

# **Zweiphasen-Freistrahlmmodell eines atmosphärischen Flugstromvergasers**

Zur Erlangung des akademischen Grades eines  
DOKTORS DER INGENIEURWISSENSCHAFTEN (Dr.-Ing.)

von der KIT-Fakultät für Chemieingenieurwesen und Verfahrenstechnik des  
Karlsruher Instituts für Technologie (KIT)  
genehmigte

DISSERTATION

von  
Dipl.-Ing. Christian Johannes Hotz  
aus Mühlhausen im Kraichgau

Tag der mündlichen Prüfung: 13.12.2024

Erstgutachter: Prof. Dr.-Ing. Thomas Kolb

Zweitgutachter: Prof. Dr.-Ing. Nikolaos Zarzalis



Dieses Werk ist lizenziert unter einer Creative Commons Namensnennung 4.0 International Lizenz (CC BY 4.0): <https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/deed.de>

## Kurzfassung

Kern der vorliegenden Arbeit ist das Zweiphasen-Freistrahlmmodell (2Ph-FJM) zur Simulation der reagierenden Zweiphasen-Strömung in einem atmosphärischen Flugstromvergaser. Mit dem 2Ph-FJM kann die Temperatur, die Strömungsgeschwindigkeit und chemische Reaktion in der Gasphase sowie die Aufheizung und die Verdampfung von Brennstofftropfen in der Hauptreaktionszone simuliert werden. Das 2Ph-FJM basiert auf einem modifizierten Freistrahlanatz, der ursprünglich dazu entwickelt wurde den Einphasen-Freistrahls mit Hilfe von Gauß-Profilen zu beschreiben. Die Beschleunigung, Aufheizung und Verdampfung von Tropfen sowie Stoffeigenschaften der Gasphase und des Brennstoffs wurden mit Modellen aus der Literatur modelliert. Für die Gasphase wird Gleichgewicht angenommen. Bei der Modellierung von Geschwindigkeiten, Konzentrationen und Temperaturen von Gasphase und Tropfen wird die Übertragung von Impuls, Wärme und Masse zwischen den beiden Phasen sowie chemische Reaktion in der Gasphase berücksichtigt.

Der Zweiphasen-Freistrahls wurde zunächst in Versuchen unter Umgebungsbedingungen untersucht. Dabei wurde der Einfluss der Tropfen auf Entrainment von Gas aus der Umgebung in den Freistrahls mit Hilfe von Tracergas-Messungen geprüft. Darüber hinaus wurde die radiale Verteilung der Flüssigkeitstropfen bei der Zerstäubung mit einem mechanischen Patternator gemessen und die Tropfengrößenverteilung und Tropfengeschwindigkeit mit einem Phasen-Doppler-Anemometer bestimmt. Aus den Messergebnissen konnte abgeleitet werden, dass die Gasphase des Zweiphasen-Freistrahls selbstähnlich ist und durch Gauß-Profile beschrieben werden können. Abhängig von den Betriebsbedingungen bei der Zerstäubung kann die radiale Konzentrationsverteilung von Zerstäubungsmedium und die Breite des Spraykegels beeinflusst werden. Dabei können sich Zerstäubungsmedium und Tropfen aus der Düse in der Zweiphasen-Strömung entmischen. Die Messungen wurden im 2Ph-FJM dazu genutzt, den Freistrahlanatz an den Zweiphasen-Freistrahls anzupassen und um Annahmen im Modell zu überprüfen. Außerdem wurde die gemessene Tropfengrößenverteilung als Eingangsgröße für das Modell verwendet.

Das 2Ph-FJM wurde in einem Vergasungsversuch am atmosphärischen Flugstromvergaser REGA validiert. Dazu wurde die Struktur der Flamme durch Messung von OH\*-Chemilumineszenz abgebildet. Die Tropfengrößen und Tropfengeschwindigkeiten von Brennstoff in der heißen Reaktionszonen wurden mit einem Phasen-Doppler-Anemometer bestimmt. Messungen und Simulationsergebnisse zeigten eine gute Übereinstimmung in Bezug auf Tropfengeschwindigkeit, Tropfengröße und Flammenstruktur. Auf Basis des Validierungsversuchs wurde der Einfluss der Geometrie von Kontrollvolumina auf das Simulationsergebnis untersucht. Dabei zeigte sich das Modell robust gegenüber der Größe der Rechenzellen. In drei weiteren numerischen Untersuchungen wurde der Einfluss der Tropfengröße und der Düsengröße untersucht. Unter den untersuchten Bedingungen ist der Einfluss der Tropfengröße auf den Brennstoffumsatz am relevantesten. Die Zerstäubung ist daher ein wesentlicher Einflussfaktor auf den Brennstoffumsatz im Flugstromvergaser. Die Länge der Oxidationszone ist geprägt durch den äquivalenten Düsendurchmesser. Findet in der Oxidationszone keine relevante Verdampfung statt, nimmt die Länge der Oxidationszone linear mit dem äquivalenten Düsendurchmesser zu. Durch Verdampfung in der Oxidationszone wird die Oxidationszone verkürzt.

Das 2Ph-FJM wurde in einer rechenfähigen Version an die Arbeitsgruppe Vergasung am Institut für Technische Chemie (ITC) des Karlsruher Instituts für Technologie (KIT) übergeben. Das 2Ph-FJM, die Validierungsversuche und die Untersuchungen im Zweiphasen-Freistrahls wurde im Rahmen dieser Arbeit in zwei Publikationen veröffentlicht.

## Abstract

The central focus of this thesis is the development of the two-phase free jet model (2Ph-FJM) for simulating the reacting two-phase flow in the main reaction zone of an atmospheric entrained flow gasifier. The 2Ph-FJM simulates the temperature, flow velocity and chemical reactions in the gas phase, as well as the heating and evaporation of fuel droplets. The 2Ph-FJM is based on a modified free jet approach, which was initially designed to describe single-phase free jets using Gaussian profiles. The acceleration, heating, and evaporation of droplets, as well as properties of the gas phase and droplets, are modelled using methods from the existing literature. In the gas phase, chemical equilibrium is assumed. While calculating the velocities, concentrations, and temperatures of both the gas phase and the droplets, the model accounts for the transfer of momentum, heat, and mass between the two phases, as well as chemical reactions in the gas phase.

The two-phase free jet was examined experimentally under ambient conditions. Tracer gas measurements were conducted to assess the effect of droplets on the entrainment of surrounding gas into the free jet. Additionally, the radial distribution of liquid droplets during atomization was measured using a mechanical patternator. The droplet size distribution and the velocities of droplets were determined with a Phase-Doppler anemometer. The experimental data showed that the gas phase of the two-phase free jet is self-similar and can be described by Gaussian profiles. Depending on the conditions during the atomization, the radial concentration distribution of the atomization medium and the spray angle are influenced. The atomization medium and droplets can segregate within the two-phase flow. The experimental measurements were used to adjust the free jet model for the two-phase flow and verify model assumptions. Furthermore, the measured droplet size distribution was used as an input parameter to the model.

The 2Ph-FJM was validated using a gasification experiment in the atmospheric entrained flow gasifier REGA. The flame structure was characterized by measuring OH\*-chemiluminescence, while droplet sizes and velocities in the hot reaction zones were determined using a Phase-Doppler anemometer. The simulation results closely matched the experimental measurements in terms of droplet velocity, droplet size and flame structure. Based on the validation experiment, the influence of the control volume geometry on the simulation results was investigated. The results confirmed that the model is robust to variations in grid cell size. In three additional numerical studies, the effects of droplet size and nozzle diameter were explored. Under the examined conditions, droplet size had the most significant influence on the fuel conversion rate, underscoring the importance of atomization within the entrained flow gasifier. The length of the oxidation zone was found to be primarily influenced by the equivalent nozzle diameter. If significant evaporation does not occur in the oxidation zone, the length of the oxidation zone increases linearly with the nozzle diameter, while evaporation within the oxidation zone reduces its length.

The 2Ph-FJM was provided in an executable version to the Gasification Working Group at the Institute for Technical Chemistry (ITC) at the Karlsruhe Institute of Technology (KIT). The 2Ph-FJM, the validation experiments and the studies in the two-phase free jet under ambient conditions were published in two journal articles as part of this thesis.



# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Motivation und Hintergrund.....</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Zielsetzung und Vorgehen .....</b>	<b>4</b>
<b>3</b>	<b>Theoretische Grundlagen .....</b>	<b>6</b>
3.1	Grundlagen turbulenter Freistrahlen .....	6
3.1.1	Einleitung turbulenter Einphasen-Freistrahls .....	6
3.1.2	Impulserhaltung im turbulenten Einphasen-Freistrahls .....	7
3.1.3	Queraustausch im turbulenten Einphasen-Freistrahls .....	10
3.1.4	Homogener Einphasen-Freistrahls .....	11
3.1.5	Inhomogener Einphasen-Freistrahls .....	15
3.1.6	Universelle Selbstähnlichkeit .....	23
3.1.7	Modellierung des turbulenten Einphasen-Freistrahls .....	25
3.1.8	Eingeschlossener Freistrahls .....	28
3.1.9	Auftrieb im reagierenden Freistrahls .....	30
3.1.10	Zweiphasen-Freistrahls .....	31
3.2	Grundlagen der Flugstromvergasung .....	34
3.3	Grundlagen der Zerstäubung .....	40
3.4	Grundlagen der Tropfenbeschleunigung .....	43
3.5	Grundlagen der Tropfenaufheizung und Verdunstung .....	46
3.6	Grundlage relevanter Gasphasenreaktionen im Flugstromvergaser .....	49
<b>4</b>	<b>Experimentelle Aufbauten und Messmethoden.....</b>	<b>51</b>
4.1	Atmosphärische Flugstromvergasung an der REGA .....	51
4.2	Zweiphasen-Freistrahlsversuche unter atmosphärischen Bedingungen an der ATMO .....	55
<b>5</b>	<b>Experimentelle Untersuchung im Zweiphasen-Freistrahls zur Bestimmung und Validierung von Eingangsgrößen für das 2Ph-FJM in Kaltversuchen ..</b>	<b>62</b>
5.1	Untersuchung von Entrainment in der Gasphase und Bestimmung des Impulsaustauschfaktors $c_i$ .....	62
5.2	Messung von Tropfengrößen und -geschwindigkeiten .....	72
5.3	Messung der Massenstromdichte der dispersen Phase .....	74
5.4	Untersuchung der Entmischung von Zerstäubungsmedium und Tropfen im Zweiphasen-Freistrahls .....	76
<b>6</b>	<b>Das Zweiphasen-Freistrahlsmodell (2Ph-FJM) .....</b>	<b>81</b>
6.1	Modellierungskonzept .....	81
6.2	Baustein A: Freistrahlsmodell .....	84
6.3	Baustein B: Einphasen-Bilanzgleichung .....	85
6.4	Baustein C: Tropfenmodell .....	86
6.5	Baustein D: Zweiphasen-Bilanzgleichungen .....	89
6.6	Modellierung von Stoffeigenschaften .....	94
<b>7</b>	<b>Simulationsergebnisse und Validierung des 2Ph-FJM .....</b>	<b>96</b>
7.1	Simulationsergebnisse und Vergleich mit Validierungsversuch .....	96
7.2	Einfluss ausgewählter Größen auf die Hauptreaktionszone .....	109
7.2.1	Einfluss der Größe der Kontrollvolumina .....	109
7.2.2	Einfluss der Tropfengröße .....	112
7.2.3	Einfluss der Düsengröße .....	115

<b>8</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick .....</b>	<b>123</b>
<b>9</b>	<b>Literaturverzeichnis.....</b>	<b>127</b>
<b>10</b>	<b>Abbildungsverzeichnis .....</b>	<b>134</b>
<b>11</b>	<b>Tabellenverzeichnis .....</b>	<b>139</b>
<b>12</b>	<b>Anhang .....</b>	<b>140</b>
A	Mathematische Herleitungen.....	140
A.I	Impulserhaltung im selbstähnlichen Freistrah.....	140
A.II	Äquivalenter Düsendurchmesser.....	140
A.III	Lineare Zunahme der bewegten Masse entlang der Freistrahachse.....	142
A.IV	Herleitung Freistrahmodell Günther $u(r,z)$ .....	142
A.V	Impulsstromerhaltung im Freistrahmodell nach Günther .....	144
A.VI	Bestimmung der empirischen Konstanten im Freistrahmodell nach Schlichting .....	145
A.VII	$D^2$ -Gesetz.....	145
A.VIII	Bestimmung des lokalen und integralen Brennstoffumsatzes im Zweiphasen- Freistrah.....	147
B	Vergleich unterschiedlicher Korrelation für den $c_w$ -Wert zur Berechnung der Tropfenbeschleunigung .....	148
C	Messungen des lokalen Mischungsbruchs in der Gasphase (alle Messungen) ...	151

# Symbolverzeichnis

## Lateinische Buchstaben

Formelzeichen	Einheit	Bedeutung
$A$	$\text{m}^2$	Fläche
$a$	$\text{m/s}^2$	Beschleunigung
$c_p$	$\text{J}/(\text{kg}\cdot\text{K})$	spezifische Wärmekapazität
$d_0$	$\text{m}$	Düsendurchmesser
$d_{\text{äq}}$	$\text{m}$	Äquivalenter Düsendurchmesser
$d_{32}$	$\text{m}$	Sauterdurchmesser, siehe Gl. (3-34)
$D$	$\text{m}^2/\text{s}$	Diffusionskoeffizient
$E(\kappa)$	$\text{J/m}$	spektrale Energiedichte, siehe Kapitel 3.1.2
$F$	$\text{N}$	Kraft
$g$	$\text{m/s}^2$	Erdbeschleunigung
$h$	$\text{J/kg}$	spezifische Enthalpie
$h$	$\text{m}$	Höhe
$\dot{I}$	$\text{N}$	Impulsstrom
$L$	$\text{m}$	charakteristische Länge
$j$	$\text{mol}/(\text{m}^2\cdot\text{s})$	Teilchenstromdichte
$m$	$\text{kg}$	Masse
$\dot{m}$	$\text{kg/s}$	Massenstrom
$p$	$\text{Pa}$	Druck
$\dot{Q}$	$\text{W}$	Wärmestrom
$\dot{q}$	$\text{W/m}^2$	Wärmestromdichte
$R$	$\text{J}/(\text{mol}\cdot\text{K})$	universelle Gaskonstante
$r$	$\text{m}$	radiale Position / Radius
$t$	$\text{s}$	Zeit

$T$	K	Temperatur
$u$	m/s	Geschwindigkeit
$V$	m <sup>3</sup>	Volumen
$X$	kg/kg	Mischungsbruch
$Y$	kg/m <sup>3</sup>	Beladung
$y$	kg/kg	Massenanteil
$\tilde{y}$	mol/mol	Stoffmengenanteil
$z$	m	Axiale Position
$z_0$	m	Virtueller Strahlursprung
$z_C$	m	Zentrum Rezirkulationswirbel, siehe Gl. (3-26)
$z_P$	m	Ende Rezirkulationswirbel, siehe Gl. (3-27)

## Griechische Buchstaben

Formelzeichen	Einheit	Bedeutung
$\alpha$	W/(m <sup>2</sup> ·K)	Wärmeübertragungskoeffizient
$\zeta$	m/m	axiale Position
$\eta$	m/m	radiale Position
$\eta$	Pa·s	dynamische Viskosität
$\theta$	°	Spraywinkel
$\kappa$	1/m	Wellenzahl
$\lambda$	W/(m·K)	Wärmeleitfähigkeit
$\nu$	m <sup>2</sup> /s	kinematische Viskosität
$\rho$	kg/m <sup>3</sup>	Dichte
$\sigma$	N/m	Oberflächenspannung
$\tau$	Pa	Schubspannung
$\Phi$	kg/(s·m <sup>2</sup> )	Massenstromdichte

## Dimensionslose Kennzahlen

Symbol	Beschreibung	Definition	Bedeutung
$a, b$	stöchiometrische Faktoren	-	siehe Gl. (3-36)
Bi	Biot-Zahl	$\frac{\alpha \cdot L}{\lambda}$	$\frac{\text{äußerer Wärmtransport}}{\text{innere Wärmeleitung}}$
$B_u, B_X$	Gradient entlang der Freistrahlachse	-	siehe Gl. (3-16), Gl.(3-18)
$B_T$	Wärmetransportzahl	-	siehe Gl. (3-51)
$c_i, c_X$	Austauschfaktor für Impuls, Stoff	-	siehe Gl. (3-22) - (3-24)
CC	Kohlenstoffumsatz (Carbon Conversion)	$\frac{\dot{n}_{C,SG}}{\dot{n}_{C,BS}}$	$\frac{\text{C – Gehalt Syngas}}{\text{C – Gehalt Brennstoff}}$
FC	integraler Brennstoffumsatz	$\frac{\dot{m}_{BD}}{\dot{m}_{BS}}$	siehe Gl. (6-45)
Fr	Froude-Zahl	$\frac{\rho_0 \cdot u_0^2}{\Delta \rho \cdot g \cdot d_0}$	$\frac{\text{Trägheitskraft}}{\text{Auftriebskraft}}$
GLR	Gas-to-Liquid Ratio	$\frac{\dot{m}_g}{\dot{m}_l}$	$\frac{\text{Gasmassenstrom}}{\text{Flüssigmassenstrom}}$
KGW	Kaltgaswirkungsgrad	$\frac{\dot{n}_{SG} \cdot \tilde{h}_{SG}}{\dot{n}_{BS} \cdot \tilde{h}_{BS}}$	$\frac{\text{Energiegehalt Syngas}}{\text{Energiegehalt Brennstoff}}$
$K_P$	Chemische Gleichgewichtskonstante	-	siehe Gl. (6-8)
Le	Lewis-Zahl	$\frac{\lambda}{D} = \frac{Sc}{Pr}$	$\frac{\text{Wärmetransport}}{\text{Stofftransport}}$
Nu	Nusselt-Zahl	$\frac{\alpha \cdot L}{\lambda}$	$\frac{\text{Wärmetransport}}{\text{Wärmeleitung}}$
Pr	Prandtl-Zahl	$\frac{\mu \cdot c_p}{\lambda}$	$\frac{\text{Viskosität}}{\text{Wärmeleitfähigkeit}}$
$Q_0, Q_3$	Summenverteilung Tropfen	-	siehe Gl. (5-2)

$Re$	Reynolds-Zahl	$\frac{\rho \cdot u \cdot L}{\mu}$	$\frac{\text{Trägheitskräfte}}{\text{viskose Kräfte}}$
$Sc$	Schmidt-Zahl	$\frac{\nu}{D}$	$\frac{\text{Impulstransport}}{\text{Stofftransport}}$
$We_{aero}$	Weber-Zahl	$\frac{u_{rel}^2 \cdot \rho_g \cdot L}{\sigma}$	$\frac{\text{Trägheitskraft}}{\text{Oberflächenspannung}}$
$x_{BS}$	lokaler Brennstoff-Konversionsgrad	-	siehe Gl. (6-42)
$x_{O_2}$	lokaler Sauerstoff-Konversionsgrad	-	siehe Gl. (6-39)
$\alpha$	empirische Konstante nach Schlichting		siehe Gl. (3-19) - (3-20)
$\epsilon_{max}$	maximale relative Ausdehnung	-	siehe Gl. (6-37)
$\lambda_{abs}$	absolute Luftzahl	$\frac{\dot{n}_{O_2}}{\dot{n}_{O_2,st}}$	siehe Gl. (3-32)
$\lambda_{tech}$	technische Luftzahl	$\frac{n_O}{2 \cdot n_C + 0,5 \cdot n_H}$	siehe Gl. (3-31)
$\theta$	Thring-Newby Parameter		siehe Gl. (3-25)

## Indizes tiefgestellt

Symbol	Beschreibung
$0$	Düse
$ENT$	Umgebung
$0,5$	Halbwert
$ad$	adiabat
$A$	Auftrieb
$\ddot{a}q$	äquivalent
$g$	Gas
$G$	Gewichtskraft

<i>i</i>	Laufzahl Komponenten Mischungsbruch
<i>I</i>	Trägheit
<i>k</i>	Laufzahl Tropfen
<i>l</i>	Flüssigkeit
<i>m</i>	Achse
<i>n</i>	Laufzahl Molekülsorte
<i>rel</i>	relativ
<i>s</i>	Oberfläche
<i>st</i>	stöchiometrisch
<i>Tr</i>	Tropfen
<i>t</i>	turbulent
<i>W</i>	Widerstand

---

## Akronyme

Symbol	Beschreibung
2Ph-FJM	Zweiphasen-Freistrahlmmodell (engl.: <i>two-phase free jet model</i> )
ATMO	atmosphärischer Zerstäuberprüfstand
CSTR	kontinuierlicher Rührkesselreaktor
LDA	Laser-Doppler-Anemometer
MEG	Monoethylenglykol
μGC	Mikro-Gaschromatograph
PDA	Phasen-Doppler-Anemometer
REGA	Research Entrained Flow Gasifier
WGS	Wassergas-Shift Reaktion

---

## Komponenten im Mischungsbruch

Symbol im Einphasen-Freistrah	Bedeutung
0	Gas aus Düse
ENT	Entrainment
Symbol im Zweiphasen-Freistrah (kalt)	Bedeutung
ENT	Entrainment
Tr	Tropfen
ZM	Zerstäubungsmedium
Symbol im Zweiphasen-Freistrah (heiß)	Bedeutung
ENT	Entrainment
BF	Flüssige Brennstofftropfen
BD	Brennstoffdampf
BS	Brennstoff (= BD + BF)
VM	Vergasungsmedium
PG	Produktgas



# 1 Motivation und Hintergrund

Die Vertreter von 196 Staaten einigten sich auf der Pariser Klimakonferenz im Jahr 2015 die Klimaerwärmung auf maximal zwei Grad im Vergleich zur vorindustriellen Zeit zu begrenzen [1]. Die deutsche Bundesregierung unterzeichnete das Pariser Klimaschutzabkommen ebenfalls und verabschiedete 2019 das Klimaschutzgesetz mit dem Ziel, dass Deutschland klimaneutral wird [2]. Nach dem Urteil des Bundesverfassungsgerichts wurde das Klimaschutzgesetz 2021 nochmals verschärft [3]. Eine weitere Novellierung wurde 2024 vorgenommen [4]. Gesetzlich vorgegebenes Ziel ist demnach die Klimaneutralität bis 2045 zu erreichen. Als gesetzliche Zwischenziele wurde eine Reduktion der Treibhausgasemission bis 2030 um 65 % und bis 2040 88 % im Vergleich zu 1990 festgelegt.

Um diese ambitionierten Ziele zu erreichen, bedarf es großer Veränderungen in allen Bereichen von Industrie, Haushalte, Gewerbe und Mobilität. Neben einer effizienteren Nutzung von Energie spielt die Verwendung von erneuerbaren Energiequellen an Stelle von fossilen Brennstoffen die entscheidende Rolle. Bemerkenswert ist bereits heute die Entwicklung in der Stromerzeugung. In diesem Sektor wurden bis zum Jahr 2021 etwa 191 Millionen Tonnen CO<sub>2</sub>-Äquivalente pro Jahr im Vergleich zu 1990 eingespart. Dies entspricht einer Reduktion um etwa 45 % [5]. Der Anteil erneuerbarer Energie bei der Stromerzeugung betrug 2023 52 % [6].

Im Gegensatz dazu wurde im Verkehrssektor im Zeitraum zwischen 1990 und 2009 eine Reduktion von etwa 7 % erzielt. Zwischen 2009 und 2019 stieg die Emission von Treibhausgasen wieder an und überstieg den Vergleichswert von 164 Millionen Tonnen CO<sub>2</sub>-Äquivalente pro Jahr vom Jahr 1990 [7]. Die Corona-Pandemie brachte durch die Einschränkung der Mobilität kurzfristig einen Einbruch der Emissionen. Bis 2022 stieg die Emission allerdings wieder auf 148 Millionen Tonnen CO<sub>2</sub>-Äquivalente pro Jahr an, trotz hoher Kraftstoffpreise und der befristeten Einführung des 9-Euro-Tickets im öffentlichen Nahverkehr [8]. Der Anteil erneuerbarer Energie im Verkehrssektor stagniert bei unter 7 % [9]. Dieser stammt hauptsächlich aus Biodiesel und Bioethanol, die fossilem Kraftstoff beigemischt werden. Eine Erhöhung ist kritisch zu sehen, da die landwirtschaftliche Anbaufläche in Konkurrenz zur Nahrungsmittelproduktion steht [10]. Im Bereich Mobilität müssen daher unbedingt grundlegende Veränderungen herbeigeführt werden. Durch die fortschreitende Defossilisierung der Stromerzeugung und besserer Wirkungsgrade versprechen elektrisch betriebene Fahrzeuge geringere Treibhausgasemissionen als klassische Verbrennungsmotoren. Das Problem von batterieelektrischen Fahrzeugen ist allerdings die begrenzte Batteriekapazität aufgrund der geringen Speicherdichte der Fahrzeugbatterien, insbesondere im Schwerlastverkehr. Bei Schiffen und Flugzeugen ist eine Umstellung von chemischen Energieträgern auf batterieelektrische Antriebe aus heutiger Sicht nicht wahrscheinlich.

Um die Klimaschutzziele zu erreichen, können die chemischen Kraftstoffe in Zukunft nicht mehr aus fossiler Quelle bezogen werden, sondern müssen synthetisch oder biologisch hergestellt werden. Dazu können verschiedene Verfahren genutzt werden. Für die Herstellung gasförmiger Kraftstoffe eignen sich Biogasanlagen oder Power-to-Gas-Anlagen (PtG). Bei flüssigen Kraftstoffen bieten Biomass-to-Liquid-Verfahren (BtL) eine vielversprechende Möglichkeit synthetische Kraftstoffe der Zukunft herzustellen. Aktuelle

Studien zeigen, dass diese Energieträger einen unverzichtbaren Baustein im zukünftigen Energiesystem darstellen [11,12].

Ein innovatives BtL-Verfahren ist der am KIT entwickelte bioliq<sup>®</sup>-Prozess (siehe Abbildung 1-1). Dabei werden synthetische Kraftstoffe aus Stroh und andere „lignocellulosehaltige“ Biomasse produziert. Stroh fällt in der Landwirtschaft dezentral als Reststoff an und weist eine geringe Energiedichte auf. Um einen ökonomischen Transport der Biomasse zu einer Produktionsstätte zu ermöglichen, wird die Energiedichte mithilfe einer dezentralen Schnellpyrolyse erhöht. Dabei werden Restfeuchte und flüchtige Bestandteile aus der Biomasse ausgetrieben. Der verbleibende Feststoff (Pyrolysekoks) wird spröde und kann mit geringem Energieaufwand gemahlen werden. Ein Teil der flüchtigen Bestandteile kann zu Pyrolyseöl kondensiert und zu den festen Partikeln beigemischt werden. Die entstehende Brennstoffsuspension (bioSyncrude<sup>®</sup>) hat eine hohe Energiedichte, die kosteneffizient zu einer zentralen Syntheseanlage transportiert werden kann. Kern der Anlage ist ein Hochdruckflugstromvergaser, der bioSyncrude<sup>®</sup> bei Drücken von 40 bar und Temperaturen größer als 1200 °C vergast. Das entstehende Synthesegas ist weitgehend frei von Nebenprodukten und kann in der nachgeschalteten Gasreinigung und -konditionierung gefiltert und aufbereitet werden. Im Syntheseteil der Anlage wird in einem zweistufigen katalytischen Verfahren zunächst Dimethylether (DME) hergestellt und daraus flüssiger Kraftstoff erzeugt. [13]

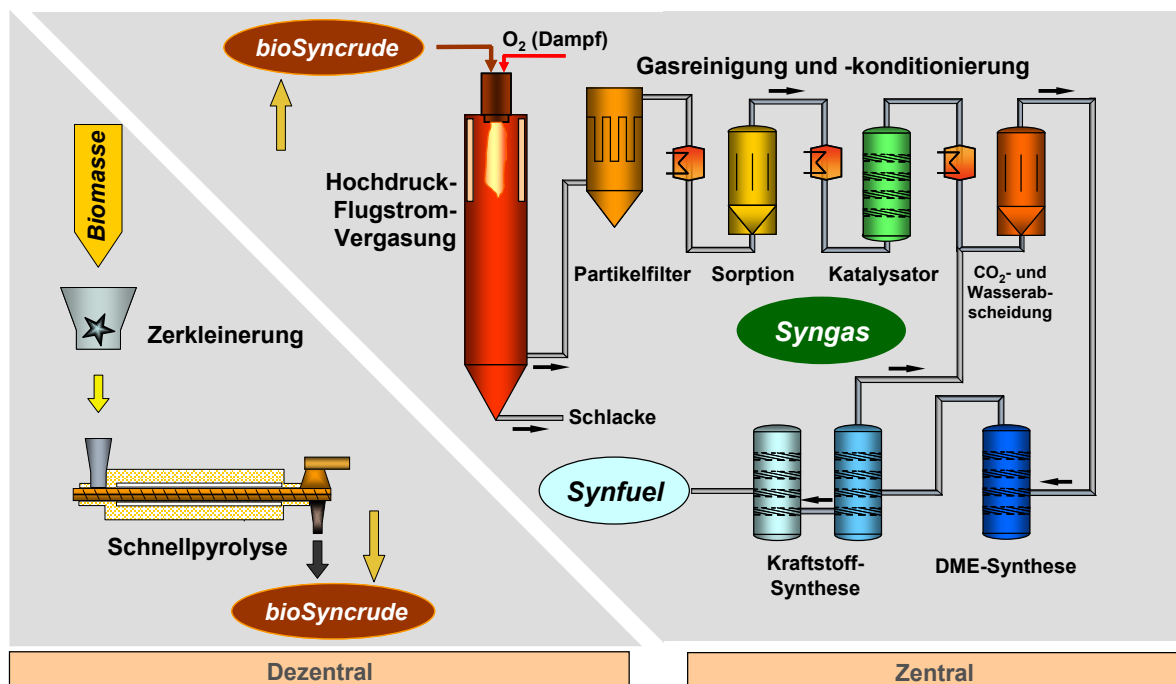


Abbildung 1-1 bioliq<sup>®</sup>-Prozessschema mit dezentraler Pyrolyse und zentraler Syntheseanlage zur Produktion flüssiger synthetischer Kraftstoffen aus lignocellulosehaltiger Biomasse [13].

Die Flugstromvergasung von Suspensionsbrennstoffen ist ein Dreiphasen-Prozess bei hohem Druck und hoher Temperatur. Bei Betrachtung der Vorgänge, die bei der Umsetzung des Brennstoffs stattfinden, ergibt sich ein komplexes Zusammenspiel verschiedener Teilprozesse. Brennstoff wird an der gasgestützten Zerstäuberdüse am Kopf des Vergasers

in feine Tröpfchen zerstäubt. Durch die Düse wird Brennstoff mit Prozessdampf und Sauerstoff als Vergasungsmedium in den Reaktor eingebracht (siehe Abbildung 1-2 links). Die Brennstofftropfen heizen in der heißen Atmosphäre des Reaktors auf. Flüssige Bestandteile verdunsten und zersetzen sich in der heißen Umgebung zu gasförmigen Produkten, die in weiteren Reaktionen zu Synthesegas umgesetzt werden. Der Feststoff durchläuft eine Sekundärpyrolyse, bei der flüchtige Bestandteile ausgasen. Der verbleibende Feststoff wird anschließend durch heterogene Vergasungsprozesse ebenfalls zu Synthesegas umgesetzt. Bei vollständigem Brennstoffumsatz bleiben ausschließlich mineralische Bestandteile aus der Biomasse übrig, die aufgrund der hohen Temperaturen flüssige Schlacke bilden. Diese einfache schematische Betrachtung der ablaufenden Prozesse beschränkt sich auf die Vorgänge am Brennstoff (siehe Abbildung 1-2 links). Wenn zusätzlich die Vorgänge in der Gasphase berücksichtigt werden, ergibt sich ein komplexes Zusammenspiel der einzelnen Teilprozesse mit intensiver gegenseitiger Wechselwirkung. Abbildung 1-2 rechts zeigt ein vereinfachtes Schema der Prozesse im Flugstromvergaser. Um die grundlegenden Zusammenhänge zu verstehen, bedarf es eines mathematischen Modells, das die relevanten Teilprozesse abbildet. Damit kann die Interaktion zwischen den einzelnen Teilprozessen und deren Einfluss auf den Gesamtprozess abgeschätzt werden. [14]

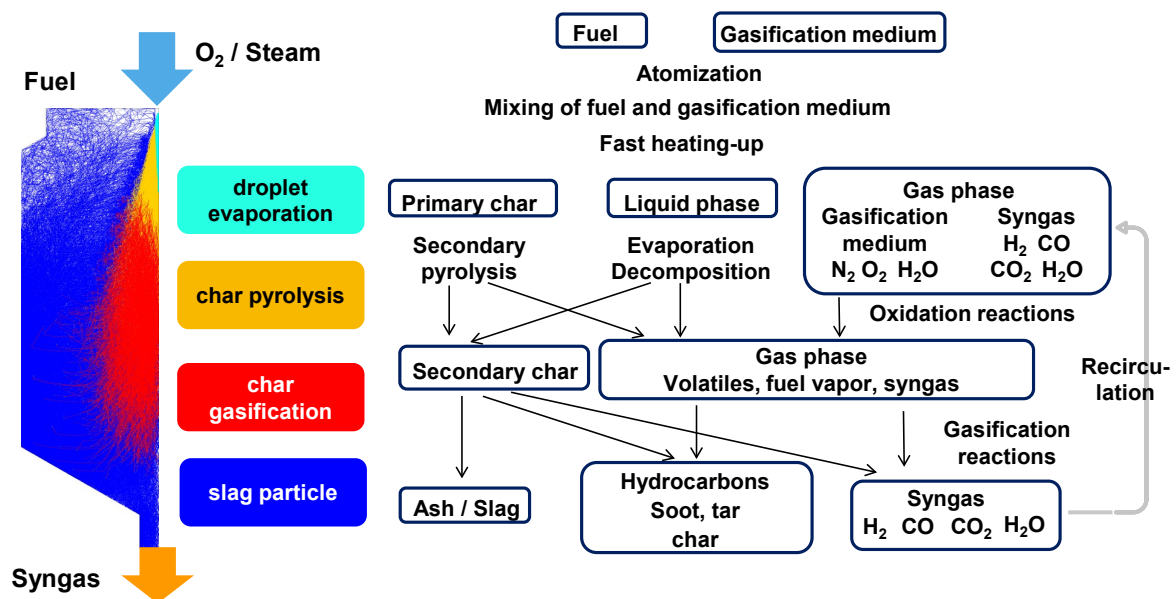


Abbildung 1-2 Links: Trajektorien von Brennstoffpartikeln und Prozessschritte bei der Umsetzung der Brennstoffsuspension. Neuberechnung durch IEVB, TU Clausthal aus [14]. Rechts: Schema der Teilprozesse im Flugstromvergaser. Abbildungen verändert nach [14].

## 2 Zielsetzung und Vorgehen

Ziel dieser Arbeit ist der Aufbau und Validierung des Zweiphasen-Freistrahlmmodells (2Ph-FJM) zur Beschreibung der physikalischen und thermo-chemischen Prozesse in der Hauptreaktionszone eines atmosphärischen Flugstromvergaser. Die Hauptreaktionszone ist der düsennahe Bereich, in dem sich die Flamme befindet und wesentliche Prozesse der Flugstromvergasung stattfinden. Mithilfe des 2Ph-FJM kann der Einfluss verschiedener Faktoren, wie Zusammensetzung und Massenströme von Brennstoff und Vergasungsmedium, sowie Tropfengröße und Düsendurchmesser auf die Prozesse in der Hauptreaktionszone untersucht werden. Das Modell berechnet das Geschwindigkeits-, Temperatur- und Konzentrationsfeld der reagierenden Gasphase sowie den Verlauf von Größen und Geschwindigkeiten von verdampfenden Tropfen. Außerdem werden Gasphasenreaktionen und die Struktur der Flamme abgebildet. Die Modellarchitektur ist modular aufgebaut. Teilmodelle von Subprozessen können ausgetauscht werden, sodass deren Einfluss auf den Gesamtprozess im Rahmen von Sensitivitätsanalysen untersucht werden können. Das Modell ist nicht dazu geeignet, das Strömungsfeld im gesamten Flugstromreaktor zu simulieren. Das Strömungsfeld wird nur im Bereich des Zweiphasen-Freistrahls abgebildet und nicht im Bereich der äußeren Rezirkulationszone eines Flugstromvergaser. Die Ergebnisse aus dem 2Ph-FJM werden im Rahmen dieser Arbeit plausibilisiert und mit Messungen aus dem atmosphärischen Flugstromvergaser REGA validiert. Darüber hinaus wird der Einfluss der Tropfengrößen und der Düsengeometrie auf die Prozesse im reagierenden Zweiphasen-Freistrahls untersucht.

Das 2Ph-FJM basiert auf einem empirischen Freistrahlsansatz, bei dem Geschwindigkeits- und Konzentrationsverteilung durch Gauß-Profile modelliert werden. Der Freistrahlsansatz wurde ursprünglich zur Beschreibung des Einphasen-Freistrahls von Günther [15] entwickelt. Die Gauß-Profile werden für das 2Ph-FJM mithilfe des Impulsaustauschfaktors  $c_i$  an die Gasphase des Zweiphasen-Freistrahls angepasst. Der Parameter  $c_i$  wird in Kaltversuchen mit Zweiphasen-Freistrahlen unter atmosphärischen Bedingungen experimentell bestimmt. Brennstofftropfen werden im 2Ph-FJM durch die Teilprozesse Beschleunigung, Aufheizung und Verdampfung mit bekannten Modellansätzen aus der Literatur abgebildet. Für die chemischen Reaktionen in der Gasphase des Flugstromvergaser werden Gleichgewichtsreaktionen angenommen.

Der weitere Aufbau der Arbeit ist wie folgt gegliedert: In Kapitel 3.1 werden die Grundlagen turbulenter Freistrahlen vorgestellt. Der im Rahmen dieser Arbeit verwendete Freistrahlsansatz zur Beschreibung turbulenter reagierender Zweiphasen-Strömungen ist nicht Stand der Technik. Daher wird besonderer Fokus auf die Grundlagen turbulenter Freistrahlen gelegt. In Kapitel 3.2 - 3.6 werden die Grundlagen der Flugstromvergasung sowie die für diese Arbeit relevanten Teilprozesse Zerstäubung, Beschleunigung, Aufheizung und Verdampfung von Tropfen sowie die chemischen Reaktionen in der Gasphase behandelt. In Kapitel 4 werden die experimentellen Aufbauten des atmosphärischen Zerstäuberprüfstands ATMO und des atmosphärischen Flugstromvergaser REGA, der verwendeten Messtechnik sowie die eingesetzten Messmethoden vorgestellt. In Kapitel 5 werden die Untersuchungen im Zweiphasen-Freistrahls an der ATMO beschrieben. Dabei wird in Kaltversuchen gezeigt, dass die Gauß-Profile zur Beschreibung des Einphasen-Freistrahls generell geeignet sind, um die Gasphase des Zweiphasen-Freistrahls zu modellieren. Der Einfluss der dispersen Phase auf die Gasphase wird für unterschiedliche Zerstäubungsregime aufgezeigt und der

Impulsaustauschfaktor  $c_i$  als Eingangsgröße für das 2Ph-FJM an den Zweiphasen-Freistrahler angepasst. In Kapitel 5 wird auch die Tropfengrößenverteilung als weiterer Eingangsgröße für das 2Ph-FJM und die radiale Verteilung der Flüssigkeit bestimmt. In Kapitel 6 wird als Kern dieser Arbeit das Zweiphasen-Freistrahlermodell 2Ph-FJM zur Untersuchung der Hauptreaktionszone im atmosphärischen Flugstromvergaser vorgestellt. Dieses Kapitel beleuchtet auch wichtige Annahmen, Voraussetzungen und Grenzen im 2Ph-FJM. Kapitel 7 beinhaltet Simulationsergebnisse für einen Validierungsversuch, die plausibilisiert und mit experimentellen Daten aus dem atmosphärischen Flugstromvergaser (REGA) verglichen werden. Auf Basis des Validierungsversuches wird der Einfluss der Tropfengröße und der Düse untersucht. Darüber hinaus wird in Kapitel 7 die Größe der verwendeten Kontrollvolumina validiert. Abschließend werden die wesentlichen Ergebnisse dieser Arbeit in Kapitel 8 zusammengefasst.

### 3 Theoretische Grundlagen

#### 3.1 Grundlagen turbulenter Freistrahlen

##### 3.1.1 Einleitung turbulenter Einphasen-Freistrahls

Ein Freistrahls ist ein Fluidstrom, der aus einer Öffnung, zum Beispiel einer Düse, austritt und sich ungestört von festen Wänden oder weiteren Strömungen ausbreitet. [15]. Im idealisierten Fall einer turbulenten Kolbenströmung am Düsenaustritt bewegt sich der Fluidstrom über die gesamte Düsenaustrittsfläche mit konstanter Geschwindigkeit  $u_0$  (siehe Abbildung 3-1). Aufgrund des Geschwindigkeitsgradienten zwischen ruhendem Umgebungsmedium und dem Strahlrand wirken Reibungskräfte, die das Fluid durch Impulsaustausch mit der Umgebung abbremsten [16]. Diese Störung wird mit zunehmendem Düsenabstand vom Strahlrand in Richtung der Symmetrieachse fortgesetzt. Bei Einphasen-Freistrahlen, wie zum Beispiel einem Luftfreistrahls in die ruhende Umgebung, erreicht die Störung nach einem Düsenabstand von etwa 4-5 Düsendurchmessern die Strahlachse [17–19]. Die unbeeinflusste Zone des Freistrahls ist der kegelförmige Kernbereich (engl: *potential core*) [20]. Daran anschließend folgt ein Übergangsbereich. In diesem Bereich verliert der Strahl vollständig die Identität des ursprünglichen Strömungsprofils, welches durch die Düse aufgeprägt wurde. Es bilden sich radiale Geschwindigkeitsprofile in Form von Gauß-Profilen aus [21–24]. Nach etwa 8-10 Düsendurchmessern [15,25,26] ist die Transformation der Radialprofile zu Gauß-Profilen abgeschlossen und der Ähnlichkeitsbereich beginnt. Namensgebend für den Ähnlichkeitsbereich sind die selbstähnlichen Eigenschaften des Freistrahls, die weiter unten vorgestellt werden.

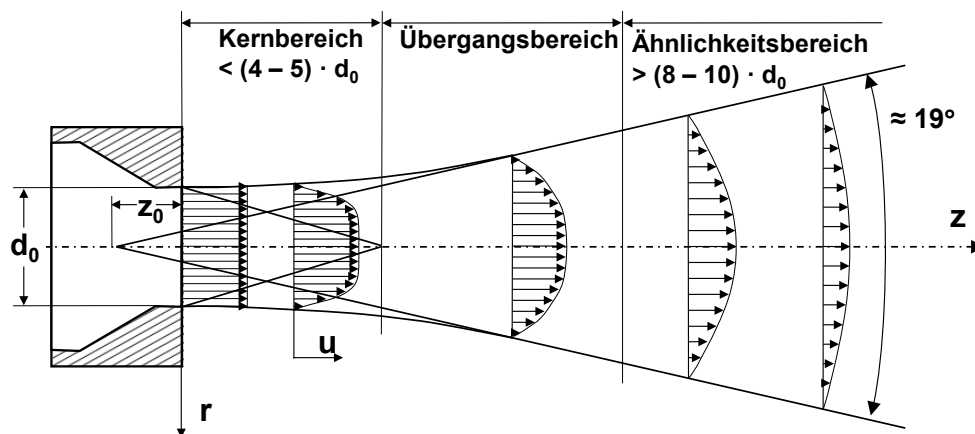


Abbildung 3-1 Entwicklung der Geschwindigkeitsprofile bei unterschiedlichen Abständen zur Düse und die drei charakteristischen Bereiche im achsensymmetrischen turbulenten Einphasen-Freistrahls.

Die stochastische Teilchenbewegung der turbulenten Strömung im Einphasen-Freistrahls beschleunigt Fluid aus der Umgebung. Der Impulsaustausch quer zur Hauptströmungsrichtung mischt das Fluid aus der Umgebung mit dem Strahlmedium. Das Einmischen von Fluid aus der Umgebung ist das so genannte Entrainment. Durch das Entrainment nimmt die bewegte Masse  $\dot{m}$  im Freistrahls stromab zu und die Geschwindigkeit nimmt ab. Dabei bleibt der Gesamtimpulsstrom  $\dot{I}$  des Freistrahls erhalten.

(siehe Kapitel 3.1.2). Im Ähnlichkeitsbereich nimmt die Masse linear mit dem Düsenabstand zu (siehe Gleichung (3-1)). Mit dem typischen Geschwindigkeitsverlauf im Freistrah und der Impulserhaltung kann die lineare Zunahme der Masse auch mathematisch gezeigt werden (siehe Anhang A.III). Die Proportionalitätskonstante in Gleichung (3-1) wurde von Ricou (1960) [25] experimentell bestimmt. Daraus abgeleitet gilt als Faustformel, dass nach jeweils drei Düsendurchmessern der Massenstrom aus der Düse  $\dot{m}_0$  aus der Umgebung zusätzlich zur bewegten Masse in den Strahl eingemischt wird. Abbildung 3-2 zeigt schematisch die Zunahme der bewegten Masse in den drei Bereichen des Freistrahls. Da die bewegte Masse ab Beginn des Ähnlichkeitsbereichs linear zunimmt, ergibt sich ein konstanter Öffnungswinkel des Freistrahls von etwa  $19^\circ$  [15,27]. Ein exakter Öffnungswinkel des Freistrahls kann nicht angegeben werden, da die Geschwindigkeit zum Rand asymptotisch gegen null läuft und somit keine klare Grenze des Freistrahls definiert werden kann.

$$\frac{\dot{m}}{\dot{m}_0} = 0,32 \cdot \sqrt{\frac{\rho_{ENT}}{\rho_0}} \cdot \frac{z}{d_0} \quad (3-1)$$

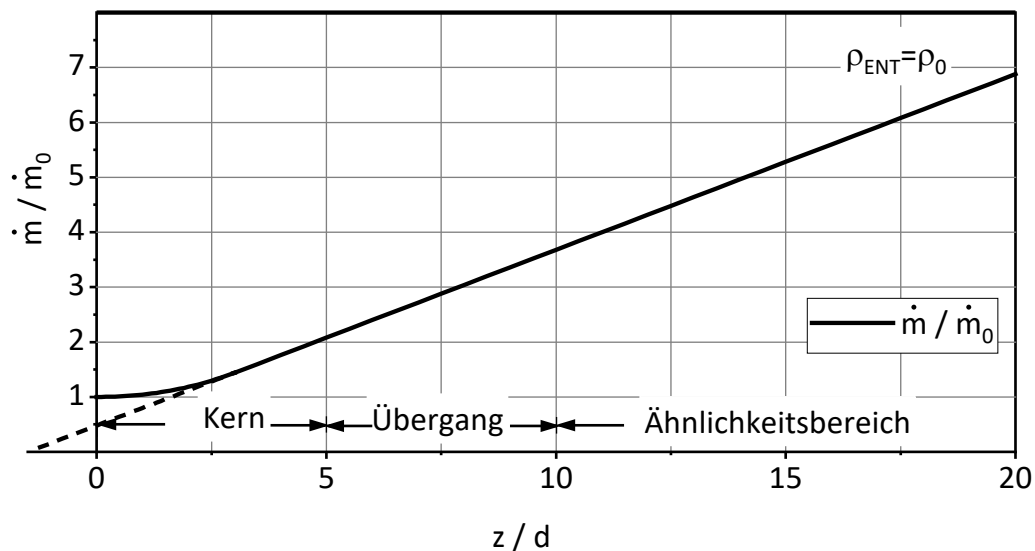


Abbildung 3-2 Zunahme der bewegten Masse im homogenen (= ohne Dichtegradient zur Umgebung) Einphasen-Freistrah aus runder Düse mit Durchmesser  $d$  nach Gleichung (3-1).

### 3.1.2 Impulserhaltung im turbulenten Einphasen-Freistrah

An der Düse kann der Strahl je nach Düsengeometrie und Gasaustrittsgeschwindigkeit turbulent oder laminar austreten. In Abbildung 3-3 ist die Strömung aufgrund der konischen Düsenform laminar. An der Kontaktfläche des Strahls zur Umgebung wachsen kleine Störungen aufgrund von Kevin-Helmholtz Instabilitäten zu größeren heran. Durch die Störung beginnt eine Rotationsbewegung, ähnlich einer brechenden Wasserwelle und erzeugt im Randbereich einen ringförmigen Wirbel von der Größe der Austrittsöffnung, der den laminar-turbulenten Umschlagspunkt markiert. Dieser Wirbel zerfällt stromab in

zahlreiche kleinere Wirbel und verursacht eine stochastische Fluidbewegung, die eine Struktur aus Wirbeln unterschiedlicher Größe bildet. [28]

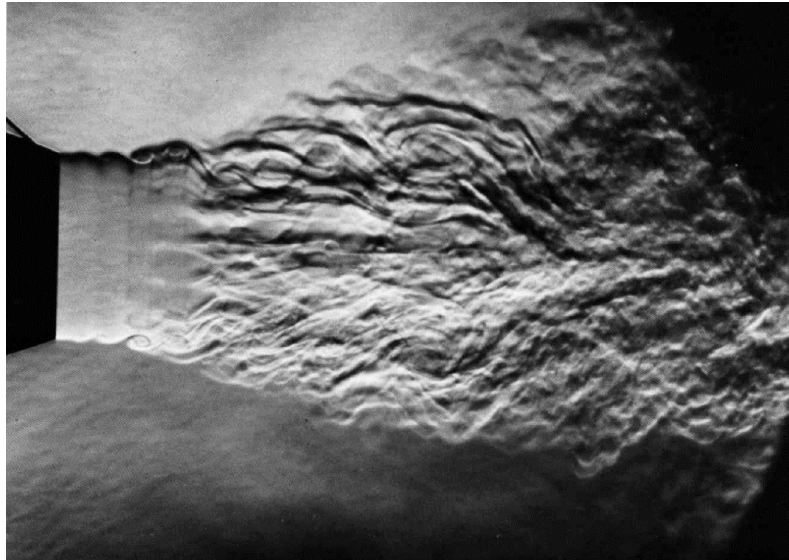


Abbildung 3-3 Schlierenfotografie einer laminar austretenden Luftströmung aus einer runden Düse ( $Re \approx 40000$ ) und Ausbildung eines turbulenten Freistrahls [29].

Eine turbulente Strömung kann nur bei Fluidströmungen mit ausreichend großer kinetischer Energie auftreten. In turbulenten Strömungen ist keine konstante lokale Geschwindigkeit zu beobachten, da die Wirbel eine stochastisch fluktuierende Fluidbewegung verursachen. Die tatsächliche lokale Geschwindigkeit kann als Summe der zeitlich gemittelten Geschwindigkeit  $u$  und einer überlagerten Schwankungsgeschwindigkeit  $u'$  betrachtet werden [30]. Die turbulente kinetische Energie eines einzelnen Wirbels kann durch die Größe der Schwankung charakterisiert werden. Die gesamte turbulente kinetische Energie der Strömung kann als Summe der Schwankungen aller Wirbel betrachtet werden. Durch Frequenzanalyse von  $u'$  kann eine Wellenzahl  $\kappa$  bestimmt werden. Die Wellenzahl ist ein Maß für die Anzahl der Wirbel pro Längeneinheit. Der Anteil der kinetischen Energie, der auf Wirbel der Wellenzahl  $\kappa$  entfällt, ist die spektrale Energiedichte  $E(\kappa)$ . Durch doppellogarithmische Auftragung ergibt sich das Energiespektrum  $E(\kappa)$ , das als „Energiekaskade“ turbulenter Strömungen bezeichnet wird (siehe Abbildung 3-4) [30].



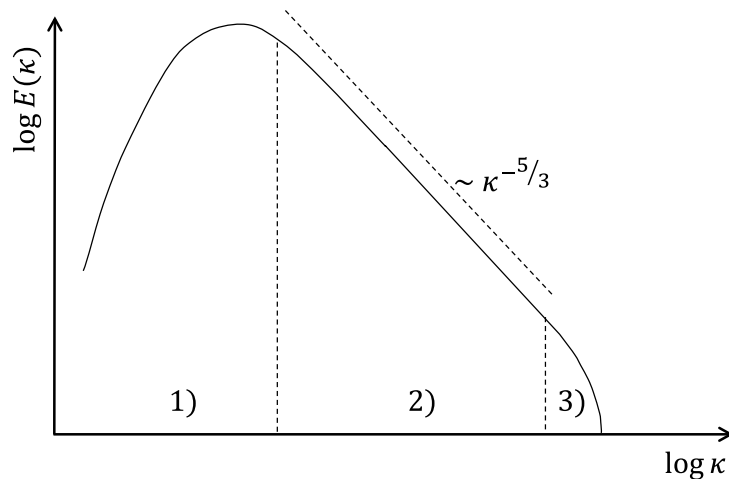


Abbildung 3-4 Energiespektrum  $E(\kappa)$  einer turbulenten Strömung in doppellogarithmisches Auftrugung mit der Einteilung in unterschiedliche Turbulenzbereiche: 1) Produktionsbereich, 2) Inertialbereich 3) Dissipationsbereich. Abbildung verändert aus [31].

Wirbel werden, wie bereits oben beschrieben, nahe der Düse durch den laminar-turbulenten Umschlag gebildet. Dieses Stadium der Strömung wird als Produktionsbereich bezeichnet. Die Wirbel sind in der Größenordnung vom Durchmesser der Düse und weisen eine geringe Wellenzahl auf. Nach dem Produktionsbereich folgt der Inertialbereich. In diesem Bereich zerfallen große Wirbel zu kleineren. Die kinetische Energie eines zerfallenden Wirbels wird nahezu vollständig auf die kleineren Wirbel übertragen. Aufgrund der Drehimpulserhaltung nimmt die Wellenzahl der Wirbel zu [27]. Durch den Wirbelzerfall wird die turbulente kinetische Energie des Energiespektrums zu höheren Wellenzahlen verschoben. Die spektrale Energiedichte  $E(\kappa)$  nimmt typischerweise proportional zur Wellenzahl  $\sim \kappa^{-5/3}$  ab. Im Inertialbereich sind die Wirbel so groß, dass viskose Reibungskräfte zwischen sich entgegengesetzt bewegenden Wirbeln keine Rolle spielen. Die viskosen Reibungskräfte sind in diesem Bereich im Vergleich zur kinetischen Energie der Wirbel gering. Die kinetische Energie wird somit hauptsächlich durch elastische Stöße der Moleküle transportiert, wodurch der Impuls vollständig erhalten bleibt. Der sich anschließende Dissipationsbereich setzt sich aus den kleinsten Wirbeln zusammen. Diese Wirbel werden Kolmogorow-Wirbel genannt. Mit Erreichen dieser kleinsten möglichen Längenskalen, bei der Wirbel existieren können (Mikroskala von Kolmogorow), wird der Strömung nun durch viskose Reibung kinetische Energie entzogen und in ungeordnete Molekülbewegung (Wärme) umgewandelt [32]. Im Dissipationsbereich nimmt das Energiespektrum nach der Theorie von Heisenberg (1948) [33] exponentiell ab [30]. Die Größe der Kolmogorow-Wirbel ist abhängig vom Austrittsimpuls der Strömung. Mit steigendem Austrittsimpuls verschiebt sich der Übergang zwischen Inertialbereich und Dissipationsbereich zu größer Wellenzahlen, wodurch kleinere Wirbel in diesem Bereich existieren können. Das gesamte Phänomen des Wirbelzerfalls ist als turbulente Energiekaskade bekannt [34–36].

Im Freistrahls zerfallen große Wirbel erst nach vergleichsweise langer Lebensdauer zu kleineren Wirbeln, da keine festen Wände in der Strömung vorhanden sind, die die Ausbreitung der Wirbel behindern würden. Daher kann im turbulenten Freistrahls Impulstransport über weite Strecken im Inertialbereich stattfinden. Der Impulsstrom  $\dot{I}_0$  des Freistrahls aus der Düse bleibt folglich über weite Strecken stromab erhalten [16,17,25]. Die

Impulserhaltung im Freistrahle konnte auch experimentell bestätigt werden [37–39]. Darüber hinaus gibt es im (nicht-reagierenden) turbulenten Freistrahle keine Quellen und Senken für Wärme und Stoff. Neben Impuls werden somit auch die thermische Energie und der Stoffstrom aus der Düse verlustfrei durch die Strömung transportiert.

### 3.1.3 Queraustausch im turbulenten Einphasen-Freistrahle

Fluidteilchen in turbulenten Strömungen bewegen sich aufgrund der Rotation der Wirbel sowohl in Hauptströmungsrichtung als auch quer dazu. Somit findet auch Impulsaustausch quer zur Hauptströmungsrichtung statt. Der turbulente Impulstransport überlagert und intensiviert die viskose Reibung. Der turbulente Impulstransport ist um mehrere Größenordnungen größer als Impulstransport durch viskose Reibung. Mathematisch kann die turbulente Impulsübertragung analog zum Newton'schen Gesetz für laminare Strömung behandelt werden. Dabei wird die molekulare kinematische Viskosität  $\nu$  durch eine turbulente Wirbelviskosität turbulente (Schein-) Zähigkeit  $\nu_t$ , auch als turbulente (Schein-) Zähigkeit bezeichnet, ersetzt (Gleichung (3-2)). Die turbulente Wirbelviskosität  $\nu_t$  (engl.: *eddy viscosity*) ist im Gegensatz zur molekularen Viskosität keine Stoffeigenschaft, sondern abhängig vom Strömungszustand [40]. Damit ergibt sich in Anlehnung an das Newton'sche Gesetz die turbulente Schubspannung  $\tau_t$ . Der Geschwindigkeitsgradient quer zur Hauptströmungsrichtung ( $y$ - Richtung) kann dabei als treibendes Gefälle betrachtet werden.

$$\tau_t = -\nu_t \cdot \rho \cdot \frac{du}{dy} \quad (3-2)$$

Wärme und Stofftransport in der turbulenten Strömung können ebenfalls analog zur Impulsübertragung durch turbulente Transportgrößen definiert werden. Dazu wird im Fourier'schen Gesetz für Wärmeleitung die Wärmeleitfähigkeit  $\lambda$  und im Fick'schen Gesetz für Diffusion der Diffusionskoeffizient  $D$  durch entsprechende turbulente (effektive) Größen ersetzt. Für die effektive Wärmestromdichte  $\dot{q}_t$  und die effektive Teilchenstromdichte  $j_t$  ergeben sich Gleichung (3-3) und (3-4) mit der Fluidtemperatur  $T$  und der Konzentration  $\tilde{c}$ . Im turbulenten Freistrahle sind die turbulenten effektiven Größen ( $\nu_t, \lambda_t, D_t$ ) im Vergleich zu den molekularen Stoffgrößen ( $\nu, \lambda, D$ ) um Größenordnungen größer [25,27,30].

$$\dot{q}_t = -\lambda_t \cdot \frac{dT}{dy} \quad (3-3)$$

$$j_t = -D_t \cdot \frac{d\tilde{c}}{dy} \quad (3-4)$$

Das Verhältnis von effektivem Impulstransport und effektivem Stofftransport wird durch die dimensionslose turbulente Schmidt-Zahl  $Sc_t$  beschrieben (Gleichung (3-5)). Das Verhältnis von effektivem Impulstransport und effektivem Wärmetransport ist durch die turbulente

Prandtl-Zahl  $Pr_t$  definiert (Gleichung (3-6)). Das Verhältnis zwischen effektivem Wärme- und Stofftransport wird durch die turbulente Lewis-Zahl dargestellt (Gleichung (3-7)). Die dimensionslosen Kennzahlen in Gleichung (3-5) - (3-7) werden alle in Anlehnung an die molekularen Größen definiert.

$$Sc_t = \frac{v_t}{D_t} \quad (3-5)$$

$$Pr_t = \frac{v_t}{\lambda_t} \quad (3-6)$$

$$Le_t = \frac{\lambda_t}{D_t} = \frac{Sc_t}{Pr_t} \quad (3-7)$$

Molekulare Diffusion und Wärmeleitung können im turbulenten Freistrahle vernachlässigt werden. Wenn zusätzlich auch Strahlung vernachlässigt wird, beruhen Wärme- und Stofftransport ausschließlich auf konvektivem Transport im turbulenten Fluidstrom. Da die Austauschvorgänge auf demselben Transportmechanismus beruhen, sind die entsprechenden turbulenten Austauschgrößen ( $\lambda_t, D_t$ ) und damit auch  $Sc_t$  und  $Pr_t$  gleich groß. Das Verhältnis aus turbulentem Stoff- und Wärmetransport ( $Le_t$ ) nimmt den Wert eins an. Der effektive Impulstransport ist geringer als der Wärme- und Stofftransport. Typische Werte für  $Pr_t$  und  $Sc_t$  sind deshalb kleiner eins und liegen zwischen 0,7 und 0,8 [22,41–43].

### 3.1.4 Homogener Einphasen-Freistrahle

#### Geschwindigkeitsverlauf im homogenen Freistrahle

Ein homogener Freistrahle weist keine Temperatur- oder Konzentrationsgradienten zwischen Strahl und Umgebung auf. Damit besteht auch kein Dichtegradient zwischen Strahl und Umgebung. Im Freistrahle werden die Geschwindigkeitsprofile mit zunehmendem Abstand zur Düse aufgrund von Entrainment (siehe Kapitel 3.1.1) breiter. Die Geschwindigkeit nimmt entlang der Achse ab. Im folgenden Abschnitt werden diese beiden Aspekte separat betrachtet.

Die Geschwindigkeit entlang der Achse ist im Kernbereich bis zum Beginn des Übergangsbereichs konstant und nimmt im Ähnlichkeitsbereich hyperbolisch ab. In Abbildung 3-5 (links) sind Messdaten im Ähnlichkeitsbereich von Hussein, Capp & George (1994) [24] gezeigt. In Abbildung 3-5 rechts ist der Kehrwert der Geschwindigkeit entlang der Achse  $u_m$  normiert mit der Düsenaustrittsgeschwindigkeit  $u_0$  über dem dimensionslosen Düsenabstand  $\zeta$  aufgetragen. Für  $\zeta$  wird der axiale Düsenabstand  $z$  um einen virtuellen Düsenabstand  $z_0$  (Erklärung weiter unten) reduziert und mit dem Düsendurchmesser  $d_0$  normiert (Gleichung (3-8)). In Abbildung 3-5 rechts ergibt sich eine Gerade mit Steigung  $1/B_u$ . Bedingt durch Einlauffeffekte am Düsenaustritt schneidet die Gerade nicht zwangsläufig die Abszisse bei  $z = 0$ . Der virtuelle Strahlursprung  $z_0$  in Gleichung (3-8) wird so angepasst, dass sich eine Ursprungsgerade mit Gleichung (3-9) ergibt. Dabei ist  $B_u$

(engl.: *centerline decay rate*) ein dimensionsloses Maß für den Geschwindigkeitsgradienten entlang der Achse.  $B_u$  nimmt im gesamten Ähnlichkeitsbereich einen konstanten Wert an. Der konstante Wert für  $B_u$  ist eine direkte Konsequenz aus Impulserhaltung (siehe Anhang A.I). Je kleiner der Wert von  $B_u$ , desto steiler ist der Abfall der Geschwindigkeit. Typische Werte für  $B_u$  liegen im Bereich 5,8 - 6,2 und Werte für  $z_0$  betragen  $\pm$  wenige Düsendurchmesser (siehe Tabelle 3-1).

$$\zeta = \frac{z - z_0}{d_0} \quad (3-8)$$

$$\frac{u_m}{u_0} = \frac{B_u}{\zeta} \quad (3-9)$$

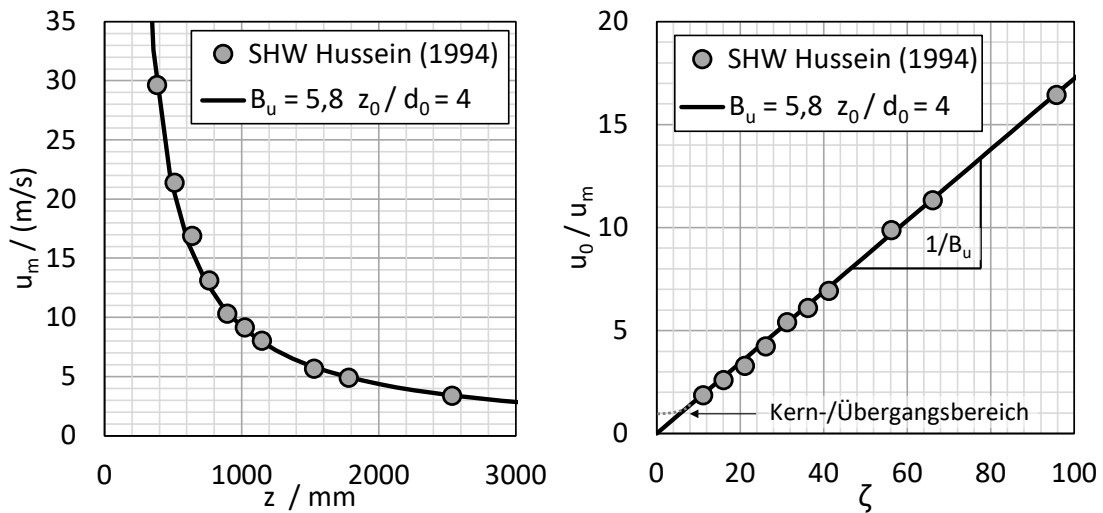


Abbildung 3-5 Geschwindigkeitsverlauf entlang der Freistrahlachse gemessen mit stationärer Hitzdrahtanemometrie. Eigene Darstellung von Messdaten und Fit aus [24]. Links: Auftragung der Geschwindigkeit  $u_m$  entlang der Achse mit  $u_0 = 56 \text{ m/s}$  und  $d_0 = 25,4 \text{ mm}$ . Rechts: Auftragung in dimensionsloser Darstellung zur Visualisierung der Ursprungsgeraden mit Steigung  $1/B_u$ .

Radiale Geschwindigkeitsprofile von turbulenten Freistrahlen verhalten sich ab einem Düsenabstand von etwa 8-10 Düsendurchmessern selbstähnlich. Diese mathematische Eigenschaft ist namensgebend für den Ähnlichkeitsbereich. Das Konzept der Selbstähnlichkeit kommt in vielen Bereichen, wie zum Beispiel in der fraktalen Geometrie zum Einsatz und dient der Beschreibung von sich wiederholenden Strukturen in unterschiedlichen Größenskalen. Selbstähnlich sind dabei Strukturen, die durch Wahl geeigneter Maßstabsfaktoren untereinander zur Deckung gebracht werden können [30]. Im Zusammenhang mit Freistrahlen sind radiale Geschwindigkeitsprofile bei unterschiedlichen Düsenabständen selbstähnlich. Für die Wahl des geeigneten Maßstabsfaktors wird in Gleichung (3-10) zunächst ein dimensionsloser Radius  $\eta$  definiert, mit dem radialen Abstand  $r$  und dem axialen Abstand  $z$  reduziert um den virtuellen Strahlursprung  $z_0$ .

$$\eta = \frac{r}{z - z_0} \quad (3-10)$$

Um die Radialprofile bei unterschiedlichen Düsenabständen untereinander zur Deckung zu bringen, wird die Geschwindigkeit  $u(r, z)$  mit der Geschwindigkeit auf der Achse  $u_m(z)$  normiert und über dem dimensionslosen Radius  $\eta$  aufgetragen. Abbildung 3-6 zeigt selbstähnliche Geschwindigkeitsprofile aus Messungen von Panchapakesan & Lumley (1993) [39]. Durch die Selbstähnlichkeit kann die Anzahl der unabhängigen Variablen zur Beschreibung der Geschwindigkeitsprofile im Freistrah von zwei  $(r, z)$  auf eine  $(\eta)$  reduziert werden.

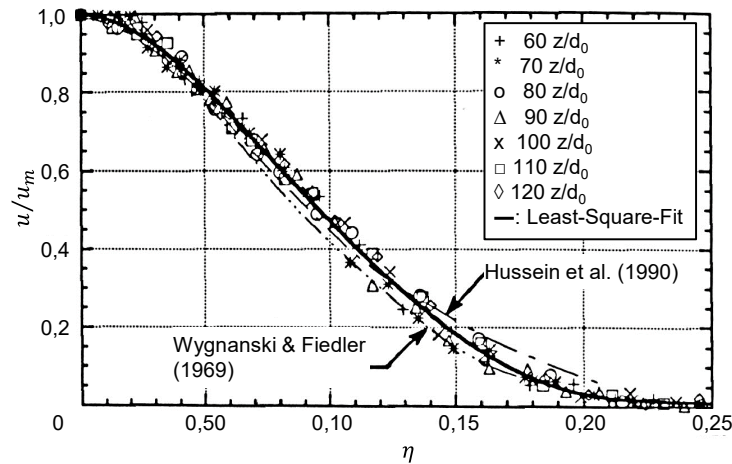


Abbildung 3-6 Ähnlichkeitsdarstellung der radialen Geschwindigkeitsprofile eines Luft-Freistrahls in ruhende Umgebungsluft aus Geschwindigkeitsmessungen mit einem Hitzedraht von Panchapakesan & Lumley (1993) bei verschiedenen Düsenabständen im Ähnlichkeitsbereich [39] und zusätzliche Daten aus [24,44]. Abbildung verändert aus [39].

Das radiale Geschwindigkeitsprofil verläuft zum Rand hin asymptotisch gegen null. Um die Breite des Strahls zu charakterisieren, wird ein Halbwertsradius  $r_{0,5}$  in Gleichung (3-11) definiert. Aufgrund der Selbstähnlichkeit nimmt der Halbwertsradius  $r_{0,5}$  linear mit dem Düsenabstand  $z$  zu. Der dimensionslose Halbwertsradius in Gleichung (3-12) ist für alle Freistrahlen nahezu konstant und beträgt  $\eta_{0,5} \approx 0,09$ .

$$u(r_{0,5}, z) = 0,5 \cdot u_m(z) \quad (3-11)$$

$$\eta_{0,5} = \frac{r_{0,5}}{z - z_0} \quad (3-12)$$

### Geschwindigkeitsmessung in der Literatur

Geschwindigkeitsmessungen im turbulenten Freistrah sind seit Anfang des 20. Jahrhunderts Gegenstand zahlreicher Untersuchungen. Bereits 1915 untersucht Trüpel den turbulenten Freistrah [45]. Im Jahr 1933 bestimmt Ruden in der Aerodynamischen Versuchsanstalt in Göttingen den Geschwindigkeitsabfall entlang der Achse mithilfe von Staudrucksonden

[46]. Ruden erkennt einen hyperbolischen Abfall und bestimmt  $B_u$  zu 6,45 und einen virtuellen Strahlsprung zu  $z_0 = 0,66 d_0$ . Diese Werte unterscheiden sich nur geringfügig von späteren Messungen. Hinze & Van der Hegge Zijnen (1949) beschreiben eine lineare Ausbreitung des Freistrahls, die in einem konstanten Ausbreitungswinkel und einem dimensionslosen Halbwertsradius  $\eta_{0,5}$  resultiert. Des Weiteren zeigen Hinze & Van der Hegge Zijnen anhand von Geschwindigkeitsmessungen, dass der turbulente Freistrahel selbstähnlich ist [47].

Die Messungen in der ersten Hälfte des 20. Jahrhunderts weisen jedoch experimentelle Unsicherheiten auf, unter anderem bei der Erfassung der Geschwindigkeit am Rand des Strahls. Dies liegt vor allem an der Ungenauigkeit der verfügbaren Messinstrumente bei geringer Strömungsgeschwindigkeit. Das veranlasst Wygnanski & Fiedler 1969 einen stationären Hitzdrahtanemometer (engl.: *hot wire*) zu verwenden [44]. Die Ansprechzeit und die Genauigkeit werden verbessert, sodass neben der mittleren Geschwindigkeit auch turbulente Fluktuationen der Geschwindigkeit erfasst werden können. Chen & Rodi (1975) entwickeln eine neue Methode zur Auswertung der Signale des Hitzdrahtanemometers [48] und kommen zu ähnlichen Ergebnissen wie Wygnanski & Fiedler [49]. Die Veröffentlichungen von Wygnanski & Fiedler sowie Chen & Rodi entwickeln sich zur Standardreferenz für Geschwindigkeitsmessungen im turbulenten Freistrahel, die für einige Jahre verwendet wurde.

Seif (1981) analysiert die Daten von Wygnanski & Fiedler (1969) anhand der publizierten Werte für  $B_u$  und  $\eta_{u,0,5}$  erneut und stellt fest, dass der Gesamtimpulsstrom bei 50 Düsendurchmessern stromab auf etwa 69 % des ursprünglichen Impulsstroms aus der Düse abgefallen ist [50]. Auch bei der Analyse der Daten von Chen & Rodi (1975) kommt Seif (1981) zu einem ähnlichen Ergebnis. Die Ursache für diesen Impulsstromverlust untersucht Capp (1983) durch Vergleich der Geschwindigkeitsmessungen eines Phasen-Doppler-Anemometers (PDA) mit Messungen durch einen Hitzdrahtanemometer. Capp (1983) wiederholt die Versuche in einem wesentlich größeren Versuchsraum bei ansonsten gleichen Bedingungen. Er stellt fest, dass bei Wygnanski & Fiedler Rezirkulation aufgetreten sein muss, da der Raum in dem sich der Freistrahel ausbreitet, zu klein gewählt wurde [38]. Durch Rezirkulation wird eine, dem Freistrahel entgegengerichtete Strömung, induziert, die den Impulsstrom reduziert. George (1990) sieht darin die Ursache, dass Wygnanski & Fiedler (1969) kleinere Werte für  $B_u$  bestimmt haben als bei späteren Messungen von Capp (1983) [51]. Außerdem können Wygnanski & Fiedler (1969) entlang der Achse keinen einheitlichen Wert für  $B_u$  finden, sondern unterteilt den Ähnlichkeitsbereich in zwei Abschnitte mit unterschiedlichen Werten für  $B_u$ . Dies deutet ebenfalls darauf hin, dass Impulserhaltung nicht erfüllt ist. Die Messungen von Capp (1983), die in einem Raum ausreichender Größe durchgeführt wurden, erfüllen die Impulserhaltung. Spätere Messungen, die im Folgenden vorgestellt werden, erfüllen dies ebenso.

Panchapakesan & Lumley (1993) [39] verwenden einen bewegten Hitzdraht (engl.: *flying hot wire*), Hussein, Capp & George (1994) [24] sowie Chua & Antonia (1986) [37] und Burattini & Antonia (2005) [52] einen stationären Hitzdrahtanemometer. Alle Autoren bestimmen Werte für  $B_u$  zwischen 5,8 und 6,1. Die Messungen von Hussein, Capp & George (1994) und Panchapakesan & Lumley (1993) wurden mit großer Sorgfalt durchgeführt. Die Ergebnisse zeigen große Übereinstimmung und gelten als bester Benchmark zur Validierung von Strömungssimulationen [53]. Tabelle 3-1 zeigt eine Übersicht von häufig zitierten Quellen für die Untersuchung des Strömungsfelds von Freistrahlen.

Tabelle 3-1: Zusammenstellung von Geschwindigkeitsmessungen im homogenen Freistrah (Luft - Luft) aus runder Düse

Quelle	Messtechnik	$Re_0$	$B_u$	$z_0$	$\eta_{0,5,u}$	$\dot{I}/\dot{I}_0$
Hussein, Capp & George (1994) [24]	Hot Wire LDA	$9,6 \cdot 10^4$	5,9 5,8	$4 \cdot d_0$	0,102 0,094	0,97
Panchapakesan & Lumley (1993) [39]	Flying Hot Wire	$1,1 \cdot 10^4$	6,06	0	0,096	1,04
Chua & Antonia (1986) [37]	Hot Wire	$5,2 \cdot 10^4$	5,92	$1 \cdot d_0$	0,099	1,03
Burattini & Antonia (2005) [52]	Hot Wire	$1,3 \cdot 10^5$	6,0	$4,4 \cdot d_0$	k.A.	k.A.
Wynanski & Fiedler (1969) [44]	Hot Wire	$1,0 \cdot 10^5$	5,4	$3 \cdot d_0$	0,086	0,71
Rodi (1972) [54]	Hot Wire	$8,7 \cdot 10^4$	5,85	k.A.	0,086	0,79
Hinze & Van der Hegge Zijnen (1949) [47]	Drucksonde	$6,9 \cdot 10^4$	6,39	$0,6 \cdot d_0$	0,094	1,09 (*)

(\*) Aus charakteristischen Werten ( $B_u, \eta_{0,5,u}$ ) abgeschätzt

### 3.1.5 Inhomogener Einphasen-Freistrah

#### Das Konzept des äquivalenten Düsendurchmessers

Inhomogene Freistrahlen weisen einen Dichtegradient zwischen Strahlmedium und Umgebung auf. Dieser kann sowohl durch einen Konzentrationsgradienten als auch durch einen Temperaturgradienten hervorgerufen werden [43]. Die Untersuchungen in Kapitel 3.1.4 beziehen sich ausschließlich auf den homogenen Freistrah aus einer runden Düse. In diesem Kapitel wird das Konzept des äquivalenten Düsendurchmessers gezeigt, die die Ansätze aus Kapitel 3.1.4 auf inhomogene Freistrahlen und weitere Düsenformen übertragbar machen. Das Konzept wurde von Thring & Newby (1953) [55] entwickelt und von zahlreichen Autoren übernommen [25,56–58].

Der Impulsstrom  $\dot{I}_0$  des Massenstroms  $\dot{m}_0$  aus der Düse mit der Geschwindigkeit  $u_0$  ist die treibende Kraft im turbulenten Freistrah (Gleichung (3-13)). Des Weiteren ist der Freistrah geprägt durch Entrainment, wodurch innerhalb weniger Düsendurchmesser stromab ein Vielfaches der ursprünglichen Fluidmasse aus der Umgebung in den Strahl eingemischt wird (siehe Gleichung (3-1)). Damit nimmt der Strahl asymptotisch die Dichte der Umgebung an, sodass bereits nach geringem Abstand zur Düse ein quasi homogener Freistrah vorliegt [59].

Für den äquivalenten Düsendurchmesser  $d_{\text{äq}}$  wird ein hypothetischer Freistrah angenommen, der den gleichen Impuls- und Massenstrom wie der betrachtete Freistrah besitzt, aber mit der Dichte des Fluids  $\rho_{\text{ENT}}$ , das aus der Umgebung in den Freistrah eingemischt wird [25] (siehe Gleichung (3-14)). Eine mathematische Herleitung der Gleichung ist auf Basis von Erhaltung des Impulsstroms und des Massenstroms in Anhang A.II zu finden. Mit dem Konzept des äquivalenten Düsendurchmessers ist es auch möglich, einen Ringspalt in einen runden Äquivalentdurchmesser zu überführen. Gibt es bei einer Düse mehrere koaxiale Düsenauslässe, so kann in Gleichung (3-14) der austretende

Massenstrom  $\dot{m}_0$  durch den Gesamtmassenstrom und der Impulsstrom  $\dot{I}_0$  durch den Gesamtimpulsstrom aller Ströme ersetzt werden. Damit kann ein gemeinsamer Äquivalentdurchmesser der Düsenauslässe bestimmt werden [60]. Für eine runde Düse mit einem Durchmesser  $d_0$  und der Dichte des austretenden Mediums  $\rho_0$  vereinfacht sich Gleichung (3-14) zu Gleichung (3-15). Entspricht die Dichte des Strahlmediums der Umgebungsdichte, so folgt aus Gleichung (3-15)  $d_0 = d_{\ddot{a}q}$ . Somit ist Gleichung (3-14) zur Berechnung des äquivalenten Düsendurchmessers für homogene und inhomogene Freistrahlen anwendbar.

$$\dot{I}_0 = \dot{m}_0 \cdot u_0 \quad (3-13)$$

$$d_{\ddot{a}q} = \frac{2 \cdot \dot{m}_0}{\sqrt{\dot{I}_0 \cdot \pi \cdot \rho_{ENT}}} \quad (3-14)$$

$$d_{\ddot{a}q} = d_0 \cdot \sqrt{\frac{\rho_0}{\rho_{ENT}}} \quad (3-15)$$

Die Geschwindigkeit  $u_m$  entlang der Achse des inhomogenen Freistrahls nimmt nach dem Kernbereich mit zunehmendem Düsenabstand ab. Durch die Auftragung der Geschwindigkeit auf der Achse über  $1/z$  ergibt sich im Ähnlichkeitsbereich analog zum homogenen Freistrahls eine Gerade (siehe Abbildung 3-5). Es stellt sich ein Gradient ein, der abhängig ist vom Dichtegradienten  $\rho_{ENT}/\rho_0$  zwischen Umgebung und Düsenaustritt. Durch Verwendung des äquivalenten Düsendurchmessers  $d_{\ddot{a}q}$  anstelle des geometrischen Düsendurchmessers  $d_0$  als Maßstabsfaktor entspricht der Gradient  $B_u$  des inhomogenen Freistrahls dem des homogenen Freistrahls [56–58,61]. Um den dimensionslosen axialen Geschwindigkeitsgradienten zu bestimmen, wird Gleichung (3-9) entsprechend angepasst und es ergibt sich Gleichung (3-16), die sowohl für homogene als auch für inhomogene Freistrahlen angewendet werden kann.

$$\frac{u_m}{u_0} = B_u \cdot \frac{d_{\ddot{a}q}}{z - z_0} \quad (3-16)$$

Die radialen Geschwindigkeitsprofile  $u(r, z)$  inhomogener Freistrahlen können durch Normierung mit der Geschwindigkeit auf der Achse  $u_m = u(0, z)$  und durch Auftragung über  $\eta$  dimensionslos dargestellt werden. Die Profile bei unterschiedlichen Düsenabständen fallen auf einem Ähnlichkeitsprofil zusammen und zeigen somit Selbstähnlichkeit. Das Ähnlichkeitsprofil der Geschwindigkeit inhomogener Freistrahlen ist mit denen von homogenen Freistrahlen (siehe Abbildung 3-6) deckungsgleich [49].

Inhomogene Freistrahlen weisen neben dem Geschwindigkeitsgradienten auch einen Dichtegradienten zwischen Strahl am Düsenaustritt und Umgebung auf, der durch Konzentrations- und Temperaturgradienten hervorgerufen werden kann. Im Ähnlichkeitsbereich bilden sich aufgrund turbulenter Transportprozesse entsprechend Temperatur- und Konzentrationsprofile aus. Zur Charakterisierung von Stofftransport im



turbulenten Freistrahls kann ein dimensionsloser Mischungsbruch  $X$  in Gleichung (3-17), mit dem lokale Massenbruch  $y$ , dem Massenbruch  $y_0$  an der Düse und der Massenbruch  $y_{ENT}$  in der Umgebung des Freistrahls, definiert werden [62]. Bei  $X = 1$  entspricht die Zusammensetzung dem Massenbruch am Düsenaustritt,  $X = 0$  entspricht dem Massenbruch in der Umgebung.

$$X(z, r) = \frac{y(z, r) - y_{ENT}}{y_0 - y_{ENT}} \quad (3-17)$$

Bei Düsenaustritt ist der Mischungsbruch  $X$  definitionsgemäß eins. Nach dem Kernbereich nimmt die Konzentration im Ähnlichkeitsbereich entlang der Achse hyperbolisch ab. Bei Auftragung von  $1/X$  über  $\zeta$  ergibt sich aufgrund der Selbstähnlichkeit des Freistrahls eine Ursprungsgerade mit Steigung  $1/B_X$  (siehe Gleichung (3-18) und Abbildung 3-7). Das Vorgehen ist analog zur Charakterisierung des Abklingverhaltens der Geschwindigkeit entlang der Achse. In gleicher Weise kann auch ein Gradient  $B_Q$  definiert werden, um das Abklingverhalten der Temperatur entlang der Achse zu charakterisieren. Aufgrund der Äquivalenz von effektivem Wärme- und Stofftransport in turbulenten Strömungen ( $Pr_t = Sc_t$ ) sind die radialen Profile für den Mischungsbruch und eine normierte Temperatur deckungsgleich [28,56]. Typische Werte für  $B_X$  bzw.  $B_Q$  liegen im Bereich 4,7 bis 5,4. In der Literatur werden  $B_X$  und  $B_Q$  häufig mit  $B_c$  und  $B_t$  bezeichnet.

$$X(z, 0) = \frac{B_X}{\zeta} \quad (3-18)$$

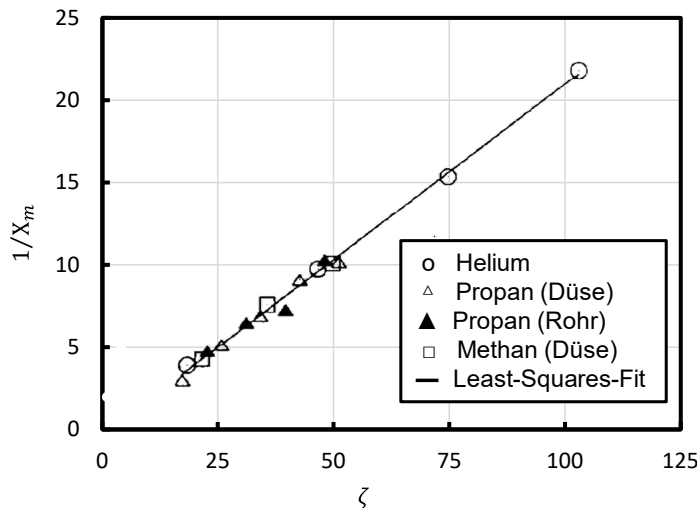


Abbildung 3-7 Konzentrationsabfall eines Freistrahls in ruhende Umgebungsluft entlang der Achse. Abbildung verändert aus [59].

Radialprofile des Mischungsbruchs  $X(z, r)$  bei unterschiedlichen Düsenabständen können durch Normierung mit dem Wert auf der Achse  $X_m$  und Auftragung über  $\eta$  in guter Näherung zur Deckung gebracht werden. Der Freistrahls ist somit hinsichtlich des Mischungsbruchs selbstähnlich (siehe Abbildung 3-8). Das Vorgehen ist analog zu den

radialen Geschwindigkeitsprofilen (siehe Abbildung 3-6). Abbildung 3-8 zeigt das Ähnlichkeitsprofil für die Konzentration eines Ethin-Freistrahls in eine Stickstoff-Atmosphäre aus einer runden Düse [63]. Aus dem Ähnlichkeitsprofil kann der dimensionslose Halbwertsradius des Mischungsbruchs  $\eta_{0,5,X}$  abgelesen werden. Typische Werte für  $\eta_{0,5,X}$  liegen im Bereich zwischen  $0,105 < \eta_{0,5,X} < 0,114$  [63,64]. Eine Übersicht experimentell ermittelter Kennzahlen von inhomogenen Freistrahlen ist in Tabelle 3-2 gezeigt.

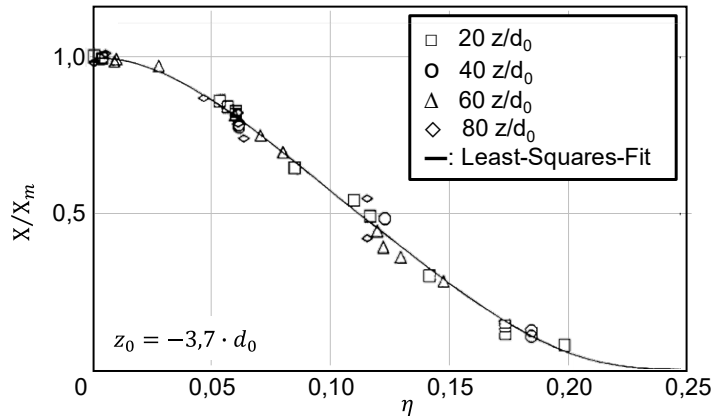


Abbildung 3-8 Normierte Darstellung radialer Konzentrationsprofile bei verschiedenen Düsenabständen mit  $Re_0 = 5000$ . Abbildung verändert aus [63]

Im Vergleich zum Verlauf der Geschwindigkeit klingt der Mischungsbruch entlang der Achse schneller ab ( $B_X < B_u$ ) und die Radialprofile sind breiter ( $\eta_{0,5,X} > \eta_{0,5,u}$ ). Grund dafür ist, dass der turbulente Stofftransport quer zur Hauptströmungsrichtung größer ist als der turbulente Impulstransport ( $Sc_t < 1$ ) (siehe Kapitel 3.1.3).

### Untersuchungen in der Literatur von Einflussfaktoren auf den turbulenten Freistrah

In der Literatur gibt es zahlreiche Untersuchungen von Einflussfaktoren auf den turbulenten Freistrah, um die in diesem Kapitel bereits vorgestellte Theorie zu untersuchen. Im Rahmen dieser Arbeit sind ausschließlich zeitlich gemittelte Größen von Interesse. Da der Verlauf dieser Größen das Ergebnis aus turbulenten Transportprozessen ist, werden neben den Untersuchungen zu zeitlich gemittelten Größen auch Studien zu turbulenten Größen vorgestellt.

Dahm & Dimotakis (1990) [65] untersuchen den Einfluss der Dichte des Strahlmediums auf den turbulenten Freistrah ohne Dichtegradient. Dabei strömt ein mit Farbstoff angereicherter Wasserstrahl in ein großes ruhendes Wasserreservoir. Wasser weist im Vergleich zu Gasen eine sehr hohe Dichte und eine große molekulare Schmidt-Zahl (Wasser:  $Sc \approx 600$ , Gase:  $Sc \approx 1$ ) auf. Damit ist der molekulare Stofftransport um mehr als zwei Größenordnungen langsamer als der Impulstransport. Zeitlich gemittelte Konzentrationsprofile in Wasser und Luft würden sich somit für laminare Strömungen fundamental unterscheiden. Dahm untersucht Konzentrationsprofile im Ähnlichkeitsbereich

von turbulenten Wasser-Freistrahlen mit Reynolds-Zahlen am Düsenaustritt zwischen 1500 und 20000. Die Konzentration entlang der Achse nimmt mit Gradienten  $B_x = 5,4$  ab. Dieser Wert entspricht dem Wert eines Gas-Freistrahls. Damit zeigt Dahm, dass die absolute Dichte keinen Einfluss auf den Verlauf der zeitlich gemittelten Konzentration besitzt. Im Gegensatz zu Gas-Freistrahlen findet Dahm im Wasser-Freistrahle allerdings auch in großer Entfernung zur Düse noch kleine völlig ungemischte Fluidbereiche [56]. Ursache hierfür ist, dass turbulente Transportprozesse ein Fluid nur bis zu der kleinsten Größenordnung, in der noch Wirbel möglich sind, durchmischen kann (Kolmogorow Wirbel, siehe Kapitel 3.1.1). Die Durchmischung in noch kleineren Größenordnungen muss durch molekulare Diffusion stattfinden. Da der molekulare Diffusionskoeffizient in Wasser um Größenordnungen kleiner ist als in Gasen, kann keine effektive Durchmischung auf Mikroebene stattfinden. Dieser Effekt ist hauptsächlich bei kleinen Reynolds-Zahlen (hier 1500) ausgeprägt. Mit steigender Reynolds-Zahl nimmt die Größe der Kolmogorow Wirbel ab [43]. Turbulente Transportprozesse finden dann auch in kleineren Strukturen statt.

Mi et al. (2001) [28] untersuchen den Einfluss der Düsengeometrie (Düse und Rohr) eines erhitzten Freistrahls aus einer Düse und einem Rohr bei jeweils  $Re = 16000$  durch Temperaturmessungen. Die gefundenen charakteristischen Werte für  $B_Q$  (Düse: 4,46; Rohr: 4,63) und  $\eta_{0,5,Q}$  (Düse: 0,110; Rohr: 0,102) unterscheiden sich für die Düse und das Rohr nur geringfügig. Bei normierter Darstellung sind die Ähnlichkeitsprofile nahezu deckungsgleich und überlagern sich zusätzlich mit denen anderer Autoren (siehe Abb. 12 und 13 in [28]).

Richards & Pitts (1993) [59] untersuchen anhand von umfassenden Literaturdaten und eigenen Messungen den Einfluss eines Dichtegradienten zur Umgebung, der Düsengeometrie und der Austrittsgeschwindigkeit auf das Konzentrationsfeld (Mischungsbruch) mit Rayleigh-Streuung. Dazu werden drei Fluide unterschiedlicher Dichte (Helium, Methan, Propan) aus einem Rohr und einer Düse mit Reynold-Zahlen von jeweils 4000 und 25000 in die ruhende Umgebung (Luft) untersucht. Richards & Pitts finden unter Berücksichtigung des äquivalenten Düsendurchmessers für alle Austrittsbedingungen annähernd den gleichen Wert für  $B_x$  (Rohr: 4,75; Düse: 4,76). Richards & Pitts (1993) findet außerdem in den vier durchgeführten Versuchsreihen ähnliche Werte für  $\eta_{0,5,X}$  (Rohr:  $0,112 \pm 0,003$ , Düse: 0,113). Diese entsprechen in guter Näherung dem Wert von Dowling & Dimotakis (1990) [63] (0,112), der im Freistrahle ohne Dichtegradient bestimmt wurde. Beim Vergleich mit weiteren Literaturwerten [22,63,64,66–69] für  $\eta_{0,5,X}$  und  $\eta_{0,5,Q}$  im Bereich  $4300 < Re < 270000$  stellen die Autoren eine sehr große Übereinstimmung mit den eigenen Daten fest. Richards & Pitts (1993) folgern, dass der Verlauf des dimensionslosen axialen Konzentrationsgradienten sowie der Halbwertsradius unabhängig von der Dichte an der Düse, Düsengeometrie und der Reynolds-Zahl am Düsenaustritt sind.

Dowling (1990) [63] vergleicht ebenso Radialprofile für den Mischungsbruch bzw. der Temperatur von Freistrahlen aus eigenen Daten mit weiteren Literaturquellen [41,56,57,63,66,70–75]. Sämtliche Daten fallen in guter Näherung auf einem Ähnlichkeitsprofil zusammen, obwohl die Daten bei sehr verschiedenen Dichtegradienten, Reynold-Zahlen von 5000 – 800000 und Schmidt-Zahlen von 0,7 – 38000 gemessen wurden (siehe Abbildung 3-9). Tabelle 3-2 zeigt eine Übersicht charakteristischer Kennzahlen für den Mischungsbruch und die Temperatur in turbulenten Freistrahlen, die in experimentellen und numerischen Untersuchungen bestimmt wurden.

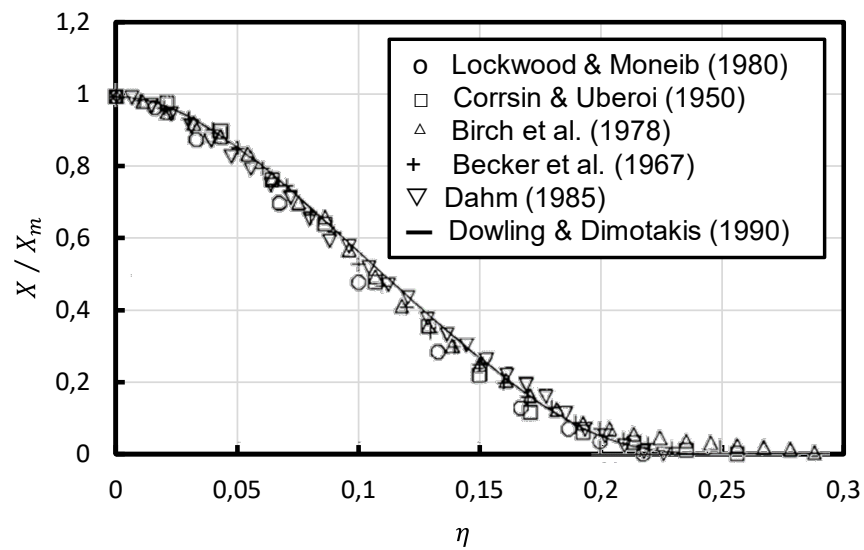


Abbildung 3-9 Ähnlichkeitsprofile zeitlich gemittelter Konzentration und Temperatur von ausgewählter Literaturstellen [41,63,66,70,74,76]. Abbildung verändert aus [63].

Tabelle 3-2: Zusammenstellung von charakteristischen Größen zur Ausbreitung (Konzentration und Temperatur) von inhomogener Freistrahlen aus experimentellen und numerischen Untersuchungen

Quelle	Strahl- / Umgebung	Messgröße / Messtechnik	$Re_0$	$B_X, B_Q$	$z_0$ aus Gl. (3-9) ( $z_0$ aus Gl.(3-12))	$\eta_{0,5,X}, \eta_{0,5,Q}$
Richards & Pitts (1993) [59]	Helium; Methan; Propan / Luft	Konzentration / Rayleigh-Streuung	4000; 25000 (Rohr; Düse)	4,75 $\pm 0,038$	-2,1 d - +3,6 d (-0,15 d - +4,3 d)	0,112 $\pm 0,0025$
Dowling & Dimotakis (1990) [63]	Ethin / Stickstoff, Propan / Argon	Konzentration / Rayleigh-Streuung	5000; 16000, (Düse)	5,1; 4,73	-	0,114; 0,114
Dahm & Dimotakis (1990) [65]	Wasser +Farbstoff / Wasser	Konzentration / LIF	5000 (Rohr)	5,41	-	-
Mi et al. (2001) [28]	Luft (heiß) / Luft	Temperatur / Thermoelement	16000 (Rohr)	4,64	4,73 d (1,3 d)	0,102
Chua / Antonia (1986) [37]	Luft (heiß) / Luft	Temperatur / Thermoelement	17700	4,35	2,28 d (1,38 d)	0,106
Lockwood & Moneib (1980) [70]	Luft (heiß) / Luft	Temperatur / Thermoelement	50400 (Rohr)	5,44	2,0 d (2,0 d*)	0,132
Galeazzo (2013) [42]	Luft / Luft	Large Eddy Simulation	73000 (Rohr)	5,12	-	0,114

## Einflüsse auf den virtuellen Strahlursprung

Die bisher gezeigten Untersuchungen zum turbulenten Freistrahls zeigen, dass nahezu keine Einflüsse der Austrittsbedingungen auf das Ähnlichkeitsprofil der zeitlich gemittelten Geschwindigkeit, Konzentration und Temperatur bestehen. Die Position des virtuellen Ursprungs hingegen ist stark abhängig von den Austrittsbedingungen. Eine allgemein gültige Theorie zur Beschreibung des virtuellen Strahlursprungs als Funktion der Austrittsbedingungen ist nicht bekannt. [59,61]. Der folgende Abschnitt bietet eine Literaturübersicht zu diesem Thema.

Richards & Pitts (1993) [59] stellen fest, dass sich die Daten der vier Messreihen (s. Tabelle 3-3) nicht unter Verwendung eines gemeinsamen virtuellen Strahlursprungs beschreiben lassen. Der virtuelle Ursprung kann aus dem Konzentrationsabfall entlang der Achse (siehe Gleichung (3-9)) oder aus dem Halbwertswinkel (siehe Gleichung (3-12)) bestimmt werden. Aus diesen Werten für  $z_0$  kann kein direkter Zusammenhang mit den Austrittsbedingungen erkannt werden. Mehrere Effekte können überlagert auftreten. Ein bekanntes Phänomen ist, dass die Position des virtuellen Strahlursprungs von der Dichte abhängt [55,77,78]. Eine höhere Dichte des Strahlmediums verschiebt  $z_0$  zu kleineren Werten [58]. Des Weiteren verschiebt sich der virtuelle Ursprung mit steigender Reynolds-Zahl hin zu größeren Werten. Dieser Einfluss nimmt für große Reynolds-Zahl allerdings ab [79]. Es ist weiterhin bekannt, dass die Düsengeometrie (Rohr / Düse) einen Einfluss auf den virtuellen Strahlursprung hat [80]. Mi et al. [28] zeigen anhand von Temperaturvisualisierungen durch Mie-Streuung deutliche Unterschiede zwischen der Strömung aus einem Rohr und einer Düse, insbesondere im Bereich nahe der Austrittsöffnung (siehe Abbildung 3-10). Eine (kontrahierende) Düse produziert am Auslass eine laminare Strömung, die nach kurzer Einlaufstrecke eine große Ringstruktur von der Größe der Auslassöffnung bildet. Die Wirbelstrukturen dehnen sich aus. Benachbarte Wirbelstrukturen beginnen eine Rollbewegung, die eine turbulente Strömung verursacht. Fluidbereiche, welche sich zwischen zwei drehenden Wirbeln befinden, werden zunächst eingeschlossen und dann ebenfalls in turbulente Wirbelbewegung versetzt. Durch diese intensive, großflächige Rotationsbewegung wird der gesamte Austrittsstrahl stark durchmischt. Somit verliert die Strömung bereits nach geringer Strecke vollständig das ursprüngliche Strömungsprofil und es kann sich ein selbstähnliches Profil ausbilden. Die Position des virtuellen Ursprungs liegt in diesem Fall nahe an der Düse. Dahingegen kann sich am Austritt einer Rohrströmung keine große Primärinstabilität bilden, da die Strömung bereits turbulent aus dem Rohr austritt. Die Durchmischung der austretenden Strömung ist lokal auf die Größe der vorhandenen Wirbel begrenzt. Dadurch bildet sich eine längere Einlaufstrecke bis sich ein selbstähnliches Profil ausgebildet und der virtuelle Strahlursprung liegt weiter stromab. [81].

Zusammenfassend ist eine Tendenz zu beobachten, dass je größer die Störung der Strömung am Düsenauslass ist, desto kleiner ist der Abstand des virtuellen Strahlursprungs zum Düsenaustritt. Experimentelle Untersuchungen zeigen, dass  $z_0$  häufig im Bereich von  $\pm 0 - 4 d_0$  liegt. Im Vergleich zur typischen Länge von Freistrahlen von  $> 100 z/d_0$  ist die Größe des virtuellen Ursprungs somit vergleichsweise klein. Eine umfassende Beschreibung des virtuellen Strahlursprungs oder quantitative Modellierung als Funktion der Austrittsbedingungen an der Düse ist nicht aus der Literatur zu entnehmen.

Tabelle 3-3 Experimentelle Bestimmung des virtuellen Ursprungs aus dem Konzentrationsabfall entlang der Achse (Gleichung (3-9)) und aus dem Halbwertswinkel (Gleichung (3-12)) [59].

Medium	Re [-]	$z_0$ nach Gl. (3-9) [ $d_0$ ]	$z_0$ nach Gl. (3-12) [ $d_0$ ]
Helium (Rohr)	5000	3,0	-0,2
Methan (Rohr)	25000	3,6	2,6
Propan (Rohr)	25000	-2,1	4,3
Propan (Düse)	25000	1,6	3,6

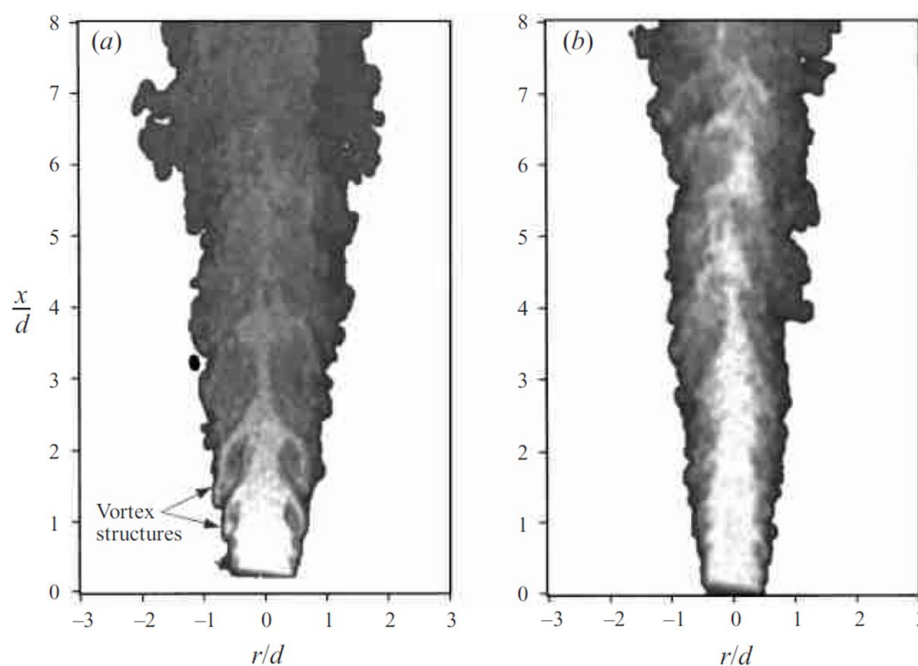


Abbildung 3-10 Temperaturmessung mit Mie-Streuung von zwei Freistrahlen aus: a) Düse, b) Rohr. [28]

### 3.1.6 Universelle Selbstähnlichkeit

In der Literatur ist allgemein anerkannt, dass ein Freistrahler den ursprünglichen Charakter der Strömung aus der Düse nach kurzer Einlaufstrecke verliert und sich asymptotisch einem selbstähnlichen Zustand nähert [28,49,59,63,82]. In vielen Untersuchungen konnte gezeigt werden, dass die Radialprofile von zeitlich gemittelter Geschwindigkeit, Mischungsbruch und Temperatur bei unterschiedlichen Düsenabständen in einem radialen Ähnlichkeitsprofil zur Deckung gebracht werden können (siehe Abbildung 3-6).

Durch Wahl geeigneter Maßstabsfaktoren kann Selbstähnlichkeit auch für turbulente Größen gezeigt werden. Durch Normierung der turbulenten Fluktuation der Geschwindigkeit in der

Hauptströmungsrichtung  $u'$  mit der zeitlich gemittelten Geschwindigkeit auf der Achse  $u_m(z)$  können Radialprofile ( $u'(r, z)/u_m(z)$ ) bei unterschiedlichen Düsenabständen durch Auftragung über  $\eta$  zur Deckung gebracht werden (siehe Abbildung 3-11). Selbiges gilt auch für Radialprofile der Fluktuation der radialen Geschwindigkeitskomponente ( $v'(r, z)/u_m(z)$ ) [24]. Diese Größen werden turbulente Momente zweiter Ordnung genannt. Abbildung 3-11 zeigt den Verlauf der Ähnlichkeitsprofile der turbulenten Intensität, die aus denselben Versuchen wie die Profile der zeitlich gemittelten Geschwindigkeit in Abbildung 3-6 ermittelt wurden. Panchapakesan & Lumley (1993) [39] zeigen, dass radiale Profile dritter Ordnung bei unterschiedlichen Düsenabständen durch selbstähnliche Darstellung ebenfalls zur Deckung gebracht werden können (siehe Abbildungen 12 und 13 a-c in [39]). Weitere Informationen zu turbulenten Momenten sind in [40,83] zu finden. Folglich besteht auch für turbulente Größen Selbstähnlichkeit.

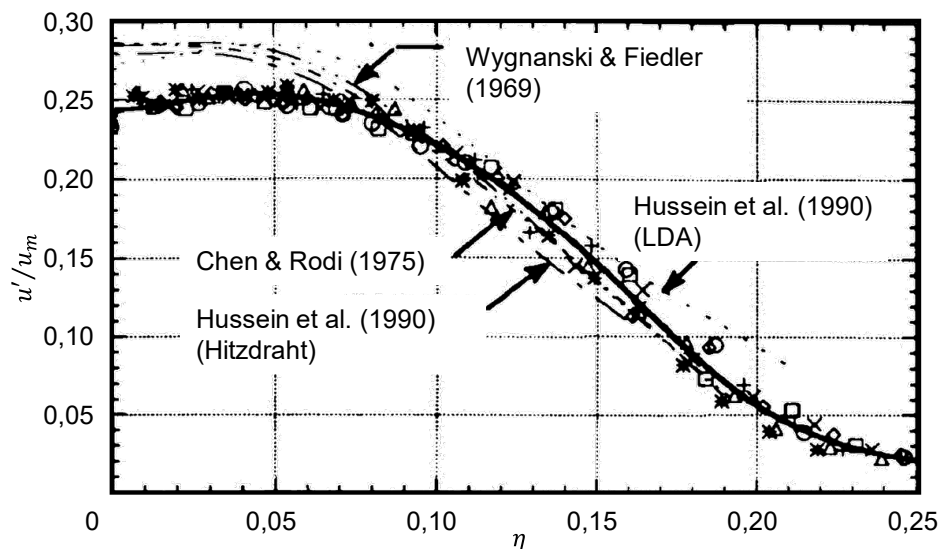


Abbildung 3-11 Ähnlichkeitsdarstellung der turbulenten Intensität der axialen Geschwindigkeitskomponente. Symbole wie in Abbildung 3-6. Abbildung verändert aus [39].

Panchapakesan & Lumley (1993) [39] vergleichen eigene Messungen mit Messungen anderer Forschergruppen [24,44,49]. Die Messwerte der einzelnen Forschergruppen können jeweils auf einem Ähnlichkeitsprofil zur Deckung gebracht werden. Bei unterschiedlichen Austrittsbedingungen unterscheiden sich jedoch die Ähnlichkeitsprofile. Somit besteht keine universelle Selbstähnlichkeit im turbulenten Freistrah. Die Ähnlichkeitsprofile höherer Ordnung sind ebenfalls abhängig von den Austrittsbedingungen.

In der Geschichte der Freistrahlforschung waren sich Forschergruppen lange Zeit uneinig, ob universelle Selbstähnlichkeit besteht. In der klassischen Freistrahtheorie, die unter anderen von Townsend (1976) [84] und Rodi (1972) [49,54] postuliert wird, wird von universeller Selbstähnlichkeit ausgegangen. Die Form der Ähnlichkeitsprofile und ebenso die dimensionslosen axialen Gradienten ( $B_u, B_x, B_y$ ) sind nach dieser Theorie vollkommen unabhängig von den Austrittsbedingungen an der Düse [21,40]. Zu den Austrittsbedingungen zählen neben der Reynolds-Zahl auch die Form der Austrittsöffnung (Düse oder Rohr) und das Medium des ausströmenden Stroms und der Umgebung.



George (1989) [82] postuliert, dass keine universelle Selbstähnlichkeit besteht. Die zeitlich gemittelten Ähnlichkeitsprofile sind das Resultat aus turbulenten Transportprozessen im Freistrah, die wiederum auf den fluktuierenden Geschwindigkeitsschwankungen aufgrund der stochastischen Wirbelbewegung der Strömung basieren. Wenn das zeitlich gemittelte Geschwindigkeitsprofil vollkommen unabhängig von den Austrittsbedingungen wäre, müssten folglich auch die turbulenten (=fluktuierenden) Größen durch geeignete Darstellung vollkommen unabhängig von den Austrittsbedingungen selbstähnlich darstellbar sein. Da Momente höherer Ordnung nicht unabhängig von den Austrittsbedingungen zur Deckung gebracht werden können, kann der turbulente Freistrah nicht universell selbstähnlich sein. Demnach existieren verschiedene Zustände von Selbstähnlichkeit, die jeweils abhängig von Austrittsbedingungen sind [82]. Spätere experimentelle und numerische Arbeiten, teilweise unter Verwendung direkter numerischer Simulation (DNS), bestätigen [82], dass keine universelle Selbstähnlichkeit existiert [52,53,80,83,85,86].

Das Konzept der universellen Selbstähnlichkeit bietet jedoch sehr große Vorteile bei der Modellierung des Ähnlichkeitsbereichs eines Freistrahls, da die Komplexität zur Beschreibung der Ausbreitung des Strahls deutlich reduziert wird. Bei Kenntnis des Ähnlichkeitsprofils einer Größe (z. B. Form des Geschwindigkeitsprofils in Abbildung 3-6) kann durch eine einzige Gleichung die jeweilige Größe (hier: Geschwindigkeit) an jeder Position des Freistrahls explizit bestimmt werden, unabhängig von den Austrittsbedingungen. Eine aufwändige numerische Simulation der Turbulenz und der Transportprozesse zur Berechnung des Strömungsfelds ist nicht notwendig. Modelle zur Beschreibung der Geschwindigkeit des Freistrahls werden dadurch im mathematischen Sinn sehr simpel. Zu den Modellen, die auf Selbstähnlichkeit beruhen, zählen unter anderem das Modell von Schlichting (1951), Reichardt (1951) und Günther (1974) [15,23,30] (siehe Kapitel 3.1.7).

Die Untersuchungen in diesem Kapitel zeigen, dass der Einfluss der Austrittsbedingungen auf die Ähnlichkeitsprofile von Momenten höherer Ordnung deutlich ausgeprägt ist. Hinsichtlich zeitlich gemittelter Größen besteht, wenn dann nur ein sehr geringer Einfluss. Im Rahmen dieser Arbeit spielen ausschließlich die zeitlich gemittelte Geschwindigkeit, der Mischungsbruch und die Temperatur im turbulenten Freistrah eine Rolle. Diese Größen sind selbstähnlich. Obwohl es keine asymptotische Assimilation hin zu einer universellen Selbstähnlichkeit gibt und somit ein Einfluss der Austrittsbedingungen und verwendete Fluide auf den Ähnlichkeitsbereich mindestens theoretisch bestehen sollte, so zeigen die in Kapitel 3.1.4 - 3.1.6 beschriebenen Studien, dass diese Einflüsse gering sind und im Rahmen dieser Arbeit vernachlässigt werden. Das 2Ph-FJM basiert auf dem Modell von Günther [15], welches auf universeller Selbstähnlichkeit beruht.

### **3.1.7 Modellierung des turbulenten Einphasen-Freistrahls**

Für die Modellierung turbulenter Strömungen wird häufig eine CFD-Simulation (Computational Fluid Dynamics) eingesetzt, die iterativ die Strömung an jedem Punkt des Rechnungsgitters annähert. Ausgangspunkt sind Erhaltungsgleichungen für Impuls, Masse und Energie aus den Navier-Stokes Gleichungen. Turbulente Strömungen können durch Direkte Numerische Simulation (DNS) aus den vollständigen instationären Navier-Stokes Gleichungen berechnet werden. Da die gesamte Strömung inklusive der kleinsten Wirbel simuliert wird, ist ein extrem feines Rechengitter mit sehr kleinen Zeitschritten notwendig. Die Navier-Stokes Gleichungen müssen iterativ berechnet werden, da eine explizite Lösung

nicht möglich ist. Der Rechenaufwand für DNS-Simulationen ist extrem hoch. Um die Anzahl, der zu berechnenden Gitterpunkte zu reduzieren, ist es möglich eine Large-Eddy Simulation (LES) zu nutzen. Dabei werden nur die „großen“ Wirbel („large eddies“) in direkter numerischer Simulation berechnet. Feine Strukturen der Strömung werden durch ein Turbulenzmodell abgebildet. Der Rechenaufwand für eine LES-Simulation bleibt allerdings sehr hoch. Simulationsergebnisse mit LES liefern eine sehr gute Übereinstimmung mit Messungen im turbulenten Freistrahle [87]. Für stationäre Strömungen vereinfachen sich die Navier-Stokes Gleichungen, da instationäre Terme wegfallen. Durch Modellierung der turbulenten (Wirbel-)Viskosität  $\nu_t$  kann die benötigte Anzahl an Berechnungspunkten im Vergleich zur LES-Simulation deutlich reduziert werden. Für die Modellierung der turbulenten Viskosität können verschiedene Turbulenzmodelle eingesetzt werden. In der RANS-Simulation (Reynolds Averaged Navier-Stokes) wird für die turbulente Viskosität ein Zwei-Gleichungsmodell verwendet, mit der turbulenten kinetischen Energie  $k$  und der Dissipationsgeschwindigkeit  $\varepsilon$  [88]. Simulationen mit dem  $k$ - $\varepsilon$ -Ansatz zeigen allerdings keine gute Übereinstimmung mit Messungen im turbulenten Freistrahle [87]. Durch eine Erweiterung des RANS-Modells im realizable- $k$ - $\varepsilon$ -Ansatz nach [89] können deutlich bessere Simulationsergebnisse für den turbulenten Freistrahle erzielt werden [87]. Unabhängig vom Ansatz zur Modellierung der Turbulenz ist der Berechnungsaufwand für eine RANS-Simulation deutlich geringer als bei LES, bleibt aber hoch. Für das Turbulenzmodell kann auch ein Ein-Gleichungsmodell, wie das Mischungswegmodell nach [90] verwendet werden. Der Berechnungsaufwand bleibt ähnlich hoch wie bei einer RANS-Simulation.

Für die Simulation eines turbulenten Freistrahls können die Navier-Stokes-Gleichungen aufgrund der Achsensymmetrie weiter vereinfacht werden. Darüber hinaus kann für das Turbulenzmodell eine konstante Wirbelviskosität  $\nu_t$  angenommen werden, die an experimentelle Daten angepasst wird. Mit diesen Vereinfachungen konnte Schlichting [91] für den turbulenten Freistrahle eine explizite Lösung für die Geschwindigkeit und den Mischungsbruch (Gl. (3-19) - (3-20)) finden. Eine ausführliche Beschreibung der verwendeten mathematischen Ansätze ist in [30,40] zu finden. Die jeweils ersten Terme auf der rechten Seite von Gleichungen (3-19) und (3-20) entsprechen dem dimensionslosen axialen Gradienten für die Geschwindigkeit und den Mischungsbruch  $B_u$ ,  $B_x$ . Der jeweils letzte Term auf der rechten Seite beschreibt das radiale Ähnlichkeitsprofil. Das Ähnlichkeitsprofil ist ausschließlich von  $\eta$  und einer empirischen Konstanten  $\alpha$  abhängig, deren Wert durch Messungen des Halbwertswinkels der Geschwindigkeit [30] ( $\eta_{0,5,u} = 0,094$ ) zu  $\alpha = 0,017$  bestimmt wurde.  $\alpha$  ist allgemeingültig für den Freistrahle. Durch Vergleich von Gleichung (3-19) mit Gleichung (3-9) ergibt sich für den dimensionslosen Geschwindigkeitsgradienten  $B_u$  ein Wert von 6,19 (siehe Tabelle 3-1). Der Gradient des Mischungsbruchs entlang der Achse ergibt sich mit  $Sc_t = 0,75$  aus [43] zu  $B_x = 5,09$ . Dies ist in guter Übereinstimmung mit experimentellen Werten aus der Literatur (siehe Tabelle 3-2).

$$\frac{u(\zeta, \eta)}{u_0} = \frac{\sqrt{3}}{16 \cdot \alpha} \cdot \frac{1}{\zeta} \cdot \frac{1}{\left(1 + \left(\frac{\eta}{8 \cdot \alpha}\right)^2\right)^2} \quad (3-19)$$

$$X(\zeta, \eta) = \frac{2 Sc_t + 1}{\sqrt{3} \cdot 16 \alpha} \cdot \frac{1}{\zeta} \cdot \frac{1}{\left(1 + \left(\frac{\eta}{8 \cdot \alpha}\right)^2\right)^{2 Sc_t}} \quad (3-20)$$

Das Modell von Schlichting wird in [40] mit Geschwindigkeitsmessungen von Hussein et al. (1994) [24] und Panchapakesan & Lumley (1993) [39] verglichen. Hussein bestimmt  $B_u$  zu 5,9 und Panchapakesan zu 6,06. Mit  $\alpha = 0,017$  aus [30] ergibt sich im Freistrahlmmodell nach Schlichting  $B_u = 6,19$  (siehe Gl. (3-19)). Für den axialen Geschwindigkeitsgradienten gibt es somit eine gute Übereinstimmung zwischen Modell und Messung. Beim Vergleich des radialen Geschwindigkeitsprofils (Abbildung 3-12 rechts) mit Messdaten von Hussein et al. (1994) fällt auf, dass die Geschwindigkeit zum Rand hin überschätzt wird. Grund dafür ist die Annahme der konstanten Wirbelviskosität. Für  $0 < \eta < 0,12$  ist die (normierte) Wirbelviskosität näherungsweise konstant  $\hat{\nu}_t \approx 0,028$  (siehe Abbildung 3-12 links) [40]. In diesem Bereich gibt es eine gute Übereinstimmung zwischen Modell und Messung. Für  $\eta > 0,12$  fällt die Wirbelviskosität zum Rand hin stark ab. Das Modell weicht hier zunehmend von den Messwerten ab.

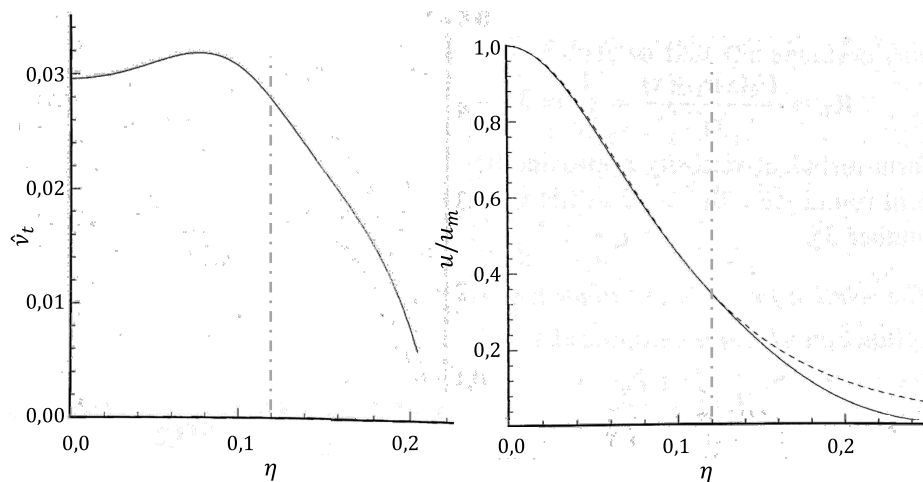


Abbildung 3-12 links: Turbulente Wirbelviskosität (normiert mit Düsendurchmesser und Düsenaustrittsgeschwindigkeit) aus Messdaten von Hussein et al. (1994) [24]; rechts: Vergleich von radialen Geschwindigkeitsprofil nach Modell von Schlichting [91] (--) mit Messdaten von Hussein et al. (1994) [24]. Abbildung verändert aus [40].

Günther (1974) [15] wählt im Gegensatz zum semi-empirischen Modell nach Schlichting einen rein empirischen Ansatz. Ausgehend vom allgemeinen Ansatz in Gleichung (3-21) mit dem Abklingverhalten für die Geschwindigkeit entlang der Achse (1. Term rechte Seite) und einem radialen Ähnlichkeitsprofil (2. Term rechter Seite). Für die mathematische Grundform des radialen Ähnlichkeitsprofils  $f(\eta)$  wird ein Gauß-Profil angenommen. Diese Annahme wird durch Messungen zahlreicher Forschergruppen gestützt [21–23,47,92–94]. Auf der rechten Seite der Gleichung wird der erste und zweite Term durch die Impulserhaltung verknüpft. Zur Anpassung des Modells an Messwerte bleibt eine empirische Konstante  $c_i$  (Impulsaustauschfaktor). Damit kann die explizite Gleichung (3-22) für das Geschwindigkeitsfeld abgeleitet werden. Eine mathematische Herleitung des Modells von Günther ist im Anhang A.IV zu finden. Der Impulsaustauschfaktor  $c_i$  ist an Messungen von Kremer [43] angepasst und ergibt sich zu  $c_i = 0,07$ . Durch Vergleich von Gleichung (3-22) mit Gleichung (3-9) ergibt sich für den dimensionslosen Geschwindigkeitsgradienten  $B_u$  ein Wert von 7,14 (siehe Tabelle 3-1).

Analog dazu leitet Günther explizite Gleichungen zur Beschreibung des lokalen Mischungsbruchs (Gleichung (3-24)) ab. Dazu wird ein weiterer Austauschfaktor für Konzentration (Mischungsbruch)  $c_X$  verwendet. In der Originalarbeit von [15] wird  $c_X$  mit

$c_c$  bezeichnet.  $c_x$  kann anhand der turbulenten Schmidt-Zahl mit Gleichung (3-23) abgeleitet werden. Mit  $Sc_t = 0,75$  [43] ergibt sich  $c_x = 1,15 \cdot c_i$ .

$$\frac{u(\zeta, \eta)}{u_0} = \frac{B_u}{\zeta} \cdot f(\eta) \quad (3-21)$$

$$\frac{u(\zeta, \eta)}{u_0} = \frac{1}{2 \cdot c_i} \cdot \frac{1}{\zeta} \cdot \exp\left(-\left(\frac{1}{c_i^2} - \frac{1}{2 \cdot c_i^2}\right) \cdot \eta^2\right) \quad (3-22)$$

$$Sc_t = \frac{c_i^2}{c_x^2} \quad (3-23)$$

$$X(\zeta, \eta) = \frac{c_i}{2 \cdot c_x^2} \cdot \frac{1}{\zeta} \cdot \exp\left(-\left(\frac{1}{c_x^2} - \frac{1}{2 \cdot c_i^2}\right) \cdot \eta^2\right) \quad (3-24)$$

### 3.1.8 Eingeschlossener Freistrah

Im Randbereich des Freistrahls wird Fluid durch Entrainment eingemischt. Dadurch nimmt die bewegte Masse stromab zu und der Strahl wird breiter. Im Rahmen dieser Arbeit wird ein Modell zur Beschreibung der Hauptreaktionszone in einem Flugstromvergaser entwickelt. Der Reaktor umschließt dabei die Strömung aus der Düse und bildet einen eingeschlossenen Freistrah. Da das eingemischte Fluid nicht aus der freien Umgebung nachströmen kann, wird Fluid am Rand der Einhausung entgegen der Hauptströmungsrichtung aus Zonen stromab angesaugt. Dadurch bildet sich ein Rezirkulationswirbel aus. Am Ende der Rezirkulationszone geht das Strömungsprofil in eine Rohrströmung über [17]. Abbildung 3-13 zeigt schematisch die verschiedenen Bereiche im Strömungsfeld des eingeschlossenen Freistrahls.

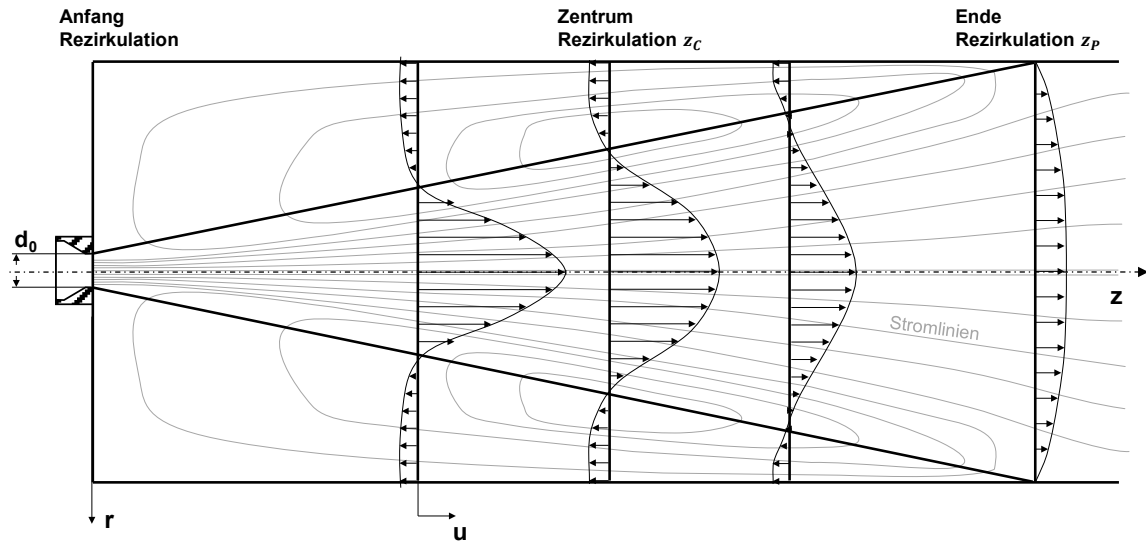


Abbildung 3-13 Schematische Darstellung der Geschwindigkeitsprofile und Stromlinien im eingeschlossenen Freistrah. Eigene Darstellung.

Im Rahmen dieser Arbeit ist das Strömungsprofil im Strahlbereich von Interesse. Nahe der Düse unterscheidet sich das Strömungsprofil im Strahlbereich des eingeschlossenen Freistrahls nicht von einem Freistrahls ohne Einhausung. Ab dem Zentrum des Rezirkulationswirbels  $z_c$  wird durch den Wirbel eine Strömungsbewegung in radiale Richtung verursacht. Dadurch wird der Strahl zunächst aufgeweitet. Schließlich verliert die Strömung die Eigenschaften eines Freistrahls vollständig und geht in eine Rohrströmung über [43].

Die Position des Rezirkulationswirbels kann mithilfe eines Ähnlichkeitsparameters nach Thring-Newby  $\theta$  (siehe Gleichung (3-25)) abgeschätzt werden [55,95]. Der Thring-Newby-Parameter ist das Verhältnis des äquivalenten Düsendurchmessers und dem Reaktordurchmesser. Die Rezirkulationszone beginnt unmittelbar auf Höhe der Düse. Die Abschätzung der Position von Zentrum  $z_c$  und Ende  $z_p$  des Rezirkulationswirbels sind in den Gleichungen (3-26) - (3-27) gegeben. Die Abschätzung eignet sich für Düsendurchmesser kleiner als 1/10 des Reaktordurchmessers [17,57]. Bis zum Zentrum des Rezirkulationswirbels  $z_c$  kann der eingeschlossene Freistrahls in guter Näherung durch einen Freistrahlsansatz beschrieben werden. Nach dem Zentrum  $z_c$  gibt es eine zunehmende Abweichung vom Freistrahls bis die Strömung schließlich ab  $z_p$  in eine Rohrströmung übergeht.

$$\theta = \frac{d_0}{d_{Reaktor}} \cdot \sqrt{\frac{\rho_0}{\rho_{ENT}}} \quad (3-25)$$

$$z_c = \frac{d_{Reaktor}}{2} \cdot \left( 2,925 + \frac{\theta}{0,32} \right) \quad (3-26)$$

$$z_p = 2,925 \cdot d_{Reaktor} \quad (3-27)$$

### 3.1.9 Auftrieb im reagierenden Freistrah

Abbildung 3-14 zeigt schematisch eine nach unten gerichtete Freistrahflamme. Zwischen der Flamme und der Umgebung entsteht durch exotherme Reaktionen ein großer Temperaturunterschied, der aufgrund des Dichtegradienten zu Auftriebseffekten führen kann. Der Einfluss von Auftriebskräften auf die Geschwindigkeit im Freistrah kann mithilfe der Froude-Zahl abgeschätzt werden. Die Froude-Zahl ist das Verhältnis von Trägheitskraft und Auftriebskraft mit der Erdbeschleunigung  $g$  und der Düsenaustrittsgeschwindigkeit  $u_0$  (siehe Gleichung (3-28)). Chen & Rodi (1975) [49] definieren in Abhängigkeit der Froude-Zahl  $Fr$  und dem Dichtegradienten am Düsenaustritt einen düsenahen Bereich  $z_I/d_0$ , in dem der Freistrah rein impulsdominiert ist (siehe Gleichung (3-29)) und einen düsenfernen Bereich  $z_{III}/d_0$ , in dem der Strahl auftriebsdominiert ist (siehe Gleichung (3-30)). Dazwischen befindet sich ein Übergangsbereich  $z_{II}/d_0$ .

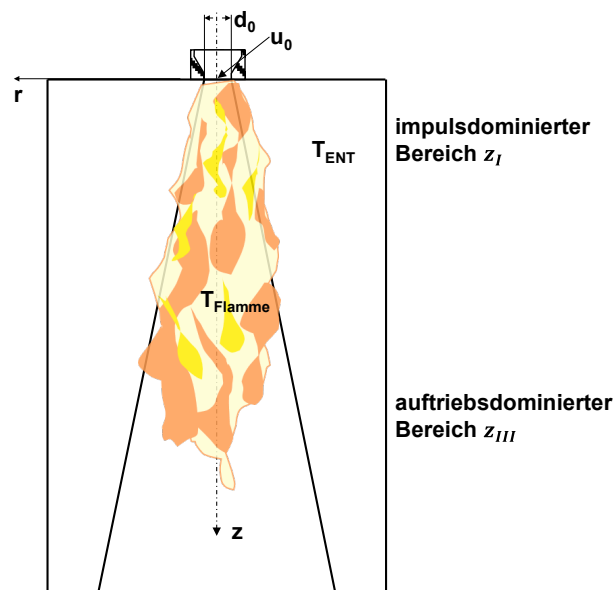


Abbildung 3-14 Schemazeichnung eines nach unten gerichteten reagierenden Freistrahls mit einem impulsdominierten Bereich am Düsenaustritt und einem auftriebsdominierten Bereich fern der Düse.

Bei ausreichend hoher Geschwindigkeit am Düsenauslass spielt Auftrieb im impulsdominierten Bereich keine Rolle, da dieser im Vergleich zur Trägheit der strömenden Fluidmasse gering ist. Die Selbstähnlichkeit von Freistrahlen hinsichtlich der gemittelten Größen ist nur im impulsdominierten Bereich gegeben. Mit zunehmendem Abstand zur Düse nimmt die Strömungsgeschwindigkeit ab und der Einfluss des Auftriebs wird größer. Im auftriebsdominierten Bereich stellt der Auftrieb im Freistrah eine Impulsquelle dar, die die Geschwindigkeit im Freistrah beeinflusst.

$$Fr = \frac{u_0^2 \cdot \rho_{Flamme}}{(\rho_{ENT} - \rho_{Flamme}) \cdot g \cdot d_0} \quad (3-28)$$

$$\frac{z_I}{d_0} < 0,5 \cdot Fr^{\frac{1}{2}} \cdot \sqrt[4]{\frac{\rho_{Flamme}}{\rho_{ENT}}} \quad (3-29)$$

$$\frac{z_{III}}{d_0} > 5 \cdot Fr^{\frac{1}{2}} \cdot \sqrt[4]{\frac{\rho_{Flamme}}{\rho_{ENT}}} \quad (3-30)$$

### 3.1.10 Zweiphasen-Freistrah

Ein Zweiphasen-Freistrah besteht aus einer kontinuierlichen (Gas) und einer dispersen Phase (Tropfen oder Partikel). Die Modellierung des Zweiphasen-Freistrahls ist zentraler Bestandteil dieser Arbeit. Insbesondere das Strömungsfeld (Mischungsbruch und Geschwindigkeit) der Gasphase und der Verlauf der Geschwindigkeit der Tropfen im Zweiphasen-Freistrah ist für diese Arbeit von großem Interesse. Aus der Literatur ist keine umfassende Beschreibung des Zweiphasen-Freistrahls zu entnehmen. Der folgende Abschnitt ist eine Übersicht zu Untersuchungen des Zweiphasen-Freistrahls, die jeweils Teilaspekte beleuchten. Der größte Teil dieser Untersuchungen wurde mit partikelbeladenen Gasströmungen durchgeführt.

Im Zweiphasen-Freistrah findet analog zum Einphasen-Freistrah Impulsaustausch mit der ruhenden Umgebung und damit Entrainment von Gas statt. Dadurch nimmt die bewegte Masse zu und die mittlere Geschwindigkeit des Freistrahls ab. Radiale Geschwindigkeitsprofile nehmen nach kurzer Einlaufstrecke die Form einer Gauß-Kurve an [96]. Ohne Berücksichtigung von Verdunstung bleibt der Massenstrom der dispersen Phase stromab konstant. Da die bewegte Masse der Gasphase mit zunehmendem Abstand zur Düse zunimmt, nimmt der Massenanteil der dispersen Phase ab. Bedingt durch den Dichteunterschied der beiden Phasen, sind die Tropfen und Partikel in der Gasphase träge und stellen massereiche Zentren dar, die der Gasströmung nicht unmittelbar folgen können. Somit können die beiden Phasen unterschiedliche Geschwindigkeiten und Bewegungsrichtungen aufweisen. Fluidreibung an der Oberfläche von Tropfen beziehungsweise Partikel verursachen eine Widerstandskraft, die die disperse Phase beschleunigt (siehe Kapitel 3.4). Auf Grund der Impulserhaltung wird die umgebende Gasphase abgebremst, sodass der Gesamtimpulsstrom der Zweiphasen-Strömung erhalten bleibt.

Crowe et al. (2005) beschreibt den Einfluss der dispersen Phase auf den Zweiphasen-Freistrah in Abhängigkeit vom Massenanteil der dispersen Phase [97]. Bei geringer Beladung (Massenanteil  $< 10^{-3}$ ) ist der Einfluss vernachlässigbar und eine wechselseitige Beeinflussung der Phasen muss nicht berücksichtigt werden (one-way coupling). Bei höherer Beladung (Massenanteil  $> 10^{-3}$ ) stellt die disperse Phase einen signifikanten Massenanteil dar, deren Impulsstrom für den Gesamtimpulsstrom der Zweiphasen-Strömung berücksichtigt werden muss. Bei der Beschleunigung der dispersen Phase muss also ein Abbremsen der Gasphase berücksichtigt werden. Des Weiteren kann die disperse Phase auch Einfluss auf die Turbulenz der Strömung haben. Dabei können zwei Mechanismen auftreten. Zum einen kann die turbulente Bewegung der Gasphase auf die disperse Phase übertragen und dadurch gedämpft werden. Zum anderen können im Nachlauf von großen Partikeln beziehungsweise Tropfen, welche sich mit großer

Relativgeschwindigkeit zur kontinuierlichen Phase bewegen ( $Re_p > 400$ ), Verwirbelungen bilden und somit Turbulenz erzeugt werden [98]. Der Einfluss der dispersen Phase auf die Turbulenz kann wiederum Auswirkungen auf das Entrainment und damit auf die Ausbreitung des Zweiphasen-Freistrahls haben (two-way coupling). Für sehr große Beladungen (Massenanteil  $> 1$ ) müssen auch mögliche Kollisionen der Partikel beziehungsweise Tropfen in Betracht gezogen werden (four-way-coupling). [97,99]

Melville & Bray (1979) [100] vergleichen experimentelle Untersuchungen im Zweiphasen-Freistrahls aus der Literatur. In den ausgewählten Literaturquellen werden Geschwindigkeitsmessungen und Messungen der Verteilung von der dispersen Phase im Zweiphasen-Freistrahls mit unterschiedlichen Kombinationen der beiden Phasen durchgeführt. Die disperse Phase ist Öl, Sand, Dibutylphthalat oder Korund. Die kontinuierliche Phase ist Luft oder Wasser. Die untersuchten Partikelgrößen liegen zwischen 2 und 460  $\mu\text{m}$ . Die Beladungen der kontinuierlichen Phase (bezogen auf Masse) mit der dispersen Phase liegt zwischen  $10^{-4}$  und 3. Melville & Bray (1979) stellt fest, dass für geringe Partikelbeladung (one-way coupling Bereich) im Vergleich zu einer partikelfreien Strömung kein Unterschied bei der zeitlich gemittelten Geschwindigkeit festzustellen ist. Darüber hinaus unterscheidet sich die radiale Verteilung der Partikeln nicht wesentlich von der Konzentrationsverteilung von Gasen im Freistrahls. Aus der Verteilung der Partikel kann eine Schmidt-Zahl  $Sc_p$  abgeleitet werden, die zwischen  $0,69 < Sc_p < 0,85$  liegt und damit im Bereich der Schmidt-Zahl von Gasen liegt. Daraus geht hervor, dass Zweiphasen-Freistrahlen mit geringer Partikelbeladung dem Einphasen-Freistrahls hinsichtlich der zeitlich gemittelten Geschwindigkeit und Konzentration entsprechen.

Für höhere Partikelbeladungen sind in der Untersuchung von Melville & Bray (1979) nur die Messungen von Laats (1966, 1970) [101–103] enthalten. Dabei wird die Gasgeschwindigkeit im Zweiphasen-Freistrahls gemessen. Für die Versuche werden Korund-Partikel mit 17, 32, 49, 72 und 80  $\mu\text{m}$  bei Beladungen zwischen 0 und 1,4 und Luft mit Gasaustrittsgeschwindigkeit von 29 – 60 m/s verwendet. Um die Messungen von Laats zu interpretieren modelliert Melville & Bray (1979) in [104] den Zweiphasen-Freistrahls. Dabei werden zwei Bereiche im turbulenten Zweiphasen-Freistrahls unterschieden. Der Nahbereich, in dem noch keine Impulsübertragung zwischen disperser und kontinuierlicher Phase stattfand und ein Fernbereich, in dem beide Phasen dieselbe Geschwindigkeit haben. Bei der Modellierung des Zweiphasen-Freistrahls werden beide Phasen als kontinuierlich betrachtet. Für die Gasphase wird die turbulente Wirbelviskosität mit einem Reynolds-Spannungsmodell berechnet. Die Partikel werden durch die Widerstandskraft in der Gasphase beschleunigt. Melville & Bray (1979) erzielen durch diesen einfachen Berechnungsansatz gute Übereinstimmung mit den Messungen der zeitlich gemittelten Geschwindigkeiten von Laats (1966, 1970) [101–103]. Melville & Bray folgern daraus, dass kein oder nur ein geringer Einfluss der dispersen Phase auf die Turbulenz der fluiden Phase besteht, da im Modell nur Impulserhaltung und Impulsübertragung durch den Partikelwiderstand in der Strömung berücksichtigt wurden.

Lau & Nathan (2016) [26] untersuchen den Zweiphasen-Freistrahls mit höherer Partikelbeladung (two-way coupling Bereich). Dazu werden Partikel aus einem langen Rohr mit unterschiedlicher monodispersen Partikelgrößenverteilungen und Austrittsgeschwindigkeiten bei konstanter Partikelbeladung der Zweiphasen-Strömung untersucht. Die Geschwindigkeit wird mit Particle Imaging Velocimetry (PIV) und die Partikelkonzentration aus der Intensität der Mie-Streuung durch Planar Nephelometry (PN) gemessen. Lau & Nathan zeigen, dass sowohl die Radialprofile der Partikelgeschwindigkeit als auch die Radialprofile der Partikelkonzentration bei unterschiedlichen Düsenabständen



durch dimensionslose Auftragung auf einem Ähnlichkeitsprofil zur Deckung gebracht werden können. Somit verhalten sich Zweiphasen-Freistrahlen hinsichtlich Geschwindigkeit und Konzentration selbstähnlich. Bei der Bestimmung des dimensionslosen Halbwertsradius der Konzentration und Geschwindigkeit ( $\eta_{0,5,u}$ ,  $\eta_{0,5,c}$ ) und des dimensionslosen Konzentrations- und Geschwindigkeitsgradienten ( $B_u$ ,  $B_c$ ) (siehe Gleichung (3-12) und (3-16)) wird trotz konstanter Partikelbeladung der Zweiphasen-Strömung am Düsenaustritt ein Einfluss der Partikelgröße und der Ausströmgeschwindigkeit festgestellt. Lau & Nathan begründen dies damit, dass es nicht gelungen sei, eine über den Düsenquerschnitt konstante Partikelbeladung einzustellen. Partikel in einer Gasströmung in einem Rohr werden in Bereiche mit geringerer Turbulenz nahe der Rohrwand transportiert (Turbophorese). Große Partikel bewegen sich auf Grund von Saffman Auftrieb in Richtung des Zentrums der Rohrströmung. Aufgrund der unterschiedlichen Umströmungsgeschwindigkeit von der Partikelseite, welche der Rohrwand zu- beziehungsweise abgewandt ist, erfährt der Partikel eine Kraft, welche weg von der Rohrwand gerichtet ist. Auch nach großer Einlaufstrecke der Zweiphasen-Strömung im Rohr ist es damit nicht möglich eine homogene Partikelkonzentration über den gesamten Düsenquerschnitt zu realisieren. Die Referenzkonzentration auf der Achse entspricht somit nicht der mittleren Konzentration der Strömung. Dies beeinträchtigt die relative Abnahme der Partikelkonzentration ( $B_c$ ) ebenso wie den Halbwertsradius ( $\eta_{0,5,c}$ ).

Stakić & Milojevic (1995) [105] messen Geschwindigkeitsprofile von Zweiphasen-Freistrahlen und vergleichen diese mit Profilen eines Einphasen-Freistrahls. Dazu werden Quarzpartikel unterschiedlicher Größe (mittlere Partikelgröße:  $d_p = 250 - 300\mu m$ , große Partikelgröße  $d_p = 800 - 1000\mu m$ ) bei hoher Beladung (two-way coupling Bereich) in eine Luftströmung in einem Rohr eingebracht. Im Rohr beschleunigen die Partikel in der Gasströmung und treten am Ende in die freie Umgebung aus. Im Freistrahls aus der Rohröffnung wird die Geschwindigkeit der Gasströmung mit Hilfe einer Staudrucksonde bestimmt. Freistrahlen, die mit kleinen Partikeln ( $d_p < 250\mu m$ ) beladen sind, werden nicht untersucht, da davon ausgegangen wird, dass kein Einfluss besteht. Für alle untersuchten Freistrahlen stellen Stakić & Milojevic fest, dass die Halbwertsradien (siehe Gl. (3-12)) linear mit dem Düsenabstand zunehmen. Die Geschwindigkeit auf der Achse ist für die mittlere Partikelgröße größer als beim Einphasen-Freistrahls mit gleicher Austrittsgeschwindigkeit der Gasphase  $u_0$ . Bei großer Partikelgröße ist die Gasgeschwindigkeit auf der Achse kleiner als beim Einphasen-Freistrahls. Stakić & Milojevic sehen die Ursache bei Unterschieden in den Austrittsbedingungen. Die mittlere Partikelgröße kann in der Gasströmung vor Düsenaustritt annähernd auf die Gasgeschwindigkeit beschleunigt werden. Der Impulsstrom der Zweiphasen-Strömung ist am Düsenaustritt größer als beim Einphasen-Freistrahls. Die Gasphase wird durch Entrainment abgebremst und die Partikel können als massereiche Zentren in der Strömung Impuls auf die Gasphase übertragen. Große Partikel hingegen können in der Rohrströmung vor Düsenaustritt weniger stark beschleunigt werden und sind langsamer als die Gasphase. Die Partikel nehmen stromab zunächst weiter Impuls aus der Gasphase auf. Damit ist die Gasphase langsamer als beim Einphasen-Freistrahls. Um ihre Ergebnisse auf Plausibilität zu prüfen, modellieren Stakić & Milojevic zwei Grenzfälle. Erstens, die Partikel treten mit der Geschwindigkeit null aus der Düse aus. Zweitens, die Partikel erreichen am Düsenaustritt die Geschwindigkeit der Gasphase. Stakić & Milojevic stellen fest, dass ihre Messergebnisse jeweils zwischen diesen beiden Grenzfällen liegen.

Zusammenfassend lässt sich aus den oben gezeigten Untersuchungen feststellen, dass die Anwesenheit einer dispersen Phase (Partikel oder Tropfen) einen Einfluss auf den Freistrahls ausübt. Die meisten Untersuchungen wurden dabei mit partikelbeladenen Strömungen

durchgeführt. Für geringe Beladung ist der Einfluss sehr gering. Für höhere Beladungen gibt es im Wesentlichen zwei Mechanismen, die in der Literatur untersucht wurden. Zum einen besteht ein Einfluss der dispersen Phase auf die Struktur der Turbulenz. Zum anderen besteht ein Einfluss durch die Trägheit der Masse der dispersen Phase. Turbulenz kann je nach Partikelgröße sowohl intensiviert als auch abgeschwächt werden. Der Einfluss von partikelinduzierter Turbulenz auf die Freistrahlsprofile wird in der Literatur als eher gering abgeschätzt. Der Einfluss der Trägheit der Masse der Partikel muss berücksichtigt werden. Die Anwesenheit von Partikeln erschwert die Durchführung von Experimenten mit klaren Versuchsbedingungen. Die meisten Versuche zum Zweiphasen-Freistrahls werden mit partikelbeladenen Gasströmungen durchgeführt, die über ein Rohr in die freie Umgebung ausströmt. Dabei ist der Austrittsimpuls der dispersen Phase unbekannt, da Partikel, bereits innerhalb der Düse beschleunigt werden. Außerdem kann keine homogene Mischung von Gas und disperser Phase am Düsenaustritt realisiert werden, da sich die Strömung entmischt. Eine Erfassung des Austrittsimpulsstroms durch Messung des lokalen Massenstroms und zugehörige Geschwindigkeit am Düsenaustritt ist komplex. So fehlt bis heute eine systematische und detaillierte experimentelle Untersuchung zum Zweiphasen-Freistrahls, vor allem im Bereich hoher Partikelbeladung (two-way coupling) [26]. Eine umfassende Theorie zur Beschreibung des Zweiphasen-Freistrahls ist ebenfalls nicht aus der Literatur zu entnehmen. Kernaussagen, die in der Literatur verfügbaren Quellen, ergeben keine konsistente Theorie zum Zweiphasen-Freistrahls und widersprechen sich teilweise. Aus diesem Grund werden im weiteren Verlauf dieser Arbeit Messungen im Zweiphasen-Freistrahls durchgeführt, die eine empirische Beschreibung des Zweiphasen-Freistrahls auf Grundlage der verfügbaren Theorie ermöglicht.

### 3.2 Grundlagen der Flugstromvergasung

Vergasung ist eine energieeffiziente Methode zur Produktion von Synthesegas aus kohlenstoffhaltigen Brennstoffen. Synthesegas ist ein Gemisch aus CO und H<sub>2</sub> und Ausgangsstoff für die Herstellung von Basischemikalien, welche unter anderem zu Kunststoffen, Pflanzenschutzmitteln und Düngern weiterverarbeitet werden [106,107]. Synthesegas besitzt sehr große Bedeutung für die chemische Industrie. Des Weiteren können aus Synthesegas chemische Energieträger, wie Methan, Fischer-Tropsch-Diesel und Dimethylether (DME) hergestellt werden [106]. Eine Übersichtsdarstellung von möglichen Syntheserouten ist in Abbildung 3-15 gezeigt. Darüber hinaus kann Synthesegas in IGCC-Kraftwerken energetisch zur Stromerzeugung genutzt werden [108].

Synthesegas wird entweder durch Dampfreformierung von fossilem Erdgas oder durch Vergasung hergestellt. Letztgenanntes bietet die Möglichkeit lignocellulosehaltige Biomasse als Einsatzstoff zu verwenden, wodurch fossile Energieträger ersetzt und Treibhausgasemissionen reduziert werden können. Ferner kann durch die Vergasung von Plastikabfällen Kohlenstoff recycelt werden, indem aus dem erzeugten Synthesegas erneut chemische Produkte hergestellt werden. Damit kann der Kohlenstoffkreislauf geschlossen, Emissionen reduziert und Ressourcen geschont werden. Vergasung ist somit ein vielversprechendes Verfahren und kann zukünftig eine Schlüsselrolle in der Kreislaufwirtschaft einnehmen.

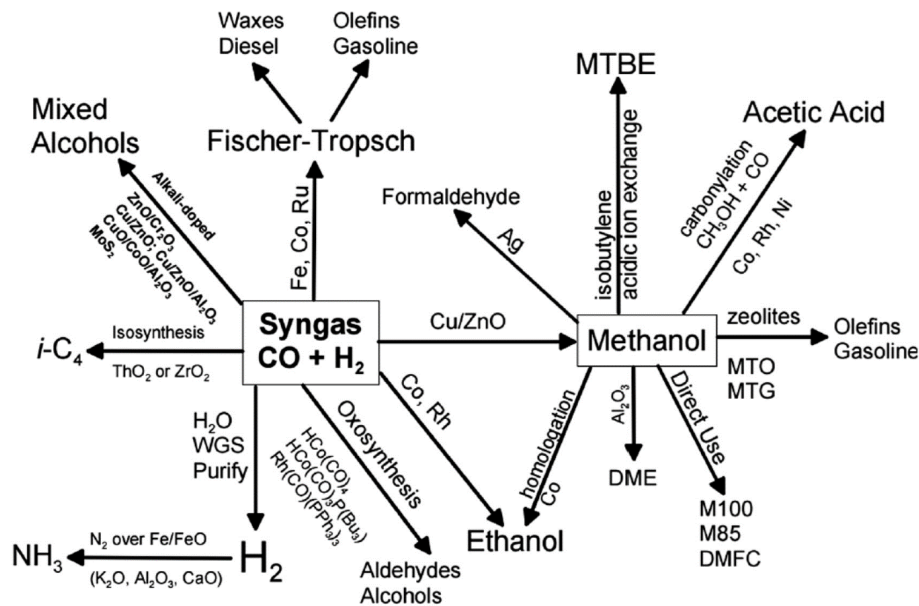


Abbildung 3-15 Übersicht über verschiedene Verwendungspfade von Synthesegas zur Herstellung von chemischen Produkten [109]

Es gibt drei technisch relevante Vergasertypen: Festbett-, Wirbelschicht- und Flugstromvergaser [110]. Die drei Reaktortypen unterscheiden sich in den Reaktionsbedingungen (Druck, Temperatur, Verweilzeit) und der Strömungsführung im Reaktor. Diese Faktoren haben großen Einfluss auf die Qualität des erzeugten Synthesegases. Grundsätzlich enthält das Produktgas bei höheren Reaktortemperaturen weniger unerwünschte Nebenprodukte, wie zum Beispiel Kohlenwasserstoffe. Allerdings ist der chemische Energieinhalt (Kaltgaswirkungsgrad) des erzeugten Synthesegases geringer. Um die hohen Prozesstemperaturen zu erzeugen, muss ein größerer Anteil des Brennstoffs durch vollständige Oxidation umgesetzt werden. Der Vergasertyp wird anhand des Brennstoffs, der geforderten Synthesegasqualität und dem gewünschten Druck im nachgeschalteten Prozess ausgewählt. In Tabelle 3-4 sind wichtige technische Kennzahlen der drei Verfahren gegenübergestellt.

Tabelle 3-4 Vergleich typischer Betriebsbedingungen von drei kommerziellen Vergasungstechnologien. Daten aus [111]

	<b>Festbett</b>	<b>Wirbelschicht</b>	<b>Flugstrom</b>
Brennstoff	Feststoff (6-51 mm)	Feststoff (< 6 mm)	Feststoffe (< 150 µm) Flüssigkeit, Suspension
Gasaustritts- temperatur	450 – 650 °C	800 – 1000 °C	>1260 °C
Druck (absolut)	1 - 30 bar	1 bar	30 - 100 bar
Vergasungs- medium	Luft / Sauerstoff / Dampf	Luft	Sauerstoff
Inerte Bestandteile	Asche / Schlacke	Asche	Schlacke
Teergehalt	Gegenstrom: sehr hoch; Gleichstrom: gemäßigt	Hoch	Sehr gering

Der Flugstromvergaser ist die am häufigsten verwendete Vergasungstechnologie für große Vergasungsanlagen [110]. Im Vergleich zu Wirbelschicht- und Festbettvergaser können die höchsten Reaktortemperaturen und -drücke realisiert werden. Dadurch werden hohe Reaktionsgeschwindigkeiten und damit kurze Verweilzeiten von wenigen Sekunden erreicht. Die Einsatzstoffe bei der Flugstromvergasung sind im Wesentlichen das Vergasungsmedium und Brennstoff. Das Vergasungsmedium besteht hauptsächlich aus Sauerstoff mit einem geringeren Anteil Wasserdampf als Moderator. Im Gegensatz zu anderen Verfahren wird kein Stickstoff eingebracht. Bei der Wahl des Brennstoffs gibt es außer einer geringen Partikelgröße kaum Restriktionen. Es kann ein großes Spektrum verschiedener fein gemahlener Feststoffe als auch Flüssigkeiten, Gase und Suspensionen verwendet werden. Nach Higman (2008) [110] können fast alle Arten von fossiler Kohle sowie feste und flüssige Rückstände aus Raffinerien eingesetzt werden. Die Technologie eignet sich insbesondere auch für Brennstoffe biogenen Ursprungs, die vor der Vergasung durch Pyrolyse vorbehandelt werden können, um den Mahlprozess zu feinen Partikeln zu ermöglichen [111–113]. Die folgende Liste zeigt mögliche Brennstoffe aus verschiedenen Wirtschaftsbereichen [110,111]:

- Landwirtschaft: Stroh, Bagasse, Schalen von Nüssen und Samen
- Siedlungsabfälle: Kunststoffe
- Forstwirtschaft: Holz, Rinde, Sägemehl
- Industrielle Reststoffe: Schwarzlauge, Pyrolyseöl
- Fossile Brennstoffe: Kohle

Der Brennstoff wird am Kopf des Vergasers zusammen mit dem Vergasungsmedium in feine Tröpfchen zerstäubt und in die heiße Atmosphäre des Vergasers eingebracht und dort zu Synthesegas umgesetzt. An der gasgestützten Brennerdüse wird dabei ein Brennstoffspray durch den großen Impulsstrom des Vergasungsmediums erzeugt. Damit wird das

Vergasungsmedium gleichzeitig als Zerstäubungsmedium verwendet. Entstehende Brennstofftropfen und Vergasungsmedium bilden im Anschluss an die Zerstäubung einen Zweiphasen-Freistrahls, der mit hoher Geschwindigkeit in die heiße Reaktoratmosphäre eintritt. Gasmoleküle in der Umgebung des austretenden Freistrahls werden mitgerissen und in den Strahl eingemischt (= Entrainment, s. Kapitel 3.1). Durch das Entrainment wird eine Rezirkulation der Gasphase im Innenraum des Reaktors erzeugt und ein Strom von brennbarem heißem Synthesegas Richtung Reaktorkopf transportiert. Das Synthesegas mischt durch Entrainment mit dem Vergasungsmedium unmittelbar am Düsenaustritt und reagiert unter Ausbildung einer stabil brennenden Flamme. Durch die hohen Reaktionstemperaturen können Zwischen- und Nebenprodukte (Ruß, Teer, kurze Kohlenwasserstoffe) nahezu vollständig abreagieren. Das entstehende Produktgas enthält typischerweise nur geringe Anteile an Nebenprodukten. Die Flugstromvergasung eignet sich daher für Syntheseverfahren mit besonders hohen Ansprüchen an die Synthesegasqualität.

Die hohen Temperaturen im Reaktionsraum stellen in Kombination mit dem hohen Reaktordruck und der korrosiven Wirkung von mineralischen Bestandteilen aus dem Brennstoff eine enorme Herausforderung an die Werkstoffe des Reaktors dar. Je nach Ausführung kann der Reaktor mit Feuerfestmaterial ausgemauert sein oder über einen Kühlschirm (= Membranwand) verfügen. Eine Übersicht über die Reaktordesigns verschiedener Flugstromvergaser ist in [110,111] zu finden. In dieser Arbeit wird nur der mit Membranwand ausgestattete Reaktor vorgestellt, da dieser für den bereits in Kapitel 1 erwähnten bioliq<sup>®</sup>-Reaktor eingesetzt ist (siehe Abbildung 3-16). Dabei bildet ein äußerer Stahlmantel den Druckbehälter. Der Kühlschirm besteht aus Stahlrohren, die zu einer Helix gewickelt und über Stege („Membranen“) miteinander verbunden werden. Durch die Stahlrohre fließt Kühlwasser. Auf dem Kühlschirm ist zum Schutz vor Korrosion und Hitze eine Schicht aus Siliziumcarbid als Feuerfestmasse aufgestampft, auf der sich flüssige Schlacketrophen abscheiden [13,114]. Diese bilden einen Schlackefilm, der auf Grund der Schwerkraft nach unten abfließt. Schlacke, die in direktem Kontakt mit der gekühlten Stampfmasse steht, erstarrt und bildet eine feste Schlackeschicht auf der Feuerfestmasse. Diese schützt den Kühlschirm vor korrosiven Angriffen und bildet außerdem eine Isolationsschicht zur heißen Synthesegasatmosphäre [13,113]. Wenn die schützende feste Schlackeschicht durch eine mechanische oder thermische Beanspruchung abgetragen wird, erstarrt an dieser Stelle erneut flüssige Schlacke auf der gekühlten Stampfmasse. Der Schutz des Kühlschirms wird dadurch erneuert. Damit können lange Betriebszeiten ohne Revision erreicht werden. Trotz der Wasserkühlung ist der Wärmeverlust über den Kühlschirm mit 2,5 – 4 % des Heizwerts des Feedstroms gering [114]. Am unteren Ende des Kühlschirms tropft die flüssige Schlacke an der Kante des Auslasses ab und kühlt zusammen mit dem heißen Synthesegas in der Tauchquenche ab. Die Schlacke erstarrt zu Granulat und kann diskontinuierlich aus dem Reaktor ausgeschleust werden. Das Synthesegas verlässt den Gaserzeuger über einen seitlichen Auslass und kann der Gasreinigung zugeführt werden.

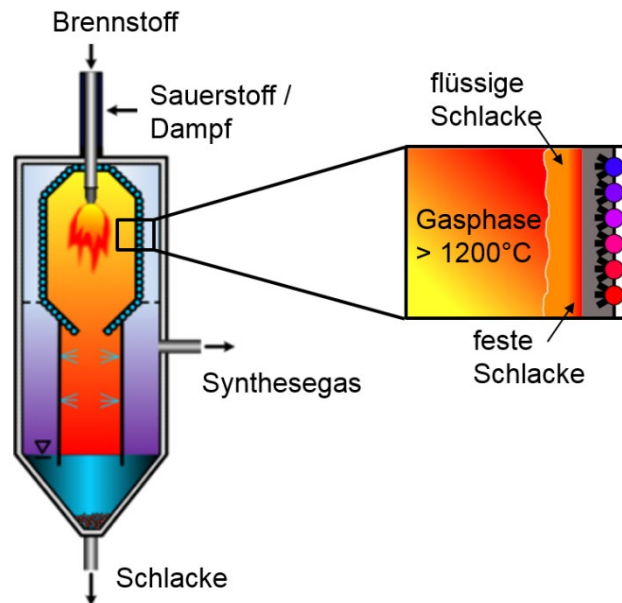


Abbildung 3-16 Hochdruckflugstromreaktors des bioliq<sup>®</sup>-Vergasers mit Kühlturm und Tauchquench. Detailabbildung: Aufbau des Kühlturms mit schützender Schlackeschicht [13].

### Kennzahlen der Flugstromvergasung

Zur Charakterisierung des Vergasungsprozesses werden Kennzahlen eingesetzt. Diese können sowohl dimensionsbehaftet als auch dimensionslos sein und beschreiben globale und lokale Größen und Zustände im Prozess. Die technische Luftzahl  $\lambda$  ist das Verhältnis der tatsächlich zugeführten Sauerstoffmenge zur Sauerstoffmenge, die für eine stöchiometrische Verbrennung benötigt wird. Dabei wird zwischen der technischen Luftzahl  $\lambda_{tech}$  und der absoluten Luftzahl  $\lambda_{abs}$  unterschieden. Bei  $\lambda_{tech}$  (Gleichung (3-31)) wird bei der zugeführten Sauerstoffmenge  $\dot{n}_{O_2}$  nur der Sauerstoff aus dem Vergasungsmedium berücksichtigt. Bei  $\lambda_{abs}$  wird zusätzlich der Sauerstoff berücksichtigt, der im Brennstoff enthalten ist. Dabei wird in Gleichung (3-32) das Verhältnis aus der Anzahl der vorhandenen O-Atome und der Anzahl der O-Atome, die zur vollständigen Oxidation der C und H-Atome benötigt werden, gebildet. Mit der absoluten Luftzahl kann auch der Oxidationsgrad des Synthesegases sowohl am Reaktorauslass als auch lokal im Reaktor anhand der Gaszusammensetzung bestimmt werden.

$$\lambda_{tech} = \frac{\dot{n}_{O_2}}{\dot{n}_{O_2,st}} \quad (3-31)$$

$$\lambda_{abs} = \frac{n_O}{2 \cdot n_C + 0,5 \cdot n_H} \quad (3-32)$$

Zur Charakterisierung der Eintrittsströme bei der Vergasung wird das Massenstromverhältnis GLR (*Gas-to-Liquid Ratio*) aus Vergasungsmedium und Brennstoff gebildet (Gleichung (3-33)). Da bei der Flugstromvergasung das Vergasungsmedium

gleichzeitig als Zerstäubungsmedium verwendet wird, dient das Massenstromverhältnis insbesondere zur Charakterisierung des Zerstäubungsprozesses.

$$GLR = \frac{\dot{m}_g}{\dot{m}_l} \quad (3-33)$$

Zur Charakterisierung der entstehenden Tropfengrößenverteilung bei der Zerstäubung werden repräsentative mittlere Tropfengrößen verwendet. Im Rahmen dieser Arbeit ist der Sauterdurchmesser  $d_{32}$  relevant. Der Sauterdurchmesser ist der fiktive Tropfendurchmesser eines monodispersen Sprays mit dem gleichen Volumen-zu-Oberflächenverhältnis wie das zu beschreibende Spray (Gleichung (3-34)). [115]

$$d_{32} = \frac{\sum_{k=1}^{N_k} \Delta N_{Tr,k} \cdot d_{Tr}^3}{\sum_{k=1}^{N_k} \Delta N_{Tr,k} \cdot d_{Tr}^2} \quad (3-34)$$

Ziel der Vergasung ist einen großen Anteil der chemisch gebundenen Energie aus dem Brennstoff in das Synthesegas zu überführen. Zur energetischen Charakterisierung der Produktausbeute wird der Kaltgaswirkungsgrad KGW (Gleichung (3-35)) herangezogen. Dieser beschreibt den Heizwert des Synthesegases im Verhältnis zum Heizwert des eingesetzten Brennstoffs. Der Brennstoffumsatz kann mithilfe des Kohlenstoffumsatzes CC (engl: *Carbon Conversion*) beschrieben werden. Dieser ist definiert als das Verhältnis des im Produktgas gebundenen Kohlenstoffs zu dem im Brennstoff gebundenen Kohlenstoff.

$$KGW = \frac{\dot{n}_{SG} \cdot \tilde{h}_{s,SG}}{\dot{n}_{BS} \cdot \tilde{h}_{s,BS}} \quad (3-35)$$

$$CC = \frac{\dot{n}_{SG} \cdot (\tilde{y}_{SG,CO} + \tilde{y}_{SG,CO_2} + a \cdot \tilde{y}_{SG,C_aH_b})}{\dot{n}_{BS} \cdot \tilde{y}_{BS,C}} \quad (3-36)$$

Zur Charakterisierung der Reaktortemperatur können die adiabate Temperatur und die Wassergas-Shift-Temperatur berechnet werden. Die adiabate Temperatur  $T_{ad}$  ergibt sich unter der Annahme von vollständigem Umsatz der zugeführten Edukte zu  $H_2$ ,  $CO$ ,  $H_2O$  und  $CO_2$ , ohne Wärmeverlust. Dabei wird die mögliche Entstehung von Radikalen (z. B.  $OH^\cdot$ ) nicht berücksichtigt. Die Wassergas-Shift-Temperatur  $T_{WGS}$  kann aus der Synthesegaszusammensetzung berechnet werden. Dabei wird angenommen, dass sich die Mischung im thermodynamischen Gleichgewicht befindet. Aus der temperaturabhängigen Gleichgewichtskonstanten der Wassergas-Shift Reaktion  $K_{P,WGS}$  wird  $T_{WGS}$  bestimmt (siehe Gleichung (3-64)). Das Gasgemisch befindet sich im thermodynamischen Gleichgewicht, wenn  $T_{WGS}$  mit der lokalen Gastemperatur übereinstimmt.

Die in diesem Abschnitt beschriebenen Kennzahlen können für einen effizienten Betrieb des Flugstromvergasers nur in Grenzen variiert werden. Für einen hohen Brennstoffumsatz muss der Brennstoff an der Düse in ein feines Spray zerteilt werden. Dazu wird an der Düse der Impulsstrom aus dem Vergasungsmedium genutzt. Je größer der zugeführte Massenstrom von Vergasungsmedium (= Zerstäubungsmedium) ( $GLR \uparrow$ ) desto feiner sind die

entstehenden Tropfen ( $d_{32} \downarrow$ ). Je größer die zugeführte Menge Vergasungsmedium, desto größer ist die zugeführte Menge Sauerstoff und desto größer ist die Luftzahl ( $\lambda_{tech} \uparrow$ ). Mit steigender Luftzahl nimmt auch die Temperatur zu ( $T \uparrow$ ). Durch den höheren Oxidationsgrad nimmt allerdings die chemisch gebundene Energie im Synthesegas ab (KGW  $\downarrow$ ). Umgekehrt nimmt bei geringer Luftzahl ( $\lambda_{tech} \downarrow$ , GLR  $\downarrow$ ) die Temperatur ab ( $T \downarrow$ ). Dadurch steigt der Anteil ungewollter Nebenprodukte im Produktgas und nicht umgesetzter Brennstoff verlässt den Reaktor (CC  $\downarrow$ ). Somit ist für einen effizienten Vergasungsprozess das Verhältnis von Vergasungsmedium und Brennstoff begrenzt. Einerseits müssen hohe Reaktortemperaturen für einen vollständigen Brennstoffumsatz erreicht werden. Andererseits muss die chemisch gebundene Energie in das Produktgas überführt werden. Damit ergibt sich für die Vergasung ein enges Betriebsfenster, in dem eine gute Produktgasausbeute mit hoher Gasqualität zu erwarten ist. In Abbildung 3-17 sind diese Zusammenhänge schematisch gezeigt.

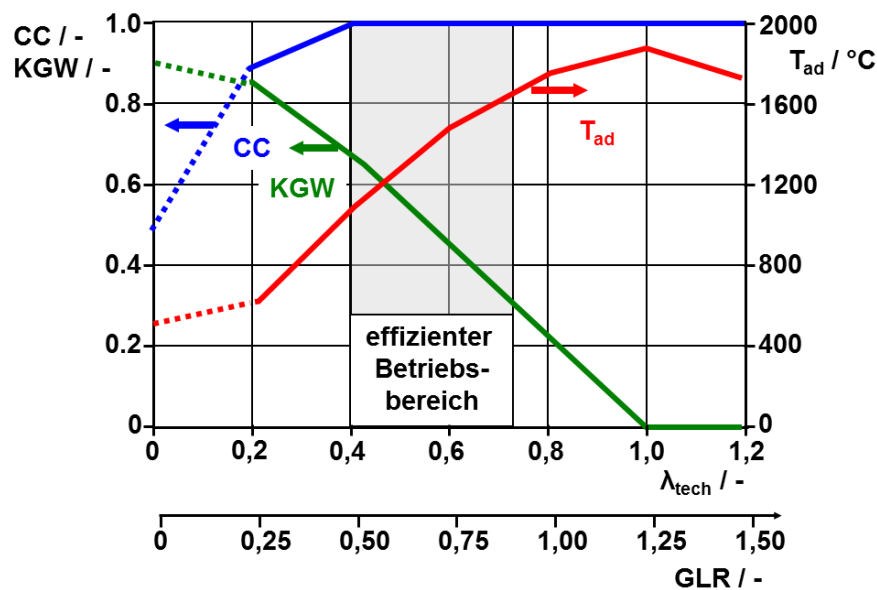


Abbildung 3-17 Schematische Darstellung der Abhängigkeit von adiabater Temperatur, Kohlenstoffumsatz und Kaltgaswirkungsgrad als Funktion der Luftzahl beziehungsweise des Massenstromverhältnisses an der Brennerdüse eines Flugstromvergasers. Abbildung aus [116].

Eine weitere wichtige Größe ist der Sauerstoffanteil im Vergasungsmedium. Durch Beimischung von Wasserdampf in das Vergasungsmedium kann der Massenstrom des Vergasungsmediums bei konstanter Sauerstoffmenge erhöht werden. Dadurch kann das Massenstromverhältnis für eine effiziente Zerstäubung erhöht werden. Allerdings ist die Beimischung von Wasserdampf ebenfalls begrenzt, da diese bei gleichbleibender Freisetzung von Reaktionswärme den Produktgasstrom erhöhen und somit die Reaktortemperatur herabsetzen.

### 3.3 Grundlagen der Zerstäubung

Die Zerstäubung findet im Flugstromvergasers unmittelbar am Austritt der Brennerdüse am Kopf des Reaktors statt. Um Wärme- und Stoffübergänge zu intensivieren und damit einen vollständigen Brennstoffumsatz zu ermöglichen, wird durch Zerstäubung die Oberfläche der



Flüssigkeit stark vergrößert. Wenn die Oberflächenspannung der Flüssigkeit mithilfe einer äußeren Kraft überwunden wird, kann Flüssigkeit aus dem kompakten Flüssigkeitsstrahl abgetrennt und neue Phasengrenzfläche geschaffen werden. Die hierfür benötigte Oberflächenenergie  $E_S$  ist das Produkt aus der neu geschaffenen Oberfläche  $\Delta A$  und der Oberflächenspannung  $\sigma$  (Gleichung (3-37)). Diese Energie muss von äußeren Kräften aufgebracht werden. Die Flüssigkeit bildet ohne weitere Krafteinwirkung unter Minimierung ihrer Grenzfläche sphärische Tropfen aus.

$$E_S = \sigma \cdot \Delta A \quad (3-37)$$

Bei der Zerstäubung mit gasgestützten Zweistoff-Düsen werden aerodynamische Kräfte zur Zerteilung der Flüssigkeit durch das gasförmige Zerstäubungsmedium aufgebracht. Dieses tritt mit hoher Geschwindigkeit aus der Düse aus und wird mit der langsam ausströmenden Flüssigkeit in Kontakt gebracht. Im Rahmen dieser Arbeit werden ausschließlich außenmischende Zweistoff-Düsen betrachtet. Durch die Relativgeschwindigkeit der beiden Phasen wird Impuls übertragen, der die Flüssigkeit zunächst verformt und bei ausreichend hohem Impulsstrom der Gasphase schließlich zerteilt. Das Zerteilen des intakten Flüssigkeitsstrahls wird als Primärzerfall bezeichnet. Dabei entstehen zusammenhängende Ligamente und größere Tropfen, die in einem Sekundärzerfall weiter zerfallen können. Der Primärstrahlzerfall kann mithilfe der aerodynamischen Weber-Zahl in verschiedene Regime eingeteilt werden. Die Weber-Zahl wird aus dem Verhältnis von destabilisierenden aerodynamischen Kräften der Gasphase zu stabilisierenden Oberflächenspannungskraft der Flüssigkeit gebildet (Gleichung (3-38)). Die Weber-Zahl ist damit ein Maß für die Stabilität eines kompakten Flüssigkeitsvolumens (Flüssigkeitsstrahl, Tropfen) gegen Verformung oder Zerteilung. Für die charakteristische Länge  $L_c$  in der Weber-Zahl kann entweder der Strahldurchmesser oder ein Tropfendurchmesser eingesetzt werden.

$$We_{aero} = \frac{(u_g - u_l)^2 \cdot \rho_g \cdot L_c}{\sigma} \quad (3-38)$$

Der Primärstrahlzerfall von Zweistoff-Düsen wurde von Faragó & Chigier (1992) in vier Regime klassifiziert (Abbildung 3-18). Der achsensymmetrische Rayleigh-Zerfall tritt bei geringen Gasaustrittsgeschwindigkeiten und damit kleinen aerodynamischen Kräften auf. Kleine Störungen im austretenden Flüssigkeitsstrahl wachsen auf Grund der Rayleigh-Plateau-Instabilität weiter an und bilden Einschnürungen im Strahl, die schließlich zur Abtrennung des Strahls in einzelne Tropfen führen. Für Weber-Zahlen  $We_{aero} < 15$  wellt sich der Strahl achsensymmetrisch auf. Für  $15 < We_{aero} < 25$  zeigt sich ein nicht-achsensymmetrischer Rayleigh-Zerfall. Bei weiterer Erhöhung der Gasaustrittsgeschwindigkeit kommt es zur Ausbildung von Membranen. Diese Membranen werden durch die Gasströmung aufgeblasen. Die Flüssigkeit akkumuliert an den Membranrändern, bis die Membran an der Stelle mit der geringsten Stärke berstet. Dieser Zerfallsmechanismus wird Membranzerfall genannt und tritt bei  $25 < We_{aero} < 70$  auf. Für höhere Weber-Zahlen kommt es zum Fadenzerfall. Dabei werden auf Grund der großen aerodynamischen Kräfte Flüssigkeitsligamente vom Flüssigkeitsstrahl abgeschert. Diese Ligamente zerfallen stromab auf Grund von Rayleigh-Plateau-Instabilitäten zu einem feinen Spray. Abbildung 3-19 zeigt Hochgeschwindigkeitskameraaufnahmen (HG-Aufnahmen)

der verschiedenen Zerfallsregime von gasgestützten außen mischenden Zweistoff-Düsen. [117]

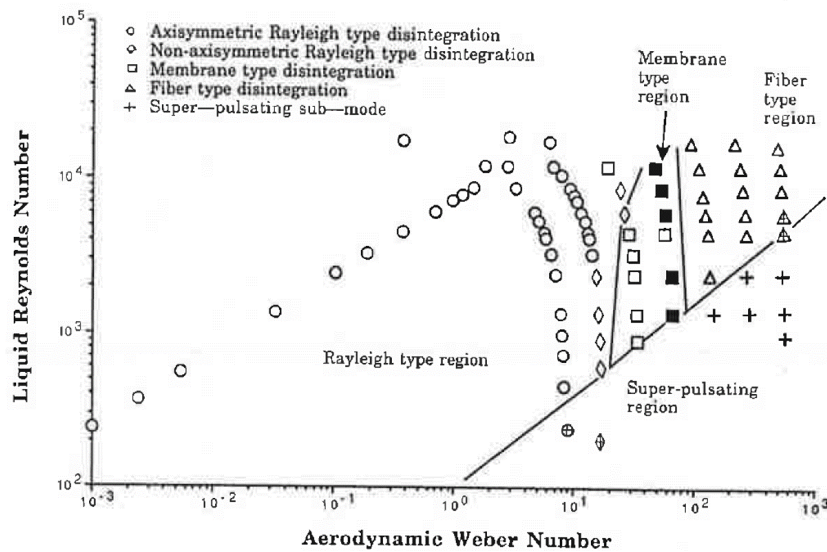


Abbildung 3-18 Klassifizierung der Regime des Primärstrahlzerfalls von außenmischenden Zweistoff-Düsen nach Chigier & Faragó (1992) [117].

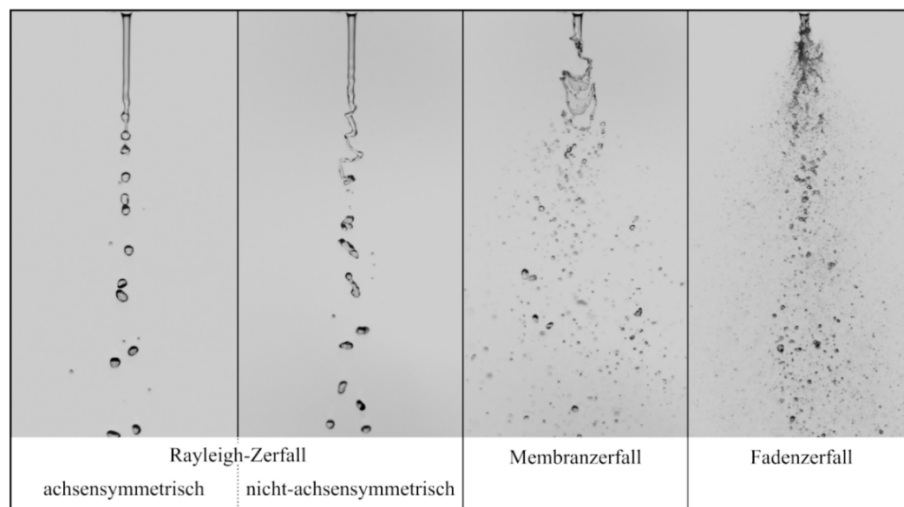


Abbildung 3-19 Strahlzerfallsregime gasgestützter Zweistoff-Düsen [115].

Beim Faden- und Membranzerfall kann es zur Ausbildung einer periodischen Pulsation des Flüssigkeitsstrahls nahe der Düse kommen (Flapping). Dabei werden durch den hohen Impuls aus der Gasphase Wellen an der Phasengrenze der Flüssigkeit (Kevin-Helmholtz-Instabilitäten) verstärkt. Durch die Gasphase werden Flüssigkeitsligamente aus dem Flüssigkeitsstrahl herausgelöst. Zwischen zwei Wellenbergen auf der Phasengrenze bilden sich Wirbel in der Gasphase, die die Flüssigkeitsligamente in radiale Richtung schleudern (engl.: *flapping*). Im Anschluss zerfallen die Ligamente durch Rayleigh-Plateau Instabilität in Tropfen. Abbildung 3-20 zeigt repräsentative HG-Aufnahmen der beiden Primärinstabilitäten. Bei geringer Ausströmgeschwindigkeit der Flüssigphase und gleichzeitig hoher Gasgeschwindigkeit führen Faragó & Chigier (1992) [117] das

Unterregime Super-Pulsieren ein. Diese Primärinstabilität kann sowohl achsensymmetrisch (Pulsieren) als auch nicht-achsensymmetrisch (Flapping) stattfinden und hat Einfluss auf den weiteren Strahlzerfall. Der vorherrschende Modus ist nach Sanger (2018) [115] abhangig von der Viskositat der Flussigkeit und dem Massenstromverhaltnis von Gas- zu Flussigphase.

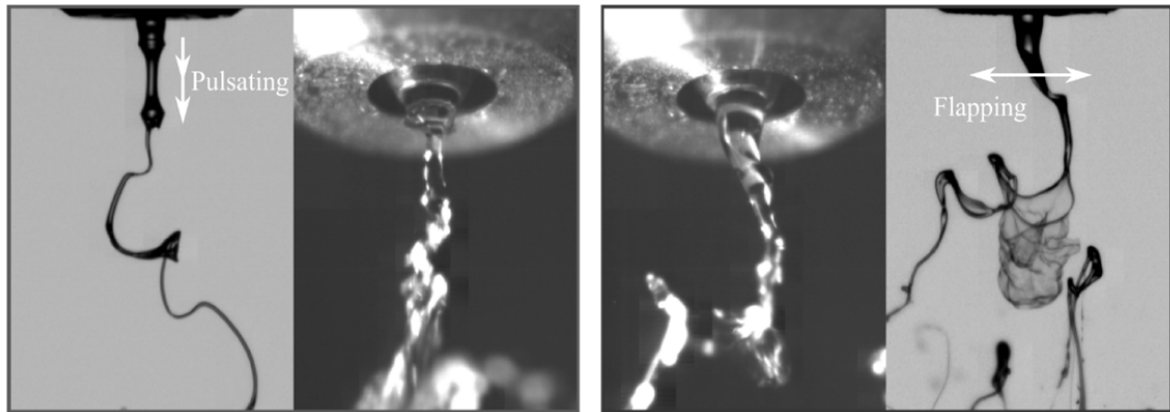


Abbildung 3-20: Primarin stabilitaten bei gasgestutzten Zweistoff-Dusen von zwei Flussigkeiten mit verschiedener Viskositat. Pulsating:  $\eta_l = 200 \text{ mPa s}$  ; Flapping:  $\eta_l = 300 \text{ mPa s}$  [115].

### 3.4 Grundlagen der Tropfenbeschleunigung

Um Brennstoff an der Brennerduse des Vergasers in ein feines Spray zu zerstauben, werden groe aerodynamische Krafte benotigt. Diese Krafte werden durch den Impulsstrom des ausstromenden Vergasungsmediums aufgebracht. Tatsachlich ubersteigt der Impulsstrom der Gasphase den benotigten Energiestrom zur Schaffung neuer Oberflache um ein Vielfaches, sodass der Impulsstrom aus der Gasphase weitgehend als Bewegungsenergie erhalten bleibt. Der Impulsstrom aus der Gasphase wird durch Widerstandskrafte zwischen Gasphase und Tropfen ubertragen, wodurch die Tropfen eine Beschleunigung erfahren. Im Folgenden werden der umstromte Tropfen als eine Kugel betrachtet.

In Gleichung (3-39) ist die Bewegungsgleichung aus einer Kraftebilanz um eine Kugel beschrieben. Der Term auf der linken Seite entspricht der Tragheitskraft der Kugel. Die rechte Seite ist die Summe der aueren Krafte, mit der Widerstandskraft  $F_W$  (Gleichung (3-41)) und der, um den (statischen) Auftrieb  $F_A$  verminderten Schwerkraft  $F_G$  (Gleichung (3-40)). Die Schwerkraft wirkt in Richtung der Erdanziehung, die Auftriebskraft entgegen der Erdanziehung. Die Widerstandskraft an der Kugel wirkt entgegen der Anstromrichtung, die sich aus der Relativgeschwindigkeit  $(u_g - u_{Tr})$  ergibt [118]. Im Rahmen der vorliegenden Arbeit spielen Schwer- und Auftriebskraft aufgrund der hohen Stromungsgeschwindigkeiten im Verhaltnis zur Widerstandskraft keine Rolle und werden vernachlassigt. Weitere nicht berucksichtigte Effekte sind der Einfluss der tropfeninternen Zirkulation der Flussigkeit und der verdunstende Massenstrom auf den Widerstandsbeiwert. Daher bleibt die Widerstandskraft als einzige auere Kraft auf der rechten Seite der Kraftebilanz in Gleichung (3-39) stehen.

$$\frac{\pi}{6} \cdot d_{Tr}^3 \cdot \rho_{Tr} \cdot \frac{du_{Tr}}{dt} = F_W + (F_G - F_A) \quad (3-39)$$

$$F_G - F_A = \frac{\pi}{6} \cdot d_{Tr}^3 \cdot (\rho_{Tr} - \rho_g) \cdot g \quad (3-40)$$

Die Widerstandskraft setzt sich aus zwei Komponenten zusammen. Der Reibungswiderstand wird durch die Haftbedingung der Gasströmung an der Kugeloberfläche hervorgerufen. Die Druckkraft entsteht durch den Staudruck auf die Anströmfläche der Kugel. Zur Berechnung der Widerstandskraft (Gleichung (3-41)) wird ein dimensionsloser Widerstandskoeffizient  $c_w$  als Proportionalitätsfaktor eingeführt, der von der Reynolds-Zahl an der Kugel  $Re_{Tr}$  abhängig ist [119]. Die Reynolds-Zahl wird aus der Relativgeschwindigkeit  $(u_g - u_{Tr})$ , dem Tropfendurchmesser  $d_{Tr}$  sowie der Dichte  $\rho_g$  und der dynamischen Viskosität  $\eta_g$  der umströmenden Gasphase gebildet (Gleichung (3-42)) [120].

$$F_W = c_w \cdot \frac{\pi}{4} \cdot d_{Tr}^2 \cdot \frac{1}{2} \cdot \rho_g \cdot (u_g - u_{Tr}) \cdot |u_g - u_{Tr}| \quad (3-41)$$

$$Re_{Tr} = \frac{(u_{Tr} - u_g) \cdot \rho_g \cdot d_{Tr}}{\eta_g} \quad (3-42)$$

Für sehr geringe Reynolds-Zahlen, dem so genannten Stokesbereich ( $Re_{Tr} < 0,5$ ), kann eine analytische Lösung aus der Navier-Stokes Gleichung für  $c_w$  gefunden werden ( $c_w = 24/Re_{Tr}$ ). In diesem Bereich ist die Widerstandskraft dominiert von der Viskosität des umströmenden Fluids [120]. Für größere Reynolds-Zahlen weicht der Wert für  $c_w$  zunehmend von  $c_w = 24/Re_{Tr}$  ab, da weitere Strömungsphänomene den  $c_w$  beeinflussen. Zunächst löst sich die Strömung von der Oberfläche der Kugel ab und bildet eine Rezirkulationszone im Nachlauf (siehe Abbildung 3-21 links). Durch weitere Erhöhung der Reynolds-Zahl löst sich die Rezirkulationszone periodisch ab und erzeugt eine Kármánsche Wirbelstraße. Bei der kritischen Reynolds-Zahl von  $Re_{krit} \approx 2,5 \cdot 10^5$  erfolgt ein laminar-turbulenter Umschlag der Grenzschicht im Bereich der Strömungsablösung. Dadurch ergibt sich ein sprunghafter Abfall des Widerstandsbeiwerts. Dabei ist  $Re_{krit}$  abhängig vom Turbulenzgrad der Gasphase in der freien Anströmung. Bei einem hohen Turbulenzgrad liegt der laminar-turbulente Umschlag bei  $Re_{krit} \approx 1000$ . Im Bereich  $Re_{Tr} > Re_{krit}$  nimmt der Widerstandsbeiwert mit steigender Reynolds-Zahl wieder zu, da sich die Rezirkulationszone im Nachlauf vergrößert [118]. Aus den hier beschriebenen Strömungsphänomenen ergibt sich der typische Verlauf des Widerstandsbeiwerts einer glatten Kugel (Abbildung 3-21 rechts). Im Gegensatz zu Kugeln aus fester Materie können Tropfen bei großer Relativgeschwindigkeit verformt oder desintegriert werden (siehe Kapitel 3.3). Dadurch wird auch  $c_w$  beeinflusst. Dieser Effekt wird im Rahmen dieser Arbeit nicht berücksichtigt.

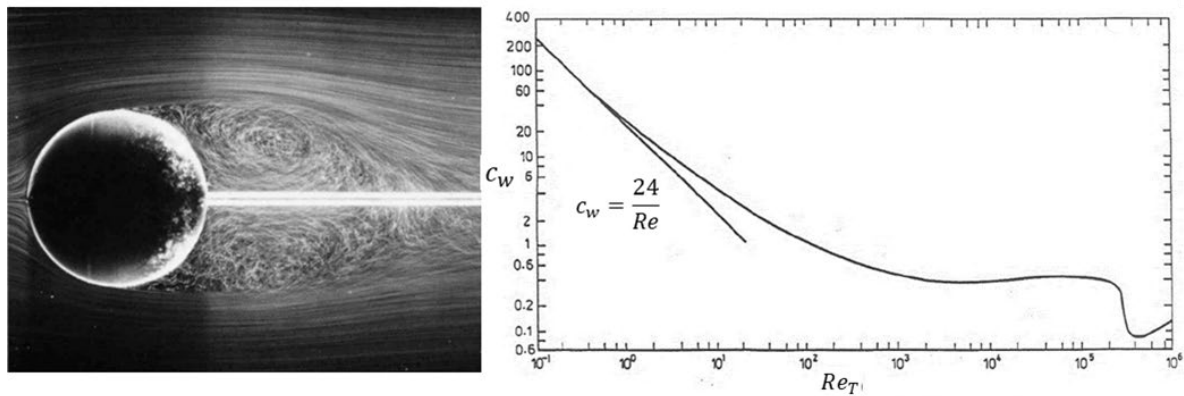


Abbildung 3-21 links: Umströmung einer Kugel bei  $Re = 15000$  mit Wasser. Langzeitbelichtung von kleinen Luftblasen zeigt die Rezirkulationszone des Fluids. [121]. Rechts: Widerstandskoeffizient einer glatten Kugel in Abhängigkeit der Reynolds-Zahl. [122].

Zur Beschreibung des Verlaufs von  $c_w = f(Re_{Tr})$  werden empirische Korrelationen verwendet, die jeweils in einem begrenzten Bereich der Reynolds-Zahl der Tropfen gültig sind. Morsi & Alexander (1972) [123] definieren eine allgemein gültige Korrelation (Gleichung (3-43)) mit abschnittsweise gültigen Koeffizienten, welche in Tabelle 3-5 gezeigt sind. Diese Korrelation wird im Rahmen dieser Arbeit zur Modellierung der Tropfenbeschleunigung verwendet. Diese Korrelation wird ebenfalls von der Simulationssoftware ANSYS Fluent® zur Modellierung der Widerstandskraft runder Partikel verwendet [124]. In Anhang B werden weitere Korrelationen beschrieben und verglichen [125–127].

$$c_w = a_1 + \frac{a_2}{Re_{Tr}} + \frac{a_3}{Re_{Tr}^2} \quad (3-43)$$

Tabelle 3-5 Koeffizienten zur Berechnung des Widerstandskoeffizienten als Funktion der Reynolds-Zahl einer umströmten glatten Kugel mit Gleichung (12-82) nach Alexander & Morsi (1972) [120,123].

$a_1$	$a_2$	$a_3$	Gültigkeitsbereich
0	24	0	$0 < Re_{Tr} < 0,1$
3,690	22,73	0,0903	$0,1 < Re_{Tr} < 1$
1,222	29,1667	-3,8889	$1 < Re_{Tr} < 10$
0,6167	46,50	-116,67	$10 < Re_{Tr} < 100$
0,3644	98,33	-2778	$100 < Re_{Tr} < 1000$
0,357	148,62	-47500	$1000 < Re_{Tr} < 5000$
0,46	-490,546	578700	$5000 < Re_{Tr} < 10000$
0,5111	-1662,5	5416700	$Re_{Tr} > 10000$

### 3.5 Grundlagen der Tropfenaufheizung und Verdunstung

Im Flugstromvergaser wird der kalte Brennstoff mithilfe des Impulsstroms aus dem Vergasungsmedium zerstäubt und in der heißen Reaktoratmosphäre beschleunigt. In der heißen Synthesegasatmosphäre wird Wärme auf den Tropfen übertragen und durch Wärmeleitung innerhalb der Flüssigkeit bis zum Zentrum des Tropfens transportiert. Gleichzeitig verdunstet an der Tropfenoberfläche Flüssigkeit, sodass ein gekoppelter Wärme- und Stofftransport stattfindet. Bei geringer Tropfentemperatur ist die Verdunstungsrate zunächst gering. Die Wärme aus der Umgebung wird am Tropfen hauptsächlich zur Aufheizung der Flüssigkeit aufgewendet. Mit steigender Temperatur nimmt die Verdunstung an der Phasengrenzfläche zu, bis sich ein Gleichgewicht zwischen ankommender Wärme und abgehender Verdampfungsenthalpie an der Tropfenoberfläche einstellt. Die Temperatur bei diesem Gleichgewichtszustand wird als Beharrungstemperatur  $T_{WB}$  (engl.: *wet bulb temperature*) bezeichnet. Bezogen auf die Tropfenoberfläche nimmt der Tropfendurchmesser in dieser Phase mit einer konstanten Verdunstungsrate ab, bis schließlich die gesamte Flüssigkeit verdunstet ist.

Zur mathematischen Beschreibung der Verdunstung und Aufheizung werden im Rahmen dieser Arbeit zwei Ansätze aus der Literatur verwendet. Es kann entweder eine Energiebilanz an der Phasengrenze des Tropfens genutzt werden, wodurch sich das D<sup>2</sup>-Gesetz ergibt (Gleichung (3-53)). Dabei wird die Aufheizung des Tropfens bis zur Verdampfungstemperatur und anschließend die Verdunstung des Tropfens bei Beharrungstemperatur sequenziell berechnet. Alternativ können Aufheizung und Verdunstung auch als parallel ablaufende Prozesse modelliert werden. Dazu wird ein diffusionskinetischer Ansatz verwendet, der zusammen mit der Energiebilanz gelöst wird. Beide Berechnungsansätze werden im Folgenden beschrieben.

In Gleichung (3-44) ist die Energiebilanz um einen Tropfen. Abbildung 3-22 zeigt schematisch einen Tropfen, der von einer laminaren Grenzschicht umgeben ist, sowie die auftretenden Enthalpieströme bei der Verdunstung eines Tropfens. Die zeitliche Änderung der Enthalpie des Tropfens  $H_{Tr}$  (linke Seite Gleichung (3-44)), wird aus der Tropfenmasse  $m_{Tr}$ , der spezifischen Wärmekapazität  $c_{p,Tr}$  und der Änderung Tropfentemperatur  $T_{Tr}$  mit Gleichung (3-45) berechnet. Die Temperatur des Tropfens wird als uniform angenommen. Auf der rechten Seite von Gleichung (3-44) sind die Enthalpieströme zu und von der Tropfenoberfläche, mit dem Wärmestrom  $\dot{Q}_{zu}$  aus der Umgebung und dem abgehenden Enthalpiestrom  $\dot{H}_v$  durch den verdunstenden Massenstrom  $\dot{m}$ . Der Wärmestrom  $\dot{Q}_{zu}$  kann mit einem kinetischen Ansatz für Wärmeübertragung in Gleichung (3-46) berechnet werden. Dabei sind  $\alpha$  der Wärmeübertragungskoeffizient,  $d_{Tr}$  der Tropfendurchmesser und  $T_{g,\infty}$  die Temperatur in der Tropfenumgebung außerhalb der Grenzschicht.  $\alpha$  kann aus der Nusselt-Zahl  $Nu$  mit Gleichung (3-47) berechnet werden. Dabei ist  $\lambda_g$  die Wärmeleitfähigkeit der Gasphase in der Phasengrenzschicht. Die Nusselt-Zahl wird mithilfe einer empirischen Korrelation in Gleichung (3-48) abgeschätzt. Die Prandtl-Zahl ist das Verhältnis aus kinematischer Viskosität und Wärmeleitfähigkeit der Gasphase und kann damit aus Stoffeigenschaften abgeleitet werden. Der Enthalpiestrom des verdunstenden Massenstroms  $\dot{H}_v$  in Gleichung (3-44) kann mit Gleichung (3-49) berechnet werden. Dabei ist  $\dot{m}$  der verdunstende Massenstrom,  $h_v$  die spezifische Verdunstungsenthalpie,  $c_{p,v}$  die spezifische Wärmekapazität des Brennstoffdampfs und die Temperaturdifferenz von Tropfen  $T_{Tr}$  zur Umgebung  $T_{g,\infty}$ .

Die Gleichungen (3-45) - (3-49) können in die Energiebilanz (3-44) eingesetzt werden. Durch Bilanzierung der Wärme- und Stoffströme über die Grenzschicht des Tropfens, ergibt sich der verdunstende Massenstrom  $\dot{m}$  in Gleichung (3-50). Dabei ist  $B_T$  die Wärmetransportzahl, definiert in Gleichung (3-51) [128]. Durch Einsetzen von Gleichung (3-50) und (3-51) in die Massenbilanz um den Tropfen (Gleichung (3-52)), ergibt sich das D<sup>2</sup>-Gesetz (Gleichung (3-53)). Die mathematische Herleitung für Gleichung (3-50) und (3-53) sind in Anhang A.VII zu finden.

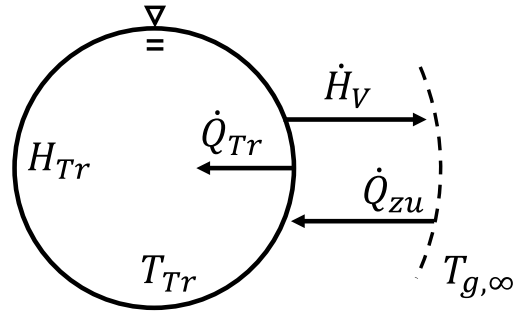


Abbildung 3-22 Tropfen mit umgebender laminarer Grenzschicht sowie auftretende Wärme- und Stoffströme an der Grenzschicht.

Energiebilanz um den Tropfen

$$\frac{dH_{Tr}}{dt} = \dot{Q}_{zu} - \dot{H}_v \quad (3-44)$$

Änderung der Enthalpie im Tropfen

$$\frac{dH_{Tr}}{dt} = m_{Tr} \cdot c_{p,Tr} \frac{dT_{Tr}}{dt} \quad (3-45)$$

Kinetischer Ansatz für Wärmeübertragung

$$\dot{Q}_{zu} = \pi \cdot d_{Tr}^2 \cdot \alpha \cdot (T_{g,\infty} - T_{Tr}) \quad (3-46)$$

Definition Nusselt-Zahl

$$Nu = \alpha \cdot \frac{d_{Tr}}{\lambda_g} \quad (3-47)$$

Empirische Korrelation der Nusselt-Zahl nach Ranz-Marshall [129]

$$Nu = 2 + Re_{Tr}^{1/2} \cdot Pr^{1/3} \quad (3-48)$$

Enthalpiestrom des verdunstenden Massenstroms

$$\dot{H}_v = \dot{m} \cdot (h_v + c_{p,v} \cdot (T_{g,\infty} - T_{Tr})) \quad (3-49)$$

Verdunstender Massenstrom

$$\dot{m} = 2\pi \cdot d_{Tr} \cdot \frac{\lambda_g}{c_{p,v}} \cdot \ln(1 + B_T) \quad (3-50)$$

Wärmetransportzahl

$$B_T \equiv \frac{c_{p,v} \cdot (T_{g,\infty} - T_{Tr})}{h_v + \frac{\dot{Q}_{zu} - \dot{H}_V}{\dot{m}}} \quad (3-51)$$

Massenbilanz um den Tropfen

$$\frac{dm_{Tr}}{dt} = -\dot{m} \quad (3-52)$$

D<sup>2</sup>-Gesetz

$$\frac{dd_{Tr}^2}{dt} = - \frac{8 \cdot \lambda_g \cdot \ln(1 + B_T)}{\rho_{Tr} \cdot c_{p,v}} \quad (3-53)$$

Eine zweite Möglichkeit den abgehenden Massenstrom und damit den zeitlichen Verlauf der Tropfengröße zu bestimmen ist ein diffusionskinetischer Ansatz. Dabei wird angenommen, dass sich in der Gasphase unmittelbar über der Phasengrenze der Dampfdruck der flüssigen Komponente als ein temperaturabhängiger quasistationärer Gleichgewichtszustand zwischen Gas- und Flüssigphase einstellt. Der einseitige Stofftransport der verdunstenden Flüssigkeit kann mit dem kinetischen Ansatz in Gleichung (3-54) beschrieben werden [130]. Dabei ist  $y_1$  der Massenanteil der verdunstenden Komponente 1,  $D_{12}$  ist der binäre Diffusionskoeffizient von Komponente 1 im Umgebungsgas (Komponente 2). Durch Integration von Gleichung (3-54) über die Phasengrenzschicht, die von der Phasengrenze ( $r = r_{Tr}$ ) bis in die Umgebung ( $r = \infty$ ) reicht, erhält man Gleichung (3-55) mit der Stofftransportzahl  $B_M$  definiert in Gleichung (3-56) [131]. Der Einfluss der Umströmung des Tropfens auf die Phasengrenzschichtdicke wird im Stoffübergangskoeffizient  $\beta$  berücksichtigt. Zur Bestimmung von  $\beta$  wird eine Sherwood-Korrelation als Funktion der Reynolds-Zahl und Schmidt-Zahl verwendet. Die Sherwood-Zahl wird in Gleichung (3-57) definiert. Der Stoffübertragungskoeffizient  $\beta$  wird durch Gleichsetzen von Gleichung (3-57) und der Sherwood-Korrelation aus Gleichung (3-58) bestimmt [129]. Die Reynolds-Zahl ist in Gleichung (3-59) definiert. Dabei sind  $(u_g - u_{Tr})$  die Relativgeschwindigkeit zwischen Tropfen und umströmender Gasphase,  $\rho_g$  die Dichte der Gasphase und  $\eta_g$  die dynamische Viskosität der Gasphase.

$$\dot{m} = \pi \cdot d_{Tr}^2 \cdot D_{12} \cdot \rho_G \cdot \left( \frac{1}{1 - y_1} \right) \frac{dy_1}{dr} \quad (3-54)$$

$$\dot{m} = \pi \cdot d_{Tr}^2 \cdot \beta \cdot \rho_G \cdot \ln(1 + B_M) \quad (3-55)$$

$$B_M \equiv \frac{y_{1,Ph} - y_{1,\infty}}{1 - y_{1,Ph}} \quad (3-56)$$

$$Sh = \frac{\beta \cdot d_{Tr}}{D_{12}} \quad (3-57)$$

$$Sh = 2 + 0,6 \cdot \sqrt{Re_{Tr}} \cdot \sqrt[3]{Sc} \quad (3-58)$$



$$Re_{Tr} = \frac{d_{Tr} \cdot (u_g - u_{Tr}) \cdot \rho_G}{\eta_G} \quad (3-59)$$

Durch die Verdunstung wird Komponente 1 von der Phasengrenzfläche weg transportiert. Folglich muss dem Komponentenstrom  $\dot{m}_1$  ein ebenso großer konvektiver Strom entgegen gerichtet werden. Dieser Konvektionsstrom (Stefan-Strom) enthält ebenfalls Komponente 1 und ist der Diffusion entgegen gerichtet. Dadurch wird die Verdunstung begrenzt. Der Stefan-Strom wird in diesem Ansatz nicht berücksichtigt.

In beiden Ansätzen ist ein Wärmeübergang von der umgebenden Gasphase auf den Tropfen enthalten. Dieser Wärmeübergang stellt einen gaseitigen Wärmetransportwiderstand dar. Daneben tritt durch Wärmeleitung in der Flüssigkeit auch ein innerer Transportwiderstand im Tropfen auf. Wenn das Verhältnis von innerem zu äußerem Wärmetransportwiderstand an der Phasengrenze groß ist, bildet sich ein Temperaturgradient in der Flüssigphase des Tropfens aus. Für kleine Tropfen ist dieser Gradient sehr gering, sodass die Flüssigkeitstemperatur im Tropfen näherungsweise konstant ist. Der innere Wärmewiderstand ist in diesem Fall vernachlässigbar klein. Dies kann mithilfe der Biot-Zahl (Gleichung (3-60)) abgeschätzt werden. Die Biot-Zahl ist das Verhältnis der Wärmeübertragung auf den Tropfen und der Wärmeleitfähigkeit innerhalb der Flüssigkeit. Im Rahmen dieser Arbeit wird kein innerer Wärmewiderstand berücksichtigt. Diese Annahme ist nur gültig, wenn für die Tropfen  $Bi \ll 1$  gilt.

$$Bi = \frac{\alpha \cdot d_{Tr}}{\lambda_{Tr}} \quad (3-60)$$

Bei technischen Brennstoffen, wie zum Beispiel Pyrolyseöl, kann die flüssige Phase des Brennstoffs aus mehreren Komponenten bestehen. Im Rahmen dieser Arbeit wird nur die Verdunstung einer flüssigen Komponente betrachtet. Die Verdunstung von Gemischen aus zwei oder mehreren Komponenten ist in [128] und [132] ausführlich beschrieben.

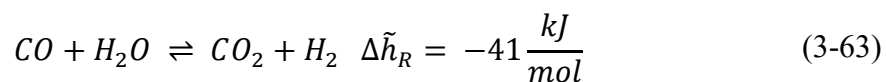
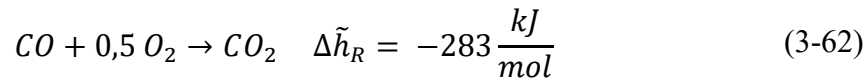
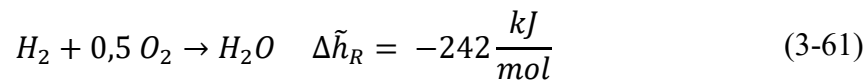
### 3.6 Grundlage relevanter Gasphasenreaktionen im Flugstromvergaser

In den Fluidstrom aus der Brennerdüse des Flugstromvergaser wird Synthesegas in den Zweiphasen-Freistrahle eingemischt (Entrainment). Dadurch entsteht ein reaktionsfähiges Gemisch aus Sauerstoff, Synthesegaskomponenten und Brennstoffdampf. Sauerstoff aus dem Vergasungsmedium kommt mit zwei potenziellen Reaktionspartnern in Kontakt, Brennstoff und Synthesegas. Die Oxidation von Brennstoff findet nur geringfügig statt, da Brennstoff zunächst in Form von kalten Tropfen vorliegt. Vor einer möglichen Oxidation muss der Brennstoff erst aufgeheizt und verdunstet werden. Sauerstoff wird hauptsächlich durch die Oxidation der heißen Synthesegaskomponenten Wasserstoff und Kohlenmonoxid umgesetzt (Gleichung (3-61) - (3-62)). Da Sauerstoff hauptsächlich mit Synthesegas reagiert, müssen die Brennstoffkomponenten weitgehend unter Sauerstoffausschluss umgesetzt werden. Große Moleküle können durch Zersetzungsreaktionen zu kleineren gespalten werden. Als Zwischenprodukt können kurze Kohlenwasserstoffe entstehen, die durch Reformierungsreaktionen mit Wasserdampf zu Synthesegas umgesetzt (Gleichung (3-65)) werden. Feste Bestandteile werden durch heterogene Vergasungsreaktionen

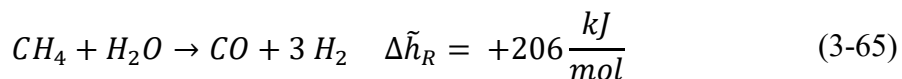
ebenfalls zu Synthesegaskomponenten umgesetzt. Die Hauptkomponenten im Synthesegas stehen im thermischen Gleichgewicht der Wassergas-Shift-Reaktion (Gleichung (3-63)). Im Gleichgewichtszustand sind die Reaktionsgeschwindigkeiten der Hin- und Rückreaktion gleich schnell. Die Gleichgewichtskonstante  $K_{P,WGS}$  (Gleichung (3-64)) der Wassergas-Shift-Reaktion beschreibt den temperaturabhängigen Gleichgewichtszustand.

Das Gasgemisch zündet beim Vergasungsprozess nahe der Düse durch Selbstzündung. Die Zündgrenzen des Gemisches aus Synthesegas und Sauerstoff sind abhängig von der Temperatur. Durch die hohen Temperaturen im Reaktor ist eine Reaktion im gesamten Konzentrationsbereich möglich. Das heiße Synthesegas enthält Radikale, die brennbare Moleküle aufbrechen und die Reaktion starten [133]. Die Reaktionsenthalpie hält die Reaktion kontinuierlich am Laufen. Das bei der Reaktion entstehende Synthesegas wird durch Rezirkulation zurück zur Düse transportiert. Dort wird frisches Eduktgas eingemischt, sodass die Flugstromvergasung als stationärer Prozess ohne externe Zündquelle betrieben werden kann. Zur einmaligen Zündung beim Betriebsstart ist ein Zündbrenner erforderlich.

Die Zeitskalen in denen Oxidationsreaktionen ablaufen sind aufgrund der typisch hohen Temperaturen der Flugstromvergasung sehr schnell im Vergleich zu typischen Zeitskalen der Transportprozesse. Im Rahmen dieser Arbeit wird daher von unendlich schneller Reaktionsgeschwindigkeit ausgegangen („gemischt ist verbrannt“). Somit können Reaktionen ohne Kenntnis der exakten Reaktionsgeschwindigkeit mit einem Gleichgewichtsansatz beschrieben werden. Mit diesem Ansatz können gute Ergebnisse bei der Vorhersage der Konzentration der Hauptspezies und der Temperatur erzielt werden. Zur Vorhersage der Entstehung von Nebenprodukten (z. B. Methan und Ruß) ist diese Annahme ungeeignet [134]. OH\*-Radiale werden im Rahmen dieser Arbeit nicht berücksichtigt.



$$K_{P,WGS}(T) = \frac{\tilde{y}_{CO_2} \cdot \tilde{y}_{H_2}}{\tilde{y}_{CO} \cdot \tilde{y}_{H_2O}} \quad (3-64)$$



## 4 Experimentelle Aufbauten und Messmethoden

### 4.1 Atmosphärische Flugstromvergasung an der REGA

Die Vergasungsversuche wurden am atmosphärischen Flugstromvergaser REGA (Research Entrained Flow Gasifier) am Institut für Technische Chemie des KITs durchgeführt. REGA ist eine Versuchsanlage im Technikumsmaßstab und besteht im Wesentlichen aus vier Anlagenteilen: dem Brennstoffkreislauf, der Versorgungseinheit für Vergasungsmedium, dem Reaktor und der anschließenden Synthesegasnachbehandlung. Ein vereinfachtes Fließschema der Anlage ist in Abbildung 4-1 gezeigt.

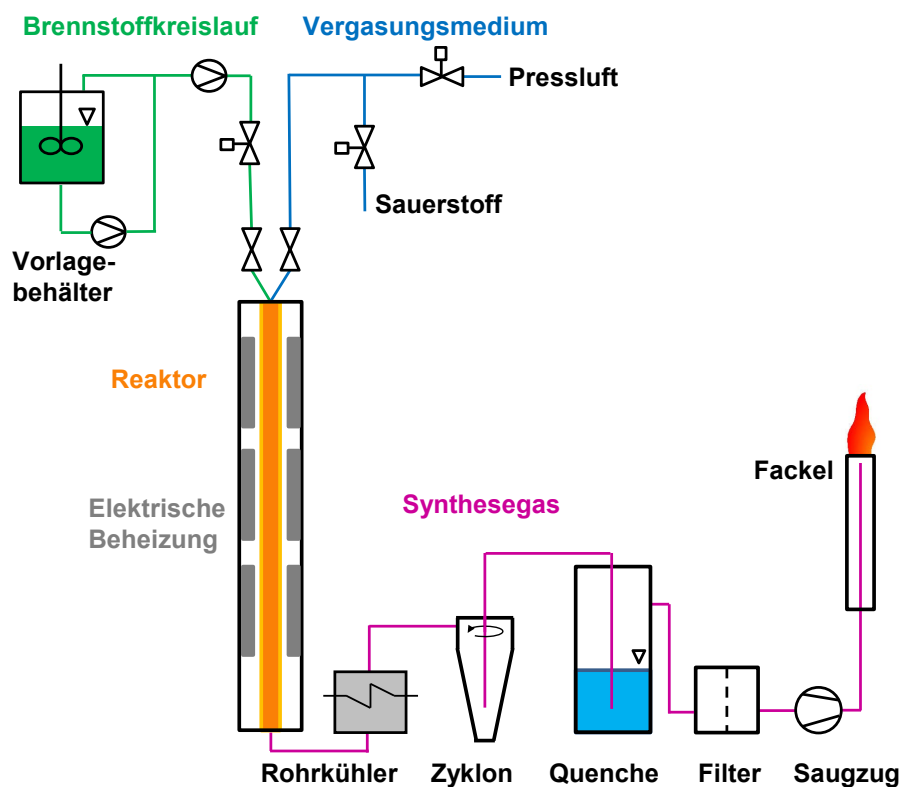


Abbildung 4-1 Vereinfachtes Fließschema des atmosphärischen Flugstromvergasers REGA. Abbildung verändert aus [14].

Das Vergasungsmedium ist mit Sauerstoff angereicherte Luft. Als Brennstoff wird Monoethylenglykol (MEG) verwendet. Brennstoff und Vergasungsmedium werden am Kopf des Reaktors durch eine gekühlte Lanze zur Brennerdüse gefördert. Der Massendurchfluss des Brennstoffs wird mithilfe eines Coriolis-Messgeräts geregelt. Die Menge Vergasungsmedium wird mit einem thermischen Massendurchflussmesser gesteuert. Die Brennerdüse ist eine außenmischende Zweistoffdüse, die Glykol mithilfe des Vergasungsmediums in ein feines Spray zerstäubt und in den Reaktionsraum einbringt (siehe Abbildung 4-2). Das Vergasungsmedium dient somit auch als Zerstäubungsmedium. Die Düse sitzt in einem Brennerstein, der den Reaktionsraum nach oben abschließt (siehe Abbildung 4-3). Die Position des Brennersteins kann durch eine Hebevorrichtung axial verschoben werden. Der Reaktionsraum wird durch ein Reaktionsrohr mit einem Innendurchmesser von 280 mm begrenzt. Die Länge des gesamten Reaktionsraums beträgt

bei höchster Brennerstellung etwa 3000 mm. Der Reaktionsraum umfasst damit circa  $0,2 \text{ m}^3$  und ermöglicht eine mittlere Verweilzeit von 4 bis 5 s ( $30 \text{ m}_N^3/h$  Synthesegas bei  $1200^\circ\text{C}$ ). Das Reaktionsrohr und der Brennerstein bestehen aus hochtemperaturbeständigen Keramikbetonteilen ( $\text{Al}_2\text{O}_3$ ).

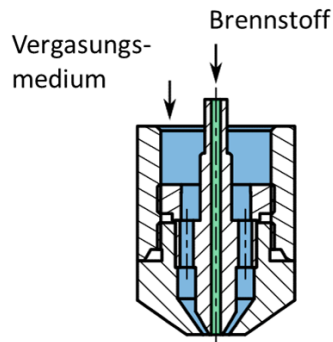


Abbildung 4-2 Brennerdüse im REGA-Vergaser. Abbildung verändert aus [115].

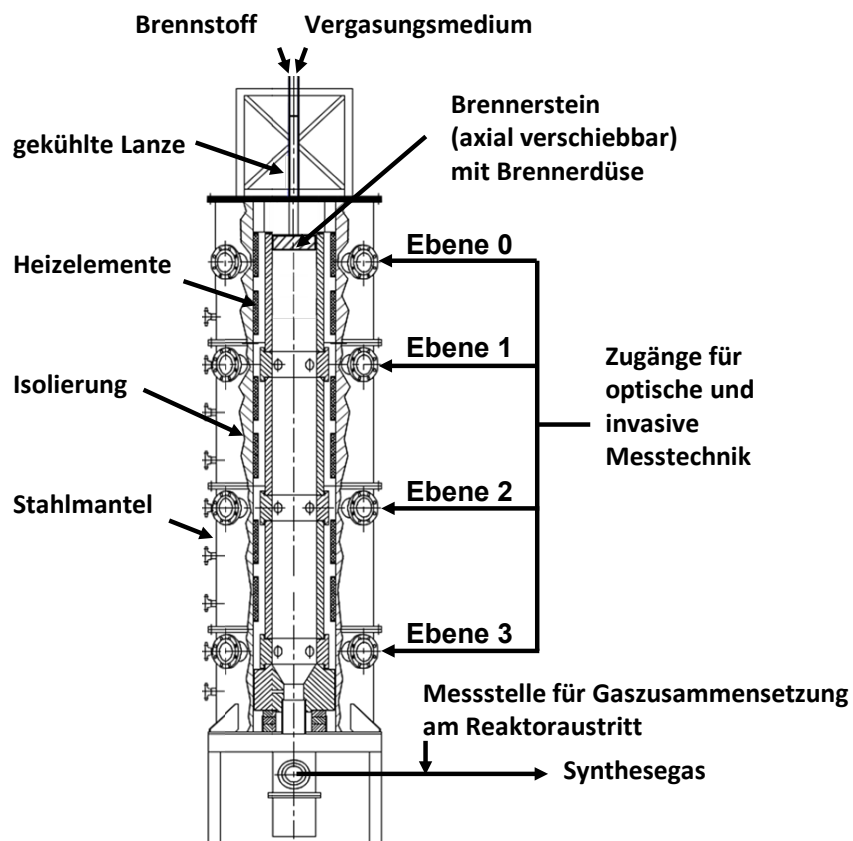


Abbildung 4-3 Schnittzeichnung durch den Reaktor des REGA-Vergasers. Abbildung verändert aus [14].

Der Reaktor wird über drei unabhängig geregelte Heizelemente elektrisch beheizt. Dadurch kann die Wandtemperatur im Reaktionsraum unabhängig vom Prozess eingestellt werden und somit konstante Randbedingungen erzeugt werden. Im Rahmen dieser Arbeit wurde die Reaktorwandtemperatur einheitlich auf 1200 °C geregelt.

Die Gastemperatur im Reaktor wird durch keramikumhüllte Thermoelemente Type S überwacht, die entlang der vertikalen Achse auf sieben axialen Positionen installiert sind. Der Reaktor verfügt auf jeder Messebene über vier Flansche, die Zugang für Messtechnik ermöglichen. Die Flansche sind zugänglich für Temperatur- und Gasentnahmesonden, sodass radiale Profile aufgezeichnet werden können. In Kombination mit der verschiebbaren Brennerdüse, die den axialen Abstand zur Messebene verändert, kann bei beliebigen radialen und axialen Abständen Temperaturen gemessen werden und Gasproben entnommen werden.

Um Wärmeverlust des Reaktors zur Umgebung gering zu halten, ist der Reaktionsraum mit einer etwa 300 mm dicken Isolationsschicht aus gepresster Keramikwolle ausgekleidet. Ein äußerer Stahlmantel sorgt für die mechanische Stabilität und dichtet zur Umgebung ab. Um bei eventuell vorhandenen Undichtigkeiten vor Synthesegasaustritt zu schützen, wird der Reaktor bei leichtem Unterdruck (0,8 -1,5 mbar) betrieben. Dadurch kann es zum Eintreten von Umgebungsluft kommen (Falschluff). Der Unterdruck wird durch einen Saugzug am Ende der Synthesegasstrecke aufrechterhalten und durch eine Differenzdruckmessstelle im Reaktor geregelt.

Das erzeugte Synthesegas verlässt den Reaktor am unteren Ende des Reaktors mit etwa 900 °C. Das Synthesegas wird in zwei aufeinander folgenden Doppelrohr-Wärmeübertragern auf etwa 200 °C abgekühlt. Es folgt ein Heißgaszyklon zur Abscheidung von großen Partikeln aus dem Gasstrom. Vor dem Einlass in die Quenche wird ein feines Spray aus Wasser mit einer Hochdruckpumpe erzeugt und in den Synthesegasstrom injiziert. Dadurch kühlt der Gasstrom weiter ab und feine Partikel, die den Zyklon passieren konnten, werden gebunden und in der Quenche abgeschieden. Beim Verlassen der Quenche ist das Synthesegas noch etwa 35 °C warm und vollständig mit Wasser gesättigt. Durch Wärmeverluste über die Synthesegasleitung wird das Gas weiter abgekühlt. Anfallendes Kondensat wird an verschiedenen Stellen über Kondensatabscheider aus der Synthesegasleitung entfernt. Im Gasstrom verbliebene Partikel werden in einem Filter abgeschieden. Das gereinigte Synthesegas wird einer Fackel zugeführt und sicher verbrannt. Das entstehende Rauchgas wird über Dach in die Umgebung abgegeben.

Die Anlage wird über ein zentrales Prozessleitsystem gesteuert. Messdaten von Fluidströmen, Temperaturen, Drücke und Gaszusammensetzung und andere prozessrelevante Größen werden kontinuierlich aufgezeichnet und gespeichert. Die Anlage kann bei Normalbetrieb automatisiert betrieben werden. Bei Prozessstörungen gibt es eine übergeordnete Steuerung, die die Anlage in einen sicheren Zustand überführt. Die Versuche wurden in Form von mehrwöchigen Kampagnen durchgeführt.

Am atmosphärischen Flugstromvergaser REGA können sowohl reine Flüssigkeiten als auch Suspensionen als Brennstoffe eingesetzt werden. Ziel der Vergasungsversuche ist die Untersuchung des Vergasungsverhaltens von biomassestämmigen Brennstoffen, wie zum Beispiel Pyrolyseöl. Pyrolyseöl ist ein Gemisch aus vielen Einzelstoffen. Die genaue Zusammensetzung variiert je nach Primäreinsatzstoff und Prozessbedingungen während der Pyrolyse. Aus diesem Grund wurde auf Monoethylenglykol (MEG) als definierten Modellbrennstoff zurückgegriffen. MEG enthält wie Pyrolyseöl molekular gebundenen Sauerstoff. Der Heizwert und das C/H/O-Verhältnis von MEG sind ähnlich wie bei

Pyrolyseöl [14,111]. MEG hat eine definierte, bekannte Zusammensetzung und enthält neben C, H und O keine weiteren Elemente. Die Qualität ist reproduzierbar und variiert nur in sehr geringen Grenzen. Als Reinstoff weist MEG einen bekannten Siedepunkt und keinen Siedebereich auf. MEG hat bei Raumtemperatur einen niedrigen Dampfdruck und damit einen hohen Flammpunkt. Damit kann das Brandrisiko bei der Lagerung minimiert werden. MEG ist weder giftig noch im Verdacht Krebs erregend zu sein und ist somit leicht zu handhaben.

Um den Einsatz optischer Messtechnik (z. B. PDA) zu ermöglichen, können die Flansche am Reaktor mit Stickstoff gespülten Schaugläsern ausgestattet werden (siehe Abbildung 4-3). Durch den vertikal verschiebbaren Brennerstein können in beliebigem axialem Abstand zur Düse Messungen durchgeführt werden. Damit ist die gesamte Hauptreaktionszone optisch zugänglich. Im Rahmen dieser Arbeit wurden Tropfengeschwindigkeit mit einem Laser-Doppler Anemometer (LDA) gemessen und Aufnahmen von OH\*-Chemilumineszenz aufgenommen. Des Weiteren wurden in der Arbeitsgruppe Vergasung Phasen-Doppler-Anemometer (PDA) Messungen durchgeführt [135]. Aufgrund der besseren Datenqualität, werden im Rahmen dieser Arbeit die PDA-Messungen der Arbeitsgruppe verwendet anstatt der PDA-Messungen, die im Rahmen dieser Arbeit entstanden. Mit PDA-Messungen können die Geschwindigkeit und die Größe von Einzeltropfen bestimmt werden. Das Funktionsprinzip der PDA-Messtechnik ist detailliert in [115] beschrieben.

Mithilfe von OH\*-Chemilumineszenz-Aufnahmen kann die Flammenstruktur im Flugstromvergaser optisch dargestellt werden. Im Vergaser werden durch die Reaktion, insbesondere bei hoher Temperatur Elektronen von OH\*-Radialen angeregt. Durch Relaxation wird Licht im ultravioletten Bereich emittiert. Diese Strahlung wird als OH\*-Chemilumineszenz bezeichnet [136]. Durch die Messung der Chemilumineszenz werden Zonen mit hoher Reaktionsintensität und hoher Temperatur erfasst, die typisch für die Flammenzone sind. Die Messungen werden mit einem intensivierten Kamerasystem durchgeführt. Das System besteht aus einem Bildverstärker (LaVision IRO) mit einem UV-Objektiv ( $f = 85 \text{ mm}$ ) und einer CMOS-Kamera (Imager M-Lite 2 M, LaVision). Ein Bandpassfilter ( $\lambda = 342 \text{ nm}$ ,  $85 \text{ nm FWHM}$ , LaVision) lässt ausschließlich Licht im Wellenlängenbereich der OH\*-Chemilumineszenz passieren. Nach dem Filter wird das Licht mithilfe des Bildverstärkers intensiviert und durch die CMOS-Kamera aufgezeichnet. Die räumliche Auflösung der Kamera beträgt  $0,2 \text{ mm}$  pro Pixel. Es werden 200 Bilder mit einer Bildrate von  $50 \text{ Hz}$  und einer Belichtungszeit von  $10 \text{ ms}$  aufgenommen. Aus den 200 Einzelaufnahmen wird jeweils ein zeitlich-gemittelttes Bild erzeugt. Der optische Zugang der REGA erlaubt keine vollständige Abbildung der gesamten Flamme in einem Durchgang. Daher wird der Brenner axial bewegt und die Messung an verschiedenen Brennerpositionen durchgeführt. Die Bilder an den unterschiedlichen Brennpositionen werden in einer Nachbearbeitung zusammengesetzt.

Bei der OH\*-Chemilumineszenz-Aufnahme wird der gesamte Flammenbereich durchleuchtet, sodass hohle Strukturen in der Flamme nicht sichtbar sind. Die tatsächliche Flammenstruktur kann mithilfe einer inversen Abel-Transformation rekonstruiert werden [137]. Die inverse Abel-Transformation ist eine mathematische Methode, die in der Bildverarbeitung dazu verwendet wird, rotationssymmetrische Daten in ein zweidimensionales Bild zu wandeln. Die rekonstruierte Flammenstruktur entspricht einem Schnitt durch die Symmetrieachse der Flamme.

## 4.2 Zweiphasen-Freistrahlexperimente unter atmosphärischen Bedingungen an der ATMO

Die Modellierung des Zweiphasen-Freistrahls ist ein zentraler Bestandteil dieser Arbeit. Dabei sind insbesondere der Mischungsbruch und die Geschwindigkeit der Gasphase sowie die radiale Verteilung und der Verlauf der Geschwindigkeit von Tropfen im Zweiphasen-Freistrah von großem Interesse. In Kapitel 3.1.10 wurde gezeigt, dass in der Literatur keine umfassende Beschreibung des Zweiphasen-Freistrahls verfügbar ist. Daher werden im Rahmen dieser Arbeit Messungen im Zweiphasen-Freistrah durchgeführt, die eine empirische Beschreibung des Zweiphasen-Freistrahls auf Grundlage der verfügbaren Theorie ermöglicht. Der atmosphärische Zerstäuberprüfstand ATMO wurde dazu genutzt, um die Messungen im Zweiphasen-Freistrah durchzuführen. Der experimentelle Aufbau für die Untersuchung in der Gasphase des Zweiphasen-Freistrahls ist in Abbildung 4-4 zu sehen. An eine axial verschiebbare Zweistofflanze ist eine außenmischende Zweistoffdüse montiert. Wasser tritt aus der zentralen Öffnung der Zweistoffdüse aus und wird mithilfe des Zerstäubungsmediums, das koaxial aus dem Ringspalt strömt, an der Düse in ein feines Spray zerstäubt. Nach dem Austritt aus der Düse bildet die Zweiphasen-Strömung einen Zweiphasen-Freistrah, der in einen Behälter unterhalb der Düse geleitet wird. Um Rückströmung tropfenbeladener Luft aus dem Behälter zu vermeiden, wird eine Wabenstruktur in den Behälter eingesetzt und eine Absaugung der Gasphasen am Behälter verwendet. Die Tropfen werden im Behälter abgeschieden und können nach einer Versuchsreihe aus dem Behälter abgelassen werden. Der Durchfluss des Zerstäubungsmediums wird mit einem thermischen Massendurchflussmesser geregelt. Der Durchfluss des Wassers wird mit einem Coriolis-Massendurchflussmesser geregelt.

Für die Untersuchung der Gasphase im Zweiphasen-Freistrah muss das Zerstäubungsmedium (Luft) von der Luft, die durch Entrainment in den Strahl eingemischt wurde, zu unterscheiden sein. Dazu wird das Zerstäubungsmedium mit einer geringen Menge Helium als Tracergas angereichert. Helium weist eine sehr hohe thermische Leitfähigkeit auf und kann daher bereits in geringen Mengen mit einem Mikro-Gaschromatograph ( $\mu\text{GC}$ ) detektiert werden. Um den Dichtegradienten zwischen Zerstäubungsmedium und Umgebung gering zu halten, muss die Tracergas-Konzentration im Zerstäubungsmedium gering sein. Andererseits muss die Helium-Konzentration im Zweiphasen-Freistrah auch bei großer Verdünnung durch Umgebungsluft noch zuverlässig bestimmt werden können. In Vorversuchen zeigt sich eine Tracergas-Konzentration des Zerstäubungsmediums von  $y_{\text{He},0} = 0,05 \text{ mol/mol}$  als gut geeignet. Diese Ausgangskonzentration von Helium im Zerstäubungsmedium wurde für alle Versuche verwendet. Die Gasphase im Zweiphasen-Freistrah kann mit einer horizontal verschiebbaren Lanze abgesagt und die Helium-Konzentration in einem  $\mu\text{GC}$  (Agilent 490 Micro Gaschromatograph) analysiert werden. Um den  $\mu\text{GC}$  vor Flüssigkeit zu schützen, werden Tropfen nach der Lanze durch einen Tropfenabscheider aus der Gasströmung entfernt. Um den Einfluss des Totvolumens im Abscheider auf die Konzentrationsmessung zu minimieren, wurde ein Tropfenabscheider mit geringem Volumen ( $\approx 8 \text{ ml}$ ) eingesetzt. Um den Einfluss auf die Strömung stromaufwärts gering zu halten, wurde eine Lanze mit geringem Außendurchmesser ( $\approx 3 \text{ mm}$ ) eingesetzt, deren Öffnung entgegen der Strömungsrichtung zeigt. Eine isokinetische Absaugung ist mit dem vorliegenden Messaufbau nicht möglich.

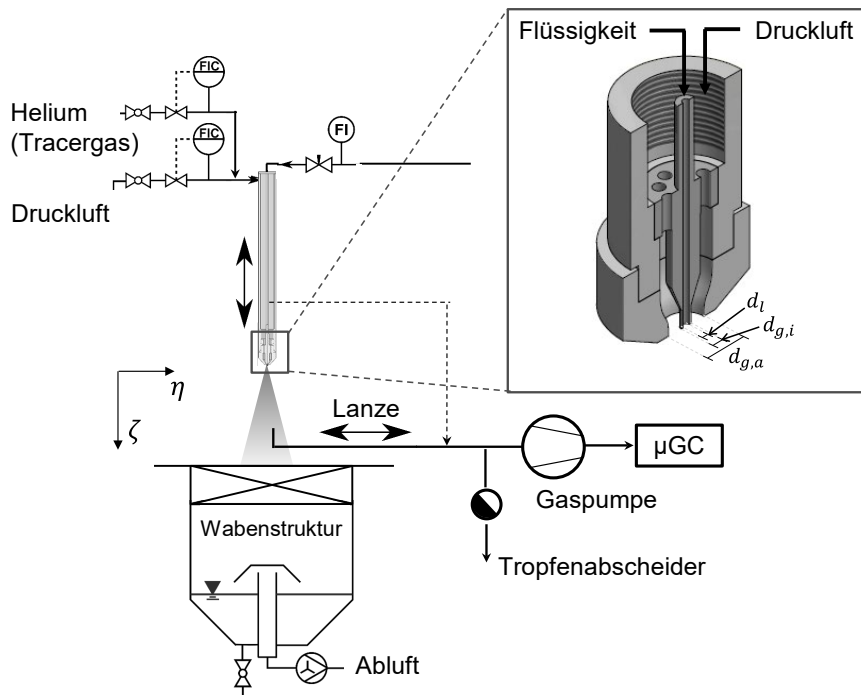


Abbildung 4-4 Schematische Darstellung des atmosphärischen Zerstäuberprüfstands ATMO zur Durchführung von Zerstäubungsversuchen und Tracergas-Messungen in der Gasphase des Zweiphasen-Freistrahls. Abbildung verändert aus [115].

Zerstäubungsmedium (Luft + Helium) aus der Düse wird mit Umgebungsluft, das durch Entrainment in den Zweiphasen-Freistrahle eingemischt wird, verdünnt. Durch Messung der lokalen Helium-Konzentration kann der Massenanteil des Zerstäubungsmediums, der ursprünglich aus der Düse stammt und der Massenanteil von Gas, der durch Entrainment in den Freistrahle eingemischt wurde, bestimmt werden. Der lokale Mischungsbruch von Zerstäubungsmedium in der Gasphase (linke Seite Gleichung (4-1)) wird aus dem Verhältnis der lokalen Konzentration von Helium  $y_{He}(\eta, \zeta)$  und der Ausgangskonzentration  $y_{He,0}$  an der Düse (rechte Seite Gleichung (4-1)) bestimmt.

Mischungsbruch von Zerstäubungsmedium aus der Düse (Index: ZM) und durch Entrainment eingemischte Luft (Index: ENT) in der Gasphase des Zweiphasen-Freistrahls:

$$\frac{m_{ZM}(\zeta, \eta)}{m_{ZM}(\zeta, \eta) + m_{ENT}(\zeta, \eta)} = \frac{y_{He}(\eta, \zeta)}{y_{He,0}} \quad (4-1)$$

Um die radiale Verteilung der Tropfen zu untersuchen, wurde der Versuchsaufbau an der ATMO modifiziert. Abbildung 4-5 zeigt den experimentellen Aufbau an der ATMO zur Bestimmung der lokalen Massenstromdichte der Flüssigphase mit einem mechanischen Patternator. Der Patternator besteht aus einem Hohlkörperprofil mit parallel angeordneten Säulen. Eine Detailansicht mit Abmessungen ist in Abbildung 4-6 dargestellt. Die Säulen des Patternators sind nach oben offen und nach unten verschlossen, sodass eintretende Tropfen darin aufgefangen werden. Für die Messung der Massenstromdichte der Flüssigkeit wird der mechanische Patternator so oberhalb der Wabenstruktur platziert, dass die Mitte des Spraykegels durch den Patternator abgedeckt wird (siehe Abbildung 4-7). Die



Öffnungen des Patternators sind zunächst abgedeckt. Mit Beginn der Messung wird die Abdeckung des Patternators entfernt und Tropfen in den Säulen gesammelt. Die Messung endet, wenn eine Säule zu etwa 90 % mit Flüssigkeit gefüllt ist. Die Versuchszeit  $t$  und die Füllhöhe der einzelnen Säulen  $h(\eta)$  wird gemessen. Die Massenstromdichte der Flüssigkeitstropfen kann aus Gleichung (4-2) bestimmt werden.

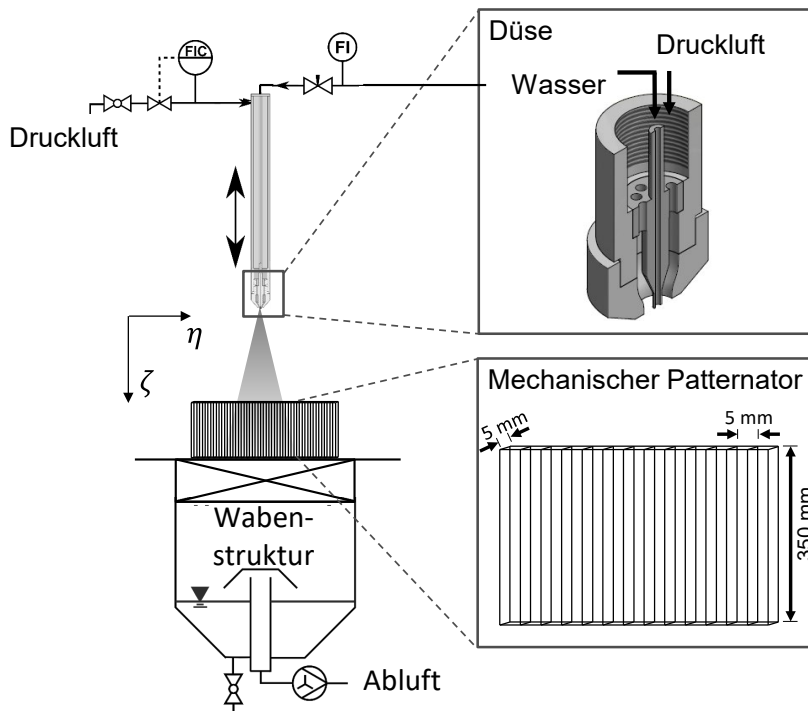


Abbildung 4-5 Schematische Darstellung des atmosphärischen Zerstäuberprüfstands ATMO zur Durchführung von Zerstäubungsversuchen und Patternator-Messungen der Flüssigphase des Zweiphasen-Freistrahls. Abbildung verändert aus [115].

Zur Bestimmung der Gesamtflüssigkeitsmenge, die durch die Messebene strömt, muss die Massenstromdichte mithilfe von Gleichung (4-3) über den Radius der Messung integriert werden. Dabei ist zu beachten, dass die Fläche, die durch einen Messpunkt repräsentiert wird, abhängig von der Messposition ist (siehe Abbildung 4-7). Je weiter außen ( $\eta \uparrow$ ) eine Messposition liegt, desto größer ist die Fläche, die durch den Messpunkt repräsentiert wird. Aus diesem Grund wird in Gleichung (4-3) die Massenstromdichte  $\Phi_{Tr}(\eta)$  mit dem Radius  $\eta$  gewichtet. Die Mitte des Spraykegels ( $\eta = 0$ ) wird mithilfe von Gleichung (4-4) bestimmt. Dabei wird die Mitte des Spraykegels so verschoben, dass auf beiden Seiten ( $\eta < 0$  und  $\eta > 0$ ) der gleiche Massenstrom durch die Messebene strömt.

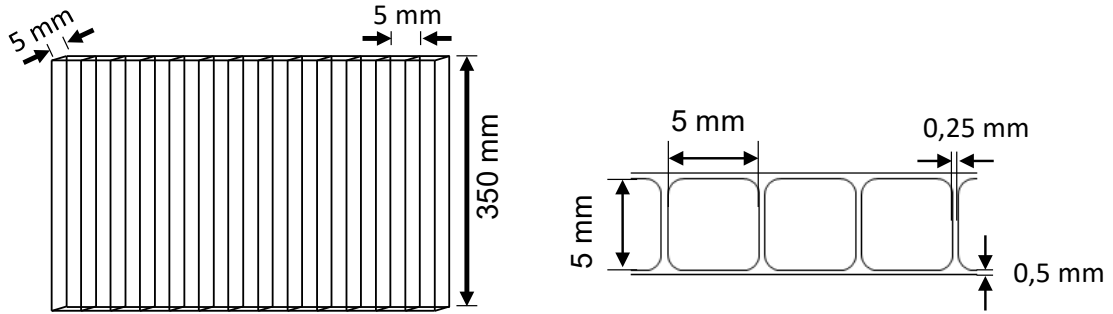


Abbildung 4-6 Mechanischer Patternator (links) und horizontaler Schnitt durch den Patternator (rechts) mit Abmessungen.

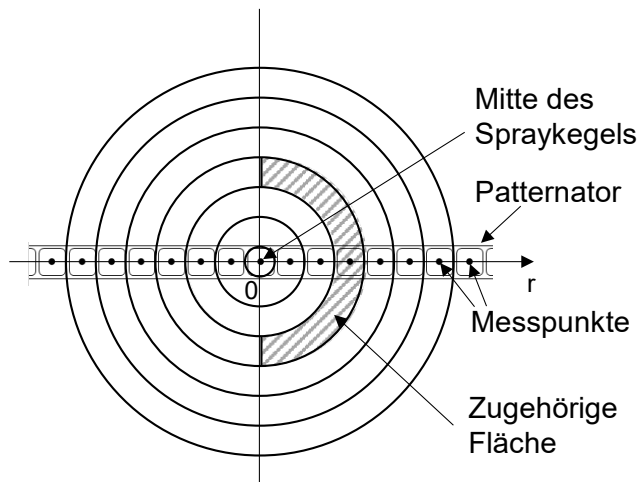


Abbildung 4-7 Schemazeichnung zur Positionierung des Patternators als horizontaler Schnitt durch den Spraykegel.

Massenstromdichte berechnet aus Füllhöhe im Patternator und der Dichte der Flüssigkeit:

$$\Phi_{Tr}(\eta) = \frac{h(\eta) \cdot \rho_{Tr}}{t} \quad (4-2)$$

Bestimmung Gesamtflüssigkeitsmenge an der Messebene:

$$\dot{m}_{Tr} = 2\pi * \int_{-\infty}^{\infty} \Phi_{Tr}(\eta) \cdot \eta \, d\eta \quad (4-3)$$

Bestimmung der Mitte des Spraykegels:

$$\int_{-\infty}^{\eta=0} \Phi_{Tr}(\eta) \cdot \eta \, d\eta = \int_{\eta=0}^{\infty} \Phi_{Tr}(\eta) \cdot \eta \, d\eta \quad (4-4)$$

Die Geschwindigkeit und die Größe von Einzeltropfen im Zweiphasen-Freistrahls wurden mithilfe eines Phasen-Doppler-Anemometers (PDA) bestimmt. Das Funktionsprinzip der Messtechnik ist detailliert in [115] beschrieben. Der Messaufbau an der ATMO ist in

Abbildung 4-8 zeigt. Dabei ist der PDA-Messkopf horizontal verschiebbar, sodass das Messvolumen durch den Spraykegel traversiert werden kann.

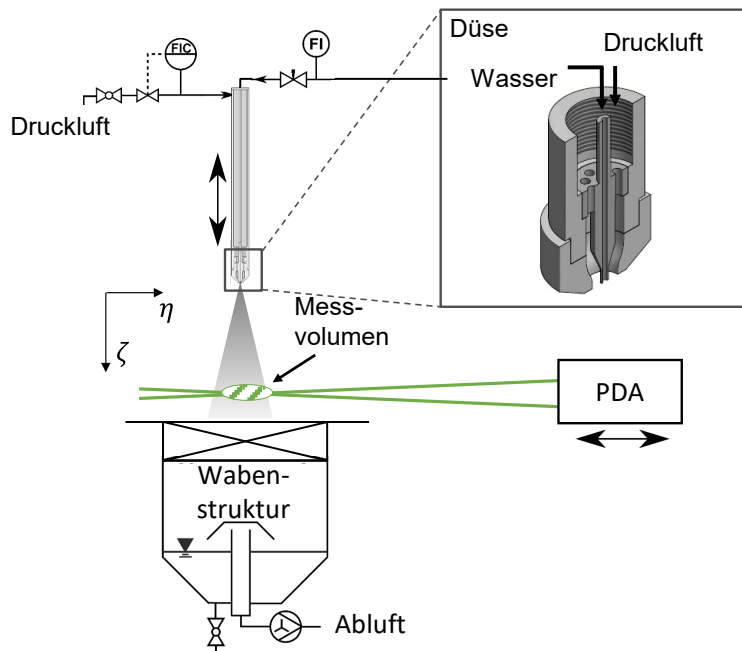


Abbildung 4-8 Schematische Darstellung des atmosphärischen Zerstäuberprüfstands ATMO zur Durchführung von Zerstäubungsversuchen und Messungen der Größe und Geschwindigkeit von Einzeltropfen im Zweiphasen-Freistrah. Abbildung verändert aus [115].

Die Flüssigkeitsbeladung im Zweiphasen-Freistrah kann aus dem Verhältnis der lokalen Massenstromdichte  $\Phi_{Tr}$  (Patternator-Messung) und der mittleren (massengemittelt) Tropfengeschwindigkeit  $\bar{u}_{Tr}$  (PDA-Messung) berechnet werden (siehe Gleichung (4-5)). In Abbildung 4-9 ist der Zusammenhang von Tropfengeschwindigkeit und Massenstromdichte visualisiert. Die Beladung ist dabei die Masse der Tropfen innerhalb des Kontrollvolumens. Bei konstanter Massenstromdichte durch das Kontrollvolumen und Zunahme der mittleren Tropfengeschwindigkeit sinkt entsprechend Gleichung (4-5) beziehungsweise Abbildung 4-9 die Beladung.

Flüssigkeitsbeladung in einer Zweiphasen-Strömung:

$$Y_{Tr}(\eta) = \frac{\Phi_{Tr}(\eta)}{\bar{u}_{Tr}(\eta)} \quad (4-5)$$

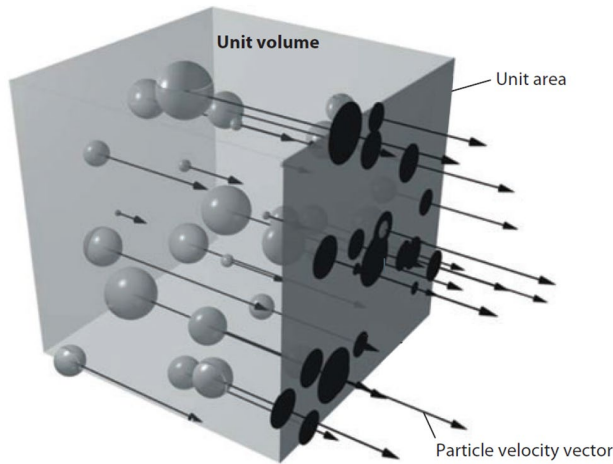


Abbildung 4-9 Visualisierung der Korrelation aus Partikelgeschwindigkeit  $u_{Tr}$ , Flüssigkeitsmassenstromdichte  $\Phi_{Tr}$  und Flüssigkeitsbeladung  $Y_{Tr}$  in einer Zweiphasen-Strömung. Abbildung aus [138].

Wie in diesem Kapitel weiter oben beschrieben, kann die radiale Verteilung der Flüssigkeitsbeladung im Zweiphasen-Freistrah durch Messungen mit dem Patternator und dem PDA bestimmt werden. Die radiale Verteilung des Mischungsbruchs in der Gasphase des Zweiphasen-Freistrah wird durch Konzentrationsmessungen mit dem  $\mu$ GC bestimmt. Um die radiale Verteilung der Gasphase mit der radialen Verteilung der Flüssigphase vergleichen zu können, wird eine lokale Beladung mit Zerstäubungsmedium im Zweiphasen-Freistrah aus dem Mischungsbruch in der Gasphase berechnet.

Die Beladung mit Zerstäubungsmedium ist das Verhältnis der Masse des Zerstäubungsmediums und dem Volumen der Zweiphasen-Strömung. Die lokale Beladung mit Zerstäubungsmedium  $Y_{ZM}(\eta)$  kann durch Division des gemessenen Mischungsbruchs von Zerstäubungsmedium in der Gasphase ( $m_{ZM}/(m_{ZM} + m_{ENT})$ ) mit der Dichte der Gasphase bestimmt werden (Gleichung (4-6)). Die lokale Dichte der Gasphase im Freistrah entspricht in guter Näherung der Dichte in der Umgebung  $\rho_{ENT}$ , da sich die Dichte von Zerstäubungsmedium (Luft + Helium) und Gas aus der Umgebung (Luft) nur geringfügig unterscheiden. Außerdem übersteigt im Freistrah die Menge an Gas, die durch Entrainment in den Freistrah eingemischt wird, die Menge von Zerstäubungsmedium bereits nach geringem axialem Abstand, wodurch sich die Gasdichte im Freistrah der Dichte der Umgebung annähert. In Gleichung (4-6) wird des Weiteren das Volumen der Tropfen gegenüber dem Gasvolumen im Zweiphasen-Freistrah vernachlässigt.

Beladung mit Zerstäubungsmedium (Index Zerstäubungsmedium: ZM, Index Entrainment: ENT):

$$Y_{ZM}(\eta) = \frac{m_{ZM}(\eta)}{m_{ZM}(\eta) + m_{ENT}(\eta)} \cdot \frac{1}{\rho_{ENT}} \quad (4-6)$$

Das lokale Verhältnis der Massen von Zerstäubungsmedium und Tropfen kann durch Division der Beladungen bestimmt werden (siehe Gleichung (4-7)). Diese Größe wird dazu

verwendet, um zu prüfen ob sich Zerstäubungsmedium und Flüssigkeit aus der Düse im Zweiphasen-Freistrahls entmischen. Entspricht das lokale Verhältnis dem Verhältnis, der an der Düse zugeführten Massenströme von Zerstäubungsmedium und Flüssigkeit (=GLR), so findet keine Entmischung der beiden Stoffe statt. Im 2Ph-FJM wird davon ausgegangen, dass keine Entmischung stattfindet (siehe Kapitel 6).

Lokales Verhältnis der Masse des Zerstäubungsmedium und der Tropfen:

$$\frac{m_{ZM}(\eta)}{m_{Tr}(\eta)} = \frac{Y_{ZM}(\eta)}{Y_{Tr}(\eta)} \quad (4-7)$$

## 5 Experimentelle Untersuchung im Zweiphasen-Freistrahls zur Bestimmung und Validierung von Eingangsgrößen für das 2Ph-FJM in Kaltversuchen

In diesem Kapitel werden wichtige Eingangsgrößen für die Simulation des 2Ph-FJM bestimmt und überprüft. Zur Beschreibung der Gasphase im Zweiphasen-Freistrahls wird im Modell ein empirischer Ansatz von Günther [15] für Einphasen-Freistrahls verwendet. Mithilfe des Parameters für Impulsaustausch  $c_i$  wird der Ansatz auf die Gasphase des Zweiphasen-Freistrahls angepasst. Der Ansatz nach Günther beruht auf der Annahme, dass die radiale Verteilung des Mischungsbruchs von Zerstäubungsmedium in der Gasphase einer Gauß-Verteilung entspricht. In Kapitel 5.1 wird Entrainment in der Gasphase des Zweiphasen-Freistrahls untersucht. Der Mischungsbruch von Zerstäubungsmedium wird gemessen und geprüft, ob die radiale Verteilung einer Gauß-Verteilung entspricht. Zur Bestimmung von  $c_i$  für das 2Ph-FJM wird das Freistrahlsmodell von Günther an die Messwerte des Mischungsbruchs im Zweiphasen-Freistrahls gefittet. Eine weitere wichtige Eingangsgröße ist die Tropfengrößenverteilung an der Düse, die in Kapitel 5.2 bestimmt wird. Im 2Ph-FJM wird angenommen, dass sich Zerstäubungsmedium und Tropfen aus der Düse im Zweiphasen-Freistrahls nicht entmischen. Das lokale Massenverhältnis von Zerstäubungsmedium und Tropfen entspricht im Modell an jeder Stelle dem GLR an der Düse. Zur Überprüfung dieser Annahme werden die lokale Beladung des Zweiphasen-Freistrahls mit Zerstäubungsmedium und die lokale Beladung des Zweiphasen-Freistrahls mit Tropfen bestimmt. Das Verhältnis der beiden Beladungen wird in Kapitel 5.4 mit dem GLR an der Düse verglichen. Zur Bestimmung der lokalen Beladungen mit Zerstäubungsmedium wird die lokale massengemittelte Tropfengeschwindigkeit in Kapitel 5.2 bestimmt und die lokale Massenstromdichte der Tropfen in Kapitel 5.3 gemessen.

### 5.1 Untersuchung von Entrainment in der Gasphase und Bestimmung des Impulsaustauschfaktors $c_i$

In diesem Kapitel wird Entrainment im Zweiphasen-Freistrahls für unterschiedliche Düsen und Zerstäubungsregime untersucht. Ziel in diesem Kapitel ist die modelltechnische Beschreibung der Gasphase im Zweiphasen-Freistrahls für das 2Ph-FJM auf Grundlage des Einphasen-Freistrahlsmodells nach Günther [15] (siehe Kapitel 3.1.7). Dazu wird die Gasphase des Zweiphasen-Freistrahls unter atmosphärischen Bedingungen untersucht.

Die Messungen werden am atmosphärischen Zerstäuberprüfstand ATMO durchgeführt. Wasser wird mit Luft unter atmosphärischen Bedingungen zerstäubt. Das Zerstäubungsmedium wird mit Helium als Tracer-Gas angereichert und die Gasphase im Zweiphasen-Freistrahls mit einem  $\mu$ GC-Messungen untersucht. Der Versuchsaufbau und die Messmethode sind in Kapitel 4.2 beschrieben. In einem ersten Schritt wird der Mischungsbruch für Zerstäubungsmedium in der Gasphase des Zweiphasen-Freistrahls mithilfe von Tracergas-Messungen und Gleichung (4-1) bestimmt. Dabei ist  $m_o$  die lokale Masse des Zerstäubungsmedium und  $m_{ENT}$  die lokale Masse von Umgebungsluft, das durch Entrainment eingemischt wurde. Das Verhältnis der beiden Massen bildet den lokalen

Mischungsbruch in der Gasphase des Zweiphasen-Freistrahls, wie bereits in Kapitel 4.2 eingeführt.

Mischungsbruch von Zerstäubungsmedium aus der Düse (Index: ZM) und durch Entrainment eingemischte Luft (Index: ENT) in der Gasphase des Zweiphasen-Freistrahls:

$$\frac{m_{ZM}(\zeta, \eta)}{m_{ZM}(\zeta, \eta) + m_{ENT}(\zeta, \eta)} = \frac{y_{He}(\eta, \zeta)}{y_{He,0}} \quad (4-1)$$

Im Modellansatz nach Günther wird angenommen, dass Radialprofile im Einphasen-Freistrahls einer Gauß-Verteilung entsprechen. Diese Annahme wird im nächsten Schritt für die Gasphase im Zweiphasen-Freistrahls geprüft. Im Anschluss wird der Einfluss der Flüssigkeitsmenge auf das Entrainment im Zweiphasen-Freistrahls untersucht. Als letzter Schritt in diesem Kapitel wird der Parameter für Impulsaustausch  $c_i$  für die drei untersuchten Düsen zur Verwendung im 2Ph-FJM bestimmt. Dazu wird  $c_i$  im Freistrahlsmodell in Gl. (3-24) an die Messwerte in der Gasphase des Zweiphasen-Freistrahls angepasst. Die Inhalte aus diesem Kapitel wurden zu großen Teilen in [139] veröffentlicht. Die Messwerte wurden zusätzlich auf Mendeley Data open-access veröffentlicht [140].

Der Impulsstrom der Gasphase  $\dot{I}_{g,0}$  ist die treibende Kraft im turbulenten Freistrahls. Für vergleichbare Versuchsreihen mit unterschiedlichen Düsen wurde  $\dot{I}_{g,0}$  für alle Versuche konstant gehalten. Damit ergeben sich aus der Düsengeometrie für jede der drei untersuchten Düsen je ein Massenstrom  $\dot{m}_{g,0}$  und eine Geschwindigkeit  $u_{g,0}$  für das Zerstäubungsmedium am Düsenaustritt. Tabelle 5-1 zeigt die Düsengeometrie und die Versuchseinstellungen der Gasphase. Um den Einfluss der Flüssigkeit auf die Gasphase zu untersuchen, wurde der Flüssigkeitsmassenstrom für jede Düse entsprechend einem GLR zwischen 0,5 und 1,5 variiert. Zusätzlich wurden Messungen ohne Flüssigkeit im Einphasen-Freistrahls durchgeführt. Für jede Versuchseinstellung wurden bei 5 axialen Abständen Radialprofile mit je 19 radialen Messpositionen aufgenommen. Tabelle 5-2 zeigt die gesamte Parameterliste der durchgeführten Kaltversuche.

Tabelle 5-1 Düsenabmessungen und Versuchseinstellung der Gasphase in den Kaltversuchen an der ATMO zur Bestimmung des Parameters für Impulsaustausch für die drei eingesetzten Düsen (D1, D2, D3)

Parameter	Symbol	Einheit	D1	D2	D3
Durchmesser Flüssigkeitsöffnung	$d_l$	mm	2,0	2,0	2,0
Innendurchmesser Gasringspalt	$d_{g,i}$	mm	3,0	3,0	3,0
Außendurchmesser Gasringspalt	$d_{g,a}$	mm	7,2	6,6	4,2
Äquivalenter Düsendurchmesser	$d_{äq}$	mm	6,6	5,8	3,0
Massenstrom Gasphase Düsenaustritt	$\dot{m}_{g,0}$	kg / h	10,0	8,9	4,6
Geschwindigkeit Gasphase Düsenaustritt	$u_{g,0}$	m / s	72	80	156
Impulsstrom Gasphase Düsenaustritt	$\dot{I}_{g,0}$	N	0,2	0,2	0,2
Reynolds-Zahl Gasphase Düsenaustritt	$Re_{g,0}$	1000	20,4	19,4	13,1

Tabelle 5-2 Parameterliste der Kaltversuche an der ATMO

Parameter	Symbol						
Düsen	-	D1	D2	D3			
Gas-to-Liquid Ratio	GLR	0,50	0,75	1,00	1,25	1,50	Nur Gas
Axiale Messpositionen	$\zeta$	10	20	30	40	50	
Radiale Messpositionen	$\eta$	0	$\pm 0.025$	$\pm 0.050$	$\pm 0.075$	$\pm 0.100$	$\pm 0.125$
		$\pm 0.15$	$\pm 0.175$	$\pm 0.20$	$\pm 0.30$		

Zur Überprüfung der Messmethode und als Referenzmessung zum Zweiphasen-Freistrahls wurde zunächst Entrainment im Einphasen-Freistrahls ohne Flüssigkeit untersucht. Dazu wurde der Mischungsbruch entlang der Achse des Einphasen-Freistrahls für Düse 1 – 3 gemessen und mit Werten aus der Literatur [15,19,28,37,42,59,63,65] verglichen. Der lokale Mischungsbruch wurde über dem reziproken axialen Abstand  $1/\zeta$  aufgetragen (siehe Abbildung 5-1). Für den virtuellen Strahlursprung wurde für alle Versuchspunkte  $z_0 = 3 \text{ mm}$  angenommen. Damit ergeben sich in guter Näherung Ursprungsgeraden. Die Steigung der Geraden liegt im Bereich von  $\pm 10 \%$  der Werte aus der Literatur. Damit konnte für den Einphasen-Freistrahls gezeigt werden, dass die Messmethode zur Untersuchung von Entrainment im Freistrahls geeignet ist.



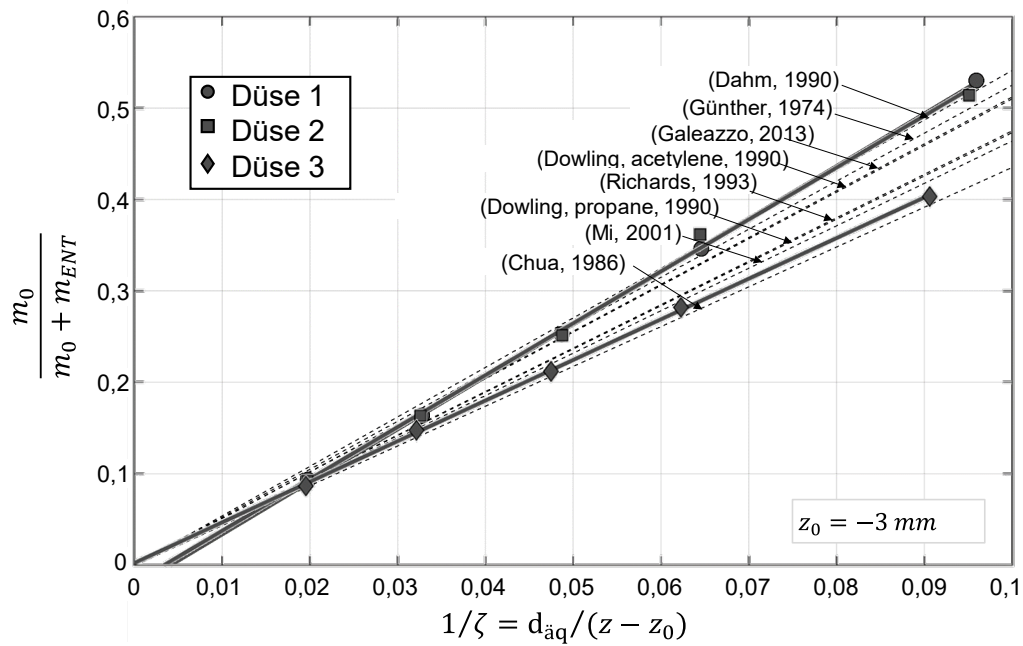


Abbildung 5-1 Anteil der Gasphase aus der Düse entlang der Achse im Einphasen-Freistahl. Vergleich von Messungen an der ATMO und Werten aus der Literatur [15,19,28,37,42,59,63,65]. Abbildung verändert aus [139].

Zur Untersuchung des Zweiphasen-Freistrahls wurden Bilder mit einer Hochgeschwindigkeit-Kamera vom Zweiphasen-Freistahl mit den drei Düsen bei unterschiedlichen GLR aufgenommen (siehe Abbildung 5-2). Die Aufnahmen werden in den folgenden Abschnitten in Kapitel 5 zur Interpretation der Messergebnisse als qualitative Zusatzinformation herangezogen.

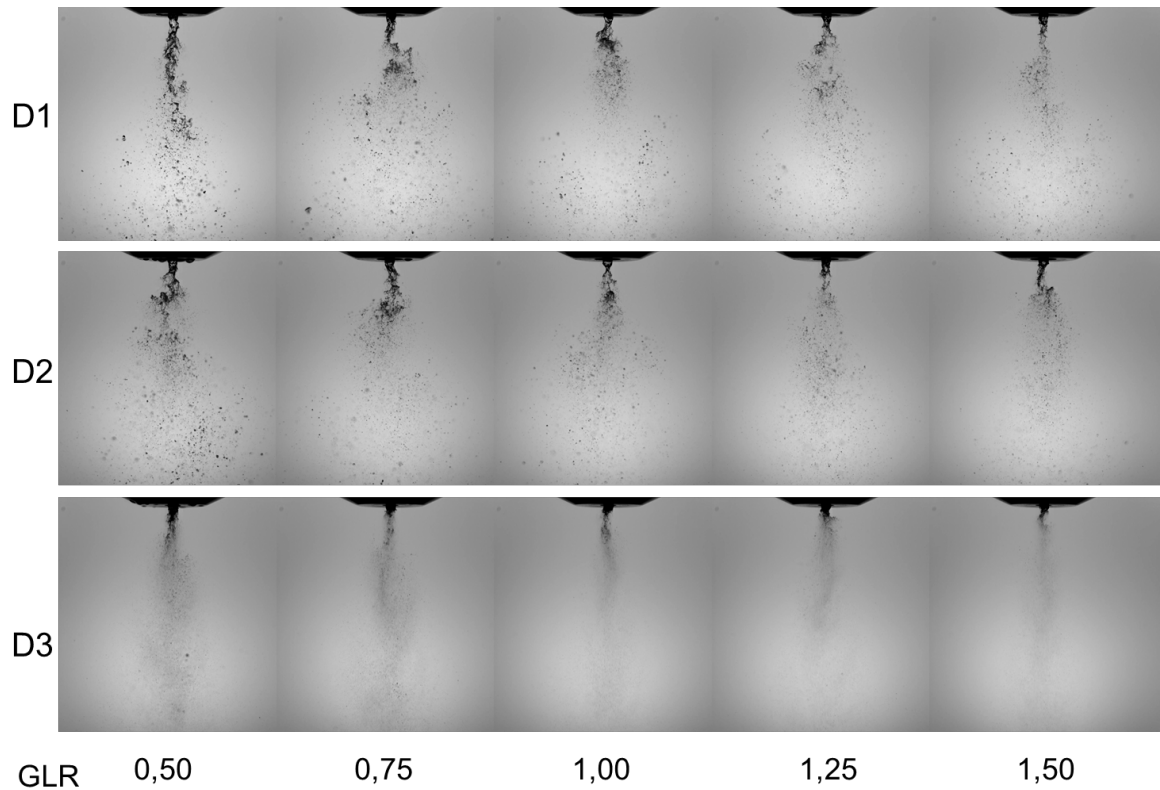


Abbildung 5-2 Zerstäubung von Wasser mit Luft mit Düse 1 – 3 bei  $0,5 \leq \text{GLR} \leq 1,5$  aufgenommen mit einer Hochgeschwindigkeitskamera (Photron Fastcam SA4).

Im Zweiphasen-Freistrahls ist die Gasströmung aus der Düse Zerstäubungsmedium, das durch Entrainment von Gas aus der Umgebung im Freistrahls verdünnt wird. Aus der Literatur ist bekannt, dass im Einphasen-Freistrahls der Mischungsbruch in der Gasphase einer Gauß-Verteilung entspricht (siehe Kapitel 3.1). Dies wurde in einem ersten Schritt für den Zweiphasen-Freistrahls geprüft. Die gemessenen Helium-Konzentrationen  $y_{\text{He}}(\eta, \zeta)$  wurden mit der Konzentration an der Düse  $y_{\text{He},0}$  verglichen. Mithilfe von Gleichung (4-1) wurde der lokale Mischungsbruch von Zerstäubungsmedium in der Gasphase ( $m_{\text{ZM}}/(m_{\text{ZM}} + m_{\text{ENT}})$ ) bestimmt. In Gleichung (5-1) wurde der lokale Mischungsbruch durch die Parameter a, b, c an eine Gauß-Verteilung gefittet. Um die Parameter a, b, c zu bestimmen, wurde das Softwarepaket „Non-linear least squares solver“ von Matlab® verwendet. Die gemessenen Werte und ein entsprechender Gauß-Fit sind beispielhaft für ein Radialprofil in Abbildung 5-3 dargestellt. Messwerte und Gauß-Fits aller Radialprofile sind in Anhang C dargestellt.

Die Koeffizienten in Gleichung (5-1) repräsentieren die Höhe des Scheitelpunkts (a), die radiale Position der Symmetrieachse (b) und die Breite (c) der Gauß-Verteilung. Der Koeffizient b wurde genutzt, um die Messwerte so zu verschieben, dass diese bei  $\eta = 0$  zentriert sind (siehe auch Abbildung 5-3). Für jede Messposition wurde die Abweichung des Messwerts und der gefitteten Gauß-Verteilung berechnet. Für die 1492 Messwerte im Zweiphasen-Freistrahls aus der Parameterliste in Tabelle 5-2 ergibt sich eine Standardabweichung von  $\sigma = 0,0053$ . Damit konnte gezeigt werden, dass die Verteilung des Zerstäubungsmediums in der Gasphase im Zweiphasen-Freistrahls einer Gauß-Verteilung entspricht.

$$\frac{m_{ZM}(\zeta, \eta)}{m_{ZM}(\zeta, \eta) + m_{ENT}(\zeta, \eta)} = a * \exp\left(-\frac{\eta - b}{c}\right)^2 \quad (5-1)$$

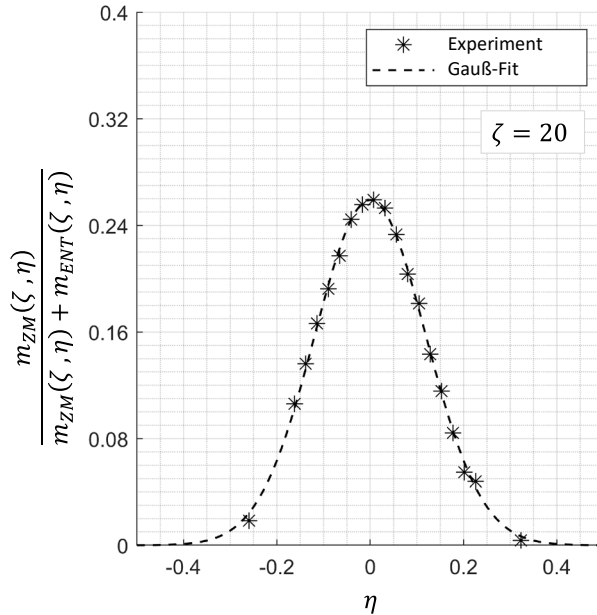


Abbildung 5-3 Gemessenes Radialprofil des Mischungsbruches von Zerstäubungsmedium in der Gasphase des Zweiphasen-Freistrahls für Düse 1 mit  $GLR = 1$  bei einem axialen Abstand von  $\zeta = 20$  und an die Messwerte gefittete Gauß-Verteilung (Gleichung (5-1)). Abbildung verändert aus [139].

In einem nächsten Schritt wurde der Einfluss der Flüssigkeit auf das Entrainment im Zweiphasen-Freistrahls untersucht. Dazu wurden für jede Düse die Messungen des Einphasen-Freistrahls (siehe Abbildung 5-1) mit den Messungen im Zweiphasen-Freistrahls verglichen. Der Vergleich zwischen Einphasen- und Zweiphasen-Freistrahls ist für die drei Düsen in Abbildung 5-4 bis Abbildung 5-6 dargestellt. Abbildung 5-4 (Düse 1) und Abbildung 5-5 (Düse 2) zeigen deutliche Abweichungen zwischen Ein- und Zweiphasen-Freistrahls. In Abbildung 5-6 (Düse 3) ist kein signifikanter Unterschied zwischen Ein- und Zweiphasen-Freistrahls festzustellen. Die Betriebsbedingungen für alle Düsen liegen nach [117] im Zerstäubungsregime Fadenzerfall (engl.: *Fiber-type regime*) (siehe Kapitel 3.3). Die Betriebsbedingungen für Düse 1 und 2 liegen im Unterregime Pulsieren (engl.: *pulsating*) und wurden entsprechend typischer Betriebsbedingungen am REGA-Vergaser gewählt. Die Betriebsbedingungen für Düse 3 wurden so gewählt, dass diese im Unterregime Super-Pulsieren (engl.: *super-pulsating*) liegen. Im Pulsationsregime (Düse 1 und Düse 2) werden Flüssigkeitsligamente aus dem Flüssigkeitsstrahl herausgelöst und in radiale Richtung geschleudert (engl.: *flapping*). Grundlagen dazu sind in Kapitel 3.3 zu finden. Im weiteren Verlauf zerfallen die Ligamente durch Rayleigh-Plateau Instabilität in Tropfen. Die radiale Auslenkung der Ligamente führt zu einem breiten Spraywinkeln (siehe Abbildung 5-7 a) und b)). Es ist naheliegend, dass die Wirbel, die die Ligamente in radiale Richtung auslenken, auch das Entrainment in der Gasphase des Zweiphasen-Freistrahls intensivieren. Für Düse 1 und Düse 2 liegt der gemessene Mischungsbruch von Zerstäubungsmedium in der Gasphase ( $m_{ZM}/(m_{ZM} + m_{ENT})$ ) unterhalb des Mischungsbruchs im Einphasen-Freistrahls (siehe Abbildung 5-4 und Abbildung 5-5). Das bedeutet, dass im Zweiphasen-

Freistrahls durch den radialen Impulstransport der Tropfen mehr Entrainment von Umgebungsluft stattfindet als im Einphasen-Freistrahls. Die Betriebsbedingungen von Düse 3 liegen im Unterregime Super-Pulsieren. In diesem Unterregime wird die Flüssigkeit unmittelbar am Düsenaustritt in feine Tropfen zerstäubt, sodass kein Flapping stattfindet und der Spraywinkel klein ist (siehe Abbildung 5-7 c)). In der Gasphase ist kein signifikanter Unterschied zwischen Einphasen- und Zweiphasen-Freistrahls festzustellen.

Der Einfluss des Flüssigkeitsmassenstroms wurde durch Variation des GLRs zwischen 0,5 und 1,5 untersucht. Für keine der drei Düsen konnte ein signifikanter Einfluss der Flüssigkeitsmenge auf den Mischungsbruch in der Gasphase des Zweiphasen-Freistrahls festgestellt werden. Die Anwesenheit einer dispersen Phase kann je nach Betriebsbedingungen beziehungsweise Zerstäubungsregime einen Einfluss auf die Gasphase bewirken. Die Menge der Flüssigkeit spielt im untersuchten Betriebsbereich eine untergeordnete Rolle.

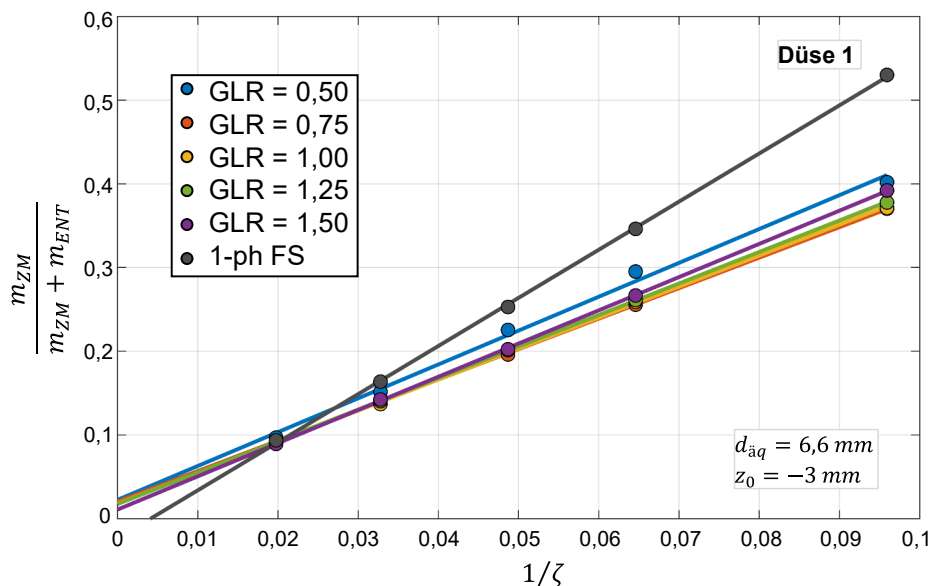


Abbildung 5-4 Vergleich des lokalen Mischungsbruches in der Gasphase entlang der Strahlachse ( $\eta = 0$ ) für den Einphasen-Freistrahls und den Zweiphasen-Freistrahls mit unterschiedlichen GLRs für Düse 1. Diagramm verändert aus [139].

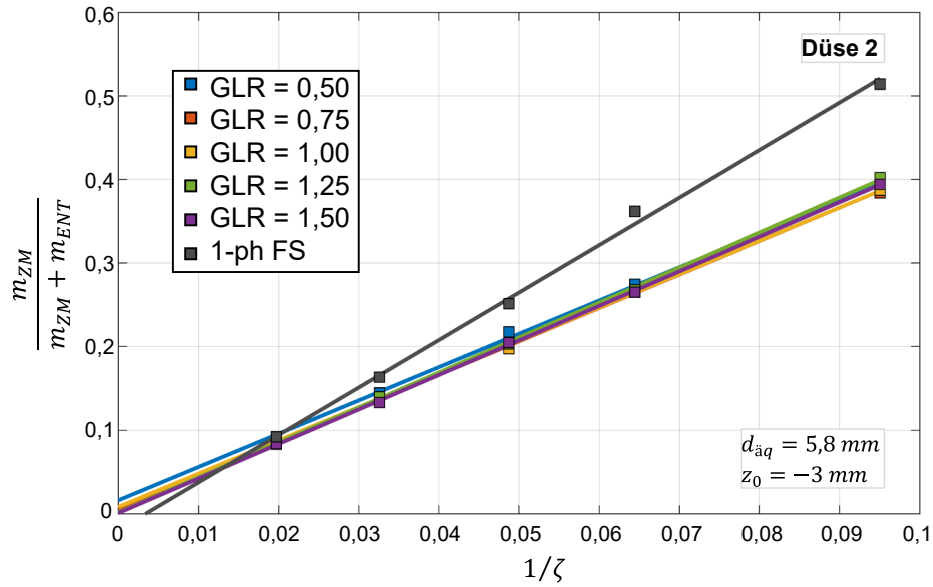


Abbildung 5-5 Vergleich des lokalen Mischungsbruches in der Gasphase entlang der Strahlachse ( $\eta = 0$ ) für den Einphasen-Freistahl und den Zweiphasen-Freistahl mit unterschiedlichen GLRs für Düse 2. Diagramm verändert aus [139].

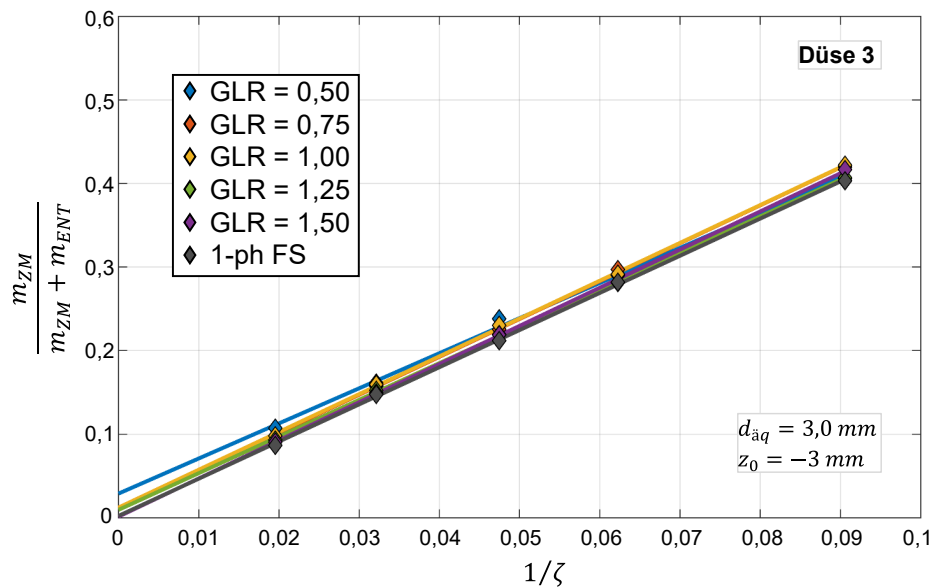


Abbildung 5-6 Vergleich des lokalen Mischungsbruches in der Gasphase entlang der Strahlachse ( $\eta = 0$ ) für den Einphasen-Freistahl und den Zweiphasen-Freistahl mit unterschiedlichen GLRs für Düse 3. Diagramm verändert aus [139].

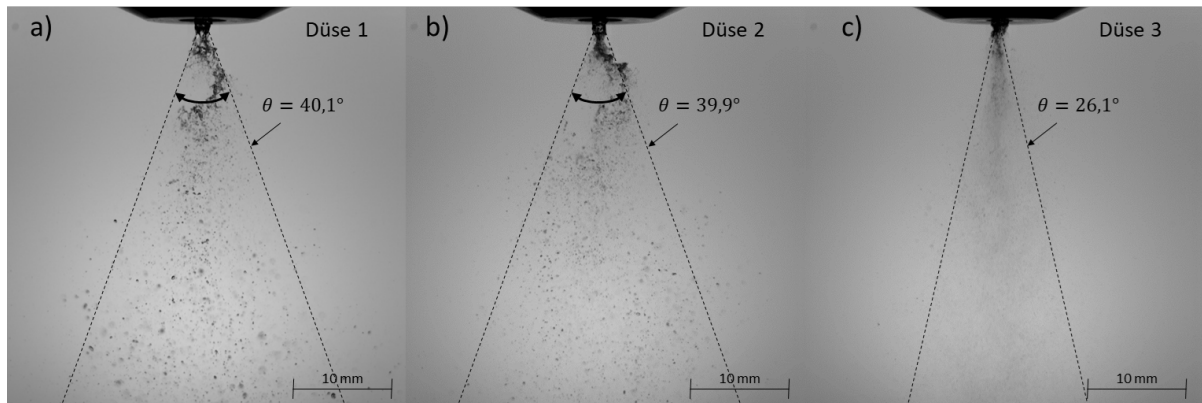


Abbildung 5-7 Hochgeschwindigkeitskameraaufnahmen im Düsennahbereich von Düse 1 und 2 (beide Fadenzerfall: Pulsieren) sowie Düse 3 (Fadenzerfall: Super-Pulsieren).

Der Einphasen-Freistrahls verhält sich selbstähnlich, da Radialprofile bei unterschiedlichen Düsenabständen zur Deckung gebracht werden können (siehe Kapitel 3.1). In einem nächsten Schritt wurde geprüft, ob die Gasphase im Zweiphasen-Freistrahls ebenfalls selbstähnliche Eigenschaften aufweist. Eine hinreichende Bedingung für Selbstähnlichkeit ist in Abbildung 5-4 bis Abbildung 5-6 gezeigt: Die gemessenen Werte entlang der Achse des Zweiphasen-Freistrahls liegen jeweils auf einer Geraden. Zur Überprüfung der Selbstähnlichkeit wurden je Düse alle gemessenen radialen Werte durch Multiplikation mit dem dimensionslosen Düsenabstand  $\zeta$  über dem dimensionslosen radialen Abstand  $\eta$  aufgetragen (siehe Abbildung 5-8). Die Messwerte fallen in guter Näherung auf einem Radialprofil zusammen. Damit ist die Selbstähnlichkeit für den Mischungsbruch in der Gasphase des Zweiphasen-Freistrahls gezeigt.

Die Gasphase des Zweiphasen-Freistrahls wird im Zweiphasen-Freistrahlsmodell (2Ph-FJM) mithilfe des Freistrahlsmodells nach Günther [15] modelliert. Das Modell basiert darauf, dass die Gasphase Selbstähnlichkeit aufweist und durch eine Gauß-Verteilung abgebildet werden kann. Beide Eigenschaften konnten in diesem Kapitel für den Zweiphasen-Freistrahls bereits bestätigt werden. Es zeigte sich jedoch, dass die Anwesenheit von Flüssigkeit Einfluss auf das Entrainment im Zweiphasen-Freistrahls hat. Die Flüssigkeitsmenge hatte im untersuchten Betriebsbereich keinen signifikanten Einfluss.

Das Freistrahlsmodell nach Günther [15] (Gleichung (3-24)) beinhaltet einen Parameter für Impulsaustausch in der Gasphase  $c_i$ . Durch  $c_i$  kann das Modell an den Zweiphasen-Freistrahls angepasst werden. Jeweils alle Messungen im Zweiphasen-Freistrahls für eine Düse (siehe Parameterliste in Tabelle 5-2) wurden dazu genutzt, um  $c_i$  in Gleichung (3-24) zu bestimmen. Dazu wurde ebenfalls das Softwarepaket „Non-linear least squares solver“ von Matlab® verwendet.

Freistrahlmmodell nach Günther [15]

$$\frac{m_{ZM}(\zeta, \eta)}{m_{ZM}(\zeta, \eta) + m_{ENT}(\zeta, \eta)} = \frac{Sc_t}{2 \cdot c_i} \cdot \frac{1}{\zeta} \cdot \exp\left(-\left(\frac{2 \cdot Sc_t - 1}{2 \cdot c_i^2}\right) \cdot \eta^2\right) \quad (3-24)$$

Der Wert von  $c_i$  für Düse 3 ( $c_i = 0,0776$ ) liegt nahe am Literaturwert für Einphasen-Freistrahlen ( $c_i = 0,07$ ), wohingegen sich die Werte für Düse 1 ( $c_i = 0,0856$ ) und Düse 2 ( $c_i = 0,0870$ ) um bis zu 25% vom Literaturwert für den Einphasen-Freistrahls unterscheiden. Dieses Ergebnis ist in Übereinstimmung mit dem Verlauf des Mischungsbruchs in der Gasphase entlang der Achse (siehe Abbildung 5-4 bis Abbildung 5-6). Bei Düse 1 und Düse 2 wird Entrainment in der Gasphase durch den Zerstäubungsprozess intensiviert. Die Werte für den Mischungsbruch in der Gasphase entlang der Achse sind bei gleichem axialem Abstand geringer. Die Radialprofile sind breiter im Vergleich zum Einphasen-Freistrahls.

Abbildung 5-8 zeigt jeweils für eine Düse den Verlauf von Gleichung (3-24) mit den angepassten Werten von  $c_i$  und alle Messungen im Zweiphasen-Freistrahls. Da Gleichung (3-24) selbstähnlich ist, fallen alle Radialprofile auf einer Linie zusammen. Die Standardabweichung zwischen Modell und Messungen beträgt  $\sigma = 0,035$ . Die Standardabweichung ist eine Größenordnung größer als für den Gauß-Fit (siehe weiter oben in diesem Kapitel, Beispiel Abbildung 5-3). Beim Gauß-Fit wurde jeweils ein Radialprofil einer Messebene, für eine Einstellung des GLRs an die Gauß-Verteilung mithilfe von 3 Parametern (a, b, c) gefittet. Für die Bestimmung von  $c_i$  wurde ausschließlich  $c_i$  an alle Messwerte für eine Düse (5 Messebenen mit je 5 GLRs) angepasst. Trotz der höheren Standardabweichung zwischen Freistrahlmmodell und Messungen konnte gezeigt werden, dass die Messungen in der Gasphase des Zweiphasen-Freistrahls mithilfe der angepassten Werte für  $c_i$  in guter Näherung wiedergegeben werden können.

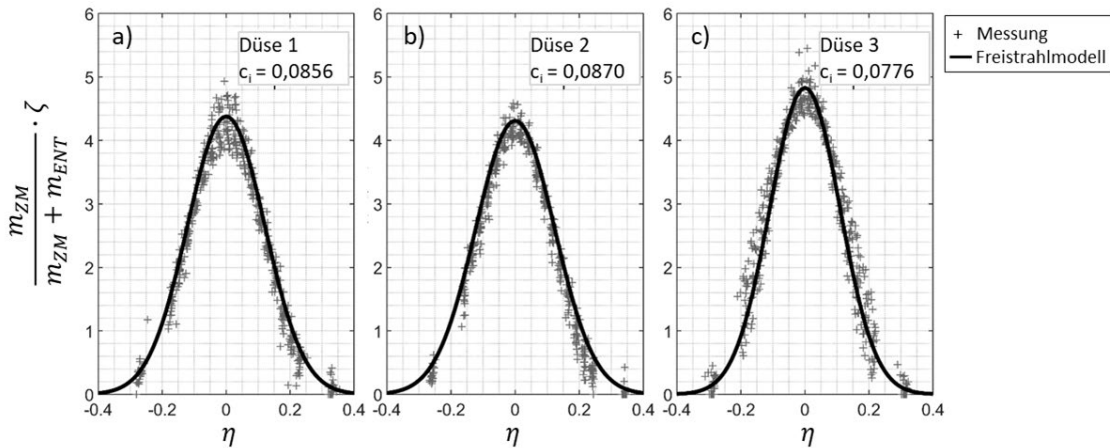


Abbildung 5-8 Normierte Darstellung des lokalen Mischungsbruchs von Zerstäubungsmedium in der Gasphase des Zweiphasen-Freistrahls: Bestimmung aus Tracergas-Messungen und berechnet mit dem Freistrahlmmodells nach [15] mit angepassten Werten des Impulsaustauschfaktors  $c_i$  je Düse.

## 5.2 Messung von Tropfengrößen und -geschwindigkeiten

In diesem Kapitel werden die Tropfengrößen und die Geschwindigkeit der Tropfen für unterschiedliche Düsen und Zerstäubungsregime mithilfe von PDA-Messungen an der ATMO gemessen. Dazu wird Wasser mit Luft zerstäubt. Der Messaufbau ist in Abbildung 4-8 dargestellt. Die Messungen werden dazu genutzt die Tropfengrößenverteilung als wichtige Eingangsgröße für das Zweiphasen-Freistrahlsmodell (2Ph-FJM) (siehe Kapitel 6) zu bestimmen. Außerdem wird aus der Messung der mittleren lokalen Tropfengrößen und Geschwindigkeit die mittlere lokale Tropfengeschwindigkeit des Tropfenkollektivs bestimmt. Diese Größe wird in Kapitel 5.4 dazu genutzt, die Flüssigkeitsbeladung des Zweiphasen-Freistrahls zu ermitteln. Mit der Flüssigkeitsbeladung wird die Annahme im 2Ph-FJM überprüft, dass sich die Flüssigphase und die Gasphase aus der Düse im Zweiphasen-Freistrahls nicht entmischen.

Die PDA-Messungen werden mit den drei Düsen und den Betriebseinstellungen sowie Messparametern aus Tabelle 5-1 und Tabelle 5-2, allerdings jeweils bei nur einem axialen Abstand je Düse durchgeführt (siehe Tabelle 5-3). Aufgrund unterschiedlicher Limitierungen<sup>1 2</sup> war es nicht möglich die Messungen bei einem einheitlichen Abstand von  $z / d_{aq} = 30$  durchzuführen.

Tabelle 5-3 Axialer Düsenabstand für die Messungen mit PDA und mechanischer Patternator (siehe Kapitel 5.3).

Düse	1	2	3
$z / \text{mm}$	198	174	150
$z / d_{aq}$	30	30	50

Die Messung der Tropfengrößen wurde auf der Strahlasche bei einem Düsenabstand von  $z = 200 \text{ mm}$  durchgeführt. An dieser Position ist die Zerstäubung für die relevanten Betriebsbedingungen abgeschlossen.

In Abbildung 5-9 sind die gemessenen Tropfengrößen als Summenverteilung ( $Q_0$ ,  $Q_3$ ) für Düse 1 (siehe Tabelle 5-1) dargestellt. Diese Messung wurde zusätzlich auf der Strahlachse bei  $z = 200 \text{ mm}$  mit den Betriebsbedingungen, wie in Abbildung 5-9 angegeben, durchgeführt, da die Einstellungen in einer Simulation in Kapitel 7 verwendet werden. Aus der gemessenen Summenverteilung werden  $k$  Tropfengrößenfraktionen als repräsentative Tropfengrößen für das 2Ph-FJM verwendet. Zur Bestimmung der Tropfengrößenfraktionen wird die  $Q_3$ -Verteilung in  $k$  gleich große Abschnitte unterteilt, sodass jede Tropfengrößenfraktion den gleichen Anteil des Brennstoffmassenstroms repräsentiert. In Abbildung 5-9 wurde zur grafischen Darstellung für  $k$  beispielhaft 5 gewählt. Die repräsentativen Tropfengrößenfraktionen  $d_{T,0,i}$  werden jeweils in der Mitte eines Abschnitts

---

<sup>1</sup> Der maximale Durchmesser des Spraykegels ist durch die Breite des Patternators limitiert.

<sup>2</sup> Die Messung wird bei  $z \geq 150 \text{ mm}$  durchgeführt, damit die Zerstäubung an der Messebene abgeschlossen ist.



in der  $Q_3$ -Verteilung bestimmt (siehe Gleichung (5-2)). Die Anzahl  $k$  kann im 2Ph-FJM frei gewählt werden und beträgt im Rahmen dieser Arbeit 50.

$$Q_3(d_{T,0,i}) = \frac{2 \cdot i - 1}{2 \cdot k} \quad i \in [1, k] \quad (5-2)$$

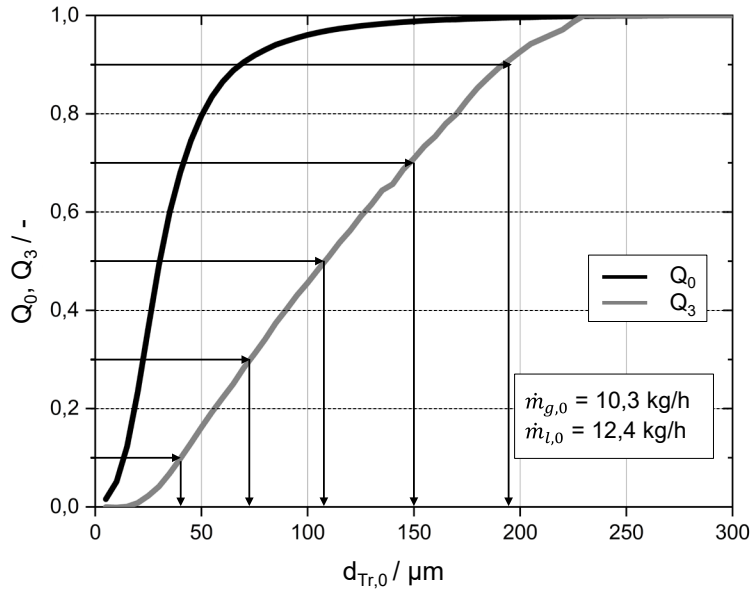


Abbildung 5-9 Summenverteilungen ( $Q_0$ ,  $Q_3$ ) der Tropfengrößen bei der Zerstäubung an der ATMO von Wasser mit Luft aus Düse 1. Messung der Tropfengrößen auf der Strahlachse bei  $z = 200$  mm mit dem Phasen-Doppler-Anemometer (PDA). Beispielhafter Auswahl von  $k = 5$  Tropfengrößenfraktionen als Eingangsgröße in das 2Ph-FJM.

Die mittlere Tropfengeschwindigkeit des Tropfenkollektivs wurde ebenfalls mit Hilfe von PDA-Messungen bestimmt. Dazu wurden an jeder Messposition (siehe Tabelle 5-2) die Größe und die Geschwindigkeit von Einzeltropfen gemessen und daraus die lokale mittlere (massengemittelt) Geschwindigkeit des Tropfenkollektivs  $\bar{u}_{Tr}$  berechnet. In Abbildung 5-10 sind Radialprofile von  $\bar{u}_{Tr}$  für unterschiedliche GLRs für Düse 1-3 dargestellt. Für Düse 1 und 2 unterscheiden sich die Profile mit unterschiedlichem GLR mit jeweils der gleichen Düse nur geringfügig. Für Düse 3 ist kein Einfluss des GLRs auf die mittlere Tropfengeschwindigkeit  $\bar{u}_{Tr}$  erkennbar.

Der Impulsstrom der Zweiphasen-Strömung stammt fast ausschließlich aus dem Zerstäubungsmedium. Der Massenstrom und damit auch der Impulsstrom des Zerstäubungsmediums sind für alle Versuche mit derselben Düse gleich. Die im Freistrahls bewegte Masse (Zerstäubungsmedium + Entrainment + Flüssigkeit) ist bei größerer Flüssigkeitsmenge (GLR ↓) größer. Die lokale mittlere Tropfengeschwindigkeit  $\bar{u}_{Tr}$  ist geringer, da der Impuls aus dem Zerstäubungsmedium auf eine größere Tropfenmasse übertragen wird. Der Einfluss der Flüssigkeitsmenge ist allerdings gering, da die insgesamt bewegte Masse (Zerstäubungsmedium + Entrainment + Flüssigkeit) im Zweiphasen-Freistrahls durch Entrainment dominiert wird. Durch Entrainment wird jeweils nach etwa drei

Düsendurchmessern einmal der Massestrom des Zerstäubungsmediums aus der Düse in den Freistrahls eingemischt. Die Messebene liegt für Düse 1 und Düse 2 bei  $z / d_{aq} = 30$ . Dadurch übersteigt die eingemischte Masse aus Entrainment die Masse an Flüssigkeit um ein Vielfaches. Der Einfluss unterschiedlicher Flüssigkeitsmengen auf  $\bar{u}_{Tr}$  ist daher gering. Für Düse 3 liegt die Messebene bei  $z / d_{aq} = 50$ . Hier ist kein Einfluss der Flüssigkeitsmenge auf  $\bar{u}_{Tr}$  mehr festzustellen.

Ein weiterer Einfluss der Flüssigkeitsmenge (GLR) auf die mittlere lokale Tropfengeschwindigkeit  $\bar{u}_{Tr}$  könnte in den Tropfengrößen liegen. Je größer die Flüssigkeitsmenge (GLR  $\downarrow$ ) ist, desto größere Tropfen entstehen bei der Zerstäubung. Größere Tropfen weisen eine hohe Trägheit auf. Möglicherweise ist die Beschleunigung der großen Tropfen bei  $z / d_{aq} = 30$  noch nicht abgeschlossen und dadurch die massengemittelte Tropfengeschwindigkeit  $\bar{u}_{Tr}$  für kleinere GLR geringer.

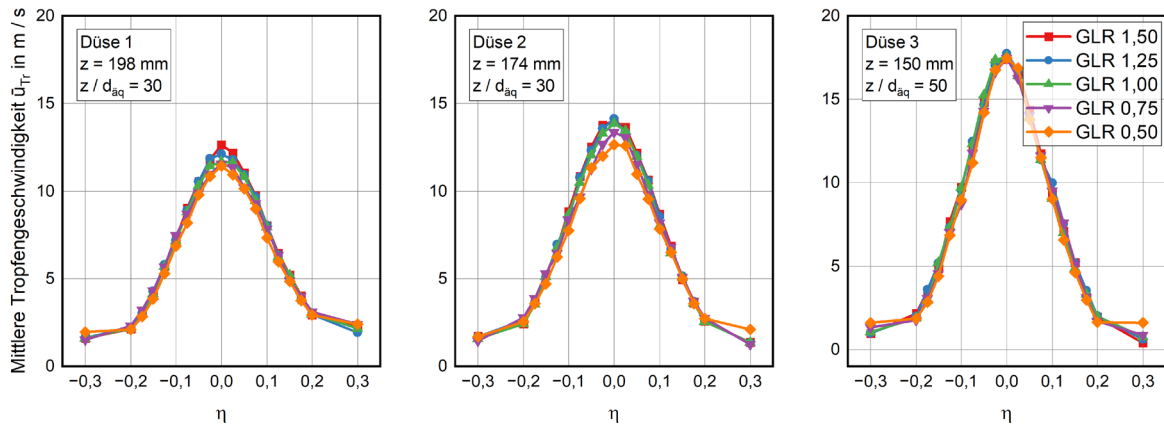


Abbildung 5-10 Mittler Tropfengeschwindigkeit (massengemittelt)  $\bar{u}_{Tr}$  berechnet aus PDA-Messungen von Einzeltropfen.

### 5.3 Messung der Massenstromdichte der dispersen Phase

In diesem Kapitel wird die Massenstromdichte der Flüssigkeit  $\Phi_{Tr}$  mit einem mechanischen Patternator für die drei unterschiedlichen Düsen und Zerstäubungsregime bestimmt. Die Messmethode ist in Kapitel 4.2 beschrieben. Die Messungen wurden je Düse bei einem axialen Abstand durchgeführt (siehe Tabelle 5-3). Die Massenstromdichte wird in Kapitel 5.4 dazu genutzt die Flüssigkeitsbeladung des Zweiphasen-Freistrahls zu ermitteln, um die Annahme im 2Ph-FJM zu überprüfen, dass sich die Flüssigphase und die Gasphase aus der Düse im Zweiphasen-Freistrahls nicht entmischen.

Zur Validierung der Messmethode wird mithilfe von Gleichung (4-3) zunächst die gesamte Flüssigkeitsmenge bestimmt, die durch die Messebene strömt. Dabei wird die radiale Verteilung der Massenstromdichte über die gesamte Messebene integriert. Der integrale Massenstrom ist dabei abhängig von der radialen Verteilung (siehe Gleichung (4-3)). Die aus der Patternator-Messung bestimmte Flüssigkeitsmenge wurde mit der Flüssigkeitsmenge verglichen, die über die Flüssigkeitspumpe an der ATMO zudosiert wurde (siehe Abbildung 5-11). Dabei konnte für alle Düsen gezeigt werden, dass der relative Fehler bei der Messmethode  $< 5 \%$  ist. Die Messmethode ist damit gut geeignet, um die lokale Massenstromdichte der Flüssigkeit im Zweiphasen-Freistrahls zu bestimmen.

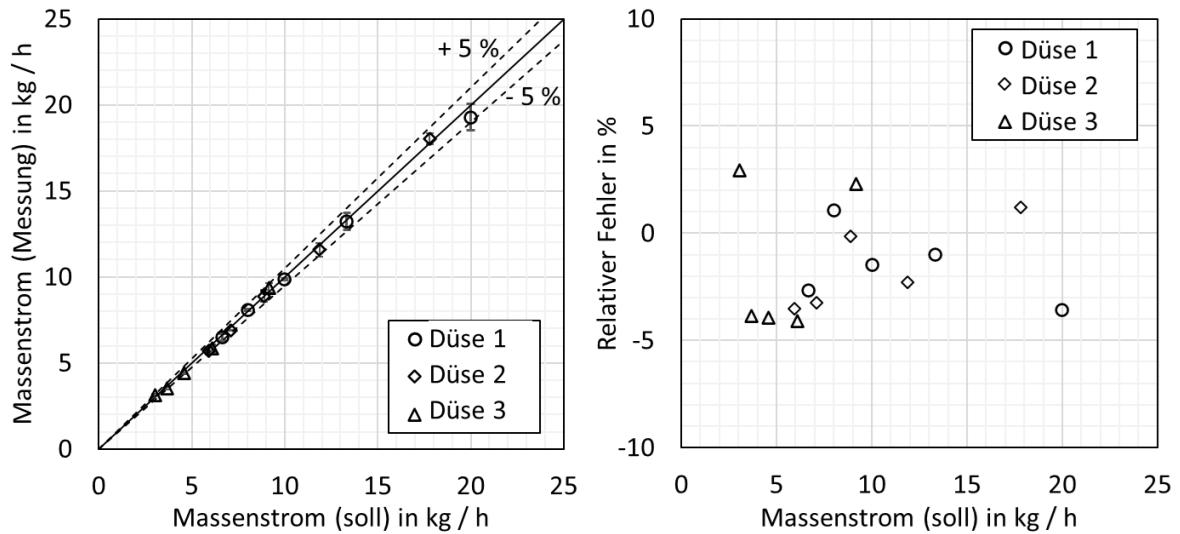


Abbildung 5-11 Links: Paritätsplot der Massenstromdichte aus der Patternator-Messung und dem Sollwert mit einem Fehlerbereich von  $\pm 5\%$  (gestrichelte Line). Rechts: Relativer Fehler zwischen dem Sollwert des Massenflusses und der Patternator-Messung.

Die Messung der lokalen Massenstromdichte  $\Phi_{Tr}$  mit dem Patternator wurde jeweils doppelt durchgeführt und die Ergebnisse gemittelt. Die Messergebnisse sind in Abbildung 5-12 dargestellt. Innerhalb der Messreihe mit einer Düse wird der Massenstrom des Zerstäubungsmediums konstant gehalten. Der Flüssigkeitsmassenstrom nimmt mit sinkendem GLR zu. Für alle Düsen nimmt die gemessene Massenstromdichte an gleicher radialer Position proportional mit  $1/\text{GLR}$  zu. Ausnahme ist das Radialprofil von Düse 1 mit  $\text{GLR} = 0,5$ . Dieses Profil wird im Vergleich zu den anderen vier Radialprofilen mit Düse 1 schmäler und deutlich höher.

Die Profile von Düse 1 und Düse 2 sind breiter (Sprayrand bei  $\eta = 0.35 - 0.45$ ) als die Profile von Düse 3 (Sprayrand bei  $\eta \approx 0.25$ ). Die Ursache liegt in den unterschiedlichen Sprayregimen. Düse 1 und Düse 2 liegen im Unterregime Pulsieren (engl.: *pulsating*) und Düse 3 im Unterregime Super-Pulsieren (engl.: *super-pulsating*). Wie bereits in Kapitel 5.1 beschrieben, werden im Unterregime Pulsieren Flüssigkeitsligamente aus dem Flüssigkeitsstrahl herausgelöst und in radiale Richtung geschleudert (Flapping). Dadurch entsteht ein breiter Spraywinkel (siehe auch Abbildung 5-7).

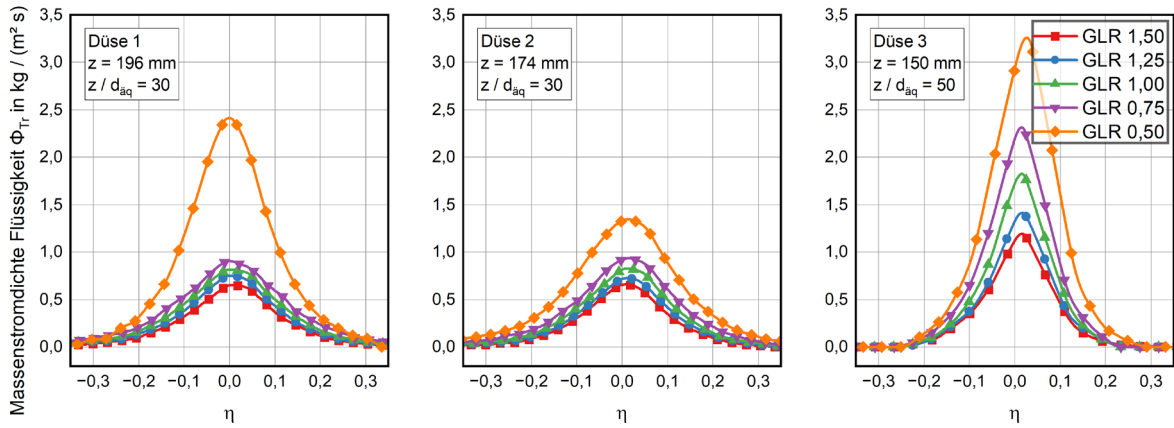


Abbildung 5-12 Lokale Massenstromdichte der Flüssigkeitstropfen  $\Phi_{Tr}$ , gemessen mit einem mechanischen Patternator an der ATMO.

#### 5.4 Untersuchung der Entmischung von Zerstäubungsmedium und Tropfen im Zweiphasen-Freistrah

In Kapitel 5.4 wird die radiale Verteilung von Zerstäubungsmedium mit der radialen Verteilung der Tropfen verglichen. In Kapitel 5.1 wurden Radialprofile des Mischungsbruchs von Zerstäubungsmedium bestimmt. In Kapitel 5.3 wurde die radiale Verteilung der Massenstromdichte der Tropfen gemessen. Um die beiden Größen ins Verhältnis setzen zu können, wird in einem ersten Schritt die lokale Beladung der Zweiphasen-Strömung mit Zerstäubungsmedium und die lokale Beladung mit Tropfen bestimmt. Die Beladung ist das Verhältnis der Masse (Zerstäubungsmediums beziehungsweise Tropfen) und dem Volumen der Zweiphasen-Strömung. Da die Messung der Massenstromdichte nur bei einem axialen Abstand durchgeführt wurde, kann auch das Verhältnis der Beladung von Zerstäubungsmedium und Tropfen bei einem axialen Abstand berechnet werden.

Die lokale Beladung von Zerstäubungsmedium  $Y_{ZM}$  im Zweiphasen-Freistrah wird für eine Messebene je Düse benötigt. Dazu wird in Gleichung (5-3) der lokale Mischungsbruch von Zerstäubungsmedium in der Gasphase durch die Dichte der Gasphase dividiert. Für die Dichte der Gasphase wird die Dichte der Umgebungsluft angenommen (siehe Kapitel 4.2). Die Beladung von Zerstäubungsmedium in der Zweiphasen-Strömung ist in Abbildung 5-13 dargestellt.

Beladung von Zerstäubungsmedium im Zweiphasen-Freistrah:

$$Y_{ZM}(\zeta, \eta) = \frac{m_{ZM}(\zeta, \eta)}{m_{ZM}(\zeta, \eta) + m_{ENT}(\zeta, \eta)} \cdot \rho_{ENT} \quad (5-3)$$

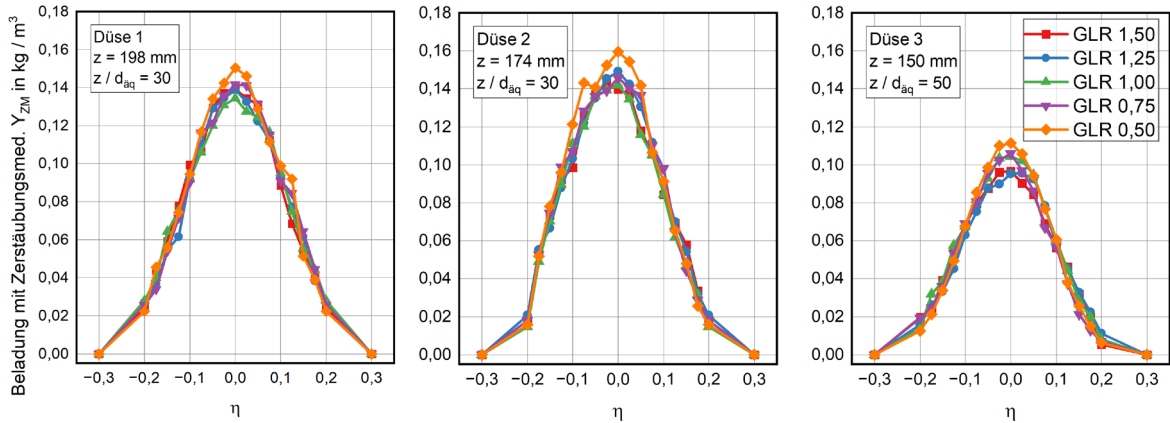


Abbildung 5-13 Beladung des Zweiphasen-Freistrahls mit Zerstäubungsmedium  $Y_0$  berechnet aus dem Massenanteil Zerstäubungsmedium in der Gasphase (Tracergas-Messungen) und der Dichte der Gasphase.

Zur Bestimmung der lokalen Beladung des Zweiphasen-Freistrahls mit Flüssigkeit wird die Massenstromdichte durch die mittlere Tropfengeschwindigkeit dividiert. Da die radialen Messpositionen der PDA-Messungen nicht mit den Messpositionen der Patternator-Messungen übereinstimmen, wird die Patternator-Messung durch lineare Interpolation auf die Messpositionen der PDA-Messungen projiziert. Die Messpositionen der PDA-Messung entsprechen auch den Positionen bei der  $\mu\text{CG}$ -Messung. Die Projektion der Messwerte bei Düse 1 und  $\text{GLR} = 1,5$  ist in Abbildung 5-14 beispielhaft dargestellt.

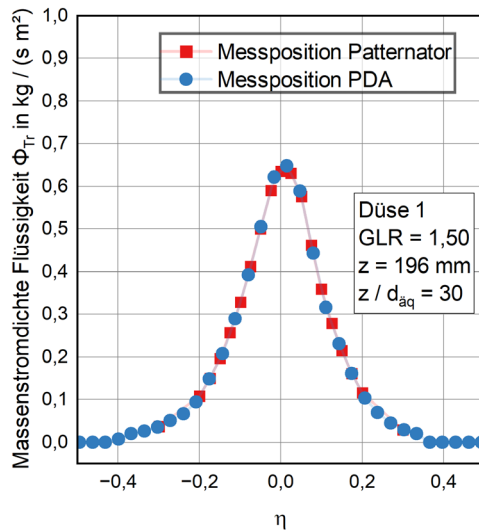


Abbildung 5-14 Auswertung der Massenstromdichte  $\Phi_{Tr}$  gemessen mit dem Patternator an den Messpositionen der PDA-Messung (siehe Tabelle 5-2) durch lineare Interpolation am Beispiel der Messreihe Düse 1  $\text{GLR} 1,5$ .

Aus dem Verhältnis der mittleren (massengemittelten) Tropfengeschwindigkeit  $\bar{u}_{Tr}$  (siehe Abbildung 5-10) und der Massenstromdichte  $\Phi_{Tr}$  (siehe Abbildung 5-12) kann die Flüssigkeitsbeladung  $Y_{Tr}$  im Zweiphasen-Freistrahls mit Gleichung (4-5) bestimmt werden (siehe Kapitel 4.2). Die gemessene Flüssigkeitsbeladung im Zentrum des Freistrahls (-

$0,2 < \eta < 0,2$ ) für Düse 1 und Düse 2 bei allen GLRs ist in guter Näherung konstant. Ausnahme ist hier wieder Düse 1 mit  $\text{GLR} = 0,5$ . Das Profil zeigte bereits bei der Messung der Flüssigkeitsmassenstromdichte in Kapitel 5.3 eine schmalere und höhere Form als die restlichen Profile mit Düse 1. Ein Erklärungsansatz folgt am Ende dieses Kapitels. Bei Düse 3 ist die Flüssigkeitsbeladung auf der Achse deutlich höher als bei  $\eta = 0,2$ , sodass ausgeprägte Profile entstehen. Für Düse 3 gehen am Freistrahlsrand bei  $\eta = 0,3$  sowohl die Werte der Massenstromdichte als auch die Werte der Tropfengeschwindigkeit gegen null, sodass für Gleichung (4-5) eine Singularität entsteht.

Flüssigkeitsbeladung in einer Zweiphasen-Strömung:

$$Y_{Tr}(\eta) = \frac{\Phi_{Tr}(\eta)}{\bar{u}_{Tr}(\eta)} \quad (4-5)$$

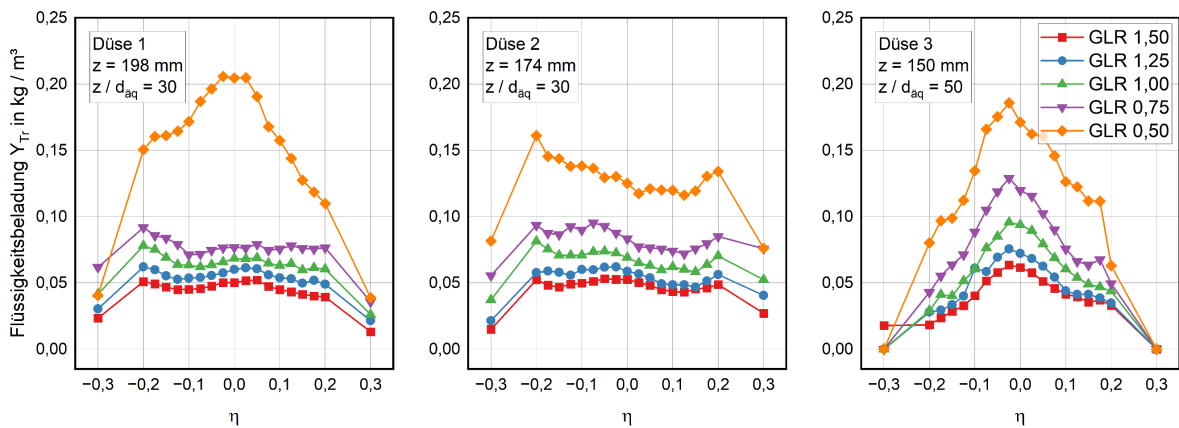


Abbildung 5-15 Flüssigkeitsbeladung  $Y_{Tr}$  im Zweiphasen-Freistrahls berechnet aus der Massenstromdichte  $\Phi_{Tr}$  (Patternator-Messung) und der mittleren Tropfengeschwindigkeit  $\bar{u}_{Tr}$  (PDA-Messung).

Im Folgenden wird das lokale Massenverhältnis von Zerstäubungsmedium und Tropfen mit Gleichung (4-7) aus der Beladung der Zweiphasen-Strömung mit Zerstäubungsmedium und der Beladung mit Tropfen bestimmt. Im 2Ph-FJM wird angenommen, dass sich Zerstäubungsmedium und Flüssigkeitstropfen aus der Düse nicht entmischen (siehe Kapitel 6). Unter dieser Annahme und ohne Berücksichtigung von Verdampfung entspricht das Massenverhältnis von Zerstäubungsmedium und Tropfen an jeder Stelle im Zweiphasen-Freistrahls dem Verhältnis an der Düse (= GLR). Zur Überprüfung der Annahme wird das lokale Massenverhältnis von Zerstäubungsmedium zu Tropfen mit dem GLR an der Düse verglichen. Die Ergebnisse sind in Abbildung 5-16 dargestellt.

Lokales Verhältnis der Masse des Zerstäubungsmedium und der Tropfen:

$$\frac{m_{ZM}(\eta)}{m_{Tr}(\eta)} = \frac{Y_{ZM}(\eta)}{Y_{Tr}(\eta)} \quad (4-7)$$

Für Düse 3 liegt im Zentrum des Freistrahls ( $0 < \eta < 0,15$ ) das lokale Verhältnis leicht über, aber nahe am GLR an der Düse. In diesem Bereich liegen Zerstäubungsmedium und Flüssigkeit annähernd im gleichen Verhältnis vor wie an der Düse. Folglich fand keine Entmischung von Zerstäubungsmedium und Tropfen statt. Bei Düse 3 werden Tropfen (siehe Abbildung 5-12) und Zerstäubungsmedium (siehe Abbildung 5-13) großteils im Bereich  $0 < \eta < 0,15$  transportiert. Damit kann bestätigt werden, dass im untersuchten Betriebsbereich für Düse 3 im Unterregime Super-Pulsieren das lokale Verhältnis von Zerstäubungsmedium und Flüssigkeit in guter Näherung dem GLR an der Düse entspricht. Weiter zum Rand ( $\eta > 0,15$ ) werden nur noch gering Mengen Zerstäubungsmedium und Tropfen transportiert. Hier liegt das lokale Verhältnis unterhalb des GLR, sodass ein Überschuss von Flüssigkeit vorliegt.

Die Betriebsbedingungen der Zerstäubung mit Düse 1 und Düse 2 liegen im Unterregime Pulsieren. Tropfen werden in diesem Zerstäubungsregime durch Flapping in radiale Richtung geschleudert (siehe Kapitel 3.3). Dadurch entsteht ein breiter Spraywinkel (siehe Abbildung 5-7). Im Zentrum des Freistrahls  $0 < \eta < 0,15$  gibt es daher ein erhebliches Defizit an Flüssigkeit im Vergleich zum GLR an der Düse. Das lokale Verhältnis  $m_{ZM}/m_{Tr}$  ist auf der Achse in etwa doppelt so hoch wie das GLR an der Düse. Die Tropfen werden aus dem Zentrum in Richtung Freistrahlsrand geschleudert. Am Freistrahlsrand ( $\eta > 0,15$ ) fällt das lokale Verhältnis  $m_{ZM}/m_{Tr}$  deutlich unter das GLR an der Düse. In Abbildung 5-12 ist zu sehen, dass im Bereich  $0,15 < \eta < 0,30$  noch relevante Mengen Flüssigkeit transportiert werden. Wie in Kapitel 5.1 gezeigt, wird Entrainment in der Gasphase durch die Zerstäubung im Unterregime Pulsieren intensiviert. Dadurch wird das Zerstäubungsmedium im Vergleich zum Einphasen-Freistrahls etwas weiter in radiale Richtung transportiert. Die Bewegung der Tropfen durch das Flapping im Unterregime Pulsieren übertrifft den radialen Transport des Zerstäubungsmediums allerdings bei weitem. Die radiale Verteilung der Tropfen ist deutlich breiter als die Verteilung des Zerstäubungsmediums. Eine Entmischung der beiden Medien findet statt. Damit ist für die Betriebsbedingungen mit Düse 1 und Düse 2 im 2Ph-FJM die Annahme, dass Zerstäubungsmedium und Tropfen im Verhältnis des GLR nur bedingt erfüllt. Die Diskussion zur Auswirkung auf die Prozesse im F2Ph-FJM sind in Kapitel 7.1 zu finden.

Ein Sonderfall ist, wie in Abbildung 5-12 und Abbildung 5-15 auch zu sehen, bei Düse 1 mit  $GLR = 0,5$ . Nach einer qualitativen Auswertung der Hochgeschwindigkeitsbilder (Abbildung 5-2), ist der Impulsstrom aus der Gasphase nicht ausreichend, um die Flüssigkeitstropfen in feine Tropfen zu zerstäuben und durch Flapping in radiale Richtung zu schleudern. Dadurch findet im Vergleich zu allen anderen Messungen mit Düse 1 und Düse 2 deutlich weniger Entmischung statt. Das lokale Verhältnis  $m_{ZM}/m_{Tr}$  liegt im Zentrum des Freistrahls nahe am GLR an der Düse.



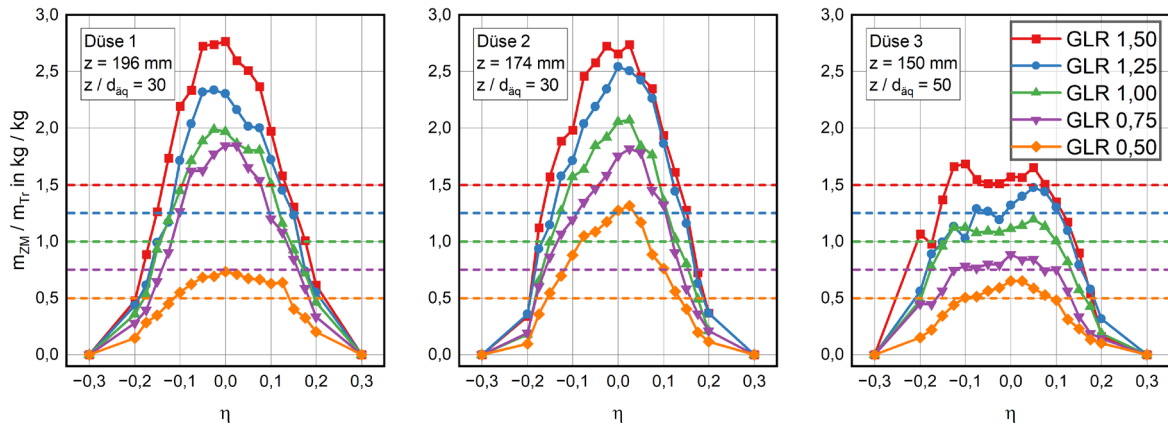


Abbildung 5-16 Lokales Massenverhältnis von Zerstäubungsmedium und Flüssigkeit im Zweiphasen-Freistrahls berechnet aus der Beladung mit Zerstäubungsmedium  $Y_{ZM}$  und Flüssigkeitstropfen  $Y_{Tr}$  sowie GLR an der Düse (gestrichelte Linien). Die Beladungen wurden aus Messungen mit dem mechanischen Patternator,  $\mu GC$  und PDA bestimmt.

Im Folgende werden die Ergebnisse aus diesem Kapitel auf die Flugstromvergasung übertragen. Wenn die Zerstäubung im Flugstromvergaser im Unterregime Pulsieren stattfindet, können sich Brennstoff und Vergasungsmedium entmischen. Wenn die Brennstofftropfen durch Flapping in radiale Richtung geschleudert werden, entsteht im Zentrum der Zweiphasen-Strömung ein lokaler Überschuss von Zerstäubungsmedium. Dadurch steigt die lokale Luftzahl  $\lambda$  und damit auch die lokale Temperatur der Gasphase. Da der Großteil des Vergasungsmediums allerdings mit Synthesegas reagiert, das durch Entrainment in den Freistrahls eingemischt wird, wird der Effekt auf die Temperatur als gering eingeschätzt. Tropfen, die radial durch Flapping aus der heißen Flammenzone geschleudert werden, durchfliegen ein vergleichsweise kaltes Temperaturfeld. Dadurch verdunsten die Tropfen langsamer im Vergleich zu Tropfen, die durch die Flammenzone fliegen. Das Zerstäubungsmedium wird hauptsächlich in das Zentrum ( $0 < \eta < 0,15$ ) der Zweiphasen-Strömung transportiert. Der Brennstoffdampf wird in kühleren Zonen außerhalb der heißen Flammenzone bei geringer Luftzahl freigesetzt. Durch die geringen Temperaturen sind die Reaktionen in der Gasphase (z. B. Zersetzungsreaktion) langsam. Die Reaktionszeit ist möglicherweise nicht ausreichend, um Kohlenwasserstoffe und anderer Zwischenprodukte zu Synthesegas umzusetzen. In Kombination mit der geringen Luftzahl könnte Rußbildung begünstigt werden.



## 6 Das Zweiphasen-Freistrahlmmodell (2Ph-FJM)

### 6.1 Modellierungskonzept

Das Zweiphasen-Freistrahlmmodell (2Ph-FJM) ist ein fluiddynamisches numerisches Modell zur Simulation der Hauptreaktionszone eines atmosphärischen Flugstromvergasers. Das 2Ph-FJM ist Kern der vorliegenden Arbeit. Das Modell und Validierungsmessungen wurden im Rahmen dieser Arbeit in der Fachzeitschrift FUEL veröffentlicht [141]. Das 2Ph-FJM basiert auf Gauß-Profilen, die als empirisches Modell zur Beschreibung eines Einphasen-Freistrahls von Günther entwickelt wurden [15] (siehe Kapitel 3.1.7). Das Simulationsgebiet im 2Ph-FJM ist unterteilt in den Strahlbereich und den Rezirkulationsbereich (siehe Abbildung 6-1).

Für den Rezirkulationsbereich wird eine stagnierende Gasphase ohne Tropfen mit konstanter Temperatur und Zusammensetzung angenommen. Die Temperatur entspricht der Temperatur an der Reaktorwand. Die Gaszusammensetzung im Rezirkulationsbereich entspricht dem chemischen Gleichgewicht bei dieser Temperatur (Wassergas-Shift-Gleichgewicht). Die Zusammensetzung im Rezirkulationsbereich wird berechnet aus den Eingangsmassenströmen von Brennstoff und Vergasungsmedium an der Düse. Der Strahlbereich ist in Kontrollvolumina unterteilt, bestehend aus Winkelsegmenten, die in axiale Richtung in äquidistante Abschnitte unterteilt sind. Damit ergibt sich ein Kegelkoordinatensystem mit der axialen Koordinate  $\zeta$  (siehe Gleichung (3-8)) und einer Winkelkoordinate  $\eta$  (siehe Gleichung (3-10)).

Die axiale und radiale Position ( $\zeta, \eta$ ) im Freistrahlm sind dimensionslose Größen. Zur Bestimmung von  $\eta$  wird der (dimensionsbehaftete) radiale Abstand  $r$  mit dem (dimensionsbehafteten) axialen Abstand  $z$ , reduziert um den virtuellen Strahlursprung  $z_0$ , normiert (Gleichung (3-10)). Zur Bestimmung von  $\zeta$  wird der axiale Abstand  $z$ , reduziert um den virtuellen Strahlursprung  $z_0$  mit dem äquivalenten Düsendurchmesser  $d_{\text{äq}}$  normiert (Gleichung (3-8)). Der äquivalente Düsendurchmesser ist in Gleichung (3-14) mit dem Impulsstrom  $\dot{I}_{g,0}$  (Gleichung (6-1)) und dem Massenstrom  $\dot{m}_{g,0}$  des Gasstroms an der Düse sowie der Dichte des Gases in der Umgebung des Freistrahls  $\rho_{ENT}$  berechnet (siehe Kapitel 3.1). Es wird Rotationssymmetrie angenommen. Höhe und Breite der Kontrollvolumina sowie Größe des gesamten Simulationsbereichs sind im Modell frei wählbar. Der Strahlbereich muss so breit gewählt werden, dass der gesamte Freistrahlm abgebildet wird, sodass keine Unstetigkeit beim Übergang zwischen Strahl- und Rezirkulationsbereich entsteht. In der vorliegenden Arbeit wird der Strahlbereich mit  $6,4 \cdot 10^5$  Kontrollvolumina berechnet.

Radiale Position:

$$\eta = \frac{r}{z - z_0} \quad (3-10)$$

Axiale Position:

$$\zeta = \frac{z - z_0}{d_{\text{äq}}} \quad (3-8)$$

Äquivalenter Düsendurchmesser

$$d_{\ddot{a}q} = \frac{2 \cdot \dot{m}_{g,0}}{\sqrt{\dot{I}_{g,0} \cdot \pi \cdot \rho_{ENT}}} \quad (3-14)$$

Impulsstrom der Gasphase

$$\dot{I}_{g,0} = \dot{m}_{g,0} \cdot u_{g,0} \quad (6-1)$$

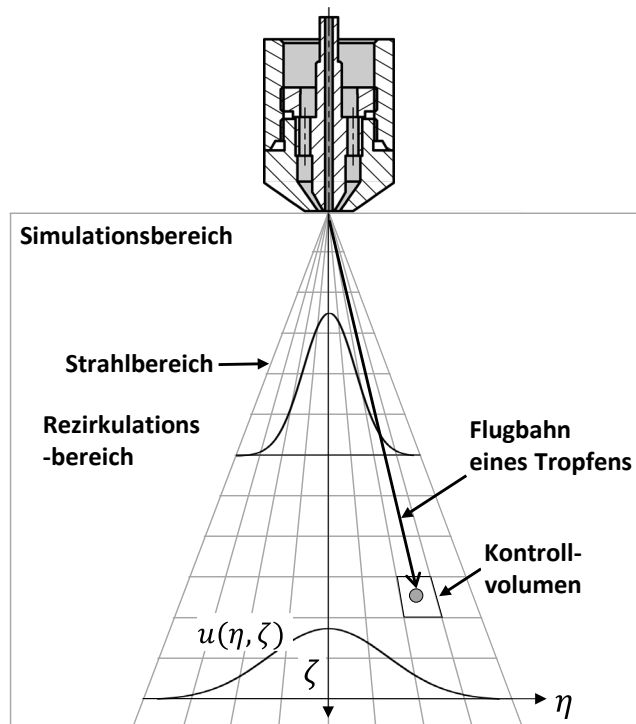


Abbildung 6-1 Simulationsbereich im 2Ph-FJM und Struktur der Kontrollvolumina mit einer repräsentativen Tropfenflugbahn.

In Abbildung 6-2 ist der Berechnungsalgorithmus dargestellt, der in jedem Kontrollvolumen durchlaufen wird. Die Blöcke mit abgerundeten Ecken und weißem Hintergrund enthalten die erforderlichen Eingangsdaten. In Blöcken mit scharfen Ecken sind Berechnungsschritte enthalten. In Blöcken mit abgerundeten Ecken und grauem Hintergrund sind (Zwischen-) Ergebnisse aus den Berechnungen dargestellt. Der Algorithmus im 2Ph-FJM besteht aus vier Bausteinen (A, B, C, D). Die Bausteine A und B werden zu Beginn je einmal durchlaufen. Die Bausteine C und D werden iterativ mehrfach durchlaufen. Im Folgenden werden alle Bausteine detailliert beschrieben.

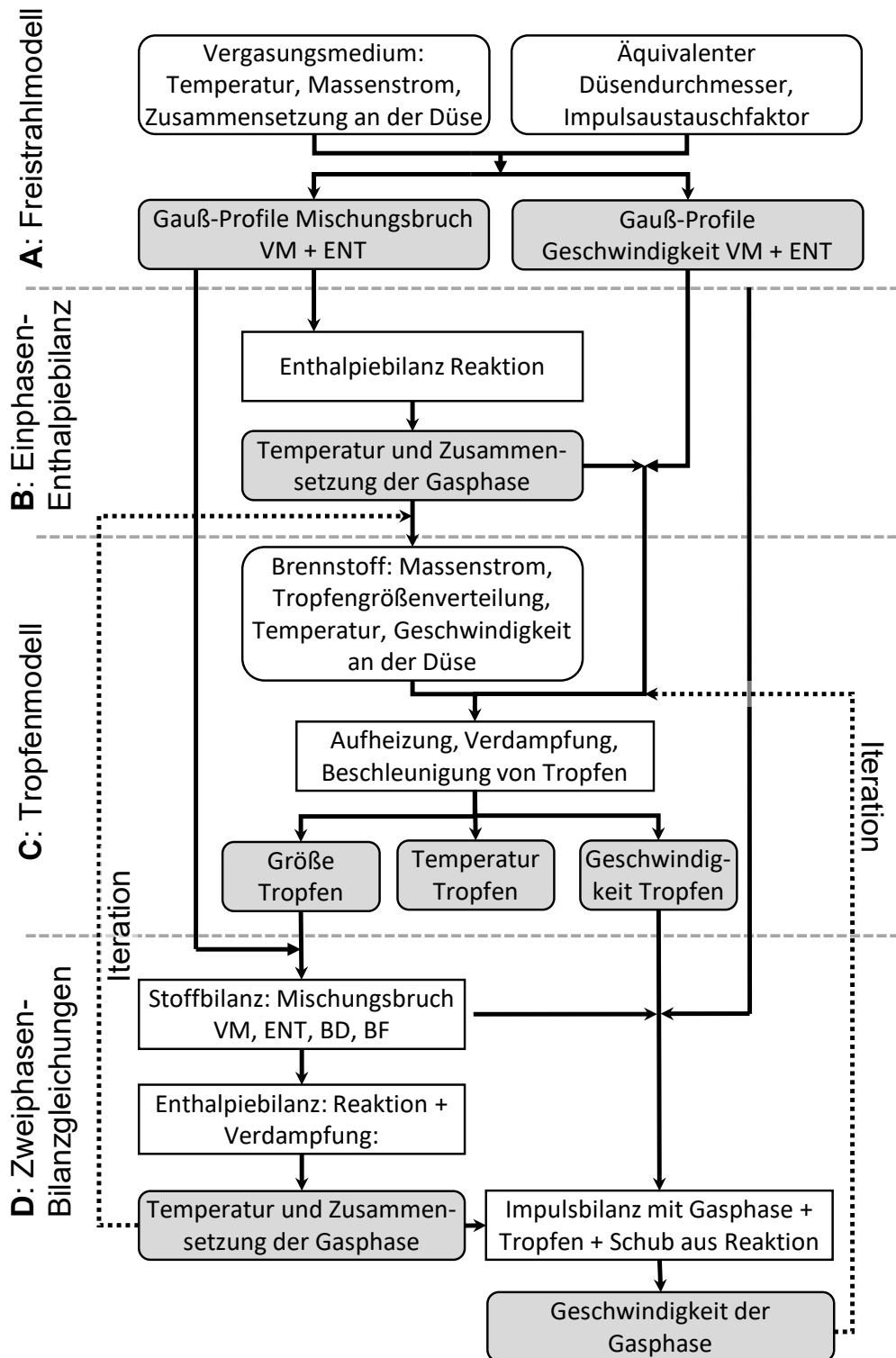


Abbildung 6-2 Berechnungsalgorithmus im 2Ph-FJM.

## 6.2 Baustein A: Freistrahlmmodell

Im Baustein A (siehe Abbildung 6-2) wird die lokale Gasgeschwindigkeit und der lokale Mischungsbruch für die Gasphase eines Zweiphasen-Freistrahls berechnet. Der Einfluss der Brennstoffmasse und mögliche Gasphasenreaktionen werden in diesem Baustein noch nicht berücksichtigt. Die Geschwindigkeit und der Mischungsbruch der Gasphase im Zweiphasen-Freistrahlm werden durch Gauß-Profile (Gleichung (6-2) - (6-3)) beschrieben, die auf dem empirischen Freistrahlmmodell von Günther [15] zur Beschreibung des Einphasen-Freistrahls (siehe Gleichung (3-22) - (3-24) in Kapitel 3.1.7) basieren. Mit dem Impulsaustauschfaktor  $c_i$  in Gleichung (6-2) und (6-3), können die Gauß-Profile an die Breite des Freistrahls angepasst werden. Zur Anpassung von Gleichung (6-2) und (6-3) an die Gasströmung eines Zweiphasen-Freistrahls wurde  $c_i$  mithilfe der Ergebnisse der Kaltversuche am atmosphärischen Zerstäuberprüfstand ATMO bestimmt (siehe Kapitel 5.1). Für den Einphasen-Freistrahlm ist  $c_i = 0,07$ . Gleichung (6-2) beschreibt die lokale Geschwindigkeit der Gasphase im Freistrahlm. Gleichung (6-3) beschreibt den lokalen Mischungsbruch in der Gasphase. Der Mischungsbruch in der Gasphase ist der Anteil der Masse  $m_{VM}$  im Kontrollvolumen, welcher ursprünglich aus der Düse stammt (Vergasungsmedium). Durch Entrainment wird die Masse  $m_{ENT}$  aus der Umgebung in den Strahl eingemischt. Die Gasaustrittsgeschwindigkeit  $u_{g,0}$  wird aus dem Massenstrom des Vergasungsmediums und der Düsenaustrittsfläche des Ringspalts der Düse (siehe Abbildung 4-2) berechnet. Die turbulente Schmidt-Zahl wird auf  $Sc_t = 0,75$  festgelegt [15] (siehe Kapitel 3.1.7). Als Eingangsdaten für den Baustein A werden der Impulsaustauschfaktor  $c_i$ , die turbulente Schmidt-Zahl  $Sc_t$ , der Massenstrom  $\dot{m}_{Tr,0}$  und die Temperatur des Vergasungsmediums am Düsenaustritt  $T_0$  sowie die Abmessungen der Düsen benötigt. Im Baustein A werden die Gauß-Profile für die Geschwindigkeit und der Mischungsbruch als Basis der Gasphasenströmung berechnet.

Gauß-Profil für die Geschwindigkeit der Gasphase im Freistrahlm

$$\frac{u_g(\zeta, \eta)}{u_{g,0}} = \frac{1}{2 \cdot c_i \cdot \zeta} \cdot \exp\left(-\frac{1}{2 \cdot c_i^2} \cdot \eta^2\right) \quad (6-2)$$

Gauß-Profil für den Mischungsbruch der Gasphase im Freistrahlm

$$\frac{m_{VM}(\zeta, \eta)}{m_{VM}(\zeta, \eta) + m_{ENT}(\zeta, \eta)} = \frac{Sc_t}{2 \cdot c_i} \cdot \frac{1}{\zeta} \cdot \exp\left(-\left(\frac{2 \cdot Sc_t - 1}{2 \cdot c_i^2}\right) \cdot \eta^2\right) \quad (6-3)$$

Die Gauß-Profile beschreiben die Geschwindigkeit und den Mischungsbruch der Gasphase im Ähnlichkeitsbereich ( $\zeta \geq 8 - 10$ ). Im Kernbereich ( $\zeta \leq 4 - 5$ ) entspricht die lokale Geschwindigkeit der Geschwindigkeit an der Düse und der Mischungsbruch ist 1. Zwischen Kernbereich und Ähnlichkeitsbereich liegt ein Übergangsbereich. Gleichung (6-2) und (6-3) sind nur für den Ähnlichkeitsbereich des Freistrahls gültig. In Gleichung (6-2) ergibt sich mit  $\zeta < 7$  eine Gasgeschwindigkeit  $u_g$  auf der Achse größer als die Geschwindigkeit  $u_{g,0}$  an der Düse. Diese Werte werden im 2Ph-FJM durch  $u_{g,0}$  ersetzt. In Gleichung (6-3) ergibt sich mit  $\zeta < 5$  ein lokaler Mischungsbruch (linke Seite Gleichung (6-3)) größer als 1. Diese Werte werden im 2Ph-FJM durch 1 ersetzt. Der Kernbereich ist im 2Ph-FJM definiert als der Bereich indem die Gasgeschwindigkeit  $u_g = u_{g,0}$ , beziehungsweise der Mischungsbruch 1 ist. Der Übergangsbereich wird im 2Ph-FJM nicht abgebildet.

### 6.3 Baustein B: Einphasen-Bilanzgleichung

In Baustein B (siehe Abbildung 6-2) reagiert das Gasgemisch bestehend aus Vergasungsmedium (VM) und eingemischtem Synthesegas (ENT). Der Mischungsbruch (Gleichung (6-4)) für VM und ENT wird in Baustein A durch die Gauß-Profile bestimmt. In Baustein B wird jedes Kontrollvolumen als adiabater, kontinuierlicher Rührkesselreaktor (CSTR) betrachtet, indem das Gasgemisch aus VM und ENT ins chemische Gleichgewicht reagiert. In jedem Kontrollvolumen werden die Oxidationsreaktionen nach Gleichungen (6-5) - (6-6) berücksichtigt, deren Gleichgewicht vollständig auf der Produktseite liegt. In Kontrollvolumina, in denen die absolute Luftzahl  $\lambda_{abs} < 1$  (siehe Gleichung (3-32)) ist, werden zusätzlich die Wassergas-Shift Reaktion (Gleichung (6-7)) berücksichtigt. Die Wassergas-Shift Reaktion wird als Gleichgewichtsreaktion modelliert. Die Gleichgewichtskonstante  $K_{P,WGS}$  wurde mithilfe von Aspen Plus® als Funktion der Temperatur bestimmt (Gleichung (6-8)).

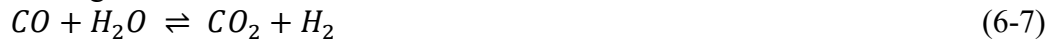
Mischungsbruch ohne Brennstoff

$$X_i(\zeta, \eta) = \frac{m_i(\zeta, \eta)}{\sum m_i(\zeta, \eta)} \quad \text{mit } i = VM, ENT \quad (6-4)$$

Oxidationsreaktionen



Wassergas-Shift Reaktion



Chemische Gleichgewichtskonstante der Wassergas-Shift Reaktion

$$K_{P,WGS}(T) = \frac{\tilde{y}_{CO_2} \cdot \tilde{y}_{H_2}}{\tilde{y}_{CO} \cdot \tilde{y}_{H_2O}} \quad (6-8)$$

Zur Berechnung der lokalen Temperatur  $T_{PG}$  und Zusammensetzung (Massenbruch)  $y_{n,PG}(\zeta, \eta)$  des Produktgases (PG) nach der Reaktion wird in Gleichung (6-9) eine Enthalpiebilanz in jedem CSTR (=Kontrollvolumen) aufgestellt. Auf der linken Seite der Bilanz sind die Edukte VM und ENT vor der Reaktion und auf der rechten Seite das Produktgas (PG) nach der Reaktion. Da in Gleichung (6-9) die absoluten Massen  $m_i$  der Edukte in den Kontrollvolumina nicht bekannt ist, werden beide Seiten von Gleichung (6-9) durch die Gesamtmasse dividiert. Die Gesamtmasse bleibt bei der Reaktion erhalten. Daher wird die linke Seite von Gleichung (6-9) durch die Gesamtmasse der Edukte und die rechte Seite durch die Gesamtmasse des Produktgases dividiert und es ergibt sich Gleichung (6-10). Die spezifische Enthalpie von Einzelkomponenten  $h$  wird dabei mit Gleichung (6-11) und die Enthalpie von Gemischen mit Gleichung (6-12) berechnet. Die Wärmekapazität  $c_p$  von Gasen wird mithilfe der Shomate-Gleichung berechnet (siehe Kapitel 6.6). Die Zusammensetzung von Gasgemischen wird als Massenbruch durch Gleichung (6-13) berechnet.

In die Enthalpie-Bilanz (Gleichung (6-10)) geht VM mit der Temperatur  $T_{VM} = T_0$  und der Zusammensetzung des Vergasungsmediums an der Düse ein. Die Temperatur  $T_{ENT}$  wird mit der Temperatur an der Reaktorwand (1200 °C) angenommen. Die Zusammensetzung von ENT wird als Gleichgewichtszusammensetzung der Massenströme ( $\dot{m}_{g,0}$ ,  $\dot{m}_{Tr,0}$ ) von Vergasungsmedium und Brennstoff an der Düse bei  $T_{ENT}$  angenommen. Die Zusammensetzung und Temperatur von VM und ENT sind somit keine lokalen Größen.

Enthalpie-Bilanz ohne Brennstoff

$$m_{VM}(\zeta, \eta) \cdot h_{VM}(T_{VM}) + m_{ENT}(\zeta, \eta) \cdot h_{ENT}(T_{ENT}) = \sum_n m_{n,PG}(\zeta, \eta) \cdot h_n(T_{PG}) \quad (6-9)$$

$$X_{VM}(\zeta, \eta) \cdot h_{VM}(T_{VM}) + X_{ENT}(\zeta, \eta) \cdot h_{ENT}(T_{ENT}) = \sum_n y_{n,PG}(\zeta, \eta) \cdot h_n(T_{PG}) \quad (6-10)$$

Spezifische Enthalpie von Einzelkomponenten

$$h_n(T_i) = \Delta_f h_n(298K) + \int_{298K}^{T_i} c_p(T) dT \quad (6-11)$$

Enthalpie von Gemischen

$$h_i(T) = \sum_n h_n(T) \cdot y_{n,i} \quad (6-12)$$

mit  $i = VM, ENT, PG$  und  $n = CO, CO_2, H_2, H_2O, N_2, O_2$

Massenbruch des Produktgases

$$y_{n,PG}(\zeta, \eta) = \frac{m_{n,PG}(\zeta, \eta)}{\sum_n m_{n,PG}(\zeta, \eta)} \quad (6-13)$$

In Gleichung (6-10) verbleiben die Temperatur  $T_{PG}$  und die Zusammensetzung  $y_{n,PG}$  als 7 Unbekannte. Um diese Größen zu berechnen, wird das Gleichungssystem mit Gleichung (6-36), den 4 Elementbilanzen für H, C, N, O, die temperaturabhängige Gleichgewichtskonstante der Wassergas-Shift Reaktion in Gleichung (6-8) und Gleichung (6-13) als Schließbedingung ( $\sum y_{n,PG} = 1$ ) gelöst.

## 6.4 Baustein C: Tropfenmodell

Im Baustein C (siehe Abbildung 6-2) ist das Tropfenmodell des 2Ph-FJM verortet. Die Brennstofftropfen werden durch Impuls- und Wärmeeintrag aus der Gasphase beschleunigt, geheizt und verdampft. Die Flugbahn der Tropfen ist gerade und führt entlang der kegelförmigen Winkelsegmente von der Düse weg (siehe Abbildung 6-1). In diesem Baustein werden die lokale Temperatur, Geschwindigkeit und Größe der Tropfengrößenfraktionen berechnet.

Das 2Ph-FJM beinhaltet kein Teilmodell zur Modellierung der Zerstäubung. Im Modell wird angenommen, dass direkt am Düsenaustritt ( $\zeta = 0$ ) Brennstofftropfen bei Raumtemperatur  $T_0$  vorliegen. Die initiale Tropfengrößenverteilung ist eine Eingangsgröße im Modell und wird durch PDA-Messungen in Kaltversuchen an der ATMO bestimmt (siehe Kapitel 5.2). Im Rahmen dieser Arbeit wird die Simulation mit 50 Tropfengrößenfraktion durchgeführt. Die Tropfengrößenverteilung bei  $\zeta = 0$  wird in jedem Winkelsegment gleich angenommen. Die Geschwindigkeit, mit der der Brennstoff die Düse verlässt, wird aus dem Brennstoffmassenstrom und der Querschnittsfläche der Flüssigkeitsöffnung der Düse berechnet und beträgt typischerweise  $u_{Tr,0} \approx 1 \text{ m/s}$ .

In jedem Kontrollvolumen wird Impulsaustausch zwischen der Gasphase und den Tropfen berücksichtigt. Die lokale Gasgeschwindigkeit ist eine Eingangsgröße in Baustein C und wird in einem ersten Durchlauf der Berechnungssequenz in Abbildung 6-2 im Baustein A mit dem Gauß-Profil berechnet. In allen weiteren Durchläufen wird die lokale Gasgeschwindigkeit iterativ durch eine Impulsbilanz in Baustein D berechnet, da die Geschwindigkeit der Tropfen eine Eingangsgröße für Baustein D darstellt.

Zur Berechnung der Tropfengeschwindigkeit im nächsten Kontrollvolumen stromab an der Position  $\zeta_{i+1} = \zeta_i + \Delta\zeta$  wird ein second-order-upwind-Konzept verwendet. Dazu wird zunächst eine allgemeine Bewegungsgleichung für einen Tropfen (Gleichung (6-14)) aufgestellt. In der Zeit  $\Delta t$  wird die Strecke  $\Delta\zeta$  zurückgelegt. Im second-order upwind Konzept wird angenommen, dass die Beschleunigung des Tropfens  $a_{Tr}$  innerhalb eines Kontrollvolumens konstant ist. Die Geschwindigkeit des Tropfens  $u_{Tr}$  ändert sich entlang der Strecke  $\Delta\zeta$  entsprechend Gleichung (6-15). Damit wird Gleichung (6-14) integriert und es ergibt sich Gleichung (6-16), die nach der unbekannten Zeit  $\Delta t$  aufgelöst werden kann, die der Tropfen benötigt um das Kontrollvolumen der Länge  $\Delta\zeta$  zu durchlaufen. Die Tropfenbeschleunigung im Kontrollvolumen  $a_{Tr}(\zeta_i)$  in Gleichung (6-16) wird aus dem Gleichungssystem (6-17) - (6-22) berechnet (siehe Grundlagen in Kapitel 3.4).

$$\Delta\zeta = \int_0^{\Delta t} u_{Tr}(t) dt \quad (6-14)$$

$$\frac{du_{Tr}(t)}{d\zeta} = a_{Tr}(t) = \text{konstant} \quad (6-15)$$

$$\Delta\zeta = u_{Tr}(\zeta_i) \cdot \Delta t + \frac{1}{2} \cdot a_{Tr}(\zeta_i) \cdot \Delta t^2 \quad (6-16)$$

In Gleichung (6-17) wird eine Kräftebilanz um den Tropfen aufgestellt, mit der Trägheitskraft  $F_I$  (Gleichung (6-18)) der Tropfenmasse und der Widerstandskraft  $F_W$  durch die umströmende Gasphase (Gleichung (6-20)). Der Widerstandsbeiwert  $c_W$  wird durch eine Reynolds-Korrelation (Gleichung (6-21)) mit den Koeffizienten aus Tabelle 3-5 ermittelt. Die Reynolds-Zahl ist von der Relativgeschwindigkeit des Tropfens ( $u_g - u_{Tr}$ ) und der dynamischen Viskosität  $\eta_g$  der umströmenden Gasphase abhängig (Gleichung (6-22)). Die Berechnung der Tropfenbeschleunigung (Gleichung (6-15) - (6-22)) wird für alle  $k$  Tropfengrößenfraktionen in jedem Winkelsegment durchgeführt.

$$F_I = F_W \quad (6-17)$$

$$F_I = \frac{\pi}{6} \cdot d_{Tr}^3 \cdot \rho_{Tr} \cdot \frac{du_{Tr}}{dt} \quad (6-18)$$

$$a_{Tr} = \frac{du_{Tr}}{dt} \quad (6-19)$$

$$F_W = c_W \cdot \frac{\pi}{4} \cdot d_{Tr}^2 \cdot \frac{1}{2} \cdot \rho_g \cdot (u_g - u_{Tr}) \cdot |u_g - u_{Tr}| \quad (6-20)$$

$$c_W = a_1 + \frac{a_2}{Re_{Tr}} + \frac{a_3}{Re_{Tr}^2} \quad (6-21)$$

$$Re_{Tr} = \frac{(u_{Tr} - u_g) \cdot \rho_g \cdot d_{Tr}}{\eta_g} \quad (6-22)$$

Der Brennstoff verlässt die Düsen im 2Ph-FJM als Tropfenkollektiv mit der Temperatur  $T_{Tr,0}$ . Die Tropfen werden durch das Vergasungsmedium beschleunigt und innerhalb eines Winkelsegments stromab transportiert. Durch die Umströmung der Gasphase wird neben Impuls auch Wärme auf den Tropfen übertragen. Dadurch heizen die Tropfen auf und verdampfen schließlich. Die Temperatur der Gasphase ist eine Eingangsgröße in diesen Baustein und wird in einem ersten Durchlauf der Berechnungssequenz in Baustein B durch ein Gauß-Profil berechnet (siehe Abbildung 6-2). In allen weiteren Durchläufen wird die lokale Gastemperatur iterativ durch eine Enthalpiebilanz in Baustein D berechnet. Im 2Ph-FJM werden Aufheizung und Verdunstung konsekutiv berechnet. Die Grundlagen zu diesem Teilmodell sind in Kapitel 3.5 beschrieben.

Die Änderung der Temperatur eines Tropfens  $T_{Tr}$  mit der Masse  $m_{Tr}$  und der spezifischen Wärmekapazität  $c_{p,Tr}$  ist in Gleichung (6-23) beschrieben. Der Wärmeübergangskoeffizienten  $\alpha_{Tr}$  wird mit der Nusselt-Zahl  $Nu_{Tr}$  bestimmt (Gleichung (6-24)). Die Nusselt-Zahl wird mit einem Ranz-Marshall Ansatz (Gleichung (6-25)) abgeschätzt. Die Prandtl-Zahl  $Pr$  wird in Gleichung (6-26) aus den Stoffeigenschaften Viskosität  $\eta$ , Wärmekapazität  $c_p$  und Wärmeleitfähigkeit  $\lambda$  der Gasphase berechnet. Berechnung der Stoffeigenschaften sind in Kapitel 6.6 beschrieben. Die lokale Tropfentemperatur  $T_{Tr}$  wird jeweils über den gesamten Tropfenradius als konstant angenommen. Nach der Erreichung der Siedetemperatur endet die Tropfenaufheizung und die Verdampfung setzt ein.

$$m_{Tr} \cdot c_{p,Tr} \frac{dT_{Tr}}{dt} = \pi \cdot d_{Tr}^2 \cdot \alpha_{Tr} \cdot (T_g - T_{Tr}) \quad (6-23)$$

$$Nu_{Tr} = \alpha_{Tr} \cdot d_{Tr} / \lambda_g \quad (6-24)$$

$$Nu_{Tr} = 2 + 0,6 \cdot Re_{Tr}^{\frac{1}{2}} \cdot Pr^{\frac{1}{3}} \quad (6-25)$$



$$Pr = \frac{\eta_g \cdot c_{p,g}}{\lambda_g} \quad (6-26)$$

Die Verdampfung kann mit dem D<sup>2</sup>-Gesetz oder einem diffusionskinetischen Ansatz beschrieben werden. Grundlagen zur Verdampfung sowie eine Herleitung der verwendeten Gleichungen sind in Kapitel 3.5 beschrieben. Im Rahmen der in dieser Arbeit gezeigten Ergebnisse wurde das D<sup>2</sup>-Gesetzes nach Gleichung (6-27) genutzt. Die Wärmetransportzahl  $B_T$  ist in Gleichung (6-28) definiert und beinhaltet die Wärmekapazität des Brennstoffdampfs  $c_{p,v}$ , den Wärmestrom von der Gasphase zum Tropfen  $\dot{Q}_{Tr}$  (Gleichung (6-29)) und den abdampfenden Massenstrom  $\dot{m}_v$  (Gleichung (6-30)).

$$\frac{dd_{Tr}^2}{dt} = - \frac{8 \cdot \lambda_g \cdot \ln(1 + B_T)}{\rho_{Tr} \cdot c_{p,v}} \quad (6-27)$$

$$B_T \equiv \frac{c_{p,v} \cdot (T_g - T_{Tr})}{h_v + \dot{Q}_{Tr} / \dot{m}_v} \quad (6-28)$$

$$\dot{Q}_{Tr} = \pi \cdot d_{Tr}^2 \cdot \alpha_{Tr} \cdot (T_g - T_{Tr}) \quad (6-29)$$

$$\dot{m}_v = \frac{2\pi \cdot d_{Tr} \cdot \lambda_g}{c_{p,v}} \cdot \ln(1 + B_T) \quad (6-30)$$

## 6.5 Baustein D: Zweiphasen-Bilanzgleichungen

Im Baustein D (siehe Abbildung 6-2) wird die Geschwindigkeit, Temperatur und die Zusammensetzung der Gasphase unter Berücksichtigung des Einflusses von Brennstoff durch Impulsaustausch mit der Gasphase und Freisetzung von Brennstoffdampf sowie Reaktion in der Gasphase mit Hilfe von Zweiphasen-Bilanzgleichungen für Masse, Enthalpie und Impuls berechnet. In Baustein D fließen neben den Gauß-Profilen aus Baustein A, die lokale Geschwindigkeit, Temperatur und Größe der Tropfengrößenfraktionen ein, die in Baustein C berechnet werden. Des Weiteren wird die Ausdehnung der Gasphase durch Reaktion als zusätzlicher Schub in der Impulsbilanz berücksichtigt.

In einem ersten Schritt wird in Baustein D der lokale Mischungsbruch im Zweiphasen-Freistrah  $X_i$  bestimmt.  $X_i$  ist in Gleichung (6-31) für den Zweiphasen-Freistrah definiert und berücksichtigt folgende Komponenten:

- Vergasungsmedium aus der Düse (VM)
- Entrainment (ENT)
- Flüssige Brennstofftropfen (BF)
- Brennstoffdampf (BD)

Zur Berechnung von  $X_i$  werden folgende Gleichungen genutzt. Das Vergasungsmedium (VM) aus der Düse wird durch Entrainment (ENT) von rezirkulierendem Gas verdünnt. Das

Verhältnis von VM und ENT ist durch die Gauß-Profile des Freistrahls definiert (Gleichung (6-3)). Es wird angenommen, dass das Verhältnis von Vergasungsmedium (VM) und der Gesamtmasse des Brennstoffs (BD+BF) an jeder Position dem GLR an der Düse entspricht (Gleichung (6-32)). Für die Massenanteile des Brennstoffs welche flüssig beziehungsweise gasförmig vorliegen, werden die Summe der lokalen Volumina aller Tropfengrößenklassen ( $\sim d_{Tr,k}^3(\zeta, \eta)$ ) mit der Summe der Tropfenvolumina an der Düse ( $\sim d_{Tr,k,0}^3$ ) verglichen (Gleichung (6-33)). Die Differenz aus der lokalen Tropfenmasse und der Tropfenmasse an der Düse liegt als Brennstoffdampf vor. Aus Gleichung (6-31) ergibt sich als Schließbedingung, dass die Summe aller Mischungsbrüche  $X_i$  ( $i = VM, ENT, BD, BF$ ) gleich eins ist. Um die vier unbekannten Mischungsbrüche  $X_i$  zu bestimmen, muss das Gleichungssystem aus den vier Gleichungen (6-3), (6-31) - (6-33) gelöst werden.

Mischungsbruch im Zweiphasen-Freistrahlm

$$X_i(\zeta, \eta) = \frac{m_i(\zeta, \eta)}{\sum m_i(\zeta, \eta)} \quad \text{mit } i = VM, ENT, BD, BF \quad (6-31)$$

Annahme für das Massenverhältnis von Vergasungsmedium und Gesamtmasse Brennstoff

$$\frac{m_{VM}(\zeta, \eta)}{m_{BD}(\zeta, \eta) + m_{BF}(\zeta, \eta)} = GLR \quad (6-32)$$

Massenverhältnis von flüssigem Brennstoff zur Gesamtmasse Brennstoff

$$\frac{m_{BF}(\zeta, \eta)}{m_{BD}(\zeta, \eta) + m_{BF}(\zeta, \eta)} = \frac{\sum_k d_{Tr,k}^3(\zeta, \eta)}{\sum_k d_{Tr,k,0}^3} \quad (6-33)$$

Aus den berechneten Mischungsbrüchen  $X_i$  können analog zu Baustein B durch eine Enthalpiebilanz die Gasphasentemperatur  $T_{pG}$  und der Massenbruch des Produktgases  $y_{n,PG}$  berechnet werden. Dazu wird jedes Kontrollvolumen als ein CSTR betrachtet. VM, ENT, BD und BF werden im CSTR als Edukte betrachtet, die entsprechend dem Verhältnis der lokalen Mischungsbrüche  $X_i$  vorliegen. Analog zu Baustein B ist VM eine Mischung aus Sauerstoff und Stickstoff bei Düsenaustrittstemperatur  $T_0$  ( $\approx$  Raumtemperatur) und die Temperatur von ENT wird mit der Temperatur an der Reaktorwand (1200 °C) angenommen. Die Zusammensetzung des rezirkulierenden Gases ENT wird als Gleichgewicht der Eingangsströme an der Düse bei der Wandtemperatur des Reaktors angenommen. Brennstoff (BD + BF) liegt flüssig und bei der Temperatur an der Düse  $T_0$  vor.

In jedem Kontrollvolumen (= CSTR) reagiert die Gasphase (VM, ENT und BD) ins chemische Gleichgewicht. Flüssige Brennstofftropfen (BF) werden von Düsenaustrittstemperatur bis zur mittleren (massengemittelten) lokalen Tropfentemperatur  $\overline{T_{Tr}}$  aufgeheizt. Die lokalen Tropfentemperaturen  $T_{Tr}$  der Einzeltropfen (aus Baustein C) werden dazu über alle Tropfengrößenfraktionen massengemittelt. In der Gasphase werden wie in Baustein B die Reaktionen (6-5) - (6-7) und zusätzlich die Zersetzung von Brennstoff (hier: Monoethylenglykol) in Gleichung (6-34) berücksichtigt.

Zersetzungsreaktion von Brennstoffdampf (hier: Monoethylenglykol)



Für die Bestimmung des lokalen Massenbruchs  $y_{n,PG}$  und der Gasphasentemperatur  $T_{PG}$  des Produktgases (PG) wird in Gleichung (6-35) eine Zweiphasen-Enthalpie-Bilanz in jedem Kontrollvolumen aufgestellt. Gleichung (6-35) basiert auf Gleichung (6-9) und enthält neben VM und ENT zusätzlich BD und BF. Auf der linken Seite von Gleichung (6-35) ist die Enthalpien der Edukte (VM, ENT, BD, BF), auf der rechten Seite die Enthalpie der Produkte (Produktgas und verbleibende flüssige Brennstofftropfen). Die spezifische Enthalpie von Reinstoffen und Gasgemischen wird analog zu Baustein B mit Gleichung (6-11) - (6-13) bestimmt. Die Wärmekapazität des flüssigen Brennstoffs wird als temperaturabhängige Größe aus ASPEN Plus® bestimmt.

Da in Gleichung (6-35) die absoluten Massen  $m_i$  der Edukte in den Kontrollvolumina nicht bekannt ist, werden beide Seiten von Gleichung (6-35) durch die Gesamtmasse dividiert (vergleiche Baustein B). Die linke Seite von Gleichung (6-35) wird durch die Gesamtmasse der Edukte und die rechte Seite durch die Gesamtmasse der Produkte (Produktgas und verbleibende flüssige Tropfen) dividiert und es ergibt sich Gleichung (6-36).

Für die Bestimmung der Temperatur  $T_{PG}$  und die Zusammensetzung  $y_{n,PG}$  des Produktgases (7 Unbekannte) aus Gleichung (6-36) werden analog zu Baustein B die 4 Elementbilanzen für H, C, N, O, die temperaturabhängige Gleichgewichtskonstante der Wassergas-Shift Reaktion in Gleichung (6-8) und Gleichung (6-13) als Schließbedingung ( $\sum y_{n,PG} = 1$ ) gelöst.

Zweiphasen-Enthalpie-Bilanz

$$\sum_i m_i(\zeta, \eta) \cdot h_i(T_i) = \sum_n \left( m_{n,PG}(\zeta, \eta) \cdot h_n(T_{PG}) \right) + m_{BF}(\zeta, \eta) \cdot h_{BF}(\overline{T_T}) \quad (6-35)$$

$$\frac{\sum_i X_i(\zeta, \eta) \cdot h_i(T_i)}{\sum_n m_{n,PG}(\zeta, \eta) + m_{BF}(\zeta, \eta)} = \frac{\sum_n \left( m_{n,PG}(\zeta, \eta) \cdot h_n(T_{PG}) \right) + m_{BF}(\zeta, \eta) \cdot h_{BF}(\overline{T_T})}{\sum_n m_{n,PG}(\zeta, \eta) + m_{BF}(\zeta, \eta)} \quad (6-36)$$

Durch die Reaktionen wird die Gasphase aufgeheizt und die Anzahl der Moleküle ändert sich. Dadurch wird eine Volumenausdehnung verursacht, die eine Impulsquelle darstellt. Um diese Impulsquelle in 2Ph-FJM zu berücksichtigen, wurde ein Modellansatz gewählt, bei dem die Gauß-Profile zur Berechnung der Geschwindigkeit des Freistrahls in Baustein A Gleichung (6-2) mit einem zusätzlichen Term erweitert werden, der Ausdehnung der Gasphase im reagierenden Freistrahls repräsentiert (erste Klammer in Gleichung (6-40)). Die Geschwindigkeit des reagierenden Einphasen-Freistrahls wird mit  $u_{RFS}$  bezeichnet. Der zusätzliche Term in Gleichung (6-40) enthält eine maximale Ausdehnung der Gasphase  $\epsilon_{max}$ , die durch die Oxidation von VM mit ENT hervorgerufen wird und einen lokalen

Konversionsgrad von Sauerstoff  $x_{O_2}(\zeta, \eta)$ , mit dem der Anteil der maximalen Volumenausdehnung berechnet wird. Für Kontrollvolumina, in denen bereits Sauerstoff umgesetzt ist, wird dadurch die Austrittsgeschwindigkeit  $u_0$  an der Düse durch den zusätzlichen Schub aus der Oxidationsreaktion um den Faktor  $\sqrt[3]{\epsilon_{max}} \cdot x_{O_2}(\zeta, \eta)$  erhöht.

Für die Berechnung der maximalen Ausdehnung der Gasphase  $\epsilon_{max}$  wird zunächst das stöchiometrische Verhältnis ( $\lambda_{abs} = 1$ ) der beiden Gasgemische Vergasungsmedium (VM) und eingemischtes Synthesegas (ENT) bestimmt. Das stöchiometrische Gemisch aus VM und ENT wird in einer isobaren und adiabaten Reaktion zu Produktgas (PG) umgesetzt. Die Ausdehnung der Gasphase wird aus der Volumenzunahme über die Oxidationsreaktion in Gleichung (6-37) mithilfe des idealen Gasgesetzes in Gleichung (6-38) berechnet. Das Volumen der Gasphase dehnt sich in alle Richtungen aus. Um die Auswirkung der Volumenausdehnung auf die Geschwindigkeit in axiale Richtung zu bestimmen, wird in Gleichung (6-40) die Kubikwurzel von  $\epsilon_{max}$  berücksichtigt.

Die maximale Volumenausdehnung ist erreicht, wenn in einem Kontrollvolumen der gesamte Sauerstoff in Oxidationsreaktionen umgesetzt ist. In Gleichung (6-39) wird der lokale Konversionsgrad von Sauerstoff  $x_{O_2}(\zeta, \eta)$  berechnet. Diese Kennzahl wird in Gleichung (6-40) benutzt, um den lokalen Anteil der maximal möglichen Volumenausdehnung durch die Oxidation zu bestimmen. Der lokale Konversionsgrad von Sauerstoff wird durch Vergleich der lokalen Sauerstoffkonzentration ohne Reaktion (Nenner) und mit Reaktion (Zähler) bestimmt. Mit Gleichung (6-40) wird nun die Geschwindigkeit eines reagierenden Einphasen-Freistrahls (RFS) berechnet.

$$\epsilon_{max} = \frac{V_{PG}}{V_{VM} + V_{ENT}} - 1 \quad (6-37)$$

$$V_i = \frac{n_i \cdot R \cdot T_i}{p} \quad \text{with } i = PG, VM, ENT \quad (6-38)$$

$$x_{O_2}(\zeta, \eta) = \left( 1 - \frac{y_{O_2,PG}(\zeta, \eta)}{X_{VM}(\zeta, \eta) \cdot y_{O_2,VM}} \right) \quad (6-39)$$

$$u_{RFS}(\zeta, \eta) = \left( 1 + \sqrt[3]{\epsilon_{max}} \cdot x_{O_2}(\zeta, \eta) \right) \cdot \frac{u_0}{2 \cdot c_i^2 \cdot \zeta} \cdot \exp\left(-\frac{\eta^2}{2 \cdot c_i^2}\right) \quad (6-40)$$

Für die Berechnung der Geschwindigkeit der Gasphase wird in Baustein D (siehe Abbildung 6-2) für jedes Kontrollvolumen eine Zweiphasen-Impulsbilanz (Gleichung (6-41)) gelöst. Alle Größen in Gleichung (6-41) sind lokale Größen  $f(\zeta, \eta)$  mit Ausnahme der Geschwindigkeit der Brennstofftropfen  $u_{Tr,0}$  am Düsenaustritt. Im Zweiphasen-Freistahl werden vier Prozesse berücksichtigt, bei denen Impuls übertragen wird:

- Synthesegas (ENT) aus der ruhenden Umgebung wird im Freistahl durch Entrainment in das Vergasungsmedium (VM) eingemischt.

- Tropfen verdampfen und Brennstoffdampf (BD) mischt sich mit der restlichen Gasphase. Die Gasphase mit VM, ENT und BD nimmt eine gemeinsame Geschwindigkeit an.
- Impuls wird zwischen Gasphase und Brennstofftropfen (BF) übertragen.
- Reaktionen in der Gasphase und Verdampfung stellen eine Impulsquelle dar.

Zur Bestimmung des Gesamtimpulsstroms, der in einem Kontrollvolumen zur Verfügung steht (linke Seite der Impulsbilanz), wird ein hypothetischer Zustand beschrieben, bei dem kein Impulsaustausch zwischen Brennstoff (BF, BD) und restlicher Gasphase (VM, ENT) erfolgt ist. Vergasungsmedium (VM) und eingemischtes Synthesegas (ENT) bewegen sich entsprechend eines reagierenden Einphasen-Freistrahls mit  $u_{RFS}$  (Gleichung (6-40)). Bei  $u_{RFS}$  ist Entrainment von Synthesegas aus der ruhenden Umgebung sowie Reaktion und Verdampfung als Impulsquelle bereits berücksichtigt. Tropfen (BF) und Brennstoffdampf (BD) haben auf der linken Seite von Gleichung (6-40) in allen Kontrollvolumina die Geschwindigkeit  $u_{Tr,0}$ , die der Geschwindigkeit an der Düse entspricht ( $u_{Tr,0} \approx 1m/s$ ). Auf der rechten Seite der Impulsbilanz haben die Tropfen die Geschwindigkeit wie im Tropfenmodell Baustein C berechnet. Damit ist die Impulsübertragung zwischen Gasphase und Tropfen berücksichtigt. Die Geschwindigkeit der einzelnen Tropfengrößenfraktionen geht als massengemittelte Tropfengeschwindigkeit  $\bar{u}_{Tr}$  in die Impulsbilanz ein. Das Gasgemisch (VM, ENT, BD) bewegt sich mit der Gasgeschwindigkeit  $u_g$ . Die Gasgeschwindigkeit ist die einzige Unbekannte in Gleichung (6-41) und kann somit bestimmt werden.

Impulsbilanz im Kontrollvolumen:

$$(X_{BD} + X_{BF}) \cdot u_{Tr,0} + (X_{VM} + X_{ENT}) \cdot u_{RFS} = \quad (6-41)$$

$$X_{BF} \cdot \bar{u}_{Tr} + (X_{VM} + X_{ENT} + X_{BD}) \cdot u_g$$

Zur Auswertung der Simulationsergebnisse wird der Brennstoffumsatz bestimmt. Da im 2Ph-FJM angenommen wird, dass Brennstoffdampf in der Gasphase unendlich schnell ins chemische Gleichgewicht reagiert, ist der Brennstoffumsatz ausschließlich durch die Kinetik der Verdampfung bestimmt. Durch Gleichung (6-42) wird der lokale Brennstoffumsatz  $x_{BS}(\zeta, \eta)$  aus dem Verhältnis der lokalen Massen von bereits verdampften Brennstofftropfen ( $m_{BD}$ ) und der gesamten Brennstoffmasse ( $m_{BD} + m_{BF}$ ) bestimmt. Die bereits verdampfte Masse  $m_{BD}$  wird durch Vergleich der lokalen Tropfengrößen  $d_{Tr}$  und den Tropfengrößen an der Düse  $d_{Tr,0}$  bestimmt.

Darüber hinaus wird ein integralen Brennstoffumsatzes  $FC(\zeta)$  (engl.: fuel conversion) bestimmt, der den gesamten Brennstoffumsatz an einer Kontrollebene beschreibt. Für die Bestimmung des integralen Brennstoffumsatzes  $FC(\zeta)$  werden zunächst die Massenströme des verdampften Brennstoffs (BD) und des gesamten Brennstoffs (BD+BF) durch die Kontrollebene benötigt. Der gesamte Massenstrom von Brennstoff (BD + BF) durch eine Kontrollebene wird mit Gleichung (6-43) bestimmt. Dabei wird die Annahme im 2Ph-FJM genutzt, dass sich Tropfen und Vergasungsmedium nicht entmischen und daher an jeder Position dem GLR an der Düse entsprechen. Der Massenstrom von Brennstoff durch eine Kontrollebene wird aus dem Flächenintegral zur Berechnung des Massenstroms der Gasphase durch eine Kontrollebene bestimmt. Da Tropfen aufgrund der Trägheit nicht exakt der Gasströmung folgen, wurde in Gleichung (6-43) zur Bestimmung des Massenstroms des

Brennstoffs anstatt der Gasgeschwindigkeit  $u_g$  die massengemittelte Geschwindigkeit der Tropfen  $\bar{u}_{Tr}$  verwendet. Eine ausführlichere Herleitung der Abschätzung ist in Anhang A.VIII zu finden.

Mit Gleichung (6-44) wird der Massenstrom von bereits verdampftem Brennstoff  $\dot{m}_{BD}$  mit Hilfe des lokalen Brennstoffumsatzes  $x_{BS}$  aus Gleichung (6-42) und dem Massenstrom des gesamten Brennstoffs  $\dot{m}_{BS}$  aus Gleichung (6-43) bestimmt. Aus dem Verhältnis der Massenströme von bereits verdampftem Brennstoff zum Gesamtmassenstrom Brennstoff wird in Gleichung (6-45) der integrale Brennstoffumsatz  $FC(\zeta)$  bestimmt.

Lokaler Brennstoffumsatz

$$x_{BS}(\zeta, \eta) = \frac{\dot{m}_{BD}(\zeta, \eta)}{\dot{m}_{BF}(\zeta, \eta) + \dot{m}_{BD}(\zeta, \eta)} \quad (6-42)$$

Massenstrom gesamter Brennstoff (BS = BD + BF)

$$\dot{m}_{BS}(\zeta) = 2\pi \cdot GLR \cdot \int_{\eta=0}^{\infty} \rho_g(\zeta, \eta) \cdot \bar{u}_{Tr}(\zeta, \eta) \cdot \eta \, d\eta \quad (6-43)$$

Massenstrom Brennstoffdampf (BD)

$$\dot{m}_{BD}(\zeta) = 2\pi \cdot GLR \cdot \int_{\eta=0}^{\infty} \rho_g(\zeta, \eta) \cdot x_{BS}(\zeta, \eta) \cdot \bar{u}_{Tr}(\zeta, \eta) \cdot \eta \, d\eta \quad (6-44)$$

Integraler Brennstoffumsatz (*engl.*: fuel conversion):

$$FC(\zeta) = \frac{\dot{m}_{BD}(\zeta)}{\dot{m}_{BS}(\zeta)} \quad (6-45)$$

## 6.6 Modellierung von Stoffeigenschaften

Die im 2Ph-FJM verwendeten Stoffeigenschaften sind im relevanten Temperaturbereich nicht konstant und müssen daher als Funktion der Temperatur modelliert werden. Der Dampfdruck der Flüssigkeit wird mit der Antoine Gleichung (Gleichung (6-46)) mit den Parametern A, B, C aus der NIST-Datenbank [142] modelliert.

Antoine-Gleichung zur Bestimmung des Dampfdrucks über einer Flüssigkeit:

$$p_i = 10^{A - \frac{B}{C+T}} \quad (6-46)$$

Diffusionskoeffizienten, Viskosität und thermische Leitfähigkeit der Gasphase werden aus der kinetischen Gastheorie abgeleitet. Dabei werden die Moleküle als Kugeln angenommen, die in elastischen Stößen kollidieren. Die Stoffeigenschaften ergeben sich durch Stoßwahrscheinlichkeiten der Moleküle, die mit semi-empirischen Moleküleigenschaften (z. B. Stoßquerschnitt) angepasst werden. Detaillierte Beschreibungen der folgenden Modelle sind in [143] zu finden. Die Viskosität  $\eta_g$  von Einzelgasen wird mit der Chapman-

Enskog Gleichung modelliert. Die Viskosität von Gasgemischen wird auf Basis der Einzelgase mit dem Modell von Wilke modelliert. Für die thermische Leitfähigkeit  $\lambda_g$  von Einzelgasen wird das Eucken-Modell verwendet. Für die thermische Leitfähigkeit von Gasgemischen wird das Modell von Mason und Saxena verwendet. Der binäre Diffusionskoeffizient  $D_{12}$  wird mit der Chapman-Enskog Gleichung nach Wilke und Lee abgeschätzt.

Die Wärmekapazität der gasförmigen Komponenten wird mit dem Shomate-Polynom modelliert (Gleichung (6-47)). Die Shomate-Gleichung approximiert die spezifische Wärmekapazität  $c_p(T)$  als Funktion der Temperatur durch ein Polynom. Die Parameter A, B, C, D, E können für jedes Gasmolekül abschnittsweise für einen Temperaturbereich aus der NIST-Datenbank [142] bezogen werden. Das Polynom kann zur Berechnung der spezifischen Enthalpie in Gleichung (6-12) algebraisch integriert werden. Die spezifische Enthalpie von Gasgemischen wird mit Gleichung (6-13) bestimmt. Die Wärmekapazität  $c_{p,T}$  und die Dichte der Brennstofftropfen  $\rho_{Tr}$  werden mithilfe von empirischen Korrelationen aus dem VDI-Wärmeatlas [144] berechnet.

Shomate-Polynom für die spezifische Wärmekapazität von Gasen

$$\frac{c_p(T)}{\frac{J}{mol \cdot K}} = A + B \cdot \left(\frac{T}{1000}\right) + C \cdot \left(\frac{T}{1000}\right)^2 + D \cdot \left(\frac{T}{1000}\right)^3 + E \cdot \left(\frac{T}{1000}\right)^{-2} \quad (6-47)$$

## 7 Simulationsergebnisse und Validierung des 2Ph-FJM

### 7.1 Simulationsergebnisse und Vergleich mit Validierungsversuch

Zur Validierung des Zweiphasen-Freistrahlmmodells (2Ph-FJM) wurden Messungen in einem Validierungsversuch am atmosphärischen Flugstromvergaser REGA durchgeführt und mit Simulationsergebnissen aus dem 2Ph-FJM verglichen. Der REGA-Vergaser sowie die eingesetzte Düse sind in Kapitel 4 beschrieben. Als Brennstoff für den Validierungsversuch wurde Monoethylenglykol (MEG) verwendet, das mit sauerstoffangereicherter Luft am Austritt der Düse zerstäubt und im Reaktor zu Synthesegas umgesetzt wurde. Die Reaktorwand wurde elektrisch auf 1200 °C beheizt. Die Versuchseinstellungen sowie die Abmessung der Düse sind Tabelle 7-1 zu entnehmen. Die Düse entspricht Düse 1 aus den Versuchen an der ATMO in Kapitel 5 (siehe Tabelle 5-1). Im 2Ph-FJM wird angenommen, dass die Zerstäubung bereits am Düsenaustritt abgeschlossen ist und sphärische Tropfen aus der Düse austreten (siehe Kapitel 6). Die Größenverteilung der Tropfen wurde mit einem PDA in Kaltversuchen gemessen (siehe Kapitel 5.2). Für die Messung wurde Wasser mit Luft an der ATMO zerstäubt und Messungen bei einem Düsenabstand von 200 mm durchgeführt. Der Messaufbau ist in Kapitel 4.2 beschrieben. Abbildung 5-9 zeigt die gemessene Tropfengrößenverteilung. Der gemessene mittlere Sauterdurchmesser der Tropfengrößenverteilung beträgt  $d_{32} = 84\mu\text{m}$ . Als Input für das 2Ph-FJM wurde die Tropfengrößenverteilung in 50 Klassen unterteilt, die jeweils gleiche Massenanteile des Brennstoffs repräsentieren. Als weitere Eingangsgröße wird der Parameter für Impulsaustausch  $c_i$  im Zweiphasen-Freistrahls benötigt. Der Parameter wurde ebenfalls an der ATMO experimentell zu  $c_i = 0.0884$  bestimmt (siehe Kapitel 5.1). Die Größen im 2Ph-FJM werden in Kegel-Koordinaten  $(\xi, \eta)$  berechnet. Zur Darstellung der Ergebnisse werden alle Größen in kartesische Koordinaten  $(z, r)$  transformiert (siehe Gleichung (3-8) und (3-10)). Die zugeführten Massenströme des Vergasungsmediums und Brennstoff entsprechen einer technischen Luftzahl (siehe Gleichung (3-31)) von  $\lambda_{tech} = 0,46$  und einer absoluten Luftzahl (siehe Gleichung (3-32)) von  $\lambda_{abs} = 0,62$ . Bei der absoluten Luftzahl wird im Brennstoff gebundener Sauerstoff im Gegensatz zur technischen Luftzahl berücksichtigt (siehe Kapitel 3.2).

In einem ersten Schritt werden zunächst Annahmen im 2Ph-FJM überprüft. Das 2Ph-FJM basiert auf einem Freistrahlsansatz und wird dazu genutzt einen reagierenden eingeschlossenen Freistrahls zu simulieren. Ein eingeschlossener Freistrahls bildet aufgrund der Einhausung einen großen Rezirkulationswirbel (siehe Kapitel 3.1.8). Bis zum Zentrum des Rezirkulationswirbels  $z_C$ , kann der eingeschlossene Freistrahls in guter Näherung mit einem Freistrahlsansatz beschrieben werden. Im Anschluss geht die Strömung asymptotisch in eine Rohrströmung über. Die Abschätzung für die Position des Rezirkulationswirbels eignet sich bis zu einem Durchmesser Verhältnis von 1/10 von Düse zu Einhausung. Der Durchmesser der Einhausung (=Reaktor) beträgt  $d_{Reaktor} = 280\text{mm}$ . Der äquivalente Düsendurchmesser beträgt  $d_{\ddot{a}q} = 6,5\text{mm}$ . Das Durchmesser Verhältnis liegt dementsprechend bei  $d_{\ddot{a}q}/d_{Reaktor} = 0,02$ . Das Zentrum des Rezirkulationswirbels liegt nach Gleichung (3-26) bei  $z_C = 0,42\text{m}$  und das Ende liegt nach Gleichung (3-27) bei  $z_p = 0,82\text{m}$ . Die Annahme eines Freistrahls ist dementsprechend bis zu einem axialen Abstand von  $z \approx 0,4\text{m}$  in guter Näherung gültig und verliert dann bis  $z \approx 0,8\text{m}$  asymptotisch die Gültigkeit.

Die Flamme im Flugstromreaktor ist nach unten gerichtet. Die Dichte im Flammenbereich  $\rho_{Flamme}$  ist aufgrund der hohen Temperatur geringer als die Dichte in der Umgebung des



Freistrahls  $\rho_{ENT}$ . Durch den Dichtegradienten können Auftriebseffekte induziert werden. Der Einfluss von Auftriebskräften auf die Geschwindigkeit im Freistrahls kann mit Hilfe der Froude-Zahl abgeschätzt werden. Die Grundlagen dazu sind in Kapitel 3.1.9 dargelegt. Um den Einfluss von Auftriebseffekte abzuschätzen, wird die Länge des impulsdominierten Bereichs mit Hilfe der Froude-Zahl (Gleichung (3-28) - (3-30)) berechnet. Die Dichte der Flamme und der Umgebung wird aus der lokalen Temperatur und Zusammensetzung in der Gasphase aus den Simulationsergebnissen, die weiter unten detailliert beschrieben werden, bestimmt. Als Worst-Case-Abschätzung wird für die Flamme die geringste Dichte  $\rho_{Flamme} = 0,098 \text{ kg/m}^3$  angenommen, die im gesamten Freistrahlsbereich mit dem 2Ph-FJM berechnet wurde. Die Dichte der Umgebung beträgt  $\rho_{ENT} = 0,17 \text{ kg/m}^3$ . Aus Gleichung (3-28) ergibt sich mit dem äquivalenten Düsendurchmesser  $d_{\ddot{a}q} = 6,5 \text{ mm}$  eine Froude-Zahl von  $Fr = 107748$ . Das Ende des impulsdominierten Bereichs wird aus Gleichung (3-29) zu  $z_I = 0,94 \text{ m}$  und der Beginn des auftriebsdominierten Bereichs aus Gleichung (3-30) zu  $z_{III} = 9,4 \text{ m}$  berechnet. Damit liegt die Flammenzone vollständig im impulsdominierten Bereich. Auftrieb spielt für den untersuchten Bereich unter den betrachteten Bedingungen keine Rolle.

Tabelle 7-1 Parameter zur Simulation des Validierungsversuchs

Parameter	Symbol	Wert	Einheit
Durchmesser Flüssigkeitsöffnung Düse	$d_l$	2,0	mm
Durchmesser Gasöffnung Düse	$d_g$	7,2	mm
Äquivalenter Düsendurchmesser <sup>3</sup>	$d_{\ddot{a}q}$	6,5	mm
Massenstrom Brennstoff an der Düse	$\dot{m}_{Tr,0}$	12,4	kg/h
Massenstrom Vergasungsmedium an der Düse	$\dot{m}_{g,0}$	10,3	kg/h
Anteil Sauerstoff im Vergasungsmedium	$\tilde{y}_{VM,O_2}$	0,693	mol/mol
Anteil Stickstoff im Vergasungsmedium	$\tilde{y}_{VM,N_2}$	0,307	mol/mol
Geschwindigkeit Brennstoff an der Düse	$u_{Tr,0}$	1	m/s
Geschwindigkeit Vergasungsmedium an der Düse	$u_{g,0}$	72	m/s
Temperatur Edukte an der Düse	$T_0$	303	K
Temperatur Reaktorwand	$T_{Reaktor}$	1473	K

Die Simulationsergebnisse aus dem Zweiphasen-Freistrahlsmodell (2Ph-FJM) werden mit den Parametern des Validierungsversuchs aus Tabelle 7-1 simuliert und im folgenden Abschnitt mit experimentellen Daten aus dem REGA-Vergaser verglichen. In Abbildung 7-1 - Abbildung 7-6 sind zunächst Simulationsergebnisse aus dem 2Ph-FJM abgebildet. In Abbildung 7-1 ist auf der linken Seite die Temperaturverteilung der Gasphase in der Flammenzone dargestellt. Auf der rechten Seite ist die absolute Luftzahl  $\lambda_{abs}$  (siehe Gleichung (3-32)) in der Gasphase zu sehen. In Abbildung 7-2 bis Abbildung 7-6 sind radiale

<sup>3</sup> Ohne Berücksichtigung des Dichtegradienten (siehe Gleichung (3-14))

Profile der Temperatur und Zusammensetzung der Gasphase bei unterschiedlichen axialen Abständen abgebildet.

Das Vergasungsmedium tritt aus der Düse aus und bildet direkt an der Düse eine kalte Kernzone aus (siehe Abbildung 7-1 links). In der Kernzone findet kein radialer Austausch zwischen Freistrah und Fluid aus der Umgebung statt. Temperatur und Zusammensetzung der Gasphase entsprechen dem Vergasungsmedium. Die kalte Kernzone ist auch im Radialprofil bei  $z = 50 \text{ mm}$  ( $z/d_{\text{aq}} \approx 8$ ) in Abbildung 7-2 für  $r < 10 \text{ mm}$  zu sehen. In der Kernzone reagiert der Sauerstoff aus dem Vergasungsmedium nicht, da an dieser Position weder Brennstoffdampf noch Synthesegas für eine exotherme Oxidationsreaktion zur Verfügung steht. Für den Brennstoffdampf müssen zunächst die Tropfen aufgeheizt und verdunstet werden. Synthesegas wird durch Entrainment aus der Umgebung in den Zweiphasen-Freistrah eingemischt. Die Zündung in der Gasphase finden unmittelbar am Düsenauslass, radial leicht versetzt von der Strahlachse statt. In diesem Bereich mischt sich der Sauerstoff aus dem Vergasungsmedium mit heißem Synthesegas und bildet eine rotationssymmetrische Reaktionszone aus, die die kalte Kernzone umhüllt. Im Radialprofil bei  $z = 50 \text{ mm}$  (Abbildung 7-2) entsteht bei  $r \approx 10 \text{ mm}$  eine stöchiometrische Mischung ( $\lambda_{\text{abs}} = 1$ ) in der Gasphase (siehe auch Abbildung 7-1 rechts). Temperatur und Konzentration der Oxidationsprodukte ( $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{CO}_2$ ) zeigen einen schmalen steilen Peak. Sauerstoff und brennbare Synthesegaskomponenten ( $\text{CO}$ ,  $\text{H}_2$ ) sind am Peak vollständig abreagiert. Die Gasphasentemperatur beträgt im Maximum  $T_g \approx 3500 \text{ K}$ . Die hohen Temperaturen entstehen durch die Sauerstoffanreicherung des Vergasungsmittels (siehe Tabelle 7-1). Außerdem wird die Temperatur im 2Ph—FJM überschätzt, da im Reaktionsmodell keine Radikale enthalten sind. Zur Validierung des Reaktionsmodells wurden die berechneten Gasphasentemperaturen aus dem 2Ph-FJM mit Berechnungen aus Aspen Plus® verglichen. Die Validierung mit Aspen Plus® ist weiter unten in diesem Kapitel gezeigt.

Für  $r > 10 \text{ mm}$  sind in der Gasphase Synthesegaskomponenten und Oxidationsprodukte enthalten. Sauerstoff ist vollständig umgesetzt. Mit zunehmendem Abstand zur Düse wird Synthesegas aus der Umgebung bis auf die Achse ( $r \approx 0$ ) eingemischt und reagiert mit dem Sauerstoff aus dem Vergasungsmedium. Bei  $z = 100 \text{ mm}$  ( $z/d_{\text{aq}} \approx 15$ ) reagiert bereits Sauerstoff auf der Achse (siehe Abbildung 7-3) und bei  $z = 150 \text{ mm}$  ( $z/d_{\text{aq}} \approx 23$ ) bleibt auf der Achse nur noch eine geringe Konzentration Sauerstoff übrig (siehe Abbildung 7-4). Durch die hohen Temperaturen werden Brennstofftropfen schnell aufgeheizt und verdunstet, wodurch Brennstoffdampf ( $\text{C}_2\text{H}_6\text{O}_2$ ) freigesetzt wird, der zu  $\text{CO}$  und  $\text{H}_2$  zerfällt und mit Sauerstoff zu  $\text{CO}_2$  und  $\text{H}_2\text{O}$  ins chemische Gleichgewicht reagiert. Die schmale heiße Reaktionszone verbreitert sich mit zunehmendem Abstand zur Düse und wächst bei einem axialen Abstand von  $z \approx 160 \text{ mm}$  auf der Achse zusammen. Bei  $z = 200 \text{ mm}$  ( $z/d_{\text{aq}} \approx 31$ ) ist über den gesamten Radius die absolute Luftzahl  $\lambda_{\text{abs}} < 1$  (siehe Abbildung 7-5). Das Reaktionsgemisch ist damit unterstöchiometrisch, sodass kein Sauerstoff im Produktgas enthalten ist. Die Gasphasentemperatur liegt unterhalb der Spitzentemperatur der Flamme. Für  $z > 200 \text{ mm}$  werden die Radialprofile durch weiteres Entrainment und Verdampfung von Brennstoff flacher und breiter (siehe Abbildung 7-6).

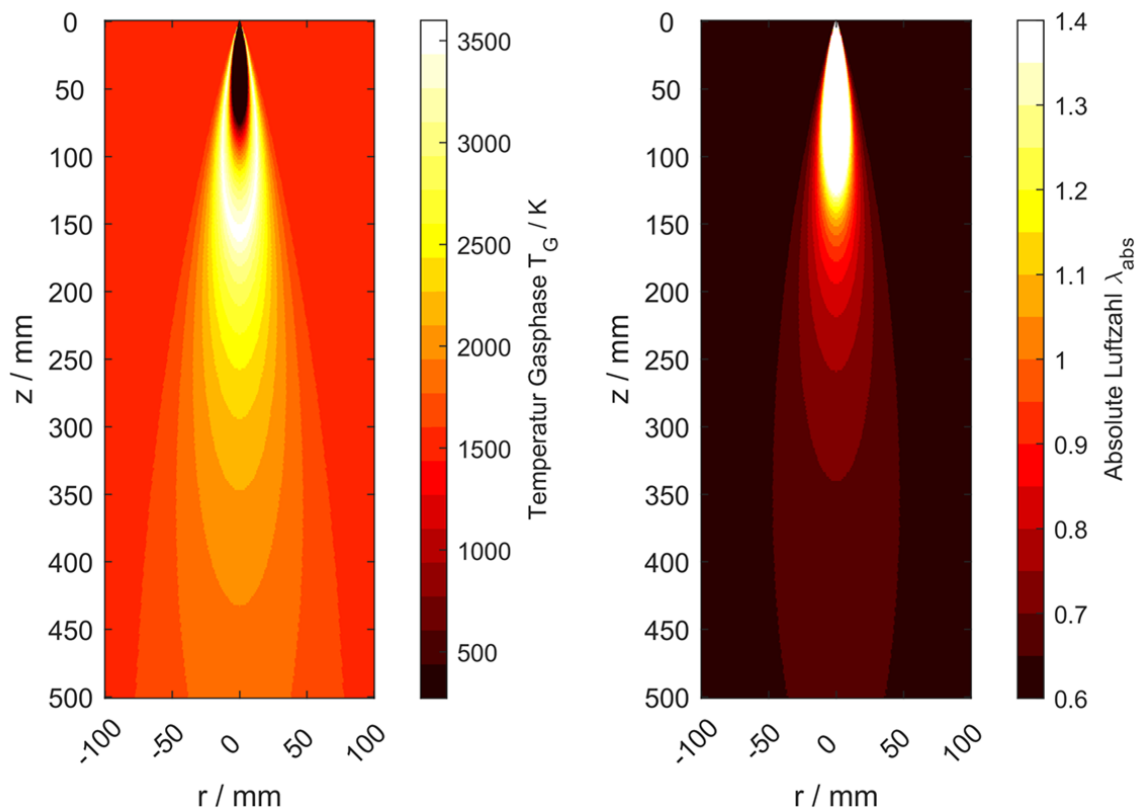


Abbildung 7-1 Simulationsergebnisse für den Validierungsversuch. Links: Temperaturverteilung in der Gasphase. Rechts: Absolute Luftzahl  $\lambda_{abs}$  in der Gasphase nach Gleichung (3-32).

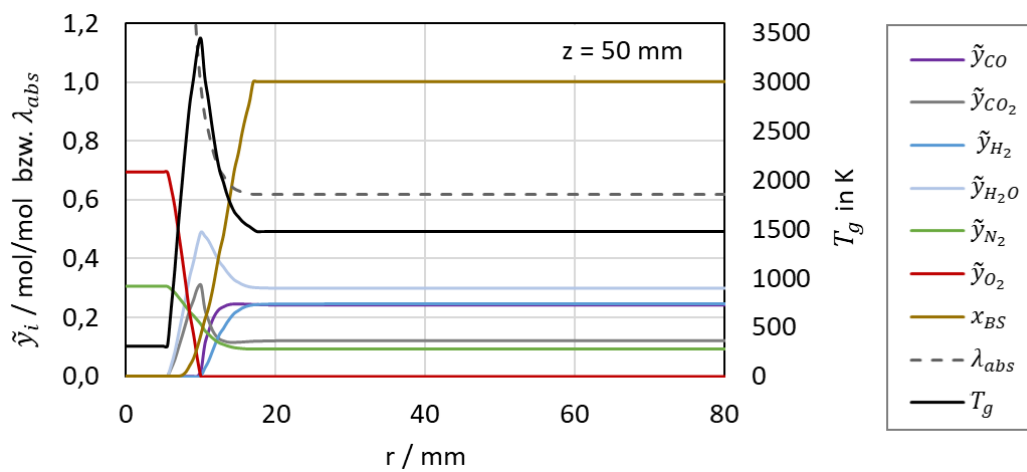


Abbildung 7-2 Radiales Profil von Temperatur und Zusammensetzung der Gasphase bei  $z = 50$  mm ( $z/d_{\ddot{a}q} \approx 8$ ).

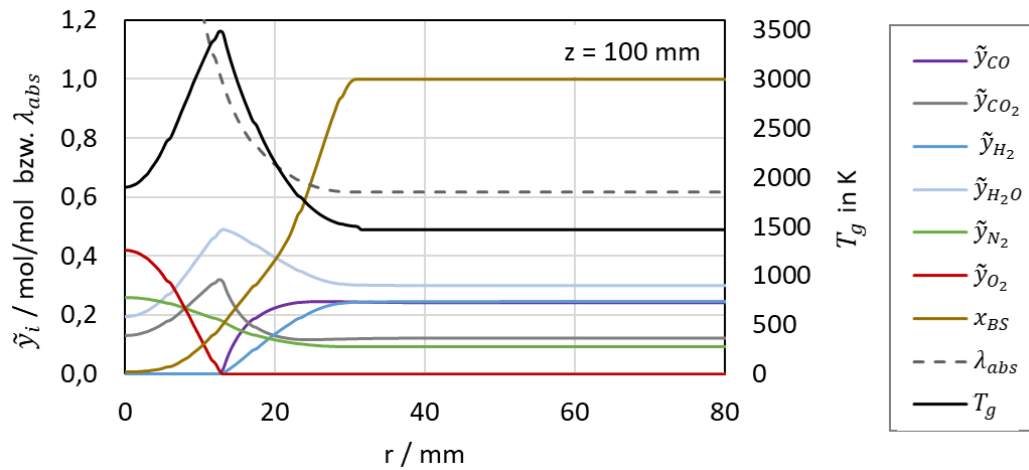


Abbildung 7-3 Radiales Profil von Temperatur und Zusammensetzung der Gasphase bei  $z = 100 \text{ mm}$  ( $z/d_{\text{äq}} \approx 15$ ).

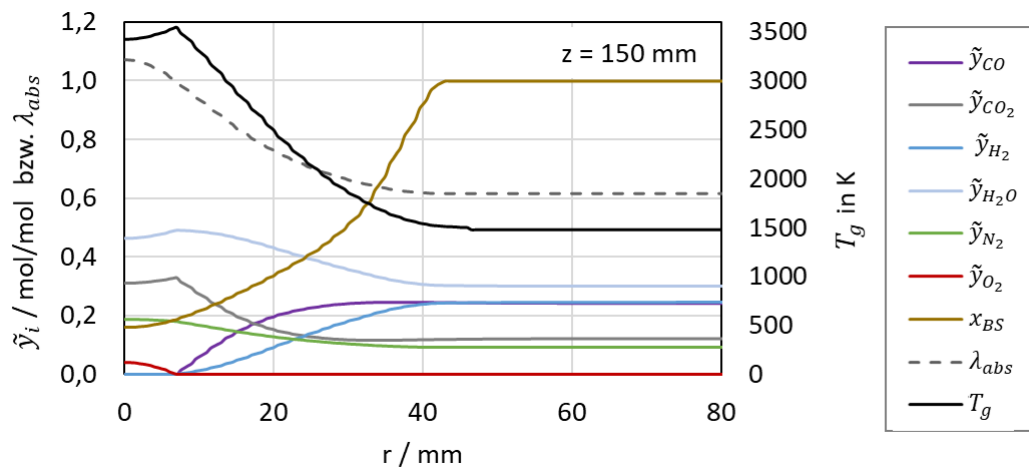


Abbildung 7-4 Radiales Profil von Temperatur und Zusammensetzung der Gasphase bei  $z = 150 \text{ mm}$  ( $z/d_{\text{äq}} \approx 23$ ).

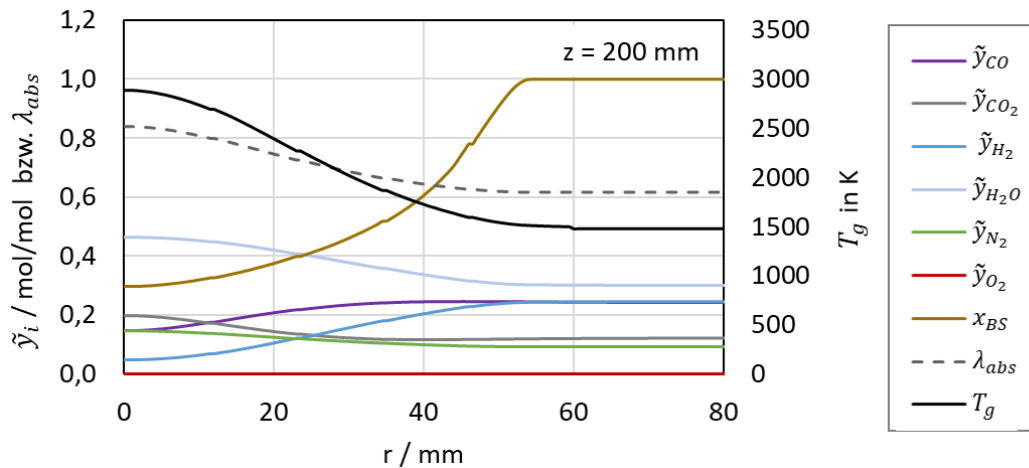


Abbildung 7-5 Radiales Profil von Temperatur und Zusammensetzung der Gasphase bei  $z = 200 \text{ mm}$  ( $z/d_{\text{aq}} \approx 31$ ).

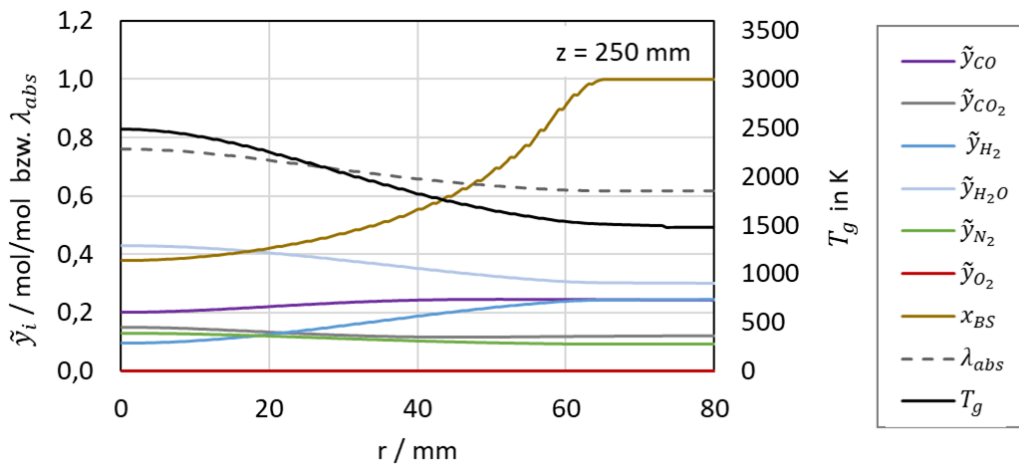


Abbildung 7-6 Radiales Profil von Temperatur und Zusammensetzung der Gasphase bei  $z = 250 \text{ mm}$  ( $z/d_{\text{aq}} \approx 39$ ).

Zur Validierung des Reaktionsmodells wurden die im 2Ph-FJM berechneten Temperaturen und Zusammensetzungen von Produktgas mit Berechnungen aus Aspen Plus® verglichen. Dazu wurden unterschiedliche Gemische von Vergasungsmedium (VM), Synthesegas aus der Umgebung = Entrainment (ENT) und Brennstoffdampf (BD) in einem Rührkesselreaktor (CSTR) zur Reaktion gebracht. Die Temperaturen und Zusammensetzungen der Eingangsströme (VM, ENT und BD) in den CSTR wurden aus dem 2Ph-FJM entnommen. Analog zum Reaktionsmodell im 2Ph-FJM wurde in Aspen Plus® nur CO, CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O, N<sub>2</sub> und O<sub>2</sub> als Ausgangsströme zugelassen und keine Radikale berücksichtigt. Die Temperaturen und die Zusammensetzungen der Produktströme aus dem CSTR berechnet mit Aspen Plus® (—) und berechnet mit 2Ph-FJM (♦) sind in Abbildung 7-7 zu sehen. Die Ergebnisse sind über  $\lambda_{\text{abs}}$  aufgetragen, das aus der Zusammensetzung der Eingangsströme berechnet wurde. Der Vergleich zwischen 2Ph-FJM und Aspen Plus® zeigt große Übereinstimmung sowohl in der Zusammensetzung als auch in der Temperatur des Produktgases, was die Validierung des Reaktionsmodells im 2Ph-FJM bestätigt.

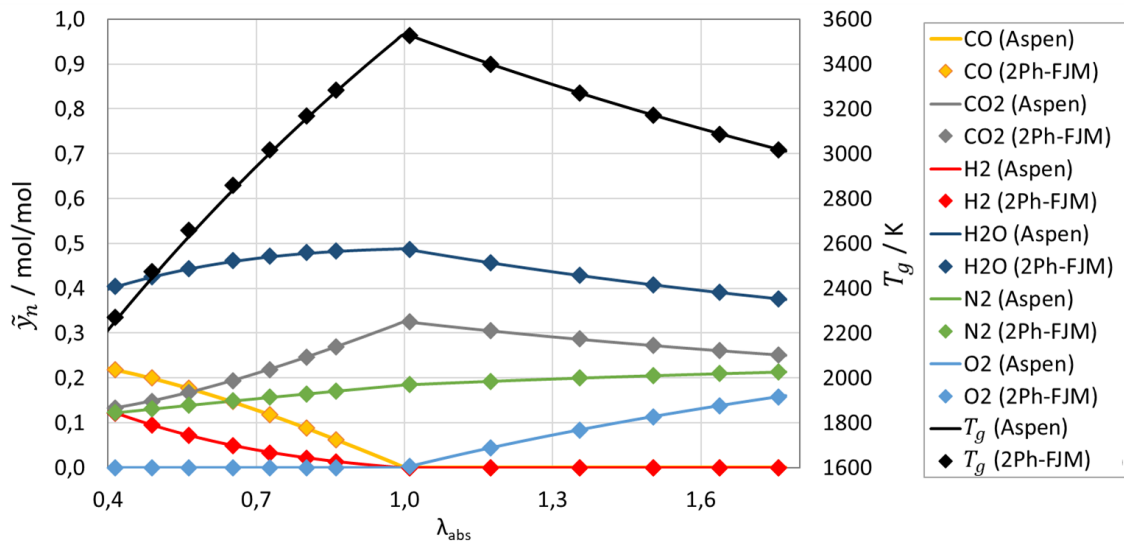


Abbildung 7-7 Vergleich von Zusammensetzung  $y_{n,PG}$  und Temperatur  $T_g$  des Produktgases aus einem Rührkesselreaktor berechnet mit dem 2Ph-FJM (♦) und in Aspen Plus ® (—) mit unterschiedlicher Zusammensetzung der Eingangsströme (VM, ENT und BD) aufgetragen über  $\lambda_{abs}$ .

Zur Validierung der Flammenstruktur aus dem 2Ph-FJM wurden OH\*-Chemilumineszenz Aufnahmen aus dem REGA-Vergaser aufgenommen. Im Reaktionsmodell des 2Ph-FJM wird OH\* als Zwischenprodukt nicht modelliert. Der Verlauf der Temperatur und die OH\*-Konzentration sind qualitativ dennoch vergleichbar, da die OH\*-Konzentration besonders hoch ist, wenn die Gasphasentemperatur hoch ist [136]. Um die radiale Verteilung der OH\*-Konzentration im Querschnitt zu rekonstruieren, wurden die OH\*-Aufnahmen durch eine inverse Abel-Transformation nachbearbeitet (siehe Kapitel 4.1). In Abbildung 7-8 rechts ist die Temperatur der Gasphase aus der Simulation des 2Ph-FJM dargestellt. OH\*-Chemilumineszenz Aufnahmen und Simulationsergebnisse der Temperatur zeigen eine ähnliche Flammenstruktur. Die Zündung erfolgt nahe der Düse leicht versetzt von der Achse. Eine schmale heiße Zone verbreitert sich mit zunehmendem Abstand zur Düse und erreicht die Achse im Bereich  $130 \text{ mm} < z < 170 \text{ mm}$ . Die heiße Reaktionszone hüllt den Kernbereich ein, in dem wenig beziehungsweise keine Reaktion stattfindet. Das Modell beschreibt die Zündzone und die heiße Reaktionszone in guter Näherung.

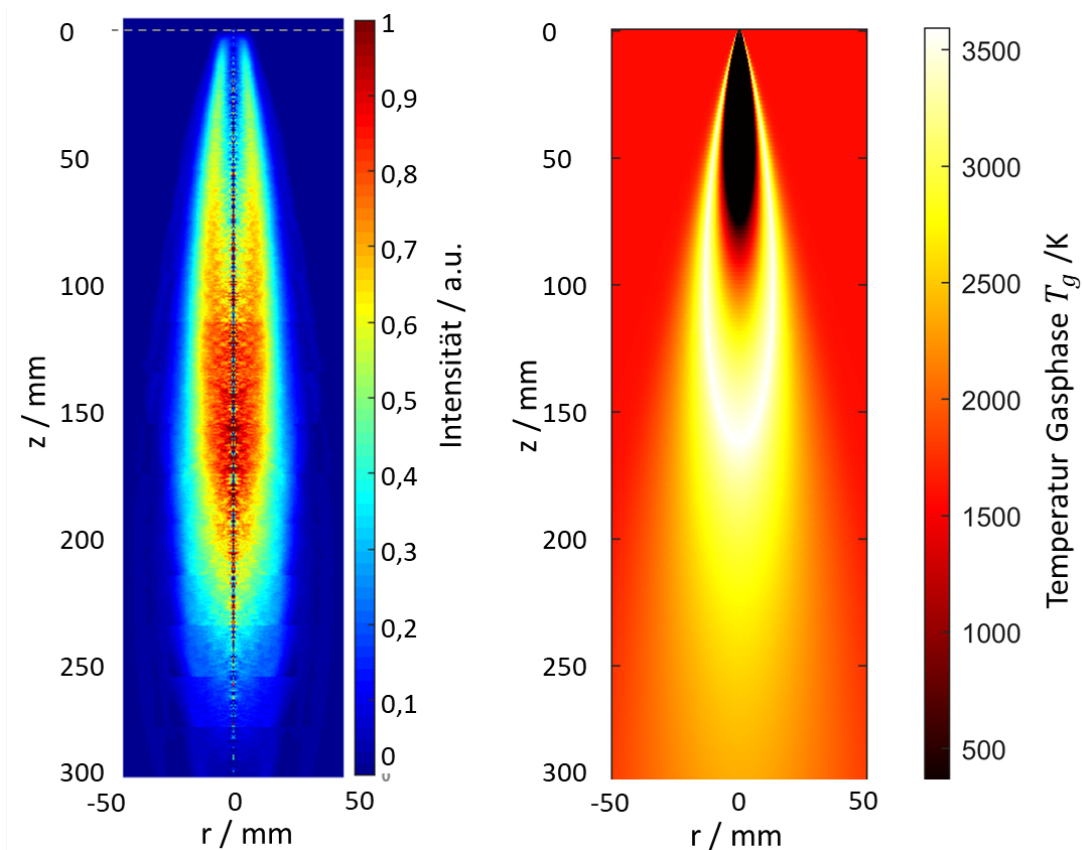


Abbildung 7-8 OH\*-Chemilumineszenz Aufnahme (Abel-transformiert) des Validierungsversuchs im REGA-Vergaser.

In Abbildung 7-9 links sind Tropfen- und Gasgeschwindigkeit für den Validierungsversuch entlang der Achse aus den Simulationsergebnissen des 2Ph-FJM dargestellt. Bei  $z = 0$  tritt das Vergasungsmedium mit einer Geschwindigkeit von  $u_{g,0} = 69 \text{ m/s}$  und die Flüssigphase mit einer Geschwindigkeit von  $u_{\text{Tr},0} = 1 \text{ m/s}$  aus der Düse aus. Die Geschwindigkeit der Gasphase wird erstens durch Impulsübertragung auf die Tropfen, zweitens durch Entrainment von Gas aus der ruhenden Umgebung und drittens durch die Ausdehnung der Gasphase aufgrund von Reaktion beeinflusst. Der Kernbereich des Freistrahls erstreckt sich im Bereich zwischen  $0 \text{ mm} < z < 95 \text{ mm}$ , sodass im 2Ph-FJM Entrainment erst ab  $z > 95 \text{ mm}$  die Achse erreicht. Reaktion findet ebenfalls erst statt, wenn Synthesegas durch Entrainment in das Vergasungsmedium eingemischt wird. Im Düsennahbereich wird die Gasgeschwindigkeit folglich nur durch Impulsübertragung zwischen kaltem Vergasungsmedium und Tropfen beeinflusst. Aufgrund der Impulsübertragung von der Gasphase auf die Tropfen werden die Tropfen beschleunigt und die Gasphase abgebremst. Kleine Tropfen beschleunigen schnell im Gegensatz zu großen Tropfen, die eine hohe Trägheit aufweisen und nur moderat beschleunigen. Da die anzahlgemittelte mittlere Tropfengeschwindigkeit durch kleine Tropfen dominiert wird, ist der Anstieg im Vergleich zur massengemittelten Tropfengeschwindigkeit, welche durch große Tropfen dominiert wird, größer.

Mit Beginn des Ähnlichkeitsbereichs wird die Gasphase durch Entrainment von ruhendem Gas aus der Umgebung abgebremst und durch die Dichteverringerung aufgrund von Reaktion beschleunigt. Der Ähnlichkeitsbereich schließt sich im 2Ph-FJM direkt ohne Übergangszone an den Kernbereich an. Der Beginn des Ähnlichkeitsbereichs in den

Freistrahlsprofilen für den Mischungsbruch (Gleichung (6-3)) liegt auf der Achse bei  $z = 75 \text{ mm}$  und in den Geschwindigkeitsprofilen (Gleichung (6-2)) auf der Achse bei  $z = 95 \text{ mm}$ . Im Ähnlichkeitsbereich von Gleichung (6-3) können Gasphasenreaktionen stattfinden. Im Ähnlichkeitsbereich von Gleichung (6-2) wird die Gasphase durch Entrainment von Umgebungsfluid abgebremst. Im Bereich zwischen  $75 \text{ mm} < z < 95 \text{ mm}$  kommt es daher zunächst zu einer Beschleunigung durch Reaktion und dann zum Abbremsen der Gasphase durch Entrainment. Der Versatz beim Beginn des Ähnlichkeitsbereichs in den beiden Gleichungen (6-2) und (6-3) ist ein rein numerisches Artefakt im Modell. Im Bereich  $95 \text{ mm} < z < 160 \text{ mm}$  heben sich die gegenläufigen Effekte (Beschleunigung durch Reaktion und Abbremsen durch Entrainment) weitgehend auf. Es ergibt sich ein Plateau der Gasgeschwindigkeit bei etwa  $u_g \approx 38 \text{ m/s}$ . Wenn der gesamte Sauerstoff auf der Achse aufgebraucht ist und keine weitere Oxidation mehr stattfinden kann, endet das Plateau bei  $z = 160 \text{ mm}$  abrupt. Ab hier nimmt die Geschwindigkeit der Gasphase ab. Sobald die Geschwindigkeit der Gasphase unter die Geschwindigkeit einer Tropfengrößenfraktion fällt, wird Impuls von Tropfen auf die Gasphase übertragen und die Tropfengeschwindigkeit nimmt ebenfalls ab. Nach einer Strecke von  $z > 350 \text{ mm}$  liegt die Geschwindigkeit der Gasphase unterhalb der langsamsten Tropfengrößenfraktion. Ab hier nimmt die Geschwindigkeit aller Tropfengrößenfraktionen ab. Während der Lebensdauer einer Tropfengrößenfraktion nimmt die Masse und damit die Trägheit des Tropfens aufgrund der Verdunstung ab. Wenn eine Tropfengrößenfraktion vollständig verdampft ist, entspricht die Geschwindigkeit der Fraktion der Geschwindigkeit der Gasphase, da die Trägheit der Tropfen durch Verdampfung gegen null geht. Auf der rechten Seite von Abbildung 7-9 sind die Geschwindigkeit von Gasphase  $u_g$  und die massengemittelte Geschwindigkeit der Tropfen  $\bar{u}_{Tr}$  im gesamten Bereich abgebildet. Die Geschwindigkeit von Gasphase und Tropfen sind bei  $r = 0$  am höchsten und nehmen in radial Richtung asymptotisch ab.

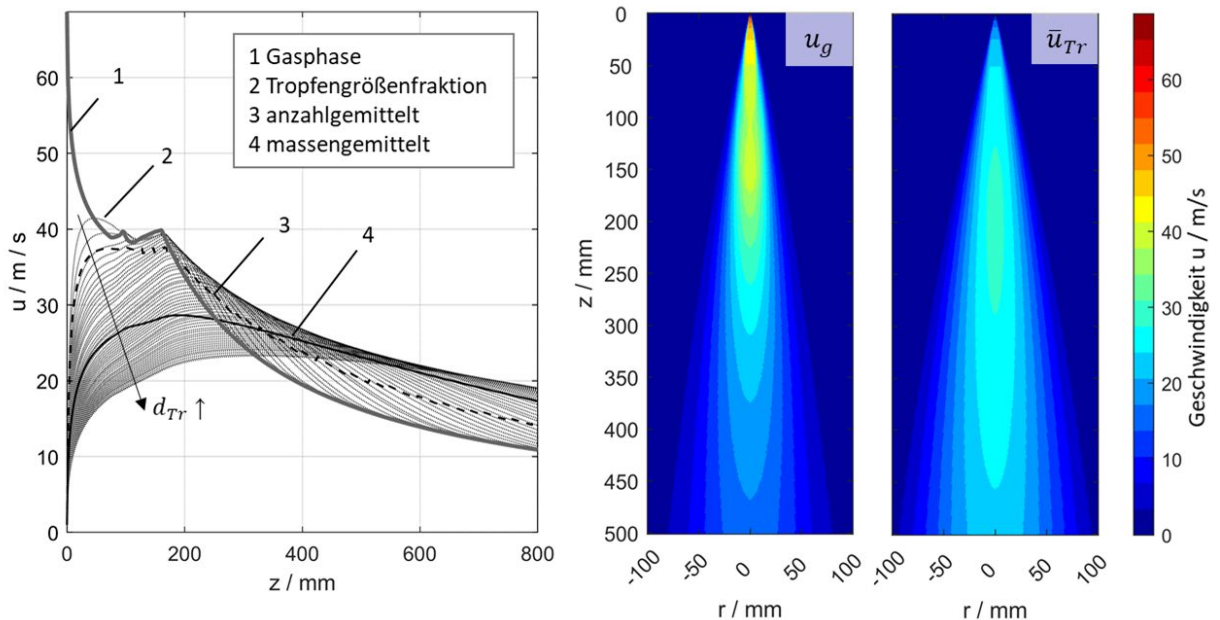


Abbildung 7-9 Simulationsergebnisse für die Geschwindigkeit der Gasphase. Links: Gasphase, die 50 Tropfengrößenfraktionen sowie anzahl- und massengemittelten Tropfengeschwindigkeit entlang der Achse. Rechts: Geschwindigkeit der Gasphase  $u_g$  und massengemittelte Geschwindigkeit der Tropfen  $\bar{u}_{Tr}$ .



In Abbildung 7-10 links sind die Tropfendurchmesser der 50 Tropfengrößenfraktionen sowie der gemittelte Sauterdurchmesser entlang der Achse ( $r=0$ ) dargestellt. Die Tropfengröße bei  $z=0$  ist die initiale Tropfengröße, die als Eingangsgröße aus Messungen in der ATMO vorgegeben wird (siehe Kapitel 5.2). Die Tropfen durchlaufen zunächst den kalten Kernbereich. Mit Beginn des Ähnlichkeitsbereichs bei  $z=75$  mm nimmt die Temperatur der Gasphase zu und Wärme wird auf die Tropfen übertragen. Die Aufheizung und Verdampfung der Tropfen werden im 2Ph-FJM konsekutiv berechnet. Die Tropfen werden bis zur Verdampfungstemperatur aufgeheizt und beginnen dann zu verdampfen. Bei der Verdampfung bleibt die Temperatur konstant. Bei der Aufheizung der Tropfen nimmt die Dichte der Flüssigkeit ab. Die Tropfendurchmesser nehmen zu. Bei der Verdampfung verringert sich der Tropfendurchmesser, bis die Tropfen vollständig verdampft sind. Kleine Tropfengrößenfraktionen verdampfen deutlich schneller als große Tropfengrößenfraktionen, die nur teilweise beim Durchflug durch die Flammenzone verdampfen.

In Abbildung 7-10 links ist zusätzlich zu den Tropfengrößenfraktionen der mittlere Sauterdurchmesser ( $d_{32}$ ) dargestellt.  $d_{32}$  nimmt zu, da die kleinen Tropfenklassen schneller komplett verdampfen und damit nicht mehr bei der Berechnung des  $d_{32}$  berücksichtigt werden, als dass die großen Tropfen relevant an Durchmesser verlieren. Erst wenn auch die größten Tropfengrößenfraktionen deutlich an Durchmesser verlieren, nimmt der  $d_{32}$  ab. Dieser Bereich ist nicht mehr im Ausschnitt von Abbildung 7-10 links enthalten. In Abbildung 7-10 rechts ist der  $d_{32}$  im gesamten Simulationsbereich dargestellt. Da die Geschwindigkeit der Tropfen zum Rand hin abnimmt, haben die Tropfen für  $r > 0$  eine längere Verweilzeit im Vergleich zur Flugbahn auf der Achse bei  $r=0$ . Die Verdampfung ist daher für  $r > 0$  schon weiter fortgeschritten, wodurch der  $d_{32}$  mit zunehmendem Radius zunächst zunimmt. Im Randbereich des Freistrahls gibt es eine Zone, in der der  $d_{32}$  dann abrupt auf  $d_{32} = 0$  abfällt, wenn die größten Tropfengrößenfraktionen verdampfen. Im blauen Bereich von Abbildung 7-10 rechts sind keine Tropfen mehr vorhanden.

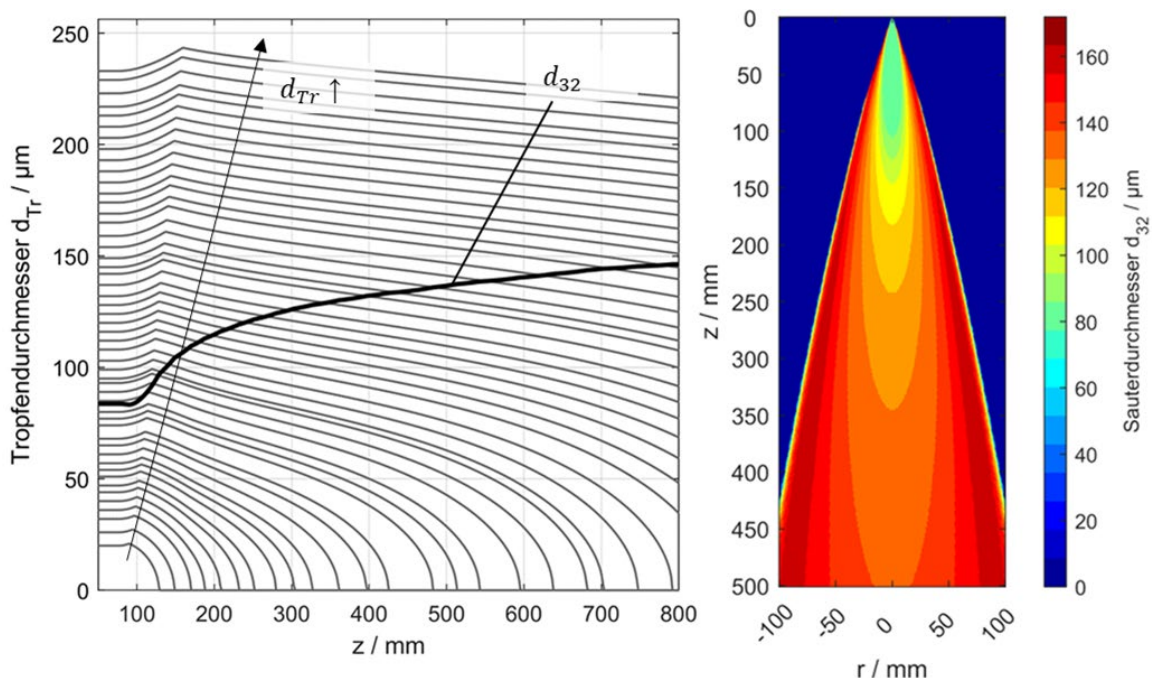


Abbildung 7-10 Simulationsergebnisse aus dem Validierungsversuch (2Ph-FJM). Links: Tropfendurchmesser der Tropfengrößenfraktionen und Sauterdurchmesser  $d_{32}$  entlang der Achse. Rechts: Sauterdurchmesser  $d_{32}$  im gesamten düsennahen Simulationsbereich.

In Abbildung 7-11 werden zur Validierung des 2Ph-FJM die Simulationsergebnisse mit PDA-Messungen im REGA-Vergaser verglichen. PDA-Messungen sind ab einem Abstand von  $z = 30$  mm möglich. In diesem Bereich werden noch Tropfen beschleunigt bis das Plateau der Tropfengeschwindigkeit von  $u_{Tr} \approx 41$  m/s erreicht wird. Die Geschwindigkeit im Plateau liegt leicht oberhalb des im 2Ph-FJM berechneten Wert mit  $u_{Tr} \approx 38$  m/s. Für  $z > 150$  mm nimmt die gemessene Geschwindigkeit wie im 2Ph-FJM berechnet ab. Der Sauterdurchmesser bleibt im Kernbereich zunächst näherungsweise konstant. Die gemessenen Werte entsprechen in guter Näherung den Werten im 2Ph-FJM<sup>4</sup>. Nach dem Kernbereich nimmt der Sauterdurchmesser mit einsetzender Verdampfung zu. Im 2Ph-FJM wird die Zunahme des Sauterdurchmesser im Vergleich zu den gemessenen Werten etwas überschätzt. Außerdem beginnt der Anstieg des Sauterdurchmesser in den Messungen bei  $z < 100$  mm und im 2Ph-FJM bei  $z \approx 100$  mm. Eine Ursache für diese Diskrepanz könnte die im 2Ph-FJM vernachlässigte Strahlung als weiterer Wärmetransportmechanismus sein. Durch die Strahlung können Tropfen bereits im kalten Kernbereich aufgeheizt und verdampft werden. Außerdem wurde in Kapitel 5 gezeigt, dass Tropfen bei der Zerstäubung mit Düse 1 in radiale Richtung geschleudert werden können, was im 2Ph-FJM nicht berücksichtigt wird. Dies könnte den auf der Achse gemessenen Sauterdurchmesser beeinflussen. Zusätzlich können bei der Messung im Flugstromvergaser mit dem PDA-Messfehler entstehen. Insgesamt konnte der Verlauf und die absoluten Werte der PDA-Messungen von Tropfengeschwindigkeit und Tropfengröße sowie die Aufnahmen der Flammenstruktur mit OH\*-Chemilumineszenz durch das 2Ph-FJM gut wiedergegeben werden.

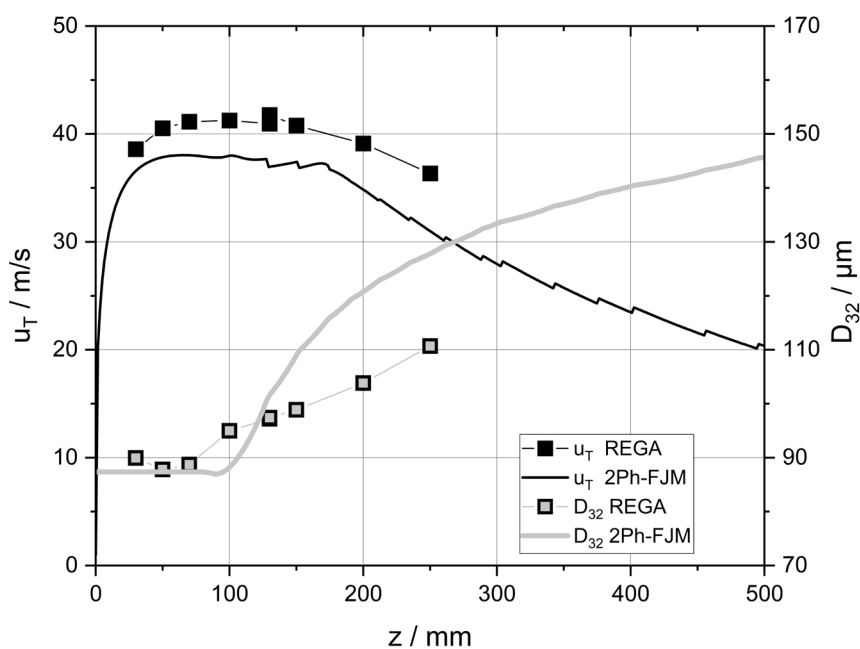


Abbildung 7-11 Vergleich von PDA-Messungen (REGA) und Simulationsergebnissen (2Ph-FJM) für den axialen Verlauf der Tropfengeschwindigkeit (anzahlgemittelt) und des Sauterdurchmessers der Tropfen  $d_{32}$  entlang der Achse.

<sup>4</sup> Die Tropfengrößen für das 2Ph-FJM wurden in Kaltversuchen mit Wasser und Luft an der ATMO gemessen. Die Vergasungsversuche wurden mit Monoethylenglykol durchgeführt, das mit Vergasungsmedium in den Reaktor zerstäubt wurde.

Der Brennstoffumsatz wird im 2Ph-FJM ausschließlich durch die Verdampfung der Tropfen bestimmt (siehe Kapitel 6.5). Durch Vergleich der lokalen Tropfengrößen mit den Tropfengrößen an der Düse kann mit Gleichung (6-42) ein lokaler Umsatz  $x_{BS}(z, r)$  bestimmt werden. Der lokale Brennstoffumsatz  $x_{BS}$  für den Validierungsversuch ist in Abbildung 7-12 links dargestellt. Nahe der Düse im Kernbereich findet keine Verdampfung von Brennstoff statt. Nach dem Kernbereich werden die Tropfen auf der Achse in der heißen Flammenzone aufgeheizt und Verdampfung setzt ein. Zunächst tragen vor allem kleine Tropfen zum lokalen Brennstoffumsatz bei bis auch große Tropfen verdampfen (siehe Abbildung 7-10). Der lokale Brennstoffumsatz  $x_{BS}$  steigt entlang der Achse mit zunehmendem Abstand zur Düse. Da die Geschwindigkeiten der Tropfen auf der Achse am höchsten ist und die Verweilzeit damit am geringsten, ist der Brennstoffumsatz auf der Achse am geringsten. Mit zunehmendem radialem Abstand nimmt der lokale Brennstoffumsatz  $x_{BS}$  zu. Am Rand des Strahlbereichs ist die Tropfengeschwindigkeit langsam (siehe Abbildung 7-9 rechts) und die Verweilzeit hoch. Der lokale Brennstoffumsatz  $x_{BS}$  geht gegen Vollumsatz ( $x_{BS} = 1$ ).

Am Rand ist der lokale Brennstoffumsatz hoch, aber die Massenstromdichte des Brennstoffs gering. Zur Bestimmung des Gesamtumsatzes an einer Kontrollebene  $z$  wird der integralen Brennstoffumsatzes  $FC$  mit Gleichung (6-45) berechnet. Dabei wird  $x_{BS}$  mit der mittleren Tropfengeschwindigkeit gewichtet und das Flächenintegral an der axialen Position  $z$  gebildet. Den Verlauf des integralen Brennstoffumsatzes (siehe Gleichung (6-45)) in Abhängigkeit des Düsenabstands  $z$  ist in Abbildung 7-12 rechts dargestellt. Dabei ist zu sehen, dass der integrale Brennstoffumsatz  $FC$  im Bereich  $0 < z = 50\text{mm}$  zunächst flach beginnt, da auf der Achse der Kernbereich liegt, wo keine Verdampfung stattfindet. Für  $r > 0$  findet auch bei geringem axialem Abstand bereits Verdampfung statt. Daher ist in diesem Bereich der integrale Brennstoffumsatz  $FC > 0$ . Im Bereich  $50\text{mm} < z < 300\text{ mm}$  nimmt der  $FC$  stark zu. In diesem Bereich liegen sehr hohe Temperaturen in der Gasphase vor (siehe Abbildung 7-1). Als Indikation der Flammenzone in Abbildung 7-12 rechts ist zusätzlich die axiale Position vom Ende der Oxidationszone eingefügt, welches definiert ist als der axiale Abstand, an dem  $O_2$  vollständig aufgebraucht ist. An dieser Stelle ist  $\lambda_{abs} = 1$  und die Gastemperatur am höchsten. Kleine Tropfen verdampfen im Vergleich zu großen Tropfen sehr schnell und tragen in diesem Bereich wesentlich zum Brennstoffumsatz bei (siehe Abbildung 7-10 links). Für  $z > 300\text{ mm}$  wird die Verdampfungsrate von mehreren, teils gegenläufigen Prozessen beeinflusst. Viele kleine Tropfengrößenfraktionen sind bereits verdampft und der mittlere Tropfendurchmesser nimmt zu (siehe Abbildung 7-10 rechts). Da die Verdampfung abhängig ist von  $d_{Tr}^2$ , nimmt die Verdampfungsrate dadurch ab. Zusätzlich nimmt nach der Oxidationszone die Gastemperatur und die Relativgeschwindigkeit zwischen Tropfen und Gasphase ab, wodurch die Verdampfungsrate ebenfalls abnimmt. Da die Tropfen langsamer werden, nimmt die Verweilzeit und damit auch die Verdampfungsrate zu. Die Bewertung unterschiedlicher Einflussfaktoren auf den Brennstoffumsatz findet in Kapitel 7.2 statt.

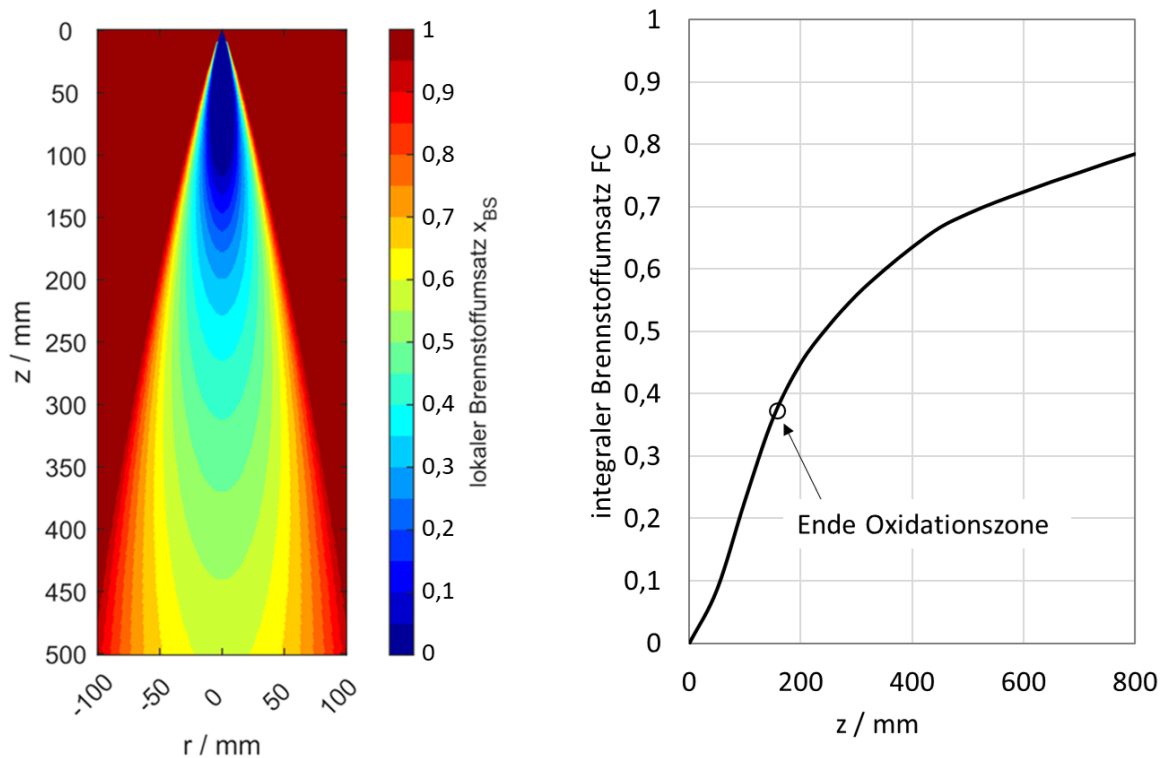


Abbildung 7-12 Simulationsergebnisse aus dem Validierungsversuch (2Ph-FJM). Links: Lokaler Brennstoffumsatz nach Gleichung (6-42). Rechts: Integraler Brennstoffumsatz in Abhängigkeit vom Düsenabstand nach Gleichung (6-45) und Ende der Oxidationszone, an der axialen Position, an dem Sauerstoff vollständig abreagiert ist.

Im 2Ph-FJM wird davon ausgegangen, dass das lokale Verhältnis von Zerstäubungsmedium und Flüssigkeitstropfen  $m_{ZM}/m_{Tr}$  dem GLR an der Düse entspricht (siehe Kapitel 6). Für die in Kapitel 5 untersuchten Betriebsbedingungen mit Düse 3 im Unterregime Super-Pulsieren ist diese Annahme gerechtfertigt. Für die Betriebsbedingungen mit Düse 1 und Düse 2 im Unterregime Pulsieren wird diese Annahme nur eingeschränkt erfüllt. Die Auswertung in Kapitel 5.4 zeigt, dass in Kaltversuchen mit Düse 1 und 2 die Tropfen in radiale Richtung geschleudert werden, sodass eine Entmischung von Brennstofftropfen und Vergasungsmedium stattfindet. Für Düse 1 und 2 kann die Hauptreaktionszone somit weniger akkurat beschrieben werden. Im Validierungsversuch wurde Düse 1 verwendet. Nach den Ergebnissen aus Kapitel 5.4 wird im 2Ph-FJM der Anteil der Tropfen überschätzt, der durch die heiße Flammenzone fliegt. Damit könnte die Verdampfungsrates insgesamt überschätzt werden. Um das Modell zu verbessern, kann das lokale Verhältnis von Zerstäubungsmedium und Flüssigkeitstropfen, wie in Kapitel 5.4 gezeigt, unter atmosphärischen Bedingungen bestimmt werden. Das Verhältnis kann als weiterer Modellparameter für das 2Ph-FJM aufgenommen werden.

Zusammenfassend zeigt die Simulation des Validierungsversuchs mit dem 2Ph-FJM gute Übereinstimmung mit experimentellen Daten. Die Struktur und die Ausdehnung der Flamme können in guter Näherung wiedergegeben werden. Die berechneten Strömungs-, Temperatur- und Konzentrationsfelder der Gasphase zeigen plausible Verläufe. Der simulierte Verlauf der Geschwindigkeit von Tropfen entlang der Achse kann mit PDA-Messdaten bestätigt werden. Die absolute Geschwindigkeit wird leicht überschätzt. Die Zunahme des mittleren Sauterdurchmessers  $d_{32}$  entlang der Achse kann ebenfalls experimentell bestätigt werden. Die absolute Größe des  $d_{32}$  zeigt für größere axiale

Abstände Abweichungen. Insgesamt kann das 2Ph-FJM für einen Versuch am atmosphärischen Flugstromvergaser REGA validiert werden. Im folgenden Kapitel 7.2 wird das 2Ph-FJM genutzt, um Einflüsse der Größe von Kontrollvolumina auf das Berechnungsergebnis sowie Einflüsse von Tropfendurchmesser und Düsendurchmesser auf den Gesamtprozess in der Hauptreaktionszone zu untersuchen.

## 7.2 Einfluss ausgewählter Größen auf die Hauptreaktionszone

### 7.2.1 Einfluss der Größe der Kontrollvolumina

Bei fluiddynamischen Modellen kann die Größe der Kontrollvolumina Einfluss auf die Güte der Simulationsergebnisse haben. In diesem Kapitel wird dieser Einfluss untersucht. Grundsätzlich nimmt die Qualität der Ergebnisse zu, je feiner das Rechengitter gewählt wird. Allerdings nimmt durch ein feineres Rechnungsgitter auch die Rechenzeit der Simulation zu. Im 2Ph-FJM ist der Strahlbereich in Kontrollvolumina unterteilt, in denen jeweils die Berechnungen durchgeführt werden, (siehe Abbildung 6-1). Die Gesamthöhe des Strahlbereichs beträgt  $200 \text{ z}/d_{aq} = 1310 \text{ mm}$ . In radiale Richtung wird der Strahlbereich  $0 < \alpha < 2/3 \cdot \pi$  berechnet. Aufgrund der Rotationssymmetrie können die Ergebnisse auf  $-2/3 \cdot \pi < \alpha < 0$  übertragen werden. In einer ersten Untersuchung (A) in diesem Kapitel werden die drei Geometrien der Kontrollvolumina in Tabelle 7-2 genutzt. Der Strahlbereich ist für alle drei Simulationen gleich groß. Simulation A1 wird mit den kleinsten Kontrollvolumina durchgeführt. Simulation A3 wurde mit den größten Kontrollvolumina durchgeführt. Ziel der Untersuchung A ist eine Standardgröße mit ausreichend kleinen Kontrollvolumina festzulegen, die im Rahmen der Arbeit genutzt wird. Der Strahlbereich wird in axiale Richtung für A1 in 801 und für A2 und A3 in 201 Kontrollvolumina unterteilt. In radiale Richtung wird der Strahlbereich für A1 in 801, für A2 in 401 und für A3 in 101 Kontrollvolumina unterteilt. Damit ist die Anzahl der Kontrollvolumina im Vergleich zu A1 für A2 um circa Faktor 8 kleiner und für A3 um Faktor 32 kleiner.

Tabelle 7-2 Simulationsparameter der Variation von Höhe  $\Delta z$  und Breit  $\Delta \alpha$  der Winkelsegmente (=Kontrollvolumina) und die resultierende Anzahl von Kontrollvolumina im Simulationsbereich

Simulation	Höhe $\frac{\Delta z}{mm}$	Breite $\frac{\Delta \alpha}{\pi/1000}$	Anzahl Kontrollvolumina
A1	1,625	0,83	801 x 801 = 641 601
A2	6,5	1,67	201 x 401 = 80 601
A3	6,5	6,67	201 x 101 = 20 301

Abbildung 7-13, Abbildung 7-14 und Abbildung 7-15 zeigen die berechneten Temperaturen der Gasphase, der lokale Brennstoffumsatz sowie Geschwindigkeit der Tropfen und der Gasphase entlang der Achse für die drei Simulationen für A1 – A3. In Abbildung 7-13 und Abbildung 7-14 ist der Unterschied in der Größe der Kontrollvolumina in der Struktur der Abbildungen zu erkennen. Die Form und die absoluten Werte der Temperaturfelder und des lokalen Umsatzes sind näherungsweise gleich. In Abbildung 7-15 zeigt sich ein Unterschied der Geschwindigkeit der Tropfen im Bereich unmittelbar nach der Düse. Für A1 ist die

Beschleunigung der Tropfen steiler als für A2 und A3. Aus numerischen Gründen wird im 2Ph-FJM ein Geschwindigkeitszuwachs pro Kontrollvolumen von maximal 10 m/s zugelassen. Diese Limitierung ist trotz des second-order-upwind-Ansatzes (siehe Kapitel 6.4) notwendig, um bei großen Kontrollvolumina ein Überschwingen der Tropfengeschwindigkeit zu vermeiden. Für A1 greift diese Limitierung nicht, da die Beschleunigung kleiner als 10 m/s pro Kontrollvolumen ist. Die maximale Geschwindigkeit von kleinen Tropfengrößenfraktionen ist dadurch für A2 und A3 geringfügig kleiner als für A1. Der Einfluss auf die gemittelten Geschwindigkeiten, die Temperatur und den Brennstoffumsatz ist vernachlässigbar. Insgesamt zeigte sich für die drei unterschiedlichen Größen der Kontrollvolumina ein geringer Einfluss auf die Simulationsergebnisse. Da sich bei der Größe der Kontrollvolumina keine relevante Veränderung zwischen den Simulationen A1 bis A3 gezeigt hat, ist für kleinere Kontrollvolumen als bei A1 ebenfalls keine Verbesserung der Simulationsergebnisse zu erwarten. Als Standardgröße wurde daher die Größe der Kontrollvolumina von Simulation A1 (siehe Tabelle 7-2) gewählt, mit der bereits die Simulationen in Kapitel 7.1 und alle weiteren Simulationen durchgeführt wurden.

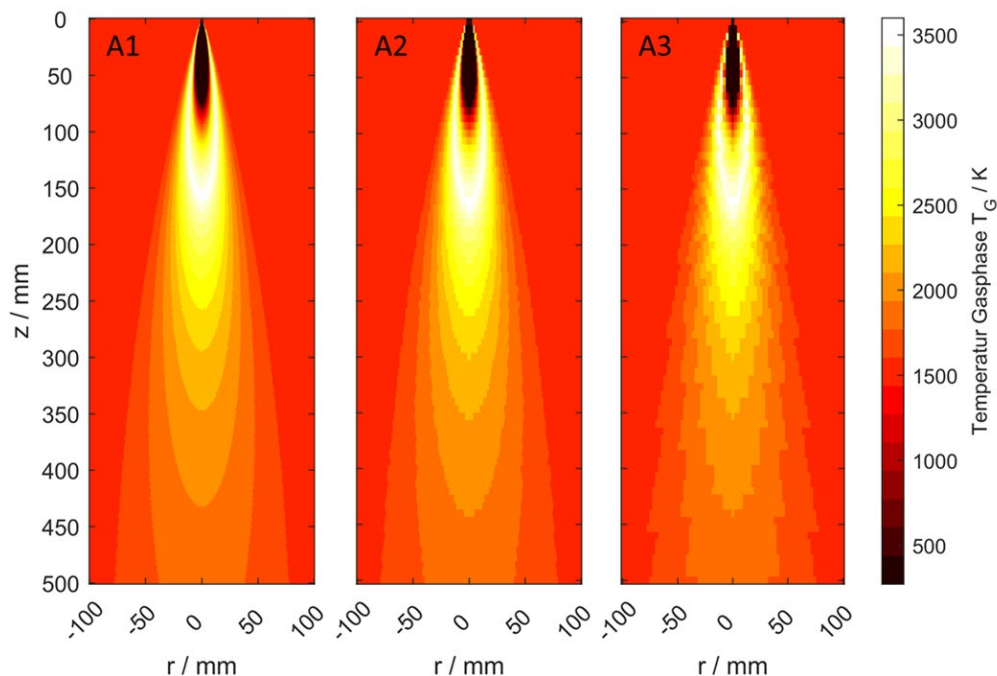


Abbildung 7-13 Temperatur der Gasphase berechnet mit kleinen (A1), mittleren (A2) und großen (A3) Kontrollvolumina.



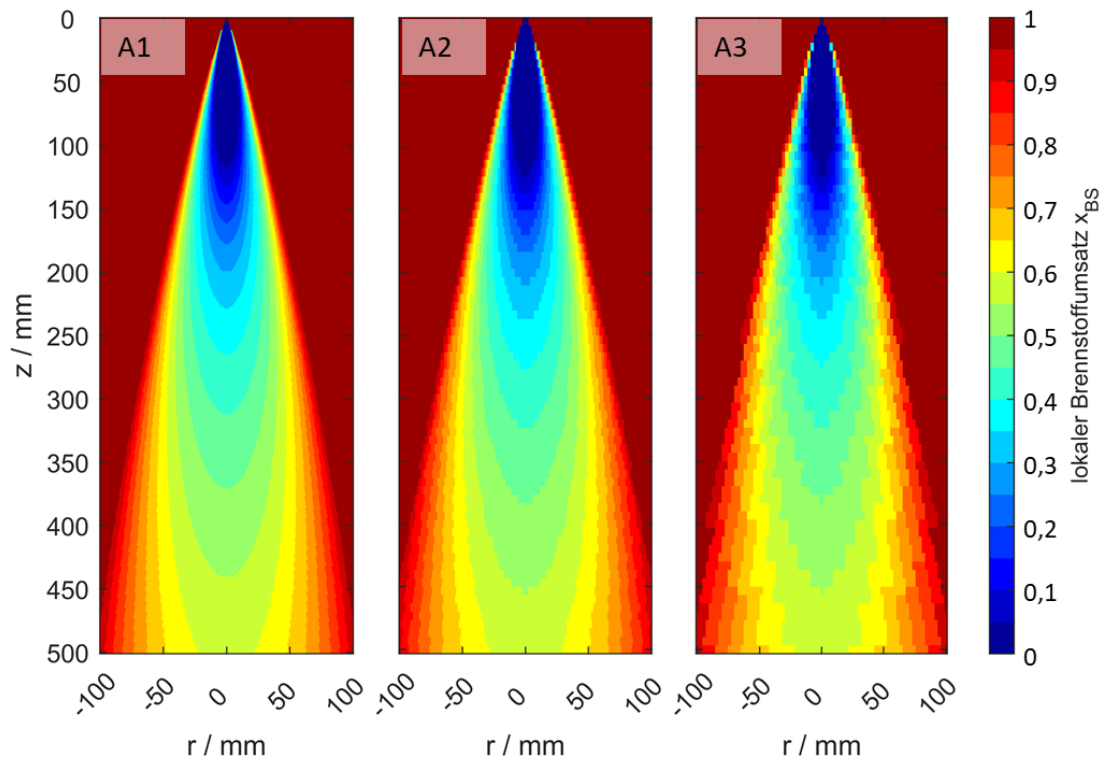


Abbildung 7-14 Lokaler Brennstoffumsatz berechnet mit kleinen (A1), mittleren (A2) und großen (A3) Kontrollvolumina.

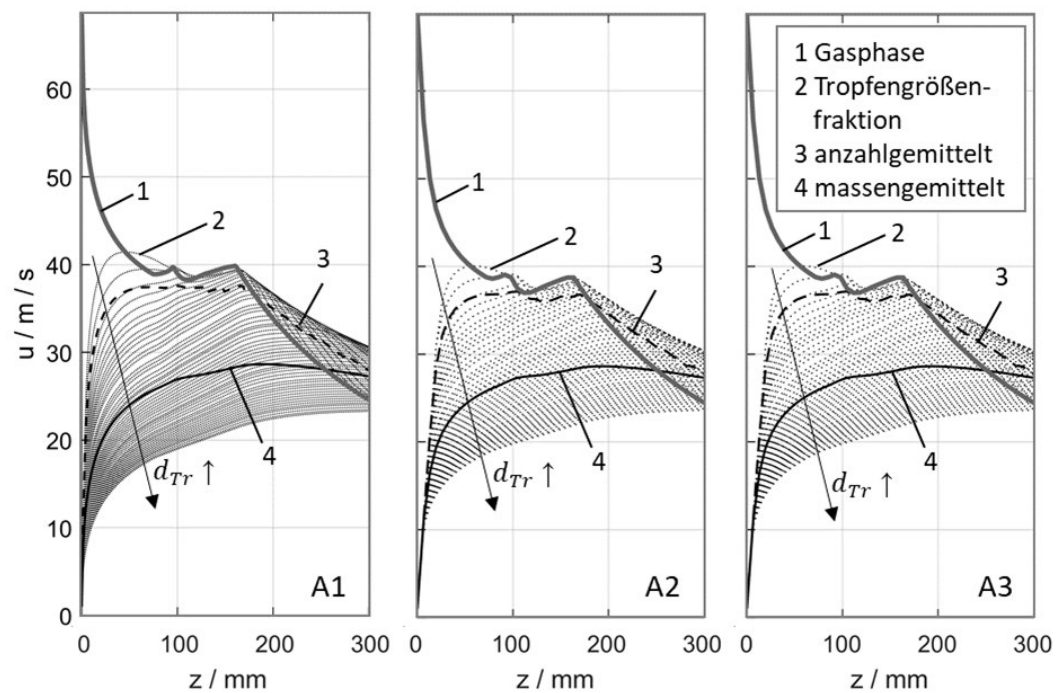


Abbildung 7-15 Geschwindigkeit der Gasphase und der Tropfen berechnet mit kleinen (A1), mittleren (A2) und großen (A3) Kontrollvolumina.

### 7.2.2 Einfluss der Tropfengröße

In drei weiteren Untersuchungen (B, C, D) mit dem 2Ph-FJM wird der Einfluss der Tropfengröße und der Düsengröße auf die Hauptreaktionszone analysiert. Dazu wird jeweils der Validierungsversuch aus Kapitel 7.1 als Basis-Simulation verwendet und die zu untersuchende Größe variiert. Die Skalierungsfaktoren betragen jeweils: 0,2; 0,5; 0,75; 0,9; 1; 1,1; 1,25; 1,5; 2. Damit erhalten die Simulationen B5, C5 und D5 jeweils den Skalierungsfaktor 1 und sind damit identisch zur Basis-Simulation.

In der Untersuchung B werden die Tropfengrößen an der Düse aus der Basis-Simulation (siehe Abbildung 5-9) jeweils mit dem Skalierungsfaktor multipliziert, sodass sich als Eingangstropfengröße für die Simulationen B1 – B9 die mittleren Sauterdurchmesser aus Tabelle 7-3 ergeben. Alle weiteren Größen sind identisch mit den Größen in der Basis-Simulation.

Tabelle 7-3 Mittlere Sauterdurchmesser  $d_{32}$  bei Variation der Tropfengrößenfraktionen am Düsenaustritt.

<b>Simulation</b>	<b><math>\underline{d_{32}}</math> <math>\mu m</math></b>
B1	17
B2	42
B3	63
B4	75
B5 (Basis)	84
B6	92
B7	105
B8	126
B9	167

Abbildung 7-16 zeigt den Einfluss der Tropfengröße auf den integralen Brennstoffumsatz. Zusätzlich zum integralen Brennstoffumsatz ist das Ende der Oxidationszone für alle Simulationen B1 -B9 eingezeichnet. Bei kleinen Brennstofftropfen (B1) ist der Brennstoff nach  $z \approx 350$  mm vollständig umgesetzt. Bei großen Tropfen (B9) ist auch nach  $z = 800$  mm der Brennstoffumsatz bei  $FC < 0,5$ . Die Eingangstropfengröße hat damit erheblichen Einfluss auf den Brennstoffumsatz. Zur weiteren Analyse der Auswirkung auf den Brennstoffumsatz sind in Abbildung 7-17 bis Abbildung 7-19 Simulationsergebnisse mit den kleinsten Tropfengrößen (B1) und den größten Tropfengrößen (B9) als Extremwerte gezeigt.



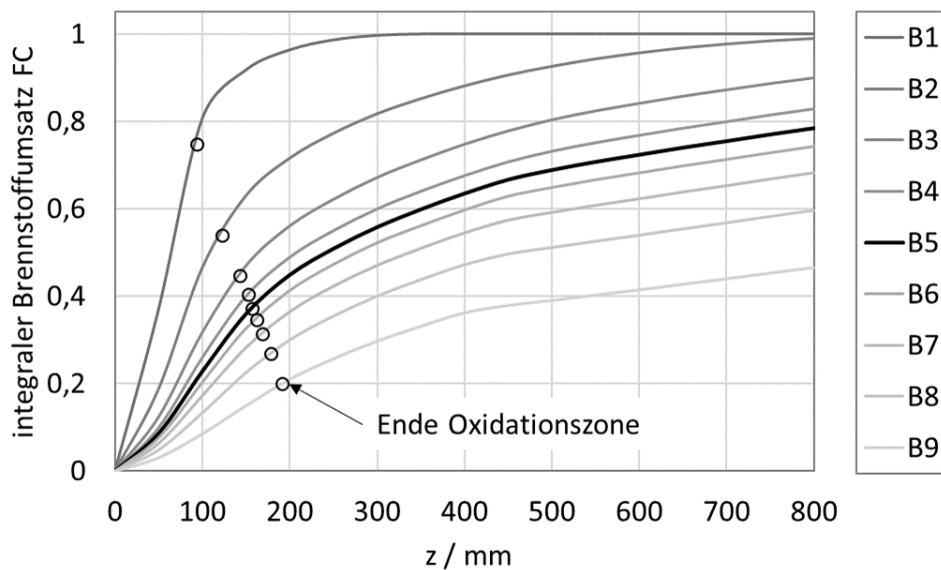


Abbildung 7-16 Integraler Brennstoffumsatz und Ende der Oxidationszone bei Variation der Eingangstropfengröße in den Simulationen B1 – B9.

Abbildung 7-17 zeigt den Verlauf der Geschwindigkeit der Gasphase und der Tropfen für kleine (B1) und große Tropfen (B9). In Abbildung 3-18 ist zu sehen, dass auf der Achse bei beiden Simulationen (B1, B9) zunächst ein Kernbereich bis  $z \approx 75$  mm vorliegt, in dem die Tropfen inert vorliegen. Im Anschluss heizen die Tropfen in B1 sehr schnell auf und Verdampfung setzt ein. Dadurch wird Brennstoffdampf freigesetzt, der mit Sauerstoff aus dem Vergasungsmedium reagiert. Der Sauerstoff aus dem Vergasungsmedium ist daher bei B1 wesentlich früher abreagiert und die Flammenlänge ist für B1 wesentlich kürzer im Vergleich zu B9 (siehe Abbildung 7-19). Da bei B1 die Reaktion mit Sauerstoff hauptsächlich in einem sehr kurzen Bereich bei  $80 \text{ mm} < z < 120 \text{ mm}$  stattfindet, gibt es eine starke Beschleunigung der Gasphase und damit auch der Tropfen. Die Tropfen bei B1 haben damit eine sehr kurze Verweilzeit in der heißen Flammenzone, da die Flammenzone kurz ist und die Geschwindigkeit der Tropfen hoch ist. Kleine Tropfen folgen der Gasphase aufgrund der geringen Trägheit sehr schnell, was zu einer geringen Relativgeschwindigkeit zwischen Tropfen und Gasphase führt. Durch die geringe Relativgeschwindigkeit von kleinen Tropfen ist die Wärmeübertragung zwischen Gasphase und Tropfen zur Erhitzung und Verdampfung der Gasphase gering. Trotz der geringen Relativgeschwindigkeit (Abbildung 7-17) und der geringen Verweilzeit der Tropfen in der heißen Flammenzone verdampfen die kleinen Tropfen bei B1 erheblich schneller als große Tropfen (B9) (siehe Abbildung 3-18). Die Tropfengröße beziehungsweise die Zerstäubung ist folglich der dominierende Einflussfaktor für die Verdampfung. Verweilzeit der Tropfen und Relativgeschwindigkeit zwischen Gasphase und Tropfen spielen im Vergleich dazu eine untergeordnete Rolle.

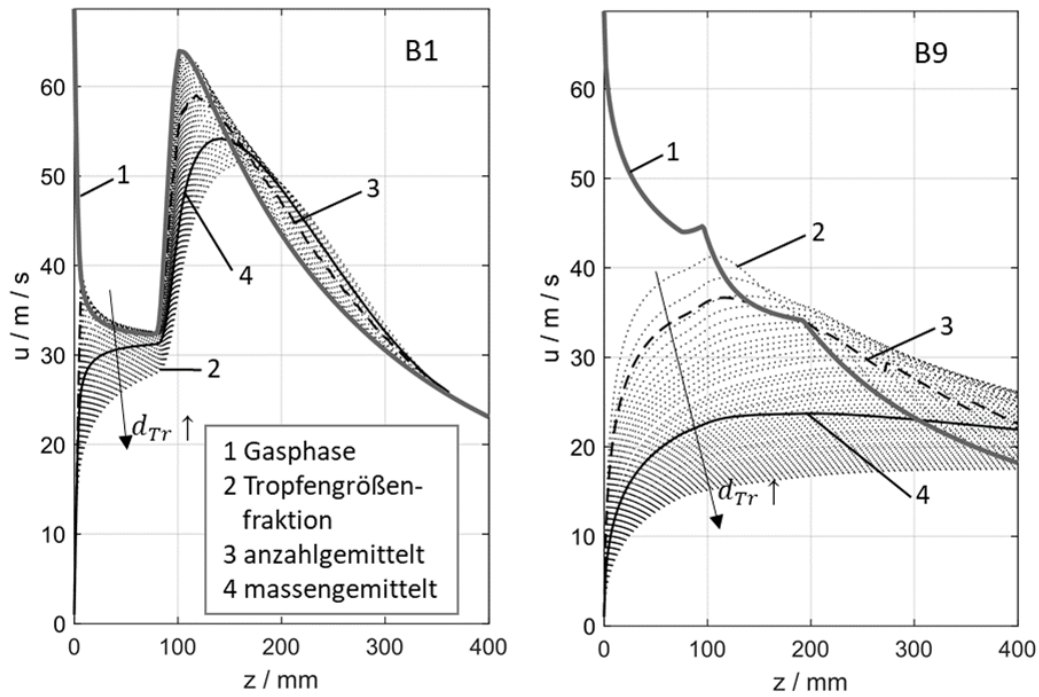


Abbildung 7-17 Verlauf der Geschwindigkeit der Gasphase und der Tropfen entlang der Achse bei Variation der Eingangstropfengröße für die Simulationen B1 ( $d_{32} = 17 \mu\text{m}$ ) und B9 ( $d_{32} = 167 \mu\text{m}$ ).

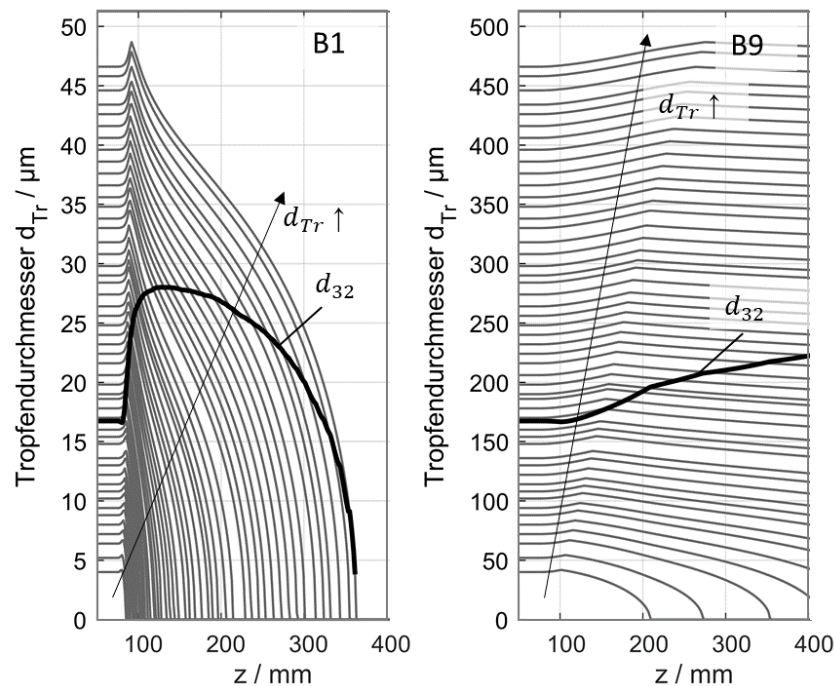


Abbildung 7-18 Verlauf der Tropfendurchmesser entlang der Achse bei Variation der Eingangstropfengröße für die Simulationen B1 ( $d_{32} = 17 \mu\text{m}$ ) und B9 ( $d_{32} = 167 \mu\text{m}$ ).

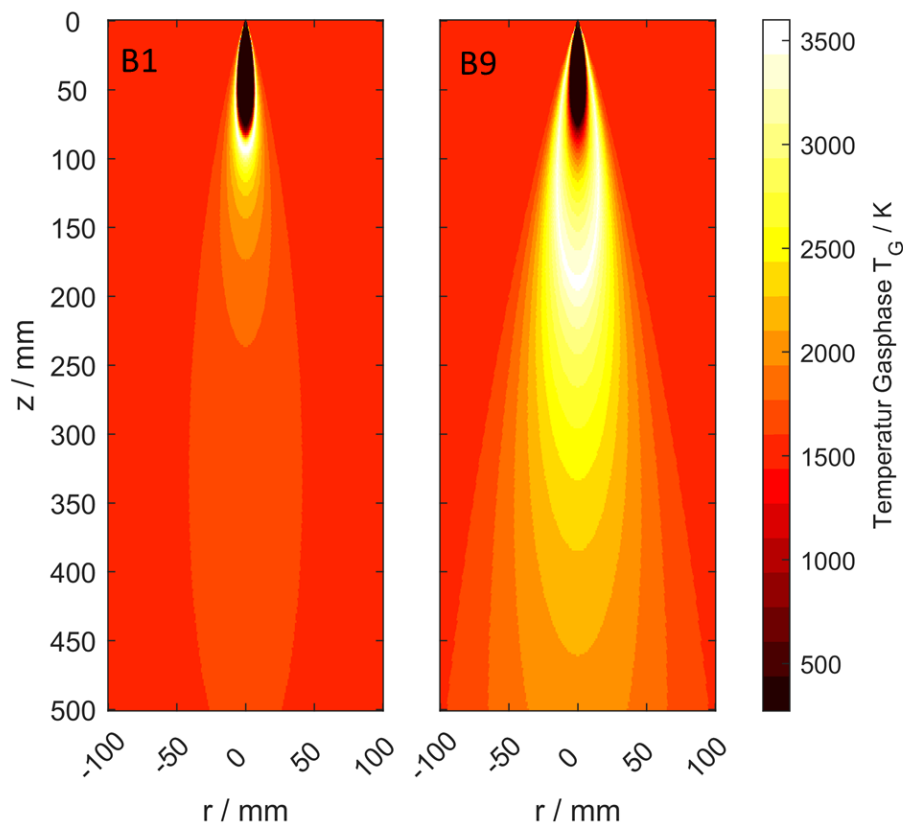


Abbildung 7-19 Temperatur der Gasphase bei Variation der Eingangstropfengröße für die Simulationen B1 ( $d_{32} = 17 \mu\text{m}$ ) und B9 ( $d_{32} = 167 \mu\text{m}$ ).

### 7.2.3 Einfluss der Düsengröße

In zwei weiteren Untersuchungen (C, D) werden in Simulation C1 - C9 beziehungsweise D1 – D9 die Größe des Gasspalts an der Düse variiert. Dazu wird der äquivalente Düsendurchmesser  $d_{\text{äq}}$  der Basis-Simulationen (C5 beziehungsweise D5) mit den Skalierungsfaktoren von: 0,2; 0,5; 0,75; 0,9; 1; 1,1; 1,25; 1,5; 2 jeweils multipliziert. Der Gasspalt wird jeweils so angepasst, dass sich die berechneten äquivalenten Düsendurchmesser  $d_{\text{äq}}$  ergeben. Für C1-C9 sind alle weiteren Größen mit den Größen in der Basis-Simulation C5 identisch. Durch die Variation des Gasspaltes bei konstantem Massenstrom des Vergasungsmediums, wird die Austrittsgeschwindigkeit des Vergasungsmediums an der Düse verändert. Für C1-C9 sind die äquivalenten Düsendurchmesser  $d_{\text{äq}}$  und die Gasgeschwindigkeiten  $u_{g,0}$  an der Düse in Tabelle 7-4 aufgeführt. Für C1 ergibt sich für  $u_{g,0} = 1717 \text{ m/s}$  eine höhere Geschwindigkeit an der Düse als die Schallgeschwindigkeit. Diese Simulation ist technisch nicht umsetzbar und daher nur als theoretische Betrachtung zu sehen.

Um den Einfluss des äquivalenten Düsendurchmessers vom Einfluss der Gasgeschwindigkeit zu trennen, wird in der Untersuchung D der Massenstrom des Vergasungsmediums  $\dot{m}_{g,0}$  so angepasst, dass sich an der Düse für alle Simulationen D1-D9 die gleichen Gasgeschwindigkeiten an der Düse  $u_{g,0}$  ergibt. Um für alle Simulationen auch GLR konstant zu halten, wird der Massenstrom des Brennstoffs  $\dot{m}_{Tr,0}$  ebenfalls entsprechend angepasst. Dadurch wird in D1-D9 die Brennstoffgeschwindigkeit an der Düse variiert, was keinen relevanten Einfluss auf die Simulationsergebnisse hat, da der

Impulsstrom des Brennstoffs bei D1-D9 vernachlässigbar klein ist im Vergleich zum Impulsstrom des Vergasungsmediums. Tabelle 7-5 enthält für Simulation D1-D9 die äquivalenten Düsendurchmesser  $d_{\text{äq}}$  und die Massenströme von Vergasungsmedium  $\dot{m}_{g,0}$  und Brennstoff  $\dot{m}_{Tr,0}$  aus der Düse.

Tabelle 7-4 Parameter für die Simulationen C1-C9 zur Variation des Gasspalts der Düse und die resultierende Austrittsgeschwindigkeit von Vergasungsmedium an der Düse  $u_{g,0}$ .

Simulation	$\frac{d_{\text{äq}}}{\text{mm}}$	$\frac{u_{g,0}}{\text{m/s}}$
C1	1,3	(1717)
C2	3,3	275
C3	4,9	122
C4	5,9	85
C5 (Basis)	6,5	69
C6	7,2	57
C7	8,2	44
C8	9,8	31
C9	13,1	17

Bei einem reagierenden Einphasen-Freistrahler nimmt die Länge der Oxidationszone linear mit dem Düsendurchmesser zu, da Entrainment von Gas aus der Umgebung linear abhängig vom Düsendurchmesser ist (siehe Gleichung (3-1)). Bei einem Zweiphasen-Freistrahler wird die Länge der Oxidationszone zusätzlich durch die verdampfenden Brennstofftropfen überlagert. Abbildung 7-20 links zeigt die Länge der Oxidationszone bei der Variation des äquivalenten Düsendurchmessers (C1-C9) im reagierenden Zweiphasen-Freistrahler. Abbildung 7-21 zeigt die Temperaturverteilung für einen kleinen (links: C2) und einen großen (rechts: C9) äquivalenten Düsendurchmesser. In Abbildung 7-21 links wurde C2 als Beispiel für einen kleinen Düsendurchmesser verwendet, da C1 aufgrund der Überschall-Geschwindigkeit an der Düse nicht technisch umsetzbar ist.

Für die Simulation C2 ist die Flammenzone kurz, da  $d_{\text{äq}}$  klein ist (siehe Abbildung 7-21 links) und Gasgeschwindigkeiten an der Düse hoch (siehe Tabelle 7-4). Dadurch ist für C2 die Verweilzeit der Tropfen in der heißen, kurzen Flammenzone gering. Am Ende der Oxidationszone liegt der Brennstoffumsatz bei  $FC = 0,15$  (siehe Abbildung 7-20 rechts). Damit gibt es in der Oxidationszone in der Simulation C2 kaum Überlagerung durch verdampfende Tropfen und die Länge der Oxidationszone nimmt analog zum reagierenden Einphasen-Freistrahler näherungsweise linear mit  $d_{\text{äq}}$  zu.

Die hohe Geschwindigkeit der Gasphase an der Düse für C2 bedingt zum einen eine hohe Relativgeschwindigkeit zwischen Gasphase und Tropfen (siehe Abbildung 7-22), was die Verdampfung begünstigt und zum anderen eine große Beschleunigung der Tropfen, was eine kurze Verweilzeit der Tropfen verursacht und die Verdampfung hemmt. Außerdem ist das Temperaturfeld, welches die Tropfen durchlaufen, aufgrund der kurzen Flammenzone

vergleichsweise kalt (siehe Abbildung 7-21), was ebenfalls die Verdampfung hemmt. Da der integrale Brennstoffumsatz FC bei C2 auch nach  $z = 800\text{mm}$  sehr gering ist (siehe Abbildung 7-20 rechts), ist unter den gegebenen Bedingungen der Einfluss der Relativgeschwindigkeit auf die Verdampfung gering.

Für C3 – C9 nimmt der integrale Brennstoffumsatz bis zum Ende der Oxidationszone zu. Die Länge der Oxidationszone nimmt nicht weiter linear zu, sondern knickt nach unten ab, da der verdampfende Brennstoff die Oxidationszone verkürzt (siehe Abbildung 7-20 links). Für große Düsendurchmesser (C9) ist die Geschwindigkeit des Vergasungsmediums an der Düse gering. Die Tropfen werden nur wenig beschleunigt, sodass eine lange Verweilzeit der Tropfen im düsennahen Bereich besteht, wo Brennstoff verdampft und mit Sauerstoff reagiert. Dadurch verkürzt sich die Oxidationszone. Dennoch ist der äquivalente Düsendurchmesser  $d_{\text{äq}}$  die dominierende Größe für die Länge der Oxidationszone.

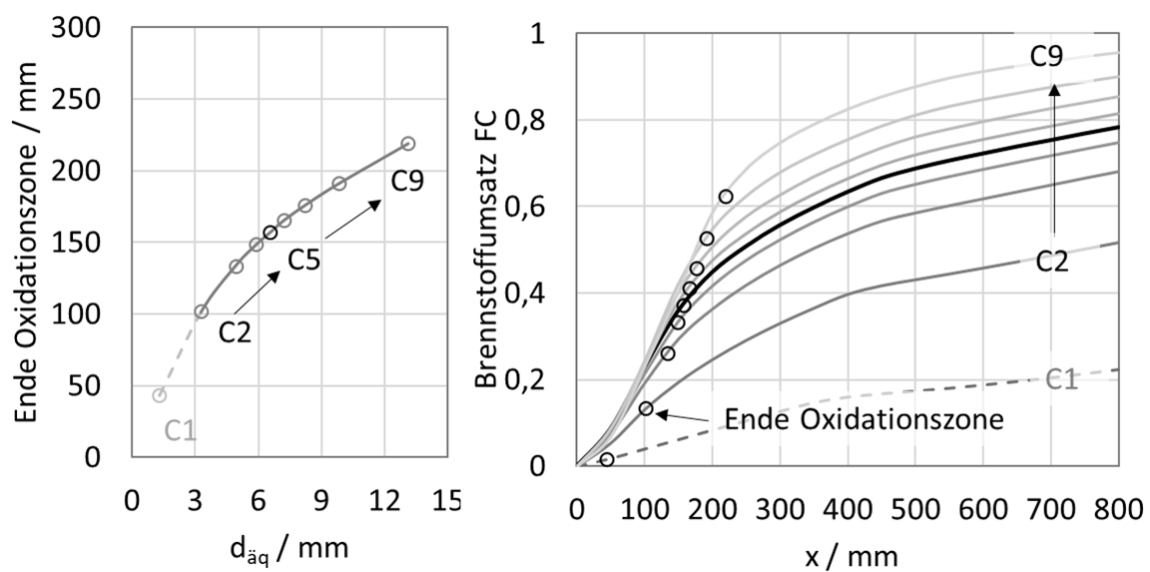


Abbildung 7-20 Ende der Oxidationszone (links) und integraler Brennstoffumsatz (rechts) bei der Variation des äquivalenten Düsendurchmessers in den Simulationen C1 – C9.

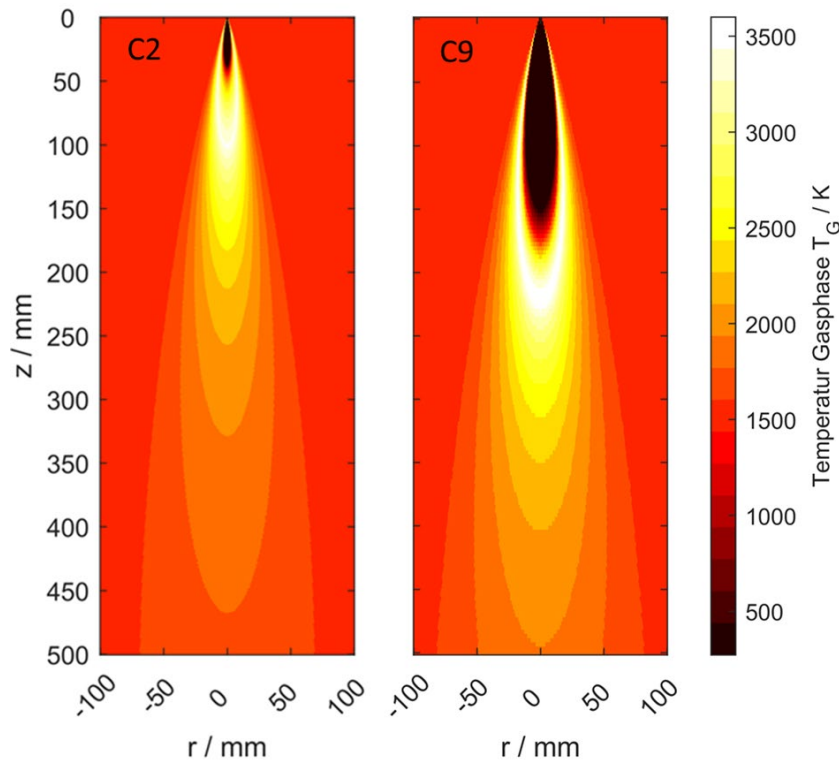


Abbildung 7-21 Temperatur der Gasphase bei Variation des äquivalenten Düsendurchmessers für die Simulationen C2 ( $d_{\text{äq}} = 3,3$  mm) und C9 ( $d_{\text{äq}} = 13,1$  mm).

Durch die Reaktion in der Gasphase gibt es eine zusätzliche Impulsquelle, die die Gasphase beschleunigt. Die Beschleunigung findet hauptsächlich in der heißesten Zone statt, die dem Ende Oxidationszone ( $\lambda_{\text{abs}} = 1$ ) entspricht. Für C2 ist das Ende Oxidationszone bei  $z \approx 100$  mm. Bei C9 ist das Ende der Oxidationszone bei  $z \approx 220$  mm. Die in der Oxidationszone freigesetzte Wärmemenge ist für beide Simulationen (C2, C9) etwa gleich, da die Sauerstoffmenge an der Düse gleich ist. Die Impulsquelle, die die Gasphase beschleunigt, ist daher bei beiden Simulationen ebenfalls etwa gleich groß. Die Gasphase wird durch Entrainment abgebremst. Dabei wird etwa jeweils nach circa drei  $d_{\text{äq}}$  einmal der Gasmassenstrom an der Düse in den Freistrahle eingemischt. Da  $d_{\text{äq}}$  bei C2 deutlich kleiner ist als bei C9 (siehe Tabelle 7-4), findet innerhalb einer kurzen Strecke in axiale Richtung sehr viel Entrainment statt. Die Beschleunigung durch die zusätzliche Impulsquelle ist gering, verglichen mit dem Abbremsen der Gasphase durch Entrainment. Daher wird bei C2 im Bereich  $50 \text{ mm} < z < 100 \text{ mm}$  durch die chemische Reaktion das Abbremsen der Gasphase verlangsamt. Bei C9 hingegen findet im Bereich  $180 \text{ mm} < z < 220 \text{ mm}$  eine Beschleunigung der Gasphase statt, da die Beschleunigung durch die zusätzliche Impulsquelle groß ist verglichen mit dem Abbremsen der Gasphase durch Entrainment (siehe Abbildung 7-22).

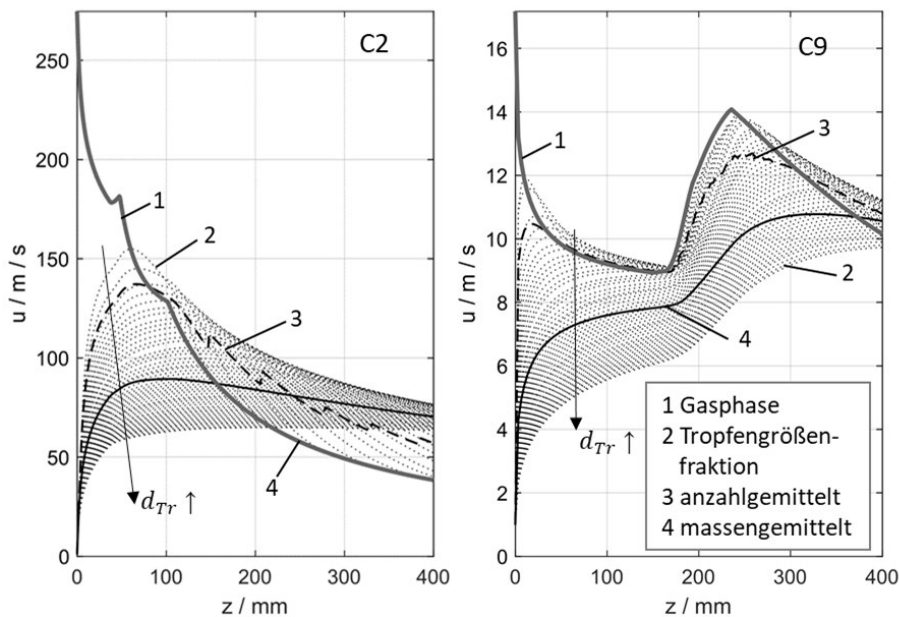


Abbildung 7-22 Verlauf der Geschwindigkeit der Gasphase und der Tropfen entlang der Achse bei Variation des äquivalenten Düsendurchmessers für die Simulationen C2 ( $d_{\text{äq}} = 3,3$  mm) und C9 ( $d_{\text{äq}} = 13,1$  mm).

In der Untersuchung D werden die äquivalenten Düsendurchmesser wie in C variiert. Zusätzlich wird in D der Massenstrom von Vergasungsmedium so angepasst, dass sich für alle Simulationen D1 – D9 dieselben Geschwindigkeiten des Vergasungsmediums an der Düse ergeben. Der Massenstrom Brennstoff wird so angepasst, dass GLR für alle Simulationen in D konstant bleibt. Damit ist der Durchsatz von Brennstoff für D1 deutlich geringer als für D9. Tabelle 7-5 enthält die äquivalenten Düsendurchmesser  $d_{\text{äq}}$  sowie die Massenströme von Vergasungsmedium und Brennstoff für die Simulationen D1 – D9. D5 entspricht der Basis-Simulation.

Tabelle 7-5 Parameter für die Simulationen D1-D9 mit Variation des Gasspalts der Düse bei konstanter Gasaustrittsgeschwindigkeit und konstantem GLR.

Simulation	$\frac{d_{\text{äq}}}{\text{mm}}$	$\frac{\dot{m}_{Tr,0}}{\text{kg/h}}$	$\frac{\dot{m}_{g,0}}{\text{kg/h}}$
D1	1,3	0,5	0,4
D2	3,3	3,1	2,6
D3	4,9	7,0	5,8
D4	5,9	10,1	8,3
D5 (Basis)	6,5	12,4	10,3
D6	7,2	15,0	12,5
D7	8,2	19,4	16,1
D8	9,8	27,9	23,2
D9	13,1	49,7	41,2

Abbildung 7-23 rechts zeigt den integralen Brennstoffumsatz sowie das Ende der Oxidationszone für die Simulationen D1 – D9. Der integrale Brennstoffumsatz liegt für D1 – D9 im Bereich  $0,18 < FC < 0,45$ . Die Länge der Oxidationszone nimmt annähernd linear mit  $d_{\text{äq}}$  zu. Der Einfluss des Brennstoffumsatzes auf die Länge der Oxidationszone ist gering im Vergleich zum Einfluss des  $d_{\text{äq}}$  (siehe Abbildung 7-23 links).

Bei D1 ist die Geschwindigkeit der Tropfen gering (siehe Abbildung 7-25) und die Verweilzeit der Tropfen entsprechend hoch. Das Temperaturfeld, das die Tropfen durchlaufen ist aufgrund der kurzen Oxidationszone kalt (siehe Abbildung 7-24). Bei D9 ist die Verweilzeit gering und das Temperaturfeld heiß. Bei  $z = 800$  mm liegt der integrale Brennstoffumsatz von D1 über dem von D9. Daher ist unter den gegebenen Bedingungen der Einfluss der Verweilzeit auf den Brennstoffumsatz größer als die Temperatur der umgebenen Gasphase der Tropfen. Der Unterschied zwischen D1 (viel Verweilzeit, geringe Temperatur) zu D9 (geringe Verweilzeit, hohe Temperatur) ist deutlich weniger ausgeprägt als der Unterschied von C1 (geringe Verweilzeit, geringe Temperatur, hohe Relativgeschwindigkeit) zu C9 (große Verweilzeit, hohe Temperatur, geringe Relativgeschwindigkeit).

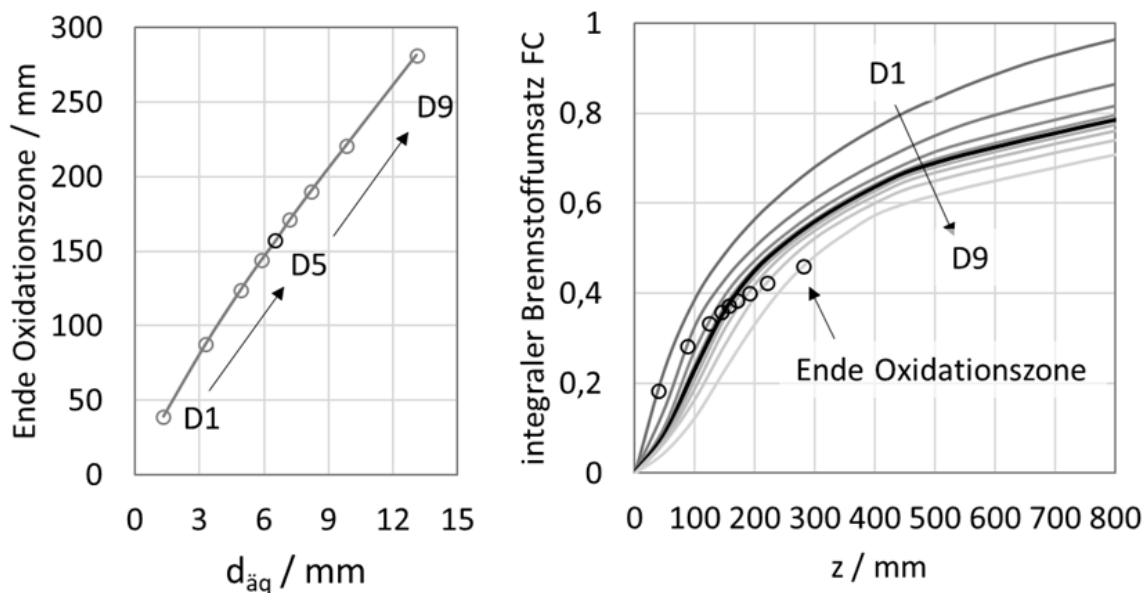


Abbildung 7-23 Ende der Oxidationszone (links) und integraler Brennstoffumsatz (rechts) bei der Variation des äquivalenten Düsendurchmessers bei konstanter Gasgeschwindigkeit und konstantem GLR an der Düse in den Simulationen D1 – D9.



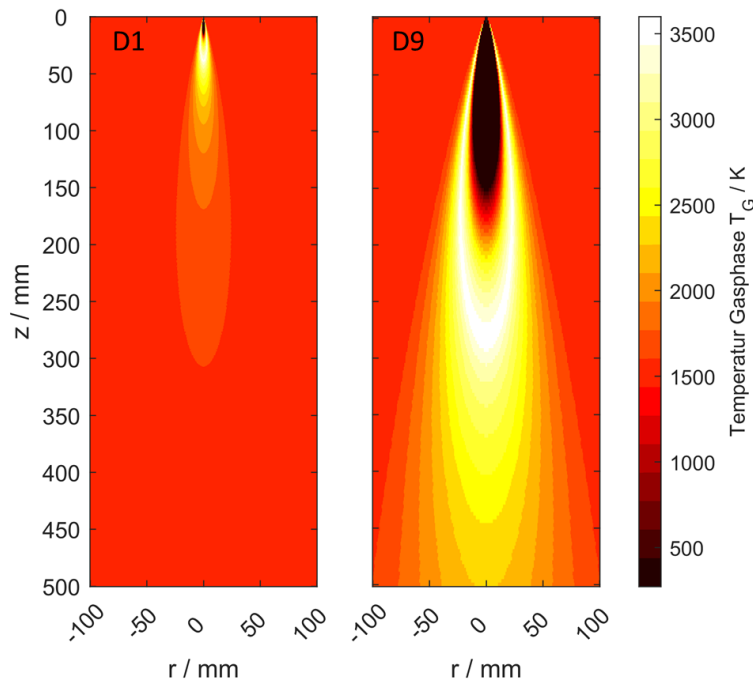


Abbildung 7-24 Temperatur der Gasphase bei Variation des äquivalenten Düsendurchmessers bei konstanter Gasgeschwindigkeit und konstantem GLR an der Düse für die Simulationen D1 ( $d_{\text{äq}} = 1,3 \text{ mm}$ ) und D9 ( $d_{\text{äq}} = 13,1 \text{ mm}$ ).

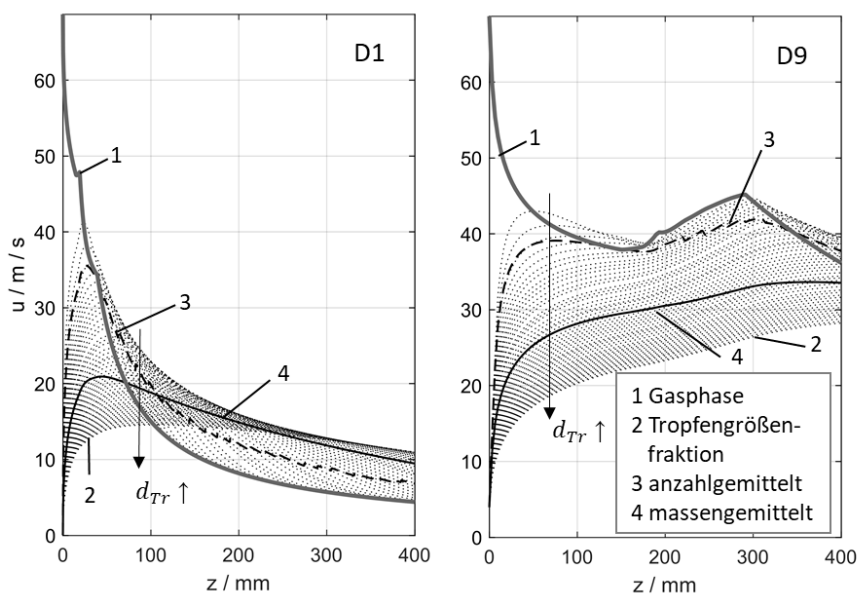


Abbildung 7-25 Verlauf der Geschwindigkeit der Gasphase und der Tropfen entlang der Achse bei Variation des äquivalenten Düsendurchmessers bei konstanter Gasgeschwindigkeit und konstantem GLR an der Düse für die Simulationen D1 ( $d_{\text{äq}} = 1,3 \text{ mm}$ ) und D9 ( $d_{\text{äq}} = 13,1 \text{ mm}$ ).

Zusammenfassend konnte in den Untersuchungen B, C und D in Kapitel 7.2.2 und 7.2.3 unter den gewählten Bedingungen festgestellt werden, dass der Einfluss der Tropfengröße auf den Brennstoffumsatz am größten ist. Die Zerstäubung besitzt daher einen wesentlichen

Einfluss auf den Brennstoffumsatz im Flugstromvergaser. Der Einfluss der Verweilzeit, die sich aus den Tropfengeschwindigkeiten ergibt, auf den Brennstoffumsatz ist größer als der Einfluss der Temperatur der umgebenden Gasphase. Der Einfluss der Relativgeschwindigkeit auf den Brennstoffumsatz ist gering. Die Länge der Oxidationszone ist hauptsächlich geprägt durch den äquivalenten Düsendurchmesser  $d_{\text{äq}}$ . Findet in der Oxidationszone keine relevante Verdampfung statt, nimmt die Länge der Oxidationszone linear mit Düsendurchmesser zu. Durch Verdampfung in der Oxidationszone wird die Länge der Oxidationszone verkürzt.

## 8 Zusammenfassung und Ausblick

Kern der vorliegenden Arbeit ist das Zweiphasen-Freistrahlmmodell (2Ph-FJM) zur Simulation der reagierenden Zweiphasen-Strömung in einem atmosphärischen Flugstromvergaser. Mit dem 2Ph-FJM kann die Temperatur, die Strömungsgeschwindigkeit und chemische Reaktionen in der Gasphase sowie die Aufheizung und die Verdampfung von Brennstofftropfen in der Hauptreaktionszone simuliert werden. Das 2Ph-FJM basiert auf einem modifizierten Freistrahlanatz, der ursprünglich dazu entwickelt wurde den Einphasen-Freistrahls mit Hilfe von Gauß-Profilen zu beschreiben. Im Rahmen der Arbeit wurde der Freistrahlanatz mithilfe von Messungen an die Gasphase des Zweiphasen-Freistrahls angepasst. Die Beschleunigung, Aufheizung und Verdampfung von Tropfen sowie Stoffeigenschaften der Gasphase und der Tropfen wurden mit Modellen aus der Literatur modelliert. Für die Gasphase wird chemisches Gleichgewicht angenommen. Bei der Modellierung von Geschwindigkeiten, Konzentrationen und Temperaturen von Gasphase und Tropfen wird der Austausch von Impuls, Wärme und Masse zwischen den beiden Phasen sowie chemische Reaktion in der Gasphase berücksichtigt.

Die Verwendung eines Freistrahlanatzes als Basis zur Modellierung des Strömungsfelds der Gasphase in einem atmosphärischen Flugstromvergaser ist nicht Stand der Technik. Daher wurden im Rahmen der Arbeit die relevanten Grundlagen turbulenter Freistrahlen ausführlich dargelegt. Aus der Literatur ist keine umfassende Beschreibung des Zweiphasen-Freistrahls zu entnehmen. Daher wurden experimentelle Untersuchungen der Gasphase und der Tropfen im Zweiphasen-Freistrahls unter Umgebungsbedingungen durchgeführt. Die Untersuchungen im Zweiphasen-Freistrahls wurden auch genutzt, um Eingangs-, und Validierungsdaten für das 2Ph-FJM zu bestimmen. Dazu wurde am atmosphärischen Zerstäuberprüfstand ATMO Wasser mit Luft zerstäubt und Messungen im Zweiphasen-Freistrahls durchgeführt.

Der Einfluss der dispersen Phase auf Entrainment von Gas aus der Umgebung in den Zweiphasen-Freistrahls wurde mit Hilfe von Tracergas-Messungen untersucht. Dazu wurde das Zerstäubungsmedium mit Tracergas angereichert und die Verteilung in der Zweiphasen-Strömung mit einem  $\mu$ GC gemessen. Zur Überprüfung der Messmethode und als Referenzmessung wurden zusätzlich Messungen im Einphasen-Freistrahls ohne Flüssigkeit durchgeführt und mit Messungen aus der Literatur verglichen. Die radiale Verteilung der Flüssigkeitstropfen wurde mit einem mechanischen Patternator gemessen. Größe und Geschwindigkeit der Tropfen wurden mit einem Phasen-Doppler-Anemometer bestimmt. Der Freistrahlanatz, der im 2Ph-FJM zur Modellierung der Gasphase des Zweiphasen-Freistrahls genutzt wird, basiert auf zwei Eigenschaften, die für den Einphasen-Freistrahls aus der Literatur bekannt sind. Zum einen sind Radialprofile des Mischungsbruchs im Einphasen-Freistrahls selbstähnlich. Zum anderen können die Radialprofile in guter Näherung durch Gauß-Profile beschrieben werden. Beide Eigenschaften konnten mit den Messungen an der ATMO auch für die Gasphase des Zweiphasen-Freistrahls bestätigt werden. Die Breite des Mischungsbruchs in der Gasphase konnte durch den Impulsaustauschfaktor an die Messungen an die Gasphase des Zweiphasen-Freistrahls angepasst werden. Der Impulsaustauschfaktor ist eine Eingangsgröße für das 2Ph-FJM.

Bei der Untersuchung an der ATMO wurde gezeigt, dass abhängig von den Betriebsbedingungen bei der Zerstäubung, die radiale Konzentrationsverteilung von Zerstäubungsmedium und die Breite des Spraykegels beeinflusst werden kann. Im Zerstäubungsregime Fadenzerfall – Pulsieren werden Tropfen in radiale Richtung

geschleudert. Dies konnte durch Messungen mit dem mechanischen Patternator und qualitativ durch Aufnahmen mit einer Hochgeschwindigkeitskamera experimentell bestätigt werden. Durch die radiale Bewegung der Tropfen wird auch Entrainment in der Gasphase intensiviert, das durch  $\mu\text{GC}$ -Messungen von Tracergas gemessen wurde. Darüber hinaus konnte gezeigt werden, dass sich Zerstäubungsmedium und Tropfen aus der Düse in diesem Zerstäubungsregime entmischen und nicht im konstanten Verhältnis in der Zweiphasen-Strömung vorliegen. Dazu wurden zusätzlich Geschwindigkeitsmessungen der Tropfen mit einem Phasen-Doppler-Anemometer genutzt. Die Flüssigkeitsmenge hatte im untersuchten Betriebsbereich keinen signifikanten Einfluss. Werden die Erkenntnisse auf die Flugstromvergasung übertragen, können die lokale Luftzahl und die Flammenstruktur beeinflusst werden. Brennstofftropfen, die in radiale Richtung aus der heißen Flammenzone geschleudert werden, verdampfen in kälteren Zonen und werden bei potentiell geringeren Luftzahlen umgesetzt, wodurch unerwünschte Zwischenprodukte erzeugt werden können. Im Zerstäubungsregime Fadenzerfall – Superpulsieren werden Tropfen nicht in radiale Richtung geschleudert. Für dieses Regime konnte in den Messungen an der ATMO gezeigt werden, dass die radialen Verteilungen der Tropfen und des Zerstäubungsmediums gleich breit sind und der Verteilung des Mischungsbruchs in einem Einphasen-Freistrahls entsprechen. Das Mischungsverhältnis ist im Wesentlichen über den gesamten Radius konstant und entspricht dem GLR der Massenströme von Zerstäubungsmedium und Flüssigkeit an der Düse. Diese Untersuchungen im Zweiphasen-Freistrahls unter Umgebungsbedingungen dienten der Überprüfung von Annahmen im 2Ph-FJM. Außerdem wurde die gemessene Tropfengrößenverteilung als weitere Eingangsgröße für das 2Ph-FJM verwendet.

Im 2Ph-FJM verlassen die Tropfen zusammen mit dem Vergasungsmedium die Düse. Synthesegas aus der Umgebung der Zweiphasen-Strömung wird durch Entrainment in den Freistrahls eingemischt. Die Tropfen werden beschleunigt, aufgeheizt und verdampft. Der Brennstoffdampf wird in der Gasphase zusammen mit dem Vergasungsmedium und dem eingemischten Gas zu Synthesegas umgesetzt. Durch die chemische Reaktion in der Gasphase entsteht eine Impulsquelle, die zunächst die Gasphase und damit auch die Tropfen beschleunigt. Tropfen und chemische Reaktion überlagern somit den Gas-Freistrahls aus der Düse. Die Interaktion zwischen reagierender Gasphase und Tropfen wird mit Bilanzgleichungen für Impuls, Wärme und Stoff berücksichtigt. Dabei überlagern Verdampfung und Reaktion die Gauß-Profile aus dem Freistrahlsansatz. Das Geschwindigkeits-, Temperatur- und Konzentrationsfeld in der Gasphase wird mithilfe der Bilanzgleichungen und dem Tropfenmodell iterativ neu berechnet. In der Gasphase wird chemisches Gleichgewicht angenommen. Durch die Ausdehnung der Gasphase aufgrund von Reaktion entsteht eine zusätzliche Impulsquelle in der Gasphase, die ebenfalls in den Bilanzgleichungen berücksichtigt wird. Das Tropfenmodell zur Beschreibung der Beschleunigung, Aufheizung und Verdunstung von Tropfen sowie die Berechnung der temperaturabhängigen Stoffeigenschaften sind Ansätze aus der Literatur und Stand der Technik.

Das 2Ph-FJM wurde im Rahmen dieser Arbeit mit den Eingangsgrößen aus den Kaltversuchen an der ATMO simuliert und für einen Versuch am atmosphärischen Flugstromvergaser REGA validiert. Das berechnete Strömungs-, Temperatur- und Konzentrationsfeld sowie die Größe und Geschwindigkeit der Tropfen zeigen plausible Ergebnisse. Die Struktur der Flamme wurde anhand der Temperaturverteilung im 2Ph-FJM bestimmt. In der REGA wurden Aufnahmen von  $\text{OH}^*$ -Chemilumineszenz aufgenommen und mithilfe einer inversen Abel-Transformation rekonstruiert. Die Flammenstruktur wurde mit dem Temperaturfeld und Konzentrationsfeld in der Gasphase aus der Simulation

verglichen. Simulation und Aufnahmen von OH\*-Chemilumineszenz zeigen gute Übereinstimmung. Die Zündung findet nahe an der Düse, leicht von der Achse versetzt statt. Die Reaktionszone wird stromabwärts breiter und umschließt eine kalte Kernzone, in der nur sehr wenig Reaktion stattfindet. Die Position, an der das Gemisch im 2Ph-FJM eine stöchiometrische Zusammensetzung in der Gasphase aufweist, entspricht in gute Näherung der höchsten Intensität von OH\*. Weiter stromab von der Flammenzone werden Radialprofile flacher und die Intensität von OH\* nimmt ab. Die Größe und Geschwindigkeit der Tropfen wurde im atmosphärischen Flugstromvergaser REGA mit einem Phasen-Doppler-Anemometer bestimmt und mit den Simulationsergebnissen verglichen. Die Messung der mittleren Tropfengeschwindigkeit liegt leicht unterhalb der Simulationsergebnisse, zeigen aber einen ähnlichen Verlauf entlang der Achse. Nahe der Düse werden die Tropfen zunächst stark beschleunigt. Die Gasphase wird durch Entrainment und die Beschleunigung der Tropfen abgebremst und durch Reaktion in der Flammenzone beschleunigt. Durch diese gegenläufigen Effekte entsteht in der Flammenzone ein Plateau der mittleren Tropfengeschwindigkeit. Sobald der Sauerstoff aus dem Vergasungsmittel vollständig umgesetzt ist, nimmt die Geschwindigkeit der Tropfen und der Gasphase ab. Der mittlere Sauterdurchmesser ( $d_{32}$ ) bleibt im kalten Kernbereich zunächst unverändert. Mit einsetzender Verdampfung nimmt der Sauterdurchmesser zu, da kleine Tropfen sehr schnell vollständig verdampfen und größere Tropfen übrigbleiben. Der Sauterdurchmesser wird im Modell im Vergleich zu den Messungen für größere axiale Abstände zur Düse leicht überschätzt. Insgesamt konnte für den Validierungsversuch gezeigt werden, dass das 2Ph-FJM die Tropfengeschwindigkeit und Tropfengröße aus der PDA-Messung sowie die Flammenstruktur aus den OH\*-Chemilumineszenz Aufnahmen gut wiedergegeben kann.

Auf Basis des Validierungsversuchs wurde der Einfluss der Geometrie von Kontrollvolumina auf das Simulationsergebnis untersucht. Dazu wurde die Berechnung mit drei unterschiedlich großen Kontrollvolumina durchgeführt. Dabei konnten nur sehr geringfügige Auswirkungen auf die Ergebnisse festgestellt werden. Das Modell zeigte sich sehr robust gegenüber der Größe der Rechenzellen. Als Standardgröße, mit denen alle weiteren Berechnungen durchgeführt wurden, wurde die kleinste Größe der Kontrollvolumina gewählt.

In drei weiteren Untersuchungen wurde der Einfluss der Tropfengröße und des äquivalenten Düsendurchmessers untersucht. Unter den untersuchten Bedingungen ist der Einfluss der Tropfengröße auf den Brennstoffumsatz am größten. Die Zerstäubung ist daher ein wesentlicher Einflussfaktor auf den Brennstoffumsatz im Flugstromvergaser. Der Einfluss der Verweilzeit auf den Brennstoffumsatz ist größer als der Einfluss der Temperatur der umgebenden Gasphase. Der Einfluss der Relativgeschwindigkeit auf den Brennstoffumsatz ist gering. Die Länge der Oxidationszone ist hauptsächlich geprägt durch den äquivalenten Düsendurchmesser. Findet in der Oxidationszone keine relevante Verdampfung statt, nimmt die Länge der Oxidationszone linear mit dem Düsendurchmesser zu. Durch Verdampfung in der Oxidationszone wird die Oxidationszone verkürzt.

Das 2Ph-FJM wurde in einer rechenfähigen Version an die Arbeitsgruppe Vergasung am Institut für Technische Chemie (ITC) des Karlsruher Instituts für Technologie (KIT) übergeben. Das 2Ph-FJM und die Validierungsversuche wurde im Rahmen dieser Arbeit in der Fachzeitschrift FUEL veröffentlicht [141]. Die Untersuchungen und die modelltechnische Beschreibung der Gasphase im Zweiphasen-Freistrahler wurden open-access in FUEL publiziert [139]. Alle relevanten Messdaten, die im Rahmen dieser Dissertation entstanden, wurden separat auf Mendeley Data veröffentlicht [140]. Die modulare Modellarchitektur des 2Ph-FJM erlaubt die Erweiterung des Modells. Aufbauend

auf dem 2Ph-FJM, wie es im Rahmen dieser Arbeit vorgestellt wurde, wurde die Verteilung der Flüssigkeit als weitere Eingangsgröße in das Modell implementiert und ebenfalls veröffentlicht [146]. Darüber hinaus wurden im Rahmen dieser Arbeit weitere Messungen zur Untersuchung des Vergasungsprozesses und zur Validierung von numerischen Arbeiten am atmosphärischen Flugstromvergaser REGA durchgeführt und veröffentlicht [14,147–150].

## 9 Literaturverzeichnis

- [1] Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz, Bau und Reaktorsicherheit. Das Pariser Klimaabkommen auf der Zielgerade: UN-Klimakonferenz (COP21/CMP11) in Paris vom 30. November bis 11. Dezember 2015 2015.
- [2] Deutscher Bundestag. Bundes-Klimaschutzgesetz: KSG; 2019.
- [3] Deutscher Bundestag. Bundes-Klimaschutzgesetz: KSG; 2021.
- [4] Deutscher Bundestag. Bundes-Klimaschutzgesetz: KSG; 2024.
- [5] Pressestelle UBA. UBA-Prognose: Treibhausgasemissionen sanken 2022 um 1,9 Prozent; 2023.
- [6] Umweltbundesamt. Erneuerbare Energien in Deutschland: Daten zur Entwicklung im Jahr 2023; 2024.
- [7] Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz und nukleare Sicherheit. Klimaschutzbericht 2018: zum Aktionsprogramm Klimaschutz 2020 der Bundesregierung 2019.
- [8] Umweltbundesamt. Entwicklung der Treibhausgase des Verkehrs in Deutschland. [October 09, 2023]; Available from: <https://www.umweltbundesamt.de/themen/verkehr/klimaschutz-im-verkehr#ziele>.
- [9] Arbeitsgemeinschaft erneuerbare Energien-Statistik. Anteil erneuerbarer Energien im Verkehr; 2023.
- [10] Fachagentur Nachwachsende Rohstoffe. Bioenergy in Germany Facts and Figures 2019 2019.
- [11] Sensfuß F, Lux B, Bernath C, Kiefer C, Pfluger B, Kleinschmitt C et al. Langfristszenarien für die Transformation des Energiesystems in Deutschland: Treibhausgasneutrale Hauptszenarien Modul Verkehr. Karlsruhe; 2021.
- [12] Luderer G, Kost C, Sörgel D. Deutschland auf dem Weg zur Klimaneutralität 2045: Szenarien und Pfade im Modellvergleich. Potsdam Institute for Climate Impact Research; 2021.
- [13] Eberhard M, Santo U, Böning D, Schmid H, Michelfelder B, Zimmerlin B et al. Der bioliq®-Flugstromvergaser - ein Baustein der Energiewende. Chemie Ingenieur Technik 2018;90(1-2):85–98. <https://doi.org/10.1002/cite.201700086>.
- [14] Fleck S, Santo U, Hotz C, Jakobs T, Eckel G, Mancini M et al. Entrained flow gasification Part 1: Gasification of glycol in an atmospheric-pressure experimental rig. Fuel 2018;217:306–19. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2017.12.077>.
- [15] Günther R. Verbrennung und Feuerungen. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg; 1974.
- [16] Abramovich GN. The Theory of Turbulent Jets; 1963.
- [17] Beér JM, Chigier NA. Combustion Aerodynamics; 1972.
- [18] Falcone AM, Cataldo JC. Entrainment Velocity in an Axisymmetric Turbulent Jet. Journal of Fluids Engineering 2003.
- [19] Dimotakis PE, Mlake-Lye RC, Papantoniou DA. Structure and dynamics of round turbulent jets. Phys. Fluids 1983;26(11):3185–92.
- [20] Rajaratnam N. Turbulent Jets; 1976.
- [21] Rotta JC. Turbulente Strömungen: Eine Einführung in die Theorie und ihre Anwendung. Göttingen, Göttingen: Niedersächsische Staats- und Universitätsbibliothek; Univ.-Verl. Göttingen; 2010.
- [22] Hinze JO. Turbulence. 2nd ed. New York, NY: McGraw-Hill; 1975.
- [23] Reichardt H. Gesetzmäßigkeiten der freien Turbulenz. VDI Forschungsheft 1951(414):2–30.

- [24] Hussein HJ, Capp SP, George WK. Velocity measurements in a high-Reynolds-number, momentum-conserving, axisymmetric, turbulent jet. *J. Fluid Mech.* 1994;258(-1):31. <https://doi.org/10.1017/S002211209400323X>.
- [25] Ricou FP. Measurement of entrainment by turbulent jets [Dissertation]. London: University of London; 1960.
- [26] Lau TCW, Nathan GJ. The effect of Stokes number on particle velocity and concentration distributions in a well-characterised, turbulent, co-flowing two-phase jet. *J. Fluid Mech.* 2016;809:72–110. <https://doi.org/10.1017/jfm.2016.666>.
- [27] Kasabov P. Experimentelle Untersuchungen an abgehobenen Flammen unter Druck [Dissertation]. Karlsruhe: KIT; 2013.
- [28] Mi J, Nobes DS, Nathan GJ. Influence of jet exit conditions on the passive scalar field of an axisymmetric free jet. *Journal of Fluid Mechanics* 2001(432):91–125.
- [29] Bradshaw P, Ferriss DH, Johnson RF. Turbulence in the noise-producing region of a circular jet. *J. Fluid Mech.* 1964;19(04):591. <https://doi.org/10.1017/S0022112064000945>.
- [30] Schlichting H, Gersten K, Krause E. Grenzschicht-Theorie: Mit 22 Tabellen. 10th ed. Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag Berlin Heidelberg; 2006.
- [31] Kraichnan RH. Inertial Ranges in Two-Dimensional Turbulence. *Phys. Fluids* 1967;10(7):1417. <https://doi.org/10.1063/1.1762301>.
- [32] Liberman MA. Introduction to Physics and Chemistry of Combustion: Explosion, Flame, Detonation. Berlin, Heidelberg: Springer; 2008.
- [33] Heisenberg W. Zur statistischen Theorie der Turbulenz. *Zeitschrift für Physik* 1948;124(7-12):628–57. <https://doi.org/10.1007/BF01668899>.
- [34] Kolmogorow AN. The Local Structure of Turbulence in Incompressible Viscous Fluid for Very Large Reynolds Numbers 1941.
- [35] Kolmogorow AN. A refinement of previous hypotheses concerning the local structure of turbulence in a viscous incompressible fluid at high Reynolds number 1962.
- [36] Jiménez J. The Contributions of A. N. Kolmogorov to the theory of turbulence 2004.
- [37] Chua LP, Antonia RA. The Turbulent Interaction Region of a Circular Rond Jet. *INT. COMM. HEAT MASS TRANSFER* 1986.
- [38] Capp SP. Experimental investigation of the turbulent axisymmetric jet [Dissertation]: University at Buffalo; 1983.
- [39] Panchapakesan NR, Lumley JL. Turbulence measurements in axisymmetric jets of air and helium. Part 1. Air jet. *Journal of Fluid Mechanics* 1993;246:197–223. <https://doi.org/10.1017/S0022112093000096>.
- [40] Pope SB. Turbulent flows. 12th ed. Cambridge: Cambridge Univ. Press; 2000.
- [41] Corrsin S, Uberoi MS. Further experiments on the flow and heat transfer in a heated turbulent air jet. National Advisory Committee for Aeronautics 1950.
- [42] Galeazzo FCC. Simulation of Turbulent Flows with and without Combustion with Emphasis on the Impact of Coherent Structures on the Turbulent Mixing [Dissertation]: Karlsruher Institut für Technologie; 2013.
- [43] Kremer H. Zur Ausbreitung inhomogener turbulenter Freistrahlen und turbulenter Diffusionsflammen [Dissertation]. Karlsruhe: Universiät Karlsruhe (TH); 1964.
- [44] Wygnanski I, Fiedler H. Some measurements in the self-preserving jet. *J. Fluid Mech.* 1969;38(03):577. <https://doi.org/10.1017/S0022112069000358>.
- [45] Trüpel T. Über die Einwirkung eines Luftstrahles auf die umgebende Luft. *Zeitschrift für das gesamte Turbinenwesen* 1915.
- [46] Ruden P. Turbulente Ausbreitungsvorgänge im Freistrah. *Naturwissenschaften* 1933;21(21-23):375–8. <https://doi.org/10.1007/BF01451791>.
- [47] Hinze JO, Van Der Hegge Zijnen BG. Transfer of heat and matter in the turbulent mixing zone of an axially symmetrical jet. *Appl. Sci. Res.* 1949.



- [48] Rodi W. A new method of analysing hot-wire signals in highly turbulent flow, and its evaluation in a round jet. London: Imperial College of Sciences and Technology; 1975.
- [49] Chen CJ, Rodi W. A Review of experimental data of vertical turbulent buoyant jets; 1975.
- [50] Seif AA. Higher Order Closure Model for Turbulent Jets [Dissertation]. New York: State University of New York at Buffalo; 1981.
- [51] George WK. Governing equations, experiments, and the experimentalist. *Experimental Thermal and Fluid Science* 1990;3(6):557–66. [https://doi.org/10.1016/0894-1777\(90\)90071-E](https://doi.org/10.1016/0894-1777(90)90071-E).
- [52] Burattini P, Antonia RA, Danaila L. Similarity in the far field of a turbulent round jet. *Physics of Fluids* 2005;17(2):25101. <https://doi.org/10.1063/1.1833414>.
- [53] Lipari G, Stansby PK. Review of Experimental Data on Incompressible Turbulent Round Jets. *Flow Turbulence Combust* 2011;87(1):79–114. <https://doi.org/10.1007/s10494-011-9330-7>.
- [54] Rodi W. The prediction of free turbulent boundary layers by use of a two-equation model of turbulence [Dissertation]. London: London University; 1972.
- [55] Thring MW, Newby MP. Combustion length of enclosed turbulent jet flames. *Symposium (International) on Combustion* 1953;4:789–96.
- [56] Dahm WJA, Dimotakis PE. Measurements of entrainment and mixing in turbulent jets. *AIAA Journal* 1987;25(9):1216–23. <https://doi.org/10.2514/3.9770>.
- [57] Becker HA, Hottel HC, Williams GC. Mixing and Flow in ducted turbulent Jets: At Cornell University Ithaca, New York, August 27 to September 1, 1962 1963.
- [58] Pitts WM. Effects of global density ratio on the centerline mixing behavior of axisymmetric turbulent jets. *Experiments in Fluids* 1991;11-11(2-3):125–34. <https://doi.org/10.1007/BF00190288>.
- [59] Richards CD, Pitts WM. Global density effects on the self-preservation behaviour of turbulent jets. *J. Fluid Mech.* 1993(254):417–35.
- [60] Seifert H. Turbulenter Austausch in konzentrischen Luftstrahlen und Erdgas-Diffusionsflammen [Dissertation]. Karlsruhe: Universität Karlsruhe (TH); 1979.
- [61] Chassaing P, Harran G, Joly L. Density fluctuation correlations in free turbulent binary mixing. *J. Fluid Mech.* 1994;279(-1):239. <https://doi.org/10.1017/S0022112094003903>.
- [62] Pitts WM, Kashiwagi T. Mixing in variable density, isothermal turbulent flow and implications for chemically reacting turbulent flows 1987.
- [63] Dowling DR, Dimotakis PE. Similarity of the concentration field of gas-phase turbulent jets. *Journal of Fluid Mechanics* 1990(218):109–41.
- [64] Grandmaison EW, Rathgeber DE, Becker HA. Some characteristics of concentration fluctuations in free turbulent jets. *Can. J. Chem. Eng.* 1982;60(2):212–9. <https://doi.org/10.1002/cjce.5450600203>.
- [65] Dahm WJA, Dimotakis PE. Mixing at large Schmidt number in the self-similar field of turbulent jets. *Journal of Fluid Mechanics* 1990(217):299–330.
- [66] Birch AD, Brown DR, Dodson MG, Thomas JR. The turbulent concentration field of a methane jet. *J. Fluid Mech.* 1978;88(03):431. <https://doi.org/10.1017/S0022112078002190>.
- [67] So RMC, Zhu JY, Ötügen MV, Hwang BC. Some measurements in a binary gas jet. *Experiments in Fluids* 1990;9(5):273–84. <https://doi.org/10.1007/BF00233128>.
- [68] Sunavala PD, Hulse C, Thring MW. Mixing and combustion in free and enclosed turbulent jet diffusion flames. *Combustion and Flame* 1957;1(2):179–93. [https://doi.org/10.1016/0010-2180\(57\)90044-5](https://doi.org/10.1016/0010-2180(57)90044-5).

- [69] Namazian M, Schefer RW, Kelly J. Scalar dissipation measurements in the developing region of a jet. *Combustion and Flame* 1988;74(2):147–60.  
[https://doi.org/10.1016/0010-2180\(88\)90013-2](https://doi.org/10.1016/0010-2180(88)90013-2).
- [70] Lockwood FC, Moneib HA. Fluctuating Temperature Measurements in a Heated Round Free Jet. *Combustion Science and Technology* 1980;22(1-2):63–81.  
<https://doi.org/10.1080/00102208008952372>.
- [71] Papanicolaou PN, List EJ. Investigations of round vertical turbulent buoyant jets. *J. Fluid Mech.* 1988;195(-1):341. <https://doi.org/10.1017/S0022112088002447>.
- [72] Papanicolaou PN, List E. Statistical and spectral properties of tracer concentration in round buoyant jets. *International Journal of Heat and Mass Transfer* 1987;30(10):2059–71. [https://doi.org/10.1016/0017-9310\(87\)90086-X](https://doi.org/10.1016/0017-9310(87)90086-X).
- [73] Wilson R, Danckwerts PV. Studies in turbulent mixing—II. *Chemical Engineering Science* 1964;19(11):885–95. [https://doi.org/10.1016/0009-2509\(64\)85066-1](https://doi.org/10.1016/0009-2509(64)85066-1).
- [74] Becker HA, Hottel HC, Williams GC. The nozzle-fluid concentration field of the round, turbulent, free jet. *J. Fluid Mech.* 1967;30(02):285.  
<https://doi.org/10.1017/S0022112067001430>.
- [75] Papantoniou DA. Observations in turbulent buoyant jets by use of laser-induced fluorescence [Dissertation]. Pasadena: California Institute of Technology; 1986.
- [76] Dahm WJA. Experiments on entrainment, mixing and chemical reactions in turbulent jets at large Schmidt number [Dissertation]. Pasadena: California Institute of Technology; 1985.
- [77] So RMC, Liu TM. On self-preserving, variable-density, turbulent free jets. *Z. angew. Math. Phys.* 1986;37(4):538–58. <https://doi.org/10.1007/BF00945429>.
- [78] Schefer RW, Dibble RW. Mixture Fraction Field in a Turbulent Nonreacting Propane Jet. *AIAA Journal* 2001;39(1):64–72. <https://doi.org/10.2514/2.1271>.
- [79] Pitts WM. Reynolds number effects on the mixing behavior of axisymmetric turbulent jets. *Experiments in Fluids* 1991;11-11(2-3):135–41.  
<https://doi.org/10.1007/BF00190289>.
- [80] Xu G, Antonia R. Effect of different initial conditions on a turbulent round free jet. *Exp Fluids* 2002;33(5):677–83. <https://doi.org/10.1007/s00348-002-0523-7>.
- [81] Grinstein FF. Open Boundary Conditions in the Simulation of Subsonic Turbulent Shear Flows. *Journal of Computational Physics* 1994;115(1):43–55.  
<https://doi.org/10.1006/jcph.1994.1177>.
- [82] George WK. The Self-Preservation of Turbulent Flows and Its Relation to Initial Conditions and Coherent Structures 1989.
- [83] Pollard A, Castillo L, Danaila L, Glauser M. Whither Turbulence and Big Data in the 21st Century? 2017. <https://doi.org/10.1007/978-3-319-41217-7>.
- [84] Townsend AA. The structure of turbulent shear flow. 2nd ed. Cambridge: Cambridge Univ. Press; 1976.
- [85] George WK. Lectures in Turbulence for the 21st Century 2013.
- [86] Carazzo G, Kaminiski E, Tait S. The route to self-similarity in turbulent jets and plumes. *J. Fluid Mech.* 2006;547(-1):137.  
<https://doi.org/10.1017/S002211200500683X>.
- [87] Weber R, Mancini M, Eberhard A, Alberti M. Entrainment Rate Predictions of Axis-Symmetric Non-Swirling Jets using Free-Jet-Theory, Reynolds-Averaged Navier-Stokes Modelling and Large-Eddy-Simulations Resolved up to Kolmogorov Scale: In Preparation.
- [88] Launder B, Spalding DB. The numerical computation of turbulent flows 1973.
- [89] Shih T-H, Liou WW, Shabbir A, Yang Z, Zhu J. A new  $k-\epsilon$  eddy viscosity model for high reynolds number turbulent flows. *Computers & Fluids* 1995;24(3):227–38.  
[https://doi.org/10.1016/0045-7930\(94\)00032-T](https://doi.org/10.1016/0045-7930(94)00032-T).

- [90] Tollmien W. Berechnung turbulenter Ausbreitungsvorgänge. Zeitschrift für angewandte Mathematik und Mechanik 1926(6):468-478.
- [91] Schlichting H. Grenzschicht-Theorie. 1st ed. Karlsruhe: G. Braun; 1951.
- [92] Corrsin S. Investigation of flow in an axially symmetrical heated jet of air: Investigation of flow in an axially symmetrical heated jet of air. Wartime Report 1943.
- [93] Reichardt H. Impuls- und Wärmeaustausch in freier Turbulenz 1944.
- [94] Alexander LG, Baron T, Comings EW. Transport of momentum, mass, and heat in turbulent jets. University of Illinois Bulletin Series 1953(413).
- [95] Field MA. Combustion of pulverized coal. Leatherhead (Sy.); 1967.
- [96] Aísa L, García JA, Cerecedo LM, García Palacín I, Calvo E. Particle concentration and local mass flux measurements in two-phase flows with PDA. Application to a study on the dispersion of spherical particles in a turbulent air jet. International Journal of Multiphase Flow 2002;28(2):301–24. [https://doi.org/10.1016/S0301-9322\(01\)00071-4](https://doi.org/10.1016/S0301-9322(01)00071-4).
- [97] Crowe CT, Oweis GF, Ceccio SL, Matsumoto Y, Tropea C, Roisman IV. Multiphase Flow Handbook. CRC Press; 2005.
- [98] Hetsroni G. Particles-Turbulence Interaction. International Journal of Multiphase Flow 1989(15):735–46.
- [99] Crowe CT, Troutt TR, Chung JN. Numerical Models for Two-Phase Turbulent Flows. Annu. Rev. Fluid Mech. 1996;28(1):11–43. <https://doi.org/10.1146/annurev.fl.28.010196.000303>.
- [100] Melville WK, Bray KN. The Two-Phase Turbulent Jet. International Journal of Heat and Mass Transfer 1979(22):279–87.
- [101] Laats MK. Experimental study of the dynamics of an air-dust jet. INZHENERNO-FIZICHE SKII ZHURNAL 1966(10):11–5.
- [102] Ivanov YV, Laats MK, Frishman FA. Dispersion of a heavy admixture in a two-phase jet. Journal of Engineering Physics 1970;18(3):378–80.
- [103] Laats MK, Frishman FA. Assumptions used in calculating the two-phase jet. Fluid Dyn 1970;5(2):333–8. <https://doi.org/10.1007/BF01080254>.
- [104] Melville WK, Bray KN. A model of a two-phase turbulent jet. Int. J. Heat Mass Transfer 1979(22):647–56.
- [105] Stakić MB, Milojevic DZ. The effect of particles on the gas velocity in a free turbulent flow. Journal of Engineering Physics and Thermophysics 1995.
- [106] Henrich E, Dahmen N, Dinjus E. Cost estimate for biosynfuel production via biosyncrude gasification. Biofuels, Bioprod. Bioref. 2009;3(1):28–41. <https://doi.org/10.1002/bbb.126>.
- [107] Bertau M, Offermanns H, Plass L, Schmidt F, Wernicke H-J. Methanol: The Basic Chemical and Energy Feedstock of the Future: The basic chemical and energy feedstock of the future Asinger's vision today. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg; 2014.
- [108] Molino A, Chianese S, Musmarra D. Biomass gasification technology: The state of the art overview. Journal of Energy Chemistry 2016;25(1):10–25. <https://doi.org/10.1016/j.jechem.2015.11.005>.
- [109] Chen P, Xie Q, Addy M, Zhou W, Liu Y, Wang Y et al. Utilization of municipal solid and liquid wastes for bioenergy and bioproducts production. Bioresour Technol 2016;215:163–72. <https://doi.org/10.1016/j.biortech.2016.02.094>.
- [110] Higan C, van Burgt Md. Gasification. 2nd ed. Amsterdam: Gulf Professional Pub./Elsevier Science; 2008.
- [111] Basu P. Biomass Gasification and Pyrolysis; 2010.

- [112] Landälv I, Gebart R, Marke B, Granberg F, Furusjö E, Löwnertz P et al. Two years experience of the BioDME project-A complete wood to wheel concept. *Environ. Prog. Sustainable Energy* 2014;33(3):744–50. <https://doi.org/10.1002/ep.11993>.
- [113] Dahmen N, Henrich E, Dinjus E, Weirich F. The bioliq® bioslurry gasification process for the production of biosynfuels, organic chemicals, and energy. *Energ Sustain Soc* 2012;2(1):3. <https://doi.org/10.1186/2192-0567-2-3>.
- [114] Ahrenfeldt J, Knoef H. Handbook biomass gasification: Contributions: Jesper Ahrenfeldt ... [et al.] ; editor Harrie Knoef. Netherlands: BTG Biomass Technology Group; 2005.
- [115] Sängner AD. Zerstäubung hochviskoser Fluide bei variierendem Systemdruck - Grundlagenforschung zur Hochdruck-Flugstromvergasung. Dissertation 2018. <https://doi.org/10.5445/IR/1000087397>.
- [116] Jakobs T, Djordjevic N, Fleck S, Mancini M, Weber R, Kolb T. Gasification of high viscous slurry R&D on atomization and numerical simulation. *Applied Energy* 2012;93:449–56. <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2011.12.026>.
- [117] Chigier NA, Farago Z, Chigier N. Morphological classification of disintegration of round liquid jets in a coaxial air stream. *Atomization and Sprays* 1992;2(2):137–53. <https://doi.org/10.1615/AtomizSpr.v2.i2.50>.
- [118] Stephan P, Mewes D, Kabelac S, Kind M, Schaber K, Wetzel T (eds.). VDI-Wärmeatlas. Wiesbaden: Springer; 2019.
- [119] Bohl W, Elmendorf W. Technische Strömungslehre. 15th ed. Vogel Buchverlag; 2014.
- [120] Yarin LP, Hetsroni G. Combustion of two-phase reactive media. Berlin, New York: Springer; 2004.
- [121] van Dyke M. An album of fluid motion. 12th ed. Stanford, Calif.: Parabolic Press; 1982.
- [122] Juniper MP. LearnFluidMechanics.org. [March 16, 2019].
- [123] Morsi SA, Alexander AJ. An investigation of particle trajectories in two-phase flow systems. *J. Fluid Mech.* 1972;55(02):193. <https://doi.org/10.1017/S0022112072001806>.
- [124] ANSYS Fluent. Theory Guide.
- [125] Oseen CW. Über die Stoke'sche Formel und über eine verwandte Aufgabe in der Hydrodynamik. *Arkiv för matematik, astronomi och fysik* 1910.
- [126] Schiller L, Naumann Z. A drag Coefficient Correlation. *VDI Zeitung* 1935(77):318–20.
- [127] Ihme F, Schmidt-Traub H, Brauer H. Theoretische Untersuchung über die Umströmung und den Stoffübergang an Kugeln. *Chemie Ingenieur Technik* 1972;44(5):306–13. <https://doi.org/10.1002/cite.330440513>.
- [128] Sazhin S. Droplets and Sprays. London: Springer London; 2014.
- [129] Ranz WE, Marshall WRJ. Evaporation from Drops: Part I. *Chemical Engineering Progress* 1952(Vol. 48, No. 3).
- [130] Schlünder E-U. Einführung in die Stoffübertragung: Mit 6 Tabellen. Braunschweig, Wiesbaden: Vieweg; 1996.
- [131] Kneer R. Grundlegende Untersuchungen zur Sprühstrahlausbreitung in hochbelasteten Brennräumen: Tropfenverdunstung und Sprühstrahlcharakterisierung [Dissertation]: Universität Karlsruhe (TH); 1993.
- [132] Hallett WLH, Clark NA. A model for the evaporation of biomass pyrolysis oil droplets. *Fuel* 2006;85(4):532–44. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2005.08.006>.
- [133] Warnatz J, Maas U, Dibble RW. Verbrennung: Physikalisch-chemische Grundlagen, Modellierung und Simulation, Experimente, Schadstoffentstehung ; mit 17 Tabellen. 3rd ed. Berlin [u.a.]: Springer; 2001.

- [134] Peters N. 4 Lectures on Turbulent Combustion: Summer School [Vorlesung]. Aachen: RWTH; 1997.
- [135] Haas M, Dammann M, Fleck S, Kolb T. Entrained flow gasification: Impact of fuel spray distribution on reaction zone structure. *Fuel* 2023;334:126572. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2022.126572>.
- [136] Eckbreth AC. Laser Diagnostics for Combustion Temperature and Species. London: CRC Press; 2022.
- [137] Dribinski V, Ossadtchi A, Mandelshtam VA, Reisler H. Reconstruction of Abel-transformable images: The Gaussian basis-set expansion Abel transform method. *Review of Scientific Instruments* 2002;73(7):2634–42. <https://doi.org/10.1063/1.1482156>.
- [138] Tropea C. Optical Particle Characterization in Flows. *Annu. Rev. Fluid Mech.* 2011;43(1):399–426. <https://doi.org/10.1146/annurev-fluid-122109-160721>.
- [139] Hotz C, Haas M, Wachter S, Fleck S, Kolb T. Experimental investigation on entrainment in two-phase free jets. *Fuel* 2023;335:126912. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2022.126912>.
- [140] Hotz C. Data for: Experimental investigation on entrainment in two-phase free jets. Mendeley Data 2022. <https://doi.org/10.17632/t66f8swg6w.1>.
- [141] Hotz C, Haas M, Wachter S, Fleck S, Kolb T. Two-phase free jet model of an atmospheric entrained flow gasifier. *Fuel* 2021;304(21–23):121392. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2021.121392>.
- [142] Linstrom P. NIST Chemistry WebBook, NIST Standard Reference Database 69; Available from: <https://webbook.nist.gov/chemistry/>.
- [143] Poling BE, Prausnitz JM, O'Connell JP. The properties of gases and liquids. 5th ed. New York, NY: McGraw-Hill; 2001.
- [144] Stephan P, Kabelac S, Kind M, Mewes D, Schaber K, Wetzel T. VDI-Wärmeatlas: Mit 320 Tabellen. 11th ed. Berlin: Springer Vieweg; 2013.
- [145] Haas M, Dammann M, Fleck S, Kolb T. Entrained flow gasification: Impact of fuel spray distribution on reaction zone structure. *Fuel* 2023;334:126572. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2022.126572>.
- [146] Haas M, Hotz C, Fleck S, Kolb T. Flame Structure of Central Liquid Jet Burners under Entrained Flow Gasification Conditions - Influence of Spray Parameters and Gas Momentum Flow. In Preparation 2024.
- [147] Nau P, Kutne P, Eckel G, Meier W, Hotz C, Fleck S. Infrared absorption spectrometer for the determination of temperature and species profiles in an entrained flow gasifier. *Appl Opt* 2017;56(11):2982–90. <https://doi.org/10.1364/AO.56.002982>.
- [148] Kutne P, Ebenhoch M, Meier W, Fleck S, Hotz C. Measurement of the equivalence ratio in an atmospheric gasifier using laser induced breakdown spectroscopy 2016.
- [149] Eckel G, Saenger A, Hotz C, Kathrotia T, Le Clercq P, Aigner M. Insight into the injector near-field of a glycol-fueled entrained-flow gasifier by numerical simulation with detailed chemistry.
- [150] Nau P, Kutne P, Meier W, Hotz C, Fleck S. Development of an infrared absorption spectrometer for temperature and species concentration measurements in a gasifier:LM2E.3. <https://doi.org/10.1364/LACSEA.2016.LM2E.3>.
- [151] Haider A, Levenspiel O. Drag coefficient and terminal velocity of spherical and nonspherical particles. *Powder Technology* 1989;58(1):63–70. [https://doi.org/10.1016/0032-5910\(89\)80008-7](https://doi.org/10.1016/0032-5910(89)80008-7).
- [152] Frank T. Parallele Algorithmen für die numerische Simulation dreidimensionaler, disperser Mehrphasen Strömungen und deren Anwendung in der Verfahrenstechnik [Habilitation]. Chemnitz: TU Chemnitz; 2002.

## 10 Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1-1 bioliq©-Prozessschema mit dezentraler Pyrolyse und zentraler Syntheseanlage zur Produktion flüssiger synthetischer Kraftstoffen aus lignocellulosehaltiger Biomasse [13].....	2
Abbildung 1-2 Links: Trajektorien von Brennstoffpartikeln und Prozessschritte bei der Umsetzung der Brennstoffsuspension. Neuberechnung durch IEVB, TU Clausthal aus [14]. Rechts: Schema der Teilprozesse im Flugstromvergaser. Abbildungen verändert nach [14]. .....	3
Abbildung 3-1 Entwicklung der Geschwindigkeitsprofile bei unterschiedlichen Abständen zur Düse und die drei charakteristischen Bereiche im achsensymmetrischen turbulenten Einphasen-Freistrah. ....	6
Abbildung 3-2 Zunahme der bewegten Masse im homogenen (= ohne Dichtegradient zur Umgebung) Einphasen-Freistrah aus runder Düse mit Durchmesser $d$ nach Gleichung (3-1). ....	7
Abbildung 3-3 Schlierenfotografie einer laminar austretenden Luftströmung aus einer runden Düse ( $Re \approx 40000$ ) und Ausbildung eines turbulenten Freistrahls [29]. ....	8
Abbildung 3-4 Energiespektrum $E(\kappa)$ einer turbulenten Strömung in doppellogarithmisches Auftragung mit der Einteilung in unterschiedliche Turbulenzbereichen: 1) Produktionsbereich, 2) Inertialbereich 3) Dissipationsbereich. Abbildung verändert aus [31]. ....	9
Abbildung 3-5 Geschwindigkeitsverlauf entlang der Freistrahlachse gemessen mit stationärer Hitzdrahtanemometrie. Eigene Darstellung von Messdaten und Fit aus [24]. Links: Auftragung der Geschwindigkeit $u_m$ entlang der Achse mit $u_0 = 56 \text{ m/s}$ und $d_0 = 25,4 \text{ mm}$ . Rechts: Auftragung in dimensionsloser Darstellung zur Visualisierung der Ursprungsgeraden mit Steigung $1/B_u$ . ....	12
Abbildung 3-6 Ähnlichkeitsdarstellung der radialen Geschwindigkeitsprofilen eines Luft-Freistrahls in ruhende Umgebungsluft aus Geschwindigkeitsmessungen mit einem Hitzedraht von Panchapakesan & Lumley (1993) bei verschiedenen Düsenabständen im Ähnlichkeitsbereich [39] und zusätzliche Daten aus [24,44]. Abbildung verändert aus [39]. ....	13
Abbildung 3-7 Konzentrationsabfall eines Freistrahls in ruhende Umgebungsluft entlang der Achse. Abbildung verändert aus [59]. ....	17
Abbildung 3-8 Normierte Darstellung radialer Konzentrationsprofile bei verschiedenen Düsenabständen mit $Re_0 = 5000$ . Abbildung verändert aus [63]. ....	18
Abbildung 3-9 Ähnlichkeitsprofile zeitlich gemittelter Konzentration und Temperatur von ausgewählter Literaturstellen [41,63,66,70,74,76]. Abbildung verändert aus [63]. ....	20
Abbildung 3-10 Temperaturmessung mit Mie-Streuung von zwei Freistrahlen aus: a) Düse, b) Rohr. [28]. ..	23
Abbildung 3-11 Ähnlichkeitsdarstellung der turbulenten Intensität der axialen Geschwindigkeitskomponente. Symbole wie in Abbildung 3-6. Abbildung verändert aus [39]. ....	24
Abbildung 3-12 links: Turbulente Wirbelviskosität (normiert mit Düsendurchmesser und Düsenaustrittsgeschwindigkeit) aus Messdaten von Hussein et al. (1994) [24]; rechts: Vergleich von radialen Geschwindigkeitsprofil nach Modell von Schlichting [91] (--) mit Messdaten von Hussein et al. (1994) [24]. Abbildung verändert aus [40]. ....	27
Abbildung 3-13 Schematische Darstellung der Geschwindigkeitsprofile und Stromlinien im eingeschlossenen Freistrah. Eigene Darstellung. ....	29
Abbildung 3-14 Schemazeichnung eines nach unten gerichteten reagierenden Freistrahls mit einem impulsdominierten Bereich am Düsenaustritt und einem auftriebsdominierten Bereich fern der Düse. 30	
Abbildung 3-15 Übersicht über verschiedene Verwendungspfade von Synthesegas zur Herstellung von chemischen Produkten [109]. ....	35
Abbildung 3-16 Hochdruckflugstromreaktors des bioliq©-Vergasers mit Kühlschirm und Tauchquenche. Detailabbildung: Aufbau des Kühlschirms mit schützender Schlackeschicht [13]. ....	38
Abbildung 3-17 Schematische Darstellung der Abhängigkeit von adiabater Temperatur, Kohlenstoffumsatz und Kaltgaswirkungsgrad als Funktion der Luftzahl beziehungsweise des Massenstromverhältnis an der Brennerdüse eines Flugstromvergaser. Abbildung aus [116]. ....	40

Abbildung 3-18 Klassifizierung der Regime des Primärstrahlerfalls von außenmischenden Zweistoff-Düsen nach Chigier & Faragó (1992) [117].	42
Abbildung 3-19 Strahlerfallsregime gasgestützter Zweistoff-Düsen [115].	42
Abbildung 3-20: Primärinstabilitäten bei gasgestützten Zweistoff-Düsen von zwei Flüssigkeiten mit verschiedener Viskosität. Pulsating: $\eta l = 200 \text{ mPa s}$ ; Flapping: $\eta l = 300 \text{ mPa s}$ [115].	43
Abbildung 3-21 links: Umströmung einer Kugel bei $Re = 15000$ mit Wasser. Langzeitbelichtung von kleinen Luftblasen zeigt die Rezirkulationszone des Fluids. [121]. Rechts: Widerstandkoeffizient einer glatten Kugel in Abhängigkeit der Reynolds-Zahl. [122].	45
Abbildung 3-22 Tropfen mit umgebender laminarer Grenzschicht sowie auftretende Wärme- und Stoffströme an der Grenzschicht.	47
Abbildung 4-1 Vereinfachtes Fließschema des atmosphärischen Flugstromvergaser REGA. Abbildung verändert aus [14].	51
Abbildung 4-2 Brennerdüse im REGA-Vergaser. Abbildung verändert aus [115].	52
Abbildung 4-3 Schnittzeichnung durch den Reaktor des REGA Vergasers. Abbildung verändert aus [14].	52
Abbildung 4-4 Schematische Darstellung des atmosphärischen Zerstäuberprüfstands ATMO zur Durchführung von Zerstäubungsversuchen und Tracergas-Messungen in der Gasphase des Zweiphasen-Freistrahls. Abbildung verändert aus [115].	56
Abbildung 4-5 Schematische Darstellung des atmosphärischen Zerstäuberprüfstands ATMO zur Durchführung von Zerstäubungsversuchen und Patternator-Messungen der Flüssigphase des Zweiphasen-Freistrahls. Abbildung verändert aus [115].	57
Abbildung 4-6 Mechanischer Patternator (links) und horizontaler Schnitt durch den Patternator (rechts) mit Abmessungen.	58
Abbildung 4-7 Schemazeichnung zur Positionierung des Patternators als horizontaler Schnitt durch den Spraykegel.	58
Abbildung 4-8 Schematische Darstellung des atmosphärischen Zerstäuberprüfstands ATMO zur Durchführung von Zerstäubungsversuchen und Messungen der Größe und Geschwindigkeit von Einzeltropfen im Zweiphasen-Freistrah. Abbildung verändert aus [115].	59
Abbildung 4-9 Visualisierung der Korrelation aus Partikelgeschwindigkeit $uTr$ , Flüssigkeitsmassenstromdichte $\Phi Tr$ und Flüssigkeitsbeladung $YTr$ in einer Zweiphasen-Strömung. Abbildung aus [138].	60
Abbildung 5-1 Anteil der Gasphase aus der Düse entlang der Achse im Einphasen-Freistahl. Vergleich von Messungen an der ATMO und Werten aus der Literatur [15,19,28,37,42,59,63,65]. Abbildung verändert aus [139].	65
Abbildung 5-2 Zerstäubung von Wasser mit Luft mit Düse 1 – 3 bei $0,5 \leq GLR \leq 1,5$ aufgenommen mit einer Hochgeschwindigkeitskamera (Photron Fastcam SA4).	66
Abbildung 5-3 Gemessenes Radialprofil des Mischungsbruches von Zerstäubungsmedium in der Gasphase des Zweiphasen-Freistrahls für Düse 1 mit $GLR = 1$ bei einem axialen Abstand von $\zeta = 20$ und an die Messwerte gefittete Gauß-Verteilung (Gleichung (5-1)). Abbildung verändert aus [139].	67
Abbildung 5-4 Vergleich des lokalen Mischungsbruches in der Gasphase entlang der Strahlachse ( $\eta = 0$ ) für den Einphasen-Freistahl und den Zweiphasen-Freistrah mit unterschiedlichen GLRs für Düse 1. Diagramm verändert aus [139].	68
Abbildung 5-5 Vergleich des lokalen Mischungsbruches in der Gasphase entlang der Strahlachse ( $\eta = 0$ ) für den Einphasen-Freistahl und den Zweiphasen-Freistrah mit unterschiedlichen GLRs für Düse 2. Diagramm verändert aus [139].	69
Abbildung 5-6 Vergleich des lokalen Mischungsbruches in der Gasphase entlang der Strahlachse ( $\eta = 0$ ) für den Einphasen-Freistahl und den Zweiphasen-Freistrah mit unterschiedlichen GLRs für Düse 3. Diagramm verändert aus [139].	69
Abbildung 5-7 Hochgeschwindigkeitskameraaufnahmen im Düsennahbereich von Düse 1 und 2 (beide Fadenzerfall: Pulsieren) sowie Düse 3 (Fadenzerfall: Super-Pulsieren).	70

Abbildung 5-8 Normierte Darstellung des lokalen Mischungsbruchs von Zerstäubungsmedium in der Gasphase des Zweiphasen-Freistrahls: Bestimmung aus Tracergas-Messungen und berechnet mit dem Freistrahlmotiv nach [15] mit angepassten Werten des Impulsaustauschfaktors $ci$ je Düse. ....	71
Abbildung 5-9 Summenverteilungen ( $Q_0$ , $Q_3$ ) der Tropfengrößen bei der Zerstäubung an der ATMO von Wasser mit Luft aus Düse 1. Messung der Tropfengrößen auf der Strahlachse bei $z = 200$ mm mit dem Phasen-Doppler-Anemometer (PDA). Beispielhafter Auswahl von $k = 5$ Tropfengrößenfraktionen als Eingangsgröße in das 2Ph-FJM. ....	73
Abbildung 5-10 Mittler Tropfengeschwindigkeit (massengemittelt) $uTr$ berechnet aus PDA-Messungen von Einzeltropfen. ....	74
Abbildung 5-11 Links: Paritätsplot der Massenstromdichte aus der Patternator-Messung und dem Sollwert mit einem Fehlerbereich von $\pm 5\%$ (gestrichelte Linie). Rechts: Relativer Fehler zwischen dem Sollwert des Massenflusses und der Patternator-Messung. ....	75
Abbildung 5-12 Lokale Massenstromdichte der Flüssigkeitstropfen $\Phi_{Tr}$ , gemessen mit einem mechanischen Patternator an der ATMO. ....	76
Abbildung 5-13 Beladung des Zweiphasen-Freistrahls mit Zerstäubungsmedium $Y_0$ berechnet aus dem Massenanteil Zerstäubungsmedium in der Gasphase (Tracergas-Messungen) und der Dichte der Gasphase. ....	77
Abbildung 5-14 Auswertung der Massenstromdichte $\Phi_{Tr}$ gemessen mit dem Patternator an den Messpositionen der PDA-Messung (siehe Tabelle 5-2) durch lineare Interpolation am Beispiel der Messreihe Düse 1 GLR 1,5. ....	77
Abbildung 5-15 Flüssigkeitsbeladung $Y_{Tr}$ im Zweiphasen-Freistrahlmotiv berechnet aus der Massenstromdichte $\Phi_{Tr}$ (Patternator-Messung) und der mittleren Tropfengeschwindigkeit $uTr$ (PDA-Messung). ....	78
Abbildung 5-16 Lokales Massenverhältnis von Zerstäubungsmedium und Flüssigkeit im Zweiphasen-Freistrahlmotiv berechnet aus der Beladung mit Zerstäubungsmedium $Y_{ZM}$ und Flüssigkeitstropfen $Y_{Tr}$ sowie GLR an der Düse (gestrichelte Linien). Die Beladungen wurden aus Messungen mit dem mechanischen Patternator, $\mu GC$ und PDA bestimmt. ....	80
Abbildung 6-1 Simulationsbereich im 2Ph-FJM und Struktur der Kontrollvolumina mit einer repräsentativen Tropfenflugbahn. ....	82
Abbildung 6-2 Berechnungsalgorithmus im 2Ph-FJM. ....	83
Abbildung 7-1 Simulationsergebnisse für den Validierungsversuch. Links: Temperaturverteilung in der Gasphase. Rechts: Absolute Luftzahl $\lambda_{abs}$ in der Gasphase nach Gleichung (3-32). ....	99
Abbildung 7-2 Radiales Profil von Temperatur und Zusammensetzung der Gasphase bei $z = 50$ mm ( $z/d_{aq} \approx 8$ ). ....	99
Abbildung 7-3 Radiales Profil von Temperatur und Zusammensetzung der Gasphase bei $z = 100$ mm ( $z/d_{aq} \approx 15$ ). ....	100
Abbildung 7-4 Radiales Profil von Temperatur und Zusammensetzung der Gasphase bei $z = 150$ mm ( $z/d_{aq} \approx 23$ ). ....	100
Abbildung 7-5 Radiales Profil von Temperatur und Zusammensetzung der Gasphase bei $z = 200$ mm ( $z/d_{aq} \approx 31$ ). ....	101
Abbildung 7-6 Radiales Profil von Temperatur und Zusammensetzung der Gasphase bei $z = 250$ mm ( $z/d_{aq} \approx 39$ ). ....	101
Abbildung 7-7 Vergleich von Zusammensetzung $y_n$ , $PG$ und Temperatur $T_g$ des Produktgases aus einem Rührkesselreaktor berechnet mit dem 2Ph-FJM ( $\diamond$ ) und in Aspen Plus $\text{®}$ ( $—$ ) mit unterschiedlicher Zusammensetzung der Eingangsströme (VM, ENT und BD) aufgetragen über $\lambda_{abs}$ . ....	102
Abbildung 7-8 OH*-Chemilumineszenz Aufnahme (Abel-transformiert) des Validierungsversuchs im REGA-Vergaser. ....	103
Abbildung 7-9 Simulationsergebnisse für die Geschwindigkeit der Gasphase. Links: Gasphase, die 50 Tropfengrößenfraktionen sowie anzahl- und massengemittelten Tropfengeschwindigkeit entlang der Achse. Rechts: Geschwindigkeit der Gasphase $u_g$ und massengemittelte Geschwindigkeit der Tropfen $uTr$ . ....	104



Abbildung 7-10 Simulationsergebnisse aus dem Validierungsversuch (2Ph-FJM). Links: Tropfendurchmesser der Tropfengrößenfraktionen und Sauterdurchmesser $d_{32}$ entlang der Achse. Rechts: Sauterdurchmesser $d_{32}$ im gesamten düsen nahen Simulationsbereich.....	105
Abbildung 7-11 Vergleich von PDA-Messungen (REGA) und Simulationsergebnissen (2Ph-FJM) für den axialen Verlauf der Tropfengeschwindigkeit (anzahl gemittelt) und des Sauterdurchmessers der Tropfen $d_{32}$ entlang der Achse. ....	106
Abbildung 7-12 Simulationsergebnisse aus dem Validierungsversuch (2Ph-FJM). Links: Lokaler Brennstoffumsatz nach Gleichung (6-42). Rechts: Integraler Brennstoffumsatz in Abhängigkeit vom Düsenabstand nach Gleichung (6-45) und Ende der Oxidationszone, an der axialen Position, an dem Sauerstoff vollständig abreagiert ist.....	108
Abbildung 7-13 Temperatur der Gasphase berechnet mit kleinen (A1), mittleren (A2) und großen (A3) Kontrollvolumina.....	110
Abbildung 7-14 Lokaler Brennstoffumsatz berechnet mit kleinen (A1), mittleren (A2) und großen (A3) Kontrollvolumina.....	111
Abbildung 7-15 Geschwindigkeit der Gasphase und der Tropfen berechnet mit kleinen (A1), mittleren (A2) und großen (A3) Kontrollvolumina. ....	111
Abbildung 7-16 Integraler Brennstoffumsatz und Ende der Oxidationszone bei Variation der Eingangstropfengröße in den Simulationen B1 – B9.....	113
Abbildung 7-17 Verlauf der Geschwindigkeit der Gasphase und der Tropfen entlang der Achse bei Variation der Eingangstropfengröße für die Simulationen B1 ( $d_{32} = 17 \mu\text{m}$ ) und B9 ( $d_{32} = 167 \mu\text{m}$ ). ....	114
Abbildung 7-18 Verlauf der Tropfendurchmesser entlang der Achse bei Variation der Eingangstropfengröße für die Simulationen B1 ( $d_{32} = 17 \mu\text{m}$ ) und B9 ( $d_{32} = 167 \mu\text{m}$ ).....	114
Abbildung 7-19 Temperatur der Gasphase bei Variation der Eingangstropfengröße für die Simulationen B1 ( $d_{32} = 17 \mu\text{m}$ ) und B9 ( $d_{32} = 167 \mu\text{m}$ ).....	115
Abbildung 7-20 Ende der Oxidationszone (links) und integraler Brennstoffumsatz (rechts) bei der Variation des äquivalenten Düsendurchmessers in den Simulationen C1 – C9.....	117
Abbildung 7-21 Temperatur der Gasphase bei Variation des äquivalenten Düsendurchmessers für die Simulationen C2 ( $d_{\text{äq}} = 3,3 \text{ mm}$ ) und C9 ( $d_{\text{äq}} = 13,1 \text{ mm}$ ).....	118
Abbildung 7-22 Verlauf der Geschwindigkeit der Gasphase und der Tropfen entlang der Achse bei Variation des äquivalenten Düsendurchmessers für die Simulationen C2 ( $d_{\text{äq}} = 3,3 \text{ mm}$ ) und C9 ( $d_{\text{äq}} = 13,1 \text{ mm}$ ).....	119
Abbildung 7-23 Ende der Oxidationszone (links) und integraler Brennstoffumsatz (rechts) bei der Variation des äquivalenten Düsendurchmessers bei konstanter Gasgeschwindigkeit und konstantem GLR an der Düse in den Simulationen D1 – D9. ....	120
Abbildung 7-24 Temperatur der Gasphase bei Variation des äquivalenten Düsendurchmessers bei konstanter Gasgeschwindigkeit und konstantem GLR an der Düse für die Simulationen D1 ( $d_{\text{äq}} = 1,3 \text{ mm}$ ) und D9 ( $d_{\text{äq}} = 13,1 \text{ mm}$ ).....	121
Abbildung 7-25 Verlauf der Geschwindigkeit der Gasphase und der Tropfen entlang der Achse bei Variation des äquivalenten Düsendurchmessers bei konstanter Gasgeschwindigkeit und konstantem GLR an der Düse für die Simulationen D1 ( $d_{\text{äq}} = 1,3 \text{ mm}$ ) und D9 ( $d_{\text{äq}} = 13,1 \text{ mm}$ ).....	121
Abbildung 12-1 Vergleich der Korrelationen für den Widerstandbeiwert von runden glatten Partikeln. Das Ende des Gültigkeitsbereichs ist mit $\diamond$ gekennzeichnet. ....	149
Abbildung 12-2 Lokaler Mischungsbruch von Zerstäubungsmedium in der Gasphase des Zweiphasen-Freistrahls aus den Tracergas-Messungen (Helium) bestimmt und gefittet Gauß-Funktion für Düse 1. ....	151
Abbildung 12-3 Lokaler Mischungsbruch von Zerstäubungsmedium in der Gasphase des Zweiphasen-Freistrahls aus den Tracergas-Messungen (Helium) bestimmt und gefittet Gauß-Funktion für Düse 2. ....	152
Abbildung 12-4 Lokaler Mischungsbruch von Zerstäubungsmedium in der Gasphase des Zweiphasen-Freistrahls aus den Tracergas-Messungen (Helium) bestimmt und gefittet Gauß-Funktion für Düse 3. ....	153



## 11 Tabellenverzeichnis

Tabelle 3-1: Zusammenstellung von Geschwindigkeitsmessungen im homogenen Freistrah (Luft - Luft) aus runder Düse.....	15
Tabelle 3-2: Zusammenstellung von charakteristischen Größen zur Ausbreitung (Konzentration und Temperatur) von inhomogener Freistrahlen aus experimentellen und numerischen Untersuchungen...	21
Tabelle 3-3 Experimentelle Bestimmung des virtuellen Ursprungs aus dem Konzentrationsabfall entlang der Achse (Gleichung (3-9)) und aus dem Halbwertswinkel (Gleichung (3-12)) [59]. ....	23
Tabelle 3-4 Vergleich typischer Betriebsbedingungen von drei kommerziellen Vergasungstechnologien. Daten aus [111].....	36
Tabelle 3-5 Koeffizienten zur Berechnung des Widerstandskoeffizienten als Funktion der Reynolds-Zahl einer umströmten glatten Kugel mit Gleichung (12-82) nach Alexander & Morsi (1972) [120,123]. ..	45
Tabelle 5-1 Düsenabmessungen und Versuchseinstellung der Gasphase in den Kaltversuchen an der ATMO zur Bestimmung des Parameters für Impulsaustausch für die drei eingesetzten Düsen (D1, D2, D3) ..	64
Tabelle 5-2 Parameterliste der Kaltversuche an der ATMO .....	64
Tabelle 5-3 Axialer Düsenabstand für die Messungen mit PDA und mechanischer Patternator (siehe Kapitel 5.3).....	72
Tabelle 7-1 Parameter zur Simulation des Validierungsversuchs .....	97
Tabelle 7-2 Simulationsparameter der Variation von Höhe $\Delta x$ und Breit $\Delta \alpha$ der Winkelsegmente (=Kontrollvolumina) und die resultierende Anzahl von Kontrollvolumina im Simulationsbereich ....	109
Tabelle 7-3 Mittlere Sauterdurchmesser $d_{32}$ bei Variation der Tropfengrößenfraktionen am Düsenaustritt. ....	112
Tabelle 7-4 Parameter für die Simulationen C1-C9 zur Variation des Gasspalts der Düse und die resultierende Austrittsgeschwindigkeit von Vergasungsmedium an der Düse $u_{g,0}$ .....	116
Tabelle 7-5 Parameter für die Simulationen D1-D9 mit Variation des Gasspalts der Düse bei konstanter Gasaustrittsgeschwindigkeit und konstantem GLR. ....	119

## 12 Anhang

### A Mathematische Herleitungen

#### A.I Impulserhaltung im selbstähnlichen Freistrah

Impulserhaltung

$$\int_0^{r=\infty} 2\pi \cdot \rho \cdot u^2 \cdot r \, dr = \dot{I} \quad (12-1)$$

Geschwindigkeit: Mit  $u(z, 0)$  Geschwindigkeit auf der Achse und  $f(\eta)$  dem Ähnlichkeitsprofil

$$u(z, r) = u(z, 0) \cdot f(\eta) \quad (12-2)$$

Dimensionsloser Radius

$$\eta = \frac{r}{z} \quad \rightarrow \quad r = z \cdot \eta \quad (12-3)$$

$$\frac{d\eta}{dr} = \frac{1}{z} \quad \rightarrow \quad dr = z \cdot d\eta \quad (12-4)$$

Gleichung (12-2) (12-3) und (12-4) in (12-1) einsetzen

$$\int_0^{r=\infty} 2\pi \cdot \rho \cdot (u(z, 0) \cdot f(\eta))^2 \cdot \eta \cdot z^2 \, d\eta = \dot{I} \quad (12-5)$$

Da  $(2\pi, \rho, \eta) \neq f(z)$  und Impulsstrom ist  $\dot{I}$  konstant entlang der Achse folgt:

$$u(z, 0) \cdot z = \text{Konstante} \quad (12-6)$$

Nach  $u(z, 0)$  aufgelöst folgt:

$$u(z, 0) = \text{Konstante} \cdot \frac{1}{z} \quad (12-7)$$

#### A.II Äquivalenter Düsendurchmesser

Ein Freistrah mit Dichte  $\rho_o$  am Düsenaustritt, Massenstrom  $\dot{m}_o$  und Impulsstrom  $\dot{I}_o$  strömt in die ruhende Umgebung der Dichte  $\rho_1$ . Gesucht ist der hypothetische runde Düsendurchmesser  $d_{\ddot{a}q}$  eines Freistrahls mit  $\dot{I}_o$ ,  $\dot{m}_o$  und  $\rho_1$  am Düsenaustritt.

Für den äquivalenten Freistrahlgilt:

$$\rho_{\ddot{a}q} = \rho_1 \quad (12-8)$$

$$\dot{m}_{\ddot{a}q} = \dot{m}_0 \quad (12-9)$$

$$\dot{I}_{\ddot{a}q} = \dot{I}_0 \quad (12-10)$$

Impulsstrom aus der Düse

$$\dot{I}_{\ddot{a}q} = \dot{m}_{\ddot{a}q} \cdot u_{\ddot{a}q} \quad (12-11)$$

Mit Gleichung (12-9) und (12-10) folgt

$$\dot{I}_0 = \dot{m}_0 \cdot u_{\ddot{a}q} \quad (12-12)$$

Düsenaustrittsgeschwindigkeit aus runder Düse

$$\dot{m}_{\ddot{a}q} = \rho_{\ddot{a}q} \cdot u_{\ddot{a}q} \cdot \frac{\pi}{4} \cdot d_{\ddot{a}q}^2 \quad (12-13)$$

$$u_{\ddot{a}q} = \frac{4 \cdot \dot{m}_{\ddot{a}q}}{\rho_{\ddot{a}q} \cdot \pi \cdot d_{\ddot{a}q}^2} \quad (12-14)$$

Mit Gleichung (12-8) und (12-9) folgt

$$u_{\ddot{a}q} = \frac{4 \cdot \dot{m}_0}{\rho_1 \cdot \pi \cdot d_{\ddot{a}q}^2} \quad (12-15)$$

Gleichung (12-15) in Gleichung (12-12) einsetzen

$$\dot{I}_0 = \frac{4 \cdot \dot{m}_0^2}{\rho_1 \cdot \pi \cdot d_{\ddot{a}q}^2} \quad (12-16)$$

Auflösen nach  $d_{\ddot{a}q}$

$$d_{\ddot{a}q} = \frac{2 \cdot \dot{m}_0}{\sqrt{\rho_1 \cdot \pi \cdot \dot{I}_0}} \quad (12-17)$$

Für einen Freistrahlen aus einer runden Düse mit Durchmesser  $d_0$  und  $\dot{I}_0$ ,  $\dot{m}_0$  und  $\rho_0$  am Düsenaustritt kann Gleichung (12-17) weiter vereinfacht werden. Es gilt

$$\dot{m}_0 = \rho_0 \cdot u_0 \cdot \frac{\pi}{4} \cdot d_0^2 \quad (12-18)$$

$$\dot{I}_0 = \dot{m}_0 \cdot u_0 = \rho_0 \cdot u_0^2 \cdot \frac{\pi}{4} \cdot d_0^2 \quad (12-19)$$

Gleichung (12-18) und (12-19) in Gleichung (12-17) einsetzen

$$d_{\ddot{a}q} = \frac{2 \cdot \rho_0 \cdot u_0 \cdot \frac{\pi}{4} \cdot d_0^2}{\sqrt{\rho_1 \cdot \pi \cdot \rho_0 \cdot u_0^2 \cdot \frac{\pi}{4} \cdot d_0^2}} = d_0 \cdot \frac{\frac{1}{2} \cdot u_0 \cdot \pi}{\sqrt{\frac{1}{4} \cdot u_0^2 \cdot \pi^2}} \cdot \frac{\rho_0}{\sqrt{\rho_1 \cdot \rho_0}} \quad (12-20)$$

$$d_{\ddot{a}q} = d_0 \cdot \sqrt{\frac{\rho_0}{\rho_1}} \quad (12-21)$$

**A.III Lineare Zunahme der bewegten Masse entlang der Freistrahachse**

Impulsstrom aus der Düse

$$\dot{I}_0 = \dot{I} = \dot{m} \cdot u = \text{konst.} \quad (12-22)$$

$$u \sim \frac{d}{z} \quad \text{mit} \quad d = d_0 \cdot \sqrt{\frac{\rho_0}{\rho_1}} \quad (12-23)$$

Gleichung (12-23) in (12-22) einsetzen und nach  $\dot{m}$  auflösen

$$\dot{m} = \frac{\dot{I}}{u} \sim \text{Konstante} \cdot \frac{z}{d_0} \sqrt{\frac{\rho_1}{\rho_0}} \quad (12-24)$$

**A.IV Herleitung Freistrahmodell Günther u(r,z)**Impulsstrom aus der Düse mit Durchmesser  $d_0$ 

$$\dot{I}_0 = \dot{m}_0 \cdot u_0 = \rho_0 \cdot u_0 \cdot A_0 \cdot u_0 = \rho_0 \cdot u_0^2 \cdot \frac{\pi}{4} \cdot d_0^2 \quad (12-25)$$

Impulsstrom an einer Ebene: Flächenintegral über den achsensymmetrischen ( $\neq f(\varphi)$ ) Freistrah ohne Dichtegradient zur Umgebung (1)  $\rho(r, z) = \rho_1 = \rho_0$

$$\dot{I} = \int_0^{\varphi=2\pi} \int_0^{r=\infty} \rho \cdot u^2 \cdot r \, dr \, d\varphi \quad (12-26)$$

$$\dot{I} = 2\pi \cdot \rho_0 \cdot \int_0^{r=\infty} u^2 \cdot r \, dr$$

Annahme: Ähnlichkeit hinsichtlich  $\eta$ ,  $\frac{u(0,z)}{u_0} \sim \frac{1}{\frac{z}{d_0}}$ , Steigungsrate B

$$u = u_0 \cdot B \cdot \frac{1}{\frac{z}{d_0}} \cdot f(\eta) \quad (12-27)$$

Annahme: Radiale Profile entsprechen Gauß'schen Verteilungsfunktion mit Konstante C:

$$f(\eta) = \exp(-C \cdot \eta^2) \quad (12-28)$$

Gleichung (12-27)+(12-28) in (12-26)

$$\dot{I} = 2\pi \cdot \rho_0 \cdot \int_0^{r=\infty} (u_0 \cdot B \cdot \frac{1}{\frac{z}{d_0}} \cdot \exp(-C \cdot \eta^2))^2 \cdot r \, dr \quad (12-29)$$

Gleichung (12-25) + (12-29) gleichsetzen  $\dot{I}_0 = \dot{I}$ 

$$\rho_0 \cdot u_0^2 \cdot \frac{\pi}{4} \cdot d_0^2 = 2\pi \cdot \rho_0 \cdot \int_0^{r=\infty} (u_0 \cdot B \cdot \frac{1}{\frac{z}{d_0}} \cdot \exp(-C \cdot \eta^2))^2 \cdot r \, dr \quad (12-30)$$

Dimensionsloser Radius

$$\eta = \frac{r}{z} \rightarrow r = z \cdot \eta \quad (12-31)$$

$$\frac{d\eta}{dr} = \frac{1}{z} \rightarrow dr = z \cdot d\eta \quad (12-32)$$

Gleichung (12-31) + (12-32) in (12-30) einsetzen

$$\rho_0 \cdot u_0^2 \cdot \frac{\pi}{4} \cdot d_0^2 = 2\pi \cdot \rho_0 \cdot \int_0^{r=\infty} (u_0 \cdot B \cdot \frac{1}{z} \exp(-C \cdot \eta^2))^2 \cdot \eta \cdot z \cdot z \, d\eta \quad (12-33)$$

$B, u_0, d_0 \neq f(\eta)$

$$\rho_0 \cdot u_0^2 \cdot \frac{\pi}{4} \cdot d_0^2 = 2\pi \cdot u_0^2 \cdot B^2 \cdot d_0^2 \cdot \rho_0 \cdot \int_0^{r=\infty} (\exp(-C \cdot \eta^2))^2 \cdot \eta \cdot \frac{z^2}{z^2} \, d\eta \quad (12-34)$$

$$\frac{1}{8 \cdot B^2} = \int_0^{r=\infty} (\exp(-C \cdot \eta^2))^2 \cdot \eta \, d\eta \quad (12-35)$$

Wolfram Alpha:

$$\int_0^{r=\infty} (\exp(-C \cdot \eta^2))^2 \cdot \eta \, d\eta = -\frac{1}{4 \cdot C} * \exp(-2 \cdot C \cdot \eta^2) \quad (12-36)$$

Aus Gleichung (12-35) mit (12-36) folgt:

$$\frac{1}{8 \cdot B^2} = -\frac{1}{4 \cdot C} \cdot [(-\exp(-C \cdot \infty^2)) - (-\exp(-C \cdot 0^2))] \quad (12-37)$$

$$\frac{1}{8 \cdot B^2} = -\frac{1}{4 \cdot C} \cdot [(-0) - (-1)] \quad (12-38)$$

$$C = 2 \cdot B^2 \quad (12-39)$$

Daraus folgt Gleichung für axiale Geschwindigkeitsverteilung

$$u = u_0 \cdot B \cdot \frac{1}{z} \cdot \exp(-2 \cdot B^2 \cdot \eta^2) \quad (12-40)$$

Mit Substitution:  $c_i = \frac{1}{2 \cdot B} \rightarrow B = \frac{1}{2 \cdot c_i}$

$$u(r, z) = u_0 \cdot \frac{1}{2 \cdot c_i \cdot \frac{z}{d_0}} \cdot \exp\left(-\frac{1}{2 \cdot c_i^2} \cdot \left(\frac{r}{z}\right)^2\right) \quad (12-41)$$

Mit Berücksichtigung eines Dichtegradienten:  $d_0 \rightarrow d_{\ddot{a}q}$  folgt:

$$d_{\ddot{a}q} = d_0 * \sqrt{\frac{\rho_0}{\rho_1}} \quad (12-42)$$

Folgt aus Gleichung (12-41) + (12-42)

$$u(r, z) = u_0 \cdot \frac{1}{2 \cdot c_i \cdot \frac{z}{d_0}} \cdot \sqrt{\frac{\rho_0}{\rho_1}} \cdot \exp\left(-\left(\frac{1}{c_i^2} - \frac{1}{2 \cdot c_i^2}\right) \cdot \left(\frac{r}{z}\right)^2\right) \quad (12-43)$$

## A.V Impulsstromerhaltung im Freistrahlmmodell nach Günther

Freistrahlmmodell nach Günther

$$u(r, z) = u_0 \cdot \frac{1}{2 \cdot c_i \cdot \frac{z}{d_0}} \cdot \sqrt{\frac{\rho_0}{\rho_1}} \cdot \exp \left( - \left( \frac{1}{c_i^2} - \frac{1}{2 \cdot c_i^2} \right) \cdot \left( \frac{r}{z} \right)^2 \right) \quad (12-44)$$

Isotherm  $\rho_0 = \rho_1$

$$u(r, z) = u_0 \cdot \frac{1}{2 \cdot c_i \cdot \frac{z}{d_0}} \cdot \exp \left( - \frac{1}{2 \cdot c_i^2} \cdot \left( \frac{r}{z} \right)^2 \right) \quad (12-45)$$

Impulsstrom an einer Ebene: Flächenintegral über achsensymmetrischen ( $\neq f(\varphi)$ )

Freistrahlm ohne Dichtegradient zur Umgebung (1)  $\rho(r, z) = \rho_1 = \rho_0$

$$\dot{I} = 2\pi \cdot \rho_0 \cdot \int_0^R u^2 \cdot r \, dr \quad (12-46)$$

Gleichung (12-45) einsetzen

$$\dot{I} = 2\pi \cdot \rho_0 \cdot \int_0^R \left( u_0 \cdot \frac{1}{2 \cdot c_i \cdot \frac{z}{d_0}} \cdot \exp \left( - \frac{1}{2 \cdot c_i^2} \cdot \left( \frac{r}{z} \right)^2 \right) \right)^2 \cdot r \, dr \quad (12-47)$$

$$\dot{I} = \frac{\pi \cdot \rho_0 \cdot u_0^2 \cdot d_0^2}{2 \cdot c_i^2 \cdot z^2} \cdot \int_0^R \left( \exp \left( - \frac{1}{2 \cdot c_i^2} \cdot \left( \frac{r}{z} \right)^2 \right) \right)^2 \cdot r \, dr \quad (12-48)$$

Substitution:  $x = r^2 \rightarrow \frac{dx}{dr} = 2 \cdot r \rightarrow dr = \frac{1}{2 \cdot r} \cdot dx$  ;  $\cdot X = R^2$

$$\dot{I} = \frac{\pi \cdot \rho_0 \cdot u_0^2 \cdot d_0^2}{2 \cdot c_i^2 \cdot z^2} \cdot \int_0^{\sqrt{X}} \left( \exp \left( - \frac{x}{2 \cdot c_i^2 \cdot z^2} \right) \right)^2 \cdot \frac{1}{2 \cdot r} \cdot r \, dx \quad (12-49)$$

Integration

$$\dot{I} = \frac{\pi \cdot \rho_0 \cdot u_0^2 \cdot d_0^2}{4 \cdot c_i^2 \cdot z^2} \cdot \left[ \left( - \frac{2 \cdot c_i^2 \cdot z^2}{2} \right) \cdot \exp \left( - \frac{x}{2 \cdot c_i^2 \cdot z^2} \right) \right]_{x=0}^{x=\sqrt{X}} \quad (12-50)$$

Integrationsgrenzen einsetzen

$$\dot{I} = \frac{\pi \cdot \rho_0 \cdot u_0^2 \cdot d_0^2}{4 \cdot c_i^2 \cdot z^2} \cdot \left( \left( - \frac{2 \cdot c_i^2 \cdot z^2}{2} \right) \left[ \exp \left( - \frac{\sqrt{X}}{2 \cdot c_i^2 \cdot z^2} \right) \right] - \left[ \exp \left( - \frac{0}{2 \cdot c_i^2 \cdot z^2} \right) \right] \right) \quad (12-51)$$

Für  $X \rightarrow \infty$

$$\dot{I} = \frac{\pi \cdot \rho_0 \cdot u_0^2 \cdot d_0^2}{4 \cdot c_i^2 \cdot z^2} \cdot \frac{2 \cdot c_i^2 \cdot z^2}{2} = \frac{\pi \cdot \rho_0 \cdot u_0^2 \cdot d_0^2}{4} = \dot{I}_0 \quad (12-52)$$

q.e.d.



## A.VI Bestimmung der empirischen Konstanten im Freistrahlmmodell nach Schlichting

Das Freistrahlmmodell nach Schlichting [91] wurde bereits in Abschnitt 3.1.7 vorgestellt. In diesem Kapitel werden zwei unterschiedlicher Herleitungen aus den Quellen Schlichting (2006) und Pope (2000) verglichen.

Schlichting (S. 672 f) [30]:

$$\frac{u}{u_0} = \frac{1}{8 \cdot \alpha} \cdot \sqrt{\frac{3 \cdot K_a}{\pi}} \cdot \frac{1}{x - x_0} \cdot \frac{1}{\left(1 + \frac{\eta}{8 \cdot \alpha}\right)^2}$$

mit der kinematischen Viskosität  $K_a = f(\nu_t)$

Mit der Annahme eines Halbwertsradius von  $\eta_{0,5u} = 0,086$  folgt in [30] die empirische Konstante  $\alpha = 0,017$ .

Pope (S. 118 ff) [40]:

$$\frac{u}{u_0} = \frac{8 \cdot a \cdot \hat{\nu}_t}{x - x_0} \cdot \frac{1}{(1 + a \cdot \eta)^2}$$

$$\text{mit } a = \frac{\sqrt{2} - 1}{\eta_{0,5u}^2}$$

Außerdem gilt:  $\eta_{0,5u} = 8 \cdot (\sqrt{2} - 1) \cdot \hat{\nu}_t$

Aus Annahme Halbwertsradius:  $\eta_{0,5u} = 0,094$  folgt in [40] die normierte Wirbelviskosität  $\hat{\nu}_t = 0,028$  als konstante über den gesamten .

## A.VII D<sup>2</sup>-Gesetz

Energiebilanz um einen Tropfen

$$\dot{Q}_{Tr} = \dot{Q}_{zu} - \dot{H}_V \quad (12-53)$$

$$\dot{Q}_{zu} = \lambda_g \cdot 4 \cdot \pi \cdot r^2 \frac{dT_{Tr}}{dr} \quad (12-54)$$

$$\dot{H}_V = \dot{m} \cdot (h_V + c_{p,v} \cdot (T_{g,\infty} - T)) \quad (12-55)$$

einsetzen

$$\lambda_g \cdot 4 \cdot \pi \cdot r^2 \frac{dT}{dr} = \dot{Q}_{Tr} + \dot{m} \cdot (h_V + c_{p,v} \cdot (T_{g,\infty} - T)) \quad (12-56)$$

Trennung der Variablen

$$\int_{T_{Tr}}^{T_{g,\infty}} \frac{\lambda_g}{h_V + c_{p,v} \cdot (T_{g,\infty} - T) + \frac{\dot{Q}_{Tr}}{\dot{m}}} dT = \int_{r_{Tr}}^{\infty} \frac{\dot{m}}{4 \cdot \pi \cdot r^2} dr \quad (12-57)$$

Linke Seite von Gleichung (12-57):

$$F(x) = \int \frac{1}{c + ax} dx = \frac{\ln(c + ax)}{a} \quad (12-58)$$

Stammfunktion bilden:

$$\left[ -\frac{1}{c_{p,v}} \ln \left( \frac{\dot{Q}_T}{\dot{m}} + h_v - c_{p,v} \cdot (T - T_{g,\infty}) \right) \right]_{T_{Tr}}^{T_{g,\infty}} \quad (12-59)$$

Integrationsgrenzen einsetzen:

$$-\frac{1}{c_{p,v}} \cdot \left[ \ln \left( \frac{\dot{Q}_{Tr}}{\dot{m}} + h_v \right) - \ln \left( \frac{\dot{Q}_T}{\dot{m}} + h_v - c_{p,v} \cdot (T - T_{g,\infty}) \right) \right] \quad (12-60)$$

Durch Umformen

$$\frac{1}{c_{p,v}} \cdot \left[ \ln \left( 1 + \frac{c_{p,v} \cdot (T_{g,\infty} - T_{Tr})}{\frac{\dot{Q}_T}{\dot{m}} + h_v} \right) \right] \quad (12-61)$$

Mit der Wärmetransportzahl  $B_T$

$$B_T \equiv \frac{c_{p,v} \cdot (T_{g,\infty} - T_{Tr})}{\frac{\dot{Q}_{Tr}}{\dot{m}} + h_v} \quad (12-62)$$

Folgt die Linke Seite von Gleichung (12-57).

$$\frac{1}{c_{p,v}} \cdot [\ln(1 + B_T)] \quad (12-63)$$

Rechte Seite von Gleichung (12-57):

$$\int_{r_{Tr}}^{\infty} \frac{\dot{m}}{4 \cdot \pi \cdot r^2} dr = \left[ -\frac{\dot{m}}{4 \cdot \pi \cdot r} \right]_{r_{Tr}}^{\infty} = \frac{\dot{m}}{4 \cdot \pi \cdot r_{Tr}} \quad (12-64)$$

Durch Gleichsetzen der linken Seite (12-63) und rechten Seite (12-64) von Gleichung (12-57) folgt

$$\frac{1}{c_{p,v}} \cdot [\ln(1 + B_T)] = \frac{\dot{m}}{4 \cdot \pi \cdot r_{Tr}} \quad (12-65)$$

Durch Umformen folgt

$$\dot{m} = 4\pi \cdot r_{Tr} \cdot \frac{\lambda_g}{c_{p,v}} \cdot \ln(1 + B_T) \quad (12-66)$$

Und mit  $2 \cdot r_{Tr} = D_T$  folgt schließlich

$$\dot{m} = 2\pi \cdot D_T \cdot \frac{\lambda_g}{c_{p,v}} \cdot \ln(1 + B_T) \quad (12-67)$$

Grundgleichung ist eine Massenbilanz um den Tropfen

$$\frac{dm_{Tr}}{dt} = -\dot{m} \quad (12-68)$$

Aus der Tropfenmasse nach der Tropfengröße abgeleitet

$$m_{Tr} = \frac{\pi}{6} \cdot D_{Tr}^3 \cdot \rho_{Tr} \quad (12-69)$$

$$\frac{dm_{Tr}}{dD_{Tr}} = \frac{\pi}{2} \cdot D_{Tr}^2 \cdot \rho_{Tr} \quad (12-70)$$

Und dem allgemeinen Zusammenhang

$$\frac{dD_{Tr}^2}{dD_{Tr}} = 2 \cdot D_{Tr} \quad (12-71)$$

Aus Gleichung (12-68) ergibt sich durch einsetzen von Gleichung (12-67), (12-70) und (12-71) das bekannte D<sup>2</sup>-Gesetz (Gleichung(12-72)).

$$\frac{dD_{Tr}^2}{dt} = - \frac{8 \cdot \lambda_G \cdot \ln(1 + B_T)}{\rho_{Tr} \cdot c_{p,v}} \quad (12-72)$$

#### **A.VIII Bestimmung des lokalen und integralen Brennstoffumsatzes im Zweiphasen-Freistrah**

Der lokale Brennstoffumsatz  $x_{BS}(\zeta, \eta)$  wird aus dem Verhältnis der Massen von bereits verdampften Brennstofftropfen ( $m_{BD}$ ) und der gesamten Brennstoffmasse ( $m_{BD} + m_{BF}$ ) in jeder Berechnungszelle mit Gleichung (12-73) bestimmt. Die bereits verdampfte Masse  $m_{BD}$  und die Masse der flüssigen Brennstofftropfen  $m_{BF}$  werden durch Vergleich der lokalen Tropfengrößen  $d_{Tr}$  und den Tropfengrößen an der Düse  $d_{Tr,0}$  bestimmt (siehe Kapitel 6.5).

Für die Bestimmung des integrale Brennstoffumsatzes FC (*engl.*: fuel conversion) werden zunächst die Massenströme von bereits verdampftem Brennstoff (BD) und des gesamten Brennstoffs (BD+BF) benötigt. Die Abschätzung des integralen Massenstroms von Brennstoff durch eine Kontrollebene, wird aus der Berechnung des Massenstrom der Gasphase durch eine Kontrollebene abgeleitet. Für den des Massenstrom der Gasphase wird in Gleichung (12-74) das Flächenintegral über die Gasgeschwindigkeit gebildet. Im 2Ph-FJM wird angenommen, dass sich Tropfen und Vergasungsmedium nicht entmischen und daher an jeder Position dem GLR an der Düse entsprechen (siehe Kapitel 6). Der Massenstrom von Brennstoff durch eine Kontrollebene wird durch Ergänzung des GLR aus Gleichung (12-74) abgeleitet (siehe Gleichung (12-75)). Da  $GLR \neq f(\eta)$ , kann GLR in Gleichung (12-75) vor das Integral gezogen werden. Da Tropfen aufgrund der Trägheit nicht exakt der Gasströmung folgen, wurde in Gleichung (12-74) anstatt der Gasgeschwindigkeit

$u_g(\zeta, \eta)$  in Gleichung (12-75) die massengemittelte Tropfengeschwindigkeit  $\bar{u}_{Tr}(\zeta, \eta)$  verwendet. Zur Abschätzung des Massenstroms der bereits verdampften Tropfen (BD), wird der Massenstrom des gesamten Brennstoffs (BD + BF) aus Gleichung (12-75) mit dem lokalen Umsatz aus Gleichung (12-73) multipliziert (siehe Gleichung (12-76)). Das Verhältnis der Massenströme des bereits verdampften Brennstoffs  $\dot{m}_{BD}$  und dem gesamten Brennstoff ( $\dot{m}_{BF} + \dot{m}_{BD}$ ) ist der integrale Brennstoffumsatz (siehe Gleichung (12-77)).

Lokaler Brennstoffumsatz

$$x_{BS}(\zeta, \eta) = \frac{m_{BD}(\zeta, \eta)}{m_{BF}(\zeta, \eta) + m_{BD}(\zeta, \eta)} \quad (12-73)$$

Massenstrom Gas durch Kontrollebene

$$\dot{m}_{BS}(\zeta) = 2\pi \cdot \int_{\eta=0}^{\infty} \rho_g(\zeta, \eta) \cdot u_g(\zeta, \eta) \cdot \eta \, d\eta \quad (12-74)$$

Massenstrom Brennstoff (BD + BF) durch Kontrollebene

$$\dot{m}_{BS}(\zeta) = 2\pi \cdot GLR \cdot \int_{\eta=0}^{\infty} \rho_g(\zeta, \eta) \cdot \bar{u}_{Tr}(\zeta, \eta) \cdot \eta \, d\eta \quad (12-75)$$

Massenstrom Brennstoff (BD + BF) durch Kontrollebene

$$\dot{m}_{BD}(\zeta) = 2\pi \cdot GLR \cdot \int_{\eta=0}^{\infty} \rho_g(\zeta, \eta) \cdot \bar{u}_{Tr}(\zeta, \eta) \cdot x_{BS}(\zeta, \eta) \cdot \eta \, d\eta \quad (12-76)$$

Integraler Brennstoffumsatz (*engl.*: fuel conversion):

$$FC(\zeta) = \frac{\dot{m}_{BD}(\zeta)}{\dot{m}_{BS}(\zeta)} \quad (12-77)$$

## B Vergleich unterschiedlicher Korrelation für den $c_w$ -Wert zur Berechnung der Tropfenbeschleunigung

Die Gleichungen (12-79)-(12-81) zeigen die in der Literatur häufig verwendeten Korrelationen mit den entsprechenden Gültigkeitsbereichen [125–127]. Diese Korrelationen sind alle Erweiterungen des Stoke'schen Gesetzes (Gleichung (12-78)). Keine dieser Korrelation ist sowohl im Bereich sehr kleiner als auch sehr großer Reynold-Zahlen gültig.

$$c_w = \frac{24}{Re_{Tr}} \quad \text{für } Re_{Tr} < 0,5 \quad (12-78)$$

$$c_w = \frac{24}{Re_{Tr}} \cdot \left(1 + \frac{3}{16} \cdot Re_{Tr}\right) \quad \text{für } Re_{Tr} < 5 \quad (12-79)$$

$$c_w = \frac{24}{Re_{Tr}} \cdot \left(1 + 0,15 \cdot Re_{Tr}^{0,687}\right) \quad \text{für } Re_{Tr} < 800 \quad (12-80)$$

$$c_w = \frac{24}{Re_{Tr}} + \frac{5,48}{Re_{Tr}^{0,573}} + 0,36 \quad \text{für } Re_{Tr} < 10^4 \quad (12-81)$$

$$c_w = a_1 + \frac{a_2}{Re_{Tr}} + \frac{a_3}{Re_{Tr}^2} \quad (12-82)$$

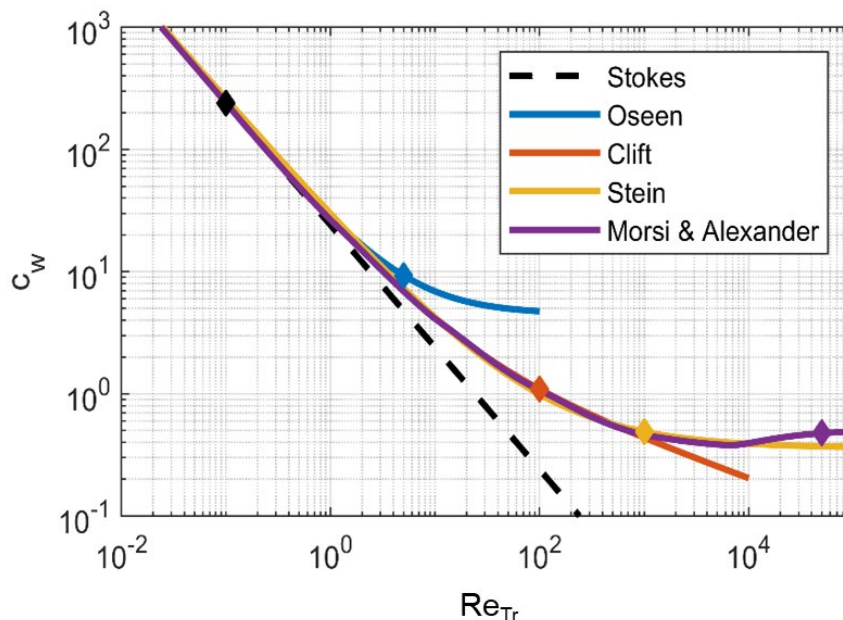


Abbildung 12-1 Vergleich der Korrelationen für den Widerstandbeiwert von runden glatten Partikeln. Das Ende des Gültigkeitsbereichs ist mit  $\diamond$  gekennzeichnet.

Haider & Levenspiel (1989) [151] untersuchen den Widerstandkoeffizient von nicht-sphärische Partikel. Dabei wird die Sphärizität  $\Phi$  als Parameter herangezogen, die aus dem Verhältnis der Oberfläche einer volumengleichen Kugel zur Oberfläche des betrachteten Partikels gebildet wird und die Abweichung von der Kugelform ( $\Phi = 1$ ) beschreibt. Für kleine Reynold-Zahlen am Partikel und einer Sphärizität von  $\Phi > 0,5$  ergeben sich nur sehr geringe Abweichungen zur Standardkurve von sphärischen Partikeln. Für kleinere Sphärizitäten des Partikels zeigt sich ein deutlich erhöhter Widerstandkoeffizient. Für große Reynold-Zahlen am Partikel ergibt sich eine deutliche Erhöhung des Widerstandskoeffizienten im Vergleich zur Standardkurve der runden Kugel [118].

Neben den bereits beschriebenen Kräften existieren weitere äußere Kräfte, die am Partikel auftreten können. Erfährt ein Partikel eine Beschleunigung, so wird an der Oberfläche,

aufgrund der Haftbedingung der Gasphase an der Partikeloberfläche, sowie im Nachlauf des Partikels umgebendes Fluid mitbeschleunigt. Diese zusätzliche Masse bei der Partikelbeschleunigung kann in der Bewegungsgleichung als virtuelle Masse und Basset-Kraft berücksichtigt werden. Ist das Partikel zusätzlich zur translatorischen Bewegung in Rotation versetzt, so tritt eine Magnus-Kraft auf. Dabei wird durch die Rotation des Partikels Fluid an einer Seite des Partikels beschleunigt. Auf der gegenüberliegenden Seite ist die Rotation entgegen der Anströmrichtung gerichtet und bremst umströmendes Fluid ab. Dadurch entsteht ein Druckunterschied, der das Partikel quer zur Anströmrichtung des Fluid beschleunigt. Diese zusätzlichen äußeren Kräfte, Magnus-Kraft, virtuelle Masse und Basset-Kraft, sind im Vergleich zur Widerstandskraft allerdings gering und werden im Rahmen dieser Arbeit nicht weiter berücksichtigt. [152]

## C Messungen des lokalen Mischungsbruchs in der Gasphase (alle Messungen)

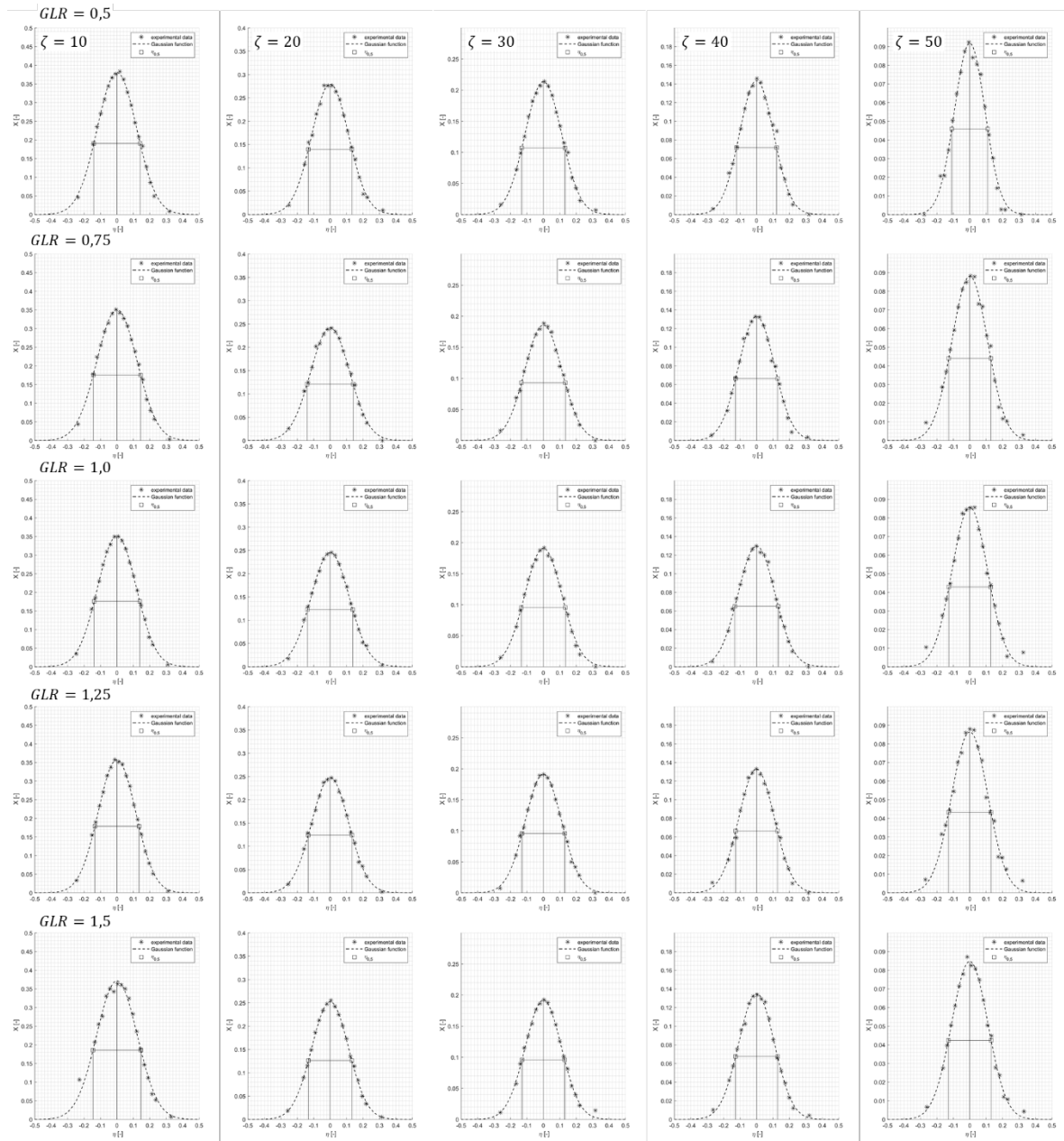


Abbildung 12-2 Lokaler Mischungsbruch von Zerstäubungsmedium in der Gasphase des Zweiphasen-Freistrahls aus den Tracergas-Messungen (Helium) bestimmt und gefittet Gauß-Funktion für Düse 1.

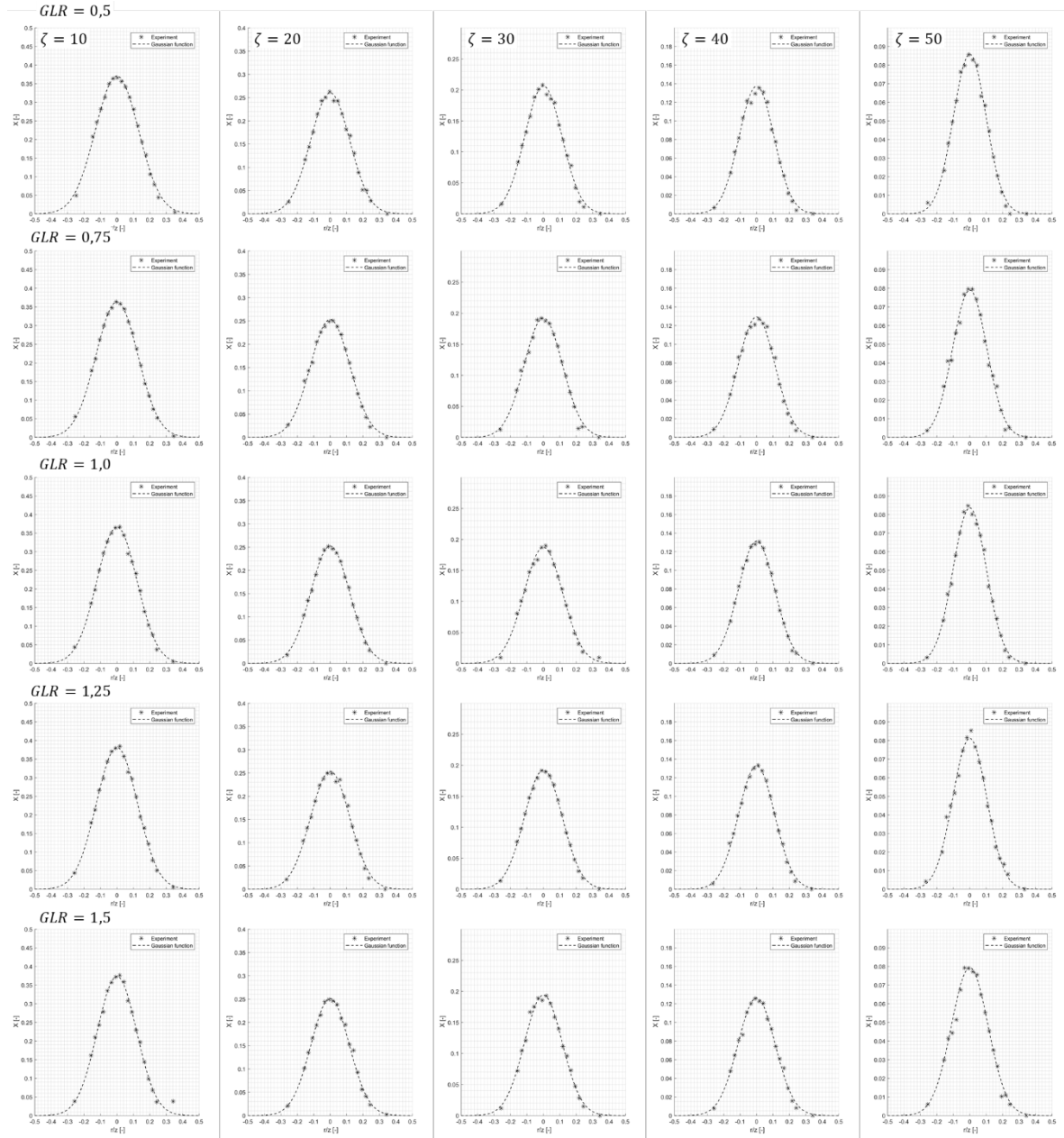


Abbildung 12-3 Lokaler Mischungsbruch von Zerstäubungsmedium in der Gasphase des Zweiphasen-Freistrahls aus den Tracergas-Messungen (Helium) bestimmt und gefittet Gauß-Funktion für Düse 2.



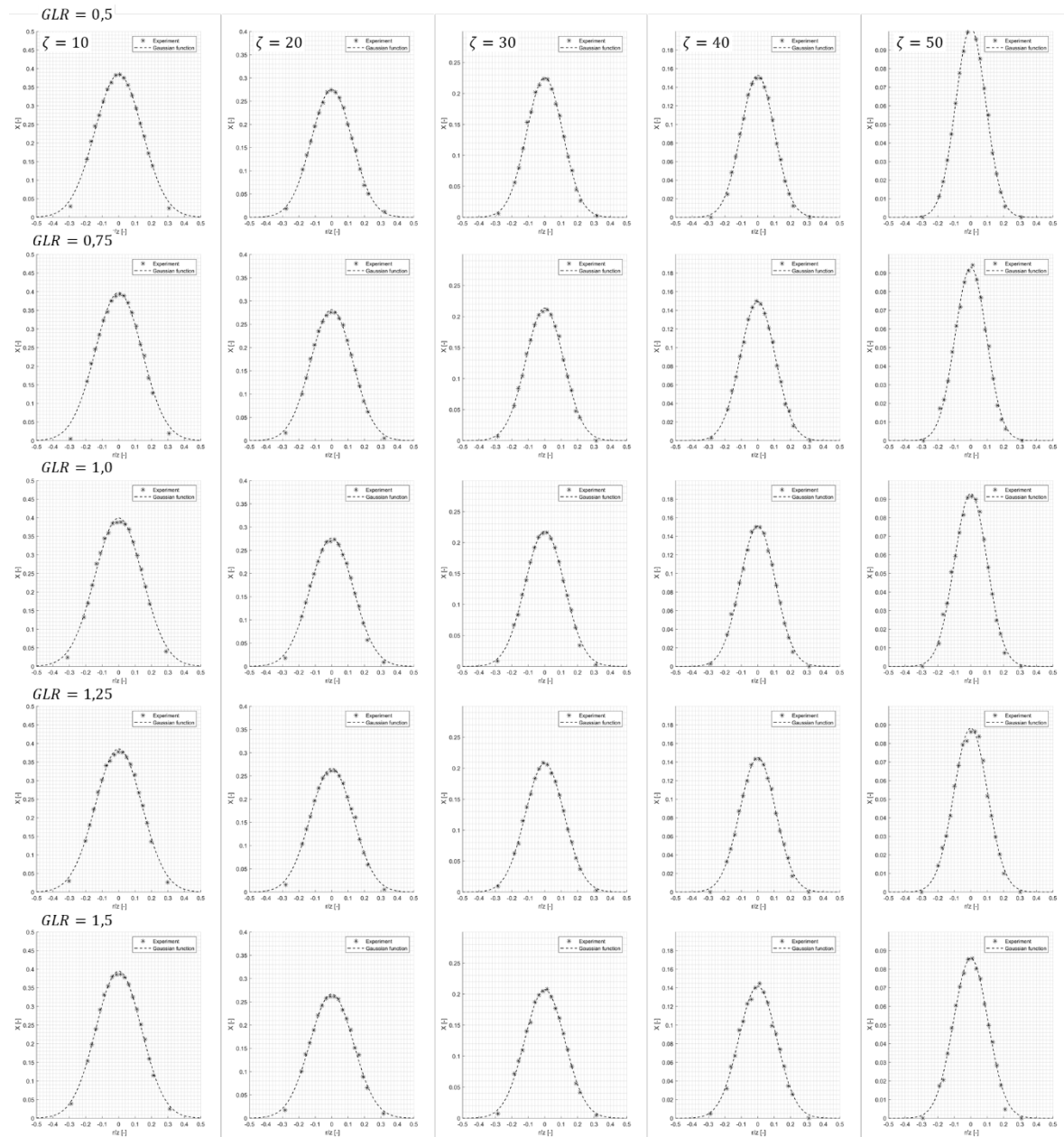


Abbildung 12-4 Lokaler Mischungsbruch von Zerstäubungsmedium in der Gasphase des Zweiphasen-Freistrahls aus den Tracergas-Messungen (Helium) bestimmt und gefittet Gauß-Funktion für Düse 3.