

Beitrag zur mathematischen Modellierung der Gemischaufbereitung flüssiger Brennstoffe in Luft

Von der Fakultät für Georessourcen und Materialtechnik
der Rheinisch Westfälischen Technischen Hochschule Aachen

zur Erlangung des akademischen Grades eines
Doktors der Ingenieurwissenschaften
genehmigte Dissertation

vorgelegt von Diplom-Ingenieur

André Wittmer

aus Lissabon

Berichter: Univ.-Prof. Dr.-Ing. H. Köhne
Univ.-Prof. Dr.-Ing. K. Görner

Tag der mündlichen Prüfung: 14. Mai 2004

Inhaltsverzeichnis

| | | |
|----------|--|-----------|
| 1 | Einleitung | 1 |
| 2 | Vom flüssigen Brennstoff zum Gemisch | 4 |
| 2.1 | Zerfall der Flüssigkeit | 6 |
| 2.2 | Die Fortentwicklung des Sprays | 13 |
| 2.2.1 | Verdunstung von Tropfen | 13 |
| 2.2.2 | Sekundärzerfall durch Kollision mit Wänden | 14 |
| 2.3 | Tropfenmodell | 15 |
| 3 | Zündvorgänge und Niedertemperaturreaktionen | 17 |
| 3.1 | Kinetik homogener Zündungen | 17 |
| 3.2 | Langsame Oxidation und Kalte Flammen | 22 |
| 3.3 | Reaktionsmechanismus für <i>n</i> -Heptan | 24 |
| 3.3.1 | Reduzierte Mechanismen | 24 |
| 3.3.2 | Globale einfache Modelle | 26 |
| 4 | Experimentelle Untersuchung der Gemischaufbereitung | 30 |
| 4.1 | Versuchsaufbau | 30 |
| 4.2 | Ergebnisse | 34 |
| 5 | Mathematisches Modell | 37 |
| 5.1 | Anfangsbedingungen für die Tropfenbahnen | 37 |
| 5.2 | Thermische Modellierung des NTC-Verhaltens | 38 |
| 5.3 | Quellterm zur numerischen Simulation | 43 |
| 5.4 | 5-Schritt Reaktionsmechanismus | 44 |
| 6 | Numerische Simulation kontinuierlich durchströmter Reaktoren | 48 |
| 6.1 | Modelle der Apparaturen zur Untersuchung der Gemischaufbereitung | 48 |
| 6.1.1 | Isopropanol-Verdampfer | 49 |
| 6.1.2 | Rohrreaktor zur Ermittlung von Zündverzugszeiten | 53 |
| 6.1.3 | Kalte Flammen Reaktor mit Rezirkulationsrohr | 54 |
| 6.2 | Ergebnisse der Simulationsrechnungen | 56 |
| 6.2.1 | Thermisches Modell | 56 |
| 6.2.2 | Chemisches Modell | 65 |
| 7 | Zusammenfassung | 70 |

| | |
|--|-----------|
| Literaturverzeichnis | 72 |
| A Verwendete Formelzeichen | 78 |
| B Anhang | 83 |
| B.1 Tropfengrößenverteilung | 83 |
| B.2 Fehlerfortpflanzung | 84 |
| B.3 Stoffwerte | 84 |
| B.4 Versuchsmatrix | 84 |
| B.5 Ergänzende Rechnung mit dem 5-Schritt Reaktionsmechanismus | 86 |