

Technische Universität München
Institut für Energietechnik

Lehrstuhl für Thermodynamik

Effiziente numerische Simulation des Deflagrations–Detonations–Übergangs

Florian Anton Ettner

Vollständiger Abdruck der von der Fakultät für Maschinenwesen der
Technischen Universität München zur Erlangung des akademischen Grades
eines

DOKTOR – INGENIEURS

genehmigten Dissertation.

Vorsitzender:

Univ.–Prof. Rafael Macián–Juan, Ph.D.

Prüfer der Dissertation:

1. Univ.–Prof. Dr.–Ing. Thomas Sattelmayer
2. Univ.–Prof. Dr. rer. nat. Hans–Josef Allelein,
RWTH Aachen

Die Dissertation wurde am 18.10.2012 bei der Technischen Universität München eingereicht
und durch die Fakultät für Maschinenwesen am 08.01.2013 angenommen.

Vorwort

Die vorliegende Arbeit entstand am Lehrstuhl für Thermodynamik der Technischen Universität München während meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Assistent. Sie wurde durch das Bundesministerium für Wirtschaft und Technologie über die Gesellschaft für Reaktorsicherheit gefördert.

Mein besonderer Dank gilt meinem Doktorvater Prof. Dr.–Ing. Thomas Sattelmayer für die Betreuung der Arbeit und die Übernahme des Hauptreferats. Darüber hinaus möchte ich mich bei ihm für das in mich gesetzte Vertrauen, die gewährten wissenschaftlichen Freiräume und die wertvollen Impulse zum Gelingen dieser Arbeit bedanken. Prof. Dr. rer. nat. Hans–Josef Allelein danke ich für die freundliche Übernahme des Koreferats und Prof. Rafael Macián–Juan, Ph.D., für die Übernahme des Vorsitzes bei der mündlichen Prüfung.

Für die freundschaftliche Zusammenarbeit möchte ich mich bei allen aktuellen und ehemaligen Mitarbeitern des Lehrstuhls herzlich bedanken. Mein besonderer Dank gilt dabei meinem Projektkollegen Klaus Vollmer, mit dem ich gemeinsam viele Höhen und Tiefen durchleben durfte. Für wertvolle Anregungen und fruchtbare Diskussionen danke ich Prof. Dr.–Ing. Dr.–Ing. E. h. Franz Mayinger, Dr.–Ing. Christoph Hirsch, Daniel Morgenweck, Attila Török, Tobias Holzinger und Frédéric Collonval. Über die Lehrstuhlsgrenzen hinweg kamen wertvolle Beiträge zum Gelingen dieser Arbeit von Dr.–Ing. Oliver Borm und Steffen Schmidt. Prof. Wolfgang Polifke, Ph.D., danke ich für die angenehme und lehrreiche Zusammenarbeit bei der Betreuung der Vorlesung „Wärmetransportphänomene“.

Zum Gelingen dieser Arbeit haben darüber hinaus zahlreiche Studenten beigetragen, von denen ich Sebastian Kaindl, Rudolf Toroczky und Nicolai Stadlmair besonders hervorheben möchte. Helga Bassett und Sigrid Schulz–Reichwald danke ich für die Unterstützung in sämtlichen organisatorischen Angelegenheiten.

Abschließend danke ich von ganzem Herzen meiner Familie und vor allem meinen Eltern für ihre unermüdliche Unterstützung.

Kurzfassung

Um Sicherheitsanalysen für Kernkraftwerke zu verbessern, muss untersucht werden, ob bei schweren Unfällen entstehende Wasserstoff–Luft–Gemische deflagrativ abbrennen oder ob eine Deflagrations–Detonations–Transition (DDT) auftritt. In dieser Arbeit wurde ein CFD–Solver entwickelt, um den gesamten Verbrennungsablauf inklusive DDT zu simulieren. Der dichtebasierete Solver beinhaltet sowohl ein deflagratives Verbrennungsmodell als auch ein Selbstzündmodell. Beide Modelle sind über eine Fortschrittsvariable gekoppelt. Bei der Anwendung auf homogene und inhomogene Gemische zeigt sich eine sehr gute Übereinstimmung mit Experimenten. Je nach vorliegenden Randbedingungen können Wasserstoffkonzentrationsgradienten die DDT–Neigung gegenüber homogenen Gemischen entweder verringern oder erhöhen. Unter Umständen können gerade in mageren Gebieten extrem hohe Drucklasten auftreten. Dies gilt es bei zukünftigen Sicherheitsanalysen zu berücksichtigen.

Abstract

In order to improve safety analyses of nuclear power plants, it is necessary to investigate if hydrogen–air mixtures (created in severe accidents) burn in a deflagrative manner or whether a deflagration–to–detonation transition (DDT) occurs. In this work a CFD solver has been developed for the simulation of a complete combustion process including DDT. The density–based solver incorporates a deflagration model and an auto–ignition model which are coupled via a progress variable. The application to both homogeneous and inhomogeneous mixtures shows very good agreement with experiments. Depending on the boundary conditions the presence of a hydrogen concentration gradient can either increase or decrease the probability of DDT when compared to a homogeneous mixture. Under certain circumstances extremely high pressure loads occur even in areas of low hydrogen content. This should be taken into consideration in future safety analyses.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Motivation	1
1.2	Problembeschreibung	3
2	Grundlagen	9
2.1	Laminare und turbulente Deflagration	9
2.1.1	Laminare Verbrennung	9
2.1.2	Turbulente Strömung	12
2.1.3	Turbulenz–Chemie–Interaktion	13
2.2	Detonation: Eindimensionale Betrachtung	16
2.3	Detonation: Mehrdimensionale Betrachtung	20
2.4	Deflagrations–Detonations–Übergang (DDT)	22
3	Modellierung	31
3.1	Stoffeigenschaften	31
3.2	Erhaltungsgleichungen	32
3.2.1	Differentielle Erhaltungsgleichungen	32
3.2.2	Turbulente Mittelung	35
3.2.3	Modellierung der unbekanntenen Terme	37
3.3	Diskretisierung	39
3.3.1	Druckbasierte und dichte-basierte Lösungsverfahren	39
3.3.2	Rekonstruktionsverfahren	42
3.3.3	HLLC–Solver	43
3.3.4	Validierung am Stoßwellenrohr	47
3.4	Modellierung der turbulenten Deflagration	51
3.4.1	Übersicht	51
3.4.2	Bestimmung des deflagrativen Quellterms	53
3.4.3	Erweiterung auf inhomogene Gemische	61
3.4.4	Berechnung der Stoffwerte des unverbrannten Gemisches	62

3.5	Modellierung der detonativen Verbrennung	62
3.5.1	Modellierung der Selbstzündung	63
3.5.2	Min–Max–Modell	67
4	Anwendung auf die GraVent–Anlage	73
5	Ergebnisse und Diskussion	79
5.1	Rechnungen mit homogenem Gemisch	79
5.2	Rechnungen mit Konzentrationsgradient	84
5.3	Einfluss der Hindernisgröße	94
5.4	Drucklasten auf die umgebende Struktur	104
5.5	Fazit	108
6	Kritische Analyse und Ausblick	111
7	Zusammenfassung	115
	Literaturverzeichnis	119
	Anhang	141
A	Kenngrößen für Wasserstoff–Luft–Gemische	141
B	Verlauf der Kennzahlen im Borghi–Diagramm	143
C	Vergleich der Berechnungsverfahren für Temperatur und Druck über innere Energie und Enthalpie	144
D	Herleitung der Druckgleichung	145
E	Polynome für den Wasserstoffgehalt in Rechnungen mit Gradient	146
F	Berechnung der Zustände hinter einem senkrecht reflektierten Stoß	147
G	Druckschriebe aus den durchgeführten Simulationen	148

Abbildungsverzeichnis

1.1	Prinzipskizze eines Explosionskanals mit Hindernissen.	4
2.1	Laminare Brenngeschwindigkeit von Wasserstoff–Luft–Flammen bei Standardbedingungen.	11
2.2	Borghì–Diagramm nach Peters.	15
2.3	p – v –Diagramm mit Rayleigh–Geraden und Hugoniot–Kurven.	19
2.4	Numerische und experimentelle Rußschriebe.	21
2.5	Makroskopische Einteilung von DDT–Vorgängen.	25
2.6	Temperaturverlauf O’Conaire–Mechanismus / angepasster Einschnitt–Mechanismus.	28
3.1	Schematische Rekonstruktion einer Variable von den Zellschwerpunkten auf den Randflächen.	43
3.2	Ort–Zeit–Diagramm der Charakteristiken im HLLC–Schema.	44
3.3	Ergebnisse Stoßwellenrohr mit druckbasiertem Solver.	49
3.4	Ergebnisse Stoßwellenrohr mit HLLC erster Ordnung.	49
3.5	Ergebnisse Stoßwellenrohr mit HLLC zweiter Ordnung ohne Limiter.	50
3.6	Ergebnisse Stoßwellenrohr mit HLLC zweiter Ordnung und Limitern.	50
3.7	Vergleich turbulenter Brenngeschwindigkeits–Korrelationen.	58
3.8	Angenommene 1D–Verteilung der Reaktionsfortschrittsvariable – Variante 1.	59
3.9	Angenommene 1D–Verteilung der Reaktionsfortschrittsvariable – Variante 2.	60
3.10	Angenommene 1D–Verteilung der Reaktionsfortschrittsvariable – Variante 3.	60
3.11	Temperaturverlauf in einer isochoren Explosion bei unterschiedlichen Anfangstemperaturen.	64

3.12	Abhängigkeit der Zündverzugszeit von Temperatur, Druck und Wasserstoffgehalt.	65
3.13	Darstellung einer sich bewegenden Diskontinuität in der Finite–Volumen–Methode.	68
3.14	Aufteilung einer Rechenzelle nach dem Min–Max–Modell.	68
3.15	Temperaturanstieg als Funktion des Druckanstiegs.	71
4.1	Prinzipskizze der GraVent–Anlage.	73
4.2	Verlauf des Wasserstoffgehalts über der Kanalhöhe.	74
5.1	Auswertung der Flammenausbreitung in der Konfiguration BR30 mit 15% H ₂ (homogen).	79
5.2	Auswertung der Flammenausbreitung in der Konfiguration BR30 mit 20% H ₂ (homogen).	81
5.3	Druckschriebe für die Konfiguration BR30 mit 20% H ₂ (homogen).	82
5.4	Auswertung der Flammenausbreitung in der Konfiguration BR30 mit 25% H ₂ (homogen).	84
5.5	Auswertung der Flammenausbreitung in der Konfiguration BR30 mit 15% H ₂ (mit Konzentrationsgradient).	84
5.6	DDT durch Interaktion eines reflektierten Stoßes mit der Flammenfront.	86
5.7	Druckschriebe für die Konfiguration BR30 mit 15% H ₂ (mit Konzentrationsgradient).	87
5.8	Auswertung der Flammenausbreitung in der Konfiguration BR30 mit 20% H ₂ (mit Konzentrationsgradient).	88
5.9	Auswertung der Flammenausbreitung in der Konfiguration BR30 mit 25% H ₂ (mit Konzentrationsgradient).	89
5.10	Druck– und Temperaturverteilung vor Erreichen des letzten Hindernisses in der Konfiguration BR30 mit 25% H ₂ (mit Konzentrationsgradient).	89
5.11	DDT durch Selbstzündung am letzten Hindernis.	90
5.12	Druckschriebe für die Konfiguration BR30 mit 25% H ₂ (mit Konzentrationsgradient).	93
5.13	Auswertung der Flammenausbreitung in der Konfiguration BR60 mit 25% H ₂ (homogen).	94
5.14	Druckschriebe für die Konfiguration BR60 mit 25% H ₂ (homogen).	95
5.15	Auswertung der Flammenausbreitung in der Konfiguration BR60 mit 25% H ₂ (mit Konzentrationsgradient).	96

5.16	DDT durch Stoßreflexion am Kanalende.	96
5.17	Druckschriebe für die Konfiguration BR60 mit 25% H ₂ (mit Konzentrationsgradient).	97
5.18	Auswertung der Flammenausbreitung in der Konfiguration BR60 mit 30% H ₂ (homogen).	98
5.19	Auswertung der Flammenausbreitung in der Konfiguration BR60 mit 30% H ₂ (mit Konzentrationsgradient).	99
5.20	Vermischung des Wasserstoffs im unverbrannten Gas bei 30% Blockierrate.	100
5.21	Vermischung des Wasserstoffs im unverbrannten Gas bei 60% Blockierrate.	101
5.22	Stoß-Flammen-Interaktion an einem Hindernis mit Blockierrate 60%.	102
5.23	Verteilung der Drucklasten auf die obere und untere Wand in einem homogenen Gemisch (H ₂ -Gehalt 25%).	104
5.24	Verteilung der Drucklasten auf die obere und untere Wand bei Vorliegen eines Gradienten (H ₂ -Gehalt 25%).	105
5.25	Druckverteilung in einer Detonationsfront mit Konzentrationsgradient (H ₂ -Gehalt 25%).	106
G.1	Druckschriebe für die Konfiguration BR30 mit 15% H ₂ (homogen).149	
G.2	Druckschriebe für die Konfiguration BR30 mit 20% H ₂ (homogen).150	
G.3	Druckschriebe für die Konfiguration BR30 mit 25% H ₂ (homogen).151	
G.4	Druckschriebe für die Konfiguration BR30 mit 15% H ₂ (mit Konzentrationsgradient).	152
G.5	Druckschriebe für die Konfiguration BR30 mit 20% H ₂ (mit Konzentrationsgradient).	153
G.6	Druckschriebe für die Konfiguration BR30 mit 25% H ₂ (mit Konzentrationsgradient).	154
G.7	Druckschriebe für die Konfiguration BR60 mit 25% H ₂ (homogen).155	
G.8	Druckschriebe für die Konfiguration BR60 mit 30% H ₂ (homogen).156	
G.9	Druckschriebe für die Konfiguration BR60 mit 25% H ₂ (mit Konzentrationsgradient).	157
G.10	Druckschriebe für die Konfiguration BR60 mit 30% H ₂ (mit Konzentrationsgradient).	158

Tabellenverzeichnis

3.1	Anfangsbedingungen für die Validierung des Solvers am Stoßwellenrohr.	47
3.2	Diskretisierung der Zündverzugszeiten-Tabelle.	66
5.1	Chapman-Jouguet-Drücke, berechnet mit <i>Cantera</i>	105
A.1	Für Flammenbeschleunigung und DDT relevante Kenngrößen von Wasserstoff in Luft.	142
E.1	Koeffizienten zur Bestimmung des Wasserstoffgehalts in Rechnungen mit Konzentrationsgradient.	146

Symbolverzeichnis

Lateinische Buchstaben

<i>A</i>	Fläche	m^2
<i>a</i>	Schallgeschwindigkeit	m/s
<i>a</i>	Temperaturleitfähigkeit	m^2/s
<i>c</i>	spezifische Wärmekapazität	$\text{J}/(\text{kg K})$
<i>c</i>	Reaktionsfortschritt	-
<i>D</i>	Ausbreitungsgeschwindigkeit (einer Detonation)	m/s
<i>D</i>	Diffusionskoeffizient	m^2/s
<i>e</i>	spezifische innere Energie	J/kg
<i>f</i>	Mischungsbruch	-
<i>G</i>	Quenching-Faktor	-
<i>g</i>	Erdbeschleunigung	m/s^2
<i>H</i>	Heaviside-Funktion	-
<i>h</i>	spezifische Enthalpie	J/kg
<i>I</i>	flächenbezogener Impuls	$\text{N s}/\text{m}^2$
<i>j</i>	Fluss durch Speziesdiffusion	m/s
<i>k</i>	spezifische turbulente kinetische Energie	J/kg
<i>\mathcal{L}</i>	Limitier, Limiterfunktion	-
<i>ℓ</i>	Länge, Längenmaß	m
<i>M</i>	Molmasse	kg/kmol
<i>p</i>	Druck	N/m^2
<i>q</i>	spezifische Wärme	J/kg
<i>q</i>	diffusiver Enthalpiefluss	W/m^2
<i>\mathcal{R}</i>	universelle Gaskonstante	$\text{J}/(\text{mol K})$
<i>R</i>	spezifische Gaskonstante	$\text{J}/(\text{kg K})$
<i>S</i>	Geschwindigkeit (von Charakteristiken)	m/s
<i>s</i>	Brenngeschwindigkeit	m/s
<i>T</i>	Temperatur	K

t	Zeit, Zeitmaß	s
u, v	Geschwindigkeit	m/s
v	spezifisches Volumen	m ³ /kg
x, y, z	kartesische Koordinaten	m
x	Molenbruch	-
y	Massenbruch	-

Griechische Buchstaben

α	Volumenanteil im Min–Max–Modell	-
δ_{ij}	Kronecker–Symbol	-
ε	Dissipationsrate der spez. turb. kinetischen Energie	J/(kg s)
Θ	Temperaturverhältnis	-
κ	Isentropenexponent	-
λ	Wärmeleitfähigkeit	W/(m K)
μ	dynamische Viskosität	kg/(m s)
ν	kinematische Viskosität	m ² /s
ξ	Flammenfaltungsfaktor	-
ρ	Dichte	kg/m ³
σ	Expansionsverhältnis	-
τ	Schubspannung	N/m ²
τ	normierter Massenbruch eines fiktiven Radikals	-
ϕ	allgemeine Variable	
ψ	allgemeine Variable	
Ω	Gesamtreaktionsrate	kg/s
ω	volumetrische Reaktionsrate	kg/(m ³ s)
ω	turbulente Frequenz	s ⁻¹

Hochgestellte Indizes

'	Schwankungsgröße
f	Bildung (formation)
T	transponiert

Tiefgestellte Indizes

0	Standardbedingungen; Zustand vor Wärmezufuhr
1	Zustand nach Wärmezufuhr
CJ	Chapman–Jouguet
cr	kritisch (critical)
eff	effektiv
eq	Gleichgewicht (equilibrium)
F	Flamme
F	Fläche
H ₂	Wasserstoff
ign	Zündung (ignition)
L	laminar
L	links
p	Produkte
p	isobar
R	Radikal
R	rechts
r	Reaktanden
ref	Referenz
T	turbulent
t	total
u	unverbrannt
V	Volumen
v	isochor
vN	von Neumann
x, y, z	kartesische Koordinaten
δ	Reaktionszone
η	Kolmogorov
\perp	senkrecht projiziert
*	Kontaktwelle

Dimensionslose Kennzahlen

CFL	Courant–Friedrichs–Lewy–Zahl
Da	Damköhler–Zahl
Ka	Karlovitz–Zahl

Le	Lewis-Zahl
Ma	Mach-Zahl
Pr	Prandtl-Zahl
Re	Reynolds-Zahl
Sc	Schmidt-Zahl

Abkürzungen

CFD	Computational Fluid Dynamics
CPU	Central Processing Unit
DDT	Deflagration-to-Detonation Transition
DNS	Direct Numerical Simulation
EBU	Eddy Break-Up
EDC	Eddy Dissipation Concept
HLLC	Harten-Lax-van Leer-Contact
KPP	Kolmogorov-Petrovskii-Piskunov
LES	Large Eddy Simulation
PaSR	Partially Stirred Reactor
PDF	Probability Density Function
PISO	Pressure Implicit with Splitting of Operators
PSR	Perfectly Stirred Reactor
RANS	Reynolds-Averaged Navier-Stokes
SST	Shear Stress Transport
SWACER	Shock Wave Amplified Coherent Energy Release
URANS	Unsteady Reynolds-Averaged Navier-Stokes
ZND	Zeldovich-von Neumann-Döring

1 Einleitung

1.1 Motivation

Die ungewollte Freisetzung von Wasserstoff ist in zahlreichen Anwendungen von hoher sicherheitstechnischer Bedeutung, beispielsweise der Automobiltechnik [33, 148, 197, 199], der Verfahrenstechnik [21, 139, 177, 209] und der Kerntechnik [34, 45, 142, 188]. Aufgrund der potentiell katastrophalen Folgen gibt insbesondere die friedliche Nutzung der Kernenergie Anlass, die im Falle eines Unfalls mit Wasserstoff-Freisetzung ablaufenden Vorgänge genauer zu untersuchen.

Die Brennstabhüllen in wassergekühlten Kernreaktoren bestehen üblicherweise aus einer Zirkonium-Legierung. Kommt es aufgrund eines schweren Störfalls zu einem partiellen Kühlmittelverlust, sodass die Brennstäbe freiliegen und überhitzen, wird ab einer Temperatur von etwa 900 °C durch die exotherme Reaktion



gasförmiger Wasserstoff produziert [52]. Darüber hinaus verfügen insbesondere deutsche Kernkraftwerke über eine Kerntragestruktur aus hochlegiertem Stahl, wodurch bei Temperaturen oberhalb von 1000 °C weitere chemische Reaktionen zur Wasserstoffbildung beitragen, insbesondere die Oxidation von Eisen und Chrom. Eine Übersicht über die dabei relevanten Reaktionspfade findet sich in [52].

Falls der Kühlmittelverlust nicht rechtzeitig ausgeglichen wird, kommt es zur Kernschmelze, wobei neben den beschriebenen Mechanismen (während der sogenannten „In-Vessel-Phase“) nach Versagen des Reaktordruckbehälters eine weitere Wasserstoffquelle durch Reaktion der heißen Kernschmelze mit dem metallarmierten Beton des Containments relevant wird („Ex-Vessel-Phase“) [194]. Je nach chemischer Zusammensetzung der Armierung sind dabei unterschiedliche Reaktionspfade für die weitere Wasserstoffentstehung

von Bedeutung [6]. Grundsätzlich ist davon auszugehen, dass das noch unoxidierte in der Kernschmelze vorhandene Zirkonium und Chrom innerhalb von weniger als einer Stunde vollständig oxidiert wird [94]. Anschließend tritt die Reaktion von Wasserdampf mit Eisen, die sich über mehrere Tage hinziehen kann, als Wasserstoffquelle in den Vordergrund. Die dabei dominierenden chemischen Reaktionen sind schwer vorherzusagen, da bei hohen Temperaturen komplexe Gleichgewichtsreaktionen zwischen den verschiedenen Oxidationsstufen des Eisens ablaufen.

Nach einer Studie der Gesellschaft für Reaktorsicherheit [81] können sowohl während der In-Vessel-Phase als auch während der Ex-Vessel-Phase mehrere hundert Kilogramm Wasserstoff freigesetzt werden. Eine umfangreichere Analyse der unterschiedlichen Entstehungswege, Freisetzungsraten und zu erwartenden Wasserstoffmengen findet sich in [94]. Kommt es zur Vermischung des freigesetzten Wasserstoffs mit Luft, entsteht ein in einem weiten Stöchiometriebereich (4–76 Vol.-% H_2 [15]) brennbares Gemisch.

Unfälle, bei denen größere Mengen Wasserstoff auf diese Weise freigesetzt wurden und anschließend zündeten, traten 1979 in Harrisburg/USA [160] und 2011 in Fukushima/Japan [80] auf. Bei dem Reaktorunglück 1984 in Tschernobyl/UdSSR geht man dagegen davon aus, dass die erste, verheerende Explosion physikalischer Art („Wasserdampfexplosion“) war [19]. Ob anschließend eine Wasserstoffexplosion stattfand, ist nach wie vor nicht abschließend geklärt [102].

Um verlässliche Sicherheitskonzepte zu erarbeiten, ist ein genaues Verständnis der bei der Wasserstoff-Umsetzung ablaufenden Vorgänge unverzichtbar. Wird ein ruhendes Wasserstoff-Luft-Gemisch gezündet, bildet sich zunächst eine selbstbeschleunigende, von molekularen und turbulenten Austauschprozessen beherrschte Flamme (Deflagration) aus. Je nach Randbedingungen können hierbei Ausbreitungsgeschwindigkeiten von mehreren hundert Metern pro Sekunde und Überdrücke von mehreren Bar erreicht werden.

Unter Umständen kann eine Deflagration auch plötzlich in eine durch gasdynamische Effekte getriebene Reaktionsfront (Detonation) umschlagen. Die Ausbreitungsgeschwindigkeit der Reaktionsfront, die auftretenden Drücke und damit das Schadenspotenzial sind bei einer Detonation deutlich höher als bei einer lediglich deflagrativ ablaufenden Verbrennung.

Insbesondere der sprunghafte Übergang einer Deflagration in eine Detonation (*Deflagration-to-Detonation Transition* – DDT) ist nach wie vor Gegenstand grundlegender Forschung und kann bisher nur unzureichend modelliert werden. Üblicherweise behilft man sich daher mit Experimenten in Explosionskanälen, um skalierbare Gesetzmäßigkeiten abzuleiten [41, 49, 118]. Da derartige Experimente mit einem hohen Aufwand verbunden sind und die Anwendbarkeit von Kriterien, die an einfachen Geometrien gewonnen wurden, auf komplexere Geometrien mit großer Unsicherheit behaftet ist [35, 56], soll in dieser Arbeit ein Rechenverfahren entwickelt und in einen CFD-Solver (*Computational Fluid Dynamics Solver*) implementiert werden, mit dem DDT-Vorgänge effizient, d.h. bei vertretbarem Rechenaufwand, simuliert und der Einfluss verschiedener Parameter bestimmt werden kann. Dieser Solver soll anschließend auf Experimente, die in einem Explosionsrohr durchgeführt wurden, angewendet werden.

Im Gegensatz zu früheren Arbeiten soll dabei insbesondere berücksichtigt werden, dass Wasserstoff-Luft-Gemische in Unfall-Szenarien nicht homogen, sondern aufgrund des Dichteunterschieds im Allgemeinen geschichtet, d.h. mit vertikalen Konzentrationsgradienten, zu erwarten sind [8, 142]. Da hierzu bisher keine Erfahrungswerte vorliegen, ist zu klären, ob Gemische mit Konzentrationsgradient ein geringeres oder ein höheres Gefährdungspotenzial aufweisen als homogene Gemische desselben Wasserstoffgehalts. Der zu entwickelnde Solver sollte in der Lage sein, experimentell gewonnene Ergebnisse zu reproduzieren und Hilfe bei der Erklärung der physikalisch relevanten Effekte zu geben. Zu dem in der Reaktorsicherheit verfolgten Ziel, eines Tages komplexe Verbrennungsvorgänge inklusive DDT auf Reaktorskala berechnen zu können, soll diese Arbeit einen ersten Beitrag leisten.

1.2 Problembeschreibung

Für die experimentelle Untersuchung von DDT-Vorgängen auf Laborskala werden meist geschlossene Rohre/Kanäle mit rundem oder rechteckigem Querschnitt verwendet, in die das zu untersuchende Gemisch gefüllt und anschließend an einem Kanalende gezündet wird. Die in erster Näherung eindimensionale Flammenausbreitung entlang der Kanalachse erleichtert die experimentelle Erfassung von Druck, Flammenposition und anderen relevan-

ten Größen über der Zeit. Da glatte Kanäle sehr lang sein müssten, um darin eine DDT zu erreichen, werden klar definierte Hindernisse, beispielsweise Platten oder Gitter eingebracht, die die Flammenbeschleunigung forcieren. Ein derartiger Kanal ist in Abb. 1.1 dargestellt.

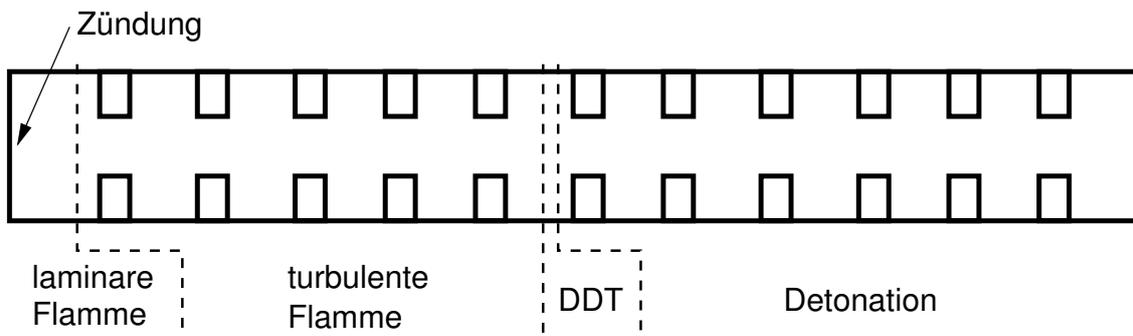


Abbildung 1.1: Prinzipskizze eines Explosionskanals mit Hindernissen.

Die im Kanal zu beobachtende Flammenausbreitung lässt sich in vier Bereiche einteilen. Die Vielzahl der dabei auftretenden Phänomene wird im Folgenden kurz umrissen.

Laminare Flammenausbreitung

Unmittelbar nach der Zündung bildet sich eine laminare Flamme aus. Durch die Expansion der Verbrennungsprodukte wird eine Strömung vor der Flamme induziert. Dadurch brennt die Flamme nicht mehr in ein ruhendes, sondern in ein bewegtes Gemisch hinein. Die von einem laborfesten Beobachter wahrgenommene Flammenausbreitungsgeschwindigkeit u_F kann daher deutlich über der laminaren Brenngeschwindigkeit s_L liegen. Beispielsweise ergibt sich aus einer stationären 1D-Bilanz¹ bei Vorliegen einer festen Rückwand eine Flammenausbreitungsgeschwindigkeit

$$u_F = \sigma s_L = \frac{v_b}{v_u} s_L \quad , \quad (1.1)$$

wobei das Expansionsverhältnis σ dem Verhältnis der spezifischen Volumina von verbranntem und unverbranntem Gas entspricht. Zahlenwerte für das Expansionsverhältnis σ von Wasserstoff-Luft-Gemischen finden sich in Tabelle A.1 in Anhang A. Durch die Expansion und die damit verbundene Stö-

¹ Der mehrdimensionale Fall wird in [27] diskutiert.

ung des anfänglich ruhenden Fluids werden schwache Druckwellen, die sich mit Schallgeschwindigkeit ausbreiten, ausgesandt.

Turbulente Flammenausbreitung

Durch die Haftbedingung an der Kanalwand sowie durch Scherung in der durch die Verbrennung erzeugten Strömung wird Turbulenz generiert. Dadurch wird die Flamme verformt und schlägt in eine turbulente Flamme mit höherer Umsatzrate und damit auch höherer Brenngeschwindigkeit um.² Die sich einstellende turbulente Brenngeschwindigkeit hängt neben der Gemischzusammensetzung im Wesentlichen von dem sich einstellenden Turbulenzniveau ab. Mit zunehmender Brenngeschwindigkeit verstärkt sich wiederum die verbrennungsinduzierte Expansion und damit die Turbulenzerzeugung, sodass es zu einer positiven Rückkopplung kommt und die Flamme immer mehr beschleunigt. Im Folgenden erhöht sich nicht nur die Strömungsgeschwindigkeit, sondern es kommt auch zu einem lokalen Druckanstieg.

Kontinuitätsbedingt bildet die verbrennungsinduzierte Strömung in den Engstellen zwischen den Hindernissen Gebiete hoher Strömungsgeschwindigkeit aus. Erreicht die Flamme diesen Bereich, wird sie stark beschleunigt, tritt zwischen den Hindernissen hindurch und wird anschließend wieder abgebremst, was mit einer transversalen Ausbreitung einhergeht und die Flammenoberfläche, damit auch die Umsatzrate, weiter erhöht. Dieser Effekt wird weiter verstärkt durch Kelvin–Helmholtz–Instabilitäten (Vergrößerung der Flammenoberfläche durch Scherung [158], insbesondere durch Wirbel im Nachlauf der Hindernisse [182]) und Rayleigh–Taylor–Instabilitäten (Vergrößerung der Flammenoberfläche, da Druck- und Dichtegradient nicht gleichgerichtet sind [17]). Zudem wird durch die Scherung der Strömung an den Hindernissen weitere Turbulenz produziert und die Brenngeschwindigkeit weiter erhöht. Die immer stärker werdenden Druckwellen vor der Flamme führen zu einer Vorkompression des unverbrannten Gemisches, was die Temperatur und damit die Schallgeschwindigkeit erhöht. Daher pflanzen sich später entstandene Druckwellen gleicher Stärke schneller fort und können früher entstandene einholen, wodurch erste Verdichtungsstöße entstehen.³ Die mehr-

² Zu den dabei auftretenden Flammeninstabilitäten s. [48, 143, 144, 184, 185].

³ Vergleiche hierzu die Modellvorstellung der Stoßentstehung vor einem bewegten Kolben [130].

fache Interaktion mit Hindernissen führt zur Bildung immer stärkerer Verdichtungsstöße, die komplexe Muster ausbilden können. Trifft ein Stoß auf eine Flammenfront, so werden verbranntes und unverbranntes Gemisch unterschiedlich stark beschleunigt (Richtmyer–Meshkov–Instabilität [48]), was die Flammenoberfläche und damit die Umsatzrate weiter erhöht.

Die erreichbaren Flammenausbreitungsgeschwindigkeiten liegen im Bereich der Schallgeschwindigkeit a_p der (isobar adiabat verbrannten) Produkte. Bei Wasserstoff–Luft–Gemischen entspricht das Geschwindigkeiten von 600 bis über 1000 m/s (s. Tabelle A.1 in Anhang A). Werden Flammenausbreitungsgeschwindigkeiten dieser Größenordnung erreicht, ist in der Regel ein dominanter führender Stoß zu erkennen, dem die Flamme mit etwas Abstand folgt.

Eine weitere Unterteilung der turbulenten Flammenausbreitung durch Vergleich mit der Schallgeschwindigkeit der Reaktanden a_r in langsame ($u_F < a_r$) und schnelle Deflagrationen ($u_F > a_r$) ist dadurch legitimiert, dass im langsameren Regime turbulente Austauschprozesse die Verwinklung der Flammenfront dominieren, während im schnelleren Regime Stöße wesentlich dazu beitragen, über Richtmyer–Meshkov–Instabilitäten Flammenoberfläche zu generieren [48]. DDT kann nur erfolgen, wenn das Regime der schnellen Deflagration erreicht wurde, was ein Gasgemisch mit ausreichender Volumenzunahme während der Verbrennung voraussetzt („ σ -Kriterium“ [50]). Eine ausreichende Volumenzunahme von $\sigma > 3,75$ [72] ist bei Wasserstoff–Luft–Gemischen allerdings schon ab etwa 11 Volumenprozent Wasserstoff gegeben (s. Tabelle A.1 in Anhang A).

DDT

Eine plötzliche lokale Explosion in der Nähe des führenden Stoßes kann bei ausreichender Stärke dazu führen, dass sich eine Detonationsfront ausbildet, auf den führenden Stoß aufläuft und sich die Reaktion ab dieser Stelle gekoppelt mit dem führenden Stoß ausbreitet. Die hierbei auftretenden Druckspitzen liegen oft um ein Vielfaches über denen in einer turbulenten Deflagration. Als letztendlicher Auslöser für die plötzliche Explosion und damit den Übergang sind unterschiedliche Mechanismen in der Diskussion, die in Kap. 2.4 ausführlich dargestellt werden.

Detonation

Nach dem Detonationsübergang dominiert die Gasdynamik die weitere Flammenausbreitung, während laminare und turbulente Effekte vernachlässigbar werden. Die Kompression durch den führenden Stoß ist so stark, dass das Gemisch auf Zündtemperatur gebracht wird und sich eine Reaktionsfront in geringem Abstand hinter dem Stoß einstellt. Während es bei der DDT meist zu einer deutlichen Geschwindigkeitsspitze kommt, sinkt die Ausbreitungsgeschwindigkeit im Anschluss auf einen konstanten Wert im Bereich der Chapman–Jouguet–Geschwindigkeit D_{CJ} (s. Kap. 2.2) ab. Diese liegt bei detonationsrelevanten Wasserstoff–Luft–Gemischen im Bereich von 1300 bis über 2100 m/s (s. Tabelle A.1 in Anhang A).

Bei dem Versuch, DDT–Vorgänge in ihrer Komplexität berechnen zu können, müssen zwangsläufig Abstriche gemacht werden. Ohne Betrachtung des turbulenten Flammenanlaufs kann DDT nur unter künstlich vorgegebenen und damit unrealistischen Anfangsbedingungen untersucht werden. Betrachtet man andererseits die gesamte Flammenbeschleunigung, so sind die anfangs zu berücksichtigenden Phänomene (Dominanz der laminaren und turbulenten Transportprozesse, niedrige Mach–Zahl, je nach Stadium geringe bis mäßige Kompressibilität) denen in einer Detonation (Dominanz der Gasdynamik, hohe Mach–Zahl, hohe Kompressibilität) diametral entgegengesetzt. Erschwerend kommt die große Spreizung der involvierten Längen– und Zeitskalen hinzu, die unmöglich in ihrer Gesamtheit aufgelöst werden können. Gängige Simulationscodes zur Flammenbeschleunigung (z.B. [151]) beschränken sich daher oft darauf, vorherzusagen, ob DDT möglich wäre, und erfordern im Anschluss eine weitere Rechnung mit einem reinen Detonationscode. Diese strikte Trennung soll in dieser Arbeit durchbrochen werden, sodass vollständige DDT–Experimente in Explosionsrohren wie in Abb. 1.1 skizziert nachgerechnet werden können. Neben der Anwendbarkeit bei sicherheitsrelevanten Problemen sind davon auch Erkenntnisse, die auf experimentellem Wege nicht oder nur unter unverhältnismäßig großem Aufwand gewonnen werden können, zu erwarten.

Die dafür erforderlichen Grundlagen sowie die aus der Literatur bekannten Ansätze werden in Kap. 2 zusammengefasst. Das im Rahmen dieser Arbeit entwickelte Rechenverfahren wird in Kap. 3 vorgestellt. Kap. 4 beschreibt die Anwendung des Modells auf das verwendete Referenz–Experiment, die soge-

nannte GraVent-Anlage. Die erzielten Ergebnisse werden in Kap. 5 dargestellt und diskutiert. Kap. 6 rundet die Arbeit mit einer kritischen Analyse und einem Ausblick ab.

2 Grundlagen

Wie in der Einleitung bereits angeklungen, kann eine Verbrennung, worunter man im Allgemeinen die chemische Reaktion zwischen Brennstoff und Oxidator verbunden mit Wärmefreisetzung versteht,¹ auf zwei unterschiedliche Arten erfolgen: Die deflagrative und die detonative. Im Alltag wird fast nur die deflagrative Verbrennung beobachtet. Hierbei beruht die Ausbreitung der Reaktionsfront auf dem Austausch von Wärme und Stoff zwischen dem verbrannten und dem unverbrannten Medium. Dies geschieht in einer laminaren Strömung durch molekulare Vorgänge (Wärmeleitung, Diffusion) oder, sehr viel effektiver, in einer turbulenten Strömung durch turbulente Wirbel, wobei deutlich höhere Umsatzraten als im laminaren Fall erreicht werden. In einer Detonation dagegen werden die Reaktanden durch einen Verdichtungsstoß so stark komprimiert, dass die Selbstzündtemperatur erreicht wird und die chemische Reaktion ohne weitere Transportvorgänge stattfinden kann. Der für eine Detonation notwendige Verdichtungsstoß erfordert zwangsläufig eine Ausbreitung mit Überschallgeschwindigkeit. Die für die Beschreibung beider Regimes wesentlichen Grundlagen werden in diesem Kapitel dargestellt.

2.1 Laminare und turbulente Deflagration

2.1.1 Laminare Verbrennung

Eine deflagrative Flammenfront kann sich sowohl in einem laminaren als auch in einem turbulenten Strömungsfeld ausbreiten. Die für die Ausbildung einer turbulenten Strömung benötigte Reynolds-Zahl

$$\text{Re} = \frac{u \ell}{\nu} \quad (2.1)$$

¹ Sonderformen der Verbrennung, auf die diese Definition nur sehr eingeschränkt zutrifft, sind in [16] beschrieben.

mit der Strömungsgeschwindigkeit u , der Bezugslänge (z.B. Rohrdurchmesser) ℓ und der kinematischen Viskosität ν wird bei den in dieser Arbeit betrachteten Deflagrationsvorgängen meist so früh erreicht, dass die exakte Wiedergabe der laminaren Ausbreitung für die Simulation des DDT-Übergangs vernachlässigbar ist. Allerdings fußt die Modellierung der turbulenten Deflagration auf wesentlichen Größen der laminaren Verbrennung, die im Folgenden beschrieben werden.

Die Ausbreitung einer laminaren Flamme in ein Frischgas hinein erfolgt mit der laminaren Brenngeschwindigkeit s_L . Diese Größe ist experimentell messbar oder kann mit geeigneten Programmen wie z.B. *Cantera* [86] unter Verwendung eines detaillierten Reaktionsmechanismus (z.B. [97, 156, 163]) berechnet werden. Für Wasserstoff in Luft liegt das Maximum der laminaren Brenngeschwindigkeit nicht im stöchiometrischen (Wasserstoff–Molenbruch $x_{\text{H}_2} = 29,4\%$), sondern im leicht fetten Bereich. Experimentelle Ergebnisse für die Brenngeschwindigkeit in Wasserstoff–Luft–Gemischen sind in Abb. 2.1 gezeigt.² Diese wurden bei Standardbedingungen (Temperatur $T_0 = 298\text{ K}$, Druck $p_0 = 1,013\text{ bar}$) gewonnen. Die Messwerte können durch ein Polynom angenähert werden:

$$s_{L,0} = \begin{cases} (-488,9x_{\text{H}_2}^4 + 285,0x_{\text{H}_2}^3 - 21,92x_{\text{H}_2}^2 + 1,351x_{\text{H}_2} - 0,040) \text{ m/s}, & x_{\text{H}_2} \leq 0,35 \\ (-160,2x_{\text{H}_2}^4 + 377,7x_{\text{H}_2}^3 - 348,7x_{\text{H}_2}^2 + 140,0x_{\text{H}_2} - 17,45) \text{ m/s}, & x_{\text{H}_2} > 0,35 \end{cases} \quad (2.2)$$

Der Verlauf dieses Polynoms ist ebenfalls in Abb. 2.1 eingetragen.

Die Abhängigkeit der laminaren Brenngeschwindigkeit von Druck und Temperatur des Frischgases kann man wie folgt formulieren [196]:

$$s_L = s_{L,0} \left(\frac{T}{T_0} \right)^\alpha \left(\frac{p}{p_0} \right)^\beta \quad (2.3)$$

Als Exponenten werden in dieser Arbeit die Werte $\alpha = 1,75$ und $\beta = -0,2$ als konstant angenommen.³

² Die dargestellten Messergebnisse sind alle um den Effekt der Flammenstreckung [9] bereinigt. Ältere Experimente (etwa bis Mitte der 1980er Jahre) ignorierten diesen Effekt, wodurch sich die deutlich größeren Abweichungen in den gemessenen laminaren Brenngeschwindigkeiten in älteren Publikationen erklären [115, 208].

³ Zwar existieren genauere (und komplexere) Korrelationen für die Temperatur- und Druckabhängigkeit der laminaren Brenngeschwindigkeit, diese haben aber im Allgemeinen einen deutlich geringeren Gültigkeitsbereich als in dieser Arbeit benötigt.

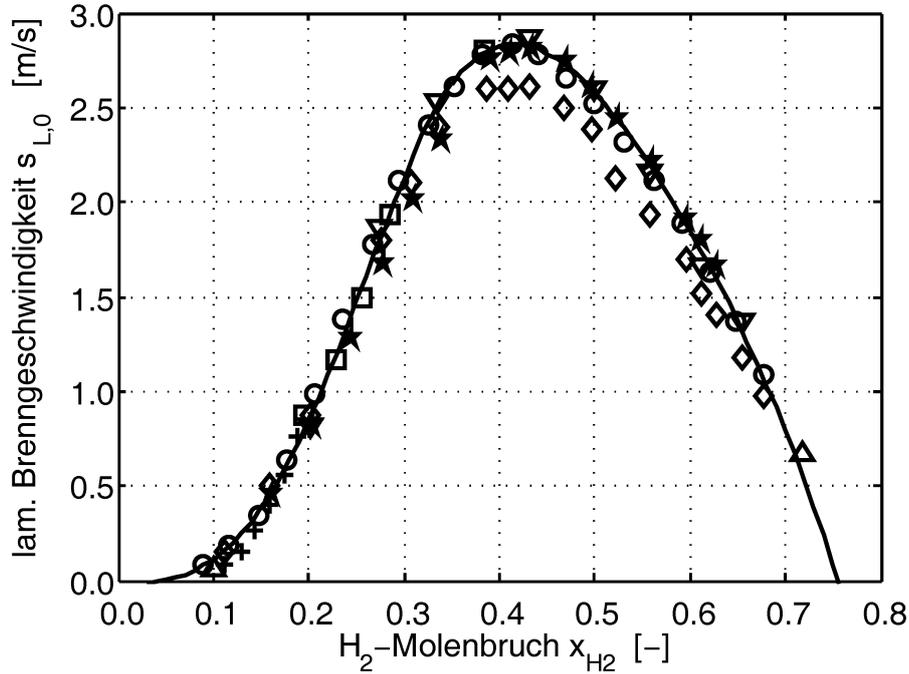


Abbildung 2.1: Laminare Brenngeschwindigkeit von Wasserstoff–Luft–Flammen bei Standardbedingungen. Die experimentellen Ergebnisse stammen aus [9, 10] (\diamond), [51] (\circ), [99] (\triangle), [119] (∇), [195] (\star), [198] ($+$), [208] (\square). Zusammenstellung nach Konnov [115]. Die durchgezogene Linie entspricht Gl. 2.2.

Bei Kenntnis der laminaren Brenngeschwindigkeit kann ein charakteristisches Längenmaß, die Dicke der laminaren Flammenfront, durch Dimensionsanalyse [207] abgeschätzt werden zu

$$\ell_L = \frac{a_u}{s_L} \quad , \quad (2.4)$$

wobei a_u für die mittlere Temperaturleitfähigkeit des Gemisches bezogen auf die Dichte ρ des unverbrannten Gemisches (Index u) steht:

$$a_u = \frac{\lambda}{\rho_u c_p} \quad . \quad (2.5)$$

Hier steht λ für die Wärmeleitfähigkeit und c_p für die spezifische isobare Wärmekapazität des Gemisches. Aus den eingeführten Größen lässt sich unmittelbar ein laminares Zeitmaß festlegen. Es ist definiert als die Zeit, die die Flamme benötigt, um die Strecke ihrer eigenen Dicke zurückzulegen:

$$t_L = \frac{\ell_L}{s_L} = \frac{a_u}{s_L^2} \quad . \quad (2.6)$$

2.1.2 Turbulente Strömung

In einer turbulenten Strömung werden ständig dreidimensionale, irreguläre Wirbelstrukturen produziert, da der in der Hauptströmung enthaltene Impuls größer ist als die Zähigkeitskräfte, was sich in einer großen Reynolds-Zahl (Gl. 2.1) widerspiegelt. Diese Wirbel bewirken Fluktuationen in den lokalen Strömungsgrößen [206]. Die Fluktuationen erscheinen chaotisch und irregulär, können aber durch statistische Größen beschrieben werden [90]. Die turbulenten Wirbel haben eine begrenzte Lebensdauer und tauschen untereinander Energie aus, wobei im Mittel mehr Energie von größeren zu kleineren Wirbeln übertragen wird als umgekehrt. So wird über eine Kaskade immer kleinerer Wirbel [169] die von der Hauptströmung produzierte Turbulenzenergie schließlich in den kleinsten Wirbeln zu Wärme dissipiert. Da turbulente Wirbel den Wärme- und Stoffaustausch erhöhen, hat Turbulenz einen entscheidenden Einfluss auf die Flammenausbreitung. Für eine umfassende Abhandlung des Turbulenz-Phänomens siehe [90, 169, 189]. Im Folgenden sollen nur die für die Berechnung der turbulenten Flammenausbreitung nötigen Größen vorgestellt werden.

Stellt man die Strömungsgeschwindigkeit \vec{u} als Summe einer mittleren Geschwindigkeit $\bar{\vec{u}}$ und einer turbulenten Schwankungsgeschwindigkeit \vec{u}' dar, so kann man die turbulente kinetische Energie k definieren als

$$k = \frac{|\vec{u}'|^2}{2} = \frac{u_x'^2 + u_y'^2 + u_z'^2}{2} \quad . \quad (2.7)$$

Unter der Annahme isotroper Turbulenz kann aus der turbulenten kinetischen Energie eine mittlere skalare Schwankungsgeschwindigkeit u' berechnet werden:

$$u' = \sqrt{\frac{2}{3}k} \quad . \quad (2.8)$$

Die Dissipation der turbulenten kinetischen Energie auf den kleinsten Wirbelskalen geschieht mit der Dissipationsrate ε , die der Transferrate von turbulenter kinetischer Energie von großen zu kleinen Wirbeln entspricht [169]. Ein integrales Längenmaß für die turbulenten Wirbelstrukturen, definiert als energiegewichteter Mittelwert, kann damit zu

$$\ell_T = \frac{u'^3}{\varepsilon} \quad (2.9)$$

bestimmt werden [37]. In analoger Weise kann ein integrales turbulentes Zeitmaß definiert werden als

$$t_T = \frac{\ell_T}{u'} = \frac{2k}{3\varepsilon} \quad , \quad (2.10)$$

was als mittlere Umlaufzeit der energiereichsten Wirbel angesehen werden kann.

Nach Kolmogorovs Gleichgewichtstheorie [112, 113] sind die kleinsten turbulenten Wirbel gerade so groß, dass sie die ihnen zugeführte turbulente Energie vollständig in Wärme dissipieren, da ihre Bewegungsenergie nicht mehr ausreicht, um die viskosen Kräfte zu überwinden. Aus Dimensionsbetrachtungen ergeben sich damit das Kolmogorov–Längenmaß

$$\ell_\eta = \left(\frac{\nu^3}{\varepsilon} \right)^{1/4} \quad (2.11)$$

und das entsprechende Kolmogorov–Zeitmaß

$$t_\eta = \left(\frac{\nu}{\varepsilon} \right)^{1/2} \quad . \quad (2.12)$$

2.1.3 Turbulenz–Chemie–Interaktion

Da Flammenausbreitung und Turbulenz auf unterschiedlichen Längen- und Zeitskalen ablaufen können, sind verschiedene Formen der Interaktion zu beobachten. Zur Klassifizierung in unterschiedliche Flammentypen werden drei dimensionslose Kennzahlen eingeführt [162, 170]. Da es sich dabei lediglich um eine Klassifizierung in Größenordnungen handelt, wird vereinfachend angenommen, dass die molekularen Transportgrößen Viskosität, Temperaturleitfähigkeit und Diffusionskoeffizient identisch sind:

$$\nu = a = D \quad . \quad (2.13)$$

Die turbulente Reynolds–Zahl Re_T vergleicht in Analogie zu Gl. 2.1 den turbulenten Transport durch die energietragenden Wirbel mit dem molekularen Transport:

$$Re_T = \frac{u' \ell_T}{\nu} \quad . \quad (2.14)$$

Die Damköhler-Zahl Da vergleicht das integrale turbulente Zeitmaß mit dem Zeitmaß der laminaren Flamme:

$$Da = \frac{t_T}{t_L} \quad . \quad (2.15)$$

Die Karlovitz-Zahl Ka vergleicht das Zeitmaß der laminaren Flamme mit dem Zeitmaß der kleinsten turbulenten Wirbel. Mit den Gleichungen 2.6, 2.11, 2.12 und 2.13 kann sie auch als ein Verhältnis von Längenmaßen formuliert werden:

$$Ka = \frac{t_L}{t_\eta} = \left(\frac{\ell_L}{\ell_\eta} \right)^2 \quad . \quad (2.16)$$

Dass diese Kennzahlen zur Klassifizierung von Flammentypen anschaulich benutzt werden können, wird im sogenannten Borghi-Diagramm [23, 24] deutlich, in dem das Verhältnis von u' und s_L über dem Verhältnis von ℓ_T und ℓ_L aufgetragen wird. Bei doppelt logarithmischer Auftragung entsprechen Linien konstanter Kennzahlen Geraden im Borghi-Diagramm (s. Anhang B):

$$\frac{u'}{s_L} = \text{Re}_T \left(\frac{\ell_T}{\ell_L} \right)^{-1} = \text{Da}^{-1} \left(\frac{\ell_T}{\ell_L} \right) = \text{Ka}^{2/3} \left(\frac{\ell_T}{\ell_L} \right)^{1/3} \quad . \quad (2.17)$$

Das ursprüngliche Borghi-Diagramm wurde von mehreren Autoren modifiziert. Nach aktuellem Wissensstand ist dabei das in Abb. 2.2 dargestellte Borghi-Diagramm nach Peters [162] zutreffender als frühere Versionen [23, 24]. Der Argumentation von Poruba [170] folgend wird anhand dieser Version des Borghi-Diagramms die Klassifizierung der Flammentypen vorgenommen.

Bei turbulenten Reynolds-Zahlen $\text{Re}_T < 1$ breitet sich die Flammenfront in einem laminaren Strömungsfeld aus. Der turbulente Bereich mit $\text{Re}_T > 1$ und $Ka < 1$ wird als Flamelet-Bereich bezeichnet. Aus Gl. 2.16 folgt, dass bei $Ka < 1$ die chemische Reaktion schneller abläuft als die Bewegung der kleinsten Wirbel bzw. dass die laminare Flammenfrontdicke kleiner ist als die kleinsten Wirbel. Damit können die turbulenten Wirbel nicht in die Flammenfront eindringen und diese zerstören, sondern lediglich die Flammenoberfläche in ihrer Gesamtheit verformen. Der Flamelet-Bereich selbst lässt sich wiederum in zwei Bereiche unterteilen. Im Bereich $u'/s_L < 1$ treten vornehmlich gewellte Flamelets auf. Obwohl sich turbulente Wirbel ausbilden, dominiert in diesem

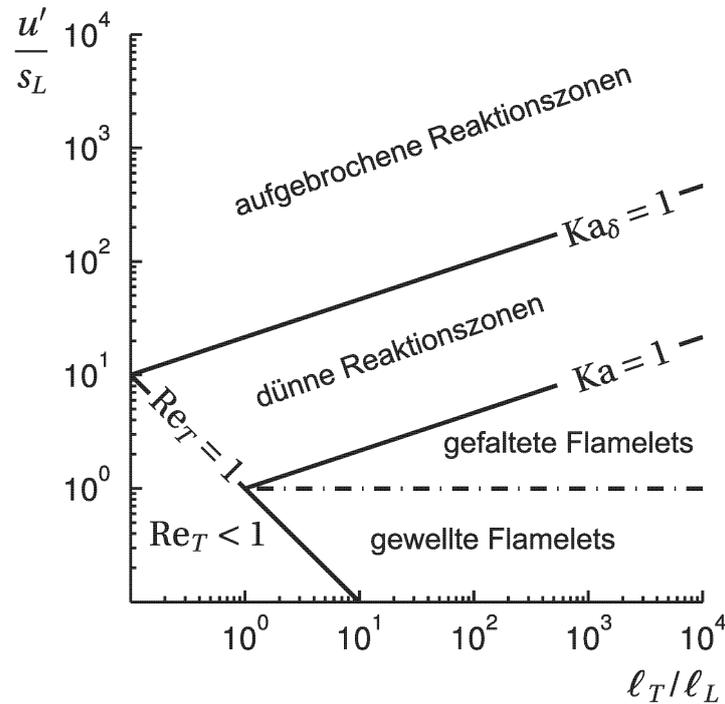


Abbildung 2.2: Borghi-Diagramm nach Peters [162].

Regime die laminare Flammenausbreitung, da nicht einmal die großen energietragenden Wirbel mit ihrer Geschwindigkeit gegen die laminare Brenngeschwindigkeit ankommen [162]. Im Bereich der Flamelets mit $u'/s_L > 1$ kommt es mit Annäherung an die $Ka=1$ -Linie zu einer zunehmenden Faltung der Flammenfront, womit auch die räumliche Abtrennung einzelner brennender Bereiche einhergeht. Durch die deutlich vergrößerte Flammenoberfläche steigt die Umsatzrate und damit die turbulente Brenngeschwindigkeit stark an.

Im Gegensatz zum ursprünglichen Borghi-Diagramm [23, 24] spielt die Damköhler-Zahl für die Charakterisierung der Flammentypen im Borghi-Diagramm nach Peters [162] keine Rolle mehr. Stattdessen wird eine zweite Karlovitz-Zahl basierend auf der Dicke ℓ_δ der Reaktionszone der laminaren Flamme gebildet. Mit der Abschätzung, dass die Reaktionszone etwa ein Zehntel der gesamten Flammendicke ausmacht [162, 170], erhält man analog zu Gl. 2.16 die auf die Reaktionszone bezogene Karlovitz-Zahl

$$Ka_\delta = \frac{t_\delta}{t_\eta} = \left(\frac{\ell_\delta}{\ell_\eta} \right)^2 = \frac{1}{100} Ka \quad . \quad (2.18)$$

Damit kann man wie folgt argumentieren: Im Bereich $Ka > 1$ aber $Ka_\delta < 1$, der als Bereich der dünnen Reaktionszonen bezeichnet wird, dringen die kleinsten Wirbel zwar in die Struktur der Vorwärmzone ein, vermögen aber nicht, die Struktur der Reaktionszone zu zerstören. Damit wird zwar neben der Erhöhung der Flammenoberfläche auch die Vorwärmzone stärker durchmischt, die Reaktionszone bleibt aber intakt. Die Brenngeschwindigkeit steigt gegenüber den gefalteten Flamelets weiter an.

Im Bereich $Ka_\delta > 1$ sind schließlich die kleinsten turbulenten Wirbel kleiner als die Reaktionszone, sodass diese zerrissen wird. Damit greift die Turbulenz in die Reaktion so weit ein, dass sie Reaktionspartner trennt, bevor die Reaktion vollständig abgelaufen ist, was sich auch in den Zeitmaßen widerspiegelt: $t_\eta < t_\delta$. Es ist keine geschlossene Flammenstruktur mehr vorhanden, sondern es treten zahlreiche teilverbrannte Pakete auf. Daher wird dieses Regime als Bereich der aufgebrochenen Reaktionszonen bezeichnet. Da den Reaktanden nicht mehr ausreichend Zeit zur vollständigen Reaktion bleibt, sinkt die turbulente Brenngeschwindigkeit nach Erreichen eines Maximums ab. Im Extremfall kommt es zum Erlöschen („Quenching“) der Reaktion [1, 166, 201].

2.2 Detonation: Eindimensionale Betrachtung

Die Detonation als separates Verbrennungsphänomen kann zunächst völlig unabhängig von der bisher beschriebenen laminaren und turbulenten Deflagration betrachtet werden. Abgesehen von vereinzelt Vorarbeiten⁴ begann die wissenschaftliche Erforschung von Detonationen im späten 19. Jahrhundert [18, 46, 141]. Damals wurde bereits erkannt, dass in einer Detonation nicht Wärmeleitung und Diffusion die chemische Reaktion auslösen, sondern die schnelle Kompression des unverbrannten Gases durch einen Verdichtungsstoß. Eine quantitative Analyse zur Bestimmung der Ausbreitungsgeschwindigkeit beruht auf den Arbeiten von Chapman [39] und Jouguet [98]. Hierbei wird eine eindimensionale, stationäre, adiabate, reaktive Strömung betrachtet und nur über die Zustände ausreichend vor und hinter der Reaktionsfront bilanziert, wo sich das betrachtete Fluid im chemischen Gleichgewicht befindet. Der Beobachter bewegt sich mit der Reaktionsfront, sodass die im Folgenden betrachteten Geschwindigkeiten als Relativgeschwindigkeiten

⁴ Eine Übersicht findet sich in [126].

zur Reaktionsfront zu verstehen sind. Außerdem wird angenommen, dass es sich um ein ideales Gas mit konstanten Stoffwerten (spezifische isobare Wärmekapazität c_p , spezifische Gaskonstante R und Isentropenexponent κ) handelt. Damit können die Erhaltungsgleichungen von Masse, Impuls und Energie geschrieben werden als

$$\frac{u_0}{v_0} = \frac{u_1}{v_1} \quad , \quad (2.19)$$

$$p_0 + \frac{u_0^2}{v_0} = p_1 + \frac{u_1^2}{v_1} \quad , \quad (2.20)$$

$$h_0 + \frac{u_0^2}{2} = h_1 + \frac{u_1^2}{2} \quad . \quad (2.21)$$

Hier steht der Index „0“ für den Zustand vor und der Index „1“ für den Zustand hinter der Reaktionsfront. u bezeichnet die Geschwindigkeit, v das spezifische Volumen, p den Druck und h die spezifische Enthalpie. Letztere wird weiter aufgetrennt in die Standardbildungsenthalpie h^f bei Referenztemperatur T_{ref} und die fühlbare Enthalpie $c_p(T - T_{\text{ref}})$,

$$h = h^f + c_p(T - T_{\text{ref}}) \quad , \quad (2.22)$$

wobei die Reaktionswärme

$$q = h_0^f - h_1^f \quad (2.23)$$

der Differenz der Standardbildungsenthalpien entspricht. Durch Hinzunahme der idealen Gasgleichung

$$pv = RT \quad (2.24)$$

erhält man bei Kenntnis des unverbrannten Zustandes (p_0, v_0, T_0) vier Gleichungen für fünf Unbekannte: u_0, u_1, p_1, v_1, T_1 . Das Problem besteht nun darin, u_0 , die Ausbreitungsgeschwindigkeit der Reaktionsfront ins unverbrannte Gas hinein, zu bestimmen. Eine ausführliche Herleitung der Lösung findet sich in [16, 122, 126]. Dazu kombiniert man Gl. 2.19 und Gl. 2.20 zur Rayleigh-Gleichung [207]

$$p_1 = p_0 - \left(\frac{u_0}{v_0} \right)^2 (v_1 - v_0) \quad , \quad (2.25)$$

was sich in einem p - v -Diagramm (Abb. 2.3) als eine Schar von Geraden durch den Punkt (p_0, v_0) darstellen lässt. Die Steigung der Geraden ist eine Funktion der Geschwindigkeit u_0 . Geraden mit positiver Steigung stellen offensichtlich keine gültige Lösung dar, da $-(u_0/v_0)^2$ stets negativ ist. Im p - v -Diagramm in

Abb. 2.3 sind daher die Bereiche I und III als nicht zulässige Bereiche grau hinterlegt. Gültige Lösungen führen entweder zu einer Zunahme des spezifischen Volumens und einer Abnahme des Drucks (was einer Deflagration entspricht, Bereich II) oder einer Abnahme des Volumens und einer Zunahme des Drucks (was einer Detonation entspricht, Bereich IV). Mit Hilfe der Gleichungen 2.22, 2.23 und der Formulierung der spezifischen isobaren Wärmekapazität für ideale Gase

$$c_p = R \frac{\kappa}{\kappa - 1} \quad (2.26)$$

kann die Energiegleichung 2.21 umgeformt werden zur Hugoniot-Gleichung [207]:

$$p_1 = p_0 \frac{\frac{\kappa+1}{\kappa-1} - \frac{v_1}{v_0} + 2 \frac{q}{p_0 v_0}}{\frac{\kappa+1}{\kappa-1} \frac{v_1}{v_0} - 1} \quad (2.27)$$

Zunächst erhält man damit unendlich viele Detonationslösungen (p_1, v_1) , die sowohl auf der Hugoniot-Linie als auch auf einer zulässigen Rayleigh-Geraden liegen. Es kann allerdings gezeigt werden [126], dass sich im stationären Fall, solange der Abströmung keine Geschwindigkeit von außen aufgeprägt wird, genau eine Lösung einstellen wird, die sogenannte Chapman-Jouguet-Lösung.⁵ Deren Endzustand (p_1, v_1) liegt im p - v -Diagramm genau in dem Punkt, in dem die Rayleigh-Gerade die Hugoniot-Kurve tangential berührt. Durch Bestimmung der Rayleigh-Geraden, die diese Bedingung erfüllt, erhält man zwei Lösungen für die Ausbreitungsgeschwindigkeit

$$u_{0,CJ} = \sqrt{\kappa R T_0 + \frac{\kappa^2 - 1}{2} q} \pm \sqrt{\frac{\kappa^2 - 1}{2} q} \quad (2.28)$$

wobei das positive Vorzeichen der Detonationslösung (in der Literatur auch als CJ-Detonationsgeschwindigkeit D_{CJ} bezeichnet) entspricht [16]. Diese Lösung entspricht genau dem Abströmzustand, in dem die Mach-Zahl im Verbrannten (relativ zur Reaktionsfront) Eins ist:

$$\text{Ma}_1 = \frac{u_1}{a_1} = \frac{u_1}{\sqrt{\kappa R T_1}} = 1 \quad (2.29)$$

Damit können Expansionswellen, die von einer festen Rückwand ausgehen, die Reaktionsfront nicht stören.

⁵ Eine Ausnahme bilden Brennstoffe, deren Reaktion zunächst exotherm, später endotherm verläuft, wodurch sich eine pathologische Detonation ausbildet [126].

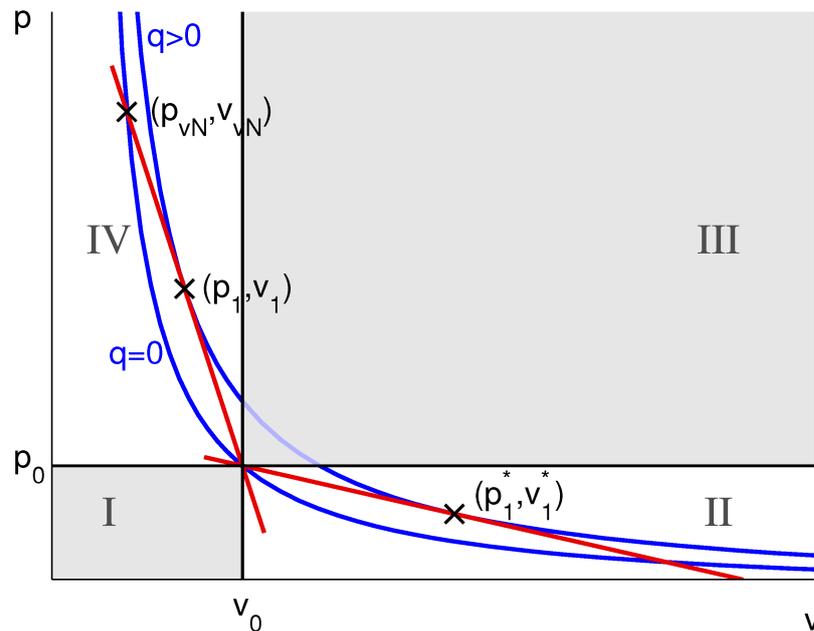


Abbildung 2.3: p - v -Diagramm mit Rayleigh-Geraden (rot) und Hugoniot-Kurven (blau) für $q > 0$ und $q = 0$. Die CJ-Geschwindigkeit ergibt sich aus der Steigung der Rayleigh-Geraden, die die Hugoniot-Kurve mit $q > 0$ tangential berührt. Die Deflagrationslösung liegt im Bereich II, die Detonationslösung im Bereich IV.

Die nach dieser Theorie maximal mögliche Deflagrationsgeschwindigkeit wird ebenfalls durch Gl. 2.28 festgelegt, indem man das negative Vorzeichen wählt. Diese Geschwindigkeit ist jedoch von eher theoretischem Wert, u.a. weil Deflagrationen das Fluid vor der Reaktionsfront in Bewegung setzen und bei hohen Geschwindigkeiten von mehrdimensionalen Phänomenen wie Turbulenz getrieben werden. Die mit der Chapman–Jouguet–Theorie berechnete Detonationsgeschwindigkeit trifft die in der Realität beobachteten Detonationsgeschwindigkeiten allerdings überraschend genau, obwohl auch Detonationsfronten mehrdimensionale Effekte zeigen (s. Kap. 2.3).

Während zur Berechnung der Chapman–Jouguet–Detonationsgeschwindigkeit das exakte Zusammenspiel zwischen Verdichtungsstoß und Wärmefreisetzung irrelevant ist, kann eine eindimensionale Analyse dieser Kopplung weiter zum Verständnis des Phänomens beitragen. Diese wurde unabhängig voneinander von Zeldovich [211], von Neumann [154] und Döring [55] in den 1940er Jahren erarbeitet. In dieser nach den Urhebern ZND genannten Theorie wird eine eindimensionale Detonation als ein infinitesimal dünner Verdichtungsstoß angesehen, dem in einigem Abstand eine Wärmefreisetzung-

zone finiter Ausdehnung folgt. Der Zustand nach dem Stoß („von–Neumann–Zustand“) ist im p – v –Diagramm als der Punkt erkennbar, in dem sich die Rayleigh–Gerade mit der Hugoniot–Linie mit Wärmefreisetzung $q = 0$ schneidet und ist in Abb. 2.3 mit (p_{vN}, v_{vN}) gekennzeichnet. Der von–Neumann–Zustand kann bei bekannter Detonationsgeschwindigkeit D_{CJ} aus den inerten Stoßbeziehungen [3] berechnet werden.

Durch Postulierung eines einfachen Reaktionsmechanismus, beispielsweise eines Einschnitt–Arrhenius–Ansatzes, konnte damit die Dicke der Wärmefreisetzungszone sowie deren Abstand von der Stoßfront, die sogenannte Induktionslänge, berechnet werden. Dies legte die Grundlage für spätere Untersuchungen des instationären, mehrdimensionalen Verhaltens einer Detonationsfront.

2.3 Detonation: Mehrdimensionale Betrachtung

In der Regel zeigt auch eine Detonation, die sich im Mittel mit konstanter Geschwindigkeit ausbreitet, unterschiedliche Formen der Instabilität. Longitudinale Instabilitäten [26, 60–62] überlagern die mittlere Ausbreitungsgeschwindigkeit. Da ihre Amplituden allerdings klein sind, fallen sie gegenüber den transversalen Instabilitäten kaum auf. Letztere sorgen dafür, dass sich in einer Detonationsfront eine selbsterhaltende, zelluläre Struktur aus schrägen Stößen und Mach–Stämmen ausbildet [71, 204]. Grund für die Entstehung dieser Struktur ist, dass schon eine leichte Störung einer ebenen Detonationsfront zu einer Veränderung der lokalen Zündverzugszeit, damit der Wärmefreisetzung und damit der Druckverteilung führt, was durch transversale Druckwellen ausgeglichen wird. Die dadurch entstehenden schiefen Stoßfronten werden an Wänden reflektiert, aber auch an anderen transversal laufenden Stößen, wozu ab einem gewissen Einfallswinkel ein Mach–Stamm erforderlich ist [3, 67]. Dadurch entsteht je nach Gemischzusammensetzung ein mehr oder weniger regelmäßiges Muster von einfallenden Stößen, reflektierten Stößen und Mach–Stämmen [181]. Da der Druckanstieg über einen Mach–Stamm höher ist als über einen schräg einfallenden Stoß, führen die Tripelpunkte (einfallender Stoß – reflektierter Stoß – Mach–Stamm) transversale Bewegungen aus und werden ihrerseits reflektiert, wenn sie mit einem anderen Tripelpunkt zusammentreffen. Durch die Überlagerung mit der Grundbewe-

gung in longitudinaler Richtung beschreiben die Tripelpunkte damit für einen ortsfesten Beobachter ein Rautenmuster, die sogenannten Detonationszellen [204].

Die Detonationszellen können experimentell mittels der Rußschrieb-Technik [2, 11, 44] aufgezeichnet werden und numerisch durch die Berechnung des Maximaldrucks⁶, der während des Vorbeilaufens einer Detonation an jeder Stelle aufgetreten ist, visualisiert werden [75]. Aus dem Rautenmuster kann eine mittlere Detonationszellweite λ gemessen werden, die charakteristisch für die jeweilige Gemischzusammensetzung ist.

In hoch reaktiven Gemischen, wie z.B. Wasserstoff–Luft oder Wasserstoff–Sauerstoff, sind die Detonationszellen sehr unregelmäßig. Verdünnt man diese Gemische mit einem Inertgas (z.B. Argon), werden die Zellen deutlich regelmäßiger. In Rechnungen mit Einschnitt–Arrhenius–Ansätzen konnte gezeigt werden, dass Zellgröße und –regelmäßigkeit eine Funktion der Aktivierungsenergie der Einschnitt–Reaktion sind [75]. Das Ergebnis einer Simulation mit einer entsprechend angepassten Aktivierungsenergie ist in Abb. 2.4 dargestellt. Eine beispielhafte Detonationszellweite λ ist ebenfalls eingezeichnet.

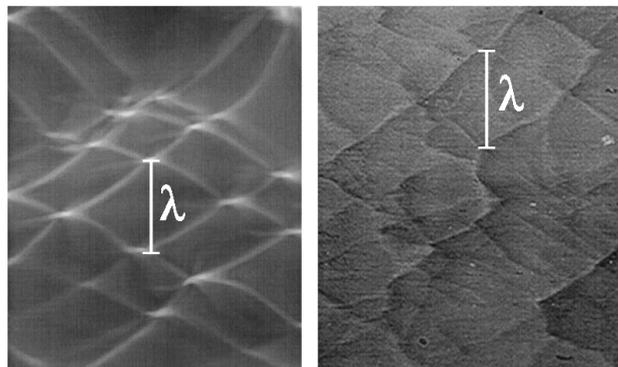


Abbildung 2.4: Numerische (links) und experimentelle (rechts) Rußschriebe einer Detonation in einem $\text{H}_2\text{-O}_2$ -Gemisch. Übernommen aus [75].

Die Detonationszellweite lässt sich allerdings nicht direkt aus der Gemischzusammensetzung berechnen, auch wenn nichtlineare Zusammenhänge mit der Induktionslänge empirisch erkennbar sind [78, 181]. Eine Sammlung von experimentell ermittelten Detonationszellweiten findet sich in der *GALCIT Detonation Database* [88].

⁶ Manche Autoren bevorzugen statt des Maximaldrucks die maximale Geschwindigkeit [92] oder die maximale Wirbelstärke $\nabla \times \vec{u}$ [173].

Die Erfassung der Detonationsinstabilitäten in einer numerischen Simulation erfordert eine Gitterauflösung deutlich unterhalb der Induktionslänge, was für praktische Anwendungen in größeren Geometrien prohibitiv teuer wird. Der Argumentation von Thomas [190] folgend, soll daher in dieser Arbeit versucht werden, die wesentlichen Eigenschaften des Deflagrations–Detonations–Übergangs korrekt zu simulieren, ohne diese kleinen Skalen aufzulösen. Dies wird in Kap. 2.4 genauer erläutert.

2.4 Deflagrations–Detonations–Übergang (DDT)

Zwar kann eine Detonation in einem brennbaren Gemisch auch direkt initiiert werden [110, 127], allerdings sind dazu extrem energieintensive Zündquellen nötig [186], mit denen in Unfallszenarien kaum zu rechnen ist. Der sehr viel wahrscheinlichere Weg der Entstehung einer Detonation besteht darin, dass sich zunächst, wie in Kap. 1.2 beschrieben, eine Deflagration ausbildet, die unter Umständen in eine Detonation umschlagen kann.

Fundamentale Untersuchungen zum Deflagrations–Detonations–Übergang in geschlossenen Rohren haben gezeigt, dass eine Deflagration nur bis zu einer Maximalgeschwindigkeit beschleunigen kann und der Übergang zur Detonation dann schlagartig auf eine Geschwindigkeit etwas oberhalb der CJ–Geschwindigkeit erfolgt („überkomprimierte Detonation“ [71]). Anschließend sinkt die Ausbreitungsgeschwindigkeit der Reaktionsfront auf einen konstanten Wert nahe an der CJ–Geschwindigkeit. Ebenso übersteigen die während einer DDT gemessenen Drücke oft die Drücke in einer sich mit CJ–Geschwindigkeit ausbreitenden Detonation. Aus diesem Grund ist gerade der Übergang von großem sicherheitstechnischem Interesse.

Der genaue Ablauf des DDT–Phänomens ist allerdings bis heute wissenschaftlich nicht vollständig geklärt. Bereits die eindimensionale Chapman–Jouguet–Theorie (Kap. 2.2) führte zu dem Ergebnis, dass im stationären Fall keine Ausbreitungsgeschwindigkeit zwischen der CJ–Deflagrations– und der CJ–Detonationsgeschwindigkeit möglich ist (s. Abb. 2.3). Dies deckt sich mit Beobachtungen, dass Deflagrationen oft über eine längere Strecke bei konstan-

ter Maximalgeschwindigkeit verharren, bevor der plötzliche Umschlag in eine Detonation erfolgt [48].⁷

Die Beobachtung zeigt, dass in schnellen Deflagrationen stets ein führender Stoß vorliegt. Da eine Deflagration diffusionsgetrieben und eine Detonation selbstzündungsgetrieben ist, ist es sinnvoll, den DDT–Vorgang als den Moment aufzufassen, ab dem die Selbstzündung durch den Stoß für die Ausbreitung der Reaktionsfront verantwortlich ist [126]. Dies legt die Modellvorstellung nahe, dass der führende Stoß, der von Druckstörungen aus der Deflagrationsfront gespeist wird, immer stärker wird, bis er schließlich im Zwischenraum zwischen Stoß und Flamme eine Selbstzündung verursacht. Es konnte allerdings gezeigt werden [149], dass diese eindimensionale Vorstellung für die Praxis irrelevant ist, da reale Zündverzugszeiten hinter dem führenden Stoß einer schnellen Deflagration viel zu groß sind, um eine Selbstzündung herbeizuführen.

Eine weitgehend akzeptierte Theorie geht dagegen davon aus, dass ein lokaler Gradient in der Zündverzugszeit t_{ign} für das Auftreten einer DDT verantwortlich ist. In Analogie zum Rayleigh–Kriterium [175] aus der Thermoakustik postulierte Zeldovich [213], dass während einer DDT ein sich selbst verstärkender Prozess in Gang kommt, wenn Wärmefreisetzung und Druckanstieg in Phase sind. Dazu setzt Zeldovich einen Bereich im unverbrannten Gemisch voraus, in dem durch geeignete Vorkonditionierung ein lokaler Gradient in der Zündverzugszeit besteht. Derartige Gradienten entstehen beispielsweise durch die Vorwärmung des unverbrannten Gemisches vor der Flamme und können durch die Interaktion mit der turbulenten Strömung verstärkt oder abgeschwächt werden. Neben Temperaturdifferenzen können auch Unterschiede in der lokalen Gemischzusammensetzung, die ebenfalls auf turbulente Mischung zurückzuführen sind, zu Gradienten der Zündverzugszeit führen [14]. Liegt ein derartiger Gradient vor, so kommt in der Regel an dem Ende mit der kürzesten Zündverzugszeit die Reaktion zuerst in Gang. Auslöser kann eine leichte Störung des Anfangszustandes, beispielsweise durch einen Verdichtungsstoß, der über den Gradienten hinwegläuft, sein. Sobald die Wärmefreisetzung beginnt, kommt es zu einer lokalen Expansion des Gemisches, wodurch ein Verdichtungsstoß entsteht oder ein bereits vorhandener Verdichtungsstoß verstärkt wird. Unter günstigen Bedingungen wird der Stoß dabei

⁷ Dieses Phänomen ist vor allem in relativ glatten Röhren zu beobachten. In Röhren mit Hindernissen erfolgt der Übergang dagegen oft ohne ein ausgeprägtes Geschwindigkeitsplateau [182].

so stark, dass er auch das Gemisch mit zunehmend größerer Zündverzugszeit zur Reaktion bringt, während er den Gradienten entlangläuft. Da die freigesetzte Wärme den Stoß immer mehr verstärkt, wird schließlich eine ausreichende Kopplung von Wärmefreisetzung und Druckanstieg erreicht, um eine Detonation herbeizuführen. Dieser Mechanismus wird als SWACER (*Shock Wave Amplified Coherent Energy Release*) bezeichnet und konnte experimentell reproduziert werden [125]. Damit es zur DDT kommen kann, muss die Ausbreitungsgeschwindigkeit der „spontanen Welle“ [14], die durch die Stärke des Zündverzugsgradienten vorgegeben ist,

$$u = |\nabla t_{\text{ign}}|^{-1} \quad , \quad (2.30)$$

mindestens im Bereich der Schallgeschwindigkeit der Reaktanden a_r , aber unterhalb der CJ–Detonationsgeschwindigkeit D_{CJ} liegen [14, 212, 213]:

$$a_r \lesssim u \lesssim D_{\text{CJ}} \quad . \quad (2.31)$$

Ist die Geschwindigkeit der spontanen Welle zu gering, so ist davon auszugehen, dass die bereits vorhandene schnelle Deflagration (deren Ausbreitungsgeschwindigkeit im Bereich von a_r liegt) über den Zündverzugsgradienten hinwegläuft und das Gemisch deflagrativ abbrennt, ohne dass die sukzessive Selbstzündung entlang des Gradienten wirksam werden kann. Ist die Geschwindigkeit der spontanen Welle zu groß, findet ebenfalls keine Kopplung zwischen Stoß und Reaktion statt, da die Stoßwelle der Reaktion nicht folgen kann.

Zwar ist es theoretisch denkbar, dass geeignete Gradienten im Umfeld einer hochturbulenten, schnell propagierenden Deflagration existieren. Dennoch stellt sich die Frage, ob sich die Vielzahl der beobachtbaren makroskopischen DDT–Phänomene mit diesem Ansatz erklären lassen. In der Literatur [35, 56] werden zunächst zwei Kategorien von makroskopischen Detonationsübergängen unterschieden, s. Abb. 2.5: DDT durch Stoßfokussierung und DDT aus der unmittelbaren Umgebung der Flamme heraus. Ersteres wird auch als starke Lösung bezeichnet [190] und ist bei Kenntnis der Reaktionskinetik relativ einfach zu berechnen: Ein propagierender Stoß muss ausreichend fokussiert werden (z.B. an Behälterwänden oder –ecken), damit die Selbstzündtemperatur überschritten wird. Die Bezeichnung „starke“ Lösung erklärt sich dadurch, dass diese Art der DDT das Vorhandensein eines starken Verdichtungsstoßes, der dem reagierenden Gemisch von außen aufgeprägt wird, erfordert.

Bei längerkettigen Kohlenwasserstoffen, die eine ausgeprägte Kinetik mit kalten Flammen [42, 180] aufweisen, kann auch eine mäßig starke Stoßwelle, die über ein bereits teilreagiertes Gemisch läuft, eine DDT erzeugen. Dies ist häufig die Ursache für das Klopfen in Otto–Motoren [172]. Entspringt die DDT dagegen aus der Umgebung der Flamme ohne die externe Einwirkung eines starken Stoßes, so spricht man von der schwachen Lösung. Dies stellt im Hinblick auf die Berechnung die deutlich komplexere Herausforderung dar. Der Stoß, der letztendlich zur DDT führt, entsteht in diesem Fall erst aus der lokalen Wechselwirkung von Strömung und Reaktion. Die schwache Lösung wird wiederum in zwei Kategorien unterteilt: DDT durch Wiedertzündung heißer Abgasstrahlen bei Eintritt in ein Frischgasgemisch und DDT durch die Wechselwirkung von Gasdynamik, Flamme und Turbulenz, wodurch es zu lokalen Explosionen kommt.

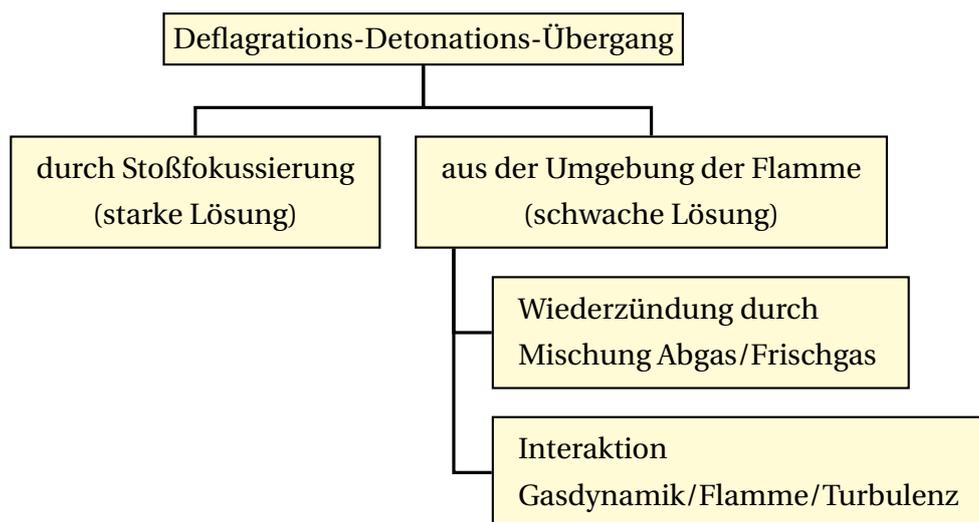


Abbildung 2.5: Makroskopische Einteilung von DDT-Vorgängen.

Die Wiedertzündung heißer Abgasstrahlen spielt in erster Linie bei Vorhandensein extrem enger Verbindungsquerschnitte zwischen größeren Räumen eine Rolle. Hier kann es beim Durchtritt der Flamme durch die Verengung zum Erlöschen der Reaktion kommen. Eine anschließende intensive Vermischung mit dem kalten Frischgas kann die Reaktion wieder in Gang bringen, wie in [38, 111] gezeigt wurde.

Aufgrund der großen Bedeutung für die Reaktorsicherheit liegt in dieser Arbeit der Fokus auf DDT verursacht durch die Interaktion von Gasdynamik, Flamme und Turbulenz. Hier liegt die Beobachtung vor, dass es in einer schnellen Deflagration kontinuierlich zu schwächeren lokalen Explosionen in unmittel-

barer Nähe der Flammenfront kommt. Diese entstehen, weil durch verschiedene Mischungsvorgänge (neben Turbulenz auch akustische Interaktionen, Kelvin–Helmholtz–, Rayleigh–Taylor– und Richtmyer–Meshkov–Instabilitäten [48, 185]) fortlaufend unverbranntes Gas ins verbrannte und umgekehrt befördert wird, wodurch sogenannte *hot spots* [82, 159] generiert werden, die lokale Explosionen verursachen. Dass die hierbei stattfindenden Mischungsvorgänge auch Gradienten in der lokalen Zündverzugszeit hervorrufen, steht außer Frage. Da ein einzelner *hot spot* aber häufig zu schwach ist, um direkt eine DDT zu erzeugen, müssen *hot spots* in einer gewissen Häufigkeit entstehen, um durch resonante Stoßverstärkung eine DDT zu erreichen. Daher kann DDT auch als ein statistisches Phänomen betrachtet werden, mit dem zu rechnen ist, wenn eine schnelle Deflagration erreicht wurde und sich die Reaktion ausreichend lange bei hoher Geschwindigkeit und hohen Turbulenzintensitäten ausbreiten kann.

Dementsprechend weit gefächert sind auch die in der Literatur zu findenden Ansätze zur Simulation des Deflagrations–Detonations–Übergangs, auch wenn die Anzahl der Veröffentlichungen zum Thema DDT–Simulation noch immer gering ist im Vergleich zu den Veröffentlichungen, die sich ausschließlich Flammenbeschleunigung oder Detonation widmen. Oft wird versucht, eine möglichst hohe räumliche Auflösung zu erreichen, um die sich ausbildenden Strömungsphänomene wie Stoß–Flammen–Interaktion möglichst gut wiederzugeben, während die Chemie stark vereinfacht beschrieben wird.

Dold et al. [47] konnten in 1D–Simulationen mit einem Einschnitt–Arrhenius–Ansatz qualitativ zeigen, wie eine Druckstörung sich zu einem Stoß aufbauen kann, hinter dem es zur Zündung kommt. Dadurch entsteht zunächst eine überkomprimierte Detonation, die anschließend in eine CJ–Detonation übergeht. Hierbei wurde von den Autoren der Einfluss des gewählten Reaktionsmechanismus auf die zu beobachtenden Vorgänge besonders betont. Die benötigte Größe und Form eines Gradienten in der Zündverzugszeit, um DDT über den SWACER–Mechanismus zu erreichen, wurde von Khokhlov et al. [107] in Abhängigkeit von wesentlichen Parametern des Gemisches abgeschätzt und durch 1D–Simulationen bestätigt. Mit einem ähnlichen Ansatz in zweidimensionalen Rechnungen konnten Oran et al. [76, 106] zeigen, wie *hot spots* entstehen und über den SWACER–Mechanismus als Keimzellen für DDT dienen. Vergleiche mit 3D–Rechnungen [76] zeigten dabei keine phänomenologischen und nur geringe quantitative Unterschiede bei der Si-

mulation des Deflagrations–Detonations–Übergangs. Die Kalibrierung eines Einschnitt–Arrhenius–Ansatzes, um sowohl Deflagrations– als auch Detonationsregimes erfassen zu können, ist in [103] beschrieben. Weitere Arbeiten mit diesem Modellierungsansatz sind in einem Übersichtsartikel von Oran et al. [158] zusammengefasst. Ein Ansatz von Kessler et al. [104], Einschnitt–Ansätze durch die Verwendung gemischabhängiger Parameter so zu modifizieren, dass damit auch Detonationen in inhomogenen Gemischen simuliert werden können, brachte gute qualitative Ergebnisse, konnte aber die Detonationszellen in inhomogenen Gemischen nicht in der korrekten Größe reproduzieren.

Auch wenn in derartigen Rechnungen exzessiv adaptive Gitterverfeinerung [76, 105, 106] betrieben wird, können die turbulenten Wirbel in der Regel nicht bis zur Kolmogorov–Skala aufgelöst werden. Dennoch gehen die Autoren davon aus, alle relevanten Vorgänge zu erfassen, solange die Dicke der Flammenfront mit mehreren Rechenzellen aufgelöst wird. Dies wird in neueren Veröffentlichungen jedoch in Frage gestellt [171]. Darüber hinaus bezweifeln Liberman et al. [135, 136] die Möglichkeit, DDT mit einem Einschnitt–Ansatz realistisch zu beschreiben, da damit bei geeigneter Parameterwahl zwar die Zündverzugszeit in einer ausgebildeten CJ–Detonation getroffen werden kann, keinesfalls aber der nichtlineare Verlauf der Zündverzugszeit bei niedrigen Temperaturen, der bei DDT entscheidend ist. Außerdem konnte durch Rechnungen mit detaillierter Chemie [136] gezeigt werden, dass die räumliche Ausdehnung eines Gradienten in der Zündverzugszeit um mehrere Größenordnungen über der Ausdehnung liegen muss, die mit Einschnitt–Ansätzen berechnet wurde, weshalb der SWACER–Mechanismus als DDT–Ursache von Liberman et al. in Frage gestellt wird. Die Simulation mit Einschnitt–Ansätzen führt nämlich fälschlicherweise zu einer kontinuierlichen Wärmefreisetzung während des gesamten Reaktionsablaufs von den Edukten zu den Produkten. In der Realität finden dagegen zu Beginn zahlreiche Kettenverzweigungsreaktionen ohne nennenswerte Wärmefreisetzung statt [196]. Dies ist anhand des Temperaturverlaufs in einer isochoren Explosion (Ausgangszustand $T_0 = 1000 \text{ K}$, $p_0 = 5 \text{ bar}$, $x_{H_2,0} = 30\%$) in Abb. 2.6 dargestellt. Es ist zu erkennen, dass bei Berechnung mit dem detaillierten Mechanismus von O’Conaire et al. [156] das Gemisch zunächst bei nahezu konstanter Temperatur verbleibt und die Wärmefreisetzung erst nach einer Induktionszeit von einigen Millisekunden relativ schlagartig erfolgt. Wurde

das Gemisch durch einen Verdichtungsstoß in diesen Zustand versetzt, so hat sich der Stoß während dieser Zeit weiter fortbewegt und eine Kopplung kommt nur zu Stande, wenn es den bei der Wärmefreisetzung entstehenden Druckwellen gelingt, den Stoß einzuholen. Bei Berechnung mit einem angepassten Einschnitt-Ansatz⁸ erfolgt die Wärmefreisetzung zwar weniger schlagartig, sie beginnt aber viel früher (s. Abb. 2.6). Dies bedeutet, dass von Anfang an die verbrennungsbedingte Expansion den Verdichtungsstoß verstärken kann. Die Wahrscheinlichkeit, dass dadurch ein selbstverstärkender Prozess in Gang gesetzt wird, ist damit auf unrealistische Weise erhöht. Dadurch können in Simulationen mit Einschnitt-Ansätzen sehr leicht SWACER-Phänomene generiert werden, die in der Realität nicht auftreten.

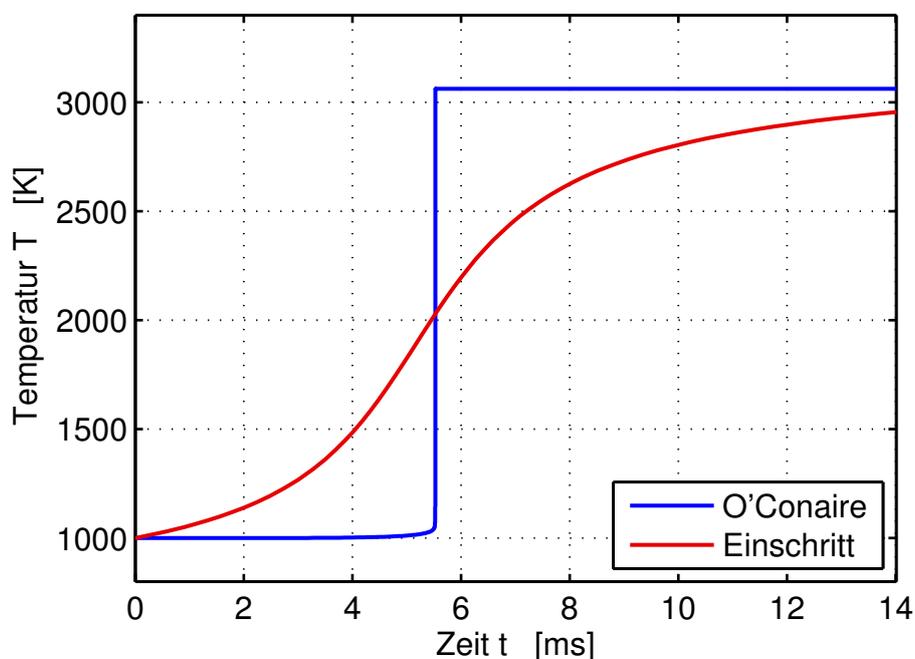


Abbildung 2.6: Temperaturverlauf in einer isochoren Explosion berechnet mit dem O'Conaire-Mechanismus [156] und einem angepassten Einschnitt-Mechanismus.

Aus diesen Gründen und natürlich auch aus Gründen der praktischen Anwendbarkeit gab es immer wieder Versuche, DDT makroskopisch korrekt wiederzugeben, ohne sämtliche kleinskalige Phänomene aufzulösen. Smiljanovski [185] und Moser [153] lösten eine Flammenfortschritts-Transportgleichung für die deflagrative Verbrennung und parallel dazu ei-

⁸ Der in Abb. 2.6 verwendete Einschnitt-Mechanismus wurde so kalibriert, dass die Hälfte der Wärmefreisetzung zum gleichen Zeitpunkt erreicht ist wie im detaillierten Mechanismus.

ne Einschnitt–[185] bzw. Zweischnitt–Reaktionsgleichung [153], um die Selbstzündung wiederzugeben. Um auch auf relativ groben Gittern arbeiten zu können, wurde die Flamme dabei als Diskontinuität zwischen einzelnen Gitterpunkten rekonstruiert. Die turbulente Brenngeschwindigkeit wurde dabei allerdings als Funktion der Zeit vorgegeben und nicht aus der Strömung selbst berechnet. Damit konnte DDT qualitativ, aber nicht quantitativ zufriedenstellend wiedergegeben werden. Kotchourko et al. [116] erweiterten das Eddy–Break–Up–Modell [187] durch Einführung einer lokalen Zündverzugszeit, so dass faktisch sowohl das turbulenzlimitierte Eddy–Break–Up–Regime als auch das kinetiklimitierte Selbstzündregime mit einem einzigen Modell erfasst werden konnten [35]. Bei der Simulation von Selbstzündprozessen in Gasturbinen und Motoren haben sich ebenfalls Verfahren, bei denen ein deflagratives Verbrennungsmodell mit einem Selbstzündmodell vereinigt wird, etabliert [29, 42, 124, 152]. Weitaus komplexere Ansätze basierend auf Partikel–Methoden [73] erscheinen aufgrund des immensen zusätzlichen Rechenaufwandes nicht praxistauglich.

Zwar können in Simulationen auf groben Gittern die in Kap. 2.3 beschriebenen mehrdimensionalen intrinsischen Instabilitäten in einer Detonationsfront nicht wiedergegeben werden. Trotzdem konnten mehrere Autoren zeigen, dass ausgebildete Detonationen sich mit einfachsten Ansätzen, beispielsweise durch Vorgabe der lokalen CJ–Geschwindigkeit, makroskopisch korrekt wiedergeben lassen [7, 210]. Der Grund dafür besteht darin, dass die idealisierte, eindimensionale CJ–Lösung zwar eine Gleichgewichtslösung darstellt, mit der sich eine Detonation ausbreiten kann. Alle praxisrelevanten Brennstoff–Oxidator–Gemische zeigen aber eine derart nichtlineare Abhängigkeit ihres Zündverhaltens von der Temperatur, dass eine kleine Störung der CJ–Gleichgewichtslösung zur Ausbildung der zweiten möglichen Lösung, nämlich der in Kap. 2.3 beschriebenen Detonationsfront mit transversalen Instabilitäten führt. Diese Transversalstrukturen sind selbsterhaltend, da die auftretenden Mach–Stämme die Drücke lokal erhöhen, wodurch die Wärme–freisetzung nicht mehr gleichmäßig über die gesamte Front erfolgt und konsequenterweise immer neue Transversalwellen gebildet werden. Wenn eine Detonation einmal dieses Verhalten angenommen hat, kehrt sie nicht mehr in den stabilen Zustand mit planarer Reaktionsfront zurück. In der sogenannten hydrodynamischen [128] Betrachtung einer Detonation (Betrachtung der Zustände nur vor der Detonationsfront und hinter der $Ma=1$ –Linie) sind beide

Lösungen identisch, da der Zustand ausreichend weit hinter der Detonationsfront auch im Falle transversaler Instabilitäten dem CJ-Zustand entspricht. Dies ist der Grund dafür, dass sich auch eine Detonation, die transversale Instabilitäten aufweist, mit der CJ-Geschwindigkeit ausbreitet. Daher können auch Simulationen, in denen die Instabilitäten wegen mangelnder räumlicher Auflösung nicht dargestellt werden können, DDT-Vorgänge und ausgebildete Detonationen makroskopisch richtig wiedergeben. In derartigen Simulationen verbleibt die Detonation nach erfolgter Transition im Zustand der planaren CJ-Lösung und bildet die im Experiment beobachtbaren Transversalstrukturen nicht aus. In einer Übersichtsstudie folgert Thomas [190] aus dem Vergleich von experimentellen und numerischen Arbeiten, dass die kleinskali- gen transversalen Strukturen zwar die in der Realität bevorzugte Lösung darstellen, ein gutes numerisches Modell aber auf deren Abbildung verzichten kann und nur folgende Eigenschaften haben muss, um eine DDT korrekt zu berechnen:

- korrekte Wiedergabe der Wärmefreisetzung inkl. der daraus entstehenden Stöße,
- korrekte turbulente Brennraten,
- korrekte Wiedergabe des Dichteanstiegs durch Stöße.

Dieser Argumentation folgend wurde in dieser Arbeit ein Modell entwickelt, das die genannten Anforderungen erfüllt. Es beruht auf der Zusammenführung eines turbulenten Verbrennungsmodells mit einem Selbstzündmodell, da in einem DDT-Vorgang beide Effekte gleichzeitig von Bedeutung sind. Zusätzlich erforderte die Implementierung die Erstellung eines Strömungssolvers, der Verdichtungsstöße mit hoher Genauigkeit wiedergibt, ohne dass dabei numerisch bedingte Überschwinger entstehen.

3 Modellierung

Für die Modellierung der in dieser Arbeit betrachteten Flammenbeschleunigungs- und DDT-Vorgänge wurde das Open Source CFD-Paket *OpenFOAM* [157] verwendet. Die modulare Software-Architektur in der objektorientierten Programmiersprache C++ ermöglichte es, auf vorhandene Solver und Modelle aufzubauen. Da der vorhandene Code größtenteils parallelisiert abgearbeitet werden kann, wurde auch in dieser Arbeit großer Wert darauf gelegt, die Implementierung vollständig parallelisierbar vorzunehmen, damit einer Anwendung auf Großrechnern nichts im Wege steht. Die Modelle und Rechenverfahren des in dieser Arbeit entwickelten Solvers werden im Folgenden beschrieben.

3.1 Stoffeigenschaften

Die zu modellierenden instationären Strömungsvorgänge finden in einem kompressiblen, reaktiven Gasgemisch statt. Hierfür gelte die ideale Gasgleichung

$$p = \rho RT \quad , \quad (3.1)$$

in der p den Druck, ρ die Dichte und T die Temperatur des Gemisches bezeichnet. Die spezifische Gaskonstante R lässt sich mit der mittleren Molmasse M des Gemisches aus der universellen Gaskonstante \mathcal{R} berechnen:

$$R = \frac{\mathcal{R}}{M} \quad . \quad (3.2)$$

Der Zusammenhang zwischen spezifischer Enthalpie h und spezifischer innerer Energie e lautet

$$h = e + \frac{p}{\rho} \quad . \quad (3.3)$$

Das Gas besteht aus N Spezies. Mit Kenntnis der Massenbrüche y_k jeder Spezies lässt sich die spezifische innere Energie des Gemisches berechnen zu

$$e = \sum_{k=1}^N y_k e_k = \sum_{k=1}^N y_k \left(e_k^f + \int_{T_{\text{ref}}}^T c_{v,k} dT \right) . \quad (3.4)$$

Hier bezeichnet e_k^f die spezifische innere Energie der Spezies k bei Referenztemperatur T_{ref} und $c_{v,k}$ die jeweilige spezifische isochore Wärmekapazität. Sind innere Energie und Zusammensetzung des Gemisches bekannt, lässt sich die Temperatur über Gl. 3.4 iterativ berechnen.¹ Sämtliche laminare Transportgrößen können anschließend mit der Sutherland–Korrelation [20, 205] bestimmt werden.

3.2 Erhaltungsgleichungen

Im Folgenden werden die Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls und Energie für kompressible Strömungen vorgestellt. Die Gleichungen werden oft als Navier–Stokes–Gleichungen bezeichnet, obwohl dieser Begriff streng genommen nur die Massen– und Impulserhaltung beinhaltet. Zusammen mit der Zustandsgleichung (in diesem Fall der idealen Gasgleichung) ergeben sie ein Differentialgleichungssystem zur Berechnung der Strömungsgrößen ρ (Dichte), \vec{u} (Geschwindigkeit), e (innere Energie) und p (Druck). In einer chemisch reagierenden Strömung müssen zusätzlich die Massenbrüche y_k aller Spezies berechnet werden. Eine ausführliche Herleitung der Gleichungen findet sich z.B. in [70, 123, 200, 205].

3.2.1 Differentielle Erhaltungsgleichungen

In dieser Arbeit wird die konservative, differentielle Schreibweise für ein ortsfestes, kartesisches Koordinatensystem verwendet. Hierbei gelte die Einstein’sche Summenkonvention.²

¹ Der Grund, warum in dieser Arbeit die Temperatur aus der inneren Energie und nicht aus der Enthalpie berechnet wird, ist in Anhang C dargestellt.

² „Tritt ein Index in einem Term eines Ausdrucks zweimal auf, so ist über ihn stets zu summieren, wenn nicht ausdrücklich das Gegenteil bemerkt ist.“ [59]

Da Massenänderungen in chemischen Reaktionen vernachlässigbar sind, kann die Erhaltungsgleichung für die Masse des Fluids geschrieben werden als

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j) = 0 \quad . \quad (3.5)$$

Die Erhaltungsgleichungen für den Impuls in jeder Raumrichtung i lauten:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_i u_j) = \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} - \frac{\partial p}{\partial x_i} + \rho g_i \quad . \quad (3.6)$$

Hier bezeichnet g_i die auf das Fluidelement wirkenden äußeren Kräfte (z.B. die Schwerkraft) in i -Richtung und τ_{ij} den Schubspannungstensor, der für ein Newton'sches Fluid durch Nutzung der Stokes'schen Hypothese [101, 205] geschrieben werden kann als

$$\tau_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_m}{\partial x_m} \right) \quad . \quad (3.7)$$

Dabei bezeichnet μ die dynamische Viskosität und δ_{ij} das Kronecker-Symbol:

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases} \quad . \quad (3.8)$$

Die Energieerhaltungsgleichung kann in zahlreichen Varianten formuliert werden [165]. Da in transsonischen Strömungen die kinetische Energie eine wesentliche Rolle spielt, empfiehlt sich die Verwendung der totalen inneren Energie e_t , die sich aus der statischen inneren Energie und der kinetischen Energie zusammensetzt:

$$e_t = e + \frac{u_i u_i}{2} \quad (3.9)$$

Die Bilanzgleichung für die Totalenergie lautet:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho e_t) + \frac{\partial}{\partial x_j} ((\rho e_t + p) u_j) = - \frac{\partial q_j}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\tau_{ij} u_i) \quad . \quad (3.10)$$

Der Übersichtlichkeit halber wurden Effekte, die für die vorliegende Arbeit keine Rolle spielen (z.B. volumetrische Energiequellen und -senken, Beitrag der potentiellen Energie, Dufour-Effekt, Soret-Effekt [91]), bereits vernachlässigt.

Der diffusive Flussterm q_j setzt sich aus zwei Teilen zusammen, dem Wärmestrom aufgrund von Wärmeleitung und dem Enthalpiefluss aufgrund von Speziesdiffusion:

$$q_j = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_j} + \rho \sum_{k=1}^N h_{k,t} j_{k,j} \quad . \quad (3.11)$$

Die Speziesdiffusion kann mit dem Fick'schen Gesetz [101] geschrieben werden als

$$j_{k,j} = -D \frac{\partial y_k}{\partial x_j} \quad , \quad (3.12)$$

wobei D für den Diffusionskoeffizienten der Spezies k im betrachteten Gemisch steht und für alle Spezies gleich groß sein soll. Exaktere Betrachtungen finden sich in [89, 101, 165].

Außerdem ist es zweckmäßig anzunehmen, dass die Lewis-Zahl

$$\text{Le} = \frac{a}{D} = 1 \quad (3.13)$$

beträgt, wobei $a = \lambda/(\rho c_p)$ für die Temperaturleitfähigkeit des Gemisches steht. Die beiden vorangegangenen Näherungen mögen in Wasserstoff-Luft-Gemischen grob erscheinen, in turbulenten Strömungen dominieren allerdings die scheinbaren turbulenten Transportgrößen a_T und D_T über die laminaren, wodurch die Näherung gerechtfertigt ist. Damit kann der Speziesdiffusionsterm in der sogenannten Shvab-Zeldovich-Form [207] zu

$$q_j = -\rho a \frac{\partial h_t}{\partial x_j} \quad (3.14)$$

angenähert werden. Die Bilanzgleichung der totalen inneren Energie erhält dadurch die vereinfachte Form

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho e_t) + \frac{\partial}{\partial x_j} ((\rho e_t + p) u_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho a \frac{\partial h_t}{\partial x_j} + \tau_{ij} u_i \right) \quad . \quad (3.15)$$

Um die lokale Zusammensetzung eines Mehrkomponenten-Fluids zu bestimmen, müssen Erhaltungsgleichungen für die einzelnen Spezies k formuliert werden. Unter Zuhilfenahme von Gl. 3.12 und der Annahme eines konstanten Diffusionskoeffizienten lauten diese:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho y_k) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho y_k u_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D \frac{\partial y_k}{\partial x_j} \right) + \omega_k \quad . \quad (3.16)$$

Hier bezeichnet ω_k die Netto-Produktionsrate von Spezies k durch chemische Reaktion. In einem Gemisch mit N Spezies müssen nur $N - 1$ Erhaltungsgleichungen gelöst werden, der verbleibende Speziesmassenbruch ergibt sich aus der Bedingung

$$y_N = 1 - \sum_{k=1}^{N-1} y_k \quad . \quad (3.17)$$

3.2.2 Turbulente Mittelung

Die Lösung der in Kap. 3.2.1 aufgelisteten Erhaltungsgleichungen für turbulente Strömungsprobleme durch direkte numerische Simulation (*Direct Numerical Simulation* – DNS) [13, 132, 169] ist auf den heute verfügbaren Rechnern nach wie vor nur in Sonderfällen (moderate Reynolds-Zahlen, extrem kleine Rechendomänen) möglich. Auch die Grobstruktursimulation (*Large Eddy Simulation* – LES) [74, 77, 169], bei der große turbulente Wirbel aufgelöst, kleinere modelliert werden, ist bei den hier verfolgten Anwendungen mit extrem hohen Turbulenzniveaus in Rechengebieten von mehreren Metern Länge nicht praktikabel, zumal da LES-Rechnungen stets dreidimensionale Rechnungen erfordern [169]. Da die Kenntnis der turbulenzgemittelten Strömungsgrößen für die zu erzielenden Ergebnisse ausreicht, wird in dieser Arbeit die URANS-Methode (*Unsteady Reynolds-Averaged Navier-Stokes*) [70, 169, 176] angewendet. Dabei wird jede turbulente Größe ϕ in eine mittlere Größe $\bar{\phi}$ und einen Schwankungsanteil ϕ' zerlegt:

$$\phi = \bar{\phi} + \phi' \quad . \quad (3.18)$$

Hierbei ist die mittlere Größe $\bar{\phi}$ in einem Zeitintervall Δt definiert als

$$\bar{\phi} = \frac{1}{\Delta t} \int_{t_0}^{t_0 + \Delta t} \phi dt \quad . \quad (3.19)$$

Dies ist die sogenannte Reynolds-Mittelung. Die URANS-Methode ist eine Weiterentwicklung der für stationäre Strömungen entwickelten RANS-Methode (*Reynolds-Averaged Navier-Stokes*) [169, 176]. Während in RANS-Rechnungen eine eindeutige Trennung zwischen stationärer Hauptströmung und turbulenten Schwankungen gegeben ist, liegen in URANS-Rechnungen zwei Arten von instationären Phänomenen vor. Neben den turbulenten

Schwankungen ϕ' unterliegt nämlich auch die gemittelte Größe $\bar{\phi}$ zeitlichen Änderungen. In frühen Arbeiten mit der URANS–Methode wurde oft argumentiert, dass diese getrennte Beschreibung der instationären Phänomene möglich sei, solange der Zeitschritt Δt , über den gemittelt wird, größer ist als die charakteristischen Zeitmaße der turbulenten Schwankungen. Noll et al. [155] konnten aber zeigen, dass die URANS–Methode auch sehr gut zur Simulation von Strömungen verwendet werden kann, in denen die Hauptströmung hochfrequente Änderungen erfährt, deren Zeitskalen eindeutig im Bereich der turbulenten Wirbelkaskade (s. Kap. 2.1.2) liegen. Voraussetzung ist, dass die Änderungen der Hauptströmung deterministisch sind, im Gegensatz zu den turbulenten Schwankungen also nicht (scheinbar) chaotisch erfolgen [93]. Außerdem müssen zusätzliche Fehlerquellen (die durch die zeitliche und örtliche Diskretisierung der Gleichungen entstehen) gering gehalten werden [155]. In Strömungen mit stark instationärer Hauptströmung kann die Reynolds–Mittelung auch alternativ zu Gl. 3.19 als eine Ensemble–Mittelung [169] verstanden werden, bei der über eine Anzahl N von Realisierungen $\phi_{(n)}$ der Variable ϕ gemittelt wird:

$$\bar{\phi} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \phi_{(n)} \quad . \quad (3.20)$$

Mit dieser Argumentation kann die URANS–Methode auch auf die in dieser Arbeit untersuchten instationären Strömungsvorgänge angewendet werden. Aus der Definition der Reynolds–Mittelung folgt, dass

$$\overline{\phi'} = 0 \quad . \quad (3.21)$$

Im Allgemeinen gilt aber, dass das Produkt turbulenter Schwankungsgrößen nicht Null ist:

$$\overline{\phi' \psi'} \neq 0 \quad . \quad (3.22)$$

Wendet man die Reynolds–Mittelung auf die Erhaltungsgleichungen aus Kap. 3.2.1 an, so tauchen dabei neue, ungeschlossene Terme in der Form von Gl. 3.22 auf [79, 133]. In kompressiblen Strömungen kann die Anzahl dieser ungeschlossenen Terme deutlich verringert werden, indem man Größen, die in Produkten mit der Dichte auftauchen, einer dichtegewichteten Mittelung, der sogenannten Favre–Mittelung [69], unterzieht. Diese ist definiert als:

$$\tilde{\phi} = \frac{\overline{\rho \phi}}{\bar{\rho}} \quad . \quad (3.23)$$

Der aus der Favre–Mittelung stammende Schwankungsterm wird mit ϕ'' gekennzeichnet. In Analogie zu Gl. 3.18 gilt daher:

$$\phi = \tilde{\phi} + \phi'' \quad . \quad (3.24)$$

Damit erhält man die Reynolds–gemittelten Erhaltungsgleichungen:

$$\frac{\partial}{\partial t} \bar{\rho} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j) = 0 \quad , \quad (3.25)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \widetilde{u_i'' u_j''}) = \frac{\partial \bar{\tau}_{ij}}{\partial x_j} - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \bar{\rho} \tilde{g}_i \quad , \quad (3.26)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{e}_t) + \frac{\partial}{\partial x_j} ((\bar{\rho} \tilde{e}_t + \bar{p}) \tilde{u}_j) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \widetilde{h_t'' u_j''}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho} a \frac{\partial \tilde{h}_t}{\partial x_j} + \bar{\tau}_{ij} \tilde{u}_i \right) \quad , \quad (3.27)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{y}_k) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{y}_k \tilde{u}_j) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \widetilde{y_k'' u_j''}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho} D \frac{\partial \tilde{y}_k}{\partial x_j} \right) + \bar{\omega}_k \quad . \quad (3.28)$$

3.2.3 Modellierung der unbekanntenen Terme

In den Gleichungen 3.26 bis 3.28 tauchen ungeschlossene Terme der Form $\bar{\rho} \widetilde{\phi'' u_j''}$ auf, die man mit einem Gradientenansatz modelliert [165]:

$$\bar{\rho} \widetilde{u_i'' u_j''} = -\mu_T \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial \tilde{u}_m}{\partial x_m} \right) + \frac{2}{3} \delta_{ij} \bar{\rho} k \quad , \quad (3.29)$$

$$\bar{\rho} \widetilde{h_t'' u_j''} = -\bar{\rho} a_T \frac{\partial \tilde{h}_t}{\partial x_j} \quad , \quad (3.30)$$

$$\bar{\rho} \widetilde{y_k'' u_j''} = -\bar{\rho} D_T \frac{\partial \tilde{y}_k}{\partial x_j} \quad . \quad (3.31)$$

Hierbei bezeichnet k die turbulente kinetische Energie

$$k = \frac{\widetilde{u_i'' u_i''}}{2} \quad . \quad (3.32)$$

Wegen der Analogie zu Gl. 3.7 werden diese Terme als Reynolds–Spannungen bezeichnet, auch wenn lediglich Gl. 3.29 die Einheit einer Spannung hat. Die Reynolds–Spannungen stellen die von den turbulenten Schwankungen hervorgerufenen konvektiven Flüsse dar, werden aber wie diffusive Flüsse modelliert, mit einer turbulenten Scheinviskosität μ_T , einer turbulenten Temperaturleitfähigkeit a_T und einem turbulenten Diffusionskoeffizienten D_T . Fasst

man diese Größen und die laminaren Transportgrößen zu effektiven Transportgrößen zusammen, $\mu_{\text{eff}} = \mu_T + \mu$, $a_{\text{eff}} = a_T + a$ und $D_{\text{eff}} = D_T + D$, so erhält man letztendlich die numerisch zu lösenden Erhaltungsgleichungen:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j) = 0 \quad , \quad (3.33)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j + \frac{2}{3} \delta_{ij} \bar{\rho} k \right) = \frac{\partial}{\partial x_j} \mu_{\text{eff}} \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial \tilde{u}_m}{\partial x_m} \right) - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \bar{\rho} \tilde{g}_i \quad , \quad (3.34)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{e}_t) + \frac{\partial}{\partial x_j} ((\bar{\rho} \tilde{e}_t + \bar{p}) \tilde{u}_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho} a_{\text{eff}} \frac{\partial \tilde{h}_t}{\partial x_j} + \bar{\tau}_{ij} \tilde{u}_i \right) \quad , \quad (3.35)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{y}_k) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{y}_k \tilde{u}_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho} D_{\text{eff}} \frac{\partial \tilde{y}_k}{\partial x_j} \right) + \bar{\omega}_k \quad . \quad (3.36)$$

Das verbleibende Problem besteht nun darin, die turbulente Scheinviskosität μ_T zu modellieren. Etabliert haben sich dazu Zwei-Gleichungs-Turbulenzmodelle, die die turbulente kinetische Energie k und deren Dissipationsrate ε über Transportgleichungen bestimmen und damit die Abschätzung

$$\mu_T = \bar{\rho} C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (3.37)$$

treffen. Die Modellkonstante C_μ wird üblicherweise zu 0,09 gesetzt [70]. Das am weitesten verbreitete Zwei-Gleichungs-Modell ist das Standard- k - ε -Modell. Dessen Transportgleichungen lauten [165]

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} k) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} k \tilde{u}_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + P_k - \bar{\rho} \varepsilon \quad , \quad (3.38)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \varepsilon \tilde{u}_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} P_k - C_{\varepsilon 2} \bar{\rho} \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (3.39)$$

mit den Modellkonstanten

$$\sigma_k = 1,0, \quad \sigma_\varepsilon = 1,3, \quad C_{\varepsilon 1} = 1,44, \quad C_{\varepsilon 2} = 1,92 \quad . \quad (3.40)$$

Der Quellterm der turbulenten kinetischen Energie wird definiert als

$$P_k = -\bar{\rho} \widetilde{u_i'' u_j''} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} \quad (3.41)$$

und ist dank Gl. 3.29 geschlossen. Damit kann die turbulente Scheinviskosität μ_T aus Gl. 3.37 berechnet werden. Die verbleibenden Transportgrößen berechnen sich zu

$$a_T = \frac{\mu_T}{\bar{\rho} \text{Pr}_T} \quad \text{und} \quad D_T = \frac{\mu_T}{\bar{\rho} \text{Sc}_T} \quad (3.42)$$

mit der turbulenten Prandtl-Zahl Pr_T und der turbulenten Schmidt-Zahl Sc_T . Diese beiden Kennzahlen werden in dieser Arbeit konstant zu $\text{Pr}_T = \text{Sc}_T = 1$ gesetzt.

Alternativ kann statt Gl. 3.39 auch eine Transportgleichung für die turbulente Frequenz $\omega = \varepsilon/k$ gelöst werden, wodurch man das k - ω -Turbulenzmodell erhält [169]:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho}\omega) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho}\omega \tilde{u}_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\omega} \right) \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right] + C_{\omega 1} \frac{\omega}{k} P_k - C_{\omega 2} \bar{\rho} \omega^2 \quad . \quad (3.43)$$

Die Modellkonstanten betragen

$$C_{\omega 1} = C_{\varepsilon 1} - 1, \quad C_{\omega 2} = C_{\varepsilon 2} - 1 \quad . \quad (3.44)$$

Während das k - ω -Modell dem k - ε -Modell bei der Modellierung des Wandinflusses überlegen ist, liefert das k - ε -Modell meist bessere Ergebnisse bei der Modellierung turbulenter Freistrahlen [206]. Daher wurde von Menter [146] das sogenannte k - ω -SST-Modell („*Shear Stress Transport*“) eingeführt, in dem durch eine Überblendfunktion zwischen den Formulierungen Gl. 3.43 und Gl. 3.39 umgeschaltet wird. Details zur Implementierung der Überblendfunktion finden sich in [147].

Da bei den zu untersuchenden Flammenbeschleunigungsvorgängen davon auszugehen ist, dass eine gute Wiedergabe sowohl des Wandinflusses als auch turbulenter Freistrahlen (beim Durchtritt zwischen Hindernissen) von Bedeutung ist, wird in dieser Arbeit durchgängig das k - ω -SST-Modell verwendet.

3.3 Diskretisierung

3.3.1 Druckbasierte und dichtebasierte Lösungsverfahren

Zur numerischen Lösung der in Kap. 3.2 hergeleiteten Erhaltungsgleichungen wird die Finite-Volumen-Methode benutzt [70]. Hierbei wird das Recheng-

biet in finite Volumen aufgeteilt, in denen jeweils ein diskreter Wert der zu berechnenden Größen gespeichert wird. Die Gleichungen werden linearisiert und können als ein Gleichungssystem der Form

$$A\vec{\phi} = \vec{b} \quad (3.45)$$

mit den Erhaltungsgrößen $\vec{\phi} = (\rho, \rho\vec{u}, \rho e_t, \rho\psi_k)^T$ geschrieben werden, wobei ψ_k stellvertretend für alle transportierten Skalare steht.

Die Formulierung der zeitlichen Ableitung kann implizit oder explizit erfolgen. Bei der Lösung des Gleichungssystems hat man die Wahl zwischen einer druckbasierten und einer dichte-basierten Prozedur. Die Navier–Stokes–Gleichungen weisen nämlich die Besonderheit auf, dass die Lösung der Impuls–Gleichung (Gl. 3.34) die Kenntnis des Drucks erfordert, dieser aber aus keiner anderen Erhaltungsgleichung direkt bestimmt werden kann. Man spricht in diesem Fall von der Druck–Geschwindigkeits–Kopplung [200].

Da die Massenerhaltung (Gl. 3.33) eine zusätzliche Einschränkung für die Lösung des Geschwindigkeitsfeldes darstellt, dessen Komponenten aber bei Kenntnis des Druckfeldes schon durch die Impulserhaltung bestimmt wären, nutzt man in einem druckbasierten Verfahren die Massenerhaltung, um eine Druckgleichung herzuleiten (s. Anhang D):

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} \right) = - \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j - \bar{\tau}_{ij, \text{eff}}) \right] + \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{g}_i)}{\partial x_i} + \frac{\partial^2 \bar{\rho}}{\partial t^2} \quad (3.46)$$

Die nichtlineare Kopplung zwischen Druck und Impuls kann dann iterativ gelöst werden, z.B. mit dem PISO–Algorithmus (*Pressure Implicit with Splitting of Operators*) [95]. Die Dichte kann anschließend aus dem idealen Gasgesetz bestimmt werden.

Die druckbasierte Lösung der Navier–Stokes–Gleichungen eignet sich vor allem für implizite Verfahren, mit denen die Residuen im PISO–Algorithmus iterativ so lange verringert werden, bis eine ausreichende Konvergenz erreicht wurde. Dies ermöglicht kosteneffiziente numerische Berechnungen mit großen Zeitschritten und wird daher von fast allen kommerziellen und Open Source CFD–Sollern angewendet.

Schwächen zeigen druckbasierte Lösungsverfahren allerdings bei Überschall–Problemen. Da die Druckgleichung (Gl. 3.46) eine zweimalige stetige Differenzierbarkeit des Druckfeldes impliziert und damit diffusiv auf Unstetigkeiten

wirkt, werden Verdichtungsstöße relativ unscharf wiedergegeben. Daher sind Codes zur Berechnung transsonischer und hypersonischer Strömungen in der Regel dichte basiert formuliert.

Bei einem dichte basierten Verfahren wird das Dichtefeld direkt aus der Massenerhaltung (Gl. 3.33) bestimmt. Da diese Gleichung keinen diffusiven Term beinhaltet, werden Diskontinuitäten theoretisch, d.h. bei exakter Lösung der analytischen Gleichung, nicht verschmiert. Um darüber hinaus die Abschwächung von Diskontinuitäten durch numerische Diffusion zu verringern, wird die finite Ausbreitungsgeschwindigkeit von Wellen („Charakteristiken“ [121, 191]) im Lösungsverfahren explizit berücksichtigt. In der Praxis bedeutet dies, dass zunächst die Ausbreitungsgeschwindigkeit aller Wellen, die sich aus den Erhaltungsgleichungen ergeben, berechnet wird (s. Kap. 3.3.3). Durch Verwendung eines expliziten Verfahrens wird anschließend sichergestellt, dass jede Rechenzelle nur von ihren Nachbarzellen (bzw. den daraus stammenden Charakteristiken) beeinflusst wird.³ Zwangsläufig erfordern explizite Verfahren damit die Einhaltung des CFL-Kriteriums: Die Courant-Friedrichs-Lewy-Zahl, die eine Aussage darüber trifft, wie weit Information innerhalb eines Rechenschritts propagiert, darf einen Maximalwert nicht überschreiten, damit das Verfahren stabil bleibt:

$$\text{CFL} = \frac{(|u| + a) \Delta t}{\Delta x} < \text{CFL}_{\max} \quad . \quad (3.47)$$

Hier bezeichnet u die Strömungsgeschwindigkeit, a die Schallgeschwindigkeit, Δt den Zeitschritt und Δx die Gitterweite. Nach der expliziten Lösung der Erhaltungsgleichungen kann schließlich der Druck aus dem idealen Gasgesetz bestimmt werden. Dies bringt den Nachteil mit sich, dass dichte basierte Solver bei verschwindender Kopplung zwischen Dichte und Druck, also inkompressiblen Strömungen, instabil werden und daher nicht zur Simulation von Strömungen mit sehr geringer Mach-Zahl geeignet sind.⁴

³ Im Gegensatz dazu werden in impliziten Rechenverfahren, wie sie bei Unterschallproblemen üblich sind, die Variablen in allen Rechenzellen so verändert, dass die Residuen der zu lösenden Gleichungen minimiert werden. Eine korrekte Wiedergabe der finiten Ausbreitungsgeschwindigkeit von Wellen ist damit nicht mehr garantiert.

⁴ Zur Umgehung dieses Problems s. Kap. 4.

3.3.2 Rekonstruktionsverfahren

Da eine akkurate Darstellung von Stoß- und Detonationsfronten in dieser Arbeit unverzichtbar ist, wurde ein dichtebasierter Solver entwickelt. Die Berechnung der konvektiven Flüsse erfolgt dabei mit einem Riemann-Solver [109, 121, 191]. In einem ersten Schritt müssen hierzu die konservativen Variablen ϕ aus dem Lösungsvektor $\vec{\phi}$ (Gl. 3.45), die den jeweiligen Wert im Schwerpunkt eines finiten Volumens repräsentieren, auf den Flächen zwischen den Volumina rekonstruiert werden. Im einfachsten Fall kann man annehmen, dass die Variablen innerhalb eines Volumens konstant sind, wodurch man aber nur ein Verfahren erster Ordnung erreicht. Um eine höhere Genauigkeit zu erzielen, führt man eine lineare Rekonstruktion ein:

$$\phi_F = \phi_V + \nabla\phi|_V \cdot (\vec{x}_F - \vec{x}_V) \quad . \quad (3.48)$$

Hier bezeichnet ϕ_F den auf der Fläche rekonstruierten Wert, ϕ_V den im Schwerpunkt des Volumens gespeicherten Wert, $\nabla\phi|_V$ den Gradienten, ausgewertet im Schwerpunkt des Volumens, und \vec{x}_F bzw. \vec{x}_V den Schwerpunkt der Fläche bzw. des Volumens. Dies führt zu einem Verfahren zweiter Ordnung. Hierbei können prinzipiell neue Minima/Maxima auf den Zellflächen entstehen, wie es für den eindimensionalen Fall in Abb. 3.1 illustriert ist. Dort werden drei nebeneinander liegende finite Volumina („Zellen“) betrachtet. In jeder Zelle wird die Variable ϕ vom Schwerpunkt des Volumens V auf den Randflächen F durch ein Verfahren zweiter Ordnung gemäß Gl. 3.48 rekonstruiert. Auf der Fläche F_2 würde dabei ein neues Maximum entstehen, was dazu führen kann, dass die Variable unphysikalisch anwächst. Daher ist es nötig, bei einem Verfahren zweiter (und höherer) Ordnung Limiterfunktionen einzuführen und Gl. 3.48 zu erweitern auf

$$\phi_F = \phi_V + \mathcal{L} \nabla\phi|_V \cdot (\vec{x}_F - \vec{x}_V) \quad . \quad (3.49)$$

Zur Bestimmung des Limiters \mathcal{L} wird in dieser Arbeit ein mehrdimensionales, zell-limitiertes Verfahren [157] verwendet. Hierbei wird eine Schleife über alle Nachbarzellen durchlaufen und der Limiter, der standardmäßig den Wert $\mathcal{L} = 1$ hat, in der gesamten Zelle auf einen Wert $\mathcal{L} < 1$ gesetzt, falls sich bei der Rekonstruktion auf den Zellflächen neue Extrema ergeben sollten. Liegt in einer Rechenzelle ein lokales Minimum oder Maximum vor, wird der Limiter zu Null, sodass dort faktisch mit einem Verfahren erster Ordnung gerechnet

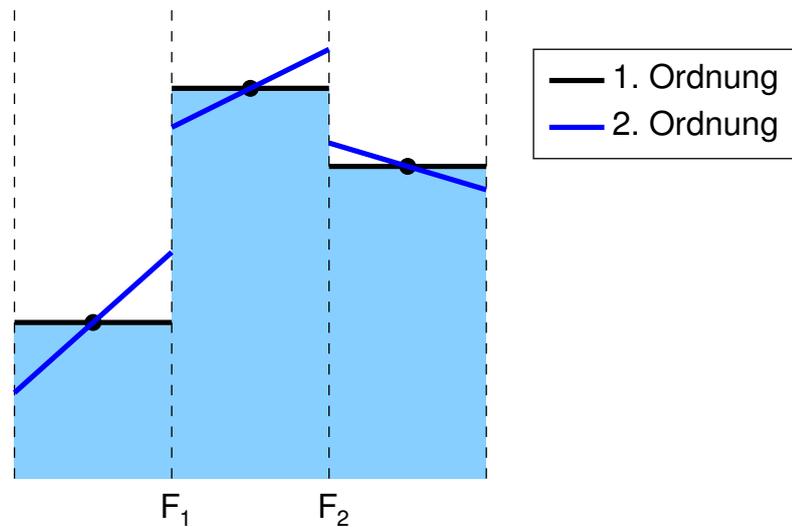


Abbildung 3.1: Schematische Rekonstruktion einer Variable von den Zellschwerpunkten auf den Randflächen.

wird, während im restlichen Rechengebiet die Genauigkeit zweiter Ordnung erhalten bleibt.

3.3.3 HLLC–Solver

Nach der Rekonstruktion der Variablen auf den Zellflächen liegen dort im Allgemeinen Diskontinuitäten vor. Um daraus die konvektiven Flüsse über die Zellflächen zu berechnen, wurde durch Godunov [84] erstmals eine Methode eingeführt, die jedes sich berührende Zellpaar als ein Riemann–Problem [109, 121, 191] betrachtet. Da die exakte Lösung des Riemann–Problems an jeder Zellfläche numerisch sehr teuer ist, haben sich verschiedene Verfahren etabliert, um den Fluss durch eine Näherungslösung des Riemann–Problems zu berechnen. In dieser Arbeit hat sich dabei das HLLC–Verfahren („Harten–Lax–van Leer–Contact“) [192], das zur Gruppe der Riemann–Solver [191] gehört, als sehr gut geeignet herausgestellt und wird im Folgenden kurz skizziert. Die Implementierung des Verfahrens für nicht–konstante Stoffwerte erfolgte aufbauend auf den Arbeiten von Borm [25].

Entfernt man aus den Navier–Stokes–Gleichungen (Gl. 3.5, 3.6, 3.10) die reibungsbehafteten Terme, so erhält man die Euler–Gleichungen, die in konservativer Form geschrieben werden können als [191]

$$\frac{\partial}{\partial t} \vec{\phi} + \frac{\partial}{\partial x} \vec{F} = 0 \quad (3.50)$$

mit dem Zustandsvektor $\vec{\phi}$ und dem Flussvektor \vec{F} :

$$\vec{\phi} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho w \\ \rho e_t \end{pmatrix}, \quad \vec{F} = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ \rho uw \\ \rho u e_t + up \end{pmatrix}. \quad (3.51)$$

Ohne Beschränkung der Allgemeinheit wurde hierbei vorausgesetzt, dass über eine Zellfläche bilanziert wird, die normal zur x -Richtung steht. Die rekonstruierten Variablen auf einer Seite einer Zellfläche werden im Folgenden mit dem Index L , die auf der anderen Seite einer Zellfläche mit dem Index R gekennzeichnet. Um aus den Zustandsvektoren auf beiden Seiten dieser Fläche den Fluss darüber zu berechnen, wird im HLLC-Solver postuliert, dass von der Grenzfläche drei Wellen (Charakteristiken) ausgehen, die sich mit den konstanten Geschwindigkeiten S_L , S_* und S_R ausbreiten (s. Abb. 3.2). Hierbei gilt $S_L < S_* < S_R$. Die mittlere Charakteristik stellt stets eine Kontaktwelle dar, die beiden äußeren können entweder Verdichtungsstöße oder Expansionswellen sein. Zwischen den Charakteristiken liegen jeweils konstante Zustände vor. Bei Kenntnis der Geschwindigkeiten kann dann der Fluss über die Grenzfläche bei $x = 0$ aus dem dort vorliegenden Zustand (z.B. $\vec{\phi}_{*L}$ in Abb. 3.2) berechnet werden.

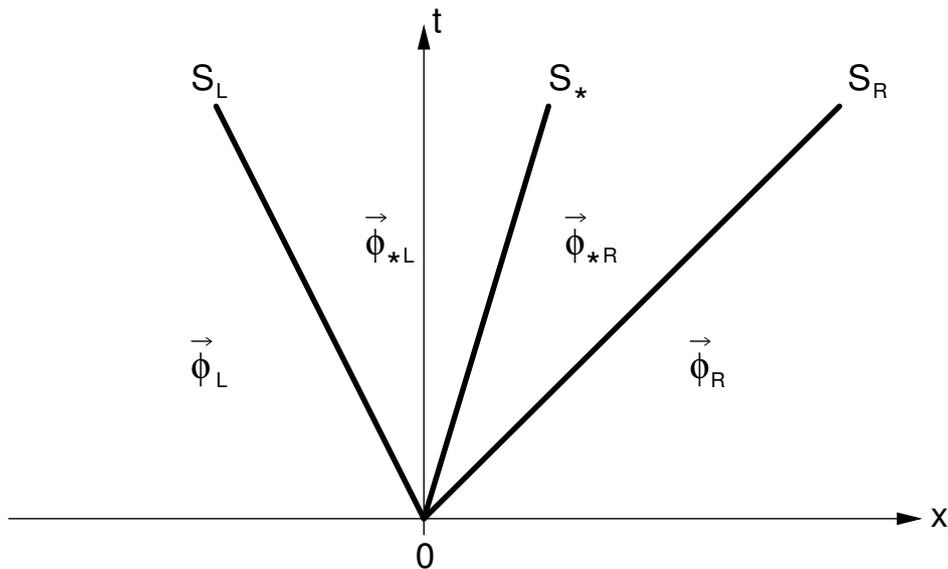


Abbildung 3.2: Ort-Zeit-Diagramm der Charakteristiken im HLLC-Schema (nach [191]).

Gegenüber der exakten Lösung des Riemann-Problems nimmt der HLLC-Solver folgende Vereinfachungen vor:

- Alle drei Wellen stellen Diskontinuitäten dar. Die innere Struktur eines Expansionsfächers wird also (innerhalb eines einzelnen Zeitschritts) nicht aufgelöst.
- Die Wellengeschwindigkeiten werden nicht iterativ bestimmt, sondern aus dem Anfangszustand abgeschätzt.

Vor allem der Verzicht auf iterative Verfahren verringert die Rechenzeit gegenüber einem exakten Riemann-Solver [87, 129, 164, 191] enorm. Die naheliegende Abschätzung der Geschwindigkeiten S_L und S_R aus den Anfangszuständen zu

$$S_L = u_L - a_L \quad , \quad S_R = u_R + a_R \quad (3.52)$$

gibt die Ausbreitungsgeschwindigkeit von Expansionswellen gut wieder, unterschätzt aber die Ausbreitungsgeschwindigkeit von Verdichtungsstößen [43]. Daher wird in dieser Arbeit die Bestimmung der Geschwindigkeiten durch einen Ansatz voninfeldt [58] bevorzugt. Einfeldt konnte durch eine Eigenwertanalyse der linearisierten Euler-Gleichungen zeigen, dass die tatsächlichen Ausbreitungsgeschwindigkeiten sehr viel besser getroffen werden durch die Abschätzung

$$S_L = \hat{u} - \hat{a} \quad , \quad S_R = \hat{u} + \hat{a} \quad (3.53)$$

mit

$$\hat{u} = \frac{\sqrt{\rho_L} u_L + \sqrt{\rho_R} u_R}{\sqrt{\rho_L} + \sqrt{\rho_R}} \quad , \quad (3.54)$$

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{\sqrt{\rho_L} a_L^2 + \sqrt{\rho_R} a_R^2}{\sqrt{\rho_L} + \sqrt{\rho_R}} + \frac{1}{2} \frac{\sqrt{\rho_L} \sqrt{\rho_R}}{(\sqrt{\rho_L} + \sqrt{\rho_R})^2} (u_R - u_L)^2} \quad . \quad (3.55)$$

Mit dem Wissen, dass der Druck p und die Geschwindigkeit u über die Kontaktwelle konstant sind, kann anschließend eine Formel für die Geschwindigkeit S_* hergeleitet werden [191]:

$$S_* = \frac{p_R - p_L + \rho_L u_L (S_L - u_L) - \rho_R u_R (S_R - u_R)}{\rho_L (S_L - u_L) - \rho_R (S_R - u_R)} \quad . \quad (3.56)$$

Der angenäherte Fluss über die Grenzfläche hängt von den Vorzeichen der Wellengeschwindigkeiten ab:

$$\vec{F}^{(HLLC)} = \begin{cases} \vec{F}_L, & 0 \leq S_L \\ \vec{F}_{*L}, & S_L < 0 \leq S_* \\ \vec{F}_{*R}, & S_* < 0 \leq S_R \\ \vec{F}_R, & S_R < 0 \end{cases} . \quad (3.57)$$

\vec{F}_L und \vec{F}_R können direkt aus Gl. 3.51 berechnet werden. Zur Bestimmung der Flüsse \vec{F}_{*K} (K steht dabei stellvertretend für L bzw. R) berechnet man zunächst den entsprechenden Zustandsvektor

$$\vec{\phi}_{*K} = \frac{S_K - u_K}{S_K - S_*} \begin{pmatrix} \rho_K \\ \rho_K S_* \\ \rho_K v_K \\ \rho_K w_K \\ \rho_K e_{t,K} + (S_* - u_K) \left(\rho_K S_* + \frac{p_K}{S_K - u_K} \right) \end{pmatrix} . \quad (3.58)$$

Durch Einsetzen in die Rankine–Hugoniot–Beziehungen [191]

$$\vec{F}_{*K} = \vec{F}_K + S_K (\vec{\phi}_{*K} - \vec{\phi}_K) \quad (3.59)$$

erhält man schließlich:

$$\vec{F}_{*K} = \frac{S_* (S_K \vec{\phi}_K - \vec{F}_K) + S_K [p_K + \rho_L (S_K - u_K) (S_* - u_K)] (0, 1, 0, 0, S_*)^T}{S_K - S_*} . \quad (3.60)$$

Der konvektive Transport weiterer passiver Skalare geschieht in Analogie zum Transport der Tangentialgeschwindigkeiten v und w , die über die Charakteristiken hinweg erhalten bleiben. Nach Berechnung der konvektiven Flüsse mit dem HLLC–Schema können die diffusiven Flüsse und eventuelle Quellterme auf dieselbe Weise wie in einem druckbasierten Solver in das Gleichungssystem 3.45 eingefügt werden.⁵

⁵ Diffusive Terme werden über einen Gradientenansatz formuliert, Quellterme tragen direkt zum Vektor \vec{b} der rechten Seite bei.

3.3.4 Validierung am Stoßwellenrohr

Die Eignung des dichte-basierten HLLC-Solvers für Überschallströmungen kann man am besten an einem einfachen Stoßwellenrohr-Problem überprüfen. Hierbei handelt es sich um ein 1D-Problem, in dem man annimmt, dass in einem Rohr zu Beginn zwei unterschiedliche Zustände vorliegen, die durch eine Membran an der Stelle $x = 0$ voneinander getrennt sind. Zum Zeitpunkt $t = t_0$ wird die Membran entfernt und es können je nach Anfangszustand unterschiedliche Wellenphänomene beobachtet werden (Verdichtungsstoß, Kontaktwelle, Expansionswelle). Mathematisch handelt es sich auch hier um ein Riemann-Problem, nämlich die Lösung der 1D-Euler-Gleichungen für die Anfangsbedingung

$$\vec{\phi}(x, t_0) = \begin{cases} \vec{\phi}_L, & x < 0 \\ \vec{\phi}_R, & x \geq 0 \end{cases} . \quad (3.61)$$

Die Abbildungen 3.3 bis 3.6 zeigen die berechneten Lösungen für Luft (molare Masse $M = 28,85 \text{ kg/kmol}$, Isentropenexponent $\kappa = 1,4$) zum Zeitpunkt $t = t_0 + 0,1 \text{ ms}$ für die in Tabelle 3.1 gegebenen Anfangsbedingungen.

Die Berechnung erfolgte auf einem äquidistanten Gitter mit Gitterweite $\Delta x = 1,0 \text{ mm}$. Zum Vergleich ist jeweils die analytische Lösung [3] als graue Linie eingezeichnet. Bei den hier verwendeten Anfangsbedingungen zeigt sich ein nach rechts laufender Verdichtungsstoß, eine nach links laufende Expansionswelle sowie eine nach rechts laufende Kontaktwelle („Mediengrenze“), über die Druck und Geschwindigkeit konstant sind, Temperatur und Dichte aber variieren.

Abb. 3.3 zeigt die Lösung, die mit einem druckbasierten *OpenFOAM*-Solver („*reactingFoam*“, unter Abschaltung der viskosen und der reaktiven Terme) erzielt wurde. Es ist zu erkennen, dass der berechnete Stoß die richtige Stärke hat, allerdings mit einer etwas zu geringen Geschwindigkeit (erkennbar

	$x < 0$	$x \geq 0$
p	10 bar	1 bar
T	800 K	300 K
u	0 m/s	0 m/s

Tabelle 3.1: Anfangsbedingungen für die Validierung des Solvers am Stoßwellenrohr.

an der falschen Stoßposition) propagiert. Darüber hinaus wird die Nachstoß-Temperatur zu gering und die Dichte folglich zu hoch vorhergesagt, was im Hinblick auf die spätere Anwendung für reaktive Strömungen besonders kritisch zu sehen ist. Ebenso ist zu erwarten, dass die leichte Oszillation im Stoßprofil sich negativ auf die Berechnung der chemischen Reaktion auswirken wird. Die Expansionswelle wird leicht abgerundet und die Kontaktwelle sehr diffusiv wiedergegeben. Die konvektiven Terme wurden im hier gezeigten Fall mit dem van-Leer-Schema [157] diskretisiert. Bei anderen Schemata ergaben sich noch schlechtere Ergebnisse.

Die Lösung in Abb. 3.4 wurde mit dem in Kap. 3.3.3 beschriebenen HLLC-Solver bei Rekonstruktion der Variablen mit Genauigkeit erster Ordnung berechnet. Wie zu erwarten, ist der Solver sehr dissipativ und damit für quantitativ anspruchsvolle Berechnungen nicht zu empfehlen. Er sagt aber die korrekte Stoßgeschwindigkeit voraus und berechnet korrekte Nachstoß-Werte. Erhöht man die Genauigkeit des Verfahrens auf zweite Ordnung (Abb. 3.5), so erkennt man, dass der Stoß deutlich schärfer wiedergegeben wird. Auch die Kontaktwelle und die Expansionswelle liegen in dieser Rechnung deutlich näher an der analytischen Lösung. Es zeigen sich allerdings Über- und Unterschwinger in allen Variablen, die keine physikalische Ursache haben, sondern auf das Entstehen neuer Minima und Maxima auf den Zellflächen (s. Kap. 3.3.2) zurückzuführen sind.

Aktiviert man die Limiterfunktionen in Gl. 3.49, so verschwinden diese Oszillationen praktisch vollständig, wie in Abb. 3.6 zu sehen ist. Die Expansionswelle stimmt nahezu perfekt mit der Theorie überein und der Stoß wird äußerst scharf wiedergegeben. Die numerisch bedingte Dissipation einer sich fortbewegenden Kontaktwelle [191] kann auch dieser Solver nicht vollständig vermeiden, doch kann das Ergebnis auch in diesem Punkt als der druckbasierten Formulierung überlegen bezeichnet werden.

Insgesamt kann festgehalten werden, dass der in dieser Arbeit implementierte HLLC-Solver Diskontinuitäten in inerten Strömungen ausgezeichnet wiedergeben kann und somit eine gute Grundlage für die Beschreibung transsonischer und hypersonischer reagierender Strömungen darstellt.

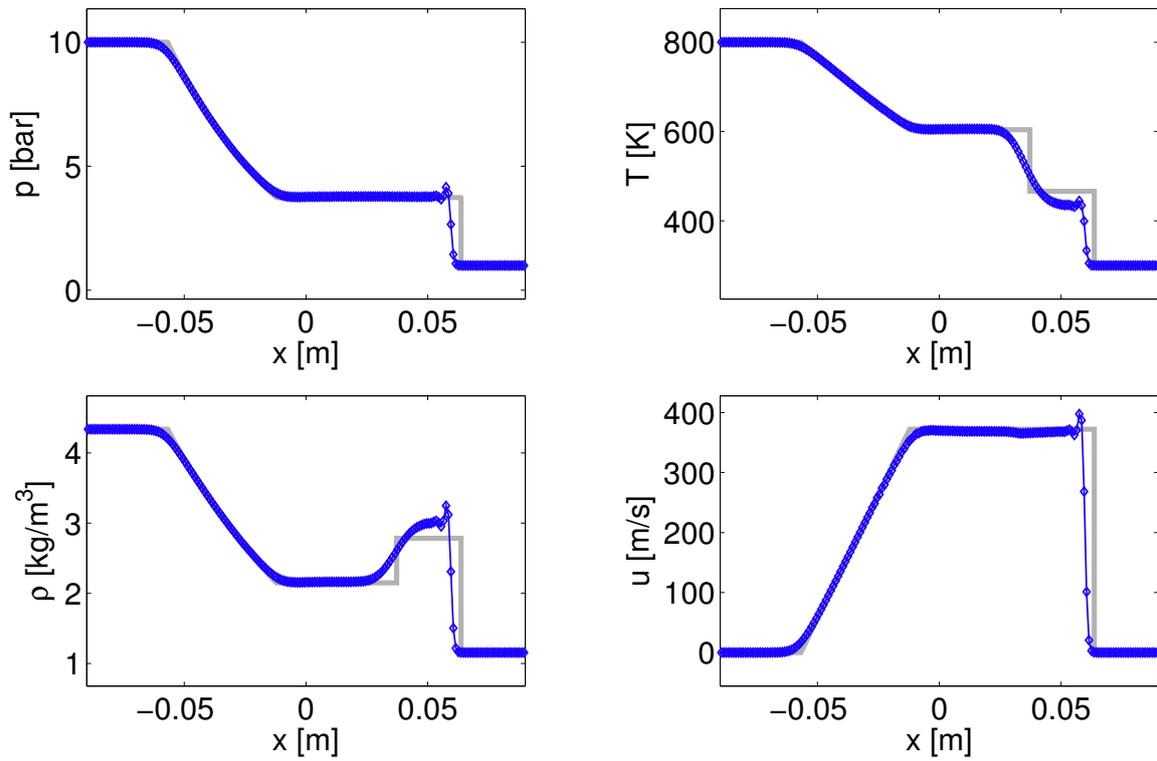


Abbildung 3.3: Ergebnisse Stoßwellenrohr mit druckbasiertem Solver.

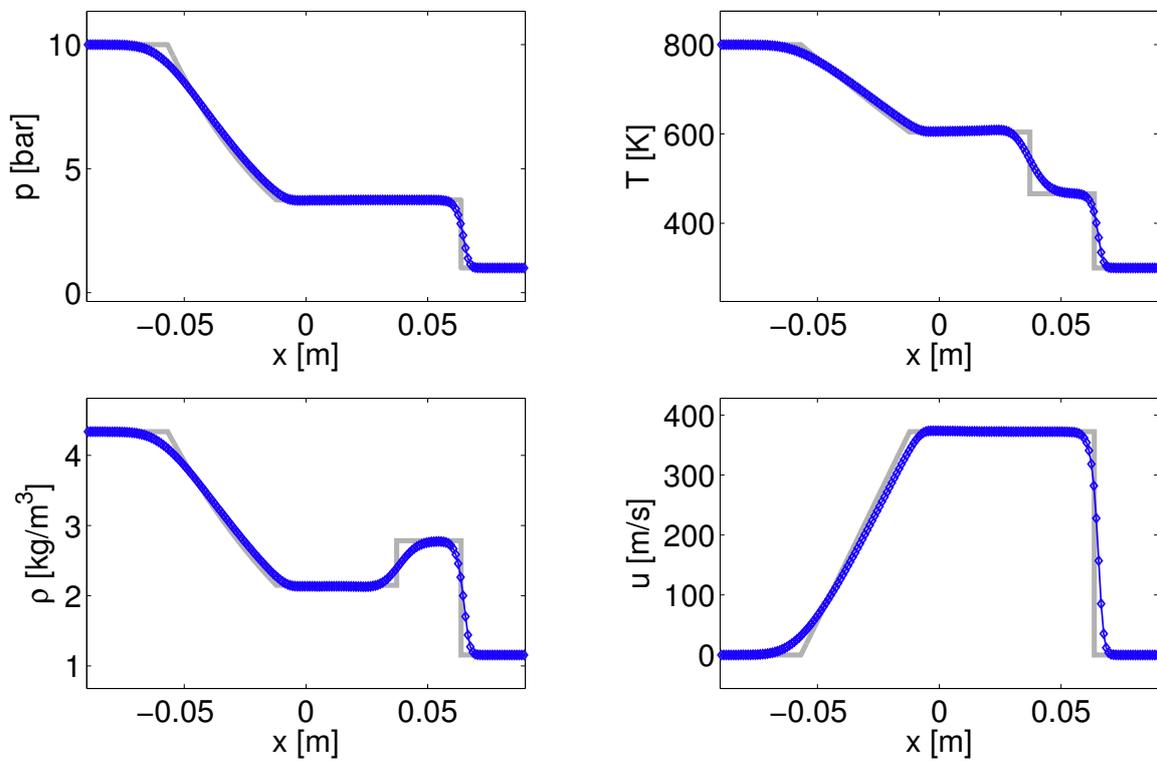


Abbildung 3.4: Ergebnisse Stoßwellenrohr mit HLLC erster Ordnung.

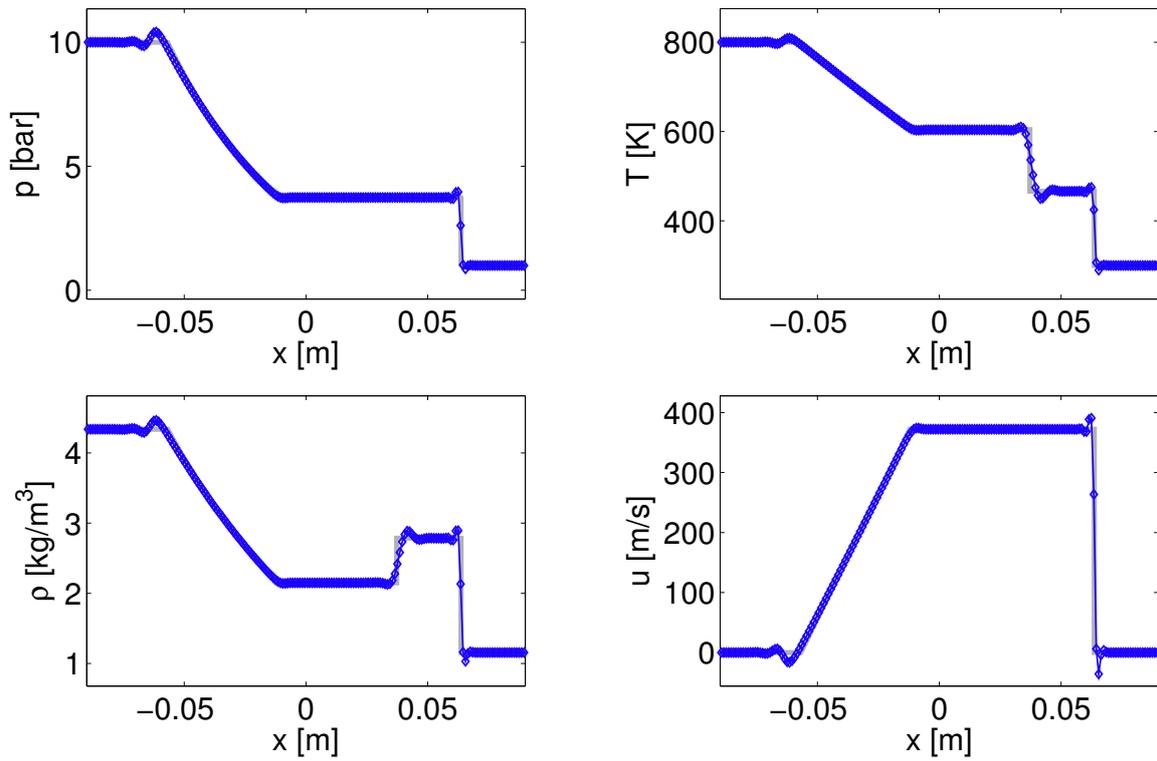


Abbildung 3.5: Ergebnisse Stoßwellenrohr mit HLLC zweiter Ordnung ohne Limiter.

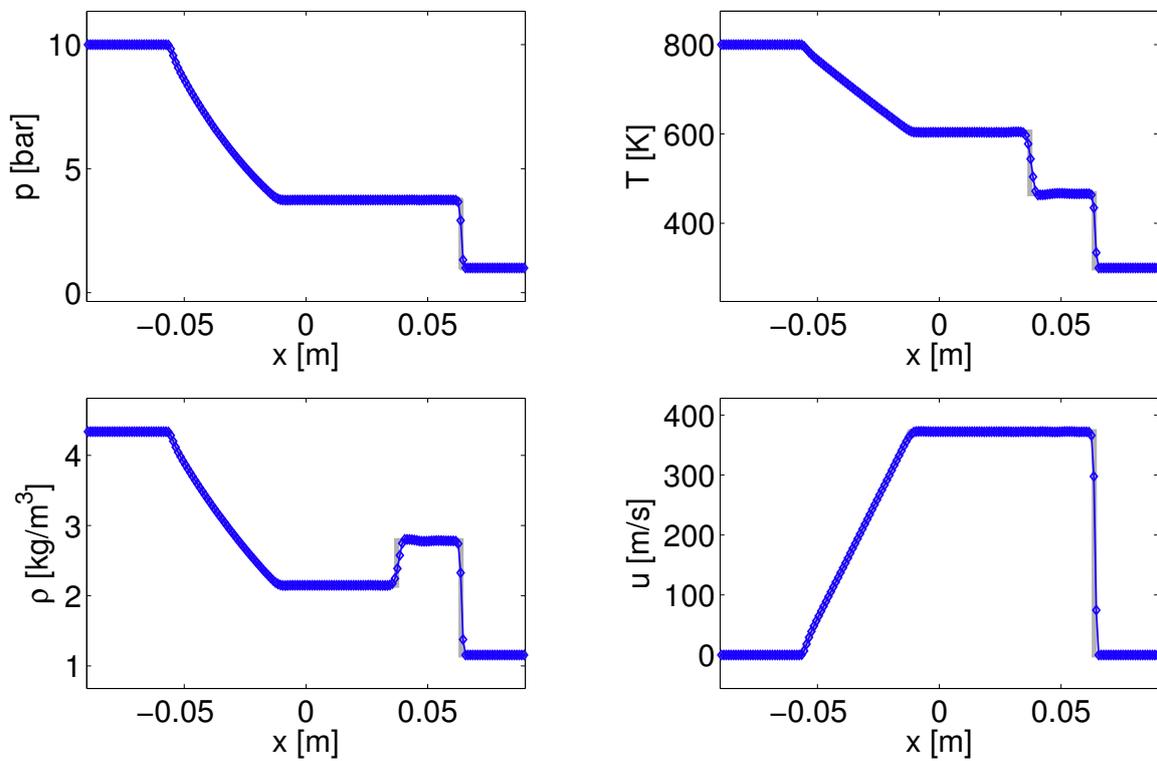


Abbildung 3.6: Ergebnisse Stoßwellenrohr mit HLLC zweiter Ordnung und Limitern.

3.4 Modellierung der turbulenten Deflagration

3.4.1 Übersicht

Zwar sind die bei der Verbrennung von Wasserstoff ablaufenden Reaktionen weitgehend verstanden und können in Form von detaillierten Mechanismen (z.B. [97, 156, 163]) angegeben werden. Allerdings wirken sich Schwankungen im Gemischzustand hochgradig nichtlinear auf die Reaktionsraten aus, weshalb es in turbulenten Strömungen grundsätzlich falsch ist, die mittleren Reaktionsraten aus den mittleren Strömungsgrößen zu berechnen [165]. Die Turbulenz–Chemie–Interaktion muss daher modelliert werden.

Je nach Verbrennungsregime haben sich dafür verschiedene Modelle etabliert. Als Extremum findet sich auf der einen Seite das Eddy–Break–Up–Modell (EBU–Modell)[187], das unter der Annahme „mixed is burned“ allein die turbulente Mischungsrate als maßgebend für die Reaktionsrate ansieht. Das trifft nur für Verbrennungsregimes, in denen die Chemie verglichen mit der Turbulenz sehr schnell abläuft, zu. Im entgegengesetzten Extremfall kann die Verbrennung auch in einem Regime stattfinden, in dem die turbulente Mischung so schnell erfolgt, dass die Chemie die Reaktionsrate limitiert. Dieses Regime entspricht einer Damköhler–Zahl $Da \ll 1$ und wird als Perfectly Stirred Reactor (PSR) bezeichnet. Es ist das einzige Deflagurationsregime, in dem die Annahme „mittlere Reaktionsrate gleich Reaktionsrate der mittleren Größen“ tatsächlich gerechtfertigt wäre. Allerdings ist dieses Verbrennungsregime in technischen Anwendungen im Allgemeinen unerreichbar, da bei derart hohen Turbulenzintensitäten das Löschen der Reaktion durch Quenching zu erwarten ist [216]. Ein aufgrund seiner Einfachheit weit verbreiteter Ansatz besteht darin, sowohl eine Reaktionsrate mit dem EBU–Modell als auch eine chemisch limitierte Reaktionsrate (z.B. durch Anwendung eines detaillierten Reaktionsmechanismus) zu berechnen und geeignet zu kombinieren, indem z.B. nur das Minimum beider Reaktionsraten oder ein gewichtetes Verfahren verwendet wird. Letzteres führt zum sogenannten Eddy Dissipation Concept (EDC) [63, 89, 140], dem der Gedanke zu Grunde liegt, dass nur Reaktionspartner, die durch turbulente Mischung auf den feinsten Skalen zueinander gebracht wurden, auch reagieren können.

Mit derselben Argumentation [161], hierbei allerdings ausgehend vom PSR-Ansatz, wird mit dem Partially–Stirred–Reactor–Modell (PaSR–Modell) versucht, die PSR–Reaktionsrate durch einen Vergleich von chemischen und turbulenten Zeitskalen zu modifizieren [85]. Dieses Modell wurde vor allem bei der motorischen Verbrennung erfolgreich eingesetzt [161], ist grundsätzlich aber auch in der Lage, DDT–Vorgänge qualitativ richtig wiederzugeben [64, 65]. Die Ausbreitungsgeschwindigkeit einer langsamen oder nur mäßig schnellen Deflagration kann damit aber nur unzureichend wiedergegeben werden, da der zu Grunde liegende PSR–Ansatz zu weit von den tatsächlich stattfindenden Vorgängen, die eher im Flamelet–Bereich verortet werden können, entfernt ist. Darüber hinaus hat das PaSR–Modell, genauso wie das EDC–Modell, den Nachteil, dass bei Verwendung eines detaillierten Reaktionsmechanismus die Bestimmung des Reaktionsquellterms sehr zeitaufwändig ist.

Eine weitere Möglichkeit zur Modellierung der Turbulenz–Chemie–Interaktion basiert auf Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen (*Probability Density Functions* – PDFs). Hier wird für eine oder mehrere turbulente Größen eine Wahrscheinlichkeitsverteilung entweder angenommen (presumed PDF [32, 120, 134]) oder durch Transportgleichungen bestimmt (transported PDF [28, 137, 168]). Die Reaktionsraten werden dann über die in der Regel mehrdimensionale Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung integriert, was in der numerischen Praxis einer mehrmaligen Auswertung der Reaktionsraten oder dem Zugriff auf tabellierte Werte entspricht. Effiziente Methoden zur Reduktion der PDF–Dimensionalität finden sich in [83] und [79]. Trotz ihrer nach wie vor hohen Kosten haben sich PDF–Verfahren bei der Modellierung isobarer, hochturbulenter Flammen etabliert. Auf schnelle Deflagrationen und DDT–Vorgänge sind sie allerdings nur schwer erweiterbar, da turbulente Vorgänge kontinuierliche PDF–Verläufe erzeugen, Verdichtungsstöße aber Sprünge in den Zustandsgrößen hervorrufen, was durch gängige PDF–Ansätze kaum wiedergegeben werden kann.

Alternativ kann man aus der Transportgleichung einer reagierenden Spezies (Gl. 3.28) eine Transportgleichung für eine Reaktionsfortschrittsvariable c herleiten [31, 133]. Hierbei entspricht $c = 0$ einem unverbrannten und $c = 1$ einem vollständig verbrannten Gemisch. In der Favre–gemittelten Betrachtungsweise entspricht \tilde{c} der dichtegewichteten Wahrscheinlichkeit, an einem Ort zu einem bestimmten Zeitpunkt verbranntes Gemisch anzutreffen. Aus der Verteilung der Reaktionsfortschrittsvariable kann anschließend auf die

Verteilung der einzelnen Spezies zurückgerechnet werden und die Temperatur aus Gl. 3.4 iterativ bestimmt werden. Somit muss statt N Speziestransportgleichungen (Gl. 3.28) nur noch eine Transportgleichung für den Reaktionsfortschritt gelöst werden:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{c}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{c} \tilde{u}_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho} D_{\text{eff}} \frac{\partial \tilde{c}}{\partial x_j} \right) + \bar{\omega}_c \quad . \quad (3.62)$$

Verbrennungsmodelle, die diesen Ansatz nutzen, werden in der Regel für den Bereich der gefalteten Flamelets und dünnen Reaktionszonen entwickelt. Da sich die deflagrative Flammenbeschleunigung hauptsächlich in diesen Regimes abspielt, stellten sich Reaktionsfortschrittsmodelle in dieser Arbeit als prädestiniert für die Simulation der Deflagration und das Erreichen realistischer „Vor-DDT-Bedingungen“ heraus. Ein weiterer Vorteil besteht in den geringen Kosten (nur eine einzige Transportgleichung, keine numerisch steifen Quellterme). Zur Berechnung des Quellterms $\bar{\omega}_c$ in Gl. 3.62 existieren die unterschiedlichsten Ansätze, von denen einige im Folgenden vorgestellt werden. Eine Analyse der jeweiligen Stärken und Schwächen findet sich in Kap. 3.4.2.5.

3.4.2 Bestimmung des deflagrativen Quellterms

3.4.2.1 Schmid

Das von Schmid [178, 179] entwickelte Modell berechnet aus der laminaren Brenngeschwindigkeit und den lokalen Turbulenzgrößen eine turbulente Brenngeschwindigkeit

$$s_T = s_L + u' (1 + \text{Da}^{-2})^{-1/4} \quad . \quad (3.63)$$

Diese Geschwindigkeit wird durch Anwendung des nach Kolmogorov, Petrovskii und Piskunov benannten KPP-Theorems [114, 138] in einen volumetrischen Quellterm für den Reaktionsfortschritt umgewandelt:

$$\bar{\omega}_c = 4,96 \bar{\rho}_u \frac{\varepsilon}{k} \left(\frac{s_L}{u'} + (1 + \text{Da}^{-2})^{-1/4} \right)^2 \tilde{c} (1 - \tilde{c}) \quad . \quad (3.64)$$

Der Vorfaktor 4,96 wurde dabei durch Vergleiche mit experimentellen Ergebnissen empirisch festgelegt. Durch die Abhängigkeit der Reaktionsrate von der

Damköhler-Zahl ist das Modell dafür ausgelegt, in sämtlichen turbulenten Brennregimes seine Gültigkeit zu bewahren. Allerdings weist es aufgrund der Formulierung der Reaktionsrate proportional zu $\tilde{c}(1 - \tilde{c})$ einen gravierenden Nachteil auf, der in Kap. 3.4.2.5 diskutiert wird.

3.4.2.2 Zimont

Zimont [214–217] wählt für den Quellterm einen Gradientenansatz:

$$\bar{\omega}_c = \bar{\rho}_u s_T |\nabla \tilde{c}| \quad . \quad (3.65)$$

Die Korrelation für die turbulente Brenngeschwindigkeit lautet

$$s_T = A u' Da^{1/4} G \quad (3.66)$$

und kann unter Verwendung der Gleichungen 2.15, 2.10, 2.6 und 2.4 geschrieben werden als

$$s_T = A u'^{3/4} s_L^{1/2} a_u^{-1/4} \ell_T^{1/4} G \quad . \quad (3.67)$$

Der empirische Vorfaktor A liegt für Wasserstoff–Luft–Flammen im Bereich zwischen 0,61 und 0,70 [214, 216].

Das Zimont–Modell berücksichtigt Quenching–Effekte durch einen von Bray [30] definierten Quenching–Faktor $G \in [0;1]$:

$$G = \frac{1}{2} \operatorname{erfc} \left[-\frac{1}{\sqrt{2\sigma}} \left(\ln \left(\frac{\varepsilon_{\text{cr}}}{\varepsilon} \right) + \frac{\sigma}{2} \right) \right] \quad . \quad (3.68)$$

Hier bezeichnet $\operatorname{erfc}(x)$ die komplementäre Fehlerfunktion [174]:

$$\operatorname{erfc}(x) = 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt \quad . \quad (3.69)$$

σ steht für die Standardabweichung der turbulenten Dissipation und wird modelliert als

$$\sigma = 0,28 \ln \left(\frac{\ell_T}{\ell_\eta} \right) \quad . \quad (3.70)$$

Die kritische Dissipationsrate

$$\varepsilon_{\text{cr}} = 15 \nu g_{\text{cr}} \quad (3.71)$$

ist eine Funktion des kritischen Geschwindigkeitsgradienten g_{cr} , bei dem Quenching relevant wird. Nach [216] kann dieser abgeschätzt werden zu

$$g_{cr} = \frac{s_L^2}{a_u} \quad , \quad (3.72)$$

womit er dem inversen Zeitmaß der laminaren Flamme (Gl. 2.6) entspricht.

Als Gültigkeitsbereich für die Zimont–Korrelation wird in [214] der Bereich

$$\text{Re}_T^{0,75} \text{Da}^{-1,5} > 1 > \text{Da}^{-0,5} \quad (3.73)$$

angegeben, was im Borghi–Diagramm hauptsächlich dem Bereich der dünnen Reaktionszonen entspricht.⁶

3.4.2.3 Peters

Das turbulente Verbrennungsmodell von Peters basiert ursprünglich auf einer Level–Set–Formulierung („G–Gleichung“) [162], kann aber in eine Form mit Reaktionsfortschrittsvariable umgeschrieben werden [4]. Der Quellterm ist dann identisch mit Gl. 3.65, für die Formulierung der turbulenten Brenngeschwindigkeit ergibt sich

$$s_T = s_L \left(1 - A \frac{\ell_T}{\ell_L} + \sqrt{\left(A \frac{\ell_T}{\ell_L} \right)^2 + B \frac{u' \ell_T}{s_L \ell_L}} \right) \quad . \quad (3.74)$$

Die Modellkonstanten betragen $A = 0,195$ und $B = 0,78$. Als Gültigkeitsbereich gibt Peters den Bereich der gefalteten Flamelets und der dünnen Reaktionszonen an [162].

3.4.2.4 Weller

Weller [202] formuliert ein Flammenoberflächenmodell, in dem die turbulente Brenngeschwindigkeit als Produkt aus laminarer Brenngeschwindigkeit und einem Flammenfaltungsfaktor ξ aufgefasst wird:

$$s_T = \xi s_L \quad . \quad (3.75)$$

⁶ In [216] wird der Gültigkeitsbereich etwas allgemeiner mit $\text{Re}_T \gg 1, \text{Da} \gg 1, u' \gg s_L$ angegeben.

Damit kann der Quellterm der Reaktionsfortschrittsvariable ebenfalls in der Form von Gl. 3.65 aufgestellt werden. Der Flammenfaltungsfaktor kann als das Verhältnis der turbulent gefalteten Flammenoberfläche A_T und der in Ausbreitungsrichtung projizierten Fläche A_{\perp} angesehen werden:

$$\xi = \frac{A_T}{A_{\perp}} \quad . \quad (3.76)$$

Der Gültigkeitsbereich des Modells kann somit im Bereich der gefalteten Flamelets, unter Umständen auch im Bereich der dünnen Reaktionszonen angesiedelt werden.

Durch Anwendung von bedingter Mittelung [40] wird von Weller eine Transportgleichung für den Flammenfaltungsfaktor ξ aufgestellt, die sich schreiben lässt als

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho}\xi) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho}\xi\tilde{u}_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho}D_{\text{eff}} \frac{\partial \xi}{\partial x_j} \right) + \bar{\rho}P_{\xi}\xi - \bar{\rho}R_{\xi}\xi^2 \quad . \quad (3.77)$$

Der Koeffizient P_{ξ} für die Produktionsrate der Flammenfaltung wird dabei modelliert:

$$P_{\xi} = 0,28 \sqrt{C_{u'}^3 \frac{\varepsilon}{\nu_u}} \quad . \quad (3.78)$$

Der Koeffizient R_{ξ} für die Abbaurrate ergibt sich aus der Argumentation, dass im Gleichgewicht Produktionsrate und Abbaurrate gleich groß sein müssen [202],

$$R_{\xi} = \frac{P_{\xi}}{\xi_{\text{eq}}} \quad , \quad (3.79)$$

wobei ξ im Gleichgewicht den Wert

$$\xi_{\text{eq}} = 1 + C_{\xi} \left(1 + 2 C_S (\tilde{c} - 0,5) \right) \sqrt{\frac{u'}{s_L} \text{Re}_{\eta}} \quad (3.80)$$

annimmt, mit der Reynolds-Zahl auf Kolmogorov-Skala

$$\text{Re}_{\eta} = \frac{u'}{(C_{u'} \nu_u \varepsilon)^{1/4}} \quad . \quad (3.81)$$

Die Modellkonstanten betragen

$$C_{u'} = 1, \quad C_{\xi} = 0,62, \quad C_S = 1 \quad . \quad (3.82)$$

Ausführlichere Darstellungen des Modells sowie alternative Formulierungen finden sich in [157, 202, 203].

3.4.2.5 Auswahl des Verbrennungsmodells

Die Auswahl eines geeigneten Deflagrationsmodells, um Flammengeschwindigkeiten über mehrere Verbrennungsregimes hinweg gut wiederzugeben, erweist sich als schwierig, da bei schnelleren Flammen zunehmend Selbstzündeffekte einen Beitrag zur Flammenausbreitung leisten [182]. Diese werden von den beschriebenen Modellen nicht erfasst und müssen separat modelliert werden (s. Kap. 3.5.1). Eine Auswahl ausschließlich anhand der Modellierungsqualität langsamer Flammen ist dagegen nicht zielführend, da das Deflagrationsmodell in dieser Arbeit vor allem als Werkzeug zum Erreichen schneller Flammen (und damit Vor-DDT-Bedingungen) dient, um anschließend den Deflagrations–Detonations–Übergang berechnen zu können. Die Entscheidung für ein spezifisches Modell wird daher in dieser Arbeit durch einen analytischen Vergleich der Stärken und Schwächen der verschiedenen Modelle vorgenommen.

Dazu wird zunächst von jedem Modell die Korrelation für die turbulente Brenngeschwindigkeit im gesamten Borghi–Diagramm ausgewertet. Um die Modelle vergleichbar zu machen, wird beim Weller–Modell dabei die Gleichgewichtsannahme $\xi = \xi_{\text{eq}}$ (Gl. 3.80) zur Berechnung der turbulenten Brenngeschwindigkeit verwendet. Außerdem wird Quenching in allen Modellen berücksichtigt, indem der Quenching–Faktor G aus dem Zimont–Modell (Gl. 3.68) auf alle Modelle angewendet wird.

Die errechneten Brenngeschwindigkeiten für jeweils konstante Verhältnisse von turbulenten und laminaren Längenskalen (ℓ_T/ℓ_L), was senkrechten Schnitten durch das Borghi–Diagramm (Abb. 2.2) entspricht, sind in Abb. 3.7 zu sehen. Ergebnisse, die außerhalb der Gültigkeitsbereiche der jeweiligen Modelle liegen, sind gestrichelt dargestellt.

Alle Modelle zeigen einen qualitativ ähnlichen Anstieg der turbulenten Brenngeschwindigkeit mit zunehmender turbulenter Geschwindigkeitsschwankung. In Abhängigkeit von ℓ_T/ℓ_L wird bei einer gewissen Turbulenzintensität ein Maximum erreicht, nach dessen Überschreiten der Quenching–Faktor G die Brenngeschwindigkeit gegen Null gehen lässt.

Es fällt auf, dass die turbulente Brenngeschwindigkeit im Zimont–Modell nicht nur generell relativ niedrig ist, sondern außerhalb des angegebenen Gültigkeitsbereichs besonders stark von den anderen Modellen abweicht. Insbe-

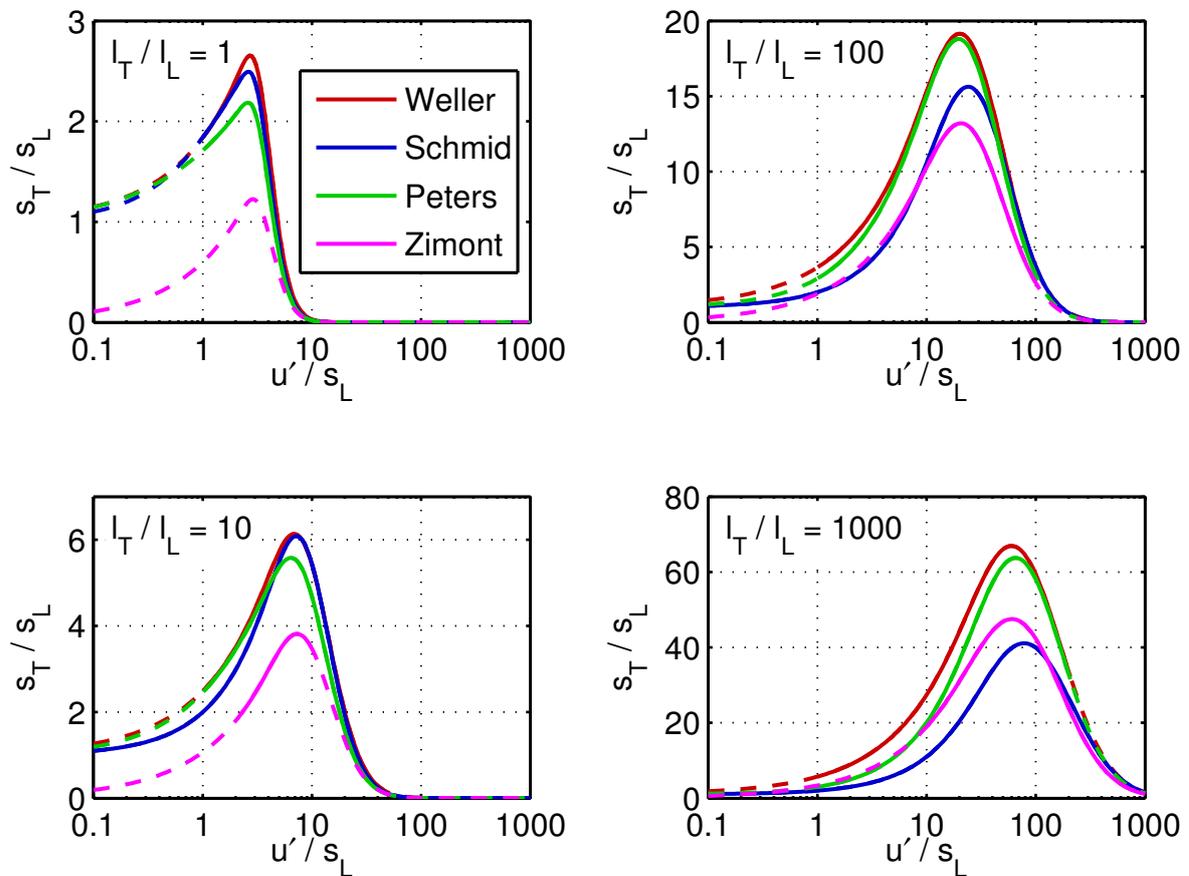


Abbildung 3.7: Vergleich turbulenter Brenngeschwindigkeits–Korrelationen.

sondere geht für verschwindende turbulente Schwankungen u' die Brenngeschwindigkeit gegen Null, wie sich anhand von Gl. 3.66 leicht verifizieren lässt:

$$\lim_{u' \rightarrow 0} s_T = 0 \quad . \quad (3.83)$$

Damit erweist sich das Zimont–Modell als denkbar ungeeignet für die Simulation einer Flammenbeschleunigung, bei der ausgehend von laminaren oder sehr niedrigturbulenten Flammen mehrere Verbrennungsregimes durchlaufen werden, zumal wenn vor Durchführung einer Simulation noch nicht feststeht, welche Verbrennungsregimes erreicht werden.

Die übrigen drei Modelle verhalten sich bei geringen Turbulenzintensitäten deutlich gutmütiger: Im Extremfall $u' \rightarrow 0$ wird die turbulente Brenngeschwindigkeit zur laminaren Brenngeschwindigkeit:

$$\lim_{u' \rightarrow 0} s_T = s_L \quad . \quad (3.84)$$

Das Schmid–Modell basiert als einziges Modell nicht auf einem Gradientenansatz, sondern formuliert eine Reaktionsrate proportional zu $\tilde{c}(1 - \tilde{c})$. Damit ist der unmittelbare Zusammenhang zwischen s_T und $\bar{\omega}_c$ nicht mehr gegeben, wie in einer eindimensionalen Analyse leicht gezeigt werden kann:

Betrachtet man ein diskretes 1D–Rechengebiet mit konstanter Gitterweite $\Delta x = h$ und Querschnittsfläche $\Delta y \cdot \Delta z = A$, so beträgt die Gesamtreaktionsrate $\bar{\Omega}_c$ im Rechengebiet

$$\bar{\Omega}_c = \int_{-\infty}^{\infty} \bar{\omega}_c A dx \quad . \quad (3.85)$$

Bei festgelegten Turbulenzparametern und Stoffwerten und damit festgelegtem s_T kann die Reaktionsrate des Schmid–Modells (Gl. 3.64) geschrieben werden als

$$\bar{\omega}_c = K \tilde{c}(1 - \tilde{c}) \quad , \quad (3.86)$$

wobei K eine Konstante ist. Nimmt man nun für \tilde{c} eine Verteilung wie in Abb. 3.8 gezeigt an ($\tilde{c} = 0,5$ in einer Zelle, sonst 0 oder 1), so erhält man als Gesamtreaktionsrate

$$\bar{\Omega}_c = \int_{-\infty}^{\infty} K \tilde{c}(1 - \tilde{c}) A dx = 0,25 K A h \quad . \quad (3.87)$$

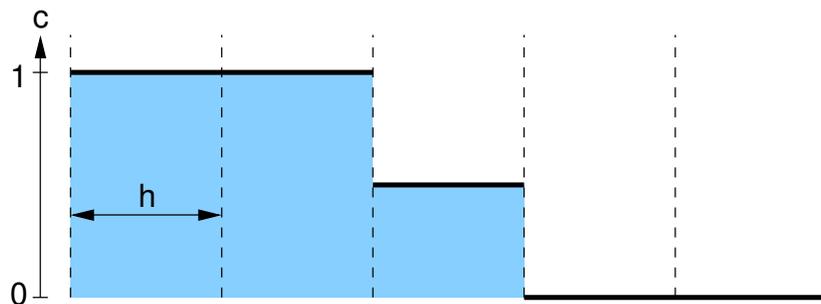


Abbildung 3.8: Angenommene 1D–Verteilung der Reaktionsfortschrittsvariable – Variante 1.

Führt dagegen eine (physikalisch oder numerisch bedingte) erhöhte Diffusion zu einer Verteilung wie in Abb. 3.9 gezeigt ($\tilde{c} = 0,9 - 0,5 - 0,1$, sonst 0 oder 1), so ändert sich die Reaktionsrate zu

$$\bar{\Omega}_c = 0,43 K A h \quad , \quad (3.88)$$

was einem deutlichen Anstieg entspricht, obwohl s_T unverändert bleibt. In ähnlicher Weise äußert sich auch eine Änderung der Gitterweite. Reduziert

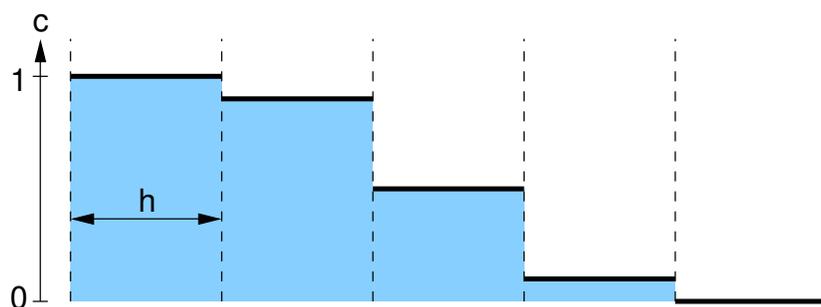


Abbildung 3.9: Angenommene 1D-Verteilung der Reaktionsfortschrittsvariable – Variante 2.

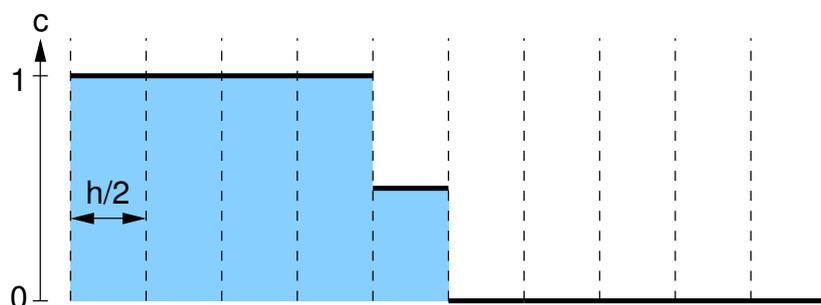


Abbildung 3.10: Angenommene 1D-Verteilung der Reaktionsfortschrittsvariable – Variante 3.

man diese um den Faktor 2 und nimmt eine Verteilung wie zu Beginn an ($\tilde{c} = 0,5$ in einer Zelle, sonst 0 oder 1, s. Abb. 3.10), so ergibt sich eine Reaktionsrate von

$$\bar{\Omega}_c = 0,125 K A h \quad . \quad (3.89)$$

Wendet man dagegen den Gradientenansatz (Gl. 3.65) auf die drei gezeigten Verteilungen an, so erhält man in allen drei Fällen eine Gesamtreaktionsrate von

$$\bar{\Omega}_c = \int_{-\infty}^{\infty} \bar{\rho}_u s_T |\nabla \tilde{c}| A dx = \bar{\rho}_u s_T A \quad . \quad (3.90)$$

Diese ist unabhängig von der Gitterweite und unabhängig davon, wie weit die numerische Diskretisierung den Verlauf der Variable \tilde{c} verschmiert. Die Reaktionsrate entspricht genau dem beabsichtigten Wert und lässt sich anschaulich interpretieren: Sie gibt die Masse an unverbranntem Gemisch an, das in einer Fläche A senkrecht zur Flammenoberfläche von einer Front mit der Geschwindigkeit s_T pro Zeiteinheit überstrichen wird. Beim Schmid-Modell ist dieser Zusammenhang zwischen berechneter Brenngeschwindigkeit s_T und numerisch resultierender Umsatzrate $\bar{\omega}_c$ bzw. $\bar{\Omega}_c$ nicht gegeben, weshalb es in dieser Arbeit für die Simulation der Flammenbeschleunigung nicht in Frage

kommt. Eine gitter- und fallabhängige Anpassung des Vorfaktors soll nämlich unbedingt vermieden werden.

Die verbleibenden Modelle von Peters und Weller zeigen in Abb. 3.7 einen relativ ähnlichen Verlauf. Die Entscheidung fiel letztendlich auf das Weller-Modell, da dieses durch die Transportgleichung für die Flammenoberfläche (Gl. 3.77) auch Nichtgleichgewichtseffekte erfassen kann. Durch das Zusammenspiel von Produktionsterm und Abbauterm (Gl. 3.78 und 3.79) strebt der Flammenfaltungsfaktor zwar stets seinem Gleichgewichtswert (Gl. 3.80) entgegen. Bei sehr schnellen Zustandsänderungen, wie sie in beschleunigenden Flammen auftreten, kann die Flammenfaltung aber durchaus hinter dem Gleichgewicht zurückbleiben, wenn nicht ausreichend Zeit zur Verfügung steht, um sich den dynamischen Strömungsverhältnissen anzupassen [202]. Dies wird durch Gl. 3.77 berücksichtigt. Darüber hinaus zeigt das Weller-Modell außerhalb seines eigentlichen Gültigkeitsbereichs ein gutmütiges Verhalten, sodass auch sehr niedrigturbulente und sehr hochturbulente Flammen mathematisch gut beschrieben werden können.⁷

3.4.3 Erweiterung auf inhomogene Gemische

Obwohl das Weller-Modell (wie auch die anderen auf einer Reaktionsfortschrittsvariable basierenden Modelle) für homogene Gemische entwickelt wurde, lässt es sich durch Einführung einer zusätzlichen Transportgleichung auf inhomogene Wasserstoff-Luft-Gemische erweitern [167]. Dazu wird ein Mischungsbruch f_H definiert, der den Massenanteil des Wasserstoff-Atoms am Gesamtgemisch darstellt:

$$f_H = \sum_{k=1}^N y_{H,k} y_k \quad . \quad (3.91)$$

Hier steht $y_{H,k}$ für den Anteil, den die H-Atome zur Gesamtmasse eines Moleküls der Spezies k beitragen und y_k für den Massenanteil der Spezies k am Gesamtgemisch. Der Mischungsbruch wird in einer chemischen Reaktion weder verbraucht noch produziert, weshalb man eine Transportgleichung für f_H aufstellen kann, in der kein Quellterm auftaucht:

⁷ Die Beschreibung ist allerdings nicht mehr zwingend physikalisch korrekt, sobald das Konzept einer „Flammenoberfläche“ nicht mehr haltbar ist.

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{f}_H) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{f}_H \tilde{u}_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho} D_{\text{eff}} \frac{\partial \tilde{f}_H}{\partial x_j} \right) . \quad (3.92)$$

Berechnet man den Wasserstoff–Molenbruch x_{H_2} in Gl. 2.2 nicht aus dem tatsächlich vorliegenden Wasserstoffgehalt, sondern aus dem Mischungsbruch f_H , kann die laminare Brenngeschwindigkeit auch in teilverbrannten Gitterzellen ($c > 0$) korrekt berechnet werden. In derselben Weise verfährt man mit allen Größen, die eine Funktion der Gemischzusammensetzung sind.

Höhere Momente des Mischungsbruchs werden in dieser Arbeit nicht berücksichtigt, da zwar inhomogene Gemische betrachtet werden, diese aber durch ausreichend lange Diffusionszeiten vor Beginn der Verbrennung (s. Kap. 4) auf molekularer Ebene stets vorgemischt sind.

3.4.4 Berechnung der Stoffwerte des unverbrannten Gemisches

Die für die Deflagrationsmodellierung benötigten Stoffwerte des unverbrannten Gemisches sind nicht konstant, sondern werden durch die Strömung beeinflusst. Daher wird in Analogie zu Gl. 3.35 eine weitere Transportgleichung für die totale innere Energie des unverbrannten Gemisches gelöst:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{e}_{u,t}) + \frac{\partial}{\partial x_j} ((\bar{\rho} \tilde{e}_{u,t} + \bar{p}) \tilde{u}_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho} a_{\text{eff}} \frac{\partial \tilde{h}_{u,t}}{\partial x_j} + \bar{\tau}_{u,ij} \tilde{u}_i \right) . \quad (3.93)$$

Bei bekanntem Mischungsbruch kann anschließend aus der inneren Energie die Temperatur des Unverbrannten bestimmt werden, da im Unverbrannten sämtliche Wasserstoff–Atome in der Form des H_2 –Moleküls vorliegen ($y_{H_2} = f_H$). Anschließend können daraus alle weiteren Stoffwerte (ρ_u , μ_u etc.) bestimmt werden.

3.5 Modellierung der detonativen Verbrennung

Wie in Kap. 2 dargestellt, beruht die Wärmefreisetzung in einer Detonation auf Selbstzündeffekten, die durch stoßinduzierte Kompression ausgelöst werden. Die in der Literatur zu findenden Detonationssimulationen verwenden

dabei in der Regel Arrhenius–Ansätze. Da die Berechnung der Selbstzündung mit vollständigen Mechanismen sehr rechenintensiv ist, werden dabei meist Einschritt–, gelegentlich auch einfache Mehrschritt–Mechanismen verwendet. Diese müssen allerdings für eine spezifische Gasmischung angepasst werden, um realistische Zündverzugszeiten zu errechnen. Schon kleinere Änderungen in der Gemischzusammensetzung erfordern eine Neuformulierung der Arrhenius–Koeffizienten [104]. Daher wird in dieser Arbeit ein vollkommen anderer Ansatz gewählt.

3.5.1 Modellierung der Selbstzündung

Die Wärmefreisetzung in einer Detonation erfolgt in einem Abstand von der führenden Stoßwelle (s. Kap. 2.2). Dieser Abstand entspricht der Zeit, in der das Gasgemisch zunächst Radikale bildet, ohne dass in den fluiddynamischen Größen eine wesentliche Änderung erkennbar wäre. Erst wenn eine kritische Konzentration an Radikalen erreicht wird, kommt es schlagartig zur Wärmefreisetzung.

In Abb. 3.11 sind beispielhafte Temperaturverläufe einer isochoren Explosion gezeigt. Diese wurden mit dem Kinetik–Paket *Cantera* [86] berechnet. Bei der Auswahl des Reaktionsmechanismus fiel die Wahl auf den Mechanismus von O’Conaire et al. [156], da dieser für einen extrem großen Druck– (0,05 bis 87 atm) und Temperaturbereich (298 bis 2700 K) validiert wurde. In der Abbildung ist zu erkennen, dass der Temperaturanstieg äußerst schlagartig erfolgt, während davor und danach die Temperatur praktisch konstant bleibt.⁸ Da die Dauer der Wärmefreisetzung in der Regel klein ist im Vergleich zu den numerischen Zeitschritten in den durchgeführten Simulationen, ist die Wahrscheinlichkeit, zu einem Zeitpunkt teilverbranntes Gemisch anzutreffen, gering. Damit ist es möglich, eine Zündverzugszeit t_{ign} zu definieren, vor deren Ablauf ein unverbranntes und nach deren Ablauf ein verbranntes Gemisch vorliegt.

Aufbauend auf den Arbeiten von Brandt et al. [29], Ivancic et al. [96] und Michel et al. [150] wird daher eine Variable τ eingeführt, die die bereits verstrichene Zeit ins Verhältnis zur lokalen Zündverzugszeit setzt. Letztere ist eine Funktion von Temperatur, Druck und Wasserstoff–Mischungsbruch. Alterna-

⁸ Dies ist bei länger-kettigen Kohlenwasserstoffen vor allem aufgrund der Formaldehyd–Bildung im Allgemeinen nicht der Fall [42].

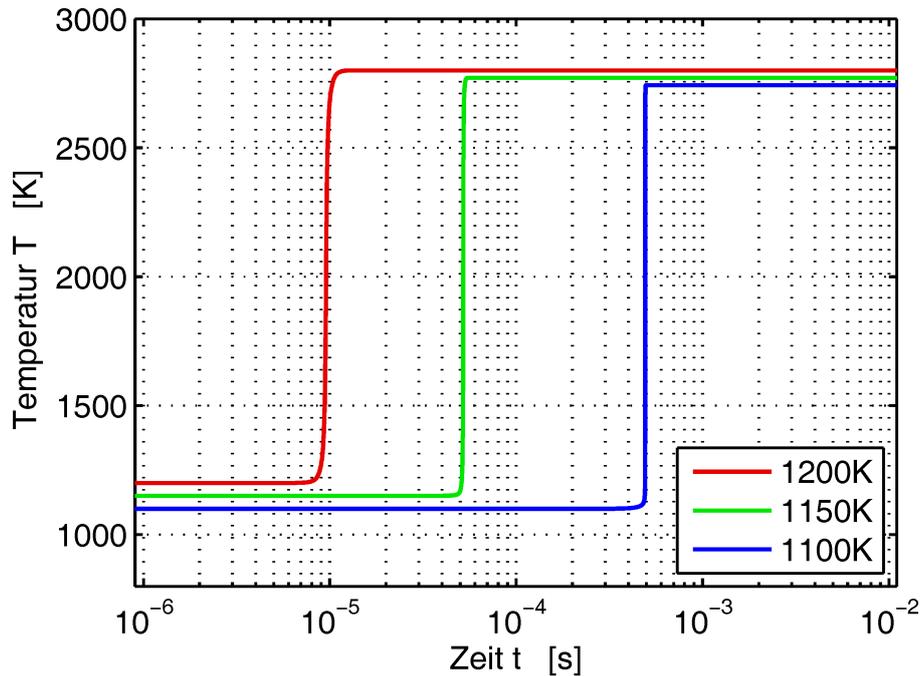


Abbildung 3.11: Temperaturverlauf in einer isochoren Explosion von 20% H₂ in Luft bei einem Anfangsdruck von 10 bar und unterschiedlichen Anfangstemperaturen.

tiv kann τ auch als der Massenbruch eines fiktiven Radikals R angesehen werden, der auf den kritischen Massenbruch, bei dem die Wärmefreisetzung einsetzt, bezogen wird:

$$\tau = \frac{t}{t_{\text{ign}}(T, p, f_H)} = \frac{y_R}{y_{R,\text{cr}}} \quad (3.94)$$

Mit letzterer Interpretation kann man $\tau \in [0; 1]$ als eine normierte, skalare Größe auffassen, die mit denselben Gesetzmäßigkeiten wie andere Skalare transportiert wird:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{\tau}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{\tau} \tilde{u}_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho} D_{\text{eff}} \frac{\partial \tilde{\tau}}{\partial x_j} \right) + \bar{\omega}_\tau \quad (3.95)$$

Der Quellterm in dieser Transportgleichung ist eine Funktion der lokalen Zündverzugszeit:

$$\bar{\omega}_\tau = \frac{\bar{\rho}}{t_{\text{ign}}} \quad (3.96)$$

Beispielhafte Verläufe der Zündverzugszeit sind in Abb. 3.12 grafisch dargestellt. Wie zu erwarten nimmt die Zündverzugszeit mit der Temperatur stark ab. Der Einfluss des Wasserstoffgehalts ist vergleichsweise gering. Hohe

Drücke können die Zündverzugszeit, je nach Anfangstemperatur, stark verringern oder erhöhen. Die Ursache dafür liegt in den unterschiedlichen Reaktionspfaden, über die die Wasserstoff-Oxidation abläuft [122]. Daher sind die in der Literatur zu findenden Exponential-Ansätze der Form $t_{\text{ign}} \sim T^\alpha p^\beta$ in Anwendungen mit stark variierenden Drücken nicht zu empfehlen.

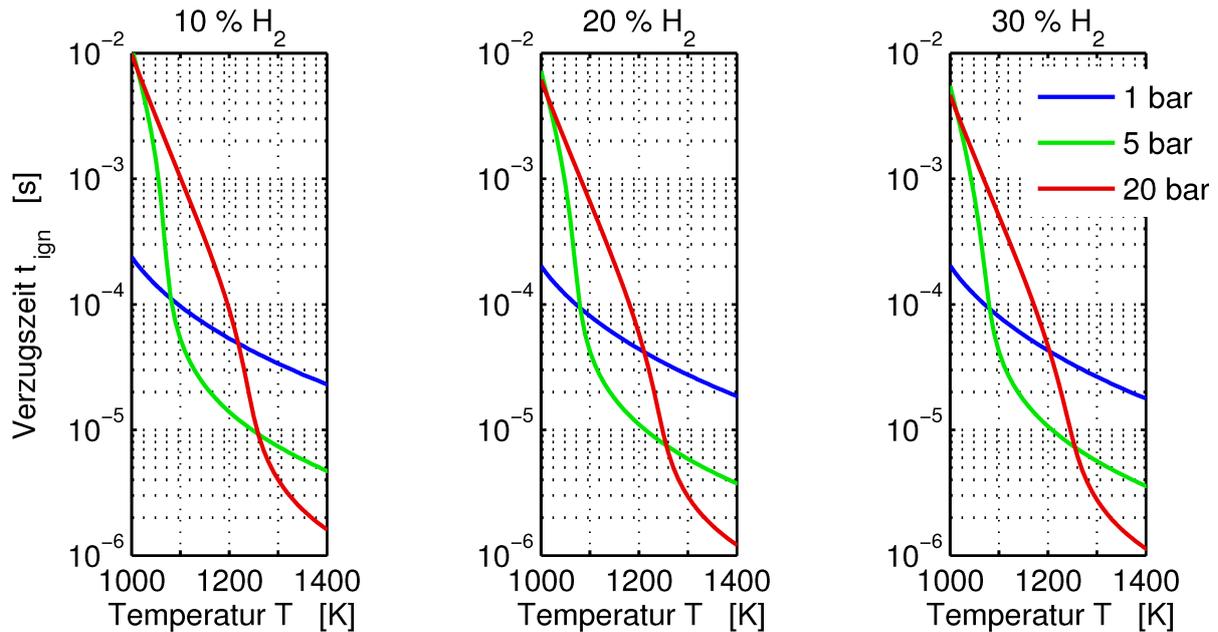


Abbildung 3.12: Abhängigkeit der Zündverzugszeit von Temperatur, Druck und Wasserstoffgehalt.

Um die kostspielige Berechnung der Zündverzugszeit t_{ign} in jedem Zeitschritt für jede Rechenzelle zu vermeiden, wird auf eine Tabelle zurückgegriffen, aus der die Zündverzugszeit als Funktion von Temperatur, Druck und Wasserstoff-Mischungsbruch abgerufen werden kann. Diese wurde mit *Cantera* erstellt und mit dem *OpenFOAM*-Solver verlinkt. Zur Erhöhung der Genauigkeit werden Zündverzugszeiten, die zwischen den tabellierten Werten liegen, logarithmisch interpoliert. Damit kann die Größe der Tabelle kompakt gehalten werden. In dieser Arbeit hat sich die in Tabelle 3.2 gegebene Diskretisierung der Zündverzugszeiten-Tabelle als ausreichend erwiesen.

Die Formulierung des Selbstzündmodells impliziert, dass der Wert von τ , also der Anteil an zur Selbstzündung notwendigen Radikalen, durch Interaktion mit benachbarten Fluidpaketen zu- oder abnehmen kann. Dies wird durch den konvektiven und den diffusiven Term in Gl. 3.95 berücksichtigt. Eine Änderung des thermodynamischen Zustandes wirkt sich dagegen nur insofern

T	800, 820, 840, ... , 1960, 1980, 2000	K
p	0.1, 1, 2, 5, 10, 20, 30, 50, 75, 100, 150	bar
x_{H_2}	1, 5, 10, 20, 30, 40, 50, 60	%

Tabelle 3.2: Diskretisierung der Zündverzugszeiten-Tabelle.

aus, als sich die Zündverzugszeit im Quellterm (Gl. 3.96) ändert. Der bereits erreichte Anteil an Radikalen bleibt davon unbeeinflusst. Betrachtet man ein Fluidelement über einen Zeitraum, in dem es Zustände mit unterschiedlichen Zündverzugszeiten durchläuft, so bedeutet dies in der Modellvorstellung, dass die relativen Beiträge bis zur Selbstzündung ($\tau = 1$) aufaddiert werden, der Aufbau von Radikalen also abschnittsweise linear erfolgt. Trotz dieser Vereinfachung konnten mit dem Modell Selbstzündeffekte in URANS- und LES-Rechnungen erfolgreich simuliert werden [42, 124, 150].

Verglichen mit Arrhenius-Ansätzen hat das hier vorgestellte Selbstzündmodell den Vorteil, dass eine nahtlose Vereinigung mit dem in dieser Arbeit verwendeten Deflagrationsmodell möglich ist. Genauso wie die Deflagration kann die Selbstzündung durch die Reaktionsfortschrittsvariable c beschrieben werden. Dazu wird in Gl. 3.62 ein zweiter Quellterm hinzugefügt:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{c}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{c} \tilde{u}_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho} D_{\text{eff}} \frac{\partial \tilde{c}}{\partial x_j} \right) + \bar{\omega}_{c,\text{turb}} + \bar{\omega}_{c,\text{ign}} \quad . \quad (3.97)$$

Der turbulente Quellterm $\bar{\omega}_{c,\text{turb}}$ errechnet sich wie bisher aus dem Deflagrationsmodell (Gl. 3.65 und 3.75). Der Quellterm aufgrund von Selbstzündung $\bar{\omega}_{c,\text{ign}}$ ist im Allgemeinen Null, außer wenn lokal $\tau = 1$ erreicht wird. In diesem Fall wird der Quellterm so gewählt, dass sich nach der Integration über den aktuellen Zeitschritt Δt ein Wert von $c = 1$ ergibt:

$$\bar{\omega}_{c,\text{ign}} = \frac{1 - \tilde{c}}{\Delta t} H(\tilde{\tau} - 1) \quad , \quad (3.98)$$

mit der Heaviside-Funktion

$$H(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ 1, & x \geq 0 \end{cases} \quad . \quad (3.99)$$

3.5.2 Min–Max–Modell

Um die Genauigkeit des Selbstzündmodells weiter zu verbessern, wird berücksichtigt, dass Verdichtungsstöße näherungsweise unendlich dünne Diskontinuitäten darstellen. Eine Simulation mit der Finite–Volumen–Methode liefert dagegen stets Zustandsgrößen, die über eine Rechenzelle gemittelt sind. Verwendet man die Reynolds– bzw. Favre–gemittelten Größen (\tilde{T} , \bar{p} , \tilde{f}_H) zur Berechnung der Selbstzündung gemäß Gl. 3.94, so begeht man aufgrund der nichtlinearen Abhängigkeit der Zündverzugszeit von diesen Größen einen inakzeptablen Fehler.

Dies ist am Beispiel des Temperaturverlaufs über einen sich fortbewegenden Verdichtungsstoß in Abb. 3.13 skizziert. Aufgrund des CFL–Kriteriums (Gl. 3.47) benötigt der dargestellte Verdichtungsstoß mehrere Zeitschritte, um eine Rechenzelle zu durchqueren. Da ein zunehmender Anteil der Rechenzelle komprimiert und damit erwärmt wird, steigt die mittlere Temperatur. Auch wenn diese korrekt berechnet wird, gibt sie keinen Aufschluss über die tatsächlich vorliegende Temperaturverteilung, die für Selbstzündvorgänge entscheidend ist. Übersteigt die gemittelte Temperatur einen kritischen Wert, so werden Selbstzündbedingungen erreicht und die gesamte Zelle auf „verbrannt“ gesetzt (s. Gl. 3.98). In der Realität hat der Verdichtungsstoß allerdings noch nicht die ganze Zelle durchquert, sodass ein Teil der Zelle noch nicht auf Zündtemperatur gebracht wurde.

Um diesen Effekt zu vermeiden und die Entstehung einer DDT auch auf relativ groben Gittern korrekt wiederzugeben, wird daher das in Kap. 3.5.1 vorgestellte Selbstzündmodell mit dem Min–Max–Modell von Tosatto und Vigevano [193] kombiniert. Diesem Modell liegt die Annahme zu Grunde, dass Zustandsgrößen innerhalb einer Rechenzelle diskontinuierlich verlaufen können. Beispielsweise teilt ein Temperatursprung eine Rechenzelle in zwei Teile, wobei im Volumenanteil α die höhere Temperatur T_{high} und im Volumenanteil $1 - \alpha$ die niedrigere Temperatur T_{low} vorliegt. Prinzipiell kann diese Teilung für alle für die Reaktion relevanten Variablen vorgenommen werden, was aber lediglich in eindimensionalen Rechnungen praktikabel ist, da ansonsten zusätzliche Richtungsinformationen eingeführt werden müssten und die Zahl der auszuwertenden Zustände rapide ansteigen würde. Tosatto und Vigevano [193] konnten zeigen, dass bei der Simulation von ausgebildeten Detonationen die Annahme einer diskontinuierlichen Temperatur in der Regel ausrei-

chend ist, während die verbleibenden Variablen als kontinuierlich angenommen werden können. Um auch DDT-Vorgänge gut reproduzieren zu können, werden in dieser Arbeit zusätzlich Druck-Diskontinuitäten berücksichtigt, allerdings unter der Vereinfachung, dass Druck und Temperatursprünge positiv korrelieren, d.h. dass hoher Druck und hohe Temperatur immer auf derselben Seite einer Diskontinuität liegen, was bei Verdichtungsstößen physikalisch sinnvoll ist. Der Wasserstoffgehalt wird als stetig angenommen, sodass f_H auf beiden Seiten der Diskontinuität dem zellgemittelten Mischungsbruch \tilde{f}_H entspricht. Die resultierende Aufteilung einer Rechenzelle in zwei Teile ist in Abb. 3.14 skizziert.

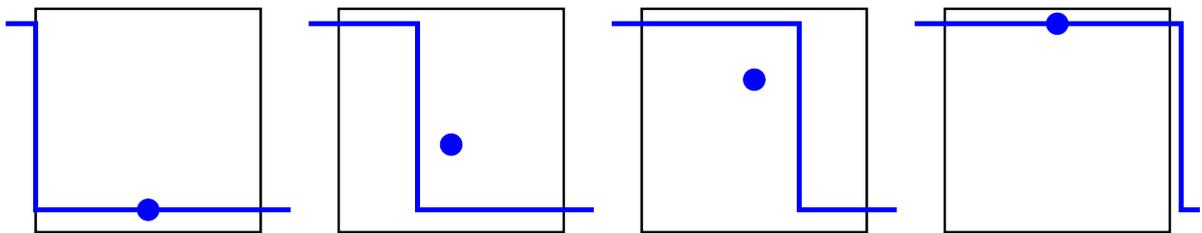


Abbildung 3.13: Darstellung einer sich bewegenden Diskontinuität (z.B. im Temperaturverlauf) in der Finite-Volumen-Methode. Die durchgezogene Linie zeigt den tatsächlichen Verlauf, der Punkt den zellgemittelten Wert, den die Simulation liefert.

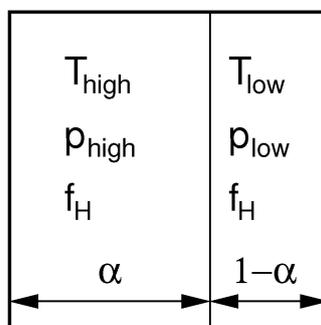


Abbildung 3.14: Aufteilung einer Rechenzelle nach dem Min-Max-Modell.

Da die Finite-Volumen-Methode nur den zellgemittelten Druck \bar{p} liefert, wird angenommen, dass der Maximaldruck in einer Zelle durch eine Diskontinuität zu Stande kommt, die sich aus den Nachbarzellen rekonstruieren lässt. Dazu wird eine Schleife über alle benachbarten ($i = 1 \dots N$) Zellen durchlaufen. p_{high} wird als der höchste dabei gefundene Druck definiert:

$$p_{\text{high}} = \max \left(\max_{i=1 \dots N} (\bar{p}_i), \bar{p} \right) . \quad (3.100)$$

In analoger Weise wird p_{low} gefunden:

$$p_{\text{low}} = \min \left(\min_{i=1 \dots N} (\bar{p}_i), \bar{p} \right) . \quad (3.101)$$

Damit kann der Volumenanteil der Zelle, in dem der hohe Druck vorliegt, bestimmt werden zu

$$\alpha = \frac{\bar{p} - p_{\text{low}}}{p_{\text{high}} - p_{\text{low}}} . \quad (3.102)$$

Nimmt man an, dass der Druckunterschied durch einen Verdichtungsstoß verursacht wird, so muss die Stoßbeziehung gelten [3]:

$$\frac{p_{\text{high}}}{p_{\text{low}}} = 1 + \frac{2\kappa}{\kappa + 1} (\text{Ma}^2 - 1) . \quad (3.103)$$

Diese Beziehung lässt sich nach der Stoß–Mach–Zahl auflösen:

$$\text{Ma} = \sqrt{1 + \frac{\kappa + 1}{2\kappa} \left(\frac{p_{\text{high}}}{p_{\text{low}}} - 1 \right)} . \quad (3.104)$$

Damit kann das durch den Stoß verursachte Temperaturverhältnis Θ ebenfalls aus einer Stoßbeziehung [3] berechnet werden zu

$$\Theta = \frac{T_{\text{high}}}{T_{\text{low}}} = \frac{p_{\text{high}}}{p_{\text{low}}} \left[1 - \frac{2}{\kappa + 1} \left(1 - \frac{1}{\text{Ma}^2} \right) \right] . \quad (3.105)$$

Da für die zellgemittelte Temperatur gelten muss, dass

$$\tilde{T} = \alpha T_{\text{high}} + (1 - \alpha) T_{\text{low}} , \quad (3.106)$$

lässt sich bei bekannter Lösung von Gl. 3.105 die Temperatur T_{low} bestimmen:

$$T_{\text{low}} = \frac{\tilde{T}}{1 + \alpha (\Theta - 1)} . \quad (3.107)$$

Schließlich ergibt sich für T_{high} :

$$T_{\text{high}} = \Theta T_{\text{low}} . \quad (3.108)$$

Damit sind alle in Abb. 3.14 definierten Variablen bekannt und die Selbstzündung kann auf beiden Seiten der Diskontinuität getrennt voneinander berechnet werden. Die Tatsache, dass dabei das Vorhandensein eines Verdichtungsstoßes postuliert wurde, stellt keine wesentliche Einschränkung dar. Im

Grenzfall, dass eine Rechenzelle nur von Zellen mit demselben Druck umgeben ist, ergibt sich $p_{\text{high}} = p_{\text{low}}$ und damit auch $T_{\text{high}} = T_{\text{low}}$. In beiden Teilen der Rechenzelle liegen identische Verhältnisse vor und der Wert von α hat keinen Einfluss auf die Berechnung. Im Bereich schwacher Druckgradienten, wie sie in einer Unterschallströmung beispielsweise durch akustische Störungen hervorgerufen werden ($p_{\text{high}} \gtrsim p_{\text{low}}$), wird zwar durch Gl. 3.104 eine Stoß-Mach-Zahl $Ma > 1$ berechnet. Da schwache Stöße aber nahezu isentrop sind, ergibt sich durch die Anwendung des beschriebenen Verfahrens kein Unterschied in der Berechnung der Temperatur zu beiden Seiten der Störung im Vergleich zum Temperaturanstieg in einer isentropen Kompression, wofür folgende Beziehung gilt:

$$\frac{T_{\text{high}}}{T_{\text{low}}} = \left(\frac{p_{\text{high}}}{p_{\text{low}}} \right)^{\frac{\kappa-1}{\kappa}} . \quad (3.109)$$

Dies ist in Abb. 3.15 verdeutlicht. Im Temperaturanstieg ist unterhalb von Druckverhältnissen von 1,5 praktisch kein Unterschied zwischen einer isentropen Kompression und einer stoßinduzierten Kompression zu erkennen. Daher kann die beschriebene Methode zur Berechnung der für die Selbstzündung relevanten Temperatur auch auf Strömungen mit kleinen Druckunterschieden bzw. vor der Entstehung von Verdichtungsstößen angewendet werden. Die Zündverzugszeit im Volumenanteil α bzw. $(\alpha - 1)$ berechnet sich damit zu:

$$t_{\text{ign,high}} = t_{\text{ign}}(T_{\text{high}}, p_{\text{high}}, f_H) , \quad (3.110)$$

$$t_{\text{ign,low}} = t_{\text{ign}}(T_{\text{low}}, p_{\text{low}}, f_H) . \quad (3.111)$$

Die für Selbstzündung verantwortliche Variable τ wird ebenso auf beiden Seiten getrennt bilanziert. Dazu wird Gl. 3.95 durch zwei Transportgleichungen ersetzt:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{\tau}_{\text{high}}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{\tau}_{\text{high}} \tilde{u}_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho} D_{\text{eff}} \frac{\partial \tilde{\tau}_{\text{high}}}{\partial x_j} \right) + \frac{\bar{\rho}}{t_{\text{ign,high}}} , \quad (3.112)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{\tau}_{\text{low}}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{\tau}_{\text{low}} \tilde{u}_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho} D_{\text{eff}} \frac{\partial \tilde{\tau}_{\text{low}}}{\partial x_j} \right) + \frac{\bar{\rho}}{t_{\text{ign,low}}} . \quad (3.113)$$

Werden auf einer Seite der Diskontinuität Zündbedingungen erreicht, so trägt nur dieser Teil zum Verbrennungsquellterm bei (vgl. Gl. 3.98):

$$\bar{\omega}_{c,\text{ign}} = \alpha \frac{1 - \tilde{c}}{\Delta t} H(\tilde{\tau}_{\text{high}} - 1) + (1 - \alpha) \frac{1 - \tilde{c}}{\Delta t} H(\tilde{\tau}_{\text{low}} - 1) . \quad (3.114)$$

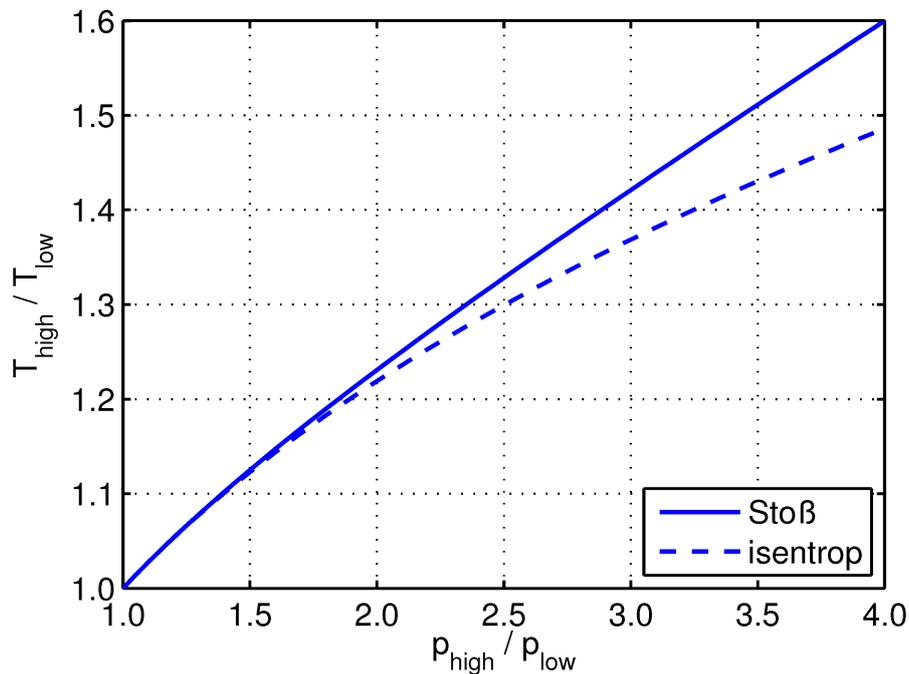


Abbildung 3.15: Temperaturanstieg als Funktion des Druckerstiegs verursacht durch einen Verdichtungsstoß und im Vergleich dazu durch eine isentrope Kompression ($\kappa = 1,4$).

Bei der Anwendung in Testrechnungen zeigte sich, dass der Einfluss des Min–Max–Modells in Fällen, in denen DDT entweder sehr früh oder überhaupt nicht auftrat, gering ist. In Fällen, die gerade an der Umschlaggrenze „DDT/keine DDT“ lagen, führt die Anwendung des Min–Max–Modells zu einer deutlichen Verbesserung. Ohne die Auftrennung der Rechenzellen in zwei Teile würde DDT deutlich zu früh vorhergesagt werden, da bei der Selbstzündung ganzer Zellen viel stärkere Druckwellen entstehen und früher eine DDT verursachen, als wenn Teile von Rechenzellen separat zünden können. Gerade die Fälle, die in dem Umschlagbereich liegen, sind aber hinsichtlich der Anwendung in sicherheitsrelevanten Untersuchungen besonders kritisch. Daher stellt die getrennte Bilanzierung der Reaktion in zwei Teilen einer Rechenzelle aus Anwendersicht eine wesentliche Verbesserung dar.

4 Anwendung auf die GraVent-Anlage

Das in dieser Arbeit entwickelte Modell wurde dazu benutzt, Flammenbeschleunigungs- und DDT-Vorgänge in einem geschlossenen Explosionskanal, der sogenannten GraVent-Anlage [66], nachzurechnen. Kernstück der GraVent-Anlage ist ein Explosionskanal von 5,40 m Länge mit einem rechteckigen Querschnitt von 300 mm Breite und 60 mm Höhe. Im Inneren des Explosionskanals können auf der Ober- und Unterseite Hindernisplatten der Höhe h angebracht werden, wie in Abb. 4.1 dargestellt. Da die Hindernisse sich über die gesamte Kanalbreite erstrecken, beträgt die damit realisierbare Blockierrate

$$BR = \frac{A_{\text{blockiert}}}{A_{\text{gesamt}}} = \frac{2h}{H} \quad (4.1)$$

In dieser Arbeit wurden Blockierraten von 30% und 60% untersucht, die im Folgenden als BR30 bzw. BR60 bezeichnet werden. Der Hindernisabstand beträgt $S = 300$ mm, wobei sich das erste Hindernis stets an der Stelle $x = 0,25$ m und das siebte und letzte Hindernis an der Stelle $x = 2,05$ m (gemessen von dem Ende, an dem gezündet wird) befindet. In der verbleibenden Strecke von 3,35 m Länge kann die Ausbreitung der Reaktionsfront in einem unversperrten Kanal untersucht werden.

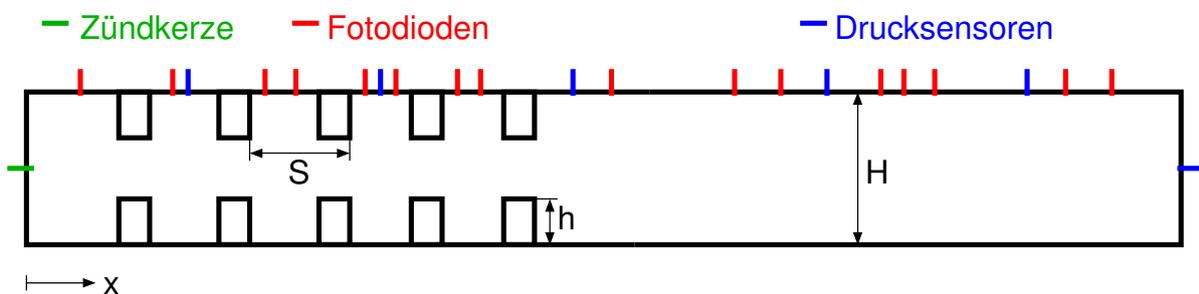


Abbildung 4.1: Prinzipskizze der GraVent-Anlage.

Zur experimentellen Erfassung der Flammenausbreitung sind auf der Oberseite des Kanals bis zu 42 Fotodioden (*Hamamatsu 1336-18BQ*) sowie sechs Drucksensoren (*Kistler 601A*) an unterschiedlichen Positionen angebracht.

Ein weiterer Drucksensor befindet sich mittig in der Endplatte, wo durch die Reflexion der eintreffenden Stoßfront die höchsten Drücke zu erwarten sind.

Die Wasserstoff-Eindüsung in den Explosionskanal erfolgt durch Versorgungsleitungen in der oberen Wand. Je nach Wartezeit zwischen Eindüsende und Zündung können dadurch entweder definierte vertikale Konzentrationsgradienten¹ oder homogene Gemische erzeugt werden. Eine ausführliche Darstellung des Eindüsendmechanismus findet sich in [66]. In dieser Arbeit werden die beiden Extremfälle, homogene Gemische und Gemische mit einem extrem starken Konzentrationsgradienten (nach 3 s Wartezeit), untersucht. Verläufe des Wasserstoffgehalts über der Kanalhöhe wurden aus 3D-Eindüsendsimulationen [66] gewonnen und sind in Abb. 4.2 dargestellt. Die Ergebnisse der Eindüsendsimulationen sind als Polynome in *OpenFOAM* hinterlegt und in Anhang E dokumentiert.

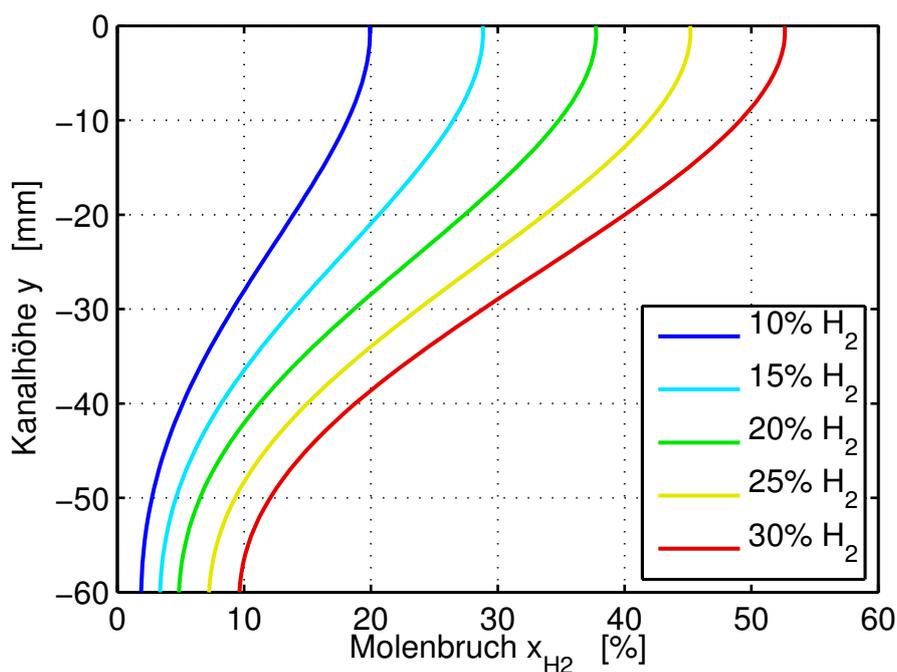


Abbildung 4.2: Verlauf des Wasserstoffgehalts über der Kanalhöhe nach 3 s Wartezeit.

Der Brennraum des Explosionskanals wurde in *OpenFOAM* mit einem zwei-dimensionalen Gitter der Gitterweite $\Delta x = \Delta y = 2$ mm diskretisiert, was in etwa 80 000 Gitterzellen entspricht. Vergleichsrechnungen mit 1 mm Gitterweite (ca. 320 000 Gitterzellen) ergaben keine wesentlichen Unterschiede. Zu Beginn einer Simulation ist das Gasgemisch entweder homogen oder weist einen

¹ Horizontale Konzentrationsgradienten sind dabei vernachlässigbar.

Konzentrationsgradienten wie in Abb. 4.2 dargestellt auf. Das Gemisch befindet sich in Ruhe, die Temperatur beträgt 293 K und der Druck 1,013 bar (absolut). Auf den adiabaten Wänden wird die Haftbedingung als Randbedingung gesetzt und über Wandfunktionen mit der turbulenten Strömung gekoppelt [157].

Da der Zündvorgang nicht vollständig simuliert werden kann und darüber hinaus der in Kap. 3.3.3 beschriebene HLLC-Solver bei Strömungsgeschwindigkeiten nahe Null instabil wird,² wird die Zündung des Gemisches dadurch erreicht, dass an der Position der Zündkerze die Rechenzellen in einem Radius von 25 mm auf „verbrannt“ gesetzt werden und zunächst einige Zeitschritte mit einem impliziten, druckbasierten Verfahren gerechnet werden. Erst wenn sich eine propagierende Flamme ausgebildet hat, wird (noch vor Erreichen des ersten Hindernisses) auf die HLLC-Formulierung umgeschaltet. Dies hat den zusätzlichen Vorteil, dass der implizite Solver keiner strengen CFL-Limitierung unterliegt, während beim HLLC-Verfahren zu Beginn sehr viele Rechenschritte durchgeführt werden müssten, in denen kaum eine Flammenausbreitung stattfindet.³ Sämtliche Rechnungen in dieser Arbeit wurden mit einem variablen Zeitschritt bei Begrenzung der CFL-Zahl auf $CFL_{\max} = 0,3$ durchgeführt.

Zu Beginn einer Simulation sind die turbulenten Variablen mit sehr niedrigen Werten initialisiert ($k_0 = 0,1 \text{ m}^2/\text{s}^2$, $\omega_0 = 50 \text{ /s}$), sodass $\xi_{\text{eq},0} \approx 1$ aus Gl. 3.80 folgt und sich die Flamme zunächst mit laminarer Brenngeschwindigkeit ausbreitet. Testrechnungen ergaben nur einen geringen Einfluss der Startwerte k_0 und ω_0 auf die zu beobachtende Flammenausbreitung, solange $\xi_{\text{eq},0} \approx 1$ eingehalten wurde.

Für eine möglichst gute Vergleichbarkeit von numerischen und experimentellen Ergebnissen wird in der Simulation die experimentelle Erfassung der Flammenposition über Fotodioden nachgeahmt. Dazu wird in jedem Zeitschritt die Lage der Flammenoberfläche (definiert über die Iso-Kontur $\tilde{c} = 0,5$) bestimmt. Die maximale x -Koordinate dieser Kontur bestimmt die Flammenspitze. Im Post-Processing können daraus die Zeitpunkte bestimmt werden, an denen die Flamme die jeweiligen (durch das Experiment vorgegebenen)

² Aufgrund der verschwindenden Kompressibilität bei $Ma \rightarrow 0$ geht die Kopplung zwischen Druck und Dichte verloren.

³ In Gl. 3.47 wird in diesem Fall der Zeitschritt durch die Schallgeschwindigkeit diktiert, selbst wenn die Strömungsgeschwindigkeit nahezu Null ist.

Fotodiodenpositionen erreicht und die Fotodiode aktiviert hat. Daraus kann ein $x-t$ -Diagramm (Weg über Zeit) erstellt werden. Um Abweichungen noch besser erkennen zu können, wird zusätzlich ein $v-x$ -Diagramm (Geschwindigkeit über Weg) erstellt. Hierbei wird die Geschwindigkeit zwischen zwei Fotodioden i und $i + 1$ berechnet als

$$v\left(x = \frac{x_i + x_{i+1}}{2}\right) = \frac{x_{i+1} - x_i}{t_{i+1} - t_i} \quad . \quad (4.2)$$

t_i und t_{i+1} sind dabei die Zeitpunkte, an denen die Flamme die jeweilige Fotodiode passiert hat. Auf Glättungsverfahren höherer Ordnung, die eventuelle Spitzen herausfiltern (z.B. [5]), wird hierbei bewusst verzichtet.

Zusätzlich findet noch ein Vergleich von berechneten und experimentell gemessenen Drücken statt. Diese sind aus Platzgründen im Folgenden nur soweit dargestellt, als sie für die Interpretation der Ergebnisse einen Mehrwert darstellen. Die restlichen Druckschriebe finden sich in Anhang G.

Bei der Interpretation der Druckschriebe ist zu beachten, dass die Druckaufnehmer im Experiment mit einer Samplingrate von $f = 250 \text{ kSamples/s}$ betrieben werden. In der Simulation ist die Abtastrate durch den numerischen Zeitschritt vorgegeben, der in der Regel kleiner als $f^{-1} = 4 \mu\text{s}$ ist. Dadurch ist in der Simulation eine höhere zeitliche Auflösung möglich, wodurch aber auch höherfrequente Schwankungen im Drucksignal sichtbar werden. Für eine bessere Vergleichbarkeit der Ergebnisse werden daher im Post-Processing auch die numerisch berechneten Drucksignale mit einer Rate von 250 kSamples/s abgetastet. Dadurch verschwinden teilweise Druckspitzen aus den Schrieben. Im Umkehrschluss heißt das, dass auch im Experiment unter Umständen höhere Maximaldrücke aufgetreten sind, diese aber mit der vorhandenen Abtastrate nicht erfasst werden konnten.

Allerdings sollten Maximaldrücke, die meist nur für sehr kurze Zeitspannen vorliegen, nicht als alleiniges Kriterium zur Bewertung der Drucklasten herangezogen werden. Eine weitere wichtige Größe, die in Sicherheitsbetrachtungen z.B. hinsichtlich der Gefährdung von Menschen oder Bauwerken von Bedeutung ist [12, 22, 54], ist der flächenbezogene Impuls

$$I = \int_0^{\infty} (p - p_0) dt \quad . \quad (4.3)$$

Im Gegensatz zu Experimenten im Freien kann bei dem in dieser Arbeit verwendeten Versuchsaufbau der Impuls allerdings nur qualitativ betrachtet werden, da in der geschlossenen Anlage der Druck nach der Verbrennung nicht wieder auf den Anfangsdruck p_0 absinkt, was nach Gl. 4.3 einen unendlich großen Impuls zur Folge hat. Für eine quantitative Analyse wäre somit die Modifikation der Integrationsgrenzen in Gl. 4.3 an jedem Drucksensor auf ein geeignetes Zeitintervall erforderlich, wodurch zwar individuelle Druckschriebe verglichen (s. Kap. 5.4), aber keine allgemeingültigen Aussagen getroffen werden können. Dennoch kann der Impuls bei der Bewertung der Ergebnisse im folgenden Kapitel als ein qualitatives Maß, erkennbar als Fläche zwischen p und p_0 in den Druckschrieben, angesehen werden.

5 Ergebnisse und Diskussion

5.1 Rechnungen mit homogenem Gemisch

Als Referenzfall wird zunächst die Kanalkonfiguration mit 30% Blockierate betrachtet. Die in diesem Fall berechnete Flammenausbreitung für ein homogenes Gemisch mit 15% Wasserstoff ist in Abb. 5.1 dargestellt. In derselben Abbildung sind auch die experimentellen Ergebnisse dargestellt. Das $x-t$ -Diagramm aus dem Experiment wurde dabei auf der Zeitachse verschoben, da der Zündfunke im Experiment von verschwindend kleiner räumlicher Ausdehnung ist, während die Diskretisierung in der Simulation es erfordert, dass zum Zeitpunkt $t = 0$ bereits mehrere Gitterzellen ein verbranntes Gemisch enthalten. Damit wird sichergestellt, dass zu Beginn der Simulation trotz des rechtwinkligen Gitters eine annähernd kreisförmige Flammenausbreitung erreicht wird. Aus Anwendersicht ergibt diese Verschiebung in der Absolutzeit keinen Nachteil, ermöglicht aber einen besseren Vergleich der Ergebnisse.

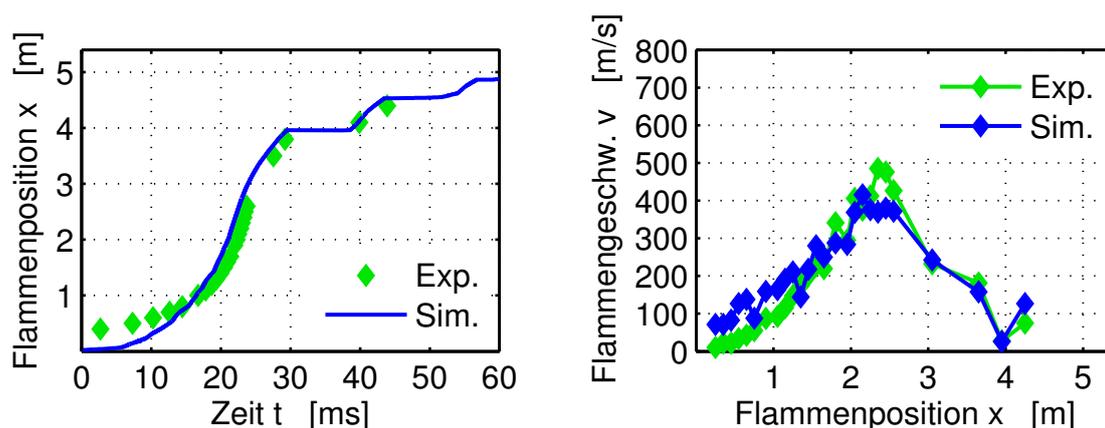


Abbildung 5.1: Auswertung der Flammenausbreitung in der Konfiguration BR30 mit 15% H_2 (homogen).

Abgesehen von der Flammenbeschleunigung unmittelbar nach der Zündung zeigt sich im $x-t$ -Diagramm eine sehr gute Übereinstimmung zwischen Si-

mulation und Experiment. Zunächst wird die $x-t$ -Kurve immer steiler, was einer beschleunigenden Flamme entspricht. Nach ca. 25 ms, bei $x \approx 2,5$ m, wird die Kurve wieder flacher, bis die Flamme bei $x \approx 4,0$ m an einer Position fast bewegungslos verharrt. Anschließend kommt es zu einem weiteren Geschwindigkeitsanstieg, der wiederum abgebremst wird. Dem Kanalende bei $x = 5,40$ m nähert sich die Flamme nur sehr langsam an. Im $v-x$ -Diagramm ist erkennbar, dass die Flamme, wiederum in Übereinstimmung mit dem Experiment, zunächst kontinuierlich beschleunigt und bei $x \approx 2,5$ m Spitzengeschwindigkeiten zwischen 400 und 500 m/s erreicht. Anschließend wird die Flamme auf eine Ausbreitungsgeschwindigkeit von nahezu Null abgebremst.

Ursache für die anfängliche Beschleunigung sind die in Kap. 1.2 beschriebenen Faktoren wie Turbulenzproduktion, Interaktion mit Hindernissen sowie das Hineinbrennen in ein bewegtes Frischgas. Da ein Teil der antreibenden Effekte mit Passieren des letzten Hindernisses ($x = 2,05$ m) wegfällt, kann die erreichte Geschwindigkeit im glatten Kanal nicht aufrecht erhalten werden, sodass es zu einer Reduktion der Flammenausbreitungsgeschwindigkeit kommt. Das Absinken auf nahezu Null bei $x \approx 4,0$ m ist allerdings auf die im unverbrannten Gas induzierte Strömung zurückzuführen. Durch die während der Verbrennung zunehmende Verdrängungswirkung staut sich immer mehr Frischgas vor der Flamme auf, wodurch der Druck ansteigt. Es bildet sich ein Verdichtungsstoß, der am Kanalende reflektiert wird und eine Strömung in negativer x -Richtung bewirkt. Diese trifft auf die Flamme und erreicht für kurze Zeit, dass Strömungsgeschwindigkeit und Brenngeschwindigkeit sich gerade die Waage halten, sodass für einen ruhenden Beobachter die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit auf einen Wert nahe Null absinkt. Im Anschluss wird der im Kanal laufende Verdichtungsstoß wieder an der Startwand reflektiert und trifft bei $t \approx 40$ ms erneut auf die Flamme, dieses Mal allerdings gefolgt von einer Strömung mit in x -Richtung positiver Geschwindigkeit. Die letzte Fotodiode, die ein auswertbares Signal lieferte, war im Experiment bei $x = 4,40$ m platziert. Aus der Simulation ist zu erkennen, dass sich auch dahinter das Wechselspiel zwischen hin- und herlaufendem Verdichtungsstoß und Flamme fortsetzt.

In Abb. 5.2 sind die entsprechenden Ergebnisse bei Erhöhung des Wasserstoffgehalts auf **20%** gezeigt. Die Kurve im $x-t$ -Diagramm zeigt einen immer steileren Anstieg, bis sie bei $t \approx 18$ ms näherungsweise in eine Gerade übergeht. Die Übereinstimmung zwischen Simulation und Experiment ist wiederum

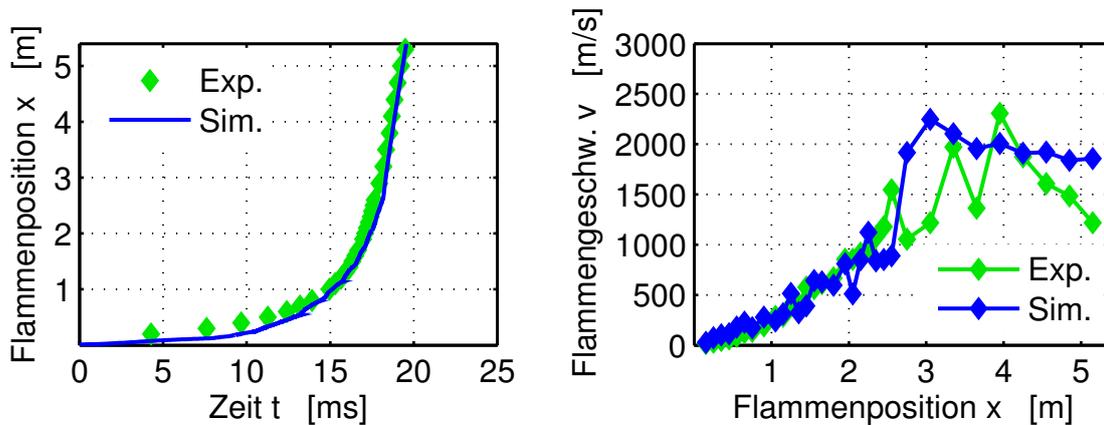


Abbildung 5.2: Auswertung der Flammenausbreitung in der Konfiguration BR30 mit 20% H_2 (homogen).

sehr gut. Im v - x -Diagramm werden die Unterschiede deutlicher. In der Simulation springt die Geschwindigkeit nach etwa 2,8 m zurückgelegter Strecke auf über 2000 m/s und sinkt danach langsam gegen einen konstanten Wert von etwa 1800 m/s ab. Dieser Wert liegt nahe an der CJ-Geschwindigkeit des Gemisches (s. Tabelle A.1 in Anhang A), was ein sicheres Indiz für eine erfolgte DDT ist. Im Experiment zeigen sich deutlich größere Geschwindigkeitsschwankungen, die ein möglicher Hinweis für eine wiederholte DDT und anschließendes Detonationsversagen sind.

Um diese Vermutung zu überprüfen, kann man die in Abb. 5.3 dargestellten Druckschriebe aus Simulation und Experiment miteinander vergleichen. Die Drucksensoren 1 und 2 liefern jeweils ein relativ langsam ansteigendes Signal, was typisch für Deflagrationen ist. Bei Sensor 4 ist in der Simulation ein schlagartiger Druckanstieg auf ca. 50 bar zu erkennen, mit einem anschließenden Abfall auf ca. 5 bar. Der zweite Druckanstieg bei $t \approx 21$ ms stellt die vom Kanalende reflektierte Druckwelle dar, wie aus dem Vergleich mit den übrigen Drucksignalen deutlich wird. Im Experiment ist die erste Druckspitze an Sensor 4 deutlich schwächer. Ein Blick auf das v - x -Diagramm (Abb. 5.2) zeigt, dass die DDT möglicherweise erst ein wenig später erfolgt und bei $x = 3,2$ m lediglich ein starker führender Stoß, aber noch keine Detonation vorliegt. Bei $x = 4,1$ m ist die DDT aber auch im Experiment erfolgt, wie sich aus der sehr guten Übereinstimmung der Druckschriebe von Sensor 5 erkennen lässt. Sensor 6 liegt bereits sehr nahe am Kanalende, doch der Unterschied zwischen der ankommenden Detonation und dem kaum schwächer ausgeprägten re-

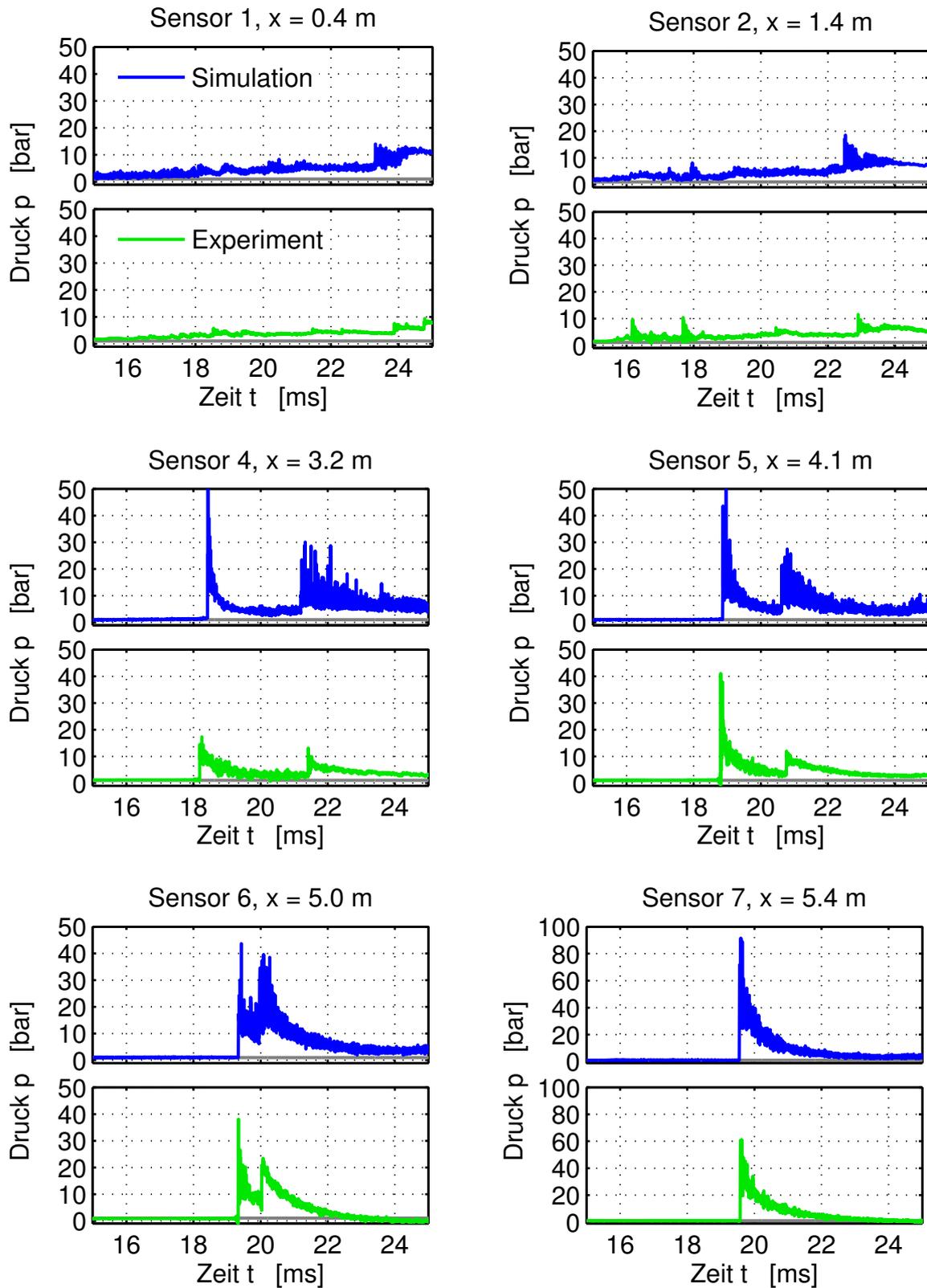


Abbildung 5.3: Druckschriebe für die Konfiguration BR30 mit 20% H_2 (homogen).

flektierten Stoß lässt sich gut erkennen. An Drucksensor 7, der mittig in der Endplatte angebracht ist (s. Abb. 4.1), treten durch das senkrechte Auftreffen der Detonation mit Abstand die höchsten Drücke auf (man beachte die unterschiedliche Skalierung). Das relativ konsistente Bild der Druckschriebe an den Sensoren 5, 6 und 7 legt den Schluss nahe, dass auch im Experiment eine ausgebildete Detonation mit konstanter Geschwindigkeit nahe an der CJ-Geschwindigkeit propagiert. Die größeren Schwankungen im v - x -Diagramm kommen demnach nicht durch wiederholte DDT und Detonationsversagen zu Stande, sondern sind wohl messtechnisch bedingt.

Bei genauerer Betrachtung der Ergebnisse in Abb. 5.3 erkennt man außerdem, dass die Drucksensoren im Experiment (z.B. Sensor 6) teilweise Drücke unter dem Anfangsdruck oder sogar negative Werte anzeigen. Dies ist physikalisch nicht plausibel, sondern auf den sogenannten Thermoschock-Effekt [53] zurückzuführen: Durch Kontakt mit der heißen Flamme kann die Vorspannung in den piezokapazitiven Sensoren verloren gehen, wodurch von diesem Zeitpunkt an falsche Werte gemessen werden. Zum Schutz der Sensoren werden diese zwar mit einer dünnen Fettschicht bedeckt, vereinzelt ist aber trotzdem mit falschen Messwerten zu rechnen. Dies sollte bei der Interpretation der weiteren Ergebnisse beachtet werden.

Eine Erhöhung des Wasserstoffgehalts von 20% auf **25%** führt zu keinem fundamental anderen Verhalten mehr, lediglich die Anlaufänge¹ bis zum Eintreten der DDT wird kürzer. In Abb. 5.4 zeigt sich, dass auch hier die Simulation das Experiment sehr gut trifft. Die DDT tritt in der Simulation noch in der Hindernisstrecke auf, im Experiment offenbar direkt am letzten Hindernis. Anschließend breitet sich die Detonation mit relativ konstanter Geschwindigkeit aus, wobei in der experimentellen Auswertung größere Schwankungen im v - x -Diagramm auftreten, die offenbar nicht physikalisch bedingt sind, da die Druckschriebe von Experiment und Simulation wiederum sehr gut übereinstimmen (s. Abb. G.3 in Anhang G).

Es kann festgehalten werden, dass der entwickelte Solver in der Lage ist, nicht nur deflagrative und detonative Flammenausbreitung in homogenen Gemischen sehr gut wiederzugeben, sondern auch das DDT-Verhalten sehr gut getroffen wird.

¹ In der englischsprachigen Literatur wird meist der Begriff *run-up distance* für die Strecke zwischen Zündquelle und dem Punkt, an dem DDT auftritt, verwendet [117, 126, 131].

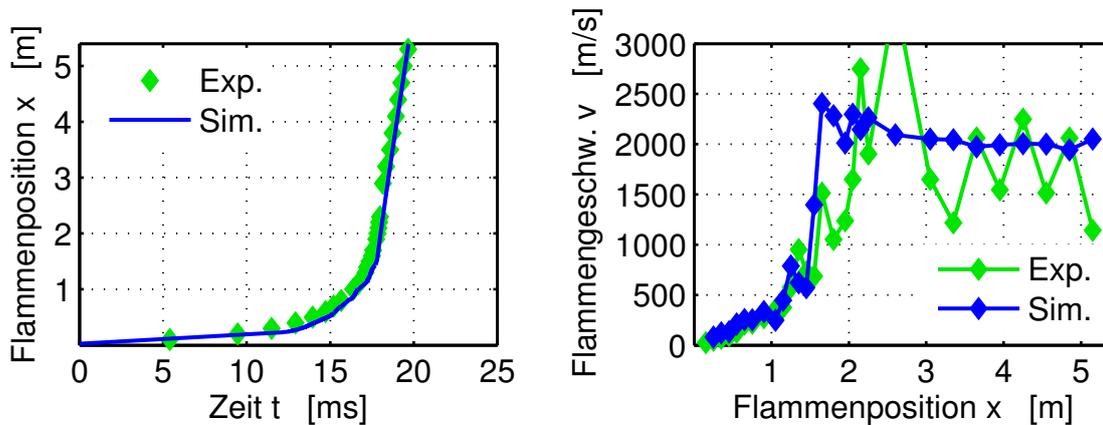


Abbildung 5.4: Auswertung der Flammenausbreitung in der Konfiguration BR30 mit 25% H_2 (homogen).

5.2 Rechnungen mit Konzentrationsgradient

Um die Auswirkung eines Konzentrationsgradienten auf die Flammenausbreitung und DDT-Neigung zu untersuchen, wurden die in Kap. 5.1 gezeigten Rechnungen mit Konzentrationsgradient wiederholt. Die Blockierrate beträgt weiterhin 30%, die Verläufe der Gradienten können Abb. 4.2 bzw. Anhang E entnommen werden. Bei einem mittleren Wasserstoffgehalt von **15%** ergibt sich das in Abb. 5.5 dargestellte Ergebnis. Das $x-t$ -Diagramm scheint zu Beginn und Ende der Simulation sehr gut mit dem Experiment übereinzustimmen, in der Mitte gibt es kleinere Abweichungen. Dies wird im $v-x$ -Diagramm

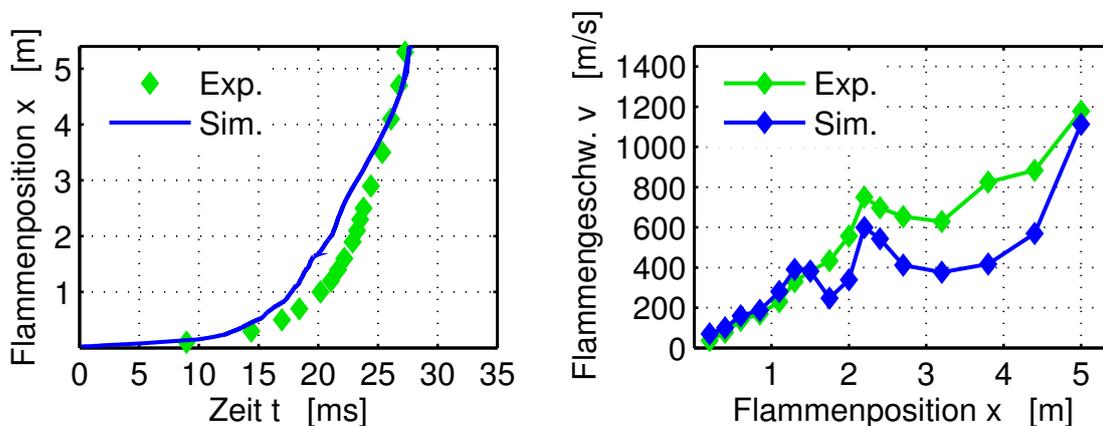


Abbildung 5.5: Auswertung der Flammenausbreitung in der Konfiguration BR30 mit 15% H_2 (mit Konzentrationsgradient).

deutlicher. Zu Beginn stimmen die Flammengeschwindigkeiten nahezu perfekt überein. Bei $x = 1,5$ m kommt es in der Simulation zu einem kurzen Geschwindigkeitseinbruch, der wie schon im homogenen Fall einer vom Kanalende reflektierten Stoßwelle geschuldet ist. Die Flamme erholt sich davon schnell wieder und erreicht eine Maximalgeschwindigkeit von ca. 600 m/s am letzten Hindernis. Nach Passieren des letzten Hindernisses sinkt die Ausbreitungsgeschwindigkeit wieder ab, allerdings nicht so stark wie im homogenen Fall (Abb. 5.1), da die Flamme sich vorwiegend in dem reaktiven Gemisch an der Kanaloberseite bewegt, wo der Wasserstoffgehalt bis zu 30% erreicht, während das Gemisch an der Kanalunterseite nur 3% Wasserstoff enthält (s. Abb. 4.2) und daher überhaupt nicht brennt. Für eine gewisse Zeit stellt sich im Kanal eine konstante Ausbreitungsgeschwindigkeit von etwa 400 m/s ein. Zum Ende der Simulation ist allerdings ein plötzlicher Geschwindigkeitsanstieg zu erkennen, sodass die Endgeschwindigkeiten in Simulation und Experiment nahezu dieselben sind.

Der Grund für diesen plötzlichen Geschwindigkeitsanstieg ist in Abb. 5.6 zu erkennen. Links ist das Temperaturfeld, rechts der Druck wiedergegeben.² Die Darstellung zeigt das Geschehen auf den letzten 50 cm der Kanallänge. Im ersten Bild, zum Zeitpunkt $t = 27,15$ ms, nähert sich die Flamme, die hauptsächlich im oberen Teil des Kanals brennt, der Endwand des Kanals an. Gleichzeitig bewegt sich der führende Stoß, der bereits am Kanalende reflektiert wurde, in entgegengesetzter Richtung. Zum Zeitpunkt $t = 27,25$ ms treffen Stoß und Flamme aufeinander. Ab hier brennt die Flamme in ein stark vorkomprimiertes Gemisch hinein, wo aufgrund der erhöhten Dichte (Gl. 3.65) und der erhöhten laminaren Brenngeschwindigkeit (Gl. 2.3) die Reaktionsrate ansteigt. Hieraus folgt wiederum ein so starker Druckerhöhung, dass es bei $t = 27,40$ ms zu einer lokalen Explosion kommt. Von diesem Punkt breitet sich eine radiale Detonationswelle aus, die nach kurzer Zeit eine quasi-stationäre Form mit gekrümmter Stoßfront annimmt. Hierbei werden kurzfristig Drücke von mehr als 100 bar erreicht.³ Vergleicht man die Druckschriebe von Simulation und Experiment wie in Abb. 5.7 dargestellt, so fällt auf, dass bis zur Stelle $x = 4,1$ m (Sensor 5) nur moderate Drücke bis etwa 15 bar auftreten. Die DDT in der Si-

² Zur schärferen Abgrenzung der Stoß- und Flammenfronten wurde hier (wie auch in den noch folgenden 2D-Plots) mit einer Gitterweite von 1 mm gerechnet. Hinsichtlich des DDT-Verhaltens ergaben sich dabei keine wesentlichen Unterschiede zu Rechnungen mit 2 mm Gitterweite.

³ Die Begrenzung der Farbskala in Abb. 5.6 auf 40 bar erfolgte zur besseren Visualisierung der Vor-DDT-Bedingungen.

mulation erfolgt bei $x = 4,9$ m, wobei kurzzeitig ein Spitzendruck von 60 bar erreicht wird. Bei der Reflexion der Detonation am Kanalende wird anschließend nahezu der doppelte Wert registriert. Im Experiment ist bei $x = 5,0$ m noch keine DDT zu erkennen. Trotzdem wird an der Endwand ein nahezu identisches Druckprofil gemessen, allerdings mit einer Abweichung: Es gibt kein Vor-Plateau, das in der Simulation ab ca. 26 ms von dem reflektierten Verdichtungsstoß verursacht wird. Als Schlussfolgerung kann festgehalten werden, dass im Experiment zwar ebenfalls eine DDT auftritt, diese aber direkt an der Endwand entsteht.

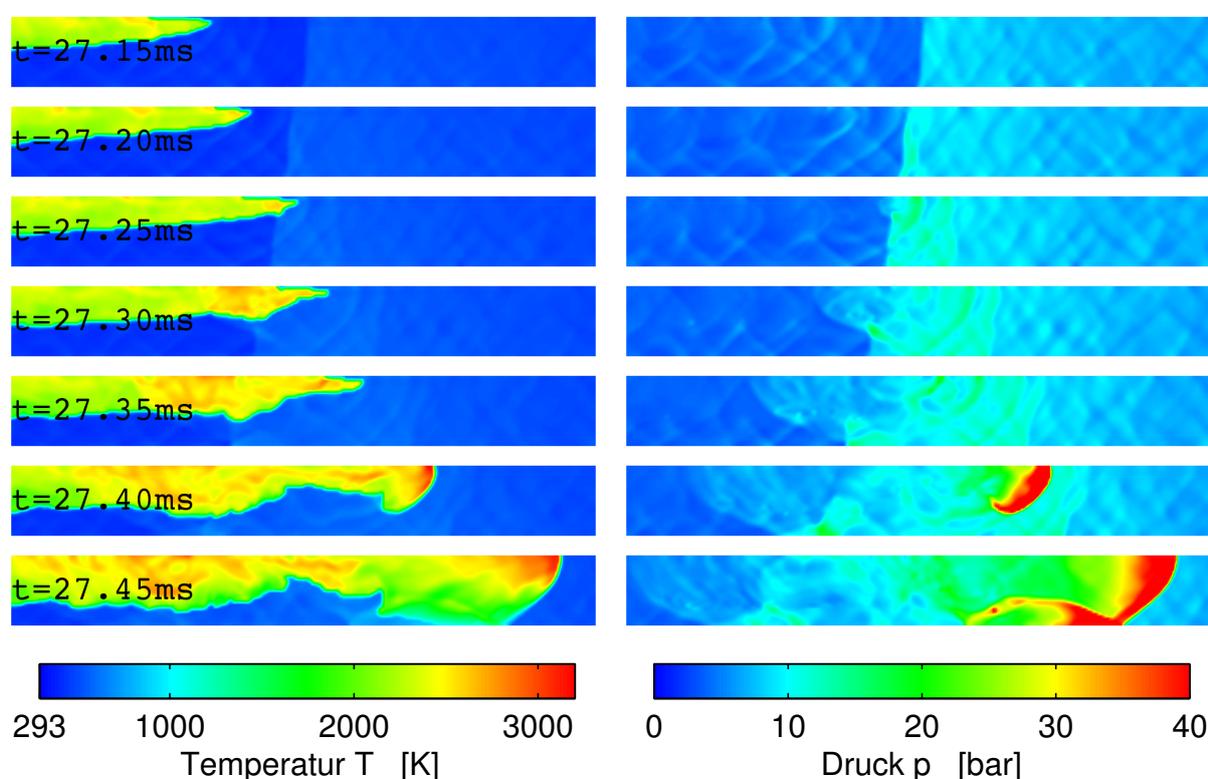


Abbildung 5.6: DDT durch Interaktion eines reflektierten Stoßes mit der Flammenfront.

Dies kann dadurch erklärt werden, dass die höhere Flammenausbreitungsgeschwindigkeit im Experiment einen etwas stärkeren Stoß erzeugt, der bei Auftreffen auf die Endwand unmittelbar eine DDT hervorruft und nicht erst noch mit der Flamme interagiert. Hier zeigt sich, dass aufgrund der extremen Nichtlinearität der Zündverzugszeit (s. Abb. 3.11) bereits kleine Unterschiede in der Ausbreitungsgeschwindigkeit phänomenal andere Auswirkungen nach sich ziehen können. Nichtsdestotrotz kann die Vorhersagekraft des Modells auch in diesem Fall als sehr zufriedenstellend bezeichnet werden, da das Auftreten einer DDT in dieser Konfiguration korrekt vorhergesagt wurde und erst eine

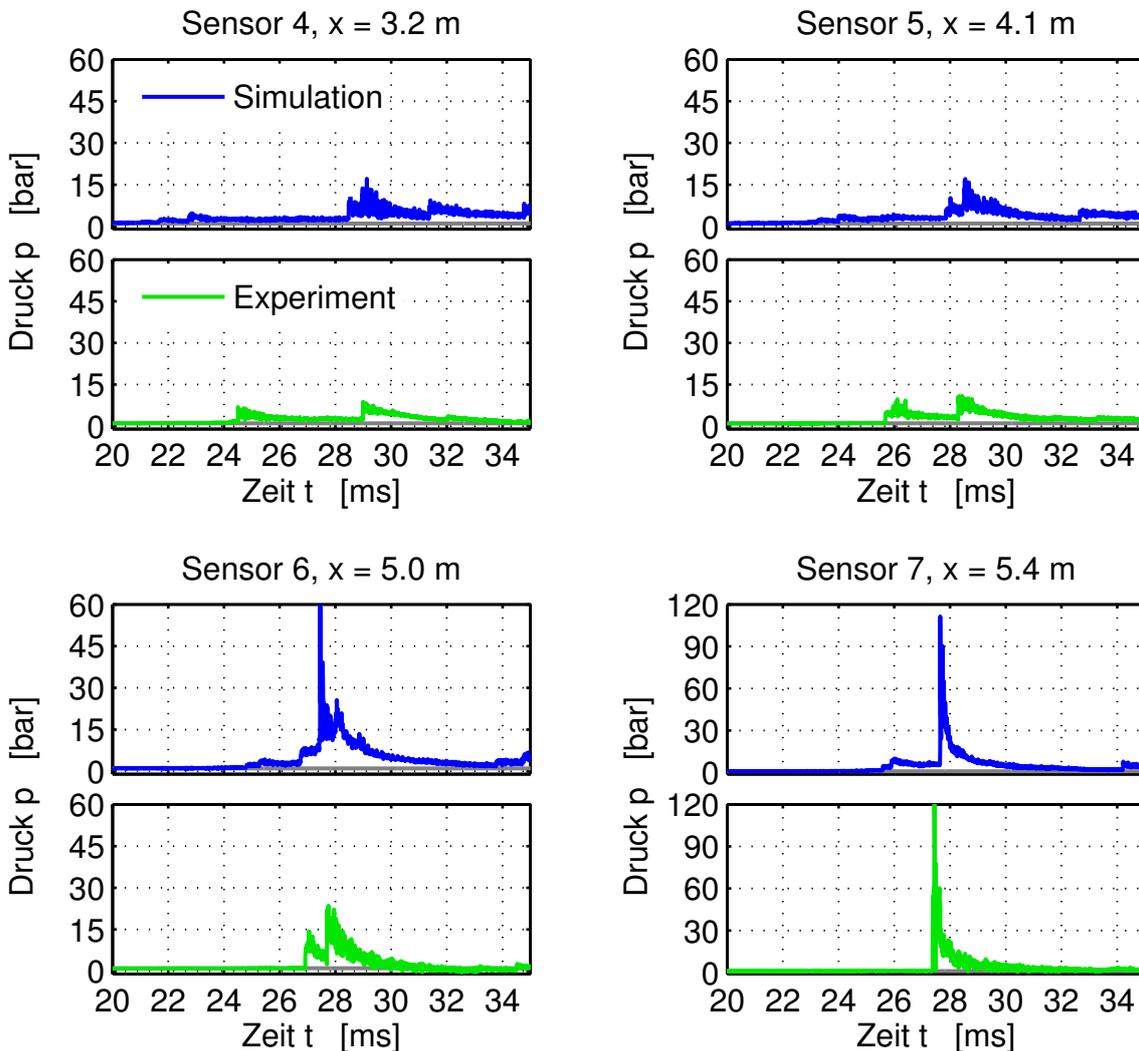


Abbildung 5.7: Druckschriebe für die Konfiguration BR30 mit 15% H₂ (mit Konzentrationsgradient).

detailliertere Untersuchung die Unterschiede im DDT-Mechanismus aufzeigte. Die wichtigste Folgerung aus Anwendersicht ist, dass das Vorhandensein eines Konzentrationsgradienten in diesem Fall eine extrem heftige DDT zur Folge hatte, während im homogenen Fall mit demselben Wasserstoffgehalt nur geringe Überdrücke von weniger als 10 bar (s. Abb. G.1 in Anhang G) erreicht wurden.

Eine Erhöhung des Wasserstoffgehalts auf **20%** führt dazu, dass eine DDT deutlich früher erreicht wird. In Abb. 5.8 ist zu erkennen, dass die Flammgeschwindigkeit zum Ende der Hindernisstrecke von ca. 1000 m/s auf mehr als 2000 m/s springt, die DDT also bereits in der Hindernisstrecke erfolgt. Vergli-

chen mit dem homogenen Gemisch desselben Wasserstoffgehalts (Abb. 5.2) erfolgt die DDT somit früher und es werden auch etwas höhere Geschwindigkeiten erreicht. In erster Näherung sieht das hier erzielte Ergebnis weniger dem homogenen Gemisch mit 20% H₂, sondern vielmehr dem homogenen Gemisch mit 25% H₂ (Abb. 5.4) ähnlich, sowohl was die Anlauf­länge, als auch was die erreichte Endgeschwindigkeit betrifft. Daraus kann geschlossen werden, dass der erhöhte Wasserstoffgehalt im oberen Teil des Kanals die gesamte Flammenausbreitung dominiert und nicht durch das Defizit an brennbarem Wasserstoff im unteren Teil des Kanals kompensiert wird.

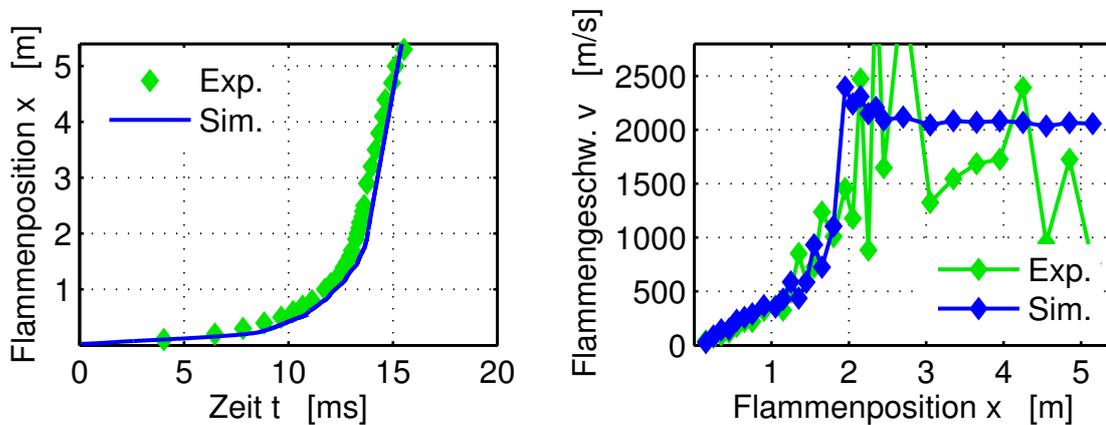


Abbildung 5.8: Auswertung der Flammenausbreitung in der Konfiguration BR30 mit 20% H₂ (mit Konzentrationsgradient).

Eine weitere Erhöhung des Wasserstoffgehalts von 20% auf **25%** bringt keine qualitative Änderung des Flammenausbreitungsverhaltens mehr. In Abb. 5.9 ist zu erkennen, dass sowohl die Anlauf­länge bis zur DDT als auch der Geschwindigkeitsverlauf im v - x -Diagramm nahezu unverändert bleiben – die DDT tritt in der Nähe des letzten Hindernisses auf.

Für eine genauere Untersuchung des DDT-Mechanismus in der Hindernisstrecke sind in Abb. 5.10 Temperatur und Druck kurz vor Erreichen des letzten Hindernisses dargestellt. Die Flamme brennt hauptsächlich im oberen Teil des Kanals, wo die höheren Wasserstoffgehalte vorliegen. Vor dieser schnellen Deflagration hat sich bereits ein gekrümmter führender Verdichtungsstoß gebildet. Grund für die Krümmung ist zum einen die asymmetrische Wärmefreisetzung, zum anderen die über die Kanalhöhe variierende Schallgeschwindigkeit. An der oberen Wand liegt die höchste Schallgeschwindigkeit vor, der Stoß ist hier senkrecht zur Wand. An der unteren Kanalwand hat sich ein Mach-

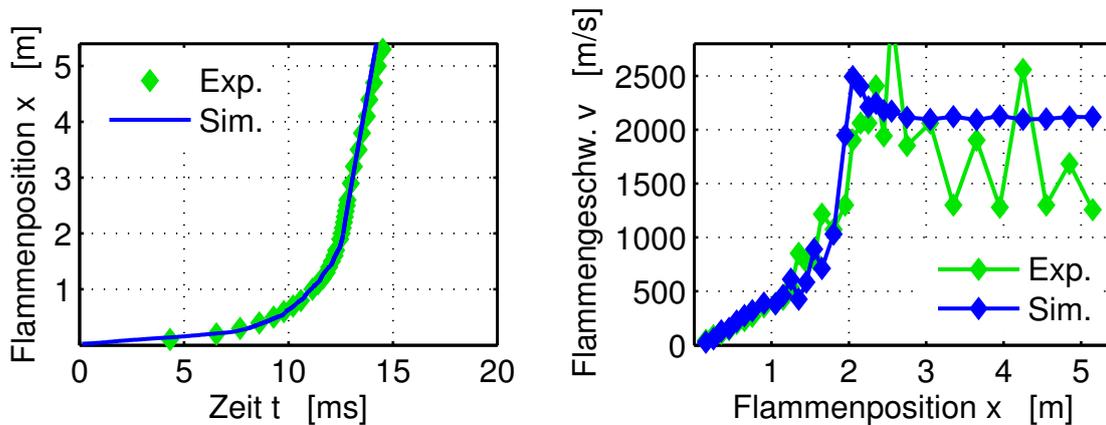


Abbildung 5.9: Auswertung der Flammenausbreitung in der Konfiguration BR30 mit 25% H_2 (mit Konzentrationsgradient).

Stamm ausgebildet, an dem der führende Stoß reflektiert wird. Dieser Mach-Stamm ist notwendig, da ein schiefer Verdichtungsstoß die Strömung ablenkt, gleichzeitig aber an den Wänden die Strömung keine Komponente senkrecht zur Wand haben kann. Ist der Winkel des eintreffenden Stoßes auf der unteren Wand zu groß, um die wandparallele Strömung durch eine einfache Stoßreflexion herzustellen, so ist ein Mach-Stamm die einzige Möglichkeit, dies zu erreichen [3, 67]. Die Reflexion des führenden Stoßes erfolgt dann abgehoben von der Wand in einem Tripelpunkt, in dem führender Stoß, Mach-Stamm und reflektierter Stoß zusammentreffen.

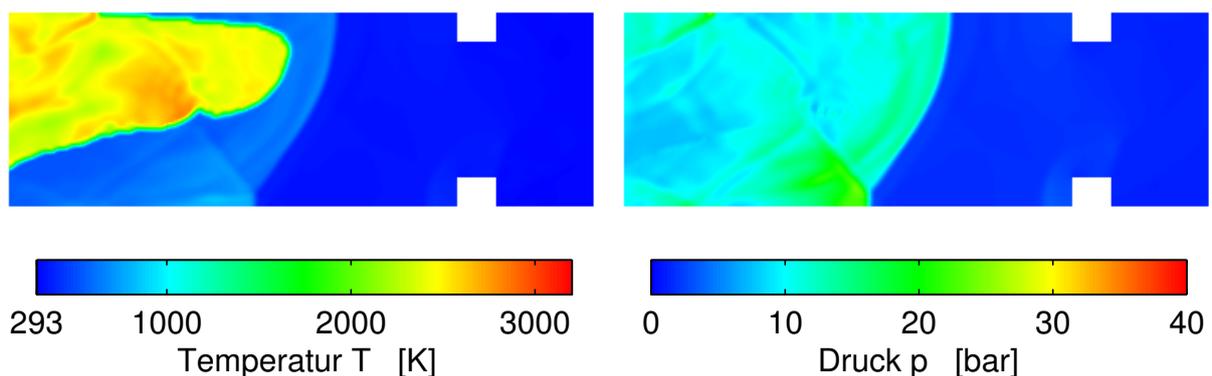


Abbildung 5.10: Druck- und Temperaturverteilung vor Erreichen des letzten Hindernisses in der Konfiguration BR30 mit 25% H_2 (mit Konzentrationsgradient).

Der Ablauf der DDT ist in Abb. 5.11 dargestellt. Nach Durchlaufen des vorletzten Hindernisses (nicht dargestellt) hat sich zum Zeitpunkt $t = 12,43$ ms eine quasi-stationäre Stoßfront, der die Flamme in kurzem Abstand folgt, eta-

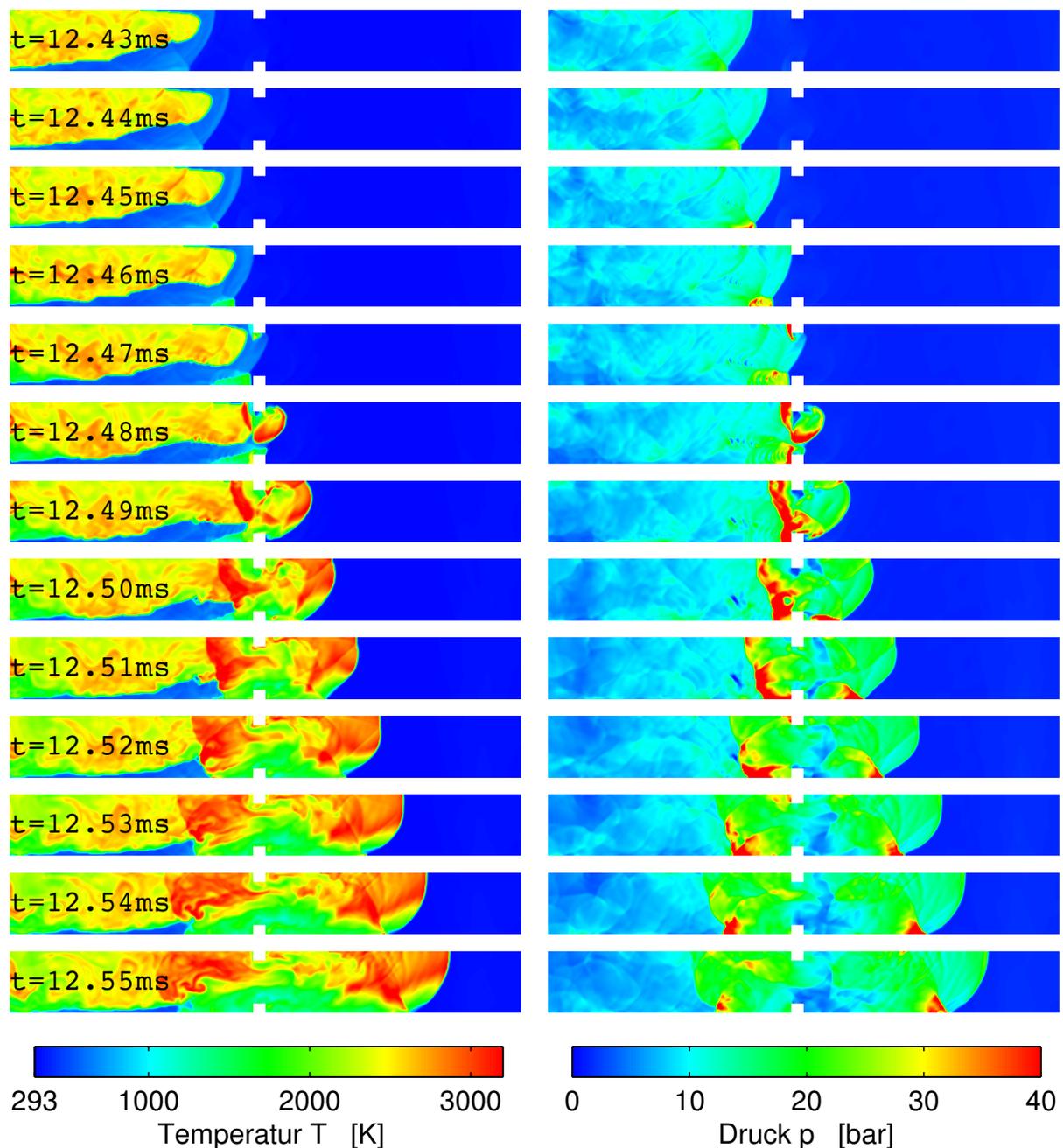


Abbildung 5.11: DDT durch Selbstzündung am letzten Hindernis.

bliert. Zum Zeitpunkt $t = 12,45 \text{ ms}$ kommt es unmittelbar hinter dem Mach-Stamm zu einer Selbstzündung, sodass an der unteren Wand eine zweite Flammenfront entsteht. Die Flammentemperatur liegt hier aufgrund des geringeren Wasserstoffgehalts deutlich unter den im oberen Kanalteil erreichten Verbrennungstemperaturen. Bei $t = 12,46 \text{ ms}$ trifft der führende Stoß auf das obere Hindernis, im Folgenden kommt es auch dort zu einer Selbstzündung.

dung. Da in diesem Fall aber deutlich mehr Reaktionswärme freigesetzt werden kann, ist der Druckanstieg hier höher als bei der Selbstzündung an der unteren Kanalwand. Die auf der Stirnseite des Hindernisses initiierte Reaktionsfront wird durch die Strömung in den Bereich zwischen den Hindernissen transportiert. Von hier breitet sich die Druckfront, die stark genug ist, um eine Detonation herbeizuführen, kreisförmig aus. In den folgenden Bildsequenzen ($t > 12,48$ ms) ist zu beobachten, wie eine rückwärts laufende Druckfront das bereits verbrannte Gemisch noch einmal komprimiert und im bis dahin unverbrannten Gemisch im unteren Bereich des Kanals ebenfalls eine Reaktion auslöst. Die nach rechts ins Unverbrannte laufende Detonationsfront aus dem oberen Teil des Kanals vereinigt sich mit der aus dem unteren Teil des Kanals und nimmt im Folgenden ($t > 12,52$ ms) eine quasi-stationäre Form an, die aufgrund des Konzentrationsgradienten im unverbrannten Gemisch stark gekrümmt ist.

Es mag zunächst erstaunlich scheinen, dass in einem Gemisch mit 25% Wasserstoff die Selbstzündung zuerst an der unteren Kanalseite auftritt, wo das Gemisch sehr mager ist ($x_{H_2} = 7\%$), während es an der oberen Kanalseite ($x_{H_2} = 45\%$) erst nach Stoßreflexion an einem weiteren Hindernis zur Selbstzündung kommt. Dies kann man jedoch bei genauerer Betrachtung der gasdynamischen Vorgänge erklären: Die Stoßfront bewegt sich vor Eintreten der Selbstzündung mit einer näherungsweise konstanten Geschwindigkeit von $v = 1450$ m/s. Die Schallgeschwindigkeit des mageren Gemisches an der unteren Wand beträgt $a_r = 356$ m/s (s. Tabelle A.1 in Anhang A). Der Mach-Stamm an der unteren Wand kann somit als ein senkrechter Verdichtungsstoß angesehen werden, der sich mit Mach-Zahl $Ma = v/a_r = 4,07$ fortbewegt. Die Stoßbeziehungen [3] liefern für $p_0 = 1,013$ bar und $T_0 = 293$ K den Nachstoß-Zustand

$$p_1 = p_0 \left(1 + \frac{2\kappa}{\kappa + 1} (Ma^2 - 1) \right) = 19,4 \text{ bar} \quad , \quad (5.1)$$

$$T_1 = T_0 \left(1 + \frac{2\kappa}{\kappa + 1} (Ma^2 - 1) \right) \left(1 - \frac{2}{\kappa + 1} \left(1 - \frac{1}{Ma^2} \right) \right) = 1220 \text{ K} \quad . \quad (5.2)$$

Die zugehörige Zündverzugszeit lässt sich mit *Cantera* zu $t_{ign} = 54 \mu\text{s}$ bestimmen. In dieser Zeit bewegt sich die Stoßfront um knapp 8 cm fort, d.h. sobald ein Mach-Stamm dieser Stärke etabliert ist, reicht die Strecke zwischen zwei Hindernissen aus, um an der unteren Wand eine Selbstzündung hervorzurufen. Natürlich unterliegt das Gemisch abweichend von dieser idealisier-

ten eindimensionalen Betrachtung leichten Störungen, beispielsweise durch transversal laufende Druckwellen. Da das Gemisch in dem auf 1220 K vorkomprimierten Zustand überaus sensitiv ist, können relativ kleine Abweichungen von dem idealisierten Nachstoß-Zustand die Zündverzugszeit nochmals extrem verkürzen. Beispielsweise bewirkt eine weitere Temperaturerhöhung um 50 K eine Verkürzung der Zündverzugslänge von 8 cm auf ca. 1 cm.

An der oberen Wand liegt zwar ebenfalls ein senkrechter Verdichtungsstoß, der sich mit derselben Geschwindigkeit fortbewegt, vor. Aufgrund der höheren lokalen Schallgeschwindigkeit ($a_r = 452$ m/s) entspricht das aber nur einer lokalen Mach-Zahl $Ma = 3,21$. Die Stoßbeziehungen liefern hierfür einen Nachstoß-Zustand $p_1 = 12,0$ bar und $T_1 = 860$ K, was zu einer um drei Größenordnungen höheren Zündverzugszeit führt. Leichte Abweichungen von diesem Zustand führen noch nicht zu einer relevanten Verkürzung der Zündverzugszeit. Erst die Reflexion am oberen Hindernis steigert den Druck und die Temperatur auf $p_2 = 79$ bar und $T_2 = 1755$ K,⁴ wodurch dort innerhalb von $0,1 \mu\text{s}$ Selbstzündung eintritt.

Eine Vergleichsrechnung mit unverändertem Wasserstoffgehalt in einem Kanal, in dem das letzte Hindernis fehlte, zeigte, dass die Selbstzündung hinter dem Mach-Stamm ausreichte, um DDT hervorzurufen. Die Reflexion am letzten Hindernis war in diesem Fall also nicht ursächlich für das Erreichen der DDT. Eine weitere Rechnung mit nur 20% Wasserstoff zeigte dagegen, dass die Reflexion am siebten Hindernis in diesem Fall erforderlich war, um eine DDT zu erreichen. Die sehr ähnlichen Ergebnisse in Abb. 5.8 und Abb. 5.9 sind somit auf unterschiedliche Effekte zurückzuführen: Bei 20% H_2 ist das siebte Hindernis erforderlich, um eine DDT zu erreichen, bei 25% H_2 tritt die DDT unabhängig davon, ob das letzte Hindernis vorhanden ist, bei $x \approx 2$ m auf.

Ein Blick auf die Druckschriebe im 25%-Fall (Abb. 5.12) zeigt, dass trotz des höheren Wasserstoffgehalts und des früheren Eintretens der DDT geringere Spitzendrücke erreicht werden als im 15%-Fall (Abb. 5.7). Folglich ist für das Schadenspotenzial, das von einer DDT ausgeht, nicht nur der Energieinhalt des Gasgemisches, sondern auch die Art der DDT von entscheidender Bedeutung. Bei einer DDT durch Reflexion am Kanalende können deutlich höhere Drücke (und Impulse) auftreten, als bei einer DDT, die in der Nähe der Flamme durch Interaktion mit Hindernissen entsteht. Die aus der Simulation ge-

⁴Zur Berechnung dieser Werte s. Anhang F.

wonnenen Erkenntnisse werden auch hier durch die experimentellen Druckschriebe (s. Abb. 5.12) bestätigt.

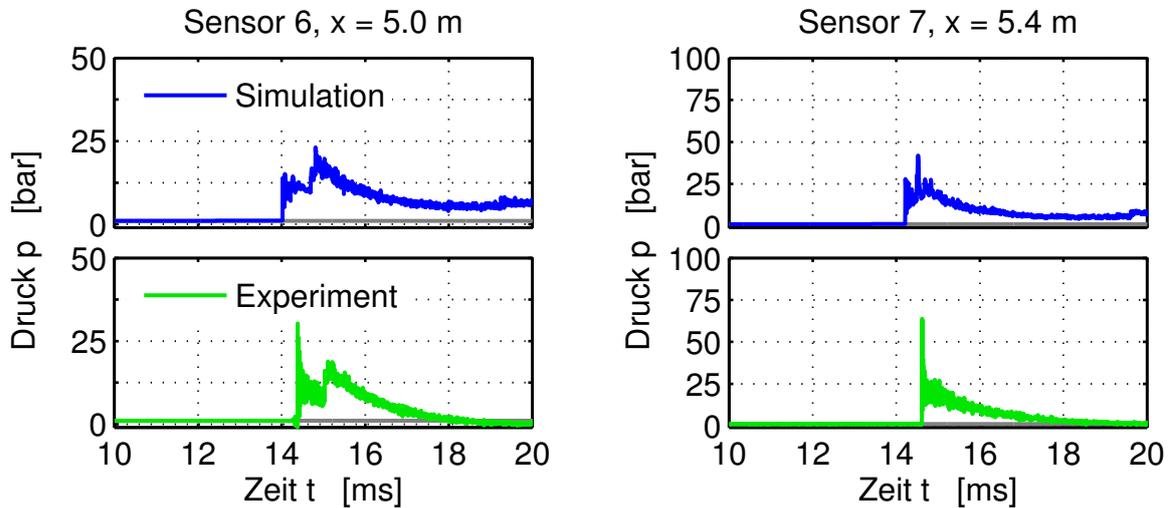


Abbildung 5.12: Druckschriebe für die Konfiguration BR30 mit 25% H₂ (mit Konzentrationsgradient).

Ein vergleichbarer Trend in homogenen Gemischen wurde bereits von Eder et al. [56, 57] experimentell beobachtet: Die maximalen Drücke an der Endwand wurden von Eder nicht in nah-stöchiometrischen, früh detonierenden Gemischen gemessen, sondern in Gemischen, in denen die Ausbreitungsgeschwindigkeit der Reaktionsfront im Bereich von 1000 bis 1250 m/s lag. Die Vermutung [56], dass in diesen Gemischen noch kurz vor oder unmittelbar an der Endwand eine DDT erfolgt, die für die hohen Drucklasten verantwortlich ist, kann durch die in dieser Arbeit durchgeführten Simulationen erhärtet werden. Als wesentliche Folgerung ist darüber hinaus festzuhalten, dass aus der Kenntnis der Ausbreitungsgeschwindigkeit nicht unmittelbar auf die auftretenden Drucklasten geschlossen werden kann.

Vergleicht man die Rechnungen mit und ohne Konzentrationsgradient, kann in der Hinderniskonfiguration BR30 zusammenfassend gefolgert werden, dass das Vorhandensein eines Konzentrationsgradienten die DDT-Neigung enorm erhöhen kann. Während im homogenen Gemisch mit 15% Wasserstoff nur eine Deflagration mit moderater Geschwindigkeit (< 500 m/s) und Überdrücken von weniger als 10 bar erreicht wurde, trat in einem Gemisch mit starkem Konzentrationsgradienten bei demselben mittleren Wasserstoffgehalt eine extrem starke DDT auf, verursacht durch Reflexion des führenden Stoßes an der Endwand des Kanals. Hierbei wurden Spitzendrücke von mehr als

100 bar beobachtet. Bei höheren Wasserstoffgehalten trat zwar sowohl im homogenen als auch im inhomogenen Gemisch DDT auf, allerdings waren dafür bei Vorhandensein eines Konzentrationsgradienten eine kürzere Anlaufstrecke bzw. weniger Hindernisse notwendig. Das hier festgestellte Verhalten generalisiert auf alle Hinderniskonfigurationen zu übertragen würde der Komplexität des Problems allerdings nicht gerecht werden, wie im folgenden Kapitel gezeigt werden soll.

5.3 Einfluss der Hindernisgröße

In diesem Kapitel wird die Kanalkonfiguration mit 60% Blockierrate untersucht. Der Schwerpunkt der Darstellung liegt dabei auf den Unterschieden zur Konfiguration mit 30% Blockierrate. Diese sind bei einem Gemisch mit 25% Wasserstoff besonders deutlich. Die Ergebnisse für den homogenen Fall sind in Abb. 5.13 dargestellt. Man erkennt, dass Simulation und Experiment gut übereinstimmen, mit einer DDT, die bei $x \approx 1,5$ m einsetzt. Die Detonation läuft mit ca. 2000 m/s gegen die Endplatte, wo Drücke von mehr als 60 bar erreicht werden. Auch an den anderen Drucksensoren liegt eine sehr gute Übereinstimmung mit dem Experiment vor (s. Abb. 5.14).

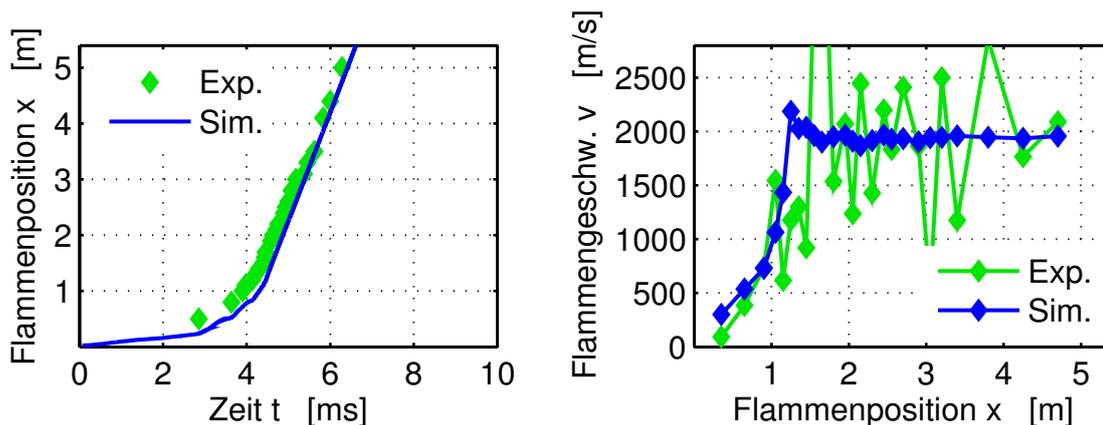


Abbildung 5.13: Auswertung der Flammenausbreitung in der Konfiguration BR60 mit 25% H_2 (homogen).

Wiederholt man diese Rechnung mit Konzentrationsgradient, so ergibt sich im v - x -Diagramm (Abb. 5.15) eine etwas schlechtere Übereinstimmung zwischen Simulation und Experiment. In beiden liegt die Flammenausbreitungs-

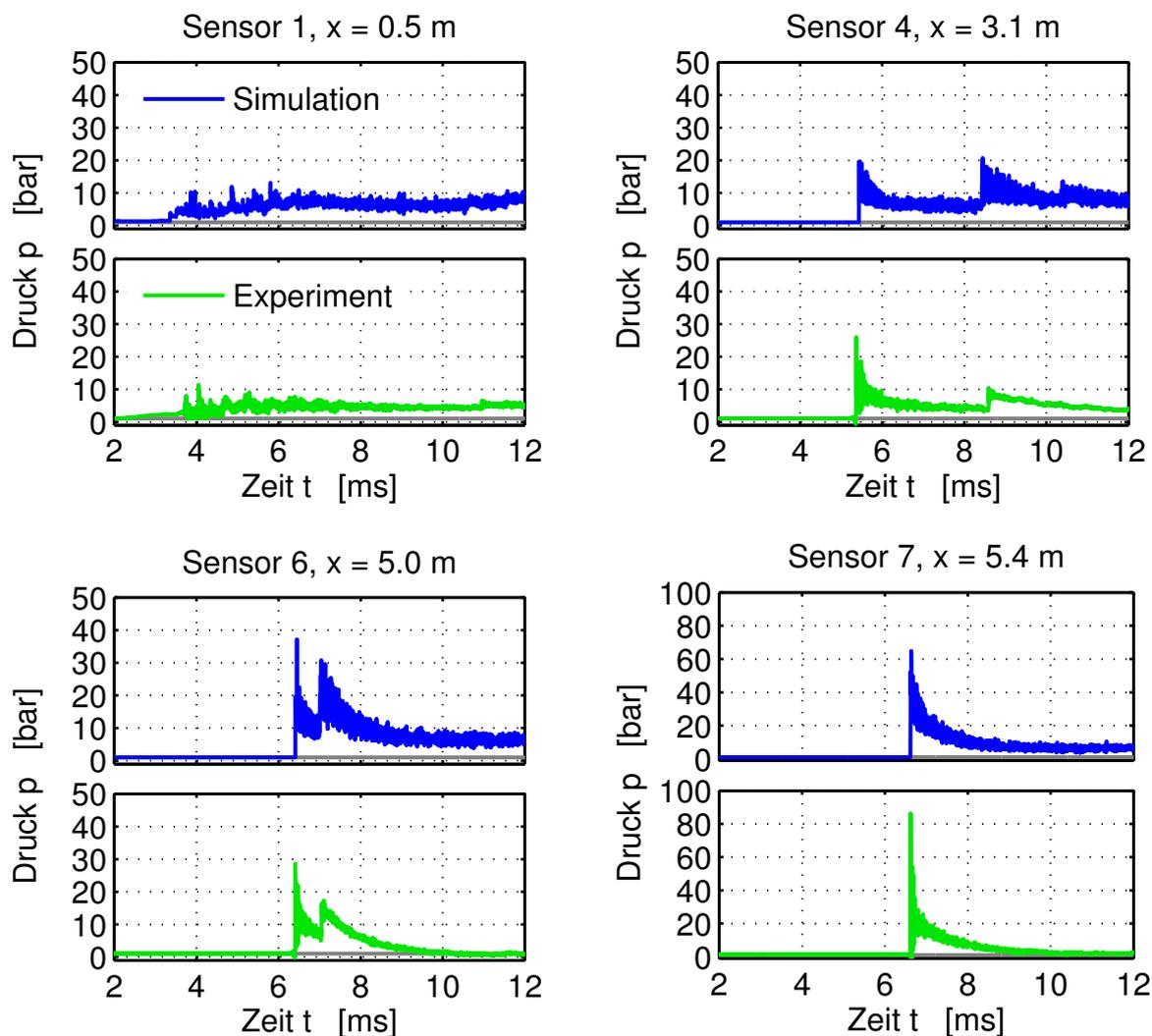


Abbildung 5.14: Druckschriebe für die Konfiguration BR60 mit 25% H₂ (homogen).

geschwindigkeit aber deutlich unter der im homogenen Gemisch beobachteten. Nach ca. 1 m Lauflänge wird eine näherungsweise konstante Ausbreitungsgeschwindigkeit erreicht, die auch im unversperrten Teil des Kanals erhalten bleibt. Im Experiment ist diese etwas höher als in der Simulation und scheint stärker zu schwanken. Erst an der letzten Fotodiode wird in der Simulation ein deutlicher Geschwindigkeitssprung festgestellt, ähnlich wie er auch schon in der Konfiguration BR30 bei 15% Wasserstoff beobachtet wurde (Abb. 5.5). Der Mechanismus ist aber in diesem Fall leicht unterschiedlich und ist in Abb. 5.16 visualisiert. In dieser Darstellung von Temperatur und Druck nähert sich die Flamme, die wiederum vornehmlich im oberen Teil des Kanals brennt, der Endwand an. In einem Abstand davon läuft ein Verdichtungs-

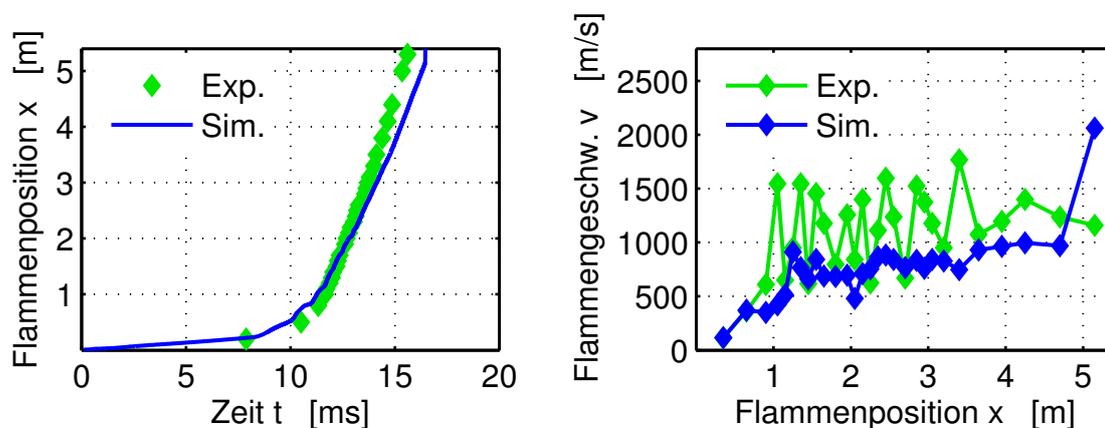


Abbildung 5.15: Auswertung der Flammenausbreitung in der Konfiguration BR60 mit 25% H₂ (mit Konzentrationsgradient).

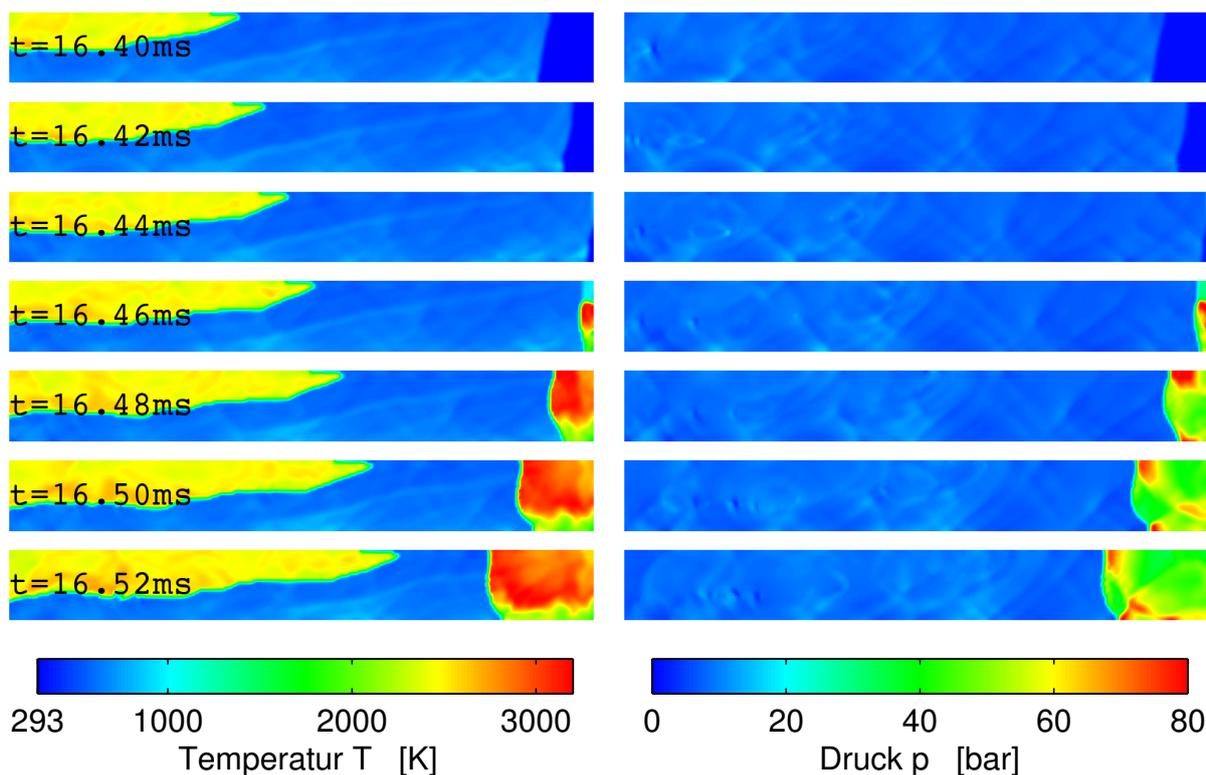


Abbildung 5.16: DDT durch Stoßreflexion am Kanalende.

stoß, der aufgrund des Konzentrationsgradienten leicht geneigt ist. Er trifft zum Zeitpunkt $t = 16,44$ ms auf die Wand und führt anschließend zu einer Selbstzündung. Diese Selbstzündung ist stark genug, um in dem noch unverbrannten Gemisch eine Detonation auszulösen. Diese läuft der Deflagration entgegen und weist aufgrund der lokalen Wasserstoff-Verteilung wiederum

eine gekrümmte Front auf. Im Gegensatz zu dem in Abb. 5.6 dargestellten Fall war hier der führende Stoß also stark genug, um direkt eine DDT auszulösen.

Im v - x -Diagramm der Simulation in Abb. 5.15 äußert sich dieser DDT-Vorgang als ein Geschwindigkeitssprung, da die Auswerterroutine die maximale x -Koordinate des verbrannten Gemisches berechnet, welche schlagartig auf $x = 5,40$ m springt. Im v - x -Diagramm des Experiments ist kein vergleichbarer Geschwindigkeitssprung erkennbar, da die letzte Fotodiode bei $x = 5,30$ m positioniert ist und offenbar von der deflagrativen Flamme erreicht wird, bevor die rückwärts laufende Detonation an dieser Stelle ankommt. Dass die rückwärts laufende Detonation dennoch im Experiment ebenfalls

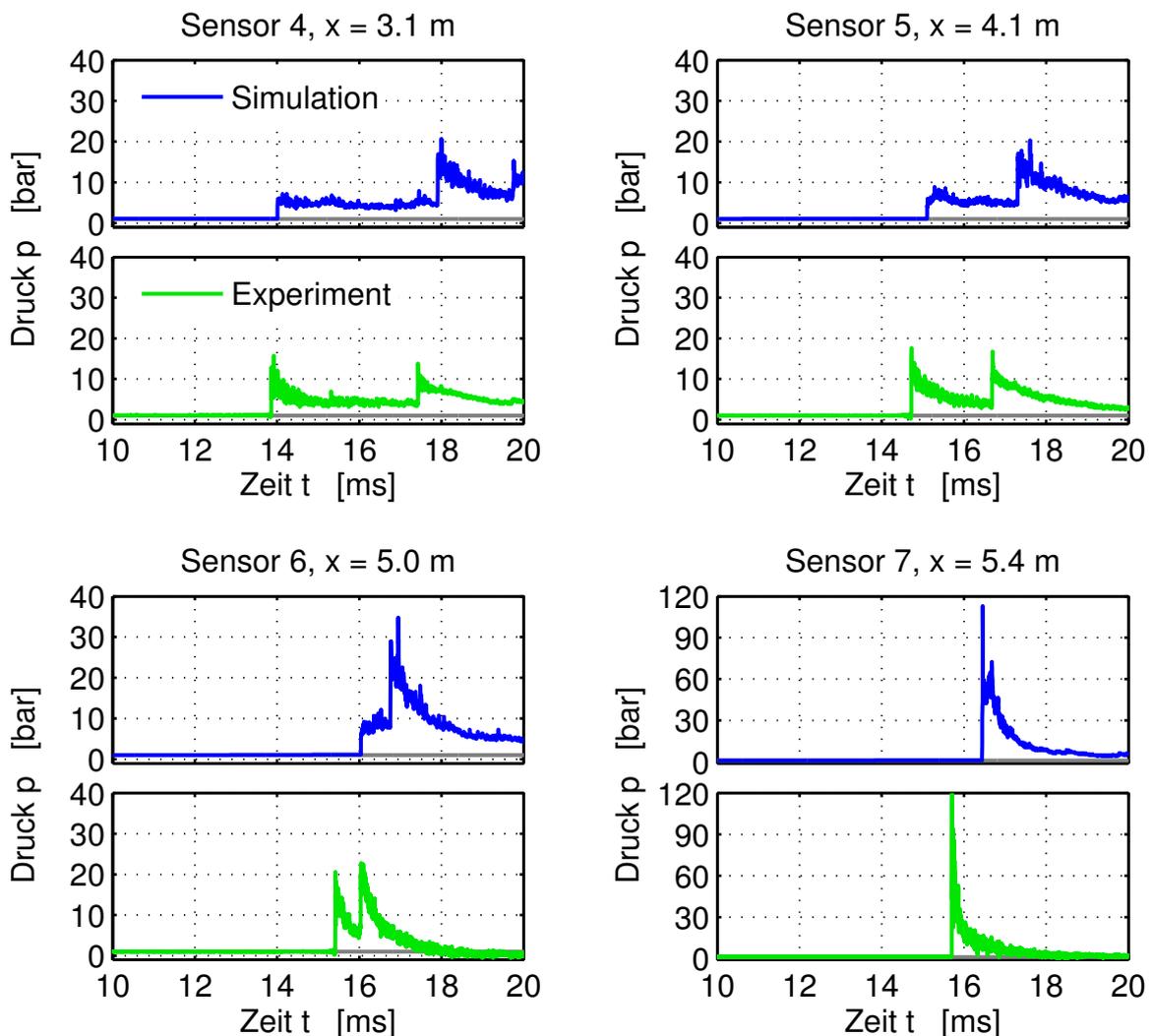


Abbildung 5.17: Druckschriebe für die Konfiguration BR60 mit 25% H_2 (mit Konzentrationsgradient).

aufgetreten ist, kann aus den Druckschrieben in Abb. 5.17 geschlossen werden. Der nach rechts laufende Stoß erreicht im Experiment an den Sensoren 4, 5 und 6 nur knapp die 20-bar-Grenze. Dennoch kommt es an der Endplatte zu einem Anstieg bis in den Bereich von 120 bar. Dieser starke Druckanstieg kann nicht durch die Reflexion eines inerten Stoßes verursacht sein, sondern muss die Folge einer extrem starken Wärmefreisetzung innerhalb eines sehr kurzen Zeitraums sein. Wie schon im Fall mit 15% Wasserstoff bei Blockierate 30% konnte durch die Simulation hier gezeigt werden, dass die alleinige Betrachtung eines experimentellen $x-t$ - oder $v-x$ -Diagramms nicht ausreicht, um zu entscheiden, ob eine DDT aufgetreten ist oder nicht. Im hier betrachteten Fall äußert sich die Explosion an der Endwand nur in den Druckschrieben, nicht aber in der von den Fotodioden erfassten Flammenausbreitung.

Bei einer Erhöhung des Wasserstoffgehalts auf **30%** rückt die benötigte Anlaufflänge bis zum Einsetzen der DDT sowohl im homogenen Gemisch (Abb. 5.18) als auch im Gemisch mit Konzentrationsgradient (Abb. 5.19) in die Hindernisstrecke hinein. Beides wird von der Simulation sehr gut wiedergegeben. Der Unterschied zwischen beiden Konfigurationen ist zwar relativ gering, allerdings detoniert auch hier das homogene Gemisch etwas früher. Dazu werden im homogenen Gemisch tendenziell etwas höhere Drücke erzielt (s. dazu die Druckschriebe in Anhang G).

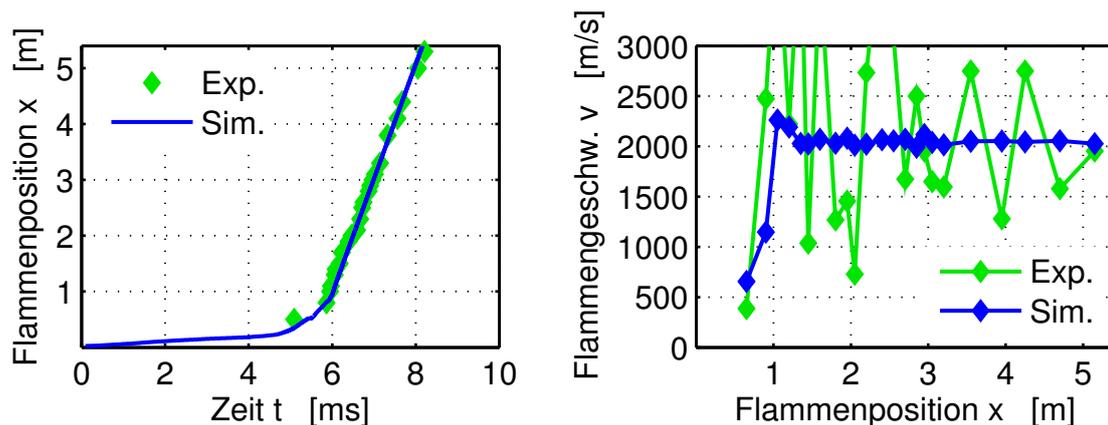


Abbildung 5.18: Auswertung der Flammenausbreitung in der Konfiguration BR60 mit 30% H₂ (homogen).

Insgesamt kann bei der Konfiguration BR60 festgestellt werden, dass bei Vorhandensein von Konzentrationsgradienten zwar ebenfalls sehr hohe Drücke erreicht werden können, wie am Beispiel der DDT durch Stoßreflexion gezeigt

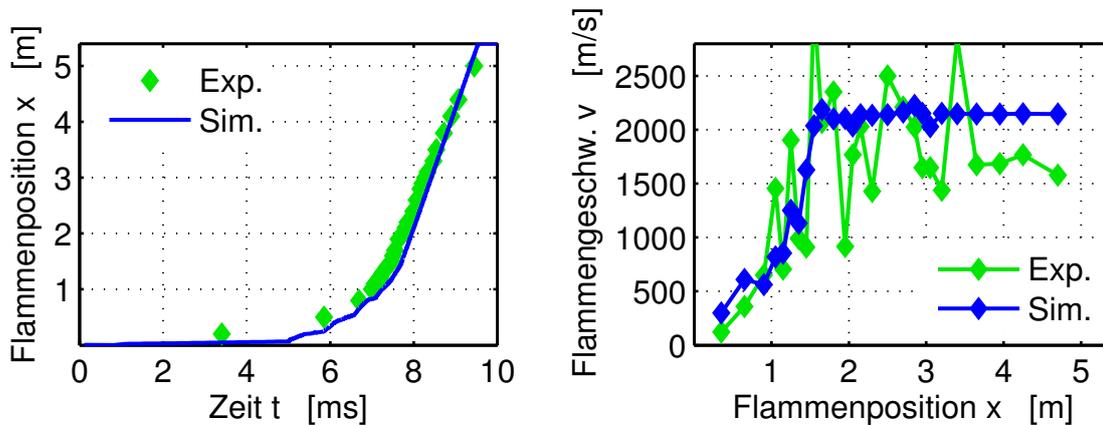


Abbildung 5.19: Auswertung der Flammenausbreitung in der Konfiguration BR60 mit 30% H_2 (mit Konzentrationsgradient).

wurde. Im Gegensatz zur Konfiguration BR30 erhöht ein Konzentrationsgradient aber nicht die DDT-Neigung gegenüber einem homogenen Gemisch, sondern verringert sie.

Um diese gegenläufige Tendenz besser zu verstehen, ist in Abb. 5.20 für die Konfiguration BR30 dargestellt, wie der Wasserstoff im unverbrannten Gemisch⁵ vor der Flamme vermischt wird, während sich die Flamme ausbreitet. Bei $t = 1,00$ ms, also kurz nach der Zündung, ist die anfängliche Schichtung gut erkennbar. Danach bildet sich aufgrund der lokal variierenden laminaren Brenngeschwindigkeit eine asymmetrische Flamme aus. Das von der Flamme verdrängte Frischgas strömt zwischen den Hindernissen hindurch, wodurch dahinter Wirbel entstehen, die die Wasserstoff-Luft-Schichtung vermischen ($t = 7,00$ ms). Dies geschieht zunächst nahezu symmetrisch mit jeweils einem großen Wirbel hinter dem oberen bzw. unteren Hindernis, wodurch Rezirkulationszonen mit fettem bzw. magerem Gemisch entstehen. Das Gebiet mittleren Wasserstoffgehalts wird eingeschnürt bzw. nach stromab verdrängt. Anschließend entstehen Asymmetrien, die vor allem auf die höhere Verdrängungswirkung aufgrund einer höheren Brenngeschwindigkeit im oberen Teil des Kanals zurückzuführen sind. Daneben spielen auch Rayleigh-Taylor-Instabilitäten eine Rolle, da teilweise Fluidpakete geringerer Dichte unter Pakete mit höherer Dichte transportiert werden. Letzter Effekt trägt ebenfalls zur Intensivierung der Durchmischung bei. Schon nach wenigen

⁵Wasserstoff im verbrannten, überstöchiometrischen Gemisch wurde hier ausgeblendet, um die Flammenkontur besser sichtbar zu machen.

Hindernissen hat die propagierende Flamme dafür gesorgt, dass sich die anfangs extremen Konzentrationsunterschiede im Bereich der Hindernisstrecke einander deutlich angenähert haben. Dennoch ist das Gemisch nach wie vor alles andere als homogen, es existieren immer noch größere Gebiete, in denen es stöchiometrisch oder leicht fett ist. Diese Verteilung scheint aufgrund der lokal erhöhten Reaktivität die DDT-Neigung gegenüber einem homogenen Gemisch mit 20% Wasserstoff zu begünstigen, da in Gebieten mit höherem Wasserstoffgehalt höhere Wärmefreisetzungsraten und damit auch höhere Druckanstiegsraten erreicht werden.

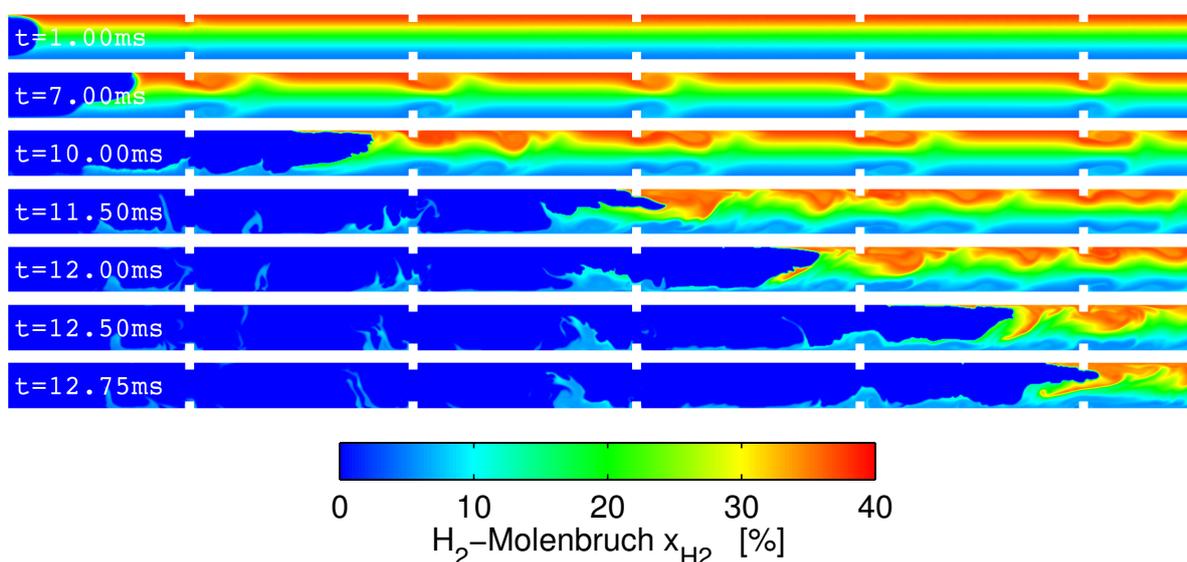


Abbildung 5.20: Vermischung des Wasserstoffs im unverbrannten Gas bei 30% Blockierrate (20% H₂, Konzentrationsgradient nach 3 s Wartezeit).

Kommt es zur DDT (hier nicht dargestellt), so breitet sich die Reaktion mit einer Geschwindigkeit aus, die um ein Vielfaches über der Geschwindigkeit der Expansionsströmung liegt, die die Vermischung verursacht. Die Reaktion kann damit die Störungen, die während der deflagrativen Phase erzeugt wurden, überholen und brennt im hinteren Teil des Kanals in ein ungestörtes Gemisch hinein, in dem der anfängliche Konzentrationsgradient noch intakt ist. Dies erklärt die ungestörte, im zeitlichen Verlauf nahezu gleichbleibende Krümmung der Detonationsfront, wie sie z.B. in Abb. 5.11 nach dem letzten Hindernis ($t > 12,52$ ms) zu sehen ist.

Betrachtet man in Abb. 5.21 den Vermischungsvorgang bei 60% Blockierrate, so fällt auf, dass von Beginn an größere, aber auch deutlich feiner strukturierte Mischungswirbel erzeugt werden, die weniger homogenisierend wir-

ken. Zwar ist die Strömungsgeschwindigkeit zwischen den Hindernissen größer als bei 30% Blockierrate, gleichzeitig entstehen aber auch höhere Scherkräfte zwischen ruhendem Gas (hinter den Hindernissen) und bewegtem Gas. Dies äußert sich in zwei Effekten. Zum einen sind bei $t = 10,50$ ms und in den darauffolgenden Bildern vor der Flamme einzelne, scharf abgetrennte Inseln mit fettem Gemisch erkennbar. Da diese allerdings klein und immer wieder von Bereichen mit magerem Gemisch umgeben sind, sind sie für die DDT-Neigung offenbar nicht förderlich. Zum anderen werden die hindurchtretenden Freistrahlen stärker abgebremst, sodass es zu einer weniger gleichmäßigen Durchmischung des Gases zwischen zwei aufeinanderfolgenden Hindernissen kommt. Stattdessen verbleibt im hinteren Teil einer Kavität, also vor dem nächsten Hindernis, die anfängliche Schichtung relativ ungestört. Dass auch dies DDT-hemmend wirkt, kann nicht allein durch die Betrachtung der Mischung, sondern nur unter Einbeziehung der Gasdynamik erklärt werden.

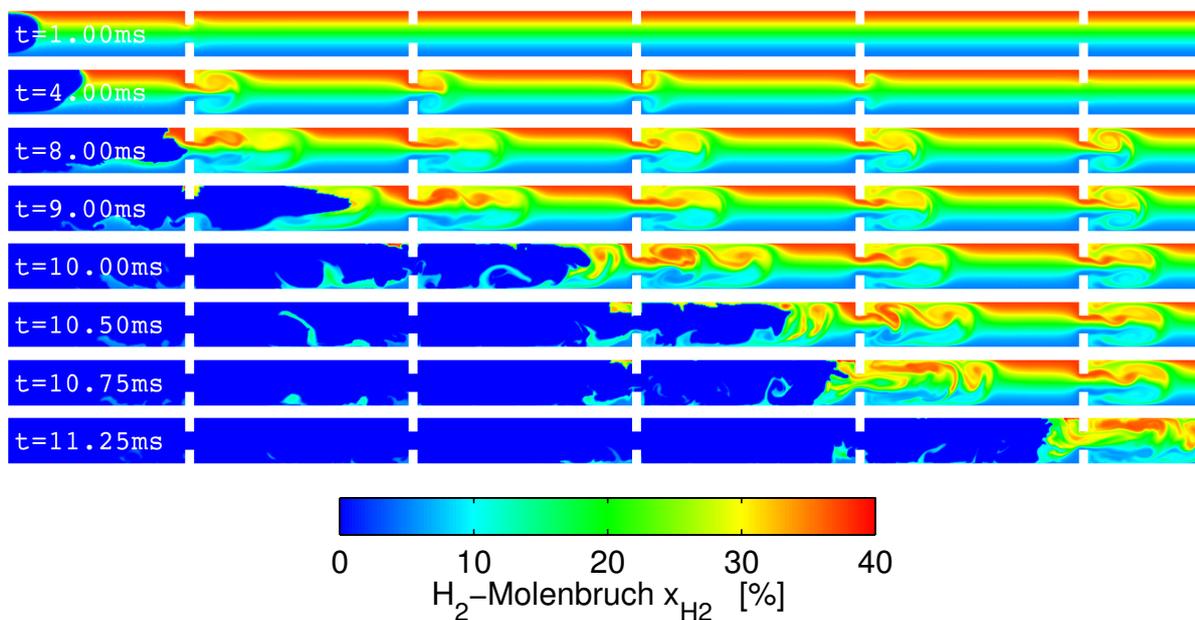


Abbildung 5.21: Vermischung des Wasserstoffs im unverbrannten Gas bei 60% Blockierrate (20% H_2 , Konzentrationsgradient nach 3 s Wartezeit).

Einerseits ist das im oberen Teil des Kanals verbleibende leicht fette Gemisch unmittelbar vor dem nächsten Hindernis zwar förderlich für die Ausbildung schneller Flammen. Andererseits wirken die Hindernisse mit 60% Blockierrate aber auch hinderlich für die DDT. Sie blocken einen Großteil der starken Druckwellen, die gerade in diesem oberen Bereich entstehen, ab. Die während der Flammenbeschleunigung entstehenden Stoßfronten können nur 40% der

Querschnittsfläche beim Übergang in die nächste Kavität nutzen, wobei sie nach dem Hindernis zunächst wieder transversal expandieren und damit axialen Impuls verlieren. Der Aufbau einer starken führenden Stoßfront, wie er für DDT notwendig ist, wird somit erschwert, wenn die Hindernisse zu groß sind.

Dies ist in Abb. 5.22 eindrucksvoll gezeigt. In dieser Abbildung ist links das Temperaturfeld und rechts der Druck dargestellt. Zusätzlich ist die $Ma=1$ -Linie (pink) eingezeichnet, die den Übergang von Unterschall- auf Überschallströmung markiert. Zum Zeitpunkt $t = 11,12$ ms nähert sich die Flamme dem Hindernis an. Zuvor wurden bereits mehrere Druckwellen erzeugt,

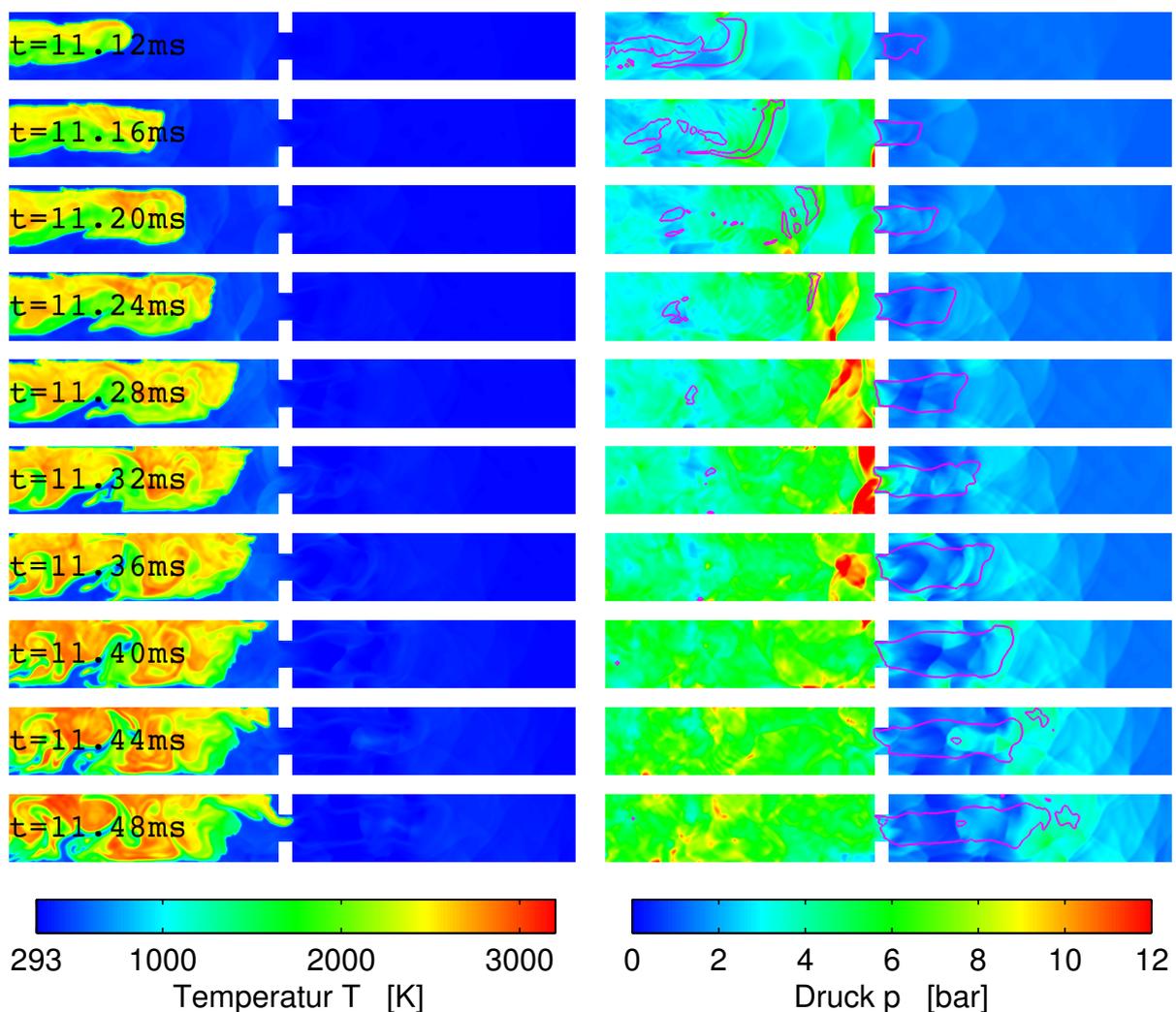


Abbildung 5.22: Stoß-Flammen-Interaktion an einem Hindernis mit Blockiertrate 60%. Im Druckplot ist auch die $Ma=1$ -Linie dargestellt.

von denen die ersten das Hindernis schon passiert haben. Dabei wurden die Druckwellen jeweils auf 60% der Querschnittsfläche reflektiert, während sie in der Mitte, auf 40% der Fläche, hindurchtraten und anschließend wieder expandierten. Ein starker, gekrümmter Stoß ist unmittelbar davor, auf das Hindernis zu treffen. Aufgrund des Druckunterschieds über das Hindernis hinweg wirkt dieses wie eine blockierte Düse, in deren engstem Querschnitt $Ma = 1$ erreicht wird. Der hindurchtretende Massenstrom ist somit durch die Gasdynamik begrenzt. Zum Zeitpunkt $t = 11,16$ ms wird der starke Stoß reflektiert, wodurch eine in negativer x -Richtung propagierende Welle entsteht. Dieser Vorgang wiederholt sich ein weiteres Mal, dieses Mal mit einem noch stärkeren Stoß zwischen $t = 11,24$ ms und $t = 11,32$ ms. Da sich die oben und unten reflektierten Stöße beim Zurücklaufen wieder zu einem einzigen Stoß über die gesamte Kanalhöhe vereinigen, kommt es in ihrem Nachlauf zu einer immer stärkeren Strömung in negativer x -Richtung, sodass die Flamme vor dem Hindernis immer weiter abgebremst wird. Der Teil der Druckstörungen, der zwischen den Hindernissen hindurchgetreten ist, propagiert dagegen mit nahezu unverminderter Geschwindigkeit bereits auf das nächste Hindernis zu. Dadurch wird die enge Kopplung zwischen Flamme und Druckstörungen, die vor dem Hindernis entsteht, bei Vorhandensein zu großer Hindernisse immer wieder zerstört. Erst bei $t = 11,48$ ms gelangt die Flamme ins Einflussgebiet der blockierten Düse, wo große Geschwindigkeiten in positiver x -Richtung vorliegen. Dadurch wird die Flamme in die nächste Kammer befördert, wo neue, starke Stöße generiert werden und der eben dargestellte Vorgang sich wiederholt.

Auch wenn große Blockierraten die anfängliche Flammenbeschleunigung erleichtern (man vergleiche die Zeitachse zwischen Simulationen mit 30% und 60% Blockierrate bei gleichen Wasserstoffgehalten, z.B. Abb. 5.4 und Abb. 5.13), so konnte hiermit gezeigt werden, dass sie für das Erreichen von DDT hinderlich sein können. Insbesondere bei Vorhandensein von Konzentrationsgradienten kommt dies zum Tragen, da die Flamme vorrangig auf der Oberseite des Kanals brennt und von den Hindernissen noch intensiver behindert wird als eine Flamme in einem homogenen Gemisch, deren Flammenspitze im Allgemeinen in der Mitte des Kanals propagiert. Wie man aus Abb. 5.22 folgern kann, würde eine solche Flamme die $Ma=1$ -Linie deutlich früher erreichen als eine asymmetrische Flamme, deren Spitze erst gegen die Druckwellen, die vom oberen Hindernis reflektiert werden, ankämpfen muss.

5.4 Drucklasten auf die umgebende Struktur

Während bei den bisher gezeigten Ergebnissen der Schwerpunkt auf der Berechnung und dem Verständnis von DDT-Vorgängen lag, soll nun noch ein Blick auf die Drucklasten, die eine stationär propagierende Detonation nach Passieren des letzten Hindernisses auf die Kanalwände ausübt, geworfen werden. Im Unterschied zu den bisherigen Rechnungen wird dazu der Druck sowohl auf der oberen als auch auf der unteren Wand erfasst. Die numerischen „Drucksensoren“ werden dazu in einem engen Abstand von nur 8 mm gesetzt. Abb. 5.23 zeigt das Ergebnis für eine Detonation, die in einem homogenen Gemisch mit 25% H_2 propagiert. Um zu zeigen, dass die Detonation voll ausgebildet ist und keine Schwankungen entlang der Ausbreitungsrichtung auftreten, sind die Druckschriebe von jeweils fünf Sensoren auf der oberen und unteren Kanalseite (jeweils mit Abstand 8 mm) dargestellt. Sobald die vollausbildete Detonation einmal erreicht ist, führt ein Versetzen der Sensoren zu keiner Veränderung der Ergebnisse mehr, daher ist die absolute Position der Sensoren nicht relevant. Da die Detonationsfront annähernd planar ist, zeigen auch die Sensoren oben und unten jeweils nahezu simultane Druckschriebe.

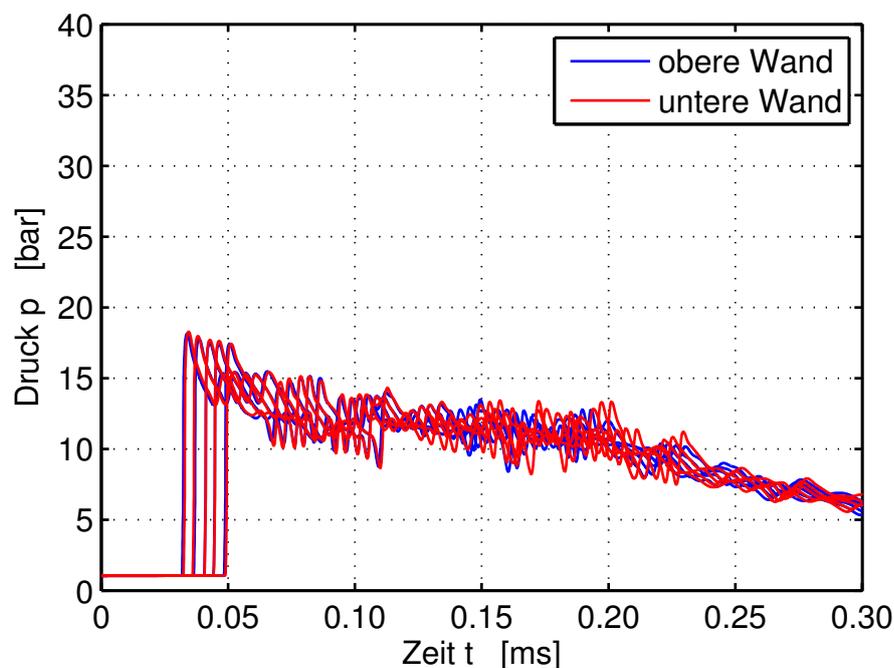


Abbildung 5.23: Verteilung der Drucklasten auf die obere und untere Wand in einem homogenen Gemisch (H_2 -Gehalt 25%).

Bei Eintreffen der Stoßfront springt der Druck auf ca. 18 bar. Die nachfolgende Expansionswelle lässt den Druck langsam absinken.

Ganz anders sieht es im Fall mit Konzentrationsgradienten aus (Abb. 5.24). Da die Stoßfront stark gekrümmt ist, werden die Drucksensoren an der oberen Wand zuerst erreicht. Sie zeigen Spitzendrücke von etwa 15 bar. An der unteren Wand werden dagegen Spitzendrücke von etwa 38 bar gemessen. Dies ist besonders brisant, wenn man bedenkt, dass an der unteren Wand nur 7% Wasserstoff vorliegen, an der oberen dagegen 45%. Die zu erwartenden Chapman–Jouguet–Drücke homogener Gemische sind in Tabelle 5.1 dargestellt.

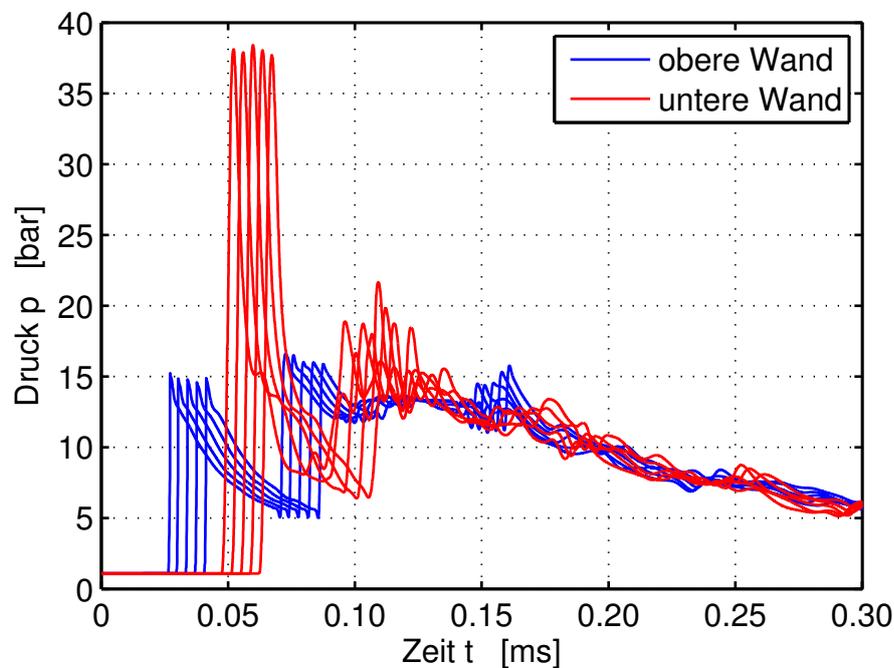


Abbildung 5.24: Verteilung der Drucklasten auf die obere und untere Wand bei Vorliegen eines Gradienten (H_2 -Gehalt 25%).

x_{H_2}	p_{CJ}
7%	6,5 bar
25%	15,2 bar
45%	14,9 bar

Tabelle 5.1: Chapman–Jouguet–Drücke, berechnet mit *Cantera* [86].

Während an der oberen Wand ein mit dem homogenen Gemisch vergleichbarer Spitzendruck nahe an dem zugehörigen CJ–Druck erreicht wird, werden an

der unteren Wand trotz Wasserstoffmangel keine geringeren, sondern deutlich höhere Drücke erzielt. Die Ursache hierfür liegt wieder in der speziellen Stoß-Struktur, die der Konzentrationsgradient mit sich bringt. Wie schon in Kap. 5.2 geschildert, erfolgt die Reflexion des führenden Stoßes an der unteren Wand über einen Mach-Stamm, der aufgrund der lokal geringeren Schallgeschwindigkeit eine größere Kompression bewirkt als der senkrechte Stoß an der oberen Wand. Dass sowohl oben als auch unten die Drücke nach einem ersten Absinken wieder sprunghaft ansteigen, ist auf die sekundären Stoßreflexionen, die in Abb. 5.25 erkennbar sind, zurückzuführen. Erst danach haben sich die Drücke über die ganze Kanalhöhe einander soweit angeglichen, dass sie wie im homogenen Fall simultan absinken.

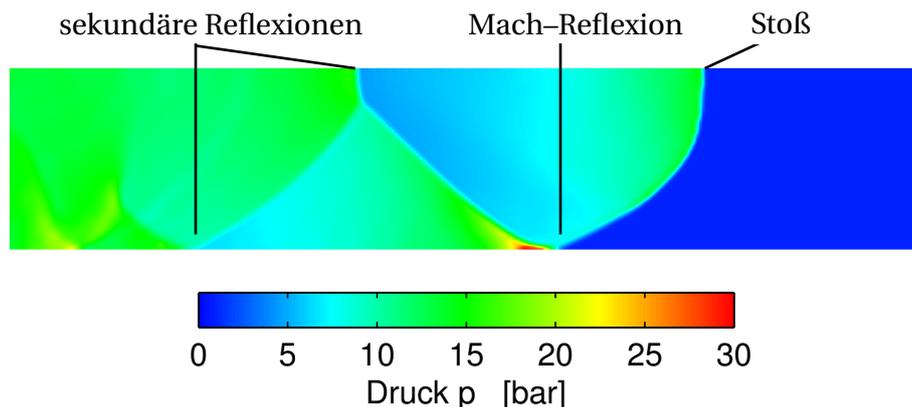


Abbildung 5.25: Druckverteilung in einer Detonationsfront mit Konzentrationsgradient (H₂-Gehalt 25%).

Weitere Rechnungen konnten zeigen, dass selbst bei Absenkung des Wasserstoffgehalts an der unteren Wand auf 0% die Drücke immer noch diejenigen an der oberen Wand übersteigen können, wenn der Gradient stark genug ist, um einen Mach-Stamm auszubilden.

Auch wenn die Druckspitzen nur für relativ kurze Zeit anliegen, äußert sich der Mach-Stamm nicht nur in den Spitzendrücken, sondern auch im Impuls. Begrenzt man die Integration in Gl. 4.3 auf die ersten 45 μ s nach dem Eintreffen der ersten Stoßfront (sowohl an der oberen als auch an der unteren Wand entspricht das dem Zeitintervall zwischen der ersten Druckspitze und den se-

kundären Reflexionen, s. Abb. 5.24), so erhält man an der oberen Wand einen flächenbezogenen Impuls von

$$I_{\text{oben}} = \int_{t_0}^{t_0+45\mu\text{s}} (p - p_0) dt = 3,32 \cdot 10^4 \frac{\text{Ns}}{\text{m}^2} , \quad (5.3)$$

an der unteren Wand hingegen

$$I_{\text{unten}} = \int_{t_0}^{t_0+45\mu\text{s}} (p - p_0) dt = 5,67 \cdot 10^4 \frac{\text{Ns}}{\text{m}^2} . \quad (5.4)$$

Neben dem um den Faktor 2,5 höheren Spitzendruck bringt die erste Stoßfront also auch einen um 70% höheren Impulseintrag mit sich. Im Hinblick auf die Belastungsgrenzen von Reaktor-Containments relativieren sich diese Unterschiede allerdings etwas. Sievers et al. [183] konnten in Finite-Elemente-Simulationen zur Bestimmung der Grenztragfähigkeit eines Stahl-Containments bei lokalen dynamischen Druckspitzen zeigen, dass bei Spitzenbelastungen oberhalb von 10 bar und Belastungsdauern zwischen 16 ms und 100 ms die effektiven Spannungen in der Containment-Struktur nicht die Maximalspannungen aus quasi-statischen Simulationen überschreiten. Zwar kann eine nennenswerte Plastifizierung der Struktur erfolgen, die Integrität des Containments ist dadurch aber nicht gefährdet. Dagegen erzeugen Spitzenbelastungen unterhalb von 10 bar bei einer Belastungsdauer im Bereich von 32 ms Verformungen der Containment-Struktur weit über dem quasi-statischen Äquivalent, da damit eine globale Eigenfrequenz des Containments angeregt wird [183]. Die in Abb. 5.24 gezeigten, sehr viel kürzeren Druckspitzen stellen somit aus dem Blickwinkel der Containment-Integrität zwar sehr hohe Maximalbelastungen dar, die lokal zu Plastifizierung der Struktur führen können, sind mit einer Dauer von deutlich unter 1 ms aber zu kurz, um ein Reaktor-Containment zu gefährden.

Nichtsdestotrotz muss festgehalten werden, dass sich die bisher übliche Annahme, homogene, nah-stöchiometrische Gemische würden aufgrund ihrer Reaktivität auch das größte Gefährdungspotenzial mit sich bringen, als falsch herausgestellt hat. Vielmehr spielt die räumliche Verteilung des Brennstoffs eine entscheidende Rolle bei der Beurteilung des Gefährdungspotenzials und sollte in Zukunft, speziell wenn es um die Integrität kleinerer Strukturen mit geringer Trägheit geht, berücksichtigt werden.

5.5 Fazit

Die gezeigten Ergebnisse belegen, dass der entwickelte Solver in der Lage ist, eine Vielzahl unterschiedlicher Versuche in der GraVent-Anlage in sehr guter Übereinstimmung mit dem Experiment nachzurechnen. Dies betrifft sowohl reine Deflagrationsvorgänge als auch Experimente, in denen DDT auftrat. Die beobachteten DDT-Phänomene umfassten Transitionen, die durch Stoßreflexion an Wänden hervorgerufen wurden, Transitionen, die aus der turbulenten Strömung zwischen führendem Stoß und Flamme entsprangen, sowie Transitionen, die durch Stoß-Flammen-Interaktion ausgelöst wurden. Eine spezielle Betrachtung oder Modellierung des in der Literatur (s. Kap. 2.4) häufig als DDT-Ursache genannten SWACER-Mechanismus war nicht nötig, um die makroskopischen, experimentell beobachteten DDT-Vorgänge zu simulieren. Die Auflösung eines SWACER-Vorgangs wäre, genauso wie die Auflösung transversaler Detonationsinstabilitäten, auf den verwendeten Gittern auch gar nicht möglich gewesen. Die in Kap. 2.4 genannten Anforderungen an ein gutes DDT-Modell konnten somit bestätigt werden.

Es konnte gezeigt werden, dass das Vorhandensein eines Konzentrationsgradienten die DDT-Neigung sowohl erhöhen als auch verringern kann. Im konkreten Fall erhöhte ein Gradient in einem Kanal mit 30% Blockierrate die DDT-Neigung, während sie in einem Kanal mit 60% verringert wurde, jeweils verglichen mit einem homogenen Gemisch des gleichen Wasserstoffgehalts. Bevor dieser Befund auch auf andere Kanalgeometrien erweitert wird, empfehlen sich allerdings weitere Rechnungen bzw. Experimente mit anderen Hindernisgeometrien. So erscheint es z.B. naheliegend, dass eine Umorientierung der Hindernisse (vertikal statt horizontal) zu anderen Ergebnissen führen wird, da dann ein Fortschreiten der Reaktionsfront an der oberen Wand nicht mehr in der Form unterbunden wird, wie es in dieser Arbeit am Kanal mit 60% Blockierrate beobachtet wurde.

Die gängige Erwartung, dass homogene, nah-stöchiometrische Gemische das höchste Gefährdungspotenzial aufweisen, muss ausdrücklich zurückgewiesen werden, da bei Vorhandensein eines Konzentrationsgradienten in mageren Gemischen weitaus höhere Drucklasten auftreten können. Dies betrifft zum einen den DDT-Vorgang selbst, dessen Heftigkeit wesentlich von dem

auslösenden Mechanismus abhängt, als auch die Lasten, die eine Detonation nach vollzogener Transition auf die umgebende Struktur ausübt.

Der entwickelte Solver stellt ein gutes Werkzeug zur Durchführung von Parameterstudien und zur Ergänzung sicherheitsrelevanter Experimente dar, da bei relativ geringem Rechenaufwand Flammenbeschleunigungs- und DDT-Vorgänge auf Laborskala simuliert werden können, ohne sämtliche feinskalige Details aufzulösen.

6 Kritische Analyse und Ausblick

Um eine hohe Qualität und Verlässlichkeit von Simulationsergebnissen zu gewährleisten, haben sich im Bereich der Reaktorsicherheit sogenannte *Best Practice Guidelines* [145] etabliert. Diese enthalten unter anderem Empfehlungen für die Variation von Parametern und Untermodellen, um die Sensitivität von Benutzereingaben auf das erhaltene Endergebnis zu quantifizieren. Den *Best Practice Guidelines* entsprechend wurden in dieser Arbeit beispielsweise Gitterkonvergenzstudien durchgeführt, die bei den GraVent-Experimenten zu dem Ergebnis führten, dass eine Mindestauflösung des Rechengitters von 2 mm erforderlich ist und feinere Gitter zu keinen signifikanten Änderungen mehr führten. Bei der Anwendung auf andere Experimente muss die erforderliche Gitterauflösung neu bestimmt werden. Außerdem ist bei der Anwendung in komplexeren Geometrien bei abnehmender Gitterqualität (z.B. unvorteilhafte Gitterwinkel, große Seitenverhältnisse, stark unterschiedliche Zellvolumina [4, 70, 145]) mit neuen Fehlerquellen zu rechnen. Im Gegensatz zu impliziten Rechenverfahren spielt dagegen die Wahl des Zeitschritts bei dem expliziten Riemann-Solver keine wesentliche Rolle im Hinblick auf die Rechengenauigkeit, sondern stellt lediglich ein Stabilitätskriterium dar: Für CFL-Zahlen von 0,4 und kleiner ist der Solver stabil. Eine Verringerung des Zeitschritts verbessert das Ergebnis nicht merklich. Um einen ausreichenden Sicherheitsabstand von der Stabilitätsgrenze einzuhalten, wurden alle Rechnungen in dieser Arbeit mit einer CFL-Zahl von 0,3 durchgeführt.

Da in dieser Arbeit nicht nur ein einzelnes Modell entwickelt wurde, sondern ein vollständiger CFD-Solver inklusive Strömungslöser, Deflagrationsmodell und Selbstzündmodell, kann nicht die gesamte Parameterbreite aller Einflussfaktoren auf das Endergebnis getestet werden. Darüber hinaus ist die hier verfolgte Anwendung (Simulation eines instationären Verbrennungsvorgangs inklusive möglicher DDT) sehr komplex und der Einfluss einzelner Parameter kann nicht anhand einer einzelnen skalaren Zielgröße, wie in den *Best Practice Guidelines* empfohlen [145], gemessen werden. Daher wurde bei der Entwicklung des vorliegenden Solvers Wert darauf gelegt, die Qualität der Mo-

dellierung so weit wie möglich durch Vergleich mit analytischen Lösungen zu belegen (Kap. 3.3.4) oder durch analytische Überlegungen zu begründen (Kap. 3.4.2). Der so konstruierte Solver erfordert keine weiteren Benutzereingaben wie empirische Vorfaktoren oder die Auswahl eines spezifischen Modells.

Im Hinblick auf eine mögliche Weiterentwicklung des Solvers bleibt festzuhalten, dass er bisher nur auf die relativ kleinskaligen Experimente in der GraVent-Anlage angewendet wurde, deren Geometrie auch in 2D-Rechnungen sehr gut abgebildet werden kann. Bevor von einem verlässlichen Rechenverfahren gesprochen werden kann, sind weitere Rechnungen in größeren und komplexeren Geometrien notwendig. Dazu bietet sich beispielsweise die Simulation von Flammenbeschleunigungs- und DDT-Vorgängen in runden Explosionsrohren [56, 117] oder großskaligen Experimenten [36, 72] an. Beim Übergang auf 3D-Simulationen ist allerdings ein erheblicher Zuwachs an Rechenzeitbedarf zu erwarten. Während die 2D-Nachrechnung eines GraVent-Experiments etwa 100 CPU-Stunden benötigt und somit schon bei geringem Parallelisierungsgrad in vertretbarer Zeit Ergebnisse erzielt werden, würde durch Hinzunahme der dritten Dimension (Kanalbreite 300 mm) bei gleicher Diskretisierung (2 mm Gitterweite) die Anzahl der Gitterzellen um den Faktor 150 steigen. Nimmt man als Fernziel die in der Einleitung genannte Nachrechnung von dreidimensionalen Verbrennungsvorgängen in der Größenordnung eines Reaktor-Containments an, so wird klar, dass trotz anhaltender Steigerung der verfügbaren Rechenkapazitäten mit einer Anwendung des in dieser Arbeit entwickelten Modells auf Reaktorskala in näherer Zukunft nicht zu rechnen ist. Daher ist es ratsam, Ansätze weiterzuverfolgen, die die für eine akkurate Beschreibung der Flammenausbreitung notwendige Gitterauflösung weiter verringern. Ein möglicher Weg in diese Richtung besteht darin, das in dieser Arbeit vorgestellte Subgrid-Modell (Kap. 3.5.2) weiterzuentwickeln, indem man die dreidimensionale Orientierung von Flammenfronten innerhalb einer Gitterzelle rekonstruiert. Derartige Ansätze existieren bereits für strukturierte Gitter [108, 185]. Gelingt es, diese auf unstrukturierte Gitter zu übertragen, so bietet dies die Möglichkeit, konvektive und diffusive Flüsse jeweils getrennt für verbranntes und unverbranntes Gemisch zu berechnen, sodass nicht nur die Reaktion, sondern auch die Transportprozesse auf Skalen deutlich unterhalb der Auflösung des CFD-Gitters erfasst werden können. Inwieweit eine mit immer größeren Gittern zwangsläufig einhergehende Ver-

einfachung komplexer Geometrien erfolgen kann, ohne die Qualität der Ergebnisse zu beeinträchtigen, muss sich anschließend erweisen.

7 Zusammenfassung

Bei der sicherheitstechnischen Bewertung von Kernkraftwerken stellt die mögliche Freisetzung von Wasserstoff während eines schweren Unfalls ein großes Problem dar. Um verlässliche Sicherheitskonzepte zu erarbeiten, muss analysiert werden, unter welchen Umständen Wasserstoff–Luft–Gemische deflagrativ abbrennen und unter welchen Umständen eine Deflagrations–Detonations–Transition (DDT) auftritt. Angesichts des aktuellen Wissensstandes werden dazu Versuche in Explosionskanälen sowie numerische Simulationen durchgeführt. Derzeit gängige Simulationstools haben den Nachteil, dass sie meist auf die Simulation entweder einer Flammenbeschleunigung oder einer Detonation beschränkt sind und der Nutzer anhand von empirischen Kriterien zu entscheiden hat, ob der Übergang zwischen beiden Regimes in Betracht gezogen werden muss. Andere Tools, die eine DDT simulieren können, erfordern dagegen in der Regel eine immens hohe räumliche Diskretisierung, sodass sie für technisch relevante Probleme kaum in Betracht kommen.

Mit dem in dieser Arbeit entwickelten CFD–Solver wurde versucht, eine Grundlage zur Überbrückung dieser Problematik zu schaffen. Dazu wurde in der CFD–Umgebung *OpenFOAM* ein dichtebasierter Riemann–Solver implementiert, der in der Lage ist, Verdichtungsstöße in Gasen mit temperaturabhängigen Stoffwerten akkurat wiederzugeben. Zur Beschreibung der chemischen Reaktion wurde ein Deflagrationsmodell mit einem Selbstzündmodell gekoppelt. Im Deflagrationsmodell wird die Flammenausbreitung über eine Verbrennungsfortschrittsvariable beschrieben. Der reaktive Quellterm berechnet sich aus dem Modell von Weller, wobei die turbulente Brenngeschwindigkeit eine Funktion der laminaren Brenngeschwindigkeit und der Flammenfaltung ist. Das Selbstzündmodell basiert auf dem Transport eines fiktiven Radikals, das bei ausreichender Konzentration zur Selbstzündung führt. Die Ermittlung der dafür notwendigen lokalen Zündverzugszeit geschieht zeitsparend mittels einer Tabelle, die vorab mit *Cantera* erstellt wurde. Um die Genauigkeit des Modells zu erhöhen, werden auch Diskontinuitäten, die vom CFD–Solver nicht aufgelöst werden können, durch Rekonstruk-

tion aus den benachbarten Zellen berücksichtigt. Dies ermöglicht es, das Fortschreiten einer Reaktionsfront auch auf Subgrid-Skala wiederzugeben und dessen Auswirkung auf die Selbstzünd-Chemie zu erfassen.

Der Solver kann sowohl auf homogene als auch auf inhomogene Gemische angewendet werden. Bei zweidimensionalen Nachrechnungen von Experimenten in einem Explosionskanal zeigte sich, dass das Vorhandensein eines Konzentrationsgradienten die DDT-Neigung gegenüber einem homogenen Gemisch desselben Wasserstoffgehalts sowohl erhöhen als auch verringern kann. Entscheidend ist die jeweilige Hinderniskonfiguration im Explosionskanal. Bei einer Blockierrate von 30% war die DDT-Neigung durch den Konzentrationsgradienten deutlich erhöht, da die Flammenbeschleunigung vorrangig entlang der wasserstoffreichen Gebiete erfolgt, die dabei entstehenden Verdichtungsstöße aber gleichzeitig zu hohen Druckanstiegen im mageren Gebieten, wo die Schallgeschwindigkeit geringer ist, führen können. Bei einer Blockierrate von 60% war die DDT-Neigung dagegen verringert, da die großen Hindernisse die Ausbreitung von Druckwellen zu sehr behindern.

In den durchgeführten Simulationen wurden verschiedene Arten von DDT-Phänomenen beobachtet, die entweder der unmittelbaren Nähe der Flammenfront entspringen oder durch die Reflexion starker Stöße an Wänden zu Stande kommen. Trotz der sehr geringen Gitterauflösung von nur 2 mm waren die Ergebnisse stets in sehr guter Übereinstimmung mit den jeweiligen Experimenten. Die Hypothese, dass es zur makroskopischen Simulation eines DDT-Vorgangs nicht der Erfassung sämtlicher kleinskaliger Phänomene bedarf, konnte somit bestätigt werden. Zudem konnten aus den durchgeführten Simulationen Erkenntnisse gezogen werden, die aus Experimenten aufgrund der begrenzten Messtechnik nicht gewonnen werden konnten. Beispielsweise konnte gezeigt werden, dass ein Gemisch, in dem DDT erst spät eintritt (z.B. nach Reflexion eines Stoßes an einer Wand), unter Umständen ein höheres Gefahrenpotenzial aufweist als ein hoch reaktives Gemisch, in dem eine DDT kurz nach der Zündung beobachtet wird. Kommt es zur Detonation, so können Gemische mit einem ausreichend starken Konzentrationsgradienten höhere Drucklasten auf die umgebende Struktur ausüben als homogene Gemische desselben oder sogar höheren Brennstoffgehalts. Dies sollte bei sicherheitsrelevanten Analysen in Zukunft berücksichtigt werden.

Aufgrund der Vielzahl unterschiedlicher Vorgänge, die mit den durchgeführten Simulationen erklärt werden konnten, kann gefolgert werden, dass der in dieser Arbeit entwickelte Solver ein wertvolles Werkzeug zur Simulation von Flammenbeschleunigungs- und DDT-Vorgängen darstellt. Der Solver ist numerisch sehr effizient, da er verglichen mit einem inerten Strömungssolver nur wenige zusätzliche Transportgleichungen enthält und bei der Berechnung der chemischen Reaktion auf die Auswertung numerisch steifer Quellterme (z.B. Arrhenius-Ansätze) verzichtet werden kann. Darüber hinaus kommt er mit relativ groben Gittern zurecht, was ihn für Parameterstudien sowie die Unterstützung experimenteller Arbeiten prädestiniert.

Im Hinblick auf das Fernziel, in Zukunft auch Deflagrations- und Detonationsvorgänge auf der Größenskala eines Reaktor-Containments mit CFD-Methoden berechnen zu können, stellt der in dieser Arbeit entwickelte Solver eine solide Ausgangsbasis dar. Es bietet sich die Entwicklung weiterer Untermodelle an, die die erforderliche räumliche Auflösung des Rechengebiets weiter verringern können.

Literaturverzeichnis

- [1] Abdel-Gayed, R. und Bradley, D.: Criteria for Turbulent Propagation Limits of Premixed Flames. *Combustion and Flame*, 62:61–68, 1985.
- [2] Achasov, O. und Penyazkov, O.: Dynamics Study of Detonation–Wave Cellular Structure: 1. Statistical Properties of Detonation Wave Front. *Shock Waves*, 11:297–308, 2002.
- [3] Anderson, J.: Modern Compressible Flow. 3. Auflage. McGraw–Hill, 2004.
- [4] ANSYS: CFX Reference Guide, Release 11.0, 2006.
- [5] Ardey, N.: Struktur und Beschleunigung turbulenter Wasserstoff–Luft–Flammen in Räumen mit Hindernissen. Dissertation, Technische Universität München, 1998.
- [6] Arnould, F.: State–of–the–Art Report on Passive Autocatalytic Recombiners (PARSOAR). Technischer Bericht, Euratom, EC, 2002.
- [7] Aslam, T., Bdzil, J. und Stewart, D.: Level Set Methods Applied to Modeling Detonation Shock Dynamics. *Journal of Computational Physics*, 126:390–409, 1996.
- [8] Auban, O., Zboray, R. und Paladino, D.: Investigation of Large–Scale Gas Mixing and Stratification Phenomena Related to LWR Containment Studies in the PANDA Facility. *Nuclear Engineering and Design*, 237:409–419, 2007.
- [9] Aung, K., Hassan, M. und Faeth, G.: Flame Stretch Interactions of Laminar Premixed Hydrogen/Air Flames at Normal Temperature and Pressure. *Combustion and Flame*, 109:1–24, 1997.

- [10] Aung, K., Hassan, M. und Faeth, G.: Effects of Pressure and Nitrogen Dilution on Flame/Stretch Interactions of Laminar Premixed $H_2/O_2/N_2$ Flames. *Combustion and Flame*, 112:1–15, 1998.
- [11] Austin, J.: The Role of Instability in Gaseous Detonation. Dissertation, California Institute of Technology, 2003.
- [12] Baker, W., Cox, P., Westine, P., Kulesz, J. und Strehlow, R.: Explosion Hazards and Evaluation. Elsevier, 1983.
- [13] Baritaud, T., Poinot, T. und Baum, M. (Hrsg.): Direct Numerical Simulation for Turbulent Reacting Flows. Editions Technip, 1996.
- [14] Bartenev, A. und Gelfand, B.: Spontaneous Initiation of Detonations. *Progress in Energy and Combustion Science*, 26:29–55, 2000.
- [15] Bartknecht, W. und Zwahlen, G.: Explosionsschutz: Grundlagen und Anwendung. Springer, 1993.
- [16] Bartlmä, F.: Gasdynamik der Verbrennung. Springer, 1975.
- [17] Bauwens, C., Bauwens, L. und Wierzba, I.: Accelerating Flames in Tubes – an Analysis. *Proceedings of the Combustion Institute*, 31:2381–2388, 2007.
- [18] Berthelot, M.: Sur la vitesse de propagation des phénomènes explosifs dans les gaz. *Comptes Rendus Hebdomadaires des Séances de l'Académie des Sciences*, 93:18–22, 1881.
- [19] Berthoud, G.: Vapor Explosions. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 32: 573–611, 2000.
- [20] Bird, R., Stewart, W. und Lightfoot, E.: Transport Phenomena. 2. Auflage. Wiley, 2001.
- [21] Bjerketvedt, D. und Mjaavatten, A.: A Hydrogen–Air Explosion in a Process Plant: A Case History. *International Conference on Hydrogen Safety, Pisa, Italy*, 2005.
- [22] Bjerketvedt, D., Bakke, J. und Wingerden, K. van: Gas Explosion Handbook. *Journal of Hazardous Materials*, 52:1–150, 1997.

-
- [23] Borghi, R.: On the Structure and Morphology of Turbulent Premixed Flames. In: Casci, C. (Hrsg.): *Recent Advances in the Aerospace Sciences*, S. 117–138. Plenum Press, 1985.
- [24] Borghi, R.: Turbulent Combustion Modelling. *Progress in Energy and Combustion Science*, 14:245–292, 1988.
- [25] Borm, O.: Instationäre numerische Untersuchung der aerodynamischen Rotor–Stator–Interaktion in einem Radialverdichter. Dissertation, Technische Universität München, 2012.
- [26] Bourlioux, A. und Majda, A.: Theoretical and Numerical Structure for Unstable One–Dimensional Detonations. *SIAM Journal on Applied Mathematics*, 51:303–343, 1991.
- [27] Bradley, D., Lawes, M. und Liu, K.: Turbulent Flame Speeds in Ducts and the Deflagration/Detonation Transition. *Combustion and Flame*, 154:96–108, 2008.
- [28] Brandl, A.: Anwendung einer konditionierten Skalar–Transport–PDF–Methode auf die Large–Eddy Simulation zur Beschreibung der turbulenten nicht–vorgemischten Verbrennung. Dissertation, Universität der Bundeswehr München, 2010.
- [29] Brandt, M., Polifke, W., Ivancic, B., Flohr, P. und Paikert, B.: Auto–Ignition in a Gas Turbine Burner at Elevated Temperature. *ASME Turbo Expo, Atlanta, GA, USA*, 2003.
- [30] Bray, K.: Methods of Including Realistic Chemical Reaction Mechanisms in Turbulent Combustion Models. In: Warnatz, J. und Jaeger, W. (Hrsg.): *Complex Chemical Reaction Systems*, Band 47 in: Springer Series in Chemical Physics, S. 356–375. Springer, 1986.
- [31] Bray, K. und Moss, J.: A Unified Statistical Model of the Premixed Turbulent Flame. *Acta Astronautica*, 4:291–319, 1977.
- [32] Bray, K., Champion, M., Libby, P. und Swaminathan, N.: Finite Rate Chemistry and Presumed PDF Models for Premixed Turbulent Combustion. *Combustion and Flame*, 146:665–673, 2006.

- [33] Breitung, W.: Safety Analysis of Hydrogen Vehicles and Infrastructure. In: Léon, A. (Hrsg.): Hydrogen Technology: Mobile and Portable Applications, S. 335–376. Springer, 2008.
- [34] Breitung, W. und Royl, P.: Procedure and Tools for Deterministic Analysis and Control of Hydrogen Behavior in Severe Accidents. *Nuclear Engineering and Design*, 202:249–268, 2000.
- [35] Breitung, W., Chan, C., Dorofeev, S., Eder, A., Gerland, B., Heitsch, M., Klein, R., Malliakos, A., Shepherd, J., Studer, E. und Thibault, P.: Flame Acceleration and Deflagration-to-Detonation Transition in Nuclear Safety. Technischer Bericht, OECD State-of-the-Art Report by a Group of Experts, NEA/CSNI/R(2000)7, 2000.
- [36] Breitung, W., Dorofeev, S., Kotchourko, A., Redlinger, R., Scholtyssek, W., Bentaib, A., L'Heriteau, J.-P., Pailhories, P., Eyink, J., Movahed, M., Petzold, K.-G., Heitsch, M., Alekseev, V., Denkevits, A., Kuznetsov, M., Efimenko, A., Okun, M., Huld, T. und Baraldi, D.: Integral Large Scale Experiments on Hydrogen Combustion for Severe Accident Code Validation-HYCOM. *Nuclear Engineering and Design*, 235:253 – 270, 2005.
- [37] Cant, R. und Mastorakos, E.: An Introduction to Turbulent Reacting Flows. Imperial College Press, 2008.
- [38] Chan, C., Lau, D. und Radford, D.: Transition to Detonation Resulting from Burning in a Confined Vortex. *Symposium (International) on Combustion*, 23:1797–1804, 1991.
- [39] Chapman, D.: On the Rate of Explosion in Gases. *Philosophical Magazine*, 47:90–104, 1899.
- [40] Chen, J., Lumley, J. und Gouldin, F.: Modelling of Wrinkled Laminar Flames with Intermittency and Conditional Statistics. *Symposium (International) on Combustion*, 21:1483–1491, 1986.
- [41] Ciccarelli, G. und Dorofeev, S.: Flame Acceleration and Transition to Detonation in Ducts. *Progress in Energy and Combustion Science*, 34: 499–550, 2008.
- [42] Colin, O., Pires da Cruz, A. und Jay, S.: Detailed Chemistry-Based Auto-Ignition Model Including Low Temperature Phenomena Applied to 3-D

- Engine Calculations. *Proceedings of the Combustion Institute*, 30:2649–2656, 2005.
- [43] Davis, S.: Simplified Second–Order Godunov–Type Methods. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*, 9:445–473, 1988.
- [44] Denisov, Y. und Troshin, Y.: On the Mechanism of Detonative Combustion. *Symposium (International) on Combustion*, 8:600–610, 1961.
- [45] Dimmelmeier, H., Eyink, J. und Movahed, M.-A.: Computational Validation of the EPR Combustible Gas Control System. *Nuclear Engineering and Design*, 249:118–124, 2012.
- [46] Dixon, H.: The Rate of Expansion in Gases. *Philosophical Transactions of the Royal Society London A*, 184:97–188, 1893.
- [47] Dold, J., Short, M., Clark, J. und Nikiforakis, N.: Accumulating Sequence of Ignitions from a Propagating Pulse. *Combustion and Flame*, 100:465–473, 1995.
- [48] Dorofeev, S.: Flame Acceleration and Explosion Safety Applications. *Proceedings of the Combustion Institute*, 33:2161–2175, 2011.
- [49] Dorofeev, S., Sidorov, V., Kuznetsov, M., Matsukov, I. und Alekseev, V.: Effect of Scale on the Onset of Detonations. *Shock Waves*, 10:137–149, 2000.
- [50] Dorofeev, S., Kuznetsov, M., Alekseev, V., Efimenko, A. und Breitung, W.: Evaluation of Limits for Effective Flame Acceleration in Hydrogen Mixtures. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 14:583–589, 2001.
- [51] Dowdy, D., Smith, D., Taylor, S. und Williams, A.: The Use of Expanding Spherical Flames to Determine Burning Velocities and Stretch Effects in Hydrogen/Air Mixtures. *Symposium (International) on Combustion*, 23: 325–332, 1991.
- [52] Drinovac, P.: Experimentelle Untersuchungen zu katalytischen Wasserstoffrekombinatoren für Leichtwasserreaktoren. Dissertation, Rheinisch–Westfälische Technische Hochschule Aachen, 2006.

- [53] Dumitrescu, M., Labracherie, L., Burtschell, Y. und Houas, L.: Protecting Pressure Gauges with Grease in High Temperature Facilities. *Shock Waves*, 2:269–271, 1992.
- [54] Díaz Alonso, F., González Ferradás, E., Sánchez Pérez, J., Miñana Aznar, A., Ruiz Gimeno, J. und Martínez Alonso, J.: Characteristic Overpressure–Impulse–Distance Curves for the Detonation of Explosives, Pyrotechnics or Unstable Substances. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 19:724–728, 2006.
- [55] Döring, W.: Über den Detonationsvorgang in Gasen. *Annalen der Physik*, 43:421–436, 1943.
- [56] Eder, A.: Brennverhalten schallnaher und überschall–schneller Wasserstoff–Luft Flammen. Dissertation, Technische Universität München, 2001.
- [57] Eder, A., Gerlach, C. und Mayinger, F.: Experimental Observation of Fast Deflagrations and Transition to Detonations in Hydrogen–Air–Mixtures. *Symposium on Energy Engineering in the 21st Century (SEE2000)*, 3: 1296–1304, 2000.
- [58] Einfeldt, B.: On Godunov–Type Methods for Gas Dynamics. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 25:294–318, 1988.
- [59] Einstein, A.: Die Grundlage der allgemeinen Relativitätstheorie. *Annalen der Physik*, 49:769–822, 1916.
- [60] Erpenbeck, J.: Stability of Steady–State Equilibrium Detonations. *Physics of Fluids*, 5:604–614, 1962.
- [61] Erpenbeck, J.: Stability of Idealized One-Reaction Detonations. *Physics of Fluids*, 7:684–696, 1964.
- [62] Erpenbeck, J.: Detonation Stability for Disturbances of Small Transverse Wavelength. *Physics of Fluids*, 9:1293–1306, 1966.
- [63] Ertesvag, I. und Magnussen, B.: The Eddy Dissipation Turbulence Energy Cascade Model. *Combustion Science and Technology*, 159:213–235, 2000.

- [64] Ettner, F., Vollmer, K. und Sattelmayer, T.: Simulating Deflagrations and Detonations with Detailed Chemistry. *22nd International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems, Minsk, Belarus, 2009.*
- [65] Ettner, F., Vollmer, K. und Sattelmayer, T.: Numerical Investigation of DDT in Inhomogeneous Hydrogen–Air Mixtures. *8th International Symposium on Hazards, Prevention and Mitigation of Industrial Explosions, Yokohama, Japan, 2010.*
- [66] Ettner, F., Vollmer, K. und Sattelmayer, T.: Einfluss von Mischungsgradienten und seitlichem Massenverlust auf die Flammenbeschleunigung und die Detonation in Kanälen. GRS-Abschlussbericht Vorhaben Nr. 1501338, Technische Universität München, 2011.
- [67] Ettner, F., Vollmer, K. und Sattelmayer, T.: Mach Reflection in Detonations Propagating through a Gas with a Concentration Gradient. *Shock Waves*, 23:201–206, 2013.
- [68] Explosion Dynamics Laboratory (EDL), California Institute of Technology: Shock and Detonation Toolbox. http://www.galcit.caltech.edu/EDL/public/cantera/html/SD_Toolbox/. Zuletzt abgerufen am 19.09.2012.
- [69] Favre, A.: Equations des gaz turbulents compressibles. *Journal de Mécanique*, 4:361–390, 1965.
- [70] Ferziger, J. und Peric, M.: Computational Methods for Fluid Dynamics. 3. Auflage. Springer, 2002.
- [71] Fickett, W. und Davis, W.: Detonation: Theory and Experiment. Dover Publications, 2000.
- [72] Friedrich, A., Grune, J., Necker, G., Sempert, K., Stern, G., Veser, A., Kuznetsov, M., Kotchourko, A., Breitung, W. und Jordan, T.: Kriterien für Flammenbeschleunigung und Detonationsübergang in Wasserstoff–Luft–Gemischen mit Konzentrationsgradienten und partiellem Einschluss. GRS-Abschlussbericht Vorhaben Nr. 1501346, Pro-Science GmbH, Karlsruher Institut für Technologie, Karlsruhe, 2011.

- [73] Frolov, S. und Ivanov, V.: Numerical Simulation of Localized Pre-Flame Autoignition in Enclosures. *8th International Symposium on Hazards, Prevention and Mitigation of Industrial Explosions, Yokohama, Japan, 2010*.
- [74] Fureby, C.: Towards the Use of Large Eddy Simulation in Engineering. *Progress in Aerospace Sciences*, 44:381–396, 2008.
- [75] Gamezo, V., Desbordes, D. und Oran, E.: Two-Dimensional Reactive Flow Dynamics in Cellular Detonation Waves. *Shock Waves*, 9:11–17, 1999.
- [76] Gamezo, V., Ogawa, T. und Oran, E.: Numerical Simulations of Flame Propagation and DDT in Obstructed Channels Filled with Hydrogen–Air Mixture. *Proceedings of the Combustion Institute*, 31:2463–2471, 2007.
- [77] Garnier, E., Adams, N. und Sagaut, P.: Large Eddy Simulation for Compressible Flows. Springer, 2009.
- [78] Gavrikov, A., Efimenko, A. und Dorofeev, S.: A Model for Detonation Cell Size Prediction from Chemical Kinetics. *Combustion and Flame*, 120: 19–33, 2000.
- [79] Gerlinger, P.: Numerische Verbrennungssimulation. Springer, 2005.
- [80] Gesellschaft für Reaktorsicherheit (GRS): Informationsportal zur Lage in Fukushima. <http://fukushima.grs.de>. Zuletzt abgerufen am 19.09.2012.
- [81] Gesellschaft für Reaktorsicherheit (GRS): Deutsche Risikostudie Kernkraftwerke Phase B – Eine zusammenfassende Darstellung. Technischer Bericht GRS-72, 1989.
- [82] Gifford, M.: The Role of Hot-Spots in the Ignition and Growth of Explosion. Dissertation, Cambridge University, 2000.
- [83] Girimaji, S.: Assumed β -pdf Model for Turbulent Mixing Validation and Extension to Multiple Scalar Mixing. *Combustion Science and Technology*, 78:177–196, 1991.
- [84] Godunov, S.: Reminiscences about Difference Schemes. *Journal of Computational Physics*, 153:6–25, 1999.

- [85] Golovitchev, V., Nordin, N., Jarnicki, R. und Chomiak, J.: 3-D Diesel Spray Simulations Using a New Detailed Chemistry Turbulent Combustion Model. *Society of Automotive Engineers*, 2000.
- [86] Goodwin, D.: Cantera: an Object-Oriented Software Toolkit for Chemical Kinetics, Thermodynamics and Transport Processes: 2009. <http://code.google.com/p/cantera>. Zuletzt abgerufen am 19.09.2012.
- [87] Gottlieb, J. und Groth, C.: Assessment of Riemann Solvers for Unsteady One-Dimensional Inviscid Flows of Perfect Gases. *Journal of Computational Physics*, 78:437–458, 1988.
- [88] Graduate Aerospace Laboratories of the California Institute of Technology (GALCIT): Detonation Database. http://www.galcit.caltech.edu/detn_db/html/. Zuletzt abgerufen am 19.09.2012.
- [89] Gran, I.: Mathematical Modeling and Numerical Simulation of Chemical Kinetics in Turbulent Combustion. Dissertation, Norwegian University of Science and Technology Trondheim, 1994.
- [90] Hinze, J.: Turbulence. McGraw-Hill, 1975.
- [91] Hirschfelder, J., Curtiss, C. und Bird, R.: Molecular Theory of Gases and Liquids. John Wiley & Sons, Inc., 1954.
- [92] Hu, X., Khoo, B., Zhang, D. und Jiang, Z.: The Cellular Structure of a Two-Dimensional $H_2/O_2/Ar$ Detonation Wave. *Combustion Theory and Modelling*, 8:339–359, 2004.
- [93] Iaccarino, G., Ooi, A., Durbin, P. und Behnia, M.: Reynolds Averaged Simulation of Unsteady Separated Flow. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 24:147–156, 2003.
- [94] Internationale Atomenergiebehörde (IAEA): Mitigation of Hydrogen Hazards in Severe Accidents in Nuclear Power Plants. IAEA-TECDOC-1661, 2011.
- [95] Issa, R.: Solution of the Implicitly Discretised Fluid Flow Equations by Operator-Splitting. *Journal of Computational Physics*, 62:40–65, 1986.
- [96] Ivancic, B., Flohr, P., Paikert, B., Brandt, M. und Polifke, W.: Auto-Ignition and Heat Release in a Gas Turbine Burner at Elevated Temperature. *ASME Turbo Expo, Vienna, Austria*, 2004.

- [97] Jachimowski, C.: An Analytical Study of the Hydrogen–Air Reaction Mechanism with Application to Scramjet Combustion. NASA Technical Paper 2791, Langley Research Center, Hampton, VA, USA, 1988.
- [98] Jouguet, E.: Sur la propagation des réactions chimiques dans les gaz. *Journal de Mathématiques Pures et Appliquées*, 1:347–425, 1905.
- [99] Karpov, V., Lipatnikov, A. und Wolanski, P.: Finding the Markstein Number Using the Measurements of Expanding Spherical Laminar Flames. *Combustion and Flame*, 109:436–448, 1997.
- [100] Kee, R., Rupley, F., Miller, J., Coltrin, M., Grcar, J., Meeks, E., Moffat, H., Lutz, A., Dixon-Lewis, G., Smooke, M., Warnatz, J., Evans, G., Larson, R., Mitchell, R., Petzold, L., Reynolds, W., Caracotsios, M., Stewart, W., Glarborg, P., Wang, C. und Adigun, O.: The Chemkin Thermodynamic Database, CHEMKIN Collection, Release 3.6. Reaction Design Inc., San Diego, CA, USA, 2000.
- [101] Kee, R., Coltrin, M. und Glarborg, P.: Chemically Reacting Flow. John Wiley & Sons, 2003.
- [102] Kerner, A., Stück, F. und Weiss, F.-P.: Der Unfall von Tschernobyl 1986. *atw*, 2:80–87, 2011.
- [103] Kessler, D., Gamezo, V. und Oran, E.: Simulations of Flame Acceleration and Deflagration–to–Detonation Transitions in Methane–Air Systems. *Combustion and Flame*, 157:2063–2077, 2010.
- [104] Kessler, D., Gamezo, V. und Oran, E.: Gas–Phase Detonation Propagation in Mixture Composition Gradients. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London A*, 370:567–596, 2012.
- [105] Khokhlov, A.: Fully Threaded Tree Algorithms for Adaptive Refinement Fluid Dynamics Simulations. *Journal of Computational Physics*, 143: 519–543, 1998.
- [106] Khokhlov, A. und Oran, E.: Numerical Simulation of Detonation Initiation in a Flame Brush: The Role of Hot Spots. *Combustion and Flame*, 119:400–416, 1999.

- [107] Khokhlov, A., Oran, E. und Wheeler, J.: A Theory of Deflagration-to-Detonation Transition in Unconfined Flames. *Combustion and Flame*, 108:503–517, 1997.
- [108] Kirmeß, O.: Numerische Simulation instationärer, turbulenter Flammenausbreitung in Rohren. Dissertation, Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen, 1996.
- [109] Knight, D.: Elements of Numerical Methods for Compressible Flow. Cambridge University Press, 2006.
- [110] Knystautas, R. und Lee, J.: On the Effective Energy for Direct Initiation of Gaseous Detonations. *Combustion and Flame*, 27:221–228, 1976.
- [111] Knystautas, R., Lee, J., Moen, I. und Wagner, H.: Direct Initiation of Spherical Detonation by a Hot Turbulent Gas Jet. *Symposium (International) on Combustion*, 17:1235–1245, 1979.
- [112] Kolmogorov, A.: Local Structure of Turbulence in Incompressible Viscous Fluid at Very Large Reynolds Number. *Doklady Akademii Nauk SSSR*, 30:299–303, 1941.
- [113] Kolmogorov, A.: A Refinement of Previous Hypotheses Concerning the Local Structure in Turbulence in Viscous Incompressible Fluid at High Reynolds Number. *Journal of Fluidmechanics*, 177:133–166, 1962.
- [114] Kolmogorov, A., Petrovskii, I. und Piskunov, N.: A Study of the Diffusion Equation with Increase in the Amount of Substance, and its Application to a Biological Problem. Übersetzung aus: Bulletin of the Moscow State University Series A 1:1-26, 1937. In: Tikhomirov, V. (Hrsg.): Selected Works of A.N. Kolmogorov, Band 1. Kluwer Academic Publishers, 1991.
- [115] Konnov, A.: Remaining Uncertainties in the Kinetic Mechanism of Hydrogen Combustion. *Combustion and Flame*, 154:507–528, 2008.
- [116] Kotchourko, A., Breitung, W., Veser, A. und Dorofeev, S.: Tube Experiments and Numerical Simulation on Turbulent Hydrogen-Air Combustion. *21st International Symposium on Shockwaves*, Great Keppel Island, Australia, 1997.

- [117] Kuznetsov, M., Alekseev, V., Matsukov, I. und Dorofeev, S.: DDT in a Smooth Tube Filled with a Hydrogen–Oxygen Mixture. *Shock Waves*, 14: 205–215, 2005.
- [118] Kuznetsov, M., Alekseev, V. und Dorofeev, S.: Comparison of Critical Conditions for DDT in Regular and Irregular Detonation Systems. *Shock Waves*, 10:217–223, 2000.
- [119] Kwon, O. und Faeth, G.: Flame/Stretch Interactions of Premixed Hydrogen–Fueled Flames: Measurements and Predictions. *Combustion and Flame*, 124:590–610, 2001.
- [120] Landenfeld, T., Sadiki, A. und Janicka, J.: A Turbulence–Chemistry Interaction Model Based on a Multivariate Presumed Beta–PDF Method for Turbulent Flames. *Flow, Turbulence and Combustion*, 68:111–135, 2002.
- [121] Laney, C.: Computational Gasdynamics. Cambridge University Press, 1998.
- [122] Law, C.: Combustion Physics. Cambridge University Press, 2006.
- [123] Lecheler, S.: Numerische Strömungsberechnung. Springer, 2009.
- [124] Lecocq, G., Richard, S., Michel, J.-B. und Vervisch, L.: A New LES Model Coupling Flame Surface Density and Tabulated Kinetics Approaches to Investigate Knock and Pre–Ignition in Piston Engines. *Proceedings of the Combustion Institute*, 33:3105–3114, 2011.
- [125] Lee, J., Knystautas, R. und Yoshikawa, N.: Photochemical Initiation of Gaseous Detonations. *Acta Astronautica*, 5:971–982, 1978.
- [126] Lee, J.: The Detonation Phenomenon. Cambridge University Press, 2008.
- [127] Lee, J. und Higgins, A.: Comments on Criteria for Direct Initiation of Detonation. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London A*, 357:3503–3521, 1999.
- [128] Lee, J. und Radulescu, M.: On the Hydrodynamic Thickness of Cellular Detonations. *Combustion, Explosion and Shock Waves*, 41:745–765, 2005.

- [129] Leer, B. van: Towards the Ultimate Conservative Difference Scheme. V. A Second-Order Sequel to Godunov's Method. *Journal of Computational Physics*, 32:101–136, 1979.
- [130] Lewis, B. und Elbe, G. von: Combustion, Flames and Explosions of Gases. Cambridge University Press, 1938.
- [131] Li, J., Lai, W., Chung, K. und Lu, F.: Uncertainty Analysis of Deflagration-to-Detonation Run-Up Distance. *Shock Waves*, 14:413–420, 2005.
- [132] Li, X.-L., Fu, D.-X., Ma, Y.-W. und Liang, X.: Direct Numerical Simulation of Compressible Turbulent Flows. *Acta Mechanica Sinica*, 26:795–806, 2010.
- [133] Libby, P. und Williams, F.: Fundamental Aspects. In: Libby, P. und Williams, F. (Hrsg.): Turbulent Reacting Flows, S. 1–44. Springer, 1980.
- [134] Libby, P. und Williams, F.: A Presumed PDF Analysis of Partially Premixed Turbulent Combustion. *Combustion Science and Technology*, 161:351–390, 2000.
- [135] Liberman, M., Ivanov, M., Kiverin, A., Kuznetsov, M., Chukalovsky, A. und Rakhimova, T.: Deflagration-to-Detonation Transition in Highly Reactive Combustible Mixtures. *Acta Astronautica*, 67:688–701, 2010.
- [136] Liberman, M., Kiverin, A. und Ivanov, M.: On Detonation Initiation by a Temperature Gradient for a Detailed Chemical Reaction Model. *Physics Letters A*, 375:1803–1808, 2011.
- [137] Lindstedt, R. und Vaos, E.: Transported PDF Modeling of High-Reynolds-Number Premixed Turbulent Flames. *Combustion and Flame*, 145:495–511, 2006.
- [138] Lipatnikov, A. und Chomiak, J.: Turbulent Flame Speed and Thickness: Phenomenology, Evaluation, and Application in Multi-Dimensional Simulations. *Progress in Energy and Combustion Science*, 28:1–74, 2002.
- [139] Liu, Y.-L., Zheng, J.-Y., Xu, P., Zhao, Y.-Z., Bie, H.-Y., Chen, H.-G. und Dryver, H.: Numerical Simulation on the Diffusion of Hydrogen due to High Pressured Storage Tanks Failure. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 22:265–270, 2009.

- [140] Magnussen, B. und Hjertager, B.: On Mathematical Modeling of Turbulent Combustion with Special Emphasis on Soot Formation and Combustion. *Proceedings of the Combustion Institute*, 16:719–729, 1976.
- [141] Mallard, E. und Le Chatelier, H.: Sur les vitesses de propagation de l'inflammation dans les mélanges gazeux explosifs. *Comptes Rendus Hebdomadaires des Séances de l'Académie des Sciences*, 93:145–148, 1881.
- [142] Manninen, M., Silde, A., Lindholm, I., Huhtanen, R. und Sjövall, H.: Simulation of Hydrogen Deflagration and Detonation in a BWR Reactor Building. *Nuclear Engineering and Design*, 211:27–50, 2002.
- [143] Margolis, S. und Matkowsky, B.: Nonlinear Stability and Bifurcation in the Transition from Laminar to Turbulent Flame Propagation. *Combustion Science and Technology*, 34:45–77, 1983.
- [144] Markstein, G.: *Nonsteady Flame Propagation*. Macmillan, 1964.
- [145] Menter, F.: *CFD Best Practice Guidelines for CFD Code Validation for Reactor-Safety Applications*. Technischer Bericht, European Commission, 5th EURATOM Framework Programme, 2002.
- [146] Menter, F.: Two–Equation Eddy–Viscosity Turbulence Models for Engineering Applications. *AIAA Journal*, 32:1598–1605, 1994.
- [147] Menter, F., Kuntz, M. und Langtry, R.: Ten Years of Industrial Experience with the SST Model. *Turbulence, Heat and Mass Transfer*, 4:625–632, 2003.
- [148] Merilo, E., Groethe, M., Colton, J. und Chiba, S.: Experimental Study of Hydrogen Release Accidents in a Vehicle Garage. *International Journal of Hydrogen Energy*, 36:2436–2444, 2011.
- [149] Meyer, J., Urtiew, P. und Oppenheim, A.: On the Inadequacy of Gasdynamic Processes for Triggering the Transition to Detonation. *Combustion and Flame*, 14:13–20, 1970.
- [150] Michel, J.-B., Colin, O. und Angelberger, C.: On the Formulation of Species Reaction Rates in the Context of Multi–Species CFD Codes Using Complex Chemistry Tabulation Techniques. *Combustion and Flame*, 157:701–714, 2010.

- [151] Middha, P., Hansen, O., Groethe, M. und Arntzen, B.: Hydrogen Explosion Study in a Confined Tube: FLACS CFD Simulations and Experiments. *21st International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems, Poitiers, France, 2007.*
- [152] Mittermayer, E.: CFD-Simulation der Zündung und Verbrennung in einem vorkammergezündeten Großgasmotor. Dissertation, Technische Universität München, 2010.
- [153] Moser, V.: Simulation der Explosion magerer Wasserstoff-Luft-Gemische in großskaligen Geometrien. Dissertation, Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen, 1997.
- [154] Neumann, J. von: Theory of Detonation Waves. In: Taub, A. (Hrsg.): John von Neumann, Collected Works. Macmillan, 1942.
- [155] Noll, B., Schütz, H. und Aigner, M.: Numerical Simulation of High-Frequency Flow Instabilities near an Airblast Atomizer. *ASME Turbo Expo, New Orleans, LA, USA, 2001.*
- [156] O’Conaire, M., Curran, H., Simmie, J., Pitz, W. und Westbrook, C.: A Comprehensive Modeling Study of Hydrogen Oxidation. *International Journal of Chemical Kinetics*, 36:603–622, 2004.
- [157] OpenFOAM: User Guide, Version 2.1.1. <http://www.openfoam.org>. Zuletzt abgerufen am 19.09.2012.
- [158] Oran, E. und Gamezo, V.: Origins of the Deflagration-to-Detonation Transition in Gas-Phase Combustion. *Combustion and Flame*, 148:4–47, 2007.
- [159] Oran, E. und Khokhlov, A.: Deflagrations, Hot Spots, and the Transition to Detonation. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London A*, 357:3539–3551, 1999.
- [160] Osif, B., Baratta, A. und Conkling, T.: TMI 25 Years Later. Pennsylvania State University Press, 2004.
- [161] Peng-Kärrholm, F.: Numerical Modelling of Diesel Spray Injection, Turbulence Interaction and Combustion. Dissertation, Chalmers University of Technology, 2008.

- [162] Peters, N.: Turbulent Combustion. Cambridge University Press, 2000.
- [163] Petersen, E. und Hanson, R.: Reduced Kinetics Mechanism for Ram Accelerator Combustion. *Journal of Propulsion and Power*, 15:591–600, 1999.
- [164] Pike, J.: Riemann Solvers for Perfect and Near-Perfect Gases. *AIAA Journal*, 31:1801–1808, 1993.
- [165] Poinso, T. und Veynante, D.: Theoretical and Numerical Combustion. 2. Auflage. R.T. Edwards, 2005.
- [166] Poinso, T., Veynante, D. und Candel, S.: Diagrams of Premixed Turbulent Combustion Based on Direct Numerical Simulation. *Symposium (International) on Combustion*, 23:613–619, 1990.
- [167] Polifke, W., Flohr, P. und Brandt, M.: Modeling of Inhomogeneously Premixed Combustion with an Extended TFC Model. *Transactions of the ASME*, 124:58–65, 2002.
- [168] Pope, S.: PDF Methods for Turbulent Reactive Flows. *Progress in Energy and Combustion Science*, 19:119–192, 1985.
- [169] Pope, S.: Turbulent Flows. Cambridge University Press, 2000.
- [170] Poruba, C.: Turbulente Flammenausbreitung in Wasserstoff-Luft-Gemischen. Dissertation, Technische Universität München, 2003.
- [171] Powers, J. und Paolucci, S.: Accurate Spatial Resolution Estimates for Reactive Supersonic Flow with Detailed Chemistry. *AIAA Journal*, 43: 1088–1099, 2005.
- [172] Pöschl, M. und Sattelmayer, T.: Influence of Temperature Inhomogeneities on Knocking Combustion. *Combustion and Flame*, 153:562–573, 2008.
- [173] Quirk, J.: Numerical Soot Traces: The Writing's on the Wall. In: Husaini, M., Gatski, T. und Jackson, T. (Hrsg.): Transition, Turbulence and Combustion, S. 331–337. Kluwer Academic Publisher, 1994.
- [174] Rade, L. und Westergren, B.: Springers Mathematische Formeln. 3. Auflage. Springer, 1995.

- [175] Rayleigh, J.: The Explanation of Certain Acoustical Phenomena. *Nature*, 18:319–321, 1878.
- [176] Reynolds, O.: On the Dynamical Theory of Incompressible Viscous Fluids and the Determination of the Criterion. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London A*, 186:123–164, 1895.
- [177] Rowbottom, R.: Bacteria Cause Fatal Explosion at Corrugating Medium Mill. *Pulp and Paper Canada*, 90:75–81, 1989.
- [178] Schmid, H.-P.: Ein Verbrennungsmodell zur Beschreibung der Wärmefreisetzung von vorgemischten turbulenten Flammen. Dissertation, Universität Karlsruhe, 1995.
- [179] Schmid, H.-P., Habisreuther, P. und Leuckel, W.: A Model for Calculating Heat Release in Premixed Turbulent Flames. *Combustion and Flame*, 113:79–91, 1998.
- [180] Sheinson, R. und Williams, F.: Cool Flames. Use of the Term in Combustion Chemistry and Analytical Chemistry. *Analytical Chemistry*, 47: 1197–1198, 1975.
- [181] Shepherd, J.: Detonation in Gases. *Proceedings of the Combustion Institute*, 32:83–98, 2009.
- [182] Shepherd, J. und Lee, J.: On the Transition from Deflagration to Detonation. In: Hussaini, M., Kumar, A. und Voigt, R. (Hrsg.): Major Research Topics in Combustion, S. 439–487. Springer, 1992.
- [183] Sievers, J., Arndt, J., Grebner, H. und Bachmann, P.: Failure Assessment Methodologies for Components under Severe Accident Loading. *Euro-safe Forum, Brussels, Belgium*, 2012.
- [184] Sivashinsky, G.: Instabilities, Pattern Formation and Turbulence in Flames. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 15:179–199, 1983.
- [185] Smiljanovski, V.: Ein numerisches Verfahren zur Berechnung schneller Vormischflammen und der Deflagrations–Detonations–Transition (DDT). Dissertation, Rheinisch–Westfälische Technische Hochschule Aachen, 1996.

- [186] Soury, H. und Mazaheri, K.: Utilizing Unsteady Curved Detonation Analysis and Detailed Kinetics to Study the Direct Initiation of Detonation in $\text{H}_2\text{-O}_2$ and $\text{H}_2\text{-Air}$ Mixtures. *International Journal of Hydrogen Energy*, 34:9847–9856, 2009.
- [187] Spalding, D.: Mixing and Chemical Reaction in Steady Confined Turbulent Flames. *Symposium (International) on Combustion*, 13:649–657, 1971.
- [188] Taveau, J.: Explosion Hazards Related to Hydrogen Releases in Nuclear Facilities. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 24:8–18, 2011.
- [189] Tennekes, H. und Lumley, J.: A First Course in Turbulence. MIT Press, 1972.
- [190] Thomas, G.: Some Observations on the Initiation and Onset of Detonation. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London A*, 370: 715–739, 2012.
- [191] Toro, E.: Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics: A Practical Introduction. Springer, 1999.
- [192] Toro, E., Spruce, M. und Speares, W.: Restoration of the Contact Surface in the HLL-Riemann Solver. *Shock Waves*, 4:25–34, 1994.
- [193] Tosatto, L. und Vigevano, L.: Numerical Solution of Under-Resolved Detonations. *Journal of Computational Physics*, 227:2317–2343, 2008.
- [194] Tragsdorf, I.: Entwicklung und Untersuchung von Katalysatorelementen für innovative Wasserstoff-Rekombinatoren. Schriften des Forschungszentrum Jülich, Reihe Energietechnik Nr. 36, Forschungszentrum Jülich, 2005.
- [195] Tse, S., Zhu, D. und Law, C.: Morphology and Burning Rates of Expanding Spherical Flames in $\text{H}_2/\text{O}_2/\text{Inert}$ Mixtures up to 60 Atmospheres. *Proceedings of the Combustion Institute*, 28:1793–1800, 2000.
- [196] Turns, S.: An Introduction to Combustion. 2. Auflage. McGraw-Hill, 2000.

- [197] Utgikar, V. und Thiesen, T.: Safety of Compressed Hydrogen Fuel Tanks: Leakage from Stationary Vehicles. *Technology in Society*, 27:315–320, 2005.
- [198] Vagelopoulos, C., Egolfopoulos, F. und Law, C.: Further Considerations on the Determination of Laminar Flame Speeds with the Counterflow Twin-Flame Technique. *Symposium (International) on Combustion*, 25: 1341–1347, 1994.
- [199] Venetsanos, A., Baraldi, D., Adams, P., Heggem, P. und Wilkening, H.: CFD Modelling of Hydrogen Release, Dispersion and Combustion for Automotive Scenarios. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 21:162–184, 2008.
- [200] Versteeg, H. und Malalasekera, W.: An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method. 2. Auflage. Pearson, 2007.
- [201] Warnatz, J., Maas, U. und Dibble, R.: Verbrennung: Physikalisch-Chemische Grundlagen, Modellierung und Simulation, Experimente, Schadstoffentstehung. Springer, 1997.
- [202] Weller, H.: The Development of a New Flame Area Combustion Model Using Conditional Averaging. Thermo-Fluids Section Report TF/9307, Imperial College London, 1993.
- [203] Weller, H., Tabor, G., Gosman, A. und Fureby, C.: Application of a Flame-Wrinkling LES Combustion Model to a Turbulent Mixing Layer. *Symposium (International) on Combustion*, 27:899–907, 1998.
- [204] Wetzel, F.: Untersuchung der Mechanismen der Detonationsentstehungs- und Detonationsausbreitungsvorgänge. VDI Fortschrittsberichte, Reihe 7 (Strömungstechnik) Nr. 228, VDI, 1993.
- [205] White, F.: Viscous Fluid Flow. 3. Auflage. McGraw-Hill, 2006.
- [206] Wilcox, D.: Turbulence Modeling for CFD. DCW Industries, 2006.
- [207] Williams, F.: Combustion Theory. 2. Auflage. Benjamin/Cummings Publishing Company, 1985.
- [208] Wu, C. und Law, C.: On the Determination of Laminar Flame Speeds from Stretched Flames. *Symposium (International) on Combustion*, 20: 1941–1949, 1985.

- [209] Xu, B., Wen, J., Dembele, S., Tam, V. und Hawkworth, S.: The Effect of Pressure Boundary Rupture Rate on Spontaneous Ignition of Pressurized Hydrogen Release. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 22:279–287, 2009.
- [210] Zbikowski, M., Makarov, D. und Molkov, V.: Numerical Simulations of Large-Scale Detonation Tests in the RUT Facility by the LES Model. *Journal of Hazardous Materials*, 181:949–956, 2010.
- [211] Zeldovich, Y.: On the Theory of the Propagation of Detonation in Gaseous Systems. Übersetzung aus: Zhurnal Eksperimental'noi i Teoreticheskoi Fiziki, 10:542-568, 1940. Technical Memorandum 1261, National Advisory Committee for Aeronautics, USA, 1960.
- [212] Zeldovich, Y.: Regime Classification of an Exothermic Reaction with Nonuniform Initial Conditions. *Combustion and Flame*, 39:211–214, 1980.
- [213] Zeldovich, Y., Librovich, V., Makhviladze, G. und Sivashinsky, G.: On the Development of Detonation in a Non-Uniformly Preheated Gas. *Astronautica Acta*, 15:313–321, 1970.
- [214] Zimont, V., Polifke, W., Bettelini, M. und Weisenstein, W.: An Efficient Computational Model for Premixed Turbulent Combustion at High Reynolds Numbers Based on a Turbulent Flame Speed Closure. *Transactions of the ASME*, 120:526–532, 1998.
- [215] Zimont, V.: Theory of Turbulent Combustion of a Homogeneous Fuel Mixture at High Reynolds Numbers. *Combustion Explosions and Shock Waves*, 15:305–311, 1979.
- [216] Zimont, V.: Gas Premixed Combustion at High Turbulence. Turbulent Flame Closure Combustion Model. *Experimental Thermal and Fluid Science*, 21:179–186, 2000.
- [217] Zimont, V. und Lipatnikov, A.: A Numerical Model of Premixed Turbulent Combustion of Premixed Gases. *Chemical Physics Reports*, 14:993–1025, 1995.

Anhang

A Kenngrößen für Wasserstoff–Luft–Gemische

Die folgenden Kenngrößen wurden mit *Cantera* [86] unter Benutzung der *EDL Shock and Detonation Toolbox* [68] berechnet. Die temperaturabhängigen Stoffwerte stammen aus der *Chemkin*-Datenbank [100]. Hinsichtlich der Gemischzusammensetzung wurde angenommen, dass Luft zu 21 Vol.-% aus Sauerstoff und zu 79 Vol.-% aus Stickstoff besteht. Die Ausgangstemperatur beträgt 293 K, der Ausgangsdruck 1,013 bar.

x_{H_2}	y_{H_2}	σ	a_r	a_p	D_{CJ}
–	–	–	m/s	m/s	m/s
7 %	0,52 %	2,84	356	586	1119
8 %	0,60 %	3,08	357	611	1178
9 %	0,69 %	3,31	359	636	1235
10 %	0,77 %	3,54	361	659	1295
11 %	0,86 %	3,77	363	682	1339
12 %	0,94 %	3,99	365	704	1388
13 %	1,03 %	4,21	367	725	1435
14 %	1,12 %	4,42	369	746	1480
15 %	1,22 %	4,63	371	766	1524
16 %	1,31 %	4,84	373	786	1565
17 %	1,41 %	5,04	375	805	1605
18 %	1,51 %	5,24	377	824	1644
19 %	1,61 %	5,43	379	843	1680
20 %	1,72 %	5,62	381	861	1716
21 %	1,82 %	5,81	383	879	1750

A Kenngrößen für Wasserstoff–Luft–Gemische

22 %	1,93 %	5,98	386	896	1782
23 %	2,04 %	6,16	388	913	1813
24 %	2,16 %	6,32	390	930	1842
25 %	2,28 %	6,48	393	946	1871
26 %	2,40 %	6,62	395	962	1897
27 %	2,52 %	6,76	398	976	1922
28 %	2,65 %	6,88	400	990	1946
29 %	2,77 %	6,97	403	1003	1967
30 %	2,91 %	7,04	405	1014	1987
31 %	3,04 %	7,05	408	1022	2004
32 %	3,18 %	7,03	411	1027	2020
33 %	3,33 %	7,00	413	1032	2033
34 %	3,47 %	6,95	416	1035	2045
35 %	3,63 %	6,90	419	1039	2056
36 %	3,78 %	6,84	422	1043	2067
37 %	3,94 %	6,78	425	1046	2076
38 %	4,11 %	6,72	428	1049	2085
39 %	4,28 %	6,66	431	1053	2094
40 %	4,45 %	6,60	434	1056	2102
41 %	4,63 %	6,53	437	1059	2112
42 %	4,82 %	6,47	441	1063	2118
43 %	5,01 %	6,40	444	1066	2126
44 %	5,20 %	6,34	448	1069	2134
45 %	5,41 %	6,27	451	1073	2142

Tabelle A.1: Für Flammenbeschleunigung und DDT relevante Kenngrößen von Wasserstoff in Luft.

B Verlauf der Kennzahlen im Borghi–Diagramm

$$\text{Re}_T \stackrel{(2.14)}{=} \frac{u' \ell_T}{\nu} \stackrel{(2.13)}{=} \frac{u' \ell_T}{a} \stackrel{(2.4)}{=} \frac{u' \ell_T}{s_L \ell_L} . \quad (\text{B.1})$$

$$\Rightarrow \frac{u'}{s_L} = \text{Re}_T \left(\frac{\ell_T}{\ell_L} \right)^{-1} . \quad (\text{B.2})$$

$$\text{Da} \stackrel{(2.15)}{=} \frac{t_T}{t_L} \stackrel{(2.10,2.6)}{=} \frac{s_L \ell_T}{u' \ell_L} . \quad (\text{B.3})$$

$$\Rightarrow \frac{u'}{s_L} = \text{Da}^{-1} \left(\frac{\ell_T}{\ell_L} \right) . \quad (\text{B.4})$$

$$\text{Ka} \stackrel{(2.16)}{=} \left(\frac{\ell_L}{\ell_\eta} \right)^2 \stackrel{(2.4)}{=} \frac{a^2}{s_L^2 \ell_\eta^2} \stackrel{(2.11)}{=} \frac{a^2 \varepsilon^{1/2}}{s_L^2 \nu^{3/2}} \stackrel{(2.9)}{=} \frac{a^{1/2} u'^{3/2}}{s_L^2 \ell_T^{1/2}} \quad (\text{B.5})$$

$$\stackrel{(2.13)}{=} \left(\frac{u'}{s_L} \right)^{3/2} \frac{a^{1/2}}{s_L^{1/2} \ell_T^{1/2}} \stackrel{(2.4)}{=} \left(\frac{u'}{s_L} \right)^{3/2} \left(\frac{\ell_L}{\ell_T} \right)^{1/2} . \quad (\text{B.6})$$

$$\Rightarrow \frac{u'}{s_L} = \text{Ka}^{2/3} \left(\frac{\ell_T}{\ell_L} \right)^{1/3} . \quad (\text{B.7})$$

Mit $\log(xy) = \log x + \log y$ und $\log(x^y) = y \log(x)$ ergibt sich im logarithmisch aufgetragenen Borghi–Diagramm für konstante Kennzahlen jeweils ein Zusammenhang der Form

$$\log \left(\frac{u'}{s_L} \right) = A + B \log \left(\frac{\ell_T}{\ell_L} \right) \quad (\text{B.8})$$

mit Konstanten A und B .

C Vergleich der Berechnungsverfahren für Temperatur und Druck über innere Energie und Enthalpie

In impliziten Solvern, die in Strömungen geringer Kompressibilität die Berechnung mit großen Zeitschritten erlauben, ist die Energieerhaltungsgleichung meist in Form der totalen Enthalpie $h_t = e_t - p/\rho$ implementiert:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h_t) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho h_t u_j) = \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho a \frac{\partial h_t}{\partial x_j} + \tau_{ij} u_i \right) \quad . \quad (\text{C.1})$$

Neben der totalen Energie muss hier gleichzeitig noch die zeitliche Änderung des Drucks im aktuellen Zeitschritt bestimmt werden. Dies stellt in impliziten Verfahren (beispielsweise dem PISO-Verfahren [95], bei dem mehrmals über die Druckgleichung und die Energiegleichung iteriert wird) kein Hindernis dar, sodass nach Lösung der Transportgleichungen die Temperatur aus folgender Gleichung iterativ bestimmt werden kann:

$$h = \sum_{k=1}^N y_k h_k = \sum_{k=1}^N y_k \left(h_k^f + \int_{T_{\text{ref}}}^T c_{p,k} dT \right) \quad . \quad (\text{C.2})$$

Da implizite Verfahren dazu neigen, Diskontinuitäten zu verschmieren (s. Kap. 3.3.1), ist in kompressiblen Strömungen ein expliziter Solver vorzuziehen. In diesem Fall ist die Energieerhaltung in der Formulierung mit der totalen inneren Energie (Gl. 3.15) vorteilhaft: Aus der Definition der Enthalpie (Gl. 3.3) ist leicht nachzuvollziehen, dass Gl. C.1 äquivalent zu Gl. 3.15 ist. Bei expliziter Diskretisierung muss in Gl. 3.15 allerdings keine Aussage über die Änderung des Druckes im aktuellen Zeitschritt gemacht werden. Stattdessen kann die Temperatur über Gl. 3.4 bestimmt werden. Anschließend ergibt sich der neue Druck aus dem idealen Gasgesetz. Mehrmalige Iterationen über Transportgleichungen können damit vermieden werden. Deshalb wird in dieser Arbeit die Formulierung über die innere Energie gegenüber der Enthalpie bevorzugt.

D Herleitung der Druckgleichung

Die Herleitung der Reynolds–gemittelten Druckgleichung (Gl. 3.46) erfolgt in Analogie zur Herleitung der Druckgleichung für laminare Strömung in [70]. Um die Notation kompakt zu halten, werden in der Reynolds–gemittelten Impulsgleichung (Gl. 3.26) die laminaren Spannungsterme mit den Reynolds–Spannungen zu einer effektiven Schubspannung $\bar{\tau}_{ij,\text{eff}}$ zusammengefasst, die mit Gl. 3.7 und Gl. 3.29 geschrieben werden kann als

$$\bar{\tau}_{ij,\text{eff}} = \bar{\tau}_{ij} - \bar{\rho} \widetilde{u_i'' u_j''} = \mu_{\text{eff}} \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial \tilde{u}_m}{\partial x_m} \right) - \frac{2}{3} \delta_{ij} \bar{\rho} k \quad . \quad (\text{D.1})$$

Gl. 3.26 kann damit umgestellt werden zu

$$\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} = - \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j) + \frac{\partial \bar{\tau}_{ij,\text{eff}}}{\partial x_j} + \bar{\rho} \tilde{g}_i - \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{u}_i) \quad . \quad (\text{D.2})$$

Die Anwendung des Divergenz–Operators auf diese Gleichung liefert:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} \right) = - \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j - \bar{\tau}_{ij,\text{eff}}) \right] + \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{g}_i)}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{u}_i) \quad . \quad (\text{D.3})$$

Außerdem liefert die Anwendung einer zeitlichen Ableitung auf die Massenerhaltung (Gl. 3.25):

$$\frac{\partial^2 \bar{\rho}}{\partial t^2} + \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i) = 0 \quad . \quad (\text{D.4})$$

Da der Impuls eine Zustandsgröße ist, gilt der Schwarz'sche Satz:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{u}_i) = \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i) \quad . \quad (\text{D.5})$$

Damit ergibt sich aus Gl. D.3 und Gl. D.4 die Druckgleichung in der gesuchten Form:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} \right) = - \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j - \bar{\tau}_{ij,\text{eff}}) \right] + \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{g}_i)}{\partial x_i} + \frac{\partial^2 \bar{\rho}}{\partial t^2} \quad . \quad (\text{D.6})$$

E Polynome für den Wasserstoffgehalt in Rechnungen mit Gradient

Der Wasserstoff–Molenbruch für mittlere Wasserstoffgehalte von 10, 20, 30 und 40% wurde aus 3D–Eindüsenrechnungen [66] gewonnen. Der resultierende eindimensionale Verlauf über der Kanalhöhe nach 3 s Wartezeit kann durch Polynome fünften Grades ausgedrückt werden:

$$x_{H_2} = a_5 y^5 + a_4 y^4 + a_3 y^3 + a_2 y^2 + a_1 y + a_0 \quad .$$

Die jeweiligen Koeffizienten sind in Tab. E.1 gegeben. Dabei ist die Höhenkoordinate in Metern einzusetzen ($y \in [-0,06; 0]$). Wasserstoffgehalte, die zwischen den tabellierten Werten liegen, werden linear interpoliert.

	10%	20%	30%	40%
a_5	$-3,5096 \cdot 10^4$	$1,8472 \cdot 10^5$	$3,7046 \cdot 10^5$	$5,6996 \cdot 10^5$
a_4	$-3,2606 \cdot 10^4$	$-1,4072 \cdot 10^4$	$1,8926 \cdot 10^4$	$6,6664 \cdot 10^4$
a_3	$-5,2576 \cdot 10^3$	$-6,7836 \cdot 10^3$	$-5,7421 \cdot 10^3$	$-2,6212 \cdot 10^3$
a_2	$-2,6215 \cdot 10^2$	$-4,1797 \cdot 10^2$	$-4,6044 \cdot 10^2$	$-4,1188 \cdot 10^2$
a_1	$-3,8466 \cdot 10^{-1}$	$-6,0981 \cdot 10^{-1}$	$-4,9862 \cdot 10^{-1}$	$-1,7976 \cdot 10^{-1}$
a_0	$1,9909 \cdot 10^{-1}$	$3,7736 \cdot 10^{-1}$	$5,2644 \cdot 10^{-1}$	$6,4839 \cdot 10^{-1}$

Tabelle E.1: Koeffizienten zur Bestimmung des Wasserstoffgehalts in Rechnungen mit Konzentrationsgradient.

F Berechnung der Zustände hinter einem senkrecht reflektierten Stoß

Ein Verdichtungsstoß, der mit der Mach-Zahl Ma_S senkrecht auf eine Wand zuläuft, wird mit der Mach-Zahl Ma_R reflektiert. Da das Fluid an der Wand zur Ruhe kommen muss, gilt dabei folgender Zusammenhang [3]:

$$\frac{Ma_R}{Ma_R^2 - 1} = \frac{Ma_S}{Ma_S^2 - 1} \sqrt{1 + \frac{2(\kappa - 1)}{(\kappa + 1)^2} (Ma_S^2 - 1) \left(\kappa + \frac{1}{Ma_S^2} \right)} \quad (F.1)$$

Der in Kap. 5.2 betrachtete Stoß hat die Mach-Zahl $Ma_S = 3,21$, sodass man für $\kappa = 1,4$

$$\frac{Ma_R}{Ma_R^2 - 1} = 0,591 \quad (F.2)$$

erhält. Die positive Lösung dieser quadratischen Gleichung ist die Reflexions-Mach-Zahl $Ma_R = 2,40$. Das durch den ersten Stoß bereits auf $p_1 = 12,0$ bar und $T_1 = 860$ K vorverdichtete Gemisch erfährt über diesen Stoß eine weitere Druckerhöhung auf (Gl. 5.1)

$$p_2 = p_1 \left(1 + \frac{2\kappa}{\kappa + 1} (Ma_R^2 - 1) \right) = 79 \text{ bar} \quad . \quad (F.3)$$

In analoger Weise ergibt sich ein Temperaturanstieg (Gl. 5.2) auf

$$T_2 = T_1 \left(1 + \frac{2\kappa}{\kappa + 1} (Ma_R^2 - 1) \right) \left(1 - \frac{2}{\kappa + 1} \left(1 - \frac{1}{Ma_R^2} \right) \right) = 1755 \text{ K} \quad . \quad (F.4)$$

G Druckschriebe aus den durchgeführten Simulationen

Übersicht:

- BR30 15% H₂ homogen: Abb. G.1
- BR30 20% H₂ homogen: Abb. G.2
- BR30 25% H₂ homogen: Abb. G.3
- BR30 15% H₂ mit Gradient: Abb. G.4
- BR30 20% H₂ mit Gradient: Abb. G.5
- BR30 25% H₂ mit Gradient: Abb. G.6

- BR60 25% H₂ homogen: Abb. G.7
- BR60 30% H₂ homogen: Abb. G.8
- BR60 25% H₂ mit Gradient: Abb. G.9
- BR60 30% H₂ mit Gradient: Abb. G.10

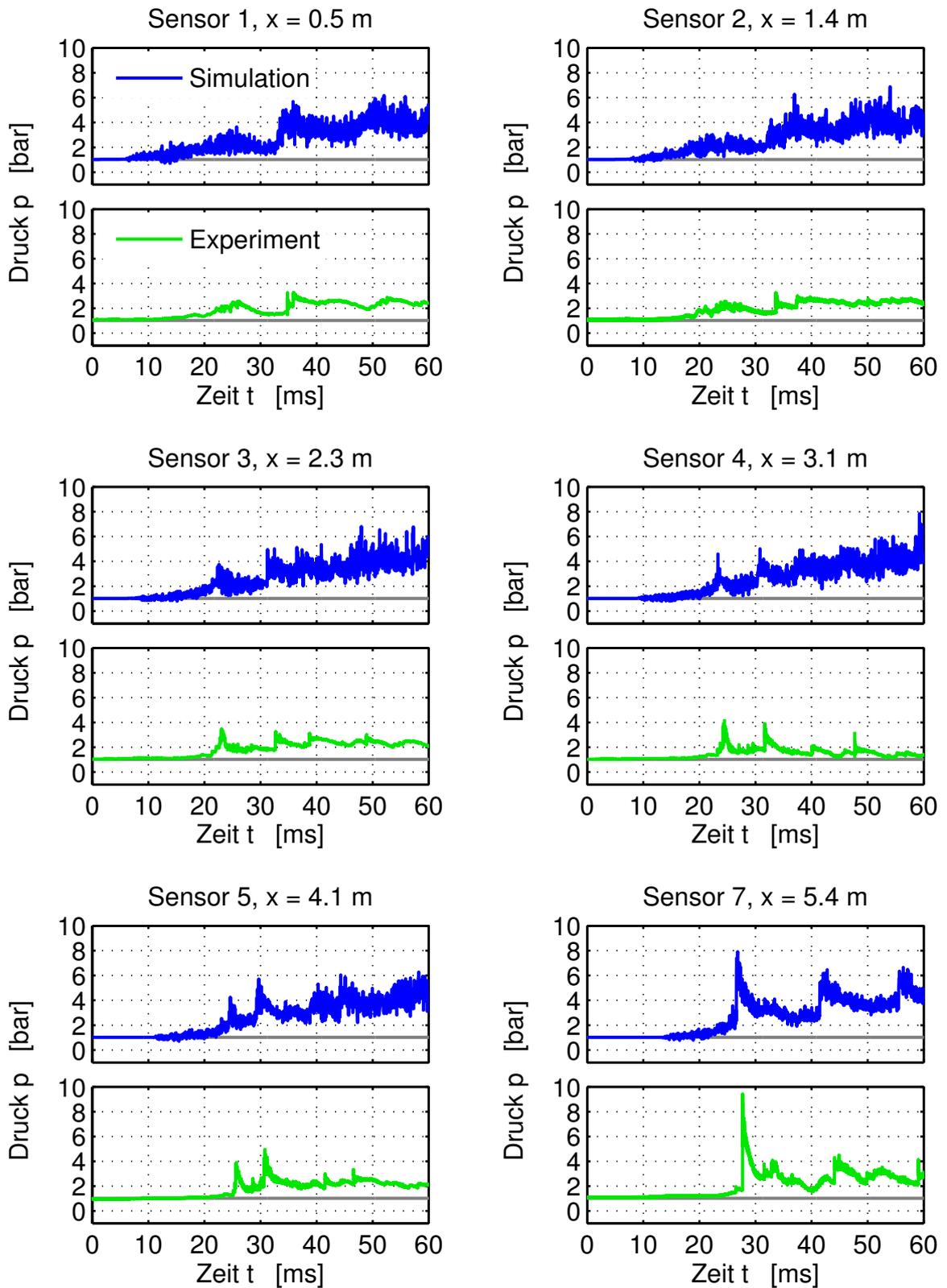


Abbildung G.1: Druckschriebe für die Konfiguration BR30 mit 15% H₂ (homogen).

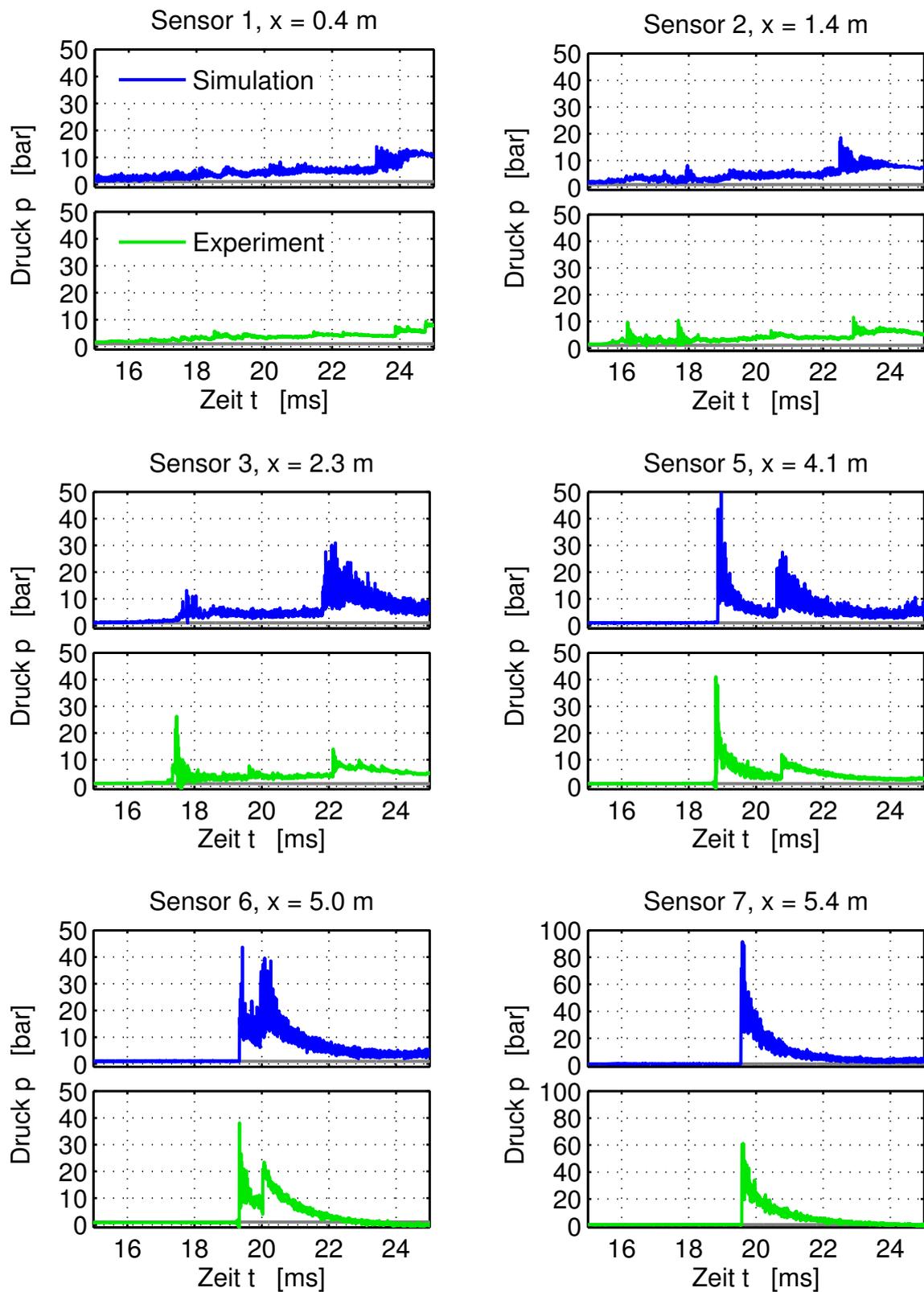


Abbildung G.2: Druckschriebe für die Konfiguration BR30 mit 20% H₂ (homogen).

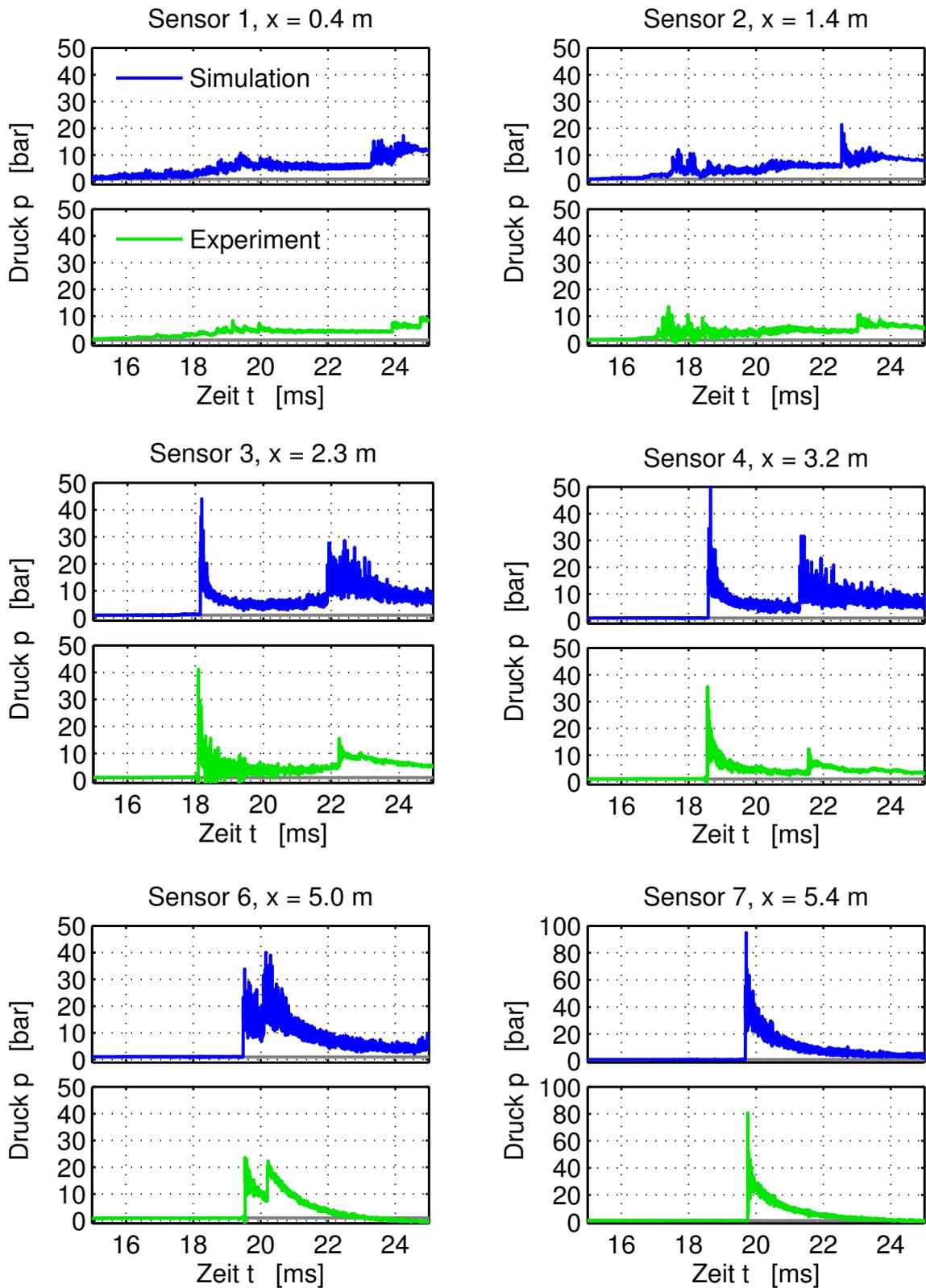


Abbildung G.3: Druckschriebe für die Konfiguration BR30 mit 25% H₂ (homogen).

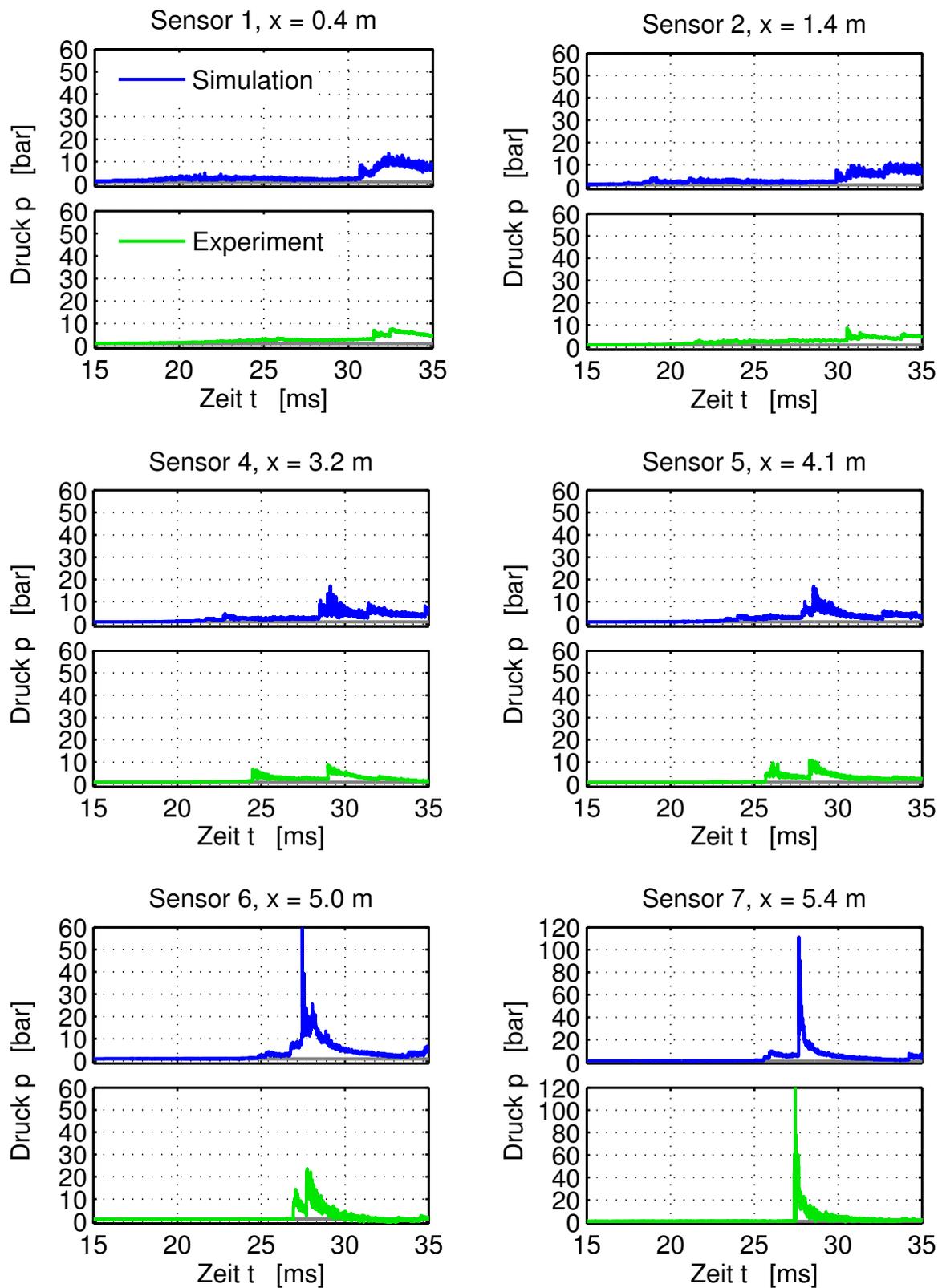


Abbildung G.4: Druckschriebe für die Konfiguration BR30 mit 15% H_2 (mit Konzentrationsgradient).

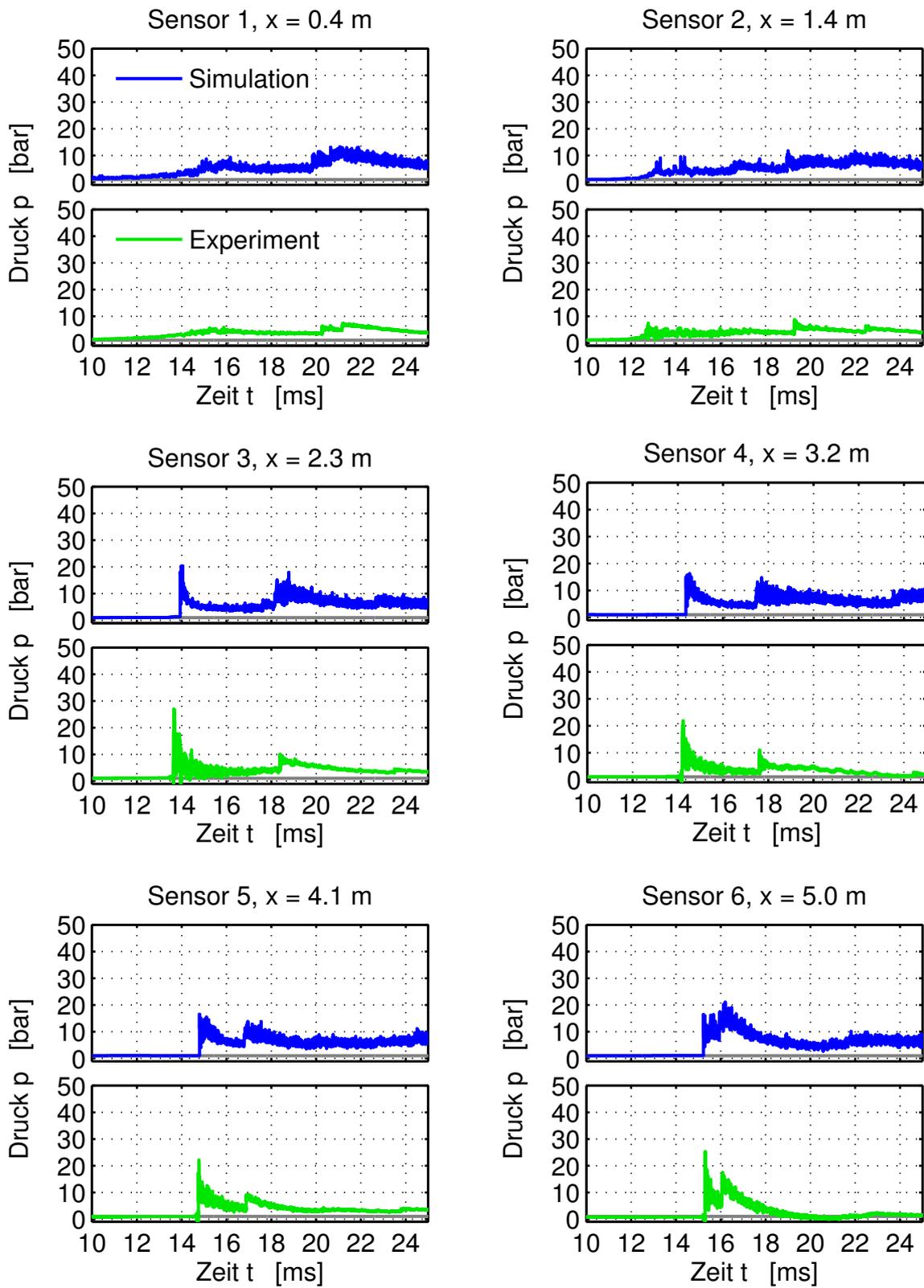


Abbildung G.5: Druckschreibe für die Konfiguration BR30 mit 20% H₂ (mit Konzentrationsgradient).

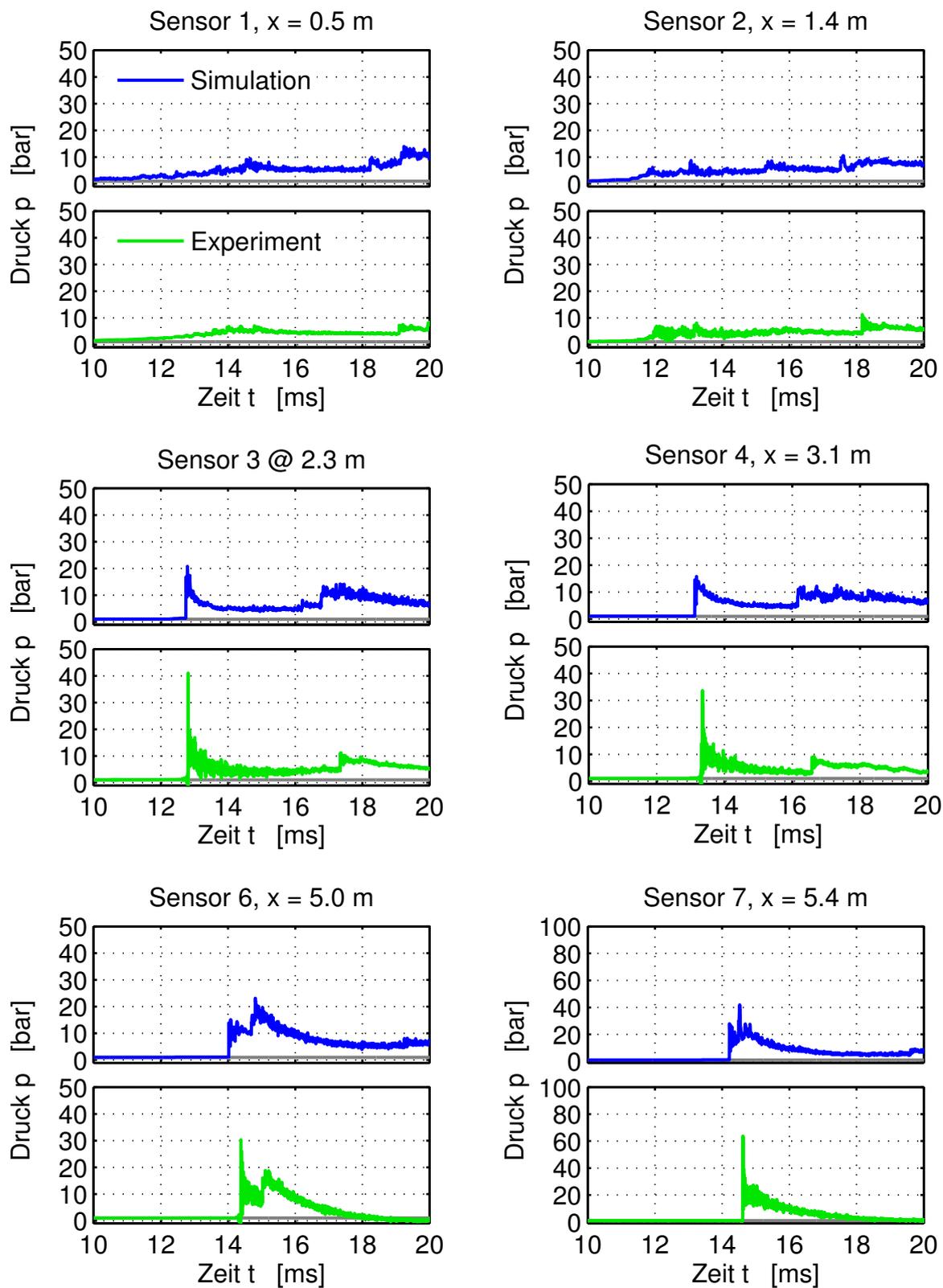


Abbildung G.6: Druckschriebe für die Konfiguration BR30 mit 25% H_2 (mit Konzentrationsgradient).

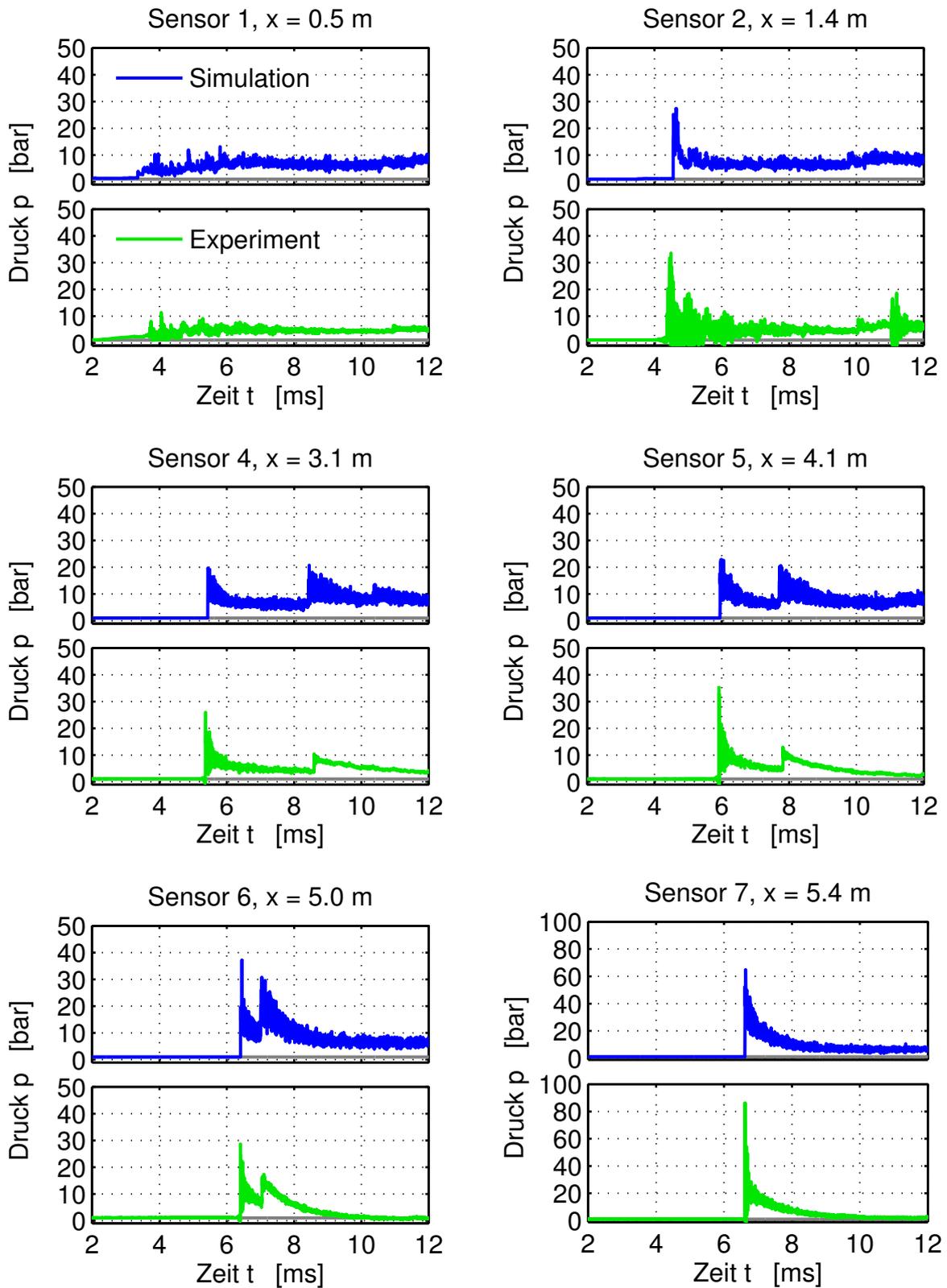


Abbildung G.7: Druckschriebe für die Konfiguration BR60 mit 25% H₂ (homogen).

G Druckschriebe aus den durchgeführten Simulationen

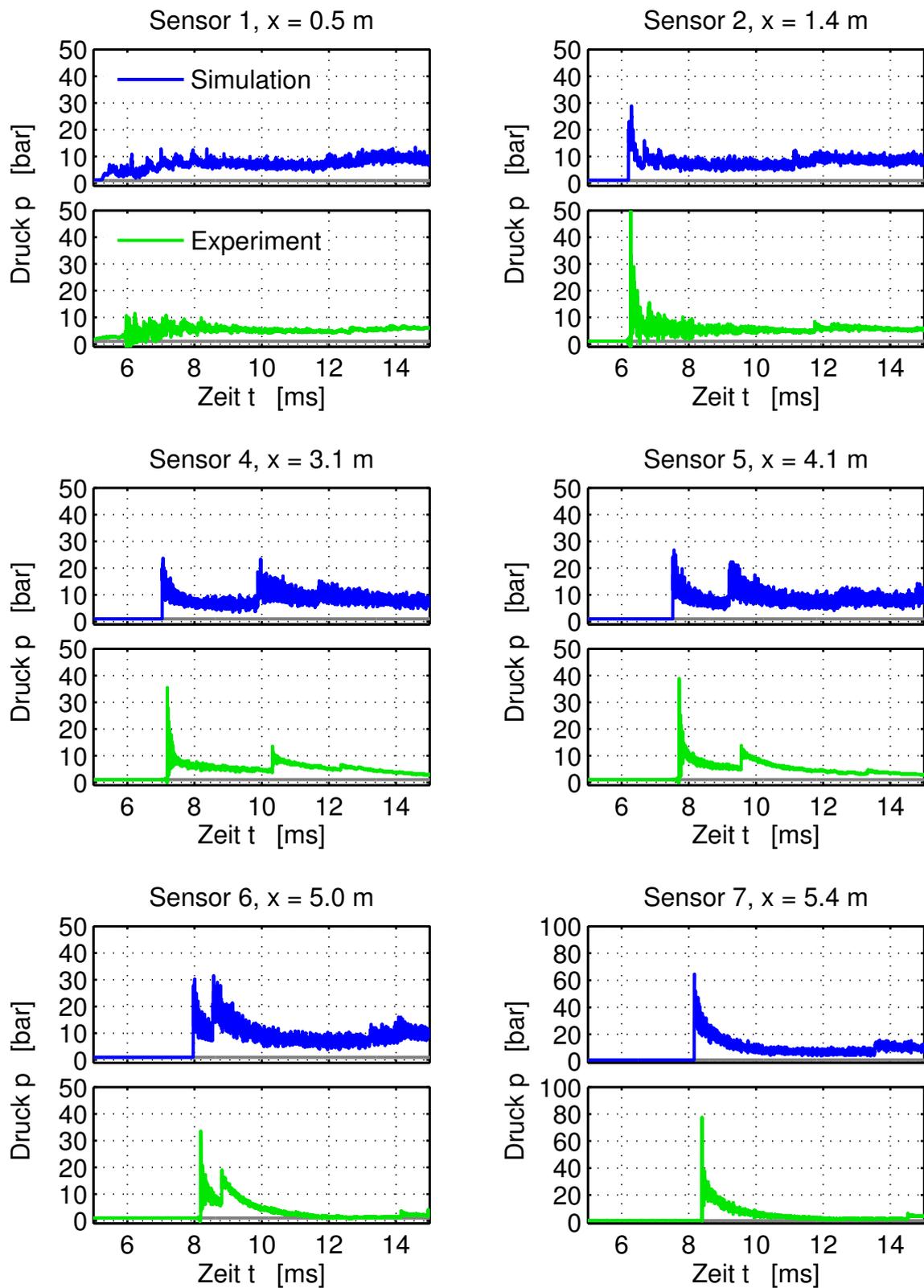


Abbildung G.8: Druckschriebe für die Konfiguration BR60 mit 30% H₂ (homogen).

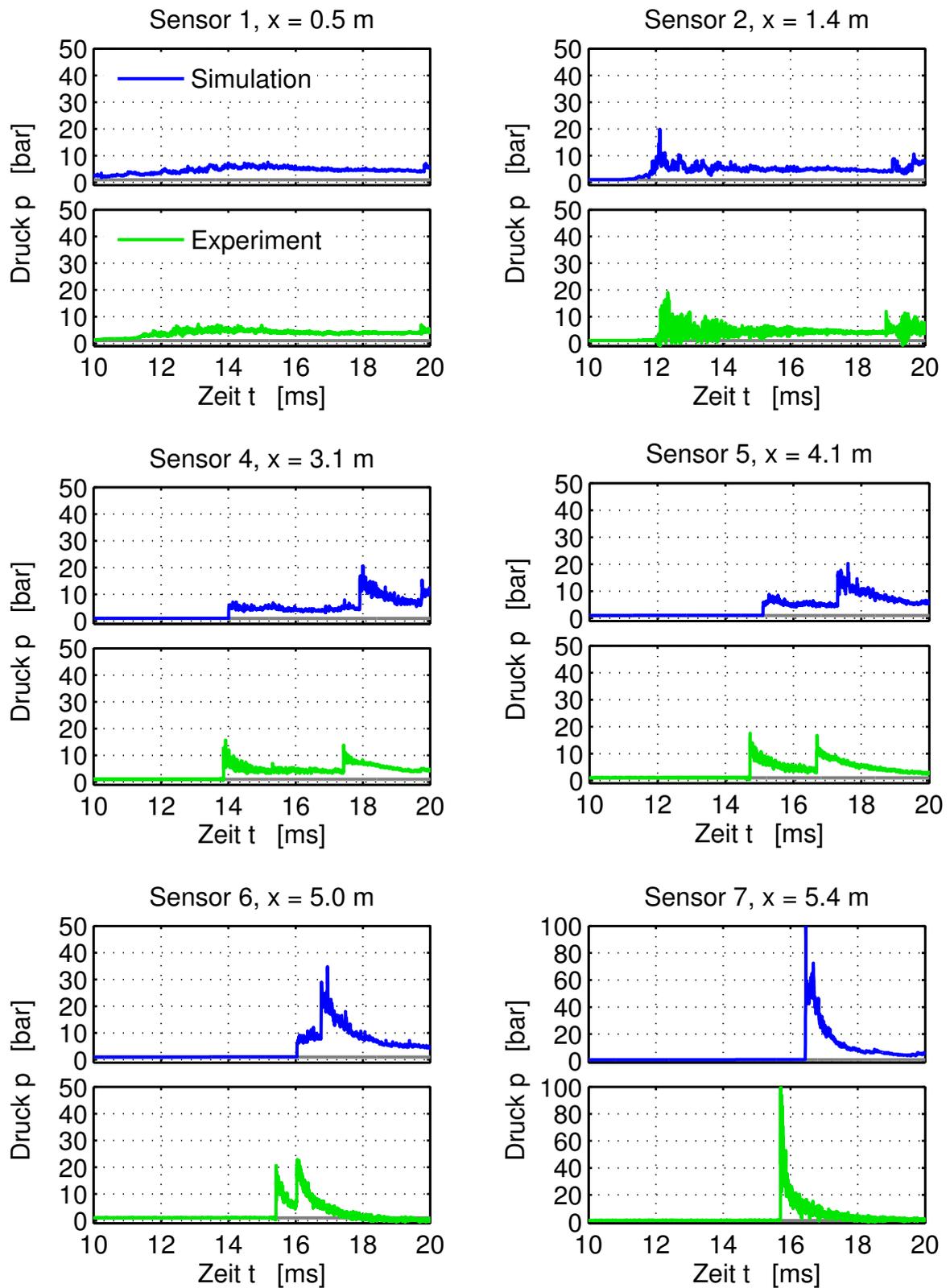


Abbildung G.9: Druckschreibe für die Konfiguration BR60 mit 25% H₂ (mit Konzentrationsgradient).

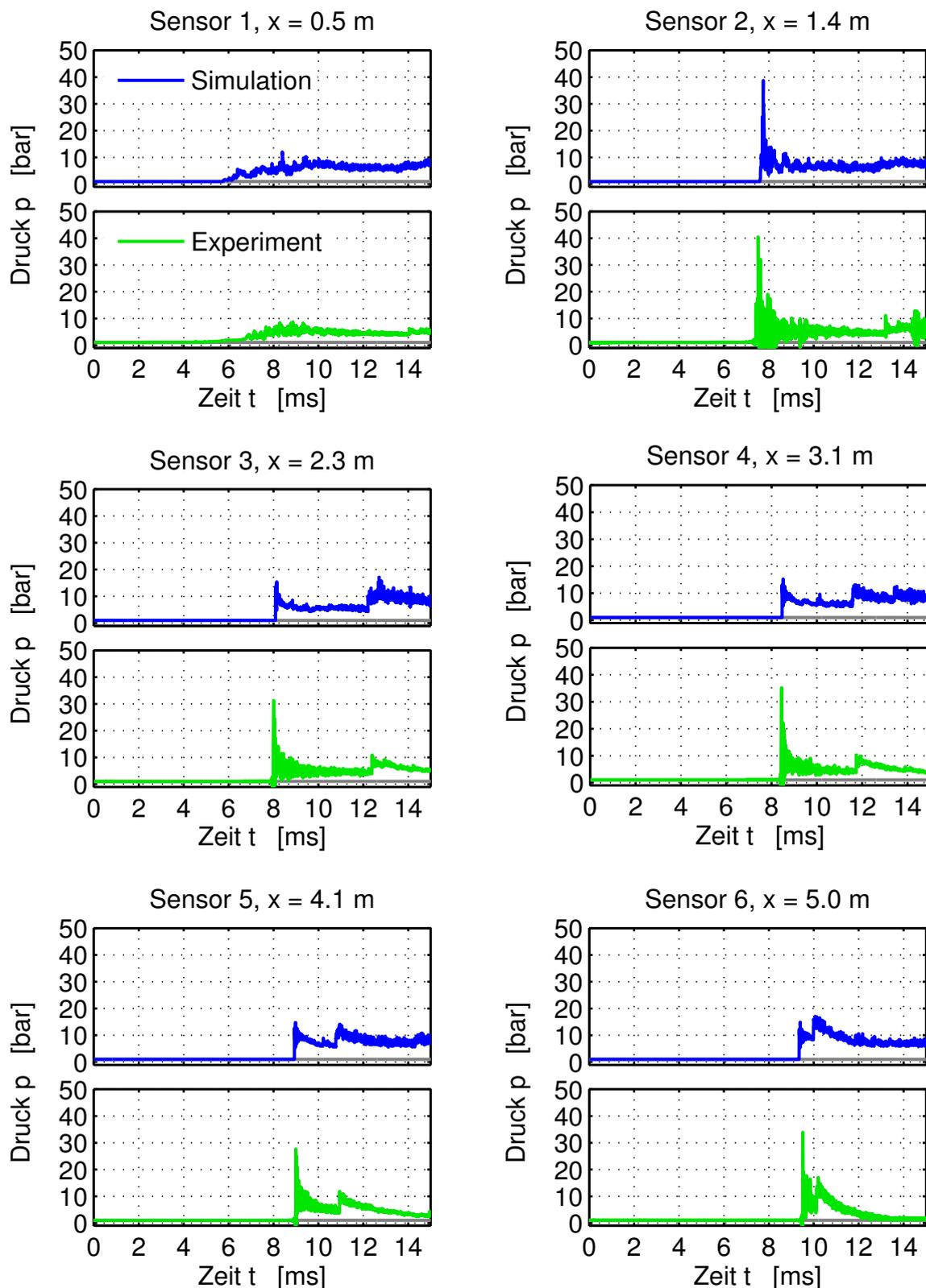


Abbildung G.10: Druckschriebe für die Konfiguration BR60 mit 30% H₂ (mit Konzentrationsgradient).