildung 4.4 skizzierten Symmetrieebenen in der Rechnung und daraus resultierend eine Reduzierung der Größe des Rechengebiets.

## 5 Untersuchung des Vorheizers

### 5.1 Einfluss von Radikalen auf die Zündung

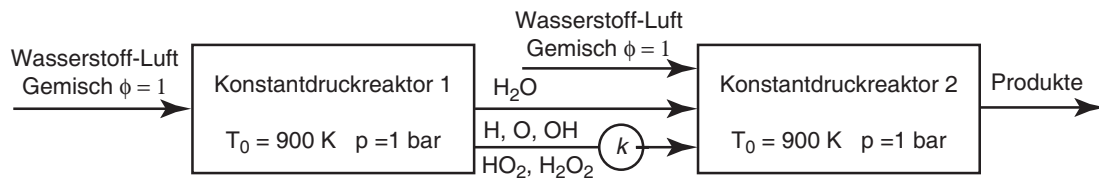
Testanlagen für SCRamjet-Brennkammern, die Flugbedingungen mit einem wasserstoffbetriebenen Vorheizer (*Vitiator*) simulieren, werden häufig wegen ihrer Einfachheit und ihrer niedrigen Herstellungs- und Betriebskosten angewandt. Ein Problem ist aber der potenzielle Einfluss des Vorheizers auf die Zündung und auf den Reaktionsverlauf in der Brennkammer durch die Verunreinigung der Testluft mit Reaktionsprodukten und Reaktionszwischenpezies. Bei der idealen Verbrennung im Vorheizer sollte die Testluft nur mit Wasserdampf verunreinigt sein, was die Selbstzündung in der Brennkammer nur geringfügig verzögert. Freie Radikale ( $H$ ,  $O$ ,  $OH$ ), die sowohl bei idealen als auch bei nicht-idealen Verbrennungsvorheizern entstehen, können die Selbstzündung und die Flammenhaltung/Verbrennung wesentlich beeinflussen. Die Recherche von Pellett [PBC02] zeigt, dass das  $OH$ -Radikal die Zündverzögerungszeit um einen Faktor größer 10 reduzieren kann, was v.a. bei niedrigeren Eintrittstemperaturen und Drücken wichtig ist. Der größte Effekt tritt im Bereich zwischen 0.3 und 1 *atm.* bei ca. 900 *K* auf, was einer Flugmachzahl von 3–4 entspricht. Das ist ein kritischer Bereich, da die Umschaltung von Ramjet auf SCRamjet Modus oft für diesen Flugmachzahlbereich vorgesehen ist. Der Effekt des  $H$ -Radikals ist infolge der Konkurrenz zwischen der  $H + O_2 \rightarrow OH + O$  Kettenverzweigung und dem  $H + O_2 + M \rightarrow HO_2 + M$  Kettenabbruch ähnlich, was sehr kritisch in Bezug auf Zündgrenzen, Zündverzugszeit und Flammenausbreitung ist. Ferner nimmt das  $O$ -Radikal über die  $O + H_2 \rightarrow OH + H$  Kettenverzweigungsreaktion Einfluss, die auch sehr wichtig für die Zündung und Flammenausbreitung ist.

Die Anwesenheit von Zwischenspezies in der Strömung bedeutet, dass die Reaktion noch nicht abgeschlossen ist, was zu einer Zunahme von Temperaturfluktuationen führt [WMD97], deren Einfluss auf die Zündung mit dem von Radikalen vergleichbar ist [GWGD94].

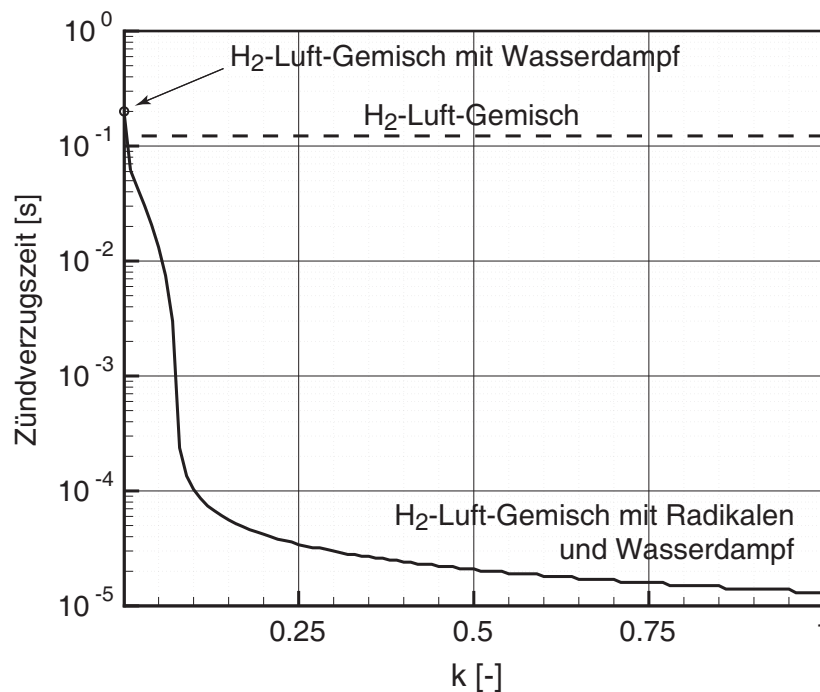


Der Einfluss der Vorverbrennung auf den Reaktionsverlauf in einer Überschallbrennkammer wurde von Mitani [MHS<sup>+</sup>97], [Mit95] untersucht. Es wurde gezeigt, dass die Vorverbrennung zu einer intensiveren Reaktion in der Brennkammer im Vergleich zu derjenigen bei Verwendung eines elektrischen Vorheizers führt. Unter manchen Bedingungen wurde die Zündung nur mit Vorverbrennung erreicht.

Die Analyse der vorherigen Ergebnissen von Grünig [Grü99] und die weitere detaillierte experimentelle Untersuchung der Brennkammer [LSS02] zeigen, dass die Bedingungen zur Zündung in der Brennkammer ungünstig sind, obwohl eine stabile und intensive Verbrennung experimentell beobachtet wurde. Da die Selbstzündung sehr sensibel auf das Auftreten von Radikalen reagiert, wurde vermutet, dass die Reaktionszwischenprodukte aus dem Vorheizer ein Grund für dieses Phänomen sind. Um die Größenordnung des Radikaleinflusses auf die Zündung zu quantifizieren, wurde ein reaktionskinetisches Modell erstellt (Abbildung 5.1), das aus zwei seriell verbundenen adiabaten Konstantdruckreaktoren aus dem *CHEMKIN II* Package besteht. Nachdem die Reaktion im ersten Reaktor abgeschlossen ist und die Radikalkonzentrationen den Gleichgewichtszustand erreichen, werden die Radikale ( $H$ ,  $O$ ,  $OH$ ,  $HO_2$ ,  $H_2O_2$ ) mit einem Faktor  $k$  ( $0 \leq k \leq 1$ ) multipliziert und das Reaktionsprodukt ( $H_2O$ ) vollständig dem zweiten Reaktor zugeführt. Die Abhängigkeit der Zündverzugszeit von der zugeführten Radikalenmenge im zweiten Reaktor und die Zündverzugszeit des reinen Wasserstoff-Luft-Gemisches bei einer Anfangstemperatur von  $900\text{ K}$  und einem konstanten Druck von  $1\text{ bar}$  ist in Abbildung 5.2 dargestellt. Der enorme Einfluss der Radikale ist schon bei Zufuhr einer geringen Menge sichtbar, während der Einfluss des Wassers relativ moderat ist. Das bedeutet, dass der Einfluss des Vorheizers schon bei geringer Radikalenemission eine entscheidende Rolle für die Zündung und die Flammenausbreitung in der Brennkammer spielen kann. Man sieht also eindeutig, dass die Bedingungen für die Zündung in der Versuchsbrennkammer auch dann günstiger als im Fall mit reiner Luft sind, wenn im Vorheizer das thermodynamische Gleichgewicht erreicht wird.



**Abbildung 5.1:** Reaktionskinetisches Modell zur Untersuchung des Einflusses von Radikalen und Wasser auf die Zündverzugszeit



**Abbildung 5.2:** Abhängigkeit der Zündverzugszeit von den Radikalen und vom Wasser

## 5.2 Untersuchung der Radikalenquelle

Eine einfache Analyse des Vorheizers zeigte, dass die Aufenthaltszeit des reagierenden Gases im Vorheizers ausreicht, um die Reaktion vor der Lavaldüse abzuschließen, wenn das reagierende Gas als ein per-

fektes Gemisch angenommen wird [SS00]. Das heißt, dass die Konzentration der Zwischenprodukte vor der Lavaldüse dem thermodynamischen Gleichgewicht entspricht. Außerdem ist zu bemerken, dass die Absenkung der statischen Temperatur in der Lavaldüse zur Verschiebung des Gleichgewichts und folglich zur Absenkung der Radikalkonzentration führt. In der Realität liegt jedoch kein perfektes Gasgemisch im Vorheizer vor, d.h. die Mischung findet parallel zur Verbrennung statt. Folglich wird durch die Anwesenheit schlecht gemischter Zonen einerseits die Reaktion verzögert und andererseits die Reaktionszone verlängert und stromabwärts verschoben. Das kann dazu führen, dass die Aufenthaltszeit im Vorheizer für die Mischung und die vollständige Reaktion nicht mehr ausreicht. Falls aber die Reaktion in die Lavaldüse verschoben wird, wird sie durch den Temperaturabfall stark beeinflusst, d.h. die stark temperaturabhängigen Reaktionsraten sinken. Die beschriebenen Vorgänge können zum Auftreten von Radikalen in der Brennkammer beitragen.

Im Hinblick auf die Mischungsvorgänge werden nun drei unterschiedliche Hypothesen betrachtet: ein starker räumlicher Konzentrationsgradient, ein langsamer Reaktionsverlauf in kalten Grenzschichten des Vorheizers und der Lavaldüse (die Wände des Vorheizers und der Lavaldüse besitzen eine Wasserkühlung) und ein inhomogener zeitlicher Konzentrationsverlauf, der oft statistisch mit Hilfe von Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen (PDF) behandelt wird. Da die Geschwindigkeit der Wasserstoffjets sehr hoch im Vergleich zur Strömungsgeschwindigkeit ist und die Grobverteilung des Brennstoffs durch die Ferne des Injektors sichergestellt ist, ist eine starke räumliche Inhomogenität des Gemisches unwahrscheinlich. Eine durch die Abkühlung verlangsamte Reaktion in der Grenzschicht sowie auch ein Konzentrationsgradient müssten zu einer Streifenstruktur der Radikalenverteilung führen, was aber den *OH-LIF* Messungen [LSS02] widerspricht. Grundsätzlich ist es wesentlich schwieriger, eine hohe zeitliche Mischungsqualität bis hinunter zu den kleinsten turbulenten Skalen zu erreichen als ein über den Querschnitt homogenes zeitgemittelttes Brennstoffprofil. Aus diesem Grund und weil lokale zeitliche Ungemischtheiten durch *OH-LIF* Messungen in Überschallströmun-

gen nur schwierig zu erfassen sind, wird davon ausgegangen, dass die am Brennkammereintritt detektierten Radikale durch starke zeitliche Ungemischtheiten verursacht werden.

Da die Komplexität der Vorheizergeometrie eine CFD-Simulation nicht gestattet, wurde ein reaktionskinetisches Modell (Abbildung 5.3) entwickelt, um den Reaktionsverlauf unter dem kontinuierlichen Einfluss von Mischung und Temperaturabfall abzuschätzen und folglich die Hypothese zu bestätigen. Die Hauptidee des Modells ist, eine fettere Verbrennung im Vorheizer zu realisieren und einen Reaktionsverlauf in der Lavaldüse unter der kontinuierlichen Zugabe von Luft zu berechnen. Damit geht man von der Vorstellung aus, dass im Vorheizer Strahlen mit Luftmangel existieren, die bei Zumischung von weiterer Luft im Vorheizer und in der Düse als kontinuierliche Radikalenquelle dienen. Für die Berechnung der Reaktion in der Lavaldüse wurde ein Plug-Flow Reaktor (eigener Code) verwendet. In der Düse sind die Beschleunigung, der Druck und die Temperatur eine Funktion der Machzahl, die vom Düsenquerschnitt abhängig ist. Da bei der Plug-Flow-Simulation normalerweise die Zeitabhängigkeit berechnet wird, wurde die zeitliche Koordinate durch den Geschwindigkeitsverlauf aus der räumlichen  $x$ -Koordinate bestimmt. Die Strömungsparameter wurden während der Berechnung laufend aktualisiert.

Am Vorheizeraustritt wurde die Strömung aufgeteilt: die wasserstoffreiche Strömung repräsentiert die fette Mischung im Nachlauf der Eindüsungsöffnungen und die reine Luft die Strömung, die zwischen den Eindüsungsöffnungen hindurchströmt. In der Zone der wasserstoffreichen Strömung, wo die Reaktion startet, wurde ein Äquivalenzverhältnis von  $\phi = 5$  ausgewählt. Für die Modellierung der fetten Verbrennung wird der *equilibrium reactor* von *CHEMKIN II* verwendet. Der Druck im Reaktor beträgt  $7.5 \text{ bar}$  und die Anfangstemperatur liegt bei  $300 \text{ K}$ . Das Abgas strömt mit einer Temperatur von  $1403 \text{ K}$  in den *plug flow reactor* (eigener Code), wo es sich während der Beschleunigung in der Lavaldüse mit der Luftströmung mischt und weiterreagiert.

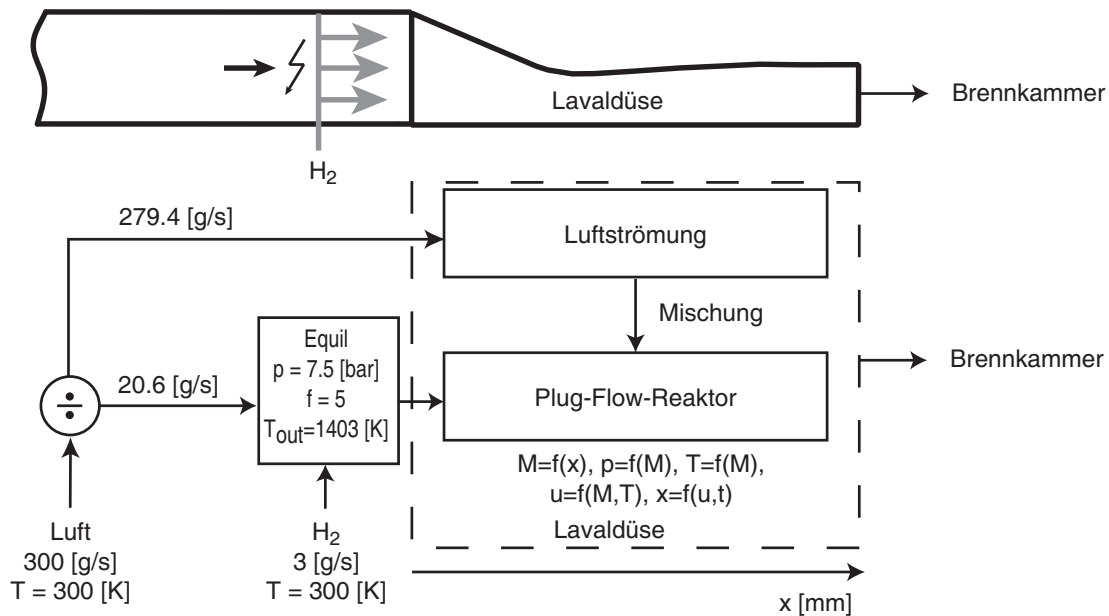


Abbildung 5.3: Reaktionskinetisches Modell des Vorheizers

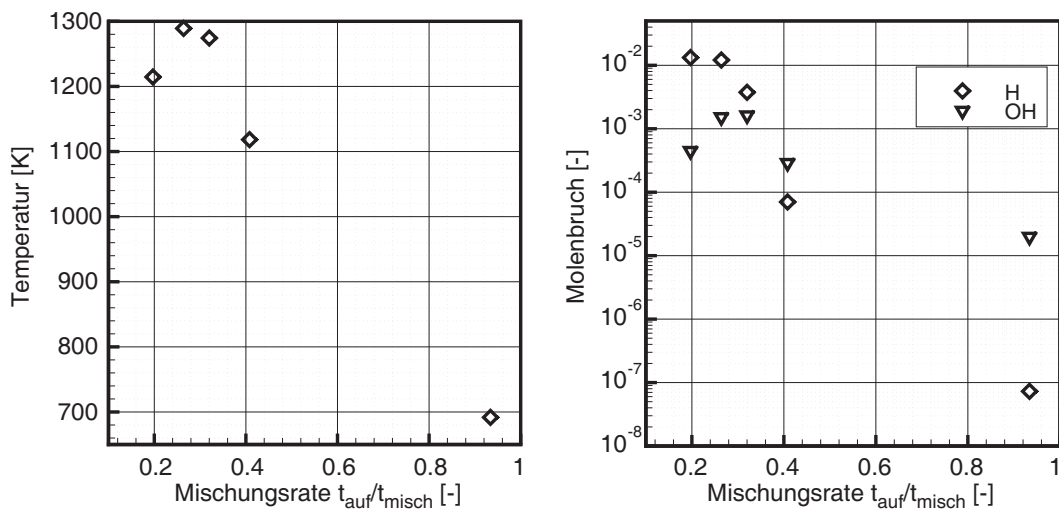


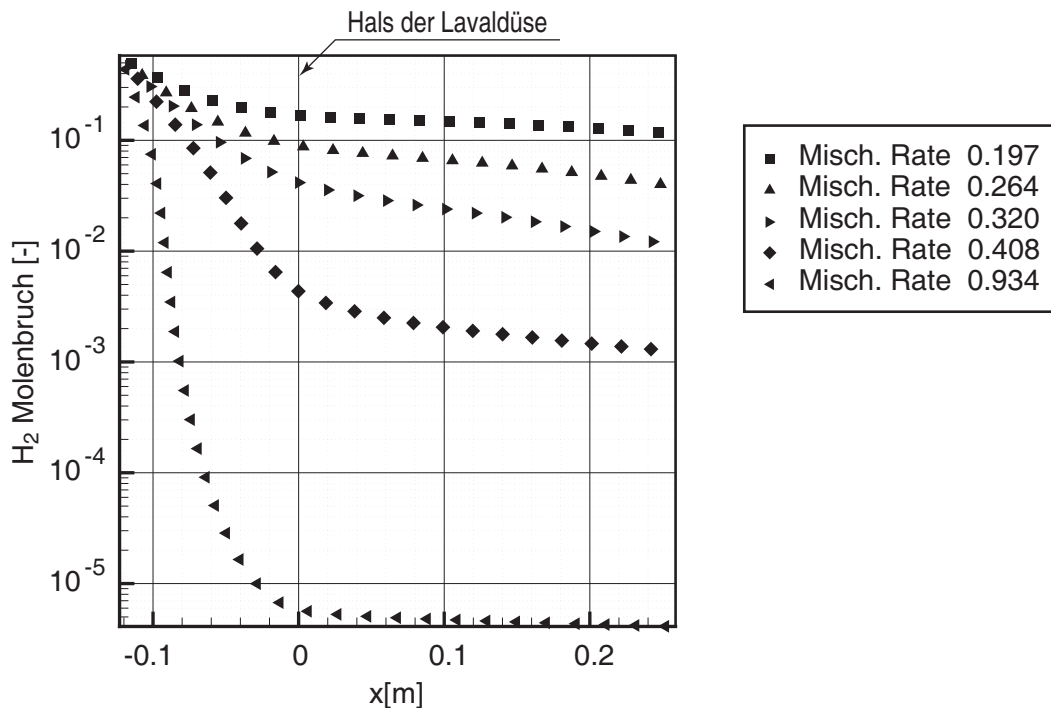
Abbildung 5.4: Temperatur (links),  $H$ - und  $OH$ -Radikale (rechts) am Austritt der Lavaldüse für verschiedene Mischungsraten

Die Simulation zeigte, dass die Strömung das thermodynamische Gleichgewicht während der Mischung und der Beschleunigung rela-

tiv schnell erreicht. Folglich kann die Radikalkonzentration durch die Auswahl des Mischungsszenarios entlang der Lavaldüse gesteuert werden. In den Simulationen wurde eine konstante Mischungsintensität angenommen. Die globale Mischungsrate wurde als das Verhältnis von der Aufenthaltszeit in der Düse  $t_{auf}$  zu der vollständigen Mischungszeit von beiden Strömen  $t_{misch}$  definiert. Bei  $t_{auf} = t_{misch}$  werden die beiden Ströme exakt am Ende der Düse vollständig gemischt. Bei  $t_{auf} < t_{misch}$  ist die Mischung der beiden Ströme am Ende der Düse noch nicht abgeschlossen. Die Aufenthaltszeit des Gases in der Lavaldüse hängt von der Temperatur am Anfang der Düse und von der Oxidation des Wasserstoffs in der Düse ab.

Die für die Reaktion notwendige Zeit steigt, wenn die Mischungsintensität sinkt. Die Simulation wurde für fünf verschiedene Mischungsraten 0.934, 0.408, 0.320, 0.264 und 0.197 durchgeführt. Der Einfluss der globalen Mischungsrate auf die statische Temperatur und auf die Molenbrüche der  $H$ - und  $OH$ -Radikale in der reagierenden Strömung am Austritt der Düse ist in Abbildung 5.4 dargestellt. Den Wasserstoffverbrauch in der Lavaldüse für die verschiedenen Mischungsraten zeigt Abbildung 5.5.

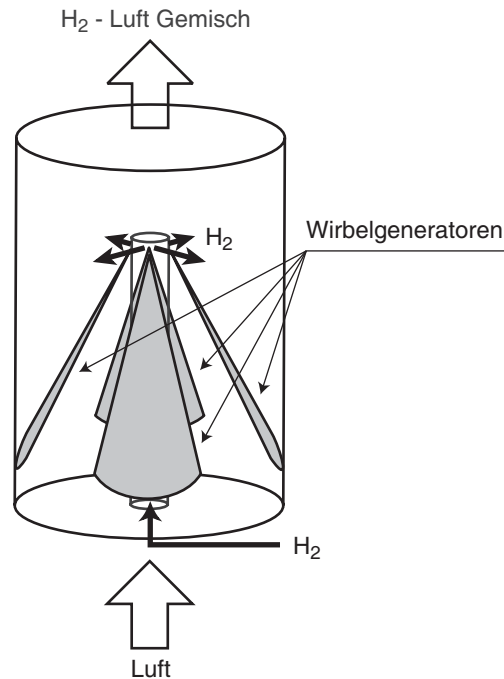
Falls ein vollständiger Ausbrand im Vorheizer bei  $\phi = 0,35$  erreicht wird, erhält man eine Totaltemperatur von 1300 K. Sie entspricht einer statischen Temperatur von 700 K am Austritt der Lavaldüse bei einer Machzahl von 2,1. Interessanterweise entspricht die Temperatur am Austritt der Düse dem Fall des vollständigen Ausbrands, solange die Mischungsrate in der Lavaldüse nahe bei eins liegt. Aus diesem Ergebnis kann man schließen, dass die Aufenthaltszeit in der Düse für eine vollständige Verbrennung des Wasserstoffs ausreichend ist, falls die vollständige Mischung stromaufwärts des Düsenaustritts erfolgt. Die Berechnungen zeigen, dass die Reaktion noch vor dem Düsenhals abgeschlossen ist (Abbildung 5.4 rechts). Die Radikalkonzentration ist in diesem Fall vernachlässigbar, da die statische Temperatur nach dem Hals sehr gering ist. Bei Abnahme der Mischungsrate reagiert die brennstoffreiche Strömung nach dem Düsenhals weiter, da das Oxidationsmittel davor nicht ausgereicht hat. In



**Abbildung 5.5:** Wasserstoffverbrauch in der Lavaldüse

diesem Fall ist eine starke zeitliche Temperaturschwankung am Austritt der Düse zu erwarten, die durch lokale nicht gemischte kalte Zonen (Luftströmung) und heiße Zonen mit Luftmangel entsteht. Folglich steigt die Radikalenemission. Es ist damit zu rechnen, dass die im Vergleich zum thermodynamischen Gleichgewicht höhere Radikalenmenge und die starke Temperaturschwankung die Zündung und den Verbrennungsablauf in der SCRamjet-Brennkammer enorm beeinflusst. Die Studie führt zu dem interessanten Ergebnis, dass bis zum Düsenaustritt lokale Gebiete mit Luftmangel vorliegen müssen, wenn die Radikalenkonzentrationen Werte weit über dem Gleichgewicht erreichen. Weil der Vorheizer mit einem hohen Luftüberschuss betrieben wird ( $\phi = 0.35$ ), ist daraus auf eine sehr schlechte Feinmischung zu schließen, die wahrscheinlich sehr große hochfrequente Temperaturfluktuationen zu Folge hat.

## 5.3 Modifizierung des Vorheizers



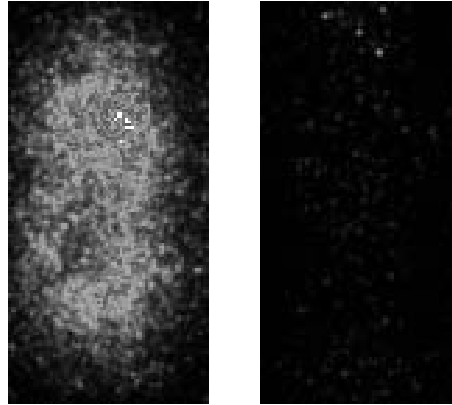
**Abbildung 5.6:** Konstruktion des Vormischers

Die kinetische Studie ergab eindeutige Richtlinien für das Design des Vorheizers. Um dessen Einfluss auf die Verbrennung in der Brennkammer zu minimieren, müssen die Verbrennungszwischenprodukte am Austritt der Düse minimiert werden. Es ist erwünscht, dass die Vermischung noch vor dem Düsenhals abgeschlossen wird. Wie schon gezeigt, hängt der Ausbrand von der Intensität der turbulenten Mischung, bzw. von den zeitlichen Mischungsschwankungen ab. Da eine wesentliche Verbesserung der Vermischung für die nicht vorgemischte Flamme ohne eine komplette Änderung der Vorheizergeometrie nur schwer zu erreichen ist, ist die Alternative, die Mischung und die Reaktion räumlich zu entkoppeln, vorzuziehen. Der Ausbrand kann deutlich verbessert werden, wenn eine vorgemischte Verbrennung an die Stelle der Diffusionsflamme tritt. Um das zu realisieren, werden ca. 50% des für die Vorheizung notwendigen Wasserstoffmassenstroms stromaufwärts des Vorheizers eingedüst und mit Hilfe eines



Wirbelgenerators (Abbildung 5.6) mit der Luft vermischt. Vier trianguläre Platten generieren vier gegeneinander rotierende Wirbelpaare. Dies gestattet den Brennstofftransport auf großen Längenskalen und führt zu einer perfekten Vermischung innerhalb einiger hydraulischer Durchmesser. Der Brennstoff wird an den Plattenenden in die Luftströmung eingedüst. Der Vorheizer kann nun in zwei Modi betrieben werden. Im Folgenden wird das Regime ohne Vormischung als Modus 1 und das Regime mit Voreindüsung als Modus 2 oder als der radikalfreie Modus bezeichnet.

Die Effizienz des Vormischers wurde von Sander [San03] durch *OH-LIF* Messungen im Austritt der Lavaldüse experimentell bewiesen. Die Aufnahmen für eine Totaltemperatur von  $1300\text{ K}$  sind in Abbildung 5.7 dargestellt. Man sieht ein deutliches *OH*-Fluoreszenzsignal in Modus 1, während in Modus 2 kein Signal detektiert werden konnte. Dies bedeutet, dass die Radikalenemission durch die Vormischung verringert wurde und unter der Detektionsgrenze des optischen Messsystems liegt. Wie sowohl aus der Recherche von Pellett [PBC02] bekannt ist, als auch in der Untersuchungen von Sander [San03] gezeigt wurde, spielt die Gaszusammensetzung am Brennkammereintritt bei Brennkammern mit einer verlustarmen Flammenstabilisierung eine entscheidende Rolle und kann zur Verfälschung der Ergebnisse führen. Nur für Brennkammerdesign mit hohen Totaldruckverlusten ist der Effekt der Testluftverunreinigung vernachlässigbar. Die durchgeführte Studie mit nachfolgender Modifizierung des Vorheizers erlaubt die Durchführung sinnvoller Experimente mit Luftvorheizung durch Verbrennung auch im Fall der technologisch besonders interessanten, verlustarmen Flammenstabilisierung. Dabei darf aber nicht vergessen werden, dass auch im Fall der perfekten Verbrennung im Vorheizer, die Zündung fördernde Radikale nicht zu vermeiden sind. Daher ist für extreme Fälle eine Überprüfung mit einer radikalfreien Vorheizungsmethode nötig.



**Abbildung 5.7:** *OH-LIF* Signal am Austritt der Lavaldüse: links - Mode 1 ohne Vormischung, rechts - Mode 2 mit Vormischung [San03]

## 5.4 Schlussfolgerungen

- Die Reaktorstudie zeigt, dass vorgemischtes Gas wesentlich schneller unter Anwesenheit von Radikalen reagiert.
- Der hohe Wasseranteil in der vorgeheizten Luft hat einen Inhibitionseffekt auf die Zündung, der aber viel schwächer ist als die Beschleunigung der Zündung durch Radikale.
- Eine unvollständige Verbrennung im Vorheizer verursacht zeitliche Temperaturschwankungen, die einen starken Einfluss auf die Reaktion in der Brennkammer haben.
- Die Untersuchung von verlustarm stabilisierten Überschallflammen erfordert ein spezielles Design des Vorheizers. Ein vollständiger Ausbrand muss vor dem Austritt aus der Lavaldüse erreicht werden.
- Die durch den Vorheizer emittierten Radikale können durch eine pilotierte teilvorgemischte Flamme effizient vermieden werden.

- Da die Reaktion im Vorheizer mischungskontrolliert ist, kann der Ausbrand nur durch eine Verbesserung der Mischung forciert werden. Dies kann eher durch eine Voreindüsung von Brennstoff in die Testluft stromaufwärts des Vorheizers als durch eine Vergrößerung der Aufenthaltszeit im Vorheizer erreicht werden.
- Eine effektive Vermischung erfordert eine Sekundärströmung in der Luftversorgungsleitung und eine in Bezug auf Position und Richtung günstige Eindüsung des Brennstoffs.
- Da das Design eines geeigneten Vorheizers mit Vorverbrennung einfach möglich ist, bietet diese Lösung eine kostengünstige Alternative zu elektrischen Vorheizern.

## 6 Strebenförmige Injektoren

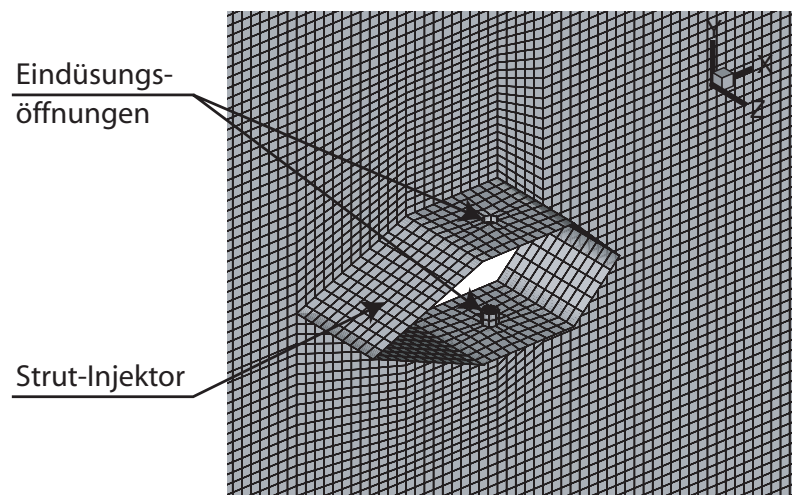
Das Hauptproblem bei der Entwicklung von SCRamjet-Triebwerken liegt in der Vermischung des Treibstoffs mit der durchströmenden Luft und in der Realisierung der Zündung und der Flammenstabilisierung, wobei die Verluste minimal bleiben müssen. Während der langen Forschung auf dem Gebiet der SCRamjet-Technologie wurden verschiedene Eindüsungsmöglichkeiten und Flammenstabilisierungskonzepte getestet, wie die Wandeindüsung, die Rampeneindüsung, sowie die Verwendung von Wandvertiefungen und Wandstufen für die Erzeugung von Rezirkulationszonen mit guten Zündbedingungen. In jüngerer Zeit richtete sich das Interesse vornehmlich auf Eindüsung- und Flammenstabilisierungskonzepte mit strebenförmigen Injektoren für die Eindüsung des Treibstoffs. Der Vorteil derartiger Injektoren liegt darin, dass sie den Treibstoff in die Mitte der Strömung bringen und folglich die Reaktion und die Wärmefreisetzung nur dort stattfinden kann. Dies löst das Problem der extremen Wärmebelastung der Wände, die im Fall der Wandeindüsung auftritt. In der dritten Forschungsphase des Sonderforschungsbereichs 255 wurden von Grünig [Grü99] verschiedene Injektorgeometrien untersucht und deren Eignung zur Flammenstabilisierung durch die Analyse der Reaktionsintensität quantifiziert. Die stärkste Reaktion wurde bei der Verwendung des Pylon-Injektors mit einer Rampenstruktur an den Flanken, der in Abschnitt 4.3 beschrieben wurde, beobachtet. Ein Ziel der vorliegenden Arbeit war die detaillierte Untersuchung von Strömungs- und Reaktionsvorgängen in der Brennkammer bei Einsatz von strebenförmigen Injektoren im Zusammenhang mit durch Testluftverunreinigungen verursachten Effekten. In diesem Abschnitt werden das Betriebsverhalten des strebenförmigen Injektors mit Hilfe numerischer Simulation untersucht und ein Vergleich mit den experimentellen Ergebnissen von Sander [San03] angestellt. Die numerischen und experimentellen Untersuchungen wurden sowohl für heiße ( $T_0 = 1300\text{ K}$   $p_0 = 7.5\text{ bar}$ ) als auch für kalte ( $T_0 = 300\text{ K}$   $p_0 = 7.5\text{ bar}$ ) Eintrittsbedingungen durchgeführt. Bei der Simulation der heißen Strömung wurde eine ideale Luftzusam-

mensetzung angenommen, da die komplizierte Reaktions-Mischungs-Wechselwirkung, die in Abschnitt 5 beschrieben wurde, mit den derzeit existierenden Modellen nicht zu erfassen ist. Die aus der numerischen Simulation gewonnenen Ergebnisse für die radikalfreie Testluft (Stoßsystem, Temperatur- und Geschwindigkeitsfeld, räumliche Verteilung des Treibstoffs und der Reaktionsverlauf) und deren experimentelle Validierung ermöglichen, insbesondere Aussagen darüber zu machen, ob und in welcher Weise die Zusammensetzung der in den Experimenten [San03] mittels Vorverbrennung aufgeheizten Luft, die Ergebnisse beeinflusst.

## 6.1 Rechengitter

Bei der Simulation von Überschallströmungen ist eine sehr feine räumliche Auflösung des Rechenvolumens erforderlich, um das induzierte Stoßsystem und die Stoß-Grenzschicht-Wechselwirkung berechnen zu können. Bei der Vernetzung von komplizierten Geometrien, die einen kontinuierlichen Übergang von extrem feinem Gitter auf ein relativ grobes Gitter erfordert (z.B. die Kopplung der Gitter in der Nähe der Eindüsenöffnungen) kann man durch die Verwendung von unstrukturierten, gemischten (tetrahedral-hexahedral) Netzen den Zeitaufwand für die Generierung des Rechnetzes stark reduzieren. Die Testsimulationen mit solchen Gittern zeigen aber eine sehr schlechte Konvergenz im Vergleich zu den strukturierten hexahedralen Netzen. Ein Grund dafür ist eine wesentlich ungenauere Diskretisierung der Erhaltungsgleichungen. Zusätzlich ist eine visuelle Kontrolle der Gitterdeformationen und eine entsprechende Korrektur des Netztes bei der Erzeugung dreidimensionaler, unstrukturierter Rechengitter schwierig, was zum Auftreten von stark verformten und asymmetrischen Rechenzellen führen kann. Aus diesem Grund wurden für die numerischen Arbeiten (Abschnitte 6 und 7) ausschließlich strukturierte hexahedrale Rechnetze verwendet. Die adaptive Gitterverfeinerung wurde angewandt, um die räumliche Auflösung in kritischen Strömungsbereichen, wie z.B. bei Stößen und Grenzschicht-

ablösungen, ohne einen enormen Anstieg der Rechenzellenanzahl zu erhöhen. Für das Studium der Strömungs- und Reaktionsphänomene in der Brennkammer wurden sowohl dreidimensionale als auch zweidimensionale Simulationen durchgeführt. Die Gitterstruktur für die dreidimensionale Simulation ist in Abbildung 6.1 dargestellt. Bei der zweidimensionalen Simulation, die für die Untersuchung der Luftströmung ohne Brennstoffeindüsung dient, wurde die gleiche Gitterstruktur unter Vernachlässigung der dritten Dimension  $Z$  verwendet. In einigen Testberechnungen wurde die Zellengröße variiert, wobei aber die Struktur des Gitters gleich blieb.



**Abbildung 6.1:** Gitterstruktur bei der Vernetzung der Rechengeometrie

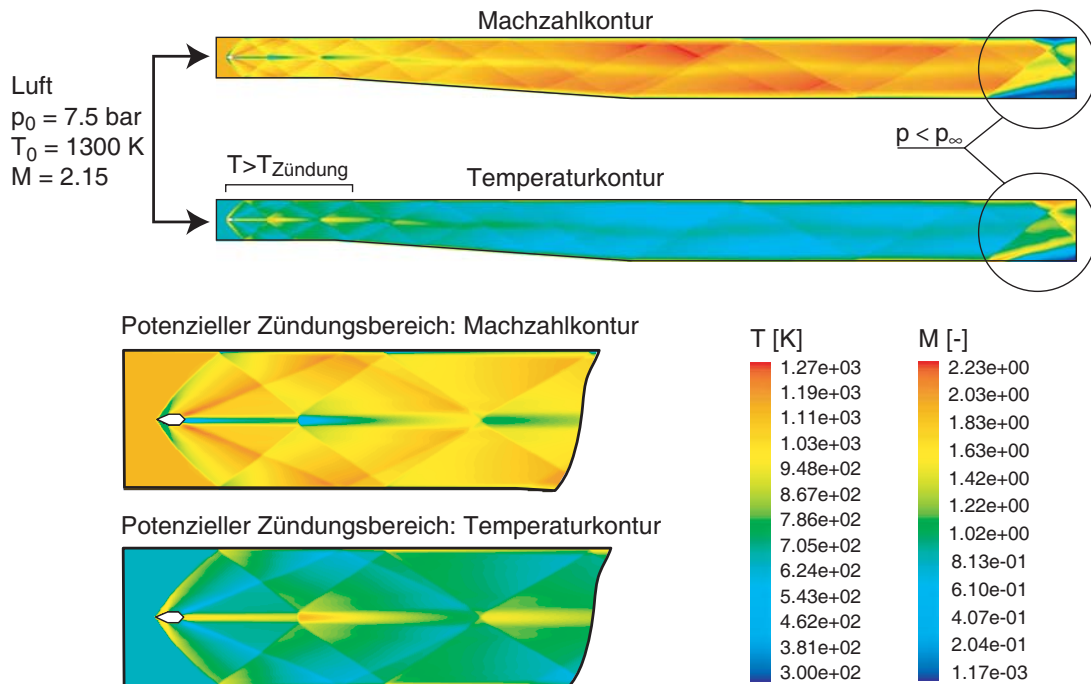
## 6.2 Stoßsystem

Die zweidimensionale Simulation der Strömung in der Brennkammer wurde bei den Betriebsbedingungen  $p_0 = 7.5 \text{ bar}$ ,  $T_0 = 1300 \text{ K}$ ,  $M = 2.15$  und einem Blockprofil für die Geschwindigkeit am Eintritt durchgeführt, um das von dem Injektor erzeugte Stoßsystem und die Verteilung der statischen Temperatur zu analysieren. Die mittlere Zellengröße des Anfangsgitters beträgt  $1 \text{ mm}$ . Das Rechengit-

ter wurde an den Stoßpositionen während der Berechnung verfeinert. Die Verteilung der Temperatur und der Machzahl ist in Abbildung 6.2 dargestellt. Die Analyse des Temperaturfeldes zeigt, dass die für die Selbstzündung des Wasserstoffs notwendige Temperatur ( $T_{\text{Zündung}} > 860 \text{ K}$ ) nur im Injektorbereich erreicht wird, da nach der Brennkammerexpansion, die 65 mm nach dem Injektor stattfindet, die statische Temperatur unter die Zündgrenze sinkt. Das Maximum des Temperaturfeldes liegt in der Mitte der Brennkammer im Nachlauf des Injektors und in den Kreuzungspunkten der reflektierten Stöße. Dabei spielt der Verlust der kinetischen Energie im Nachlauf des Injektors die dominierende Rolle, wobei der Einfluss des Stoßsystems von zusätzlicher Bedeutung ist. Die gleiche Temperaturverteilung wurde experimentell von Sander [San03] mit Hilfe der Raman-Spektroskopie gemessen. Offensichtlich kann die Zündung des Wasserstoffs nur im Nachlauf des Injektors stattfinden. Die Strömungsablösung am Austritt der Brennkammer wird durch den geringen statischen Druck und durch den folglich überexpandierten Charakter der Strömung verursacht.

### 6.3 Zündungszonen

Wie schon bei der Untersuchung des Stoßsystems gezeigt wurde, liegt die Temperatur im Nachlauf des Injektors über der Zündungsgrenze des Wasserstoffs. Die hohe statische Temperatur ist eine notwendige aber nicht ausreichende Voraussetzung für die Zündung. Für den Reaktionsbeginn ist zusätzlich die Vermischung von Brennstoff und Oxidator erforderlich, was aber im untersuchten Fall nicht gegeben ist. Die Eindüsung des Wasserstoffs ist nur wenige Millimeter stromaufwärts von der potenziellen Zündungszone entfernt und findet senkrecht zur Strömung statt. Das bedeutet, dass die Mischungszeit extrem gering ist, da die Strömungsgeschwindigkeit der Luft ca. 1000 m/s beträgt. Zusätzlich wird der Wasserstoff wegen der kritischen Durchströmung der Injektionsöffnung bei etwa 240 K eingedüst, was zu einer Senkung der Gemischtemperatur führt.



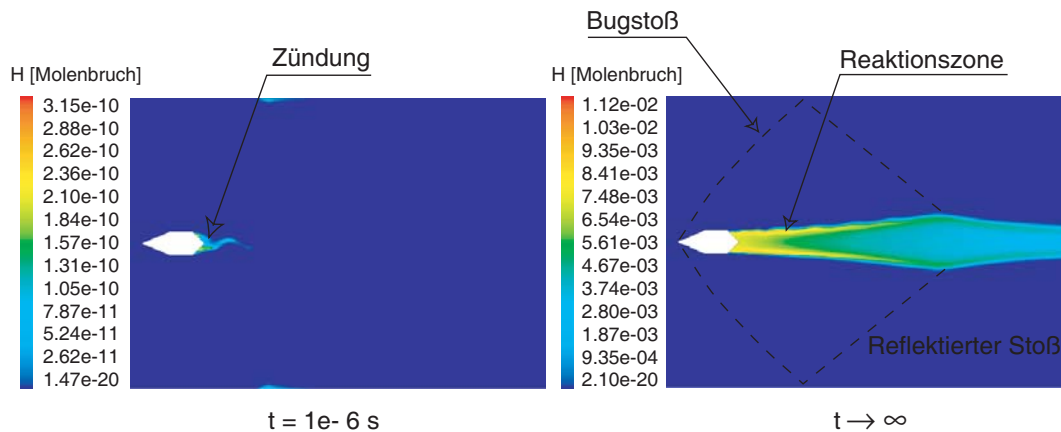
**Abbildung 6.2:** Zweidimensionale Strömungssimulation in der Brennkammer

Die komplizierte Wechselwirkung der beschriebenen Vorgänge verhindert bei einer vollständigen Simulation die Abschätzung der Einzeleinflüsse. Aus diesem Grund wurde zunächst eine Simulation durchgeführt, bei der der Brennkammer ein Wasserstoff-Luft-Gemisch zugeführt wurde. Dies ermöglicht, den Effekt der Mischung mit der extrem niedrigen Brennstofftemperatur vom reinen Zündvorgang abzukoppeln und die Zündzone in Bezug auf die Aufenthaltszeit zu untersuchen. Da das Rechenvolumen relativ klein ist, kann die zweidimensionale Rechnung mit dem elementarkinetischen Verbrennungsmodell mit hoher Ortsauflösung mit moderatem Aufwand durchgeführt werden. Die mittlere Zellengröße beträgt  $0.1 \text{ mm}$ .

Das Beispiel mit einem Äquivalenzverhältnis  $\phi = 1$ , einer Totaltemperatur  $T_0 = 1300 \text{ K}$  und einem Totaldruck  $p_0 = 7.5 \text{ bar}$  zeigt, dass die Zündung des Brennstoffs erwartungsgemäß im heißen Nachlauf des Injektors erfolgt, und dass sich die Flamme aufgrund des fehlen-



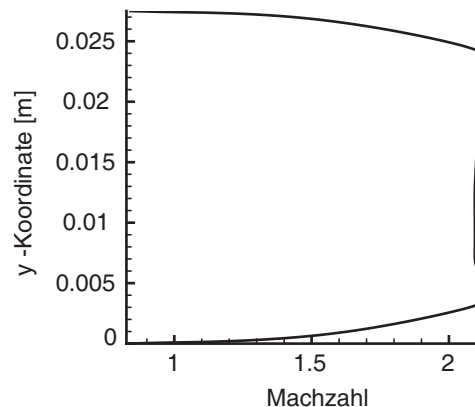
den Quertransports durch Sekundärwirbel zunächst kaum ausbreiten kann. Nach der Interaktion mit den an der Wand reflektierten Stößen wird die Reaktionszone sogar kontrahiert. Die instationäre Simulation wurde mit einem nicht-reagierenden Zustand als Anfangsbedingung gestartet. In Abbildung 6.3 sind links die Zündungszone hinter dem Injektor am Anfang der Rechnung und rechts die sich davon ausbreitende Reaktion zu erkennen. Im untersuchten Fall erfolgt die Zündung ausschließlich durch den starken Totaldruckverlust im Injektornachlauf, während das vom Injektor produzierte Stoßmuster von völlig untergeordneter Bedeutung ist. Dies steht in völligem Gegensatz zur bisherigen Vorstellung von der stoß-induzierten Zündung.



**Abbildung 6.3:** Zündung im Nachlauf des Injektors (links) und Reaktionszone (rechts)

## 6.4 Grenzschichteffekte bei der Injektorumströmung

Die beschriebenen Untersuchungen der Strömung in der Brennkammer und der Zündzone im Nachlauf des Injektors wurden unter der Annahme idealer Eintrittsbedingungen durchgeführt. In Realität bildet sich in der Lavaldüse eine Grenzschicht aus, die die reale Machzahl am Austritt der Düse verringert, was zu



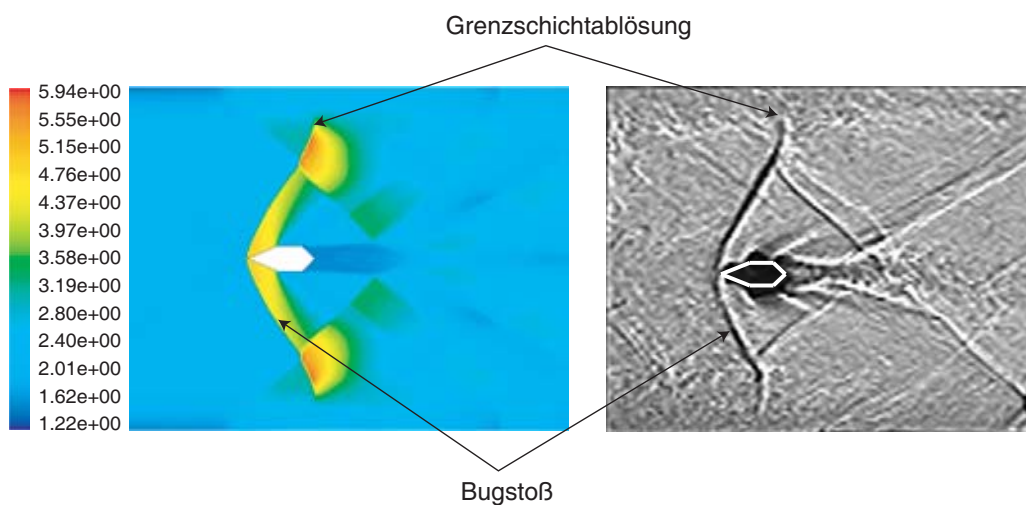
**Abbildung 6.4:** Machzahlprofil am Austritt der Lavaldüse

einem steilen und stärkeren Bugstoß führt. Zusätzlich spielt die Grenzschicht eine wichtige Rolle bei der Stoßreflektion an der Wand, da ein über den Stoß entstehender Druckgradient zur Ablösung der Grenzschicht führen kann, was folglich die Position des reflektierten Stoßes verschiebt [Abr58]. Die bisher beschriebene Untersuchung der Zündzone im Nachlauf des Injektors mit vorgemischten Gasen wurde unter idealen Eintrittsbedingungen durchgeführt, um die Zündung des Gemisches durch die Ablösung der Grenzschicht zu vermeiden. Für die weitere Untersuchung der Mischung und Verbrennung soll die Grenzschicht nicht mehr vernachlässigt werden, da sowohl die Zündzone im Injektornachlauf als auch die Mischung des eingedüsten Treibstoffs dadurch verändert werden können. Zusätzlich kann man die Simulationsergebnisse nur bei Berücksichtigung der Grenzschichteffekte mit experimentellen Ergebnissen vergleichen.

Da das wahre Eintrittsprofil experimentell nicht zu bestimmen war, wurde eine zweidimensionale Simulation der Strömung in der Lavaldüse durchgeführt, um realistische Eintrittsbedingungen zu erreichen. Das Machzahlprofil am Austritt der Lavaldüse, das für kalte Bedingungen ( $T_0 = 300\text{ K}$ ,  $p_0 = 7.5\text{ bar}$ ) berechnet wurde, ist in Abbildung 6.4 dargestellt. Die Grenzschicht verringert durch

die Veränderung der effektiven durchströmten Fläche die Ausströmmachzahl. Das Profil erreicht ein Maximum von 2.1 in der Mitte der Strömung, was auch von Sander [San03] experimentell nachgewiesen wurde.

Um die Stoß-Grenzschicht-Wechselwirkung simulieren zu können, muss ein extrem feines Gitter verwendet werden. Aus diesem Grund wurde eine räumliche Diskretisierung von  $0.1\text{ mm}$  gewählt. Die Ergebnisse der mit dem Eintrittsprofil durchgeführten Simulation (kalte Bedingungen:  $p_0 = 7.5\text{ bar}$ ,  $T_0 = 300\text{ K}$ ) zeigen einen deutlichen Unterschied zu den Simulationsergebnissen mit einem konstanten Eintrittsprofil. Der Vergleich des gerechneten Dichtefelds um den Injektor mit der entsprechenden Schattenaufnahme [San03] ist in Abbildung 6.5 dargestellt und liefert eine sehr gute Übereinstimmung was die Lage der Stöße und deren Reflexionen betrifft.

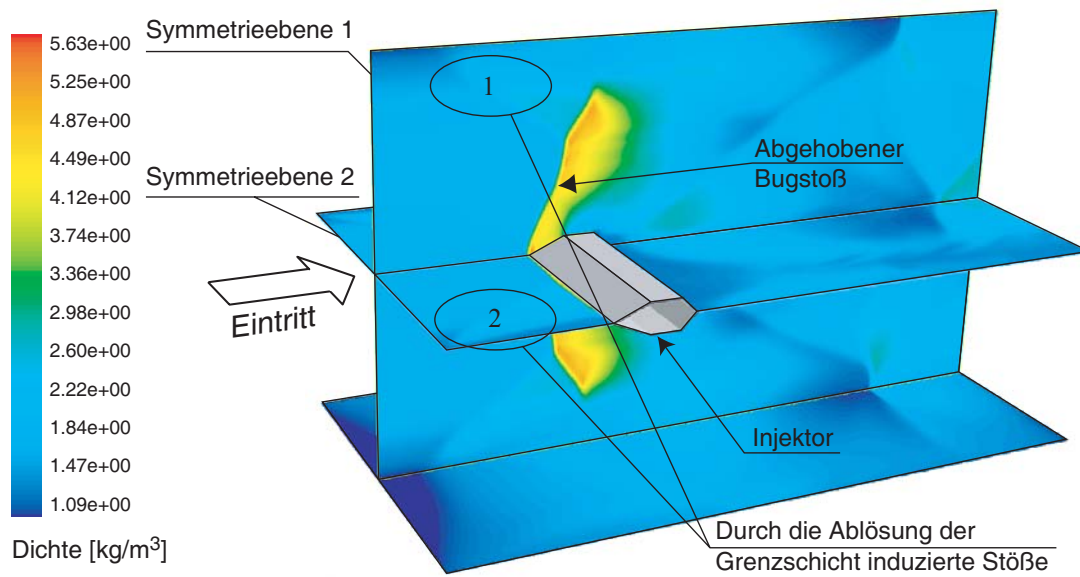


**Abbildung 6.5:** Untersuchung der Injektorumströmung, links Darstellung des gerechneten Dichtefeldes, rechts Schattenaufnahme

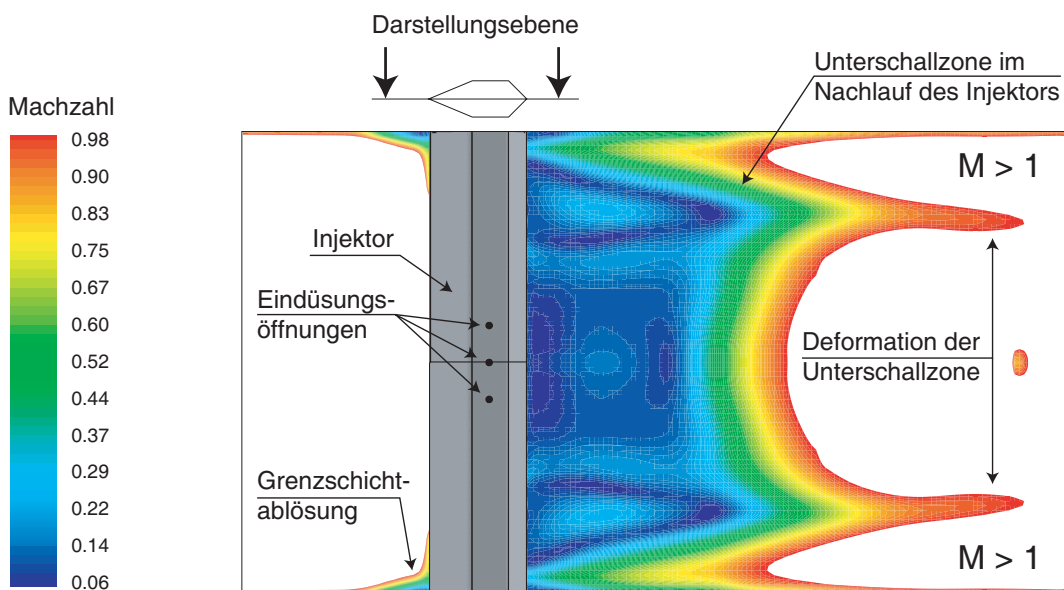
Eine geringere Machzahl und die Existenz der Grenzschicht führen dazu, dass der Bugstoß vor dem Injektor mit einem wesentlich steileren Winkel auftritt und eine starke Ablösung der Grenzschicht ver-

ursacht. Die Grenzschichtablösung, die sich wie ein fester Körper auswirkt, induziert Stöße stromaufwärts vom Injektor. Die Folge davon ist eine wesentliche Erhöhung der statischen Temperatur und der Turbulenzproduktion, was einerseits die Bedingungen für die Mischung und die Selbstzündung des Wasserstoffs verbessert aber andererseits zum Anstieg der Totaldruckverluste führt. Ein weiterer Effekt der stromaufwärts verlagerten Stoßreflexion ist, dass der Kreuzungspunkt der reflektierten Bugstöße im Totwassergebiet des Injektors liegt. Der höhere Druck nach dem Kreuzungspunkt breitet sich durch das Unterschallgebiet des Totwassers stromaufwärts aus und verbreitert die Unterschallzone nach dem Injektor. Dies bedeutet, dass die potenzielle Zündzone mit hoher statischer Temperatur größer wird. Daraus folgt, dass bei dieser Injektorgeometrie die Grenzschicht die Bedingungen für Zündung und Flammenstabilisierung wesentlich verändert und nicht vernachlässigt werden darf. Die gute Übereinstimmung der numerischen Simulation mit der Schattenaufnahme beweist, dass der verwendete CFD-Code die komplizierte Stoß-Grenzschicht-Wechselwirkung mit einer hohen Genauigkeit berechnen kann und folglich für die numerischen Arbeiten einsetzbar ist.

Wie die zweidimensionale Simulation zeigt, existiert eine starke Wechselwirkung zwischen dem Bugstoß und der Grenzschicht, die das Stoßsystem und die Mischung bzw. die Zündbedingungen beeinflusst. Eine ähnliche Grenzschichtablösung tritt auch am Übergang vom Injektor zu den Seitenwänden auf, die Stöße senkrecht zur zweidimensionalen Simulationsebene induziert. Dieser Effekt wurde mit Hilfe einer dreidimensionalen Simulation untersucht. Diese wurde in kalter Strömung unter Verwendung eines in der Lavaldüse berechneten 3D-Eintrittsprofils ( $p_0 = 7.5 \text{ bar}$ ,  $T_0 = 300 \text{ K}$ ) durchgeführt. Bei der Vernetzung der Rechengometrie wurden zwei Symmetrieebenen verwendet, so dass nur 1/4 der Brennkammer berechnet werden musste (Abbildung 6.6). Die mittlere Zellengröße beträgt  $0.25 \text{ mm}$ . Das Dichtefeld in beiden Symmetrieebenen und an der unteren Wand ist in Abbildung 6.6 dargestellt. Man erkennt einen starken Dichtegradienten durch den Bugstoß und die dadurch abgelöste Grenzschicht



**Abbildung 6.6:** Dreidimensionale Simulation des Dichtefelds bei der Injektorumströmung

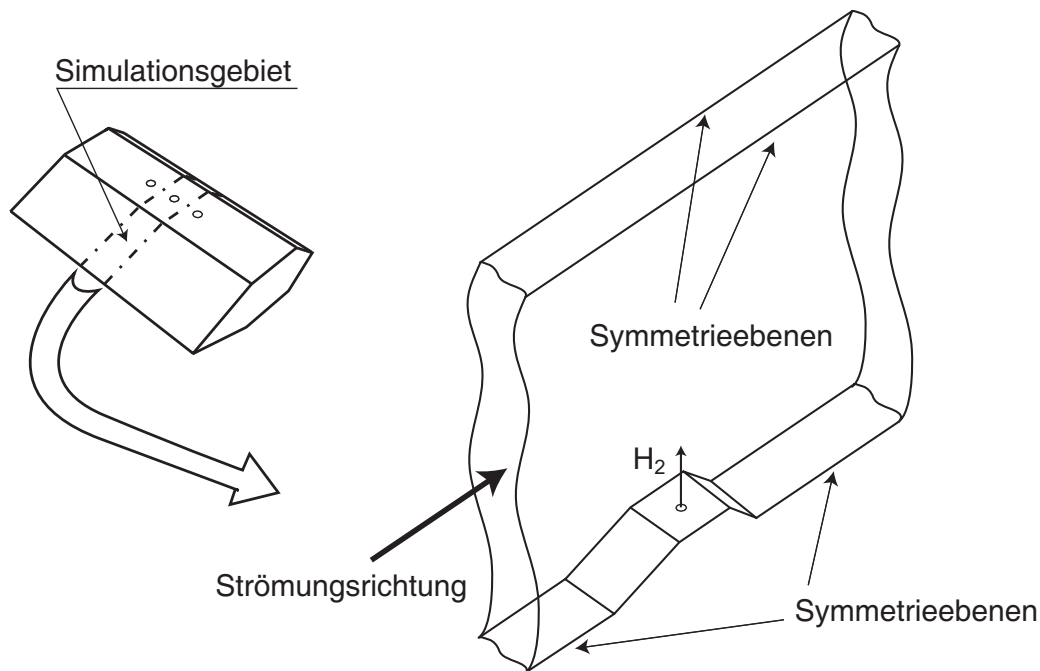


**Abbildung 6.7:** Unterschallzone in der Symmetrieebene 2 (s. Abbildung 6.6)

(Position 1). Die Ablösungen der Grenzschicht an den Seitenwänden im Bereich des Injektors (Position 2) sind deutlich schwächer und ihre Bedeutung für die Zündung ist gering. Da die potenzielle Zündzone im Unterschallbereich hinter dem Injektor liegt, kann sich der Einfluss der Grenzschichtablösung an den Injektorfüßen durch die Veränderung dieses Bereiches auswirken. Der Unterschallnachlauf des Injektors ist in Abbildung 6.7 dargestellt. Man sieht eine symmetrische Deformation der Unterschallzone, die eindeutig durch die Ablösung an den Seitenwänden verursacht wird. Die zwei schmalen Unterschallzonen an den Seitenwänden dürften aber keinen Einfluss auf die Zündung haben: sie sind klein und liegen außerhalb des Eindüsbereichs. Da das Strömungsfeld stromabwärts der Eindüsbereiche relativ homogen ist, ist es zulässig, das Rechengbiet für die Simulation der Eindüsung und der Verbrennung auf ein Segment mit seitlichen Symmetrieebenen (Abbildung 6.8) zu begrenzen. Dadurch wird der Aufwand reduziert, so dass die Simulation der Eindüsung und der chemischen Kinetik unter Berücksichtigung der Reaktionszwischenprodukte möglich wird.

## 6.5 Mischung und Zündung

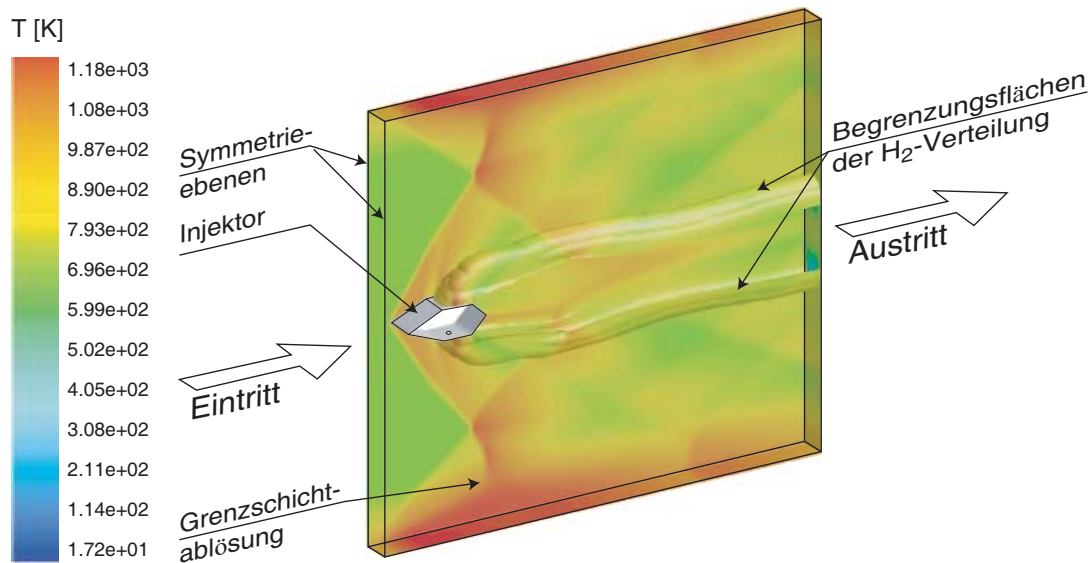
Die Simulation der Wasserstoffeindüsung wurde für die heiße Strömung durchgeführt. Nach dem gleichen Verfahren wie bei der Berechnung der kalten Strömung wurden die Profile in der Lavaldüse berechnet und als Eintrittsbedingungen für das Brennkammersegment eingesetzt. Die Totaltemperatur und der Totaldruck des Luftstroms betragen  $1300\text{ K}$  bzw.  $7.5\text{ bar}$ . Der Wasserstoff wurde kritisch ( $M_{H_2} = 1$ ) mit  $p_{0\text{ H}_2} = 24\text{ bar}$  und  $T_{0\text{ H}_2} = 300\text{ K}$  eingedüst. Die Machzahl erreicht ein Maximum von 2.1 in der Mitte des Strömungskanals. Das Rechengitter entspricht der in Abschnitt 6.1 vorgestellten Struktur mit einer mittleren Zellengröße von  $0.2\text{ mm}$ . Das Simulationsergebnis ist in Abbildung 6.9 zu sehen. Dabei ist die Temperaturkontur in der Symmetrieebene und in den Begrenzungsflächen der Wasserstoffverteilung dargestellt. Nur zwischen den Begrenzungsflächen ist



**Abbildung 6.8:** Simulationsgebiet

Brennstoff zu finden. Weil die Eindringtiefe der sehr dünnen Strahlen marginal ist und keine nennenswerten Sekundärströmungen erzeugt werden, ist die laterale Mischung erwartungsgemäß sehr schwach. Das bedeutet, dass der Wasserstoff sich in der Unterschallzone im Nachlauf des Injektors befindet, wo günstige Bedingungen für die Zündung auftreten.

Die Simulation der Verbrennung unter Verwendung des *Finite-Rate* Modells mit dem Reaktionsschema von Warnatz zeigt keine Zündung des Brennstoffs. Radikale werden zwar in der potenziellen Zündzone gebildet, die für die Zündung notwendige Radikalkonzentration wird aber nicht erreicht. Die höchste Konzentration wird in der Symmetrieebene zwischen den Eindüsuingsöffnungen produziert (Abbildung 6.10). Der Grund dafür ist, dass die statische Temperatur im Nachlauf des Injektors durch die Mischung mit dem kalten Brennstoff unter das Zündungslimit sinkt. Die einzigen Zonen mit hoher Temperatur befinden sich in den Symmetrieebenen an der Grenze

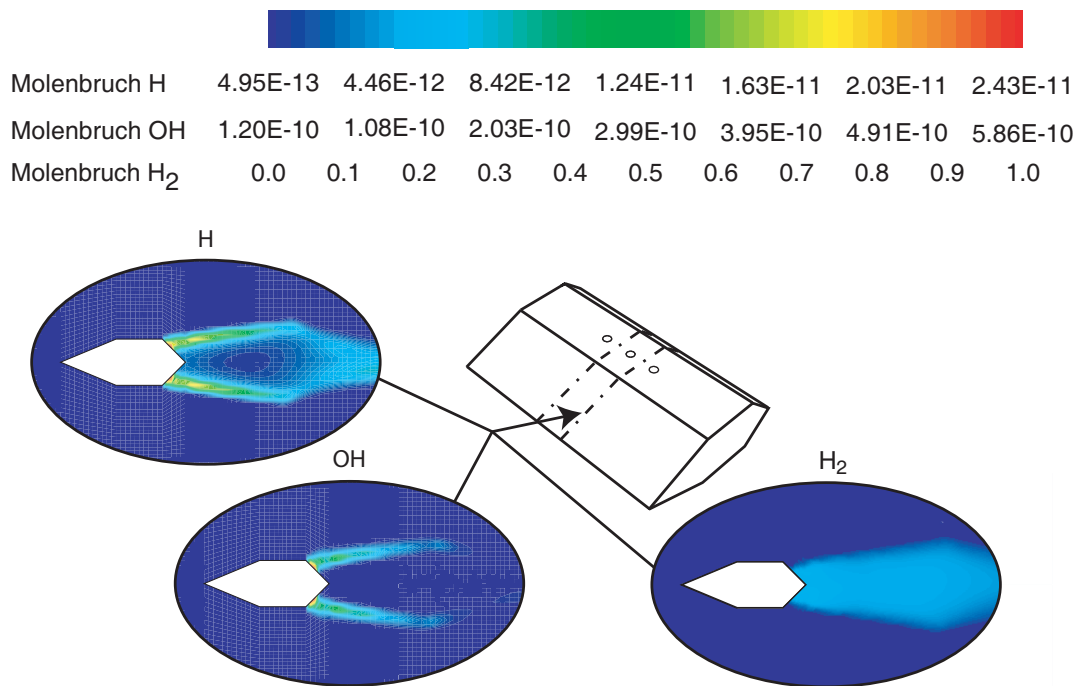


**Abbildung 6.9:** Temperaturkontur und Verteilung des eingedüsten Wasserstoffs. Luft:  $T_0 = 1300 \text{ K}$ ,  $p_0 = 7.5 \text{ bar}$ ,  $M = 2.1$ . Wasserstoff:  $T_{0 \text{ H}_2} = 300 \text{ K}$ ,  $p_{0 \text{ H}_2} = 24 \text{ bar}$ ,  $M_{\text{H}_2} = 1$

zum Wasserstoff, wo auch die maximalen Werte der Radikalkonzentrationen erreicht werden (Abbildung 6.10). Die Aufenthaltszeit des Brennstoff-Luft-Gemisches in diesen Zonen ist sehr gering und reicht nicht für die Bildung des notwendigen Radikalenpools aus. Experimentelle Untersuchungen der Zündung von Sander bestätigen dieses Ergebnis. Eine stabile Zündung wurde bei den numerisch untersuchten Eintrittsbedingungen nur beim Betrieb des Vorheizers in Modus 1 beobachtet. Offensichtlich wurde die Zündung durch die in der Testluft auftretenden Radikale initiiert. Im radikalfreien Modus 2 fand keine Zündung statt.

Die experimentelle Parameterstudie der Zündung und der Flammenstabilisierung am Keil-Injektor, die in beiden Vorheizermodi durchgeführt wurde, zeigte eine starke Sensitivität der Zündung in Abhängigkeit vom Wasserstoffmassenstrom (Eindüsungsdruck) und von der Totaltemperatur des Luftstroms. Die Strömung wurde dabei



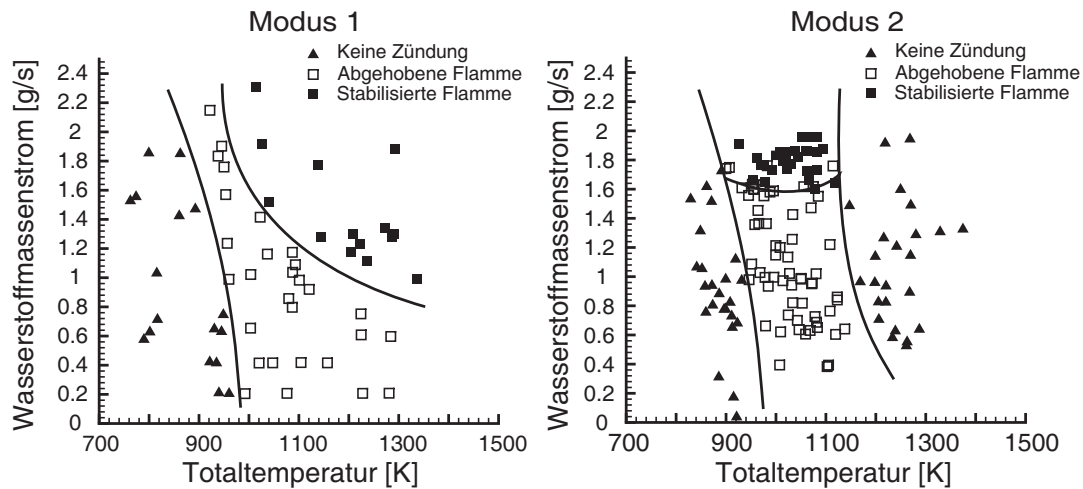


**Abbildung 6.10:** Radikalenproduktion in der Symmetrieebene zwischen Eindüsungsöffnungen: Molenbruchkonturen der  $H$ -,  $OH$ -Radikale und des Wasserstoffs

mit der Eigenfluoreszenztechnik untersucht. Drei Erscheinungsformen der Strömung lassen sich unterscheiden:

- *Keine Zündung:* In der Brennkammer wird keine Fluoreszenz beobachtet.
- *Abgehobene Flamme:* Die Flamme beginnt in einem gewissen Abstand stromabwärts von Injektor, der mit einer Erhöhung von Temperatur und Treibstoffmassenstrom abnimmt.
- *Stabilisierte Flamme:* Die Flamme wird im turbulenten Injektornachlauf stabilisiert.

Die Ergebnisse der Untersuchung sind in Abbildung 6.11 dargestellt. Man sieht, dass die untere Temperaturgrenze für die Zündung in



**Abbildung 6.11:** Zündung und Reaktion in Modus 1 und 2 für den strebenförmigen Injektor [San03]

beiden Modi des Vorheizers bei 900 K liegt. Bei dieser Temperatur wurde bei den *LIF*-Messungen auch in Modus 1 kein Signal detektiert. Dies ist durch den geringeren Wasserstoffmassenstrom im Vorheizer, die dadurch verbesserte Vermischung und durch die stärkere Radikalenrekombination in der Lavaldüse bei niedriger Temperatur begründet.

Im Temperaturbereich von 900 K bis 1200 K bildet sich eine abgehobene Flamme, die sich bei Erhöhung der Temperatur und des Wasserstoffmassenstroms zum Injektor hin verschiebt. Die Stabilisierung der Flamme direkt hinter dem Injektor konnte jedoch nur bei einem Wasserstoffmassenstrom von 1.3 g/s in Modus 1 und 1.6 g/s in Modus 2 erreicht werden. Diese Massenströme des Wasserstoffs erreicht man nur bei einem extrem hohen Eindüsungsdruck von über 40 bar. Der Einfluss des Eindüsungsdrucks auf das Zündverhalten in der Brennkammer ist durch die Verteilung des Brennstoffs zu erklären. Die Eindringtiefe der Wasserstoffstrahlen in den Luftstrom hängt direkt vom Eindüsungsdruck ab. Bei höherem Druck entfernt sich der Wasserstoff weiter vom Injektor und die Zündungszone im Nachlauf des Injektors wird durch den kalten Wasserstoff weniger ab-

gekühlt. Zusätzlich wird der Bugstoß mit steigendem Massenstrom des Wasserstoffs stärker, was zu einer höheren statischen Temperatur und einer geringeren kinetischen Energie des Luftstroms führt. Insgesamt existiert eine direkte Korrelation zwischen der lokalen Luftzahl und der lokalen statischen Temperatur des Gemisches und folglich findet die Zündung in den mageren Gemischzonen statt.

In Modus 2 erscheint eine weitere Zündgrenze bei einer Totaltemperatur von  $1200\text{ K}$ . Wie schon beschrieben wurde, erfolgt die Zündung nur im Nachlauf des Injektors, da nur hier die statische Temperatur die Zündtemperatur des Wasserstoffs übersteigt. Die Ausdehnung dieser Zone wird vom Beginn des Expansionsbereichs in der Brennkammer bei einer Entfernung von  $65\text{ mm}$  hinter der Eindüsung begrenzt, da hier die statische Temperatur unter die Zündtemperatur sinkt. Bei einer Zunahme der Totaltemperatur steigt die kinetische Energie des Luftstroms und entsprechend sinkt die Eindringtiefe der Wasserstoffjets. Folglich wird die brennstoffreiche Zone im Nachlauf des Injektors schmaler, wodurch das Nachlaufgebiet durch den Wasserstoff stärker abgekühlt und das Treibstoff-Luft-Gemisch fetter wird. Dies vergrößert in Folge den Zündverzug. Zusätzlich führt die höhere Strömungsgeschwindigkeit zu einer kürzeren Vermischungszeit und somit zu einer schlechteren Vermischung der Gase. Durch eine Erhöhung der Totaltemperatur wird so eine kritische Temperatur erreicht, oberhalb derer die Inhibitionseffekte durch die angestiegene Luftgeschwindigkeit die Verkürzung der Zündverzugszeit durch die erhöhte statische Temperatur überkompensieren.

In Modus 1 wurde keine Zündgrenze bei dieser Temperatur beobachtet. Die Flamme wird am Injektor stabilisiert, wenn Temperatur und Wasserstoffmassenstrom steigen. Offenbar führt die Anwesenheit von Radikalen zu einer Verkürzung des Zündverzugs, was zur Zündung und Reaktion in der Brennkammer im Gegensatz zum radikalfreien Modus führt.

Folglich basieren die beiden Zündgrenzen (Temperaturobergrenze der Luft und Mindestmassenstrom des Brennstoffs) auf dem gleichen Ef-

fekt der Abkühlung der potenziellen Zündungszone durch den eingedüsten Wasserstoff und einer dadurch steigenden Zündverzugszeit. Das Zündungs- und das Flammenstabilisierungskriterium kann durch das Verhältnis zwischen einer charakteristischen Aufenthaltszeit  $t_{auf}$  und einer charakteristischen Reaktionszeit  $t_r$  quantifiziert werden, das als die Mikhelsonzahl von Dunskaa eingeführt und von Frolov [FBB00] für die Analyse der Zündung und Flammenstabilisierung mit einem Staukörper in einer Ramjet-Brennkammer verwendet wurde. Die Aufenthaltszeit wird als die Zeit definiert, in der sich ein imaginäres Fluidpartikel in der potenziellen Zündungszone im Nachlauf des Injektors aufhält. Die Reaktionszeit ist die Zeit, die das Partikel unter den vorliegenden Bedingungen für die Temperatur und Gemischzustand für die Reaktion benötigt. Das Flammenstabilisierungskriterium lautet:

$$\frac{t_{auf}}{t_r} = Mi \geq 1. \quad (6.1)$$

Das bedeutet, dass eine stabile Zündung und Flammenausbreitung nur bei einer Mikhelsonzahl von größer als 1 möglich ist.

Die experimentelle Untersuchung des massiven Pylon-Injektors von Grünig (Abbildung 4.3) unter gleichen Betriebsbedingungen zeigte, dass das Zündverhalten völlig unempfindlich auf die Radikalkonzentration in der Testluft reagiert. In beiden Vorheizungsmodi kam es zur Zündung und Flammenstabilisierung in der turbulenten Rezirkulationszone hinter dem Injektor. Die Ursache dafür ist in der Injektorgeometrie begründet. Der Pylon erzeugt im Gegensatz zum Keil-Injektor Sekundärwirbel, die zu einer besseren Vermischung des Wasserstoffs mit der Luft führen. Außerdem ist das Stoßsystem des Pylon-Injektors viel stärker und die Rezirkulationszone im Nachlauf viel größer als bei dem Keil-Injektor. Dadurch steigt die Aufenthaltszeit und die Reaktionszeit sinkt gleichzeitig. Die Mikhelsonzahl liegt dann deutlich über eins, was zur stabilen Zündung und Flammenausbreitung führt. In den Untersuchungen des Pylon-Konzeptes von Grünig [Grü99] wurde der Vorheizer ausschließlich in Modus 1 be-

trieben und dasselbe Ergebnis erzielt.

Der Unterschied im Verhalten der beiden Injektoren mit unterschiedlich stark ausgeprägten Stabilisierungseigenschaften bestätigt die in Abschnitt 5 gezogenen Schlüsse für den Einsatz des Vorverbrennungsvorheizers. Die gleichen Schlussfolgerungen wurden auch in der Studie von Pellett [PBC02] gezogen, nach der der Einsatz eines derartigen Vorheizers für die Untersuchung von Konzepten mit marginalen Selbstzündungs- und Flammenhaltungseigenschaften zu nicht repräsentativen Ergebnissen führen kann. Dagegen ist der Einfluss von Reaktionszwischenprodukten bei Konzepten mit starker Reaktionsstabilisierung von geringerer Bedeutung.

Die gefundenen Phänomene bei der Zündung bei strebenförmigen Injektoren stehen im Einklang mit den Schlussfolgerungen von Huber [HSM79], die auf einer Analyse von aus repräsentativen SCRamjet-Brennkammern gewonnenen Selbstzündungsdaten basieren:

1. In typischen Fällen, wenn die Totaltemperatur des Brennstoffs wesentlich niedriger ist als die Totaltemperatur der Luft, findet die Zündung in Zonen statt, in denen das Äquivalenzverhältnis der Mischung ca. 0.2 beträgt.
2. Die Selbstzündung reagiert extrem sensitiv auf die Mischungs-temperatur in der potenziellen Zündungszone. Folglich haben die Wandtemperatur und der Temperatur-Recovery-Faktor der Rezirkulationszone einen dominierenden Einfluss auf das Zündphänomen. Die beiden letzten sollen so hoch wie möglich sein.
3. Für die typischen Fälle, in denen die Wände stark gekühlt werden, haben das Verhältnis zwischen der Grenzschichtdicke und der Penetration des Strahls, die Stufenhöhe oder die Breite des Injektors einen starken Einfluss auf die Zündung, da diese Parameter direkt den Temperatur-Recovery-Faktor beeinflussen.
4. Für die Zündung geeigneten Zonen sind: (a) Übergang der strebenförmigen Injektoren zur Wand, wenn der Treibstoff strom-

auf eingedüst wird, (b) Rezirkulationsgebiete stromaufwärts von transversalen Brennstoffstrahlen, (c) Zonen hinter Stufen mit transversaler Treibstoffeindüsung und (d) Bugstoßgebiete hinter transversalen Treibstoffjets.

Die experimentelle Untersuchung des Ausbrandes von Sander [San03] in Modus 1 des Vorheizers, wobei eine stabile Zündung im Nachlauf des strebenförmigen Injektors beobachtet wurde, zeigte eine unvollständige Brennstoffumsetzung. Der Grund dafür ist eine unzureichende Mischung der Reaktanden. Die Verschiebung der Brennkammerexpansion stromabwärts kann potenziell das Zündungsproblem lösen, wobei aber das Mischungsproblem ungelöst bleibt. Die Verbesserung der lateralen Mischung durch die Verwendung von mehreren Injektoren, die in der Brennkammer räumlich verteilt sind, wurde von Kopchenov [BGKL02] gezeigt. Dadurch steigen aber die Totaldruckverluste enorm an, was einen Einsatz solcher Konzepte fragwürdig erscheinen lässt. Eine andere Methode ist die Verwendung von Injektoren mit dem *lobed Mixer* [KGW<sup>+</sup>02, SS02], die Sekundärwirbel in Strömungsrichtung erzeugen und dadurch die Mischung verbessern. Da die kinetische Energie des Luftstroms durch die Sekundärwirbel infolge der Turbulenzproduktion und Dissipation relativ schnell irreversibel in Wärme umgewandelt wird, ist auch mit steigenden Verlusten zu rechnen. Eine Alternative bietet die Deformation der Eindüsungsöffnungen (z. B. elliptische Öffnungen), die die Wechselwirkung zwischen Brennstoffstrahl und Luft durch eine größere Kontaktfläche deutlich verstärkt. Die Verwendung derartiger Injektoren wurde von Kharitonov [KLT<sup>+</sup>00] untersucht. Dabei wurde eine in Bezug auf die Mischungsintensität und Totaldruckverluste optimale Pylonkonfiguration mit sechs elliptischen Eindüsungsöffnungen gefunden.

## 6.6 Zusammenfassung

Das grundsätzliche Problem bei der Luftvorheizung durch Verbrennung ist ein potenzieller Einfluss von Reaktionszwischenprodukten auf die Zündung und auf die Verbrennung des eingedüsten Brennstoffs.

- Die Sensitivität der Injektoren auf die Radikalkonzentration hängt stark von ihrem Design ab. Injektoren, bei denen die Flammenstabilisierung über einen hohen Druckverlust erfolgt, sind unempfindlich auf Zwischenspezies im Luftstrom.
- SCRamjet-Brennkammern mit einer verlustarmen Flammenstabilisierung sind schwierig in Versuchsständen mit Vorverbrennungs-Vorheizer zu untersuchen.
- Die Radikale zeigen einen starken Stabilisierungseffekt auf die Zündung und Flammenhaltung, der mit der Stabilisierung durch die starken Verluste beim Pylon-Injektor vergleichbar ist. Da bei der Radikalenstabilisierung keine Totaldruckverluste verursacht werden, kann diese Methode als besonderes effizient angesehen und zur Weiterentwicklung der SCRamjet-Technologie verwendet werden.

Bei der numerischen Simulation der Strömung in der Brennkammer spielt das korrekte Eintrittsprofil eine entscheidende Rolle, da die Grenzschichten zu Ablösungen und Verlusten durch die Wechselwirkung mit dem Verdichtungsstoß führen.

Die Stabilisierung der Zündung und die Flammenhaltung erfolgen im Nachlauf des Injektors, falls die Aufenthaltszeit in der Zündungszone größer als die Reaktionszeit bzw. die Mikhelsonzahl größer als eins ist. Die Zündungszone im Nachlauf des strebenförmigen Injektors ist stark vom Eindüsungsdruck des Wasserstoffs und von der Totaltemperatur des Luftstroms abhängig.

Die beschriebenen Stabilisierungs- und Mischungsprobleme des Keil-Injektors und die enormen Totaldruckverluste beim Pylon-Injektor

machen deren Einsatz für technisch relevante SCRamjet-Triebwerke fragwürdig.



## 7 Zweistrom-Injektor

Die detaillierte Untersuchung der strebenförmigen Injektoren, die im vorherigen Abschnitt beschrieben wurde, zeigte mehrere Mängel, die den Einsatz solcher Injektoren mit Zündungsstabilisierung durch ein Stoßsystem in einem funktionsfähigen Triebwerk in Frage stellen. Aus dem Studium des Vorheizers und dessen Einfluss auf das Brennverhalten bei Einsatz strebenförmiger Injektoren folgt, dass Zwischenprodukte die Zündung und die Reaktionsausbreitung wesentlich besser stabilisieren können als das Stoßsystem. Außerdem erfolgt die Zündung durch die Anwesenheit von Radikalen bei einer viel geringeren Temperatur, was einen früheren Übergang vom Ramjet- in den SCRamjet-Modus, bzw. die Erhöhung des Wirkungsrades des gesamten Flugsystems erlaubt. Ein weiterer Vorteil der Radikalenstabilisierung liegt darin, dass eine derartige Stabilisierung im Gegensatz zu einem Stoßsystem keine Totaldruckverluste verursacht.

Wie in Abschnitt 5.1 gezeigt, senkt schon eine geringe Konzentration an Radikalen die Zündtemperatur ab. Das stöchiometrische Gemisch zündet bei einer Temperatur von  $900\text{ K}$  mit Hilfe der Radikale genauso schnell, wie dasselbe Gemisch bei einer Temperatur von ca.  $1500\text{ K}$  ohne Radikale. Die Radikalenabhängigkeit der Zündung sinkt mit steigender Temperatur ab, so dass bei einer höheren Temperatur keine wesentliche Verkürzung der Induktionszeit beobachtet wird. Aus technologischer Sicht ist es wichtig, dass Radikale zu einer relativ konstanten Induktionszeit über ein breiteres Spektrum der Eintrittsbedingungen und zu einer konstanten Position der Reaktionszone in der Brennkammer führen, was z. B. mit strebenförmigen Injektoren mit geringeren Totaldruckverlusten schwierig realisierbar ist. Das führt zu einem wesentlich stabileren und sichereren Betriebsverhalten des Triebwerks und ermöglicht, die Brennkammergeometrie im Hinblick auf das Thermomanagement zu optimieren.

In diesem Abschnitt wird ein Zweistrom-Injektor vorgestellt, dessen geometrische Eigenschaften die radikalenstabilisierte Verbrennung mit geringen Totaldruckverlusten in der Überschallströmung

---

gewährleisten. Ein anderer Vorteil des Injektors liegt in der Nutzung von Zonen unterschiedlicher Drücke zur Erzeugung von Sekundärwirbeln, deren Wechselwirkung mit den Wasserstoffstrahlen die Vermischung intensiviert.

Die Entwicklung des Injektors erfolgte iterativ durch eine enge Verzahnung von numerischen und experimentellen Methoden, um dessen Geometrie und die Eindüsung des Wasserstoffs im Hinblick auf Totaldruckverluste und eine effiziente Verbrennung zu optimieren. Da die Strömungs-, Mischungs- und die Reaktionsvorgänge im Nahbereich des Injektors die Funktionsfähigkeit der gesamten Brennkammer bestimmen, konzentrieren sich die numerischen und experimentellen Forschungsarbeiten zur Entwicklung und Optimierung hauptsächlich auf den Injektorbereich. Um eine höhere Entwicklungseffizienz zu erreichen, wurde ein Brennkammersegment mit einem verbesserten optischen Zugang im Rahmen der experimentellen Arbeiten entwickelt [San03], das eine detaillierte Untersuchung der Strömung und der Reaktion im Bereich des Injektors ermöglicht. Die nachfolgend gezeigten experimentellen Ergebnisse wurden an dieser Versuchseinrichtung gemessen.

Die numerische Simulation des Injektorbereiches, zeigt eine sehr gute Korrelation mit den experimentellen Daten und bestätigt die theoretische Auslegung des Zweistrom-Injektors. Die Numerik liefert eine dreidimensionale Darstellung des Strömungsfeldes und des Verbrennungsvorganges, die notwendig sind, um die komplizierten Wechselwirkungen zwischen Strömung und Reaktion zu verstehen und als Basis für weitere Optimierungsarbeiten dienen. Zusätzlich wurden das Strömungsfeld und der Reaktionsablauf im Nachlauf des Injektors mit Hilfe einer virtuellen Brennkammer numerisch untersucht. Die daraus gewonnenen Ergebnisse gestatten die Ableitung einer geeigneten Brennkammergeometrie. Außerdem wurde die Funktion des Injektors bei höheren Machzahlen numerisch getestet, um die Einsatzfähigkeit des Konzeptes bei unterschiedlichen Flugmachzahlen, bzw. variablen Eintrittsbedingungen zu beweisen.

## 7.1 Funktionsprinzip des Zweistrom-Injektors

Die Idee der radikalenstabilisierten Überschallverbrennung mit niedrigen Totaldruckverlusten wurde, wie in Abbildung 7.1 schematisch gezeigt, umgesetzt. Der Injektor, der aus zwei symmetrischen Teilen besteht, teilt die Strömung in drei Teilströme auf: einen Injektorstrom und zwei Hauptströme, die unterschiedliche Totaldruckverluste erzeugen. Die symmetrischen Teile des Injektors formen einen Diffusor mit Innenverdichtung, der den Injektorstrom mit geringen Totaldruckverlusten verzögern soll, um die für die Zündung notwendigen Bedingungen im Injektorstrom zu erreichen. Dadurch werden die Verluste minimiert und nur auf den Injektorstrom begrenzt. Die Hauptströme bleiben vom Stoßsystem des Diffusors unbeeinflusst. Nach dem Diffusor bilden die Injektorteile eine Vorbrennkammer mit den parallelen Wänden, die mit einer konvergent-divergenten Düse abschließt, in der den Injektorstrom auf Überschall beschleunigt wird. Der Brennstoff wird in alle drei Ströme eingedüst.

Die Selbstzündung des Brennstoffs erfolgt in der Vorbrennkammer, da nur dort die dafür notwendigen Bedingungen erreicht werden. In den Hauptströmen findet im Gegensatz zum Injektorstrom infolge

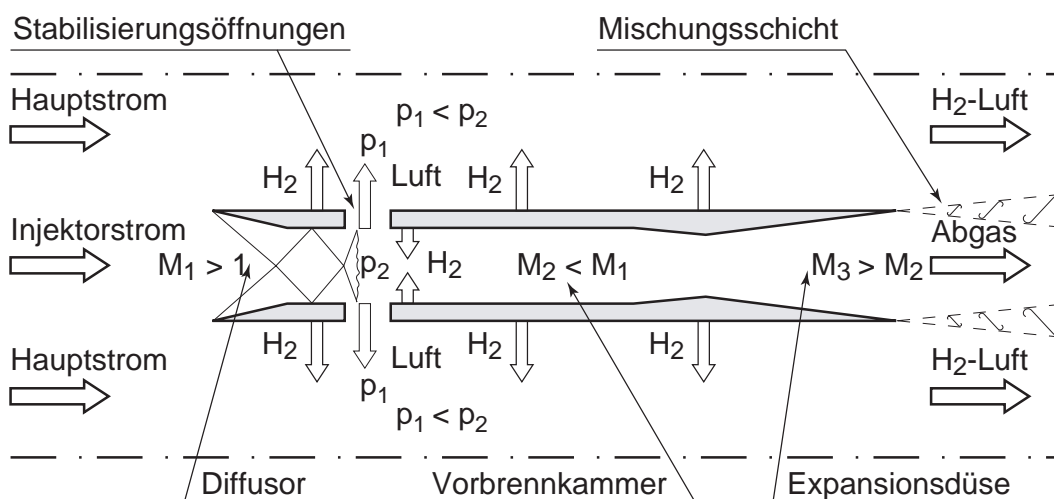


Abbildung 7.1: Zweistrom-Injektor

der zu geringen statischen Temperatur keine Reaktion statt. Der Reaktionsverlauf in der Vorbrennkammer ist gewissermaßen dem Reaktionsverlauf im Vorheizer (Abschnitt 5) ähnlich, so dass die Aufenthaltszeit des Gemisches in der Vorbrennkammer für die vollständige Vermischung der Reaktanden bzw. für eine vollständige Reaktion nicht ausreicht. Demzufolge besitzt die in der konvergent-divergenten Düse beschleunigte und weiterreagierende Strömung eine sehr hohe Konzentration an Zwischenspezies, die während des Vermischens mit den Hauptströmen eine intensive Zündung der Wasserstoff-Luft-Mischung in Hauptströmen initiieren. Somit erfolgt die Zündung in den Hauptströmen sofort nach dem Mischungskontakt mit dem weiterreagierenden Injektorstrom, wodurch die Position der Reaktionszone konstant gehalten wird.

Ein besonderer Vorteil des Konzeptes liegt in dessen breitbandiger Funktionsfähigkeit, wobei der Brennkammerstart bei einer sehr niedrigen Totaltemperatur (etwa  $900\text{ K}$ ), bzw. einer Flugmachzahl von vier erfolgen kann. Das Verhalten des Diffusors verändert sich in Abhängigkeit von den Eintrittsbedingungen der Brennkammer. Bei einer niedrigen Brennkammernachzahl ( $M \approx 2.0 \dots 2.2$ ), was auch eine geringere Totaltemperatur bedeutet, wird der Injektorstrom im Diffusor auf Unterschall verzögert, um die für die Selbstzündung notwendige statische Temperatur in der Vorbrennkammer zu erreichen. In diesem Modus (Modus 1) schließt ein senkrechter Stoß das Stoßsystem im Diffusor ab. Da ein stabiler Betrieb des Diffusors mit Innenverdichtung beim Überschall-Unterschall-Übergang im konvergenten oder parallelen Kanal physikalisch unmöglich ist, [Abr58, Mü72], bzw. ein senkrechter Stoß vor dem Diffusor gebildet wird, besitzt jedes Injektorteil eine Reihe von Öffnungen am Anfang der Vorbrennkammer, die den Injektorstrom mit den Hauptströmen verbinden. Dadurch wird sowohl der statische Druck lokal reduziert, als auch der Massenstrom teilweise abgeleitet, was die Stabilisierung des senkrechten Stoßes ermöglicht. Physikalisch bilden die Öffnungen eine virtuelle divergente Kontur des Diffusors. Zusätzlich wird der Mischungsvorgang in den Hauptströmen von der Strömung durch die Öffnungen positiv beeinflusst.

Mit der Erhöhung der Machzahl und der Totaltemperatur am Eintritt der Brennkammer bei einer höheren Flugmachzahl ist die starke Verzögerung des Injektorstroms nicht mehr notwendig, bzw. die Zündbedingungen in der Vorbrennkammer werden auch bei  $M > 1$  erreicht. In diesem Modus (Modus 2) wird kein senkrechter Stoß gebildet und der Injektor wird mit Überschall durchströmt. Demzufolge ist der Druckverlust in diesem Modus viel geringer als in Modus 1. Das Umschalten des Diffusors erfolgt automatisch und benötigt keine Geometrieänderung, da bei einer höheren Anströmmachzahl die Bedingungen für die Bildung des senkrechten Stoßes nicht erreicht werden. In diesem Fall beschränkt sich die Funktion der Öffnungen auf die Verbesserung der Mischung in den Hauptströmen.

Zusammengefasst besitzt das vorgestellte Injektorkonzept mehrere Vorteile gegenüber den strebenförmigen Injektoren. Die praktische Realisierung einer funktionsfähigen Brennkammer erfordert eine gründliche Untersuchung der Strömungs- und Reaktionsvorgänge im Injektorbereich. In den nächsten Abschnitten werden die numerischen Ergebnisse zur Untersuchung und Optimierung der Diffusorströmung, der Mischung und der Reaktion für Modus 1 vorgestellt. Die durchgeführte Untersuchung von Modus 2 betrifft nur das Stoßsystem im Diffusor und ist möglicher Gegenstand zukünftiger Arbeiten.

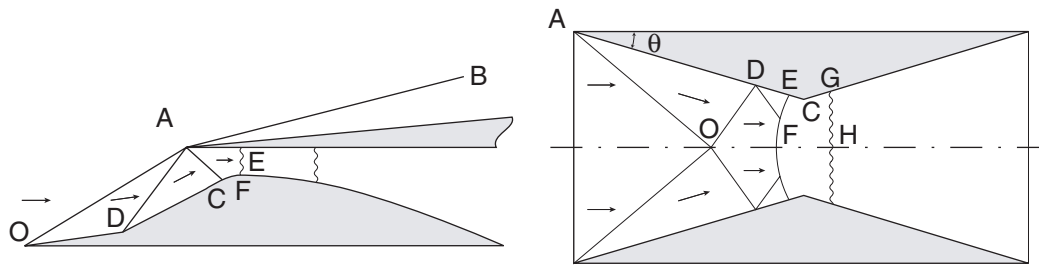
## 7.2 Injektorstrom

Wie im vorherigen Abschnitt gezeigt wurde, erfolgt die Verzögerung des Injektorstroms in einem Diffusor mit Innenverdichtung. Die Auslegung des Diffusors war die erste Aufgabe bei der Entwicklung des Konzeptes. Die Hauptkriterien zur Auslegung und Optimierung des Diffusors waren sein Wirkungsgrad und sein stabiles Betriebsverhalten. In diesem Abschnitt werden die theoretischen Grundlagen von Diffusoren und die Ergebnisse zur Untersuchung der Diffusorströmung vorgestellt.

### 7.2.1 Diffusoren mit Innenverdichtung

Die Vielzahl von Einlauftypen lassen sich in Arten mit äußerer, innerer oder gemischter Verdichtung einteilen. Die Diffusoren mit Innenverdichtung und gemischter Verdichtung sind schematisch in Abbildung 7.2 dargestellt. Das Auswahlkriterium ist hauptsächlich der Einsatzbereich, die Größe und die Charakteristik des Triebwerksystems. Diffusoren mit Innenverdichtung sind sehr empfindlich auf Schräganströmung. Sie haben aber gegenüber den Diffusoren mit äußerer Verdichtung einen sehr viel geringeren Außenwiderstand, da keine Außenstöße, wie der Stoß  $AB$  bei gemischter Verdichtung (Abbildung 7.2 links), gebildet werden. In unserem Fall, in welchem der Diffusor zum Einsatz innerhalb einer Brennkammer kommt und die Anblasung immer parallel zur Diffusorachse stattfindet, bringt die Innenverdichtung Vorteile. Das Funktionsprinzip aller Diffusorarten ist identisch und wird an einem Beispieldiffusor mit Innenverdichtung (Abbildung 7.2 rechts) gezeigt.

Ein schräger Stoß bildet sich im Punkt  $A$  der Außenverkleidung und kreuzt sich mit dem gegenüberliegenden Stoß im Punkt  $O$  auf der Symmetrieachse. Die Strömung wird dadurch um den Winkel  $\theta$  von ihrer Anfangsrichtung parallel zur Wand  $AC$  abgelenkt. Im Punkt  $O$  sind die Stromlinien genötigt, zur Anfangsrichtung zurückzukehren, so dass sich der Stoß  $OD$  bildet. Im Punkt  $D$  wird die Strömung noch einmal parallel zur Wand abgelenkt und der Vorgang kann von Neuem beginnen. Dadurch, dass die Strömung durch jeden Stoß verzögert wird, sinkt der Grenzablenkungswinkel. Der beschriebene Vorgang läuft so lange, bis der erforderliche Ablenkungswinkel größer als der Grenzablenkungswinkel ist ( $\theta > \theta_{max}$ ). Nach dem Erreichen dieses Modus bildet sich anstatt eines schrägen Stoßes eine Stoßwelle  $EF$ , nach der die Strömung auf Unterschall verzögert wird. Die Bildung der Stoßwelle  $EF$  findet auf der Symmetrieachse statt, wo der benötigte Ablenkungswinkel den Grenzablenkungswinkel überschreitet. Die ungerade Form der Stoßwelle  $EF$  wird durch die inhomogene Machzahl- und Druckverteilung senkrecht zur Strömungs-



**Abbildung 7.2:** Schematische Darstellung von Überschalldiffusoren mit gemischter Verdichtung links und mit Innenverdichtung rechts

richtung verursacht. Die Strömung wird im konvergenten Kanal bis zum engsten Querschnitt C (Hals) des Diffusors beschleunigt, wobei die Strömungsgeschwindigkeit im Hals den kritischen Wert ( $M^* = 1$ ) nicht überschreiten darf. Im entgegengesetzten Fall, wenn der Hals mit Überschall durchströmt wird, kann sich nach dem Hals im divergenten Teil eine Überschallzone bilden, die mit einem Geradstoß GH abschließt.

Eine wichtige Kenngröße des Diffusors ist der Druckrückgewinn oder Gütegrad  $\Pi_E$ , der auch oft als Diffusorwirkungsgrad bezeichnet wird. Der Druckrückgewinn wird als Quotient des Totaldruckes nach dem Stoßsystem  $p_{02}$ , bzw. in der Unterschallzone und des Totaldruckes vor dem Stoßsystem  $p_{01}$ , bzw. in der ungestörten Überschallströmung berechnet.

$$\Pi_E = \frac{p_{02}}{p_{01}} \quad (7.1)$$

Selbstverständlich ist der Druckrückgewinn immer kleiner als Eins. Die Auslegung eines verlustfreien Diffusors mit isentroper Verdichtung, der strömungsmäßig einer „umgekehrten“ Laval-Düse entsprechen würde, ist praktisch nicht realisierbar, da die Druckerhöhung das Geschwindigkeitsprofil in der Grenzschicht deformiert und anschließend eine Grenzschichtablösung verursacht. Der Druckrückge-

winn eines stoßsystembasierenden Diffusors hängt immer von der Anzahl der schrägen Stöße vor dem Geradstoß ab: je mehr schräge Stöße auftreten, desto geringer sind theoretisch die Verluste im Diffusor. In der Realität steigt aber der Grenzschichteneinfluss durch die Erhöhung der Stoßanzahl. Nur der erste Stoß, der durch die Umlenkung der ungestörten Strömung an der Vorderkante der Außenverkleidung (Abbildung 7.2) gebildet wird, bleibt von der Grenzschicht unbeeinflusst. Alle anderen Stöße entstehen durch Stoßreflexionen an den Diffusorwänden. Bei einem überkritischen<sup>6</sup> Drucksprung über den Stoß treten durch die Stoß-Grenzschicht-Wechselwirkungen Grenzschichtablösungen auf. Demzufolge verschieben und deformieren sich die Stöße, die Druckverluste steigen. Das heißt, dass bei der Auslegung eines Diffusors immer eine Kompromisslösung in Hinsicht auf die Grenzschichteffekte und die Anzahl der Stöße gefunden werden muss.

Eine andere wichtige Kenngröße des Diffusors ist der Durchsatzkoeffizient, der den stabilen Betrieb des Diffusors bestimmt. Der Durchsatzkoeffizient  $\mu$  wird als Verhältnis zwischen der vom Einlauf wirklich aufgenommenen Luftmasse  $\dot{m}_0$  zur maximal aufnehmbaren Masse  $\dot{m}_{0,max}$  definiert, und kann auch als Verhältnis zwischen der Querschnittsfläche  $A_{eff}$  der Strömung, die vom Diffusor eingefangen wird, zur maximalen oder geometrisch auffangbaren Strömungsquerschnittsfläche  $A_E$  (Abbildung 7.3) beschrieben werden.

$$\mu = \frac{\dot{m}_0}{\dot{m}_{0,max}} = \frac{A_{eff}}{A_E} \quad (7.2)$$

Der Durchsatzkoeffizient erreicht seinen kritischen Wert  $\mu_{krit} \leq 1$ , falls der das Stoßsystem abschließende Geradstoß im engsten Querschnitt des Diffusorhalses liegt. Die maximal aufnehmbare Masse, bzw. der kritische Wert des Durchsatzkoeffizienten wird meist beim Auslegungspunkt erreicht.

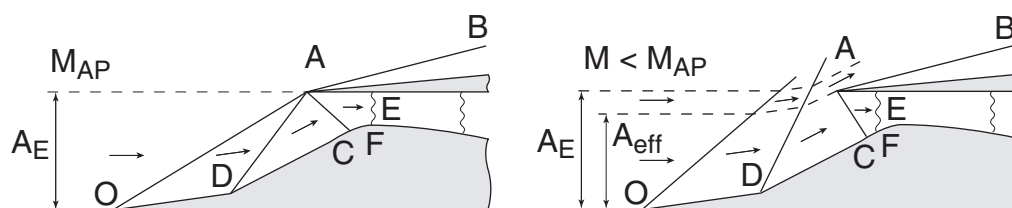
---

<sup>6</sup>Der Begriff *kritisches* Druckverhältnis wurde detailliert von Abramowitsch [Abr58] beschrieben und wird als Verhältnis zwischen dem statischen Druck in der Grenzschichtablösungszone und dem statischen Druck der ungestörten Strömung definiert. Dieser Parameter charakterisiert das Verhalten der Grenzschicht, bzw. ist das Kriterium der Ablösung und hängt vom Drucksprung über den Stoß, bzw. von der Stoßintensität ab.

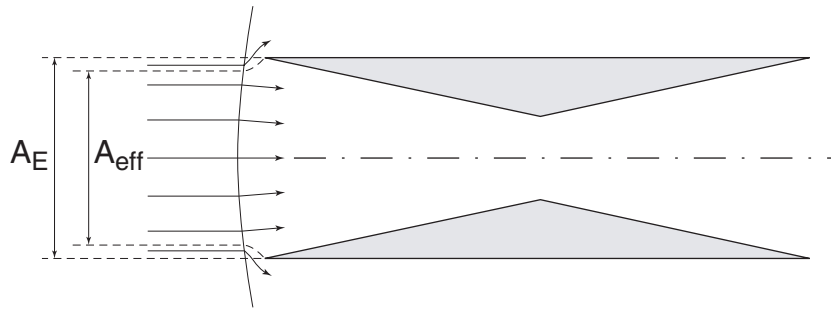


Die Reduzierung der vom Diffusor aufgenommenen Masse  $m_0$  durch die Änderung der Eintrittsbedingungen kann an einem Beispiel in Abbildung 7.3 gezeigt werden. Der Diffusor mit gemischter Verdichtung wurde für eine Flugmachzahl  $M_{AP}$  ausgelegt. Das Stoßsystem beim Auslegungspunkt ist links gezeigt. Durch die Reduzierung der Anströmmachzahl (Abbildung 7.3) werden die Verdichtungsstöße, die an der Vorderkante (Punkt O) und am Knick (Punkt D) des Zentralkörpers gebildet werden, steiler und treffen nicht mehr die Vorderkante der Außenverkleidung (Punkt E). Dadurch ist die Umlenkung der angeströmten Luft größer und die Querschnittsfläche  $A_{eff}$  der vom Diffusor aufgenommenen Luft kleiner als die entsprechende Querschnittsfläche  $A_E$  beim Auslegungspunkt. Der Verdichtungsstoß an der Vorderkante der Außenverkleidung wird auch steiler und der Geradstoß tritt früher auf. Die Verluste steigen. Zusätzlich wird die Geradstoßposition durch den Gegendruck des Triebwerkes und durch die Änderung der vom Triebwerk benötigten Luftmasse beeinflusst, so dass der Geradstoß bis zum Diffusoreinlauf wandern kann. Das Verhalten des Überschalldiffusors bei verschiedenen Betriebszuständen wurde von Münzberg [Mü72] detailliert analysiert und beschrieben.

Im Vergleich zu Diffusoren mit gemischter Verdichtung reagieren Diffusoren mit Innenverdichtung viel sensibler auf derartige Ände-



**Abbildung 7.3:** Änderung des Stoßsystems und vom Diffusor aufgenommener Massenstrom bei der Abweichung der Eintrittsbedingungen vom Auslegungspunkt. Das Stoßsystem beim Auslegungspunkt (links) und bei einer niedrigeren Anströmmachzahl (rechts)



**Abbildung 7.4:** Ablenkung der Anströmung beim Geradstoß vor dem Diffusor.

rungen. Da das Stoßsystem in einem geschlossenen Kanal hinter dem Auffangquerschnitt liegt, werden die Verdichtungsstöße bei einer niedrigeren Anström-Machzahl steiler, wobei aber keine Teilableitung der angeströmten Luft, wie bei den vorgestellten Diffusoren mit gemischter Verdichtung, stattfindet. Der Geradstoß bewegt sich stromaufwärts, was zur Änderung der Strömungsbedingungen im Diffusorhals führt. Im Idealfall soll beim Auslegungspunkt der engste Querschnitt des Diffusors kritisch durchströmt werden, wobei das stabilste Diffusorverhalten beim Positionieren des Geradstoßes kurz nach dem engsten Querschnitt erreicht wird, bzw. die engste Stelle mit Überschall durchströmt wird [Mü72, Abr58]. Der Geradstoß im konvergenten Diffusorteil und im Halsquerschnitt verhält sich sehr instabil. Die Änderung der Strömungsbedingungen im engsten Querschnitt kann dazu führen, dass die angenommene Luftmasse an der engsten Stelle nicht durchgelassen wird. In diesem Fall entsteht ein verlustreicher Geradstoß vor dem Diffusor und die angeströmte Luft wird teilweise abgeleitet, bzw. der Stromröhren-Eintrittsquerschnitt verringert sich (Abbildung 7.4).

Ein ähnliches Problem besteht beim Start eines Diffusors mit Innenverdichtung. Da sich die Anström-Machzahl kontinuierlich von 0 bis zur Auslegungs-Machzahl  $M_{AP}$  ändert, entsteht zunächst ein senkrechter Stoß vor dem Diffusor, der auch beim Erreichen der Auslegungs-Machzahl nicht geschluckt werden kann. Entsprechend der theoretischen Betrachtung des Idealdiffusors von Münz-

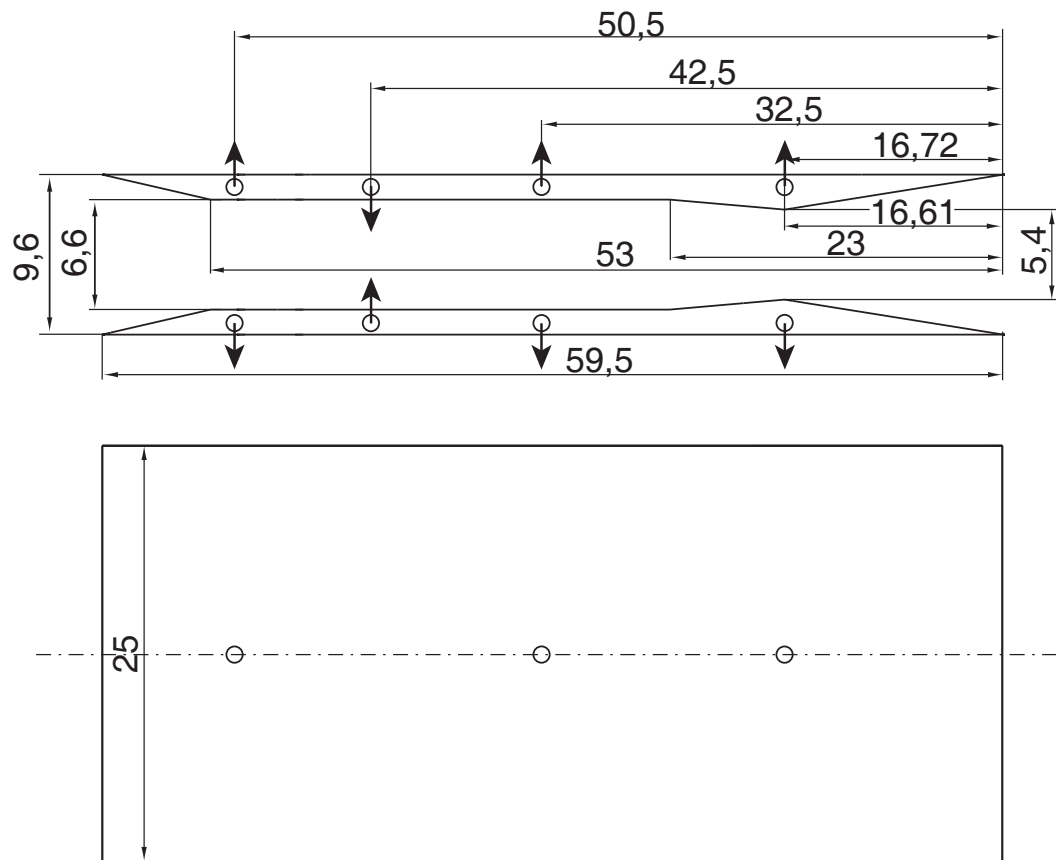
berg [Mü72] und Abramowitsch [Abr58] kann der Geradstoß nur bei einer höheren Anström-Machzahl geschluckt werden und sich im divergenten Teil des Diffusors stabilisieren. Bei Zurücknahme der Anströmmachzahl bis  $M_{AP}$  wandert der Stoß stabil in die Nähe des engsten Querschnitts.

Der beschriebene Startvorgang ist aber nicht realisierbar, da das Flugzeug mit einem nicht korrekt funktionierenden Diffusor keine höhere Flugmachzahl erreichen kann. Für einen startfähigen und stabil funktionierenden Betrieb des Diffusors muss die Geometrie verstellbar sein, was aber technisch schwierig realisierbar ist. Eine andere Möglichkeit zum Lösen des Startproblems bietet die Verwendung von perforierten, luftdurchlässigen Wänden, Bypassöffnungen oder teilweise offenen Diffusoreinläufen [Mü72].

### 7.2.2 Auslegung des Diffusors

Bei der Auslegung und Optimierung des Diffusors wurden zwei Injektorvarianten numerisch und experimentell untersucht. Die erste Version wurde auf Basis der analytischen Berechnungen hergestellt, wobei Grenzschichteffekte vernachlässigt wurden [Emb01, Gra02], und besitzt keine Öffnungen für die Kopplung des Injektorstromes mit den Hauptströmen. Diese Injektorversion sollte für die Überprüfung der theoretischen Vorausrechnungen des Injektors bezüglich des Stoßsystems dienen, um die in der Vorausrechnung nicht aufgedeckten Schwächen herauszufinden und in der zweiten Variante zu beseitigen. Die zweite Ausführung des Injektors sollte vollständig funktionsfähig sein.

Entsprechend der Strömungsbedingungen vor dem Diffusor bietet ein Dreistoß-Diffusor ein optimales Druckverhältnis  $\Pi_E$  im Hinblick auf die Stoß-Grenzschicht-Wechselwirkung [Abr58]. Trotz der beschriebenen Start- und Stabilitätsschwierigkeiten wurde ein Diffusor mit Innenverdichtung ausgewählt, da eine solche Diffusorart einen niedrigen Außenwiderstand hat und dadurch die Totaldruckverluste in den



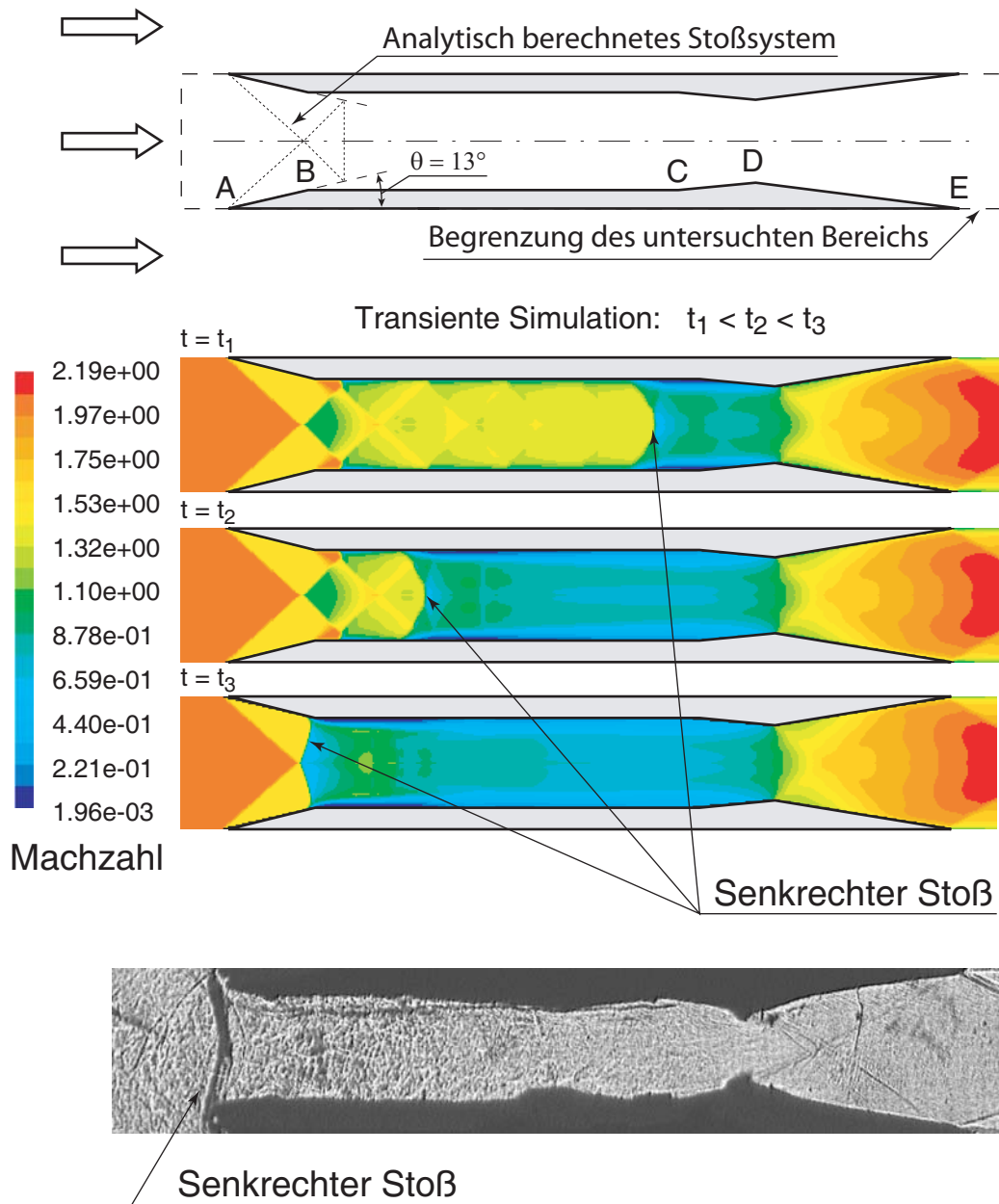
**Abbildung 7.5:** Konstruktive Ausführung des Injektors

Hauptströmen gering bleiben. Durch die analytischen Vorausrechnungen wurde eine Kompromisslösung in Bezug auf die konstruktive Ausführung des Injektors gefunden, wobei die Diffusoreinlaufflappen mit einem Keilwinkel von  $13^\circ$  in einem Abstand von  $9.6 \text{ mm}$  positioniert wurden. Für die Wasserstoffeindüsung in den Injektorstrom besitzt jedes Injektorteil eine Öffnung mit einem Durchmesser von  $0.66 \text{ mm}$  und für die Eindüsung in die Hauptströme drei Öffnungen mit einem Durchmesser von  $0.5 \text{ mm}$ . Die konstruktive Ausführung des Injektors ist in Abbildung 7.5 dargestellt.

Die numerischen Untersuchungen mit Hilfe des CFD-Verfahrens bestätigten die Existenz des analytisch berechneten Stoßsystems. Sowohl numerische als auch experimentelle Ergebnisse zur kalten Injektorströmung ohne Brennstoffeindüsung deckten aber ein Sta-

bilisierungsproblem auf: Der Geradstoß bewegte sich stromauf und stabilisierte sich vor dem Diffusor, so dass auch die Hauptströme beeinflusst werden. Folglich steigen die Verluste stark. Die Ergebnisse der zweidimensionalen numerischen Simulation dieses Vorgangs ist in Abbildung 7.6 als Machzahlverteilung im Injektorstrom dargestellt. Für die Simulation wurde ein homogenes strukturiertes Rechengitter mit einer mittleren Zellengröße von  $0.5 \text{ mm}$  verwendet. Zum Vergleich und zur Validierung der numerischen Ergebnisse sind auch die experimentellen Ergebnisse von Sander dargestellt, die detaillierter in [San03] beschrieben sind.

Beim Anströmen des Diffusors mit einer Machzahl von 2.1 bilden sich an den Eintrittskanten am Punkt A (Abbildung 7.6 mitte) zwei schräge Stöße, die durch die Reflexionen an der Diffusorachse und den Diffusorwänden ein Stoßsystem formen. Innerhalb des konvergenten Teils des Diffusors AB entspricht das Stoßsystem aus der Simulation dem analytisch berechneten Stoßsystem (Abbildung 7.6 oben). Im Punkt B findet beim Übergang zum parallelen Kanal die Strömungsexpansion statt, und das im konvergenten Teil gebildete Stoßsystem wird von der Prandtl-Mayer-Expansion beeinflusst. Dadurch wird die Strömung beschleunigt und die Bedingungen für die Ausbildung eines Geradstoßes werden nicht mehr erfüllt. Die Verdichtungsstöße werden schwächer. Dies ist der Unterschied zu dem analytisch berechneten Stoßsystem, bei dem der Übergang zum parallelen Teil nicht berücksichtigt werden konnte. Auf der Strecke BC bleibt die Strömung noch im Überschall. Überkritische Bedingungen werden nur im Punkt C erreicht, wo der Strömungsumlenkungswinkel den Grenzwinkel überschreitet und ein Geradstoß gebildet wird. Die transiente Simulation zeigt, dass das Verhalten des Geradstoßes innerhalb der Vorbrennkammer sehr instabil ist: der Stoß bewegt sich stromaufwärts bis zur Vorderkante des Diffusors. Nach dem Erreichen der Vorderkante bleibt der Geradstoß stabil, was auch die experimentellen Ergebnisse bestätigen (Abbildung 7.6 unten). Die transiente numerische Simulation wurde für eine zeitlich konstante Anströmmachzahl durchgeführt, wobei das im vorherigen Abschnitt beschriebene Startproblem nicht auftreten kann. Das heißt, dass das komplette

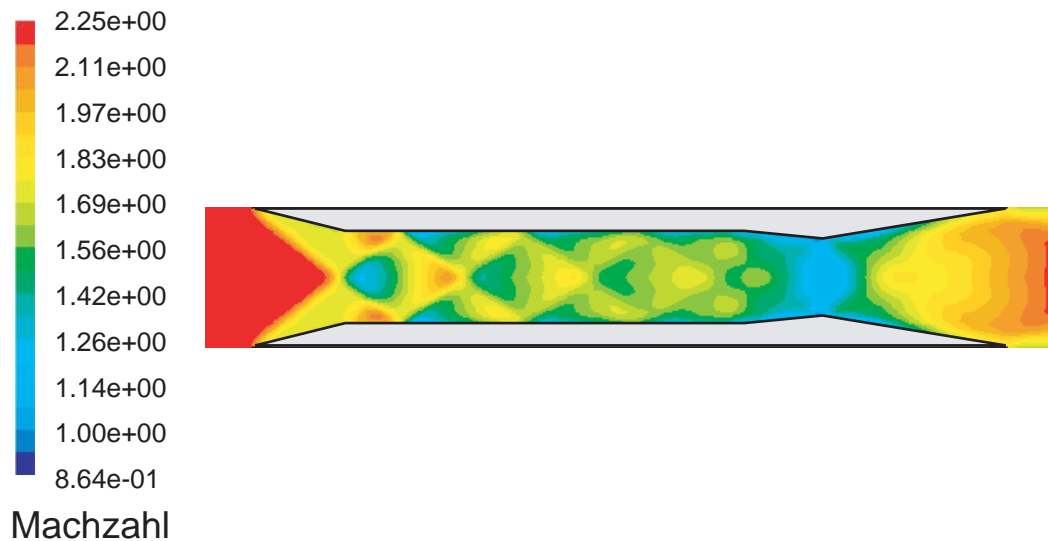


**Abbildung 7.6:** Injektorstrom. Untersucher Bereich und analytisch berechnetes Stoßsystem (oben), numerische Simulation der Stoßwanderung (mitte), Schattenaufnahme des vor dem Injektor stabilisierten Stoßes (unten). Eintrittsbedingungen:  $M = 2.1$ ,  $T_0 = 298\text{ K}$ ,  $p_0 = 7.5\text{ bar}$

Rechengebiet mit einer konstanten Machzahl (Anströmmachzahl von 2.1) initialisiert wird. Um das Startproblem zu untersuchen, muss das Rechengebiet mit einer Unterschallmachzahl ( $M < 1$ ) initialisiert werden. Während der Simulation wird die Anströmmachzahl bis zur notwendigen Machzahl ( $M = 2.1$ ) kontinuierlich erhöht. Offensichtlich ist der Diffusor nicht startbar, so dass der Geradstoß von Anfang an vor dem Diffusor gebildet wird. Wie schon früher erwähnt, ist ein stabiles Verhalten des Geradstoßes nur im divergenten Diffusorteil zu erwarten. Im Hinblick auf die konstruktive Ausführung des Injektors und dessen Funktionsprinzip soll im divergenten Teil des Injektors (Injektordüse) Überschallströmung erreicht werden. Der Einbau eines zusätzlichen divergenten Teils (Diffusorhals) vor dem parallelen Injektorkanal ist konstruktiv nicht realisierbar. Wie numerische Untersuchungen zeigten [Gra02], wurde dadurch außerdem wegen des zu hohen Gegendrucks und der Grenzschichteffekte keine Stabilisierung des Geradstoßes erreicht. Die Änderung des Abstandes zwischen den Injektorteilen und eine entsprechende Änderung des Halsquerschnitts bringt auch keine Stabilisierung des Geradstoßes. Bei der Vergrößerung des Halsquerschnitts verschwindet der Geradstoß sprunghaft, und die Strömung wird nicht auf Unterschallgeschwindigkeit verzögert.

Der Geradstoß beeinflusst in diesem Zustand alle drei Ströme und bei Eindüsung des Brennstoffs kann die Selbstzündung gleichzeitig in allen drei Strömen stattfinden, was den Injektor thermisch überlasten würde. Die Eindüsung des Wasserstoffs wird das Stoßverhalten zudem noch verschlechtern, da sie zu einer Vergrößerung der Masse im Injektorstrom führt. Selbstverständlich ist die Brennkammer bei einer derartigen Strömungsform durch die enormen Totaldruckverluste nicht funktionsfähig, so dass die stoßstabilisierenden Eigenschaften verbessert werden müssen.

Bevor die modifizierte zweite Injektorversion vorgestellt wird, müssen noch einige wichtige Anmerkungen und Ergebnisse zur ersten Injektorvariante präsentiert werden. Wie man in Abbildung 7.6 sowohl aus der numerischen Simulation als auch aus der Schattenaufnahme



**Abbildung 7.7:** Numerische Simulation des Injektorstroms. Machzahlverteilung. Eintrittsbedingungen:  $M = 2.26$ ,  $T_0 = 298 \text{ K}$ ,  $p_0 = 7.5 \text{ bar}$

sieht, beeinflusst die Geradstoßposition die Strömung in der Düse nicht. Die schrägen Verdichtungsstöße an den Hinterkanten der Injektorteile zeigen, dass wie gewünscht eine überexpandierte Überschallströmung in der Düse immer erreicht wird.

Die numerische Untersuchung der Injektorströmung bei höheren Machzahlen (Modus 2) zeigt, dass ab einer Machzahl von 2.26 kein Geradstoß in Punkt C gebildet wird, bzw. keine überkritischen Bedingungen erreicht werden und der Injektorstrom vollständig im Überschall verbleibt (Abbildung 7.7). Die höhere Anströmmachzahl bedeutet eine höhere Flugmachzahl, bzw. eine höhere Totaltemperatur. Dabei wird die für die Selbstzündung notwendige statische Temperatur schon beim Überschallmodus erreicht. Folglich sinken wie erwünscht die Totaldruckverluste, was man auch aus dem Vergleich der Strömungen in der Düse in den Abbildungen 7.6 und 7.7 sieht. Die Verdichtungsstöße an den Hinterkanten des Injektors werden bei einer Machzahl von 2.6 flacher, was einem höheren lokalen statischen Druck im Injektorstrom entspricht. Bei der Eindüsung des Wasserstoffs wird die Übergangsmachzahl natürlich größer. Die-



ses Beispiel zeigt aber, dass der Übergang zum Überschallmodus im Injektorstrom ohne Geometrieänderung des Kanals wie geplant erfolgen kann und die Verluste bei höheren Flugmachzahlen abnehmen werden. Dadurch kann ein breitbandiger Einsatzbereich des Injektor-konzeptes erreicht werden.

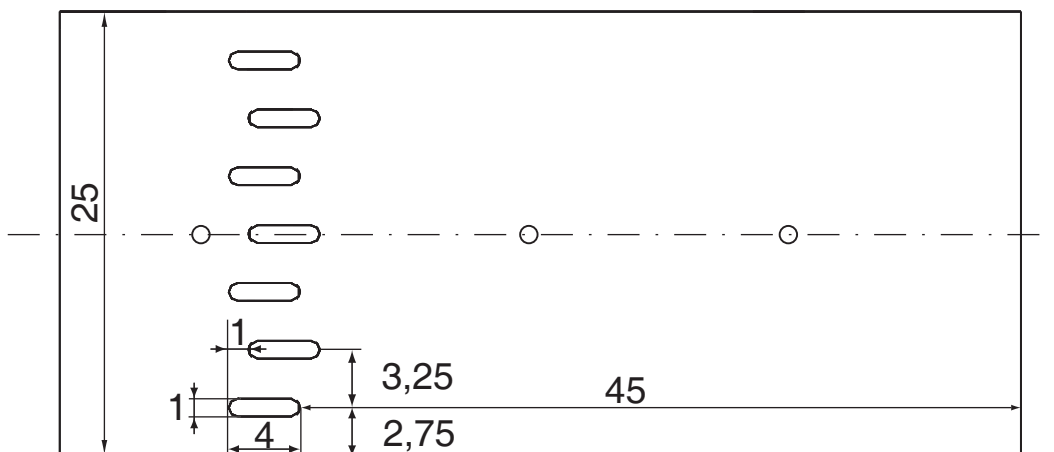
### 7.2.3 Stoßstabilisierung

Die numerische Untersuchung diverser Möglichkeiten zur Stabilisierung des Geradstoßes [Gra02] zeigte, dass die Verwendung der Bypassöffnungen eine effektive Lösung des Problems bietet, die auch konstruktiv realisierbar ist. Die Öffnungen übernehmen mehrere Funktionen, die die Stoßstabilisierung beeinflussen. Einerseits wird beim Diffusorstart die notwendige Luftmasse durch die Bypassöffnungen aus dem Injektorstrom abgeleitet, was das Entstehen des Geradstoßes vor dem Diffusor verhindert, andererseits bildet die Ableitung der Luftmasse durch die Öffnungen eine virtuelle divergente Kontur, die für die Stoßstabilisierung notwendig ist. Der Geradstoß stabilisiert sich an den Öffnungen, da an dieser Stelle eine Absenkung des statischen Drucks erreicht wird. Der Stabilisierungsmechanismus wird im Folgenden detailliert beschrieben. Ferner ist zu bemerken, dass die Grenzschichtdicke an den Öffnungen stark reduziert wird und keine Grenzschichtablösung am Geradstoß, die die Stabilisierung beeinflussen würde, stattfindet.

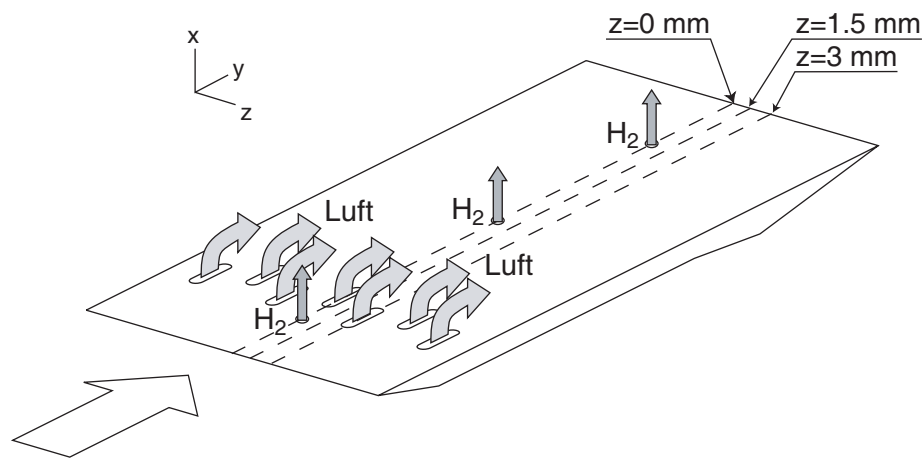
Die Bypassöffnungen wurden im Bereich zwischen der ersten Eindüsenstelle im Hauptstrom und der Eindüsenstelle im Injektorstrom platziert und verbinden den Injektorstrom mit den Hauptströmen. Der Geradstoß wird in diesem Fall vor der Wasserstoffeindüsung im Injektorstrom stabilisiert, so dass die Eindüsung in die Unterschallzone stattfindet. Die Überströmung durch die Öffnungen führt aber zur Bildung von Verdichtungsstößen in den Hauptströmen und folglich zum Anstieg der Totaldruckverluste. Zusätzlich steigt auch der statische Druck im Hauptstrom und der Druckgradient zwischen dem Injektorstrom und den Hauptströmen sinkt. Ein zu

geringer Druckgradient kann dazu führen, dass die für die Stoßstabilisierung notwendige Massenableitung und die Absenkung des statischen Drucks nicht erreicht werden. Die Untersuchung der optimalen Form und Fläche der Öffnungen in Bezug auf die Totaldruckverluste in den Hauptströmen und auf die Gewährleistung der notwendigen Druckdifferenz [Peu02] zeigte, dass schlitzförmige Öffnungen für die Überströmung besser geeignet sind als kreisförmige Öffnungen. Innerhalb der Öffnung bilden sich Ablösungszonen, so dass die wirksame Strömungsfläche wesentlich kleiner als die geometrische Öffnungsfläche wird. Dadurch hat eine schlitzförmige Öffnung, die längs der Strömungsrichtung ausgeführt ist, ein höheres Verhältnis von wirksamer zu geometrischer Öffnungsfläche. Die konstruktive Ausführung der Bypassöffnungen ist in Abbildung 7.8 dargestellt. Die Öffnungen sind in zwei Reihen angeordnet, die um  $1\text{ mm}$  zueinander versetzt sind. Einerseits führt eine solche Anordnung zu einer Vergrößerung der potenziellen Stabilisierungszone, andererseits werden dadurch die Verluste in den Hauptströmen reduziert<sup>7</sup>. Zusätzlich führt die Versetzung zu einer besseren Mischung von Brennstoff und Luft im Haupt-

<sup>7</sup>Die Druckdifferenz zwischen den Strömen steigt entlang der Öffnung in Strömungsrichtung, d.h. der Hauptstrom wird zuerst einer geringeren Druckdifferenz ausgesetzt und dadurch bildet sich ein schwächerer Verdichtungsstoß. Somit beeinflusst die stärkere Druckdifferenz die durch den ersten Verdichtungsstoß verzögerte Strömung. Insgesamt werden so die Verluste geringer.



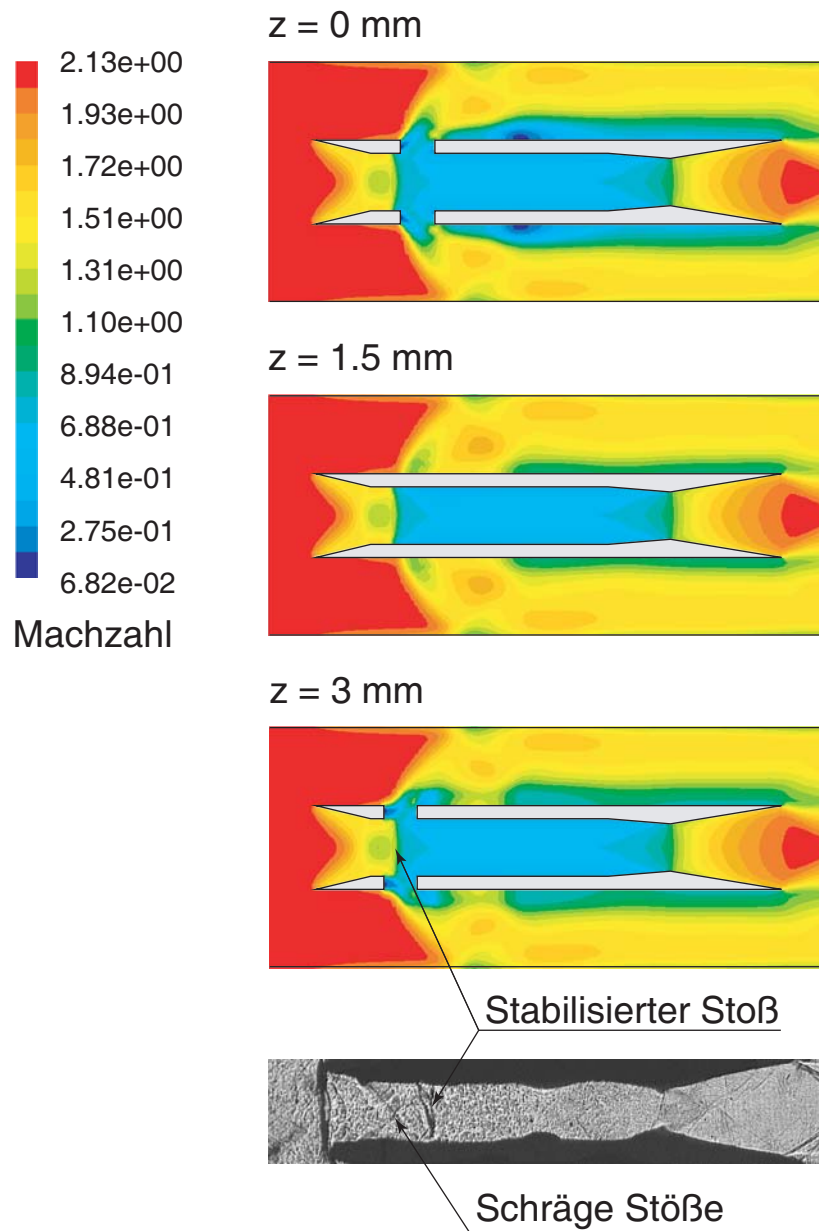
**Abbildung 7.8:** Konstruktive Ausführung der Bypassöffnungen. Draufsicht auf den Injektor.



**Abbildung 7.9:** Schematische Darstellung der Überströmung. Positionierung der Schnittebenen für die Darstellung der numerischen Ergebnisse.

strom. Die Anordnung der Bypassöffnungen und der Bohrungen für die Wasserstoffeindüsung ist in Abbildung 7.9 zu sehen. Die Intensivierung der Mischung ist eine wichtige Funktion der Überströmung, die das grundlegende Problem der Mischung in Überschallströmungen lösen kann. Der Mechanismus der Wechselwirkung zwischen der Überströmung und den Mischungsvorgängen wird im nächsten Abschnitt detailliert beschrieben.

Die Ergebnisse der numerischen Strömungssimulation im Injektorbereich sind in Abbildung 7.10 als Konturdiagramme der Machzahl in drei Schnittebenen entsprechend der Darstellung in Abbildung 7.9 zu sehen. Zum Vergleich und zur Validierung der numerischen Simulation ist auch die Schattenaufnahme des Injektorstroms dargestellt. Die Schnittebenen schneiden den Injektorbereich entlang der Strömungsrichtung und senkrecht zur Injektorplatte bei  $z = 0 \text{ mm}$ ,  $z = 1.5 \text{ mm}$  und  $z = 3 \text{ mm}$  (Abbildung 7.9). Die Schnittebene bei  $z = 0 \text{ mm}$  entspricht der Symmetrieebene und schneidet eine Öffnung aus der zweiten Reihe, während die Ebene  $z = 3 \text{ mm}$  eine Öffnung aus der ersten Reihe durchschneidet. Die Schnittebene  $z = 1.5 \text{ mm}$



**Abbildung 7.10:** Stoßstabilisierung. Numerische Strömungssimulation im Injektorbereich (oben) und Schattenaufnahme des Injektorstroms (unten). Eintrittsbedingungen:  $M = 2.1$ ,  $T_0 = 298$  K,  $p_0 = 7.5$  bar

liegt in der Mitte zwischen zwei Öffnungen. Man sieht, dass sich der Geradstoß an der ersten Reihe der Öffnungen (Schnittebene  $z = 3 \text{ mm}$ ) stabilisiert und somit die Öffnungen aus der zweiten Reihe sich in der Unterschallzone des Injektorstroms befinden. Dadurch herrscht an der zweiten Reihe ein deutlich höherer Druckgradient und demzufolge ist der Massenstrom hier wesentlich höher als der durch die Öffnungen der ersten Reihe ausgelöste Massenstrom. Es ist deutlich zu erkennen, dass die wirksame Strömungsfläche für die Öffnung in der zweiten Reihe viel größer als für die Öffnung in der ersten Reihe ist. Wie man aus den Machzahlkonturen erkennt, bilden sich in den Hauptströmen an den Öffnungen schräge Verdichtungsstöße mit unterschiedlicher Neigung und formen eine komplexe dreidimensionale Strömung. Die von den Wänden reflektierten Stöße treffen auf die Injektorplatten und rufen Grenzschichtablösungen hervor, die aber in den drei Ebenen mit einem Abstand von  $1.5 \text{ mm}$  sehr unterschiedlich sind. Es ist erkennbar, dass die stärkste Ablösung in der Schnittebene  $z = 0 \text{ mm}$  stattfindet, was einerseits durch eine intensivere Überströmung, aus der die Bildung einer dickeren Grenzschicht resultiert, und andererseits durch einen stärkeren Verdichtungsstoß mit einem höheren Drucksprung zu erklären ist.

Die dargestellte Schattenaufnahme zeigt auch einen an den Öffnungen stabilisierten Geradstoß, der das System aus den schrägen Verdichtungsstößen abschließt. Es ist zu beachten, dass in der Numerik zweidimensionale Schnitte dargestellt sind, während die Schattenaufnahme eine integrierende Visualisierung der Strömung darstellt. Die senkrechte dunkle Linie vor dem Injektor wird durch die Grenzschichtablösung am Diffusoreinlauf verursacht. Eine detailliertere Beschreibung zur Schattenaufnahme ist in [San03] zu finden.

## 7.3 Intensivierung der Mischung durch die Überströmung

Das Mischungsproblem, das schon bei der Beschreibung der strebenförmigen Injektoren in Abschnitt 6 diskutiert wurde, bleibt noch ungelöst. Zahlreiche Publikationen zu diesem Thema zeigen, dass die Variation des Eindüsungsdrucks hauptsächlich die Penetration des Strahls beeinflusst, aber dennoch die laterale Mischung marginal bleibt. Als Kontrollparameter der Strahlpenetration wird oft das Verhältnis zwischen dem Strahlmoment und dem Moment des Freistroms verwendet [GNCD95, EWDM98].

$$J = \frac{(\rho u^2)_j}{(\rho u^2)_f} = \frac{(\gamma p M^2)_j}{(\gamma p M^2)_f} \quad (7.3)$$

Die experimentelle Untersuchung der Mischung und der Strahlpenetration von Gruber [GNCD95] in Abhängigkeit von der Form der Injektoröffnung und von der Neigung des Strahls zum Freistrom<sup>8</sup> zeigte, dass die Erhöhung des Impulsverhältnisses zur Erhöhung der Penetration für alle drei Injektoren führt. Die Form der Injektoröffnung hat einen sehr geringen Einfluss auf die transversale Penetration, während die Orientierung des Injektors zum Freistrom die wichtigste Rolle spielt. Die laterale Ausbreitung des Strahls im Nahbereich war mit dem elliptischen Injektor um 25% höher als mit dem kreisförmigen senkrechten Injektor, was durch die Bildung von asymmetrischen Wirbeln an der Austrittsebene des elliptischen Injektors zu erklären ist. Die größeren Wirbel, die für die laterale Mischung im Nahbereich verantwortlich sind, werden bei der senkrechten Eindüsung durch die Scherkräfte an der Strahlgrenze bei der Strahlumlenkung und durch die Vorticity in der Strahlgrenzschicht generiert. Bei der schrägen Eindüsung entwickeln sich keine größeren Wirbelstrukturen, und dadurch erfolgt die Mischung im Nahbereich viel langsamer als bei der

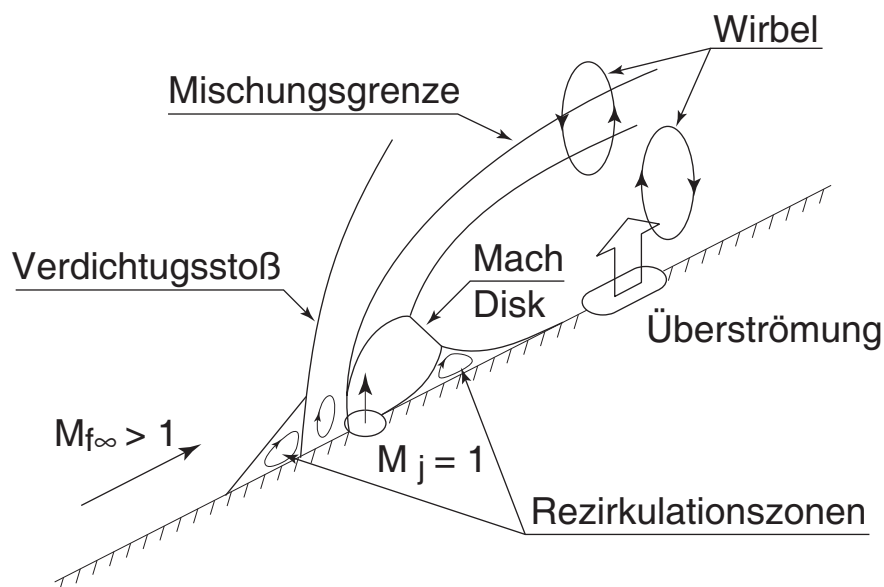
---

<sup>8</sup>Es wurde die Eindüsung von Helium und Kohlendioxid bei  $M_j = 1$  in einen Freistrah von Luft mit  $M_f = 2$  durch drei unterschiedliche Injektoren untersucht: ein kreisförmiger Injektor senkrecht zum Freistrom und mit einem Winkel von  $15^\circ$  zum Freistrom und ein elliptischer Injektor senkrecht zum Freistrom.

transversalen Eindüsung. Die Mischung im Fernbereich ist von der Eindüsungsrichtung unabhängig und bleibt in allen Fällen gering.

Die Überströmung vom Injektor- in den Hauptstrom kann für die Verbesserung der Mischung verwendet werden, da das dabei entstehende transversale Moment zur Bildung von größeren gegeneinander rotierenden Wirbeln führt. Da sich die erste Eindüsungsposition im Hauptstrom vor den Bypassöffnungen befindet, wird dieser Wasserstoffstrahl direkt von der Überströmung beeinflusst. Die dabei gebildete Strömungsstruktur ist schematisch in Abbildung 7.11 dargestellt. Die Eindüsungsöffnung liegt in der Symmetrielinie der Injektorplatte, so dass die Überströmung durch die Bypassöffnung aus der zweiten Reihe, wo der maximale Massenstrom erreicht wird, in den Wasserstoffstrahl eindringt. Die Wechselwirkung zwischen dem Wasserstoffstrahl und der Überströmung findet nach der Umlenkung des Strahls statt, so dass die durch die Umlenkung entstehenden großen Wirbel die primäre laterale Mischung bereits bewirkt haben.

Die dreidimensionale numerische Simulation der Strömung im In-

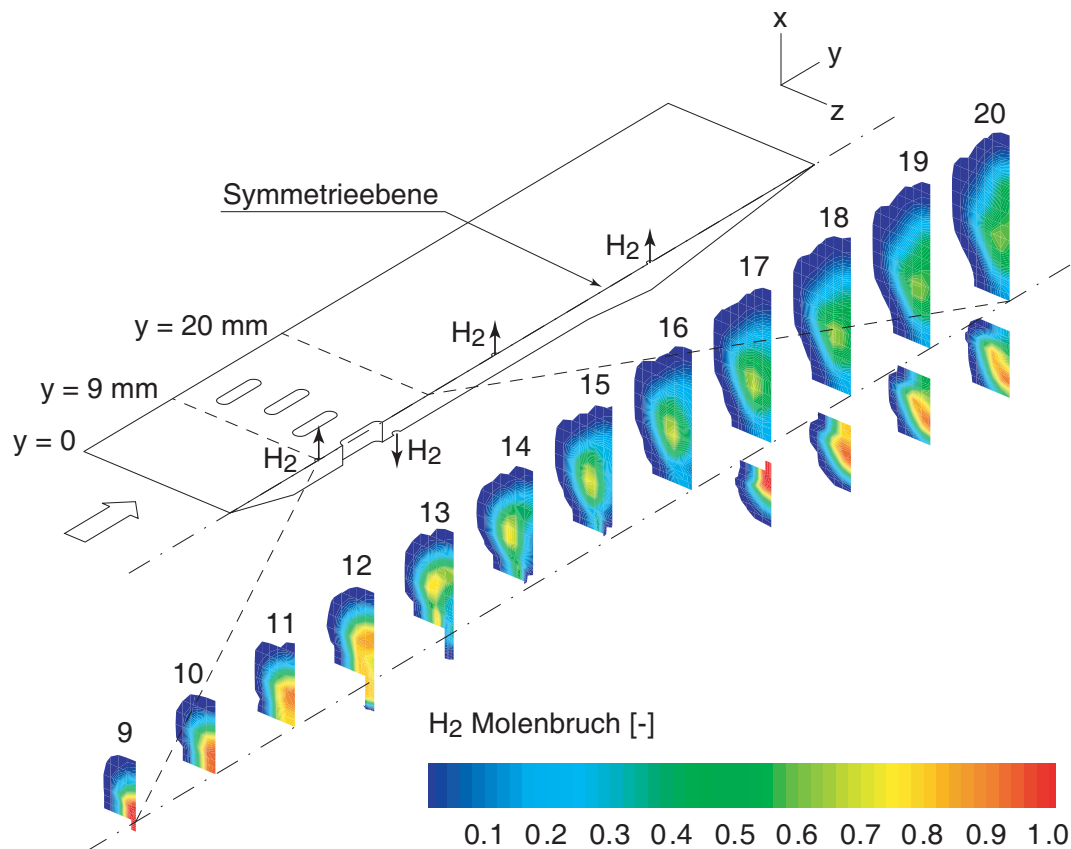


**Abbildung 7.11:** Schematische Darstellung der Strömungsstruktur an der ersten Eindüsungsposition im Hauptstrom

jektorbereich mit Wasserstoffeindüsung bestätigte den beschriebenen Mischungsvorgang. Die Verteilung des Wasserstoffs nach der Eindüsung ist in Abbildung 7.12 detailliert dargestellt. Zu sehen sind die Konturdiagramme des Wasserstoffmolenbruchs in der Schnittebene senkrecht zur Strömungsrichtung mit einem Abstand von jeweils  $1\text{ mm}$ . Die Nummerierung der Schnittebenen entspricht der  $y$ -Koordinate. Zur besseren Darstellung werden nur die Konturen links von der Symmetrieebene gezeigt. Die oberen und die unteren Teile der Verteilungen betreffen den Hauptstrom bzw. den Injektorstrom. Die Visualisierung betrifft nur den Bereich nach der ersten Eindüsungsposition ( $y = 9 \dots 20\text{ mm}$ ), da in diesem Bereich die beschriebenen Mischungsvorgänge auftreten. Die Wasserstoffverteilung an anderen Eindüsungspositionen sowie die Beschreibung der Rechengitter ist in den nächsten Abschnitten zu finden. Es ist anzumerken, dass die dargestellte Simulation bei einer höheren Machzahl ( $M = 2.2$ ) und einem höheren Totaldruck ( $p_0 = 10\text{ bar}$ ) in der Brennkammer durchgeführt wurde. Die Mischung bei den Standardbedingungen ( $M = 2.1$ ,  $p_0 = 7.5\text{ bar}$ ,  $T_0 = 1160\text{ K}$ ,  $p_{0,H_2} = 20\text{ bar}$ ,  $T_{0,H_2} = 300\text{ K}$ ) erfolgt praktisch identisch und die Ergebnisse dazu werden in den nächsten Abschnitten präsentiert.

Man sieht, dass der Wasserstoffstrahl sofort nach der Eindüsung (Schnitt 9) umgelenkt wird und die laterale Mischung bis zur Bypassöffnung (Schnitt 12) sehr langsam verläuft. Durch die Ablösungszone innerhalb der Bypassöffnung dringt der Wasserstoff teilweise in die Öffnung ein (Schnitt 12). Die durch die Öffnung strömende Luft teilt den Wasserstoffstrahl in zwei Teile und produziert zwei gegeneinander rotierende Wirbel (Schnitte 13, 14, 15). Das führt zu einer Intensivierung der lateralen Mischung und der Wasserstoff verteilt sich gleichmäßig innerhalb zweier elliptischer Wolken (Schnitt 16). Zu bemerken ist, dass nur eine Seite des Wasserstoffstrahls dargestellt ist. Die beiden Wolken wachsen zusammen (Schnitte 17, 18, 19, 20), so dass ca.  $11\text{ mm}$  nach der Eindüsung ein Bereich mit gleichmäßiger Luft-Wasserstoff-Mischung auftritt. Der Molenbruch des Wasserstoffs innerhalb dieses Bereichs beträgt ca.  $0.5$ . Der optimale Molenbruch ( $\phi = 1$ ) kann durch die Reduzierung des Wasserstoffeindüsungs-



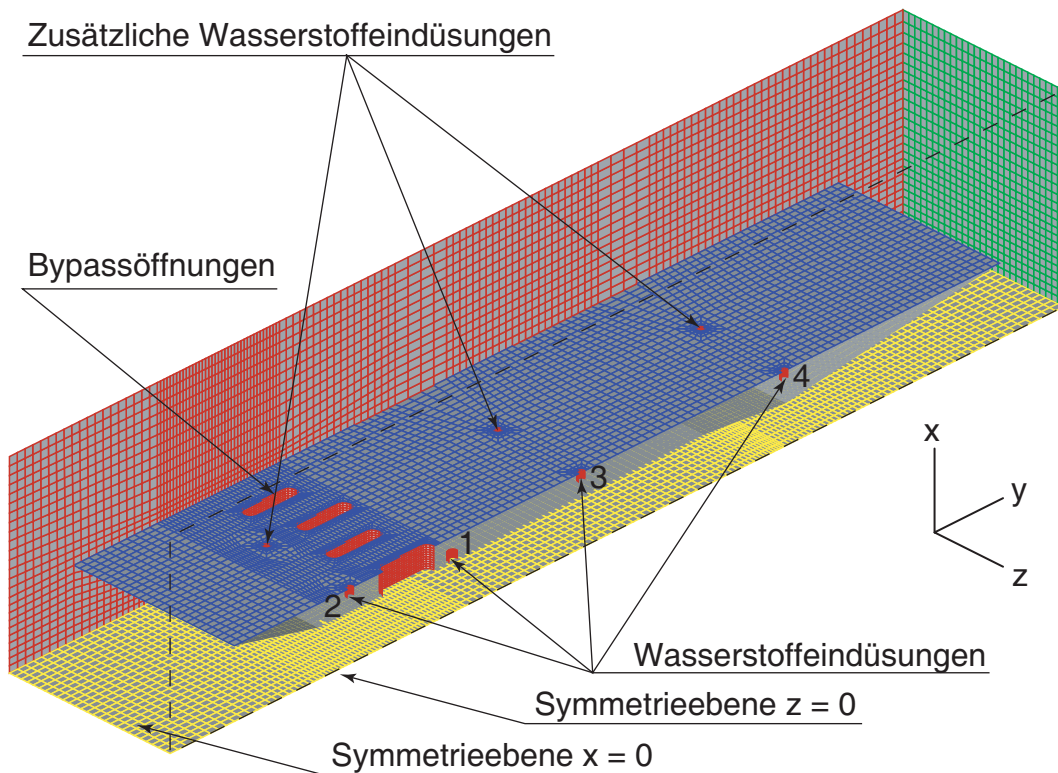


**Abbildung 7.12:** Mischungsverbesserung durch die Überströmung. Simulationsergebnisse.  $M = 2.2$ ,  $p_0 = 10 \text{ bar}$ ,  $T_0 = 1160 \text{ K}$ ,  $p_{0,H_2} = 30 \text{ bar}$ ,  $T_{0,H_2} = 300 \text{ K}$

drucks erreicht werden, was auch zusätzlich zu einem schwächeren Verdichtungsstoß und zur Reduzierung der Verluste im Hauptstrom führt.

## 7.4 Rechengitter

Für die numerische Simulation der Strömungs- und Reaktionsvorgänge im Injektorbereich wurde ein strukturiertes Rechengitter verwendet, das in Abbildung 7.13 dargestellt ist. Zahlreiche Versuche, ein unstrukturiertes Netz in den Bereichen mit den Eindüsungsöffnungen und den Bypassöffnungen zu verwenden und damit die Zeit



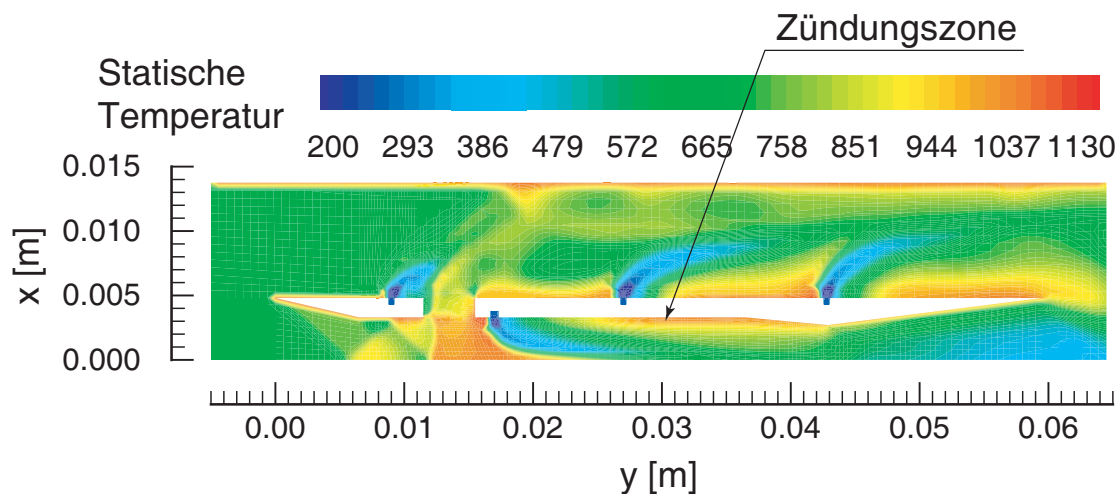
**Abbildung 7.13:** Rechengitter

für die Gittergenerierung zu reduzieren, führten zu einer unphysikalischen Strömungsstruktur in diesen Bereichen. Das strukturierte Netz bringt auch eine schnellere Konvergenz mit sich. Wie man in Abbildung 7.13 sieht, besteht das Rechengitter aus zwei Bereichen mit unterschiedlichem Feinheitsgrad. Das gröbere Netz hat eine mittlere Zellenlänge von  $0.5\text{ mm}$ , während das feinere Netz im Bereich der Bypassöffnungen und der Eindüsungsöffnungen eine Zellenlänge von  $0.125\text{--}0.25\text{ mm}$  besitzt. Die konstruktive Ausführung des Injektors erlaubt, zwei Symmetrieebenen in der Simulation zu verwenden und dadurch das Rechengebiet um  $75\%$  zu verkleinern. Für die Parameterstudie wurden bei der Gittergenerierung vier zusätzliche Wasserstoffeindüsungen vorgesehen, die wie die nummerierten Haupteindüsungen (Abbildung 7.13) in  $y$ -Richtung verteilt sind und in der Mitte zwischen der Symmetrieebene und der Wand liegen.

## 7.5 Mischung, Zündung und Reaktionsausbreitung im Injektorbereich

Die dreidimensionale Simulation der Strömung mit Wasserstoffeindüsung ohne Berechnung der chemischen Reaktion ("kalte" Lösung) wurde zuerst durchgeführt. Dies geschah, um einerseits die Wasserstoffverteilung und das Temperaturfeld und somit die potenziellen Zündungszonen zu erkennen, und andererseits ist die nicht reagierende Lösung als Anfangsbedingung für die Berechnung der Reaktion notwendig. Der Wasserstoff wurde mit einem Totaldruck  $p_{0,H_2}$  von 20 bar und einer Totaltemperatur  $T_{0,H_2}$  von 300 K durch die Öffnungen in der Symmetrieebene  $z = 0$  eingedüst. Die Machzahl, der Totaldruck und die Totaltemperatur der Luft betragen 2.1, 7.5 bar bzw. 1160 K. Das Temperaturfeld in der Symmetrieebene  $z = 0$  ist in Abbildung 7.14 dargestellt. Man sieht, dass nach dem Geradstoß im Injektorstrom sich an den Öffnungen ein Hochtemperaturbereich ausbildet. Durch die Mischung mit dem kalten Wasserstoff sinkt die statische Temperatur unter die Zündgrenze. Hinter dem Wasserstoffstrahl wird eine Rezirkulationszone gebildet (Abbildung 7.14), in der sowohl die Strömungsgeschwindigkeit gering ist, als auch eine perfekte Vermischung mit einer hohen statischen Gemischtemperatur erreicht wird.

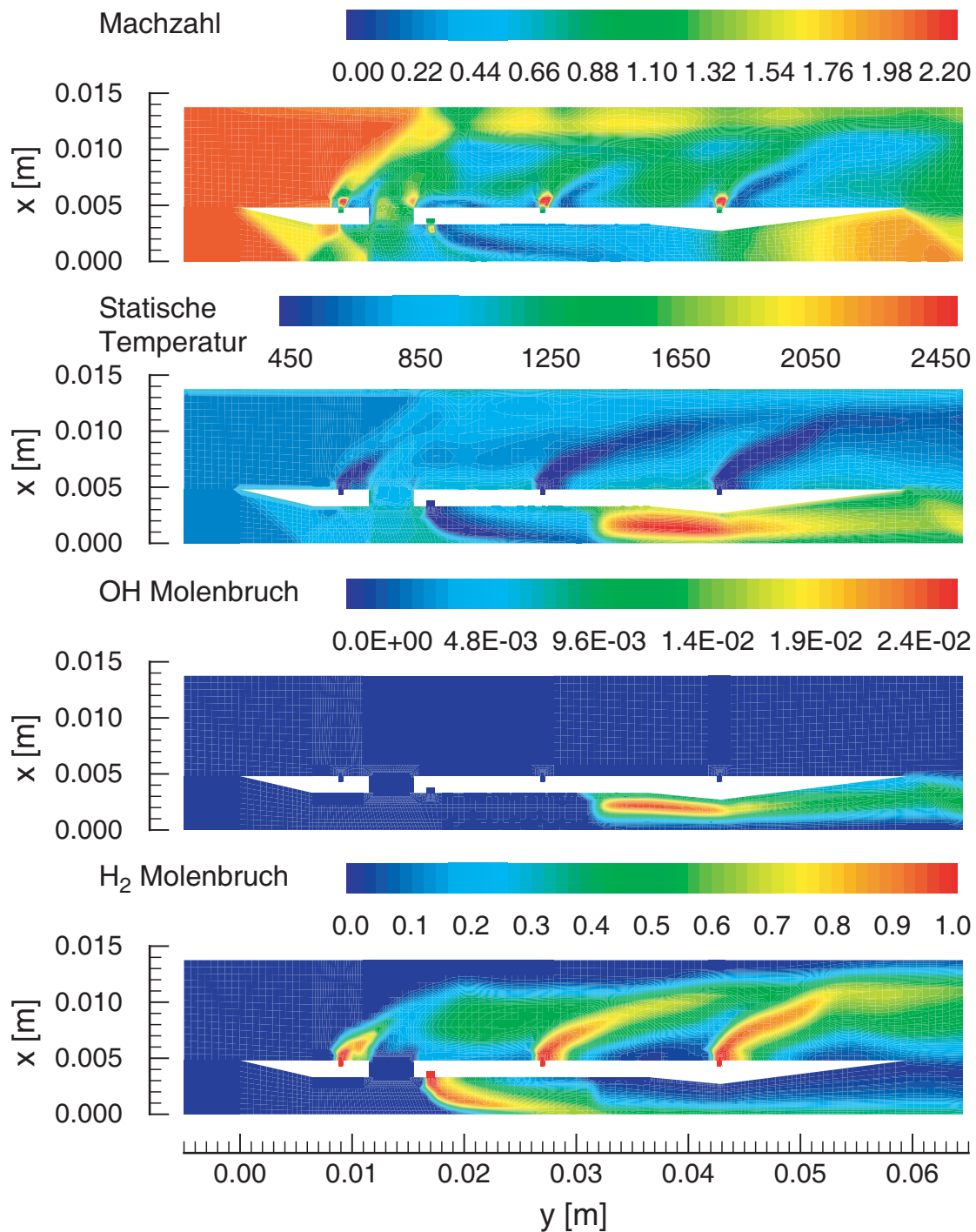
Die Berechnung der chemischen Reaktion bestätigt, dass die Zündung in diesem Bereich stattfindet. Die Simulationsergebnisse zur reagierenden Strömung sind detailliert in den Abbildungen 7.15, 7.17, 7.18 dargestellt. In Abbildung 7.16 ist die experimentelle Aufnahme der Flammeneigenfluoreszenz zu sehen. Das Stoßsystem bleibt stabil, wie man aus der Machzahlkontur (Abbildung 7.15) erkennen kann, und der Geradstoß wird an den Bypassöffnungen stabilisiert. In der Düse findet die Wiederbeschleunigung des Injektorstroms statt. Die Konturdiagramme der statischen Temperatur, der  $H_2$ - und  $OH$ -Molenbrüche in der Symmetrieebene ( $z = 0$ ) zeigen, dass sich im Injektorstrom zwei symmetrische Reaktionszonen ausbilden (in Abbildung 7.15 ist nur die obere Hälfte gezeigt). Der



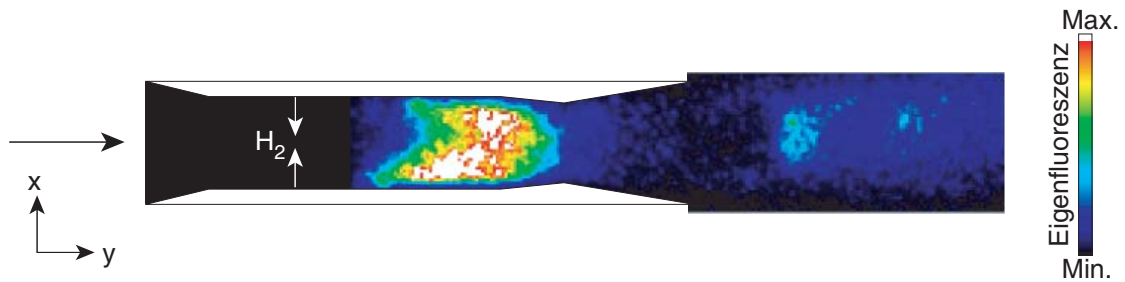
**Abbildung 7.14:** Nichtreagierende Strömung. Statische Temperatur in der Symmetrieebene ( $z = 0$ ).  $M = 2.1$ ,  $p_0 = 7.5 \text{ bar}$ ,  $p_{0,H_2} = 20 \text{ bar}$ ,  $T_0 = 1160 \text{ K}$ ,  $T_{0,H_2} = 300 \text{ K}$ .

Grund dafür ist die beschriebene Rezirkulationszone hinter dem Wasserstoffstrahl, die eine gute Vermischung der Edukte forciert. Zusätzlich spielt die Grenzschicht an den Injektoroberflächen eine wichtige Rolle für die Zündung. Die Position und die Form der Reaktionszone korrelieren sehr gut mit den experimentellen Aufnahmen des Eigenfluoreszenzsignals (Abbildung 7.16). Durch die Beschleunigung in der Düse sinken die statische Temperatur und die Radikalkonzentration ab, wodurch das Eigenfluoreszenzsignal unterhalb der Detektionsgrenze der Kamera liegt. Nach der Düse treten Verdichtungsstöße an den Hinterkanten des Injektors auf, die die Reaktion intensivieren. Die statische Temperatur und die Radikalkonzentration steigen. Dieser Vorgang ist sowohl in den numerischen Ergebnissen (Abbildung 7.15) als auch in der experimentellen Aufnahme deutlich zu sehen.

Eine detaillierte Erklärung der Zündung und der Reaktionsausbreitung im Injektorstrom liefert die Analyse der Wasserstoff- und der  $OH$ -Radikalenverteilungen in den Schnittebenen senkrecht zur Strömungsrichtung (Abbildungen 7.17, 7.18). Die Darstellung der

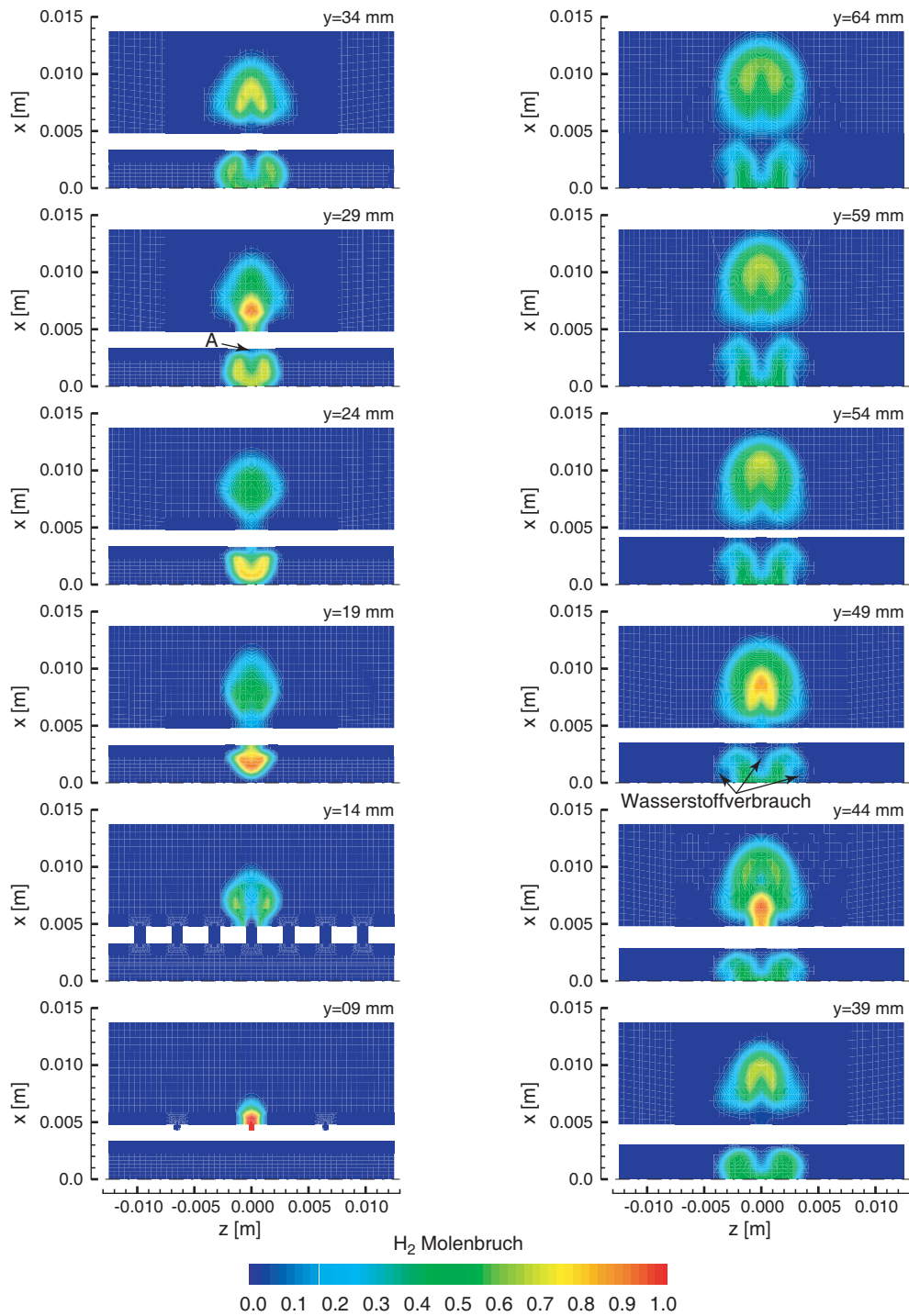


**Abbildung 7.15:** Reagierende Strömung. Wasserstoffverteilung, Machzahl und statische Temperatur in der Symmetrieebene ( $z = 0$ ).  $M = 2.1$ ,  $p_0 = 7.5 \text{ bar}$ ,  $p_{0, H_2} = 20 \text{ bar}$ ,  $T_0 = 1160 \text{ K}$ ,  $T_{0, H_2} = 300 \text{ K}$ .

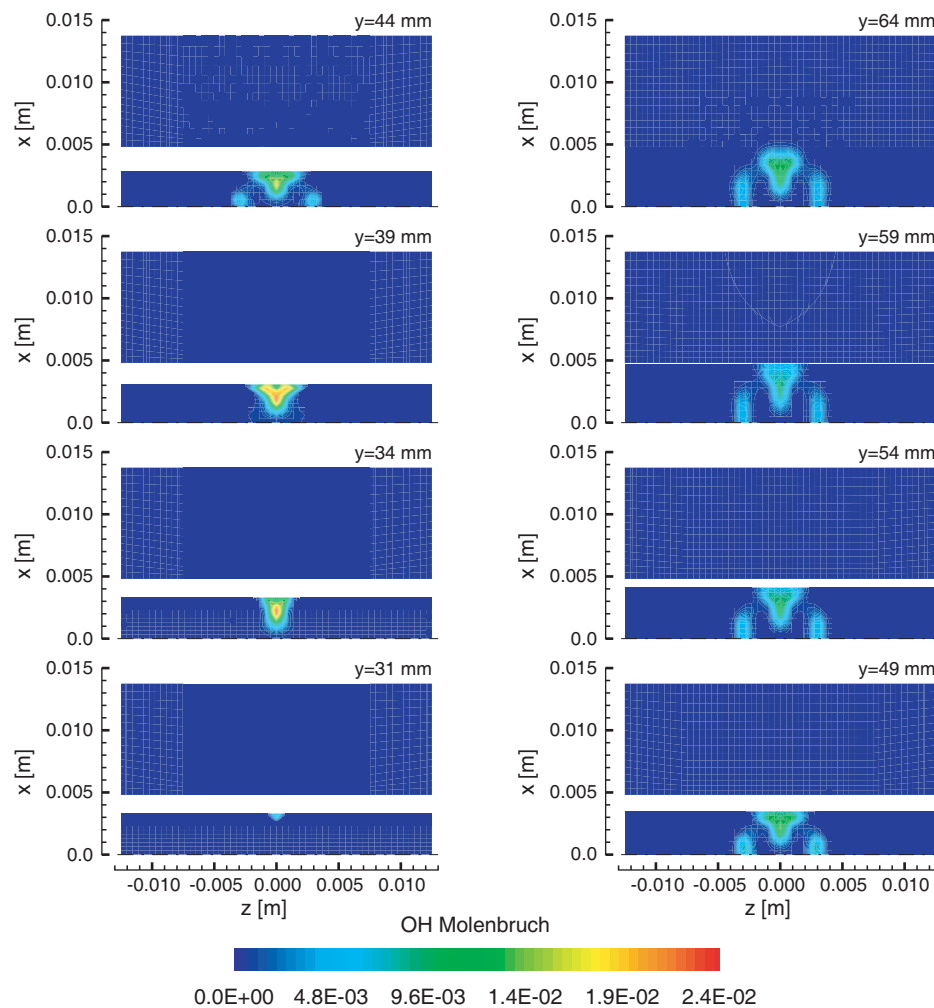


**Abbildung 7.16:** Reaktion im Injektorstrom.  $M = 2.1$ ,  $p_0 = 7.5 \text{ bar}$ ,  $p_{0,H_2} = 20 \text{ bar}$ ,  $T_0 = 1150 \text{ K}$ ,  $T_{0,H_2} = 300 \text{ K}$ .

Wasserstoffverteilung beginnt bei  $y = 9 \text{ mm}$ , was der ersten Eindüsungsposition (Position 2 in Abbildung 7.13) im Hauptstrom entspricht. Die Schnittebenen mit der Verteilung des  $OH$ -Radikals beginnen erst bei  $y = 31 \text{ mm}$ , was der Zündungsposition in der Grenzschicht der Rezirkulationszone entspricht. Die gegenüberliegende symmetrische Eindüsung im Injektorstrom führt dazu, dass die dabei entstehenden gegeneinander rotierenden Wirbelpaare jeden Wasserstoffstrahl aufteilen. Der Wasserstoff verteilt sich innerhalb der kreisförmigen Bereiche, die sich an den beiden Symmetrieebenen berühren (Schnitte  $y = 19 - 39 \text{ mm}$ , Abbildung 7.17). Da sich die statische Temperatur nach dem Geradstoß nur durch den Mischvorgang ändert, existiert eine reziproke Korrelation zwischen der Temperatur und der Wasserstoffkonzentration, d.h. je niedriger die Konzentration desto höher die Gemischtemperatur. Man sieht, dass die günstigsten Bedingungen für eine Zündung, die den in Abschnitt 6.5 beschriebenen Zündkriterien von Huber entsprechen, in Punkt A (Schnitt  $y = 29 \text{ mm}$ , Abbildung 7.17) erreicht werden. Der Molenbruch von 0.3 entspricht dem Äquivalenzverhältnis der Mischung von ca. 0.2. Das Gemisch zündet bei  $y \approx 31 \text{ mm}$ , was im entsprechenden Schnitt in Abbildung 7.18 zu sehen ist. Die Reaktion breitet sich zuerst schnell im Bereich zwischen den Wasserstoffwolken (Schnitte  $y = 31 - 34 \text{ mm}$ , Abbildung 7.18) und danach rund um die Wasserstoffstrahlen aus (Schnitte  $y = 39 - 49 \text{ mm}$ ). Die weitere Entwicklung der Reaktion wird vollständig durch die Mi-



**Abbildung 7.17:** Reagierende Strömung. Wasserstoffverteilung.  $M = 2.1$ ,  $p_0 = 7.5$  bar,  $p_{0,H_2} = 20$  bar,  $T_0 = 1160$  K,  $T_{0,H_2} = 300$  K.



**Abbildung 7.18:** Reagierende Strömung. Konturdiagramm des  $OH$ -Molenbruchs.  $M = 2.1$ ,  $p_0 = 7.5 \text{ bar}$ ,  $p_{0,H_2} = 20 \text{ bar}$ ,  $T_0 = 1160 \text{ K}$ ,  $T_{0,H_2} = 300 \text{ K}$ .

schung kontrolliert, was aus dem Verbrauch des Wasserstoffs (Schnitte  $y = 39 - 64 \text{ mm}$ , Abbildung 7.17) zu sehen ist. Die Radikalkonzentration fällt während der Beschleunigung in der Düse (Schnitte  $y = 44 - 59 \text{ mm}$ , Abbildung 7.18) und steigt sofort nach dem Düsenende wieder an (Schnitt  $y = 64 \text{ mm}$ ), wobei die Verdichtungsstöße an den Hinterkanten des Injektors zu einer Intensivierung der Reaktion führen. Die radikalenreiche Zone liegt optimal an der Grenze zwischen dem Injektorstrom und dem Hauptstrom. Es ist deutlich zu



erkennen, dass das Äquivalenzverhältnis der Mischung im Injektorstrom nach der Düse größer als eins ist und ein vollständiger Wasserstoffverbrauch in diesem Bereich nicht erreicht wird. Aus diesem Grund ist es sinnvoll, für zukünftige Optimierungsarbeiten mit einem geringeren Eindüsungsdruck aber mit mehreren Eindüsungspositionen zu arbeiten.

Man sieht, dass im Hauptstrom an den Öffnungen der in Abschnitt 7.3 beschriebene Mischungsvorgang stattfindet. Die Vermischung des an den Positionen 3 und 4 eingedüsten Wasserstoffs ist nicht so effizient wie an der zweiten Position. Das Äquivalenzverhältnis im Mischungsbereich liegt bereits nach der ersten Eindüsung deutlich über eins und die Eindüsungen 3 und 4 führen zu einer Ausbildung eines sehr fetten Gemisches in der Mitte des Mischungsbereiches, das genauso wie im Injektorstrom nicht vollständig verbrennen wird. Deswegen ist es sinnvoll, auch im Hauptstrom mit einem geringeren Eindüsungsdruck zu arbeiten und mehrere Eindüsungspositionen im Hauptstrom vor den Bypassöffnungen anzuordnen.

Trotz eines zu hohen Äquivalenzverhältnisses in der Mitte des Mischungsbereiches im Hauptstrom (Schnitt  $y = 64 \text{ mm}$ , Abbildung 7.17) liegt ein optimales Gemisch am Rand des Bereiches vor und trifft nach der Hinterkante des Injektors auf die radikalenreiche Zone des Injektorstroms, was eine intensive Reaktionsausbreitung in den Hauptstrom gewährleistet. Die numerischen Untersuchungen zur Flammenausbreitung im Hauptstrom werden im nächsten Abschnitt vorgestellt.

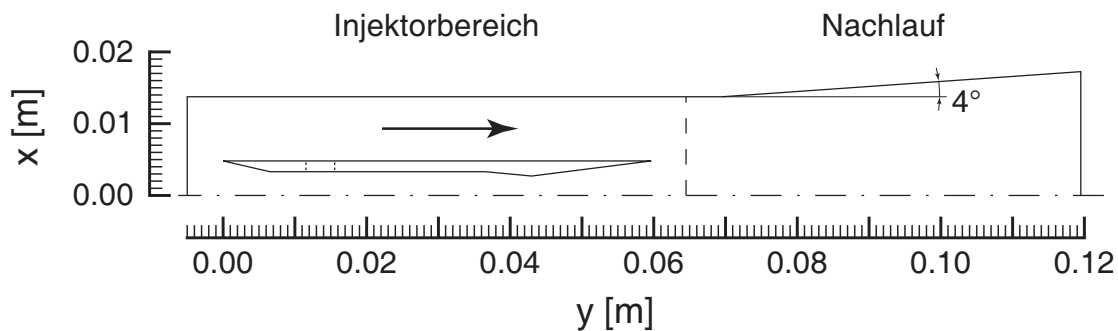
Dadurch dass die Zündung in der Grenzschicht der Rezirkulationszone hinter dem Wasserstoffstrahl stattfindet, und die Grenzschicht wegen der begrenzten Rechnerkapazität nicht vollständig aufgelöst werden kann, zeigen die numerischen Untersuchungen eine untere Totaltemperaturgrenze von  $1150 - 1160 \text{ K}$  für die Selbstzündung, während im Experiment eine Selbstzündung ab ca.  $900 \text{ K}$  beobachtet wurde. Durch den kurzen Abstand zwischen der Eindüsung und der Reaktionszone ist der Einfluss der zeitlichen Inhomogenitäten

sowohl von Temperatur als auch von Konzentrationen auf die Reaktion nicht auszuschließen. Wie in Abschnitt 3.5 analysiert wurde, führt die Berücksichtigung der Fluktuationen zur Selbstzündung bei geringerer Temperatur, wobei die dominante Rolle von den Temperaturfluktuationen übernommen wird. Die Untersuchung eines solchen Einflusses ist das Thema für zukünftige Arbeiten. Abgesehen von der Grenzschichtauflösung und den zeitlichen Fluktuationen besteht auch eine Unsicherheit in Hinblick auf den Reaktionsmechanismus, da dessen Schwächen genau im betrachteten Temperaturbereich auftreten. Trotzdem zeigen die numerischen und die experimentellen Ergebnisse identische Strömungs- und Reaktionsvorgänge und bestätigen die Funktionsfähigkeit des entwickelten Zweistrom-Injektor-Konzeptes.

## 7.6 Reaktionsausbreitung im Nachlauf des Injektors

Um die Flammenausbreitung in den Hauptstrom zu untersuchen, wurde für die numerischen Arbeiten ein divergentes Brennkammersegment mit einem Expansionswinkel von  $4^\circ$  verwendet (Abbildung 7.19). Aus Rechnerleistungsgründen wurde der Nachlauf getrennt berechnet, d.h. die Austrittsbedingungen am Ende des Injektorbereiches wurden als Eintrittsbedingungen für den Nachlauf eingesetzt. Es wurde ein homogenes strukturiertes Rechengitter mit gleicher Diskretisierung wie im Injektorbereich verwendet, wobei die beiden Simulationsbereiche am Interface knotenkompatibel sind. Der Simulationsbereich wurde wieder durch die Verwendung von Symmetrieebenen reduziert.

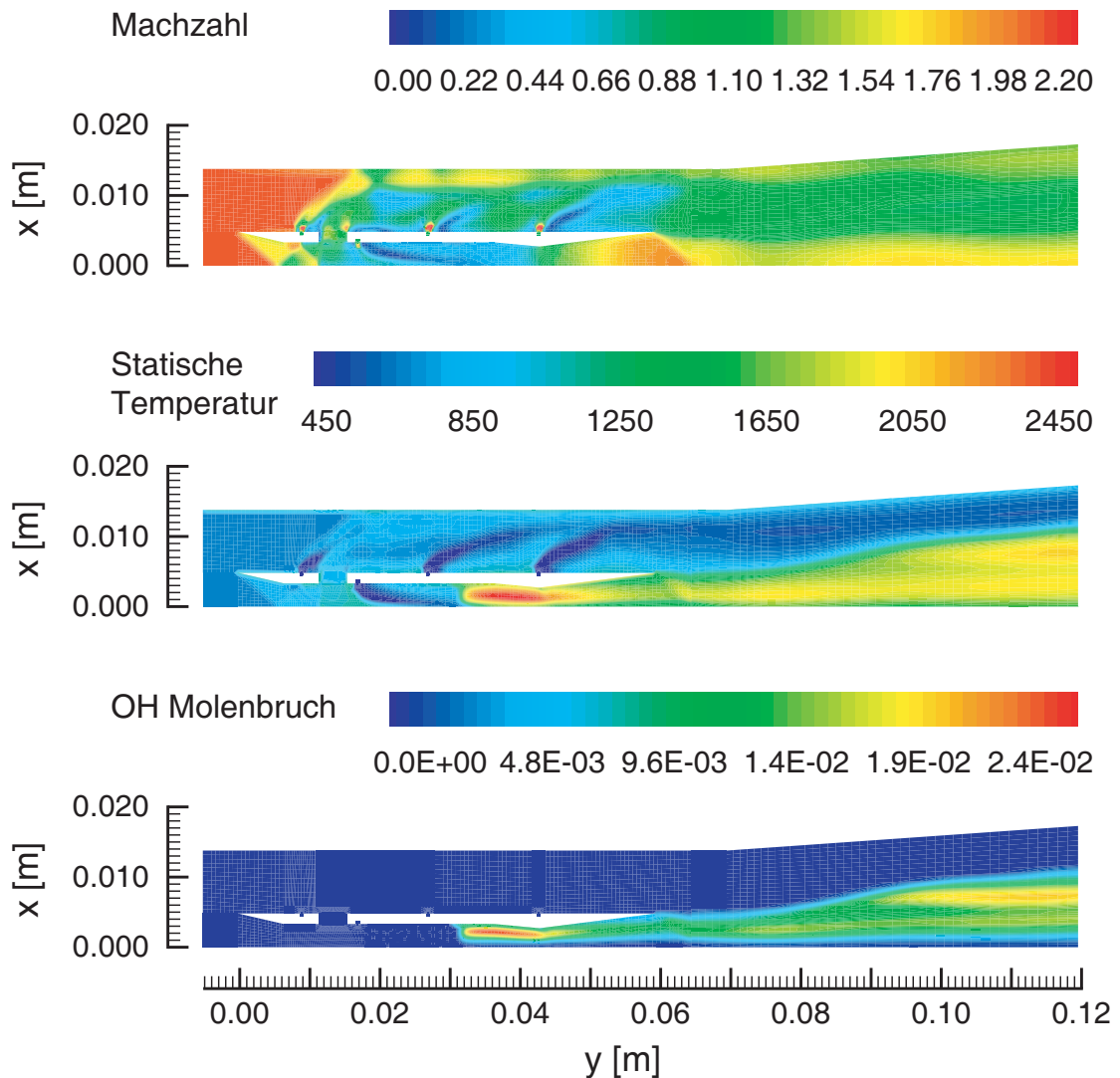
Zur Verdeutlichung sind die Ergebnisse der Nachlaufsimulation als Konturdiagramme in der Symmetrieebene ( $z = 0$ ) zusammen mit den Ergebnissen aus der Simulation des Injektorbereiches dargestellt. In Abbildung 7.20 sind die Konturdiagramme der Machzahl, der statischen Temperatur und des  $OH$ -Molenbruchs zu sehen. Es ist zu er-



**Abbildung 7.19:** Geometrie des Nachlaufsegments

kennen, dass in der Symmetrieebene, d.h. im Nachlauf des Injektors, eine höhere Machzahl erreicht wird, wobei die Machzahl im Hauptstrom durch die hohe Konzentration des Wasserstoffs und durch die erst langsam fortschreitende Reaktion nahe bei eins liegt. Durch die Scherkräfte in der Scherschicht zwischen Injektor- und Hauptstrom findet eine schnelle Vermischung zwischen dem radikalenreichen reagierenden Injektorstrom und dem Wasserstoff–Luft-Gemisch aus dem Hauptstrom statt, und die Reaktion breitet sich in den Hauptstrom aus. Gleichzeitig zur Reaktionsausbreitung findet die Strömungsexpansion statt. Demzufolge ist die Verbrennungstemperatur deutlich niedriger als in der Vorbrennkammer. Aus dem Konturplot des  $OH$ -Molenbruchs sind ab ca.  $y = 90\text{ mm}$  zwei getrennte Reaktionsbereiche, deutlich zu erkennen, die dem Injektorstrom und dem Hauptstrom entsprechen.

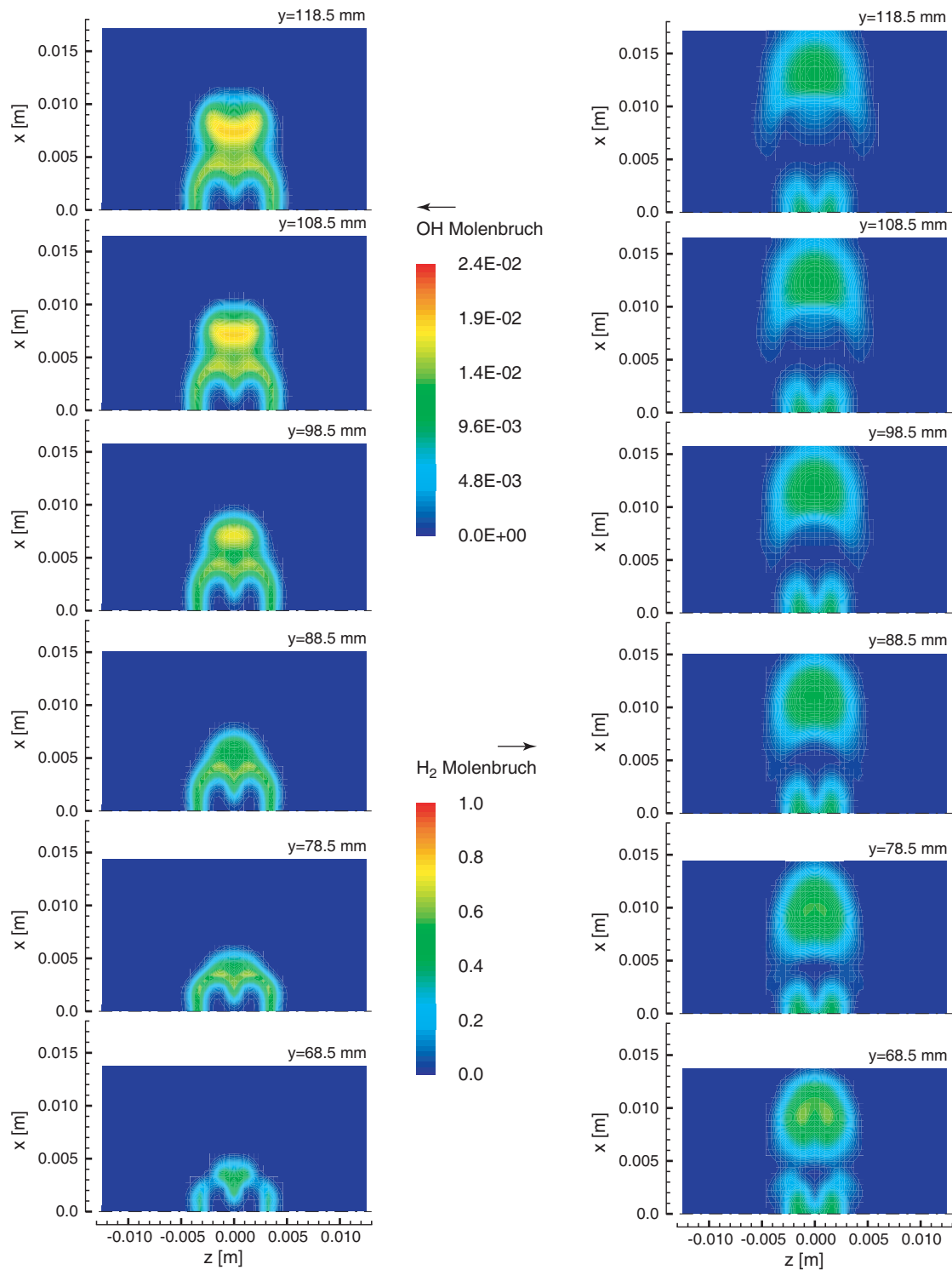
Um den Mechanismus der Reaktionsausbreitung besser zu verstehen, sind die Konturdiagramme der Wasserstoff- und der  $OH$ -Molenbrüche in den Schnittebenen senkrecht zur Strömungsrichtung in Abbildung 7.21 dargestellt. Zuerst wird die Reaktion im Injektorstrom intensiver und umfasst den Querschnitt mit Brennstoff vollständig. Danach breitet sich die Reaktionszone in den Hauptstrom aus. Man sieht, dass das fettere Gemisch deutlich langsamer reagiert und die Reaktion sich rund um die Wasserstoffwolke ausbreitet, wo das Äquivalenzverhältnis unter eins oder nahe bei eins liegt. Stromab vom Injektor ist die Mischung quer zur Hauptströmungs-



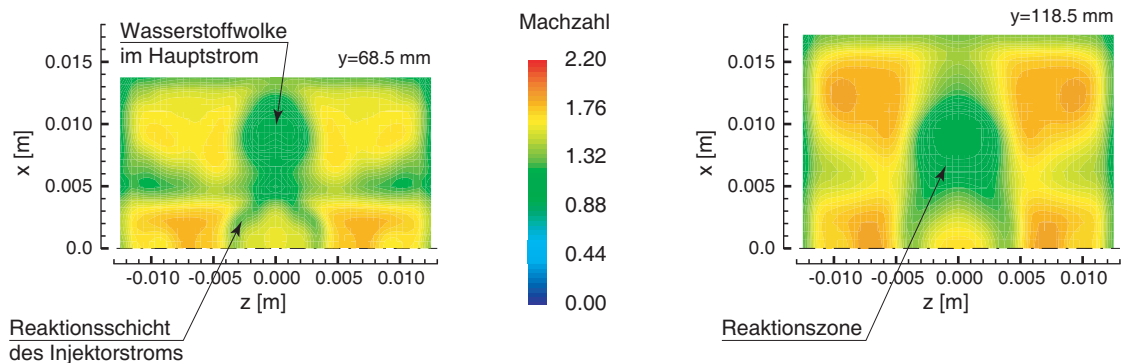
**Abbildung 7.20:** Reaktionsausbreitung im Nachlauf des Injektors

richtung sehr schwach, so dass auch bei massiver Verlängerung der Brennkammer Bereiche ohne Brennstoff bleiben. Es ist davon auszugehen, dass der Wasserstoff in Gebieten mit Luftüberschuss in einer verlängerten Brennkammer vollständig ungesetzt werden kann, aber dennoch der Überschussbrennstoff in den Luftmangelzonen emittiert wird.

Die Konturdiagramme der Machzahl in den Schnittebenen senkrecht zur Strömungsrichtung am Anfang und am Ende des Nachlaufseg-



**Abbildung 7.21:** Reaktionsausbreitung im Nachlauf des Injektors. Konturdiagramme  $OH-$  (links) und  $H_2-$ Molenbruch (rechts).



**Abbildung 7.22:** Beschleunigung der Strömung im Nachlauf des Injektors. Konturdiagramme der Machzahl.

ments (Abbildung 7.22) liefern Informationen über die Strömungsform. Man sieht, dass sich nach dem Injektor eine Strömung mit einer räumlich inhomogenen Machzahlverteilung ausbildet. Die Bereiche mit einer Machzahl nahe bei eins werden sowohl durch die Wärmefreisetzung im Injektorstrom als auch durch die Änderung der Gaseigenschaften im Hauptstrom<sup>9</sup> verursacht. Die Strömungsexpansion im divergenten Teil des Nachlaufsegmentes führt zu einer Erhöhung der Machzahl in den nichtreagierenden Strömungszonen und verhindert ein thermisches Blockieren.

Da die experimentellen Untersuchungen der Reaktionsausbreitung in den Hauptstrom im Freistrahler erfolgten, d.h. ohne das Nachlaufsegment, können die numerischen und experimentellen Ergebnisse nicht direkt verglichen werden. Die experimentellen Ergebnisse zur Verbrennung im Nachlauf des Injektors im Freistrahler sind in [San03] zu finden.

<sup>9</sup>Die Gaskonstante für Wasserstoff ist wesentlich größer als für Luft. Dadurch ist die Machzahl eines Wasserstoff-Luft-Gemisches niedriger als die Machzahl reiner Luft bei der gleichen Strömungsgeschwindigkeit und Temperatur.

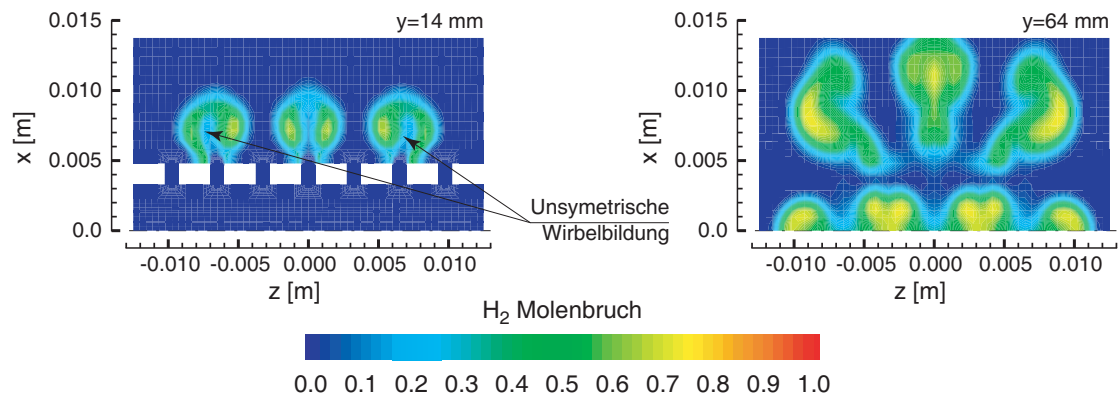
## 7.7 Parameterstudie

Um die Sensitivität des Zweistrom-Konzeptes auf die Änderung der Anström- und Eindüsungsparameter zu untersuchen und Optimierungsrichtlinien zu finden, wurden mehrere Simulationen mit unterschiedlichen Eintrittsbedingungen durchgeführt. Die wichtigsten Ergebnisse und die daraus abgeleiteten Schlussfolgerungen werden in diesem Abschnitt vorgestellt.

Die Aktivierung zusätzlicher Wasserstoffeindüsungsöffnungen (Abbildung 7.13) führt zu einer besseren räumlichen Verteilung des Wasserstoffs. Die Simulationsergebnisse mit allen aktiven Eindüsungspositionen sind in Abbildung 7.24 zu sehen. Die Eintrittsbedingungen entsprechen der in den vorherigen Abschnitten beschriebenen Berechnung, so dass man die Ergebnisse vergleichen kann. Die globalen Äquivalenzverhältnisse für den Injektor- und den Hauptstrom sind in diesem Fall ca. 1.25 bzw. 1.4. Aus den Konturdiagrammen des Wasserstoffmolenbuchs ist deutlich zu erkennen, dass asymmetrische Wirbelstrukturen an den Bypassöffnungen gebildet werden, was zur Deformation der seitlichen Wasserstoffwolken relativ zu den mittleren Wolken führt. Im Injektorstrom führen zusätzliche Eindüsungsöffnungen zur Bildung eines fetteren und kälteren Wasserstoff-Luft-Gemisches. Dadurch werden die Zündkriterien ( $\frac{t_{auf}}{t_r} = Mi \geq 1$ ) in der Vorbrennkammer nicht mehr erfüllt.

Ein anderes interessantes Ergebnis liefert die Untersuchung des Injektors bei einer höheren Anströmmachzahl von 2.2. Gleichzeitig wurden die Totaldrücke sowohl für den Luftstrom als auch für den Wasserstoff erhöht und betragen 10 *bar* bzw. 30 *bar*. Die Erhöhung der Machzahl in der Brennkammer soll einen Betriebszustand mit einer geringeren Verzögerung der Anströmung im Triebwerkeinlauf nachbilden, was zur Minimierung der Verluste des gesamten Antriebssystems führen würde.

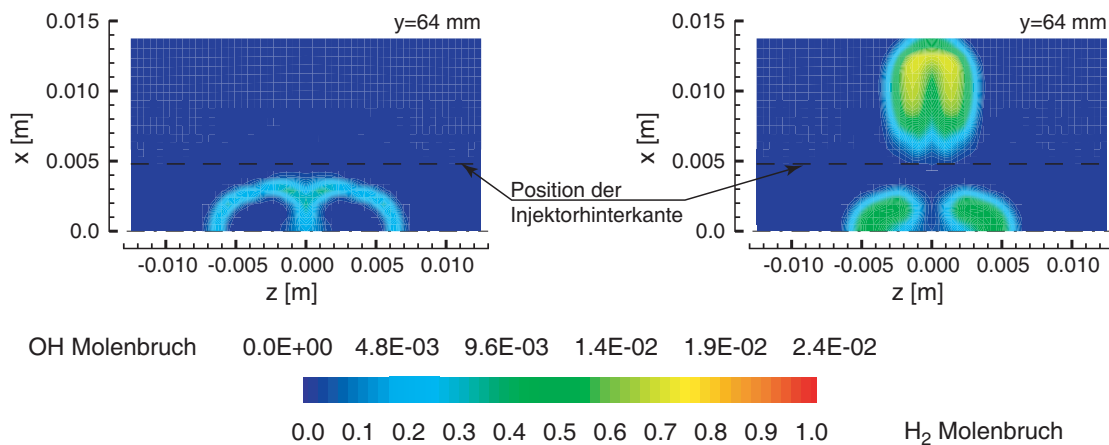
Mischung und Zündung im Injektorbereich sind identisch geblieben. Die Konturdiagramme der Wasserstoff- und *OH*-Molenbrüche in der



**Abbildung 7.23:** Wasserstoffverteilung bei Aktivierung zusätzlicher Wasserstoffeindüisungsöffnungen.  $M = 2.1$ ,  $p_0 = 7.5 \text{ bar}$ ,  $p_{0, H_2} = 20 \text{ bar}$ ,  $T_0 = 1160 \text{ K}$ ,  $T_{0, H_2} = 300 \text{ K}$ .

Schnittebene am Ende des Injektorbereiches sind in Abbildung 7.24 dargestellt. Es ist deutlich zu erkennen, dass eine höhere Konzentration der  $OH$ -Radikale im Injektorstrom im Vergleich zur Eindüisung mit  $20 \text{ bar}$  erreicht wird. Zusätzlich umfasst die Reaktionszone die Wasserstoffstrahlen vollständig und homogen. Der Grund dafür ist eine bessere Vermischung der Edukte in der Vorbrennkammer, die durch einen stärkeren Aufprall der gegeneinander orientierten Wasserstoffstrahlen erreicht wird. Neben der Mischungsverbesserung im Injektorstrom führt der höhere Eindüisungsdruck zum Abheben der Mischzonen von den Injektorplatten. Dadurch ist der Abstand zwischen der Reaktionszone im Injektorstrom und der Wasserstoffwolke im Hauptstrom größer, was die Flammenausbreitung in den Hauptstrom verschlechtert, bzw. eine längere Mischstrecke nach der Injektorhinterkante erfordert. Die Simulation der Strömung im divergenten Nachlauf des Injektors zeigt, dass sich die Reaktion nicht in den Hauptstrom ausbreiten kann, da sich die radikalenreiche Zone und die Wasserstoffwolke im Hauptstrom im divergenten Kanal weiter von einander entfernen. Bei der Verwendung eines nicht expandierenden Nachlaufsegmentes findet die Flammenausbreitung in den Hauptstrom ca.  $100 \text{ mm}$  stromabwärts der Hinterkante statt. Zusätz-





**Abbildung 7.24:** Verteilung des Wasserstoffs und der Reaktionszonen am Ende des Injektorbereichs. Konturdiagramme  $OH$ - (links) und  $H_2$ -Molenbruch (rechts).  $M = 2.2$ ,  $p_0 = 10 \text{ bar}$ ,  $p_{0,H_2} = 30 \text{ bar}$ ,  $T_0 = 1160 \text{ K}$ ,  $T_{0,H_2} = 300 \text{ K}$ .

lich ist das in beiden Strömen ausgebildete Gemisch wesentlich fetter, was zur Verschlechterung des Ausbrands führt.

Die erzielten Ergebnisse liefern eindeutige Hinweise für zukünftige Optimierungsarbeiten. Neben der Mischungsverbesserung im Injektorstrom bzw. der Intensivierung der Reaktion, bringt die Erhöhung des Eindüsungsdrucks mehrere Nachteile. Besonders wichtig ist die Reduzierung des Eindüsungsdrucks bei der Nutzung zusätzlicher Eindüsungspositionen. Die Vermischung der Wasserstoffstrahlen an den Positionen 3 und 4 (vgl. Abbildung 7.13) ist deutlich schlechter als die Vermischung des Wasserstoffstrahls an Position 2. Demzufolge ist es effizienter, die Haupteindüsungen vor den Bypassöffnungen anzuordnen. Die Eindüsungspositionen 3 und 4, die für die Injektor Kühlung von großer Bedeutung sind, sollten mit einem geringeren Druck im Vergleich zu Position 2 versorgt werden und Wasserstoffstrahlen mit einer marginalen Penetration generieren. Dadurch bildet sich eine Wasserstoffschicht nahe der Injektorplatte aus, die einen sicheren Reaktionsausbreitungsvorgang gewährleistet.

Die Simulationsergebnisse bei einer Anströmmachzahl von 2.2 zeigen, dass auch bei höheren Brennkammermachzahlen eine stabile Zündung im Injektorstrom erreicht wird, wobei das Problem der Reaktionsausbreitung in den Hauptstrom durch die Anpassung der Eindüsungsdrücke zwischen den Eindüsungspositionen leicht zu lösen ist. Es ist zu erwarten, dass die beschriebenen Zünd- und Reaktionsvorgänge im Injektorstrom auch bei höheren Brennkammermachzahlen erhalten bleiben, solange ein Geradstoß im Diffusor gebildet wird, und eine Unterschallströmung in der Vorbrennkammer herrscht (Modus 1). Falls bei einer weiteren Erhöhung der Brennkammermachzahl kein Geradstoß mehr gebildet wird und alle drei Ströme im Überschall bleiben, können sich die Zünd- und Reaktionsausbreitungsvorgänge ändern. Dadurch dass eine solche Brennkammermachzahlerhöhung mit der Erhöhung der Flugmachzahl bzw. der Totaltemperatur verbunden ist, wird die Zündung aber nicht mehr der kritische Punkt sein. Die weiteren Untersuchungen des Injektorkonzeptes in Modus 2 sind Themen zukünftiger Arbeiten.

## 7.8 Schlussfolgerungen

Die Idee der radikalenstabilisierten Überschallverbrennung, die aus numerischen und experimentellen Vorarbeiten zur Untersuchung des Vorheizers und der strebenförmigen Injektoren entstand, lässt sich für eine breitbandig arbeitende Überschallbrennkammer nutzen. Die Idee wurde in Form eines neuen Zweistrom-Injektors umgesetzt. Die enge Zusammenarbeit zwischen der Numerik und dem Experiment und die dadurch erreichte komplementäre Analyse der Ergebnisse beschleunigten den Entwicklungsvorgang. Während die numerischen Untersuchungen eine detaillierte Analyse der Strömungs-, Mischungs- und Reaktionsvorgänge ermöglichen, liefern die experimentellen Untersuchungen [San03] wichtige Parameter zu den Betriebsgrenzen, wie z.B. die untere Temperaturgrenze der Selbstzündung und die Verbrennungsintensität in Abhängigkeit des Eindüsungsdrucks. Die Ergebnisse der Untersuchungen zeigen

mehrere Vorteile des Zweistrom-Injektorkonzeptes im Vergleich zu strebenförmigen Injektoren:

- Das Zweistrom-Injektorkonzept zeigt einen stabilen Betrieb über ein breites Spektrum an Eintrittsbedingungen, wobei schon bei einer Flugmachzahl von 4 [San03] eine stabile Verbrennung gewährleistet wird.
- Der Injektor ermöglicht den Einsatz bei höheren Brennkammermachzahlen, was einerseits zur Minimierung der Verluste im Triebwerkeinlauf führt und andererseits das Problem der thermischen Brennkammerüberlastung bei hohen Flugmachzahlen lösen kann. Der Übergang in den vollständigen Überschallmodus erfolgt automatisch mit Erhöhung der Brennkammermachzahl und benötigt keine Geometrieänderung.
- Die Verwendung von Bypassöffnungen zur Stabilisierung des Geradstoßes bietet eine Möglichkeit zur Intensivierung der Vermischung, was zur effizienteren Verbrennung und folglich zur Erhöhung des Brennkammerwirkungsgrades führt.

Die positiven Testergebnisse des Zweistrom-Injektors, die die Funktionsfähigkeit des Konzeptes bestätigen, gestatten es, Gestaltungsregeln für dessen zukünftige Weiterentwicklung auszuleiten. Ein besonderes Augenmerk muss auf folgende Aspekte gelegt werden:

- Das Problem der hohen Sensitivität des Geradstoßes auf den Eindüsungsdruck des Wasserstoffs im Injektorstrom ist durch die Vergrößerung des Abstandes zwischen den Injektorplatten lösbar. Die dafür notwendige Plattenverschiebung liegt innerhalb von 0.5 – 1.0 mm. Die aktive Grenzschichtabsaugung vor dem Injektor ist von großer Bedeutung für einen stabilen Diffusorbetrieb.
- Ein großes Potential zur Erhöhung der Verbrennungseffizienz besteht in der Optimierung der Mischung sowohl in den Hauptströmen als auch im Injektorstrom. Der Einsatz von zusätzlichen

parallelen Eindüsen, die mit unterschiedlichen Eindüsungsdrücken betrieben werden, ermöglicht die Bildung eines brennbaren Gemisches über dem gesamten Querschnitt. Durch die Ergänzung der Wasserstoffeindüsenmatrix mit den Luftstrahlen ist eine Erhöhung der Mischungseffizienz zu erreichen.

- Eine detaillierte Untersuchung des Brennverhaltens bei höheren Machzahlen ( $M > 2.2$ ) ist von großer Bedeutung. Die Bestimmung der Steuerfunktion für die Eindüsungsdrücke der einzelnen Eindüsenöffnungen in Abhängigkeit von der Brennkammermachzahl ist eine wichtige Aufgabe zur Realisierung der Breitbandigkeit des Konzeptes.

## 8 Zusammenfassung und Ausblick

Die vorliegende Arbeit entstand im Teilprojekt B11 zur Entwicklung der SCRamjet-Technologie im Rahmen eines mehrjährigen Forschungsprojektes des Sonderforschungsbereiches 255. Das Teilprojekt B11 hatte in der vierten dreijährigen Forschungsphase die Aufgabe, die während der vorherigen Arbeiten entwickelte Modellbrennkammer detailliert zu untersuchen. Die Schwerpunkte der Arbeit wurden auf die Untersuchung der Strömungs-, Mischungs- und Reaktionsvorgänge in der Brennkammer gelegt. Um eine höhere Forschungseffizienz zu erreichen, wurden numerische und experimentelle Untersuchungen parallel durchgeführt. In der vorliegenden Arbeit wurden die numerischen Ergebnisse vorgestellt, während die Arbeit von Sander [San03] die experimentellen Ergebnisse umfasst.

Diese Arbeit besteht aus zwei wesentlichen Abschnitten, der Weiterentwicklung numerischer Methoden zur Simulation der Überschallverbrennung und dem Einsatz der numerischen Methoden zur Untersuchung der Strömungs-, Mischungs- und Reaktionsvorgänge in Überschallströmungen.

Es ist bekannt, dass die numerische Simulation von Überschallbrennkammern mit einem enormen Rechenaufwand verbunden ist. Daher lag das Hauptaugenmerk bei der Weiterentwicklung der numerischen Methoden auf der numerisch effizienten Modellierung der Reaktionskinetik, deren Berechnung zu den rechenaufwändigsten Operationen gehört. Durch eine detaillierte Analyse der Reaktionsketten wurde gezeigt, dass die bei der Unterschallverbrennung häufig angewandte Reduzierung des Reaktionsschemas nur in einem sehr beschränkten Umfang möglich ist. Die Alternative dafür ist die Verschiebung der Chemieberechnung in das Preprocessing mit der Erzeugung einer hochdimensionalen Lookup-Tabelle, die dann bei der Simulation verwendet wird. Dafür wurde das *Reaction Mapping* Verfahren entwickelt, wobei zuerst eine Lookup-Tabelle gebildet wird, und danach auf Basis der Lookup-Tabelle Interpolationspolynome erzeugt werden, die die Chemieberechnung bei der Simulation übernehmen. Es

wurde gezeigt, dass der Einsatz des entwickelten Verfahrens zu einer enormen Reduzierung des Rechenaufwandes führt. Folglich werden die Voraussetzungen für die Berechnung technisch-relevanter Brennkammerkonfigurationen deutlich verbessert. Besonders vielversprechend ist der Einsatz des *Reaction Mapping* zusammen mit PDF-Methoden, da so ein äußerst recheneffizientes Verbrennungsmodell entsteht, das auch die Turbulenz-Chemie-Wechselwirkung berücksichtigt. Diese Erweiterung ist aber eine Aufgabe für zukünftige Forschungsarbeiten.

Detaillierte numerische und experimentelle Untersuchungen der während der vorherigen Forschungsphase entwickelten Modellbrennkammer, wobei die Flugbedingungen in den Experimenten mit einem wasserstoffbetriebenen Vorheizer simuliert wurden, zeigten einen großen Einfluss des Vorheizerausbrands auf die Reaktionsvorgänge in der Brennkammer, der durch Verbrennungszwischenprodukte in der Testluft zu erklären ist. Dies konnte anfangs mangels geeigneter Messmethoden nicht festgestellt werden und hatte eine falsche Interpretation der Ergebnisse zur Folge. Durch die numerische Untersuchung der Mischungs- und Reaktionsvorgänge im Vorheizer wurde festgestellt, dass durch die unvollständige Vermischung der Edukte die Reaktion im Vorheizer nicht abgeschlossen werden konnte, was neben der Emission von Zwischenprodukten auch zur Erhöhung der Temperaturfluktuationen in der Testluft führte. Die konstruktive Modifizierung des Vorheizers bzw. die Ergänzung des Vorheizers mit einem Vormischer führte zur wesentlichen Verbesserung des Ausbrands, so dass die Zwischenprodukte mit dem optischen Messsystem nicht mehr detektiert werden konnten [San03]. In dieser Konfiguration stellt der Wasserstoffvorheizer eine kostenattraktive Alternative im Vergleich zu komplizierten Heizsystemen, wie z.B. elektrischen Vorheizern dar.

Die Grundlage für die Realisierung einer SCRamjet-Brennkammer ist das Injektordesign, das eine effiziente Mischung bei geringen Totaldruckverlusten gewährleisten muss. In Rahmen der Forschungsarbeiten wurden zwei strebenförmige Injektordesigns untersucht,

ein massiver Pylon-Injektor mit Rampen zur Erzeugung der Sekundärwirbel aus der vorherigen Forschungsphase und ein schlanker strebenförmiger Injektor ohne wirbelerzeugende Eigenschaften. Die Brennkammer reagiert sehr unterschiedlich auf die Modifizierung des Vorheizers in Abhängigkeit vom verwendeten Injektortyp. Der massive Pylon-Injektor gewährleistet immer eine stabile Zündung und Reaktion unabhängig von der Vorheizerkonfiguration, er produzierte aber, wie die experimentellen Untersuchungen zeigten [San03], inakzeptable Totaldruckverluste. Im Gegensatz dazu reagiert das Brennverhalten beim schlanken Injektor, der deutlich geringere Totaldruckverluste verursacht, sehr sensibel auf die Änderung des Betriebszustands des Vorheizers. Während eine stabile Zündung und Reaktion bei der Originalkonfiguration des Vorheizers beobachtet wurde, konnte ein stabiler Verbrennungsvorgang nach der Modifizierung des Vorheizers nicht gewährleistet werden. Einerseits ist das induzierte Stoßsystem zu schwach, um die Bedingungen für die Selbstzündung des Brennstoffs zu schaffen. Andererseits können die strebenförmigen Injektoren ohne spezielle Eigenschaften zur Erzeugung von Sekundärströmung nur eine mäßige laterale Mischung gewährleisten. Außerdem wurde für den schlanken Injektor in Bezug auf die Zündung eine obere Temperaturgrenze entdeckt. Das bedeutet, dass auch bei Totaltemperaturen oberhalb dieser Temperaturgrenze keine Zündung mehr stattfindet. Diese Ergebnisse deuten darauf hin, dass derartige Injektoren für einen breitbandigen Betrieb (Flugmachzahl) ungeeignet sind.

Die durchgeführten Untersuchungen des Vorheizers und des Brennverhaltens von strebenförmigen Injektoren zeigten, dass die Stabilisierung der Selbstzündung und der Reaktionsausbreitung durch Zwischenprodukte viel effektiver ist als die Stabilisierung durch ein Stoßsystem. Eine solche Stabilisierung reagiert relativ unsensibel auf die Strömungsbedingungen und kann den breitbandigen Betrieb der Brennkammer gewährleisten. Zusätzlich verursacht die Radikalenstabilisierung allein keine gasdynamischen Totaldruckverluste.

Die Idee der radikalenstabilisierten Überschallverbrennung wurde

---

im Rahmen der Arbeit durch die Entwicklung eines neuartigen Zweistrom-Injektorkonzeptes realisiert. Dabei wird durch eine kontrollierte Verzögerung eines Teilstroms eine stabile Zündzone gebildet, die die notwendige Voraussetzung für den zuverlässigen Betrieb einer SCRamjet-Brennkammer ist. Die unvollständige Reaktion in dieser Zündzone produziert einen radikalenreichen Injektorstrom, der dann die Reaktionsvorgänge in der Brennkammer stabilisiert. Die geometrischen Eigenschaften des Injektors erlauben eine automatische Anpassung des Verzögerungsgrads des Injektorstroms an die Flugbedingungen, so dass die notwendige Zündzone immer mit geringen Verlusten erzeugt wird.

Eine andere wichtige Eigenschaft des Zweistrom-Injektors liegt in der Mischungstechnik, die durch die Zonen mit unterschiedlichen Drücken realisiert wurde. Dadurch werden Luftströme erzeugt, die durch die Wechselwirkung mit den Wasserstoffjets die Vermischung forcieren.

Die Strömungs- und Reaktionsvorgänge im Injektorbereich wurden sowohl numerisch als auch experimentell [San03] detailliert untersucht und bestätigen die Funktionsfähigkeit des Konzeptes. Ein stabiler Betrieb wurde schon ab einer Totaltemperaturen von  $900\text{ K}$  (Flugmachzahl größer vier) erreicht [San03]. Die Effizienz des Injektors in diesem Bereich liegt deutlich höher als die Effizienz des in diesem Bereich verwendeten Ramjet-Triebwerks, da beim entwickelten Konzept nur ca. 30% des gesamten Luftstroms auf Unterschall verzögert wird, während im Ramjet der vollständige Unterschallmodus vorliegt.

Die Simulationsergebnisse zeigten, dass eine höhere Mischungs- und Verbrennungseffizienz durch eine Weiteroptimierung erreicht werden kann. Die detaillierte Analyse der Mischungs- und Reaktionsvorgänge im Injektorbereich und im Nachlauf des Injektors können als Richtlinien für die zukünftigen Optimierungsarbeiten dienen.



## Literatur

- [Abr58] ABRAMOWITSCH, G. N.: *Angewandte Gasdynamik*. Berlin : VEB Verlag Technik Berlin, 1958
- [All99] ALLGEIER, U.: *Turbulente Verbrennung in kompressiblen Scherschichten*, Technische Universität München, Dissertation, 1999
- [AN70] ALGERMISSEN, J. ; NÖTZOLD, D.: Der zeitliche Ablauf der Verbrennung von Wasserstoff im Überschall-Luftstrom. In: *Forschung im Ingenieurwesen* 36 (1970), Nr. 6, S. 169–183
- [BAH94] BAURLE, R. A. ; ALEXOPOULOS, G. A. ; HASSAN, H. A.: Assumed Joint Probability density Function Approach for Supersonic Turbulent Combustion. In: *Journal of Propulsion and Power* 10 (1994), Nr. 4, S. 473–484
- [BAH97] BAURLE, R. A. ; ALEXOPOULOS, G. A. ; HASSAN, H. A.: Analysis of Supersonic Combustors with Swept Ramp Injectors. In: *Journal of Propulsion, Technical Notes* 13 (1997), Nr. 2, S. 327–328
- [Bau94] BAUER, A.: *Betriebsverhalten luftatmender Kombinationstriebwerke für den Hyperschallflug unter besonderer Berücksichtigung der Triebwerkintegration*, Technische Universität München, Dissertation, 1994
- [BGKL02] BEZGIN, L. ; GOUSKOV, O. ; KOPCHENOV, V. ; LASKIN, I.: CFD Support of the Development of Hypersonic Flight Laboratory and Model SCRamjet. In: *Proceedings of the 11<sup>th</sup> AIAA/AAAF International Conference on Space Planes and Hypersonic Systems and Technologies, Paper AIAA 2002-5125* (2002)

- [Bog02] BOGDONOFF, Seymour M.: Hypersonic Test Facilities for Flight Vehicles. In: *Proceedings of ICMAR 2002* (2002)
- [Cur91] CURRAN, E. T.: High-Speed Flight Propulsion Systems, Introduction. In: *Progress in Astronautics and Aeronautics, American Institute of Aeronautics and Astronautics, Inc., Washington D.C.* 137 (1991)
- [CWP<sup>+</sup>94] CHENG, T. S. ; WEHRMEYER, J. A. ; PITZ, R. W. ; JARRETT, O. J. ; NORTHAM, G. B.: Raman Measurements of Mixing and Finite-Rate Chemistry in a Supersonic Hydrogen-Air Diffusion Flame. In: *Combustion and Flame* 99 (1994), S. 173
- [EL90] EGOLFOPOULOS, F. N. ; LAW, C. K.: An Experimental and Computational Study of the Burning Rates of Ultra-Lean to Moderately-Rich H<sub>2</sub>/O<sub>2</sub>/N<sub>2</sub> Laminar Flames with Pressure Variation. In: *Twenty-Third Symposium (International) on Combustion/The Combustion Institute* (1990), S. 333–340
- [Emb01] EMBERGER, H. M.: *Konstruktion und Untersuchung eines Zweistrom-Eindüsungskonzepts für Wasserstoff in Überschallbrennkammern*, Diplomarbeit Technische Universität München, Diplomarbeit, 2001
- [ESB78] EVANS, Jh. S. ; SHEXNAYDER, JR., C. J. ; BEACH, JR., H. L.: Application of a Two-Dimensional Parabolic Computer Program to Prediction of Turbulent Reacting Flows. In: *NASA TP 1169* (1978)
- [Esc96] ESCH, T.: *Zur Integration des Antriebs in ein Hyperschallflugzeug unter besonderer Berücksichtigung der Kraftbilanzierung*, Technische Universität München, Dissertation, 1996
- [EWDM98] EVERETT, D. E. ; WOODMANSEE, M. A. ; DUTTON, J. C. ; MORRIS, M. J.: Wall Pressure Measurements

- for a Sonic Jet Injected Transversely into a Supersonic Crossflow. In: *Journal of Propulsion and Power* 14 (1998), Nr. 6, S. 861–868
- [FBB00] FROLOV, S. M. ; BASEVICH, V. Y. ; BELYAEV, A. A.: Modelling of Turbulent Flame Stabilisation on Bluff Bodies. In: *Chemical Physics Reports* 18 (2000), Nr. 9, S. 1683–1704
- [Flu00] Fluent Inc., Lebanon: *FLUENT 5.5 Documentation*. 2000
- [FYJ90] FUKUTANI, S. ; YAMAMOTO, S. ; JINNO, H.: Propagation of Unsteady Hydrogen Premixed Flames near Flammability Limits. In: *Twenty-Third Symposium (International) on Combustion/The Combustion Institute* (1990), S. 405–411
- [Ger02] GERLINGER, P.: Investigation of an Assumed PDF Approach for Finite-Rate Chemistry. In: *Proceedings of the 40<sup>th</sup> AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, Paper AIAA 2002-0166* (2002)
- [GMB01] GERLINGER, P. ; MÖBUS, H. ; BRÜGGEMANN, D.: An Implicit Multigrid Method for Turbulent Combustion. In: *Journal of Computational Physics* 166 (2001), S. 1–30
- [GNCD95] GRUBER, M. R. ; NEJAD, A. S. ; CHEN, T. H. ; DUTTON, J. C.: Mixing and Penetration Studies of Sonic Jets in a Mach 2 Freestream. In: *Journal of Propulsion and Power* 11 (1995), Nr. 2, S. 315–323
- [Grü99] GRÜNIG, C.: *Gemischbildung und Flammenstabilisierung bei Pyloneinblasung in Überschallbrennkammern*, Technische Universität München, Dissertation, 1999
- [Gra02] GRABOVAC, D.: *Numerische Untersuchung eines Zweistrom-Eindüsungskonzepts für Wasserstoff in Über-*

- schallbrennkammern*, Technische Universität München, Semesterarbeit, 2002
- [GSB98] GERLINGER, P. ; STOLL, P. ; BRÜGGEMANN, D.: An Implicit Multigrid Method for the Simulation of Chemically Reacting Flows. In: *Journal of Computational Physics* 146 (1998), S. 322–345
- [GWGD94] GAFFNEY, R. L. J. ; WHITE, J. A. ; GIRIMAJI, S. S. ; DRUMMOND, J. P.: Modeling Temperature And Species Fluctuations in Turbulent, Reaction Flow. In: *Computing Systems in Engineering* 5 (1994), Nr. 2, S. 117–133
- [Hol97] HOLLMEIER, S.: *Simulation des Betriebsverhaltens von Antrieben für Raumtransporter/Hyperschallflugzeuge*, Technische Universität München, Dissertation, 1997
- [HSM79] HUBER, P.W. ; SCHEXNAYDER, C.J. J. ; MCCLINTON, C.R.: Criteria for Self-Ignition of Supersonic Hydrogen-Air Mixtures. In: *NASA Technical Paper 1457* (1979), S. 1–54
- [Jac88] JACHIMOWSKI, C. J.: An Analytical Study of the Hydrogen-Air Reaction Mechanism with Application to Scramjet Combustion. In: *NASA TP 2791* (1988)
- [Jac92] JACHIMOWSKI, C. J.: An Analysis of Combustion Studies in Shock Expansion Tunnels and Reflected Shock Tunnels. In: *NASA TP-3224* (1992)
- [KGW<sup>+</sup>02] KASAL, P. ; GERLINGER, P. ; WALTER, R. ; VON WOLFERSDORF, J. ; WEIGAND, B.: Supersonic Combustion: Fundamental Investigation of Aerothermodynamic Key Problems. In: *Proceedings of the 11<sup>th</sup> AIAA/AAAF International Conference on Space Planes and Hypersonic Systems and Technologies, Paper AIAA-2002-5119* (2002)

- [KL96] KREUZ, T. G. ; LAW, C. K.: Ignition in Nonpremixed Counterflowing Hydrogen versus Heated Air: Computational Study with Detailed Chemistry. In: *Combustion and Flame* (1996), Nr. 104, S. 157–175
- [KLT<sup>+</sup>00] KHARITONOV, A. M. ; LOKOTKO, A. V. ; TCHERNYSHYEV, A. V. ; V. I. KOPCHENOV, K. E. L. ; RUDAKOV, A. S.: Mixing Processes of Supersonic Flows in a Scetchy Model of a Rocket Scramjet Engine. In: *Proceedings of ICMAR 2000* (2000)
- [Kop00] KOPP, S.: *Dynamische Echtzeit-Leistungssyntheserechnung mit Sekundär- und Störeffekten für Hyperschall-Luftstrahlantriebe*, Technische Universität München, Dissertation, 2000
- [LSS02] LYUBAR, A. ; SANDER, T. ; SATTELMAYER, T.: Einfluss des Vorheizerausbrands auf die Flammenstabilisierung in einer Überschallbrennkammer. In: *Seminar des Sonderforschungsbereichs 255, TU München* (2002)
- [LW94] LIBBY, P. A. ; WILLIAMS, F. A.: *Turbulent Reacting Flows*. Academic Press, 1994
- [McC02] McCLINTON, Charles R.: NASA Hypersonics April 2001-Oct. 2002. In: *Proceedings of the 11<sup>th</sup> AIAA/AAAF International Conference on Space Planes and Hypersonic Systems and Technologies* (2002)
- [MGB01] MÖBUS, H. ; GERLINGER, P. ; BRÜGGEMANN, D.: Comparison of Eulerian and Lagrangian Monte Carlo PDF Methods for Turbulent Diffusion Flames. In: *Combustion and Flame* 124 (2001), S. 519–534
- [MGB03] MÖBUS, H. ; GERLINGER, P. ; BRÜGGEMANN, D.: Scalar and joint scalar-velocity-frequency Monte-Carlo PDF simulation of supersonic combustion. In: *Combustion and Flame* 132 (2003), S. 3–24

- [MHS<sup>+</sup>97] MITANI, T. ; HIRAIWA, T. ; SATO, S. ; TOMIOKA, S. ; KANDA, T. ; TANI, K.: Comparison of SCRamjet Engine Performance in Mach 6 Vitiated and Storage-Heated Air. In: *Journal of Propulsion and Power* 13 (1997), Nr. 5, S. 635–642
- [Mit95] MITANI, Tohru: Ignition Problems in Scramjet Testing. In: *Combustion and Flame* 101 (1995), S. 347–359
- [MP92] MAAS, U. ; POPE, S. B.: Simplifying Chemical Kinetics: Intrinsic Low-Dimensional Manifolds in Composition Space. In: *Combustion and Flame* 88 (1992), S. 239–264
- [MP94] MAAS, U. ; POPE, S. B.: Laminar Flame Calculations using Simplified Chemical Kinetics Based on Intrinsic Low-Dimensional Manifolds. In: *Twenty-Fifth Symposium (International) on Combustion/The Combustion Institute* (1994), S. 1349–1356
- [Mü72] MÜNZBERG, H. G.: *Flugantriebe, Grundlagen, Systematik und Technik der Luft- und Raumfahrtantriebe*. Berlin : Springer-Verlag, 1972. – ISBN 3–540–05626–2
- [MW88] MAAS, U. ; WARNATZ, J.: Ignition Processes in Hydrogen-Oxygen Mixtures. In: *Combustion and Flame* (1988), Nr. 74, S. 53–69
- [MW90] MAAS, U. ; WARNATZ, J.: Detailed Numerical Simulation of  $H_2 - O_2$  - Ignition in Two-Dimensional Geometries. In: *Internal Report, Preprint 90-01, University Heidelberg* (1990)
- [OG99] VAN OIJEN, J. A. ; DE GOEY, L. P. H.: Modelling of Premixed Laminar Flames Using Flame-Generated Low-Dimensional Manifolds. In: *Proceedings of the 17<sup>th</sup> Int. Coll. on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems (ICDERS)* (1999)

- [PBC02] PELLETT, G. L. ; BRUNO, C. ; CHINITZ, W.: Review of Air Vitiation Effects on Scramjet Ignition and Flameholding Combustion Processes. In: *Proceedings of the 38<sup>th</sup> AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference and Exhibit, Paper AIAA 2002-3880* (2002)
- [Peu02] PEUKERT, A.: *Stoßstabilisierung in einem Wasserstoffinjektor für SCRamjetbrennkammern*, Technische Universität München, Semesterarbeit, 2002
- [Pil97] PILLING, M. J.: *Comprehensive Chemical Kinetics. Low-Temperature Combustion and Autoignition*. Bd. 35. Elsevier, 1997
- [Pop97] POPE, S. B.: Computationally efficient implementation of combustion chemistry using *insitu* adaptive tabulation. In: *Combustion Theory Modelling* (1997), Nr. 1, S. 41–63
- [San89] Sandia National Laboratories Rept. SAND89-8009: *CHEMKIN II: A Fortran Chemical Kinetics Package for the Analysis of Gas-Phase Chemical Kinetics*. 1989
- [San03] SANDER, T.: *Verlustarme Pilotierung von Überschallflammen durch gasdynamisch optimierte Nebenstrom-Injektoren*, Technische Universität München, Dissertation, 2003
- [Sch02] SCHRADER, R. *Skript zur Vorlesung Informatik II*. Institut für Informatik, Universität zu Köln. 2002
- [SGF<sup>+</sup>99] SMITH, G. P. ; GOLDEN, D. M. ; FRENKLACH, M. ; MORIARTY, N. W. ; EITENEER, B. ; GOLDENBERG, M. ; BOWMAN, C. T. ; HANSON, R. K. ; SONG, S. ; GARDINER, W. C. ; LISSIANSKI, V. V. ; QIN, Z.: GRI-Mech 3.0. In: *The University of California, Berkeley, Stanford University, The University of Texas at Austin, SRI International* (1999)

- [SLS01] SANDER, T. ; LYUBAR, A. ; SATTELMAYER, T.: Selbstzündung, Flammenstabilisierung und Stoß-Flammen-Wechselwirkung in stoß-induzierten Überschallflammen. In: *Arbeits- und Ergebnisbericht Juli 1998 — Juni 2001 des Sonderforschungsbereichs 255, TU München* (2001)
- [SMJ98] SCHEFFER, S. G. ; MARTINELLI, L. ; JAMESON, A.: Simulation of Supersonic Reacting Flows with Detailed Chemistry. In: *Combustion Science and Technology* 136 (1998), S. 55–80
- [Smo91] SMOOKE, M. D.: *Reduced Kinetic Mechanisms and Asymptotic Approximations for Methan–Air Flames. Lecture Notes in Physics 384*. Springer, New York, 1991
- [SS00] SANDER, T. ; SATTELMAYER, T.: Ramanspektroskopie an einer reagierenden Überschallströmung und reaktionskinetische Untersuchung eines Wasserstoff-Vorheizers. In: *Seminar des Sonderforschungsbereichs 255, TU München* (2000)
- [SS02] SUNAMI, T. ; SCHEEL, F.: Analysis of Mixing Enhancement Using Streamwise Vortices in a Supersonic Combustor by Application of Laser Diagnostics. In: *Proceedings of the 11<sup>th</sup> AIAA/AAAF International Conference on Space Planes and Hypersonic Systems and Technologies, Paper AIAA 2002-5203* (2002)
- [Swe93] SWEETMAN, B.: *Aurora, The Pentagon's Secret Hypersonic Spyplane*. Motorbooks International Publishers & Wholesalers, Osceola, 1993
- [TDEN96] TISHKOFF, J. M. ; DRUMMOND, J. P. ; EDWARD, T. ; NEJAD, A.S.: Future Directions of Supersonic Combustion Research: Air-Force/NASA Workshop on Supersonic Combustion. In: *Joint Supersonic Combustion Workshop, Newport News, Virginia* (14 -16.05.1996)



- [Tur94a] TURÀNYI, T.: Application of Repro-Modeling for the Reduction of Combustion Mechanisms. In: *Twenty-Fifth Symposium (International) on Combustion/The Combustion Institute* (1994), S. 949–955
- [Tur94b] TURÀNYI, T.: Parametrisation of Reaction Mechanisms Using Orthonormal Polynomials. In: *Computers Chemistry* 18 (1994), Nr. 1, S. 45–54
- [Tur96] TURNS, Stephen R.: *An Introduction to Combustion. Concepts and Applications*. McGraw-Hill, Inc., 1996
- [VB90] VANDOOREN, J. ; BIAN, J.: Validation of H<sub>2</sub>/O<sub>2</sub> Reaction Mechanisms by Comparison with the Experimental Structure of a Rich Hydrogen-Oxygen Flame. In: *Twenty-Third Symposium (International) on Combustion/The Combustion Institute* (1990), S. 341–346
- [VFDD96] VIGUIER, C. ; FIGUEIRA DA SILVA, L. F. ; DESBORDES, D. ; DESHAIES, B.: Onset of Oblique Detonation Waves: Comparison between Experimental and Numerical Results for Hydrogen-Air Mixtures. In: *Twenty-Six Symposium (International) on Combustion/The Combustion Institute* (1996), S. 3023–3013
- [WMD97] WARNATZ, J. ; MAAS, U. ; DIBBLE, R. W.: *Verbrennung. Physikalisch-Chemische Grundlagen, Modellierung und Simulation, Experimente, Schadstoffentstehung*. Springer Verlag, 1997

## A Reaktionschema von Warnatz

Reaktion	$A$ [cm, mol, s]	$b$	$E_a$ [J/mol]
1 $O_2 + H = OH + O$	2.00E+14	0.00	70300
2 $OH + O = O_2 + H$	1.46E+13	0.00	2080
3 $H_2 + O = OH + H$	5.06E+04	2.67	26300
4 $OH + H = H_2 + O$	2.24E+04	2.67	18400
5 $H_2 + OH = H_2O + H$	1.00E+08	1.60	13800
6 $H_2O + H = H_2 + OH$	4.45E+08	1.60	77130
7 $OH + OH = H_2O + O$	1.50E+09	1.14	420
8 $H_2O + O = OH + OH$	1.51E+10	1.14	71640
9 $H + H + M = H_2 + M$	1.80E+18	-1.00	0
10 $H_2 + M = H + H + M$	6.99E+18	-1.00	436080
11 $H + OH + M = H_2O + M$	2.20E+22	-2.00	0
12 $H_2O + M = H + OH + M$	3.80E+23	-2.00	499410
13 $O + O + M = O_2 + M$	2.90E+17	-1.00	0
14 $O_2 + M = O + O + M$	6.81E+18	-1.00	496410
15 $H + O_2 + M = HO_2 + M$	2.30E+18	-0.80	0
16 $HO_2 + M = H + O_2 + M$	3.26E+18	-0.80	195880
17 $HO_2 + H = OH + OH$	1.50E+14	0.00	4200
18 $OH + OH = HO_2 + H$	1.33E+13	0.00	168300
19 $HO_2 + H = H_2 + O_2$	2.50E+13	0.00	2900
20 $H_2 + O_2 = HO_2 + H$	6.84E+13	0.00	243100
21 $HO_2 + H = H_2O + O$	3.00E+13	0.00	7200
22 $H_2O + O = HO_2 + H$	2.67E+13	0.00	242520
23 $HO_2 + O = OH + O_2$	1.80E+13	0.00	-1700
24 $OH + O_2 = HO_2 + O$	2.18E+13	0.00	230610
25 $HO_2 + OH = H_2O + O_2$	6.00E+13	0.00	0
26 $H_2O + O_2 = HO_2 + OH$	7.31E+14	0.00	303530
27 $HO_2 + HO_2 = H_2O_2 + O_2$	2.50E+11	0.00	-5200
28 $OH + OH + M = H_2O_2 + M$	3.25E+22	-2.00	0
29 $H_2O_2 + M = OH + OH + M$	2.10E+24	-2.00	206800
30 $H_2O_2 + H = H_2 + HO_2$	1.70E+12	0.00	15700
31 $H_2 + HO_2 = H_2O_2 + H$	1.15E+12	0.00	80880

32	$H_2O_2 + H = H_2O + OH$	1.00E+13	0.00	15000
33	$H_2O + OH = H_2O_2 + H$	2.67E+12	0.00	307510
34	$H_2O_2 + O = OH + HO_2$	2.80E+13	0.00	26800
35	$OH + HO_2 = H_2O_2 + O$	8.40E+12	0.00	84090
36	$H_2O_2 + OH = H_2O + HO_2$	5.40E+12	0.00	4200
37	$H_2O + HO_2 = H_2O_2 + OH$	1.63E+13	0.00	132710

$$[M] = [H_2] + 0.35[O_2] + 6.50[H_2O] + 0.40[N_2]$$

## B Orthogonale Polynome

In diesem Abschnitt werden die orthogonalen Polynome vorgestellt, deren Anwendung in Abschnitt 3.6 diskutiert wurde. Der Vorteil der Verwendung der orthogonalen Polynome als Interpolationspolynom liegt darin, dass die Polynomkoeffizienten unabhängig voneinander determiniert werden, was die Erstellung des Interpolationspolynoms erleichtert.

Um orthogonale Polynome zu erklären, muss man ein *Skalarprodukt* einführen. Sei das Intervall  $[a, b]$  und die Gewichtsfunktion  $w(x)$  festgelegt, definiert man das Skalarprodukt von Funktionen  $f(x)$  und  $g(x)$  bezüglich  $w(x)$  als

$$\langle f, g \rangle_w = \int_a^b f(x) g(x) w(x) dx \quad (\text{B.1})$$

Zwei Funktionen heißen *orthogonal*  $f \perp_w g$  falls:

$$\langle f, g \rangle_w = 0 \quad (\text{B.2})$$

Eine Funktion heißt *normiert*, falls  $\langle f, f \rangle_w = 1$ . Normierte und orthogonale Funktionen heißen *orthonormiert*.

Eine Familie  $P_n(x)$  von Polynomen

$$P_n(x) = \varphi_0(x) + \varphi_1(x) + \dots + \varphi_n(x) \quad (\text{B.3})$$

heißt *orthonormiert* bezüglich  $w$ , wenn

$$\langle \varphi_i, \varphi_j \rangle_w = \begin{cases} 0 & \text{falls } i \neq j \\ 1 & \text{falls } i = j \end{cases} \quad (\text{B.4})$$