

Lehrstuhl A für Thermodynamik
Technische Universität München

Messungen und Simulationen zur Wechselwirkung zwischen Turbulenz und vorgemischten Flammen

Bodo Durst

Vollständiger Abdruck der von der Fakultät für Maschinenwesen
der

Technischen Universität München
zur Erlangung des akademischen Grades eines

DOKTOR – INGENIEURS

genehmigten Dissertation.

Vorsitzender: Univ.-Prof. Dr.-Ing. H.-P. Kau
Prüfer der Dissertation: 1. Univ.-Prof. Dr.-Ing., Dr.-Ing. E.h.
F. Mayinger, emeritiert
2. Univ.-Prof. W. Polifke, Ph.D. (CCNY),
(schriftliche Beurteilung)
Univ.-Prof. Dr.-Ing. Th. Sattelmayer,
(mündliche Prüfung)

Die Dissertation wurde am 30.06.2000
bei der Technischen Universität München eingereicht und durch
die Fakultät für Maschinenwesen am 10.10.2000 angenommen.

Für Friederike,
Simon, Jakob und Tilman

Vorwort

Die vorliegende Arbeit entstand am Lehrstuhl A für Thermodynamik der Technischen Universität München. Meinem Lehrer Herrn Prof. em. Dr.-Ing. Dr.-Ing. E.h. F. Mayinger danke ich nicht nur für die Möglichkeit, die Arbeit an seinem Lehrstuhl durchführen zu können und für die Betreuung der Arbeit, sondern auch für die Freiheit in der Bearbeitung der mir gestellten wissenschaftlichen Aufgabe sowie für das Vertrauen, das er mir nicht nur auf diesem Gebiet entgegenbrachte.

Herrn Prof. W. Polifke, Ph.D. danke ich für die Übernahme des Koreferates, Herrn Prof. Dr.-Ing. Th. Sattelmayer für die kurzfristige Vertretung von Herrn Prof. Polifke bei der mündlichen Prüfung sowie Herrn Prof. Dr.-Ing. H.-P. Kau für die Übernahme des Vorsitzes der Prüfung.

Die Hilfe zahlreicher Studenten im Rahmen von Studien- und Diplomarbeiten sowie als studentische Hilfskräfte hat zu einem großen Teil zu dieser Arbeit beigetragen. Hier bedanke ich mich insbesondere bei den Herren Dominikus Hofmann, Andreas Nitschke und Tobias Samtleben, stellvertretend auch für die anderen, die ich nicht alle aufführen kann.

Mein Dank gilt auch allen Kolleginnen und Kollegen, mit denen ich während meiner Zeit am Lehrstuhl A für Thermodynamik zusammenarbeiten durfte. Insbesondere danke ich hier Herrn Nikolai Ardey, mit dem ich das Forschungsprojekt, in dessen Rahmen die vorliegende Arbeit entstand, gemeinsam bearbeitete. Die gute Kooperation und Unterstützung innerhalb der Verbrennergruppe hat entscheidend zum Gelingen der Arbeit beigetragen und viele der Ergebnisse und Erkenntnisse resultieren aus Anregungen und Diskussionen innerhalb der Gruppe. Stellvertretend bedanke ich mich hierfür bei Herrn Martin Jordan und Herrn Andreas Eder, die mich auch mit der Durchsicht meiner Arbeit sehr unterstützt haben.

Meinen Eltern danke ich für die Unterstützung, durch die sie mir die vorliegende Arbeit ermöglichten. Die Möglichkeit meines Studiums sowie ihr Rückhalt haben mir die Voraussetzungen für die vorliegende Arbeit gegeben. Meinem Vater danke ich zudem für die Durchsicht der Endform der Arbeit sowie für die vielen Anregungen in deren Verlauf.

Zum Schluß, jedoch nicht zuletzt bedanke ich bei meiner Frau Friederike, die mir durch ihre ausdauernde Unterstützung und ihre Geduld, die

ich sehr in Anspruch genommen habe, die Fertigstellung meiner Arbeit ermöglicht hat. Auch danke ich allen anderen meiner Familie, die mich entweder als Vater sehr oft entbehren mußten oder mir sonst durch ihren Einsatz geholfen haben.

Die Arbeit entstand im Rahmen eines durch das BMBF über die Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit geförderten Forschungsprojektes. Für die Finanzierung und Förderung sei ebenfalls gedankt.

München, im November 2000

Bodo Durst

Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis	x
Formelzeichen	xi
1 Einleitung	1
1.1 Problemstellung und Zielsetzung	1
1.2 Überblick über bisherige Arbeiten	3
2 Grundlagen turbulenter Flammenfronten	7
2.1 Mittelung und Definitionen in turbulenten Strömungen	7
2.2 Längen- und Zeitmaße turbulenter Strömungen	10
2.3 Chemische Zeitmaße und turbulente Brennbereiche	14
2.4 Schließungsansätze für die turbulente Reaktionsrate	18
3 Lokale Messung der Strömungsgeschwindigkeit	22
3.1 Beschreibung des Meßaufbaus	22
3.1.1 Versuchsanlage und integrale Meßtechnik	22
3.1.2 Betrachtete Hindernisgeometrien	26
3.1.3 Lokale Laser-Doppler Strömungsmessungstechnik	28
3.1.4 Eigenschaften und Größe der Streuteilchen	36
3.2 Auswertung der LDA-Messungen	38
3.2.1 Hauptströmung und Akustikeffekte im Verbrennungsrohr	38
3.2.2 Vorgehensweise zur LDA-Messungsauswertung	43
3.2.3 Konditionierung der Meßdaten	52
3.3 Ergebnisse	55
3.3.1 Zeitverläufe der Strömungsgeschwindigkeit	55
3.3.2 Turbulenz vor der Flammenfront	79
3.3.3 Einfluß der Turbulenz auf die Flammengeschwindigkeit und turbulente Brenngeschwindigkeit	94

4	Numerische Simulation turbulenter Verbrennungen	102
4.1	Überblick und Problemstellung	102
4.1.1	Erhaltungsgleichungen	103
4.1.2	Chemische Umsetzungsrate und Schließungsproblem	115
4.2	Schließungsansatz mit Hilfe von Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen . . .	120
4.2.1	Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen	120
4.2.2	Die Reaktionsfortschrittsvariable	125
4.2.3	Schließungsansatz mit vorgegebener Form der PDF	128
4.2.4	Numerische Umsetzung für CFD-Berechnungen	133
4.3	Berücksichtigung chemischer Reaktionskinetik	144
4.3.1	Globale Einschrittbetrachtung	145
4.3.2	Detaillierte Reaktionskinetik	154
5	Simulation der Flammenausbreitung und Vergleich mit Messungen in der MuSCET-Anlage	167
5.1	Berechnungsdetails	167
5.1.1	Simulationsprogramm und Berechnungsverfahren	167
5.1.2	Numerische Darstellung der Geometrie	170
5.1.3	Rand- und Anfangsbedingungen	174
5.1.4	Numerische Parameter	177
5.1.5	Druckverlustansatz und Platzen der Membran	177
5.1.6	Auftriebsterme	178
5.1.7	Anpassung empirischer Faktoren	179
5.2	Ergebnisse	181
5.2.1	Simulationen ohne Hindernis	182
5.2.2	Hinderniseinfluß auf die Flammenausbreitung	188
6	Zusammenfassung	193
	Literatur	197

A	Rechenregeln für die Zeit- und Favre-Mittelung	207
A.1	Zeitliche Mittelung	207
A.2	Favre-Mittelung	207
B	Maximalwert der Varianz	209
C	Gleichungen für zweidimensionales Newtonverfahren	211
C.1	Verfahren mit geklippter Gaußfunktion	211
C.2	Verfahren mit normierter Gaußfunktion	213

Abbildungsverzeichnis

2.1	Zeitverläufe in turbulenter Strömung	7
2.2	Vergleich chemischer und physikalischer Zeitmaße (nach [Maa93])	14
2.3	Unterscheidung turbulenter Brennbereiche nach Borghi [Bor84] und zugeordnete Flammentypen	15
2.4	Unterscheidung turbulenter Brennbereiche nach Peters [Pet97]	17
3.1	Abmessungen der MuSCET-Anlage (aus [AM98a])	23
3.2	Integration des LDA-Systems in den MuSCET-Aufbau (Ansicht von oben)	24
3.3	MuSCET-Anlage mit integraler Meßtechnik (aus [Ard98])	25
3.4	Untersuchte Strömungshindernisse und Bezeichnungen (die Bezeichnungen wurden von Ardey [Ard98] übernommen)	27
3.5	Optikkomponenten des LDA-Meßsystems	29
3.6	Lage und Bezeichnung der LDA-Meßpositionen im leeren Rohr (Hindernissbezeichnung: NON)	33
3.7	Lage und Bezeichnung der LDA-Meßpositionen an den Hindernissen	33
3.8	Gemessene Häufigkeitsverteilung der Seedingteilchengröße	37
3.9	Bestimmung des optimalen Mittelungsintervalls; Verlauf des Korrelationskoeffizienten über der zur Berechnung des laufenden Mittelwertes verwendeten Anzahl der Meßpunkte	40
3.10	Bestimmung der optimalen Grenzfrequenz	41
3.11	Vergleich von auf unterschiedliche Arten bestimmte Mittellinien eines Zeitverlaufs der Strömungsgeschwindigkeit	42
3.12	Zeitlicher Verlauf der Datenrate und Festlegung der Flammenankunft	44
3.13	Auswerteintervall und Flammenposition bei 9 Vol.-% H ₂	46
3.14	Vergleich der Auswerteintervalle	47
3.15	Leistungsdichtespektren des Geschwindigkeitssignales für <i>eine</i> Messung (Berechnung in Auswerteintervall vor der Flamme)	49
3.16	Turbulenzintensitäten in Abhängigkeit vom Mittelungsintervall	51
3.17	Zeitverlauf mit offensichtlichen Ausreißern	53
3.18	Behandlung von Meßwert-Ausreißern	53
3.19	Meßwertefolge im <i>Sample and Hold</i> Modus	54
3.20	Reduzierte Meßwertefolge mit interpolierten Zwischenwerten	54

3.21	Zuordnung von Ereignissen zum zeitlichen Verlauf der Strömungsgeschwindigkeit	56
3.22	Vergleich zweier Zeitverläufe der Strömungsgeschwindigkeit hinsichtlich Meßbeginn	57
3.23	Zeitlicher (Punkte) und geglätteter Verlauf (Linie) des Ensemble-Mittelwertes der Strömungsgeschwindigkeit; leeres Rohr; 9 Vol.-% H ₂ ; Meßpunkt Mitte	58
3.24	Zeitverläufe des Ensemble-Mittelwertes der Strömungsgeschwindigkeit; leeres Rohr; 9 Vol.-% H ₂	59
3.25	Zeitverläufe des Ensemble-Mittelwertes der Strömungsgeschwindigkeit; leeres Rohr; 12 Vol.-% H ₂	61
3.26	Schlierenaufnahmen der Flammenausbreitung in der MuSCET-Anlage ohne Hindernis (aus Ardey [Ard98])	62
3.27	Zeitverläufe des Ensemble-Mittelwertes der Strömungsgeschwindigkeit; leeres Rohr; 16 Vol.-% H ₂	63
3.28	Zeitverläufe des Ensemble-Mittelwertes der Strömungsgeschwindigkeit; leeres Rohr; 16 Vol.-% H ₂	64
3.29	Modell für Strömungsfeld bei symmetrischer Flammenfront	65
3.30	Schlierenaufnahmen der Ausbreitung einer turbulenten Flamme um ein Rohrhindernis in einer kleinskaligen zylindrischen Versuchsanlage mit 72 mm Innendurchmesser; 8 Vol.-% H ₂ (aus Jordan [Jor99])	67
3.31	Zeitverläufe des Ensemble-Mittelwerts bei Rohrhindernis R2	68
3.32	Zeitverlauf axialer Ensemble-Mittelwert vor Rohr R2	69
3.33	Zeitverlauf axialer Ensemble-Mittelwert vor Rohr R3	69
3.34	Zeitverläufe der Quergeschwindigkeiten bei Zylinder H1	70
3.35	Zeitverlauf der Quergeschwindigkeit am Meßpunkt H2 im Nachlauf von Zylinder H1	71
3.36	Ensemble-Mittelwertverläufe; Gitter G2	72
3.37	Ensemble-Mittelwertverlauf hinter Gitter G2; Meßpunkt H1	73
3.38	Modell für das Strömungsfeld hinter dem Gitterhindernis	73
3.39	Verlauf der Axialgeschwindigkeit bei Hindernis T1; 9 Vol.-% H ₂	74
3.40	Verlauf der Axialgeschwindigkeit bei Hindernis T1; 16 Vol.-% H ₂	75
3.41	Mittlere Hauptströmungsgeschwindigkeiten für die Hindernisse H1, R2 und R3 (Meßpunkt U) im Vergleich zum leeren Rohr (NON, Meßpunkt OBEN)	77

3.42	Mittlere Hauptströmungsgeschwindigkeiten für das Hindernis G2 im Vergleich zum leeren Rohr (NON)	77
3.43	Mittlere Hauptströmungsgeschwindigkeiten in der Scherschicht des Hindernisses T1 im Vergleich zum leeren Rohr (NON)	78
3.44	Mittlere Hauptströmungsgeschwindigkeiten im Freistrahл des Hindernisses T1 im Vergleich zum leeren Rohr (NON)	78
3.45	rms-Werte der Schwankungsgeschwindigkeiten ohne Hindernis (NON)	80
3.46	Schwankungsgeschwindigkeiten bei Rohrhindernis R2	81
3.47	Schwankungsgeschwindigkeiten bei Rohrhindernis R3	83
3.48	Schwankungsgeschwindigkeiten bei Zylinderhindernis H1	84
3.49	Schwankungsgeschwindigkeiten bei Gitterhindernis G2	85
3.50	Schwankungsgeschwindigkeiten bei Türhindernis T1	87
3.51	Schwankungsgeschwindigkeiten für alle Hindernisse in Abhängigkeit von der H ₂ -Konzentration	89
3.52	rms-Werte der Schwankungsgeschwindigkeiten in Abhängigkeit von der mittleren Geschwindigkeit	90
3.53	rms-Werte der Schwankungsgeschwindigkeiten in Abhängigkeit von der mittleren Geschwindigkeit im leeren Rohr als Referenz	91
3.54	Vergleich der Komponenten der Schwankungsgeschwindigkeiten	93
3.55	Maximale Flammengeschwindigkeit hinter den Hindernissen im Vergleich zur Flammengeschwindigkeit ohne Hindernis (aus Ardey [Ard98])	94
3.56	Lokale Flammengeschwindigkeit in Abhängigkeit von der Turbulenzintensität	95
3.57	Maximale Flammengeschwindigkeit in Abhängigkeit von der Turbulenzintensität	97
3.58	Maximale und lokale Flammengeschwindigkeit in Abhängigkeit von der mittleren Hauptströmungsgeschwindigkeit	98
3.59	Turbulente Brenngeschwindigkeit in Abhängigkeit von der Turbulenzintensität, Messungen von Loesel Sitar et al. [LSCG95]	99
3.60	Turbulente Brenngeschwindigkeit in Abhängigkeit von der Turbulenzintensität	100
4.1	Zur Definition der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (PDF)	120
4.2	Formen von PDFs des Mischungsbruches an verschiedenen Positionen in verschiedenen Strömungen (aus [Bil80])	121
4.3	Abschneiden von Bereichen der PDF außerhalb $0 \leq c \leq 1$	129

4.4	Form einer Gauß-PDF	133
4.5	Grafische Darstellung der Tabelle $\mu(\tilde{c}, \tilde{g})$	136
4.6	Grafische Darstellung der Tabelle $\sigma(\tilde{c}, \tilde{g})$	136
4.7	$f_{\tilde{c}}(\mu, \sigma)$ und $f_{\tilde{c}^{\prime 2}}(\mu, \sigma)$ für $\tilde{c} = 0.01, \tilde{g} = 0.5$	137
4.8	$f_{\tilde{c}}(\mu, \sigma)$ und $f_{\tilde{c}^{\prime 2}}(\mu, \sigma)$ für $\tilde{c} = 0.01, \tilde{g} = 0.98$	138
4.9	PDF-Formen für verschiedene Werte von \tilde{g}	140
4.10	PDF-Formen für verschiedene Werte von \tilde{c}	141
4.11	Modellfunktion für $w_3(c)$ für $E^* = 5.0$	142
4.12	Grafische Darstellung der Tabelle $\overline{w_3}(\tilde{c}, \tilde{g})$	143
4.13	Grafische Darstellung der Tabelle $\overline{c^{\prime} w_3}(\tilde{c}, \tilde{g})$	143
4.14	Extrapolation der Reaktionskonstanten nach Coffee et al. [CKM83]	148
4.15	Extrapolation der Reaktionskonstanten nach Varma et al. [VCB86]	150
4.16	Vergleich der Reaktionsraten $w_3(c)$ bei 16 Vol.-% H ₂	152
4.17	Vergleich der Reaktionsraten $w_3(c)$	153
4.18	H ₂ -O ₂ -N ₂ Reaktionsmechanismus nach Maas und Warnatz [WM93, MW88]	155
4.19	Stöchiometrische Modellflamme mit PREMIX	157
4.20	Stöchiometrische Modellflamme mit INSFLA	157
4.21	Vergleich der Verläufe von PREMIX und INSFLA (stöchiom. Gemisch)	158
4.22	Molanteilverläufe für alle Spezies für 16 Vol.-% H ₂	159
4.23	INSFLA-Verläufe für 9 Vol.-% H ₂	160
4.24	INSFLA-Verläufe für 12 Vol.-% H ₂	160
4.25	INSFLA-Verläufe für 16 Vol.-% H ₂	161
4.26	Vergleich von $w_3(c)$ bei 16 Vol.-% H ₂ mit INSFLA-Berechnung	162
4.27	Vergleich von $w_3(c)$ bei 12 Vol.-% H ₂ mit INSFLA-Berechnung	163
4.28	Vergleich von $w_3(c)$ bei 9 Vol.-% H ₂ mit INSFLA-Berechnung	163
4.29	Vergleich von $w_3(c)$ nach Bray [Bra80] bei 9 Vol.-% H ₂ mit INSFLA	164
4.30	Vergleich von $w_3(c)$ nach Bray [Bra80] bei 12 Vol.-% H ₂ mit INSFLA	164
4.31	Vergleich von $w_3(c)$ nach Bray [Bra80] bei 16 Vol.-% H ₂ mit INSFLA	165
4.32	16% H ₂ -Tabelle $\overline{w_3}(\tilde{c}, \tilde{g})$ mit $w_3(c)$ -Verläufen von INSFLA	166
4.33	16% H ₂ -Tabelle $\overline{c^{\prime} w_3}(\tilde{c}, \tilde{g})$ mit $w_3(c)$ -Verläufen von INSFLA	166

5.1	2D-Kontrollvolumendefinition in TASCflow (aus [Adv95])	167
5.2	3D-Kontrollvolumendefinition in TASCflow (aus [Adv95])	168
5.3	Vereinfachung der Geometrie der MuSCET-Anlage, Abmessungen und Bezeichnungen	170
5.4	Ansicht des Berechnungsgitters (verdoppelt) und Bezeichnung der Teilgeometrien	171
5.5	Aufgrund der Symmetrie für die Berechnung verwendetes <i>halbes</i> Berechnungsgitter	171
5.6	Verwendete Gittertopologie für Hindernis G2	172
5.7	Detail der Gittertopologie im Bereich der Hindernisses G2	172
5.8	Berechnungsgitter im Expansionstank und Druckverlust-Bereiche (dunkel hervorgehoben)	173
5.9	Zündbereich am Anfang des Berechnungsgebietes	176
5.10	Gemessener Druckverlauf für 16 Vol.-% H ₂ ohne Hindernis; Anpassungsbereiche für empirische Berechnungsfaktoren	180
5.11	Momentane und zeitgemittelte Flammenkonturen (nach Kuo [Kuo86]) . . .	181
5.12	Verteilung des Reaktionsfortschritts c ($0 \leq c \leq 1$) in der Symmetrieebene während des Anlaufens der Verbrennung bis zum Platzen der Membran; 16 Vol.-% H ₂ , ohne Hindernis	182
5.13	Vergleich des gemessenen und des berechneten zeitlichen Druckverlaufes an der Position des zweiten Druckaufnehmers (2145 mm vom Zündflansch); 16 Vol.-% H ₂ ; kein Hindernis (Ergebnis der Rechnung wurde um +3 ms in der Zeit verschoben)	183
5.14	Vergrößerte Darstellung von Abbildung 5.13	184
5.15	Vergleich des Ensemble-Mittelwertes der gemessenen Zeitverläufe der Strömungsgeschwindigkeit mit dem mit dem PDF-Modell berechneten Verlauf .	185
5.16	Vergleich eines einzelnen gemessenen Zeitverlaufes der Strömungsgeschwindigkeit mit dem mit dem PDF-Modell berechneten Verlauf	185
5.17	Zeit-Weg-Diagramm der Flammenposition in der Versuchsstrecke für alle Konzentrationen	186
5.18	Geschwindigkeits-Weg-Diagramm der Flammengeschwindigkeit in der Versuchsstrecke für alle Konzentrationen	186
5.19	Vergleich der gemessenen zeitlichen Druckverläufe an der Position des zweiten Druckaufnehmers (2145 mm vom Zündflansch) für das leere Rohr (NON) und das Gitterhindernis (G2)	189

- 5.20 Druckaufbau mit Gitterhindernis: Vergleich des gemessenen und des berechneten zeitlichen Druckverlaufes an der Position des zweiten Druckaufnehmers (2145 mm vom Zündflansch); 16 Vol.-% H₂; Gitterhindernis G2 (Ergebnis der Rechnung wurde um +7 ms in der Zeit verschoben) 190
- 5.21 Zeit-Weg-Diagramm der Flammenposition in der Versuchsstrecke mit Hindernis G2 für 16 Vol.-% H₂ 191
- 5.22 Zeit-Weg-Diagramm der Flammenposition in der Versuchsstrecke mit Hindernis G2 für alle Konzentrationen 192
- 5.23 Geschwindigkeits-Weg-Diagramm der Flammengeschwindigkeit in der Versuchsstrecke mit Hindernis G2 für alle Konzentrationen 192

Formelzeichen

Zeichen Bezeichnung

Skalare Größen

A	Preexponentieller Faktor der Arrheniusbeziehung
c	Reaktionsfortschrittsvariable
c_p	Wärmekapazität bei konstantem Druck
$c_{\varepsilon 1}, c_{\varepsilon 2}, c_{\mu}$	Konstanten des k - ε Modells
C	molare Konzentration
D	allgemeine Diffusivität
\mathcal{D}	Diffusivität einer Spezies in einem Trägergas
E	Aktivierungsenergie
f	Frequenz, Datenrate
g	normierte Schwankungsintensität des Reaktionsfortschrittes
G_i	Komponente der Auftriebskraft
h	Summe aus statischer und Bildungsenthalpie, Heavisidefunktion
h_s	statische Enthalpie
H	Totalenthalpie
H_f	Reaktionsenthalpie
H_g	Gesamtenthalpie
k	turbulente kinetische Energie
k_b	Geschwindigkeitskoeffizient der Rückreaktion
k_f	Geschwindigkeitskoeffizient der Hinreaktion
l	Länge, Längen-Mikromaß
l_{δ}	Dicke der Reaktionszone
L	Länge, integrales Längenmaß
L_C	charakteristische Länge
n	Stoffmenge, Gesamtstoffmenge eines Gemisches, Temperaturexponent der Arrheniusbeziehung
N	Anzahl Meßwerte, Anzahl Spezies
m	Masse
M	Molmasse
\mathcal{M}	chemisches Symbol einer Spezies
p	Druck
p_{α}	Partialdruck der Spezies α
P	Wahrscheinlichkeitsdichte

Zeichen	Bezeichnung
---------	-------------

q	Komponente der Wärmestromdichte
r	Abstand, allgemeine skalare Größe, Korrelationskoeffizient
r_f	stöchiometrisches Massenverhältnis
R	Autokorrelationskoeffizient, Radius, Anzahl Reaktionen
s	allgemeine skalare Größe
s_l	laminare Brenngeschwindigkeit
s_f	laminare Flammgeschwindigkeit
s_t	turbulente Brenngeschwindigkeit
S_u	Quellterm für Volumenkräfte
S_h	Quellterm für Energie
t	Zeit
T	Zeitintervall für Mittelung, Temperatur
u	allgemeine Geschwindigkeit, Geschwindigkeitsmaß, Geschwindigkeitskomponente
u_i	Geschwindigkeitskomponente
u	Geschwindigkeitskomponente
$v_{\alpha,i}$	Komponente der Diffusionsgeschwindigkeit der Spezies α
V	Volumen, Gesamtvolumen
V_α	Partialvolumen der Spezies α
w	Reaktionsrate, Geschwindigkeitskomponente
x	allgemeine Koordinate
x_i	Koordinatenrichtung
X_α	Molenbruch (Molanteil) der Spezies α
Y_α	Massenbruch (Massenanteil) der Spezies α

Griechische Symbole

α	Bezeichnung einer spezifischen Spezies
β	Bezeichnung einer spezifischen Reaktion
Γ	Bezeichnung einer spezifischen Reaktion
δ	Diracfunktion
δ_{ij}	Einheitstensor
δ_l	laminare Flammendicke
ε	Dissipationsrate der turbulenten kinetischen Energie
ε_t	turbulenter Austauschkoefizient für Skalare
ζ	Druckverlustbeiwert

Zeichen	Bezeichnung
---------	-------------

η	molekulare dynamische Viskosität
η_t	turbulente dynamische Viskosität
ϑ	allgemeine skalare Größe
λ	Wärmeleitfähigkeit, Längen-Mikromaß, Luftzahl, Wellenlänge
μ	Erwartungswert der Gaußfunktion
ν	kinematische Viskosität, stöchiometrisches Molverhältnis, stöchiometrischer Koeffizient, Iterationszähler
ρ	Dichte, Massenkonzentration
ρ_α	Massenkonzentration einer Spezies α in einem Gemisch (Partialdichte)
σ	Varianz, Kovarianz, Varianz der Gaußfunktion
$\sigma_{\tilde{k}}$	Schmidt-Zahl des k - ε Modells
$\sigma_{\tilde{\varepsilon}}$	Schmidt-Zahl des k - ε Modells
τ	Zeit-Mikromaß, Reaktionswärmeparameter
τ_c	chemisches Zeitmaß
τ_{ij}	Impulstransporttensor
φ	allgemeine skalare Größe, Winkel
Φ	Äquivalenzverhältnis

Indizes

0	unverbrannter Zustand, PDF-Grundfunktion
∞	komplett verbrannter Zustand
Br	Brennstoff
eff	effektiv
E	Intervall für rms-Bildung
G	Gitter
i, j, k	Laufindizes für Koordinatenrichtungen
l	laminar
L	integrale Maße
max	maximal
Ox	Sauerstoff, Oxidator
Pr	Produkte
rms	<i>root mean square</i> – Standardabweichung
s	Kolmogorov Mikromaße
t	turbulent
T	Taylor Mikromaße
α	Laufindex für chemische Spezies

Zeichen Bezeichnung

β	Laufindex für chemische Reaktionen
δ	bezogen auf Reaktionszone

Kennzahlen

Da	Damköhlerzahl
Ka	Karlovitzzahl
Pr	Prandtlzahl
Re	Reynoldszahl
Sc	Schmidtzahl
Tu	Turbulenzgrad

Konstanten

R_m	allgemeine (molare) Gaskonstante
-------	----------------------------------

1 Einleitung

1.1 Problemstellung und Zielsetzung

Leichtwasserreaktoren stellen aufgrund der mit ihrem Funktionsprinzip verknüpften Sicherheitsmerkmale und Überwachungs- bzw. Absicherungssysteme zweifellos einen hohen Standard in der risikoarmen Energieerzeugung dar. Setzt man jedoch einen hypothetischen, auslegungsüberschreitenden Störfall voraus, muß, aufgrund einer möglichen Wasser-Zirkonium-Reaktion bzw. der Wechselwirkung von Schmelze, Wasser und Beton oder anderer bekannter Mechanismen, von einer Freisetzung von Wasserstoff in sicherheitsrelevanten Mengen ausgegangen werden. Die Verbrennung oder gar Detonation des Wasserstoffes stellt ein hohes Gefährdungspotential für die Integrität des Reaktorsicherheitsbehälters dar. Szenarien zur Verminderung dieses Risikos sehen als Gegenmaßnahme auch die Implementierung von Zündern im Containment vor, die eine langsame Verbrennung (Deflagration) des Wasserstoffes einleiten, sobald brennbare Gasgemische vorliegen. Grundlage für diesen Vorschlag ist dabei die Annahme, daß die Freisetzung von Wasserstoff langsam geschieht, so daß ein mageres, ausreichend homogenes Gasgemisch vorliegt und daß die Energie möglicher Zündquellen nicht ausreicht, um schnelle Deflagrationen zu initiieren. Die somit vorausgesetzte langsame Verbrennung des Wasserstoffes ist im Vergleich zu Detonationen nur mit einem allmählichen Druckanstieg verbunden, der die Struktur des Reaktorcontainments nicht gefährdet. Für die Bewertung der vorgeschlagenen Wasserstoff-Gegenmaßnahme ist es jedoch notwendig, daß damit verbundene Risiken untersucht und in Betracht gezogen werden.

In früheren Untersuchungen [Bre88, Bea94] wurde gezeigt, daß anfangs langsame Verbrennungsvorgänge durch den Eintrag von Turbulenz erheblich beschleunigt werden können. Die Flamme selbst induziert eine Expansionsströmung auch in dem Bereich, in den sie hineinbrennt. Einbauten, die diese Strömung stören, führen dazu, daß Turbulenz generiert wird. Durch die Wechselwirkung zwischen Flamme und Turbulenz wird die Struktur der Flamme verändert, die Flammenfront wird gestreckt oder aufgeweitet, woraus eine höhere effektive Reaktionsrate resultiert. Die somit beobachtete größere Flammengeschwindigkeit kann wiederum die Expansionsgeschwin-

digkeit weiter erhöhen. Eskaliert diese Rückkopplung, können auch anfangs langsame Flammen stark beschleunigen und hohe Flammengeschwindigkeiten erreichen. Dies macht deutlich, daß für die Bewertung der vorgeschlagenen Sicherheitsvorkehrungen auch die Interaktion von Flammenfront und Turbulenz bei langsamen Deflagrationen eingehend untersucht werden muß, um auszuschließen, daß bisher möglicherweise unbeachtete Zusammenhänge zwischen chemischer Reaktion und turbulenter Durchmischung zu unvorhergesehenen Belastungen auf den Reaktorsicherheitsbehälter führen. Grundsätzliche Studien zu den oben beschriebenen Vorgängen wurden bereits in der Vergangenheit durchgeführt (s. Abschnitt 1.2). Der Turbulenzeintrag erfolgte jedoch meist mittels periodischer Hindernisanordnungen und als Versuchsstrecke wurden sehr oft lange zylindrische Rohre mit offenem Ende verwendet.

Die vorliegende Arbeit entstand im Rahmen eines vom Bundesminister für Bildung, Wissenschaft, Forschung und Technologie geförderten Projektes (vgl. [AM98a, DM99, EEM98, AM98b]). Die Untersuchungen die im Verlauf dieses Projektes durchgeführt werden konnten, hatten das Ziel, nicht allein den Zusammenhang zwischen Turbulenz und Flammengeschwindigkeit zu charakterisieren, sondern auch den zwischen Hindernisform und Turbulenz zu untersuchen. Für die Versuche wurden Einzelhindernisse verwendet, deren Geometrie typisch für in Reaktoranlagen vorkommende Einbauten und Gegenstände ist. Die Hindernisse wurden in einer Versuchsstrecke mit quadratischem Querschnitt der Expansionsströmung von vorge-mischten Wasserstoff-Luft-Flammen ausgesetzt. Der untersuchte Konzentrationsbereich lag zwischen 9 und maximal 18 Vol.-% H_2 . Ardey [Ard98] bestimmte im Rahmen des gemeinsamen Projektes mittels einer dichten Instrumentierung hochauflösender Meßsysteme die Zusammenhänge zwischen charakteristischen integralen Größen wie Druck, Flammenfortschritt und Flammengeschwindigkeit und konnte so die Hinderniswirkung ermitteln. Durch den Einsatz laseroptischer Meßverfahren (Schlieren und Laser induzierte Fluoreszenz) gelang ihm die Darstellung der Struktur der Flammenfronten, und er konnte diese unterschiedlichen Brennbereichen vorge-mischter Flammen zuordnen.

Die vorliegende Arbeit beschreibt sowohl experimentelle als auch numerische Untersuchungen. Ziel der Experimente war es dabei, den Turbulenzzustand nicht nur qualitativ sondern auch quantitativ zu erfassen. Zu

diesem Zweck wurden zeitlich und räumlich hochaufgelöste Messungen der Strömungsgeschwindigkeit mit einem Laser-Doppler-System durchgeführt. Aus diesen Messungen wurden die turbulenten Schwankungsgeschwindigkeiten, die die Turbulenz kennzeichnen, bestimmt und mit den Hindernisformen bzw. untersuchten Gemischkonzentrationen korreliert. Durch Vergleiche mit den von Ardey bestimmten integralen Größen konnten Zusammenhänge zwischen Turbulenzintensität und Flammengeschwindigkeit untersucht werden.

Der numerische Teil der vorliegenden Arbeit hatte zum Ziel, ein turbulentes Verbrennungsmodell zu erarbeiten und zu verifizieren, in Berechnungen einzusetzen und durch Vergleiche mit den mittels LDA durchgeführten Messungen der Strömungsgeschwindigkeit zu validieren. Die Strömungs- und Verbrennungssimulation nimmt im Rahmen der Auslegung von Reaktoranlagen eine maßgebliche Stellung ein. Derzeit zwingen jedoch Limitationen der zur Verfügung stehenden Rechenzeit und auch des Speicherplatzes dazu, die sich ergebenden Fragestellungen zum Teil stark zu vereinfachen, um überhaupt Lösungen erzielen zu können. Nicht zuletzt der Bereich der turbulenten Verbrennungsmodellierung weist hier Defizite hinsichtlich der Anwendbarkeit zur Verfügung stehender Modelle des Verbrennungsvorganges auf. Der Ansatz für die Modellierung der turbulenten Reaktionsrate, der vorgeschlagen wird, erlaubt es, einen größeren turbulenten Brennbereich als mit bisher üblichen Verbrennungsmodellen abzudecken.

1.2 Überblick über bisherige Arbeiten

Die meisten der bisherigen Arbeiten, die sich mit der turbulenten Flammenbeschleunigung durch die Wechselwirkung zwischen Hindernissen und Flammen beschäftigen, verwendeten zur Beurteilung der Flammenbeschleunigung die Flammengeschwindigkeit. Sofern es sich um Arbeiten aus dem Bereich der Sicherheitstechnik handelte, wurden auch die durch den Verbrennungsvorgang verursachten maximalen Überdrücke erfaßt. Ardey [Ard98] gibt einen guten Überblick über den Stand der Untersuchungen zu diesem Thema. Da die vorliegende Arbeit zwar auch die Flammen-Hindernis-Wechselwirkung betrachtete, der Schwerpunkt jedoch auf der

quantitativen Messung der Turbulenz, sowie der numerischen Modellierung der turbulenten Verbrennung lag, wird diese Übersicht hier kurz zusammengefaßt.

Ardey [Ard98] verweist auf frühe Arbeiten von Wheeler zusammen mit Mason [MW19], Chapman [CW26] und Robinson [RW33], die durch den Einsatz von zwei bzw. mehreren periodischen Hindernissen zeigten, daß sich gegenüber Rohren ohne Hindernis durch die Hinderniswirkung wesentlich höhere Flammengeschwindigkeiten ergeben können, teilweise sogar nahe der Detonationsgeschwindigkeit. Später gelang es vor allem durch Arbeiten von Moen et al. [MDK⁺79, MDKH80] und Lee et al. [LKK84], sowie Brehm und Mayinger [Bre88] aufzuzeigen, daß bei periodischen Hindernissen ein Rückkopplungsmechanismus zwischen Turbulenzeintrag durch die Hindernisse und der durch die Verbrennung induzierten Expansionsströmung für die Flammenbeschleunigung verantwortlich ist. Moen et al. [MLH⁺82] verglichen zudem durch den Einsatz unterschiedlicher Anzahlen von Blenden die Wirkung von Einzelhindernissen gegenüber mehrfachen Hindernissen. Sie zeigten auf, daß einer der maßgeblichen Einflußfaktoren die Blockierrate der eingesetzten Hindernisse ist. Untersuchungen in halb geschlossenen Geometrien und Geometrien mit Verbindung zur Umgebung von Urtiew et al. [UBH83] und Taylor et al. [Tay84, TB88] sowie in der freien Umgebung durch Harrison und Eyre [HE87] zeigten, daß auch hier periodische Hindernisse die Flammengeschwindigkeit signifikant vergrößern.

Zur Wirkung von Einzelhindernissen, wie sie auch in der vorliegenden Arbeit betrachtet wurden, existieren umfangreiche Untersuchungen von Phylaktou et al. [PA91b, PA91a, PAMK92, PLA94, APA95]. Sie untersuchten plattenförmige Hindernisse verschiedener Blockierrate sowie Gitterhindernisse in unterschiedlichen Explosionsrohren. Während dabei vor allem Kohlenwasserstoff-Luft-Gemische betrachtet wurden, zeigte der Vergleich mit einzelnen Versuchen mit Wasserstoff, daß bei gleicher Hinderniskonfiguration in H₂-Luft-Gemischen zum Teil erheblich höhere Flammengeschwindigkeiten erreicht werden. Starke und Roth untersuchten neben der ungestörten Ausbreitung einer Flamme in einem kurzen zylindrischen transparenten Rohr [SR83] auch die Wechselwirkung zwischen Flammen und Blenden und Gitterhindernissen [SR89]. Neben Druckaufnehmern setzten sie dabei Ionisationssonden zur Bestimmung der Flammenkontur und ein Laser-Doppler-System zur Messung der Strömungsgeschwindigkeit ein.

Zudem visualisierten sie die Form der Flammenfront mittels stroboskopischer Aufnahmen.

Untersuchungen zum Zusammenhang zwischen durch Strömungshindernisse generierte Turbulenz und Flammengeschwindigkeit sind weniger häufig in der Literatur zu finden. Auch die oben erwähnten Untersuchungen von Starke und Roth [SR83, SR89] setzen das LDA lediglich zur Bestimmung der mittleren Strömungsgeschwindigkeit und nicht zur Messung turbulenter Schwankungsgeschwindigkeiten ein. Dunn-Rankin und Sawyer [DRS85] nutzten das LDA ebenfalls lediglich um die mittlere Strömungsgeschwindigkeit im unverbrannten Bereich vor der Flamme zu bestimmen. Untersuchungen, die lokale, hochauflösende Meßmethoden wie Hitzdrahtsonden oder Laser-Doppler-Anemometer einsetzten, finden sich beispielweise bei Jones und Thomas [JT87], die beide Systeme gleichzeitig verwendeten, um in einem 8,9 m langen Verbrennungsrohr mit rechteckigem Querschnitt (76 mm × 25 mm) ohne Hindernisse und offenem Ende den Zusammenhang zwischen Turbulenzintensität und turbulenter Brenngeschwindigkeit zu untersuchen. Aufgrund mangelnder Genauigkeit bei der Bestimmung der lokalen Flammengeschwindigkeit gelang es ihnen zwar nicht, diesen Zusammenhang konkret anzugeben, sie unterstützten jedoch vorangegangene Untersuchungen von Bjorkhaug [Bjo86], der (allerdings in einem 1 m langen Verbrennungsrohr mit Hindernissen) angegeben hatte, daß die turbulente Brenngeschwindigkeit um den Faktor 3-4 größer war als die turbulenten Schwankungsgeschwindigkeiten.

Beauvais [Bea94] nutzte die Versuchsanlage in der Brehm und Mayinger [Bre88] bereits ihre Versuche durchgeführt hatten, um zu untersuchen wie sich bei periodischen Hindernissen der Hindernisabstand und die Blockierate auf die Flammenausbreitung auswirken. Anhand von Geschwindigkeitsmessungen mit dem auch in der vorliegenden Arbeit eingesetzten LDA-System konnte er dabei zwischen Flammenbeschleunigung durch homogenen Turbulenzeintrag (Turbulenzpromotion) und bei kleineren Blendendurchmessern auftretender Freistrahlzündung hinter den Hindernissen unterscheiden. Beauvais ermittelte aus dem über die Flammenfront auftretenden Geschwindigkeitsabfall der Geschwindigkeitskomponente in Richtung der Rohrachse die turbulente Brenngeschwindigkeit und gab ein Brenngesetz für den Zusammenhang mit den gemessenen turbulenten Schwankungsgeschwindigkeiten an.

Lindstedt und Sakthitharan [LS98] untersuchten in einem ca. 10 m langen rechteckigen Kanal (72 mm \times 36 mm) mittels LDA die Verbrennungsströmung um ein rechteckiges, plattenförmiges Hindernis, das eine Blockierrate von 50% hatte. Durch das sehr große Verhältnis zwischen Länge und Höhe des Kanals und die Positionierung des Hindernisses am Anfang des Kanals war es ihnen möglich, die Messungen durchzuführen, bevor die am geschlossenen Ende des Explosionsrohres reflektierten Druckwellen das Hindernis wieder erreichten. Lindstedt und Sakthitharans Untersuchungen zielten darauf ab, die instationäre Verbrennungsströmung eingehend hinsichtlich des Turbulenzzustandes zu charakterisieren. Hierzu bestimmten sie neben der Geschwindigkeitsverteilung in der Mittelebene des Rohres auch die Komponenten des Reynoldsspannungstensors, sowie die Produktions- und Dissipationsrate für die turbulente kinetische Energie. Aus diesen Werten leiteten Sie eine Abschätzung für die Karlovitzzahl Ka ab, mit Hilfe derer sie die untersuchte Verbrennungsströmung im Borghi-Diagramm (s. Abbildung 2.3) einordnen konnten.

In jüngster Zeit konnte Jordan [Jor99] in zwei Versuchsanlagen unterschiedlicher Größe zeigen, daß der turbulente Freistrah, der sich beim Durchströmen einer Blende mit sehr großer Blockierrate ergibt, dazu führen kann, daß die Flamme bei Erreichen der Blende den Bereich nach der Blende direkt bzw. erst nach einer gewissen Verzugszeit zündet oder aber die Flamme erlischt. Für den Fall der direkten Zündung führte Jordan die nachfolgende Flammenbeschleunigung auf die Erhöhung der Turbulenz vor der Flammenfront zurück, die er durch LDA-Messungen nachwies. Jordan stellte fest, daß die von Beauvais [Bea94] vorgeschlagene Beziehung für die turbulente Brenngeschwindigkeit diesen Zusammenhang sehr gut wiedergibt.

Der theoretische und numerische Teil der vorliegenden Arbeit bauen auf einer Vielzahl von Literaturstellen auf, die an dieser Stelle zusammenzufassen ungeeignet erscheint. Im nächsten Abschnitt werden grundlegende Verfahren zur numerischen Simulation turbulenter Verbrennungsvorgänge ohnehin im Zusammenhang mit dem bereits oben erwähnten Borghi-Diagramm im Hinblick auf ihren möglichen Einsatzbereich dargestellt. Andere Literaturstellen, auf die die vorliegende Arbeit aufbaut, werden im weiteren Verlauf ausführlich zitiert.

2 Grundlagen turbulenter Flammenfronten

2.1 Mittelung und Definitionen in turbulenten Strömungen

Turbulente Strömungsvorgänge zeichnen sich durch die Regellosigkeit von Wirbelbewegungen aus. In der Literatur (vgl. z.B. [TL83, Wil93]) existiert zur Generation, zum Transport und zur Dissipation turbulenter kinetischer Energie die Vorstellung einer Wirbelkaskade, die die Energie in den größten Wirbeln produziert und in immer kleiner werdende Wirbel weiterreicht, bis hin zu den kleinsten Wirbeln, in denen sie in innere Energie dissipiert. Als Folge dieser Wirbelinteraktionen zeigen die die Strömungsvorgänge beschreibenden physikalischen Größen in turbulenten Strömungen immer ein instationäres Verhalten, d.h. sie variieren stochastisch mit dem Ort *und* der Zeit.

Betrachtet man in einer *im Mittel* stationären Strömung die Messung einer Größe φ an einem festen Ort über der Zeit, so ist beispielsweise ein Verlauf möglich, wie er in Abbildung 2.1(a) dargestellt wird. Der zeitliche Mittelwert der Größe φ ist durch die folgende Vorschrift bestimmt:

$$\bar{\varphi} = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T \varphi(t) dt. \quad (2.1.1)$$

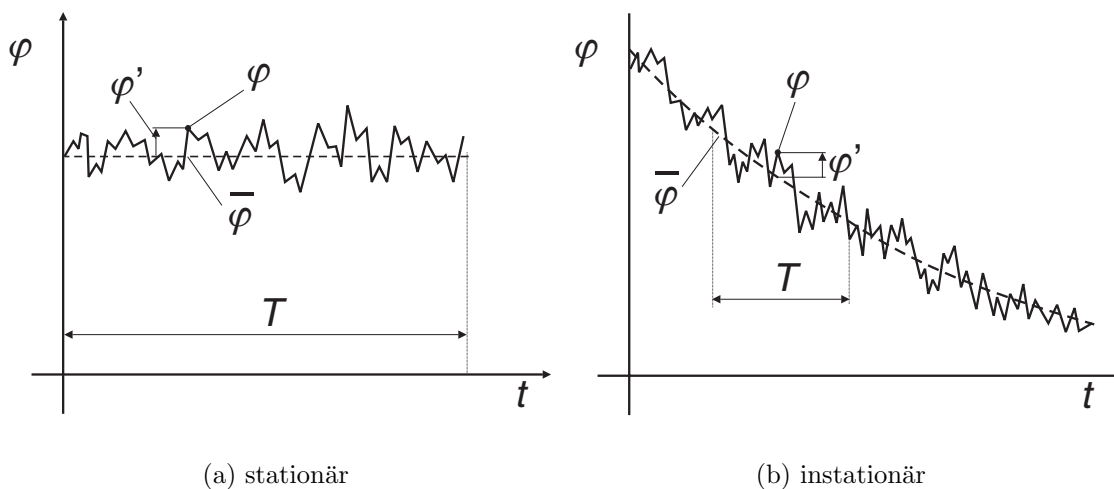


Abbildung 2.1: Zeitverläufe in turbulenter Strömung

Wie von Reynolds [Rey95] vorgeschlagen, kann der Momentanwert dann durch den Mittelwert $\bar{\varphi} \neq f(t)$ und die Abweichung des Momentanwertes vom Mittelwert $\varphi'(t)$ beschrieben werden:

$$\varphi(t) = \bar{\varphi} + \varphi'(t).$$

Bei Vorgängen, die auch im zeitlichen Mittel instationär sind, wie die in der vorliegenden Arbeit betrachtete Flammenausbreitung, ergibt sich dagegen vielmehr ein Verlauf wie in Abbildung 2.1(b) dargestellt. Eine Mittelung nach Gleichung (2.1.1) würde hierbei die transienten Anteile des Vorganges eliminieren. Um solche Vorgänge dennoch behandeln zu können, kann entweder eine Ensemble-Mittelung über mehrere Realisierungen des Versuches gebildet werden oder, sofern sich die Zeitmaße der turbulenten Schwankung und der instationären Hauptströmung genügend voneinander unterscheiden, ein instationärer (laufender) Mittelwert, der wie folgt definiert ist:

$$\bar{\varphi}(t) = \frac{1}{T} \int_{t-T/2}^{t+T/2} \varphi(t) dt.$$

Das Mittelungsintervall T muß dabei im Vergleich zu den turbulenten Schwankungen groß, im Vergleich zur instationären Hauptströmung jedoch ausreichend klein gewählt sein, um eine begründbare Basis für die vorliegenden Betrachtungen zu erhalten.

Aus Gründen, die in Abschnitt 4.1.1 weiter dargestellt werden, ist es bei Strömungsvorgängen, in denen sich die Dichte signifikant ändert, von Vorteil, für die Betrachtungen nicht die Größe $\bar{\varphi}(t)$ sondern einen dichtegegewichteten (Favre-)Mittelwert (vgl. [Fav65]) zu verwenden:

$$\bar{\rho}\tilde{\varphi}(t) = \overline{\rho\varphi}(t) = \frac{1}{T} \int_{t-T/2}^{t+T/2} \rho\varphi(t) dt \quad \text{bzw.} \quad \tilde{\varphi}(t) = \frac{\overline{\rho\varphi}(t)}{\bar{\rho}}. \quad (2.1.2)$$

Die Schwankungsgröße um den Favre-Mittelwert wird zur Unterscheidung von einfacher Zeitmittelung mit einem doppelten Strich gekennzeichnet:

$$\varphi(t) = \tilde{\varphi}(t) + \varphi''(t).$$

Daß $\varphi'(t)$ und $\varphi''(t)$ sich unterscheiden, zeigt die Anwendung des Operators (2.1.1) auf die Schwankungsgrößen. Bei reiner Zeitmittelung ergibt sich:

$$\overline{\varphi'} = \overline{\varphi(t) - \bar{\varphi}(t)} = \bar{\varphi}(t) - \bar{\varphi}(t) = 0,$$

während für die Schwankung um den Favre-Mittelwert

$$\overline{\varphi''} = \overline{\varphi(t) - \tilde{\varphi}(t)} = \bar{\varphi}(t) - \tilde{\varphi}(t) \neq 0$$

gilt. Für letztere ist vielmehr:

$$\overline{\rho\varphi''} = 0.$$

Rechenregeln, die sich aus der Anwendung der Gleichungen (2.1.1) und (2.1.2) ergeben und für die Mittelung der Erhaltungsgleichungen notwendig sind, sind im Anhang A zusammengefaßt.

Da in der Literatur im Hinblick auf die Strömungsgeschwindigkeit die Begriffe Turbulenzintensität und Turbulenzgrad zum Teil widersprüchlich definiert oder verwendet werden, sollen diese für die vorliegende Arbeit im folgenden festgelegt werden.

Turbulenzintensität wird nur im Zusammenhang mit Messungen und auf ein definiertes Zeitintervall T_E bezogen, verwendet. Wie gezeigt, verschwindet der zeitliche Mittelwert der Schwankungsgröße. Um die Schwankung dennoch beurteilen zu können, verwendet man die Standardabweichung vom Mittelwert. Wie schon der Zeit- und Favre-Mittelwert in den Gleichungen (2.1.1) bzw. (2.1.2), kann diese auch als *root mean square* bezeichnete Größe für ein Zeitintervall T_E vor einem Zeitpunkt t_E durch den folgenden Operator, gekennzeichnet durch „rms“, ermittelt werden¹:

$$u'_{\text{rms}}(t_E) = \sqrt{\frac{1}{T_E} \int_{t_E - T_E}^{t_E} (u - \bar{u})^2(t) dt}.$$

¹Im Gegensatz zur obigen Definition des laufenden Mittelwertes wird hier nicht eine zentrierte sondern eine rückwärtsweisende Definition verwendet, da die bei der Flammenausbreitung interessierenden Intervalle meist durch die Ankunft der Flamme begrenzt sind und eine Auswertung nach der Flammenankunft schwierig ist.

Liegen N_E diskrete Meßwerte u'_n in dem betrachteten Intervall vor, kann die obige Vorschrift auch durch folgende Näherung ersetzt werden:

$$u'_{\text{rms}}(t_E) = \sqrt{\frac{1}{T_E} \sum_{n=1}^{N_E} (u_n - \bar{u}_n)^2 \Delta t_n},$$

oder bei zeitlich äquidistanter Abtastung:

$$u'_{\text{rms}}(t) = \sqrt{\frac{1}{N_E} \sum_{n=1}^{N_E} (u_n - \bar{u}_n)^2}.$$

Der *Turbulenzgrad* dagegen bezieht die Schwankungsgeschwindigkeit auf die mittlere Strömungsgeschwindigkeit:

$$\text{Tu} = \frac{u'_{\text{rms}}}{\bar{u}}.$$

2.2 Längen- und Zeitmaße turbulenter Strömungen

Die Umwandlung der in der turbulenten Strömung vorliegenden Bewegungsenergie spielt im Zusammenhang mit der betrachteten Wechselwirkung zwischen Flamme und Turbulenz eine entscheidende Rolle. Im vorangegangenen Abschnitt war die Vorstellung einer Wirbelkaskade aufgegriffen worden, an deren Ende die Dissipation der Bewegungsenergie in innere Energie stattfindet. Die Größe der beteiligten Wirbel läßt sich anhand von Betrachtungen typischer Längen- und Zeitmaße in Strömungsvorgängen abschätzen. Für die beabsichtigten Simulationen sind solche Betrachtungen sehr nützlich, um ein Gefühl für die beteiligten Größenordnungen zu erhalten, da damit häufig die einsetzbaren Zeitschrittweiten und so auch die erforderliche Rechenzeit im Vorfeld abgeschätzt werden können. Im folgenden werden die Zusammenhänge jedoch trotzdem nur kurz dargestellt, da ausführliche Betrachtungen zu dem Thema in [TL83, May96] sowie in [EEJM98] und [AM98a] vorliegen.

Der Bereich der kleinsten Wirbel am Ende der Kaskade wurde von Kolmogorov [Kol41a, Kol41b, Kol41c] mit Mikromaßen für die Länge l_s , die Zeit τ_s

und die Geschwindigkeit u_s charakterisiert. Betrachtet man die Transportgleichung für die turbulente kinetische Energie k in einer inkompressiblen, stationären Strömung:

$$\rho \bar{u}_i \frac{\partial k}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\Gamma_k \frac{\partial k}{\partial x_i} \right) - \overline{\rho u'_i u'_j} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} - \rho \nu \overline{\left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_j} \frac{\partial u'_i}{\partial x_j} \right)},$$

so ergibt sich für den Produktionsterm P_k

$$P_k = \overline{u'_i u'_j} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \sim \frac{u_{\text{Prod}}^3}{l_{\text{Prod}}},$$

wobei die Geschwindigkeits- und Längenmaße (u_{Prod} bzw. l_{Prod}) denen der größten Wirbel entsprechen. Die Dissipation, die gegeben ist durch

$$\varepsilon_L = \nu \overline{\left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_j} \frac{\partial u'_i}{\partial x_j} \right)},$$

kann für den Skalenbereich der größten Wirbel dagegen aufgrund des Quadrates des Längenmaßes im Nenner vernachlässigt werden. Die Größenordnung der Rate, mit der turbulente kinetische Energie an kleinerkalige Wirbel weitergereicht wird, entspricht daher $\frac{u_{\text{Prod}}^3}{l_{\text{Prod}}}$.

Kolmogorov erkannte die Zusammenhänge zwischen den Verhältnissen der Geschwindigkeits- und Längenmaße der verschiedenen Skalenbereiche in der Turbulenz und konnte daher für die Rate, mit der k dem Bereich der *kleinsten* Wirbel zugeführt wird,

$$\frac{u_s^3}{l_s} \sim \frac{u_{\text{Prod}}^3}{l_{\text{Prod}}}$$

setzen. Durch einen Vergleich mit dem oben angegebenen Term für ε_L kann die Dissipation ε in diesem Bereich wie folgt angegeben werden:

$$\varepsilon \sim \nu \frac{u_s^2}{l_s^2}.$$

In diesem Skalenbereich der Turbulenz stehen die Zufuhr von kinetischer Energie aus größeren Wirbeln und deren Dissipation im Gleichgewicht. Es gilt daher:

$$\frac{u_s^3}{l_s} = \nu \frac{u_s^2}{l_s^2} = \varepsilon.$$

Eliminiert man in diesen beiden Gleichungen u_s , resultiert:

$$\varepsilon^2 l_s^2 = \varepsilon^3 \frac{l_s^6}{\nu^3} \quad \text{oder} \quad l_s = \left(\frac{\nu^3}{\varepsilon} \right)^{\frac{1}{4}}. \quad (2.2.1)$$

Eliminierung von ε ergibt dagegen:

$$u_s = \frac{\nu}{l_s} \quad \text{bzw.} \quad u_s = (\nu\varepsilon)^{\frac{1}{4}}. \quad (2.2.2)$$

Das Zeitmaß ist damit entsprechend

$$\tau_s = \frac{l_s}{u_s} \quad \text{oder} \quad \tau_s = \left(\frac{\nu}{\varepsilon} \right)^{\frac{1}{2}}.$$

Bildet man auf der Basis der Kolmogorovschen Mikromaße die Reynoldszahl, ergibt sich

$$\text{Re}_s = \frac{l_s u_s}{\nu} = 1.$$

Vor den Arbeiten von Kolmogorov hatte Taylor [Tay35] Mikromaße aus der Betrachtung einer Rohrströmung abgeleitet. Wie von Beauvais [Bea94] ausführlich dargestellt, ergibt sich für das Taylor-Mikromaß

$$\lambda_T = \sqrt{\frac{\overline{u'^2}}{(\partial u' / \partial x)^2}}.$$

Die Dissipationsrate ist für isotrope Turbulenz (z.B. [Wil93])

$$\varepsilon = 15\nu \overline{\left(\frac{\partial u'}{\partial x} \right)^2} \equiv 15\nu \frac{u'^2}{\lambda_T^2},$$

wodurch das Taylor-Mikromaß abgeschätzt und in Bezug zum Kolmogorovschen Mikrolängenmaß (Gleichung (2.2.1)) gesetzt werden kann.

Die hauptsächlich energietragende Wirbelklasse kann nach Taylor durch ein Makromaß L , das ein integrales Längenmaß darstellt, charakterisiert werden. Taylor definiert dieses Längenmaß auf der Basis des Autokorrelationskoeffizienten von Messungen der Schwankungsgeschwindigkeit an verschiedenen Positionen, die um einen Abstand r auseinanderliegen:

$$R(r) = \frac{\overline{u'(x)u'(x+r)}}{\sqrt{\overline{u'^2(x)u'^2(x+r)}}}.$$

Das Makromaß ergibt sich daraus als

$$L = \int_0^{\infty} R(r) dr.$$

Für viele praktische Betrachtungen im Bereich turbulenter Strömungen genügt es jedoch, L in erster Näherung durch einen Bruchteil einer typischen geometrischen Dimension des Strömungsgebietes abzuschätzen. Die auf der Basis von L und u' gebildete Reynoldszahl wird oft als *Turbulenzreynoldszahl* bezeichnet:

$$\text{Re}_L = \frac{u'L}{\nu},$$

und das zugeordnete Makro-Zeitmaß τ_L wird wie folgt gebildet:

$$\tau_L = \frac{L}{u'}.$$

Um typische Größenordnungen der Längenmaße abzuschätzen, gibt Friedrich [Fri86] Zusammenhänge zwischen diesen an (s.a. [Bea94]):

$$\frac{\lambda_T}{L} \sim \text{Re}_L^{-\frac{1}{2}}, \quad \frac{\lambda_T}{l_s} \sim \text{Re}_L^{\frac{1}{4}} \quad \text{und somit} \quad \frac{l_s}{L} \sim \text{Re}_L^{-\frac{3}{4}}.$$

Bei einer typischerweise in vollentwickelter Grenzschichtturbulenz auftretenden Reynoldszahl von $\text{Re}_L = 10^4$ zeigt sich, daß das Kolmogorovsche

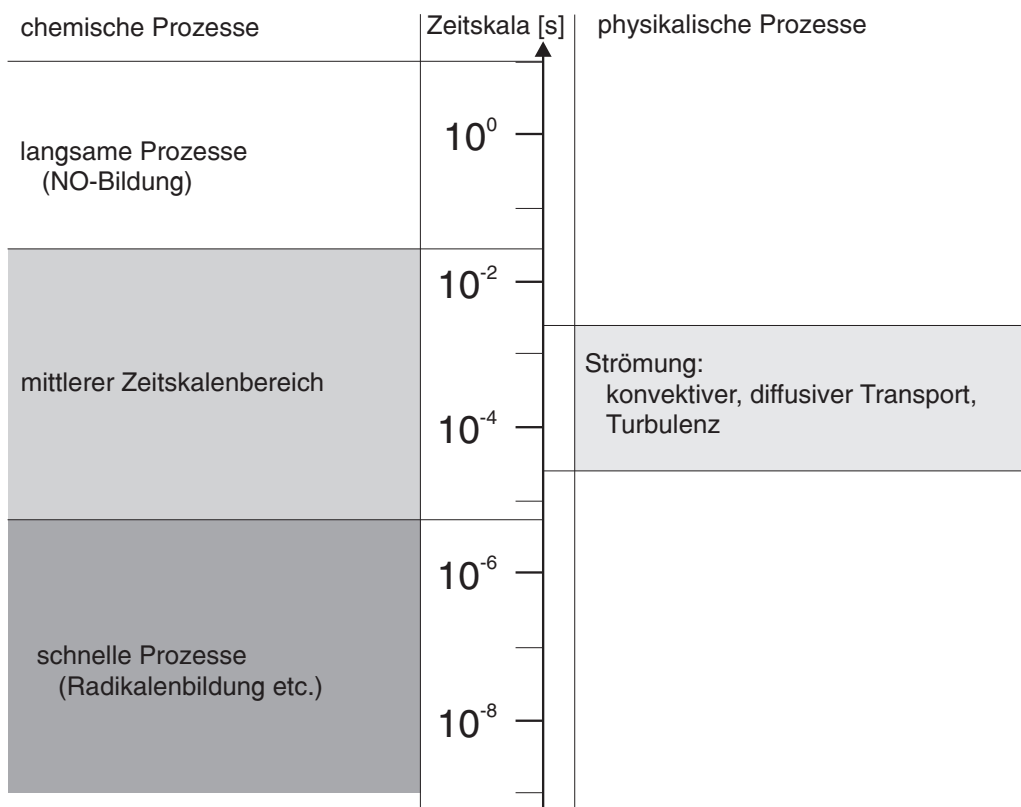


Abbildung 2.2: Vergleich chemischer und physikalischer Zeitmaße (nach [Maa93])

Mikromaß um den Faktor 10 kleiner ist als das Taylorsche. Schätzt man L durch $L = 0.1L_C$ ab, wobei L_C beispielsweise der Durchmesser eines turbulenz erzeugenden Hindernisses ist, so sind die kleinsten turbulenten Strukturen um den Faktor 10000 kleiner als L_C , während der Hauptanteil der Energie von Wirbeln getragen wird, die 10 mal kleiner sind als das Hindernis.

2.3 Chemische Zeitmaße und turbulente Brennbereiche

Für chemische Reaktionen können, wie im vorangegangenen Abschnitt für turbulente Vorgänge dargestellt, ebenfalls charakteristische Zeitmaße angegeben werden, die einen Vergleich verschieden schnell ablaufender Reaktionen oder auch einen Vergleich mit anderen Prozessen ermöglichen. Abbildung 2.2 zeigt einen Vergleich zwischen Zeitmaßen, wie sie typischerweise in chemischen Reaktionen auftreten und den Zeitmaßen bei

Strömungsvorgängen beteiligter physikalischer Vorgänge. Man erkennt, daß die beiden Bereiche sich sehr stark unterscheiden und daß auf der Seite der Chemie ein sehr großer Zeitskalenbereich abzudecken ist. Selbst die häufig bei der Reduzierung von Reaktionsmechanismen getroffene Annahme, daß sich chemische Vorgänge, die sehr kleine Zeitkonstanten aufweisen, im Gleichgewicht befinden, löst das Problem nicht. Die verbleibenden Reaktionen können immer noch ähnliche Zeitkonstanten wie die physikalischen Vorgänge aufweisen, so daß die Zeitskalen der chemischen Umsetzung nicht außer Acht gelassen werden können. Insbesondere wenn, wie in der vorliegenden Arbeit, die betrachteten Vorgänge instationär sind, können die so erforderlichen numerischen Zeitschritte eine Lösung sehr aufwendig machen.

Anhand des Verhältnisses der chemischen und turbulenten Zeitmaße können unterschiedliche Bereiche turbulenter Verbrennung unterschieden werden. Als Vergleichsgröße kann die sogenannte Damköhlerzahl verwendet werden, die turbulentes Makrozeitmaß und chemisches Zeitmaß zueinander in Bezug setzt:

$$\text{Da} = \frac{\tau_L}{\tau_c},$$

Bei Verbrennungsprozessen wird üblicherweise ein chemisches Zeitmaß τ_c aus der laminaren Flammendicke δ_l und der laminaren Brenngeschwindigkeit s_l bestimmt:

$$\tau_c = \frac{\delta_l}{s_l}.$$

Für Damköhlerzahlen kleiner als 1 ist keine klare Flammenkontur zu erkennen. Die Lebensdauer der turbulenten Makrowirbel ist kleiner als die Zeit, die die Verbrennung beansprucht, so daß es zu einer volumenhaften Verteilung der Reaktionsteilnehmer und somit auch der Reaktion kommt. Im Phasendiagramm nach Borghi [Bor84, Pet86] (vgl. Abbildung 2.3) wird dieser Bereich als *homogener Reaktor* bezeichnet.

Die mit τ_L gebildete Damköhlerzahl hat jedoch für die direkte Interaktion von Turbulenz und Chemie keine weitere Bedeutung, da die Wechselwirkung im Bereich der kleinsten Skalen stattfindet. Unterhalb der Linie $\text{Da}=1$

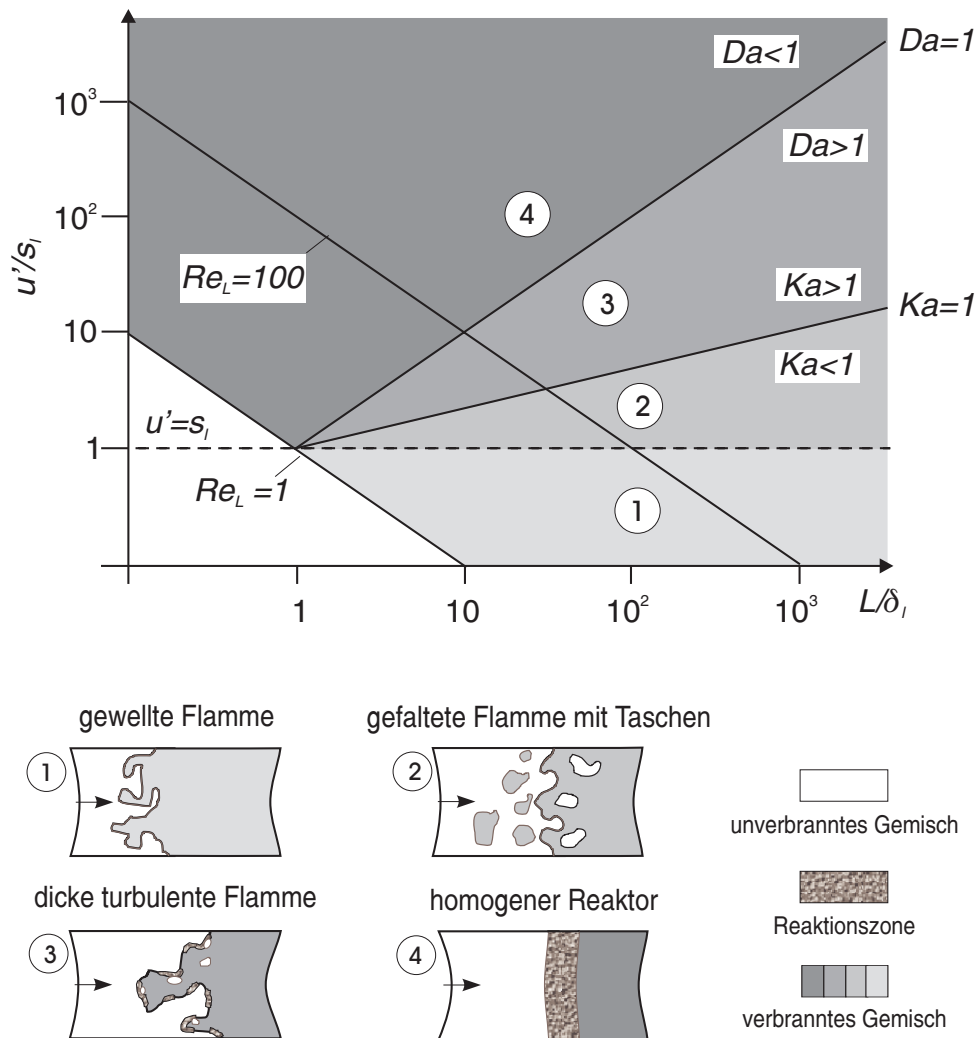


Abbildung 2.3: Unterscheidung turbulenter Brennbereiche nach Borghi [Bor84] und zugeordnete Flammentypen

muß daher weiter unterschieden werden. Man vergleicht hier τ_c mit dem Kolmogorovschen Zeitmaß und bildet so die Karlovitzzahl

$$Ka = \frac{\tau_c}{\tau_s},$$

die als Reziprokwert einer mit dem Kolmogorovschen Zeitmaß gebildeten Damköhlerzahl aufgefaßt werden kann. Für $Ka < 1$ spricht man vom Bereich der schnellen Chemie (*fast chemistry*), d.h. Reaktionsvorgänge spielen sich so schnell ab, daß selbst mit den kleinsten turbulenten Wirbeln keine nennenswerte Interaktion stattfindet. Flammen treten hier als glatte Strukturen auf, die verbranntes von unverbranntem Gemisch trennen, weshalb dieser Bereich auch als *Flamelet*-Bereich bezeichnet wird.

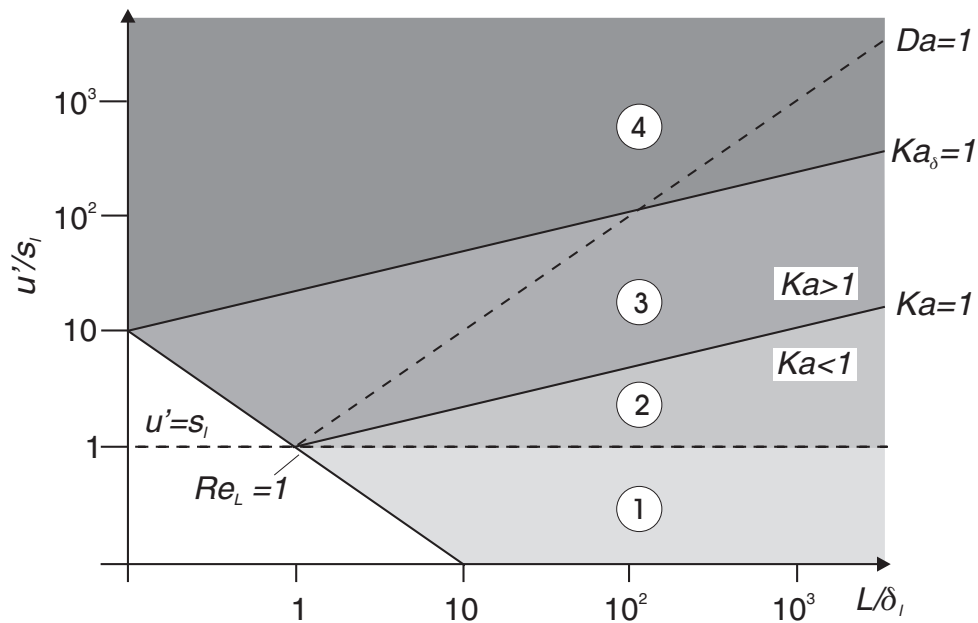


Abbildung 2.4: Unterscheidung turbulenter Brennbereiche nach Peters [Pet97]

Der Bereich für $Ka > 1$ muß näher betrachtet werden. Während Peters [Pet86] 1986 noch dieselbe Einteilung vornimmt wie Borghi [Bor84], gibt er später [Pet97] das in Abbildung 2.4 dargestellte Diagramm an. Er zeigt, daß die beteiligten Zeitskalen auch als diejenige Zeit interpretiert werden können, die bei einer gegebenen Diffusivität D benötigt wird, um Wärme oder Spezieskonzentrationen diffusiv über das entsprechende Längenmaß zu transportieren. Für das chemische Zeitmaß ergibt sich so beispielsweise

$$\tau_c = \frac{\delta_l^2}{D}$$

und die Karlovitzzahl lautet dann

$$Ka = \frac{\delta_l^2}{l_s^2}.$$

Die Bedingung $Ka < 1$, die oben den Flameletbereich abgegrenzt hatte, kann damit auf die Bedingung $\delta_l < l_s$ zurückgeführt werden, d.h. hier sind die kleinsten turbulenten Strukturen größer als die Flammendicke. Im Bereich $Ka > 1$ unterscheidet Peters weiter, indem er die vorgemischte Flamme in eine Vorwärmzone, die eigentliche Reaktionszone (*inner layer*)

der Dicke l_δ und eine Oxidationszone aufteilt. Nach Peters [Pet91, Pet97] gilt näherungsweise:

$$l_\delta = 0.1 \delta_l,$$

so daß für die mit l_δ gebildete Karlovitzzahl Ka_δ

$$\text{Ka}_\delta = \frac{l_\delta^2}{l_s^2} = 0.01 \text{Ka}$$

gilt. Unterhalb der Linie $\text{Ka}_\delta = 1$ finden sich nun Wirbel, die kleiner sind als die Flammendicke, so daß diese mit der Vorwärmzone interagieren können, und hier die Mischungsprozesse intensivieren. Da sie jedoch größer sind als die Reaktionszone, beeinflussen sie die Reaktion nicht direkt. Peters [Pet97] spricht in diesem Bereich von dünnen Reaktionszonen (*thin reaction layers*).

Oberhalb von $\text{Ka}_\delta = 1$ finden sich kleinste Wirbelelemente, die kleiner sind als die Dicke der Reaktionszone und somit in diese eindringen können. Es kommt durch die dadurch stattfindende Durchmischung der Reaktionszone zu lokalen Löscheffekten, da Reaktionsradikale vom Ort der Reaktion weg befördert werden können, bevor diese abgeschlossen ist. Peters bezeichnet dies als Bereich unterbrochener Reaktionszonen (*broken reaction zones regime*).

2.4 Schließungsansätze für die turbulente Reaktionsrate

Im Hinblick auf die in der vorliegenden Arbeit ebenfalls durchgeführten Entwicklung eines turbulenten Verbrennungsmodelles soll das im vorangegangenen Abschnitt dargestellte Phasendiagramm genutzt werden, um den möglichen Einsatzbereich verschiedener Verbrennungsmodelle aufzuzeigen.

In der Literatur finden sich verschiedenste Ansätze, das Schließungsproblem, das im Zusammenhang mit der Darstellung des Verbrennungsmodelles später eingehend erläutert wird, zu lösen. Im folgenden wird kurz eine Übersicht über diese Ansätze gegeben, um die Einordnung des in der vorliegenden Arbeit entwickelten Modelles zu ermöglichen. Eine Klassifizierung der zu findenden Modelle könnte wie folgt vorgenommen werden:

- Analytische Vorgabe der Reaktionsrate
- Empirische Modelle
- Korrelationsansätze
- Wahrscheinlichkeitsdichte-Verfahren
- Flamelet-Modelle

Die Vorgabe der Reaktionsrate durch einen analytischen Ausdruck birgt offensichtliche Nachteile, da im einfachsten Fall der vorgegebene Wert die Entwicklung des Strömungsvorganges nicht berücksichtigen kann. Zum Einsatz kommen solche Verfahren insbesondere bei Diffusionsflammen, bei denen die Reaktionspartner der Flamme getrennt voneinander zugeführt werden.

Zu den Hauptvertretern der Gruppe der empirischen Modelle zählen das *Eddy-Breakup* (EBU) Modell von Spalding [Spa71], sowie das *Eddy-Dissipation Concept* von Magnussen und Hjertager [MH76]. Diese Ansätze berücksichtigen, im Gegensatz zu den obigen einfachen Verfahren, den Einfluß der Turbulenz auf die Reaktionsrate. Die gesuchte *turbulente Reaktionsrate* wird mit einem aus der Turbulenzberechnung zugänglichen Zeitmaß und einer limitierenden Konzentration der beteiligten Spezies gebildet. Bei dieser Vorgehensweise stellt der Turbulenzzustand die entscheidende Größe dar, während die Chemie der Reaktion fast völlig außer acht gelassen wird. Für Vorgänge, bei denen sich die Zeitmaße der chemischen Reaktion und der physikalischen Vorgänge stark voneinander unterscheiden, kann dieser Ansatz durchaus richtig sein. Diese Restriktion limitiert solche Modelle jedoch auf einen eingeschränkten Bereich (Bereiche 1 und 2 in Abbildung 2.3) im Borghi-Diagramm.

Hinter den als Korrelationsansätze (z.B. [Bor74]) bezeichneten Verfahren steckt die Idee, die in der gemittelten Reaktionsrate auftretenden Korrelationsterme, wie bei einem Reynoldsspannungsverfahren für die Turbulenzmodellierung, durch eigene Transportgleichungen zu ermitteln. Da mit steigender Komplexität der Reaktion die Anzahl der Korrelationsterme rasch zunimmt, sind solche Ansätze sehr aufwendig.

Verfahren, die auf Wahrscheinlichkeitsdichteverteilungen (englisch: probability density function, im weiteren kurz PDF) aufbauen, berechnen die sich

durch die Strömung an einem Punkt ergebende Form der PDF von Größen, die für den Reaktionsvorgang relevant sind. Die errechnete PDF kann dann genutzt werden, um durch eine Faltungsintegration mit der momentanen Reaktionsrate die mittlere Reaktionsrate zu erhalten. Die Vorgehensweise zur Ermittlung der PDF-Form unterscheidet dabei verschiedene Verfahren noch einmal in zwei Hauptgruppen.

Einerseits kann die Form der PDF als generische Form angenommen werden (*assumed PDF* vgl. [Bor88]), die in Abhängigkeit von Parametern, die aus dem Strömungszustand zu ermitteln sind, zu einer speziellen Form führen.

Im Gegensatz dazu können auch Transportgleichungen für den Transport der betrachteten PDF hergeleitet werden (s. Pope [Pop85]). Die Form der PDF bestimmt sich dann aus der Berechnung der Strömung selbst (*calculated PDF*). Solche Verfahren zeigen für zukünftige Simulationswerkzeuge ein hohes Potential auf, da es sehr einfach ist, detaillierte reaktionskinetische Modelle in die Berechnung einzubinden. Sie weisen jedoch für die vorliegende Arbeit den Nachteil eines hohen Aufwandes für die Implementierung sowie sehr langer Rechenzeiten auf. Die Lösung der PDF-Transportgleichungen gelingt beispielsweise nur mittels Monte-Carlo-Simulation, so daß eine Kopplung eines Monte-Carlo-Lösers mit einem CFD-Code notwendig wäre. In der vorliegenden Arbeit wurde daher der Ansatz eines PDF-Modelles mit vorgegebener Form gewählt.

Die als letztes aufgezählten Flamelet Modelle (vgl. Peters [Pet86]) stellen in der angegebenen Aufzählung eigentlich keine eigene Gruppe dar, da sie ebenfalls auf PDFs basieren. Aufgrund der Vorgehensweise sollen sie hier jedoch trotzdem separat betrachtet werden. Flameletverfahren gehen davon aus, daß jede Flammenfront, ob gerade oder gefaltet, lokal gesehen laminare Eigenschaften besitzt und stationär ist. Dies bedeutet, daß die Flamme stets sehr dünn und so der tatsächlich reagierende Bereich im Berechnungsgebiet nur sehr klein ist. Dies führt ebenfalls zu der Annahme einer PDF, die jedoch den unverbrannten und verbrannten Zustand sehr stark wichtet. Durch die Berücksichtigung der Flammenstreckung beim Faltungsprozeß können auch Löschvorgänge mitmodelliert werden und die Integration von detaillierten Reaktionsmechanismen ist ebenfalls ohne großen Aufwand möglich. Die zugrundeliegenden Annahmen limitieren den Einsatzbereich

für diese Modelle jedoch wieder auf ein eingeschränktes Gebiet (Bereiche 1 und 2 in Abbildung 2.3) im Borghi-Diagramm.

Es existieren auch Verfahren, die sich nicht in die obigen Kategorien einordnen lassen. Beispielsweise wurden in letzter Zeit Flammentrackingverfahren entwickelt (vgl. Smiljanovski und Klein [SK94, SMK97]), die erlauben, die Flammenfront zu erfassen, auch wenn diese durch die gewählte numerische Gitterfeinheit nicht aufgelöst werden kann.

Das in der vorliegenden Arbeit realisierte Verbrennungsmodell lehnt sich an das sogenannte Bray, Libby und Moss (BML) Modell für vorgemischte und nicht-vorgemischte Verbrennung an, das in [Bra80] ausführlich beschrieben ist. Die Annahmen, die hier getroffen werden, sind jedoch teilweise nicht so restriktiv wie die dieser Autoren, so daß das Modell geeignet erscheint, Flammen auch in den Bereichen 2 und 3 des Borghi-Diagramms wiederzugeben. Wie von Ardey [Ard98] anhand laseroptischer Untersuchungen nachgewiesen, treten im Bereich der im vorliegenden Projekt untersuchten Einzelhindernisse durchaus Flammen auf, die sich diesen Bereichen zuordnen lassen. Bei der numerischen Umsetzung des Verbrennungsmodells wurde ein Weg gewählt, der eine schnelle Berechnung mit Hilfe von Tabelleninterpolationsverfahren, ähnlich wie von Lockwood und Naguib [LN75] beschrieben, zuläßt. Ein ähnliches Verfahren wurde auch von Bradley et al. [BKLM88] beschrieben und später [BGG94] noch erweitert.

3 Lokale Messung der Strömungsgeschwindigkeit

Ziel der vorliegenden experimentellen Untersuchungen war es, zu analysieren, wie Einzelhindernisse in einer Verbrennungsströmung durch Veränderung des Turbulenzzustandes der Strömung die Flammenfortpflanzung beeinflussen. Hierzu wurde die lokale Gasgeschwindigkeit der sich einstellenden Strömung berührungslos mit einem Laser-Doppler-Anemometer (LDA) gemessen. Durch die hohe örtliche und zeitliche Auflösung, die durch LDA-Messungen möglich sind, konnte der Turbulenzzustand der Strömung ermittelt und durch den Vergleich von Messungen mit verschiedenen Hindernissen untereinander bzw. mit Messungen ohne Hindernis der Geometrieinfluß bestimmt werden. Das vorliegende Kapitel stellt die MuSCET-Anlage (**M**unich **S**quare **C**ross-section **E**xplosion **T**ube), in der die Untersuchungen durchgeführt wurden, vor, zeigt wie das LDA-System in den Meßaufbau integriert wurde und dokumentiert die Vorgehensweise zur Auswertung der Messungen.

Es wird im folgenden zwischen *lokalen* und *integralen* Messungen unterschieden. *Lokale* Messungen sind dabei die Strömungsmessungen mit dem LDA-System, während die durch die MuSCET-Anlage ermittelten Meßwerte als *integrale* Informationen für das Explosionsrohr betrachtet werden.

3.1 Beschreibung des Meßaufbaus

3.1.1 Versuchsanlage und integrale Meßtechnik

Die MuSCET-Anlage wurde von Ardey [Ard98] eingehend dargestellt, so daß an dieser Stelle lediglich auf für die im Rahmen der vorliegenden Arbeit durchgeführten LDA-Geschwindigkeitsmessungen spezifische Einzelheiten und notwendige Modifikationen des Meßaufbaus näher eingegangen werden muß.

Die Versuchsstrecke der Anlage bildete ein aus austauschbaren Einzelsegmenten zusammengesetzter Explosionskanal mit quadratischem Querschnitt (Kantenlänge 268mm). Über ein zweigeteiltes Verbindungsrohr mit

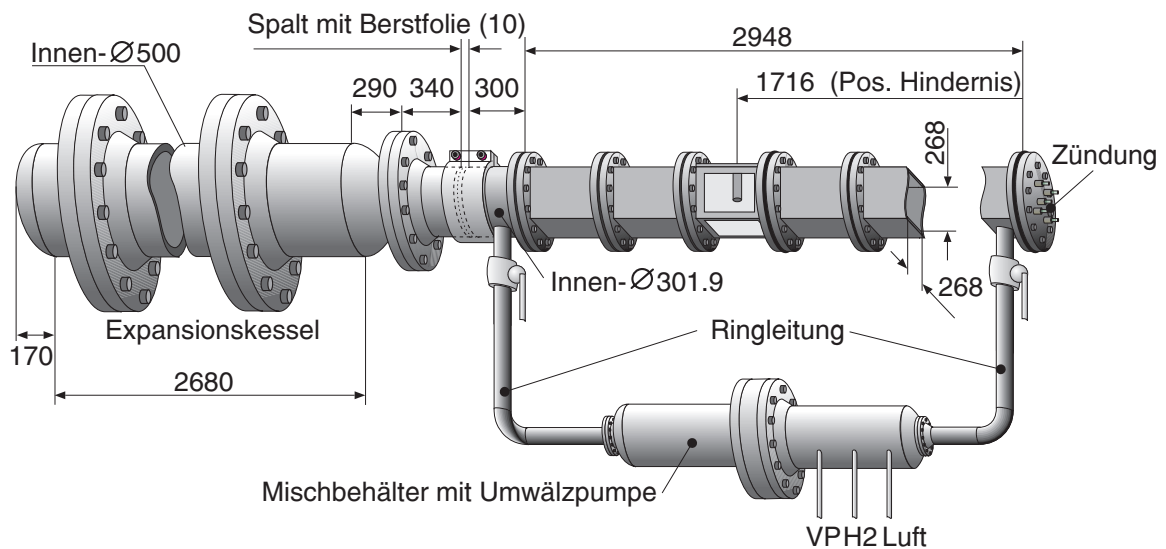


Abbildung 3.1: Abmessungen der MuSCET-Anlage (aus [AM98a])

gleicher Querschnittsfläche war der Explosionskanal mit einem Expansionsstank verbunden, in den die Flamme nach Passieren der Meßstrecke eingeleitet wurde. Die Abtrennung des Explosions- vom Expansionsteil wurde durch eine Berstmembran erreicht, die mittels einer Schiebemuffe in den Spalt zwischen den beiden Teilen des Verbindungsrohres eingespannt wurde (vgl. Abbildung 3.1). Akustische Schwingungen wurden im Expansionsstank, der mit Drehspänen aufgefüllt war, gedämpft. Zwischen Versuchsstrecke und Berstmembran befand sich ein weiteres Dämpfungselement, das zusätzlich die Aufgabe hatte, Teile der Membran nach dem Bersten zurückzuhalten. Die Verbrennung wurde durch Zündung des brennbaren Gasgemisches mittels acht separat ansteuerbarer Zündkerzen am Endflansch der Versuchsstrecke eingeleitet.

Für die im Rahmen des Projektes durchzuführenden Schlieren- und LIPF-Untersuchungen (Laserinduzierte Prädissoziationsfluoreszenz) war eines der Kanalsegmente von drei Seiten optisch zugänglich gestaltet. Die eingesetzten Quarzfenster, die für die LIPF-Untersuchungen optimiert waren, konnten ebenso für die LDA-Messungen eingesetzt werden, d.h. sie ermöglichten es, die Strahlen des LDA-Systems in die Meßstrecke zu führen. Die Strömungshindernisse wurden mit Hilfe eines variablen Hindernisträgers, von oben hängend, in diesem Fenstersegment montiert. Die Abmessungen der Anlage sind aus Abbildung 3.1 (aus [AM98a]) ersichtlich.

Die Aufbereitung des brennbaren H_2 -Luft-Gemisches erfolgte getrennt von

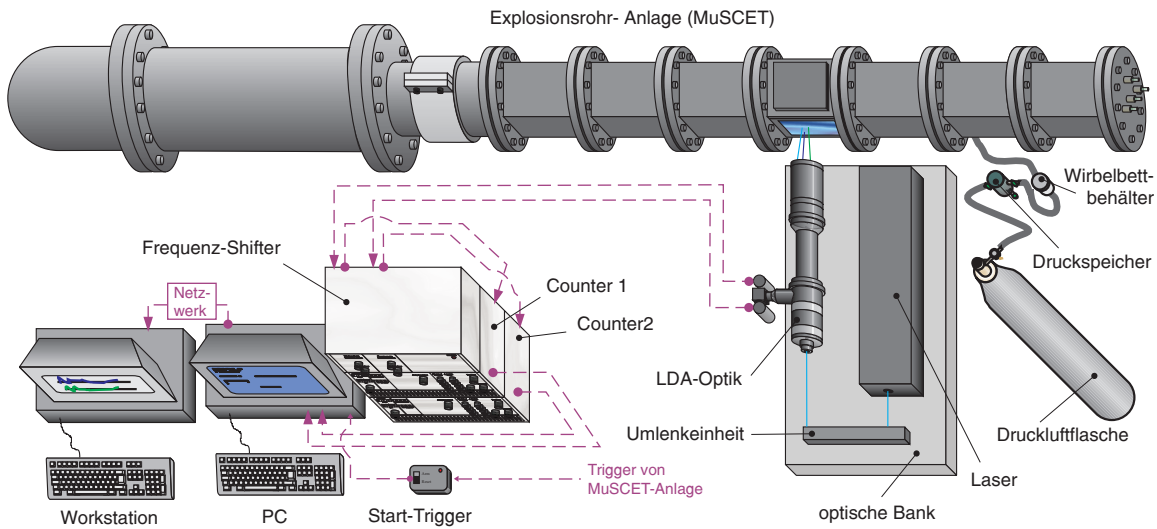


Abbildung 3.2: Integration des LDA-Systems in den MuSCET-Aufbau (Ansicht von oben)

der Versuchsstrecke in einem Mischbehälter. Durch die weitgehende Evakuierung des Behälters konnte über entsprechende Partialdruckverhältnisse die gewünschte H_2 -Konzentration eingestellt werden. Die Homogenisierung des Brenngemisches mit der Luft in der Versuchsstrecke erfolgte durch Umwälzen des gesamten Volumens der Versuchsstrecke und des Mischbehälters mittels einer Umwälzpumpe durch eine Ringleitung. Ringleitung und Mischbehälter konnten für den Versuch durch zwei Kugelhähne von der Versuchsstrecke abgetrennt werden.

Für eine hohe Verlässlichkeit der durch die LDA-Messungen bestimmten lokalen Strömungsgeschwindigkeit war es notwendig, möglichst kleine Streuteilchen (vgl. [Hoh92]) reproduzierbar in das Gemisch einzubringen. Hierfür wurde die Versuchsstrecke um eine Seedinganlage erweitert. Diese Einheit bestand aus einem Wirbelbettbehälter, der aus einem Druckspeicher gespeist wurde, welcher aus einer Druckluftflasche auf einen definierten Druck aufgepumpt wurde (s. Abbildung 3.2). Um die Struktur der Versuchsstrecke nicht zusätzlich zu schwächen, wurde als Seedingzugang die Halterung des ersten unteren Thermoelements verwendet. Um die Größe der Streuteilchen zu reduzieren, wurden diese durch eine Düse mit einer sehr kleinen Bohrung in die Versuchsstrecke eingebracht. Die starken Scherkräfte in dem sich ergebenden Freistrahл brechen eventuelle Agglomerate von Teilchen auf, bzw. verkleinern diese. Die erreichte Teilchenqualität wurde durch Teilchengrößenuntersuchungen abgesichert. Hierauf wird in

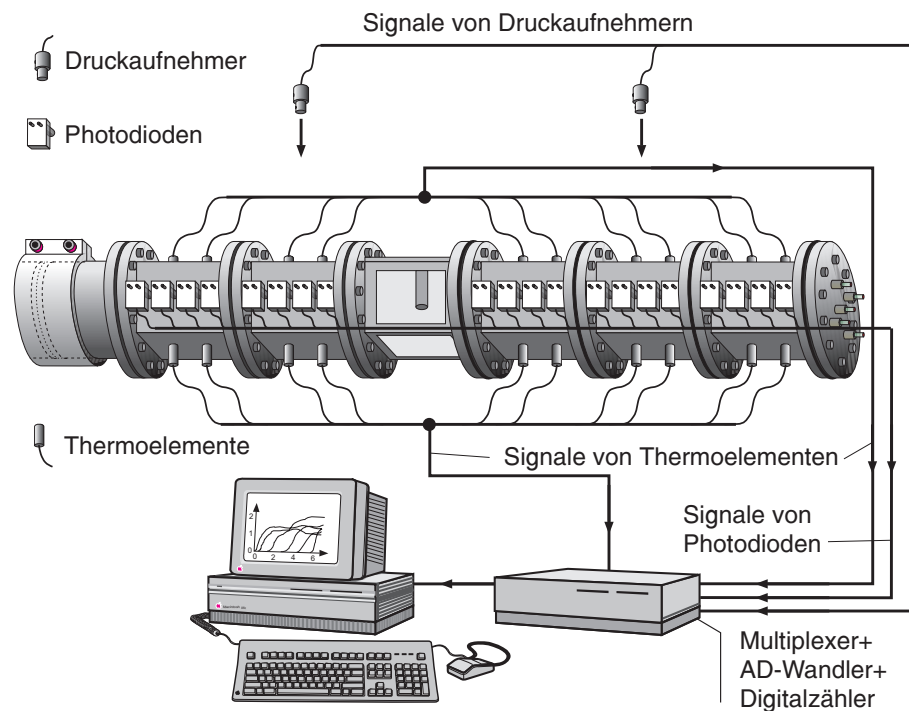


Abbildung 3.3: MuSCET-Anlage mit integraler Meßtechnik (aus [Ard98])

Abschnitt 3.1.4 näher eingegangen.

Da sich selbst kleinste Teilchen nach längerer Zeit absetzen und in der Ringleitung Rezirkulationsgebiete existierten, die „Teilchenfallen“ darstellten, mußte beim Umwälzen ein Kompromiß zwischen der notwendigen Gemischhomogenisierung und ausreichendem LDA-Seeding gefunden werden. Konzentrationsmessungen, die bei niedrigen H_2 -Konzentrationen mit einem Wasserstoffdetektor in der Versuchsstrecke durchgeführt wurden, zeigten, daß bereits nach 4 Minuten keine Änderung der Konzentration mehr auftrat. Daher wurde die Umwälzdauer gegenüber den Versuchen ohne LDA-Messungen verkürzt und das Seeding erst gegen Ende des Umwälzens zugegeben.

Zur Erfassung der integralen Größen wie Temperatur, Druck und Flammenankunftszeit zur Bestimmung der Flammengeschwindigkeit in der Versuchsstrecke wurde die in Abbildung 3.3 dargestellte Meßtechnik der MuSCET-Anlage eingesetzt. Diese umfaßte pro Kanalelement je zwei schnell ansprechende Thermoelemente an der Ober- und Unterseite jedes Kanals sowie vier Photodioden an der Kanalseite. Zur Erfassung der Druckentwicklung wurden zwei schnell ansprechende Druckaufnehmer ver-

wendet, die vor und nach dem Hindernis bündig in der Kanalwand angebracht waren. Die Flammengeschwindigkeit wurde für niedrige Flammengeschwindigkeiten (bis ca. 20 m/s) aus den Signalen der Thermoelemente ermittelt, die durch die Anordnung oben und unten auch unterschiedliche Ausbreitungsgeschwindigkeiten aufgrund des Einflusses des Auftriebs erfassen konnten. Für größere Geschwindigkeiten wurden die Signale der Photodioden verwendet. Die Flammengeschwindigkeit wurde aus den Flammenankunftszeiten an den einzelnen Detektoren und den bekannten Abständen zwischen diesen rückgerechnet. Details können wiederum der Arbeit von Ardey [AM98a] entnommen werden. Abbildung 3.3 verdeutlicht die Lage der einzelnen Meßelemente.

3.1.2 Betrachtete Hindernisgeometrien

Im Verlauf des Forschungsprojektes, in dessen Rahmen die vorliegende Arbeit entstand, wurde der Einfluß verschiedenster Einzelhindernisse auf die turbulente Verbrennung einer vorgemischten H_2 -Luft-Flamme untersucht. Dabei wurden Hindernisse betrachtet, deren Geometrie typisch ist für Einbauten in technischen Anlagen, in denen solche Verbrennungsvorgänge zu Gefahrensituationen führen können. Zylindrische Einzelhindernisse und periodische Zylinderhindernisse (Ardey [Ard98] bezeichnet diese mit H1, R1, R2, R3, RB1 und RB2) entsprachen beispielsweise Rohren und Rohrbündeln in unterschiedlichen Anordnungen (symmetrisch bzw. asymmetrisch bezüglich der Kanalachse). Trittgitter, die in technischen Anlagen häufig vorkommen, wurden durch entsprechende Einbauten (Hindernis G1), bzw. um nicht nur den Sonderfall einer senkrechten Annäherung der Flammen zu berücksichtigen, durch zwei Konfigurationen mit um 45° angestellten Gitterblättern (G2 und G3) berücksichtigt. Die optische Zugänglichkeit der Meßpositionen wurde dabei erreicht, indem diese Hindernisse so ausgeführt wurden, daß alle Gitterblätter in einer Ebene lagen (vgl. Hindernis G2 in Abbildung 3.4). Als Modell einer Wand mit einer Türöffnung wurde ein massives Hindernis verwendet, das asymmetrisch eine rechteckige Öffnung besaß (Hindernis T1 in Abbildung 3.4). Mit 85% wies dieses Hindernis die größte Blockierrate auf.

Um Referenzdaten zur Ermittlung des Hinderniseinflusses auf die Verbrennungsströmung zu erhalten, wurden zusätzlich zu den Versuchen mit ein-

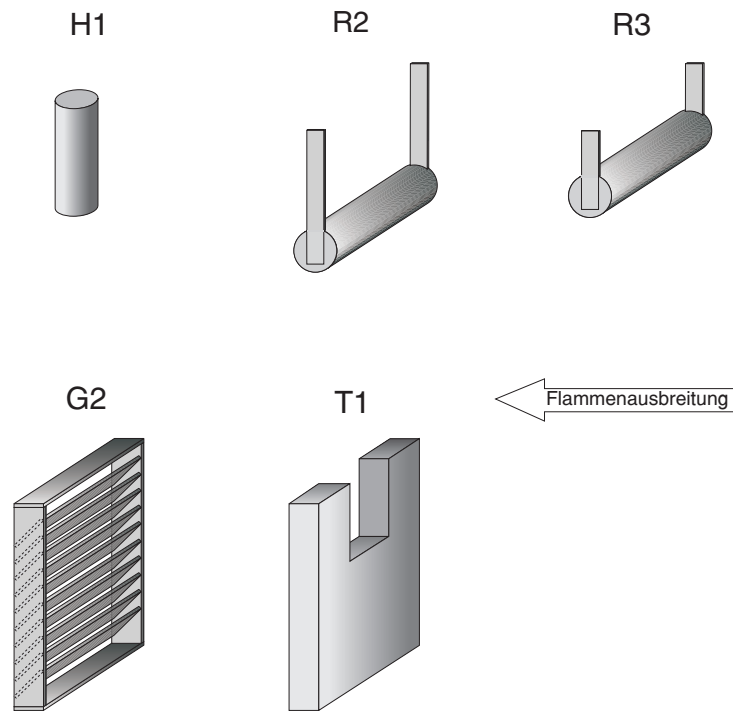


Abbildung 3.4: Untersuchte Strömungshindernisse und Bezeichnungen (die Bezeichnungen wurden von Ardey [Ard98] übernommen)

gebauten Hindernissen auch viele Untersuchungen ohne Einbauten durchgeführt.

Aus den im Projekt dieser Arbeit vorausgegangenen Schlieren- und LIPF-Messungen von Ardey [Ard98] war bekannt, welche Hindernisse einen größeren Einfluß auf die Turbulenz haben und welche aufgrund ähnlicher Hindernisform vergleichbare Ergebnisse erwarten ließen. Da zur statistischen Absicherung der Ergebnisse für jede Meßkonfiguration etliche Versuchswiederholungen notwendig waren, wurde die Hindernisauswahl für die vorliegende Arbeit im Vergleich zu den vorangegangenen Untersuchungen eingeschränkt². So wurde aus der Gruppe der Hindernisse mit niedriger Blockierrate H1 gewählt, während die Rohrbündel wegen ihres geringen Einflusses und nicht zuletzt auch aufgrund des schwierigeren optischen Zugangs für das LDA-System nicht betrachtet wurden. Das senkrechte symmetrische Rohrhindernis R1 stellt einen Sonderfall von R2 dar und wurde deshalb ebenfalls ausgeklammert. Von den Gitterhindernissen wurde nur G2 betrachtet, da die vorangegangenen Untersuchungen hier die stärksten Flammenbeschleunigungen neben dem ebenfalls berücksichtigten Türhin-

²Die Bezeichnung der Hindernisse wurde von Ardey [Ard98] übernommen und beibehalten

dernis ergeben hatten. In Abbildung 3.4 sind die untersuchten Hindernisse dargestellt. Zusammen mit dem Leerrohr ergaben sich so sechs Hinderniskonfigurationen.

3.1.3 Lokale Laser-Doppler Strömungsmeßtechnik

Die eingehende Darstellung des Laser-Doppler-Meßprinzips ist an anderer Stelle bereits vorgenommen worden, so daß sie im Rahmen der vorliegenden Arbeit nicht in großem Umfang wiederholt werden muß. Es wird daher in diesem Zusammenhang auf die Literatur zu dem Thema verwiesen, so beispielsweise auf die Bücher von Durst et al. [DMW87], Ruck [Ruc87] oder Albrecht [Alb86]. Im folgenden wird das Meßprinzip daher nur zusammenfassend erläutert.

Grundsätzlich beruht das LDA-Meßverfahren auf der Detektion der Doppler-Frequenzverschiebung von an bewegten Teilchen gestreutem Licht. Zur Vereinfachung der Detektion werden zwei Laserstrahlen verwendet, die sich im sogenannten Meßvolumen schneiden. Die Schwebungsfrequenz des von beiden Laserstrahlen an Teilchen in der Strömung gestreuten Lichtes enthält die gesuchte Meßinformation, nämlich eine Komponente der Teilchengeschwindigkeit. Bemerkenswert ist dabei, daß sich ein linearer Zusammenhang zwischen der Doppler-Frequenzverschiebung als der gemessenen Größe und der zu messenden Größe, der Geschwindigkeit der Teilchen, ergibt:

$$f_D = \frac{u_{\perp} 2 \sin \varphi}{\lambda}. \quad (3.1.1)$$

Es ist daher nicht notwendig, LDA-Systeme durch Vergleich mit Referenzgeschwindigkeiten zu kalibrieren. Da die Frequenz, mit der Meßinformationen aufgenommen werden, sehr hoch sein kann, ergeben sich im Vergleich zu relevanten Zeitmaßen des Strömungsvorganges sehr kurze Meßzeiten, so daß praktisch Momentanmessungen möglich sind. Gleichmaßen ist das Meßvolumen, aus dem die Meßinformationen aufgenommen wird, im Vergleich zu Längenmaßen der Strömung sehr klein, so daß die Messungen praktisch lokale Messungen darstellen. In Gleichung (3.1.1) bezeichnet u_{\perp} die Geschwindigkeitskomponente eines Teilchens senkrecht zur durch die

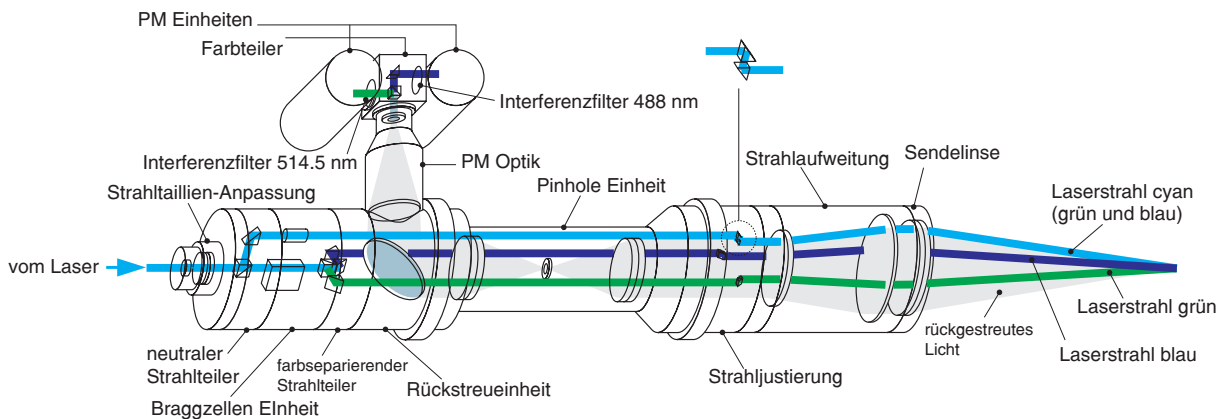


Abbildung 3.5: Optikkomponenten des LDA-Meßsystems

LDA-Optik bestimmten Winkelhalbierenden der beiden Laserstrahlen in der durch die beiden Strahlen aufgespannten Ebene, φ den halben Schnittwinkel zwischen beiden Strahlen und λ die Wellenlänge des verwendeten Laserlichtes.

Für die durchgeführten LDA-Messungen wurde das in [Dur89a] ausführlich dargestellte und auch von Beauvais [Bea94] eingesetzte Laser-Doppler-System verwendet. Es handelt sich dabei um ein modulares System der Firma Dantec, mit dem zwei Geschwindigkeitskomponenten simultan erfaßt werden können. Der gesamte LDA-Aufbau besteht aus einem Ar-Ionen Laser, einer Sende- und Empfangsoptik, Signalauswerteeinheiten sowie einem Meßdatenerfassungssystem, das als Einsteckkarte in einen PC integriert ist und die Daten auf dessen Festplatte abspeichert.

Der Laser wurde für die in der vorliegenden Arbeit durchgeführten 2-Komponentenmessungen im Multiline-Modus, in dem alle Wellenlängen des Ar-Ionen-Spektrums emittiert werden, betrieben. Zur Erfassung der beiden Geschwindigkeitskomponenten wurden die Wellenlängen 514,5 nm (grün) und 488 nm (blau) verwendet. Die Leistung des Lasers war mit 5 W spezifiziert, wobei im Singleline-Modus auf die blaue Linie 1,5 W und auf die grüne 2,0 W entfielen.

Die Dantec *X-Optik* Sende- und Empfangseinheit ist in Abbildung 3.5 dargestellt. Der Aufbau der modularen Einheit kann verändert werden, um unterschiedliche Strahlkonfigurationen am Austritt zu realisieren. Für die durchgeführten Untersuchungen wurde eine 90° Anordnung mit drei Strahlen – grün, blau und cyan (grün und blau gemischt) – verwendet,

die es erlaubte, die Geschwindigkeitskomponente entlang der Achse des Versuchsrohres und die Komponente der Quergeschwindigkeit in vertikaler Richtung gleichzeitig zu erfassen. Der cyanfarbene Laserstrahl wird über ein Prismensystem, das die Strahlteilung, Farbseparierung und Strahlpositionierung vornimmt, in die Optik eingekoppelt. In der Optik wird der Teilstrahl, der später farbsepariert wird, mittels einer Bragg-Zelle um 40 MHz frequenzverschoben, um zusammen mit der Signalauswertung die Detektion der Strömungsrichtung zu ermöglichen. Auf dem weiteren Weg durch die Optikmodule werden die Strahlen durch ein Prismensystem parallel und im Abstand einstellbar zueinander ausgerichtet. Eine Strahlaufweitungseinheit vor der Sendelinse ermöglichte die Fokussierung der Strahlen auf ein sehr kleines Volumen, wodurch eine höhere örtliche Auflösung und bessere Streusignale aus dem Meßvolumen erreicht wurden. Als Sendelinse wurde ein achromatisches Linsenpaar verwendet, um eine unterschiedliche Brechung der verwendeten Wellenlängen zu vermeiden. Um eine möglichst genaue Einstellung der Taille der Laserstrahlen zu ermöglichen, wurde als erstes Element eine Strahltaillen-Anpassung verwendet, die sicherstellt, daß die Laserstrahlen sich im Meßvolumen an ihrem engsten Querschnitt schneiden. Dies ist notwendig, um für das gesamte Meßvolumen einen eindeutigen Zusammenhang zwischen detektierter Streufrequenz und daraus zu berechnender Geschwindigkeit zu gewährleisten.

Das LDA-System wurde im Rückstreumodus betrieben, d.h. die Optikeinheit diente auch dazu, das vom Meßvolumen aus gestreute Signallicht zu sammeln und zu der Signaldetektion zu führen. Vorteil dieser Anordnung war die einfache Traversierbarkeit des gesamten LDA-Optiksystems, da eine Neujustierung beim Wechsel des Meßpunktes (meistens) nicht notwendig war. Um mögliche Reflexionen zu minimieren, wurde eine Pinhole-Einheit verwendet, sowie schmalbandige Interferenzfilter für die jeweiligen Wellenlängen nach der Farbseparierung des Streulichtes der beiden Geschwindigkeitskomponenten. Für die Signaldetektion wurden Photomultiplikatoren eingesetzt. Die komplette oben beschriebene Optikeinheit war zusammen mit dem Laser auf einem Drei-Achsen-Tisch montiert, der eine reproduzierbare Traversierung in x -, y - und z -Richtung ermöglichte. Die geometrischen Einzelheiten des optischen Aufbaus sind in Tabelle 1 zusammengefaßt.

Für die Signalauswertung wurden Counterprozessoren der Serie 55L90a

von Dantec eingesetzt. Das Signal von den Photomultiplikatoren wurde zunächst durch eine Mischereinheit geführt, die durch das Zumischen eines sinusförmigen Signales mit einstellbarer Frequenz und einen schmalbandigen Filter die Frequenzverschiebung der Bragg-Zelle bis auf einen gewünschten Rest eliminiert. Das Signal wurde dann verstärkt und den Countern zugeführt. In den Countern durchlief das Signal eine Dämpfungseinheit sowie eine Filterbank, mit der es durch Hochpaß-Filterung möglich war, den durch die Lichtintensitätsverteilung im Meßvolumen vorhandenen Signalsockel zu entfernen, sowie durch Tiefpaß-Filterung das Rauschen einzuschränken. Das so erreichte Signal wurde vom Counter durch Zählen von Nulldurchgängen und Ermittlung der zu einer festgelegten Anzahl N_f von Nulldurchgängen gehörigen Zeit Δt weiterverarbeitet. Sind diese Werte bekannt, kann die gesuchte Geschwindigkeit aus

$$u = \frac{N_f \lambda}{\Delta t 2 \sin \varphi}$$

bestimmt werden. Auf die Details der Arbeitsweise der Counter insbesondere zur Erkennung von Fehlersignalen und Aussetzern soll hier nicht weiter eingegangen werden. Hierfür wird auf Eder et al. [EEM98] sowie die Handbücher des LDA-Systems [Dan86a, Dan86b, Dan86c] verwiesen.

Tabelle 1: Geometrische Details des LDA-Optikaufbaus

Bezeichnung	Definition	λ_1	λ_2
Wellenlänge	λ	514,5 nm	488,0 nm
Strahldurchmesser	d_l	1,5 mm	1,5 mm
Strahlaufweitung	E	1,9 [-]	—
Strahlabstand vor Sendelinse	D	47,1 mm	47,3 mm
Brennweite	f	310,0 mm	—
halber Strahlschnittwinkel	$\varphi = \arctan \frac{D}{2f}$	4,34°	4,36°
Strahlabstand vor Aufweitung	$D_0 = \frac{D}{E}$	24,8 mm	24,9 mm
fokussierter Strahldurchmesser	$d_f = \frac{4}{\pi} \frac{f\lambda}{d_l E}$	71,3 μm	67,6 μm
Meßvolumen (Rotationsellipsoid)			
Länge (in Strahlrichtung)	$d_x = \frac{d_f}{\sin \varphi}$	0,94 mm	0,89 mm
Durchmesser	$d_y \approx d_z = \frac{d_f}{\cos \varphi}$	71,5 μm	67,8 μm
Interferenzstreifenabstand	$\delta_f = \frac{\lambda}{2 \sin \varphi}$	3,40 μm	3,21 μm
Interferenzstreifenanzahl	$N_f = \frac{4}{\pi} \frac{D}{E d_l}$	21	21

Die eingesetzten Counter der Firma Dantec stellen die Geschwindigkeiten als digitale Frequenz und/oder Zeitinformation im *Sample and Hold* Modus (S+H) an je einem Ausgang der Geräte zur Verfügung, d.h. ein Geschwindigkeitswert bleibt dort solange verfügbar, bis nach Eintreffen eines neuen LDA-Signals ein neuer Wert ermittelt wurde. Die Informationen werden in den Countern als 24-Bit Wort kodiert, das in die gewünschte Form umgerechnet werden muß. Die Meßwerterfassung erfolgte mittels einer PC-Interfacekarte der Firma Dostek/Zech [Dos]. Die Counter arbeiten intern mit einer Taktfrequenz von 500 MHz, während die Frequenz, mit der die Dostek-Karte Daten aufnimmt einstellbar ist. Die Messungen wurden mit einer äquidistanten Abtastung bei einer Frequenz von 62,5 kHz für die Messungen mit 12 und 16 Vol.-% H₂ bzw. 31,25 kHz für die 9 Vol.-% Messungen durchgeführt. Die Dauer der Messung wurde über die Anzahl der Meßwertpaare, die von der Karte entgegengenommen wurden, gesteuert. Da das Erfassungsprogramm auf MS-DOS basierte, limitierte die 640 kByte Speichergrenze die Anzahl der Meßwerte auf ca. 49000 Datenpaare.

Die Meßwerte der im Rahmen der vorliegenden Arbeit durchgeführten Untersuchungen wurden als Rohdaten (Frequenzinformation) in dem von den Countern vorgegebenen binären Format gespeichert, wodurch die Größe der zu speichernden Datensätze gegenüber einer formatierten Speicherung als ASCII-Daten um ein Vielfaches reduziert werden konnte. Die Umrechnung von Frequenz- in Geschwindigkeitsinformationen wurde daher immer nur dann vorgenommen, wenn diese benötigt wurden. Die Weiterverarbeitung der Daten auf leistungsfähigen Workstations war trotz des binären Formats der Daten durch entsprechende Umsetzungsroutinen möglich³. Zur Synchronisation der LDA-Messung mit der Aufnahme der Integraldaten wurde eine *inhibit*-Funktion der Dostek-Karte verwendet. Solange an einem der Eingänge der Karte ein TTL-high Signal anlag, wurde die Datenerfassung unterbunden. Mittels einer Flip-Flop Schaltung und einem Trigger-Signal von der MuSCET-Datenerfassung konnte die Datenaufnahme der Geschwindigkeitsdaten so mit der gleichen Zeitbasis wie die der integralen Daten erfolgen.

³PC-Prozessoren (sog. *Little-Endian* Architekturen) speichern die einzelnen Bits eines Speicherwortes aus mehreren Bytes in einer anderen Reihenfolge als beispielsweise Workstations (*Big-Endian* Architekturen). Sind jedoch beide Speicherreihenfolgen und die Abfolge der zu erwartenden Speicherworte bekannt, können Bitshift-Operationen die Informationen umsetzen.

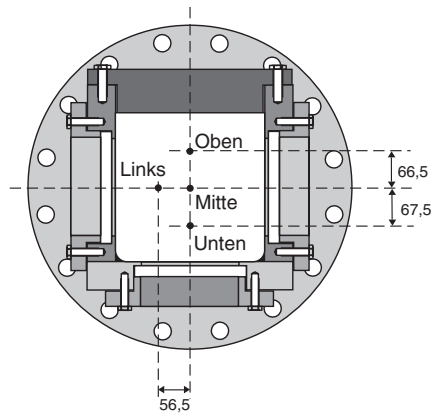
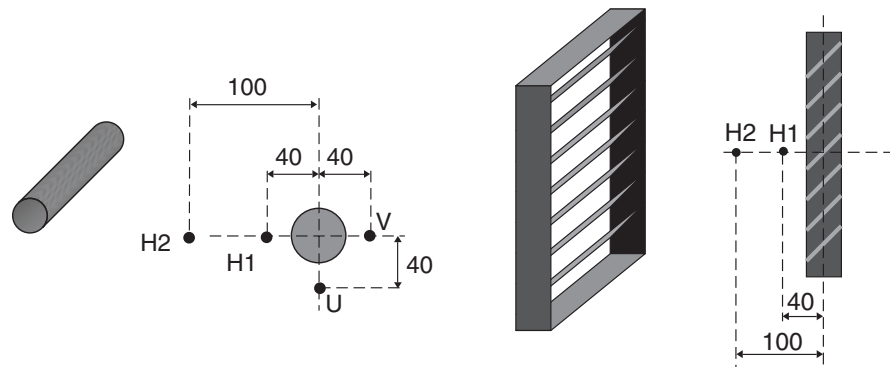
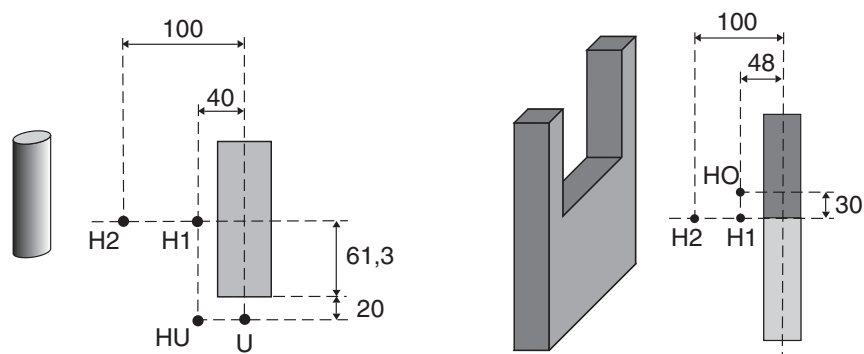


Abbildung 3.6: Lage und Bezeichnung der LDA-Meßpositionen im leeren Rohr (Hindernisbezeichnung: NON)



(a) Hindernisse R2, R3

(b) Hindernis G2



(c) Hindernis H1

(d) Hindernis T1

Abbildung 3.7: Lage und Bezeichnung der LDA-Meßpositionen an den Hindernissen

Wie oben bereits dargestellt, erlaubt die Laser-Doppler-Anemometrie räumlich sehr hoch aufgelöste Messungen der Strömungsgeschwindigkeit. Die Geschwindigkeitsinformationen beziehen sich dadurch praktisch auf einen Punkt

$$u_{\perp} = u_{\perp}(x_i, t) \quad \text{mit} \quad x_i = \text{const.}$$

Es ist daher nicht möglich, aus einer einzigen Messung Informationen über das gesamte Strömungsfeld zu gewinnen. Hierzu sind Messungen an einer ausreichend großen Anzahl ausgewählter Punkte notwendig. Für die in der vorliegenden Arbeit untersuchten Hindernisse wurden pro Hindernis bis zu 4 Meßpositionen definiert. Diese Positionen sind in Abbildung 3.7 für die betrachteten Hindernisse sowie in Abbildung 3.6 für das leere Rohr dargestellt. Die Lage der einzelnen Meßpunkte wurde so gewählt, daß diese sich in Bereichen befanden, die aufgrund der strömungsmechanischen Gegeben-

Tabelle 2: Abstand der Meßpositionen vom Zündflansch

Hindernis	Pos.	Aufnahme	x -Pos.
NON	LINKS	n.a.	1,739 m
	MITTE	n.a.	1,739 m
	OBEN	n.a.	1,739 m
	UNTEN	n.a.	1,739 m
G2	H1	1	1,708 m
	H2	1	1,768 m
H1	H1	1	1,694 m
	H2	1	1,754 m
	HU	1	1,694 m
	U	2	1,712 m
R2	H1	1	1,703 m
	H2	1	1,763 m
	U	3	1,743 m
	V	3	1,703 m
R3	H1	1	1,701 m
	H2	1	1,761 m
	U	3	1,739 m
	V	3	1,699 m
T1	H1	1	1,709 m
	H2	1	1,761 m
	HO	1	1,709 m

heiten als kritisch für die Bewertung des Turbulenzeinflusses zu betrachten waren (nahe Staustellen, in Scherschichten, Rezirkulations- und Nachlaufgebieten).

Aufgrund der geometrischen Anordnung der Laserstrahlen im Raum konnte nicht jeder optisch zugängliche Punkt auch tatsächlich mit dem Meßvolumen erreicht werden. Die Lage der oberen und unteren Meßpunkte in der Mitte des leeren Rohres war daher durch die Fensteröffnung vorgegeben. Um bei den Hindernissen möglichst viele Meßpunkte erreichen zu können, sah der Hindernisträger daher verschiedene Hindernishalterungen vor. Die Hindernisse konnten so in Richtung der Rohrachse an verschiedenen Positionen eingebaut werden, so daß zusammen mit der Verschiebung des Traversiertisches der Zugang zu einigen ansonsten nicht erreichbaren Meßpunkten möglich war. Durch diese Verschiebung ergab sich jedoch zusätzlich zu den in Abbildung 3.7 angegebenen Abständen der Meßpunkte vom Hindernis eine zusätzliche Variation im Abstand der einzelnen Meßpunkte vom Zündflansch. In Tabelle 2 sind daher die Abstände, sowie die für die jeweilige Meßposition verwendete Hindernisaufnahme zusammengestellt. Mit 1 wird dabei die dem Zündflansch nächste Hindernisaufnahme von insgesamt fünf bezeichnet.

Die LDA-Meßkurven wurden nach bestimmten Kriterien auf ihre Eignung zur Auswertung bewertet:

- Datenrate während der Messung (aus Meßdaten)
- Anzahl Fehlmessungen (Ausreißer)
- Plausibilität des Geschwindigkeitsverlaufes
- Verfügbarkeit der integralen Meßdaten

Erfüllte eine Messung diese Kriterien nicht, wurde sie verworfen. Die Anzahl der Meßkonfigurationen⁴ ergibt sich aus der Anzahl der in Tabelle 2 angegebenen LDA-Meßstellen multipliziert mit den betrachteten H₂-Konzentrationen 9, 12 und 16 Vol.-% H₂. Es ergaben sich so 63 Meßkonfigurationen. Für jede Meßkonfiguration wurden mindestens 15 auszuwertende

⁴Dieser Begriff wird im weiteren verwendet, um Messungen eindeutig zu kennzeichnen. Eine Meßkonfiguration ist bestimmt durch den Hindernistyp, die H₂-Konzentration und die Meßposition.

Messungen gefordert, so daß minimal 945 Einzelmessungen notwendig waren. Inklusive der Verworfenen wurden insgesamt über 1500 Messungen durchgeführt, von denen letztendlich 995 weiter ausgewertet wurden.

3.1.4 Eigenschaften und Größe der Streuteilchen

Als Streuteilchen wurden Titandioxid-Teilchen (TiO_2) von KRONOS International Inc. verwendet, deren mittlerer Durchmesser der Hersteller mit $0,3 \mu\text{m}$ angibt [Hoh92, KRO94]. Über die genaue Teilchengrößenverteilung war jedoch nichts bekannt, da Titandioxid in der eingesetzten Form vornehmlich als Grundstoff für Farben verwendet wird, und solche Angaben für die weitere Verarbeitung scheinbar nicht relevant sind. Durch Agglomeration bildeten sich bis die Teilchen zum Einsatz kamen, Aggregate, die augenscheinlich wesentlich größer waren, als vom Hersteller angegeben. Luftfeuchtigkeit und in der Druckluftleitung vorhandenes Wasser forcierten diesen Prozeß zusätzlich.

Die Rieselfähigkeit des Seedings konnte erhalten werden, indem Anteile von Siliziumdioxid (SiO_2) zugesetzt wurden, um die Luftfeuchte zu binden. Für die durchgeführten Messungen wurde hierfür AEROSIL OX 50 der Degussa AG verwendet. Die Größe der SiO_2 -Primärteilchen gibt der Hersteller mit 40 nm an [Deg98, Deg95]. AEROSIL neigt jedoch sehr stark dazu, Aggregate und Agglomerate bis hin zu Flocken zu bilden, so daß die visuell festgestellte Teilchengröße wesentlich größer war.

Da die Verlässlichkeit der mittels LDA gewonnenen Meßwerte sehr stark von der Teilchengröße abhängt, und die eingesetzten Teilchen augenscheinlich nicht den Herstellerangaben entsprachen und zu groß waren, wurden Maßnahmen ergriffen, um die Teilchengröße zu reduzieren und damit die Teilchengrößenverteilung zu homogenisieren. Das Einbringen der Teilchen durch eine Düse mit sehr kleinem Durchmesser wurde weiter oben bereits erwähnt. Der sich am Ausgang dieser Düse einstellende turbulente Freistrahle bildet eine Scherschicht, die bei der Teilchenzugabe genutzt werden konnte, um die Teilchenagglomerate auseinanderzubrechen.

Um zu überprüfen, welche Teilchengröße auf diese Art erreicht wurde, wurden Messungen mit einem Kaskadenimpaktor, wie von Lehner [Leh96] beschrieben, durchgeführt. Für diesen Zweck wurden aus der Versuchsanlage

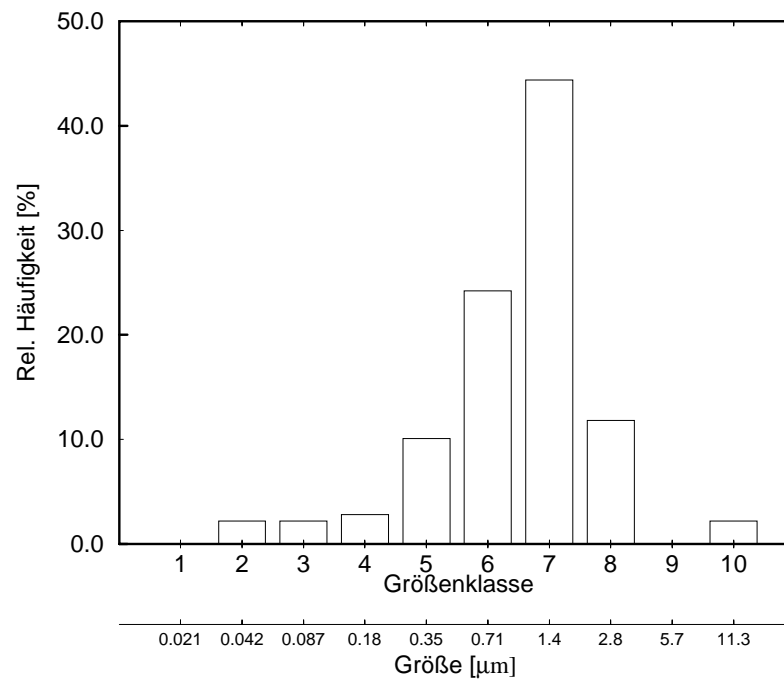


Abbildung 3.8: Gemessene Häufigkeitsverteilung der Seedingteilchengröße

während des Umwälzens mittels einer Vakuumpumpe Titandioxid-Teilchen entnommen. Da bei der Bestimmung der Teilchengröße mit dem eingesetzten Impaktor nur ein Anhaltswert von Interesse war, wurde der Aufwand einer isokinetischen Absaugung nicht betrieben. Gewichtsmessungen ergaben die in Abbildung 3.8 dargestellte Verteilung der relativen Häufigkeiten der einzelnen Größenklassen, für die die angegebenen Größenbereiche gelten. Man erkennt, daß der am häufigsten vertretene mittlere Teilchendurchmesser etwa $1,4 \mu\text{m}$ betrug und somit trotz der sowohl beim Titandioxid als auch beim Siliziumdioxid sehr großen Ausgangsteilchen durch die Zugabedüse sehr kleine und damit gute Streuteilchen erreicht werden konnten. Parallel zu den Größenmessungen durchgeführte Untersuchungen der LDA-Signalgüte zeigten zudem, daß auch das erreichte Signal-Rausch-Verhältnis der Streusignale die Voraussetzungen für die durchzuführenden Messungen erfüllte.

3.2 Auswertung der LDA-Messungen

3.2.1 Hauptströmung und Akustikeffekte im Verbrennungsrohr

In Abschnitt 2.1 wurde die Vorschrift zur Bestimmung der Turbulenzintensität bei äquidistanter Abtastung (wie im vorliegenden Fall) angegeben:

$$u'_{\text{rms}}(t) = \sqrt{\frac{1}{N_E} \sum_{n=1}^{N_E} (u_n - \bar{u}_n)^2}. \quad (3.2.1)$$

Bei der Erarbeitung eines Auswerteprogrammes für diese Größe stellte sich die Frage, wie die Werte \bar{u}_n in obiger Gleichung, die gewissermaßen eine *Mittellinie* der Zeitverläufe bilden (vgl. Abbildung 2.1(b)), zu bestimmen waren. Bei instationären turbulenten Strömungen wird hierzu meist der Ensemble-Mittelwert herangezogen. Der Ensemble-Mittelwert wird gebildet, indem viele Wiederholungen desgleichen Versuches durchgeführt und die sich ergebenden Verläufe gemittelt werden. Die Wiederholbarkeit der einzelnen Versuche in der MuSCET-Anlage war jedoch infolge von Schwankungen insbesondere des Anlaufvorganges der Verbrennung nicht derart, daß die durchführbaren Messungen ausgereicht hätten, Ensemble-Mittelwerte statistisch abzusichern. Es blieb daher nur die Möglichkeit, die Mittellinien aus den Zeitreihen selbst zu berechnen. Dies konnte entweder durch Bildung eines laufenden Mittelwertes über eine Anzahl von Meßwerten erreicht werden oder durch digitale Tiefpaß-Filterung des LDA-Signals. In der vorliegenden Arbeit wurden beide Wege hinsichtlich ihrer Anwendbarkeit für die hier beschriebenen Untersuchungen betrachtet.

Mittellinie aus laufendem Mittelwert

Bei den folgenden Betrachtungen ist es notwendig, zwischen dem Intervall, für das die Auswertung erfolgt (N_E), und dem Intervall für den laufenden Mittelwert (N_M) zu unterscheiden. N_M wird daher als *Mittelungsintervall* und N_E als *Auswerteintervall* bezeichnet. Der einem Meßwert n zugeordnete laufende Mittelwert wurde zentriert als

$$\bar{u}_n = \frac{1}{N_M} \sum_{i=n-N_M/2}^{n+N_M/2} u_i,$$

definiert, wobei das Mittelungsintervall N_M am Rand des Auswertebereiches N_E entsprechend verkleinert wurde und dort asymmetrisch um den Punkt n lag.

In Abschnitt 2.1 wurde betont, daß bei der Bestimmung eines instationären Mittelwertes das Mittelungsintervall geeignet gewählt werden muß. Einerseits muß dieses verglichen mit den turbulenten Schwankungen ausreichend groß sein, andererseits dürfen die transiente Schwankungen, die aus der Hauptströmung oder akustischen Schwingungen im Rohr herrühren, nicht durch ein zu großes Intervall herausgemittelt werden, da dies bei der Auswertung nach Gleichung (3.2.1) zu zu großen rms-Werten führen würde. Bei den durchgeführten Messungen konnte jedoch nicht *a priori* festgelegt werden, wieviele Meßwerte N_M das Mittelungsintervall umfassen sollte, da weder die Schwankungen noch der instationäre Verlauf der Hauptströmung vor der Messung bzw. der Auswertung bekannt waren. Aus diesem Grund wurde eine Methode entwickelt, um das zu wählende Intervall geeignet zu bestimmen.

Ausgangspunkt der Überlegungen war die Annahme, daß die zu messenden turbulenten Schwankungen unkorreliert sind. Korrelierte Anteile im Signal mußten daher aus großräumiger Strömungsbewegung stammen und konnten der Hauptströmung oder anderen Effekten wie der Akustik zugeordnet werden. Als Maß für die Korreliertheit zweier Signale diente der sogenannte Korrelationskoeffizient r , der wie folgt definiert ist:

$$r = \frac{\sigma_{xy}}{\sigma_x \sigma_y},$$

wobei σ_x und σ_y die Standardabweichungen der beiden Meßwertreihen bezeichnen. Für völlig unkorrelierte Signale ist der Korrelationskoeffizient null, mit zunehmender Korrelation der Signale geht er gegen eins.

Wendet man dies auf die Schwankungssignale $u'_n = u_n - \bar{u}_n$ bzw. $v'_n = v_n - \bar{v}_n$ der gemessenen Geschwindigkeiten an (u in Rohrlängsrichtung, v quer dazu), so kann überprüft werden, ob die Signale nach Abzug des mit einem bestimmten Intervall N_M gebildeten laufenden Mittelwertes noch korrelierte Anteile aufweisen. Für σ_x und σ_y verwendet man daher:

$$\sigma_x = \sqrt{\frac{1}{N_E} \sum_{n=1}^{N_E} (u'_n - \bar{u}'_n)^2}$$

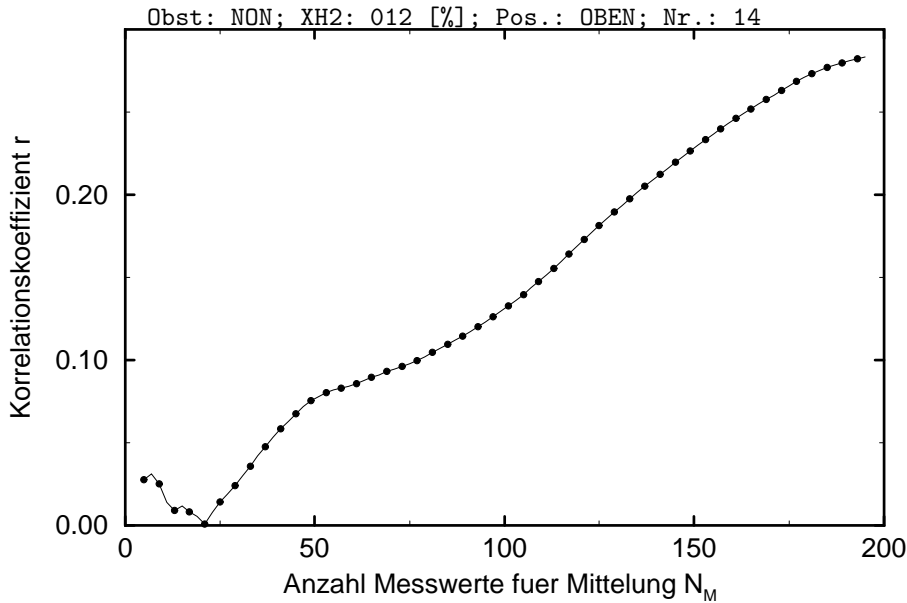


Abbildung 3.9: Bestimmung des optimalen Mittelungsintervalls; Verlauf des Korrelationskoeffizienten über der zur Berechnung des laufenden Mittelwertes verwendeten Anzahl der Meßpunkte

$$\sigma_y = \sqrt{\frac{1}{N_E} \sum_{n=1}^{N_E} (v'_n - \bar{v}'_n)^2}.$$

Die Kovarianz ist dagegen:

$$\sigma_{xy} = \frac{1}{N_E} \sum_{n=1}^{N_E} (u'_n - \bar{u}'_n)(v'_n - \bar{v}'_n).$$

Die Korrelationskoeffizienten, die sich so ergeben, sind abhängig von dem zur Bildung des laufenden Mittelwertes gewählten Intervall N_M . Für zu kleine Werte von N_M folgt der berechnete Mittelwert nahezu dem Originalsignal, so daß die Schwankungen gegen null gehen. Dies stellt ebenfalls eine Korrelation dar und führt zu einem Ansteigen des Korrelationskoeffizienten. Für zu große Werte von N_M weisen die berechneten Schwankungen noch Anteile der Originalsignale auf, die aufgrund der großräumigen Bewegung korreliert sind und so ebenfalls einen größeren Korrelationskoeffizienten aufweisen. Der geeignetste Wert ergibt sich daher an der Stelle des minimalen Korrelationskoeffizienten. Durch Variation des Mittelungsintervalls N_M konnte also, wie in Abbildung 3.9 dargestellt, aus $r(N_M)$ das gesuchte optimale Mittelungsintervall bestimmt werden.

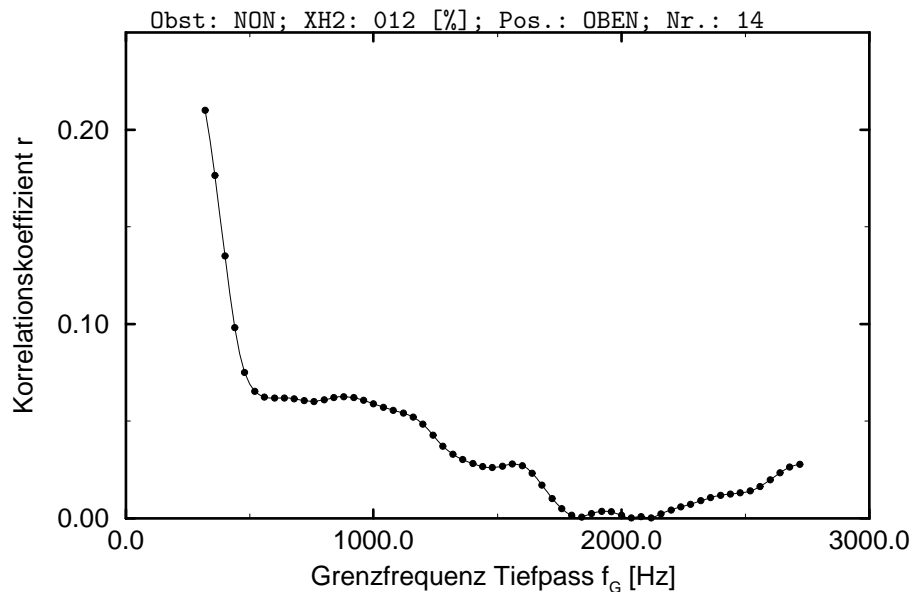


Abbildung 3.10: Bestimmung der optimalen Grenzfrequenz

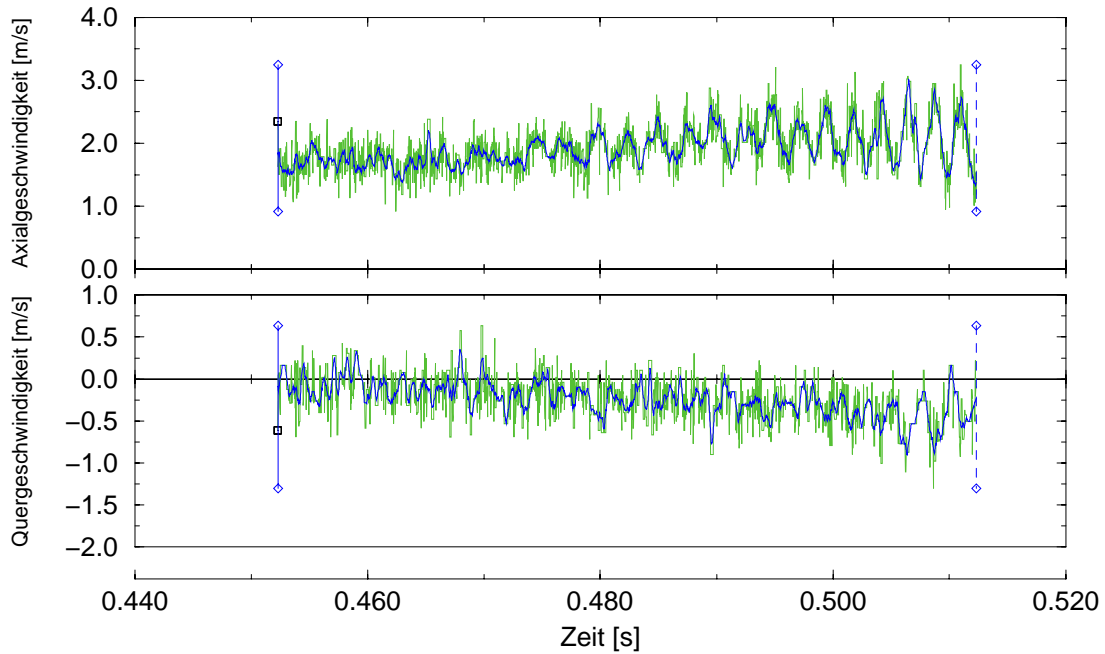
Mittellinie durch digitale Tiefpaß-Filterung

Wurde die Mittellinie, die in Gleichung (3.2.1) für \bar{u}_n verwendet wird, durch digitale Tiefpaß-Filterung des Meßsignals erzeugt, ergab sich eine ähnliche Problematik wie im obigen Abschnitt für den laufenden Mittelwert erläutert. Eine à priori Festlegung der Grenzfrequenz des Filters konnte dazu führen, daß hochfrequente Schwankungsanteile des Signals dem gefilterten Signal zugeschlagen wurden und so die Auswertung der Schwankungsintensität verfälschten. Das oben erläuterte Verfahren konnte jedoch auf die Tiefpaß-Filterung übertragen werden, indem die Grenzfrequenz f_G variiert wurde, um so das Minimum von $r(f_G)$ zu ermitteln.

Hierzu wurde, wie von Schrüfer [Sch90] erläutert, ein nichtrekursiver digitaler Filter verwendet. Schrüfer gibt an, daß für einen nichtrekursiven Tiefpaß die Grenzfrequenz nicht wesentlich kleiner als die Abtastfrequenz sein soll und nennt Faktoren von vier bis sechs. Die vorliegende Anwendung erforderte jedoch Grenzfrequenzen, die teilweise erheblich niedriger als die so erreichbaren Grenzfrequenzen lagen. Um dennoch akzeptable Flankensteilheiten der Übertragungsfunktionen zu erreichen, wurden bis zu 300 Filterkoeffizienten zugelassen und keine Glättungsfunktionen verwendet.

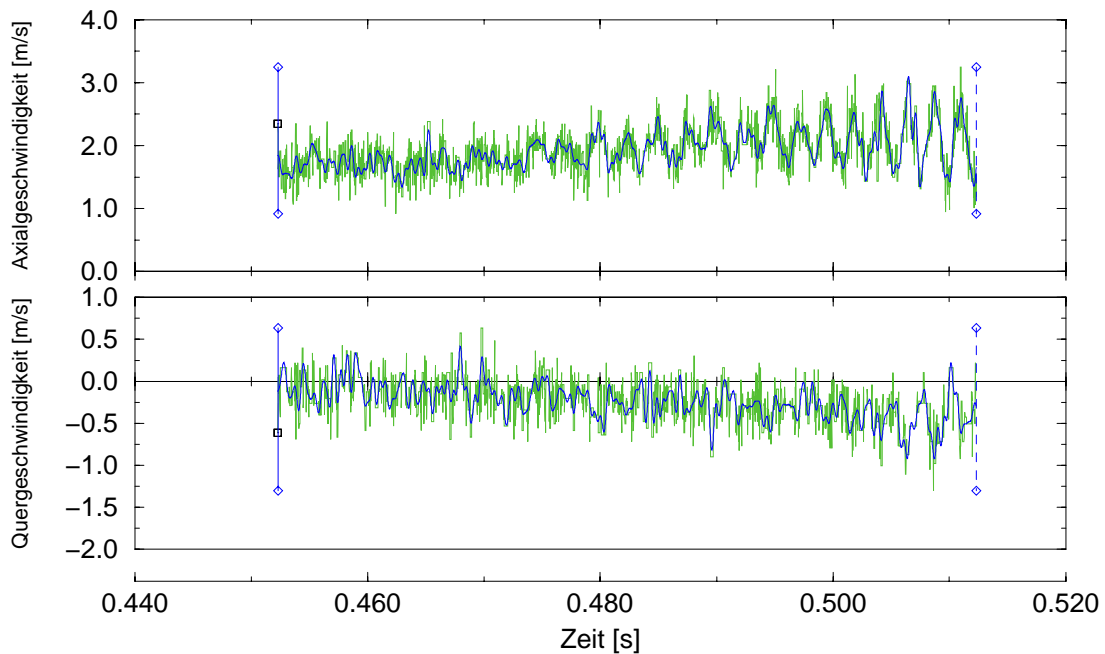
Der Verlauf $r(f_G)$, der sich so ergab, ist in Abbildung 3.10 dargestellt.

Obst: NON; XH2: 012 [%]; Pos.: OBEN; Nr.: 14



(a) Mittelung mit $N_M = 20$ Werten

Obst: NON; XH2: 012 [%]; Pos.: OBEN; Nr.: 14



(b) Tiefpaßfilterung mit Grenzfrequenz $f_G = 2040$ Hz

Abbildung 3.11: Vergleich von auf unterschiedliche Arten bestimmte Mittellinien eines Zeitverlaufs der Strömungsgeschwindigkeit

Für den beispielhaft gewählten Verlauf lieferten die beiden Verfahren ein Mittelungsintervall mit $N_M = 20$ Meßwerten, bzw. eine Grenzfrequenz von $f_G = 2040$ Hz. Die Verläufe der mit diesen Werten bestimmten Mittellinien sind in den Abbildungen 3.11(a) und 3.11(b) dargestellt. Man erkennt, daß die Verläufe plausibel sind und beide Verfahren zu ähnlichen Mittellinien führen.

3.2.2 Vorgehensweise zur LDA-Messungsauswertung

Die in der vorliegenden Arbeit betrachteten Verbrennungsströmungen unterschieden sich in ihrer Charakteristik stark von der in der klassischen Turbulenztheorie als Referenzströmung herangezogenen stationären, ebenen, turbulenten Plattengrenzschicht. Aus diesem Grund können etliche der dort vereinbarten Kenngrößen nicht einfach übernommen werden. So scheint es nicht sinnvoll, die vorliegende Verbrennungsströmung mit einer Grenzschichtströmung hinsichtlich des Turbulenzgrades zu vergleichen. Der Turbulenzgrad bezieht die ermittelten Schwankungswerte der Geschwindigkeit im Falle der Grenzschicht auf die Strömungsgeschwindigkeit in der ungestörten Hauptströmung, einer Größe, für die, im Falle einer Messung in einer Verbrennungsströmung mit Hindernissen, nur schwerlich ein Vergleichswert angegeben werden kann. Durch die Zeitabhängigkeit der Strömung und Abweichungen in der Wiederholbarkeit der hier durchgeführten Messungen entstehen zusätzliche Fragestellungen wie die Festlegung eines geeigneten Mittelwertes, die im vorangegangenen Abschnitt betrachtet wurde.

Um daher Vergleichbarkeit mit anderen Verbrennungsströmungen zu erreichen, wird im folgenden dokumentiert, wie im Rahmen der vorliegenden Arbeit die einzelnen Messungen ausgewertet wurden.

Bestimmung des Zeitpunktes der Flammenankunft

Der Zeitpunkt der Flammenankunft wurde aus der Datenrate der LDA-Zeitreihe selbst bestimmt. Da in dem Fenstersegment der MuSCET-Anlage keine Photodioden angebracht waren, ergab sich eine zu große Unsicherheit bei der Bestimmung der Flammenankunft aus der von der MuSCET-Meßtechnik ermittelten Flammenposition. Vergleiche zeigten zudem einen

deutlichen Unterschied zwischen den beiden unterschiedlich bestimmten Zeitpunkten (s. Abbildung 3.13). Die Photodioden registrierten das von der Flamme ausgehende Licht als integrale Größe, d.h. jeweils der vorderste Punkt der Flamme wurde detektiert. Aufgrund von Auftriebseffekten kam es, wie in [AM98a] dargestellt, zu einer Anstellung der Flamme, so daß (zumindest bei 9 und 12 Vol.-% H_2) der vorderste Punkt meist entlang der Oberseite der Versuchsstrecke wanderte, während die Meßpositionen, die weiter in der Rohrmitte lagen, teilweise erst erheblich später von der Flammenfront passiert wurden.

Die Flammenfront und die Expansionsströmung in der Versuchsstrecke schieben gewissermaßen wie eine Kolbenströmung die Streuteilchen vor sich her. Aus diesem Grund konnte angenommen werden, daß die Dichte der Streuteilchen vor der Flammenfront größer war als dahinter. Zudem kam es durch die Verbrennung zu Dichtegradienten im Fluid, so daß durch die sich ändernden Brechungseigenschaften des Fluids die Ausrichtung der Laserstrahlen so stark verändert wurde, daß die Streusignale nach dem Passieren der Flammenfront stärker fehlerbehaftet waren als vorher und von der Elektronik der Counter verworfen wurden. Beide Effekte führen zu einer deutlichen Abnahme der von den Countern als gut bewerteten

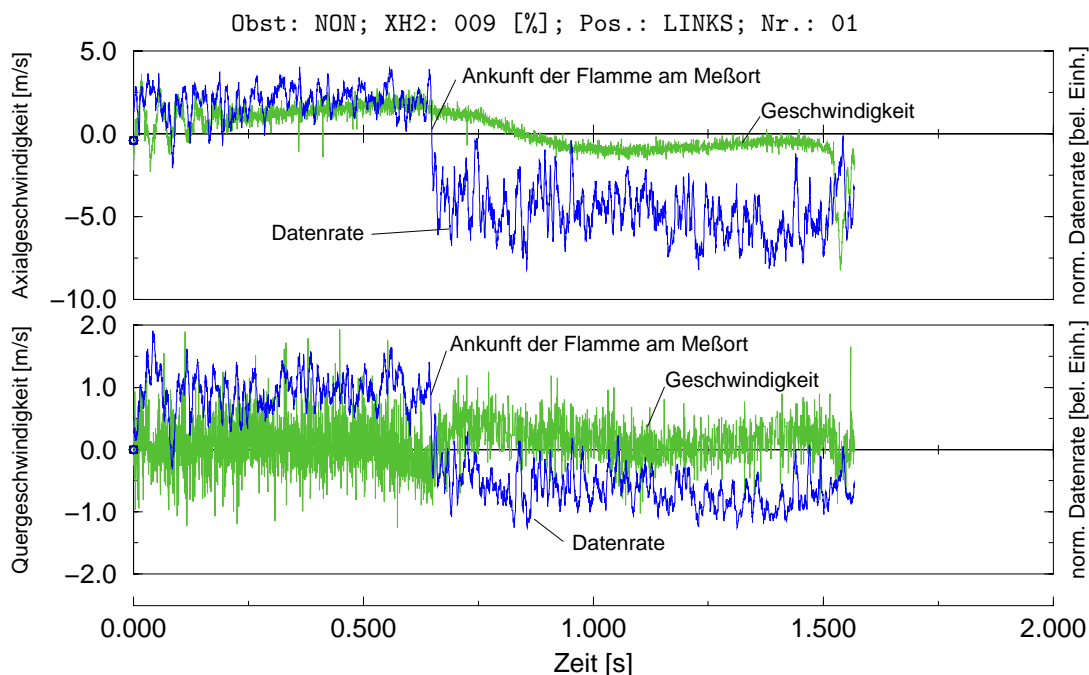


Abbildung 3.12: Zeitlicher Verlauf der Datenrate und Festlegung der Flammenankunft

Signale, so daß die Datenrate der LDA-Signale zur Detektion der Flamme verwendet werden konnte.

Die Datenrate wurde als laufende Größe über ein festgelegtes Intervall von $N_R = 200$ Punkten gebildet. Einem Punkt n wurde dabei wie folgt eine Datenrate f_R zugewiesen:

$$f_{R,n} = \frac{n_R}{N_R}, \quad (3.2.2)$$

wobei n_R die Anzahl der nach der *Sample and Hold*-Eliminierung (vgl. Abschnitt 3.2.3) mehrfacher Meßwerte übriggebliebenen Meßwerte in dem um n zentrierten Intervall von N_R Werten bezeichnet. In Abbildung 3.12 ist der Verlauf einer Meßreihe zusammen mit dem nach (3.2.2) gebildeten Verlauf der Datenrate dargestellt. Die Einheit der Datenrate ist dabei beliebig und lediglich so skaliert, daß sie den gleichen Wertebereich einnimmt wie die jeweiligen Geschwindigkeitskomponenten.

Die Abnahme der Datenrate beim Passieren der Flammenfront ist deutlich erkennbar. Die Erkennung der Flammenankunft konnte nicht automatisiert werden, so daß alle Messungen nach diesem Kriterium manuell ausgewertet werden mußten.

Festlegung des Auswertungsintervalles

Die Auswertung der Messungen hinsichtlich der Turbulenzintensität erfolgte jeweils in einem definierten Zeitintervall T_E unmittelbar vor Ankunft der Flamme, da der Turbulenzzustand in diesem Bereich die Verbrennung maßgeblich beeinflusst. T_E wurde ähnlich wie von Eder et al. [EEM98] in Relation zu einem integralen Zeitmaß τ_L der Strömung mit

$$T_E \sim 5 \cdot \tau_L$$

festgelegt. τ_L kann dabei, wie von Beauvais [Bea94] durchgeführt, aus der Autokorrelationsfunktion der Signale bestimmt werden. Eine Überprüfung des so ermittelten Zeitmaßes anhand verschiedener Meßreihen ergab jedoch teilweise unplausible Werte, insbesondere wenn die Strömung akustische Schwingungen aufwies. Für die Festlegung von τ_L wurde daher auf ein

typisches integrales Geschwindigkeitsmaß U und Längenmaß L , durch die die Strömung gekennzeichnet war, zurückgegriffen. Als charakteristisches Längenmaß L_C der Strömung wurde die Kantenlänge $L_C = 268$ mm des quadratischen Querschnitts der Versuchsstrecke verwendet. L wurde daraus als $L = 0.1L_C = 0,0268$ m bestimmt und war für alle Messungen gleich.

Bei der Festlegung des Geschwindigkeitsmaßes, das für die Bestimmung von τ_L herangezogen wurde, wurde die Annahme getroffen, daß der Turbulenzzustand vor allem durch die Hauptströmung beeinflusst war, und somit das Zeitintervall auf die ungestörte Anströmung der Hindernisse bezogen werden muß. Da die Anströmung nicht bei jedem Hindernis vermessen wurde (Ausnahmen waren R2 und R3), wurde als Geschwindigkeitsmaß die mittlere Geschwindigkeit der axialen Hauptströmung in der Mitte des Rohres ohne Hindernis herangezogen. Als Zahlenwerte für die betrachteten Gemischkonzentrationen von 9, 12 und 16 Vol-% H_2 in Luft ergaben sich so

$$\begin{aligned} U_{9\%} &\approx 1,2 \text{ m/s} \\ U_{12\%} &\approx 2,2 \text{ m/s} \\ U_{16\%} &\approx 11,4 \text{ m/s} \end{aligned}$$

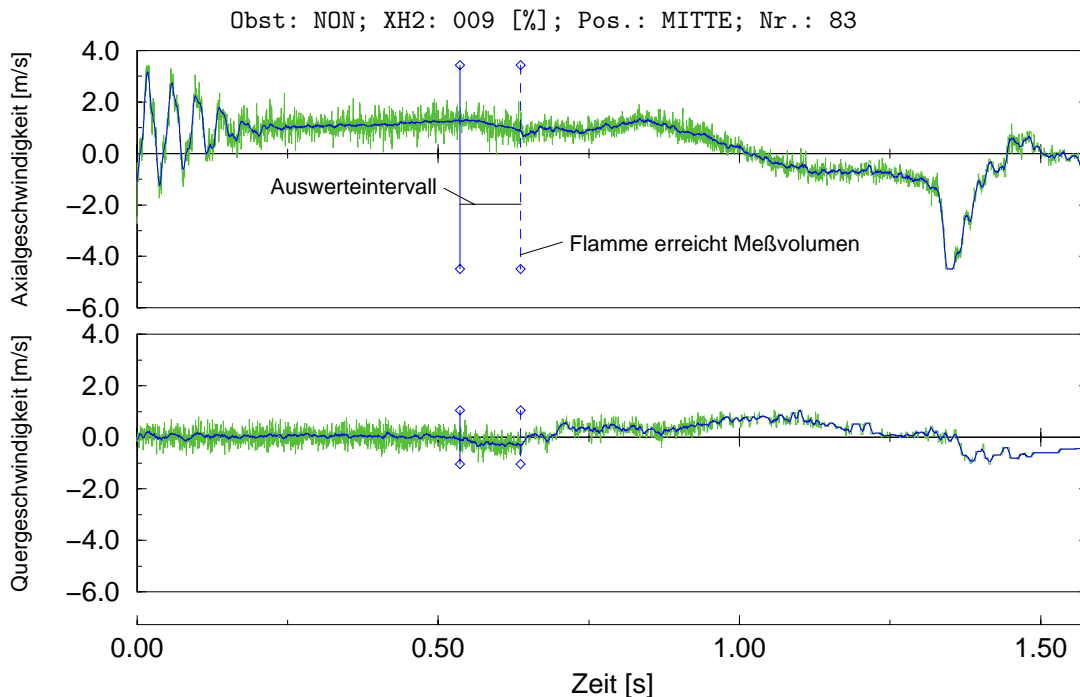
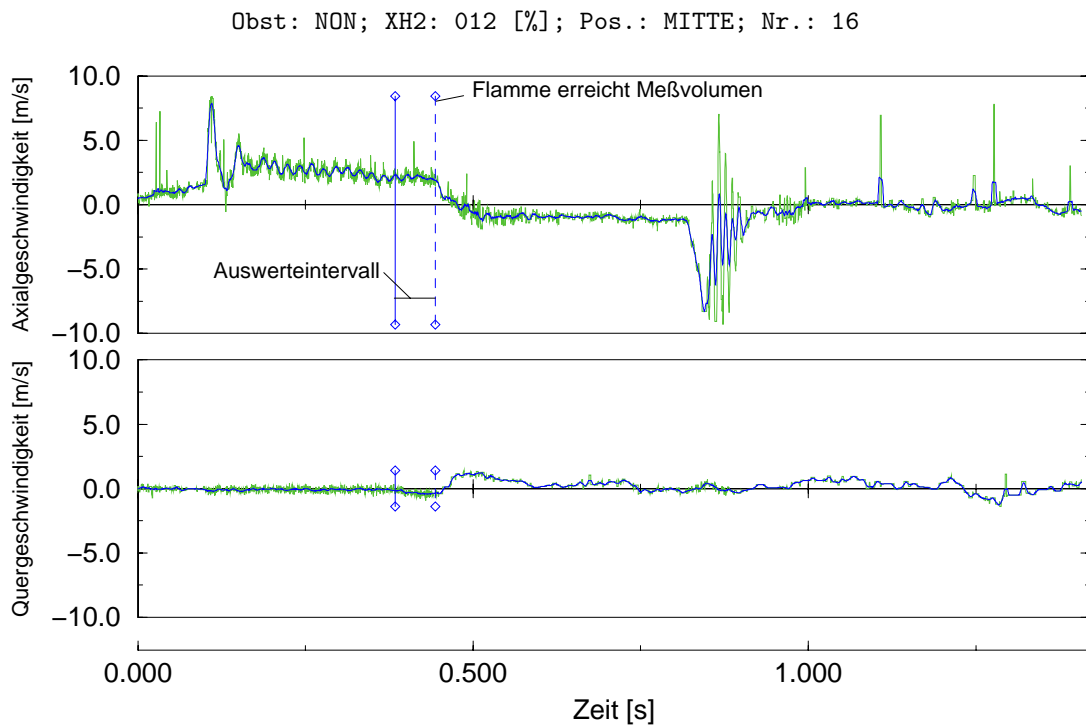
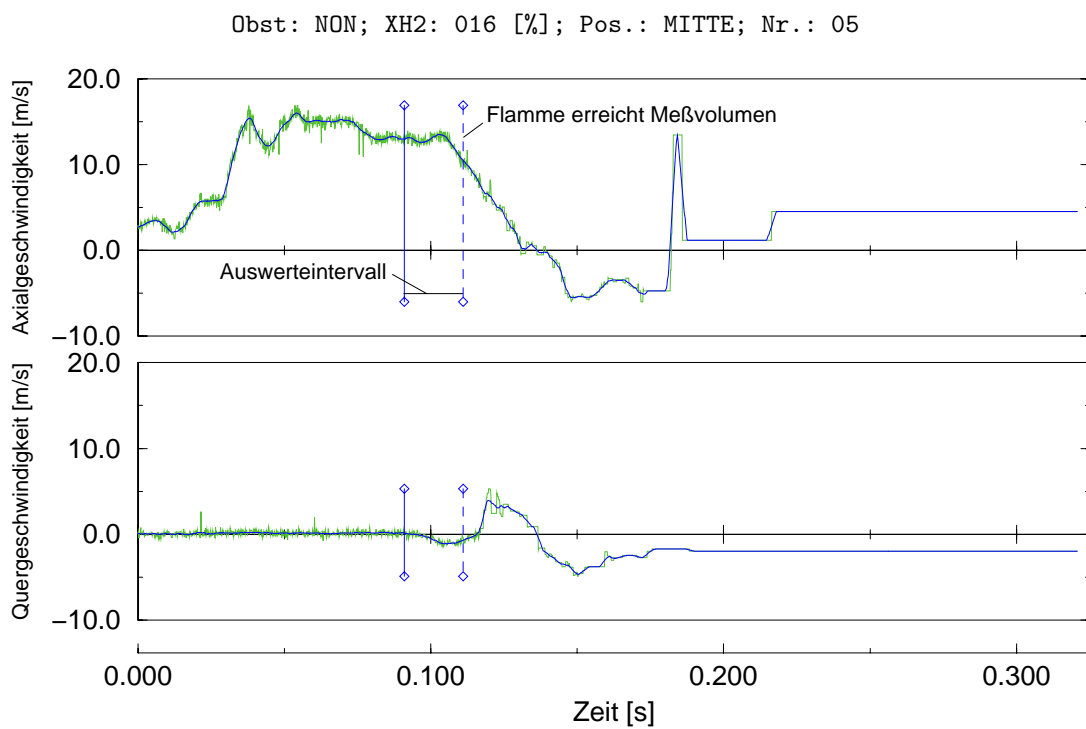


Abbildung 3.13: Auswertintervall und Flammenposition bei 9 Vol.-% H_2

(a) 12 Vol.-% H₂(b) 16 Vol.-% H₂**Abbildung 3.14:** Vergleich der Auswertintervalle

und damit die folgenden Auswerteintervalle⁵:

$$\begin{aligned} T_{E,9\%} &= 0,1 \quad \text{s} \\ T_{E,12\%} &= 0,06 \quad \text{s} \\ T_{E,16\%} &= 0,02 \quad \text{s} . \end{aligned}$$

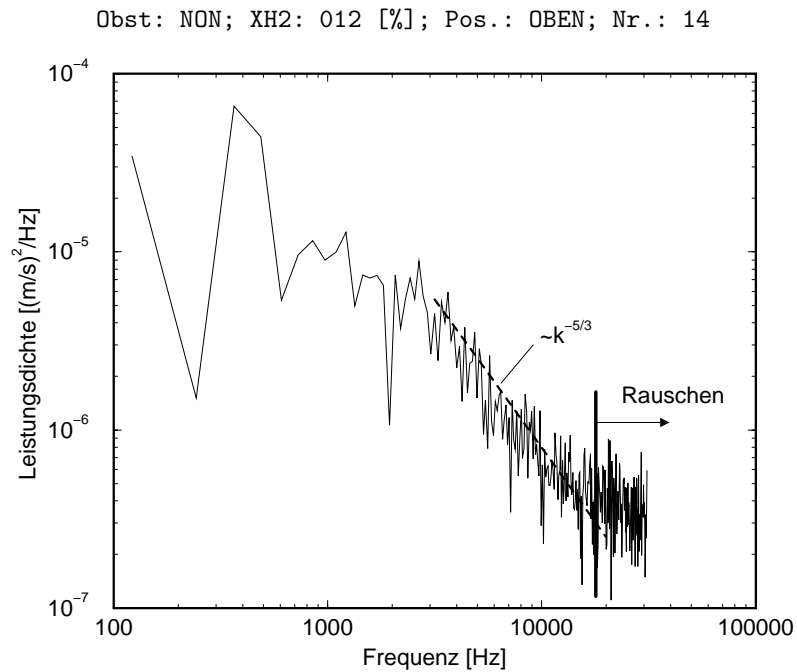
Die Lage und Größe der Auswerteintervalle, die sich auf diese Weise ergaben, ist in den Abbildungen 3.13 und 3.14 dargestellt.

Beurteilung der Signalqualität

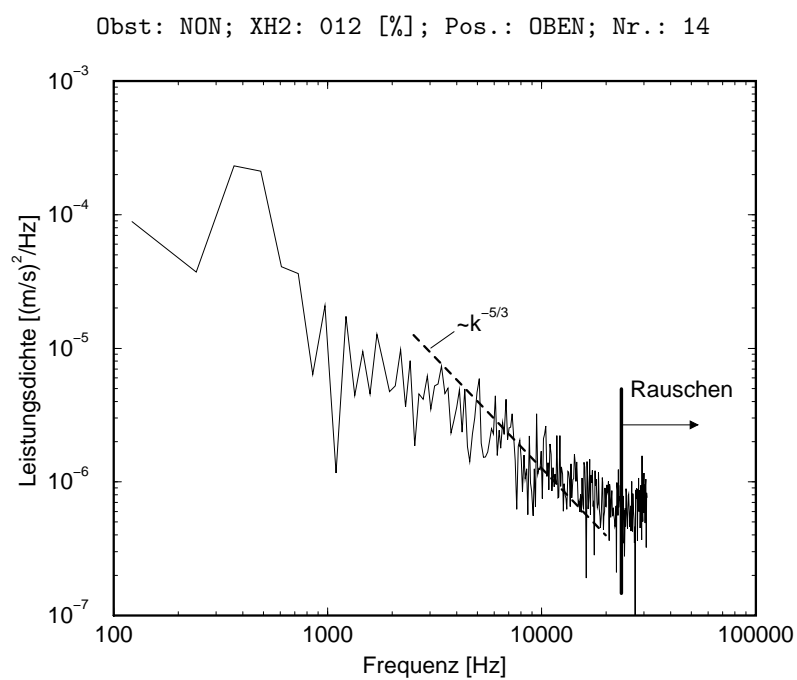
Zur Beurteilung der Signalqualität wurde durch Berechnung und Fouriertransformation der Autokorrelationsfunktion der Zeitreihe (vgl. Nobach [Nob98] und Müller et al. [MNT97]) das Leistungsdichtespektrum der Meßwerte im Auswerteintervall bestimmt. Unter der Annahme, daß Rauschen eine konstante Leistungsdichteverteilung im Spektrum aufweist, konnte das Signal-Rausch-Verhältnis abgeschätzt werden. Abbildung 3.15(a) zeigt für eine Messung das so erhaltene Leistungsdichtespektrum für die Zeitreihe der Quergeschwindigkeiten. Man erkennt, daß die Verteilung zunächst einen klaren Verlauf besitzt d.h. Signalanteile aufweist, dann jedoch in einen konstanten Verlauf, der Rauschen kennzeichnet, übergeht. Diese Informationen konnten genutzt werden, um die Grenzfrequenz für einen Tiefpaß-Filter zur Rauschunterdrückung zu bestimmen.

Als Vergleich ist in Abbildung 3.15(a) eine Linie mit einer Steigung von $-5/3$ eingezeichnet, die sich als theoretischer Verlauf für eine stationäre Strömung mit isotroper Turbulenz ergeben sollte (vgl. Tennekes und Lumley [TL83] bzw. Beauvais [Bea94]). Daß die Leistungsdichteverteilung im Mittel dieser Linie einigermaßen folgt, stellt für sich kein Qualitätskriterium dar. Das Leistungsdichtespektrum für die Zeitreihe der Längsgeschwindigkeiten (s. Abbildung 3.15(b)) folgt der Linie wesentlich schlechter. Dies deutet an, daß die Turbulenz nicht isotrop ist, sollte aufgrund des Charakters der Strömung jedoch nicht überbewertet werden.

⁵Im Falle der Messungen mit 16 Vol-% H₂ ergibt sich tatsächlich $T_{E,16\%} = 0,01$. Dieser Wert führte bei Messungen mit niedriger Datenrate zu zu geringeren Meßwertanzahlen für die statistische Absicherung.



(a) Quergeschwindigkeitskomponente



(b) Längsgeschwindigkeitskomponente

Abbildung 3.15: Leistungsdichtespektren des Geschwindigkeitssignales für *eine* Messung (Berechnung in Auswertintervall vor der Flamme)

Konditionierung der Meßdaten

Sofern wie oben beschrieben eine Grenzfrequenz für einzelne Datensätze festgelegt wurde, konnte zunächst der gesamte Datensatz zur Rauschunterdrückung digital Tiefpaß-gefiltert werden. Hierzu wurde der gleiche Filter verwendet, wie für die Bestimmung der Mittellinie (s. Abschnitt 3.2.1). Da das Signal-Rausch-Verhältnis in den meisten Fällen jedoch hoch genug war, wurde dies nur für einzelne Datensätze durchgeführt.

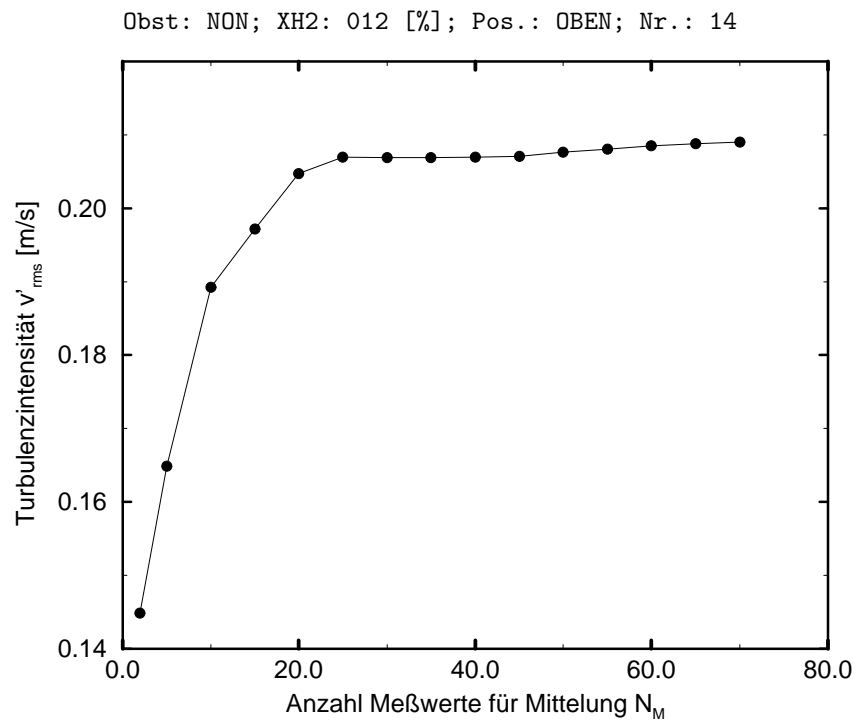
Die Meßdaten wurden dann, wie in Abschnitt 3.2.3 dargestellt, konditioniert, d.h. große Ausreißer wurden gelöscht und der Datensatz dann, wie oben beschrieben, geglättet. Dabei wurde nur zugelassen, daß durch die Konditionierung maximal 3% der Meßwerte im Auswertintervall verändert wurden. Die Konditionierung konnte so auch zur Beurteilung der Qualität der Meßwerte herangezogen werden. War es bei einzelnen Messungen nicht möglich, den angegebenen Wert zu erreichen, wurde die Messung insgesamt für die Auswertung verworfen.

Die Meßdaten wurden in dem durch T_E festgelegten Auswertintervall, wie ebenfalls in Abschnitt 3.2.3 angegeben, S+H-korrigiert und äquidistant linear interpoliert.

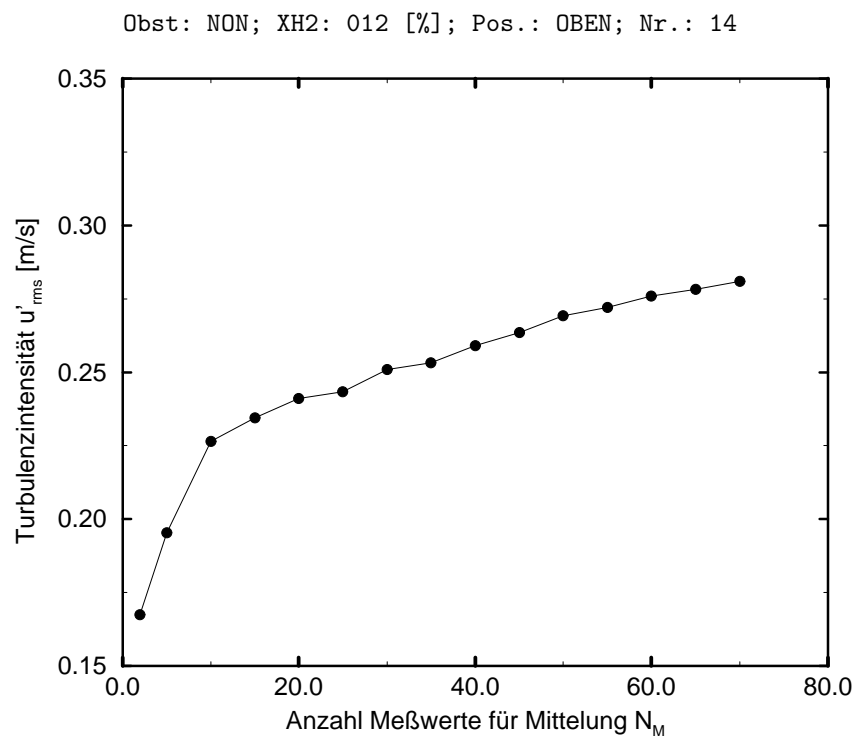
Berechnung der Mittellinie

Die Berechnungsvorschriften, die im letzten Abschnitt angegeben wurden, um die Bestimmung des geeigneten Mittelungsintervalles oder der korrekten Grenzfrequenz zu ermöglichen, stellen sehr komplexe Rechenoperationen insbesondere für große Datenmengen dar. Die anfallenden Meßdaten insgesamt mittels dieser Verfahren auszuwerten, war daher aufgrund der benötigten Rechenzeit nicht möglich. Abbildung 3.10 zeigt zudem, daß nicht immer ein eindeutiges Minimum gefunden wurde und die Mittellinien z.T. manuell auf ihre Plausibilität zu überprüfen waren. Für die Auswertung der Strömungsmessungen wurde das Suchverfahren daher, wie im folgenden beschrieben, jeweils nur für wenige Messungen verwendet, um ein geeignetes Intervall zu ermitteln.

In Abbildung 3.16(a) ist der Verlauf der berechneten Schwankungsgeschwindigkeit in Querrichtung v'_{rms} in Abhängigkeit von der Anzahl der



(a) Querrichtung



(b) Längsrichtung

Abbildung 3.16: Turbulenzintensitäten in Abhängigkeit vom Mittelungsintervall

Punkte des Mittelungsintervalls N_M dargestellt. Man erkennt, daß sich die berechnete Turbulenzintensität ab der durch das Suchverfahren gefundenen Anzahl $N_M = 20$ nicht mehr stark ändert. Für die praktische Auswertung wurde daher so verfahren, daß an wenigen Datensätzen einer Meßkonfiguration mittels der im letzten Abschnitt dargestellten Verfahren geeignete Mittelungsintervalle und Grenzfrequenzen festgelegt wurden, die dann für die Auswertung der restlichen Datensätze dieser Konfiguration beibehalten wurden.

Für die Turbulenzintensität in Längsrichtung des Rohres (Abbildung 3.16(b)) ergab sich ab der Stelle $N_M = 20$ ein steilerer Anstieg der Kurve, jedoch sind hier deutliche Fehler (bis zu 15%) möglich. Der Grund hierfür ist die in Abbildung 3.11(b) oben zu erkennende überlagerte Oberschwingung der Längsgeschwindigkeit. Zu lange Mittelungsintervalle führen hier dazu, daß die Mittellinie dieser Schwingung nicht mehr folgt und dadurch zu große rms-Werte berechnet werden.

3.2.3 Konditionierung der Meßdaten

Ausreißer

Ähnlich, wie von Lorenz und Prescher [LP90] beschrieben⁶, traten auch bei den durchgeführten Messungen einzelne Meßwerte auf, die ausgewertete Geschwindigkeitskomponenten ergaben, die außerhalb jeglicher durch die Physik gerechtfertigten Grenzen lagen. In Abbildung 3.17 ist ein Beispiel für eine solche Messung dargestellt.

Obgleich solche Ausreißer die Berechnung der Turbulenzinformation nicht sehr beeinflussen, wurden sie vor der Weiterverarbeitung der Daten eliminiert. Aus diesem Grund wurde ein Verfahren ähnlich dem von Lorenz und Prescher beschriebenen entwickelt, das in der Lage ist, solche Meßwerte zu erkennen und zu behandeln. Zunächst bestand die Möglichkeit, sehr große Ausreißer durch das Setzen einer oberen und unteren Schranke zu löschen. Das weitere Vorgehen beruhte auf der Berechnung eines laufenden, zentralen Mittelwertes sowie einer laufenden, zentralen Standardabweichung über eine definierte Anzahl von Meßwerten. Aus letzterer kann,

⁶Diese Autoren benutzten das gleiche LDA-System und die gleichen Streuteilchen.

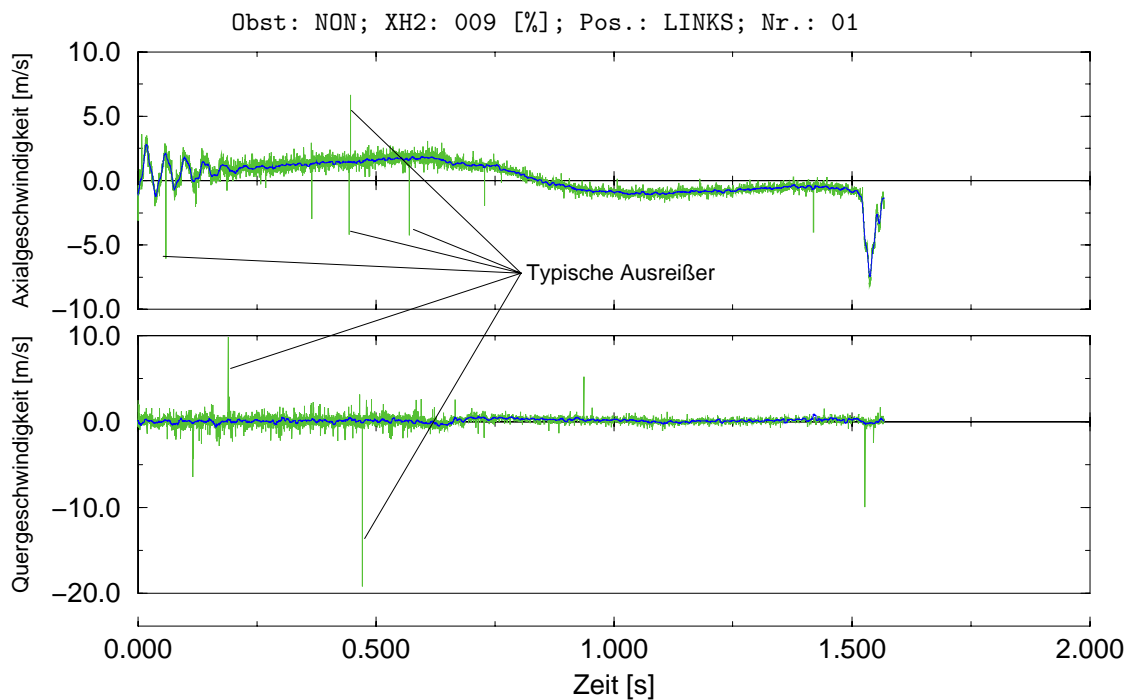


Abbildung 3.17: Zeitverlauf mit offensichtlichen Ausreißern

wie in Abbildung 3.18 angedeutet, ein mit einem Faktor skaliertes Standardabweichungsband um den laufenden Mittelwert gebildet werden. Liegt ein Meßwert außerhalb des Standardabweichungsbandes wird dieser als sehr unwahrscheinlich angesehen und daher verworfen. *Löschen* respektive

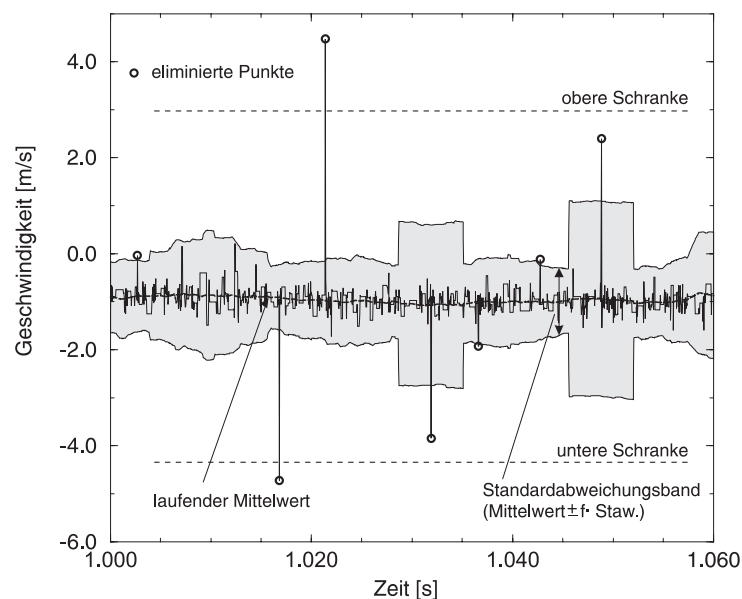


Abbildung 3.18: Behandlung von Meßwert-Ausreißern

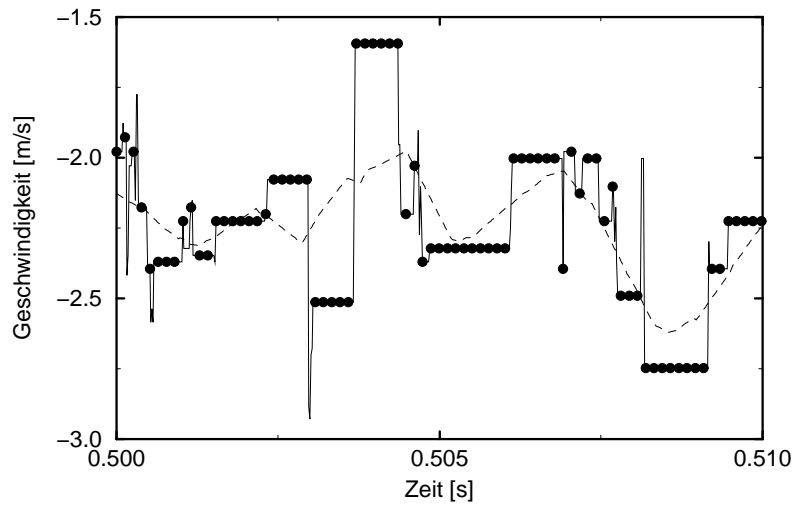


Abbildung 3.19: Meßwertefolge im *Sample and Hold* Modus

Verwerfen bedeutet dabei im Zusammenhang mit der *Sample and Hold*-Arbeitsweise der Counter, daß die entsprechenden Werte auf den Wert ihres Vorgängers zurückgesetzt werden.

Sample and Hold

Die äquidistante Abtastung der LDA-Counter durch die Datenerfassungskarte führte durch das *Sample and Hold*-Verfahren dazu, daß sich, wenn kein neuer Wert erfaßt wurde, im Zeitverlauf ein *Plateau* ausbildete (vgl.

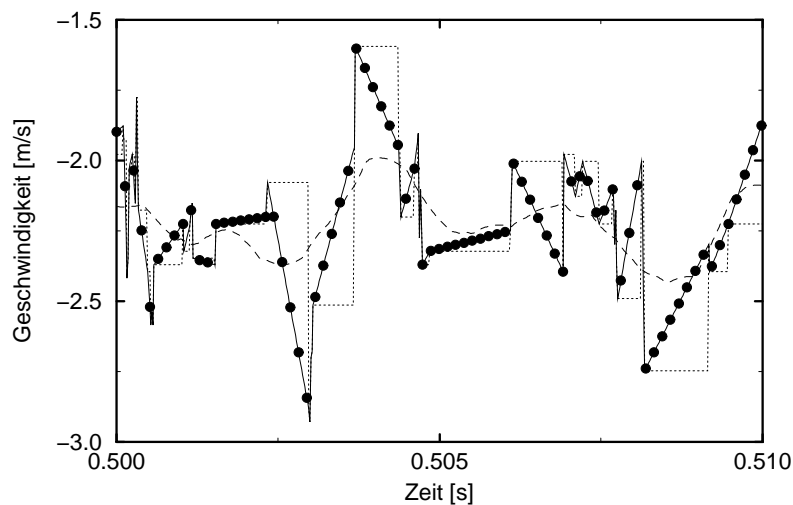


Abbildung 3.20: Reduzierte Meßwertefolge mit interpolierten Zwischenwerten

Abbildung 3.19). Da keine *neue* Information von den Countern erhalten wurde, konnten die Werte des Plateaus nicht für die Datenauswertungen verwendet werden und wurden eliminiert. Die Meßwerte eines Plateaus wurden daher bis auf den jeweils ersten verworfen und zwischen den sich so ergebenden, ungleichmäßig verteilten Meßwerten linear äquidistant interpoliert (s. Abbildung 3.20). Der laufende Mittelwert, der für die Berechnung der Turbulenzintensität notwendig war, wurde genauso behandelt, d.h. der laufende Mittelwert wurde vor der S+H-Eliminierung der Plateauwerte bestimmt und zusammen mit diesen nach derselben Vorschrift relinearisiert.

3.3 Ergebnisse

In den folgenden Abschnitten werden die Ergebnisse der lokalen Strömungsmessungen mittels LDA an der MuSCET-Anlage zusammenfassend dargestellt. In der vorliegenden Arbeit wurden die Zeitverläufe der Strömungsgeschwindigkeit an den einzelnen Meßpunkten sowie der Turbulenzzustand der Strömung unmittelbar vor der Flammenfront betrachtet. Zudem wurden Vergleiche mit den von der MuSCET-Meßtechnik ermittelten integralen Informationen angestellt, um Korrelationen zwischen Flammen- und Strömungsgeschwindigkeit bzw. Turbulenzintensität zu ermitteln.

3.3.1 Zeitverläufe der Strömungsgeschwindigkeit

Bestimmte Ereignisse während des Verbrennungsablaufes, wie das Platzen der Berstmembran, die Ankunft der Flamme oder das Beschlagen der Sichtfenster, waren, wie Abbildung 3.21 verdeutlicht, in den Zeitverläufen der Strömungsgeschwindigkeit wiederzuerkennen.

Die Kurven für die Axial- und Quergeschwindigkeiten wurden für die Darstellung grundsätzlich auf den maximalen Wertebereich skaliert und nicht wie in den Abbildungen 3.13 oder 3.14 gleich. Da zudem die Zeitbasis Schwankungen aufwies, die durch die Triggerung des LDA-Messungsbeginns durch die MuSCET-Datenaufnahme bedingt waren (vgl. die Abbildungen 3.22(a) und 3.22(b)), wurde die Zeitbasis so transformiert,

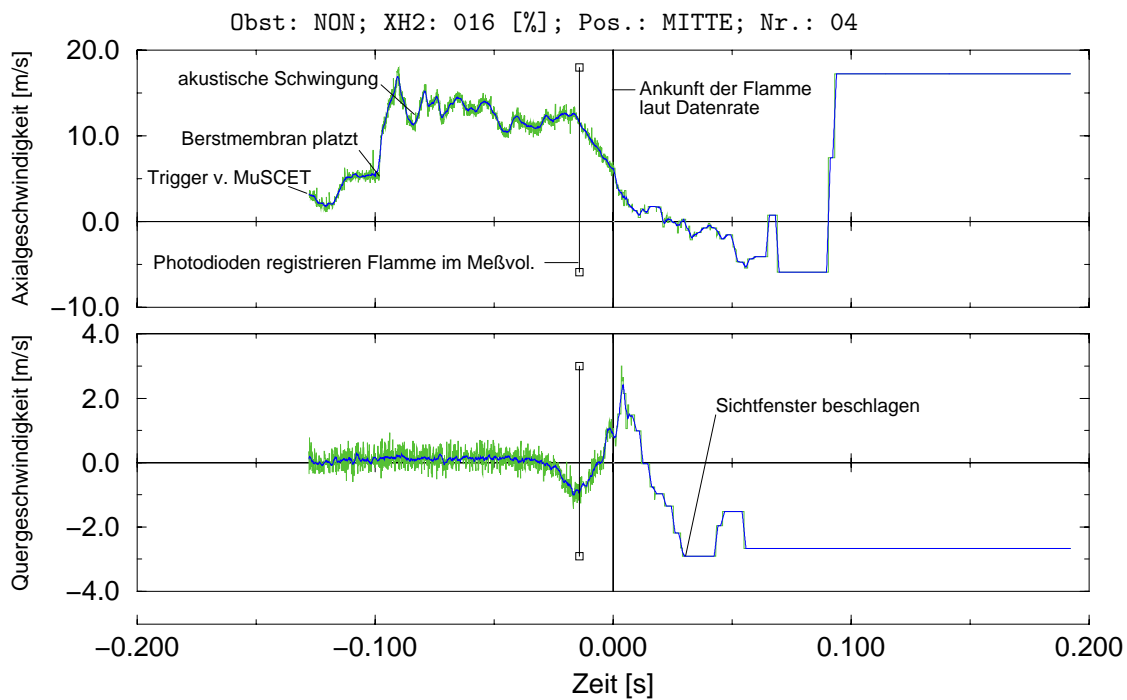
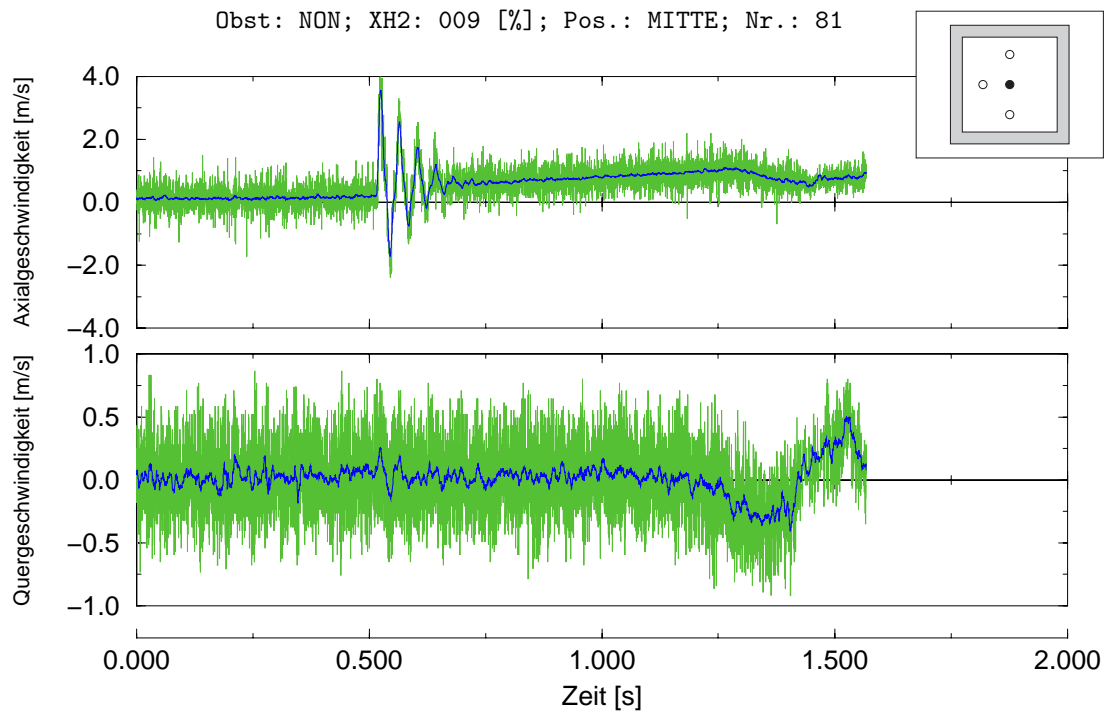


Abbildung 3.21: Zuordnung von Ereignissen zum zeitlichen Verlauf der Strömungsgeschwindigkeit

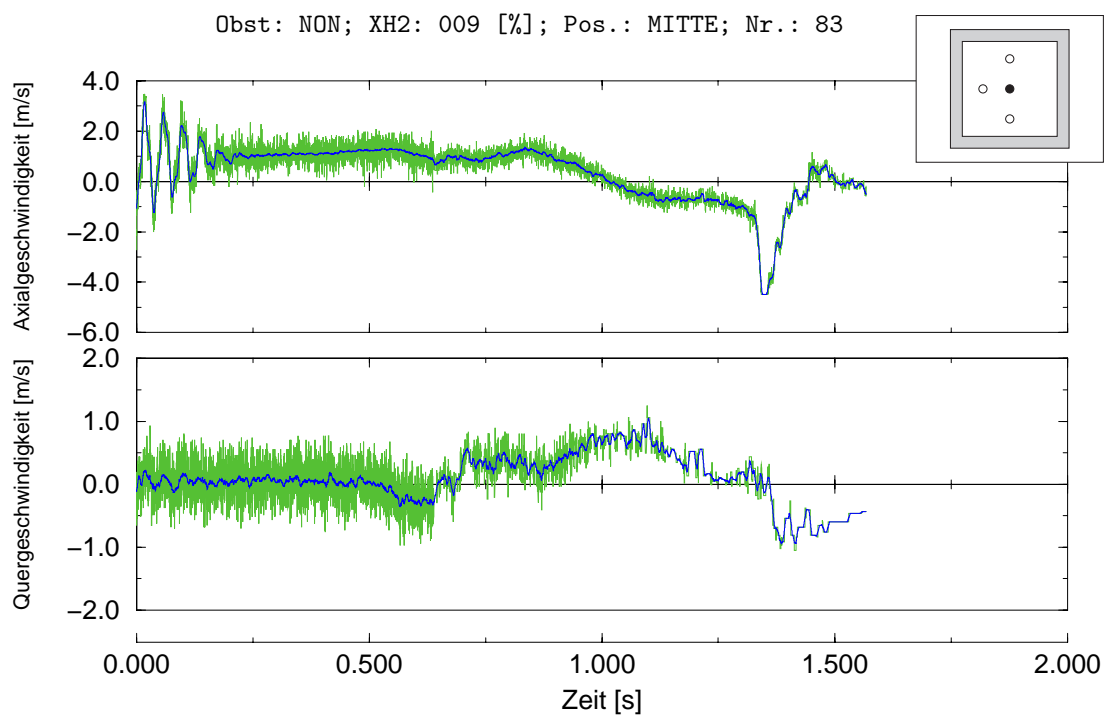
daß der Nullpunkt bei allen Darstellungen mit dem Eintreffen der Flammenfront im Meßvolumen übereinstimmte (s. z.B. Abbildung 3.21).

Die Piktogramme in den rechten oberen Ecken der Abbildungen verdeutlichen jeweils die relative Lage der einzelnen Meßpunkte zueinander und im Verbrennungsrohr. Der jeweils aktive Meßpunkt ist dabei durch einen schwarzen Punkt (●) die inaktiven durch weiße Punkte (○) gekennzeichnet.

Die in Abbildung 3.21 deutlich erkennbare Abweichung zwischen dem Zeitpunkt, zu dem die Flamme nach der Auswertung der Datenrate (wie in Abschnitt 3.2.2 beschrieben) tatsächlich ankam, und dem Zeitpunkt, zu dem die Photodioden die Flamme im Meßvolumen registrierten, hat zwei Ursachen. Zum einen war das Hinderniselement des Explosionsrohres nicht mit Photodioden bestückt, so daß der Flammenfortschritt über dieses Element aus den Signalen der letzten Photodiode davor und der ersten Photodiode danach linear interpoliert werden mußte, wodurch bei nichtlinearen Verläufen der Flammengeschwindigkeit Fehler entstanden. Zum anderen registrierten die Photodioden immer den vordersten Teil der Flamme. Durch asymmetrische Flammen, die infolge des Auftriebs bei 9 und 12



(a) früher Meßbeginn



(b) später Meßbeginn

Abbildung 3.22: Vergleich zweier Zeitverläufe der Strömungsgeschwindigkeit hinsichtlich Meßbeginn

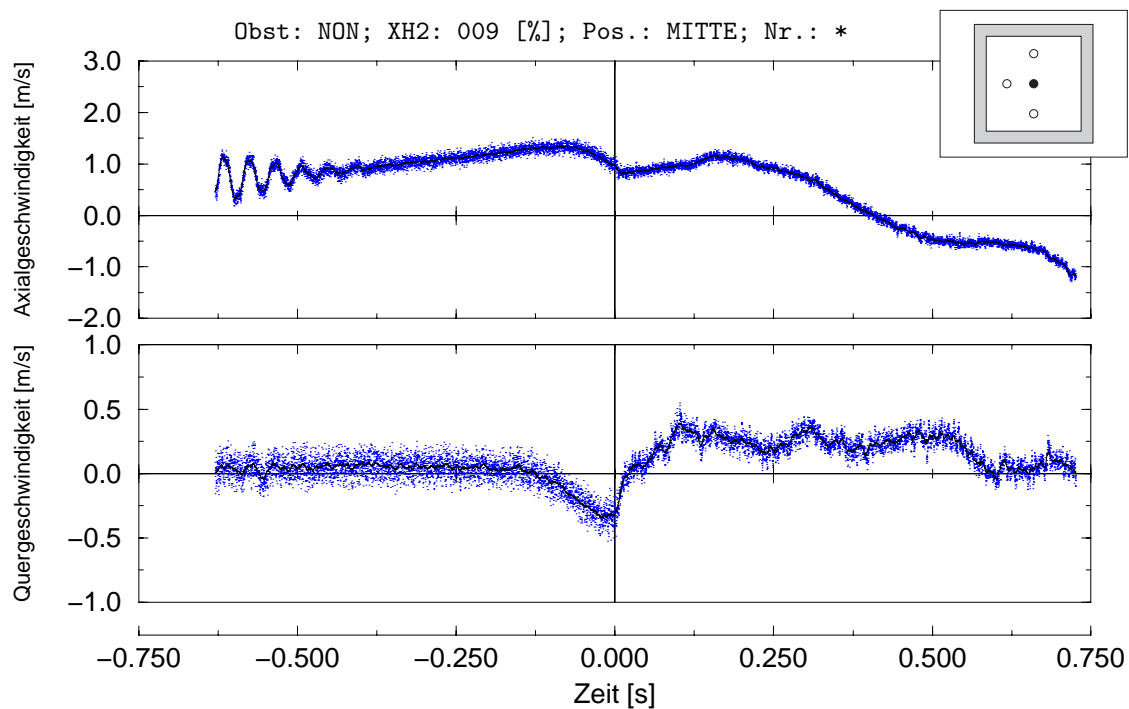
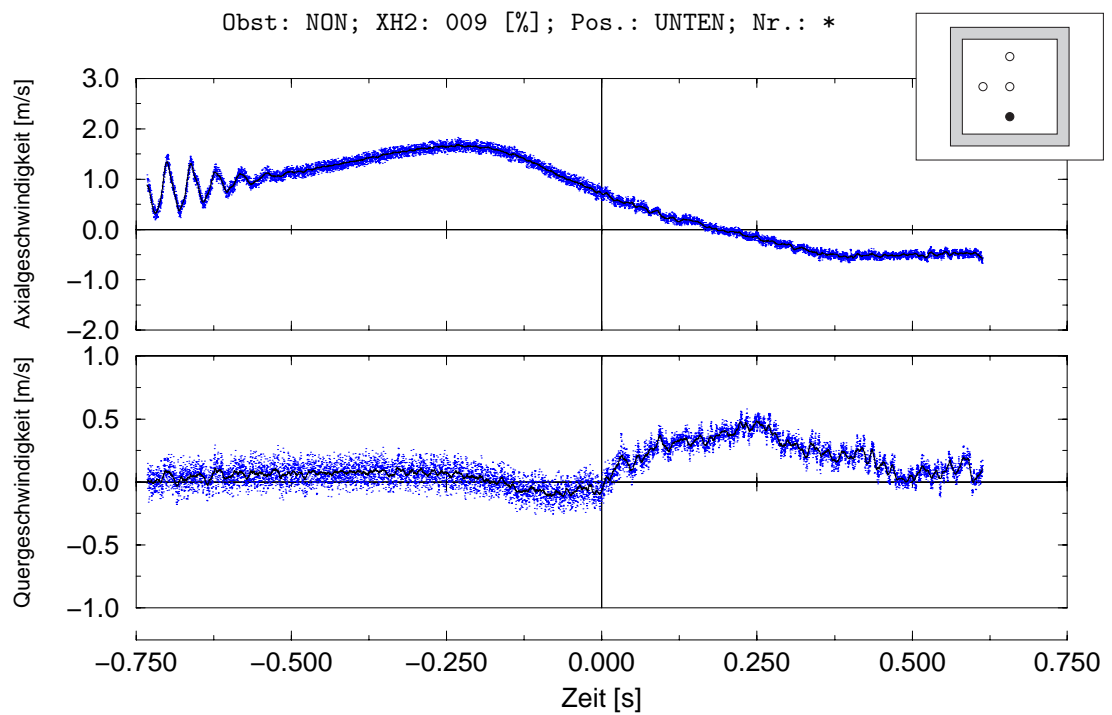


Abbildung 3.23: Zeitlicher (Punkte) und geglätteter Verlauf (Linie) des Ensemble-Mittelwertes der Strömungsgeschwindigkeit; leeres Rohr; 9 Vol.-% H_2 ; Meßpunkt Mitte

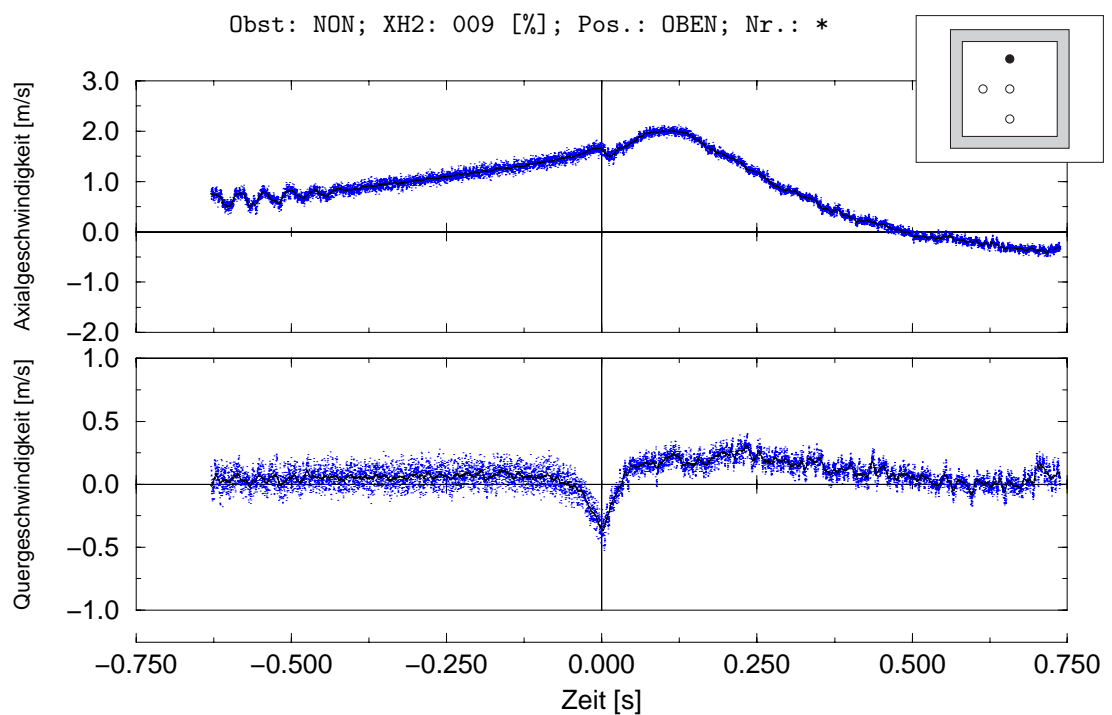
Vol.-% H_2 vorlagen, oder auch durch lokale Effekte, wurde die Flamme von den Photodioden daher integral bereits erfaßt während sie lokal das Meßvolumen noch nicht erreicht hatte.

Zeitverläufe ohne Hindernis

Ein Vergleich der Abbildungen 3.22(a) und 3.22(b) zeigt, daß die einzelnen Zeitverläufe zwar ähnliche Details aufwiesen, jedoch nicht in allen Einzelheiten übereinstimmten. Um den grundsätzlichen zeitlichen Verlauf bewerten zu können, wurde daher der Ensemble-Mittelwert für das größte gemeinsame Zeitfenster jeder Meßkonfiguration gebildet. So ist in Abbildung 3.23 der zeitliche Verlauf des Ensemble-Mittelwertes für die mittlere Meßposition im leeren Versuchsrohr bei 9 Vol.-% H_2 dargestellt. Aufgrund der doch geringen Anzahl von Versuchswiederholungen wies dessen Verlauf zwar noch deutliche Schwankungen auf, die Glättung durch einen laufenden Mittelwert ermöglichte jedoch die Bestimmung eines *mittleren zeitlichen Verlaufs* aller Messungen einer Konfiguration. In den folgenden



(a) Meßpunkt Unten



(b) Meßpunkt Oben

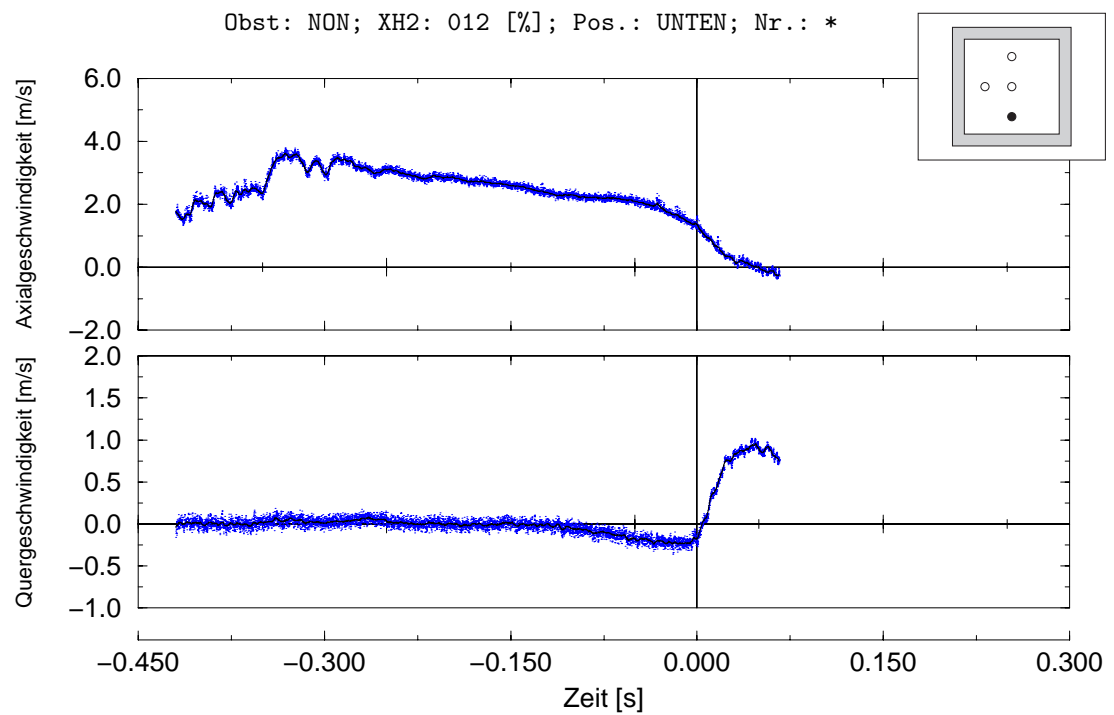
Abbildung 3.24: Zeitverläufe des Ensemble-Mittelwertes der Strömungsgeschwindigkeit; leeres Rohr; 9 Vol.-% H_2

Abbildungen ist der Verlauf des Ensemble-Mittelwertes jeweils durch einzelne Punkte, die nicht verbunden sind, dargestellt, der geglättete mittlere Verlauf ist als Linie eingezeichnet.

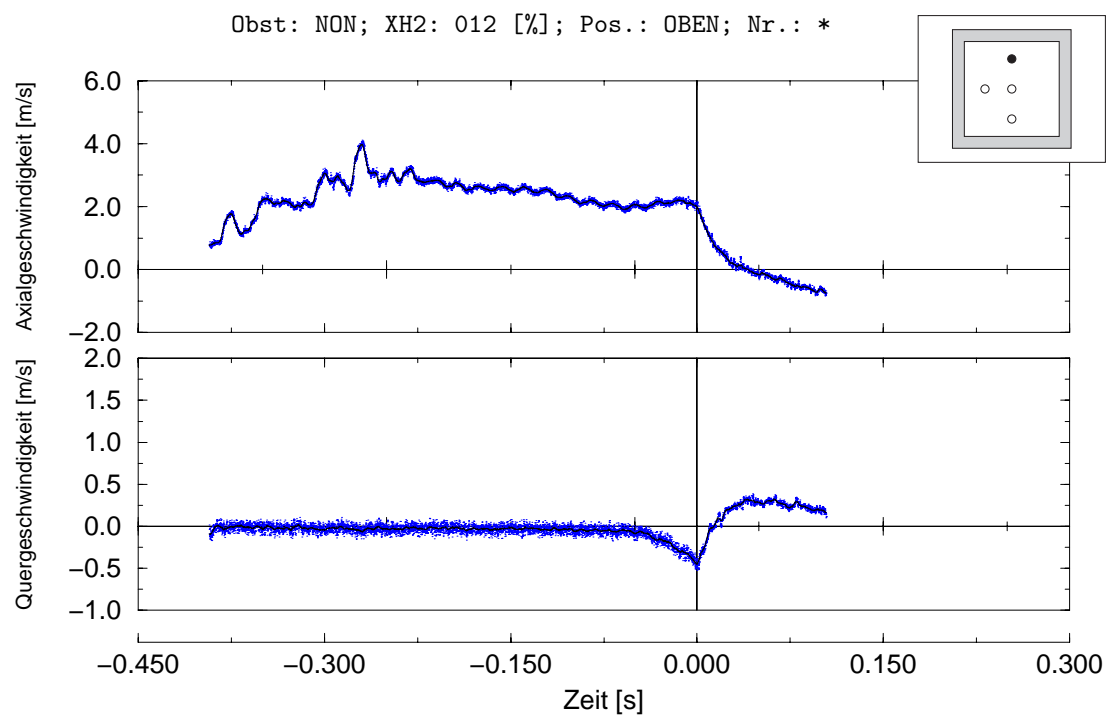
Bei 9 Vol.-% H_2 wurde in axialer Richtung eine maximale Geschwindigkeit von ca. 2 m/s in der oberen Meßposition erreicht (vgl. Abbildung 3.24(b)). Das Maximum im zeitlichen Verlauf der Axialgeschwindigkeit stimmte gut mit dem Zeitpunkt überein, an dem die Photodioden im Mittel die Flamme registrierten. Hier wurden bis zu 1,6 m/s in axialer Richtung gemessen.

Der Vergleich der Geschwindigkeitsverläufe in den unteren, mittleren und oberen Meßpunkten (Abbildungen 3.24(a), 3.23 und 3.24(b)) zeigt einen zeitlichen Versatz im Maximum des Verlaufs der Axialgeschwindigkeit kurz vor Ankunft der Flamme und daß sich mit etwa dem gleichen zeitlichen Versatz an allen Meßpunkten ein Rückströmgebiet einstellte. Vergleicht man Abbildungen 3.24(a) und 3.23, erkennt man zudem, daß im Gegensatz zu der mittleren Meßposition der untere Bereich der Versuchsstrecke bei 9 Vol.-% H_2 kaum von der Flamme direkt beeinflußt wurde. Der zeitliche Verlauf der Strömungsgeschwindigkeit war über das Eintreffen der Flamme am Meßvolumen hinweg sowohl in Axial- wie auch in Querrichtung nahezu stetig. Lediglich der geglättete Verlauf erscheint nach Passieren der Flamme etwas unruhiger. In der Tat stimmt dieses Verhalten mit den Ergebnissen von Ardey [Ard98] überein, der bei Schlierenaufnahmen der Verbrennungströmung beobachtete, daß die Flamme bis zu Konzentrationen von 14 Vol.-% H_2 durch den Auftrieb einen Anstellwinkel von bis zu ca. 20° gegenüber der Ausbreitungsrichtung aufweist und den Kanalboden bei 9 Vol.-% H_2 erst im hinteren Bereich der Versuchsstrecke – teilweise sogar überhaupt nicht – erreicht.

Aus den Abbildungen 3.23 und 3.24 ist zudem von der unteren zur oberen Meßposition eine zunehmende Tendenz zum weiteren Beschleunigen der Strömung nach dem Passieren der Flamme zu erkennen. Vermutlich hängt dies ebenfalls damit zusammen, daß die Flamme bei 9 Vol.-% H_2 nicht den gesamten Querschnitt der Versuchsstrecke überdeckte. Bei den Versuchen mit 12 und 16 Vol.-% H_2 , bei denen aus den Schlierenaufnahmen von Ardey [Ard98] (s. Abbildung 3.26) zu erkennen war, daß die Flamme die Versuchsstrecke komplett ausfüllte, war dieses Verhalten nicht mehr feststellbar (vgl. Abbildungen 3.25(a) und 3.25(b)). Die axiale Geschwin-



(a) Meßpunkt Unten



(b) Meßpunkt Oben

Abbildung 3.25: Zeitverläufe des Ensemble-Mittelwertes der Strömungsgeschwindigkeit; leeres Rohr; 12 Vol.-% H₂

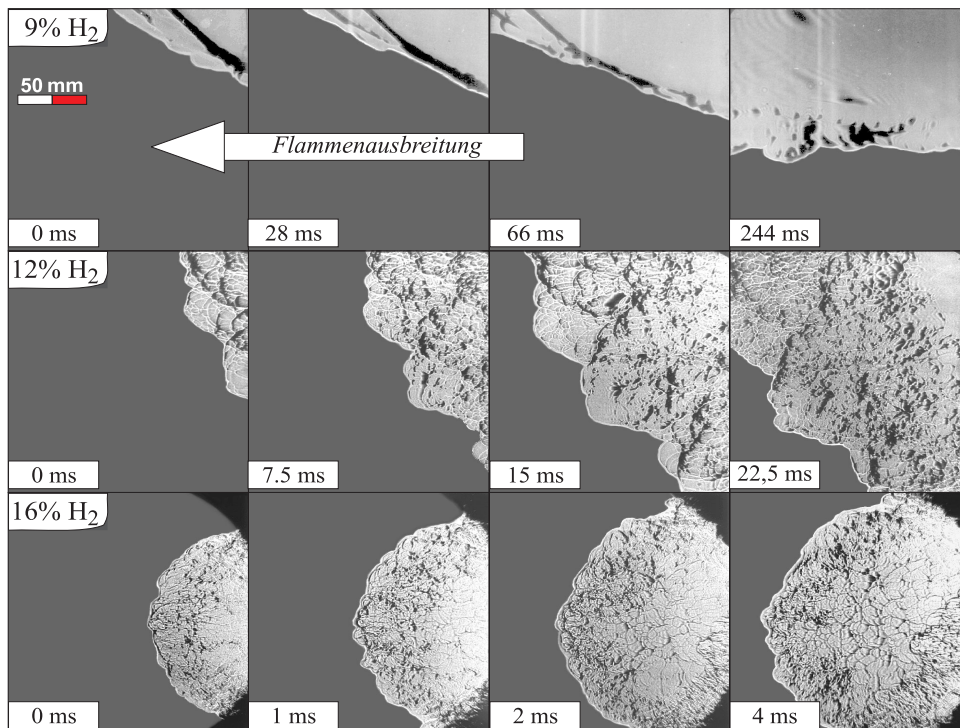
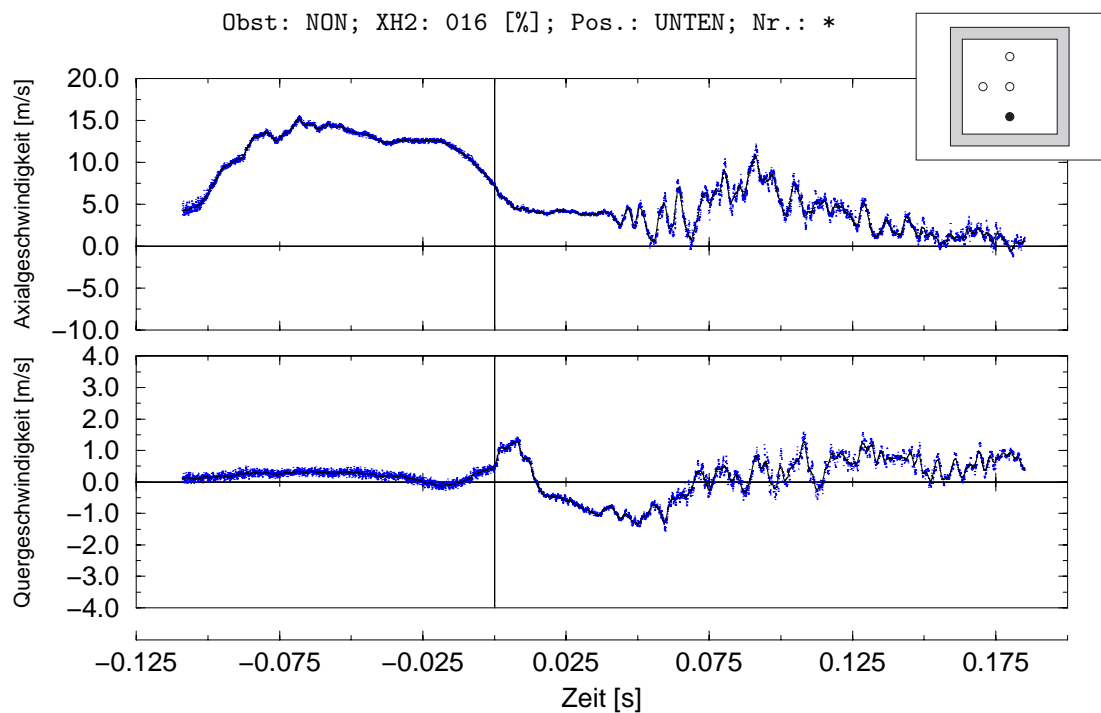


Abbildung 3.26: Schlierenaufnahmen der Flammenausbreitung in der MuSCET-Anlage ohne Hindernis (aus Ardey [Ard98])

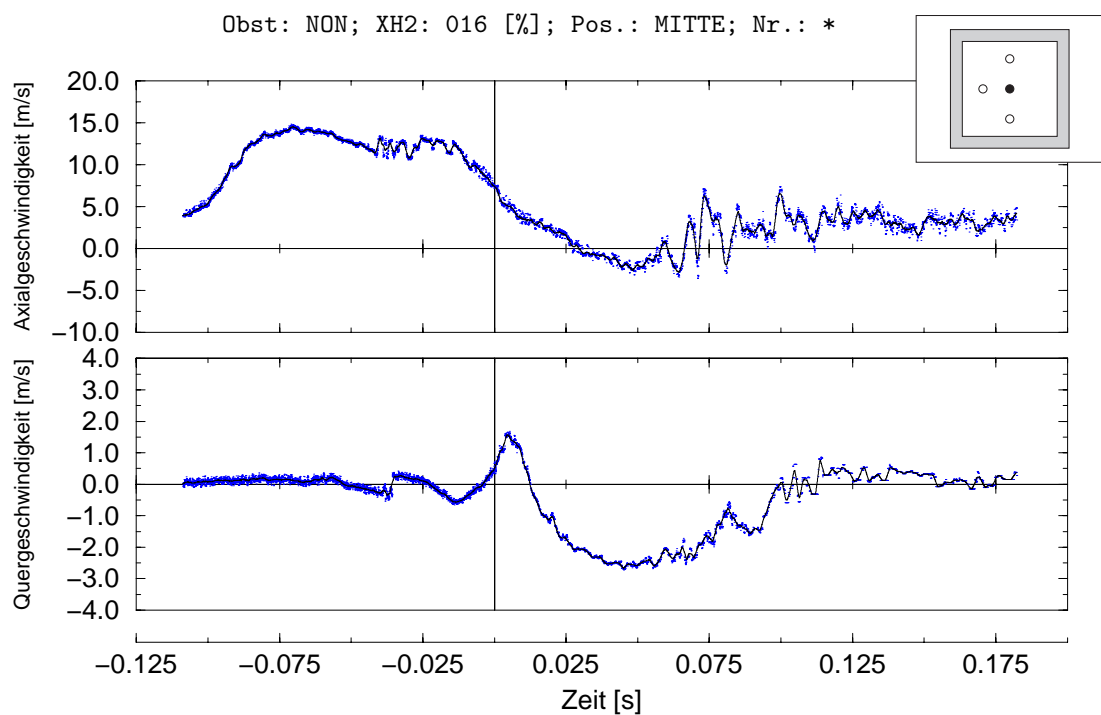
digkeitskomponente zeigte bei diesen H₂-Konzentrationen vielmehr eine deutliche Abnahme bis hin zu einer aufwärts gerichteten Rückströmung unmittelbar nach der Flammenfront.

Bei 12 Vol.-% H₂ wurden vor der Flammenfront axiale Geschwindigkeitskomponenten von bis zu 2,5 m/s registriert (obere Meßposition, Abbildung 3.25(b)). Bei allen Meßpositionen außer der unteren war zudem eine axiale Oberschwingung zu erkennen, die trotz der Dämpfungselemente im Verbindungsrohr und im Expansionsbehälter bis zum Eintreffen der Flamme nicht abklang. Da diese Schwingung in der unteren Meßposition nicht registriert wurde, kann angenommen werden, daß sie nicht durch eine akustische Schwingung, die das gesamte Volumen in der Versuchsstrecke beeinflusst hätte, hervorgerufen wurde, sondern durch eine andere Strömungsinstabilität, die sich im Nachlauf eines der Meßaufnehmer im oberen Bereich der Versuchsstrecke gebildet haben könnte, verursacht war.

Als maximale axiale Geschwindigkeitskomponente vor der Flammenfront wurden bei 16 Vol.-% H₂ an allen Meßpositionen ca. 12,5 m/s gemessen. Die zeitlichen Verläufe der Ensemble-Mittelwerte der Komponenten der

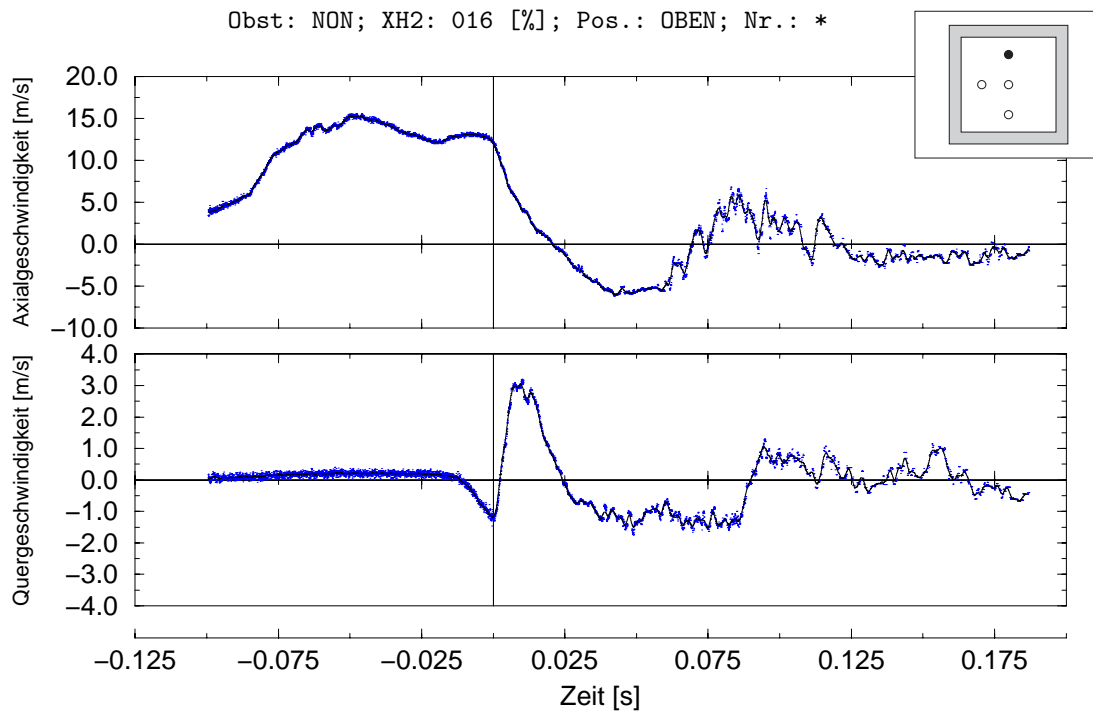


(a) Meßpunkt Unten

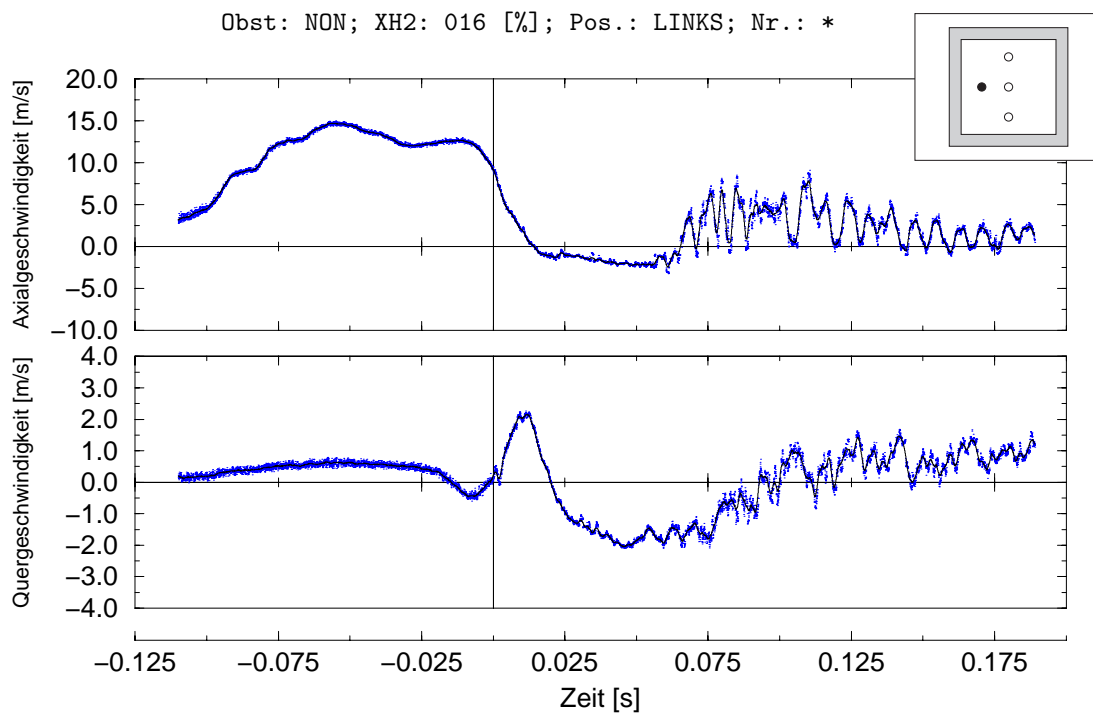


(b) Meßpunkt Mitte

Abbildung 3.27: Zeitverläufe des Ensemble-Mittelwertes der Strömungsgeschwindigkeit; leeres Rohr; 16 Vol.-% H₂



(a) Meßpunkt Oben



(b) Meßpunkt Links

Abbildung 3.28: Zeitverläufe des Ensemble-Mittelwertes der Strömungsgeschwindigkeit; leeres Rohr; 16 Vol.-% H_2

Strömungsgeschwindigkeit zeigten auch sonst vor dem Eintreffen der Flammenfront einen weitgehend ähnlichen Verlauf (Abbildungen 3.27 und 3.28). Jedoch konnte, obwohl die Schlierenaufnahmen eine symmetrische Flammenfront erkennen ließen, in den Zeitverläufen eine gewisse Asymmetrie festgestellt werden. So zeigt sich wiederum ein zeitlicher Versatz in den Punkten an denen der Verlauf der Axialgeschwindigkeit nach unten abknickt. Während, wie in Abbildung 3.28(a) zu erkennen, an der oberen Meßposition erst mit dem Eintreffen der Flamme eine Geschwindigkeitsabnahme in axialer Richtung gemessen wurde, schienen die übrigen Meßstellen die Flamme bereits vor deren Eintreffen zu registrieren.

Der zeitliche Verlauf der Quergeschwindigkeitskomponente zeigte zwar im Gegensatz dazu ein symmetrisches Verhalten, unterschied sich jedoch in einem grundsätzlichen Punkt von denen der niedrigeren H_2 -Konzentrationen. In der oberen Meßposition wurde eine abwärts gerichtete Strömung registriert, während sich allen anderen Punkten sich eine, teils zwar nur geringfügige (Abbildung 3.28(b)), Strömung nach oben ergab. Faßt man den Bereich unterhalb der symmetrischen Flammenwölbung als Flamme mit positivem Anstellwinkel auf, so hätte man hier wie vorher bei 9 und 12 Vol.-% H_2 auch negative, darüber, in der oberen Meßposition, dagegen positive Geschwindigkeitsanteile erwartet. Das beobachtete Verhalten deutet an, daß sich das Strömungsfeld vor der symmetrischen Flamme bei 16 Vol.-% H_2 grundsätzlich von dem bei 9 und 12 Vol.-% H_2 unterschied. Ein denkbares Modell hierfür, das auch das uneinheitliche Verhalten der Strömung

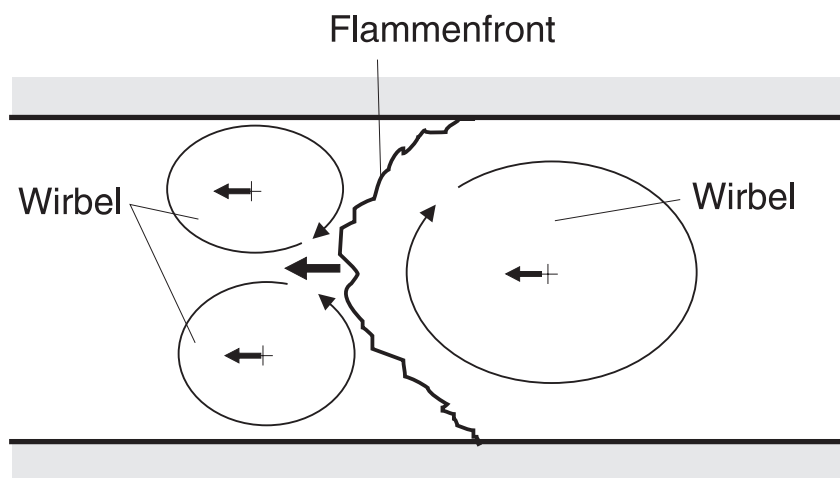


Abbildung 3.29: Modell für Strömungsfeld bei symmetrischer Flammenfront

in der mittleren Meßposition (Abbildung 3.27(b)) kurz vor Eintreffen der Flamme erklären würde, stellen, wie in Abbildung 3.29 angedeutet, zwei konkurrierende Wirbel im oberen und unteren Bereich vor der Flamme dar.

Im Bereich hinter der Flamme zeigt sich ebenfalls ein bemerkenswertes Verhalten. Während in der unteren Meßposition keine Rückströmung zu erkennen ist, nimmt die Tendenz zur Rückströmung zur oberen Meßposition hin zu. Möglicherweise ist dies auf einen durch den Auftrieb induzierten Wirbel, der, wie in Abbildung 3.29 dargestellt, hinter der Flammenfront herläuft, zurückzuführen.

Zeitverläufe mit Hindernissen

Die Zeitverläufe für die Meßsituation ohne Hindernisse wurde oben ausführlich dargestellt, da dies zum Verständnis des grundsätzlichen Strömungsverlaufes im Zusammenhang mit der Verbrennung beiträgt. Im folgenden werden für alle Meßkonfigurationen mit Hindernissen Details der zeitlichen Verläufe der einzelnen Hindernisse⁷ betrachtet. Die beobachteten Strömungsgeschwindigkeiten sind am Ende des Abschnittes zusammenfassend dargestellt.

Hindernis R2: Bei den beiden Hindernissen R2 und R3 wurde, im Gegensatz zu den anderen Hindernissen, auch jeweils ein Meßpunkt vor dem Hindernis (Bezeichnung: V) vermessen. Die Verläufe an diesen Punkten zeigten jedoch, bis auf ein niedrigeres Niveau der Axialkomponente aufgrund der Nähe zum Staupunkt, keine grundsätzlichen Unterschiede zu den entsprechenden Meßkonfigurationen ohne Hindernis, so daß bei den übrigen Hindernissen nur Meßpunkte im Einflußbereich des Hindernisses oder in dessen Nachlauf betrachtet wurden.

Der Meßpunkt H1 lag für alle H₂-Konzentrationen im Rezirkulationsgebiet hinter dem Rohr R2, erkennbar durch negative axiale Geschwindigkeitsanteile bereits vor Eintreffen der Flamme. Der in Abbildung 3.31(a) zu beobachtende, leichte zeitliche Versatz, mit dem die Querkomponente vor der Axialkomponente der Geschwindigkeit auf die Flamme reagierte, deutet an, daß die Flamme das Rezirkulationsgebiet zunächst passierte und

⁷Zur Unterscheidung werden im folgenden die beiden Hindernisse R2 und R3 als Rohre, H1 als Zylinder, G2 als Gitter und T1 als Türhindernis bezeichnet (vgl. Abbildung 3.4)

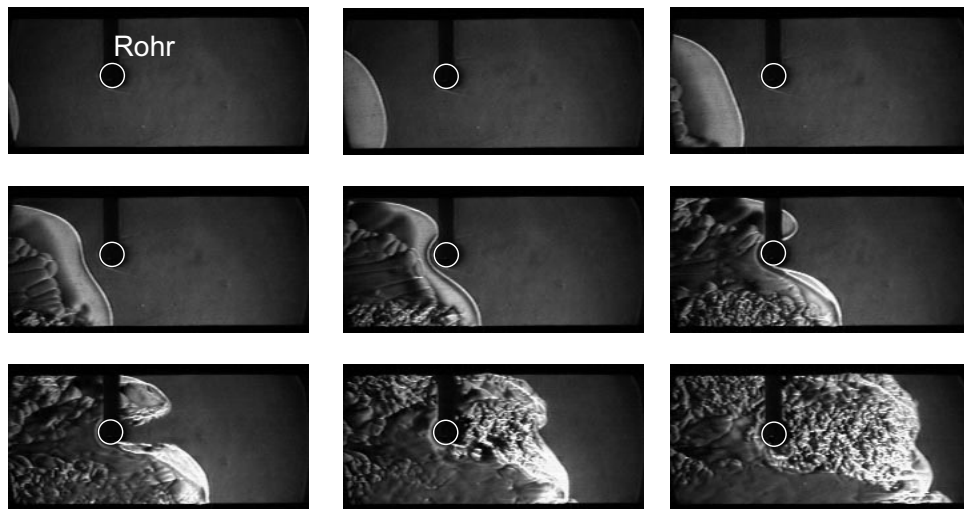


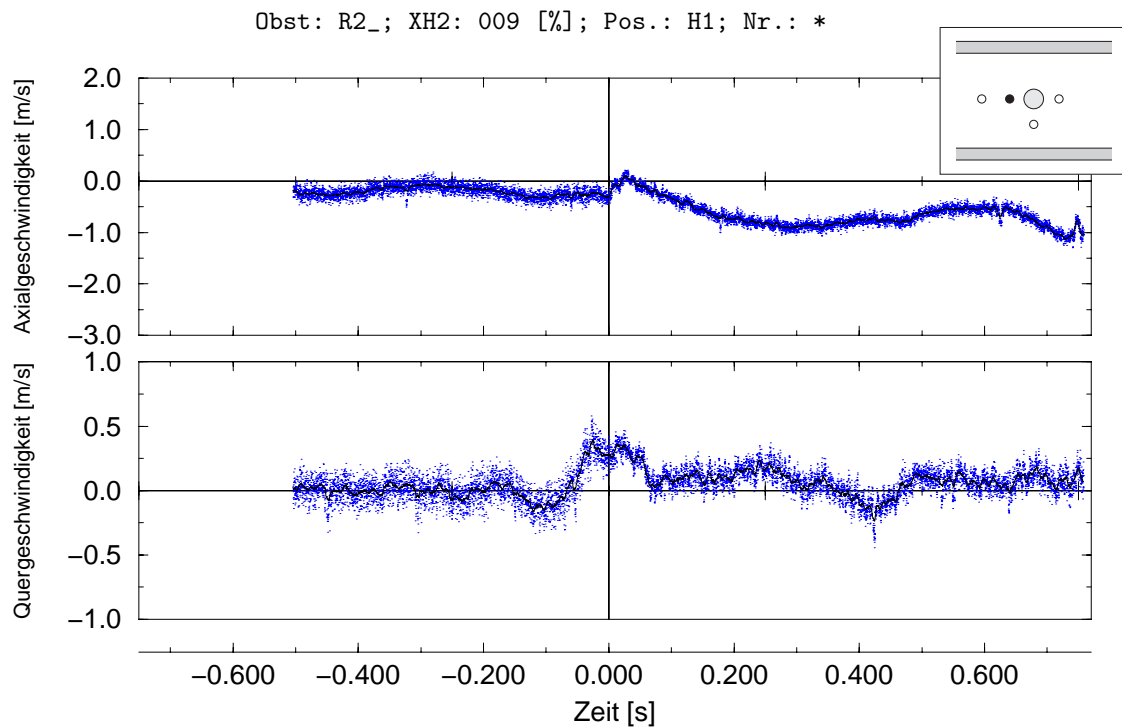
Abbildung 3.30: Schlierenaufnahmen der Ausbreitung einer turbulenten Flamme um ein Rohrhindernis in einer kleinskaligen zylindrischen Versuchsanlage mit 72 mm Innendurchmesser; 8 Vol.-% H_2 (aus Jordan [Jor99])

dieses dann von hinten kommend – gewissermaßen mit der Rezirkulation – erfaßte. Jordan [Jor99] beobachtete bei Schlierenaufnahmen einer Verbrennungsströmung in einer Versuchsanlage mit einer Rohrbrennkammer von 72 mm Innendurchmesser ein ähnliches Verhalten (s. Abbildung 3.30).

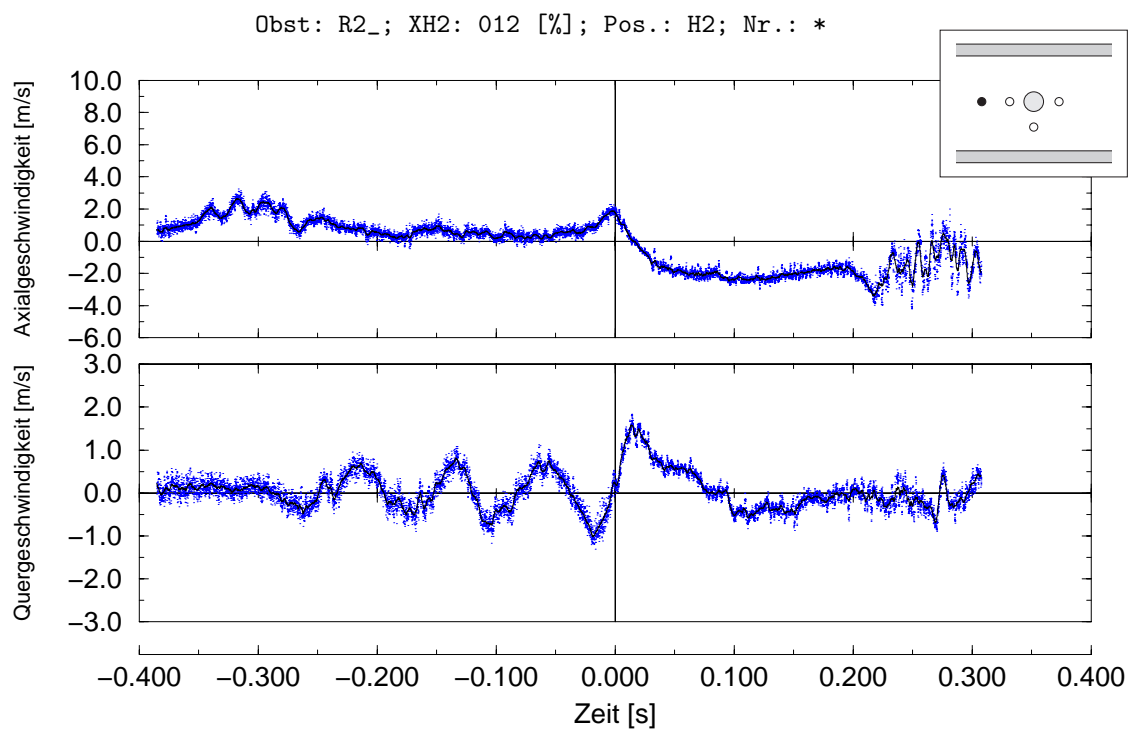
Bei 9 Vol.-% H_2 dehnte sich das Rezirkulationsgebiet mit Zunahme der Hauptströmungsgeschwindigkeit langsam aus und erfaßte vor Eintreffen der Flamme auch den Meßpunkt H2. Bei 12 und 16 Vol.-% H_2 befand sich H_2 dagegen im Nachlauf des Hindernisses. Die in Abbildung 3.31(b) zu erkennende, periodische Oszillation der Quergeschwindigkeit, die mit unterschiedlichen Frequenzen bei allen Konzentrationen feststellbar war, deutet an, daß sich hier ein instabiles Wirbelgebiet ähnlich einer Kármánschen Wirbelstraße ausbildete.

Hindernis R3: Aufgrund der vergleichbaren Meßposition im Rohr wiesen die Verläufe bei 9 Vol.-% H_2 am vorderen Meßpunkt die gleiche Tendenz auf, nach dem Eintreffen der Flamme weiter zu beschleunigen, wie im Rohr ohne Hindernis am oberen Meßpunkt. Ansonsten zeigten die Zeitverläufe des Rohrhindernisses R3 ein ähnliches Verhalten hinsichtlich Rezirkulation und Wirbelgebiet im Nachlauf wie bei Hindernis R2.

Auffallend war zudem, daß die im leeren Rohr und bei Hindernis R2 am vorderen *und* unteren Meßpunkt beobachtete Oberschwingung der axialen



(a) 9 Vol.-%, Meßposition H1 im Rezirkulationsgebiet



(b) 12 Vol.-%, Meßposition H2 im Nachlauf

Abbildung 3.31: Zeitverläufe des Ensemble-Mittelwerts bei Rohrhindernis R2

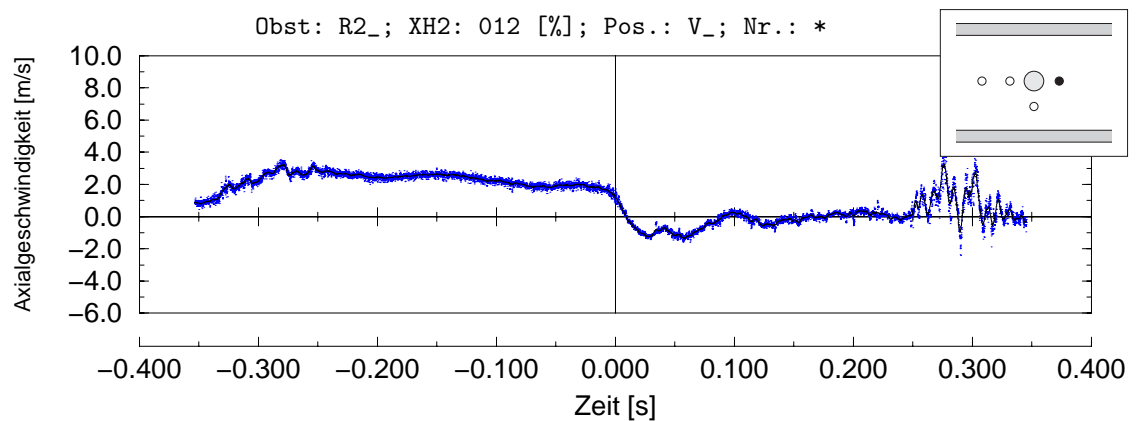


Abbildung 3.32: Zeitverlauf axialer Ensemble-Mittelwert vor Rohr R2

Geschwindigkeitskomponente nur unterhalb von Rohr R3 registriert wurde, nicht aber an der Meßposition V vor dem Hindernis (vgl. Abbildungen 3.32 und 3.33). Eine Erklärung hierfür könnte die dämpfende Wirkung des Druckgradienten entgegen der ankommenden Strömung sein, der durch den in der Nähe liegenden Staupunkt verursacht wurde.

Hindernis H1: Bei diesem Hindernis konnte, ähnlich wie bei den Röhren R2 und R3, ebenfalls ein Rückström- und Nachlaufgebiet an den Meßpunkten H1 und H2 hinter dem Zylinder festgestellt werden. Auffallend war jedoch die aufwärts gerichtete Strömung an allen Meßpunkten, deren Querkomponente von den Meßpunkten U über HU und H1 bis H2 zunahm (vgl. Abbildungen 3.34 und 3.35). Es scheint daher, als ob das Nachlaufgebiet hinter diesem nur halbhoheren Hindernis insbesondere von unterhalb des Hindernisses angeströmt wurde und die Umströmung, wie bei einem

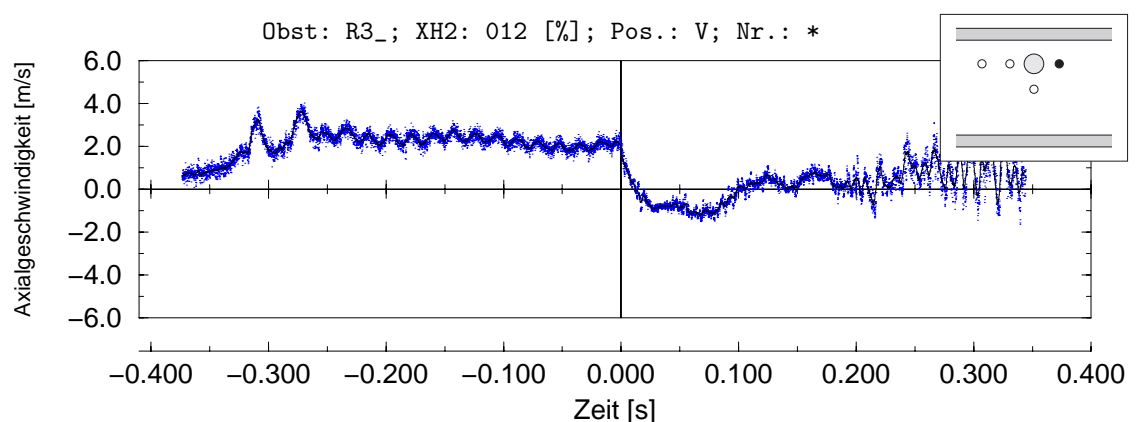
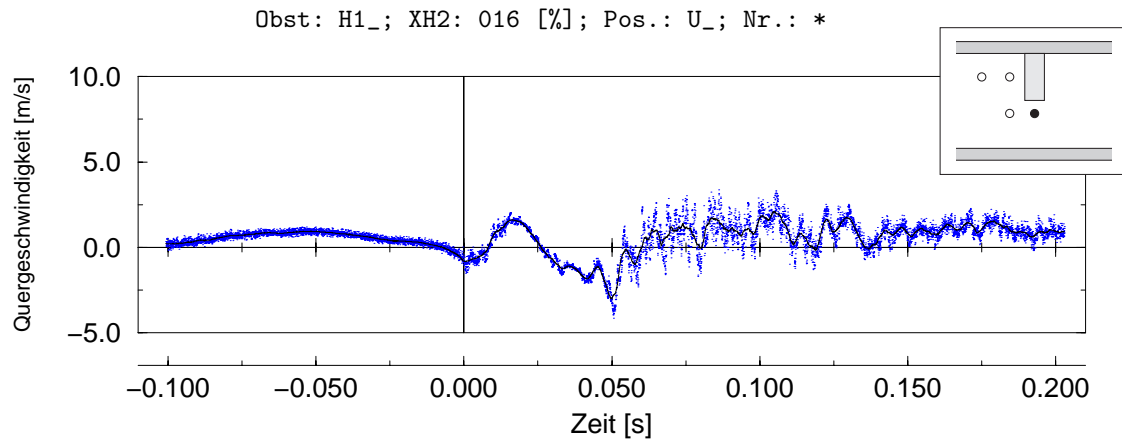
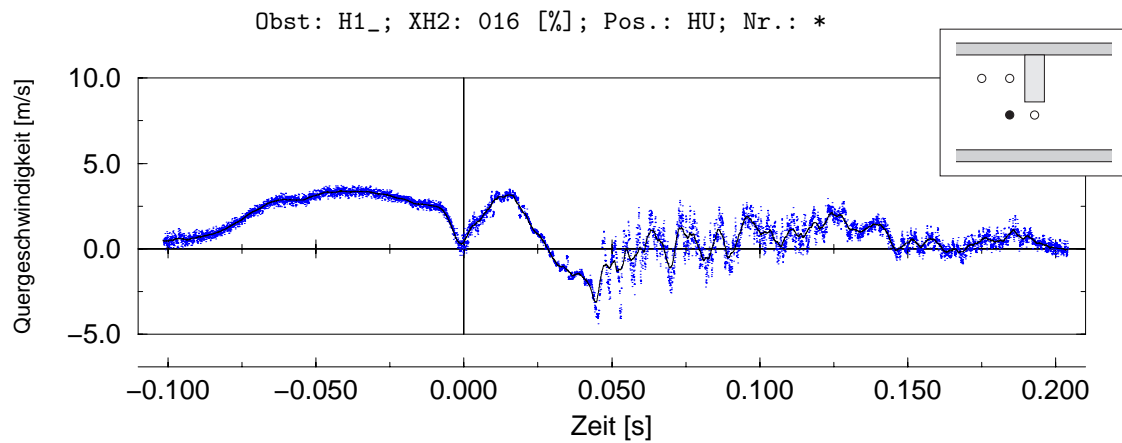


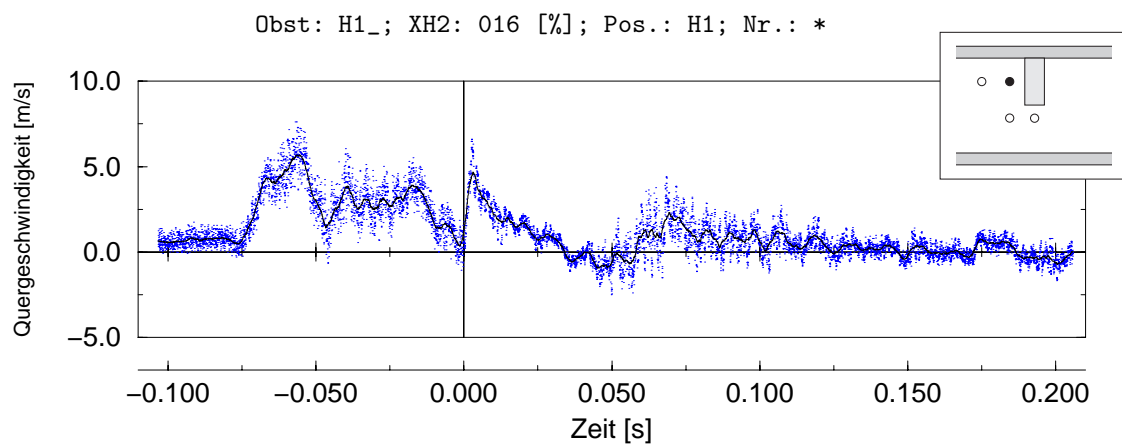
Abbildung 3.33: Zeitverlauf axialer Ensemble-Mittelwert vor Rohr R3



(a) Meßpunkt U



(b) Meßpunkt HU



(c) Meßpunkt H1

Abbildung 3.34: Zeitverläufe der Quergeschwindigkeiten bei Zylinder H1

Hufeisenwirbel, nach außen abgedrängt wurde.

Der Vergleich der Abbildungen 3.34(b) und 3.35 macht zudem die großen Unterschiede in der Schwankungsbreite des zeitlichen Verlaufs des Ensemble-Mittelwertes bei gerichtetem (HU Abbildung 3.34(b)) und ungerichtetem (H2 Abbildung 3.35) Strömungsverlauf deutlich.

Hindernis G2: Bei Hindernis G2 war die Strömungsbewegung bei 9 und 12 Vol.-% H_2 im Bereich der Flamme sehr gut reproduzierbar (erkennbar an der geringen Schwankungsbreite der Zeitverläufe nach der Flamme – Abbildungen 3.36(a) und 3.36(b)). Die zeitlichen Verläufe der Ensemble-Mittelwerte wiesen bei 16 Vol.-% H_2 jedoch im Vergleich zum geglätteten Verlauf mit Abstand die größten Schwankungsbreiten aller Hindernisse auf. Aus diesem Grund dürfen diese Verläufe nicht überbewertet werden. Interessant ist jedoch, wie in Abbildung 3.37 dargestellt, daß, selbst bei Berücksichtigung der beträchtlichen Schwankungsbreite, am Meßpunkt H1, der näher am (abwärts gerichteten) Gitterhindernis lag, eine aufwärts gerichtete Strömung registriert wurde, die mit dem Platzen der Berstmembran einsetzte. Grund für dieses Verhalten war vermutlich, die Ausführung des untersten Gitterblattes, das den zur Verfügung stehenden Querschnitt düsenförmig verengte. Da bei 16 Vol.-% H_2 die axiale Strömungsgeschwindigkeit und damit auch der Massenstrom signifikant höher war als bei 9 und 12 Vol.-%, wurde die Strömung gezwungen auch diesen Bereich zu durchströmen. Die der Kompression in der Düse folgende Expansion nach dem Hindernis führte dann, wie in Abbildung 3.38 dargestellt, zu der be-

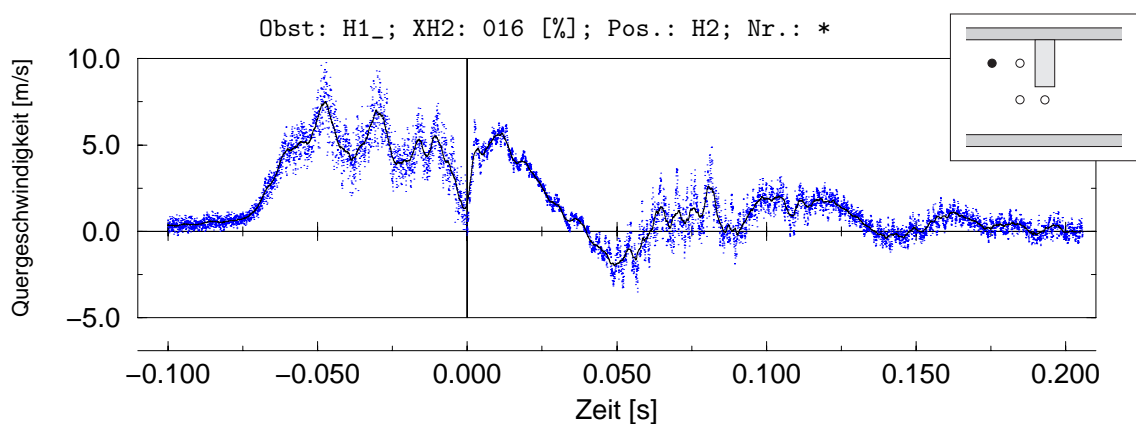
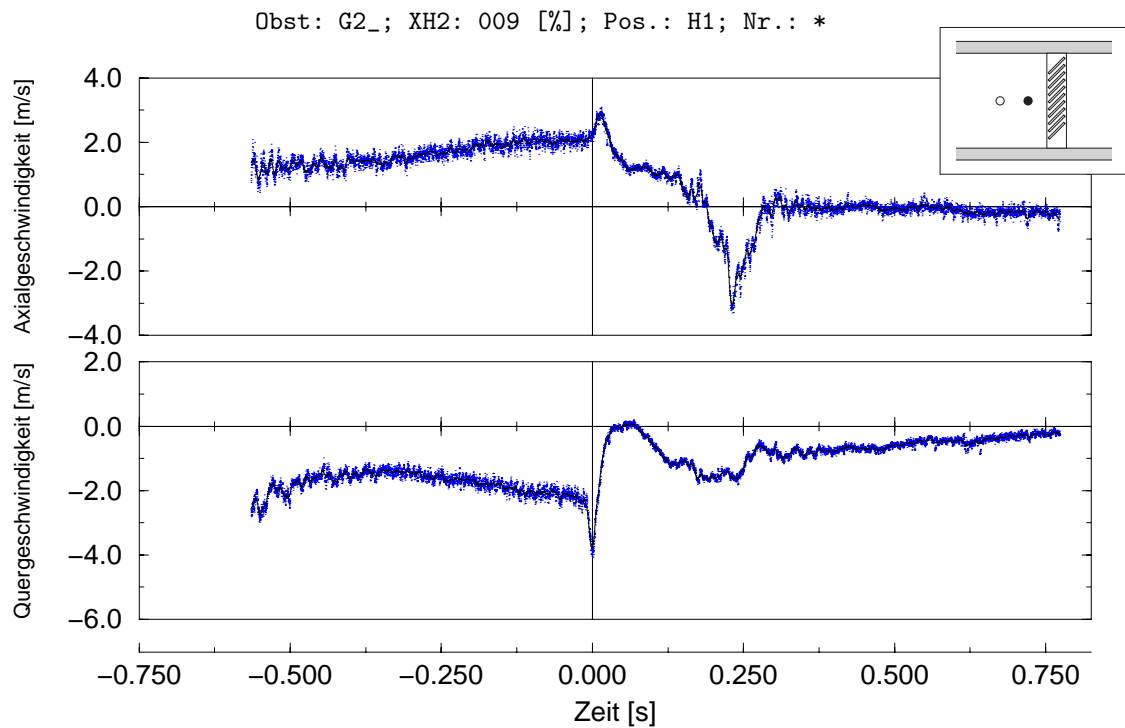
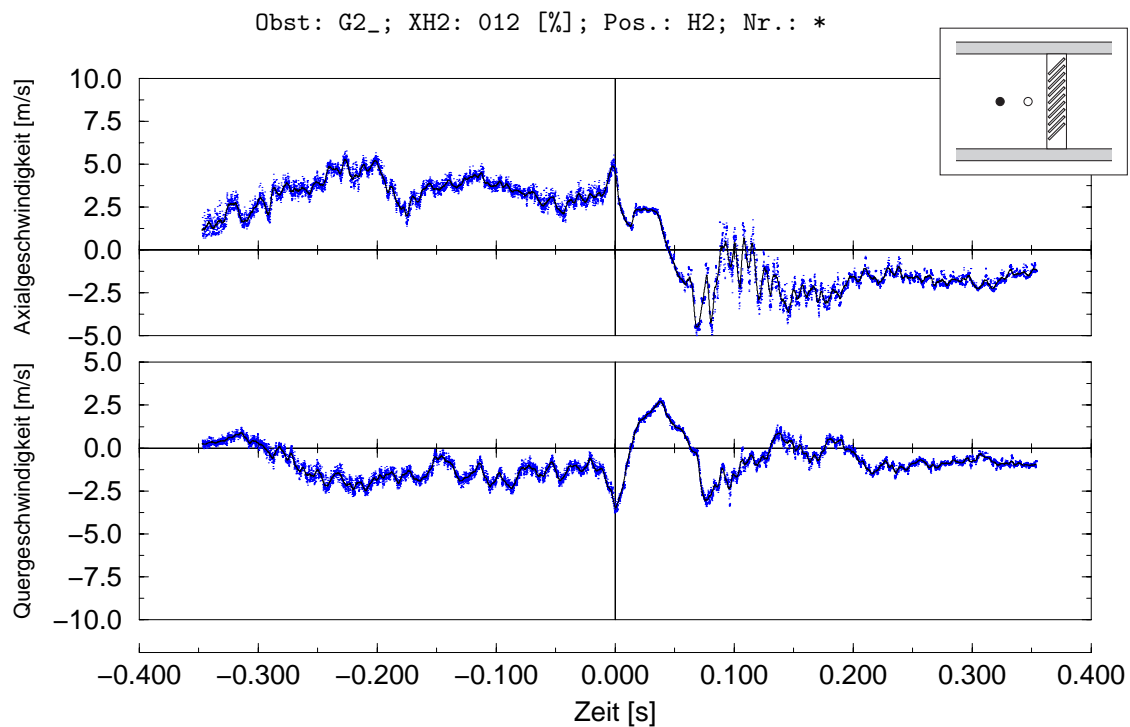


Abbildung 3.35: Zeitverlauf der Quergeschwindigkeit am Meßpunkt H2 im Nachlauf von Zylinder H1

(a) Meßpunkt H1; 9 Vol.-% H₂(b) Meßpunkt H2, 12 Vol.-% H₂**Abbildung 3.36:** Ensemble-Mittelwertverläufe; Gitter G2

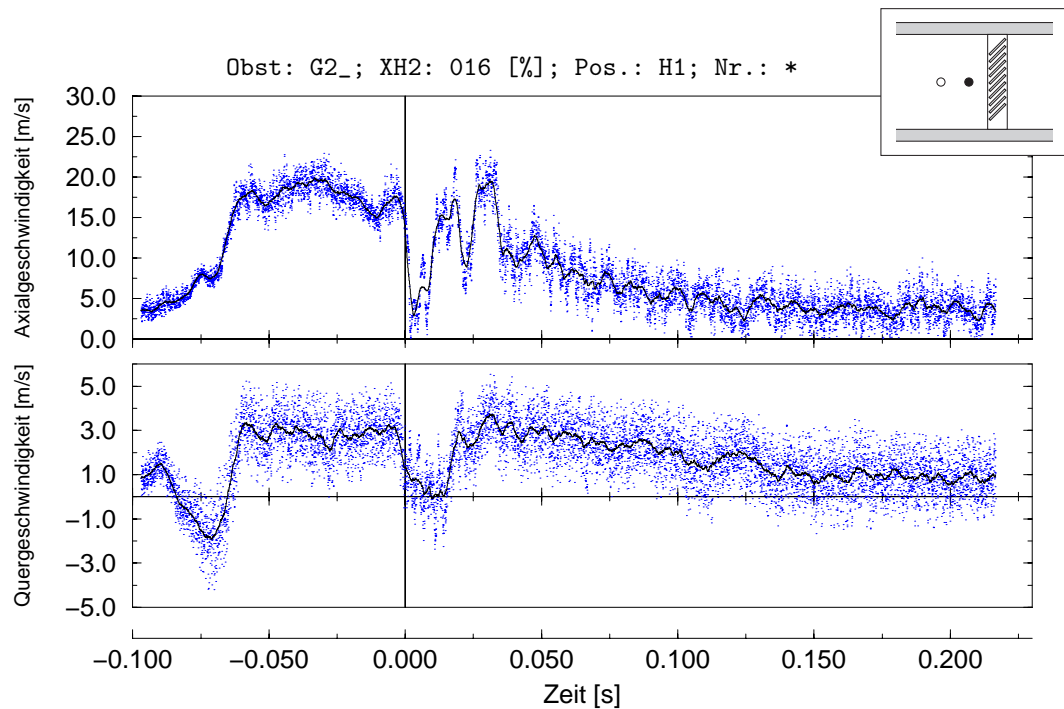


Abbildung 3.37: Ensemble-Mittelwertverlauf hinter Gitter G2; Meßpunkt H1

obachteten Strömungsumlenkung.

Hindernis T1: Beim Türhindernis T1 war deutlich der Unterschied zwischen den Meßpunkten, die sich im Bereich der turbulenten Scherschicht befanden und dem Meßpunkt im Freistrahл zu erkennen. In Abbildung 3.39 sind die Zeitverläufe der Ensemble-Mittelwerte an den drei Meßpunkten bei 9 Vol.-% H_2 dargestellt. Das gänzlich unterschiedliche Verhalten am Meßpunkt HO deutet darauf hin, daß sich dieser Punkt in der Freistrahл-

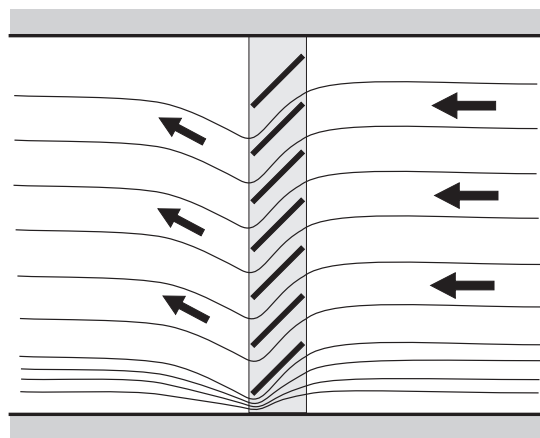
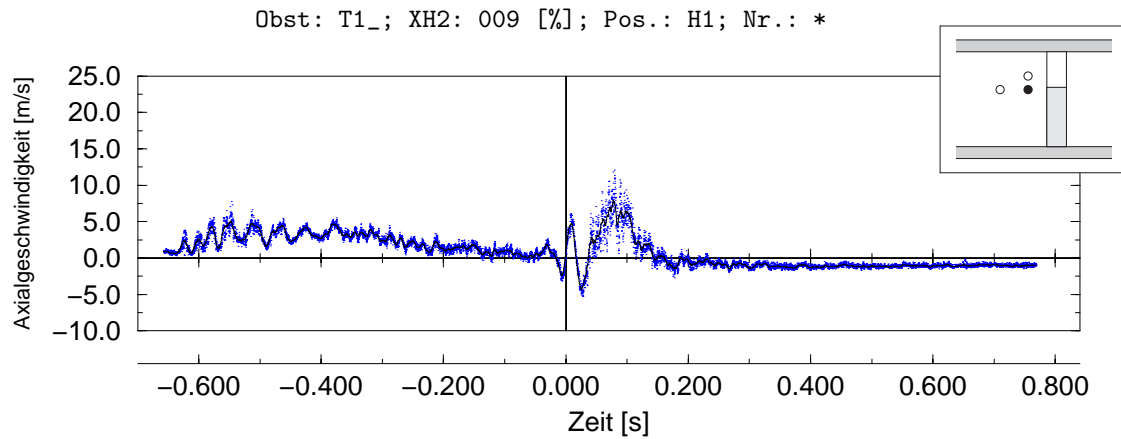
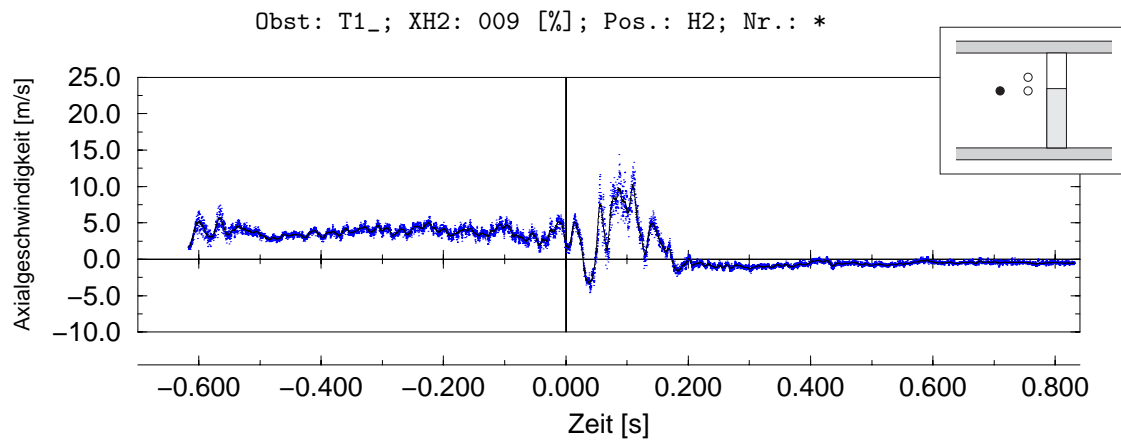


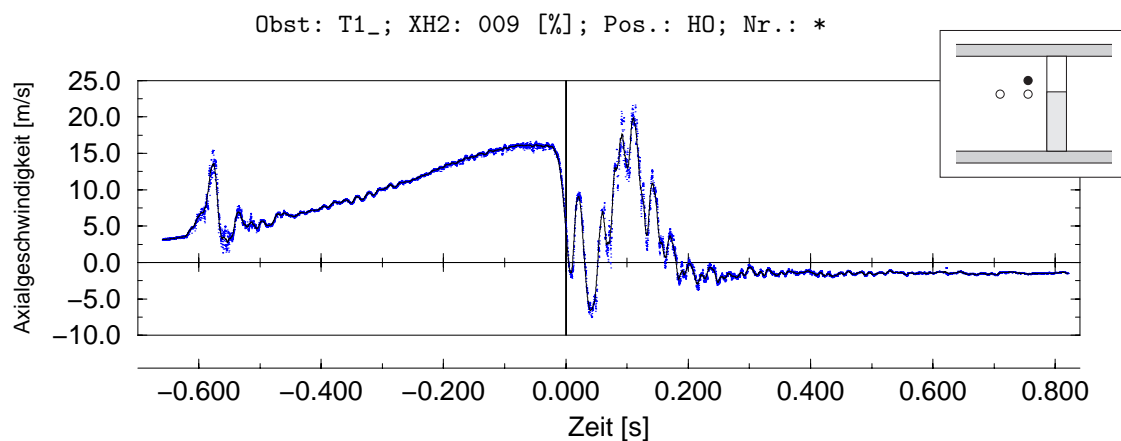
Abbildung 3.38: Modell für das Strömungsfeld hinter dem Gitterhindernis



(a) Meßpunkt H1 in der Scherschicht

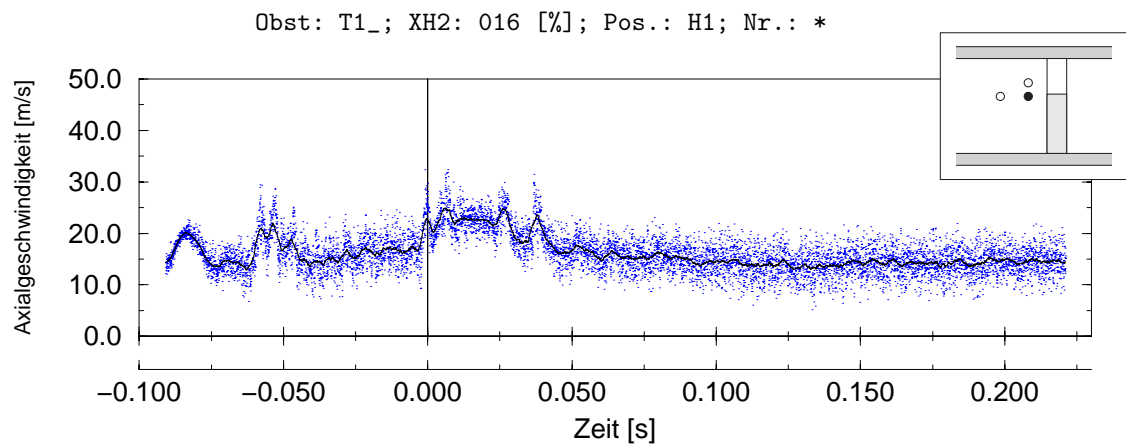


(b) Meßpunkt H2 in der Scherschicht

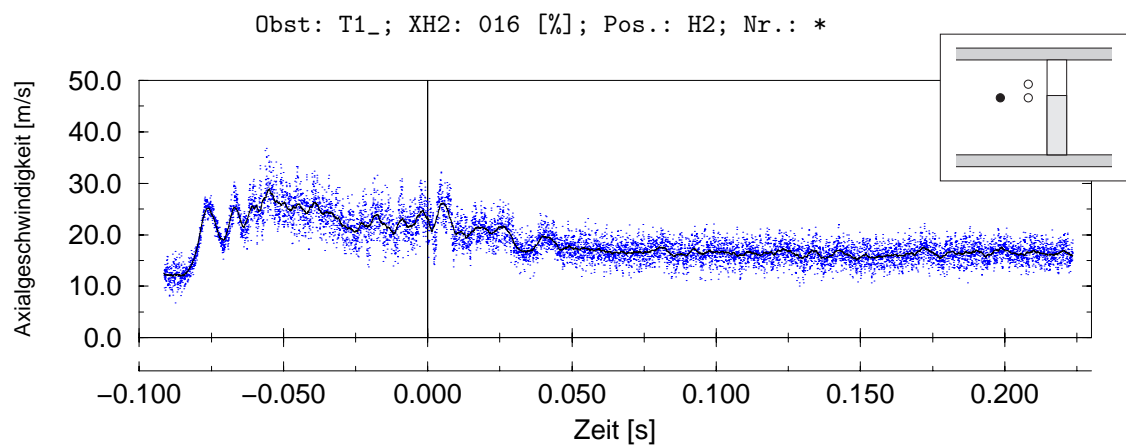


(c) Meßpunkt H0 im Freistrah

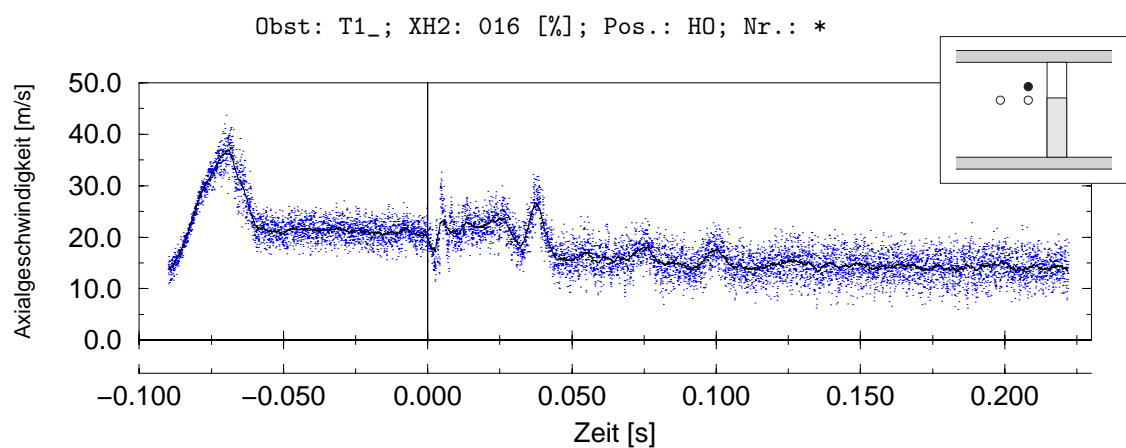
Abbildung 3.39: Verlauf der Axialgeschwindigkeit bei Hindernis T1; 9 Vol.-% H₂



(a) Meßpunkt H1 in der Scherschicht



(b) Meßpunkt H2 in der Scherschicht



(c) Meßpunkt H0 in der Scherschicht/im Ablösegebiet

Abbildung 3.40: Verlauf der Axialgeschwindigkeit bei Hindernis T1; 16 Vol.-% H₂

strömung befand. Auch bei 12 Vol.-% H_2 wurde ein vergleichbares Verhalten festgestellt. Vergleicht man dagegen die entsprechenden Kurven bei 16 Vol.-% H_2 (Abbildungen 3.40), zeigt sich, daß sich bei dieser Konzentration auch der Punkt HO nicht im Freistrahlfeld befand. Eine noch höhere Meßposition war allerdings aufgrund der LDA-Strahlengeometrie nicht möglich. Die beobachteten Zeitverläufe deuten darauf hin, daß die Strömung an der Vorderkante der Türöffnung ablöste und nicht nur hinter sondern bereits über dem Hindernis ein Rezirkulationsgebiet bildete, in dem der Punkt HO lag.

Überblick und Zusammenfassung

Bei der Bewertung der gemessenen Strömungsgeschwindigkeiten muß berücksichtigt werden, daß bei der gewählten Versuchsanordnung zwei Mechanismen zur Beschleunigung der Strömung beitragen. Einerseits erfolgt eine Strömungsbeschleunigung durch die schnellere Verbrennung aufgrund des Turbulenzeintrages durch die Hindernisse. Zum anderen beschleunigen die Hindernisse selbst die Strömung durch die Versperrung des Strömungsquerschnittes. Um den ersteren Anteil alleine zu bestimmen, wäre ein Vergleich mit entsprechenden kalten Strömungen notwendig, welcher aus den durchgeführten Messungen nicht möglich war. Verglichen werden konnten daher lediglich die Verbrennungströmungen untereinander. Unter der Annahme, daß der reine Geometrieinfluß durch die Versperrung für alle Konzentrationen gleich war, konnten jedoch durch den Vergleich der gemessenen Strömungsgeschwindigkeiten mit denen der Referenzkonfiguration ohne Hindernis Aussagen über den Turbulenzeinfluß auf die Hauptströmung gewonnen werden. Im folgenden sind daher die maximal auftretenden mittleren Geschwindigkeiten der Hauptströmung, die aus den Ensemble-Mittelwerten der Zeitverläufe ermittelt wurden, im Vergleich mit denen des leeren Rohres dargestellt.

In Abbildung 3.41 sind die für die runden Hindernisse H1, R2 und R3 maximal auftretenden mittleren Geschwindigkeiten der Hauptströmung zusammengefaßt und im Vergleich mit denen für die Messungen ohne Hindernis dargestellt. Die eingezeichneten Linien sind exponentielle Ausgleichskurven, die nach der Methode der kleinsten Fehlerquadrate bestimmt wurden

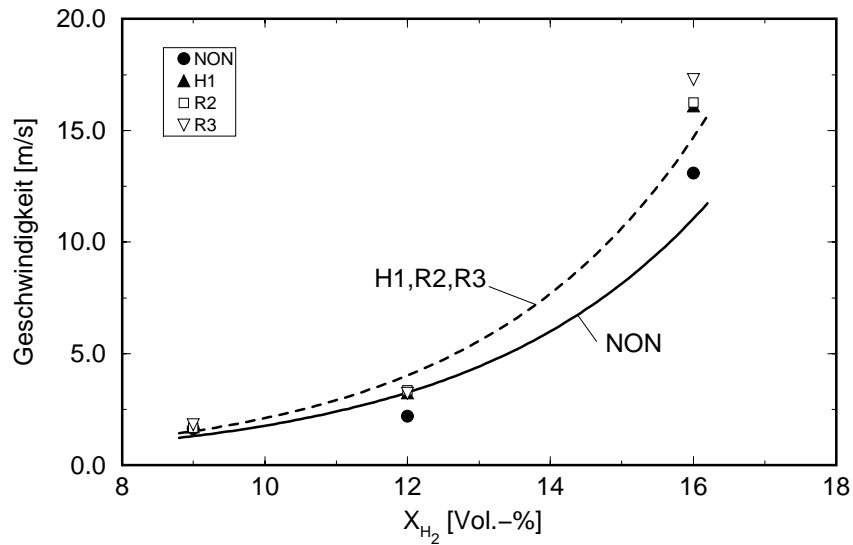


Abbildung 3.41: Mittlere Hauptströmungsgeschwindigkeiten für die Hindernisse H1, R2 und R3 (Meßpunkt U) im Vergleich zum leeren Rohr (NON, Meßpunkt OBEN)

und das Verhalten charakterisieren bzw. einen Trend aufzeigen. Man erkennt, daß der Einfluß dieser Hindernisse auf die Strömungsgeschwindigkeit sehr gering ist. Lediglich bei 16 Vol.-% H₂ zeigt das asymmetrisch in der Versuchsstrecke angebrachte Rohr R3 eine etwas stärkere Abweichung als H1 und R2, die jedoch der in der Versuchsstrecke höheren Meßposition bei R3 zugeschrieben werden kann.

Abbildung 3.42 zeigt den Vergleich zwischen den Hauptströmungsgeschwin-

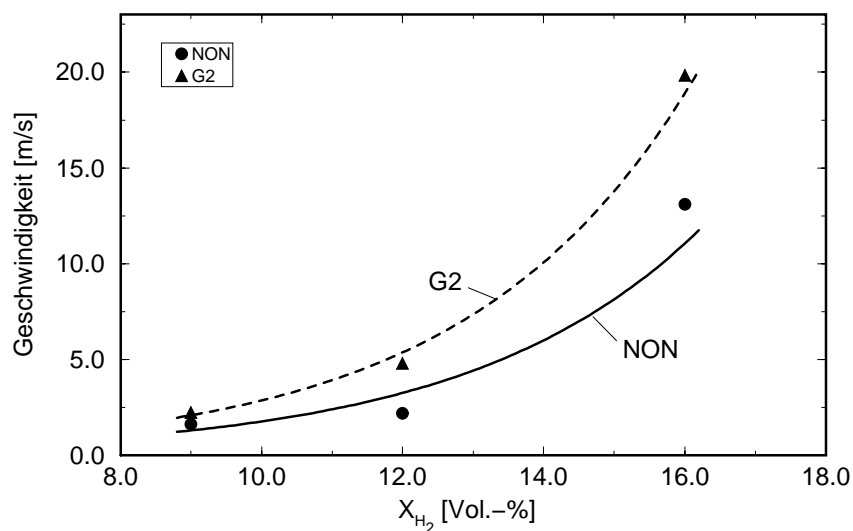


Abbildung 3.42: Mittlere Hauptströmungsgeschwindigkeiten für das Hindernis G2 im Vergleich zum leeren Rohr (NON)

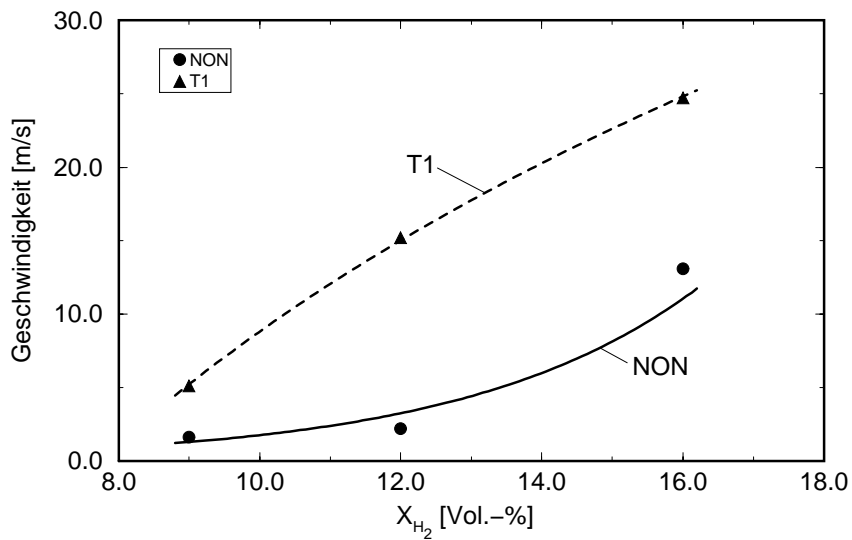


Abbildung 3.43: Mittlere Hauptströmungsgeschwindigkeiten in der Scherschicht des Hindernisses T1 im Vergleich zum leeren Rohr (NON)

digkeiten beim Gitterhindernis und dem leeren Rohr. Berücksichtigt man, daß bei diesem Hindernis der Effekt der Strömungsumlenkung den der Versperrung bei weitem überwiegt, kann die *hier* beobachtete Beschleunigung vorwiegend der turbulenten Flammenbeschleunigung zugeschrieben werden.

Beim Türhindernis T1 mußten zwei Fälle unterschieden werden, nämlich

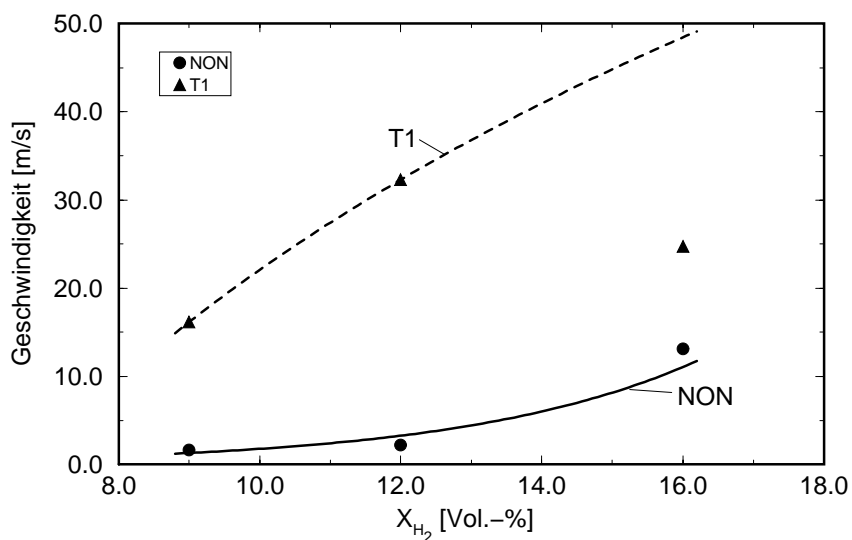


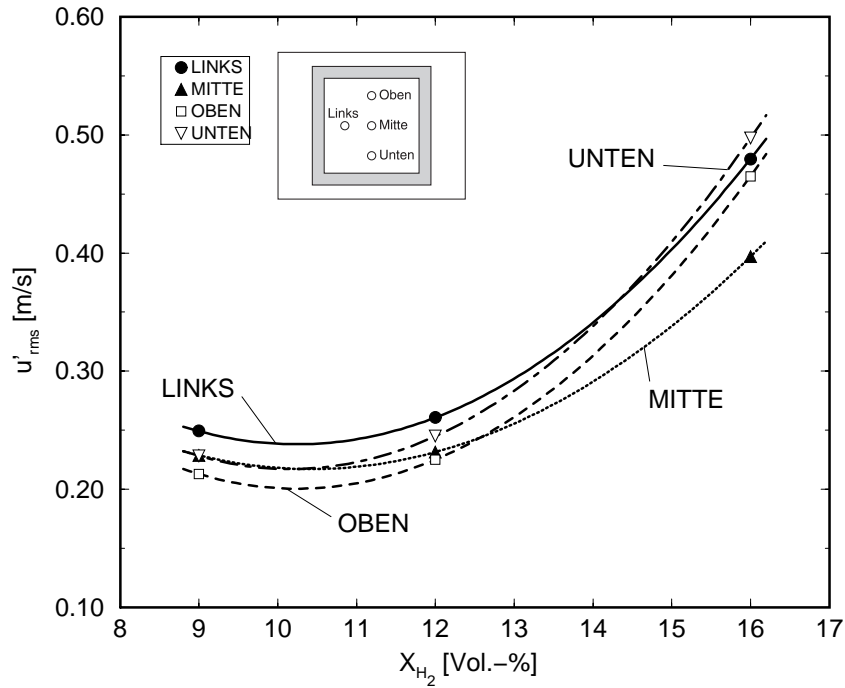
Abbildung 3.44: Mittlere Hauptströmungsgeschwindigkeiten im Freistrahle des Hindernisses T1 im Vergleich zum leeren Rohr (NON)

den des Meßpunktes in der Scherschicht und im Freistrah. In Abbildung 3.43 sind die Verhältnisse in der Scherschicht im Vergleich mit dem Rohr ohne Hindernis dargestellt. In diesem Falle gibt eine logarithmischen Ausgleichskurve die am Meßpunkt H2 gemessenen Werte sehr gut wieder. Man erkennt, daß die Strömungsgeschwindigkeit hier nicht in dem Maße zunimmt, wie es der Vergleich mit dem leeren Rohr vermuten lassen würde. Die Strömungsgeschwindigkeiten im Freistrah von Hindernis T1 konnten, wie oben dargestellt, nur bei 9 und 12 Vol.-% H₂ gemessen werden. In Abbildung 3.44 ist daher bei 16 Vol.-% H₂ der maximal (am Meßpunkt H2) auftretende Wert eingezeichnet. Da die logarithmische Ausgleichskurve in Abbildung 3.43 die gemessenen Werte sehr gut wiedergab, wurde mit den beiden vorhandenen Geschwindigkeitswerten im Freistrah logarithmisch extrapoliert. Es wird daher angenommen, daß im Freistrah bis zu 50 m/s Strömungsgeschwindigkeit auftraten.

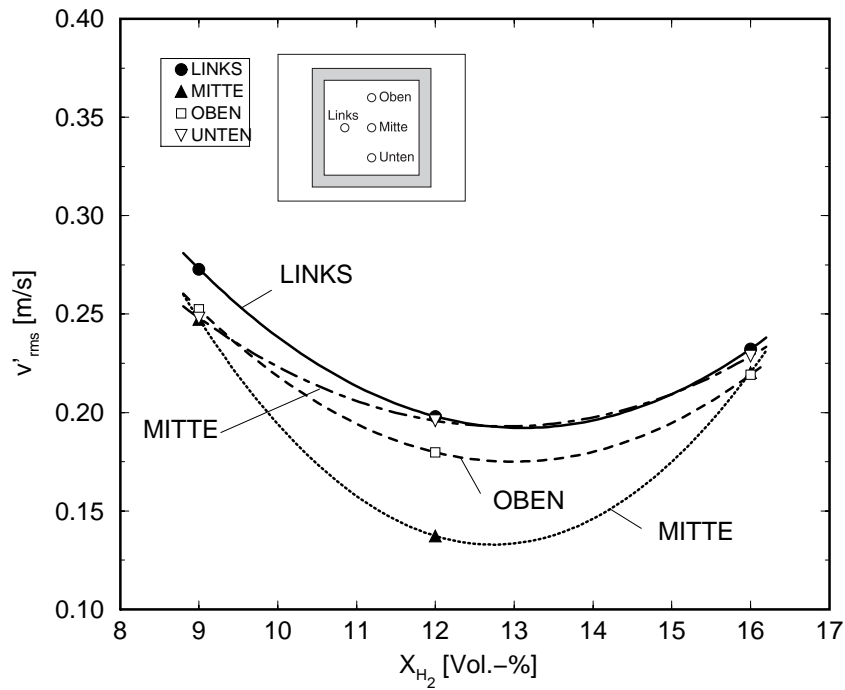
3.3.2 Turbulenz vor der Flammenfront

Die im folgenden dargestellten Schwankungsgeschwindigkeiten wurden als Mittelwerte über alle betrachteten Messungen an einem Meßpunkt erhalten, die, wie in Abschnitt 3.2.2 angegeben, ausgewertet wurden. Um den Trend der Verläufe zu verdeutlichen, wurde der Bereich zwischen den einzelnen Meßpunkten durch einfache (natürliche) kubische Spline-Interpolation ergänzt.

Messungen ohne Hindernis: In den Abbildungen 3.45(a) und 3.45(b) ist der Verlauf der rms-Werte der Schwankungsgeschwindigkeiten in Abhängigkeit von der H₂-Konzentration dargestellt. Man erkennt, daß die Schwankungen in Axial- und Querrichtung in der gleichen Größenordnung lagen. Bei der Bewertung der unterschiedlichen Absolutwerte muß die Meßgenauigkeit und die Wiederholbarkeit der einzelnen Messungen berücksichtigt werden. In axialer Richtung nahmen die Schwankungsgeschwindigkeiten mit zunehmender Konzentration zu. In der Querrichtung war ein Minimum bei 12 Vol.-% H₂ feststellbar. Es wird angenommen, daß die stärkeren Schwankungen bei 9 Vol.-% H₂ durch den Einfluß des Auftriebs verursacht wurden, während bei 16 Vol.-% H₂ der Einfluß der höheren Flammengeschwindigkeit überwog.

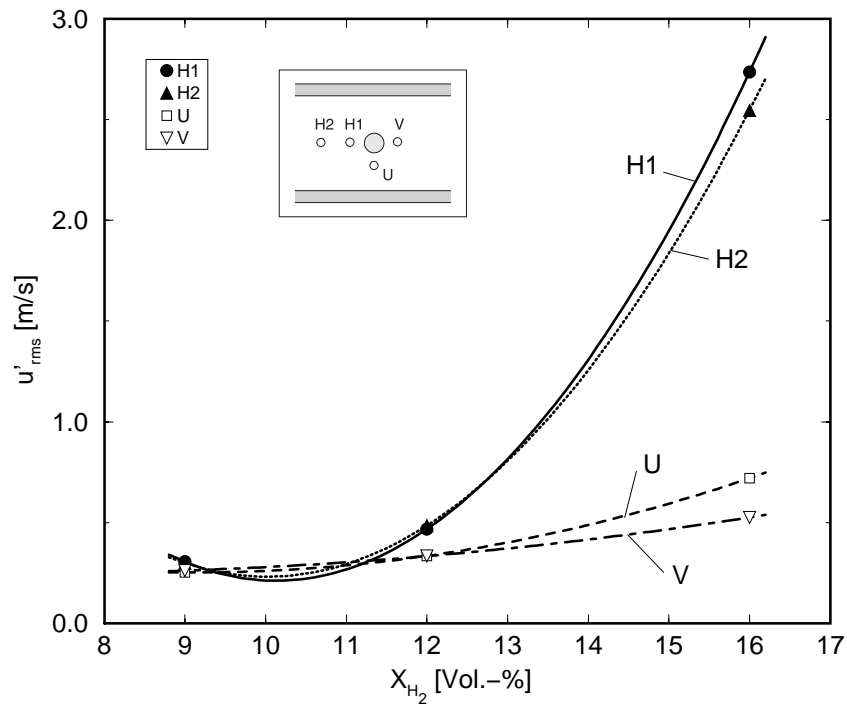


(a) axiale Richtung

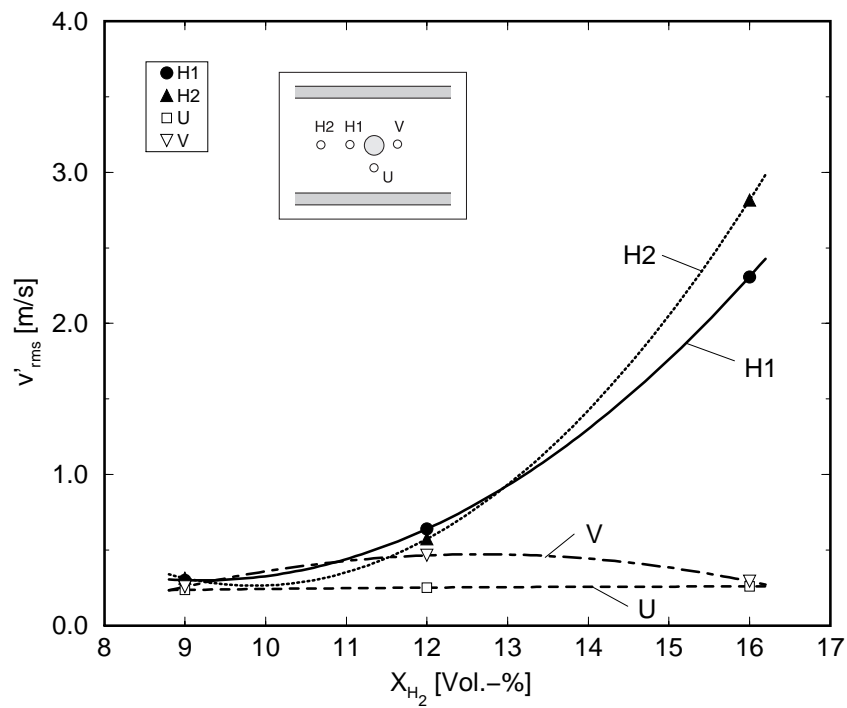


(b) Querrichtung

Abbildung 3.45: rms-Werte der Schwankungsgeschwindigkeiten ohne Hindernis (NON)



(a) axiale Richtung



(b) Querrichtung

Abbildung 3.46: Schwankungsgeschwindigkeiten bei Rohrhindernis R2

Rohrhindernisse R2/R3: Bei den Messungen im Nachlaufbereich der Rohrhindernisse wurde mit zunehmender H_2 -Konzentration eine deutliche Zunahme der turbulenten Schwankungen registriert (s. Abbildungen 3.46, und 3.47).

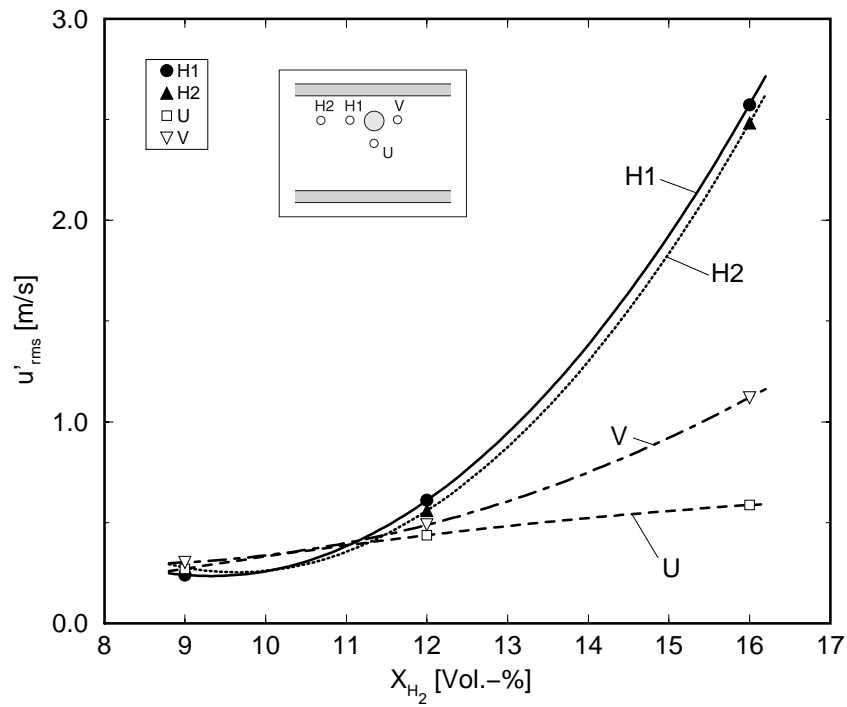
Wie bereits bei den Zeitverläufen war das Verhalten am Meßpunkt V vor den Hindernissen ähnlich wie bei den Messungen ohne Hindernis. Ausnahmen bildeten das Hindernis R3 bei 16 Vol.-% H_2 sowie R2 bei 12 Vol.-%. Im ersteren Fall konnten im Vergleich zu R2 und zu den Messungen ohne Hindernis signifikant höhere axiale Schwankungsgeschwindigkeiten bis über 1 m/s festgestellt werden (vgl. Kurve für V in den Abbildungen 3.46(a) und 3.47(a)). Höhere turbulenten Schwankungen in Querrichtung im Vergleich zu Hindernis R3 und sogar im Vergleich zu 16 Vol.-% H_2 wurden dagegen bei Hindernis R2 bei 12 Vol.-% H_2 festgestellt (V in Abbildungen 3.46(b) und 3.47(b)).

Am Meßpunkt U ist zu erkennen, daß die Strömungsbeschleunigung in diesem Bereich sich lediglich auf die turbulenten Schwankungen in axialer Richtung auswirkt. Die Schwankungsgeschwindigkeiten in Querrichtung nehmen bei Hindernis R3 mit zunehmender Strömungsgeschwindigkeit sogar ab. Grund hierfür ist vermutlich die bessere Ausrichtung der Strömung im beschleunigten Strömungsbereich unterhalb des Rohres.

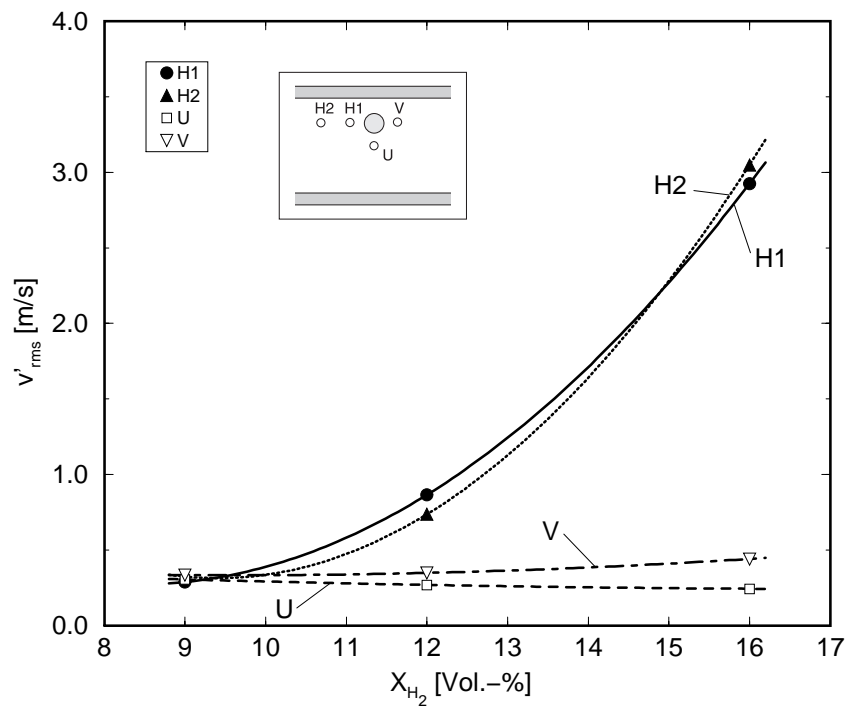
Zylinderhindernis H1: Wie anzunehmen, entsprachen hier die Schwankungsgeschwindigkeiten – bis auf das etwas geringere Niveau, das der geringeren Blockierate zugeschrieben wurde – an vergleichbaren Positionen (H1 im Rückströmgebiet und H2 im Nachlauf) denen der Rohrhindernisse R2 und R3. Während bei letzteren höhere turbulente Schwankungen jedoch nicht einheitlich am Meßpunkt H1 oder H2 auftraten, wurden beim Zylinderhindernis grundsätzlich im Nachlauf (Meßpunkt H2) die höheren Werte gemessen (s. Abbildungen 3.48(a) und 3.48(b)).

Die rms-Werte der Schwankungsgeschwindigkeiten an den beiden anderen Meßpunkten waren vergleichbar mit denen des Rohrhindernisses R3, das auch von der Höhe der Meßpositionen im Rohr ähnlich war.

Gitterhindernis G2: Die Betrachtung der Zeitverläufe für dieses Hindernis zeigte grundsätzliche Unterschiede zwischen den niedrigeren H_2 -Konzentrationen und 16 Vol.-% H_2 auf. Während bei 9 und 12 Vol.-%

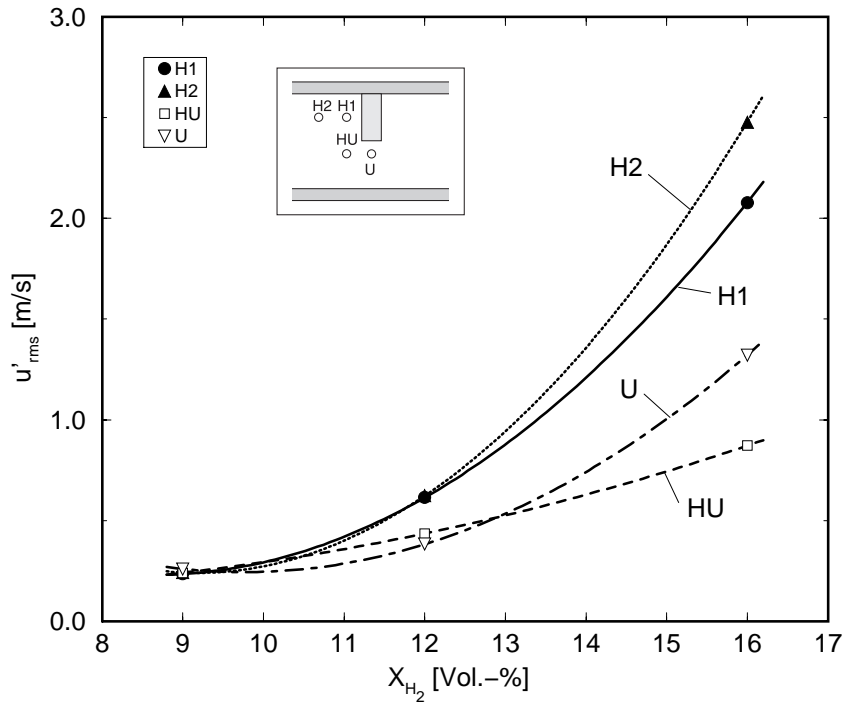


(a) axiale Richtung

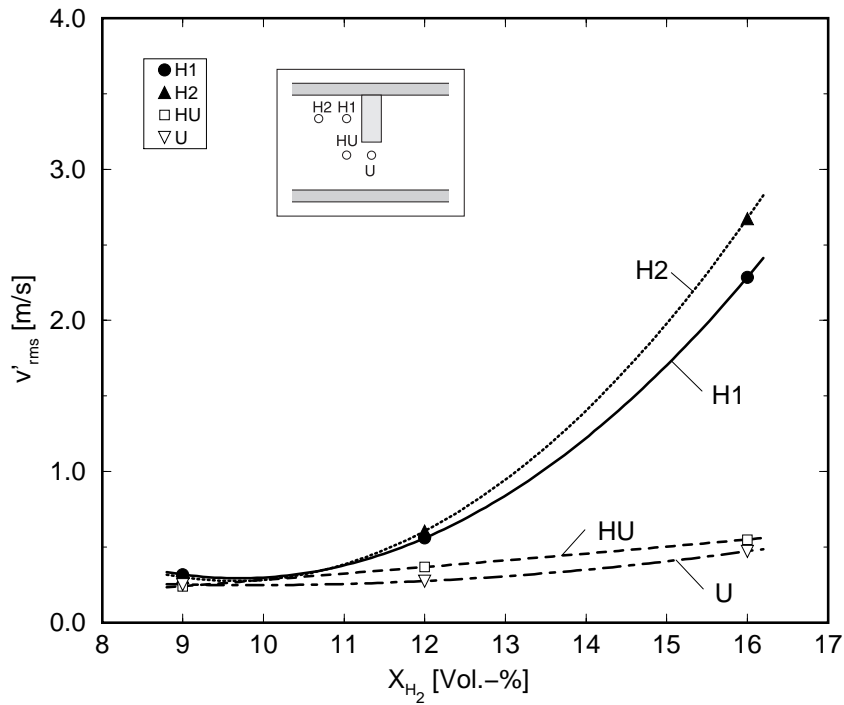


(b) Querrichtung

Abbildung 3.47: Schwankungsgeschwindigkeiten bei Rohrhindernis R3

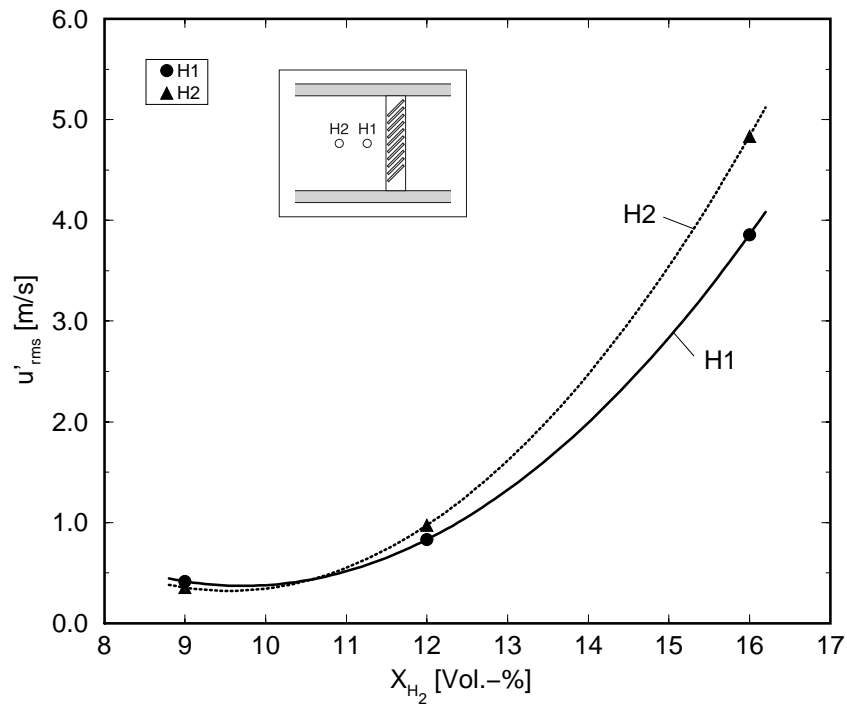


(a) axiale Richtung

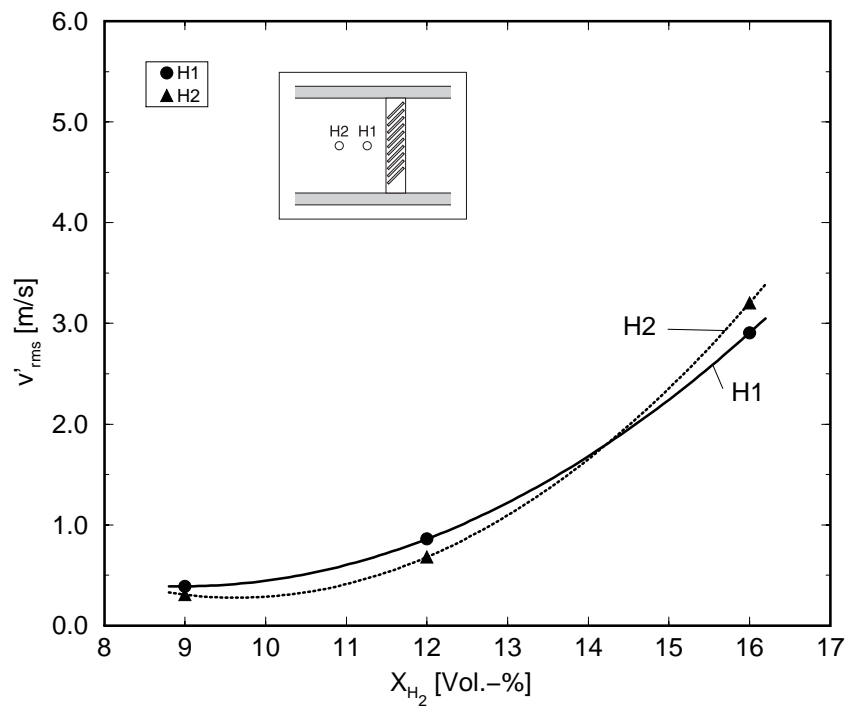


(b) Querrichtung

Abbildung 3.48: Schwankungsgeschwindigkeiten bei Zylinderhindernis H1



(a) axiale Richtung



(b) Querrichtung

Abbildung 3.49: Schwankungsgeschwindigkeiten bei Gitterhindernis G2

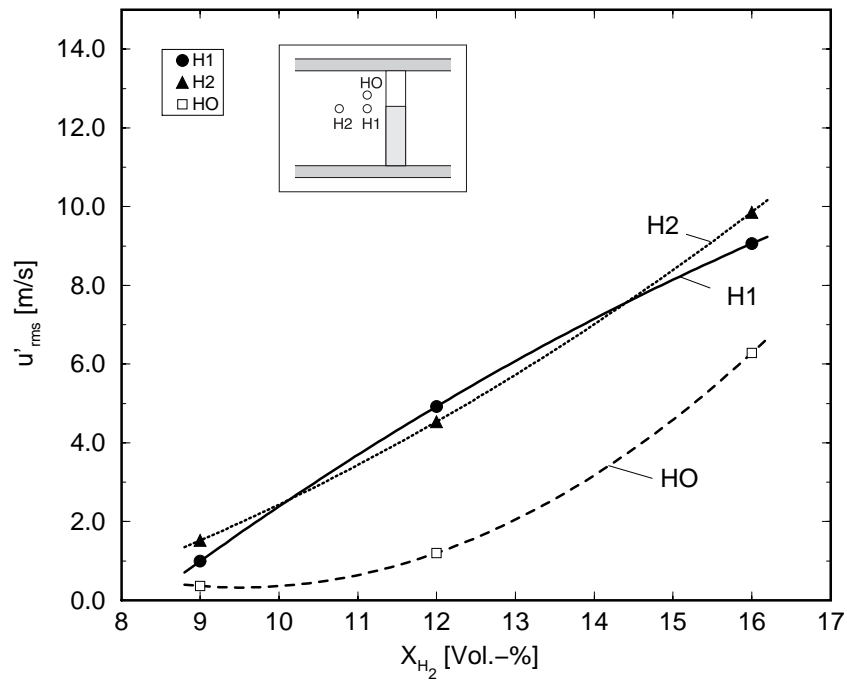
H₂ keine Vorzugsrichtung der Hauptströmung bezüglich des Koordinatensystems des Rohres zu erkennen war, ist die Strömung bei 16 Vol.-% H₂, wie oben bei der Diskussion der Zeitverläufe der Strömungsgeschwindigkeiten dargestellt, axial ausgerichtet. Entsprechend sind die Schwankungsgeschwindigkeiten für die niedrigeren Konzentrationen in Axial- und in Querrichtung ähnlich groß und weisen ähnliche Verläufe auf. Bei 16 Vol.-% H₂ ist der Unterschied zwischen axialer und Querkomponente der Schwankungsgeschwindigkeit dagegen wieder sehr deutlich zu erkennen.

Türhindernis T1: Bei diesem Hindernis war das Verhalten, das die Betrachtung der Zeitverläufe aufgezeigt hatte, auch in den rms-Werten der Schwankungsgeschwindigkeiten festzustellen. An den beiden Meßpunkten H1 und H2, die bei allen Konzentrationen in der turbulenten Scherschicht lokalisiert waren, zeigt sich eine nahezu lineare Zunahme der Turbulenzintensität. Wie dargestellt, befand sich der Meßpunkt HO dagegen für 9 und 12 Vol.-% H₂ in der Freistrahlsströmung, bei 16 Vol.-% H₂ jedoch wie die beiden Meßpunkte H1 und H2 im Bereich der turbulenten Scherschicht. Dies ist deutlich am Verlauf der Schwankungsgeschwindigkeit über der H₂-Konzentration zu erkennen. Während im Freistrahls, der mit der ungestörten Außenströmung einer ebenen Plattengrenzschicht verglichen werden kann, vergleichsweise niedrige Schwankungsgeschwindigkeiten gemessen wurden, nahmen diese bei 16 Vol.-% H₂ deutlich zu und erreichten in axialer Richtung die gleichen Werte wie an den beiden anderen Meßpunkten.

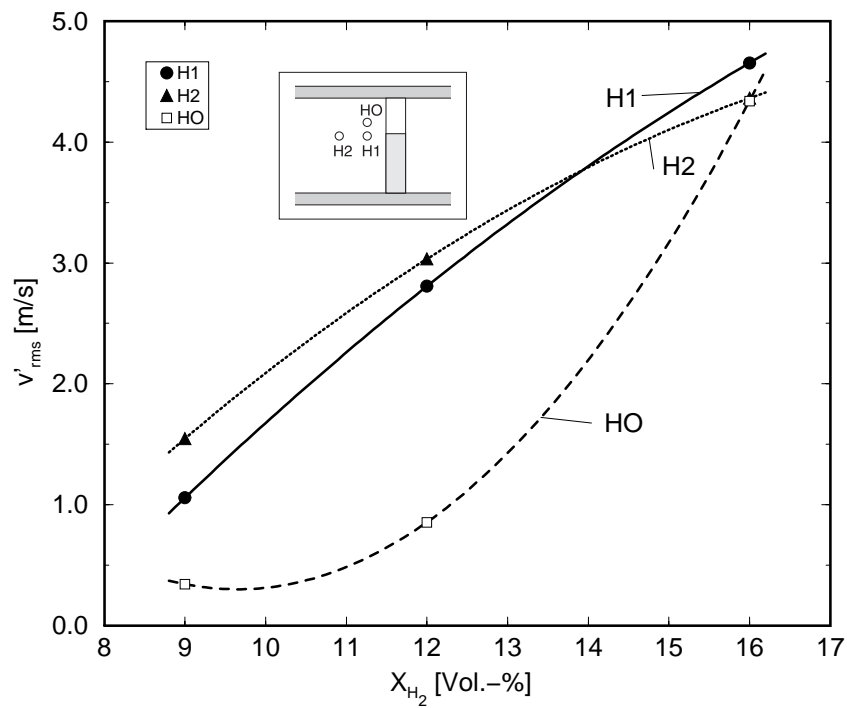
Überblick und Zusammenfassung: Um einen Vergleich der im vorliegenden Abschnitt dargestellten Verläufe der Turbulenzintensität zu ermöglichen, sind in Abbildung 3.51 repräsentative Kurven für alle Hindernisse zusammengefaßt.

Ein Vergleich der Darstellungen läßt die folgenden Aussagen zu:

- Nahezu immer waren die gemessenen rms-Werte für die axialen Schwankungsgeschwindigkeiten größer als die für die Schwankungsgeschwindigkeiten in Querrichtung. Als Maximalwert wurden beim Türhindernis T1 ca. 9,9 m/s in axialer Richtung und ca. 4,4 m/s in Querrichtung gemessen.



(a) axiale Richtung



(b) Querrichtung

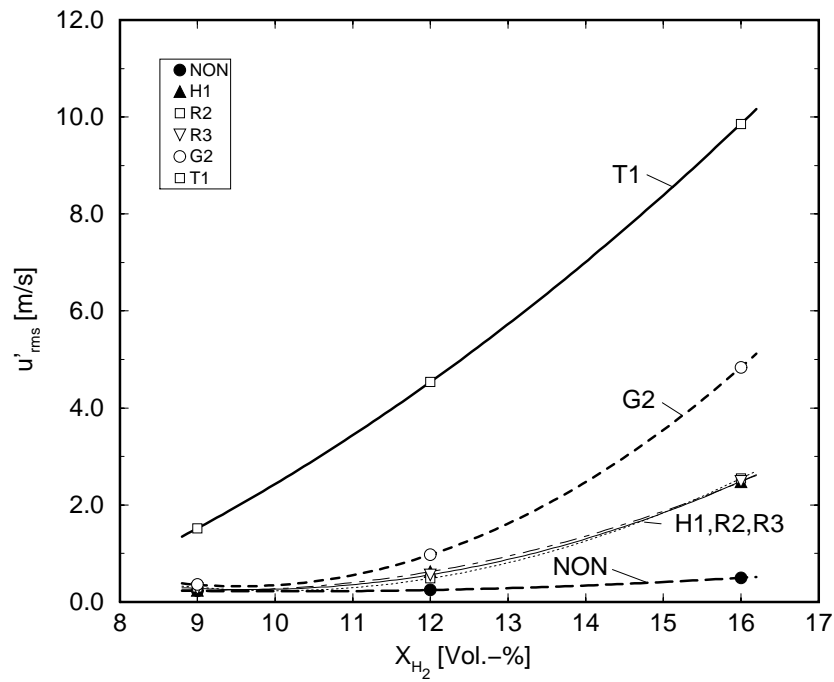
Abbildung 3.50: Schwankungsgeschwindigkeiten bei Türhindernis T1

- Die Wirkung der Rohr- und Zylinderhindernisse war unabhängig von ihrer Ausrichtung und Position im Rohr vergleichbar.
- Die axiale Turbulenzintensität zeigte eine deutliche Abstufung von Türhindernis T1 über Gitter G2 und die Rohr-/Zylinderhindernisse zu den Messungen ohne Hindernis (NON).
- Bei der Turbulenzintensität in Querrichtung verhielten sich das Gitter G2 und die Rohr- bzw. Zylinderhindernisse ähnlich.

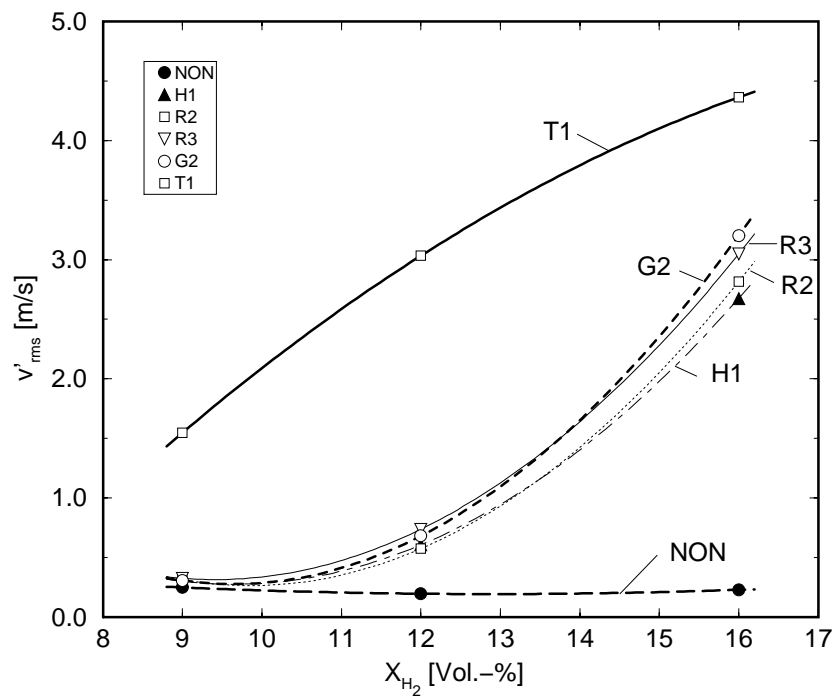
Trägt man die Schwankungsgeschwindigkeiten über den beobachteten mittleren Hauptströmungsgeschwindigkeiten auf, können bei der axialen Richtung eindeutig zwei Bereiche, in der Querrichtung sogar drei Bereiche unterschieden werden, die in Abbildung 3.52 durch Geraden angedeutet sind.

Der unterste Gerade in den Abbildungen 3.52(a) und 3.52(b) stellt dabei eine Ausgleichsgerade zwischen den Meßwerten des leeren Rohres, den Punkten V und U vor und unter den Rohrhindernissen, U und HU beim Zylinderhindernis sowie den Meßwerten im Freistrahle des Zylinderhindernisses dar. Allen diesen Meßstellen ist gemeinsam, daß ihre Position mit der einer turbulenten Außenströmung verglichen werden kann. Sie befinden sich zwar im Einflußbereich des Hindernisses, jedoch wird der Turbulenzzustand nicht durch das Hindernis bestimmt, sondern durch die Vorgeschichte der Strömung bis diese das Hindernis erreicht.

Die zweite Gerade in Abbildung 3.52(a) ist eine Ausgleichsgerade zwischen den übrigen Meßpunkten, d.h. H1 und H2 im Rezirkulationsbereich bzw. Nachlauf der Rohr- und Zylinderhindernisse, den Messungen des Gitters und den Meßwerten in der turbulenten Scherschicht des Türhindernisses. Bei den Querschwankungen kann eine dritte Gerade identifiziert werden, die die Meßwerte im Nachlauf bzw. Rezirkulationsbereich (Meßpunkte H1 und H2) der Rohr- und Zylinderhindernisse berücksichtigt. Daß diese steiler verläuft als die beiden anderen Geraden sollte nicht so gedeutet werden, daß an diesen Punkten bereits bei niedrigeren Strömungsgeschwindigkeiten höhere Turbulenzintensitäten vorlagen als an den übrigen. Vielmehr wurden hier aufgrund des Impulsverlustes hinter den Hindernissen geringere mittlere Geschwindigkeiten registriert. Ähnlich wie am Anfang von Abschnitt 3.2.2 im Zusammenhang mit dem Turbulenzgrad dargestellt, sollte

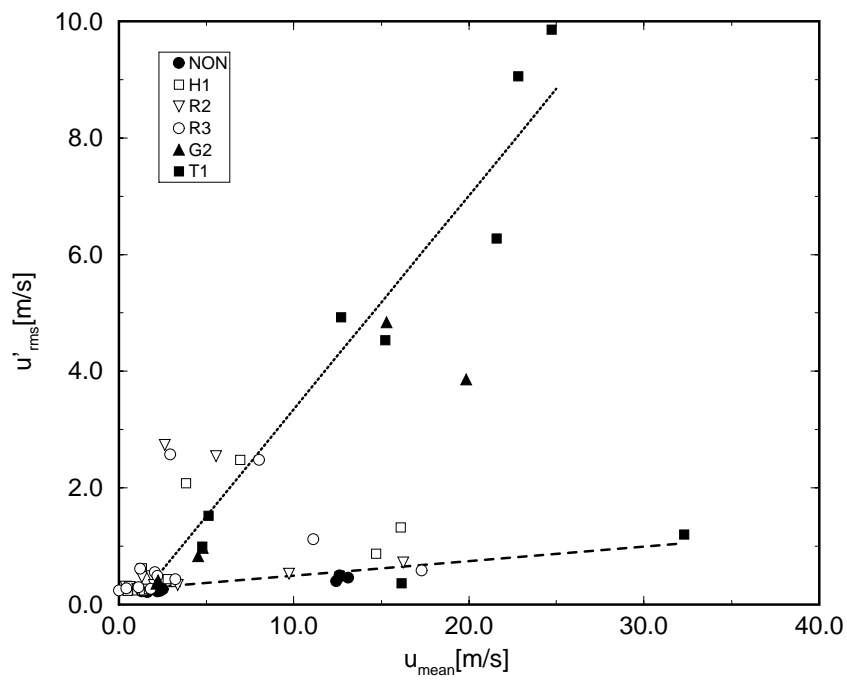


(a) axiale Richtung

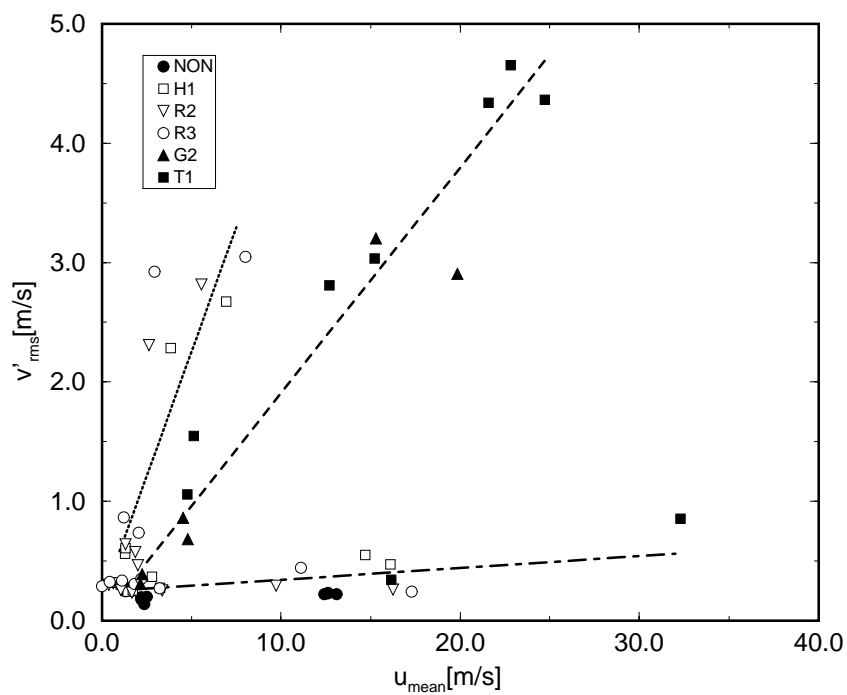


(b) Querrichtung

Abbildung 3.51: Schwankungsgeschwindigkeiten für alle Hindernisse in Abhängigkeit von der H_2 -Konzentration

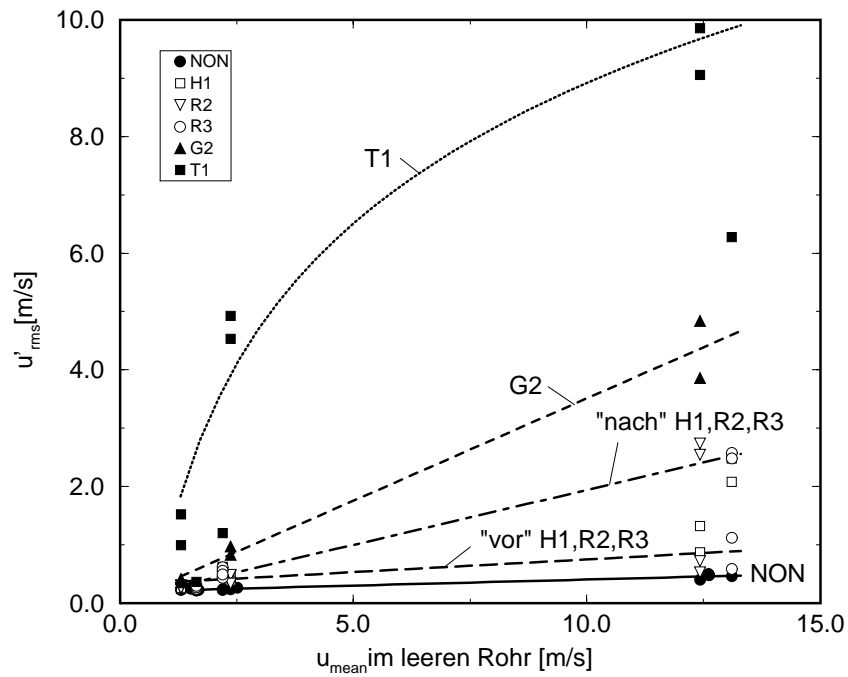


(a) axiale Richtung

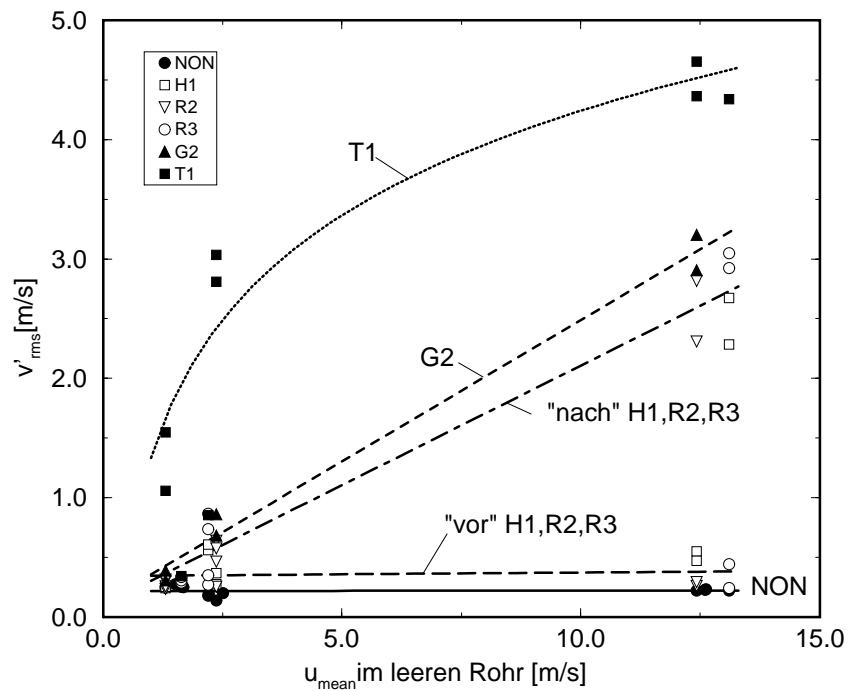


(b) Querrichtung

Abbildung 3.52: rms-Werte der Schwankungsgeschwindigkeiten in Abhängigkeit von der mittleren Geschwindigkeit



(a) axiale Richtung



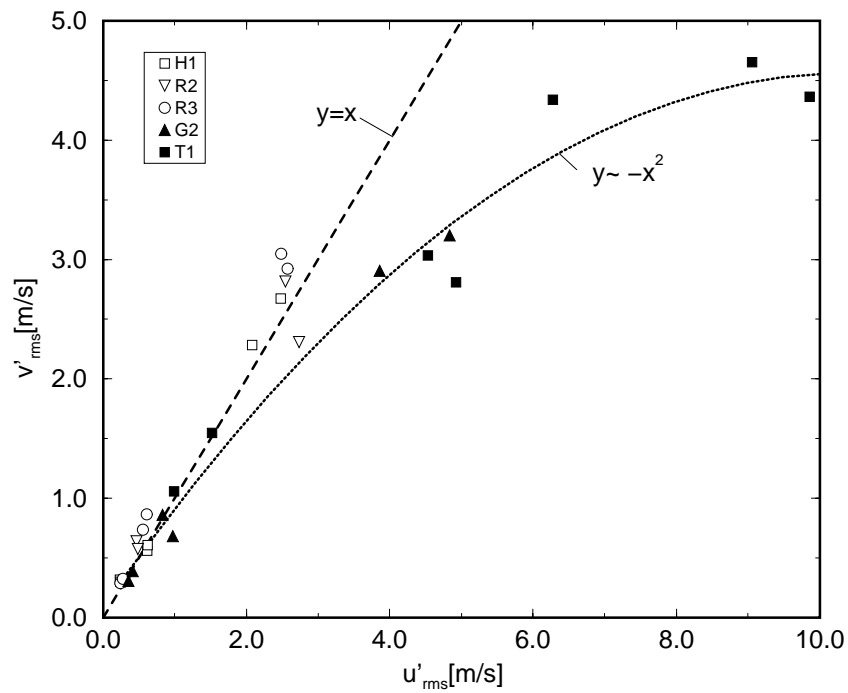
(b) Querrichtung

Abbildung 3.53: rms-Werte der Schwankungsgeschwindigkeiten in Abhängigkeit von der mittleren Geschwindigkeit im leeren Rohr als Referenz

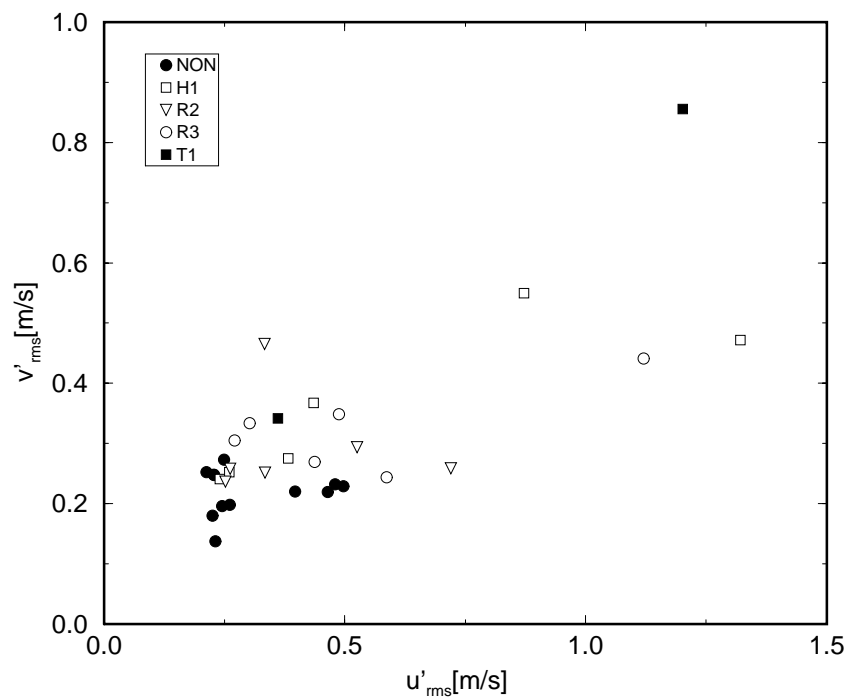
vielmehr die mittlere Geschwindigkeit der die Schwankungen verursachenden, ungestörten Anströmung zum Vergleich herangezogen werden, die, wie bereits weiter oben erläutert, bei den vorliegenden Verbrennungsströmungen nicht ermittelt werden konnte. Daher wurde für die Abbildung 3.53 jeder Meßstelle die mittlere Strömungsgeschwindigkeit einer vergleichbaren Meßstelle im leeren Rohr (Mitte oder Oben) als Referenzgeschwindigkeit zugeordnet. Auch wenn sich, bedingt durch die zwischen 12 und 16 Vol.-% H_2 stark zunehmende mittlere Geschwindigkeit im leeren Rohr, eine große Lücke im Verlauf ergibt, entsteht so ein plausibles Bild von der Wirkung der einzelnen Hindernisse auf den Turbulenzzustand der Strömung. Die Abstufung von Türhindernis T1 zu Gitterhindernis G2 ist so zu erkennen, und es wird deutlich, daß im Nachlauf und Rezirkulationsbereich der Rohr- und Zylinderhindernisse zwar höhere Turbulenzintensitäten gemessen wurden, diese bei gleicher Referenzgeschwindigkeit jedoch stets niedriger liegen als die der Hindernisse T1 und G2.

Für den Vergleich der beiden Komponenten der Turbulenzintensität wurden die beiden in Abbildung 3.52(a) identifizierten Gruppen von Meßpositionen unterschieden. So zeigt Abbildung 3.54(a) alle Meßwerte von Meßpositionen, die der turbulenten Strömung direkt ausgesetzt waren. Es ergab sich bei den Messungen im Nachlauf und Rezirkulationsgebiet der Hindernisse H1, R2 und R3 eindeutig ein linearer Zusammenhang und ähnlich große Schwankungsgeschwindigkeiten in Quer- und Axialrichtung. Bei dem Türhindernis T1 und dem Gitter G2 zeigte sich, daß die Turbulenzintensität in Querrichtung nur bis zu einem gewissen Punkt der axialen folgte. Vermutlich war dieses Verhalten durch die stärkere Dämpfung der turbulenten Querschwankungen aufgrund des Einflusses der Kanalwände bedingt.

Betrachtet man dagegen die Meßpositionen des leeren Rohres, diejenigen des Türhindernisses, bei denen sich der Meßpunkt im Freistrahlfand, sowie die Meßpositionen U und V bzw. U und HU der Rohr- bzw. Zylinderhindernisse, die sich gewissermaßen *vor* dem Hindernis befanden, erkennt man keinen eindeutigen Zusammenhang zwischen den Schwankungsgeschwindigkeiten in Quer- und in Axialrichtung (Abbildung 3.54(b)). Es zeigt sich lediglich, daß die Turbulenzintensität an diesen Stellen in der freien Strömung sehr beschränkt bleibt.



(a) im turbulenten Bereich



(b) bei „freier“ Anströmung

Abbildung 3.54: Vergleich der Komponenten der Schwankungsgeschwindigkeiten

3.3.3 Einfluß der Turbulenz auf die Flammengeschwindigkeit und turbulente Brenngeschwindigkeit

Ardey [Ard98] gibt als eines der Kriterien zur Bewertung des Hinderniseinflusses auf die Ausbreitung turbulenter Wasser-Luft-Flammen die maximale Flammengeschwindigkeit an, die hinter den Strömungshindernissen auftritt. In Abbildung 3.55 sind die von ihm ermittelten Flammengeschwindigkeiten in Abhängigkeit von der H_2 -Konzentration für alle Hindernisse, die im Rahmen des Forschungsprojektes untersucht wurden, dargestellt.

Für die Bewertung des Turbulenzeinflusses auf die globale Ausbreitung der H_2 -Luft-Flammen war es notwendig, die in den vorangegangenen Abschnitten dargestellten Turbulenzmeßergebnisse zu den gleichzeitig erfaßten integralen Meßgrößen, insbesondere der Flammengeschwindigkeit, in Bezug zu setzen. Dabei stellte sich die Frage, inwieweit die lokalen Strömungsgeschwindigkeiten, die mittels LDA gemessen wurden, mit charakteristischen integralen Meßwerten in Verbindung gebracht werden können. Beispiels-

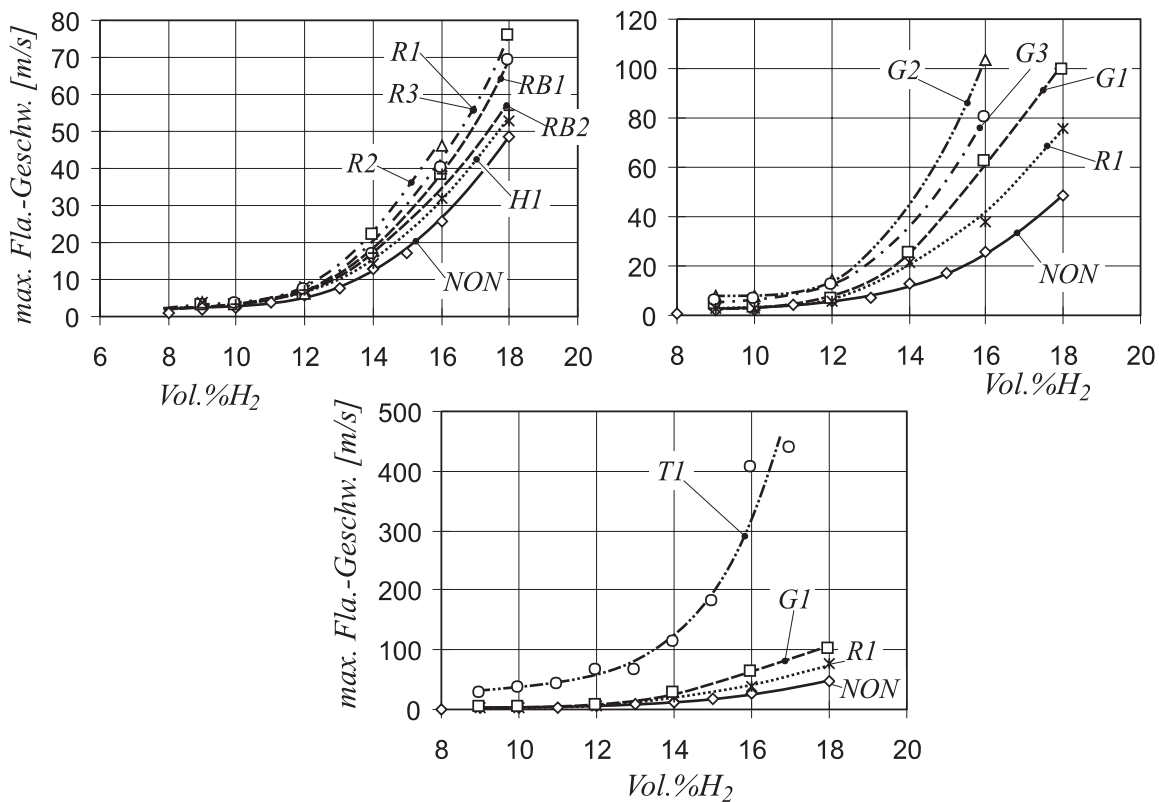
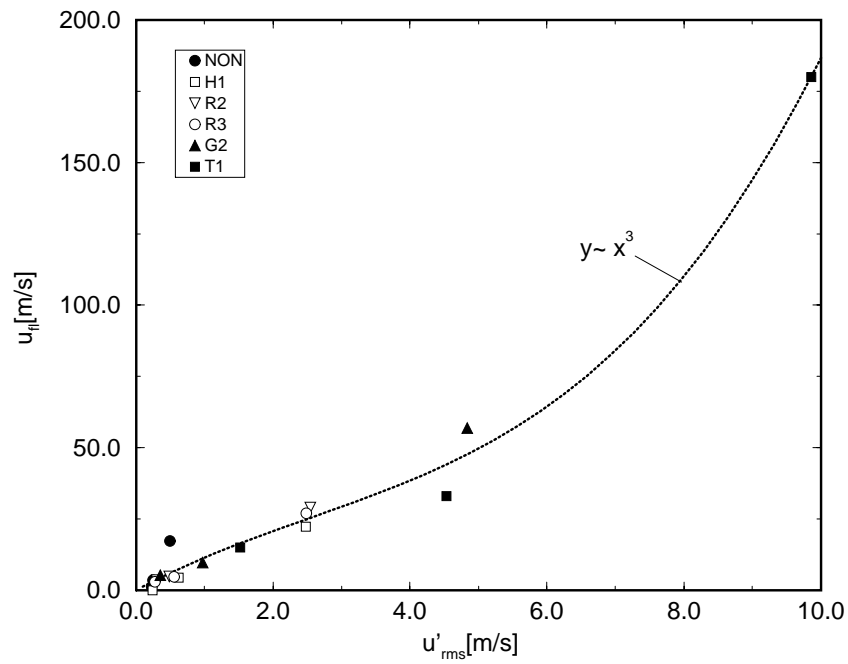
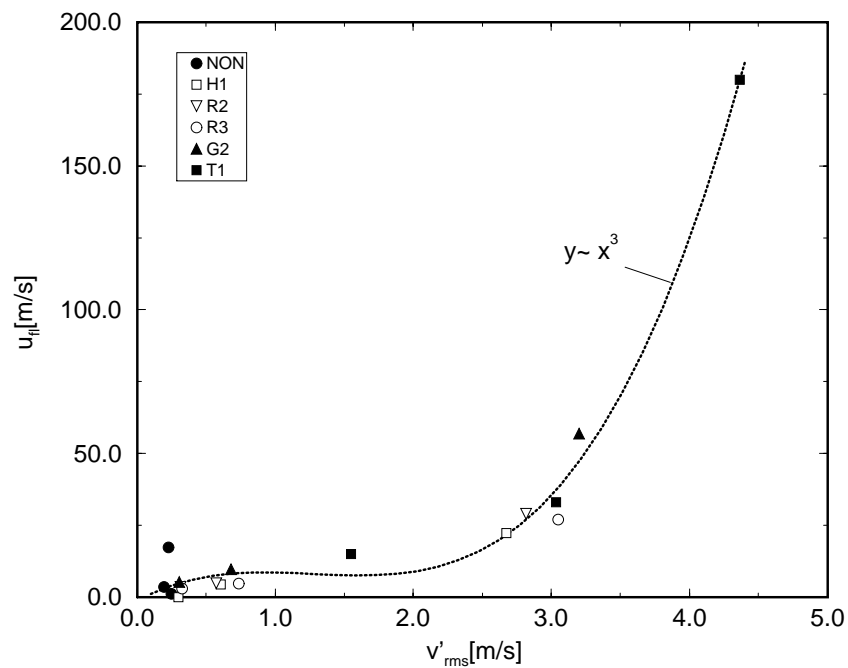


Abbildung 3.55: Maximale Flammengeschwindigkeit hinter den Hindernissen im Vergleich zur Flammengeschwindigkeit ohne Hindernis (aus Ardey [Ard98])



(a) axiale Richtung



(b) Querrichtung

Abbildung 3.56: Lokale Flammengeschwindigkeit in Abhängigkeit von der Turbulenzintensität

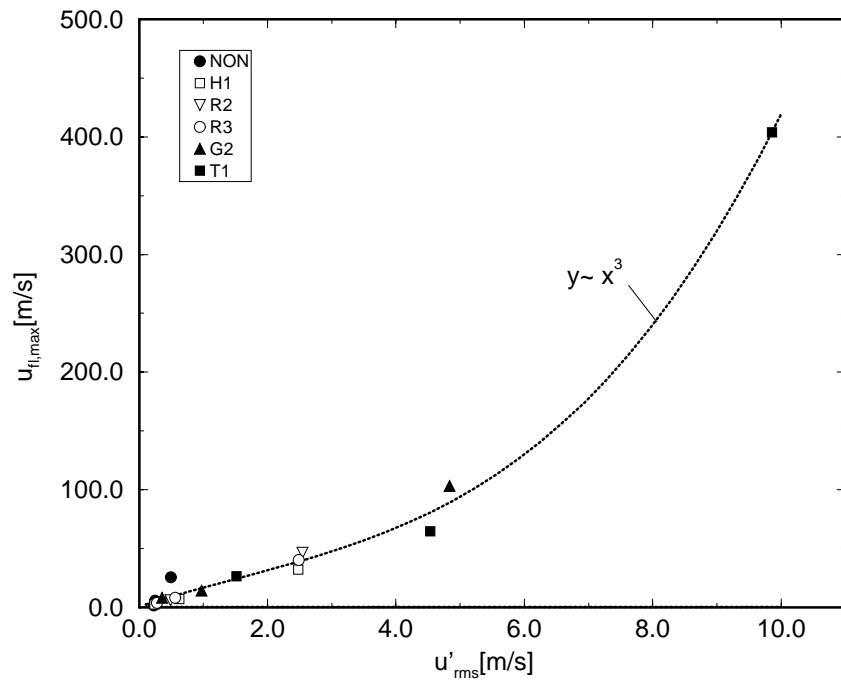
weise wurde die Turbulenzintensität im Bereich des Hindernisses in einem definierten Zeitintervall vor der Flammenankunft bestimmt. Die maximale Flammengeschwindigkeit, die von Ardey [Ard98] als integraler Meßwert zur Charakterisierung der Hinderniswirkung herangezogen wird, trat jedoch erst stromabwärts vom Hindernis in einem gewissen Abstand von der LDA-Meßstelle auf. Im folgenden wird gezeigt, daß die maximal beobachteten Flammengeschwindigkeiten trotzdem sinnvoll mit den lokalen Geschwindigkeitsmessungen in Verbindung gebracht werden konnten.

In Abbildung 3.56 ist der Vergleich der lokalen Flammengeschwindigkeit im Bereich der jeweiligen LDA-Meßposition, die aus den MuSCET-Daten bestimmt wurden, und den aus den LDA-Messungen bestimmten Turbulenzintensitäten dargestellt. Man erkennt, daß eine kubische Ausgleichskurve die Werte zufriedenstellend approximiert. Abbildung 3.57 zeigt den gleichen Zusammenhang für die *maximale* Flammengeschwindigkeit. Man erkennt, daß prinzipiell ein ähnlicher Zusammenhang besteht. Die Korrelation der beobachteten mittleren Hauptströmungsgeschwindigkeiten mit den integral bestimmten Flammengeschwindigkeiten, die in Abbildung 3.58 dargestellt sind, zeigte ebenfalls, daß sich die integralen Größen ähnlich wie die lokalen Größen verhielten. Hier besteht ein quadratischer Zusammenhang zwischen diesen beiden Größen.

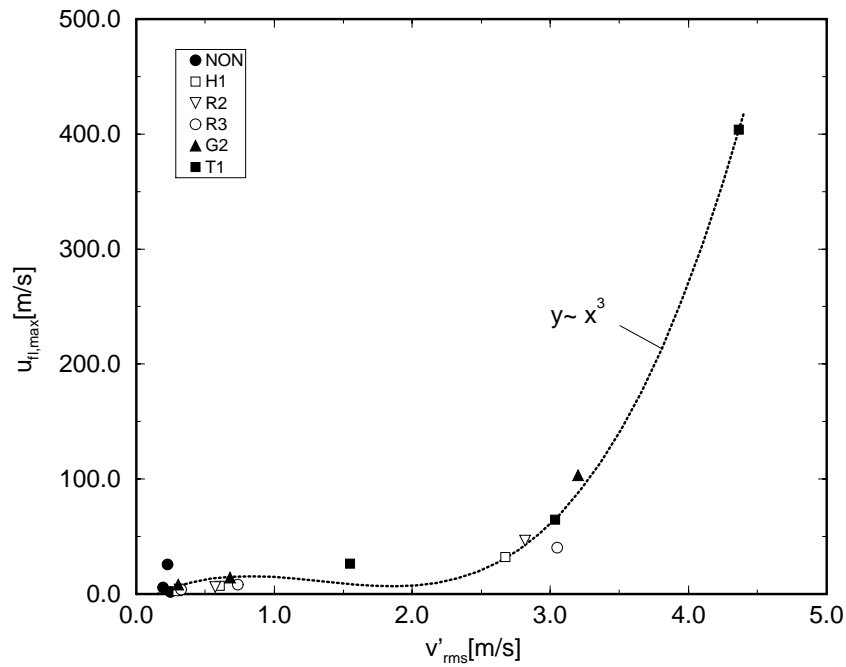
Loesel Sitar et al. [LSCG95] untersuchten in einer geschlossenen Brennkammer, in der mittels einer bewegten Lochplatte ein definiertes Turbulenzfeld generiert wurde, den Zusammenhang zwischen Turbulenzintensität und turbulenter Brenngeschwindigkeit. Sie bestimmten die Schwankungsgeschwindigkeiten jedoch aus dem durch Windkanaluntersuchungen ermittelten Zusammenhang zwischen den Lochdurchmessern der Lochplatte, der Bewegungsgeschwindigkeit der Platte und der Zeit zwischen der Plattenbewegung und der Zündung. Sie geben das in Abbildung 3.59 dargestellte Diagramm und darin auch ein entsprechendes Brenngesetz an:

$$\frac{s_t}{s_l} = 1 + \frac{u'}{s_l}.$$

Beauvais [Bea94] gab für Messungen in periodischen Hindernisanordnungen

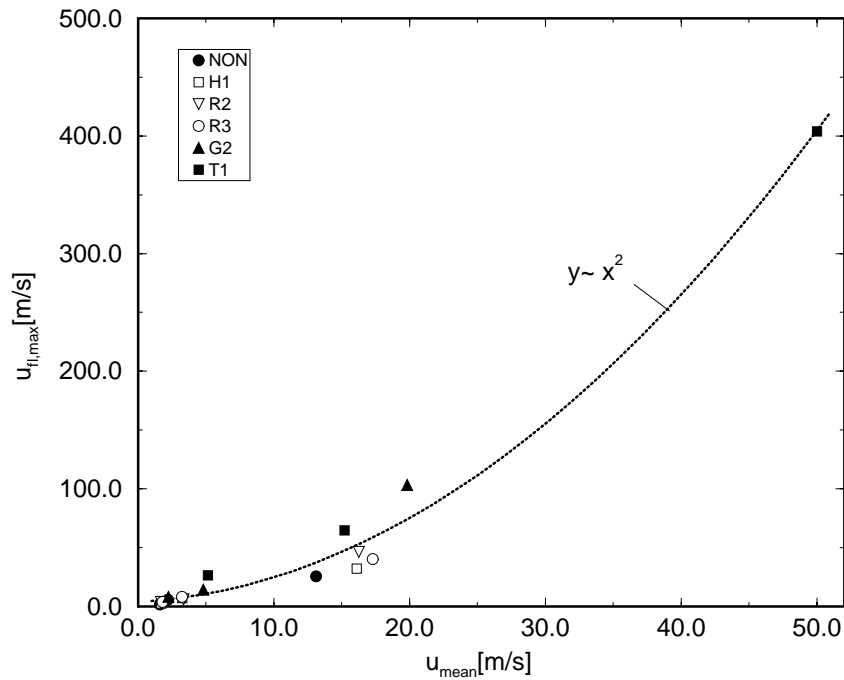


(a) axiale Richtung

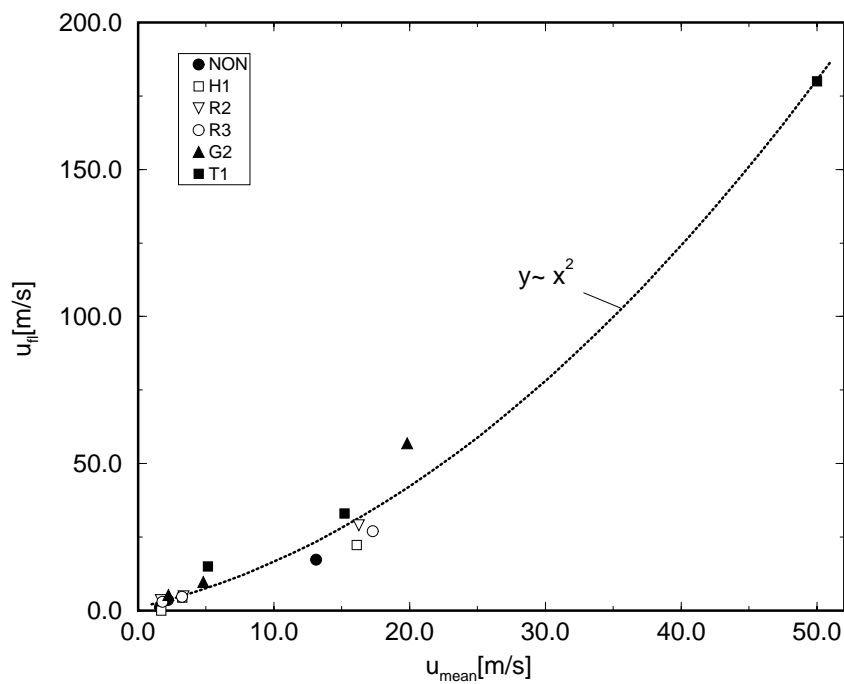


(b) Querrichtung

Abbildung 3.57: Maximale Flammgeschwindigkeit in Abhängigkeit von der Turbulenzintensität



(a) maximale Flammengeschwindigkeit



(b) lokale Flammengeschwindigkeit

Abbildung 3.58: Maximale und lokale Flammengeschwindigkeit in Abhängigkeit von der mittleren Hauptströmungsgeschwindigkeit

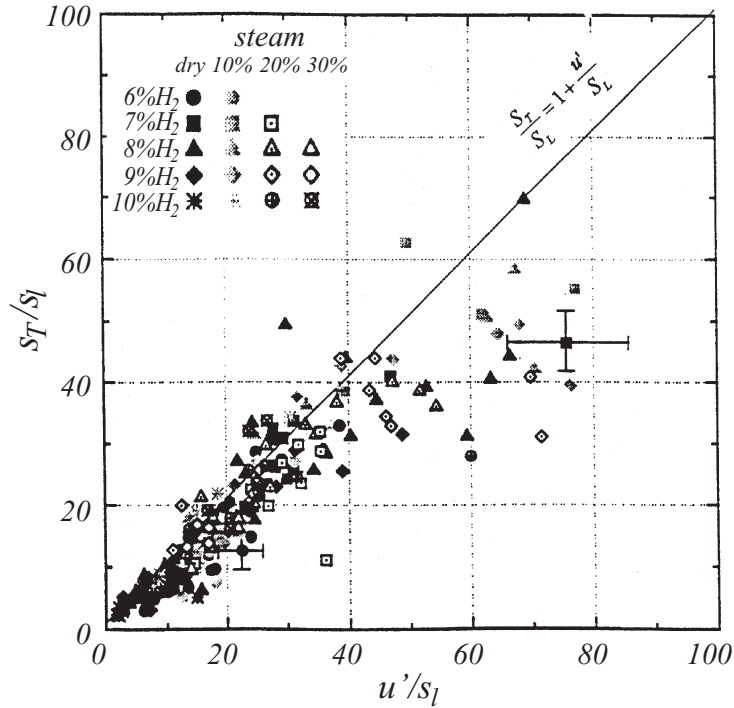


Abbildung 3.59: Turbulente Brenngeschwindigkeit in Abhängigkeit von der Turbulenzintensität, Messungen von Loesel Sitar et al. [LSCG95]

das folgende Brenngesetz an:

$$\frac{s_t}{s_l} = 1 + b \left[\sqrt{\frac{L}{\delta_l} \left(\sqrt{\frac{u'}{s_l} + 1} - 1 \right)} - c \left(\frac{u'}{s_l} \right)^2 \right].$$

Aus dem in Abbildung 3.58(b) dargestellten Zusammenhang zwischen lokaler Flammgeschwindigkeit u_{fl} und mittlerer Hauptströmungsgeschwindigkeit u_{mean} am Hindernis konnte auch für die vorliegenden Untersuchungen die turbulente Brenngeschwindigkeit $s_t = u_{fl} - u_{mean}$ abgeschätzt werden. Unter der Annahme, daß die Turbulenzintensität in Richtung der Tiefe der Versuchsstrecke w'_{rms} der in Richtung der Höhe v'_{rms} gleich ist, wurde zudem aus den Komponenten u'_{rms} und v'_{rms} der Turbulenzintensität der Betrag der Turbulenzintensität berechnet:

$$u' = \sqrt{(u'_{rms})^2 + 2(v'_{rms})^2}.$$

Nach Normierung der turbulenten Brenngeschwindigkeit und der Turbulenzintensität mit der laminaren Flammgeschwindigkeit ließen sich die

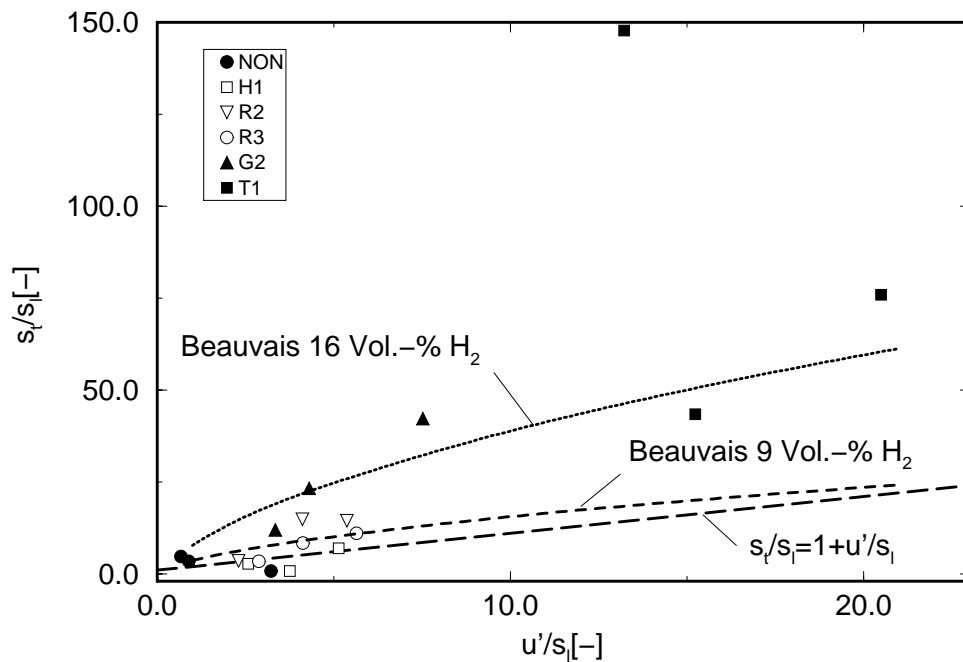


Abbildung 3.60: Turbulente Brenngeschwindigkeit in Abhängigkeit von der Turbulenzintensität

vorliegenden Messergebnisse der mit denen von Loesel Sitar et al. vergleichen (s. Abbildung 3.60).

Aus der Darstellung wird deutlich, daß der von Loesel Sitar et al. angegebene Zusammenhang die turbulente Brenngeschwindigkeit für die vorliegenden Messungen zu niedrig berechnet. Zurückzuführen ist dies einerseits auf die unterschiedlichen Versuchsanordnungen sowie auf die Art wie die Turbulenzintensität bestimmt wurde. Das von Loesel Sitar et al. angegebene u' bezeichnet aufgrund der Art der Bestimmung die Turbulenzintensität zum Zeitpunkt der Zündung, während bei den vorliegenden Untersuchungen die Turbulenzintensität unmittelbar vor der Flammenfront lokal gemessen wurde.

Beauvais [Bea94] bestimmte die Turbulenz in seiner Arbeit ebenfalls lokal mit einem LDA-System. Mit Hilfe des von ihm angegebenen Brenngesetzes konnten für diskrete Konzentrationen die in Abbildung 3.60 eingezeichneten Kurven berechnet werden. Die laminare Flammendicke δ_l wurde aus der Beziehung

$$\delta_l = \frac{\nu}{s_l}$$

bestimmt, wobei s_l anhand einer von Ardey [Ard98] angegebenen Regressionsformel für Meßwerte der laminaren Brenngeschwindigkeit bestimmt wurde. Für den Faktor b wurde, im Gegensatz zu dem von Beauvais angegebenen Wert von 0,5, der Wert 0,53 verwendet, für den die beste Übereinstimmung mit den Daten von Abdel-Gayed und Bradley [AGB89] und Koroll et al. [KKB93] erreicht wird. Als charakteristische Länge L wurden dabei 10% der Kanalhöhe der MuSCET-Anlage ($\approx 0.03m$) als Abschätzung für die Größe des integralen turbulenten Längenmaßes verwendet. Für diesen Wert zeigen die beiden Kurven für 16 Vol.-% H_2 und 9 Vol.-% H_2 in Abbildung 3.60, daß das Brenngesetz von Beauvais auch die Meßwerte der vorliegenden Arbeit sehr gut approximiert. In diesem Zusammenhang wird auf LDA-Messungen der Turbulenzintensität von Jordan [Jor99] hingewiesen. Er fand für Meßergebnisse an Blendenhindernissen mit sehr großer Blockierrate ebenfalls eine gute Übereinstimmung mit dem Brenngesetz von Beauvais.

4 Numerische Simulation turbulenter Verbrennungen

4.1 Überblick und Problemstellung

In Abschnitt 2.1 wurde dargestellt, wie regellose turbulente Vorgänge durch statistische Mittelung und Betrachtung mittlerer Größen für ingenieurmäßige Fragestellungen zugänglich gemacht werden können. Aus experimentellen Untersuchungen wird unmittelbar deutlich, daß für relevante Aussagen nicht die Kenntnis der momentanen räumlichen Verteilung einer Größe von Interesse ist, sondern, wie beispielsweise im Falle von Belastungen durch Explosionen, deren integrale Wirkung. Daher ist es nur begrenzt sinnvoll, Berechnungen mit einer feinen Zeitauflösung durchzuführen, da diese mit einem hohen Aufwand verbunden sind. Im Falle der numerischen Simulationen von turbulenten Strömungsvorgängen läßt sich anhand von Aufwandsabschätzungen nachweisen, daß für technische Probleme nur eine statistische Betrachtungsweise, d.h. die Lösung der zeitgemittelten Gleichungen, in Frage kommt.

Würde man den Weg der direkten numerischen Simulation (d.h. ohne Zeitmittelung) gehen, müßten sämtliche Längenmaße der Turbulenz in dem eingesetzten numerischen Berechnungsverfahren durch eine ausreichende Auflösung erfaßt werden. Durch einen Vergleich der Kolmogorovschen Längenmaße mit charakteristischen Abmessungen eines Strömungsproblems läßt sich die hierfür notwendige Gesamtzahl N_G von Gitterpunkten für alle drei Raumrichtungen abschätzen. Abhängig von der mittleren turbulenten Reynoldszahl Re ergibt sich

$$N_G \sim (Re)^{\frac{9}{4}}.$$

Berücksichtigt man, daß die betrachteten Probleme Reynoldszahlen von 10^6 und mehr aufweisen können, wird durch Größenbetrachtungen für N_G deutlich, daß die Limitationen selbst der schnellsten und größten verfügbaren Computersysteme, hinsichtlich Speicherplatz und Rechenzeit, die direkte numerische Simulation für technisch relevante Berechnungsgebiete noch auf lange Sicht nicht zulassen werden.

Im Falle der Simulation turbulenter Verbrennungsvorgänge kommt erschwerend hinzu, daß nicht nur sehr kleine Längen– sondern auch unterschiedlichste Zeitskalen durch das numerische Verfahren aufgelöst werden müssen. In Abschnitt 2.3 wurde verdeutlicht, daß die involvierten chemischen Zeitmaßstäbe zum Teil deutlich kleiner sein können als die physikalischen, so daß die statistische Behandlung turbulenter Strömungen durch Lösung der zeitgemittelten Gleichungen den einzigen möglichen Weg darstellt, Strömungsberechnungen praktisch zu realisieren. Aufgrund der starken Nichtlinearität der Terme, die den chemischen Umsatz beschreiben, ergibt sich jedoch ähnlich dem bekannten Schließungsproblem bei der Turbulenzmodellierung ein zusätzliches Schließungsproblem, welches die turbulente Reaktionsrate betrifft. Ein Ziel der vorliegenden Arbeit war es daher auch, einen Ansatz zur Modellierung der turbulenten Reaktionsrate zu entwickeln und in ein bestehendes Strömungssimulationsprogramm zu integrieren.

4.1.1 Erhaltungsgleichungen

Schreibweise

Grundlage für die numerische Simulation von Strömungsvorgängen sind die strömungsmechanischen Grundgleichungen, die den Transport von Masse, Impuls und Energie beschreiben, sowie Zustandsgleichungen und Beziehungen für die Stoffeigenschaften des betrachteten Fluids. Bei Verbrennungsvorgängen muß dieser Satz an Gleichungen erweitert werden, um die verschiedenen beteiligten chemischen Spezies und deren Umsetzung berücksichtigen zu können. Im folgenden wird zur Vereinfachung der Schreibweise häufig von einer Summationskonvention ähnlich der Einsteinschen aus der kartesischen Tensorrechnung Gebrauch gemacht. Das totale Differential einer Größe φ :

$$\varphi = \varphi(x_1, x_2, x_3, t) = \varphi(x_i, t), \quad i = 1, 2, 3,$$

ist beispielsweise gegeben durch

$$d\varphi = \frac{\partial\varphi}{\partial t} dt + \frac{\partial\varphi}{\partial x_1} dx_1 + \frac{\partial\varphi}{\partial x_2} dx_2 + \frac{\partial\varphi}{\partial x_3} dx_3$$

$$= \frac{\partial \varphi}{\partial t} dt + \sum_{i=1}^3 \frac{\partial \varphi}{\partial x_i} dx_i \equiv \frac{\partial \varphi}{\partial t} dt + \frac{\partial \varphi}{\partial x_i} dx_i.$$

Treten also gleiche Indizes für die Koordinatenrichtung in einem Produkt auf, wird über alle drei Richtungen aufsummiert. Soll in Einzelfällen nicht summiert werden, wird dies durch unterstrichene Indizes gekennzeichnet. $u_i x_i$ bezeichnet so das Produkt der Komponenten in Koordinatenrichtung i der Vektoren und nicht das Skalarprodukt $\vec{u} \cdot \vec{x}$.

Chemische Spezies werden durch griechische Buchstaben als Indizes unterschieden und eine Summation wird hierfür explizit angegeben. Ohne Index beziehen sich die jeweiligen Größen auf Eigenschaften des Gemisches.

Definitionen für Mehrstoffsysteme

Zur Beschreibung eines Gemisches aus mehreren Spezies werden zusätzliche Größen notwendig, die die Zusammensetzung kennzeichnen. Betrachtet man ein Gemisch aus N Spezies, so bezeichnet

$$m_\alpha = M_\alpha n_\alpha$$

die Masse der Spezies α im Gemisch, die sich als Produkt aus molarer Masse M_α und Stoffmenge n_α ergibt.

Die Massenkonzentration (oder Partialdichte) bezieht m_α auf das Volumen, das das Gesamtgemisch einnimmt:

$$\rho_\alpha = \frac{m_\alpha}{V},$$

während der Massenbruch Y_α die Masse der Spezies α in Bezug zur Gesamtmasse setzt:

$$Y_\alpha = \frac{m_\alpha}{m} = \frac{\rho_\alpha}{\rho}.$$

Da $m = \sum_{\alpha=1}^N m_\alpha$ ist, folgt $\sum_{\alpha=1}^N Y_\alpha = 1$.

Ähnlich der Massenkonzentration kann die molare Konzentration angegeben werden als

$$C_\alpha = \frac{n_\alpha}{V} = \frac{\rho_\alpha}{M_\alpha},$$

wobei als Molenbruch die Molmenge n_α bezogen auf die gesamte Stoffmenge des Gemisches bezeichnet wird:

$$X_\alpha = \frac{n_\alpha}{n} = \frac{C_\alpha}{C}.$$

Wiederum gilt $n = \sum_{\alpha=1}^N n_\alpha$ und damit $\sum_{\alpha=1}^N X_\alpha = 1$.

Bezeichnet man mit M die molare Masse des Gemisches, so gilt

$$M = \sum_{\alpha=1}^N X_\alpha M_\alpha = \frac{1}{\sum_{\alpha=1}^N Y_\alpha / M_\alpha}.$$

Der Zusammenhang zwischen X_α und Y_α kann damit angegeben werden als

$$Y_\alpha = \frac{X_\alpha M_\alpha}{\sum_{\alpha=1}^N X_\alpha M_\alpha} = X_\alpha \frac{M_\alpha}{M} \quad \text{und} \quad X_\alpha = \frac{Y_\alpha / M_\alpha}{\sum_{\alpha=1}^N Y_\alpha / M_\alpha} = Y_\alpha \frac{M}{M_\alpha}.$$

Für ein ideales Gas gilt die thermische Zustandsgleichung idealer Gase. Nachdem sich ein Gemisch idealer Gase ebenfalls wie ein ideales Gas verhält, gilt:

$$p = \frac{\rho R_m T}{M} = \rho R_m T \sum_{i=1}^N \frac{Y_\alpha}{M_\alpha}. \quad (4.1.1)$$

Bezeichnet man den Partialdruck der Spezies α mit

$$p_\alpha = \frac{\rho_\alpha R_m T}{M_\alpha},$$

so gilt für ideale Gase

$$\frac{V_\alpha}{V} = \frac{p_\alpha}{p} = \frac{\rho_\alpha M}{M_\alpha \rho} = \frac{C_\alpha}{C} = X_\alpha,$$

d.h. der Volumenanteil der Spezies am Gesamtvolumen entspricht dem Molenbruch.

Chemische Reaktionen sind gekennzeichnet durch das stöchiometrische Massenverhältnis r_f bzw. das stöchiometrische Molverhältnis ν . r_f gibt dabei an, welche Masse einer Spezies (z.B. Oxidator) mit einer Masseneinheit des Reaktionspartners (z.B. Brennstoff) reagiert. Im Falle eines stöchiometrischen Gemisches entspricht r_f genau dem Verhältnis der Massenbrüche

$$r_f = \frac{Y_{\text{Ox}}}{Y_{\text{Br}}}\Big|_{\text{st.}} . \quad (4.1.2)$$

ν gibt entsprechend an, welche Stoffmengen miteinander reagieren. Wiederum gilt für ein stöchiometrisches Gemisch:

$$\nu = \frac{X_{\text{Ox}}}{X_{\text{Br}}}\Big|_{\text{st.}} . \quad (4.1.3)$$

Zur Charakterisierung von Gemischzusammensetzungen dienen die Luftzahl λ bzw. das Äquivalenzverhältnis Φ . λ gibt an, wie ein Gemisch bezogen auf ein stöchiometrisches Gemisch ($\lambda = 1$) zusammengesetzt ist:

$$\frac{X_{\text{Ox}}}{X_{\text{Br}}} = \lambda \frac{X_{\text{Ox}}}{X_{\text{Br}}}\Big|_{\text{st.}} \quad \text{oder} \quad \lambda = \frac{X_{\text{Ox}}}{X_{\text{Br}}} \frac{1}{\nu} ,$$

während Φ den reziproken Wert darstellt:

$$\Phi = \frac{1}{\lambda} \quad \text{oder} \quad \Phi = \nu \frac{X_{\text{Br}}}{X_{\text{Ox}}} .$$

Bei Verbrennungsreaktionen bezeichnet man überstöchiometrische Gemische ($X_{\text{Br}} > \nu X_{\text{Ox}}|_{\text{st.}}$) als *fett*, unterstöchiometrische ($X_{\text{Br}} < \nu X_{\text{Ox}}|_{\text{st.}}$) als *mager*:

$$\begin{array}{ll} \text{fettes Gemisch:} & \Phi > 1, \quad \lambda < 1 \\ \text{stöchiometrisches Gemisch:} & \Phi = 1, \quad \lambda = 1 \\ \text{magere Gemisch:} & \Phi < 1, \quad \lambda > 1 . \end{array}$$

Im folgenden werden die Erhaltungsgleichungen, die in dem verwendeten Berechnungsprogramm implementiert sind, dargestellt. Für die Herleitung dieser Gleichungen wird auf die einschlägigen Lehrbücher hingewiesen. Eine Herleitung, die auch die verwendete Nomenklatur umfaßt, findet sich auch in [Dur89b].

Massenerhaltung

Die Massenerhaltung in einer Strömung wird durch die Kontinuitätsgleichung beschrieben:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i) = 0. \quad (4.1.4)$$

Da sich bei einem reagierenden Mehrstoffsystem die Zusammensetzung des Gemisches ändern kann, müssen zusätzlich zu Gleichung (4.1.4) noch Erhaltungsgleichungen für die Partialdichten $\rho_\alpha = \rho Y_\alpha$ formuliert werden:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho Y_\alpha) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i Y_\alpha) = -\frac{\partial}{\partial x_i} (\rho_\alpha v_{\alpha,i}) + w_\alpha, \quad i = 1, 2, \dots, N-1 \quad (4.1.5)$$

Aufgrund der Bedingung $\sum_{\alpha=1}^N Y_\alpha = 1$ genügt es dabei, wie oben angedeutet, $N-1$ Gleichungen zusammen mit der Kontinuitätsgleichung zu betrachten. $v_{\alpha,i}$ bezeichnet die Diffusionsgeschwindigkeit der Spezies α in Koordinatenrichtung i , die sich aus drei Anteilen – normale Diffusion, Thermodiffusion (*Soret*-Effekt) und Druckdiffusion – zusammensetzt. Bei Verbrennungsprozessen spielt letztere eine untergeordnete Rolle und die Thermodiffusion ist nur bei niedrigen Temperaturen von Bedeutung. In der vorliegenden Arbeit werden diese beiden Thermo- und Druckdiffusion daher vernachlässigt und die normale Diffusion durch das Ficksche Gesetz wie folgt beschrieben:

$$\rho_\alpha v_{\alpha,i} = \rho_\alpha (v_{\alpha_d,i} + v_{\alpha_T,i} + v_{\alpha_p,i}) \approx \rho_\alpha v_{\alpha_d,i} = -\rho \mathcal{D}_\alpha \frac{\partial Y_\alpha}{\partial x_i} = -\Gamma_\alpha \frac{\partial Y_\alpha}{\partial x_i}.$$

\mathcal{D}_α bzw. Γ_α bezeichnen in dieser Gleichung die Diffusivität respektive die Diffusionskonstante der Spezies α im Gasgemisch.

w_α beschreibt in Gleichung (4.1.5) die zeitliche Veränderung von ρ_α durch chemische Umsetzung der einzelnen Spezies. Dieser Term wird in den folgenden Abschnitten eingehend betrachtet.

Impulserhaltung

Durch die Betrachtung eines Kräftegleichgewichtes an einem Fluidelement erhält man die vektorielle Impulserhaltungsgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j u_i) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} - \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + G_i + S_u. \quad (4.1.6)$$

τ_{ij} bezeichnet dabei den diffusiven Transport von Impuls und ist für Newtonsche Fluide gegeben durch

$$\tau_{ij} = -\eta \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \frac{2}{3} \eta \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij}. \quad (4.1.7)$$

δ_{ij} stellt den Einheitstensor dar, der auch der Summationskonvention unterliegt. Die beiden Quellterme G_i und S_u stehen für Volumenkräfte, die aufgrund des Auftriebs (G_i) oder anderer Effekte (S_u), die hier nicht betrachtet werden ($S_u = 0$), auftreten können. Der Auftriebsterm soll im folgenden zunächst ebenfalls nicht betrachtet werden. Für langsame Verbrennungsvorgänge spielt der Auftrieb jedoch eine zentrale Rolle, so daß Auftriebseinflüsse später (Abschnitt 5.1.6) separat betrachtet werden.

Energieerhaltung

Die Energieerhaltungsgleichung wird in Form einer Transportgleichung für die Enthalpie eines Systemes angegeben. Für ein nicht reagierendes System lautet diese

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho H_g) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i H_g) = \frac{\partial p}{\partial t} - \frac{\partial q_i}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i}(u_j \tau_{ij}) + S_h. \quad (4.1.8)$$

Der letzte Term umfaßt dabei Quellen, wie beispielsweise Energietransport durch Strahlung u.ä., die hier nicht berücksichtigt werden ($S_h = 0$). H_g bezeichnet die Gesamtenthalpie:

$$H_g = h_s + \frac{u_i^2}{2} = \sum_{\alpha=1}^N Y_\alpha h_{\alpha,s} + \frac{u_i^2}{2}.$$

Die Multiplikation von Gleichung (4.1.6) mit u_i ergibt unter Berücksichtigung der Kontinuitätsgleichung eine Transportgleichung für die kinetische Energie:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\rho \frac{1}{2} u_i^2 \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho u_j \frac{1}{2} u_i^2 \right) = -u_i \frac{\partial p}{\partial x_i} - u_i \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j},$$

so daß durch Subtraktion dieser Gleichung von (4.1.8) folgt:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho h_s) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i h_s) = \frac{\partial p}{\partial t} + u_i \frac{\partial p}{\partial x_i} - \frac{\partial q_i}{\partial x_i} - \tau_{ij} \frac{\partial u_j}{\partial x_i}. \quad (4.1.9)$$

Der diffusive Transport q_i von Energie setzt sich aus der Wärmeleitung und einem durch den diffusiven Stofftransport bedingten Anteil zusammen. Anteile, die durch den sogenannten *Dufour*-Effekt entstehen, einem zur Thermodiffusion beim Stofftransport reziproken Transport von Wärme aufgrund von Konzentrationsgradienten, werden vernachlässigt. Die Wärmeleitung kann durch das Fouriersche Gesetz angegeben werden, so daß gilt:

$$q_i = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} - \sum_{\alpha=1}^N \Gamma_{\alpha} h_{\alpha,s} \frac{\partial Y_{\alpha}}{\partial x_i}.$$

Für ein reagierendes Mehrstoffsystem muß Gleichung (4.1.9) zudem um einen Term ergänzt werden, der die bei der chemischen Reaktion umgesetzte Energie (Bildungsenthalpie $h_{\alpha,f}$) berücksichtigt:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho h_s) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i h_s) &= \frac{\partial p}{\partial t} + u_i \frac{\partial p}{\partial x_i} \\ &+ \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} + \sum_{\alpha=1}^N \Gamma_{\alpha} h_{\alpha,s} \frac{\partial Y_{\alpha}}{\partial x_i} \right) - \tau_{ij} \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \sum_{\alpha=1}^N h_{\alpha,f} w_{\alpha}. \end{aligned} \quad (4.1.10)$$

Multipliziert man Gleichung (4.1.5) mit $h_{\alpha,f}$ und summiert über alle N Spezies, erhält man

$$\sum_{\alpha=1}^N h_{\alpha,f} \left[\frac{\partial}{\partial t} (\rho Y_{\alpha}) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i Y_{\alpha}) - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\Gamma_{\alpha} \frac{\partial Y_{\alpha}}{\partial x_i} \right) \right] = \sum_{\alpha=1}^N h_{\alpha,f} w_{\alpha}.$$

In Gleichung (4.1.10) eingesetzt, erhält man mit diesem Ausdruck eine Transportgleichung für die chemische Enthalpie h , die zusätzlich zu h_s die Bildungsenthalpie aller Spezies beinhaltet:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\rho \left(h_s + \sum_{\alpha=1}^N h_{\alpha,f} Y_{\alpha} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\rho u_i \left(h_s + \sum_{\alpha=1}^N h_{\alpha,f} Y_{\alpha} \right) \right] = \frac{\partial p}{\partial t} + u_i \frac{\partial p}{\partial x_i} - \tau_{ij} \frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} + \sum_{\alpha=1}^N \Gamma_{\alpha} (h_{\alpha,s} + h_{\alpha,f}) \frac{\partial Y_{\alpha}}{\partial x_i} \right).$$

Bezeichnet man daher die chemische Enthalpie der einzelnen Spezies mit $h_{\alpha} = h_{\alpha,s} + h_{\alpha,f}$, gilt

$$h = h_s + \sum_{\alpha=1}^N h_{\alpha,f} Y_{\alpha} = \sum_{\alpha=1}^N Y_{\alpha} (h_{\alpha,s} + h_{\alpha,f}) = \sum_{\alpha=1}^N Y_{\alpha} h_{\alpha}$$

und somit

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho h) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i h) = \frac{\partial p}{\partial t} + u_i \frac{\partial p}{\partial x_i} - \tau_{ij} \frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} + \sum_{\alpha=1}^N \Gamma_{\alpha} h_{\alpha} \frac{\partial Y_{\alpha}}{\partial x_i} \right). \quad (4.1.11)$$

Der Unterschied dieser Form der Energiegleichung zu Gleichung (4.1.10) ist, daß kein Quellterm berücksichtigt werden muß, und der Strömungsvorgang hinsichtlich der Reaktion auf demselben Enthalpieniveau abläuft. Die Enthalpie, die als Bildungsenthalpie in den Reaktionspartnern gespeichert ist, wird lediglich in *fühlbare Wärme* umgewandelt. Für die numerische Lösung der Gleichung ist diese Darstellung ohne Quellterm von Vorteil.

Die Definition der Enthalpie sowie eine starke Abhängigkeit der Stoffwerte von der Temperatur muß berücksichtigt werden, wenn die Temperatur aus der Enthalpie berechnet werden soll. Für ein ideales Gas ist die statische Enthalpie gegeben durch

$$dh_s = c_p dT \quad \text{und} \quad h_s = \int_{T_0}^T c_p(T) dT = c_p \Big|_{T_0}^T (T - T_0),$$

wobei $c_p|_{T_0}^T$ den Mittelwert von c_p im Bereich zwischen T_0 und T bezeichnet. Mit der spezifischen Wärmekapazität eines Gasgemisches, die sich aus den Wärmekapazitäten der einzelnen Spezies berechnen läßt:

$$c_p = \sum_{\alpha=1}^N Y_{\alpha} c_{p,\alpha}$$

kann die Temperatur also aus der chemischen Enthalpie h iterativ wie folgt bestimmt werden:

$$T = \frac{h - \sum_{\alpha=1}^N Y_{\alpha} h_{\alpha,f} + \sum_{\alpha=1}^N Y_{\alpha} c_{p,\alpha} |_{T_0}^T T_0}{\sum_{\alpha=1}^N Y_{\alpha} c_{p,\alpha} |_{T_0}^T}.$$

Favre-Mittelung der Gleichungen

In Abschnitt 2.1 waren die Definitionen angegeben worden, mit Hilfe derer die gemittelten Transport- und Zustandsgleichungen erhalten werden können. Spaltet man alle Größen bis auf Druck und Dichte in Favre-Mittelwert und -Schwankung auf und mittelt die Gleichungen über die Zeit, ergeben sich die entsprechenden Favre-gemittelten Gleichungen. Für den Fall der thermischen Zustandsgleichung (4.1.1) ergibt sich für die zeitlich variablen Anteile beispielsweise

$$\begin{aligned} \overline{\rho T Y_{\alpha}} &= \overline{\rho(\tilde{T} + T'')(Y_{\alpha} + Y_{\alpha}'')} \\ &= \overline{\rho\tilde{T}\tilde{Y}_{\alpha} + \rho\tilde{T}Y_{\alpha}'' + \rho\tilde{Y}_{\alpha}T'' + \rho T''Y_{\alpha}''} \\ &= \overline{\rho\tilde{T}\tilde{Y}_{\alpha}} + \overline{\rho\tilde{T}Y_{\alpha}''} + \overline{\rho\tilde{Y}_{\alpha}T''} + \overline{\rho T''Y_{\alpha}''} \\ &= \overline{\rho}\tilde{T}\tilde{Y}_{\alpha} + \tilde{T}\overline{\rho Y_{\alpha}''} + \tilde{Y}_{\alpha}\overline{\rho T''} + \overline{\rho T''Y_{\alpha}''} \\ &= \overline{\rho}\tilde{T}\tilde{Y}_{\alpha} + \overline{\rho T''Y_{\alpha}''}. \end{aligned} \tag{4.1.12}$$

Die Favre-gemittelte Zustandsgleichung lautet somit

$$\bar{p} = R_m \sum_{\alpha=1}^N \frac{\overline{\rho}\tilde{T}\tilde{Y}_{\alpha} + \overline{\rho T''Y_{\alpha}''}}{M_{\alpha}},$$

wobei der letzte Term im Zähler der Summe vernachlässigt werden kann. Die analoge Vorgehensweise wird auch auf die Transportgleichungen angewandt. Damit erhält man folgende mittlere Gleichungen:

Kontinuität:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i) = 0. \quad (4.1.13)$$

Spezieserhaltung:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{Y}_\alpha) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{Y}_\alpha) = \\ \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\Gamma_\alpha \frac{\partial \tilde{Y}_\alpha}{\partial x_i} + \Gamma_\alpha \frac{\partial \overline{Y''_\alpha}}{\partial x_i} - \overline{\rho u''_i Y''_\alpha} \right) + \bar{w}_\alpha. \end{aligned} \quad (4.1.14)$$

Der zweite Term in der Klammer auf der rechten Seite dieser Gleichung kann vernachlässigt werden, da Korrelationen mit Schwankungsgrößen für Diffusionsvorgänge meist eine untergeordnete Rolle spielen.

Impulserhaltung:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{u}_i) = - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\tau}_{ij} + \overline{\rho u''_j u''_i}) \quad (4.1.15)$$

In dieser Gleichung wird angenommen, daß gilt

$$\bar{\tau}_{ij} = \tilde{\tau}_{ij} = -\eta \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) + \frac{2}{3} \eta \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij}.$$

Energieerhaltung:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{h}) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{h}) = \frac{\partial \bar{p}}{\partial t} + \tilde{u}_i \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \overline{u''_i \frac{\partial p}{\partial x_i}} \\ + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\lambda \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_i} + \lambda \frac{\partial \overline{T''}}{\partial x_i} - \overline{\rho u''_i h''} \right) - \bar{\tau}_{ij} \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} - \overline{\tau_{ij} \frac{\partial u''_j}{\partial x_i}} \\ + \frac{\partial}{\partial x_i} \sum_{\alpha=1}^N \Gamma_\alpha \left(\tilde{h}_\alpha \frac{\partial \tilde{Y}_\alpha}{\partial x_i} + \overline{h''_\alpha} \frac{\partial \tilde{Y}_\alpha}{\partial x_i} + \tilde{h}_\alpha \frac{\partial \overline{Y''_\alpha}}{\partial x_i} + \overline{h''_\alpha \frac{\partial Y''_\alpha}{\partial x_i}} \right). \end{aligned}$$

Wie bereits zu Gleichung (4.1.14) erwähnt, werden die Korrelationen mit Schwankungsgrößen in den Diffusionstermen wiederum vernachlässigt. Für

niedrige Geschwindigkeiten können zudem etliche Terme vernachlässigt werden, so daß die folgende Gleichung verwendet wird

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{h}) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\bar{\rho}\tilde{u}_i\tilde{h}) = \\ \frac{\partial\bar{p}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\lambda \frac{\partial\tilde{T}}{\partial x_i} - \overline{\rho u_i'' h''} + \sum_{\alpha=1}^N \Gamma_\alpha \tilde{h}_\alpha \frac{\partial\tilde{Y}_\alpha}{\partial x_i} \right). \end{aligned} \quad (4.1.16)$$

Turbulenzmodellierung

In den oben angegebenen, Favre-gemittelten Gleichungen kommen Terme mit Korrelationen von Schwankungsgrößen vor. Im einzelnen sind dies $\overline{\rho u_i'' Y_\alpha''}$ in Gleichung (4.1.14), $\overline{\rho u_i'' u_j''}$ in den Gleichungen (4.1.15) und (4.1.16), sowie $\overline{\rho u_i'' h''}$ und $\overline{u_j'' \tau_{ij}''}$ in Gleichung (4.1.16). Da bei den Berechnungen ausschließlich mittlere Strömungsgrößen verwendet werden, stellen diese Ausdrücke zusätzliche Unbekannte im Gleichungssystem dar, das aufgrund dieser Unbekannten nicht geschlossen ist. Aufgabe der Turbulenzmodellierung ist es, diese Terme in Abhängigkeit von mittleren Strömungsgrößen auszudrücken.

Das in dem in dieser Arbeit verwendeten Berechnungsprogramm implementierte Turbulenzmodell geht hierbei von einem Wirbelviskositätsansatz aus, d.h. es wird angenommen, daß der turbulente Austausch von Impuls entsprechend dem molekularen Impulsaustausch erfolgt. Die Reynoldsspannungen $\overline{\rho u_i'' u_j''}$, werden daher in Analogie zu Gleichung (4.1.7) aus folgender Gleichung berechnet:

$$\overline{\rho u_i'' u_j''} = -\eta_t \left(\frac{\partial\tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial\tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) + \frac{2}{3} \left(\eta_t \frac{\partial\tilde{u}_k}{\partial x_k} + \bar{\rho}\tilde{k} \right) \delta_{ij}. \quad (4.1.17)$$

Die sogenannte turbulente Viskosität wird mit der molekularen Viskosität zu einem Effektivwert zusammengefaßt $\eta_{\text{eff}} = \eta + \eta_t$.

Für den turbulenten Austausch skalarer Größen (z.B. φ) geht man von einem Wirbeldiffusionsansatz aus, der den Term in Abhängigkeit des Gradienten der mittleren Größe ausdrückt:

$$\overline{\rho u_i'' \varphi''} = -\varepsilon_t \frac{\partial\tilde{\varphi}}{\partial x_i}. \quad (4.1.18)$$

ε_t bezeichnet in dieser Gleichung einen Austauschkoefizienten, der vom Turbulenzzustand der Strömung abhängt. Um für diese Größe Werte zu ermitteln, bedient man sich einer Analogie zum molekularen Wärme- und Stofftransport. Im molekularen Fall setzen die Prandtl- und Schmidtzahl den Impuls- und Wärmetransport bzw. Stofftransport in Bezug zueinander:

$$\text{Pr} = \frac{\eta}{\lambda/c_p} = \frac{\nu}{a} \quad \text{und} \quad \text{Sc} = \frac{\eta}{\Gamma} = \frac{\nu}{D},$$

wobei a die Temperaturleitfähigkeit und D die Diffusivität bezeichnen. Der Austauschkoefizient ε_t wird in ähnlicher Weise durch entsprechende empirische turbulente Kennzahlen Pr_t bzw. Sc_t auf die Wirbelviskosität η_t bezogen. Es ergibt sich so:

$$\overline{\rho u_i'' Y_\alpha''} = -\frac{\eta_t}{\text{Sc}_t} \frac{\partial \tilde{Y}_\alpha}{\partial x_i} \quad \text{und} \quad \overline{\rho u_i'' h''} = -\frac{\eta_t}{\text{Pr}_t} \frac{\partial \tilde{h}}{\partial x_i},$$

wobei wiederum durch $\Gamma_{\alpha_{\text{eff}}} = \Gamma_\alpha + \frac{\eta_t}{\text{Sc}_t}$ molekularer und turbulenter Diffusionskoefizient zusammengefaßt werden.

Der Austausch von durch turbulente Schwankungen geleistete Arbeit wird wie folgt approximiert:

$$\frac{\partial \overline{u_i'' \tau_{ij}''}}{\partial x_j} \approx \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\eta \frac{\partial \tilde{k}}{\partial x_k} \right).$$

Man erkennt, daß nun bis auf η_t und \tilde{k} nur noch bekannte Größen in den Gleichungen vorliegen. Zur Schließung dieser verbleibenden beiden Größen verwendet der in dem verwendeten Simulationsprogramm implementierte Ansatz das $k - \varepsilon$ Modell (s. [LS74])⁸. Für \tilde{k} kann eine Transportgleichung aus der Impulsgleichung und Kontinuitätsgleichung hergeleitet werden. Vernachlässigt man Druckdiffusions- und Druckdilatationsterme (vgl. [Wil93]), nimmt diese Gleichung die folgende Form an:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{k}) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{k}) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\Gamma_{\tilde{k}} \frac{\partial \tilde{k}}{\partial x_i} \right) - \overline{\rho u_i'' u_j''} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} - \bar{u}_j \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j} - \bar{\rho} \tilde{\varepsilon}, \quad (4.1.19)$$

⁸Das $k - \varepsilon$ Modell wurde für inkompressible Strömungen entwickelt, kann jedoch auch unverändert für dichte veränderliche Strömungen verwendet werden, wenn $k := \tilde{k}$ und $\varepsilon := \tilde{\varepsilon}$ gesetzt wird.

wobei der Term $\overline{\rho u_i'' u_j''}$ durch Gleichung (4.1.17) gegeben ist. Die Anwendung des k - ε Modells in kompressiblen Fällen führt dazu, daß der vorletzte Ausdruck, die Druckarbeit, vernachlässigt wird. Der Diffusionskoeffizient $\Gamma_{\tilde{k}} = \eta + \frac{\eta_t}{\sigma_{\tilde{k}}}$ wird wiederum abhängig von der turbulenten Viskosität berechnet. Der letzte Term beinhaltet als Senkenterm die Dissipationsrate von \tilde{k}

$$\tilde{\varepsilon} = \nu \overline{\left(\frac{\partial u_i''}{\partial x_j} \frac{\partial u_i''}{\partial x_j} \right)}.$$

Aus den Betrachtungen in Abschnitt 2.2 (Gleichung (2.2.2)) wird deutlich, daß η_t aus einem turbulenten Geschwindigkeits- und Längenmaß abgeschätzt werden kann. Wählt man $k^{\frac{1}{2}}$ als Geschwindigkeitsmaß und $k^{\frac{3}{2}}/\varepsilon$ als Längenmaß, so gilt mit c_μ als Proportionalitätskonstante

$$\eta_t = \rho c_\mu \frac{k^2}{\varepsilon}.$$

Um das Gleichungssystem zu schließen, sind nun noch weitere Betrachtungen notwendig, um $\tilde{\varepsilon}$ zu bestimmen. Launder und Spalding [LS74] geben hierfür eine halbempirische Transportgleichung an:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{\varepsilon}) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{\varepsilon}) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\Gamma_\varepsilon \frac{\partial \tilde{\varepsilon}}{\partial x_i} \right) - \frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{k}} \left(c_{\varepsilon 1} \overline{\rho u_i'' u_j''} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + c_{\varepsilon 2} \bar{\rho} \tilde{\varepsilon} \right)$$

mit $\Gamma_\varepsilon = \eta + \frac{\eta_t}{\sigma_\varepsilon}$ als Diffusionskoeffizient. Mit den in Tabelle 3 angegebenen Werten für die involvierten Konstanten und Gleichung (4.1.17) kann das Gleichungssystem nun geschlossen werden.

Die so im Berechnungsprogramm standardmäßig implementierten Erhaltungsgleichungen sind in Tabelle 4 auf Seite 116 noch einmal zusammenfassend dargestellt.

4.1.2 Chemische Umsetzungsrate und Schließungsproblem

In Gleichung (4.1.22) bezeichnet w_α die chemische Reaktionsrate der Spezies α . Für viele Verbrennungsvorgänge können Reaktionsschemata angegeben werden, die durch eine Vielzahl von Elementarreaktionen den Reaktionsvorgang beschreiben. Für ein Reaktionsschema aus R elementaren

Tabelle 3: Konstanten des $k - \varepsilon$ Turbulenzmodelles

c_μ	$c_{\varepsilon 1}$	$c_{\varepsilon 2}$	$\sigma_{\tilde{k}}$	$\sigma_{\tilde{\varepsilon}}$	Pr_t	Sc_t
0.09	1.44	1.92	1.0	1.3	0.9	Pr_t

Tabelle 4: Implementierte mittlere Zustands- und Erhaltungsgleichungen

$$\bar{p} = \bar{\rho} R_m \tilde{T} \sum_{\alpha=1}^N \frac{\tilde{Y}_\alpha}{M_\alpha} \quad (4.1.20)$$

$$\frac{\partial \bar{p}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i) = 0 \quad (4.1.21)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{Y}_\alpha) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{Y}_\alpha) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\Gamma_{\alpha \text{eff}} \frac{\partial \tilde{Y}_\alpha}{\partial x_i} \right) + \bar{w}_\alpha \quad (4.1.22)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{u}_i) = \\ - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\eta_{\text{eff}} \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \eta_{\text{eff}} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right] + \bar{g}_i \end{aligned} \quad (4.1.23)$$

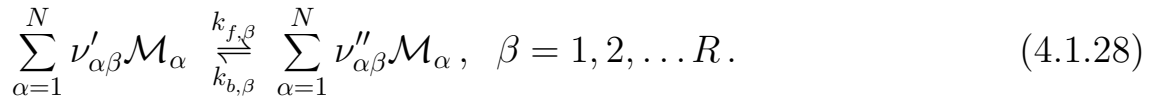
$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{h}) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{h}) = \\ \frac{\partial \bar{p}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\lambda \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_i} + \frac{\eta_t}{\text{Pr}_t} \frac{\partial \tilde{h}}{\partial x_i} + \sum_{\alpha=1}^N \Gamma_\alpha \tilde{h}_\alpha \frac{\partial \tilde{Y}_\alpha}{\partial x_i} \right) \end{aligned} \quad (4.1.24)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{k}) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{k}) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\Gamma_{\tilde{k}} \frac{\partial \tilde{k}}{\partial x_i} \right) + \tilde{P}_k - \bar{\rho} \tilde{\varepsilon} \quad (4.1.25)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{\varepsilon}) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{\varepsilon}) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\Gamma_{\tilde{\varepsilon}} \frac{\partial \tilde{\varepsilon}}{\partial x_i} \right) - \frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{k}} (c_{\varepsilon 1} \tilde{P}_k + c_{\varepsilon 2} \bar{\rho} \tilde{\varepsilon}) \quad (4.1.26)$$

$$\tilde{P}_k = \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} \left[\eta_t \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \left(\eta_t \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} + \bar{\rho} \tilde{k} \right) \delta_{ij} \right] \quad (4.1.27)$$

Einzelreaktionen mit N beteiligten chemischen Spezies, deren chemisches Symbol mit \mathcal{M}_α bezeichnet ist, kann dieses Schema allgemein wie folgt dargestellt werden:



$\nu'_{\alpha\beta}$ und $\nu''_{\alpha\beta}$ sind die ganzzahligen stöchiometrischen Koeffizienten der Spezies α als Reaktionspartner bzw. Produkt in der Reaktion β . Für die im weiteren betrachtete Verbrennung von Wasserstoff H_2 mit Luftsauerstoff O_2 zu Wasserdampf H_2O ergibt sich z.B.⁹



Ein Vergleich mit der allgemeinen Reaktionsgleichung ergibt die in Tabelle 5 dargestellten Werte für die einzelnen Größen. Um die Betrachtung jedoch so allgemein wie möglich zu halten, wird ersatzweise die Reaktion eines beliebigen Brennstoffes Br ($\alpha = 1$) mit einem Oxidator Ox ($\alpha = 2$) zu Reaktionsprodukten Pr ($\alpha = 3$) betrachtet:



Hierfür ist die Zuordnung zwar trivial, jedoch der Vollständigkeit halber auch in Tabelle 5 wiedergegeben.

$k_{f,\beta}$ und $k_{b,\beta}$ in Gleichung (4.1.28) bezeichnen die Geschwindigkeitskoeffizienten der Hin- bzw. Rückreaktion. Diese können in der Form einer Arrheniusgleichung wie folgt ausgedrückt werden:

$$k_\beta = A_\beta T^{n_\beta} e^{-\frac{E_\beta}{R_m T}}. \quad (4.1.31)$$

A_β stellt dabei den Frequenzfaktor, n_β den Temperaturexponenten und E_β die Aktivierungsenergie dar. Diese Größen werden zusammen mit den

⁹Da die Zeitkonstanten der Stickstoffreaktionen im Vergleich zu den übrigen Reaktionen und auch zu den physikalischen Vorgängen sehr lang sind (vgl. Abbildung 2.2), wird der Stickstoffanteil der Luft als inerte Komponente behandelt.

Tabelle 5: Bezeichnungen in den Reaktionsschemata

Schema		H ₂ -Luft	Allgemein	
Anzahl der Reaktionen	R	1	1	$(\beta = 1)$
Anzahl der Komponenten	N	3	3	$(\alpha = 1, 2, 3)$
chemische Symbole	\mathcal{M}_1	H ₂	Br	
	\mathcal{M}_2	O ₂	Ox	
	\mathcal{M}_3	H ₂ O	Pr	
	\mathcal{M}_4	N ₂	–	
molare Masse	M_1	2	M_1	$\left[\frac{\text{kg}}{\text{kmol}} \right]$
	M_2	32	M_2	
	M_3	18	M_3	
	M_4	28	M_4	
stöchiometrische Koeffizienten linke Seite	ν'_{11}	2	1	
	ν'_{21}	1	1	
	ν'_{31}	0	0	
	ν'_{41}	0	0	
stöchiometrische Koeffizienten rechte Seite	ν''_{11}	0	0	
	ν''_{21}	0	0	
	ν''_{31}	2	1	
	ν''_{41}	0	0	

Elementarreaktionen in einem Reaktionsschema angegeben. Die Gesamtreaktionsrate der Spezies α über alle Elementarreaktionen, an denen α beteiligt ist, kann angegeben werden durch

$$w_\alpha = M_\alpha \sum_{\beta=1}^R \left\{ (\nu''_{\alpha\beta} - \nu'_{\alpha\beta}) \left[k_{f,\beta} \prod_{\gamma=1}^N \left(\frac{\rho Y_\gamma}{M_\gamma} \right)^{\nu'_{\gamma\beta}} - k_{b,\beta} \prod_{\gamma=1}^N \left(\frac{\rho Y_\gamma}{M_\gamma} \right)^{\nu''_{\gamma\beta}} \right] \right\}.$$

Für die Reaktionsgleichung (4.1.30) kann die Reaktionsrate der Spezies α für die beiden Reaktionspartner mit

$$w_\alpha = -M_\alpha k_f \left(\frac{\rho Y_1}{M_1} \right) \left(\frac{\rho Y_2}{M_2} \right) \quad (4.1.32)$$

angegeben werden bzw. mit

$$w_\alpha = M_\alpha k_f \left(\frac{\rho Y_1}{M_1} \right) \left(\frac{\rho Y_2}{M_2} \right)$$

wenn α das Reaktionsprodukt bezeichnet.

Für die Verwendung der obigen Reaktionsrate für die Berechnung der turbulenten Reaktionsrate in Gleichung (4.1.22) (Tabelle 4) zur Berechnung turbulenter Strömungen ist es notwendig, ebenfalls den dichtegewichteten Zeitmittelwert zu bilden. Führt man für die Reaktionsrate des Reaktionsproduktes die im vorangegangenen Abschnitt dargestellte Favre-Mittelung durch, erhält man

$$\begin{aligned} \bar{w}_3 = & \frac{M_3}{M_1 M_2} \overline{\rho k_f (\bar{\rho} \tilde{Y}_1 \tilde{Y}_2 + \overline{\rho Y_1'' Y_2''})} \\ & + \overline{\rho (\rho k_f)'' Y_2'' \tilde{Y}_1} + \overline{\rho (\rho k_f)'' Y_1'' \tilde{Y}_2} + \overline{\rho (\rho k_f)'' Y_1'' Y_2''}. \end{aligned} \quad (4.1.33)$$

Da der Geschwindigkeitskoeffizient durch die Exponentialfunktion seinerseits auch stark nichtlinear ist, wird klar, daß die mittlere Reaktionsrate nicht einfach aus Gleichung (4.1.31) durch Einsetzen der Mittelwerte berechnet werden kann:

$$\bar{w}_\alpha \neq \frac{M_3}{M_1 M_2} A \tilde{T}^n e^{-\frac{E}{R_m \tilde{T}}} \bar{\rho} \tilde{Y}_1 \bar{\rho} \tilde{Y}_2.$$

Man erkennt, daß selbst für das betrachtete sehr einfache allgemeine Reaktionsschema (4.1.30) durch die Zeitmittelung zur Berücksichtigung der Turbulenz ein sehr komplexer Ausdruck für die gemittelte Reaktionsrate (4.1.33) resultiert. Für den Fall der H₂-Luft-Reaktion ergibt sich ein noch wesentlich erweiterter Ausdruck, da Y₁ durch den stöchiometrischen Koeffizienten 2 quadratisch in Gleichung (4.1.32) vorkommt, was bei der Mittelung zu zusätzlichen Korrelationstermen von Schwankungen führt.

Gesetzt den Fall, es gelänge, geschlossene Ausdrücke für die Korrelationen zu finden, so stellt die Mittelung der Exponentialfunktion im Geschwindigkeitskoeffizienten eine zusätzliche Schwierigkeit dar. Reihenentwicklungen dieses Ausdruckes, die nach einigen Termen abgebrochen werden, können

aufgrund der starken Nichtlinearität meist nicht ausreichend gerechtfertigt werden. Als Ausweg bleibt, eine Möglichkeit zu suchen, den gesamten Term in Abhängigkeit von mittleren Strömungsgrößen zu approximieren. Dies ist die Aufgabe der turbulenten Verbrennungsmodellierung, die in den folgenden Abschnitten dargestellt wird.

4.2 Schließungsansatz mit Hilfe von Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen

4.2.1 Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen

Die Wahrscheinlichkeitsdichte $P(\varphi)$ (vgl. Abbildung 4.1) gibt an, mit welcher Wahrscheinlichkeit eine Meßgröße φ in einem Bereich $d\varphi$ um den Wert φ liegt. Von Messungen turbulent fluktuierender Größen ist bekannt, daß der zeitliche Mittelwert mit Hilfe der Wahrscheinlichkeitsdichte berechnet werden kann:

$$\bar{\varphi} = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi P(\varphi) d\varphi.$$

Wie in Abbildung 4.2 dargestellt, ergeben sich abhängig vom Strömungs- und Turbulenzzustand an einem betrachteten Punkt ganz unterschiedliche

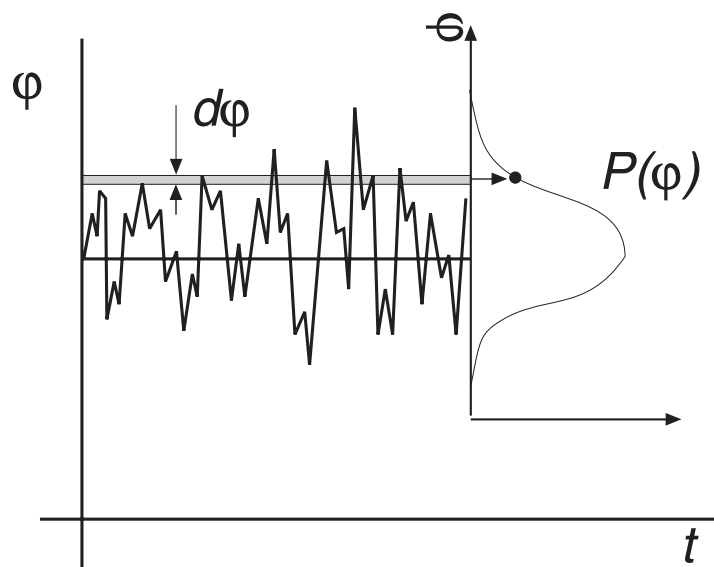
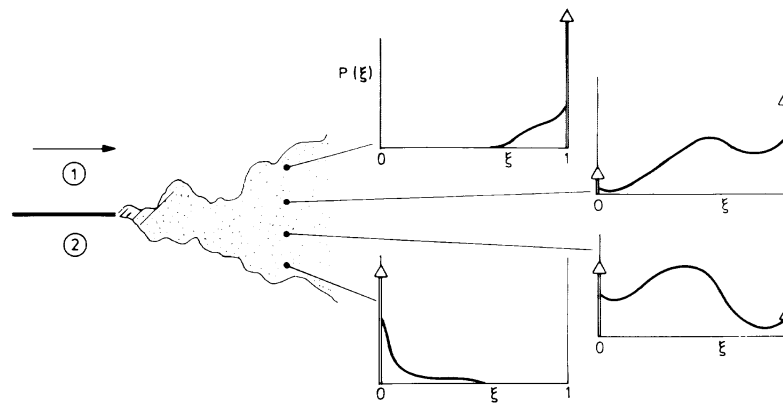
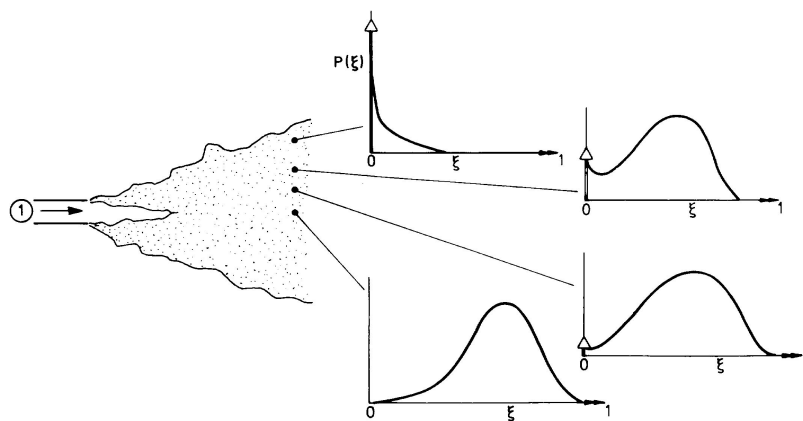


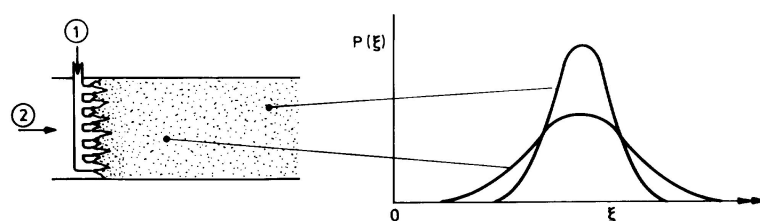
Abbildung 4.1: Zur Definition der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (PDF)



(a) Mischungsschicht



(b) Freistrahel



(c) Reaktor

Abbildung 4.2: Formen von PDFs des Mischungsbruches an verschiedenen Positionen in verschiedenen Strömungen (aus [Bil80])

Formen der PDF.

Der im folgenden dargestellte Schließungsansatz für die mittlere turbulente Reaktionsrate \bar{w}_α , der auf einer PDF aufbaut, beruht auf dem umgekehrten Schluß: wäre die Wahrscheinlichkeitsdichte $P(w_\alpha)$ bekannt, könnte \bar{w}_α leicht berechnet werden. Die Aufgabe verschiebt sich dann von der Berechnung von \bar{w}_α zu der Berechnung bzw. Bestimmung der PDF. Einführend wird kurz auf die Eigenschaften und einige Definitionen zu Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen eingegangen, um für die folgenden Abschnitte deren Anwendung und benötigte Zusammenhänge zu klären.

Die Wahrscheinlichkeitsdichte einer Größe φ bezieht sich auf einen bestimmten Ort (gegeben durch den Ortsvektor x_i) und eine festgelegte Zeit t . Dies wird durch die Schreibweise $P(\varphi; x_i, t)$ zum Ausdruck gebracht. Die PDF hat die folgenden Eigenschaften:

$$P(\varphi; x_i, t) \geq 0 \quad \text{und} \quad \int_{-\infty}^{+\infty} P(\varphi; x_i, t) d\varphi = 1. \quad (4.2.1)$$

Der Mittelwert $\bar{\varphi}(x_i, t)$ ist das sogenannte erste Zentralmoment der Zufallsgröße φ um den Wert null, und wird als *Erwartungswert* bezeichnet:

$$\bar{\varphi}(x_i, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi P(\varphi; x_i, t) d\varphi.$$

Wegen $\bar{\varphi} = 0$ (vgl. Abschnitt 2.1) kann $\bar{\varphi}$ nicht als Maß für die in der Strömung auftretenden Schwankungen dienen. Man verwendet vielmehr das zweite zentrale Moment der Zufallsgröße φ um den Wert $\bar{\varphi}^2$, die *Varianz*:

$$\begin{aligned} \overline{\varphi^2}(x_i, t) &= \int_{-\infty}^{\infty} (\varphi - \bar{\varphi})^2 P(\varphi; x_i, t) d\varphi \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \varphi^2 P(\varphi; x_i, t) d\varphi \\ &\quad - 2\bar{\varphi} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi P(\varphi; x_i, t) d\varphi + \bar{\varphi}^2 \int_{-\infty}^{\infty} P(\varphi; x_i, t) d\varphi \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \varphi^2 P(\varphi; x_i, t) d\varphi - 2\bar{\varphi} \bar{\varphi} + \bar{\varphi}^2 \\ &= \overline{\varphi^2}(x_i, t) - \bar{\varphi}^2(x_i, t). \end{aligned}$$

Ist bekannt, wie eine Größe von anderen abhängt, d.h. $\varphi(s; x_i, t)$ so kann die Berechnung des Mittelwertes auch aus der Kenntnis der PDF für s erfolgen:

$$\bar{\varphi}(s; x_i, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(s) P(s; x_i, t) ds. \quad (4.2.2)$$

Aus der Definition des Favre-Mittelwertes gilt

$$\bar{\rho}\tilde{\varphi} = \overline{\rho\varphi}.$$

Um diesen Mittelwert zu berechnen, ist die Definition einer mehrdimensionalen PDF der sogenannten *verbundenen* Wahrscheinlichkeit $P(\rho, \varphi; x_i, t)$ notwendig. Für diese gelten ebenfalls die Eigenschaften von Gleichung (4.2.1), wobei berücksichtigt werden muß, daß $\rho \geq 0$:

$$\int_0^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} P(\rho, \varphi; x_i, t) d\varphi d\rho = 1$$

und

$$P(\varphi; x_i, t) = \int_0^{\infty} P(\rho, \varphi; x_i, t) d\rho.$$

Der Favre-Mittelwert berechnet sich dann als

$$\bar{\rho}\tilde{\varphi} = \overline{\rho\varphi} = \int_0^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \rho\varphi P(\rho, \varphi; x_i, t) d\varphi d\rho$$

oder wie in Gleichung (4.2.2) für $\varphi(r, s; x_i, t)$:

$$\bar{\rho}\tilde{\varphi} = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \rho\varphi(r, s) P(\rho, r, s; x_i, t) ds dr d\rho. \quad (4.2.3)$$

Das Schwankungsmaß ist in diesem Fall $\overline{\rho\varphi''^2}(x_i, t)$ und kann wie im Falle der reinen Zeitmittelung wie folgt bestimmt werden:

$$\begin{aligned}
\overline{\rho\varphi''^2}(x_i, t) &= \int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty \rho (\varphi - \tilde{\varphi})^2 P(\rho, \varphi; x_i, t) d\varphi d\rho \\
&= \int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty \rho \varphi^2 P(\rho, \varphi; x_i, t) d\varphi d\rho \\
&\quad - 2\tilde{\varphi} \int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty \rho \varphi P(\rho, \varphi; x_i, t) d\varphi d\rho + \tilde{\varphi}^2 \int_0^\infty \rho P(\rho; x_i, t) d\rho \\
&= \int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty \rho \varphi^2 P(\rho, \varphi; x_i, t) d\varphi d\rho - 2\tilde{\varphi} \bar{\rho} \tilde{\varphi} + \bar{\rho} \tilde{\varphi}^2 \\
&= \overline{\rho\varphi^2}(x_i, t) - \bar{\rho} \tilde{\varphi}^2(x_i, t).
\end{aligned}$$

Alternativ kann auch eine Favre-PDF (vgl. Bilger [Bil75]) definiert werden durch

$$\tilde{P}(\varphi; x_i, t) = \frac{\int_0^\infty \rho P(\rho, \varphi; x_i, t) d\rho}{\bar{\rho}},$$

so daß die mehrdimensionale PDF auf eine eindimensionale zurückgeführt wird. Favre-Mittelwerte und die Schwankungen können dann wie bei reiner zeitlicher Mittelung berechnet werden:

$$\tilde{\varphi} = \int_{-\infty}^\infty \varphi \tilde{P}(\varphi; x_i, t) d\varphi, \quad (4.2.4)$$

$$\widetilde{\varphi''^2} = \frac{\overline{\rho\varphi''^2}}{\bar{\rho}} = \int_{-\infty}^\infty \varphi^2 \tilde{P}(\varphi; x_i, t) d\varphi - \tilde{\varphi}^2. \quad (4.2.5)$$

Auch sonst kann die Favre-PDF wie eine normale PDF verwendet werden. Zuletzt sei noch darauf hingewiesen, daß reine Zeitmittelwerte auch aus Favre-PDFs bestimmt werden können. Hierfür gilt:

$$\bar{\varphi} = \bar{\rho} \int_{-\infty}^\infty \frac{\varphi}{\rho} \tilde{P}(\varphi; x_i, t) d\varphi. \quad (4.2.6)$$

4.2.2 Die Reaktionsfortschrittsvariable

Die Darstellungen in den vorangegangenen Abschnitten zeigen, daß es möglich ist, bei Kenntnis der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion für die Reaktionsrate, die mittlere Reaktionsrate wie folgt zu berechnen:

$$\bar{w}_\alpha = \int_{-\infty}^{\infty} w_\alpha P(w_\alpha; x_i, t) dw_\alpha.$$

Durch die Gleichungen (4.1.31) und (4.1.33) kann die Reaktionsrate durch die Basisgrößen ausgedrückt werden, beispielsweise für das betrachtete allgemeine Reaktionsschema:

$$w_3 = M_3 A T^n e^{-\frac{E}{R_m T}} \left(\frac{\rho Y_1}{M_1} \right) \left(\frac{\rho Y_2}{M_2} \right) = w_3(\rho, T, Y_1, Y_2; x_i, t), \quad (4.2.7)$$

so daß die mittlere Reaktionsrate mit einer mehrdimensionalen PDF dieser Größen folgendermaßen berechnet werden kann:

$$\bar{w}_3(x_i, t) = \int_0^\infty \int_0^\infty \int_0^1 \int_0^1 w_3(\rho, T, Y_1, Y_2) P(\rho, T, Y_1, Y_2; x_i, t) dY_2 dY_1 dT d\rho.$$

$P(\rho, T, Y_1, Y_2; x_i, t)$ stellt in der obigen Gleichung die PDF der *verbundenen* Wahrscheinlichkeit dar. Die Modellierung solcher PDFs gelingt mit Hilfe der in Abschnitt 2.4 erwähnten Verfahren mit berechneter PDF. Soll, wie in der vorliegenden Arbeit, die Form der PDF vorgegeben werden, stellt die Komplexität dieses Ausdruckes ein Problem dar. Für statistisch unabhängige Zufallsvariablen könnte wie folgt vereinfacht werden:

$$P(\rho, T, Y_1, Y_2; x_i, t) = P(\rho; x_i, t) \cdot P(T; x_i, t) \cdot P(Y_1; x_i, t) \cdot P(Y_2; x_i, t).$$

Hierbei wird jedoch der statistische Zusammenhang zwischen den einzelnen Größen vernachlässigt. Die Zunahme der Anzahl der zu bestimmenden PDFs steigert zudem den Berechnungsaufwand erheblich. In dieser Arbeit wurde daher der Weg eingeschlagen, die Reaktionsrate in Abhängigkeit von

nur einer einzigen Variablen auszudrücken, der sogenannten *Reaktionsfortschrittsvariable*, die hier mit c bezeichnet wird.

Zur Definition von c wird die Konzentration des Reaktionsproduktes herangezogen:

$$c = \frac{Y_3 - Y_{3,0}}{Y_{3,\infty} - Y_{3,0}}. \quad (4.2.8)$$

Mit dem Index 0 wird dabei der unverbrannte Zustand und mit dem Index ∞ der komplett verbrannte Zustand bezeichnet. Die Reaktion läuft damit von $c = 0$ bis $c = 1$. Es gilt also:

$$Y_3 = c \cdot Y_{3,\infty} + (1 - c) \cdot Y_{3,0}. \quad (4.2.9)$$

Im folgenden wird das stöchiometrische Massenverhältnis r_f der Reaktion verwendet (vgl. Gleichung (4.1.2)), das für die betrachtete allgemeine Reaktionsgleichung (4.1.30) $r_f = \frac{M_2}{M_1}$ ist. Für beliebige stöchiometrische Koeffizienten ergibt sich

$$r_f = \frac{(\nu_2'' - \nu_2')M_2}{(\nu_1'' - \nu_1')M_1}.$$

Geht man davon aus, daß sich die Reaktion stets im Gleichgewicht befindet, kann für alle Spezieskonzentrationen ein Zusammenhang mit dem Reaktionsfortschritt hergestellt werden:

$$Y_1 = Y_{1,0} - \frac{1}{1 + r_f} c (Y_{3,\infty} - Y_{3,0}) \quad (4.2.10)$$

$$Y_2 = Y_{2,0} - \frac{r_f}{1 + r_f} c (Y_{3,\infty} - Y_{3,0}) \quad (4.2.11)$$

$$Y_4 = 1 - (Y_{1,0} + Y_{2,0} + Y_{3,0}). \quad (4.2.12)$$

Die Bildungsenthalpie für die Reaktionspartner H_2 und O_2 ist null und für die Reaktion kann angenommen werden, daß sie infolge der kurzen Reaktionszeit und des kleinen Reaktionsbereiches adiabatisch abläuft, so daß gilt:

$$c_p \Big|_{T_0}^T T + h_{f,3} Y_3 = c_p \Big|_{T_0}^T T_0 + h_{f,3} Y_{3,0}.$$

Unter dieser Voraussetzung ist für jeden Zustand im Verlauf der Reaktion somit

$$T = T_0 \left(1 - \frac{h_{f,3}(Y_3 - Y_{3,0})}{c_p \left| \frac{T}{T_0} \right| T_0} \right) = T_0 \left(1 - c \frac{h_{f,3}(Y_{3,\infty} - Y_{3,0})}{c_p \left| \frac{T}{T_0} \right| T_0} \right).$$

Für den letzten Ausdruck wird abkürzend der sogenannte Reaktionswärmeparameter τ (s. Bray [Bra80]) eingeführt:

$$\tau = - \frac{h_{f,3}(Y_{3,\infty} - Y_{3,0})}{c_p \left| \frac{T}{T_0} \right| T_0}.$$

Damit ergibt sich

$$T = T_0(1 + \tau c). \quad (4.2.13)$$

Im Gegensatz zu der Definition von Bray [Bra80] wird hier ein variables c_p zugelassen, so daß τ nicht konstant ist. c_p wird jedoch als Funktion von T angegeben, so daß die obige Gleichung eine Beziehung darstellt, aus der $T(c)$ iterativ bestimmt werden kann.

Da bereits alle Spezieskonzentrationen als Funktion von c angegeben wurden, kann die Molmasse M des Gemisches ebenfalls in Abhängigkeit vom Reaktionsfortschritt angegeben werden. Geht man davon aus, daß die Reaktion bei konstantem Druck abläuft, folgt für die Dichte aus der Zustandsgleichung für ideale Gase (4.1.1), die näherungsweise verwendet kann:

$$\rho = \frac{Mp}{R_m T} = \frac{Mp}{R_m T_0} \frac{1}{1 + \tau c} = \frac{\rho_0}{1 + \tau c} \frac{M}{M_0}. \quad (4.2.14)$$

Mit Hilfe der Gleichung (4.2.9)—(4.2.12), (4.2.13) und (4.2.14) ist es möglich, den thermodynamischen und chemischen Zustand allein in Abhängigkeit vom Reaktionsfortschritt anzugeben. Entsprechend ergibt sich aus Gleichung (4.2.7) also

$$w_3(\rho, T, Y_1, Y_2) = w_3(c). \quad (4.2.15)$$

Die zeitgemittelte Reaktionsrate kann nun aus einer eindimensionalen PDF bestimmt werden:

$$\bar{w}_3(x_i, t) = \int_0^1 w_3(c) P(c; x_i, t) dc.$$

Aus Gleichung (4.1.33) kann zudem für die anderen beteiligten Spezies die Reaktionsrate angegeben werden:

$$\begin{aligned} \bar{w}_1 &= -\frac{1}{1+r_f} \bar{w}_3 \\ \bar{w}_2 &= -\frac{r_f}{1+r_f} \bar{w}_3. \end{aligned}$$

Für die vorangegangenen Ableitungen wurden folgende Annahmen getroffen:

- Die Reaktion kann durch Reaktionsgleichung (4.1.30) beschrieben werden, d.h. es wird eine *irreversible Einschrittreaktion* betrachtet.
- Der Vorgang ist adiabat.
- Der Vorgang läuft isobar ab.

Diese Annahmen werden jedoch nur für die Herleitung von $w(c)$ vorausgesetzt und beeinflussen daher lediglich diesen Term. In Bereichen, in denen keine Reaktion stattfindet, spielen sie daher keine Rolle. Die Berechnung des gesamten Verbrennungsvorganges unter Berücksichtigung von Wärmeverlusten an den Wänden der Versuchsstrecke oder unterschiedlicher Diffusionskoeffizienten der Spezies stellt daher nur für den sehr kleinen Bereich der Reaktionszone einen Widerspruch dar, der hier jedoch trotzdem erwähnt werden soll.

4.2.3 Schließungsansatz mit vorgegebener Form der PDF

Die in der Überschrift dieses Abschnitts gewählte Formulierung *mit vorgegebener Form der PDF* lehnt sich an die im Englischen gebräuchliche

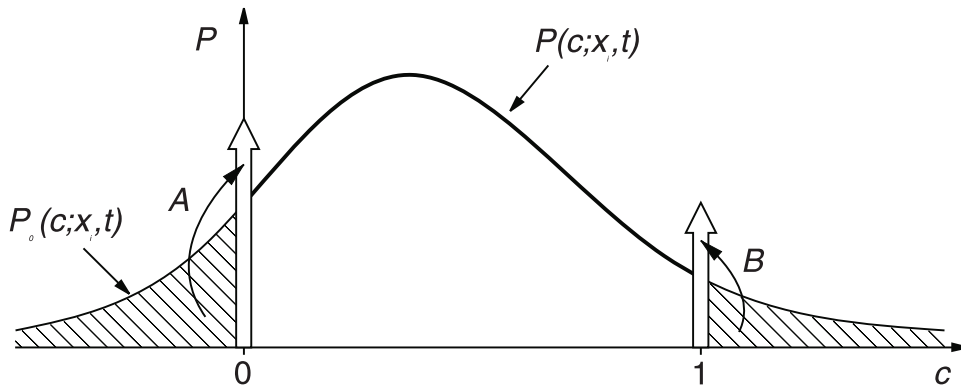


Abbildung 4.3: Abschneiden von Bereichen der PDF außerhalb $0 \leq c \leq 1$

Bezeichnung *presumed* oder *assumed PDF method* an. Es muß betont werden, daß damit eine generische Form gemeint ist, die in Abhängigkeit vom Strömungszustand spezielle Formen, wie in Abbildung 4.2 dargestellt, annehmen kann. In Abbildung 4.2(c) sind beispielsweise beide PDFs Gaußfunktionen, sie unterscheiden sich jedoch in Lage des Mittelwertes und Größe der Varianz. Im folgenden wird näher auf den Zusammenhang zwischen Strömungs- oder - richtiger - Turbulenzzustand, und den zu dessen Beschreibung verwendeten Parametern eingegangen.

Als generische Form der PDF sind verschiedenste Funktionsverläufe denkbar. Verwendet wurden in vorangegangenen Arbeiten sowohl einfache geometrische Funktionen (konstante Verläufe in Teilbereichen, lineare Verläufe etc.) [Bra80] als auch komplexere Funktionen wie β -Funktionen [Gir91] oder Gaußverteilungen [LN75]. Ziel ist jedoch, daß die spezielle Form durch Angabe von möglichst wenigen Parametern, die aus dem Strömungszustand bestimmbar sein müssen, festgelegt werden kann. Für eine PDF, die durch zwei Parameter festgelegt werden kann, stellen beispielsweise die Gleichungen (4.2.4) und (4.2.5) für $\varphi = c$ ein geschlossenes Gleichungssystem dar, das es erlaubt, bei bekanntem \tilde{c} und $\widetilde{c'^2}$ die Parameter der PDF aus

$$\tilde{c} = \int_{-\infty}^{\infty} c \tilde{P}(c; x_i, t) dc, \quad (4.2.16)$$

$$\widetilde{c'^2} = \int_{-\infty}^{\infty} c^2 \tilde{P}(c; x_i, t) dc - \tilde{c}^2 \quad (4.2.17)$$

zu berechnen.

Da c nur auf dem Intervall $0 \leq c \leq 1$ definiert ist, kann auch die später zu wählende PDF nur in diesem Bereich von 1 unterschiedliche Werte aufweisen. (Die Wahrscheinlichkeit, daß während einer Reaktion c größer als 1 oder kleiner als 0 wird, ist null). Eine beliebige Funktion $\tilde{P}_0(c, x_i, t)$, die auch außerhalb dieses Intervalles definiert ist, kann jedoch eingeschränkt werden, indem die Bereiche außerhalb aufintegriert werden und durch *Diracsche* Deltafunktionen (im weiteren Peaks genannt) an den Rändern des Definitionsintervalles ersetzt werden¹⁰ (vgl. Abbildung 4.3):

$$\begin{aligned} \tilde{P}(c; x_i, t) = & \hspace{20em} (4.2.18) \\ & \tilde{P}_0(c; x_i, t)[h(c) - h(c - 1)] + A(x_i, t)\delta(c) + B(x_i, t)\delta(c - 1), \end{aligned}$$

mit

$$A(x_i, t) = \int_{-\infty}^0 \tilde{P}_0(c; x_i, t) dc \quad \text{und} \quad B(x_i, t) = \int_1^{\infty} \tilde{P}_0(c; x_i, t) dc.$$

Die *Heavisidefunktion* h ist dabei folgendermaßen definiert:

$$h(x) = \begin{cases} 0 & : \quad x < 0 \\ 1 & : \quad x > 0 \end{cases}.$$

Durch die folgende Eigenschaft der Diracfunktion $\delta(c)$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\delta(x - x_0) dx = f(x_0)$$

ergibt das Einsetzen von Gleichung (4.2.18) in die Gleichungen (4.2.16) und (4.2.17):

$$\tilde{c}(x_i, t) = 0 \cdot A(x_i, t) + \int_0^1 c\tilde{P}_0(c; x_i, t) dc + 1 \cdot B(x_i, t), \quad (4.2.19)$$

$$\widetilde{c''^2}(x_i, t) = 0 \cdot A(x_i, t) + \int_0^1 c^2\tilde{P}_0(c; x_i, t) dc + 1 \cdot B(x_i, t) - \tilde{c}^2. \quad (4.2.20)$$

¹⁰Eine andere Möglichkeit, die Normierungsbedingung aus (4.2.1) zu erfüllen, ist, eine normierte PDF zu verwenden d.h. \tilde{P}_0 durch $\int_0^1 \tilde{P}_0 dc$ zu normieren. Dieses Verfahren wurde ebenfalls betrachtet, jedoch aufgrund numerischer Probleme nicht weiter verfolgt. Die zu den obigen Darstellungen analoge Vorgehensweise hierfür ist jedoch der Vollständigkeit halber im Anhang C mit aufgezeigt.

Die spezielle Form der PDF $\tilde{P}_0(c; x_i, t)$ kann somit für jeden Ort und jede Zeit aus der generischen Form $\tilde{P}_0(c)$ durch Lösen des obigen Gleichungssystems gewonnen werden. Dabei kann \tilde{c} aus Gleichung (4.2.8) bestimmt werden:

$$\tilde{c} = \frac{\tilde{Y}_3 - Y_{3,0}}{Y_{3,\infty} - Y_{3,0}}.$$

Die bisher dargestellten Erhaltungsgleichungen erlauben jedoch keine Aussage über das Schwankungsmaß $\overline{c'^2}$. Hierfür wird daher im vorliegenden Schließungsansatz eine zusätzliche Transportgleichung gelöst. Die Herleitung dieser Gleichung ist in [Hof95] ausführlich dargestellt und soll hier nicht wiederholt werden. Sie erfolgt durch Umformung von Gleichung (4.1.22) mit Hilfe obiger Beziehung in eine Erhaltungsgleichung für den mittleren Reaktionsfortschritt und Umstellung. Es ergibt sich so:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\overline{\rho c'^2}) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\overline{\rho \tilde{u}_i c'^2}) = \\ 2 \left[\overline{c''} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\Gamma_c \frac{\partial c}{\partial x_i} \right) \right] - 2 \overline{\rho u_i'' c''} \frac{\partial \tilde{c}}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} (\overline{\rho u_i'' c'^2}) + 2 \overline{c'' w_c}, \end{aligned} \quad (4.2.21)$$

wobei w_c und w_3 über

$$w_c = \frac{w_3}{Y_{3,\infty} - Y_{3,0}} \quad (4.2.22)$$

zusammenhängen.

Gleichung (4.2.21) enthält, wie auch die übrigen Erhaltungsgleichungen nach der Mittelung, unbekannte Terme, die durch Modellannahmen geschlossen werden müssen. Für den zweiten und dritten Term auf der linken Seite ist diese Schließung durch Gleichung (4.1.18) möglich. Der erste Ausdruck wird, wie von Jones und Whitelaw [JW82] dargestellt, analog zum Dissipationsterm in der Gleichung für die Dissipationsrate $\tilde{\varepsilon}$ modelliert:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\overline{\rho c'^2}) + \frac{\partial}{\partial x_k} (\overline{\rho \tilde{u}_k c'^2}) = \\ -c_c \overline{\rho} \frac{\tilde{\varepsilon}}{k} \overline{c'^2} + 2 \frac{\eta_t}{Sc_c} \left(\frac{\partial \tilde{c}}{\partial x_k} \right)^2 + \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\frac{\eta_t}{Sc_c} \frac{\partial \overline{c'^2}}{\partial x_k} \right) + 2 \overline{c'' w_c}. \end{aligned} \quad (4.2.23)$$

Diese Gleichung muß als zusätzliche Erhaltungsgleichung zu den Gleichungen auf Seite 116 gelöst werden.

Im Gegensatz zur Arbeit von Jones und Whitelaw [JW82] bleibt im vorliegenden Fall ein Quellterm erhalten, da es sich bei c nicht um einen sogenannten *erhaltenen* Skalar (*conserved scalar*) handelt. Berücksichtigt man, daß $w_c(0) = 0$ und $w_c(1) = 0$ sind, kann auch dieser Ausdruck mit Hilfe der bekannten PDF bestimmt werden:

$$\begin{aligned}\overline{c''w_c} &= \bar{\rho} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\widetilde{c''^2} w_c(c)}{\rho} \tilde{P}(c; x_i, t) dc \\ &= \bar{\rho} \int_0^1 \frac{(c - \tilde{c}) w_c}{\rho} \tilde{P}_0(c; x_i, t) dc \\ &= \bar{\rho} \int_0^1 \frac{c w_c}{\rho} \tilde{P}_0(c; x_i, t) dc - \tilde{c} \bar{w}_c.\end{aligned}$$

Mit den Gleichungen (4.2.14) und (4.2.22) sowie $\frac{\rho_0}{\bar{\rho}} = \frac{1}{1+\tau\tilde{c}}$ (s. [Hof95]) folgt:

$$\begin{aligned}\overline{c''w_c} &= \frac{\rho_0}{\bar{\rho}} \int_0^1 c(1 + \tau c) w_c \tilde{P}_0(c; x_i, t) dc - \tilde{c} \bar{w}_c \\ &= \frac{1}{Y_{3,\infty} - Y_{3,0}} \left(\frac{1}{1 + \tau\tilde{c}} \int_0^1 c(1 + \tau c) w_3 \tilde{P}_0(c; x_i, t) dc - \tilde{c} \bar{w}_3 \right) \\ &= \frac{\overline{c''w_3}}{Y_{3,\infty} - Y_{3,0}}\end{aligned}\tag{4.2.24}$$

Vergleicht man Gleichungen (4.2.20) und (4.2.23) und berücksichtigt Gleichung (4.2.24), erkennt man, daß der betreffende Quellterm dazu führt, daß zur kompletten Schließung des Gleichungssystems eine iterative Vorgehensweise notwendig ist. Der Grund hierfür ist, daß zur Berechnung der Parameter der PDF $\tilde{P}_0(c; x_i, t)$ $\widetilde{c''^2}$ bestimmt werden muß, das aber wiederum über den Quellterm von $\tilde{P}_0(c; x_i, t)$ abhängt. Da die numerische Lösung zur Linearisierung der Gleichungen sowie zur Kopplung von Druck- und Geschwindigkeitsinformationen ohnehin iterativ erfolgt, wird der Quellterm für die Lösung von Gleichung (4.2.23) mit einer bekannten PDF der vorangegangenen Iteration bestimmt. Dies gilt auch für den Term \bar{w}_3 . Hierauf wird am Ende des nächsten Abschnittes näher eingegangen.

Sind die Parameter der PDF bestimmt, kann die gesuchte mittlere Reaktionsrate \bar{w}_3 analog zum obigen Quellterm bestimmt werden:

$$\bar{w}_3 = \frac{1}{1 + \tau\tilde{c}_0} \int_0^1 (1 + \tau c) w_3 \tilde{P}_0(c; x_i, t) dc. \quad (4.2.25)$$

4.2.4 Numerische Umsetzung für CFD-Berechnungen

Bestimmung der PDF-Parameter

In der vorliegenden Arbeit wurde als PDF \tilde{P}_0 eine Gaußfunktion verwendet, da Gaußverteilungen häufig bei Messungen turbulent schwankender Größen auftreten und somit einen natürlichen Ansatz darstellen. Die Gaußfunktion ist gegeben durch die Gleichung

$$\tilde{P}_0(c; x_i, t) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{c-\mu}{\sigma}\right)^2}. \quad (4.2.26)$$

Dabei stellen der Erwartungswert μ und die Varianz σ der Gaußfunktion die bei der numerischen Simulation zu bestimmenden Parameter dar. Die Form dieser Funktion ist in Abbildung 4.4 für ein bestimmtes μ und σ dargestellt. Aufgrund der Beschränkung der PDF \tilde{P} auf das Intervall von null bis eins, sind μ und σ nicht identisch mit \tilde{c} und \tilde{c}''^2 , sondern müssen

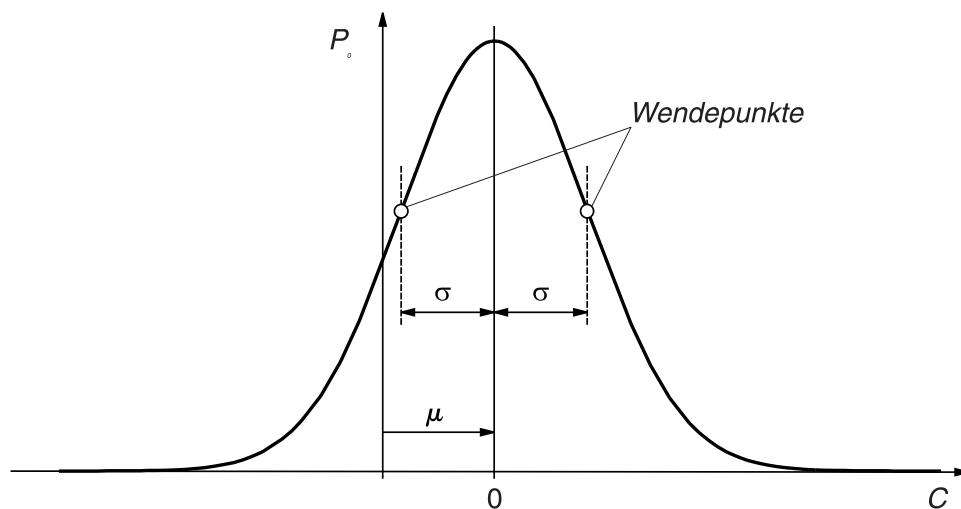


Abbildung 4.4: Form einer Gauß-PDF

aus den Gleichungen (4.2.20) und (4.2.20) bestimmt werden. Setzt man (4.2.26) in diese Gleichungen ein, erhält man

$$\tilde{c} = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \left(\int_0^1 c e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{c-\mu}{\sigma}\right)^2} dc + \int_1^\infty e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{c-\mu}{\sigma}\right)^2} dc \right) \quad (4.2.27)$$

$$\widetilde{c'^2} = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \left(\int_0^1 c^2 e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{c-\mu}{\sigma}\right)^2} dc + \int_1^\infty e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{c-\mu}{\sigma}\right)^2} dc \right) - \tilde{c}^2. \quad (4.2.28)$$

Aufgrund der beteiligten Integrale und Exponentialfunktionen kann dieses Gleichungssystem nicht einfach nach μ und σ aufgelöst werden. Eine Lösung ist nur auf numerischem Weg durch ein zweidimensionales Nullstellenverfahren möglich. In der vorliegenden Arbeit wurde hierfür ein Newton-Verfahren, wie in [PFTV86] beschrieben, verwendet. Bedenkt man, daß diese aufwendige Nullstellensuche zu jeder Iteration für jeden Gitterpunkt des Simulationsgebietes durchgeführt werden müßte, wird klar, daß dies aufgrund des hohen Rechenaufwandes nicht durchführbar ist. Es wurde daher ein Verfahren implementiert, das ähnlich dem von Lockwood und Naguib [LN75] beschriebenen, $\mu(\tilde{c}, \widetilde{c'^2})$ und $\sigma(\tilde{c}, \widetilde{c'^2})$ für alle möglichen Werte von \tilde{c} und $\widetilde{c'^2}$ tabellarisiert. Während der Strömungssimulationen wird dann jeweils zwischen den Werten dieser Tabellen interpoliert, was wegen der Stetigkeit der sich ergebenden Funktionen möglich ist. Der Wertebereich, der so berücksichtigt werden muß, ist $0 \leq \tilde{c} \leq 1$ und $0 \leq \widetilde{c'^2} \leq \widetilde{c'^2}_{\max}$, wobei

$$\widetilde{c'^2} \leq \tilde{c}(1 - \tilde{c}),$$

wie in Anhang B gezeigt wird. Daraus folgt mit $\tilde{g} = \frac{\widetilde{c'^2}}{\tilde{c}(1-\tilde{c})}$:

$$0 \leq \tilde{g} \leq 1.$$

Die Tabellarisierung wird daher als $\mu(\tilde{c}, \tilde{g})$ und $\sigma(\tilde{c}, \tilde{g})$ vorgenommen.

Die Lösung der Gleichungen (4.2.27) und (4.2.28) gelingt am einfachsten, wenn man eine Variablensubstitution $s = \frac{c-\mu}{\sigma}$ vornimmt ($s_0 = \frac{0-\mu}{\sigma}$, $s_1 = \frac{1-\mu}{\sigma}$) und die notwendigen Integrationsregeln berücksichtigt¹¹. Definiert man die Funktion $F(\eta)$ als

$$F(\eta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^\eta e^{-\frac{s^2}{2}} ds = \frac{1}{\sqrt{2}} \operatorname{erf}(\eta)$$

¹¹Die Herleitung der Gleichungen ist im Anhang C dargestellt.

erhält man

$$\begin{aligned} 0 &= \tilde{c} - \frac{1}{2} - \frac{\sigma}{\sqrt{2\pi}} \left(e^{-\frac{s_0^2}{2}} - e^{-\frac{s_1^2}{2}} \right) - (\mu - 1)F(s_1) + \mu F(s_0) \quad (4.2.29) \\ &= f_{\tilde{c}}(\mu, \sigma) \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} 0 &= \widetilde{c''^2} - \tilde{c}^2 - \frac{1}{2} - \frac{\sigma}{\sqrt{2\pi}} \left(s_0 e^{-\frac{s_0^2}{2}} - s_1 e^{-\frac{s_1^2}{2}} \right) \\ &\quad - (\sigma^2 + \mu^2 - 1)F(s_1) + (\sigma^2 + \mu^2)F(s_0) \quad (4.2.30) \\ &= f_{\widetilde{c''^2}}(\mu, \sigma). \end{aligned}$$

Für diese beiden Gleichungen wurde das bereits erwähnte zweidimensionale Newtonverfahren implementiert. Das mit $F(\eta)$ verbundene Integral konnte mit ausreichender Genauigkeit durch einfache numerische Integration approximiert werden und die im Rahmen des Newtonverfahrens notwendige Differentiation der Funktionen zur Bildung der Jacobimatrix wurde durch einen Differenzenquotienten ersetzt. Die Tabellen, die sich so ergeben, sind in Abbildung 4.5 für μ und 4.6 für σ grafisch dargestellt.

Um die Berechnung zusätzlich zu beschleunigen, wurden in der vorliegenden Arbeit auch die Integrationen in den Gleichungen (4.2.24) und (4.2.25) vorab durchgeführt, so daß Tabellen vorlagen, aus denen direkt $\overline{w_3}(\tilde{c}, \tilde{g})$ und $\overline{c''w_3}(\tilde{c}, \tilde{g})$ interpoliert werden konnten.

An den Rändern des Wertebereiches konvergiert das Newtonverfahren oft nicht, da die beiden Funktionen (4.2.29) und (4.2.30), wie ein Vergleich der Abbildungen 4.7 und 4.8 zeigt, hier praktisch parallel verlaufen. Für die Tabellen für μ und σ wurden daher die Randbereiche ausgenommen und die sich ergebenden Flächen bei der Generierung der Tabellen für $\overline{w_3}$ und $\overline{c''w_3}$ stetig fortgesetzt. Bray [Bra80] (vgl. auch [Hof95]) zeigt, daß für geringe Schwankungsintensitäten näherungsweise gilt:

$$\begin{aligned} \overline{w_3} &\approx w_3(\tilde{c}) + \frac{\widetilde{c''^2}}{2} \left[\frac{\partial^2}{\partial c^2} \left(\frac{\overline{\rho w_3(c)}}{\rho(c)} \right) \right]_{\tilde{c}}, \\ \overline{c''w_3} &\approx \widetilde{c''^2} \left[\frac{\partial}{\partial c} \left(\frac{\overline{\rho w_3(c)}}{\rho(c)} \right) \right]_{\tilde{c}}. \end{aligned}$$

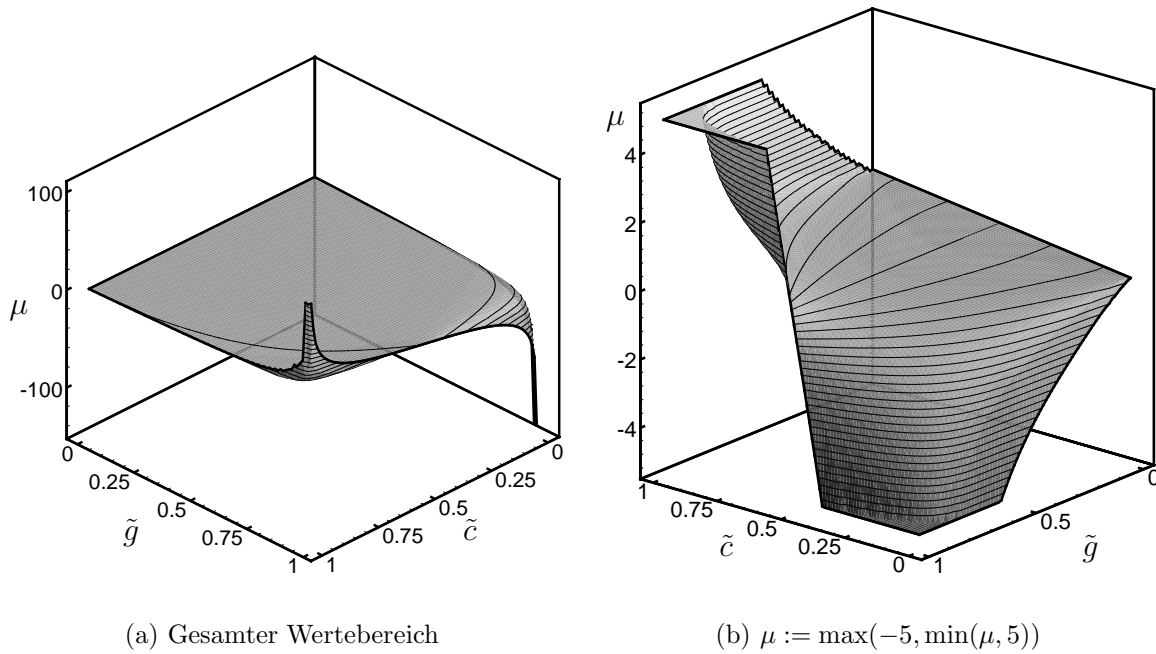


Abbildung 4.5: Grafische Darstellung der Tabelle $\mu(\tilde{c}, \tilde{g})$

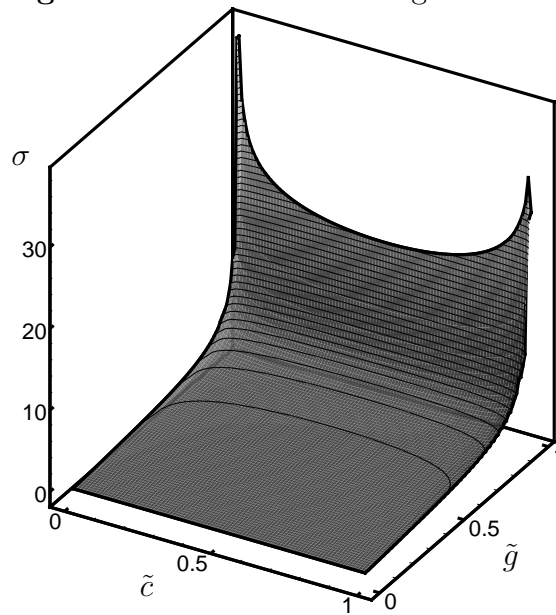
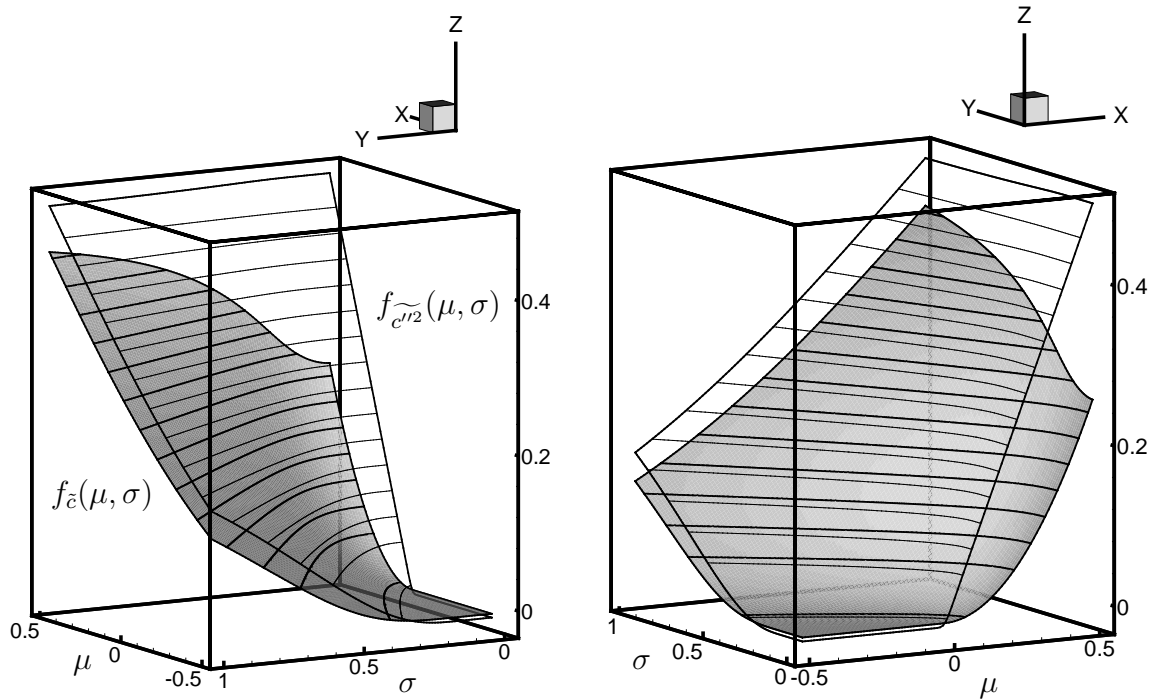
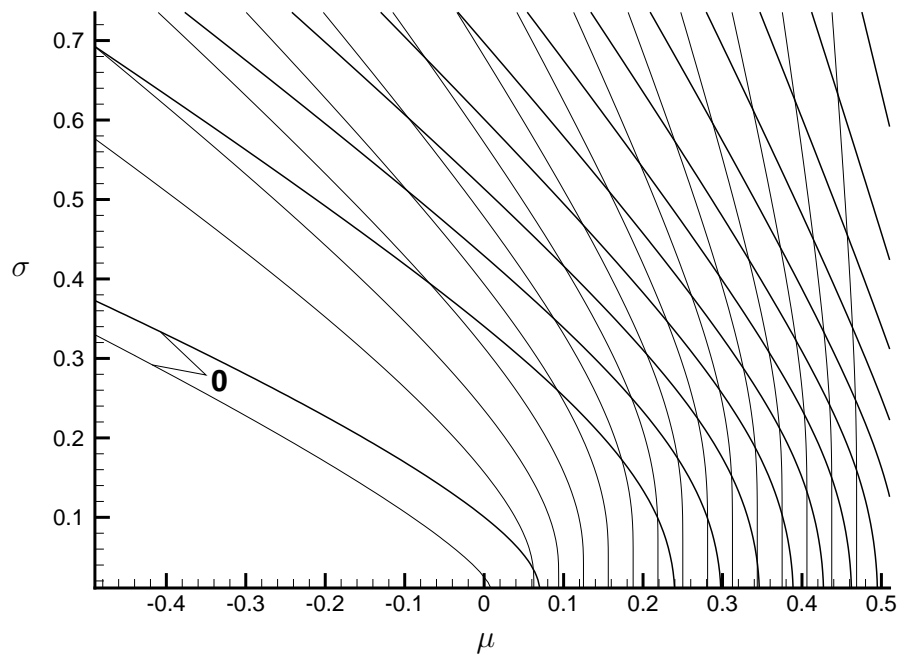


Abbildung 4.6: Grafische Darstellung der Tabelle $\sigma(\tilde{c}, \tilde{g})$



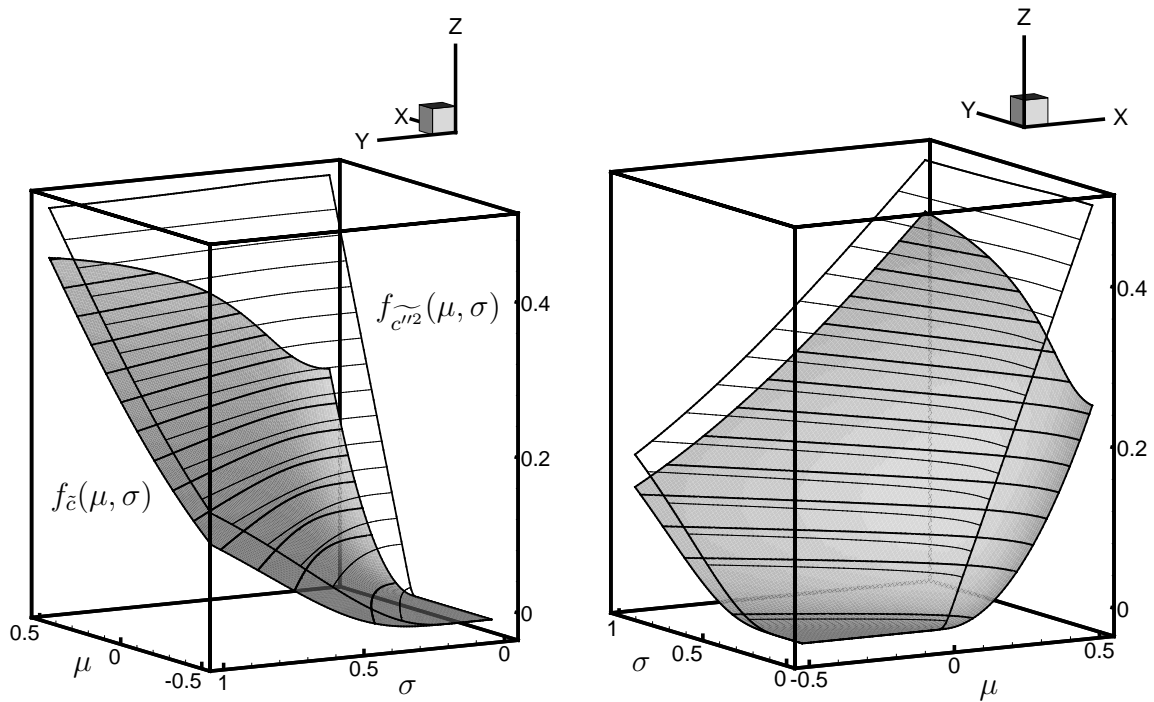
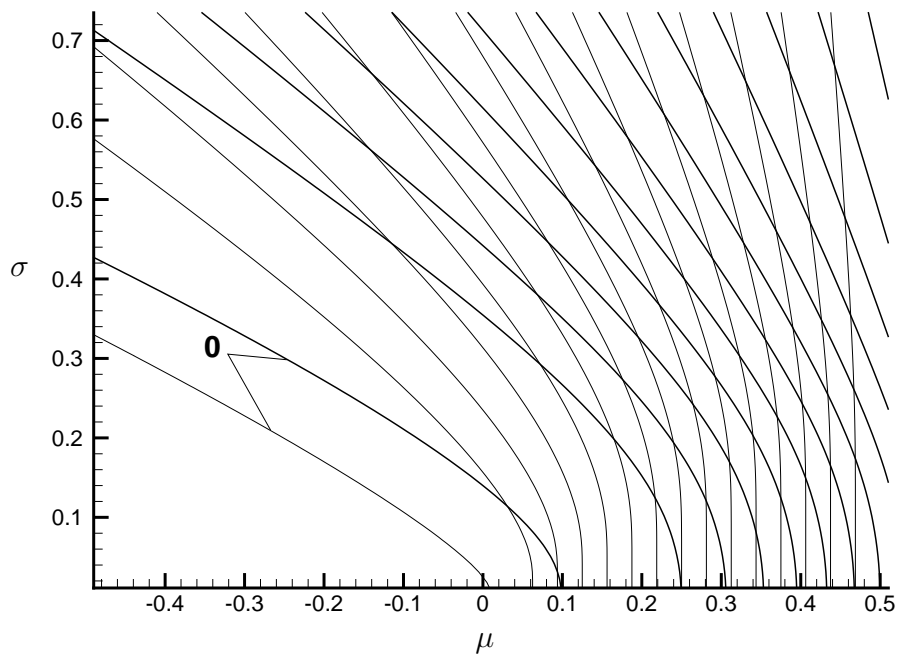
(a) Ansicht von $(-x, +y, +z)$

(b) Ansicht von $(-x, -y, +z)$



(c) Höhenlinien

Abbildung 4.7: $f_{\tilde{c}}(\mu, \sigma)$ und $f_{\tilde{c}/12}(\mu, \sigma)$ für $\tilde{c} = 0.01$, $\tilde{g} = 0.5$

(a) Ansicht von $(-x, +y, +z)$ (b) Ansicht von $(-x, -y, +z)$ 

(c) Höhenlinien

Abbildung 4.8: $f_{\tilde{c}}(\mu, \sigma)$ und $f_{\tilde{c}^{m2}}(\mu, \sigma)$ für $\tilde{c} = 0.01$, $\tilde{g} = 0.98$

Für den Rand, an dem \widetilde{c}''^2 gleich null ist, liefern daher

$$\overline{w}_3 := w_3(\tilde{c}) \quad \text{und} \quad \overline{c''w}_3 := 0$$

die stetige Fortsetzung. An den übrigen Rändern können die Tabellen für $\overline{w}_3(\tilde{c}, \tilde{g})$ und $\overline{c''w}_3(\tilde{c}, \tilde{g})$ durch Nullsetzen der Werte stetig fortgesetzt werden. Die Tabellen wurden im inneren Bereich äquidistant aufgebaut und die Interpolation erfolgte bilinear. In den ergänzten Randbereichen wurde die Interpolation an die Breite des Randbereiches angepaßt.

Die Darstellung der PDF, die sich mit den so generierten Tabellen ergeben, ist nur für einzelne Werte von \tilde{c} bzw. \tilde{g} möglich. In Abbildung 4.9 sind die sich für verschiedene Werte von \tilde{c} ergebenden Formen für den tabellarisierten Innenbereich dargestellt. Man erkennt, daß die PDF für $\tilde{g} \rightarrow 0$ immer mehr in eine Singularität übergeht, die auch die Darstellung in der Grafik erschwert. In den jeweilig rechten Abbildungen wurde daher der Wertebereich eingeschränkt. Die Änderung der PDF-Form mit \tilde{c} für unterschiedliche \tilde{g} zeigt Abbildung 4.10. Ausgehend von sehr großen Maxima für sehr kleine Schwankungsintensitäten (z.B. bei $\tilde{g}=0.05$ in Abbildung 10(a)), verschiebt sich die Form der PDF für größere \tilde{g} immer mehr in die Peaks an den Rändern des Definitionsbereiches.

Bis jetzt wurde noch keine konkrete Form von Gleichung (4.1.32) festgelegt, d.h. die Parameter der Arrheniusbeziehung (4.1.31) müssen erst noch angegeben werden. Da sich diese Aufgabe im Verlauf der vorliegenden Arbeit als sehr schwierig herausstellte, befaßt sich Abschnitt 4.3 hiermit eingehend. Um dennoch die vollständige Vorgehensweise bei der Tabellengenerierung darstellen zu können, wird als beispielhafte Beziehung eine Form, wie sie von Bray [Bra80] angegeben wird, verwendet¹²:

$$w_3(c) = Bw_{\max}(1 - c)^3 e^{-\frac{E^*(1-c)}{c}}. \quad (4.2.31)$$

Bray verwendet B als Normierungskonstante, so daß w_3/w_{\max} eine normierte Funktion ergibt, und der Maximalwert von $w_3(c)$ allein durch w_{\max}

¹²Hofmann [Hof95] zeigt auf, daß durch geeignete Anpassung der Konstanten auch die sich für die Reaktionsfortschrittsvariable ergebende Gleichung für $w_3(c)$ (4.2.15) die gleiche Form annehmen kann.

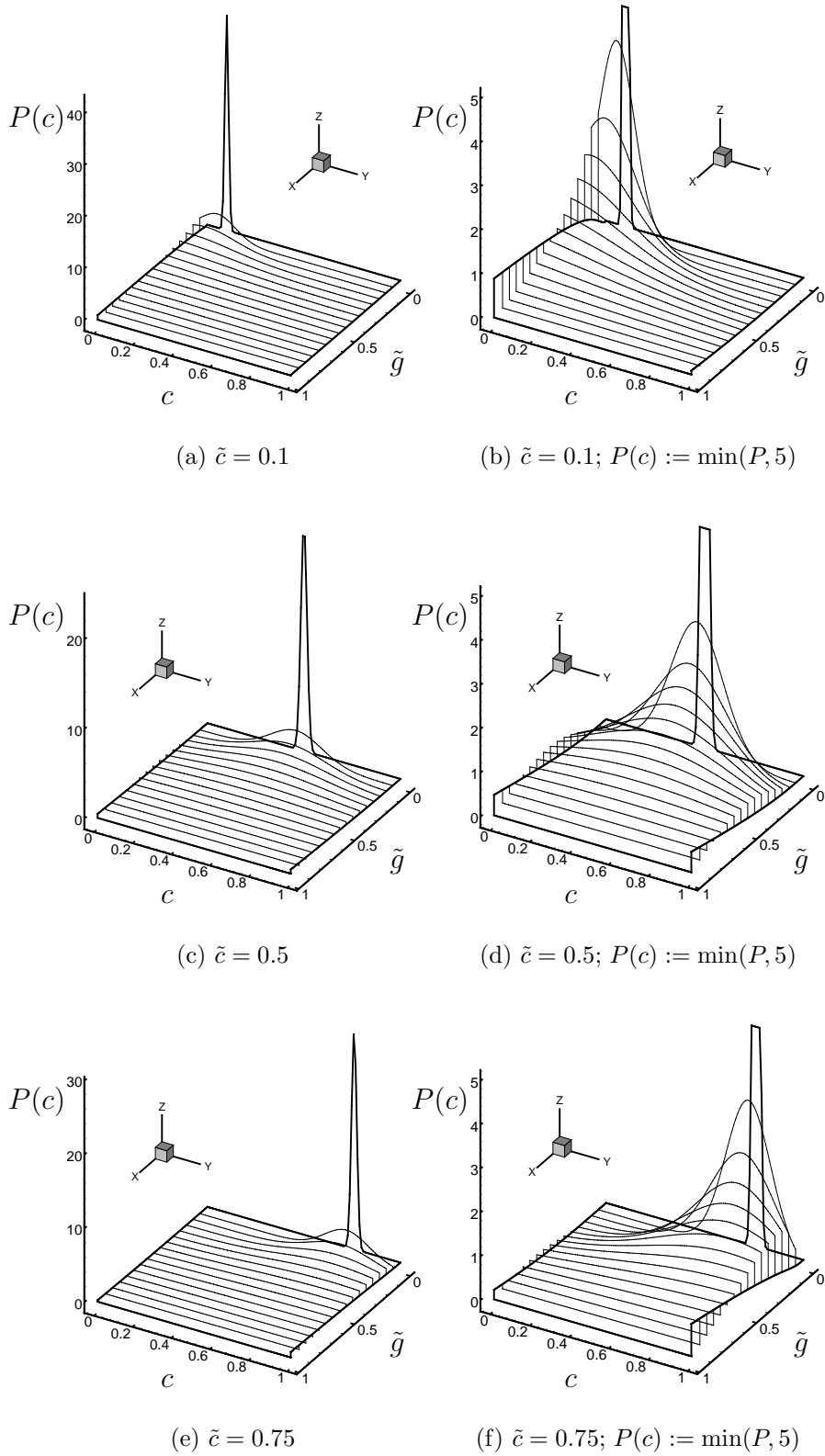


Abbildung 4.9: PDF-Formen für verschiedene Werte von \tilde{g}

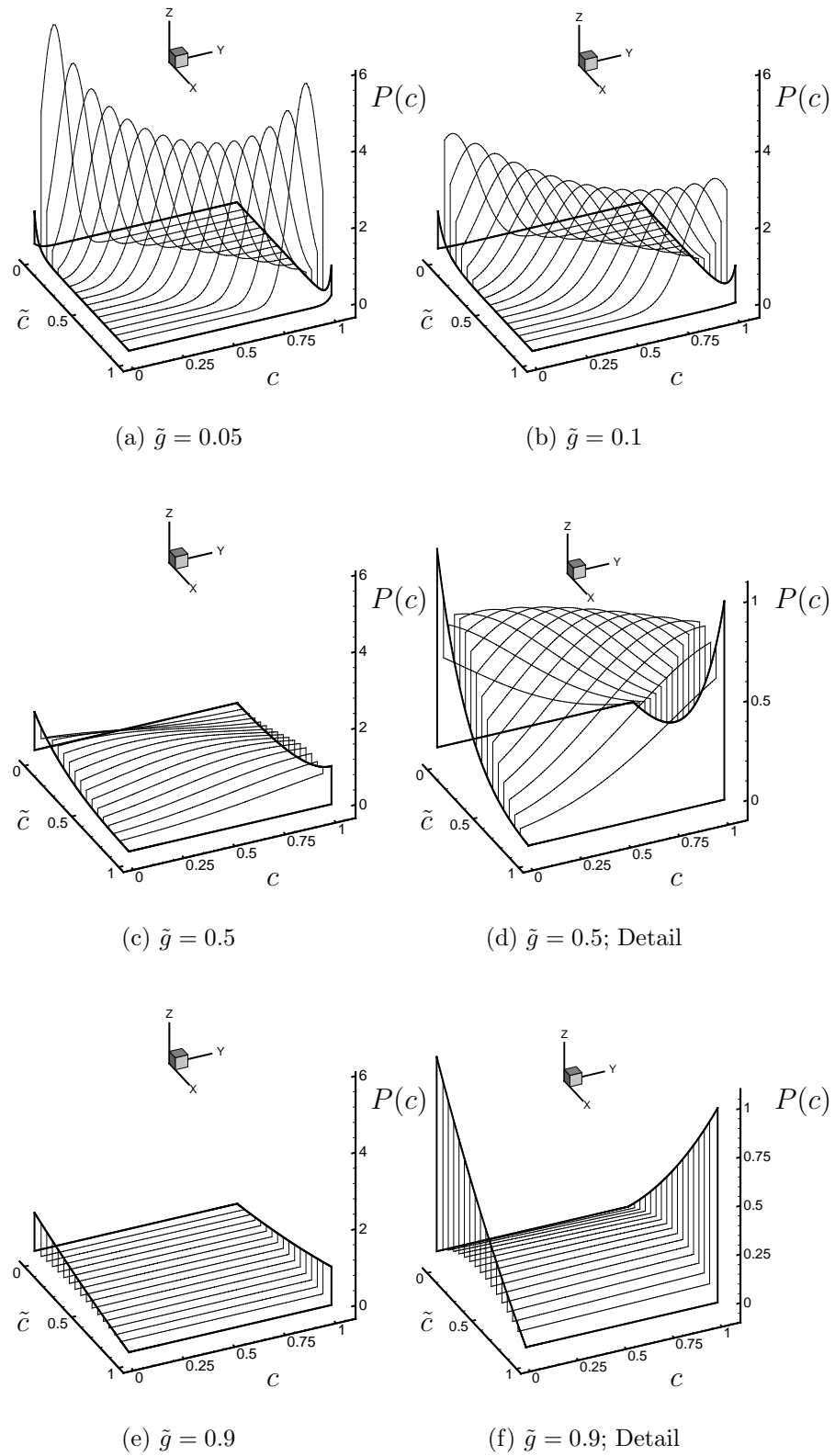


Abbildung 4.10: PDF-Formen für verschiedene Werte von \tilde{c}

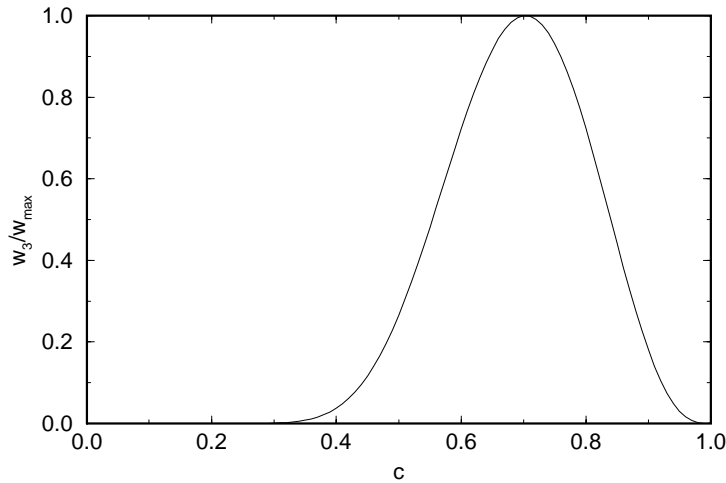


Abbildung 4.11: Modellfunktion für $w_3(c)$ für $E^* = 5.0$

bestimmt wird. B ist bestimmt durch das Maximum von $w_3/(w_{\max}B)$, das an der Stelle c_{\max} auftritt:

$$c_{\max} = -\frac{E^*}{6} + \sqrt{E^* \left(\frac{E^*}{36} + \frac{1}{3} \right)}. \quad (4.2.32)$$

Für $E^* = 5.0$ sieht die durch Gleichung (4.2.31) definierte Funktion beispielsweise wie in Abbildung 4.11 dargestellt aus. Führt man die Integration in Gleichung (4.2.25) für w_3/w_{\max} in Gleichung (4.2.31) für den gesamten Wertebereich von \tilde{c} und \tilde{g} durch, erhält man die Tabelle $\bar{w}_3(\tilde{c}, \tilde{g})$, die in Abbildung 4.12 grafisch dargestellt ist. Man erkennt deutlich für $\tilde{g} = 0$ die vorgegebene Form von $w_3(c)/w_{\max}$. Die grafische Darstellung der Tabelle in Abbildung 4.12 zeigt, daß die mittlere Reaktionsrate \bar{w}_3 mit zunehmender Schwankungsintensität \tilde{g} zwar abnimmt, die Reaktion jedoch bereits bei geringeren Reaktionsfortschritten einsetzt.

Das gewählte $w_3(c)$ führt durch die Integration in Gleichung (4.2.24) zu der Tabelle für $\overline{c''w_3}(\tilde{c}, \tilde{g})$, die sich wie in Abbildung 4.13 darstellen läßt. Betrachtet man diese Darstellung, so erkennt man, daß der Quellterm im Laufe des Reaktionsfortschrittes sein Vorzeichen wechselt. Dies bedeutet, daß durch die Reaktion zunächst Schwankungen im Reaktionsfortschritt erzeugt werden, diese Beiträge im Laufe der Reaktion jedoch wieder abnehmen, und zum Ende der Reaktion hin Schwankungen wieder abgebaut werden. Borghi [Bor88] weist für numerische Berechnungen einer stationären Strömung auf ein ähnliches Verhalten hin.

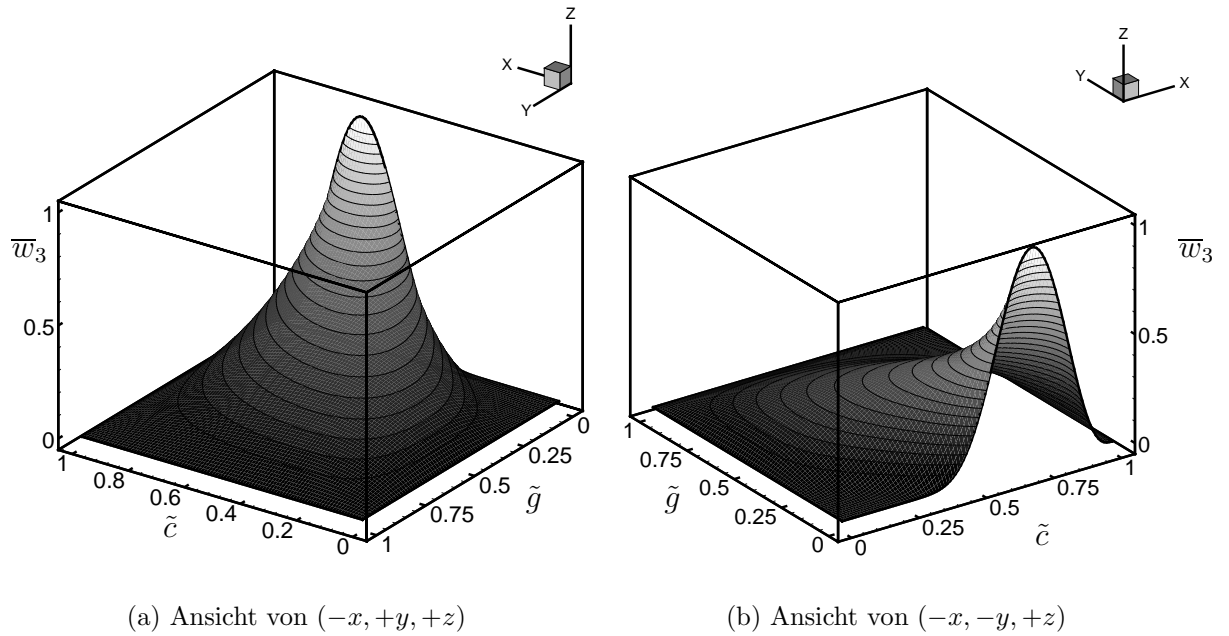


Abbildung 4.12: Grafische Darstellung der Tabelle $\bar{w}_3(\tilde{c}, \tilde{g})$

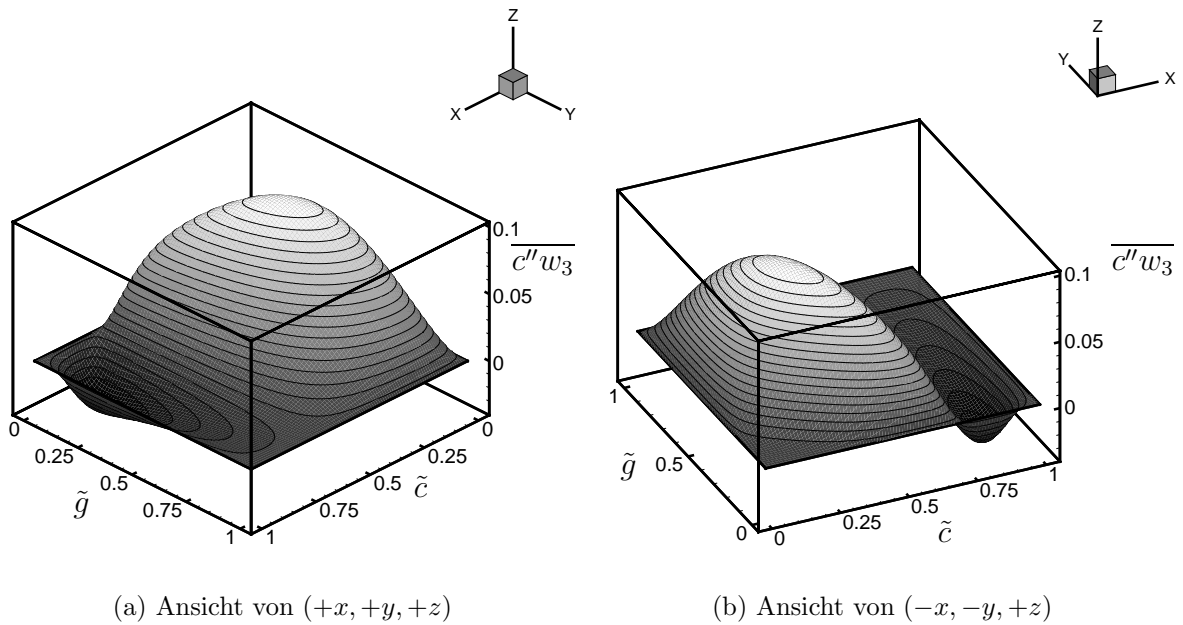


Abbildung 4.13: Grafische Darstellung der Tabelle $\overline{c''w_3}(\tilde{c}, \tilde{g})$

Linearisierung

Am Ende des letzten Abschnittes war darauf hingewiesen worden, daß sich bei dem vorliegenden Verfahren bei der Bestimmung der Parameter der PDF ein Problem ergibt, da zur Berechnung der Parameter μ und σ der PDF die Erhaltungsgleichung für $\widetilde{c''^2}$ gelöst werden muß, in der wiederum die PDF vorkommt. Ein ähnliches Problem tritt beispielsweise für die Erhaltungsgleichungen für den Impuls auf, da zur Lösung der Impulsgleichungen Massenströme bestimmt werden müssen, die selbst die Geschwindigkeit, also die gesuchte Größe, enthalten. Da hierfür ohnehin Linearisierungsiterationen vom Berechnungsprogramm durchgeführt werden, kann bei der Bestimmung der PDF ebenfalls linearisiert werden.

Wie bei iterativen Verfahren üblich, werden so für die Lösung der Erhaltungsgleichungen einer Iteration ν die Parameter μ und σ , bzw. die Quellterme $\overline{w_3}$ und $\overline{c''w_3}$ aus den Tabellen verwendet, die sich mit den Werten von $\tilde{c}_{\nu-1}$ und $\widetilde{c''^2}_{\nu-1}$ bzw. $\tilde{g}_{\nu-1}$ ergeben. Bei konvergierter Lösung gilt dann $\tilde{c}_\nu = \tilde{c}_{\nu-1}$ und $\tilde{g}_\nu = \tilde{g}_{\nu-1}$, so daß dann die korrekten Werte verwendet werden. Als Startwerte für den ersten Zeitschritt wird die Ausgangsbelegung \tilde{c}_0 und \tilde{g}_0 verwendet, als Startwerte für die Iterationen der folgenden Zeitschritte dienen die Werte der konvergierten Lösungen des vorangegangenen Zeitschrittes.

4.3 Berücksichtigung chemischer Reaktionskinetik

In Abschnitt 4.1.2 wurde darauf hingewiesen, daß sich chemische Reaktionen und insbesondere Verbrennungsreaktionen normalerweise aus zahlreichen Elementarreaktionen zusammensetzen. Reaktionsschemata für Reaktionen mit Kohlenwasserstoffen können aus mehreren hundert Einzelreaktionen bestehen, die zudem als Hin- und Rückreaktionen vorkommen. Für das $\text{H}_2\text{-O}_2\text{-N}_2$ System kann die Anzahl der betrachteten Einzelreaktionen zwar erheblich eingeschränkt werden, die Anzahl übersteigt jedoch immer noch die Möglichkeiten des vorliegenden Verbrennungsmodells. In der Tat war bis jetzt von einer einzigen globalen Reaktion ausgegangen worden und etliche der mit der Herleitung verbundenen Annahmen setzen voraus, daß lediglich *eine* Reaktion und zwar nur als *Hinreaktion* vorliegt. Ob-

gleich dies eine sehr umfangreiche Aufgabe darstellt, ist eine Erweiterung auf zusätzliche Reaktionen möglich.

In Abschnitt 4.2.4 war mit Hilfe einer Näherungsgleichung für den Reaktionsfortschritt die prinzipielle Vorgehensweise zur implementierten Tabellengenerierung aufgezeigt worden. Es wird bei Betrachtung des Reaktionsschemas jedoch klar, daß die Approximation der Reaktionsrate einer Spezies, die an zahlreichen Einzelreaktionen mit unterschiedlichsten Geschwindigkeitsgesetzen teilnimmt, durch eine einzige Gleichung der Form von (4.2.31) bestenfalls eine Näherung darstellen kann. Nicht umsonst stellt die Reduktion umfangreicher Reaktionsmechanismen ein großes Teilgebiet der chemischen Reaktionskinetik dar.

Aufgabe der vorliegenden Arbeit mußte es daher auch sein, eine geeignete Repräsentation für die momentane Reaktionsrate in Abhängigkeit vom Reaktionsfortschritt zu finden. Da, wie bereits erwähnt, allgemeine Verbrennungsreaktionen an dieser Stelle beliebig komplex werden können, wurde die Betrachtung hierfür auf die Wasserstoff-Luft-Reaktion eingeschränkt.

4.3.1 Globale Einschrittbetrachtung

Die Darstellung des Geschwindigkeitskoeffizienten für die Summenreaktion eines komplexen Reaktionsschemas durch eine *einzig*e Gleichung der Form von (4.1.31) ist ein Thema, das in der Literatur sehr kontrovers diskutiert wird (vgl. beispielweise Reitz und Bracco [RB83] und Coffee et al. [CKM83]) und auch für die vorliegende Anwendung eingehend betrachtet werden muß. Die Angabe der Konstanten für den Geschwindigkeitskoeffizienten stellt sich als schwierig dar, da deren Bestimmung durch Vergleich mit Messungen erfolgt, und die Konstanten daher nicht nur von der betrachteten Reaktion abhängig sind, sondern auch von der Brennstoffkonzentration, der Temperatur, dem Druck und sogar von der Strömungsform bedingt durch den verwendeten Versuchsaufbau. Es ist daher schwierig, in der Literatur Angaben für die Reaktionskonstanten der Arrheniusgleichung globaler Einschrittreaktionsschemata zu finden. Da die darzustellende Reaktion (4.1.29) eine Summenreaktion und keine Elementarreaktion ist, kann die durch Gleichung (4.1.32) gegebene Reaktionsrate teilweise nur dann an experimentelle Werte angepaßt werden, wenn für die beiden

Brüche nicht-ganzzahlige Exponenten hinzugefügt werden.

In der vorliegenden Arbeit wurden die Angaben von Marathe et al. [MMJ77], Coffee et al. [CKM83], Varma et al. [VCB86] und Travis [Tra87] auf ihre Eignung für das entwickelte PDF-Verfahren hin untersucht. Dabei wurden die sich ergebenden Reaktionsraten $w_3(c)$ verglichen¹³, wobei w_3 für alle Schemata in folgende Form gebracht wurde:

$$w_3 = M_3 A T^n e^{-\frac{E}{R_m T}} \left(\frac{\rho Y_1}{M_1} \right)^{\nu'_1} \left(\frac{\rho Y_2}{M_2} \right)^{\nu'_2} .$$

Für die einzelnen Terme wurden einheitlich die folgende Einheiten verwendet:

$$\nu'_1 [-], \nu'_2 [-], n [-], A \left[\frac{1}{\text{sK}^n} \left(\frac{\text{m}^3}{\text{mol}} \right)^{\nu'_1 + \nu'_2 - 1} \right], E \left[\frac{\text{J}}{\text{mol}} \right] .$$

Marathe et al.

Marathe et al. [MMJ77] untersuchten eine H₂-O₂ Gegenstrom-Diffusionsflamme und verglichen Messungen mit einem auf vier Reaktionsgleichungen reduzierten Mechanismus. Sie unterscheiden nicht nach Konzentrationsbereichen und geben die Konstanten für die Summenreaktionsrate aus diesem Vergleich in der Form

$$w_1 = M_1 Z_0 e^{-\frac{E_0}{R_m T}} \left(\frac{\rho Y_1}{M_1} \right)^{\nu'_1} \left(\frac{\rho Y_2}{M_2} \right)^{\nu'_2}$$

an. Die Zahlenwerte für die Parameter in dieser Gleichung werden von Marathe et al. wie folgt angegeben:

$$\begin{aligned} \nu'_1 &= 1.0 [-], \nu'_2 = 0.92 [-] \\ Z_0 &= 2.96 \cdot 10^{11} \left[\frac{1}{\text{s}} \left(\frac{\text{cm}^3}{\text{mol}} \right)^{0.92} \right], E_0 = 13800 \pm 600 \left[\frac{\text{cal}}{\text{mol}} \right] \end{aligned}$$

Die Umrechnung auf die oben festgelegten Einheiten ergibt

$$A = 5.14 \cdot 10^8 \left[\frac{1}{\text{s}} \left(\frac{\text{m}^3}{\text{mol}} \right)^{0.92} \right], E = 57.767 \cdot 10^3 \left[\frac{\text{J}}{\text{mol}} \right] .$$

¹³Die Indizes bezeichnen wie vorher Brennstoff H₂ (1), Oxidator O₂ (2) und Produkte H₂O (3).

Coffee et al.

Coffee et al. [CKM83] ermittelten die gesuchten Konstanten durch Vergleich von Berechnungen einer stationären laminaren Flamme mit globalen Reaktionsschemata und einem detaillierten Reaktionsmechanismus nach Dixon-Lewis [DL83]. Sie zogen insbesondere die Energiefreisetzung und Temperaturprofile heran, um die Konstanten zu ermitteln. Die Reaktionskonstanten werden in der folgenden Form angegeben:

$$w_1 = M_1 A' e^{-\frac{E}{R_m T}} \left(\frac{\rho Y_1}{M_1} \right)^{\nu'_1} \left(\frac{\rho Y_2}{M_2} \right)^{\nu'_2},$$

wobei A' das Verhältnis der Molmassen der beteiligten Spezies enthält. Für die betrachtete $\text{H}_2\text{-O}_2$ Reaktion ist somit

$$A' = \frac{A}{M_2}, \quad (4.3.1)$$

was bei der Umrechnung der Einheiten berücksichtigt wurde. Die entsprechenden Zahlenwerte werden von Coffee et al. wie folgt angegeben:

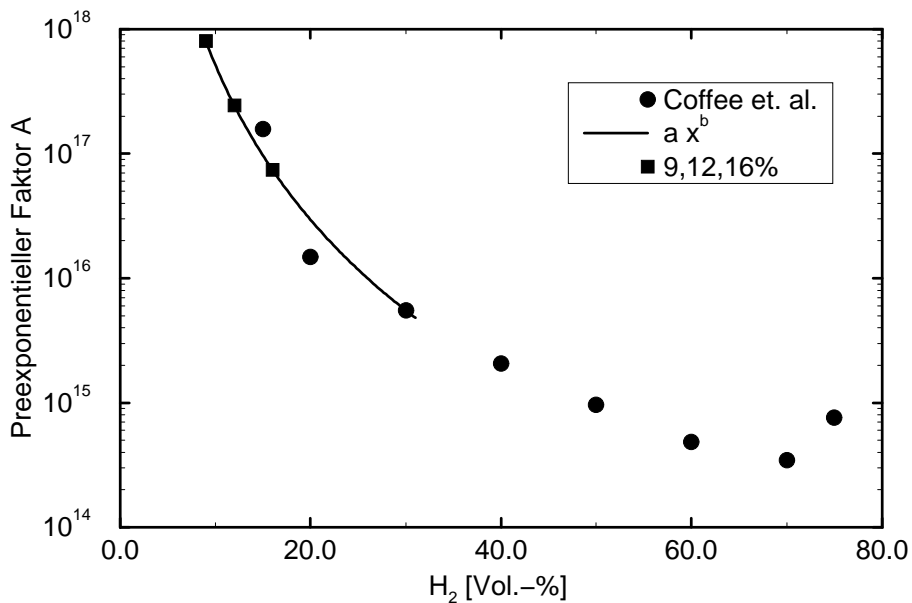
$$\nu'_1 = 2 [-], \quad \nu'_2 = 1 [-]$$

$$A \text{ s. Tabelle 6 } \left[\frac{1}{\text{sec}} \left(\frac{\text{cm}^3}{\text{mol}} \right)^2 \right], \quad E \text{ s. Tabelle 6 } \left[\frac{\text{kcal}}{\text{mol}} \right].$$

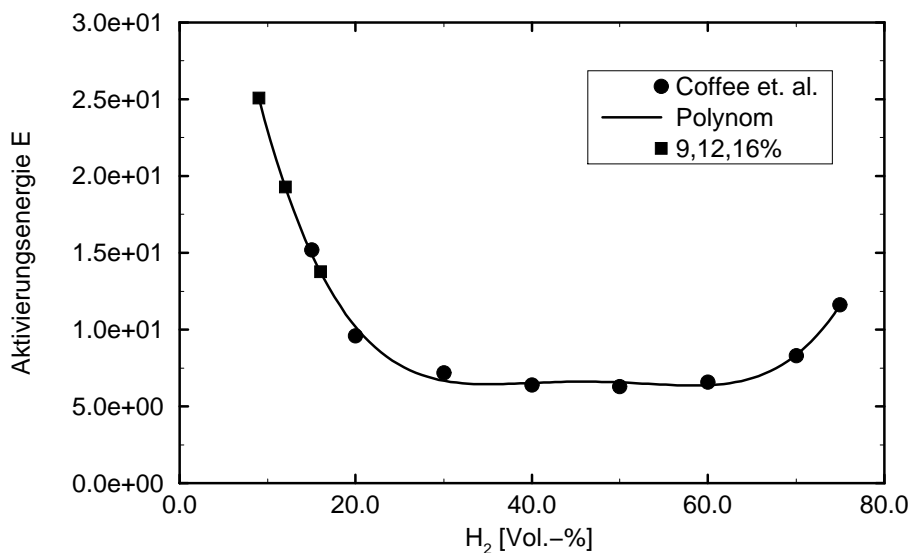
Tabelle 6: Reaktionskonstanten nach Coffee et al. [CKM83]

X_{H_2}	A'	E
15.0	$1.58 \cdot 10^{17}$	15.2
20.0	$1.48 \cdot 10^{16}$	9.6
30.0	$5.51 \cdot 10^{15}$	7.2
40.0	$2.06 \cdot 10^{15}$	6.4
50.0	$9.61 \cdot 10^{14}$	6.3
60.0	$4.84 \cdot 10^{14}$	6.6
70.0	$3.47 \cdot 10^{14}$	8.3
75.0	$7.60 \cdot 10^{14}$	11.6
9.0	$8.01 \cdot 10^{17}$	25.1
12.0	$2.44 \cdot 10^{17}$	19.3
16.0	$7.43 \cdot 10^{16}$	13.8

Der Konzentrationsbereich der von den Angaben von Coffee et al. abgedeckt wird, beginnt im unterstöchiometrischen Bereich bei 15 Vol.-% H_2 . Der in der vorliegenden Arbeit untersuchte Konzentrationsbereich lag zwischen 9 Vol.-% und 16 Vol.-% H_2 , so daß die angegebenen Werte für die in



(a) Preexponentieller Faktor



(b) Aktivierungsenergie

Abbildung 4.14: Extrapolation der Reaktionskonstanten nach Coffee et al. [CKM83]

dieser Arbeit durchgeführten Untersuchungen extrapoliert werden mußten. Zur Extrapolation wurde für den preexponentiellen Faktor A' ein Ansatz der Form $y = ax^b$ und für die Aktivierungsenergie ein Polynom vierter Ordnung verwendet, wobei die beiden Koeffizienten a und b nach der Methode der kleinsten Fehlerquadrate bestimmt wurden. Die so extrapolierten Werte sind in Tabelle 6 ebenfalls angegeben. Unter Berücksichtigung von (4.3.1) erhält man somit nach der Umrechnung auf die für den Vergleich verwendeten Einheiten die Zahlenwerte in Tabelle 8.

Varma et al.

Varma et al. [VCB86] ermittelten die gesuchten Konstanten ebenfalls aus der Simulation einer eindimensionalen stationären laminaren Flamme mit einem globalen Reaktionsschema. Sie zogen zum Vergleich jedoch zwei verschiedene detaillierte Mechanismen (Dixon-Lewis [DL83] und Westbrook [Wes82, Wes83] – auch als Westbrook-Dryer Mechanismus bekannt) heran. Betrachtet wurde dabei vor allem die laminare Brenngeschwindigkeit und das sich ergebende Temperaturprofil senkrecht zur Flammenfront. Die Ergebnisse, die sie erhielten, zeigten bessere Übereinstimmung mit dem Dixon-Lewis Mechanismus. Sie geben die gesuchten Konstanten für die Reaktionsrate in der folgenden Form an:

$$w_1 = M_1 A e^{-\frac{T_A}{T}} \left(\frac{\rho Y_1}{M_1} \right)^{\nu'_1} \left(\frac{\rho Y_2}{M_2} \right)^{\nu'_2} .$$

Im Gegensatz zu Marathe et al. werden die Zahlenwerte jedoch in Abhängigkeit vom Äquivalenzverhältnis Φ für fünf diskrete Werte zwischen

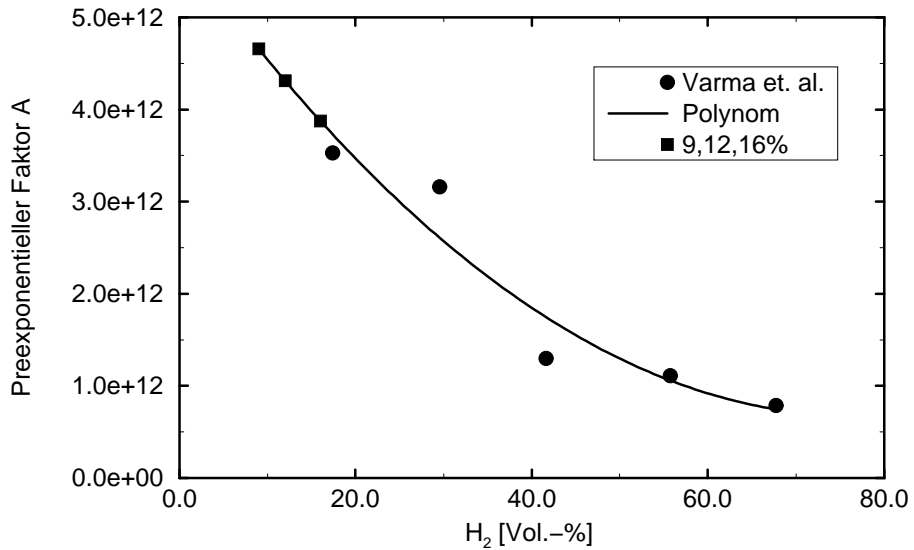
Tabelle 7: Reaktionskonstanten nach Varma et al. [VCB86]

Φ	X_{H_2}	A	T_A
0.5	17.39	$3.530 \cdot 10^{12}$	3670.0
1.0	29.57	$3.160 \cdot 10^{12}$	2950.0
1.7	41.66	$1.300 \cdot 10^{12}$	2450.0
3.0	55.75	$1.110 \cdot 10^{12}$	2950.0
5.0	67.74	$0.787 \cdot 10^{12}$	3300.0
	9.00	$4.657 \cdot 10^{12}$	4419.2
	12.00	$4.312 \cdot 10^{12}$	4123.7
	16.00	$3.877 \cdot 10^{12}$	3770.3

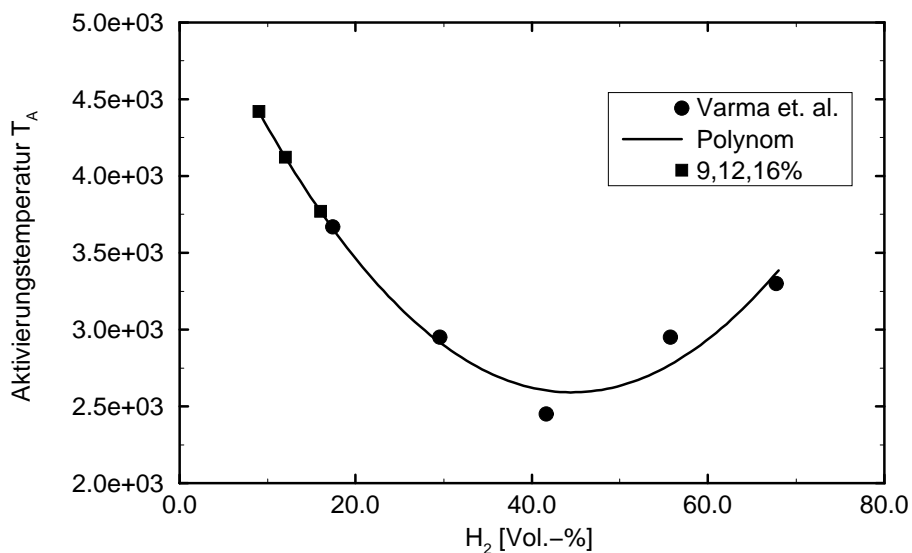
0.5 und 5.0 angegeben:

$$\nu'_1 = 1.1 [-], \nu'_2 = 1.1 [-]$$

$$A \text{ s. Tabelle 7 } \left[\frac{1}{\text{sec}} \left(\frac{\text{cm}^3}{\text{mol}} \right)^{1.2} \right], T_A \text{ s. Tabelle 7, } [K].$$



(a) Preexponentieller Faktor



(b) Aktivierungstemperatur

Abbildung 4.15: Extrapolation der Reaktionskonstanten nach Varma et al. [VCB86]

Für eine Verbrennungsreaktion mit Luft (21% Volumenanteil Sauerstoff in der Luft, d.h. $X_{\text{O}_2, \text{L}} = X_{\text{O}_2} / X_{\text{N}_2} = 21/79$) besteht folgender Zusammenhang zwischen Äquivalenzverhältnis und Volumenanteil H_2 :

$$X_1 = \frac{1}{1 + \frac{\nu}{\Phi} \left(1 + \frac{1}{X_{\text{O}_2, \text{L}}} \right)}.$$

Zur Extrapolation auf den betrachteten Konzentrationsbereich wurden quadratische Polynome (Abbildung 4.15) verwendet. Die erhaltenen Werte finden sich in Tabelle 7.

Travis

Travis [Tra87] verwendete ein globales Modell, das ähnlich auch in verschiedenen in Los Alamos entwickelten Programmen (vgl. [RFB75, RD79, CDRA82, ADOR85]) eingesetzt wird. Er gibt, unabhängig von der Wasserstoffkonzentration, die Reaktionsrate wie folgt an:

$$w_1 = 2M_1 C_f e^{-\frac{T_A}{T}} \left(\frac{\rho Y_1}{M_1} \right)^{\nu'_1} \left(\frac{\rho Y_2}{M_2} \right)^{\nu'_2}.$$

Die Zahlenwerte sind dabei

$$\begin{aligned} \nu'_1 &= 1 \quad [-] \\ \nu'_2 &= 1 \quad [-] \\ C_f &= 3.3 \cdot 10^5 \left[\frac{1}{\text{sec}} \left(\frac{\text{m}^3}{\text{mol}} \right) \right] \\ T_A &= 10^4 [K]. \end{aligned}$$

Umgerechnet ergeben sich die Werte, die in Tabelle 8 angegeben sind.

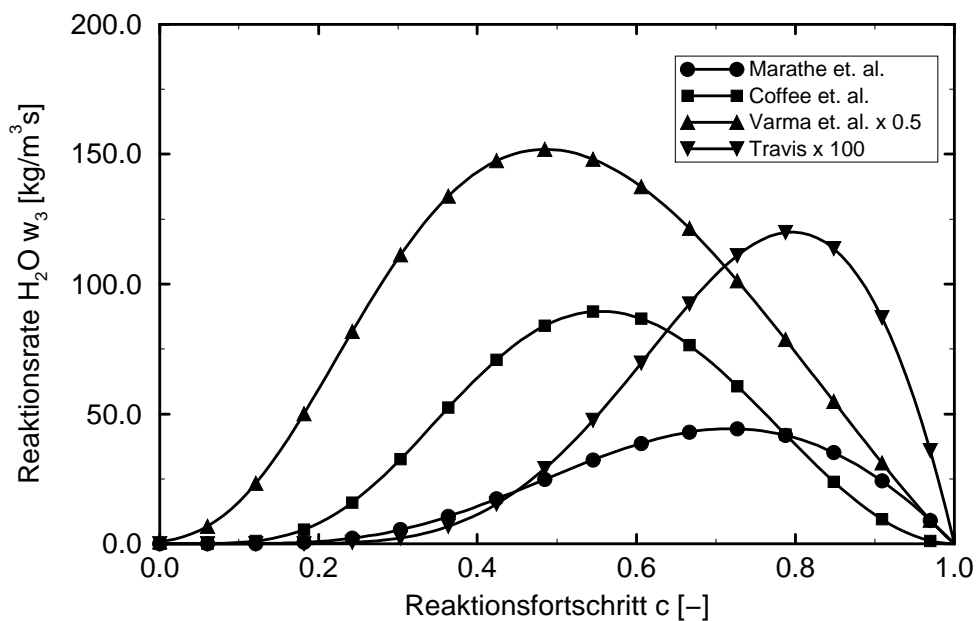
Bereits ein Vergleich in Tabelle 8 zeigt, daß sich die die Reaktionsrate bestimmenden Konstanten zum Teil erheblich unterscheiden. Berechnet man mit den angegebenen Werten die gesuchte Reaktionsrate w_3 in Abhängigkeit vom Reaktionsfortschritt (Gleichung (4.2.15)), so werden die Unterschiede der einzelnen Schemata deutlich. Abbildung 4.16 zeigt $w_3(c)$ für die Ausgangsbedingungen 16 Vol.-% H_2 , $p = 1.013$ bar und $T_0 = 293.15$ K. Es

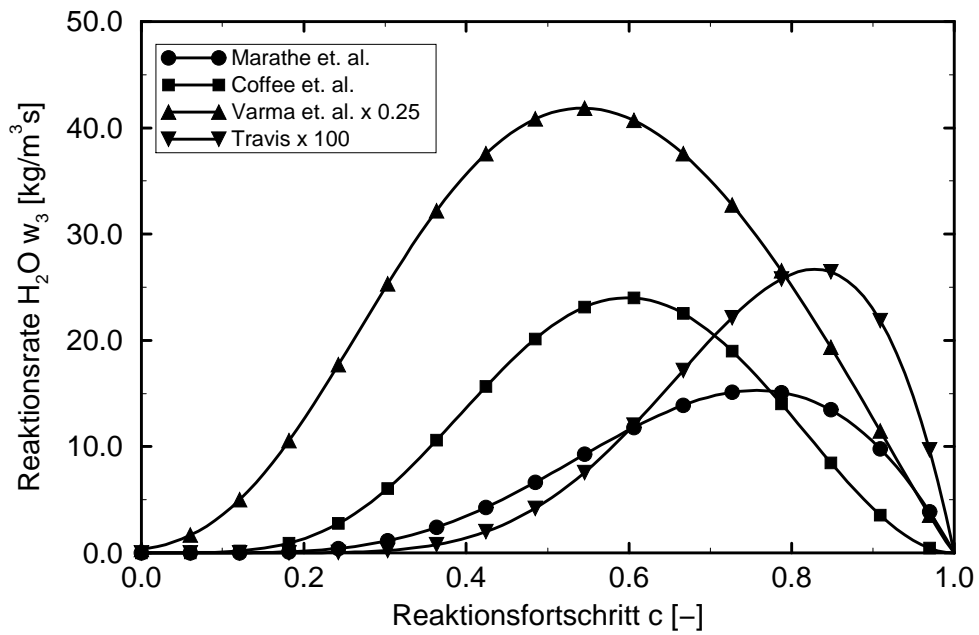
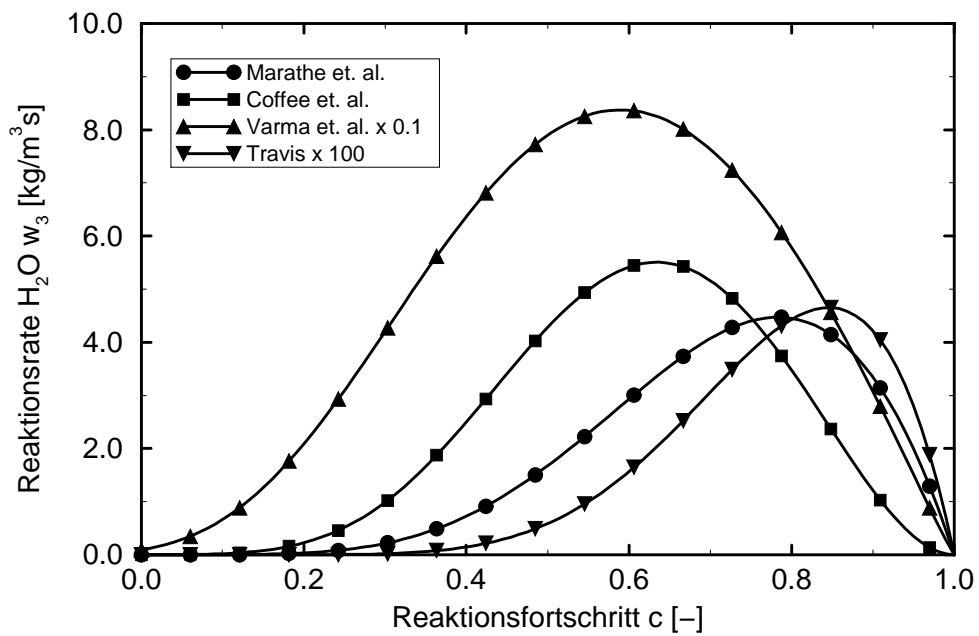
Tabelle 8: Reaktionskonstanten für verschiedene globale Einschrittmechanismen

Autor	H ₂ -Vol.-%	ν'_1	ν'_2	A	n	E
Marathe et al. [MMJ77]		1.00	0.92	$5.14 \cdot 10^{08}$	0	$57.767 \cdot 10^{03}$
Coffee et al. [CKM83]	9.0	2.00	1.00	$2.57 \cdot 10^{13}$	0	$105.07 \cdot 10^{03}$
	12.0	2.00	1.00	$7.81 \cdot 10^{12}$	0	$80.79 \cdot 10^{03}$
	16.0	2.00	1.00	$2.38 \cdot 10^{12}$	0	$57.77 \cdot 10^{03}$
Varma et al. [VCB86]	9.0	1.10	1.10	$1.17 \cdot 10^{09}$	0	$36.741 \cdot 10^{03}$
	12.0	1.10	1.10	$1.08 \cdot 10^{09}$	0	$34.285 \cdot 10^{03}$
	16.0	1.10	1.10	$9.74 \cdot 10^{08}$	0	$31.346 \cdot 10^{03}$
Travis [Tra87]		1.00	1.00	$3.30 \cdot 10^{08}$	0	$83.140 \cdot 10^{03}$

ist zu beachten, daß sowohl die Kurve von Travis als auch die von Varma et al. wie in den Legenden angegeben skaliert werden mußten, um im gleichen Wertebereich dargestellt werden zu können. Für die Kurve von Varma et al. ist die Diskrepanz für 12 Vol.-% und 9 Vol.-% H₂-Ausgangskonzentration (Abbildung 4.17) noch größer. Die maximalen Reaktionsraten differieren dadurch um bis zu drei Größenordnungen.

Genauere Betrachtungen zeigen jedoch, daß sich nicht nur die maximalen Reaktionsraten deutlich unterscheiden. Betrachtet man die beiden Abbildungen 4.16 und 4.17, so erkennt man auch deutliche Unterschiede im

**Abbildung 4.16:** Vergleich der Reaktionsraten $w_3(c)$ bei 16 Vol.-% H₂

(a) 12 Vol.-% H₂(b) 9 Vol.-% H₂Abbildung 4.17: Vergleich der Reaktionsraten $w_3(c)$

Verlauf von $w_3(c)$ über dem Reaktionsfortschritt. Die Kurven von Marathe et al. und Travis entsprechen dem Modellverlauf von Bray [Bra80] (Gleichung (4.2.31)), während die beiden anderen Kurven bereits am Anfang der Reaktion schon höhere Reaktionsraten ergeben. Aufgrund dieser Unterschiede ist es schwierig, eines der Reaktionsschemata als zwingend korrekt für die durchzuführenden Berechnungen auszuwählen. Es wurde daher nach einer Möglichkeit gesucht, zumindest die Größenordnung, in der die Reaktionsraten zu erwarten sind, zu ermitteln. In der vorliegenden Arbeit wurden hierzu Simulationen einfacher reaktiver Strömungen mit detaillierten Reaktionsmechanismen verwendet. Die dabei verwendete Vorgehensweise ist im nächsten Abschnitt beschrieben.

4.3.2 Detaillierte Reaktionskinetik

Eines der Hauptprobleme der im letzten Abschnitt untersuchten globalen Einschrittmodelle im Hinblick auf eine korrekte Wiedergabe der Summenreaktionsrate ist, daß die Berechnung der Reaktionsrate unter der Voraussetzung erfolgt, daß $\sum_{\alpha=1}^N Y_{\alpha} = 1$ für die vier an der Reaktion beteiligten Spezies H_2 , O_2 , H_2O und N_2 . Betrachtet man einen detaillierten Reaktionsmechanismus wie beispielsweise den von Mass und Warnatz [MW88, WM93] (Abbildung 4.18), erkennt man jedoch, daß bei der Reaktion auch andere Spezies, vor allem Radikale, eine Rolle spielen, nämlich H , O , OH , HO_2 und H_2O_2 . Die obige Bedingung für die Summe der Massenanteile ist daher bei einer realen Reaktion für die vier betrachteten Spezies nicht immer erfüllt. Zudem kommt es durch die beteiligten Elementarreaktionen häufig zu Induktionsvorgängen, die sich dadurch auszeichnen, daß durch eine Reaktion erst eine gewisse Menge eines Zwischenproduktes gebildet werden muß, bis eine andere Reaktion überhaupt beginnen kann. Solche Mechanismen können naturgemäß durch eine Einschrittbetrachtung nicht abgebildet werden. Es lag daher nahe, durch eine Simulation mit einem detaillierten Reaktionsmechanismus die Plausibilität der globalen Reaktionsraten im obigen Abschnitt zu überprüfen.

Es existieren Programmsysteme, mit denen es möglich ist, die sich ergebenden Systeme von gewöhnlichen Differentialgleichungen für die Reaktionsraten effizient zu lösen. Ein solches Paket ist beispielsweise die *Sandia gas phase chemical kinetics subroutine library* [KRM89] (auch bekannt

Reaktion	A	β	E_a
(1,2) O ₂ + H \rightleftharpoons OH + O	$2.20 \cdot 10^{14}$	0.00	70.3
(3,4) H ₂ + O \rightleftharpoons OH + H	$5.06 \cdot 10^{04}$	2.67	26.3
(5,6) H ₂ + OH \rightleftharpoons H ₂ O + H	$1.00 \cdot 10^{08}$	1.60	13.8
(7,8) OH + OH \rightleftharpoons H ₂ O + O	$1.50 \cdot 10^{09}$	1.14	0.4
(9,10) H + H + M' \rightleftharpoons H ₂ + M'	$1.80 \cdot 10^{18}$	-1.00	0.0
(11,12) H + OH + M' \rightleftharpoons H ₂ O + M'	$2.20 \cdot 10^{22}$	-2.00	0.0
(13,14) O + O + M' \rightleftharpoons O ₂ + M'	$2.90 \cdot 10^{17}$	-1.00	0.0
(15,16) H + O ₂ + M' \rightleftharpoons HO ₂ + M'	$2.30 \cdot 10^{18}$	-0.80	0.0
(17,18) HO ₂ + H \rightleftharpoons OH + OH	$1.50 \cdot 10^{14}$	0.00	4.2
(19,20) HO ₂ + H \rightleftharpoons H ₂ + O ₂	$2.50 \cdot 10^{13}$	0.00	2.9
(21,22) HO ₂ + H \rightleftharpoons H ₂ O + O	$3.00 \cdot 10^{13}$	0.00	7.2
(23,24) HO ₂ + O \rightleftharpoons OH + O ₂	$1.80 \cdot 10^{13}$	0.00	-1.7
(25,26) HO ₂ + OH \rightleftharpoons H ₂ O + O ₂	$6.00 \cdot 10^{13}$	0.00	0.0
(27) HO ₂ + HO ₂ \rightarrow H ₂ O ₂ + O ₂	$2.50 \cdot 10^{11}$	0.00	-5.2
(28,29) OH + OH + M' \rightleftharpoons H ₂ O ₂ + M'	$3.25 \cdot 10^{22}$	-2.00	0.0
(30,31) H ₂ O ₂ + H \rightleftharpoons H ₂ + HO ₂	$1.70 \cdot 10^{12}$	0.00	15.7
(32,33) H ₂ O ₂ + H \rightleftharpoons H ₂ O + OH	$1.00 \cdot 10^{13}$	0.00	15.0
(34,35) H ₂ O ₂ + O \rightleftharpoons OH + HO ₂	$2.80 \cdot 10^{13}$	0.00	26.8
(36,37) H ₂ O ₂ + OH \rightleftharpoons H ₂ O + HO ₂	$5.40 \cdot 10^{12}$	0.00	4.2

$$k = AT^\beta \exp\left(-\frac{E_A}{RT}\right); A \text{ in } [\text{cm}, \text{mol}, \text{s}]; E_A \text{ in kJ/mol};$$

$$c_{M'} = 1.00c_{\text{H}_2} + 0.35c_{\text{O}_2} + 6.50c_{\text{H}_2\text{O}} + 0.50c_{\text{N}_2} + 1.50c_{\text{CO}} + 1.50c_{\text{CO}_2}$$

Abbildung 4.18: H₂-O₂-N₂ Reaktionsmechanismus nach Maas und Warnatz [WM93, MW88]

als CHEMKIN). Im Rahmen der durchzuführenden Untersuchungen wurde das Programm PREMIX [KGSM85] aus dem CHEMKIN-Paket eingesetzt, mit dem es möglich ist, laminare, eindimensionale Flammen zu berechnen. Außerdem wurde für Auswerterroutinen auf die Unterprogramm-Bibliothek von CHEMKIN zurückgegriffen. Ein weiteres Programm, das in der Lage ist, diesen einfachen Strömungsfall mit detaillierter Reaktionskinetik zu berechnen, ist INSFLA, das von Maas [Maa88, MW88] an der Universität Stuttgart entwickelt wurde¹⁴. Da beide Programme lediglich angewendet wurden, wird auf die Einzelheiten der Berechnungsmethoden in der vorliegenden Arbeit nicht eingegangen. Für Detaildarstellungen der beiden Programme wird auf [KRM89] und [Maa88] verwiesen.

¹⁴INSFLA wurde dankenswerterweise vom Institut für Technische Verbrennung der Universität Stuttgart für die vorliegenden Berechnungen zur Verfügung gestellt.

Als Eingabedaten benötigen beide Programme einen Reaktionsmechanismus der Form der Tabelle in Abbildung 4.18, sowie Angaben über die thermodynamischen Stoffeigenschaften der beteiligten Spezies. Beide Programme sind zudem in der Lage, die molekularen Stoffeigenschaften der Spezies und des mehrkomponentigen Gemisches zu berechnen. CHEMKIN stellt hierzu weitere Unterroutrinen (s. [KDLW⁺86]) zur Verfügung. INSFLA ermöglicht die Berücksichtigung programmintern. Hierfür sind molekulare Parameter für jede beteiligte Spezies anzugeben. Für die Berechnungen mit beiden Programmen bestehen die Eingabedaten somit aus:

- Reaktionsmechanismus
- Thermodynamische Datenbasis
- Molekulare Parameter der Spezies

Die betrachtete Modellflamme, die beide Programme zugrunde legen, ist vorgemischt, laminar, eindimensional und adiabat. Eine solche Flamme *frißt* sich gewissermaßen mit ihrer Reaktionsgeschwindigkeit in den unreaktierten Bereich hinein. Durch das Mitführen des Koordinatensystems mit der Flammenfront wird das betrachtete Problem stationär. In dieser Betrachtungsweise muß unverbranntes Gemisch mit der laminaren Brenngeschwindigkeit vor der Flamme in das Berechnungsgebiet einströmen, und verbranntes dahinter aufgrund der erfolgten Aufwärmung des Gemisches mit entsprechend erhöhter Geschwindigkeit abströmen.

Um die Handhabung und Vergleichbarkeit der Ergebnisse beider Programme zu überprüfen, wurde zunächst für ein stöchiometrisches Gemisch eine Vergleichsrechnung durchgeführt. Abbildung 4.19 zeigt den mit PREMIX berechneten Verlauf der Massenanteile für H_2 , O_2 und H_2O , sowie der Temperatur entlang der x -Achse, d.h. vom Einströmrand durch die Flamme (bei $x = 0$ m) zum Ausströmrand. Man erkennt die dünne Reaktionszone, in der die Reaktionspartner H_2 und O_2 verbraucht werden und das Reaktionsprodukt H_2O entsteht. Die gleiche Berechnung mit INSFLA ergibt die in Abbildung 4.20 dargestellten Verläufe. Vergleicht man die Lage der beiden Flammen längs der x -Achsen, erkennt man einen grundlegenden Unterschied der beiden Programme. Bei Berechnungen mit PREMIX ist die Lage des Koordinatenursprungs festzulegen. Spezifiziert wird hierzu eine Temperatur (z.B. 400 K) und das Programm verschiebt die Achse

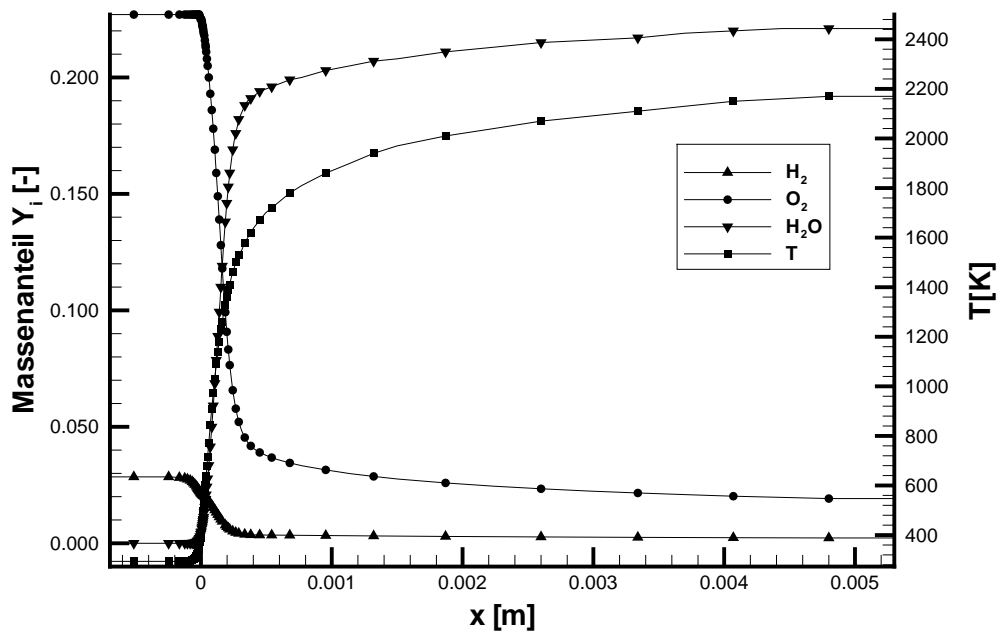


Abbildung 4.19: Stöchiometrische Modellflamme mit PREMIX

so, daß das berechnete Temperaturprofil bei $x = 0$ m diesen Wert erreicht. INSFLA verwendet eine solche Vorgabe der Achsenverschiebung nicht. Um die beiden Verläufe vergleichen zu können, muß daher einer der beiden verschoben werden. In einem Nachbearbeitungsschritt wurde daher die x -Achse der INSFLA-Verläufe so angepaßt, daß ebenfalls bei $x = 0$ m die

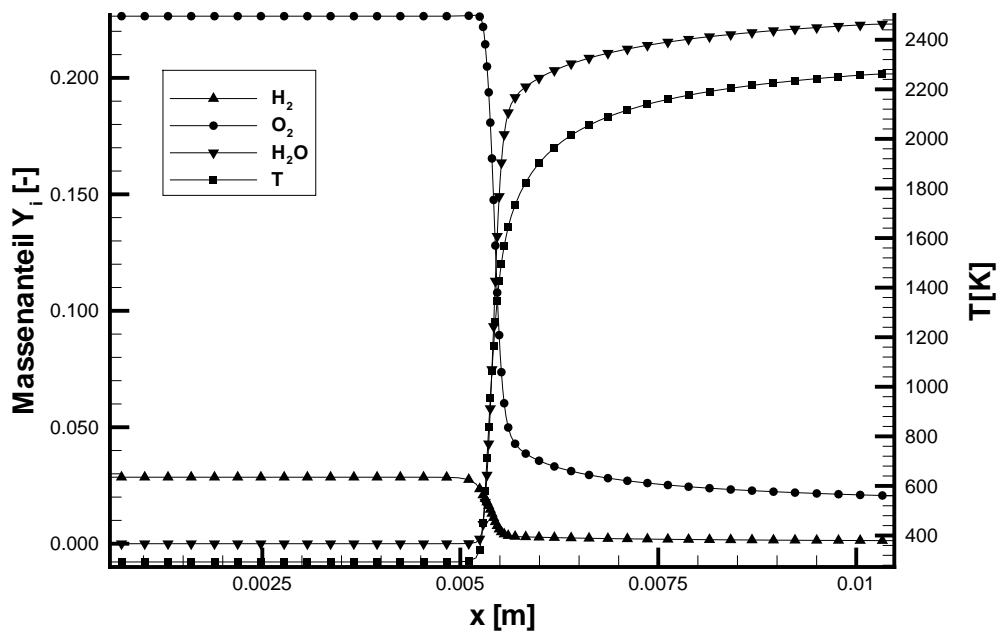


Abbildung 4.20: Stöchiometrische Modellflamme mit INSFLA

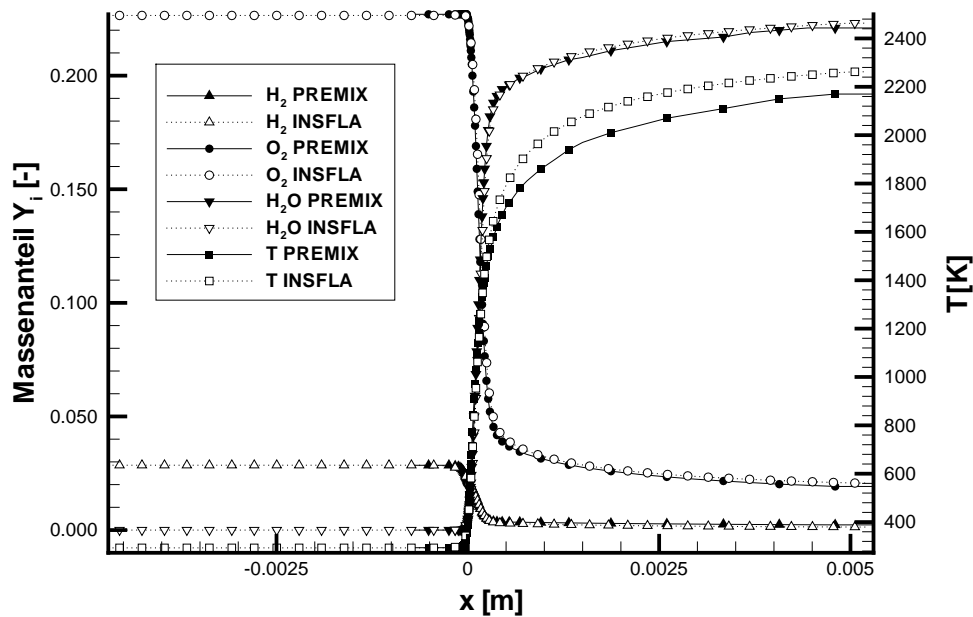


Abbildung 4.21: Vergleich der Verläufe von PREMIX und INSFLA (stöchiom. Gemisch)

Temperatur gerade den bei PREMIX vorgegebenen Wert annahm.

Der Vergleich der berechneten Verläufe ist in Abbildung 4.21 dargestellt. Die Übereinstimmung ist gut, auch wenn im Nachlauf der Flamme die Temperaturen etwas voneinander abweichen. Die Berechnungen mit INSFLA erfolgten für diesen Fall mit nicht optimierten Parametern, was beispielsweise dazu führt, daß sich die Flamme zu nahe am Ausströmrand befindet. In diesem Bereich sollten die Verläufe waagrecht sein (wie bei PREMIX), um beispielsweise zu vermeiden, daß ein Wärmestrom durch den Ausströmrand auftritt, der die Bedingung der adiabaten Betrachtung verletzt. Beide Programme führen während der Berechnung eine Neuverteilung der Gitterpunkte durch, um Bereiche hoher Gradienten besser aufzulösen. Während PREMIX jedoch auch zusätzliche Punkte einfügt, verteilt INSFLA die Punkte lediglich um. Da die Ergebnisse jedoch trotzdem vergleichbar sind, führte die höhere Zuverlässigkeit, auch im stark unterstöchiometrischen Konzentrationsbereich konvergente Lösungen zu erhalten, dazu, daß für die weiteren Berechnungen das Programm INSFLA verwendet wurde.

Als Beispiel sind in Abbildung 4.22 auch die Verläufe der Reaktionszwischenprodukte der besseren Darstellbarkeit halber als Molanteile mit aufgezeigt. Man erkennt aufgrund der notwendigen Skalierung, daß teilweise

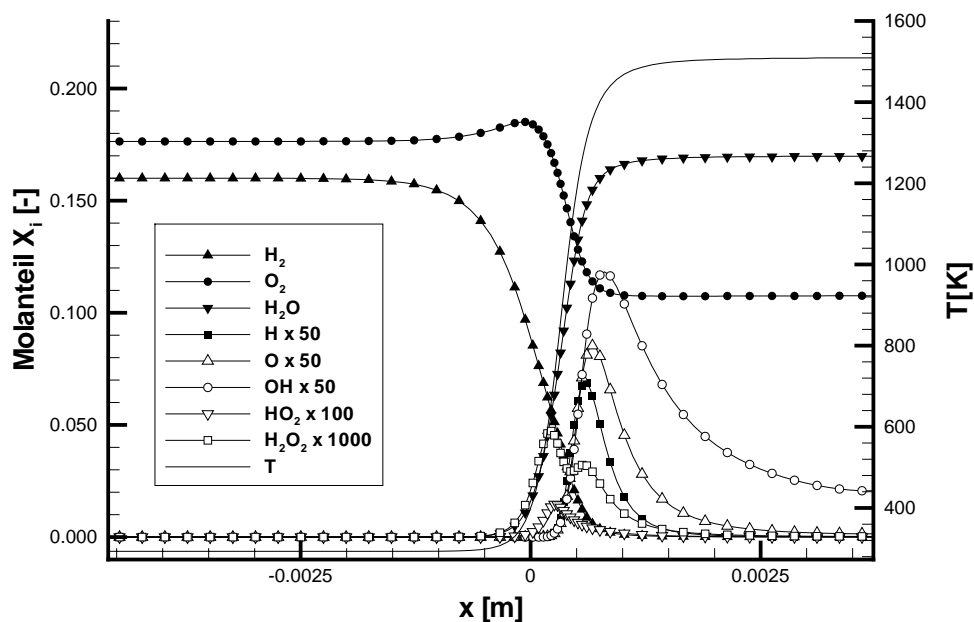
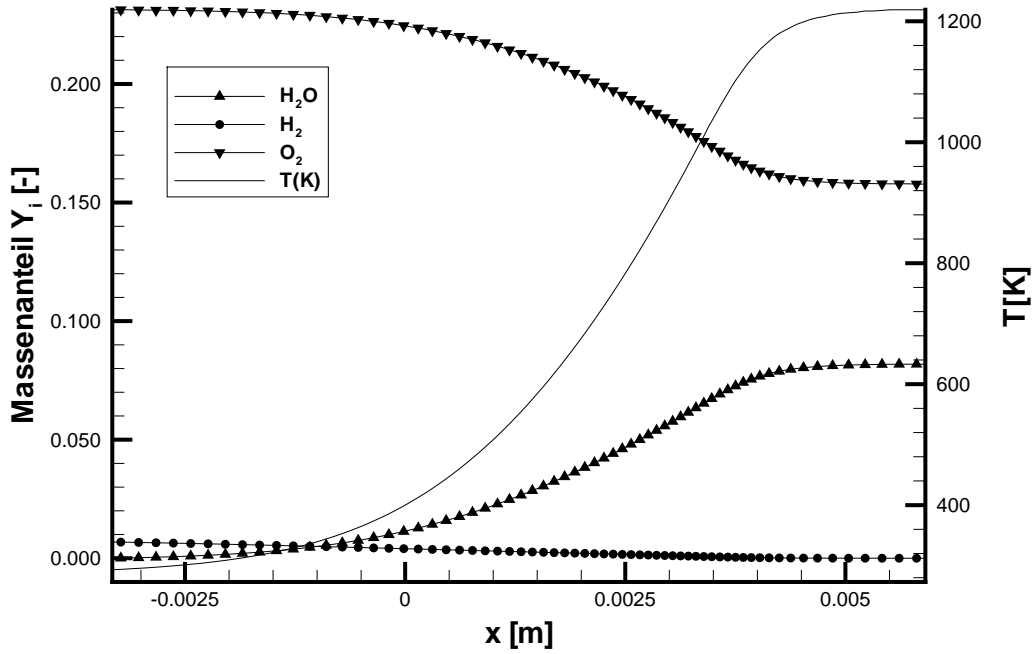
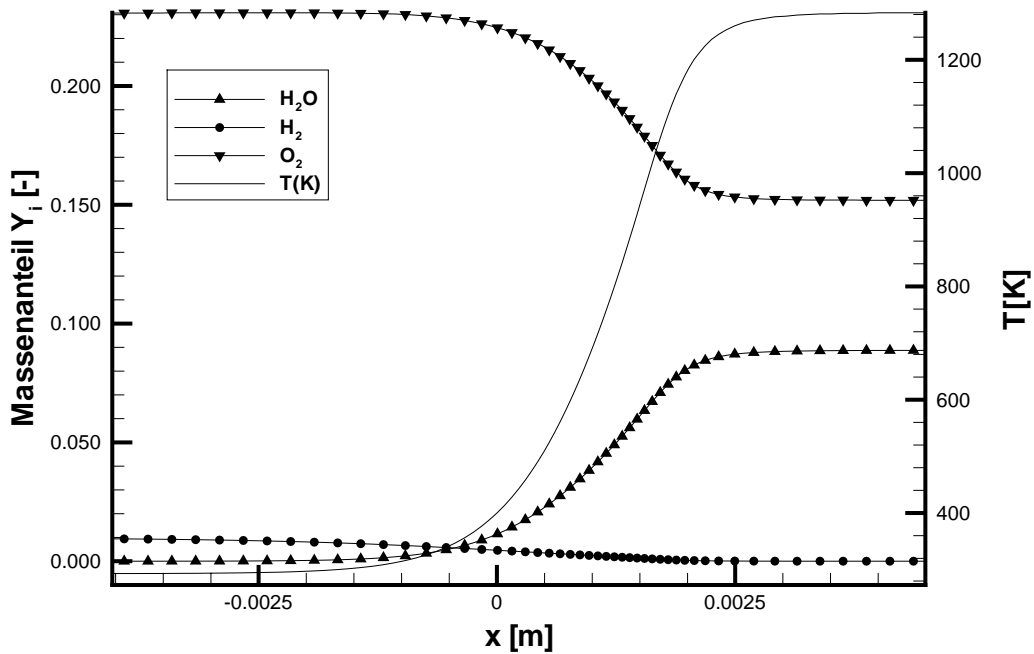


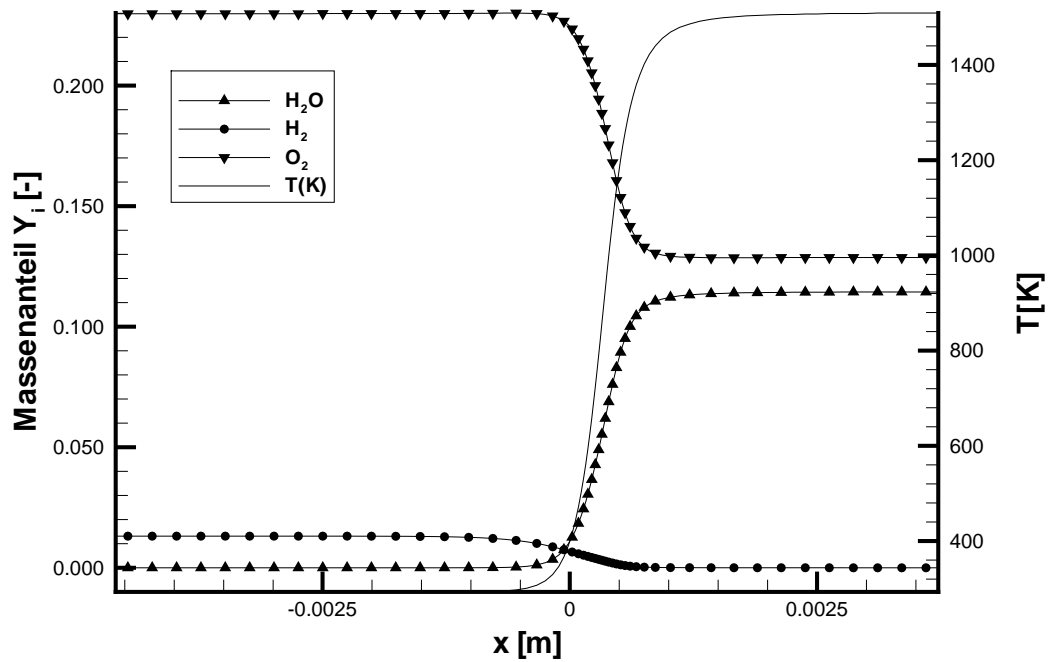
Abbildung 4.22: Molanteilverläufe für alle Spezies für 16 Vol.-% H_2

nur Spuren dieser Spezies auftreten.

Trotz der zum Teil großen Anzahl an berücksichtigten Elementarreaktionen stellen auch die detaillierten Reaktionsmechanismen lediglich Modelle für den tatsächlichen chemischen Reaktionsvorgang dar. Die angegebenen Reaktionskonstanten der Arrheniusbeziehung für die Elementarreaktionen werden ebenfalls durch den Vergleich mit Experimenten festgelegt, so daß nicht jeder Mechanismus für jede Reaktionsberechnung gleich gut geeignet ist. Ein Vergleich verschiedener Mechanismen für überstöchiometrische Flammen findet sich in Vandooren und Bian [VB90] bzw. für Detonationsvorgänge in Akbar et al. [AKSS98].

Für die vorliegende Arbeit wurden fünf verschiedene Mechanismen für den unterstöchiometrischen Bereich betrachtet. Im einzelnen waren dies der Mechanismus von Dixon-Lewis [DL83], *GRIMech 2.11* von Frenklach et al. [FWB⁺95, BHD⁺], der *Leeds Methane Oxidation Mechanism* [PTH], der Mechanismus von Maas und Warnatz [MW88, WM93] sowie der von Miller und Bowman [MB89]. Die Berechnungen zeigten, daß für die durchzuführenden Berechnungen der Mechanismus von Maas und Warnatz am zuverlässigsten konvergierende Berechnungen zuließ. Warnatz und Maas [WM93] geben den Mechanismus ausdrücklich für ... *nicht zu fette Bedingungen* an. Trotzdem gestalteten sich die Berechnungen insbesondere für

Abbildung 4.23: INSFLA-Verläufe für 9 Vol.-% H₂Abbildung 4.24: INSFLA-Verläufe für 12 Vol.-% H₂

Abbildung 4.25: INSFLA-Verläufe für 16 Vol.-% H_2

das magerste Gemisch mit 9 Vol.-% H_2 sehr schwierig. Für diese Konzentration ist mit den vom Programm vorgegebenen Initialisierungsprofilen keine Lösung zu erreichen. Nur mit Profilen, die sich aus einer bereits konvergierten Berechnungen mit 10 Vol.-% H_2 ergaben, war die Lösung möglich. Diese Lösung wiederum konnte nur mit den Ergebnisprofilen einer 11%-Berechnung als Startprofil (usw.) gewonnen werden. Für 12 und 16% konnten die Lösungen direkt erzielt werden.

Die mit INSFLA berechneten Massenanteilverläufe für die betrachteten Konzentrationsfälle 9, 12 und 16 Vol.-% H_2 sind in den Abbildungen 4.23 bis 4.25 dargestellt. Aus den Berechnungen erhält man für die betrachtete Modellflamme alle Spezieskonzentrationen sowie die Temperatur in Abhängigkeit von der Ortsvariable x . Damit kann auch $Y_3(x)$ und hieraus durch Normalisierung mit der Anfangs- und Endkonzentration der Reaktionsfortschritt c

$$c = \frac{Y_3 - Y_3|_{x=0}}{Y_3|_{x,end} - Y_3|_{x=0}},$$

und somit auch alle anderen Spezieskonzentrationen in Abhängigkeit von diesem bestimmt werden. Da alle Konzentrationen, wie auch die Temperatur bestimmt sind, liegt auch die Reaktionsrate für alle Spezies fest. Das

CHEMKIN-Paket stellt zur Berechnung der Reaktionsraten Unterprogramme zur Verfügung, die in der vorliegenden Arbeit zur Weiterverarbeitung der mit INSFLA gewonnenen Ergebnisse eingesetzt wurden. Als Ergebnis erhält man die Summenreaktionsrate über alle Elementarreaktionen für alle Spezies. Auf diese Art kann die gesuchte Reaktionsrate $w_3(c)$ bestimmt werden. In Abbildung 4.26 sind die aus dem vorangegangenen Abschnitt bekannten Schemata (bis auf Varma et al.) mit dem so berechneten Verlauf zusammen dargestellt. Es wird deutlich, daß sowohl das Schema von Coffee et al. als auch das von Marathe die richtige Größenordnung der Reaktionsrate treffen. Zum Vergleich wurde auch der Verlauf von Travis entsprechend skaliert dargestellt. Man erkennt, daß dieser mit einem geeigneten Vorfaktor ein ganz ausgezeichnetes Modell des mit INSFLA berechneten Verlaufes darstellt. Für 12 und 9 Vol.-% H_2 (vgl. Abbildungen 4.27 und 4.28) liegen jedoch alle Einschrittmodelle sowohl bezüglich maximaler Reaktionsrate als auch dem Kurvenverlauf über bzw. vor der INSFLA-Berechnung.

Erinnert man sich an die Modellfunktion für $w_3(c)$, die in Abschnitt 4.2.4 (Gleichung (4.2.31)) verwendet wurde, so kann Gleichung (4.2.32) auch verwendet werden, um für ein gegebenes c_{\max} das passende E^* zu berechnen. Mit den Werten für w_{\max} und c_{\max} aus den Reaktionskinetikberechnungen

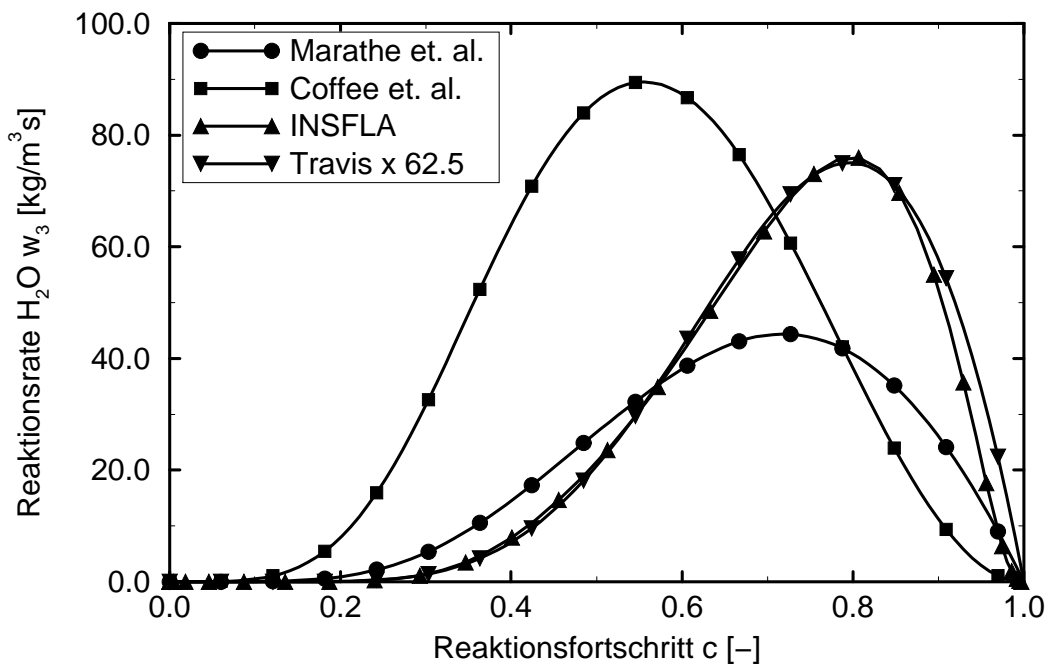


Abbildung 4.26: Vergleich von $w_3(c)$ bei 16 Vol.-% H_2 mit INSFLA-Berechnung

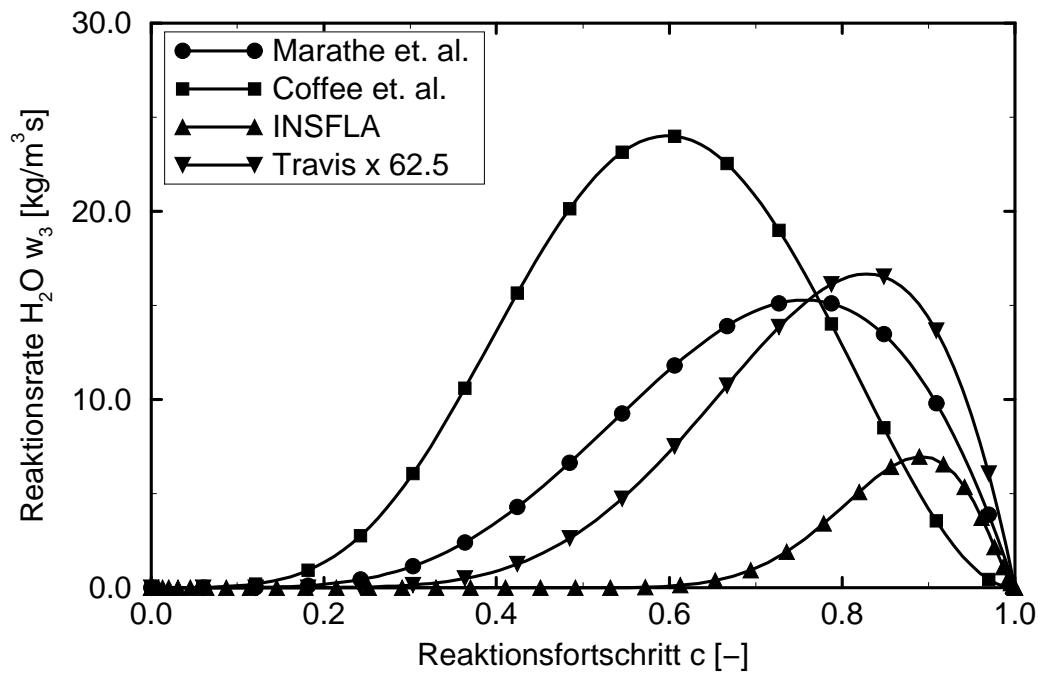


Abbildung 4.27: Vergleich von $w_3(c)$ bei 12 Vol.-% H_2 mit INSFLA-Berechnung

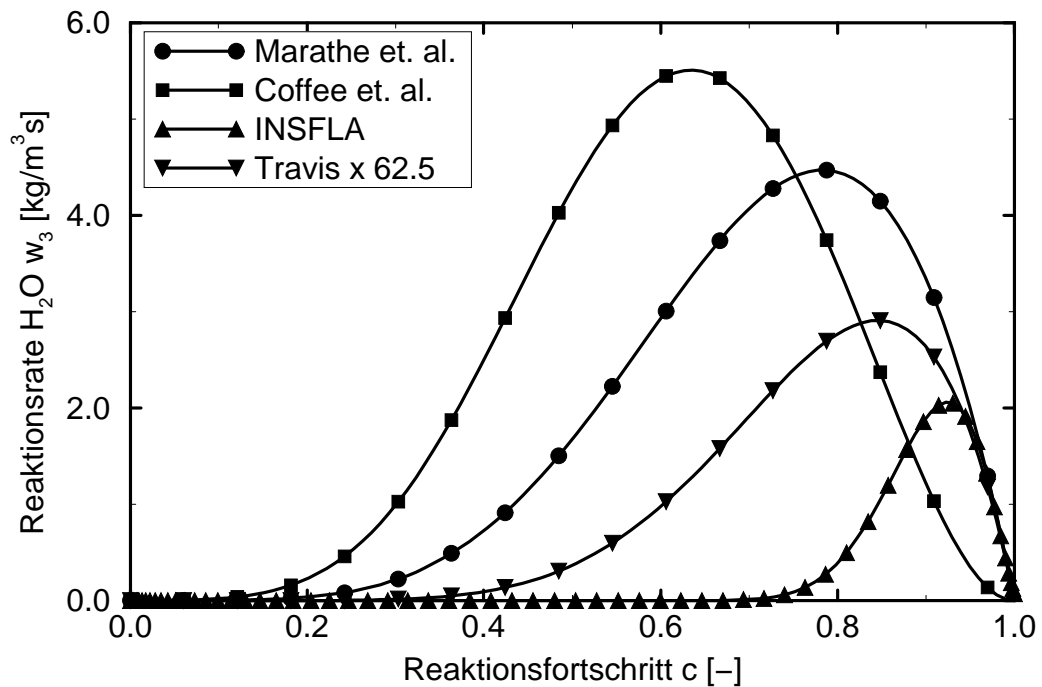


Abbildung 4.28: Vergleich von $w_3(c)$ bei 9 Vol.-% H_2 mit INSFLA-Berechnung

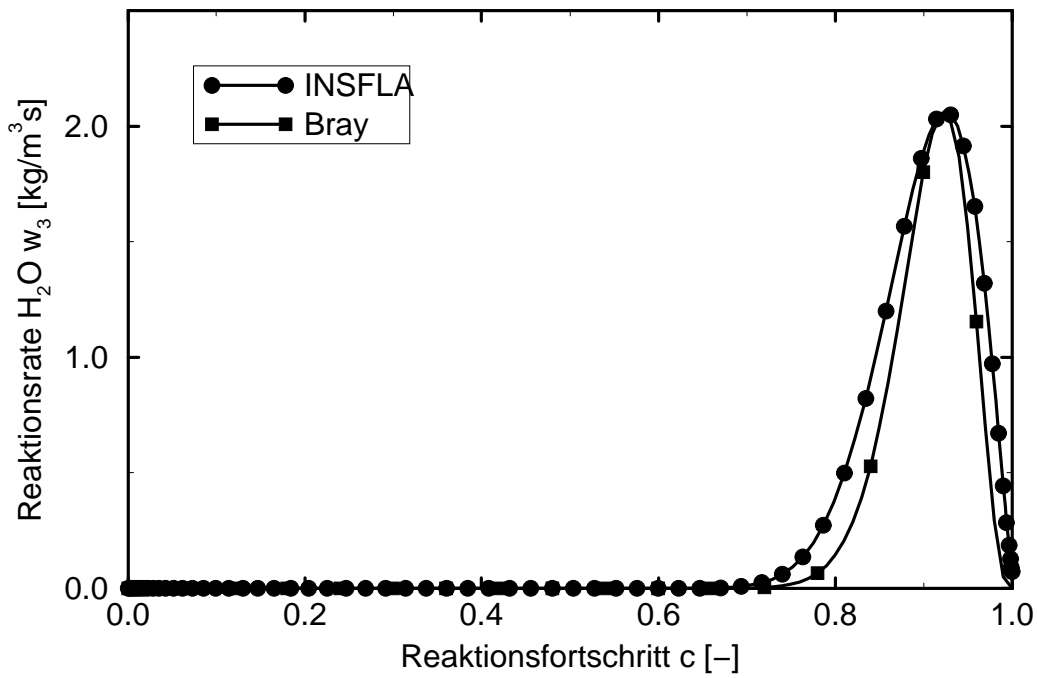


Abbildung 4.29: Vergleich von $w_3(c)$ nach Bray [Bra80] bei 9 Vol.-% H_2 mit INSFLA

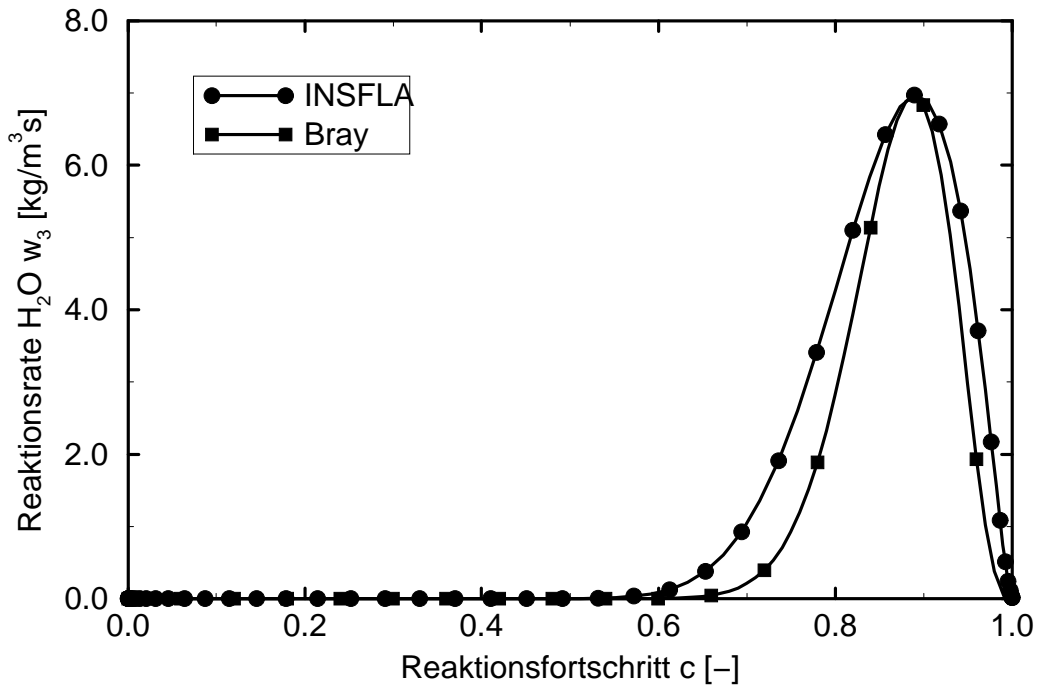


Abbildung 4.30: Vergleich von $w_3(c)$ nach Bray [Bra80] bei 12 Vol.-% H_2 mit INSFLA

können so Funktionen generiert werden, die von Wert und Lage des Maximums genau dem mit INSFLA berechneten Verlauf entsprechen. Diese Verläufe sind in den Abbildungen 4.29 bis 4.31 dargestellt. Während diese $w_3(c)$ -Verläufe jedoch gut für niedrige Konzentrationen mit den INSFLA-Verläufen korrespondieren, zeigen sich nun für 16 Vol.-% H_2 Abweichungen. Zudem liegen die Verläufe deutlich unter den mit detaillierter Reaktionskinetik berechneten Reaktionsraten. Im Sinne einer konservativen Simulation, die die tatsächlichen Reaktionsverhältnisse in keinem Fall unterschätzen darf, kann dies nicht akzeptiert werden.

In der vorliegenden Arbeit wurden daher numerisch aus den Berechnungen mit INSFLA generierte $w_3(c)$ -Verläufe für die durchzuführenden Simulationen verwendet. Die Tabellen für $\bar{w}_3(\tilde{c}, \tilde{g})$ und $\overline{c''w_3}(\tilde{c}, \tilde{g})$, die sich damit ergeben, sind für 16 Vol.-% H_2 in Abbildung 4.33 dargestellt.

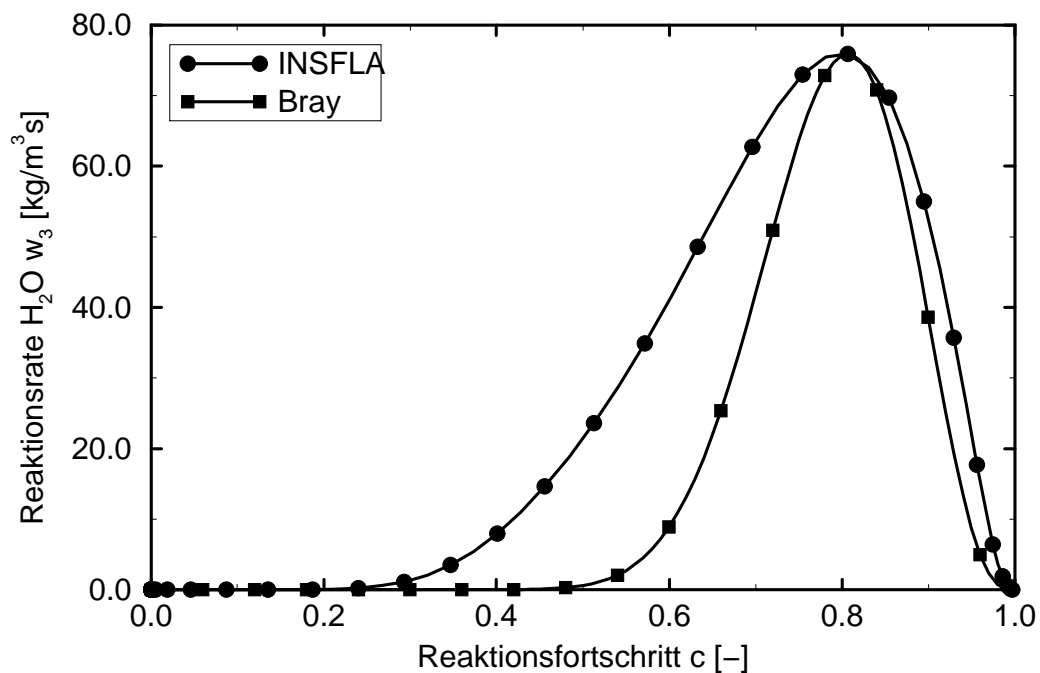


Abbildung 4.31: Vergleich von $w_3(c)$ nach Bray [Bra80] bei 16 Vol.-% H_2 mit INSFLA

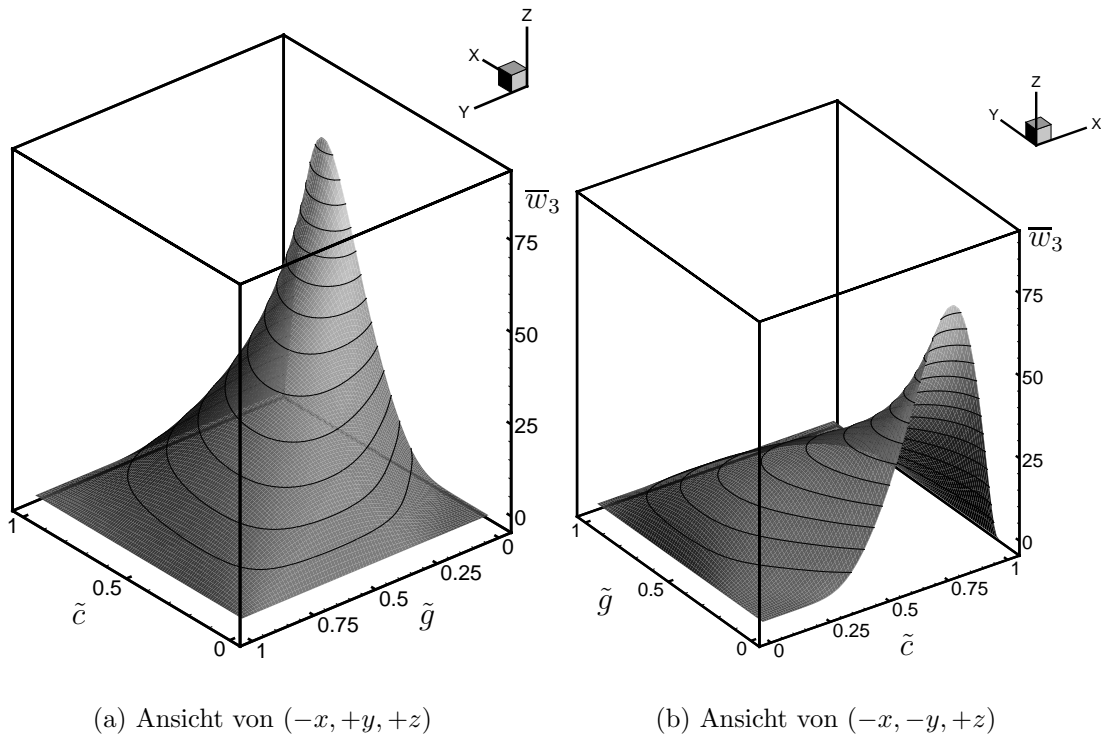


Abbildung 4.32: 16% H_2 -Tabelle $\overline{w_3}(\tilde{c}, \tilde{g})$ mit $w_3(c)$ -Verläufen von INSFLA

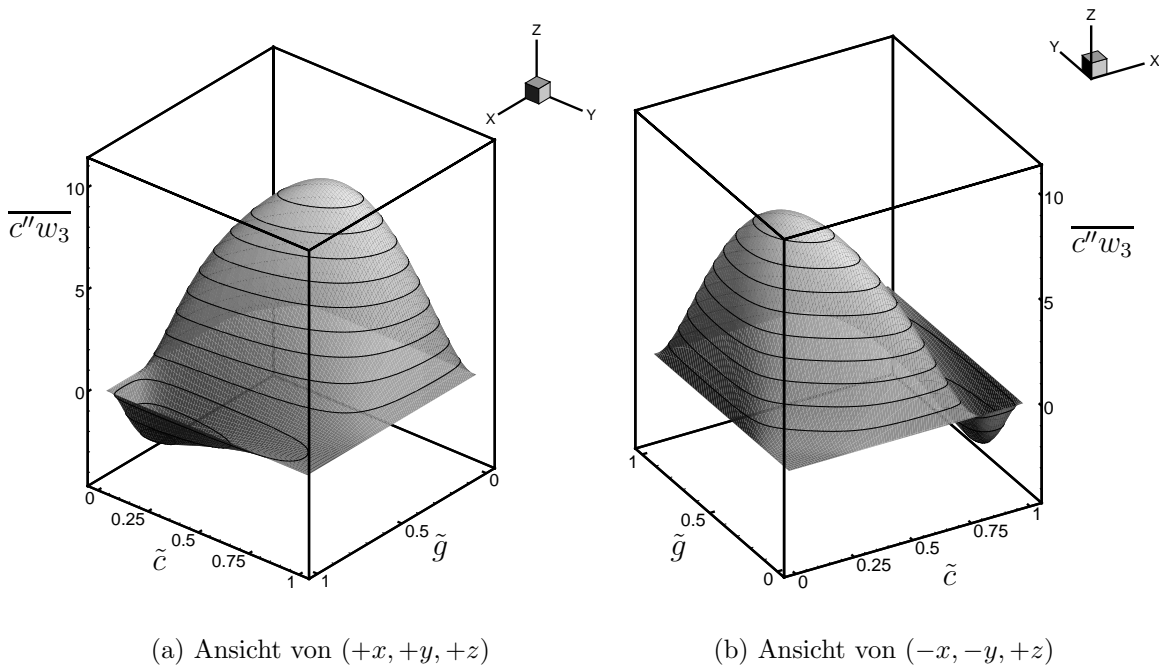


Abbildung 4.33: 16% H_2 -Tabelle $\overline{c''w_3}(\tilde{c}, \tilde{g})$ mit $w_3(c)$ -Verläufen von INSFLA

5 Simulation der Flammenausbreitung und Vergleich mit Messungen in der MuSCET-Anlage

5.1 Berechnungsdetails

5.1.1 Simulationsprogramm und Berechnungsverfahren

Für die im Rahmen der vorliegenden Arbeit durchgeführten Simulationen wurde das kommerzielle CFD-Programmpaket CFX/TASCflow der Firma AEA Technology eingesetzt. Die Entwicklungen und Untersuchungen hatten zum Ziel, das in Abschnitt 4 dargestellte PDF-Verbrennungsmodell physikalisch zu verifizieren und anhand von Vergleichen mit den durchgeführten Messungen auch zu validieren. Als *Arbeitsplattform* wurde ein kommerzielles Programm verwendet, bei dem davon ausgegangen werden konnte, daß es für Strömungssimulationen ausreichend validiert ist.

Die folgenden Erläuterungen dienen daher lediglich dazu, die numerischen Prinzipien, nach denen TASCflow arbeitet, darzustellen. Die Funktionsweise des Programmes oder gar die dahinter stehende Theorie im Detail zu erläutern, ist nicht Aufgabe der vorliegenden Arbeit. Weitergehende Informationen finden sich ausführlich in den Handbüchern [Adv95].

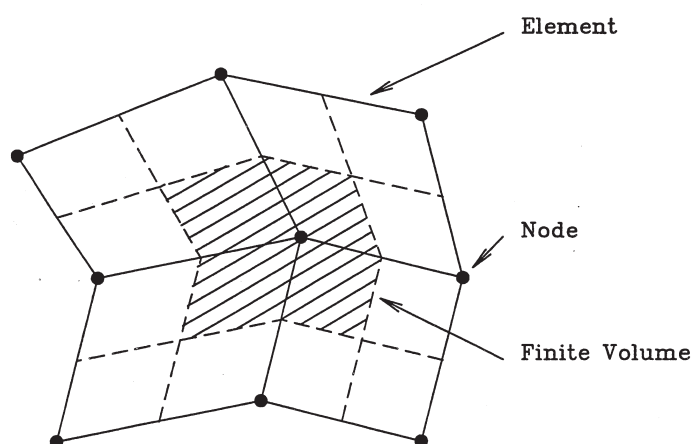


Abbildung 5.1: 2D-Kontrollvolumendefinition in TASCflow (aus [Adv95])

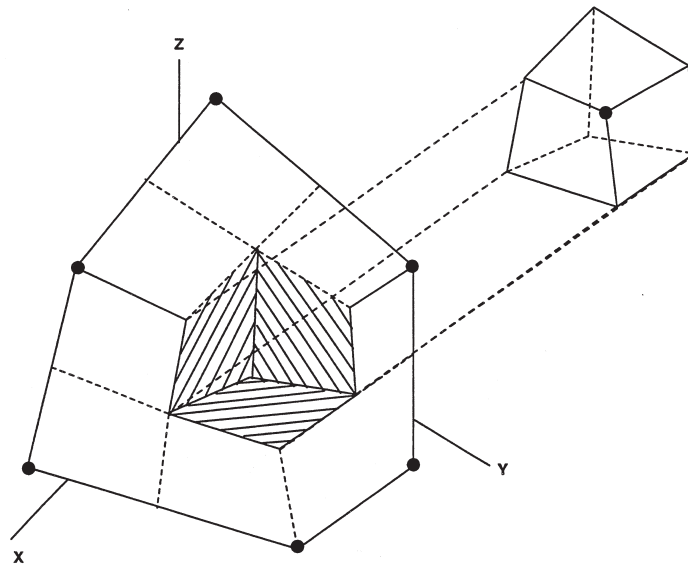


Abbildung 5.2: 3D-Kontrollvolumendefinition in TASCflow (aus [Adv95])

TASCflow verwendet für die Diskretisierung des Berechnungsgebietes Finite Volumen, die auf finiten Elementen basieren. In Abbildung 5.1 ist das numerische Gitter, das TASCflow verwendet, für den Fall eines zweidimensionalen Gebietes angedeutet. Es handelt sich um ein sogenanntes Cell-Vertex Verfahren (vgl. [PF96]), bei dem zunächst die Mittelpunkte der finiten Kontrollvolumina definiert werden. Das sich so ergebende Gitter definiert für TASCflow die *Flux-Elemente*. Die Kontrollvolumina selbst sind durch die Elementhalbierenden (2D) respektive Elementmittelebenen (3D) festgelegt. Ein Kontrollvolumen ist daher im zweidimensionalen Fall im allgemeinen durch 8 Liniensegmente, im dreidimensionalen Fall, wie in Abbildung 5.2 angedeutet, durch 24 Ebenensegmente begrenzt und besteht aus 4 Quadranten oder 8 Oktanten. An den Rändern (Kanten, Ecken) des Berechnungsgebietes ergeben sich entsprechend *halbe* (bzw. viertel oder achtel) Kontrollvolumina. Der Vorteil der Verwendung eines Kontrollvolumenmodelles liegt darin, daß sich ein Verfahren ergibt, das konservativ ist, d.h. Erhaltungsgesetze für physikalische Vorgänge werden automatisch für das gesamte Berechnungsgebiet erfüllt.

Die Speicherung der Variablen erfolgt ausschließlich an den Knotenpunkten der Flux-Elemente. Druck und Geschwindigkeit werden somit an den gleichen Punkten gespeichert und nicht auf zueinander versetzten Gittern. Das Problem der Druck-Geschwindigkeits-Entkopplung wird durch die von

Rhie [Rhi81] bzw. Rhie und Chow [RC83] vorgeschlagene Interpolation der Impulsgleichungen gelöst.

Die Volumenintegration der Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls, Energie und anderer Größen, die die Strömung beschreiben, über die Kontrollvolumina führt zu algebraischen Gleichungen (vgl. [Pat80] oder [Dur89b]). Da die Integration über alle Kontrollvolumina durchgeführt wird, entsteht ein Gleichungssystem, das in Form einer Matrix-Gleichung dargestellt werden kann. Die strukturierte Anordnung der Kontrollvolumina und die Tatsache, daß ein einzelnes Kontrollvolumen durch die algebraischen Gleichungen nur mit einer begrenzten Anzahl seiner Nachbarn in Verbindung steht bzw. Rand-Kontrollvolumina teilweise keine Nachbarn besitzen, führt zu einer bandförmigen Struktur der Matrix. TASCflow verwendet für die Lösung dieser Matrixgleichung ein iteratives Lösungsverfahren, die unvollständige Zerlegung in eine untere und obere Dreiecksmatrix (ILU: *incomplete lower-upper factorization*). Stone [Sto68] schlug ein solches Verfahren als *strongly implicit procedure* (SIP) vor.

Zur Konvergenzbeschleunigung benutzt TASCflow ein algebraisches Mehrgitterverfahren. Letztere glätten durch die Verwendung einer Hierarchie von Gittern unterschiedlicher Feinheit, die im Vergleich zur jeweiligen Gitterauflösung kurzweiligen Fehleranteile in der Lösung besser als Eingitterverfahren. Während diese Rechenzeiten $O(N^2)$ proportional zum Quadrat der Anzahl N der Gitterpunkte benötigen, können Mehrgitterverfahren $O(N)$ also eine lediglich lineare Abhängigkeit der Rechenzeit von der Anzahl der Gitterpunkte erreichen.

Eine Besonderheit von TASCflow ist, daß zur Sicherstellung der Druck-Geschwindigkeits-Kopplung nicht das weit verbreitete SIMPLE-Verfahren (Caretto et al. [CGPS72]) oder Abarten und Varianten davon (SIMPLER [Pat80], SIMPLEC [VDR84], PISO [Iss86]) verwendet werden. Vielmehr wird die Kopplung über die gekoppelte Lösung der Impuls- und Kontinuitätsgleichungen erreicht. Während die erst genannten Verfahren iterativ Druckkorrekturgleichungen und Geschwindigkeitsgleichungen sequentiell lösen, stellt TASCflow eine Matrixgleichung für den Druck und die Geschwindigkeitskomponenten zusammen auf und löst diese gekoppelt. Dem Nachteil des höheren Speicheraufwandes steht dabei die geringere Anzahl benötigter Iterationen gegenüber.

Die zeitliche Diskretisierung wird in TASCflow implizit durchgeführt. Neben der besseren Modellierung der physikalischen Vorgänge, die einen elliptischen Charakter haben (Druckwellen breiten sich auch entgegen der Strömungsrichtung aus) bietet dies den Vorteil, daß Beschränkungen hinsichtlich der Zeitschrittweite nicht wie bei expliziten Verfahren streng an das Courant-Kriterium gebunden sind. Bei der Simulation von Verbrennungsvorgängen ergeben sich jedoch durch die geringen chemischen Zeitmaße, die wie in Abschnitt 2.3 aufgezeigt teilweise erheblich kleiner als die beteiligten Zeitskalen der turbulenten Transportvorgänge sein können, zusätzliche Restriktionen für den Zeitschritt, so daß trotzdem sehr kleine Zeitschritte notwendig sind.

5.1.2 Numerische Darstellung der Geometrie

Für die numerischen Simulationen wurde eine vereinfachte Geometrie der MuSCET-Anlage, wie in Abbildung 5.3 dargestellt, betrachtet. Die Gittertopologie wurde dabei aus Teilgeometrien für die Versuchsstrecke, den Verbindungsteil und den Expansionstank aufgebaut. Abbildung 5.4 zeigt die Ansicht eines Gitters für die gesamte Geometrie. Da das Strömungsproblem symmetrisch bezüglich der Mittelebene war, war es ausreichend, das halbe Gitter, das in Abbildung 5.5 dargestellt ist, zu verwenden. Eine weitergehende Vereinfachung durch Ausnutzung der Symmetrie zu der

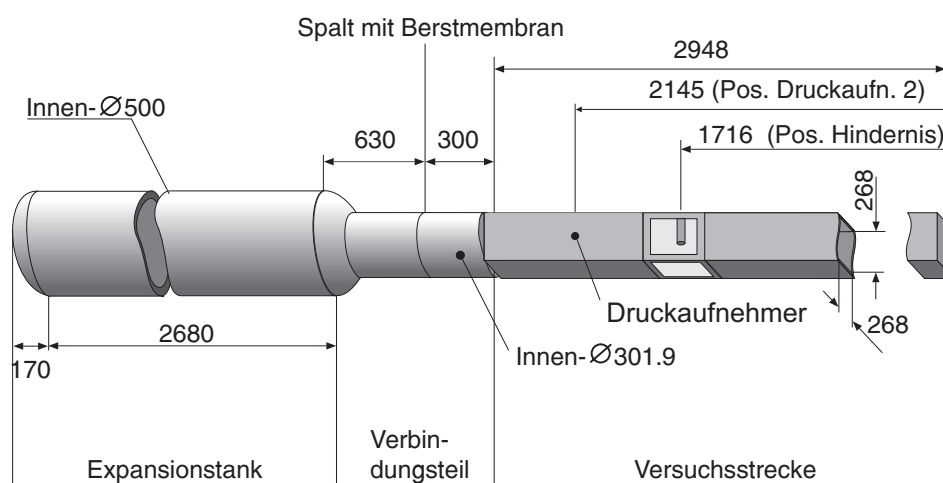


Abbildung 5.3: Vereinfachung der Geometrie der MuSCET-Anlage, Abmessungen und Bezeichnungen

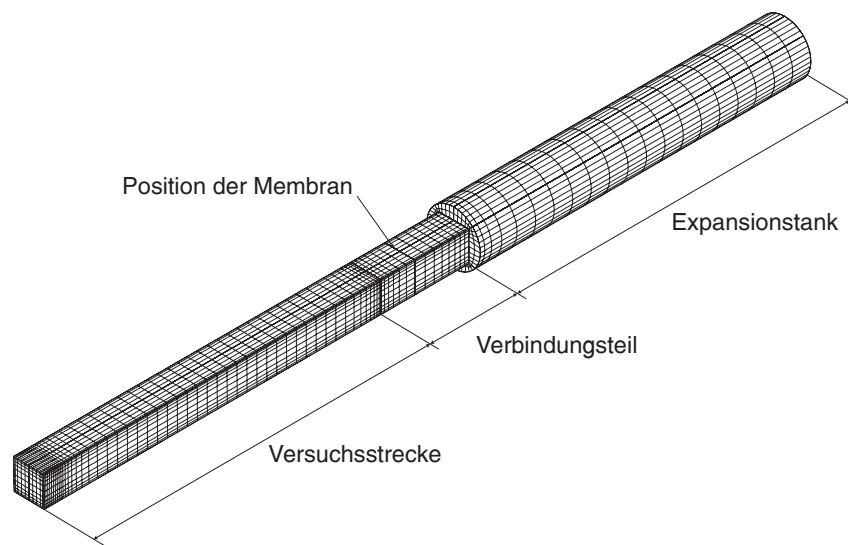


Abbildung 5.4: Ansicht des Berechnungsgitters (verdoppelt) und Bezeichnung der Teilgeometrien

zweiten Mittelebene war nicht möglich, da Auftriebseffekte berücksichtigt werden sollten und die Strömung daher in Richtung der Schwerkraft nicht symmetrisch war. Das gezeigte Gitter besteht aus ca. 7000 Gitterpunkten.

Bei den Konfigurationen mit Hindernissen wurde die Versuchsstrecke zudem in einen Teil vor den Hindernissen, den Hindernisteil selbst, sowie einen Teil

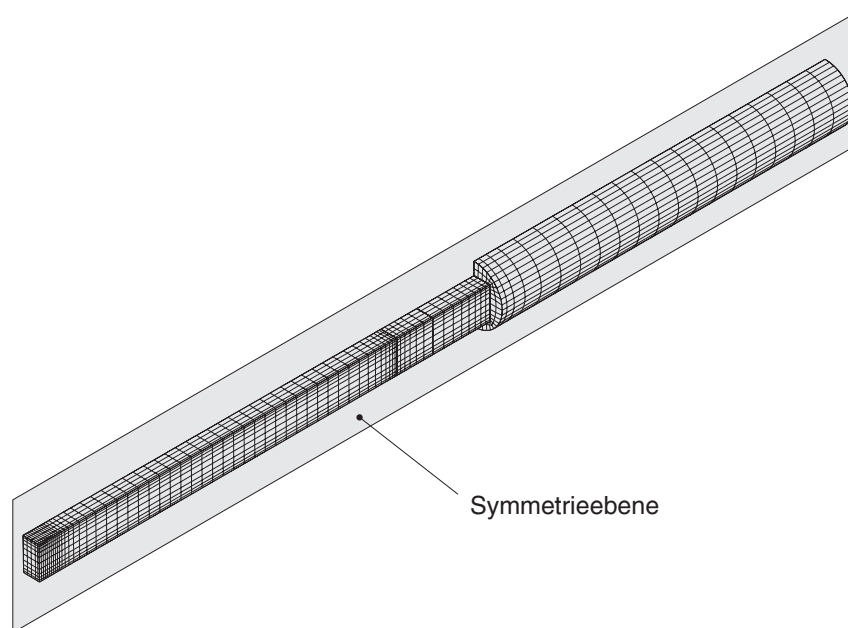


Abbildung 5.5: Aufgrund der Symmetrie für die Berechnung verwendetes *halbes* Berechnungsgitter

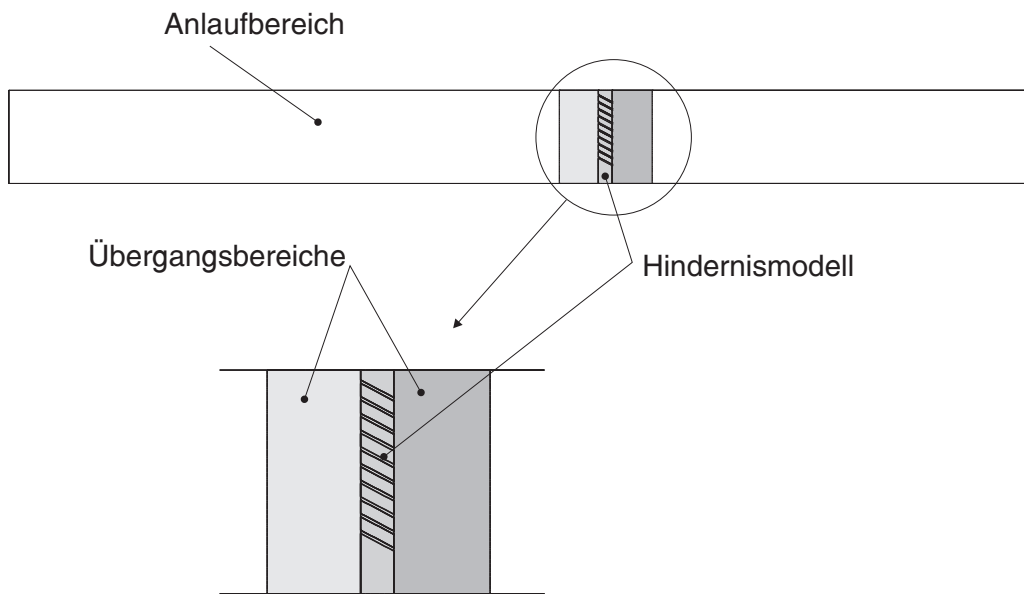


Abbildung 5.6: Verwendete Gittertopologie für Hindernis G2

nach den Hindernissen aufgeteilt.

Für den Fall des Gitterhindernisses G2 wurde die in Abbildung 5.6 dargestellte Topologie verwendet. Um den Hindernisbereich feiner auflösen zu können, wurde vor und hinter dem Hindernis ein Übergangsbereich de-

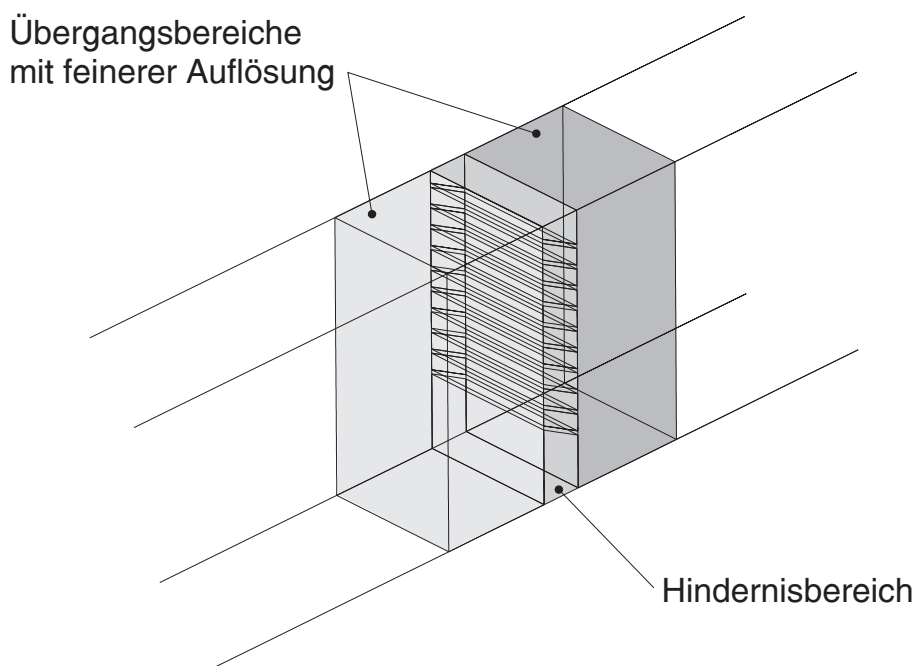


Abbildung 5.7: Detail der Gittertopologie im Bereich der Hindernisses G2

finiert, in dem das Gitter in Richtung der Rohrhöhe um den Faktor 6 verfeinert wurde. Die Topologie des numerischen Gitters im Bereich des Hindernisses ist in Abbildung 5.7 im Detail dargestellt. Durch die feinere Auflösung im Bereich des Hindernisses umfaßte das für die Berechnungen benutzte Gitter in diesem Fall ca. 15000 Gitterpunkte.

Der Verbindungsbereich zwischen Versuchsstrecke und Expansionstank wurde geometrisch vereinfacht. Der Querschnitt der Versuchsstrecke war zwar quadratisch, während der des Verbindungsbereiches rund war, jedoch waren die Querschnittsflächen nahezu identisch. Aus diesem Grund konnte der Verbindungsteil als direkte Fortführung der Versuchsstrecke gestaltet werden. Der Expansionstank selbst wurde modelliert, indem diesem zentralen H-Gitter ein C-Gitter (bzw. halbes O-Gitter) aufgesetzt wurde (s. Abbildung 5.8). Die Auflösung war in diesem Bereich sehr grob, da die Ergebnisse hier nicht von Interesse waren und dieser Gitterbereich lediglich zur Generierung der korrekten Randbedingung am Austritt aus der Versuchsstrecke diente.

Die in Abbildung 5.8 dunkler dargestellten Gitterbereiche im Verbindungsteil und Expansionstank dienten dazu, die Akustikabsorberelemente, in denen in der Versuchsanlage Drehspäne als Dämpfungsmaterial angeordnet

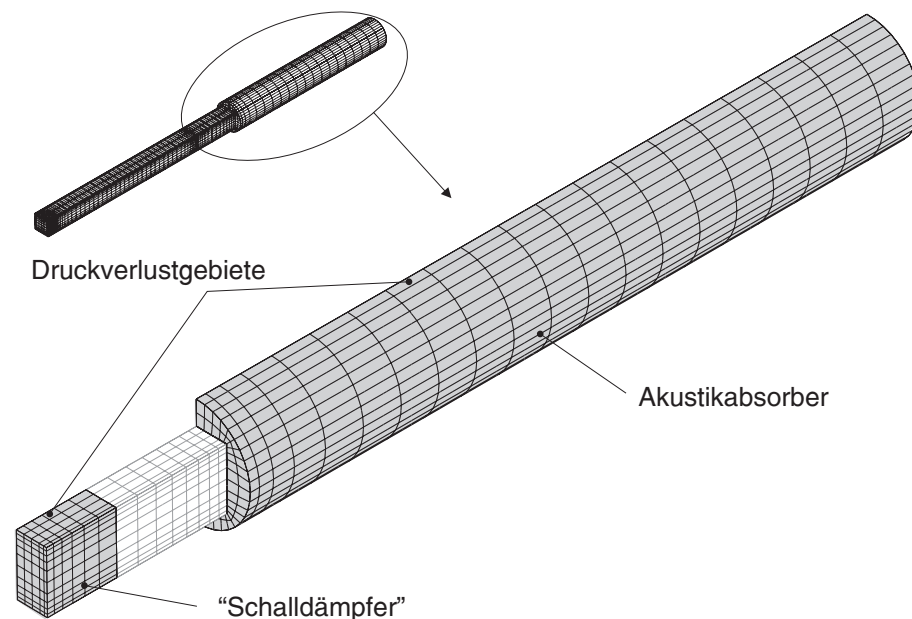


Abbildung 5.8: Berechnungsgitter im Expansionstank und Druckverlust-Bereiche (dunkel hervorgehoben)

waren, nachzubilden. In diesen Gebieten wurden für TASCflow Regionen definiert, die im Programmablauf einen Druckverlust in der Strömung simulierten. Hierzu wurde ein einfaches Druckverlustmodell verwendet, das in Abschnitt 5.1.5 erläutert wird.

5.1.3 Rand- und Anfangsbedingungen

Um die im weiteren dargestellten Ergebnisse der durchgeführten Berechnungen vollständig zu dokumentieren und nachvollziehbar zu machen, ist es notwendig, die in der Simulation verwendeten Rand- und Anfangsbedingungen anzugeben. Soweit diese zugänglich waren (z.B. Anfangsdruck und Anfangstemperatur im Versuchsgebiet), wurden hierfür die den Messungen entsprechenden Werte übernommen. Für andere Größen wie beispielsweise die turbulente kinetische Energie k und die turbulente Dissipationsrate ε mußten entsprechende Annahmen getroffen werden, die im folgenden dokumentiert sind.

Randbedingungen

Bildet man die Reynoldszahl

$$\text{Re} = \frac{u_{\infty} L}{\nu}$$

des betrachteten Strömungsproblems mit der Kantenlänge des Kanalquerschnitts als charakteristischer Länge, so ergeben sich je nach betrachtetem Hindernis und abhängig von der Gemischzusammensetzung Reynoldszahlen in der Größenordnung von 10^4 bis 10^6 . Aus diesem Grund und auch aufgrund des instationären Anlaufens der Strömung mußte mit Grenzschichtdicken im Bereich weniger Millimeter gerechnet werden. Das eingesetzte k - ε Turbulenzmodell verwendet für den wandnächsten Bereich der viskosen Unterschicht zwar Wandfunktionen, jedoch hätte der Rest der Grenzschicht trotzdem mit bis zu 5 Gitterpunkten aufgelöst werden müssen. Dies war infolge der Speicherkapazität der verfügbaren Rechner und auch wegen der mit großen Gitterpunktsanzahlen verbundenen hohen Rechenzeiten nicht möglich. Aus diesem Grund wurden alle Wände des

Berechnungsgebietes mittels Symmetrierandbedingungen als reibungsfreie Wände modelliert.

Anfangsbedingungen

Als Anfangszustand wurde eine ruhende Strömung im gesamten Rohr mit einem homogenen Wasserstoff-Luft-Gemisch im Bereich der Versuchsstrecke vorgegeben. Der Expansionstank hingegen wurde für alle Rechnungen mit reiner Luft (21 Vol.-% O₂) initialisiert. Als Anfangsdruck wurde $p_0 = 101325 \text{ N/m}^2$ vorgegeben, als Anfangstemperatur $T_0 = 293,15 \text{ K}$. Die Varianz des Reaktionsfortschrittes \widetilde{c}''^2 wurde mit null initialisiert, während die Massenbrüche der beteiligten Spezies H₂, O₂ und H₂O entsprechend der Gemischzusammensetzungen für 9, 12 und 16 Vol.-% H₂ vorgegeben wurden.

Für die Anfangsbedingungen der turbulenten kinetischen Energie k und turbulenten Dissipationsrate ε wurde davon ausgegangen, daß das Fluid zunächst in Ruhe war. Aufgrund des Turbulenzmodelles ist es jedoch nicht möglich k als null zu initialisieren. Aus diesem Grund wurde nach einem Vorschlag von Scheuerer [Sch94] die Annahme getroffen, daß

$$\eta_t = \eta,$$

d.h. die turbulente Viskosität entspricht gerade der molekularen. Mit der Beziehung für die turbulente Viskosität

$$\eta_t = \eta = c_\mu \rho \frac{k^2}{\varepsilon},$$

ergibt sich dann für k :

$$k = \frac{c_\mu \rho k}{\eta \varepsilon}.$$

Das Verhältnis $\frac{k}{\varepsilon}$ stellt ein turbulentes Zeitmaß dar, das für das betrachtete Verbrennungsmodell starken Einfluß auf das Ergebnis hat. Aus diesem Grund wurden Versuchsrechnungen mit unterschiedlichen Anfangswerten

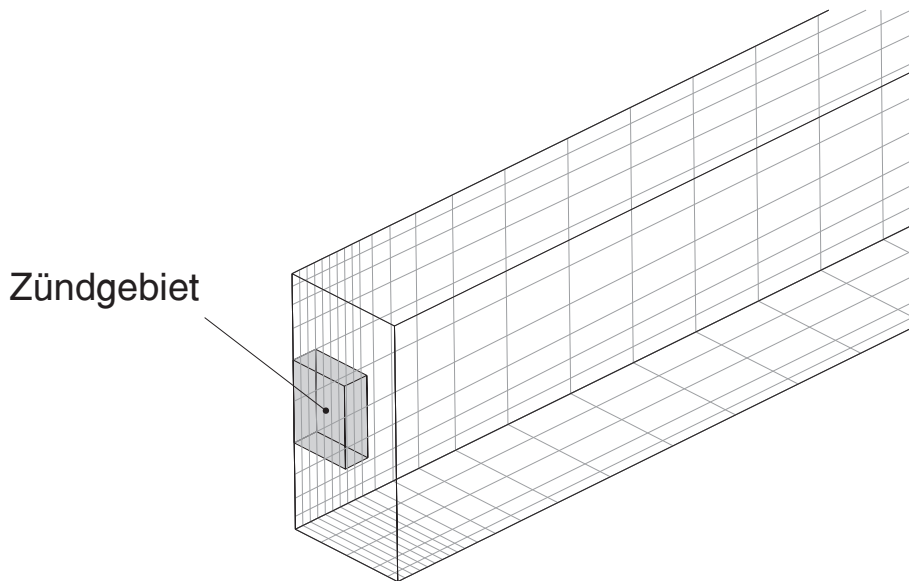


Abbildung 5.9: Zündbereich am Anfang des Berechnungsgebietes

dieses Verhältnisses durchgeführt. Die Versuche zeigten ein rasches Abklingen dieses Wertes auf ca. 1 s, so daß $\frac{k}{\varepsilon}$ für den ruhenden Bereich der Versuchsstrecke als $\frac{k}{\varepsilon} = 1$ s initialisiert werden konnte. Mit obiger Beziehung ergab sich damit ein Anfangswert für k von $k_0 = 2,3 \cdot 10^{-4} \text{m}^2/\text{s}^2$ bzw. $\varepsilon_0 = 2,3 \cdot 10^{-4} \text{m}^2/\text{s}^3$. Mit der von Launder und Spalding [LS74] vorgeschlagenen Beziehung für das turbulente Längenmaß l_c :

$$l_c = \frac{k^{\frac{3}{2}}}{\varepsilon}$$

errechnete sich mit diesen Werten $l_c \approx 0,015$ m was ca. 5% der Kantenlänge des Querschnitts der Versuchsstrecke entsprach und einen sinnvollen Wert für das turbulente Längenmaß darstellte.

Die Verbrennung wurde dadurch initiiert, daß in einem quaderförmigen Bereich am Anfang der Versuchsstrecke (vgl. Abbildung 5.9) ein gewisser Reaktionsfortschritt z.B. $c = 0,1$ vorgegeben wurde und die Massenbrüche der Spezies entsprechend diesem Reaktionsfortschritt initialisiert wurden. Die Temperatur wurde hier gleich der adiabaten Verbrennungstemperatur gesetzt, während der Druck auf $p_0 = 101325 \text{ N/m}^2$ verblieb. Als Anfangswert für die Varianz wurde in diesem Bereich $\widehat{c''^2}/\widehat{c''^2}_{max} = 0,8$ verwendet, und das turbulente Zeitmaß auf $\frac{k}{\varepsilon} = 0,05$ verkleinert. Wie oben für k_0 und ε_0 im unverbrannten Bereich dargestellt, wurden diese Werte ebenfalls

dadurch ermittelt, daß Rechnungen mit unterschiedlichen Anfangsbedingungen durchgeführt wurden und dann der Zustand im Zündgebiet nach einer kurzen Anlaufphase verglichen wurde.

5.1.4 Numerische Parameter

TASCflow verwendet zur Kontrolle der Konvergenz der Berechnung bzw. als Kriterium zur Abbruch der Berechnung der einzelnen Zeitschritte die maximalen im Berechnungsgebiet auftretenden Lösungsresiduen. Dies stellt ein sehr striktes Abbruchkriterium dar, da der rms-Mittelwert der Residuen im gesamten Berechnungsgebiet, den viele andere Programme benutzen, um bis zu zwei Größenordnungen kleiner war. Aus diesem Grund wurde als Konvergenzkriterium ein relativ hoher Wert von 10^{-3} für die maximalen Residuen zugelassen. Als rms-Residuen wurden auf diese Weise auf jedem Zeitschritt Werte von maximal $5 \cdot 10^{-4}$ für alle Variablen erreicht. Im Schnitt benötigte die Berechnung pro Zeitschritt so jeweils 5 Iterationen bis zur Konvergenz.

Als Zeitschrittweite wurde für die Berechnungen mit 16 Vol.-% H_2 0,25 ms, für 12 Vol.-% H_2 0,5 ms und für 9 Vol.-% H_2 0,75 ms verwendet.

5.1.5 Druckverlustansatz und Platzen der Membran

Um den in den Akustikabsorberelementen auftretenden Druckverlust zu modellieren, wurde ein vereinfachter empirischer Ansatz verwendet. Der Druckverlust wurde als Senkenterm in den Impulsgleichungen realisiert und als Druckgradient, dessen Betrag proportional zum dynamischen Druckanteil bestimmt wird, modelliert:

$$\Delta p = \zeta \frac{\rho u_i^2}{2}.$$

Dabei stellt ζ einen Verlustfaktor dar, der empirisch durch Vergleich der berechneten zeitlichen Druckverläufe mit den in der MuSCET-Anlage gemessenen Druckverläufen angepaßt wurde. Die Anteile für die drei Komponenten der Impulsgleichung erhält man damit folgendermaßen:

$$\nabla p_i = \zeta \frac{\rho \sqrt{u_i^2}}{2} u_i. \quad (5.1.1)$$

Um das Platzen der Membran nachbilden zu können, wurden alle Simulationen in zwei Schritten durchgeführt. Bei der Berechnung bis zum Platzen der Membran war der Verbindungsbereich ab der Position der Membran sowie der Expansionstank (vgl. Abbildung 5.4) durch sogenannte Block-Off Gebiete von der Berechnung ausgenommen. Die Simulation verhielt sich hierdurch so, als ob an der Stelle der Membran eine Wand existierte. Nach dem Platzen der Membran wurden die ausgeblockten Gebiete zur Berechnung mit hinzugenommen. Um das Platzen der Membran zu modellieren, musste zudem der Verlustfaktor ζ in Gleichung (5.1.1) im Bereich des Schalldämpfers als über einen kurzen Zeitraum linear von der Zeit abhängig angenommen werden. Im Bereich des Akustikabsorbers (s. Abbildung 5.8) wurde dagegen ζ konstant gehalten.

5.1.6 Auftriebsterme

Wie bereits in Abschnitt 4.1.1 bemerkt, stellt der Auftrieb für langsame Verbrennungsvorgänge einen bedeutenden Einflußfaktor dar. So zeigt beispielsweise Ardey [Ard98], daß bis ca. 14 Vol.-% H_2 in Luft der Einfluß des Auftriebs anhand des Anstellwinkels der Flamme in der MuSCET-Anlage meßbar war.

Aus diesem Grund wurde in TASCflow der Auftrieb berücksichtigt. In der für die vorliegende Arbeit verwendeten Version von CFX/TASCflow war für den Auftriebseinfluß ein Ansatz nach Boussinesq realisiert, der vor allem für Probleme mit natürlicher Konvektion geeignet ist. Dabei wird für den Auftriebsterm in der Impulsgleichung angenommen, daß die Dichteänderung allein aus einer Änderung der Temperatur resultiert. Für den zusätzlichen Term G_i in der Impulsgleichung (4.1.6) ergibt sich so der folgende Ausdruck:

$$G_i = -\rho\beta g_i(T - T_{\text{ref}}). \quad (5.1.2)$$

Hierbei bezeichnet β den isobaren Ausdehnungskoeffizienten des betrachteten Gases und g_i die Komponenten des Schwerkraftvektors. Für den Produktionsterm der turbulenten kinetischen Energie (Gleichung (4.1.27)) in

den Gleichungen für k (4.1.25) und ε (4.1.26) ergibt sich aus dem Auftrieb ebenfalls ein zusätzlicher Term:

$$\tilde{P}'_k = \tilde{P}_k + \rho\beta \frac{\eta_t}{\sigma_{\tilde{k}}} \left(g_i \frac{\partial T}{\partial x_i} \right).$$

Gray und Giorgini [GG76] zeigen auf, daß es für diesen sogenannten Boussinesq-Ansatz für den Auftrieb Grenzen hinsichtlich der maximal zulässigen Temperaturdifferenz $T - T_{\text{ref}}$ in Gleichung (5.1.2) gibt, innerhalb derer der Fehler dieser Approximation bestimmte Werte nicht übersteigt. Bei Verbrennungsvorgängen werden diese Grenzen z.T. weit überschritten. Um jedoch den qualitativen Einfluß des Auftriebs zu berücksichtigen, wurde das Modell trotzdem benutzt.

5.1.7 Anpassung empirischer Faktoren

Die MuSCET-Anlage war hinsichtlich der beteiligten Vorgänge (Zündung und Verbrennungsanlauf, Bersten der Membran, Dämpfung von Schallwellen) für die numerische Simulation ein sehr schwer zu modellierendes System. Wie oben dargestellt, gelang dies teilweise nur durch Vorgabe empirischer Faktoren, mittels derer die Berechnungen an gemessene Verläufe angepaßt wurden. Im einzelnen waren diese Faktoren die folgenden:

- Berstdruck beim Platzen der Membran
- Druckverlustfaktoren der Dämpfungselemente
- Zeitdauer des Berstvorganges der Membran

Zudem war in der Transportgleichung für die Varianz des Reaktionsfortschrittes (Gleichung (4.2.23)):

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left(\bar{\rho} \widetilde{c''^2} \right) + \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\bar{\rho} \tilde{u}_k \widetilde{c''^2} \right) = \\ -c_c \bar{\rho} \frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{k}} \widetilde{c''^2} + 2 \frac{\eta_t}{Sc_c} \left(\frac{\partial \tilde{c}}{\partial x_k} \right)^2 + \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\frac{\eta_t}{Sc_c} \frac{\partial \widetilde{c''^2}}{\partial x_k} \right) + 2 \overline{c'' w_c}. \end{aligned}$$

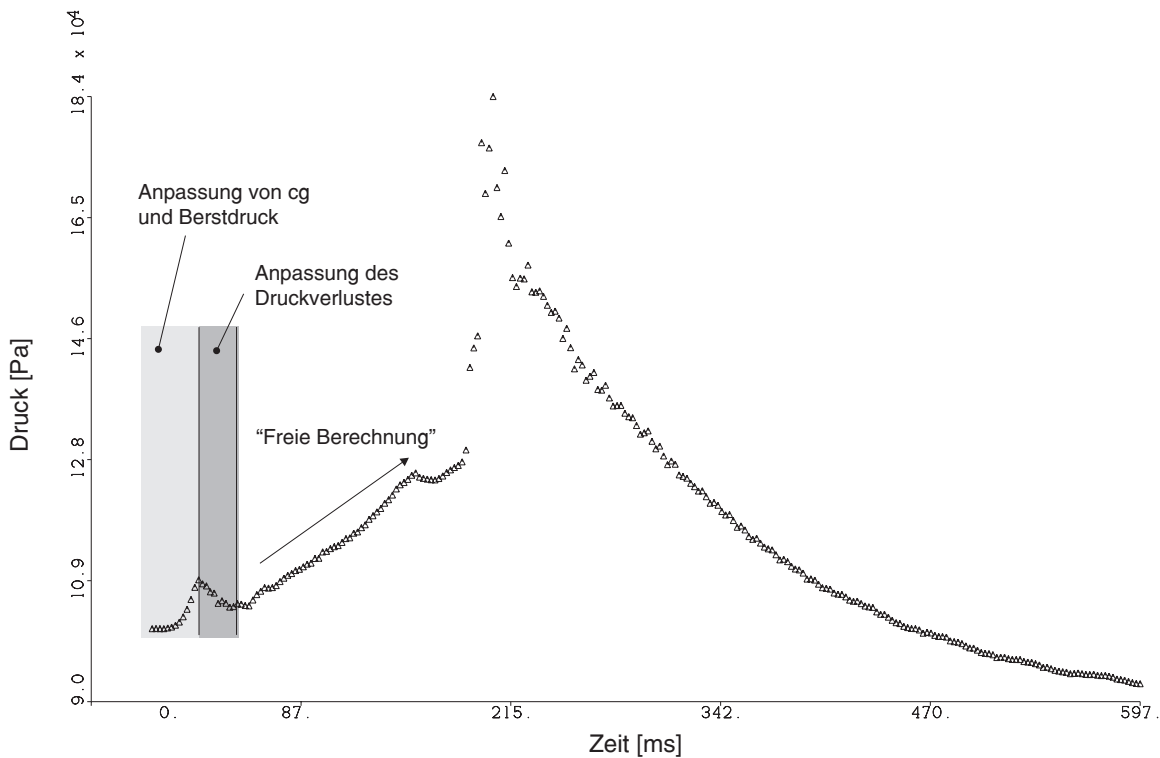


Abbildung 5.10: Gemessener Druckverlauf für 16 Vol.-% H₂ ohne Hindernis; Anpassungsbereiche für empirische Berechnungsfaktoren

der Parameter c_c unbestimmt geblieben. In der Literatur finden sich für diese Größe unterschiedliche Angaben. So schlägt Jones [JW82] für Diffusionsflammen einen Wert von 2 vor, während Wennerberg [Wen95] ebenfalls für die Simulation einer Diffusionsflamme 1,25 verwendet. Die Berechnungen in der vorliegenden Arbeit zeigten, daß für die hier betrachteten vorgemischten Flammen insbesondere in der Anlaufphase der Verbrennung wesentlich höhere Werte verwendet werden mußten. So wurde z.B. für 16 Vol.-% H₂ $c_c = 12$ verwendet.

Die Anpassung der oben dargestellten Faktoren erfolgte für alle Berechnungen lediglich in den in Abbildung 5.10 angedeuteten Bereichen und jeweils nur für die Simulation ohne Hindernis. Die Berechnungen mit Hindernis wurden mit denselben Werten durchgeführt um einen direkten Vergleich des Hinderniseinflusses zu ermöglichen. Der Druckverlauf bis zum Platzen der Membran wurde so durch den Parameter c_c und den Berstdruck an die Meßwerte angepaßt, während der folgende Druckabfall durch die Druckverlustfaktoren der Dämpfungselemente nachvollzogen werden konnte. Über diese Anpassung empirischer Faktoren hinaus wurde keine weitere Beein-

flussung der Berechnung vorgenommen, so daß sich die Berechnung dann in dem in Abbildung 5.10 angedeuteten Bereich frei entwickelte.

5.2 Ergebnisse

In den folgenden Abschnitten werden Ergebnisse der Simulationsrechnungen mit dem im Rahmen der vorliegenden Arbeit entwickelten PDF-Verbrennungsmodell dargestellt. Anhand von Simulationsrechnungen ohne Hindernis sowie mit dem Gitterhindernis G2 wurde die Funktion des Verbrennungsmodelles physikalisch verifiziert und anhand von Vergleichen mit Meßdaten validiert.

Bei der Betrachtung der berechneten Verteilungen – beispielsweise der Spezieskonzentrationen – kann der Eindruck entstehen, daß die Flammendicke um Größenordnungen zu groß berechnet wird. Der Grund für die scheinbar große Flammendicke ist, daß die numerische Simulation aufgrund der zur Behandlung der Turbulenz notwendigen Zeitmittelung auch nur zeitgemittelte Größen wiedergeben kann. Wie in Abbildung 5.11 schematisch dargestellt, ergibt sich so eine zeitgemittelte Flammenkontur, die natürlich wesentlich breiter ist als die tatsächliche Flamme selbst.

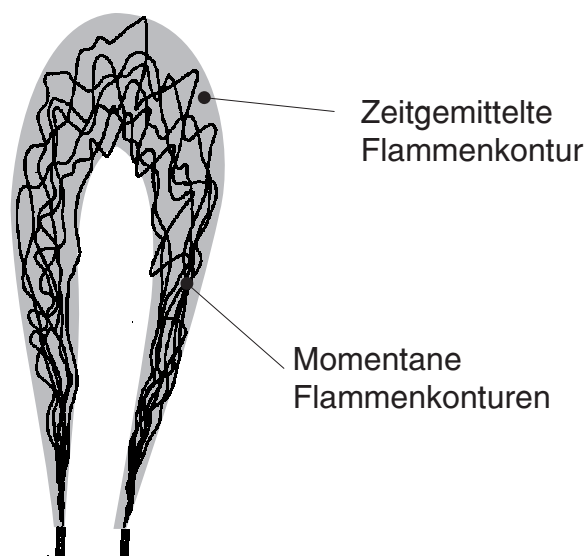


Abbildung 5.11: Momentane und zeitgemittelte Flammenkonturen (nach Kuo [Kuo86])

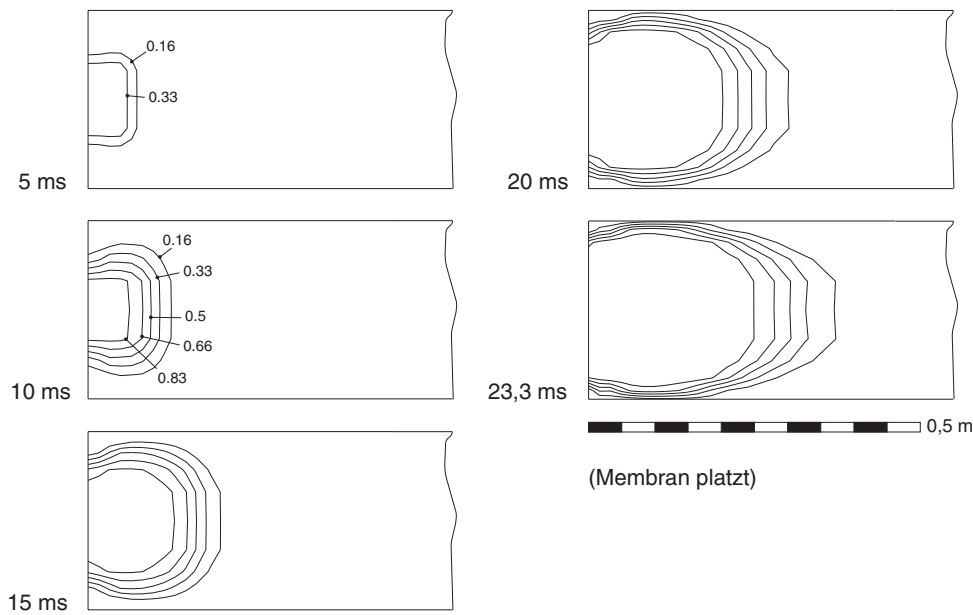


Abbildung 5.12: Verteilung des Reaktionsfortschritts c ($0 \leq c \leq 1$) in der Symmetrie-ebene während des Anlaufens der Verbrennung bis zum Platzen der Membran; 16 Vol.-% H_2 , ohne Hindernis

5.2.1 Simulationen ohne Hindernis

Zünd- und Anlaufphase

Während der Anlaufphase der Verbrennung reagiert zunächst vor allem das Zündgebiet aus. Erst wenn hier die Reaktion abgeschlossen ist, setzt sich die Flamme in Bewegung. Die Vorwärtsbewegung beschleunigt sich, wenn die Flamme die Seitenwände erreicht. Dieses Verhalten ist in Abbildung 5.12 zu erkennen.

Vergleiche mit Messungen

In Abbildung 5.13 ist der Vergleich zwischen einem gemessenen und dem berechneten Druckverlauf über der Zeit dargestellt. Die Messung erfolgte bei 16 Vol.-% H_2 ohne Hindernis an der Position des zweiten Druckaufnehmers (s. Abbildung 5.3) 2145 mm vom Zündflansch entfernt.

Man erkennt ab ca. 0,2 s eine starke Zunahme des Druckes. Diese Zunahme hing mit dem Übertreten der Flamme in den Expansionstank zusammen.

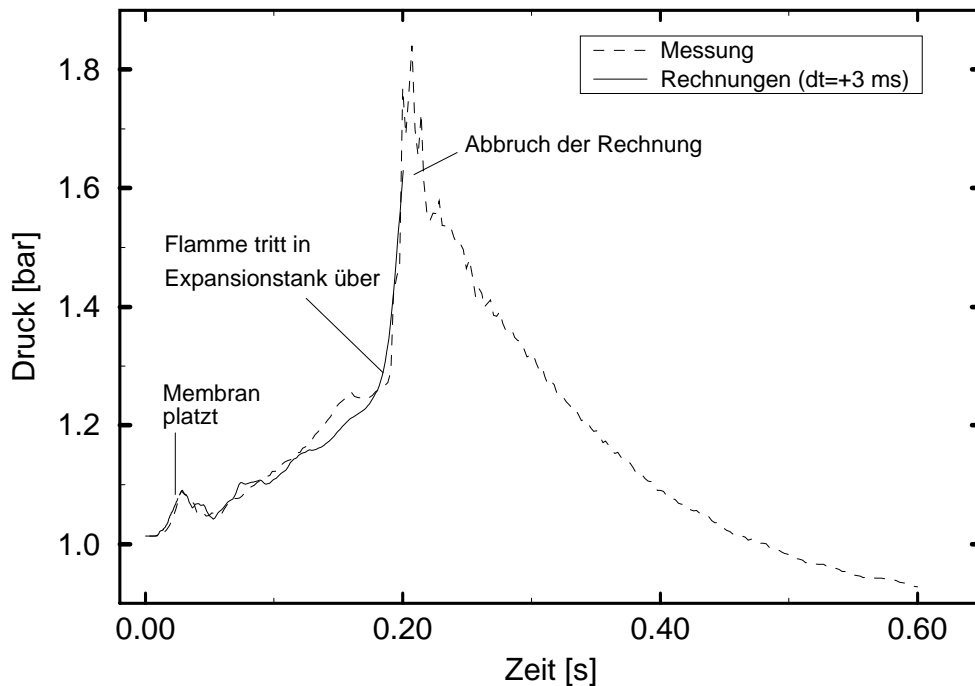


Abbildung 5.13: Vergleich des gemessenen und des berechneten zeitlichen Druckverlaufes an der Position des zweiten Druckaufnehmers (2145 mm vom Zündflansch); 16 Vol.-% H₂; kein Hindernis (Ergebnis der Rechnung wurde um +3 ms in der Zeit verschoben)

Da dieser eine größere Querschnittsfläche als die restliche Versuchsanlage aufwies, konnte die Flamme beim Erreichen dieses Querschnittsprungs ihre Oberfläche stark vergrößern. Bei Versuchsbeginn war der Expansionsstank zwar mit reiner Luft gefüllt, durch die Expansionsströmung wurde jedoch im Verlauf der Flammenausbreitung brennbares Gemisch auch in den Tank hineingeschoben. Bei dem realen Vorgang trugen im folgenden die zur Schalldämpfung eingesetzten Drehspäne aufgrund ihrer großen Oberfläche und der hohen Wärmekapazität sehr viel Wärme aus dem Strömungsgebiet aus, so daß durch den Wärmeentzug die Flamme erlosch und der Druck dann wieder abgebaut wurde. In der in den vorangegangenen Abschnitten dargestellten Modellierung des Verbrennungsvorganges war in den Druckverlustbereichen kein entsprechendes Modell für den Wärmeübergang vorgesehen, da für die Simulationen der Einfluß des Hindernisses von Interesse war und nicht das Verhalten der Flamme im Expansionsstank. Aus diesem Grund wurde die Berechnung, wie in Abbildung 5.13 angedeutet, an dieser Stelle abgebrochen.

Die der Messung in Abbildung 5.13 entsprechende Berechnung zeigt bis

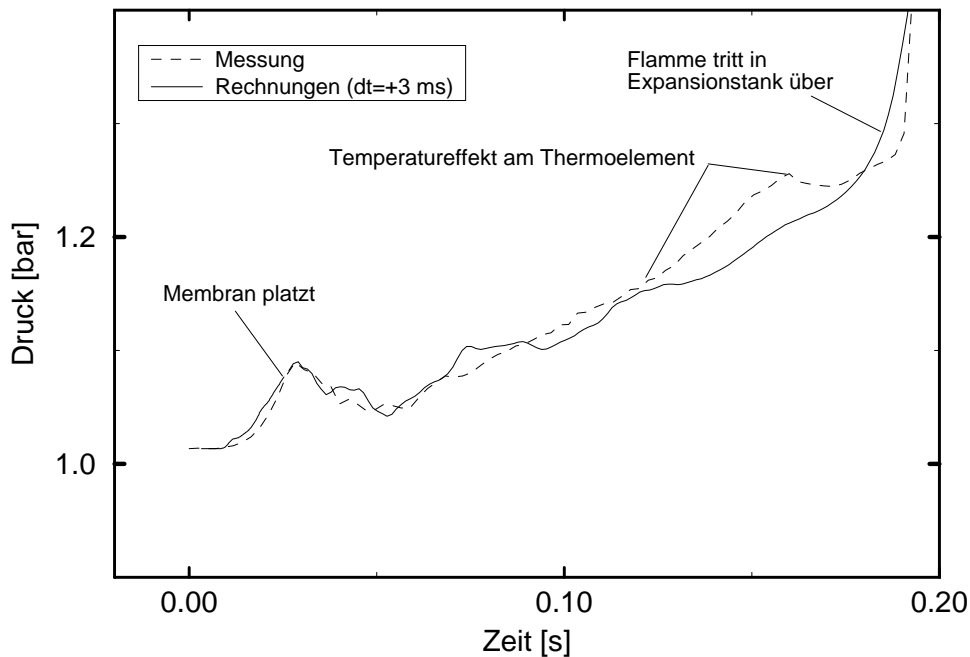


Abbildung 5.14: Vergrößerte Darstellung von Abbildung 5.13

zum Platzen der Membran und bei dem folgenden Druckabfall eine sehr gute Übereinstimmung mit der Messung¹⁵. In diesem Bereich wurden die empirischen Faktoren der Simulation so eingestellt, daß der gemessene Druckverlauf von der Berechnung wiedergegeben wurde. Im folgenden ist in der vergrößerten Darstellung in Abbildung 5.14 zu erkennen, daß die Berechnung noch leichte Druckschwingungen, die von Platzen der Berstmembran herrührten, zeigt, während diese bei der Messung offensichtlich von den Akustikabsorbern ausgedämpft wurden. Die etwas stärkere Abweichung ab ca. 0,125 s ist dagegen auf den Einfluß der Temperatur am Druckaufnehmer, der nicht wärmeisoliert werden konnte, zurückzuführen. Ardey [Ard98] beschreibt diesen Temperatureffekt im Detail. Insgesamt ist die Übereinstimmung des gemessenen und des berechneten Druckverlaufes sehr gut. Dies deutet darauf hin, daß die mittlere chemische Umsatzrate und damit die Wärmefreisetzung durch die Verbrennungsreaktion von dem PDF-Modell korrekt wiedergegeben werden.

Zur Beurteilung der Qualität der berechneten Zeitverläufe der Strömungsgeschwindigkeit mußte in Betracht gezogen werden, daß das Ergebnis einer Simulation nur von den vorgegebenen Rand- und Anfangsbedingun-

¹⁵Wie in Abbildung 5.13 angedeutet, wurden die berechneten Werte geringfügig zeitlich verschoben, um einen besseren Vergleich zu ermöglichen.

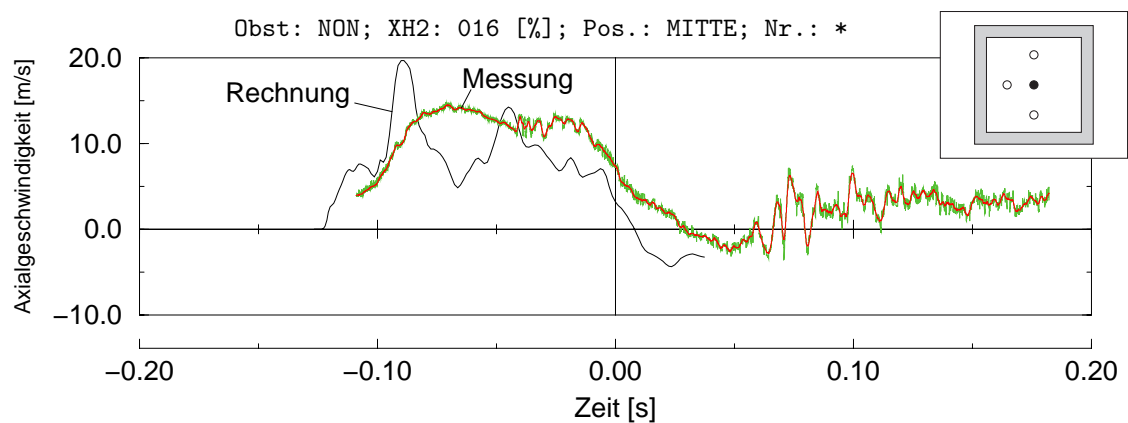
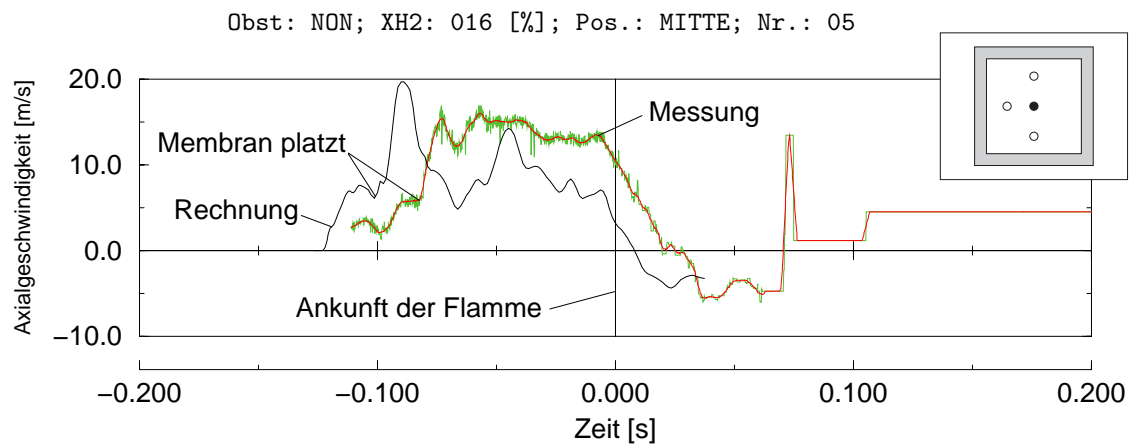
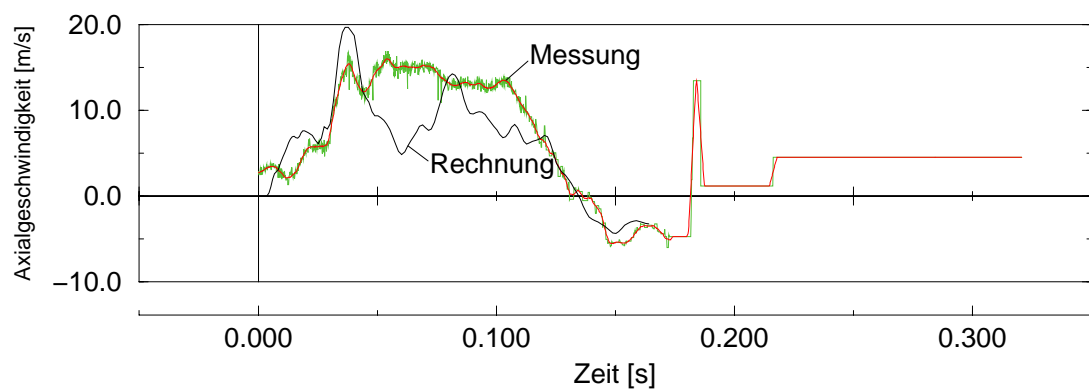


Abbildung 5.15: Vergleich des Ensemble-Mittelwertes der gemessenen Zeitverläufe der Strömungsgeschwindigkeit mit dem mit dem PDF-Modell berechneten Verlauf



(a) Zeitachsen verschoben, so daß Zeitpunkt der Flammenankunft bei $t = 0$ s übereinstimmt



(b) Zeitachsen nicht verschoben

Abbildung 5.16: Vergleich eines einzelnen gemessenen Zeitverlaufes der Strömungsgeschwindigkeit mit dem mit dem PDF-Modell berechneten Verlauf

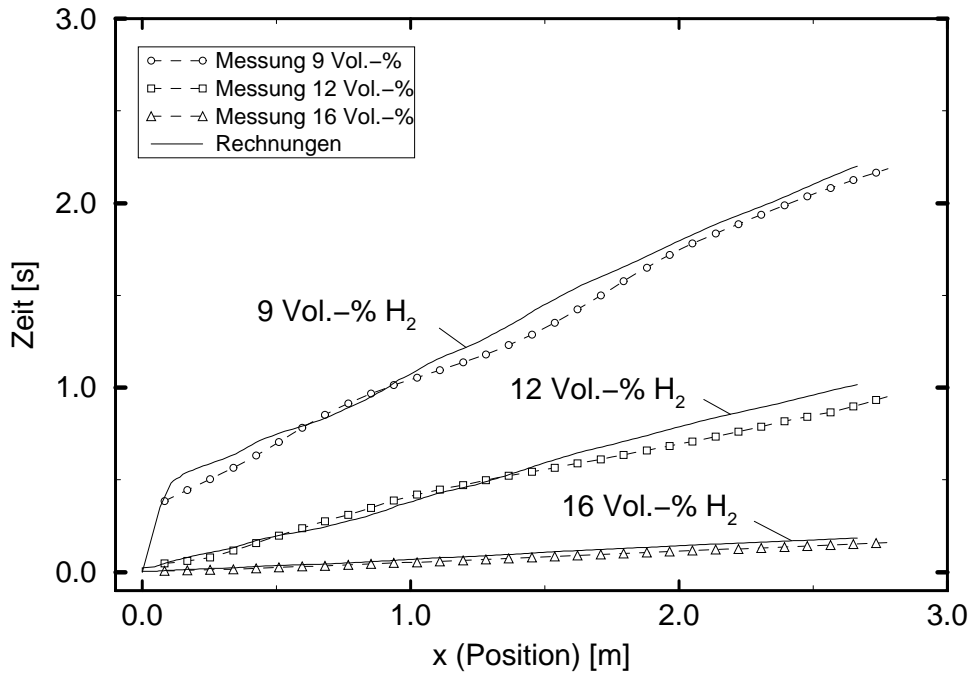


Abbildung 5.17: Zeit-Weg-Diagramm der Flammenposition in der Versuchsstrecke für alle Konzentrationen

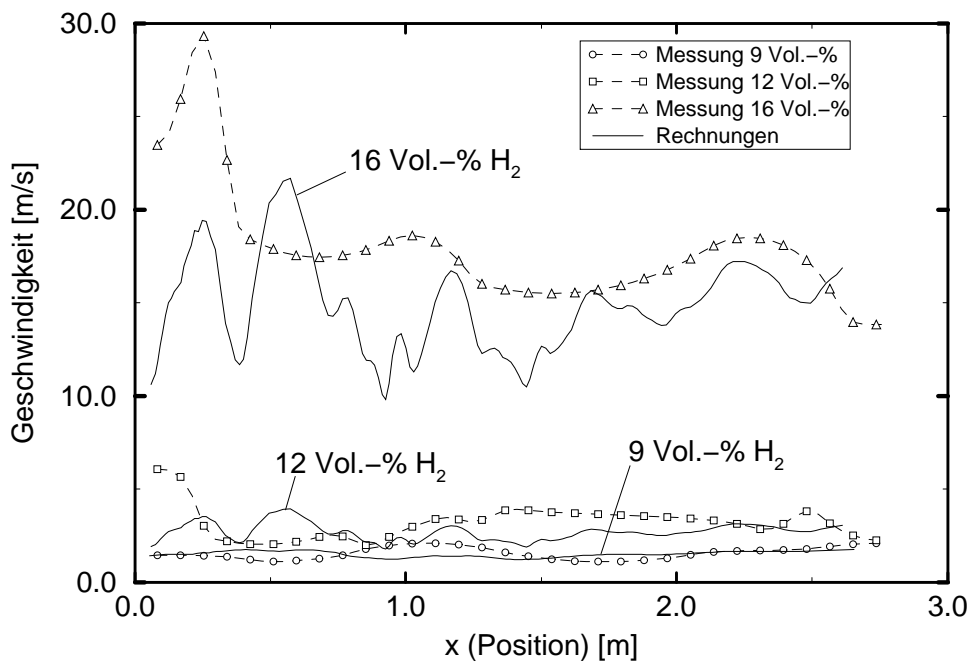


Abbildung 5.18: Geschwindigkeits-Weg-Diagramm der Flammgeschwindigkeit in der Versuchsstrecke für alle Konzentrationen

gen abhängt¹⁶. Auch bei vielen Wiederholungen der Berechnung wird daher bei gleichen Rand- und Anfangsbedingungen immer dasgleiche Ergebnis erhalten, das somit gleichzeitig als Ensemble-Mittelwert über die Wiederholungen der Berechnung aufgefaßt werden kann. Dies legte eigentlich einen Vergleich mit dem Ensemble-Mittelwert über alle Messungen einer Meßkonfiguration nahe. Dieser war bereits für die LDA-Messungen zur Beurteilung des grundsätzlichen zeitlichen Verlaufes verwendet worden (vgl. Abschnitt 3.3.1). Der in Abbildung 5.15 dargestellte Vergleich zwischen dem aus den Messungen ermittelten Ensemble-Mittelwert und dem berechneten Zeitverlauf der Strömungsgeschwindigkeit am Ort des LDA-Meßvolumens zeigt jedoch deutlichere Unterschiede zwischen den gemessenen und berechneten Werten auf, als dies die Übereinstimmung der Druckverläufe hätte vermuten lassen. Der Grund hierfür war, daß die Bildung des Ensemble-Mittelwertes Messungsanteile, die mit stochastisch im Verlauf einer Messung auftretenden Ereignissen verbunden waren, wie z.B. das starke Beschleunigen der Strömung nach dem Platzen der Membran, unterdrückte, so daß diese in dem resultierenden Verlauf nicht mehr erkennbar waren. Aufgrund der Anpassung der empirischen Faktoren anhand einer einzelnen Messung gaben die Berechnungen jedoch gerade einen solchen Einzelverlauf wieder. Daher war ein Vergleich mit Einzelmessungen angebracht.

In Abbildung 5.16 ist der Vergleich des berechneten Zeitverlaufs der Strömungsgeschwindigkeit mit einer Messung dargestellt. Dabei wurden die Zeitachsen beider Verläufe in Abbildung 5.16(a) so verschoben, daß die Flammenankunft im LDA-Meßvolumen zum Zeitpunkt $t = 0$ s übereinstimmte. Man erkennt, daß die Zeitdauer vom Platzen der Membran, bis zur Ankunft der Flamme bei Messung und Rechnung unterschiedlich lange dauerte. Verschob man die Zeitachsen jedoch wie in Abbildung 5.16(b) nicht, zeigten sich auffallende Ähnlichkeiten. Die Übereinstimmung der berechneten und gemessenen Geschwindigkeiten war daher gut, wenn auch die die Flammengeschwindigkeit in der Simulation mit dem PDF-Verbrennungsmodell wohl etwas zu niedrig berechnet wurde.

Die obigen Darstellungen bezogen sich auf die Situation eines Gasgemisches

¹⁶In diesem Zusammenhang wird darauf hingewiesen, daß die numerische Simulation Favre-gemittelte Ergebnisse liefert, während Messungen mit LDA-Systemen ungewichtete Werte ergeben. Dieser Unterschied wird hier jedoch nicht berücksichtigt.

mit 16 Vol.-% H_2 in Luft. Die Vergleiche für die beiden anderen untersuchten Wasserstoff-Konzentrationen 9 und 12 Vol.-% H_2 in Luft waren sehr ähnlich, so daß sie an dieser Stelle nicht wiederholt werden. Abbildung 5.17 zeigt den Vergleich der Rechnungen für alle H_2 -Konzentration mit der aus den Photodioden- und Thermoelementsignalen ermittelten Flammenposition in einem Zeit-Weg-Diagramm. Der Flammenfortschritt wurde qualitativ richtig wiedergegeben, jedoch insgesamt leicht unterschätzt.

Der Vergleich der gemessenen und berechneten Flammengeschwindigkeiten in einem Geschwindigkeits-Weg-Diagramm (Abbildung 5.18) zeigte, daß die Berechnung jeweils insbesondere in der Anfangsphase die Flammengeschwindigkeit deutlich unterschätzte. Der Verlauf bei 16 Vol.-% H_2 machte zudem deutlich, daß das verwendete Druckverlustmodell die Druckschwingungen nicht ausreichend dämpfte. In allen Fällen wird jedoch durch die Simulation die richtige Größenordnung der Flammengeschwindigkeit berechnet, so daß der Vergleich als befriedigend angesehen werden kann.

5.2.2 Hinderniseinfluß auf die Flammenausbreitung

In Abbildung 5.19 ist der gemessene zeitliche Druckverlauf am zweiten Druckaufnehmer (vgl. Abbildung 5.3) für das Gitterhindernis zusammen mit dem entsprechenden Verlauf im leeren Rohr bei 16 Vol.-% H_2 dargestellt. Aus dem Vergleich der beiden Kurven ist deutlich der Einfluß des Hindernisses auf die Verbrennung zu erkennen. Durch die sich im Nachlauf des Hindernisses ergebende Scherströmung wurde erhebliche Turbulenz erzeugt, so daß die Flamme bei ihrem Eintreffen in diesem Bereich günstigere Verbrennungsbedingungen vorfand. Die resultierende, wesentlich höhere Brenngeschwindigkeit führte zu dem zu beobachtenden früheren Anstieg des Druckes.

Zur Überprüfung ob das entwickelte PDF-Verbrennungsmodell in der Lage ist, den Hinderniseinfluß auf die Verbrennung wiederzugeben, wurden die Läufe mit dem Gitterhindernis G2 mit exakt dergleichen empirischen Faktoren durchgeführt, die für die Situation ohne Hindernis ermittelt worden waren. Zudem wurde auch genau diegleiche Initialisierung des Berechnungsgebietes verwendet.

In Abbildung 5.20 ist der Vergleich des berechneten und eines gemessenen

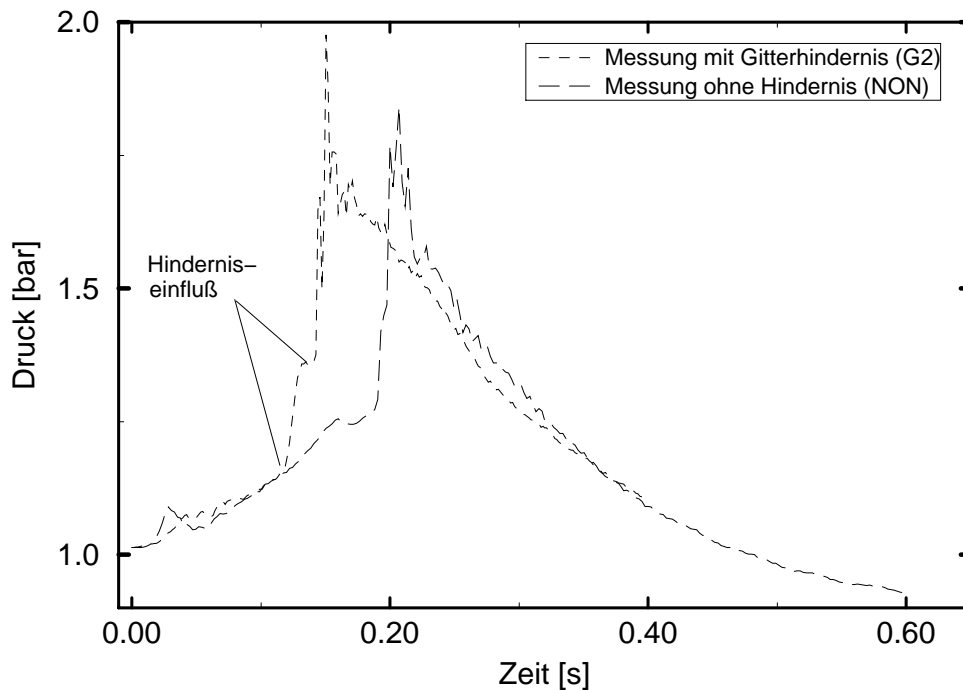


Abbildung 5.19: Vergleich der gemessenen zeitlichen Druckverläufe an der Position des zweiten Druckaufnehmers (2145 mm vom Zündflansch) für das leere Rohr (NON) und das Gitterhindernis (G2)

zeitlichen Druckverlaufes am Druckaufnehmer 2 (vgl. Abbildung 5.3) dargestellt. Man erkennt, daß das Modell zunächst den aufgrund der drosselnden Wirkung des Hindernisses flacheren Anstieg bis zum Platzen der Membran gut nachvollzog und auch nach dem Platzen der Membran den gemessenen Druckabfall zunächst gut wiedergab. Im folgenden unterschied sich der berechnete Druckverlauf über der Zeit jedoch deutlich von dem Gemessenen. Offensichtlich war für diesen Fall mit Hindernis die Charakteristik des durch die Dämpfungselemente bestimmten Druckabfalls sehr unterschiedlich zu der Situation ohne Hindernis, für die der Druckverlustbeiwert angepaßt wurde. Die zeitlichen Druckverläufe mit Hindernis zeigten daher in der Simulation eine sehr viel stärkere Abhängigkeit von den im Rohr nach dem Platzen der Berstmembran auftretenden Druckschwingungen.

Vergleicht man die Verläufe der gemessenen und berechneten Drücke, so wird aus dem steilen Druckanstieg der berechneten Kurve ab ca. 0,12 s deutlich, daß die simulierte Flamme das turbulente Nachlaufgebiet des Hindernisses ungefähr zur gleichen Zeit wie die reale Flamme erreichte. Ab diesem Zeitpunkt war auch in der Simulation der Einfluß des Strömungshin-

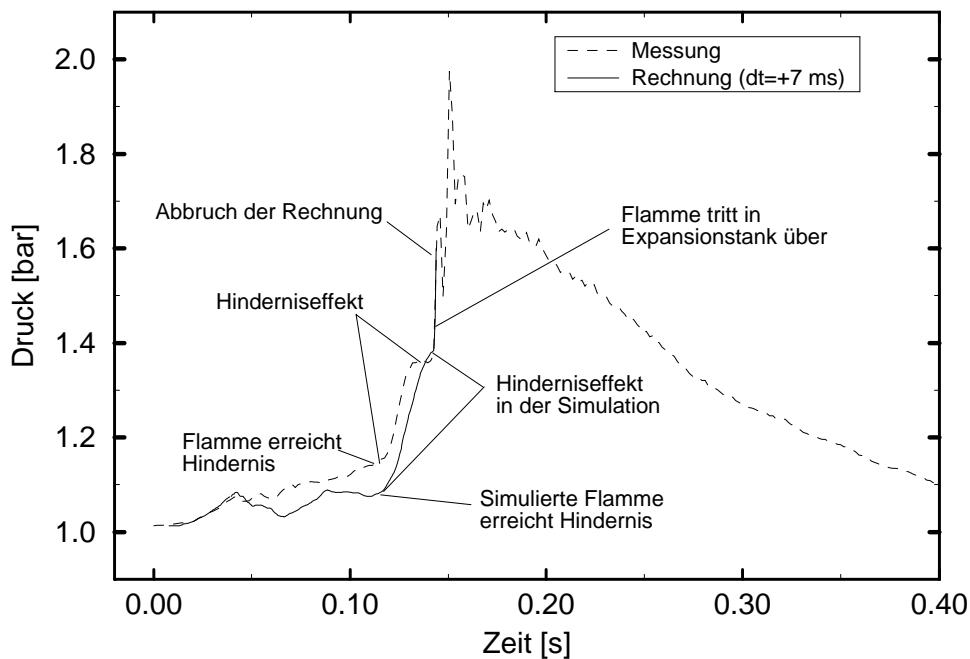


Abbildung 5.20: Druckaufbau mit Gitterhindernis: Vergleich des gemessenen und des berechneten zeitlichen Druckverlaufes an der Position des zweiten Druckaufnehmers (2145 mm vom Zündflansch); 16 Vol.-% H₂; Gitterhindernis G2 (Ergebnis der Rechnung wurde um +7 ms in der Zeit verschoben)

dernisses deutlich erkennbar. Die Steigung des durch den Hinderniseffekt verursachten Druckanstiegs sowie dessen Zeitdauer stimmten gut mit dem gemessenen Druckanstieg überein.

Abbildung 5.21 zeigt in einem Zeit-Weg-Diagramm der Flammenposition den Vergleich des gemessenen und des berechneten Flammenfortschritts für das Gitterhindernis. Nach dem Anlaufen der Verbrennung zeigte die berechnete Flammenpositionskurve ungefähr die gleiche Steigung wie die gemessene. Ungefähr 1 m vor dem Hindernis (bei ca. 0,75 m) verlangsamte sich die berechnete Flamme jedoch stärker als dies aus den Messungen zu erkennen war. Offensichtlich wurde die Drosselung der Strömung durch das Gitterhindernis in der Simulation überschätzt. Ab der Position des Hindernisses war jedoch auch in der Berechnung die Beschleunigung der Flamme – erkennbar an der flacheren Steigung der Kurve – deutlich erkennbar. Abgesehen von dem durch die vorangegangene Verzögerung verursachten Parallelversatz wiesen beide Kurven dagegen hinter dem Hindernis wieder ähnliche Steigungen auf. Der Vergleich der gemessenen und berechneten Flammenpositionskurven mit dem Gitterhindernis für alle Ge-

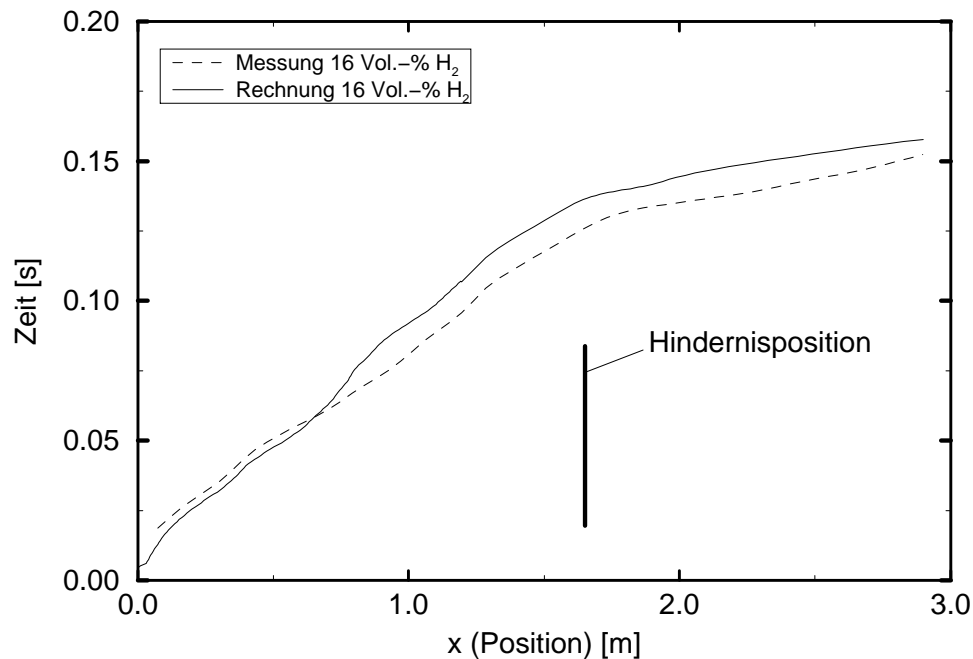


Abbildung 5.21: Zeit-Weg-Diagramm der Flammenposition in der Versuchsstrecke mit Hindernis G2 für 16 Vol.-% H₂

mischkonzentrationen im Zeit-Weg-Diagramm in Abbildung 5.22 zeigt, daß die Simulationen die Flammenposition qualitativ gut und auch quantitativ zufriedenstellend wiedergeben.

Wie bereits bei den Berechnungen ohne Hindernis zeigten die in Abbildung 5.23 dargestellten Flammengeschwindigkeitskurven im Geschwindigkeits-Weg-Diagramm, daß die Größenordnung der Flammengeschwindigkeit durch die Simulationen auch für den Fall mit dem Gitterhindernis gut wiedergegeben wird. Die Zunahme der Flammengeschwindigkeit ab der Position des Hindernisses ist deutlich ersichtlich. Auch im Bereich nach dem Hindernis ist die Hinderniswirkung an der erhöhten Flammengeschwindigkeit erkennbar. Hier wird jedoch durch die Simulation im Gegensatz zu der Messung eine gleichbleibend hohe Flammengeschwindigkeit berechnet. Die Ursache hierfür ist vermutlich, daß das verwendete k - ε Turbulenzmodell das turbulente Zeitmaß $\frac{k}{\varepsilon}$ im Bereich des Hindernisnachlaufes durch zu hohe Werte der turbulenten Dissipationsrate ε unterschätzt.

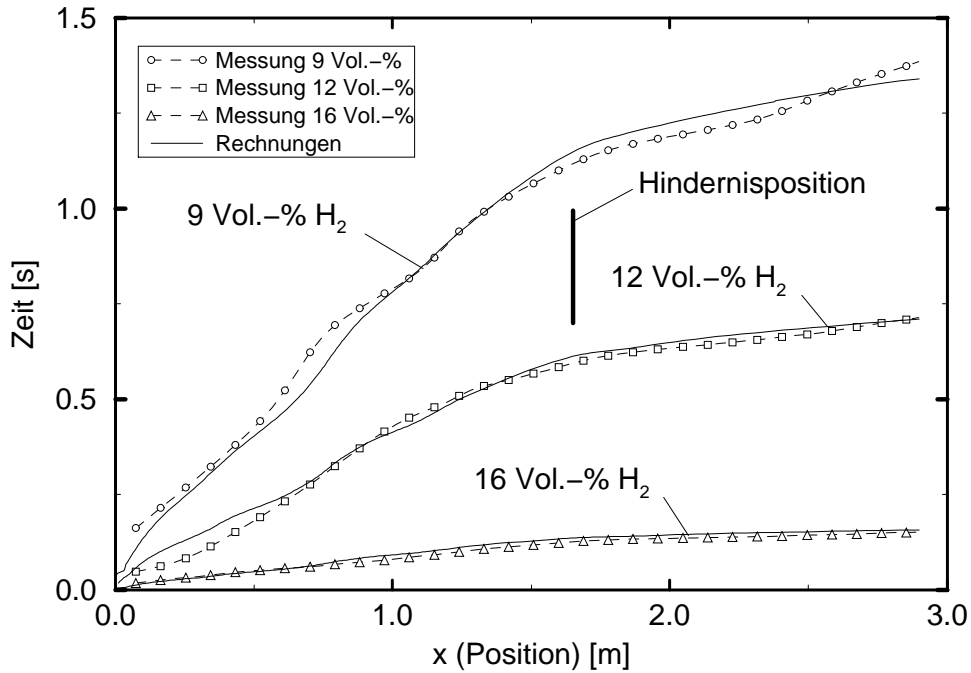


Abbildung 5.22: Zeit-Weg-Diagramm der Flammenposition in der Versuchsstrecke mit Hindernis G2 für alle Konzentrationen

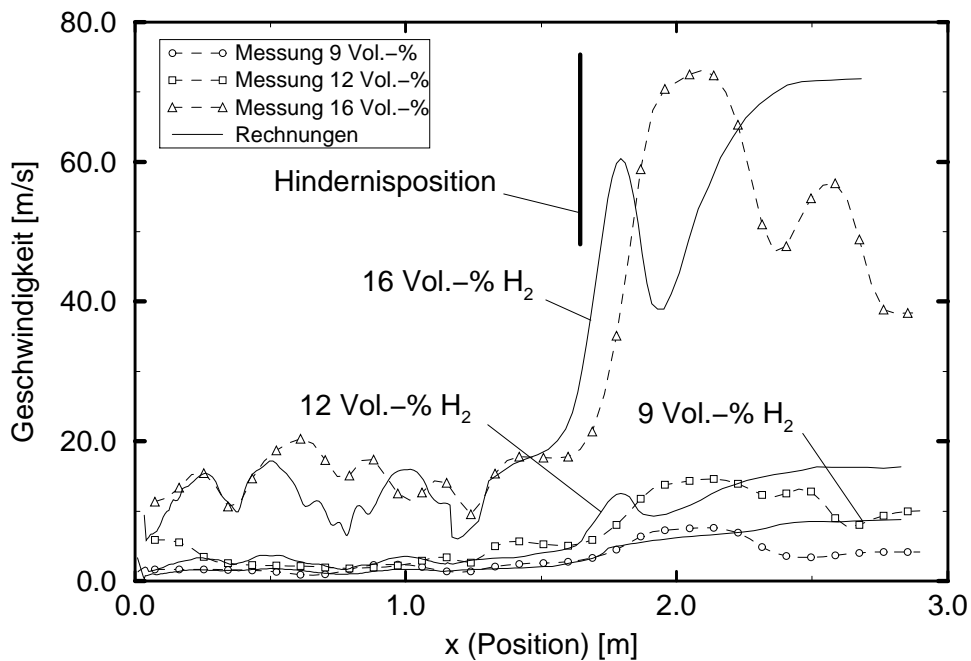


Abbildung 5.23: Geschwindigkeits-Weg-Diagramm der Flammengeschwindigkeit in der Versuchsstrecke mit Hindernis G2 für alle Konzentrationen

6 Zusammenfassung

Die hier vorliegende Arbeit beschreibt Untersuchungen zur Wechselwirkung zwischen vorgemischten, turbulenten Wasserstoff-Luft-Flammen und Strömungshindernissen. Die Arbeit teilte sich auf in zwei Teile. Es wurden experimentelle Untersuchungen durchgeführt, die durch Messungen der Strömungsgeschwindigkeit mittels eines Laser-Doppler-Systems Zusammenhänge zwischen der durch die Hindernisse in die Strömung eingebrachten Turbulenz und der durch Photodioden erfaßten Flammengeschwindigkeit bzw. der daraus ermittelten turbulenten Brenngeschwindigkeit aufzeigten. Gleichzeitig wurde durch theoretische Überlegungen ein Verbrennungsmodell für numerische Simulationen entwickelt, das für einen weiten Bereich möglicher Verbrennungen Gültigkeit besitzt. Durch Nachrechnungen und Vergleiche mit den durchgeführten Experimenten wurde das Verbrennungsmodell verifiziert und validiert.

Die Messungen wurden an einem Explosionsrohr mit quadratischem Querschnitt (Kantenlänge 268 mm) und 3 m Länge, das an einen Expansionsbehälter, in dem die Flammenfronten erlöschen konnten, angeflanscht war, durchgeführt. Als Strömungshindernisse wurden Einzelkörper wie horizontale und vertikale Zylinder, schräge Trittgitter und ein Wandhindernis mit asymmetrischer quadratischer Öffnung verwendet. Die Hindernisse wurden auswechselbar in der Mitte der Versuchsstrecke eingebaut.

Die durchgeführten experimentellen Untersuchungen ermöglichten durch das eingesetzte Laser-Doppler-Anemometer (LDA) die Bestimmung der Turbulenzintensität im Bereich der Hindernisse mit hoher örtlicher und zeitlicher Auflösung. Die Hindernisse konnten so hinsichtlich ihres Einflusses auf den Turbulenzzustand eingeordnet werden. Die gemessenen Zeitverläufe der Strömungsgeschwindigkeit gaben zudem Aufschluß über die Strömungsvorgänge im Bereich der Flammenfront. Als maximale Strömungsgeschwindigkeit wurden ca. 50 m/s im Bereich des turbulenten Freistrahles eines türförmigen Hindernisses mit hoher Blockierate gemessen. Als maximale Turbulenzintensität wurden 10 m/s im Bereich der turbulenten Scherschicht hinter der Türöffnung ermittelt. Bei den bestimmten Turbulenzintensitäten waren, abhängig davon ob der Meßpunkt im Bereich von turbulenten Scherschichten bzw. im Nachlaufgebiet der Hinder-

nisse lag oder frei angeströmt wurde, deutliche Unterschiede in dem Zusammenhang zwischen Axial- und Querschwankungen der Geschwindigkeit zu erkennen. Für Hindernisse, die durch die Versperrung des Strömungsquerschnitts eine starke Beschleunigung der Strömung verursachen, zeigte dieser Zusammenhang zudem eine Nichtlinearität, die darauf hindeutet, daß die Turbulenz in diesen Fällen anisotrop war. Korrelationen mit der integral erfaßten turbulenten Flammengeschwindigkeit zeigten, daß die in der turbulenten Scherschicht des Türhindernisses generierte Turbulenz auch den größten Einfluß auf die turbulente Flammenbeschleunigung hat. Es konnte zudem nachgewiesen werden, daß die lokal an der Position des LDA-Meßvolumens bestimmten Zusammenhänge zwischen Turbulenzintensität und lokaler Flammengeschwindigkeit in ähnlicher Weise auch für die stromabwärts von dieser Position auftretende maximale Flammengeschwindigkeit gelten. Die ermittelten turbulenten Brenngeschwindigkeiten wurden durch ein von Beauvais [Bea94] vorgeschlagenes Brenngesetz gut approximiert.

Im Rahmen der theoretischen Arbeiten wurde ein turbulentes Verbrennungsmodell für den Einsatz in dreidimensionalen Strömungssimulationsprogrammen entwickelt und in ein kommerzielles Programm-Paket zur Strömungssimulation (CFX/TASCflow) integriert. Das Modell basiert auf einem Ansatz, der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen (englisch: probability density function – PDF) nutzt, um die zeitlich gemittelte Reaktionsrate zu bestimmen. Der PDF-Ansatz geht von einer allgemeinen Form der PDF als Gauß-Funktion aus und bestimmt die Parameter, die die spezielle Form festlegen (mittlerer Reaktionsfortschritt und dessen Varianz), an jedem Berechnungspunkt des numerischen Gitters aus dem errechneten Strömungs- bzw. Turbulenzzustand. Die momentane Reaktionsrate, die durch eine Faltungsintegration mit der berechneten PDF die Bestimmung der mittleren Reaktionsrate erlaubt, wurde aus eindimensionalen Modellberechnungen unter Berücksichtigung detaillierter chemischer Reaktionsmechanismen bestimmt, nachdem Vergleiche verschiedener Einschrittmechanismen Unterschiede von z.T. mehreren Größenordnungen aufgezeigt hatten. Das PDF-Verbrennungsmodell wurde hinsichtlich der Rechenzeit optimiert, indem die turbulente Reaktionsrate für den möglichen Bereich des Reaktionsfortschrittes und dessen Varianz vorbestimmt und in Tabellen abgespeichert wurde. Während der Simulation war daher nur ein bilineares

Tabelleninterpolationsverfahren notwendig, was die Berechnung erheblich beschleunigte.

Das Verbrennungsmodell wurde anhand von Vergleichen zwischen Simulationsrechnungen und den durchgeführten Messungen überprüft. Simuliert wurden dabei sowohl das leere Explosionsrohr ohne Hindernis wie auch der Fall mit einem Hindernis, das als Modell eines schräg angeströmten Trittgitters diente. Die Vergleiche für das leere Rohr zeigten, daß die Berechnungen den zeitlichen Druck- und Strömungsgeschwindigkeitsverlauf im Explosionsrohr sehr gut wiedergaben. Auch hinsichtlich des Flammenfortschritts und der Flammengeschwindigkeit wurde eine gute Übereinstimmung mit den Messergebnissen erreicht. Die Berechnungen für das Gitterhindernis ergaben zudem, daß das Verbrennungsmodell in der Lage ist, die durch den Hinderniseinfluß verursachte Flammenbeschleunigung wiederzugeben. Auch für diesen Fall zeigten die Berechnungsergebnisse zufriedenstellende Übereinstimmung mit den Messungen.

Literatur

- [ADOR85] **A. A. Amsden, J. K. Dukowics, P. J. O'Rourke und J. D. Rams-haw.** KIVA: A computer program for two- and three-dimensional fluid flows with chemical reactions and fuel sprays. report LA-10245-MS, Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, 1985.
- [Adv95] **Advanced Scientific Computing.** TASCflow – Theory Manual. Handbuch, 1995.
- [AGB89] **R. G. Abdel-Gayed und D. Bradley.** Combustion Regimes and the Straining of Turbulent Premixed Flames. *Combust. and Flame*, 76:213–218, 1989.
- [AKSS98] **R. Akbar, M. Kaneshige, E. Schultz und J. Shepard.** Detonations in $H_2-N_2O-CH_4-NH_3-O_2-N_2$ Mixtures. Explosion Dynamics Laboratory Report FM97-3, Graduate Aeronautical Laboratories, California Institute of Technology, Pasadena, CA, 1998.
- [Alb86] **H. E. Albrecht.** *Laser-Doppler-Strömungsmessung.* Akademie-Verlag, Berlin, 1986.
- [AM98a] **N. Ardey und F. Mayinger.** Einfluß Containment-typischer Strömungshindernisse auf die Ausbreitung turbulenter Wasserstoff-Luft-Flammen – Band I. Abschlußbericht zum Forschungsvorhaben BMFT, Nr. 150 0957, TU München, 1998.
- [AM98b] **N. Ardey und F. Mayinger.** Einfluß Containment-typischer Strömungshindernisse auf die Ausbreitung von Wasserstoff-Luft-Flammen – Band IV: Resuspension von Aerosolen durch transiente Strömungen. Abschlußbericht zum Forschungsvorhaben BMFT, Nr. 150 0957, TU München, 1998.
- [APA95] **A. Alexiou, H. Phylaktou und G. E. Andrews.** Vented Gas Explosions in a Long Vessel with Obstacles. In *Proceedings of the 2nd Symposium on Major Hazards Onshore and Offshore, Manchester 1995*, pp. 297–312, Rugby, Engl., 139:, 1995. Institution of Chemical Engineers.
- [Ard98] **N. Ardey.** *Struktur und Beschleunigung turbulenter Wasserstoff-Luft-Flammen in Räumen mit Hindernissen.* Dissertation, TU München, 1998.
- [Bea94] **R. Beauvais.** *Brennverhalten vorgemischter, turbulenter Wasserstoff-Luft-Flammen in einem Explosionsrohr.* Dissertation, TU München, 1994.
- [BGG94] **D. Bradley, P. H. Gaskell und X. J. Gu.** Application of a Reynolds Stress, Stretched Flamelet, Mathematical Model to Computations of Turbulent Burning Velocities and Comparison with Experiments. *Combust. and Flame*, 96:221–248, 1994.

- [BHD⁺] **C. T. Bowman, R. K. Hanson, D. F. Davidson, W. C. Gardiner, Jr., V. Lissianski, G. P. Smith, D. M. Golden, Frenklach M. und M. Goldenberg.** http://www.me.berkeley.edu/gri_mech.
- [Bil75] **R. W. Bilger.** A Note on Favre Averaging in Variable Density Flows. *Combust. Sci. and Tech.*, 11:215–217, 1975.
- [Bil80] **R. W. Bilger.** Turbulent Flows with Nonpremixed Reactants. In **P. A. Libby und F. A. Williams**, Hrsg., *Turbulent Reacting Flows*, Topics in Applied Physics, Kapitel 3, pp. 65–113. Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, 1980.
- [Bjo86] **M. Bjorkhaug.** Dissertation, The City University, London, 1986.
- [BKLM88] **D. Bradley, L. K. Kwa, A. K. C. Lau und M. Missaghi.** Laminar Flamelet Modeling of Recirculating Premixed Methane and Propane-Air Combustion. *Combust. and Flame*, 71:109–122, 1988.
- [Bor74] **R. Borghi.** Chemical Calculations in Turbulent Flows – Application to Co Containing Turbujet Flame. *Adv. Geophysics*, 18B:349, 1974.
- [Bor84] **R. Borghi.** On the Structure of Turbulent Premixed Flames. In **C. Bruno und C. Casci**, Hrsg., *Recent Advances in Aeronautical Science*. Pergamon Press, 1984.
- [Bor88] **R. Borghi.** Turbulent Combustion Modelling. *Prog. in Energy and Combust. Sci.*, 14:245–292, 1988.
- [Bra80] **K. N. C. Bray.** Turbulent Flows with Premixed Reactants. In **P. A. Libby und F. A. Williams**, Hrsg., *Turbulent Reacting Flows*, Topics in Applied Physics, Kapitel 4, pp. 115–183. Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, 1980.
- [Bre88] **N. Brehm.** *Ein Beitrag zum Phänomen des Übergangs von der Deflagration in die Detonation*. Dissertation, TU München, 1988.
- [CDRA82] **L. D. Cloutman, J. K. Dukowics, J. D. Ramshaw und A. A. Amsden.** CONHAS-Spray: A computer code for reactive flows with fuel sprays. report LA-9294-MS, Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, 1982.
- [CGPS72] **L. S. Caretto, A. D. Gosman, S. V. Patankar und D. B. Saplding.** Two Calculation Procedures for Steady, three-dimensional flows with recirculation. In *Proc. Third Int. Conf. Num. Meth. Fluid Dyn.*, Paris, 1972.
- [CKM83] **T. P. Coffee, A. J. Kotlar und M. S. Miller.** The Overall Reaction Concept in Premixed, Laminar, Steady-State Flames. I. Stoichiometries. *Combust. and Flame*, 54:155–169, 1983.
- [CW26] **W. R. Chapman und R. V. Wheeler.** The Propagation of Flame in Mixtures of Methane and Air, Part IV. *J. Chem. Soc.*, pp. 2139–2147, 1926.

- [Dan86a] **Dantec Elektronik.** 55 X Modular Optics – Instruction Manual. Handbuch, 1986.
- [Dan86b] **Dantec Elektronik.** 55L90a Counter Processor – Instruction Manual. Handbuch, 1986.
- [Dan86c] **Dantec Elektronik.** 55N10 Frequency Shifter – Instruction Manual. Handbuch, 1986.
- [Deg95] **Degussa AG.** AEROSIL OX 50 SiO₂ – Sicherheitsdatenblatt, 1995.
- [Deg98] **Degussa AG.**
<http://www.degussa.de>, 1998.
- [DL83] **G. Dixon-Lewis.** Spherically Symmetric Flame Propagation in Hydrogen-Air Flames. *Combust. Sci. and Tech.*, 34:1–29, 1983.
- [DM99] **B. Durst und F. Mayinger.** Einfluß Containment-typischer Strömungshindernisse auf die Ausbreitung von Wasserstoff-Luft-Flammen – Band II: Lokale Strömungsmessungen und dreidimensionale Modellierung der turbulenten Verbrennung. Abschlußbericht zum Forschungsvorhaben BMFT, Nr. 150 0957, TU München, 1999.
- [DMW87] **F. Durst, A. Melling und J. H. Whitelaw.** *Theorie und Praxis der Laser-Doppler-Anemometrie.* G. Braun, Karlsruhe, 1987.
- [Dos] **Dostek Inc., Zech Electronics.** Model 1400A LDA Aquisition Interface, Installation and Technical Reference Manual. Handbuch.
- [DRS85] **D. Dunn-Rankine und R. F. Sawyer.** LDA STUDY of the Unburned Gas Motion Induced by Nonsteady Flame Propagation in a Constant Volume Duct. In *Spring Meeting, Central States Division*, pp. 1–26. The Combustion Institute, 1985.
- [Dur89a] **B. Durst.** Aufbau und Inbetriebnahme eines Laser-Doppler-Geschwindigkeitsmeßsystems für den Einsatz mit einem Explosionsrohr. Semesterarbeit, November 1989. Lehrstuhl A für Thermodynamik, TU München.
- [Dur89b] **B. Durst.** Die grundlegenden Gleichungen zur Beschreibung thermodynamischer und strömungsmechanischer Transportvorgänge – Herleitung und Diskretisierung für numerische Lösungsverfahren. Semesterarbeit, Januar 1989. Lehrstuhl A für Thermodynamik, TU München.
- [EEJM98] **A. Eder, B. Edlinger, M. Jordan und F. Mayinger.** Investigation of Transient Flame Development Using a Combination of Advanced Optical Measurement Techniques. *8th Int. Symp. on Flow Visualisation*, 1998.

- [EEM98] **A. Eder, B. Edlinger und F. Mayinger.** Einfluß Containment-typischer Strömungshindernisse auf die Ausbreitung von Wasserstoff-Luft-Flammen – Band III: Anlaufvorgänge und Ma stabseffekte. Abschlußbericht zum Forschungsvorhaben BMFT, Nr. 150 0957, TU München, 1998.
- [Fav65] **A. Favre.** Equations de gaz turbulent compressible. *J. de Mécanique*, 4:361–421, 1965.
- [Fri86] **R. Friedrich.** Grundlagen turbulenter Strömungen. Vorlesungsskript, 1986. Lehrstuhl für Strömungsmechanik, TU München.
- [FWB⁺95] **M. Frenklach, H. Wang, C. T. Bowman, R. K. Hanson, G. P. Smith, D. M. Golden, W. C. Gardiner, Jr. und V. Lissianski.** An Optimized Kinetics Model for Natural Gas Combustion. Technical report, Gas Research Institute, 1995.
- [GG76] **D. D. Gray und A. Giorgini.** The Validity of the Boussinesq Approximation for Liquids and Gases. *Int. J. Heat and Mass Transfer*, 19:545–551, 1976.
- [Gir91] **S. S. Girimaji.** Assumed β -pdf Model for Turbulent Mixing: Validation and Extension to Multiple Scalar Mixing. *Combust. Sci. and Tech.*, 78:177–196, 1991.
- [HE87] **A. J. Harrison und J. A. Eyre.** The Effect of Obstacle Arrays on the Combustion of Large Premixed Gas/Air Clouds. *Combust. Sci. and Tech.*, 52:121–137, 1987.
- [Hof95] **D. Hofmann.** Erweiterung des Finite-Volumen-Programms TASCflow um ein PDF-Verbrennungsmodell zur Simulation von turbulenten Wasserstoff-Luft-Flammen. Diplomarbeit, Dezember 1995. Lehrstuhl A für Thermodynamik, TU München.
- [Hoh92] **O. Hohlbach.** Das Folgevermögen eines Partikels in einer Fluidströmung am Beispiel eines Explosionsrohres. Semesterarbeit, Dezember 1992. Lehrstuhl A für Thermodynamik, TU München.
- [Iss86] **R. I. Issa.** Solution of Implicitly Discretized Fluid Flow Equations by Operator Splitting. *J. Comp. Physics*, 62:40–65, 1986.
- [Jor99] **M. Jordan.** *Zündung und Verbrennung in vorgemischten turbulenten Freistrahlen.* Dissertation, TU München, 1999.
- [JT87] **S. A. S. Jones und G. O. Thomas.** Pressure Hot-Wire and Laser-Doppler Anemometer Studies of Flame Acceleration in Long Tubes. *Combust. and Flame*, 87:21–32, 1987.
- [JW82] **W. P. Jones und J. H. Whitelaw.** Calculation Methods for Reacting Turbulent Flows: A Review. *Combust. and Flame*, 48:1–26, 1982.

- [KDLW⁺86] **R. J. Kee, G. Dixon-Lewis, J. Warnatz, M. E. Coltrin und J. A. Miller.** A FORTRAN Computer Code Package for the Evaluation of Gas-Phase, Multicomponent Transport Properties. Technical Report SAND86-8246, Sandia National Laboratory, 1986.
- [KGSM85] **R. J. Kee, J. F. Grcar, M. D. Smooke und J. A. Miller.** A FORTRAN Program for Modeling Steady Laminar One-Dimensional Premixed Flames. Technical Report SAND85-8240, Sandia National Laboratory, 1985.
- [KKB93] **G. W. Koroll, R. K. Kumar und E. M. Bowles.** Burning Velocities of Hydrogen-Air Mixtures. *Combust. and Flame*, 94:330–340, 1993.
- [Kol41a] **A. N. Kolmogorov.** The Local Structure of Turbulence in Incompressible Viscous Fluid for very Large Reynolds Numbers. In *Dokl. Akad. Nauk. SSSR*, vol. 30, pp. 299–303, 1941.
- [Kol41b] **A. N. Kolmogorov.** The Local Structure of Turbulence in Incompressible Viscous Fluid for very Large Reynolds Numbers. In *Dokl. Akad. Nauk. SSSR*, vol. 31, pp. 538–541, 1941.
- [Kol41c] **A. N. Kolmogorov.** The Local Structure of Turbulence in Incompressible Viscous Fluid for very Large Reynolds Numbers. In *Dokl. Akad. Nauk. SSSR*, vol. 32, pp. 19–21, 1941.
- [KRM89] **R. J. Kee, F. M. Rupley und J. A. Miller.** CHEMKIN-II: A FORTRAN Chemical Kinetics Package for the Analysis of Gas-Phase Chemical Kinetics. Technical Report SAND89-8009, Sandia National Laboratory, 1989.
- [KRO94] **KRONOS International Inc.** Titandioxid TiO₂ – Sicherheitsdatenblatt, 1994.
- [Kuo86] **K. K. Kuo.** *Principles of Combustion*. Wiley & Sons, New York, 1986.
- [Leh96] **M. Lehner.** *Staubabscheidung im Venturiwäscher mit Flüssigkeits-Selbstansaugung*. Dissertation, TU München, 1996.
- [LKK84] **J. H. Lee, R. Knystautas und Chan C. K.** Turbulent Flame Propagation in Obstacle-Filled Tubes. In *20th (Int.) Symposium on Combust.*, pp. 1663–1672. The Combustion Institute, 1984.
- [LN75] **F. C. Lockwood und A. S. Naguib.** The Prediction of Fluctuations in the Properties of Free, Round-Jet, Turbulent, Diffusion Flames. *Combust. and Flame*, 24:109–124, 1975.
- [LP90] **M. Lorenz und K. Prescher.** Cycle Resolved LDV Measurements on a Fired SI-Engine at High Data Rates Using a Conventional Modular LDA-System. *SAE Technical Paper Series*, 900054, 1990.
- [LS74] **B. E. Launder und D. B. Spalding.** The Numerical Computation of Turbulent Flows. *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.*, 3:269–289, 1974.

- [LS98] **R. P. Lindstedt und V Sakthitharan.** Time Resolved Velocity and Turbulence Measurements in Turbulent Gaseous Explosions. *Combust. and Flame*, 114:469–483, 1998.
- [LSCG95] **J. Loesel Sitar, C. K. Chan und A. Guerrero.** Turbulent Burning Rate for Near-Flammability H₂-Air-Steam Mixtures. Hydrogen Combustion Working Group Meeting, 5 Country Cooperation Exchange on Hydrogen in Reactor Safety, 1995.
- [Maa88] **U. Maas.** *Mathematische Modellierung instationärer Verbrennungsprozesse unter Verwendung detaillierter Reaktionsmechanismen.* Dissertation, Universität Heidelberg, 1988.
- [Maa93] **U. Maas.** Automatische Reduktion von Reaktionsmechanismen zur Simulation reaktiver Strömungen. Habilitationsschrift, Universität Stuttgart, 1993.
- [May96] **F. Mayinger.** Transport Phenomena in Highly Turbulent Flames. In *Proc. of the 6th Australasian Heat and Mass Transfer Conference*, pp. 201–212, Sydney, Dec. 9.–12. 1996.
- [MB89] **J. A. Miller und C. T. Bowman.** Mechanism and Modeling of Nitrogen Chemistry in Combustion. *Prog. Energy Combust. Sci.*, 15:287–338, 1989.
- [MDK⁺79] **I. O. Moen, M. Donato, R. Knystautas, J. H. Leea und H. Gg. Wagner.** Turbulent Flame Propagation and Acceleration in the Presence of Obstacles. *Progress in Astronautics and Aeronautics*, 75:33–47, 1979.
- [MDKH80] **I. O. Moen, M. Donato, R. Knystautas und Lee J. H.** Flame Acceleration Due to Turbulence Produced by Obstacles. *Combust. and Flame*, 39:21–32, 1980.
- [MH76] **B. F. Magnussen und B. H. Hjertager.** On Mathematical Modeling of Turbulent Combustion with Special Emphasis on Soot Formation and Combustion. In *16th (Int.) Symposium on Combust.*, pp. 719–729. The Combustion Institute, 1976.
- [MLH⁺82] **I. O. Moen, J. H. S. Lee, B. H. Hjertager, K Fuhre und R. K. Eckhoff.** Pressure Development Due to Turbulent Flame Propagation in Large-Scale Methane-Air Explosions. *Combust. Sci. and Tech.*, 47:31–52, 1982.
- [MMJ77] **A. G. Marathe, H. S. Mukunda und V. K. Jain.** Some Studies on Hydrogen-Oxygen Diffusion Flame. *Combust. Sci. and Tech.*, 15:49–64, 1977.
- [MNT97] **E. Müller, H. Nobach und C. Tropea.** Efficient Estimation of Power Spectral Density from Laser Doppler Anemometer Data. In *7th Int. Conf. on Laser Anemometry – Advances and Applications*, 1997.

- [MV90] **K. Meyberg und P. Vachenaue**r. *Höhere Mathematik 1*. Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, 1990.
- [MW19] **S. Mason und R. V. Wheeler**. The Propagation of Flame in Mixtures of Methane and Air. *J. Chem. Soc.*, 117:47, 1919.
- [MW88] **U. Maas und J. Warnatz**. Ignition Processes in Hydrogen-Oxygen Mixtures. *Combust. and Flame*, 74:53, 1988.
- [Nob98] **H. Nobach**. QQuick V 2.5, Programm zur rekonstruktionsbasierten Korrelations- und Spektralanalyse von LDA-Datensätzen. Bedienungsanleitung, 1998. Universität Rostok, Fachbereich Elektrotechnik und Informationstechnik, Institut für Nachrichtentechnik und Informationselektronik.
- [PA91a] **H. Phylaktou und G. E. Andrews**. The Acceleration of Flame Propagation in a Tube by an Obstacle. *Combust. and Flame*, 85:363–379, 1991.
- [PA91b] **H. Phylaktou und G. E. Andrews**. Gas Explosions in Long Closed Vessels. *Combust. Sci. and Tech.*, 77:27–39, 1991.
- [PAMK92] **H. Phylaktou, G. E. Andrews, N. Mounter und K. M. Khamis**. Spherical Explosions Aggravated by Obstacles. In *Symposium on Major Hazards Onshore and Offshore Manchester, Leeds*, vol. 130, pp. 525–542. Institution of Chemical Engineers, 1992.
- [Pat80] **S. V. Patankar**. *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. Hemisphere Publishing Corp., New York, 1980.
- [Pet86] **N. Peters**. Laminar Flamelet Concepts in Turbulent Combustion. In *21st (Int.) Symposium on Combust.*, pp. 1231–1250. The Combustion Institute, 1986.
- [Pet91] **N. Peters**. Numerical Approaches to Combustion Modeling. In **E. S. Oran und J. A. Boris**, Hrsg., *Prog. Astronautics Aeronautics*, pp. 155–182. AIAA, 1991.
- [Pet97] **N. Peters**. Four Lectures on Turbulent Combustion. In *ERCOfTAC Summer School*, Aachen, Germany, September 1997.
- [PF96] **M. Peric und J. H. Ferziger**. *Computational Methods for Fluid Dynamics*. Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, 1996.
- [PFTV86] **W. H. Press, B. P. Flannery, S. A. Teukolsky und W. T. Vetterling**. *Numerical Recipes*. Cambridge University Press, Cambridge, 1986.
- [PLA94] **H. Phylaktou, Y. Liu und G. E. Andrews**. Turbulent Explosions: A Study of the Influence of the Obstacle Scale. In *Proc. of the Conf. on Hazards XII: European Advances in Process Safety, Manchester 1994*, vol. 134, pp. 296–284, Rugby, Engl., 1994. Institution of Chemical Engineers.

- [Pop85] **S. B. Pope.** PDF Methods for Turbulent Reacting Flows. *Prog. in Energy and Combust. Sci.*, 11:119–192, 1985.
- [PTH] **M. J. Pilling, T. Turányi und K. J. Hughes.**
http://www.chem.leeds.ac.uk:80/Combustion/Combust_Leeds.
- [RB83] **R. D. Reitz und F. V. Bracco.** Global Kinetics Models and Lack of Thermodynamik Equilibrium. *Combust. and Flame*, 53:141–143, 1983.
- [RC83] **C. M. Rhie und W. L. Chow.** A Numerical Study of the Turbulent Flow Past an Isolated Air Foil with Trailing Edge Separation. *AIAA-J.*, 21:1525–1532, 1983.
- [RD79] **J. D. Ramshaw und J. K. Dukowics.** APACHE: A generalized-mesh Eulerian computer code for multicomponent chemically reactive fluid flow at all speeds. report LA-8129-MS, Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, 1979.
- [Rey95] **O. Reynolds.** On the Dynamical Theory of Incompressible Viscous Fluids and the Determination of the Criterion. *Phil. Trans. R. Soc. London*, A 186:123, 1895.
- [RFB75] **W. C. Rivard, O. A. Farmer und T. D. Butler.** RICE: A computer program for multicomponent chemically reacting flows at all speeds. report LA-5812, Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, 1975.
- [Rhi81] **C. Rhie.** *A Numerical Study of the Flow Past an Isolated Air Foil with Separation.* Dissertation, Univ. of Illinois, Urbana-Champaign, 1981.
- [Ruc87] **B. Ruck.** *Laser-Anemometrie.* AT-Fachverlag, Stuttgart, 1987.
- [RW33] **H. Robinson und R. V. Wheeler.** Explosions of Methane and Air: Propagation Through a Restricted Tube. *J. Chem. Soc.*, pp. 758–760, 1933.
- [Sch90] **E. Schrüfer.** *Signalverarbeitung.* Hanser, München, 1990.
- [Sch94] **G. Scheuerer.** Private Mitteilung, 1994.
- [SK94] **V. Smiljanovski und R. Klein.** Flame Front Tracking via In-Cell Reconstruction. In *Proc. Intl. Conf. on Hyperbolic Systems*, Stony Brook, LI, USA, 1994.
- [SMK97] **V. Smiljanovski, V. Moser und R. Klein.** A Capturing/Tracking Hybrid Scheme for Deflagration Discontinuities. *Combustion Theory and Modelling*, 1:183–215, 1997.
- [Spa71] **D. B. Spalding.** Mixing and Chemical Reaction in Steady Confined Turbulent Flames. In *13th (Int.) Symposium on Combust.*, pp. 643–657. The Combustion Institute, 1971.

- [SR83] **R. Starke und P. Roth.** Messungen zur instationären Ausbreitung eingeschlossener Flammen in kurzen zylindrischen Rohren. *Forschung im Ingenieur-Wesen*, 49:153–160, 1983.
- [SR89] **R. Starke und P. Roth.** An Experimental Investigation of Flame Behaviour During Explosions in Cylindrical Enclosures with Obstacles. *Combust. and Flame*, 75:111–121, 1989.
- [Sto68] **H. L. Stone.** Iterative Solution of Implicit Approximations of Multi-Dimensional Partial Differential Equations. *SIAM J. Num. Anal.*, 5:530–558, 1968.
- [Tay35] **G. I. Taylor.** Statistical Theory of Turbulence-I/II. In *Proc. of the Royal Society of London*, A141, pp. 421–464, 1935.
- [Tay84] **P. H. Taylor.** Fast Flames in a Vented Duct. In *21st (Int.) Symposium on Combust.*, pp. 1601–1608. The Combustion Institute, 1984.
- [TB88] **P. H. Taylor und S. J. Bimson.** Flame Propagation Along a Vented Duct Containing Grids. In *22nd (Int.) Symposium on Combust.*, pp. 1355–1362. The Combustion Institute, 1988.
- [TL83] **H. Tennekes und J. L. Lumley.** *A First Course in Turbulence*. MIT Press, Cambridge, Massachusetts, 1983.
- [Tra87] **J. R. Travis.** A Heat, Mass, and Momentum Transport Model for Hydrogen Diffusion Flames in Nuclear Reactor Containments. *Nuclear Eng. and Design*, 101:149–166, 1987.
- [UBH83] **P. A. Urtiew, J. Brandeis und W. J. Hogan.** Experimental Study of Flame Propagation in Semiconfined Geometries with Obstacles. *Combust. Sci. and Tech.*, 30:105–119, 1983.
- [VB90] **J. Vandooren und J. Bian.** Validation of H₂/O₂ Reaction Mechanisms by Comparison with the Experimental Structure of a Rich Hydrogen-Oxygen Flame. In *23rd (Int.) Symposium on Combust.*, pp. 341–346. The Combustion Institute, 1990.
- [VCB86] **A. K. Varma, A. U. Chatwani und F. V. Bracco.** Studies of Premixed Laminar Hydrogen–Air Flames Using Elementary and Global Kinetics Models. *Combust. and Flame*, 64:233–236, 1986.
- [VDR84] **J. P. Van Doormal und G. D. Raithby.** Enhancements of the SIMPLE Method for Predicting Incompressible Fluid Flows. *Num. Heat Transfer*, 7:147–163, 1984.
- [Wen95] **D. Wennerberg.** *Entwicklung eines vorhersagefähigen Berechnungsmodells für stark verdrallte Strömungen mit Verbrennung*. Dissertation, Universität Erlangen, 1995.

- [Wes82] **C. K. Westbrook.** Hydrogen Oxidation Kinetics in Gaseous Detonations. *Combust. Sci. and Tech.*, 29:67–81, 1982.
- [Wes83] **C. K. Westbrook.** Numerical Modeling of Flame Inhibition by CF_3Br . *Combust. Sci. and Tech.*, 34:201–225, 1983.
- [Wil93] **D. C. Wilcox.** *Turbulence Modeling for CFD*. DCW Industries, La Cañada, California, 1993.
- [WM93] **J. Warnatz und U. Maas.** *Technische Verbrennung*. Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, 1993.

A Rechenregeln für die Zeit- und Favre-Mittelung

A.1 Zeitliche Mittelung

Es gilt

$$\bar{\varphi} = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T \varphi(t) dt \quad \text{und} \quad \varphi(t) = \bar{\varphi} + \varphi'(t). \quad (\text{A.1.1})$$

Durch die Anwendung des durch Gleichung (A.1.1) definierten Operators ergeben sich die folgenden Rechenregeln:

- Mittelwert eines Mittelwertes: $\overline{\bar{\varphi}} = \bar{\varphi}$
- Mittelwert einer Schwankungsgröße: $\overline{\varphi'} = 0$
- Mittelwert einer Summe: $\overline{\varphi + \vartheta} = \bar{\varphi} + \bar{\vartheta}$
- Mittelwert eines Produktes: $\overline{\varphi \vartheta} = \bar{\varphi} \bar{\vartheta} + \overline{\varphi' \vartheta'}$
- Mittelwert eines Integrals: $\overline{\int \varphi dt} = \int \bar{\varphi} dt$
- Mittelwert eines Differential: $\overline{\frac{\partial \varphi}{\partial t}} = \frac{\partial \bar{\varphi}}{\partial t}$ und $\overline{\frac{\partial \varphi}{\partial x_i}} = \frac{\partial \bar{\varphi}}{\partial x_i}$
- Mittelwert eines Produktes mit Mittelwert: $\overline{\varphi \bar{\vartheta}} = \bar{\varphi} \bar{\vartheta}$
- Mittelwert eines Dreifachproduktes mit Dichte:

$$\overline{\rho \varphi \vartheta} = \bar{\rho} \bar{\varphi} \bar{\vartheta} + \bar{\rho} \overline{\varphi' \vartheta'} + \bar{\varphi} \overline{\rho \vartheta'} + \bar{\vartheta} \overline{\rho \varphi'} + \overline{\rho' \varphi' \vartheta'}$$

A.2 Favre-Mittelung

$$\tilde{\varphi}(t) = \frac{\overline{\rho \varphi(t)}}{\bar{\rho}} \quad \text{und} \quad \varphi(t) = \tilde{\varphi}(t) + \varphi''(t). \quad (\text{A.2.1})$$

Hierfür ergeben sich die folgenden Rechenregeln:

- Mittelwert eines Mittelwertes: $\overline{\tilde{\varphi}} = \tilde{\varphi}$
- Mittelwert einer Schwankungsgröße: $\overline{\varphi''} \neq 0$ aber $\overline{\rho\varphi''} = 0$
- Mittelwert eines Produktes mit Mittelwert: $\overline{\varphi\tilde{\vartheta}} = \overline{\varphi}\tilde{\vartheta}$
- Mittelwert eines Dreifachproduktes mit Dichte:

$$\overline{\rho\varphi\tilde{\vartheta}} = \overline{\rho}\tilde{\varphi}\tilde{\vartheta} + \overline{\rho\varphi''\tilde{\vartheta}''}$$

B Maximalwert der Varianz

Das Schwankungsmaß ist wie folgt definiert:

$$\begin{aligned}\widetilde{c}^{\prime 2} &= \int_{-\infty}^{\infty} (c - \tilde{c})^2 \tilde{P}(c) dc \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} c^2 \tilde{P}(c) dc - \tilde{c}^2.\end{aligned}$$

Im betrachteten Bereich $0 \leq c \leq 1$ ist $c^2 \leq c$ und somit

$$c^2 \tilde{P}(c) \leq c \tilde{P}(c).$$

Da die Funktionen stetig sind, gilt auch (vgl. [MV90]):

$$\int_{-\infty}^{\infty} c^2 \tilde{P}(c) dc \leq \int_{-\infty}^{\infty} c \tilde{P}(c) dc.$$

Daher ist

$$\widetilde{c}^{\prime 2} \leq \int_{-\infty}^{\infty} c \tilde{P}(c) dc - \tilde{c}^2$$

oder

$$\widetilde{c}^{\prime 2} \leq \tilde{c} - \tilde{c}^2$$

bzw.

$$\widetilde{c}^{\prime 2} \leq \tilde{c}(1 - \tilde{c}).$$

C Gleichungen für zweidimensionales Newtonverfahren

C.1 Verfahren mit geklippter Gaußfunktion

Zu lösen sind die Gleichungen

$$\tilde{c} = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \left(\int_0^1 c e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{c-\mu}{\sigma}\right)^2} dc + \int_1^\infty e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{c-\mu}{\sigma}\right)^2} dc \right) \quad (\text{C.1.1})$$

$$\tilde{c}'^2 = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \left(\int_0^1 c^2 e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{c-\mu}{\sigma}\right)^2} dc + \int_1^\infty e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{c-\mu}{\sigma}\right)^2} dc \right) - \tilde{c}^2. \quad (\text{C.1.2})$$

Durch Variablensubstitution

$$s = \frac{c - \mu}{\sigma}; \quad s_0 = \frac{0 - \mu}{\sigma}; \quad s_1 = \frac{1 - \mu}{\sigma}$$

schreibt sich Gleichung (C.1.1) damit als

$$\tilde{c} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(\sigma \int_{s_0}^{s_1} s e^{-\frac{s^2}{2}} ds + \mu \int_{s_0}^{s_1} e^{-\frac{s^2}{2}} ds \right) + \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{s_1}^\infty e^{-\frac{s^2}{2}} ds.$$

Aufgrund der Symmetrie der Gaußfunktion und der Normierungsbedingung gilt:

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{s_1}^\infty e^{-\frac{s^2}{2}} ds = \frac{1}{2} - \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{s_1} e^{-\frac{s^2}{2}} ds$$

und mit der Integrationsregel

$$\int s e^{-\frac{s^2}{2}} ds = -e^{-\frac{s^2}{2}}$$

ergibt sich

$$\begin{aligned} \tilde{c} = & \frac{\sigma}{\sqrt{2\pi}} \left[-e^{-\frac{s^2}{2}} ds \right]_{s_0}^{s_1} + \frac{\mu}{\sqrt{2\pi}} \left(\int_{s_0}^0 e^{-\frac{s^2}{2}} ds + \int_0^{s_1} e^{-\frac{s^2}{2}} ds \right) \\ & + \frac{1}{2} - \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{s_1} e^{-\frac{s^2}{2}} ds. \end{aligned}$$

Definiert man die Funktion $F(\eta)$ wie folgt:

$$F(\eta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^\eta e^{-\frac{s^2}{2}} ds = \frac{1}{\sqrt{2}} \operatorname{erf}(\eta),$$

erhält man

$$\tilde{c} = \frac{1}{2} + \frac{\sigma}{\sqrt{2\pi}} \left(e^{-\frac{s_0^2}{2}} - e^{-\frac{s_1^2}{2}} \right) + (\mu - 1)F(s_1) - \mu F(s_0)$$

oder Gleichung (4.2.29).

Die obige Variablensubstitution ergibt für Gleichung (C.1.2)

$$\begin{aligned} \widetilde{c''^2} = & \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(\sigma^2 \int_{s_0}^{s_1} s^2 e^{-\frac{s^2}{2}} ds + 2\sigma\mu \int_{s_0}^{s_1} s e^{-\frac{s^2}{2}} ds + \mu^2 \int_{s_0}^{s_1} e^{-\frac{s^2}{2}} ds \right) \\ & + \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{s_1}^{\infty} e^{-\frac{s^2}{2}} ds - \tilde{c}^2 \end{aligned}$$

Durch partielle Integration erhält man

$$\int s^2 e^{-\frac{s^2}{2}} ds = \int s e^{-\frac{s^2}{2}} ds - s e^{-\frac{s^2}{2}},$$

so daß mit den obigen Regeln folgt:

$$\begin{aligned} \widetilde{c''^2} = & \frac{\sigma^2}{\sqrt{2\pi}} \left[-s e^{-\frac{s^2}{2}} ds \right]_{s_0}^{s_1} + \frac{\sigma^2}{\sqrt{2\pi}} \int_{s_0}^{s_1} e^{-\frac{s^2}{2}} ds \\ & + \frac{2\sigma\mu}{\sqrt{2\pi}} \left[-e^{-\frac{s^2}{2}} ds \right]_{s_0}^{s_1} + \frac{\mu^2}{\sqrt{2\pi}} \int_{s_0}^{s_1} e^{-\frac{s^2}{2}} ds + \frac{1}{2} - \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{s_1} e^{-\frac{s^2}{2}} ds \\ & - \tilde{c}^2. \end{aligned}$$

Durch Zusammenfassen ergibt sich

$$\begin{aligned} \widetilde{c''^2} = & \frac{1}{2} + \frac{\sigma^2}{\sqrt{2\pi}} \left(s_0 e^{-\frac{s_0^2}{2}} - s_1 e^{-\frac{s_1^2}{2}} \right) + \frac{2\sigma\mu}{\sqrt{2\pi}} \left(e^{-\frac{s_0^2}{2}} - e^{-\frac{s_1^2}{2}} \right) \\ & + (\sigma^2 + \mu^2 - 1)F(s_1) - (\sigma^2 + \mu^2)F(s_0) - \tilde{c}^2 \end{aligned}$$

oder Gleichung (4.2.30).

C.2 Verfahren mit normierter Gaußfunktion

Anstelle von $\tilde{P}_0(c; x_i, t)$ wird die normierte Funktion $\tilde{P}^*(c; x_i, t)$ verwendet:

$$\tilde{P}^*(c; x_i, t) = \frac{\tilde{P}_0(c; x_i, t)}{\int_0^1 \tilde{P}_0(c; x_i, t) dc}.$$

Die verwendete PDF wird auf den Definitionsbereich von c begrenzt:

$$\tilde{P}(c; x_i, t) = \tilde{P}^*(c; x_i, t)[h(c) - h(c - 1)],$$

so daß folgt:

$$\tilde{c} = \int_{-\infty}^{\infty} c \tilde{P}(c; x_i, t) dc = \frac{\int_0^1 c e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{c-\mu}{\sigma}\right)^2} dc}{\int_0^1 e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{c-\mu}{\sigma}\right)^2} dc}.$$

Mit Hilfe dergleichen Variablensubstitution wie oben ergibt sich

$$\tilde{c} = \frac{\sigma \int_{s_0}^{s_1} s e^{-\frac{s^2}{2}} ds + \mu \int_{s_0}^{s_1} e^{-\frac{s^2}{2}} ds}{\int_{s_0}^{s_1} e^{-\frac{s^2}{2}} ds} = \sigma \frac{e^{-\frac{s_0^2}{2}} - e^{-\frac{s_1^2}{2}}}{\int_{s_0}^{s_1} e^{-\frac{s^2}{2}} ds} + \mu, \quad (\text{C.2.1})$$

bzw. mit $F(\eta)$ wie oben

$$\tilde{c} = \frac{\sigma}{\sqrt{2\pi}} \frac{e^{-\frac{s_0^2}{2}} - e^{-\frac{s_1^2}{2}}}{F(s_0) - F(s_1)} + \mu.$$

Der entsprechende Ausdruck für \tilde{c}''^2 kann völlig ohne $F(\eta)$ dargestellt werden. Aus Gleichung (C.2.1) folgt nämlich

$$\int_{s_0}^{s_1} e^{-\frac{s^2}{2}} ds = \sigma \frac{e^{-\frac{s_0^2}{2}} - e^{-\frac{s_1^2}{2}}}{\tilde{c} - \mu},$$

so daß gilt:

$$\tilde{c}''^2 = (\tilde{c} - \mu) \left(\sigma \frac{s_0 e^{-\frac{s_0^2}{2}} - s_1 e^{-\frac{s_1^2}{2}}}{e^{-\frac{s_0^2}{2}} - e^{-\frac{s_1^2}{2}}} + 2\mu \right) + (\sigma^2 + \mu^2) - \tilde{c}^2.$$