

Turbulente Flammenausbreitung in Wasserstoff-Luft-Gemischen

Christian Poruba

Lehrstuhl für Thermodynamik
Technische Universität München

Turbulente Flammenausbreitung in Wasserstoff-Luft-Gemischen

Christian Poruba

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.,
Dr.-Ing. habil. R. Schilling

Prüfer der Dissertation: 1. Univ.-Prof. Dr.-Ing.,
Dr.-Ing. E.h. F. Mayinger, emeritiert
2. Univ.-Prof. Dr.-Ing. H.P. Kau
3. Univ.-Prof. Dr.-Ing. D. Brüggemann,
Universität Bayreuth

Die Dissertation wurde am 18.09.2002
bei der Technischen Universität München eingereicht und durch
die Fakultät für Maschinenwesen am 13.03.2003 angenommen.

Vorwort

Die vorliegende Arbeit entstand am Lehrstuhl für Thermodynamik der Technischen Universität München. Meinem verehrtem Lehrer Herrn Prof. Dr.-Ing. Dr.-Ing. E.h. F. Mayinger danke ich für die Möglichkeit die Arbeit an seinem Lehrstuhl durchführen zu können, für die äußerst hilfreiche, fachliche und menschliche Unterstützung sowie für die Freiheit und das entgegengebrachte Vertrauen bei der Bearbeitung der mir gestellten wissenschaftlichen Aufgabe.

Herrn Prof. Dr.-Ing. H.-P. Kau und Herrn Prof. Dr.-Ing. D. Brüggemann danke ich für die freundliche Übernahme des Koreferats und Herrn Prof. Dr.-Ing. Dr.-Ing. habil. R. Schilling für den Vorsitz bei der mündlichen 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 J. Kopitz, S. Staudacher, M. Hubloher, R. Paggiaro und M. Koch.

Allen Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern des Lehrstuhls für Thermodynamik gilt mein Dank für die stets freundliche und hilfsbereite Unterstützung. Hervorheben möchte ich in diesem Zusammenhang die Herren Dr.-Ing. B. Durst und Dr.-Ing. A. Eder, die mir einerseits durch die vielen fachlichen Diskussionen und andererseits mit der Durchsicht meiner Arbeit sehr geholfen haben. Desweiteren möchte ich Herrn Prof. W. Polifke (Ph.D.) und Herrn Dr. C. Hirsch für die zahlreichen wichtigen Anregungen danken.

Ganz herzlich möchte ich mich auch bei meinen Eltern bedanken, die durch ihre fortwährende Unterstützung in allen Phasen meiner Ausbildung die Anfertigung dieser Arbeit erst ermöglichten.

Diese Arbeit entstand im Rahmen eines durch das Bayerische Staatsministerium für Wirtschaft, Verkehr und Technologie geförderten Forschungsvorhabens, für dessen Unterstützung ich mich ebenfalls bedanken möchte. Mein besonderer Dank gilt dabei auch dem Projektpartner des Forschungsvorhabens, Herrn Prof. Bénard (Ph.D.) von der Université du Québec à Trois Rivières für die sehr gute Zusammenarbeit.

München, im August 2003

Christian Poruba

Inhaltsverzeichnis

Formelzeichen	iv
1 Einleitung und Aufgabenstellung	1
2 Grundlagen turbulenter vorgemischter Verbrennung	5
2.1 Laminare Flammenausbreitung	5
2.1.1 Grundlagen der Verbrennung	5
2.1.2 Laminare Brenngeschwindigkeit	7
2.1.3 Flammenstruktur und charakteristisches Zeitmaß	10
2.1.4 Laminare Flammeninstabilitäten	11
2.2 Turbulente Strömungen	15
2.3 Wechselwirkung von Turbulenz und Flamme	20
2.3.1 Turbulenzproduktion durch die Flamme	20
2.3.2 Turbulente Brennregimes	22
2.3.3 Turbulente Brenngeschwindigkeit	29
2.4 Flammenausbreitungsmechanismen in Rohren	31
3 Mathematische Beschreibung und Modellansätze	34
3.1 Grundlagen der Berechnung	34
3.2 Modell für turbulente Strömungen	38
3.3 Überblick über Modellansätze für die Verbrennung	41
3.3.1 Volumenreaktionsmodelle	42
3.3.2 Flammenverfolgungsmodell	49

4	Modellierung der Verbrennung im Explosionsrohr	51
4.1	Zündprozess und laminarer Anlauf	52
4.2	PDF-Formulierung	53
4.2.1	Reduzierung auf eine Fortschrittsvariable	53
4.2.2	Die laminare Reaktionsrate	56
4.2.3	Rekonstruktion der PDF	61
4.2.4	Funktionale Form der PDF	64
4.2.5	Die PDF Reaktionsraten	74
4.2.6	Variable Enthalpiezustände vor der Flammenfront	76
4.3	BML-Formulierung	80
4.3.1	Bestimmung der Konstanten des BML-Modells .	81
4.3.2	Anpassung des turbulenten Zeitmaßes	84
5	Numerisches Verfahren	86
5.1	Grundlagen	86
5.2	Implementierung des Verbrennungsmodells	88
6	Ergebnisse	91
6.1	Simulationsbedingungen	93
6.1.1	Rechengitter	93
6.1.2	Randbedingungen und Rechenlaufsteuerung . . .	95
6.2	Flammenanlaufvorgänge	96
6.3	Verbrennungsprozess im Rohr mit Hindernissen	104
6.3.1	Blenden mit 30% Blockierrate	105
6.3.2	Blenden mit 60% Blockierrate	126
6.3.3	Kopplung des BML-Modells mit dem PDF-Modell	142
7	Zusammenfassung	151

A	Anhang	154
A.1	Favre gemittelttes Gleichungssystem	154
A.2	Transportgleichungen für \tilde{k} und $\tilde{\varepsilon}$	158
A.3	Berechnung der spezifischen Wärmekapazität	159

Formelzeichen

Zeichen Bezeichnung

Skalare Größen

a	Temperaturleitfähigkeit, Schallgeschwindigkeit
A	preexponentieller Faktor in der Arrheniusbeziehung, Querschnittsfläche
B	Molenbruch Brennstoff
\mathcal{B}	Symbol für Brennstoff
BR	Blockierrate
c	Fortschrittsvariable
c_m	Momentenverhältnis zur Berechnung von K_2
c_p	spezifische Wärmekapazität bei konstantem Druck
C_c	Konstante im Ansatz der Dissipationsrate
C_μ, C_1, C_2	Konstanten des k - ε -Turbulenzmodells
d	Maß für die Dicke, Innendurchmesser
D	Diffusionskoeffizient, Aussendurchmesser
E	Aktivierungsenergie
F	Kraft
g	normierte Varianz, Erdbeschleunigung
G	Skalar
h	spezifische Enthalpie
h_t	spezifische Totalenthalpie
H	Heaviside-Funktion
j^S	molekulare Stoffstromdichte
j^T	molekulare Wärmestromdichte
k_b	Geschwindigkeitskoeffizient der Rückreaktion
k_f	Geschwindigkeitskoeffizient der Hinreaktion
k	spezifische turbulente kin. Energie

Zeichen	Bezeichnung
K	Karlovitz-Flammenstreckungsfaktor, Vorfaktor EBU-Modell
K_2	Koeffizient zur Berechnung der BML-Reaktionsrate
l	Längenmaß
L	Wahrscheinlichkeitsfunktion für Löscherscheinungen der Flamme
\mathcal{L}	charakteristische Länge nach Markstein
M	Molare Masse
\mathcal{M}	Symbol für chemisches Element
M_s	Stoßmachzahl
n_k	Temperaturexponent in der Arrheniusgleichung
O	Molenbruch Oxidator
\mathcal{O}	Symbol für Oxidator
p	Druck
P	Wahrscheinlichkeitsdichte
\mathcal{P}	Symbol für Produkt
r_f	stöchiometrisches Verhältnis
R	Spezifische Gaskonstante, Radius, Anzahl der chemischen Reaktionen eines Reaktionssystems
R_a	allgemeine molare Gaskonstante
R_p	Residuum
s	Brenngeschwindigkeit
t	Zeit
T	Temperatur
T_w	Wandtemperatur
u_i	Geschwindigkeitskomponente
u	Geschwindigkeitskomponente in x-Richtung
v	Geschwindigkeitskomponente in y-Richtung, Geschwindigkeitsmaß

Zeichen Bezeichnung

v_F	Flammenausbreitungsgeschwindigkeit
v_s	Stoßfrontgeschwindigkeit
w	Geschwindigkeitskomponente in z-Richtung
x	Ortskoordinate
X_i	Molenbruch (Molanteil) der Spezies i
Y_i	Massenbruch der Spezies i

Griechische Symbole

α	Exponent bei der Bestimmung der laminaren Brenngeschwindigkeit
β	reduzierte Aktivierungsenergie, β -Funktion
γ	Exponent bei der Bestimmung der laminaren Brenngeschwindigkeit, erweiterte Funktion der laminaren Reaktionsrate
χ	Skalardissipation
δ	Dicke der Reaktionszone, Diracfunktion
δ_{ij}	Einheitstensor
Δ	Bindungsenthalpie
ϵ	Skalierungsfaktor
ε	Dissipationsrate der turbulenten kinetischen Energie
η	Kolmogorovsches Längenmaß
Γ	allgemeiner Diffusionskoeffizient, Γ -Funktion
κ	Isentropenexponent, Krümmung, Wellenzahl
λ	Wärmeleitkoeffizient
λ_T	Taylorsches Mikromaß
μ	dynamische Viskosität, Erwartungswert Gaussfunktion
ν	kinematische Viskosität, Reaktionsordnung

Zeichen Bezeichnung

ω	Reaktionsrate
ϕ	Beliebige skalare Größe
ψ	Massenbruch Brennstoff dimensionslos
ϱ	Dichte
σ	Varianz der Gaußfunktion
τ	Zeitmaß, Viskoser Spannungstensor
τ_c	charakteristische Stoßzeit zweier Moleküle
τ_r	charakteristische Reaktionszeit
τ_η	Kolmogorov-Zeitmaß
τ_{λ_T}	Taylor-Zeitmaß
Θ	Temperatur dimensionslos
ξ	Flammenfrontdicke dimensionslos

Indizes

∞	vollständig verbrannt
0	initialer Zustand, Zustand vor dem Stoß
1	Zustand vor der Flamme, Zustand nach dem Stoß
2	Zustand nach der Flamme
b	verbrannter Zustand
B	Brennstoff, Blende
c	Reaktionsfortschritt
D	molekulare Diffusion
eff	effektiv
ges	Gesamt-
int	integral
F	Brennstoff (Fuel)
H	Hindernisstrecke
i, j, k	Laufindex für Koordinatenrichtung, Laufindex für chemische Spezies

Zeichen Bezeichnung

K	Kammer
L	laminare Flammenfront
max	maximal
n	allgemeines Längenmaß
O	Oxidator
p	Vorwärmzone
P	Produkt
st	Stöchiometrisch
t	turbulent
T	Thermodiffusion
u	unverbrannter Zustand
var	Varianz
δ	Dicke der Reaktionszone
η	Kolmogorovsches Längenmaß

Hochgestellte Zeichen

'	Schwankungsgröße
"	Schwankung um einen Favre-Mittelwert
-	Zeitlicher Mittelwert
~	Favre Mittelwert

Kennzahlen

Da	Danköhler-Zahl
Le	Lewis-Zahl
Ka	Karlovitz-Zahl
Ma	Mach-Zahl
Pr	Prandtl-Zahl
Re	Reynolds-Zahl
Sc	Schmidt-Zahl
β	Zel'dovich-Zahl

1 Einleitung und Aufgabenstellung

Im Zuge der Entwicklung von Wasserstoff als alternativen Energieträger ist es unbedingt erforderlich Sicherheitskonzepte zu entwickeln, die eine gefahrlose Anwendung von Wasserstoff ermöglichen. Systeme, bei denen Wasserstoff als Betriebsmittel verwendet wird, oder eine Freisetzung von Wasserstoff störfallbedingt auftritt, können ein Sicherheitsrisiko für die Umgebung bedeuten, falls es zu einer Durchmischung des Wasserstoffs mit der Umgebungsluft kommt. Dabei können sich explosive Gemische bilden, die nach der Zündung, z.B. durch einen Funken, einen unkontrollierten Verbrennungsprozess bewirken, der mit der verbundenen Druck- und Temperaturentwicklung eine potentielle Gefahr für die Integrität der Systemgrenzen darstellt.

Bei der Verbrennung wird durch die Expansion des heißen Gases vor der Flamme eine Strömung induziert. Bauteile die sich in Ausbreitungsrichtung der Flamme befinden, können für die Expansionsströmung als Hindernisse wirken und somit Turbulenz vor der Flamme induzieren. In der Regel führt die Turbulenz zu einer deutlichen Erhöhung der chemischen Umsatzrate und somit zu einer Beschleunigung der propagierenden Flamme. Da die Druckentwicklung direkt an die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit gekoppelt ist, ist es nötig, die Wechselwirkungen zwischen einer sich ausbreitenden Flamme und dem zugrundeliegenden turbulenten Strömungsfeld zu kennen, um die Auslegung wasserstofftechnischer Anlagen unter Berücksichtigung sicherheitsrelevanter Aspekte durchführen zu können. Grundlage hierfür ist ein genaues Verständnis der zugrundeliegenden physikalischen sowie chemischen Zusammenhänge der turbulenten Wasserstoff-Luft-Verbrennung.

Eine Möglichkeit Wasserstoff-Luft-Verbrennungsphänomene zu untersuchen, ist die Durchführung von Experimenten in Explosionsrohren, s. z.B. [LKC84],[Bre87], [KBVD97]. In diesen und in anderen Arbeiten wird durch die Zündung eines brennfähigen Wasserstoff-Luft-Gemisches eine im geschlossenen Rohr propagierende Flamme generiert. Durch die Anordnung von Hindernissen wird gezielt Turbulenz vor der Flamme erzeugt. Je nach Mischungsverhältnis und thermodynamischem Zustand des Ausgangsgemisches, sowie der Blockierate, der Form und der Anzahl der Hindernis-

se tritt aufgrund der Flammen-Turbulenz-Wechselwirkung eine bestimmte Beschleunigung der Flamme auf. Die als Funktion der Zeit gemessene Flammenposition sowie die gemessenen Druckverläufe an unterschiedlichen Positionen im Rohr geben Aufschluss über das mögliche destruktive Potential des Verbrennungsprozesses und dienen zugleich als Datenbasis zur Validierung und Verifikation von numerischen Simulationsergebnissen.

Da Experimente für Explosionsvorgänge nur begrenzt für technisch relevante Anwendungen möglich sind, kommt der Simulation von Flammenausbreitungsvorgängen eine entscheidende Bedeutung zu. Aufgrund der heutzutage verfügbaren Rechenkapazität ist die direkte numerische Simulation (DNS) eines Verbrennungsprozesses und die damit verbundene Auflösung der kleinsten Zeit- und Längenmaße der turbulenten Strömung sowie der chemischen Reaktionen in realitätsnahen Geometrien nicht möglich. Deshalb ist es nötig, basierend auf den Navier-Stokes-Gleichungen geeignete Modelle zur Erfassung der physikalischen und chemischen Prozesse abzuleiten. Einerseits handelt es sich dabei um Turbulenzmodelle, die den Einfluss von turbulenten Schwankungsbewegungen auf den Transport von Strömungsgrößen beschreiben und andererseits um Verbrennungsmodelle, die die chemische Reaktionsrate unter Berücksichtigung der Wechselwirkung des turbulenten Strömungsfeldes mit der Flammenfront bestimmen. Während zur Turbulenzmodellierung - wie auch in dieser Arbeit - in erster Linie das k - ε -Turbulenzmodell angewandt wird, zeigt sich bei den Verbrennungsmodellen eine Vielfalt von unterschiedlichen Ansätzen:

- Modelle basierend auf der Beschreibung der Mischungsintensität, u.a. Eddy-Break-Up (EBU; Spalding [Spa76]), Eddy-Dissipation Combustion Model (EDM; Magnussen und Hjertager [MH76]), Bray-Moss-Libby (BML; Bray et al. [Bra80])
- Modelle basierend auf der Beschreibung der turbulenten Brenngeschwindigkeit, u.a. Turbulent Flame-Speed Closure (TFC; Zimont und Lipatnikov [ZL95], Karpov et al. [KLZ94])
- Modelle basierend auf einer Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion, engl. Probability-Density-Function (PDF; Dopazo und O'Brian [DE74], Pope [Pop79, Pop81, Pop85] und Bray [Bra79])
- Flammenverfolgungsmodelle, u.a. Smiljanovski et al. [SMK97].

Prinzipiell ist der Anwendungsbereich der vorgestellten Modelle jedoch begrenzt, d.h. mit keinem dieser Ansätze können alle möglichen, turbulenten Brennzustände optimal erfasst werden. Für die Simulation eines Verbrennungsvorgangs muss somit zunächst das zu erwartende Verbrennungsregime bestimmt werden und daraus resultierend ein passendes Verbrennungsmodell gewählt werden.

Der Schwerpunkt dieser Arbeit liegt auf der Modellierung und der Simulation turbulenter, vorgemischter, magerer Wasserstoff-Luft-Flammen. Validiert werden die Berechnungen mit Messungen in einem Explosionsrohr, die am Lehrstuhl A für Thermodynamik in den Arbeiten von Eder et al. [EEM98], Beauvais [Bea94] und Edlinger et al. [EPE⁺99] durchgeführt wurden. Betrachtet werden ausschließlich deflagrative Verbrennungsvorgänge. Ziel der Simulation ist es, den gesamten Ausbreitungsprozess der Flamme im Rohr zu beschreiben. Dies erfordert einerseits die Modellierung des Flammenanlaufs, sowie andererseits die Erfassung der starken Beschleunigung der Flamme aufgrund der durch die Blenden induzierten Turbulenz. Erschwert wird die Modellierung des Verbrennungsprozesses durch die Tatsache, dass während eines Verbrennungsvorgangs unterschiedliche Brennregimes auftreten können und somit eine eindeutige Klassifizierung des Verbrennungsregimes im Explosionsrohr nicht möglich ist. Deshalb werden in dieser Arbeit zwei Verbrennungsmodelle verwendet, die auf unterschiedlichen Modell-Ansätzen beruhen. Zum einen ist dies das PDF-Modell, das in erster Linie für chemisch limitierte Verbrennungsvorgänge eingesetzt wird und zum anderen das BML-Modell, das für mischungslimitierte Verbrennungsvorgänge geeignet ist.

Das in dieser Arbeit verwendete PDF-Modell basiert auf dem Ansatz von Bray [Bra80] und wurde in der Arbeit von Durst [Dur00] für die Modellierung von Wasserstoff-Luft-Flammen weiterentwickelt. Es basiert auf einer Reaktionsfortschrittsvariablen sowie einer angenommenen Form der Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung dieser Variablen. Als Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung wird standardmäßig eine gestutzte Gauss-Funktion verwendet. Die laminare Reaktionsrate, welche Grundlage der PDF-Reaktionsraten ist, wird aus der Berechnung einer laminar propagierenden, eindimensionalen Flamme basierend auf einem detaillierten Reaktionsmechanismus extrahiert. Um die Auswirkung von Zustandsänderungen vor der Flamme aufgrund von Druck-, bzw. Stoßwellen auf die

Reaktionsraten zu berücksichtigen, wird das PDF-Modell um eine adaptive Anpassung an variable Enthalpiezustände erweitert. Um den Einfluss der Form der Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung auf die Berechnung zu untersuchen, wird alternativ eine β -Funktion verwendet.

Die Koeffizienten des BML-Modells werden mit Hilfe der Berechnung einer laminar propagierenden Flamme basierend auf einem detaillierten Reaktionsmechanismus für die Wasserstoff-Luft-Verbrennung bestimmt. Um das Modell für den Bereich der moderaten Turbulenzintensitäten einsetzen zu können erfolgt eine Anpassung des turbulenten Zeitmaßes nach Borghi [Bor88] für den schwachturbulenten Bereich.

Durch die Kopplung des BML-Modells mit dem PDF-Modell soll eine erweiterte Beschreibung von turbulenten Verbrennungsprozessen ermöglicht werden. Die Kopplung wird basierend auf einer Kennzahl für turbulente Verbrennungsvorgänge, der Karlovitz-Zahl, durchgeführt.

2 Grundlagen turbulenter vorgemischter Verbrennung

Für die Entwicklung eines numerischen Simulationsmodells zur Beschreibung von turbulenten Vormischflammen ist ein umfassendes Verständnis der grundlegenden physikalischen und chemischen Vorgänge Voraussetzung. Prinzipiell ist der Verbrennungsprozess durch eine komplexe Interaktion zwischen der Flammenfront und dem existierenden Strömungsfeld gekennzeichnet. Die Strömung übt dabei je nach Turbulenzintensität und Brennstoffkonzentration des Gemisches einen unterschiedlichen Einfluss auf die Flamme aus. Zum detaillierten Verständnis der Vorgänge werden in den folgenden Kapiteln sowohl die Einzelphänomene *Ausbreitung einer Flammenfront* und *Turbulenz*, als auch mögliche Interaktionen erläutert. Dies geschieht speziell im Hinblick auf Verbrennungsprozesse von vorgemischten, mageren Wasserstoff-Luft-Gemischen. Bei der vorgemischten Verbrennung sind Brennstoff und Oxidator bereits vor der Zündung des Gemisches miteinander homogen vermischt. Im Gegensatz dazu laufen bei der nicht-vorgemischten Verbrennung (Diffusionsverbrennung) Mischung und Verbrennung gleichzeitig nebeneinander ab.

Aufbauend auf den Grundlagen der turbulenten vorgemischten Verbrennung werden in Kapitel 2.4 die Phänomene bei Flammenausbreitungsvorgängen in geschlossenen Rohren mit Hindernissen beschrieben.

2.1 Laminare Flammenausbreitung

2.1.1 Grundlagen der Verbrennung

Allgemein können Verbrennungsprozesse durch Reaktionsmechanismen beschrieben werden, die aus einer Vielzahl von Elementarreaktionen und Reaktionspartnern bestehen. Werden alle Zwischenprodukte und Spuren anderer Endprodukte als der Spezies \mathcal{P} außer acht gelassen, kann der Verbrennungsvorgang zunächst allgemein durch die Komplexreaktion



beschrieben werden. Hierbei steht \mathcal{B} für einen beliebigen Brennstoff und \mathcal{O} für den Oxidator. Die Reaktionsrate, d.h. die Geschwindigkeit, mit der ein an der Reaktion beteiligter Stoff gebildet oder verbraucht wird, ergibt sich aus dem Ansatz, u.a. [WMD99]

$$\omega = \frac{dB}{dt} = -k_f B^{\nu_B} O^{\nu_O} . \quad (2.1.2)$$

Dabei bezeichnen B und O die Molenbrüche des Brennstoffs, bzw. des Oxidators, die mit den jeweiligen Reaktionsordnungen ν_B und ν_O potenziert werden. Der Geschwindigkeitskoeffizient der Vorwärtsreaktion k_f kann aufbauend auf der charakteristischen Reaktionszeit

$$\tau_r(T) = \tau_c \exp\left(\frac{E}{R_a T}\right) \quad (2.1.3)$$

mit $k_f \propto 1/\tau_r$ durch das Arrheniusgesetz

$$k_f = A \exp\left(-\frac{E}{R_a T}\right), \quad (2.1.4)$$

bestimmt werden, wobei τ_c die charakteristische Stoßzeit zweier Moleküle, E die Aktivierungsenergie, A den preexponentiellen Faktor und R_a die allgemeine Gaskonstante bezeichnen. Nach Clavin [Cla94] gilt für ein Gemisch mit hoher Aktivierungsenergie, d.h. $E \gg R_a T$, für das Verhältnis der charakteristischen Reaktionszeiten zu den unterschiedlichen Temperaturen T_u (unverbranntes Gas) und T_b (vollständig verbranntes Gas): $\tau_r(T_b)/\tau_r(T_u) \approx 10^{-18}$. Da die Reaktionsrate umgekehrt proportional zu der charakteristischen Reaktionszeit ist, folgt, dass reaktive Gemische in einem quasi eingefrorenen Zustand vorliegen, wenn sie weit von ihrem verbrannten Gleichgewichtszustand entfernt sind. Chemische Reaktionen treten erst entscheidend in den Vordergrund, wenn sich die Temperatur des Gemisches der Endtemperatur T_b nähert. Dieses Verhalten, das durch die starke nicht-lineare Abhängigkeit des Geschwindigkeitskoeffizienten von der Temperatur bedingt wird, prägt entscheidend das Erscheinungsbild einer Verbrennung mit vorgemischten Reaktionspartnern. Hierbei propagiert ausgehend von einer Zündquelle eine Flammenfront durch das Gemisch. Getrieben

wird die Flammenfront dabei durch die Durchmischung von heißem, verbranntem Gas mit kaltem, unverbranntem Gemisch und der durch diese „Wärmezufuhr“ hervorgerufenen Reaktionsprozesse.

Zur detaillierten Untersuchung von propagierenden Flammen wird im folgenden zunächst ausschließlich das Phänomen der laminaren Flamme betrachtet. Trotz der Tatsache, dass laminare Flammen für technische Anwendungen nicht relevant sind, dient deren Betrachtungsweise einerseits dazu, grundlegende Phänomene darzustellen, andererseits zur Ableitung und Definition wichtiger charakteristischer Kenngrößen wie der Dicke, Brenngeschwindigkeit und dem Zeitmaß der laminaren Flammenfront.

2.1.2 Laminare Brenngeschwindigkeit

Die laminare Brenngeschwindigkeit s_L stellt eine Relativgeschwindigkeit der Flamme gegenüber der Geschwindigkeit u der zugrundeliegenden Strömung dar und kann sich somit merklich von der absoluten Ausbreitungsgeschwindigkeit v_F der Flammenfront unterscheiden. Allgemein gilt für die eindimensionale Betrachtungsweise:

$$v_F = u + s_L . \quad (2.1.5)$$

Die Bestimmung der laminaren Brenngeschwindigkeit ist Gegenstand zahlreicher experimenteller sowie theoretischer Untersuchungen. Eine der ersten theoretischen Arbeiten auf diesem Gebiet von Mallard und LeChatelier [ML83] ergab den proportionalen Zusammenhang

$$s_L \propto \sqrt{a\omega} . \quad (2.1.6)$$

Dieser Ansatz, der auf stark vereinfachenden Annahmen beruht, spiegelt das grundlegende Phänomen der Flammenausbreitung wieder: Die Brenngeschwindigkeit ergibt sich aus der direkten Kopplung zwischen der Reaktion und den diffusiven Mischungsprozessen. In Gleichung 2.1.6 werden die diffusiven Mischungsprozesse durch die Temperaturleitfähigkeit a repräsentiert. Es ist anzumerken, dass Mallard und LeChatelier ω nicht näher spezifizierten. Zel'dovich et al. [ZFK38] präzisierten später diesen Ansatz

durch $s_L \propto \sqrt{a\omega_b}$. Dabei entspricht ω_b der Reaktionsrate des Brennstoff-Luft-Gemisches bei adiabater Flammentemperatur.

Die exakte analytische Berechnung einer planar, laminar propagierenden Flamme, gestützt auf den Gleichungen der Massen-, der Energie- sowie der Spezieserhaltung ist aufgrund des komplexen Reaktionsmechanismus und der Vorgabe von Randbedingungen, die das Lösen des Gleichungssystems erschweren¹, selbst unter der Annahme der Gleichdruckverbrennung² nicht möglich, u.a. [Cla85]. Ein Ergebnis und somit Aussagen über die laminare Brenngeschwindigkeit sowie die Struktur der Flamme kann jedoch erhalten werden, wenn die beschriebene nicht-lineare Abhängigkeit des Arrheniussterms von der Temperatur genutzt wird, um das System in einer asymptotischen Betrachtungsweise zu vereinfachen, [ZFK38]. Grundlage dieser Betrachtungsweise ist die Unterteilung der Flammenfront in die beiden Teilbereiche Vorwärmzone und Reaktionszone (vgl. Abschnitt 2.1.3). Gilt für die reduzierte Aktivierungsenergie (auch Zel'dovich-Zahl genannt)

$$\beta = \frac{E}{R_a T_b^2} (T_b - T_u) \gg 1, \quad (2.1.7)$$

dominieren in den beiden Zonen unterschiedliche physikalische Gesetzmäßigkeiten: Die Vorwärmzone kann als reines Diffusions-Konvektionsproblem frei von ablaufenden Reaktionen betrachtet werden; in der Reaktionszone werden nur diffusive Prozesse und die Wärme- bzw. Stoffproduktion durch chemische Reaktionen betrachtet und somit ins Gleichgewicht gesetzt. Als zusätzliche Vereinfachung wird der Reaktionsmechanismus auf die Komplexreaktion in Gleichung 2.1.1 reduziert und für die Lewis-Zahl, die das Verhältnis der Diffusivitäten von Wärme und Stoff beschreibt,

$$\text{Le} = \frac{a}{D_i} \approx 1 \quad (i = B, O, P) \quad (2.1.8)$$

angenommen.

Göttgens et al. [GMP94] und Müller et al. [MBP97] entwickelten aufbauend auf der asymptotischen Betrachtungsweise eine Näherungsformel für

¹Problem der kalten Randbedingung.

²Der Druck wird über die laminare Flammendicke als konstant betrachtet.

die laminare Brenngeschwindigkeit, die die Art des Brennstoffes, das jeweilige Äquivalenzverhältnis Φ sowie den Druck und die Temperatur des unverbrannten Gemisches berücksichtigt. Eine optimale Anpassung der auftretenden Parameter ist jedoch stark vom untersuchten Brennstoff sowie von der Brennstoffkonzentration abhängig.

Wie Moser [Mos97] in ihrer Arbeit zeigt, stellt die Auswahl der Parameter speziell für sehr magere Wasserstoff-Luft-Gemische eine schwierige Aufgabe dar, weshalb in dieser Arbeit ein alternativer Ansatz angewandt wird. Dabei wird zur Bestimmung der laminaren Brenngeschwindigkeit auf Regressionspolynome zurückgegriffen, welche an gemessene Daten angepasst wurden. Aufbauend auf der Arbeit von Koroll et al. [KKM93] schlägt z.B. Ardey [Ard98] für Wasserstoff-Luft-Gemische unter atmosphärischem Druck bei $T = 298$ [K] den Ansatz

$$s_L = 64,494X_{H_2}^5 + 37,898X_{H_2}^4 - 186,87X_{H_2}^3 + 100,28X_{H_2}^2 - 5,7839X_{H_2} - 0,0245 \quad (2.1.9)$$

vor. Die Temperatur- bzw. Druckabhängigkeit der laminaren Brenngeschwindigkeit kann durch den allgemeinen Ansatz (u.a. Metghalchi und Keck [MK82])

$$s_L = s_{L,\text{ref}} \left(\frac{T_u}{T_{u,\text{ref}}} \right)^\gamma \left(\frac{p_0}{p_{0,\text{ref}}} \right)^\alpha \quad (2.1.10)$$

beschrieben werden. Der Exponent γ und somit die Temperaturabhängigkeit kann nach einer Arbeit von Liu et al. [LM83] folgendermaßen formuliert werden:

$$\gamma = A + B(0,42 - X_{H_2}) \quad (2.1.11)$$

mit $A = 1,571$ und $B = 0,3839$ für $X_{H_2} \leq 0,42$ bzw. $B = -0,2476$ für $X_{H_2} > 0,42$. Der Einfluss des Druckes auf die laminare Brenngeschwindigkeit wird im Rahmen dieser Arbeit vernachlässigt, weshalb $\alpha = 1$ angenommen wird.

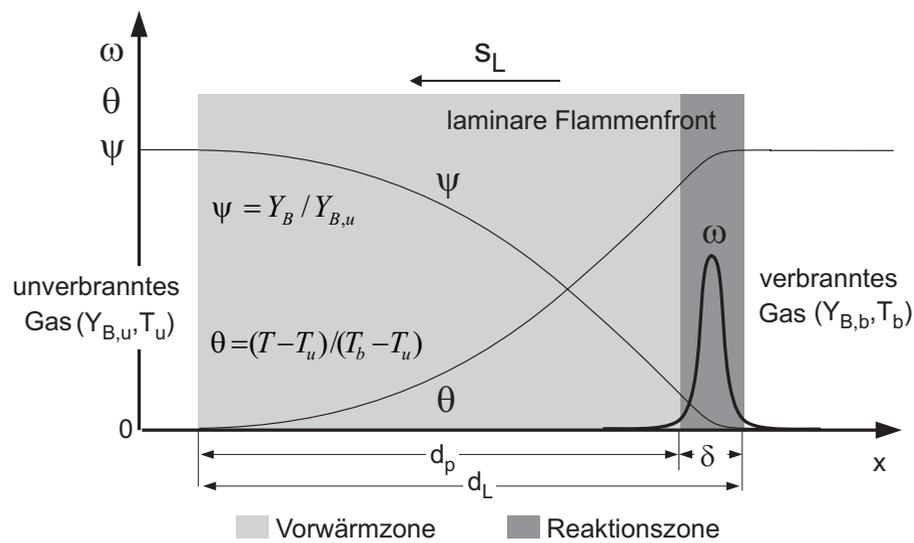


Abbildung 2.1: Temperatur und Konzentrationsverlauf in einer laminaren, planaren Flamme. Demzugrunde liegt eine Komplexreaktion und die Annahme, dass $Le = 1$ gilt.

2.1.3 Flammenstruktur und charakteristisches Zeitmaß

Wie bereits erwähnt kann neben der Brenngeschwindigkeit auch die in Abbildung 2.1 skizzierte Flammenstruktur durch die Asymptotentheorie analytisch bestimmt werden, [Cla85]. Die Abbildung zeigt, dass die laminare Flammenfront mit der Dicke d_L in die Vorwärmzone mit der Dicke d_p und die Reaktionszone mit der Dicke δ unterteilt werden kann. Die Dicke der Reaktionszone kann mit Hilfe der reduzierten Aktivierungsenergie durch $\delta = d_L/\beta$ abgeschätzt werden. Während Clavin [Cla94] als typischen Wert für die reduzierte Aktivierungsenergie $\beta \approx 8$ angibt, schätzt Peters [Pet92] diese größenordnungsmäßig mit $\beta \approx 10$ ab. Daraus folgt, dass chemische Reaktionen auf den sehr dünnen Bereich der laminaren Flammenfront mit $\delta \approx 0,1d_L$ beschränkt sind.

Nach Gaydon und Wolfhard [GW70] kann bei Kenntnis der laminaren Brenngeschwindigkeit die Dicke der Flammenfront durch eine Dimensionsanalyse mit

$$d_L = \frac{a}{s_L} \quad (2.1.12)$$

bestimmt werden. Der auf diese Weise bestimmte Wert wird im folgenden als charakteristisches Längenmaß der laminaren Flammenfront verwendet.

Aufbauend auf den Größen s_L und d_L kann durch

$$\tau_L = \frac{d_L}{s_L} \quad (2.1.13)$$

die Zeit berechnet werden, die die Flamme benötigt, um eine Strecke zurückzulegen, die ihrer eigenen Dicke entspricht. Diese wird als charakteristisches Zeitmaß der Flammenausbreitung zur Berechnung von Kennzahlen verwendet, u.a. [Pet97].

2.1.4 Laminare Flammeninstabilitäten

Durch die Interaktion von, an der Flammenfront ausgesandten, Druckwellen mit deren Reflektionen an geometrischen Hindernissen, bildet sich in realen Verbrennungsprozessen eine nicht planare, wellenförmige Flammenfront aus, [McI95]. Der lokale Versatz der Flamme kann durch hydrodynamische und diffusive Effekte, die zu einer lokal veränderten laminaren Brenngeschwindigkeiten führen, noch deutlich verstärkt werden. Diese Vorgänge werden als Flammeninstabilitäten bezeichnet.

Die Beschreibung der Ausbreitung der wellenförmigen laminaren Flammenfront beruht auf dem van Huygenschen Prinzip der Wellenausbreitung. Daraus lässt sich folgern, dass bei konstanter laminarer Brenngeschwindigkeit die konkaven Partien der Flammenfront Zacken ausbilden, wohingegen konvex in das Frischgas ausgebildete Krümmungen geglättet werden. Dies bewirkt, wie in Abbildung 2.2 dargestellt, eine Reduzierung der Ausgangsstörung mit dem Voranschreiten der Flammenfront.

Dieser Stabilisierung wirkt ein hydrodynamischer Effekt entgegen, der durch Darrieus [Dar38] und Landau [Lan44] erstmals beschrieben wurde. Ursache dieser Instabilität ist das divergente Strömungsfeld vor einer laminaren, gewellten Flammenfront. Wird, wie in Abbildung 2.3 dargestellt, ein Stromlinienbündel mit der Querschnittsfläche A_0 in der ungestörten Anströmung einer konvex in das Frischgas ausgebildeten Flammenfront betrachtet³, so entspricht die Anströmgeschwindigkeit der laminaren Brenngeschwindigkeit $u_0 = s_L$. Aufgrund des divergenten Strömungsfeldes er-

³Die sich ausbreitende laminare Flamme wird in dieser theoretischen Betrachtungsweise als ortsfest gesehen und somit vom Frischgas angeströmt.



Abbildung 2.2: Ausbreitung einer laminaren Flamme unter Anwendung des von Huygenschen Prinzips.

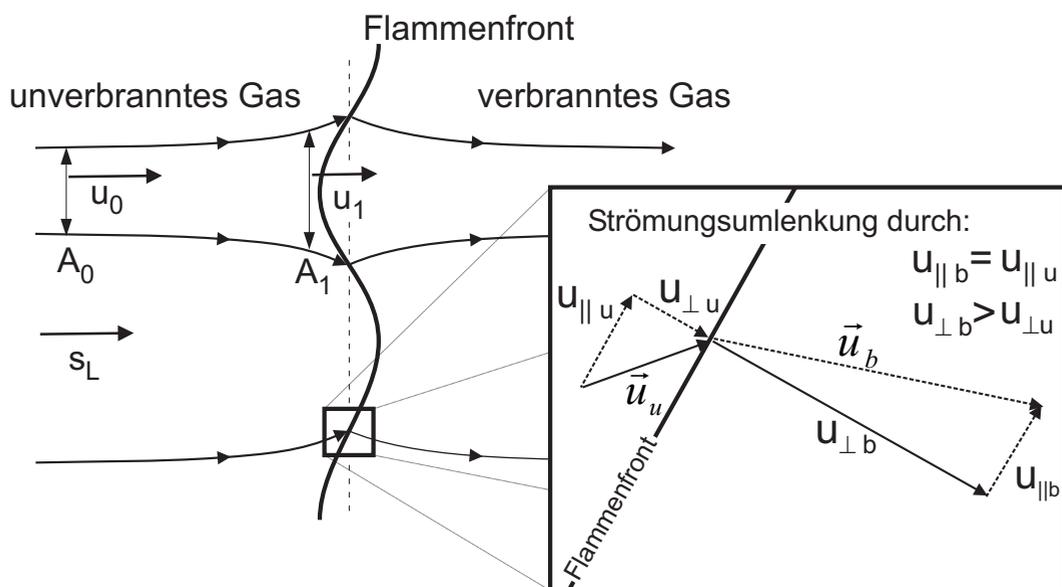


Abbildung 2.3: Hydrodynamische Instabilität nach Landau und Darrieus, basierend auf einer divergenten Anströmung der laminaren gewellten Flamme und anschließender Strömungsumlenkung.

weitert sich die Querschnittsfläche des Stromlinienbündels unmittelbar vor der Flamme auf $A_1 > A_0$. Aus der Kontinuitätsbedingung

$$u_1 A_1 = s_L A_0, \tag{2.1.14}$$

folgt, dass die lokale Anströmungsgeschwindigkeit u_1 kleiner als die Brenngeschwindigkeit s_l ist, weshalb die Flamme stromaufwärts wandert und dadurch die ursprüngliche Störung noch vergrößert. Der Effekt der divergenten Anströmung wird durch die Strömungsumlenkung der Stromlinien

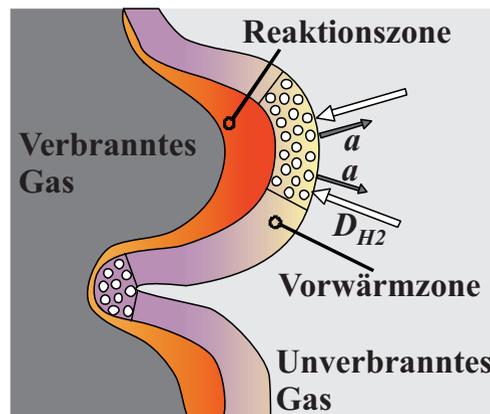


Abbildung 2.4: Diffusiver Transport von Wärme und Stoff aufgrund der Wellung der Flammenfront, [Ard98].

beim Durchtritt durch die Flammenfront hervorgerufen (s. Abbildung 2.3). Durch diese wird eine konvergente Strömung hinter der Flammenfront erzeugt, wodurch die konvexe Auslenkung weiter verstärkt wird.

Werden hydrodynamische Einflüsse auf die gewellte Flammenfront außer acht gelassen und nur diffusive Effekte betrachtet, zeigt sich, dass diese sich nicht nur dämpfend auf Störungen auswirken, sondern sie auch deutlich verstärken können, u.a. [Siv77]. Entscheidend für dieses Verhalten ist nach Clavin [Cla85] die Diffusion an gekrümmten Flammenoberflächen bei unterschiedlichen Diffusivitäten des defizitären Reaktionspartners und der Wärme. Überwiegt der diffusive Stofftransport den Wärmetransport, d.h. gilt

$$\text{Le} = \frac{a}{D} < 1, \quad (2.1.15)$$

kommt es an konvexen Ausbuchtungen der Reaktionszone zu einer relativen Konzentrationserhöhung des Brennstoffs, Abbildung 2.4. Da die laminare Brenngeschwindigkeit z.B. bei Wasserstoff-Flammen im unterstöchiometrischen Bereich mit der Brennstoffkonzentration anwächst, führt dieser Vorgang, der auch als Lewis-Zahl-Effekt bezeichnet wird, zu einer lokalen Beschleunigung der Flamme und somit zu einer Vergrößerung der Ausgangsstörung. Im Gegensatz dazu kann der Brennstoffmangel in den konkaven Bereichen der Reaktionszone zu einem lokalen Löschen der Flamme führen. Zur Darstellung dieser Effekte sind in Abbildung 2.5 die laminaren

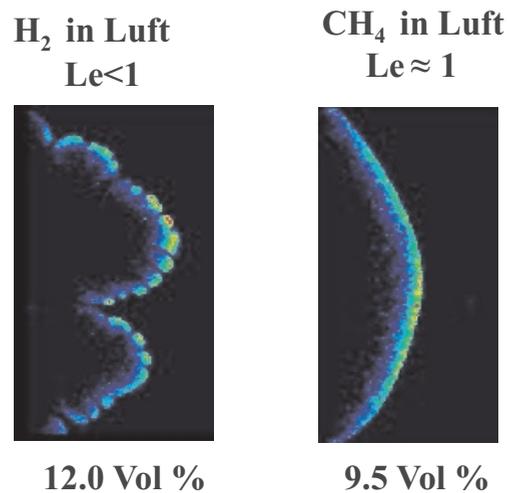


Abbildung 2.5: Laminare Flammenfronten für Gemische mit unterschiedlicher Lewis-Zahl, [Jor99]). Die Visualisierung der Flamme erfolgt durch die Messung von OH-Radikalen mit Hilfe der Laser-induzierten Prädissoziations-Fluoreszenz, [May01].

Flammenfronten für zwei Gemische mit unterschiedlicher Lewis-Zahl aufgezeigt. Während die Methan-Flamme eine glatte, homogene Flammenstruktur aufweist, zeigt sich bei der Wasserstoff-Flamme eine zelluläre Struktur, die ihren Ursprung in den diffusiven Instabilitäten hat.

Basierend auf Marksteins Arbeit von 1951 [Mar51] kann die Veränderung der lokalen Brenngeschwindigkeit s_L gegenüber der Brenngeschwindigkeit s_L^0 einer ungestreckten (planaren) laminaren Flamme durch den Einfluss der diffusiven Transportvorgänge analytisch bestimmt werden. Grundlage der Berechnung durch

$$s_L - s_L^0 = -s_L^0 \mathcal{L} \kappa \quad (2.1.16)$$

ist die Marksteinlänge \mathcal{L} und der jeweilige Krümmungsradius $\kappa = 1/R$ der Flammenfront. Dabei beschreibt R den gemittelten Radius der Krümmung und ist im Fall einer konvexen Ausbuchtung positiv definiert. Die Marksteinlänge gibt allgemein vor, wie stark die Flammenkrümmung bzw. Flammenstreckung die laminare Flammengeschwindigkeit beeinflussen. Die Bestimmung der Marksteinlänge nach Barenblatt et al. (Zit. in [Cla85]) durch

$$\frac{\mathcal{L}}{d_L} = \left(\frac{\beta(\text{Le} - 1)}{2} + 1 \right), \quad (2.1.17)$$

zeigt, dass sich z.B. für Wasserstoff-Luft-Gemische mit $\beta \approx 10$ und $Le \approx 0,4$ eine negative Marksteinlänge ergibt. Diese bewirkt nach Gleichung 2.1.16 eine Erhöhung der lokalen laminaren Brenngeschwindigkeit in einer konvex in das Frischgas ausgebildeten Flammenfront und unterstreicht dadurch die destabilisierende Wirkung der diffusiven Einflüsse.

Um zusätzlich die Auswirkungen einer divergenten Anströmung auf die Flammenfront, wie sie von Landau und Darrieus beschrieben wurden, in dem theoretischen Ansatz in Gleichung 2.1.16 zu berücksichtigen, superpositionierte Markstein diese in einer späteren Arbeit [Mar64] durch

$$s_L - s_L^0 = -s_L^0 \mathcal{L} \kappa + \mathcal{L} \vec{n} \nabla \vec{n}. \quad (2.1.18)$$

Zur Bestimmung der Marksteinlänge für diesen Fall leiteten Clavin und Williams [CW82] mit Hilfe der asymptotischen Betrachtungsweise die Beziehung

$$\frac{\mathcal{L}}{d_L} = \frac{1}{\gamma} \ln \frac{1}{1-\gamma} + \frac{\beta(Le-1)}{2} \left(\frac{1-\gamma}{\gamma} \right) \int_0^{\frac{1}{1-\gamma}} \frac{\ln(1+x)}{x} dx \quad (2.1.19)$$

ab, wobei $\gamma = (T_b - T_u)/T_b$ gilt. Dieser Ansatz ist abhängig vom Temperaturverhältnis zwischen verbranntem und unverbranntem Gas, der Lewis-Zahl und der Zel'dovich-Zahl und enthält somit alle Einflussfaktoren, die bei Flammeninstabilitäten durch die Flammenstreckung ausschlaggebend sind.

2.2 Turbulente Strömungen

Für technisch relevante Anwendungen besitzt der Flammentyp der laminaren Flamme keine Bedeutung, da dort Flammen ausschließlich in einem turbulenten Strömungsfeld brennen und mit diesem interagieren. Bevor näher auf die Wechselwirkungen eingegangen wird, soll zunächst die Turbulenz in den Strömungen allein beschrieben werden.

Turbulente Strömungsvorgänge sind gekennzeichnet durch dreidimensionale, zeitabhängige Wirbelbewegungen. Zur Beschreibung der Turbulenz werden die Wirbel als Turbulenzelemente interpretiert, denen je nach Wirbelgröße eine bestimmte räumliche Ausdehnung l zugeordnet wird. Die

Länge l entspricht dabei üblicherweise dem Durchmesser eines beliebigen Wirbels. Ein wichtiges Charakteristikum turbulenter Strömungen ist, dass die Turbulenzelemente ein kontinuierliches Spektrum in einem Längenskalenbereich aufspannen.

Nach Kolmogorovs Gleichgewichtstheorie [Kol41] wird der Hauptströmung durch Scherwirkungen, hervorgerufen durch mittlere Geschwindigkeitsgradienten, Energie entzogen. Diese wird in Wirbelbewegungen auf den größten Skalen umgewandelt und anschließend, wie in Abbildung 2.6 dargestellt, in einem Kaskadenprozess an die kleineren Wirbel weitergegeben. Entspricht die Wirbelgröße dem Kolmogorovschen Längenmaß η (Gleichung 2.2.1), wird die übertragene Energie in unkorrelierte, thermische Molekülbewegungen übergeführt. Entscheidend für den Energietransfer ist die Annahme, dass die von den größeren auf die kleineren Wirbel pro Zeiteinheit übertragene turbulente kinetische Energie ε in erster Näherung gleich bleibt. Unter Vernachlässigung von Transport- und Speichereffekten herrscht somit in einer stationären turbulenten Strömung ein energetisches Gleichgewicht, da die auf den größten Skalen produzierte turbulente kinetische Energie auf den kleinsten Längenskalen dissipiert wird.

Mittels einer Dimensionsanalyse kann, basierend auf der Annahme, dass die Bewegung der kleinsten Wirbelelemente nur von der Dissipationsrate ε und der kinematischen Viskosität ν beeinflusst ist, das kleinste Längenmaß η , Zeitmaß τ_η und Geschwindigkeitsmaß v_η durch

$$\eta \approx (\nu^3/\varepsilon)^{1/4}, \quad \tau_\eta \approx (\nu/\varepsilon)^{1/2}, \quad v_\eta \approx (\nu\varepsilon)^{1/4}. \quad (2.2.1)$$

abgeschätzt werden. In Richtung der großen Skalen wird die Längenskala durch das Makrolängenmaß l_{\max} begrenzt, das im Bereich der die Strömung

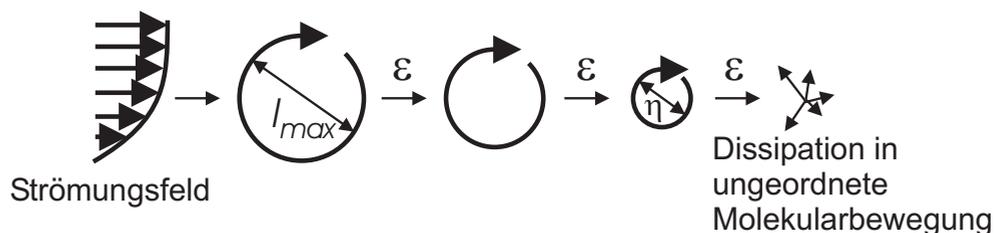


Abbildung 2.6: Energiekaskade basierend auf Kolmogorovs universeller Gleichgewichtstheorie.

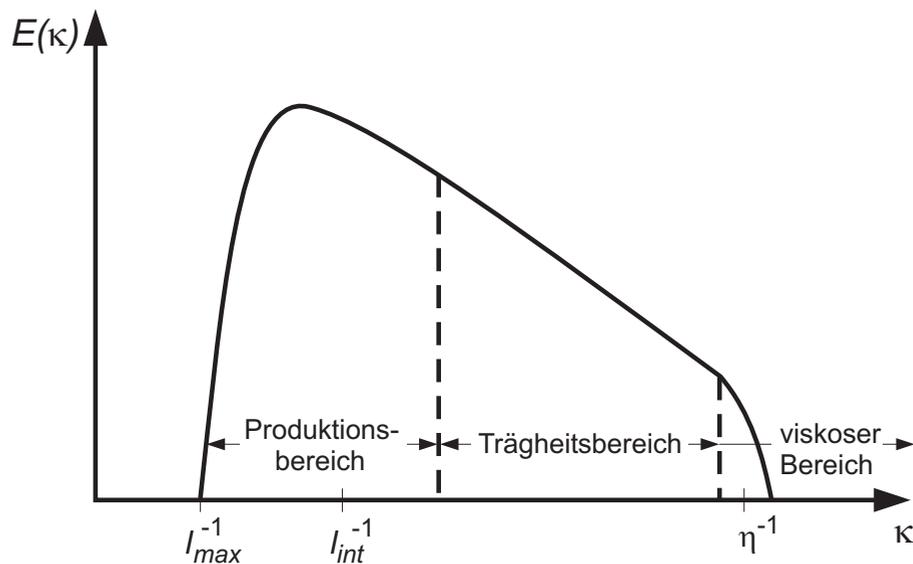


Abbildung 2.7: Turbulentes Energiespektrum dargestellt in einer doppeltlogarithmischen Skala.

begrenzenden, maximalen Geometrieabmessung, z.B. Kanaldurchmesser, liegt.

Für eine präzise Untersuchung des Kaskadenprozesses bietet sich eine Spektralanalyse an, u.a. [Wil93]. Dabei wird als Größe $E(\kappa)d\kappa$ eingeführt, die die turbulente kinetische Energie k im Bereich zwischen den Wellenzahlen κ und $\kappa + d\kappa$ beschreibt. Die Wellenzahl entspricht dem reziproken Wert der Abmessung des jeweiligen Wirbels $\kappa = l^{-1}$. Für die in der Gesamtheit aller Wirbelbewegungen gespeicherte Energie k gilt somit

$$k = \int_0^{\infty} E(\kappa)d\kappa . \quad (2.2.2)$$

Wie in Abbildung 2.7 aus der Verteilung der Energiespektrumsfunktion $E(\kappa)$ ersichtlich ist, beinhalten die Wirbel kleinerer Wellenzahlen den überwiegenden Anteil der turbulenten kinetischen Energie. Diese kennzeichnen den Produktionsbereich, in dem Wirbel der entsprechenden Größenordnung direkt aus der Hauptströmung gebildet werden und Dissipationseffekte vernachlässigt werden können.

Im Gegensatz zum Produktionsbereich entstehen im sogenannten Trägheitsbereich (englisch: *inertial subrange*) keine neuen Wirbel direkt aus dem Spannungspotenzial der gemittelten Hauptströmung. Die Ener-

gie, die in der Rotationsbewegung steckt, wird, wie in der Gleichgewichtstheorie beschrieben, durch die Impulserhaltung von größere auf kleinere Wirbel übertragen. Auch in diesem Bereich spielen Dissipationseffekte nur eine untergeordnete Rolle.

Der Dissipationsbereich ist durch einen sehr schnellen Zerfall der Wirbel gekennzeichnet, die in der Größenordnung von η sind. Die Dissipation ε von Turbulenzenergie erfolgt durch molekulare Reibungskräfte, weshalb dieser Bereich auch oftmals als viskoser Bereich bezeichnet wird.

Um Turbulenz einer analytischen Methode zugänglich zu machen wird eine statistische Betrachtungsweise angewandt. Dabei wird der Momentanwert einer Strömungsgröße in einen zeitlichen Mittelwert \bar{V} und den zugehörigen Schwankungswert V' nach

$$V = \bar{V} + V' \quad (2.2.3)$$

zerlegt. Für ein betrachtetes Zeitintervall gilt die Bedingung $\overline{V'} = 0$. Zur Charakterisierung der Geschwindigkeitsfluktuationen wird als Maß die Standardabweichung (englisch: *root mean square fluctuation*, kurz *rms*) verwendet:

$$v_{rms} = v' := \sqrt{\overline{V'^2}}. \quad (2.2.4)$$

Analog können die Geschwindigkeitsschwankungen für die weiteren Raumrichtungen u' und w' bestimmt werden. Da die in den Geschwindigkeitsfluktuationen gespeicherte kinetische Energie der turbulenten kinetischen Energie k entspricht, gilt

$$k = \frac{1}{2}(u'^2 + v'^2 + w'^2), \quad (2.2.5)$$

woraus unter der Annahme von isotroper Turbulenz ($u'^2 = v'^2 = w'^2$)

$$v' = \left(\frac{2}{3}k\right)^{\frac{1}{2}} \quad (2.2.6)$$

gefolgert wird. v' entspricht dem charakteristischen Geschwindigkeitsmaß der turbulenten Strömung, auf dessen Basis der Turbulenzgrad einer Strömung durch

$$\text{Tu} = \frac{v'}{\bar{V}} \quad (2.2.7)$$

definiert ist.

Anschaulich kann v' als mittlere Tangentialgeschwindigkeit der großen energietragenden Wirbel interpretiert werden. Diese werden durch das sogenannte turbulente integrale Längenmaß l_{int} repräsentiert, welches sowohl für die Turbulenzmodellierung (s. Kapitel 3.2) als auch der Definition von Kennzahlen in turbulenten Strömungen verwendet wird. Für sehr große turbulente Reynoldszahlen, d.h.

$$Re_t = \frac{l_{\text{int}} v'}{\nu} \gg 1 \quad (2.2.8)$$

und unter der Voraussetzung der lokalen Isotropie (d.h., dass die kleinen Turbulenzelemente, die die Schwankungsenergie dissipieren, isotrop sind) gilt nach Rotta [Rot72] der Zusammenhang

$$\varepsilon = C_D \frac{k^{3/2}}{l_{\text{int}}} . \quad (2.2.9)$$

Der Wert der Proportionalitätskonstante kann durch

$$C_D = C_\mu^{0.75} \quad (2.2.10)$$

erhalten werden, u.a. [Dö90]. Die Konstante C_μ wird, wie in Kapitel 3.2 gezeigt, benötigt, um die turbulente Viskosität zu definieren. Ihr Wert entspricht dabei standardmäßig $C_\mu = 0.09$. Es ist anzumerken, dass der in Gleichung 2.2.9 dargestellte Zusammenhang auch häufig vereinfacht durch

$$\varepsilon \approx \frac{k^{3/2}}{l_{\text{int}}} \quad (2.2.11)$$

abgeschätzt wird, u.a. [LS74],[Pet97]).

Auf der Basis des integralen Längenmaßes kann mit dem charakteristischen turbulenten Geschwindigkeitsmaß ein zugehöriges charakteristisches turbulentes Zeitmaß durch

$$\tau_{\text{int}} = \frac{l_{\text{int}}}{v'} \approx \frac{k}{\varepsilon} \quad (2.2.12)$$

definiert werden. Dieses Zeitmaß spielt bei der Modellierung von Transportgleichungen auf der Basis des k - ε -Turbulenzmodells zur Berechnung turbulenter Strömungen eine wichtige Rolle, [PF96]. Als Beispiel seien hier der Skalar dissipationsansatz in den Varianztransportgleichungen sowie der daraus abgeleitete Ansatz zur Beschreibung der chemischen Reaktionsrate unter dem Einfluss einer turbulenten Strömung genannt (s. Kapitel 3.3.1).

Ausgehend von der Kolmogorovschen Gleichgewichtstheorie können turbulente Zeit- und Geschwindigkeitsmaße auch auf andere Wirbelgrößen als Wirbel mit der Ausdehnung des integralen Längensmaßes übertragen werden. Für eine beliebige Wirbelgröße l aus dem Längenskalenbereich folgt mit Gleichung 2.2.11

$$\varepsilon \approx \frac{v_l^2}{\tau_l} = \frac{v_l^3}{l} = \frac{l_l^2}{\tau_l^3}. \quad (2.2.13)$$

Die Größen τ_l und v_l entsprechen den auf die Wirbelklasse l_l bezogenen turbulenten Zeit- und Geschwindigkeitsmaßen. Wichtig werden diese, wenn die Interaktion des turbulenten Strömungsfeldes mit der Flammenfront in Abhängigkeit bestimmter Wirbelgrößen untersucht werden soll. Bei der Ableitung von dimensionslosen Kennzahlen zur Beschreibung der Flammen-Turbulenz-Wechselwirkung wird davon ausgegangen, dass die Beziehungen in Gleichung 2.2.13 von den integralen Skalen bis zu den Dissipationsskalen Gültigkeit besitzen.

2.3 Wechselwirkung von Turbulenz und Flamme

2.3.1 Turbulenzproduktion durch die Flamme

Durch die komplexe Interaktion zwischen Strömung und Flammenfront wird in reaktiven Strömungen sowohl die messtechnische Erfassung, als auch die mathematische Beschreibung von Turbulenz im Gegensatz zu nicht-reaktiven Strömungen deutlich erschwert. Nach Tsuruda et al. [THH86] gibt es folgende Ursachen von Turbulenz bzw. Mechanismen, die ein Wachstum von Turbulenz direkt oder indirekt durch die Flamme hervorrufen:

- Turbulenz im unverbrannten Gemisch vor der Flamme;
- Turbulenz, die in den Scherströmungsgebieten zwischen den Berandungen und der von der Flamme induzierten Strömung verursacht wird;
- ungleichförmige Konzentrations- (Temperatur-, Druck-, etc.) verteilung im unverbrannten Gemisch;
- Wechselwirkung der Flamme mit schwachen Druckwellen oder mit Beschleunigung (oder Verlangsamung) der Gasströmung normal zur Front;
- Wechselwirkung der Flamme mit durch die Frontverwinklung induzierten Gasströmungen;
- Unterschiedliche Diffusionskoeffizienten von Brennstoff und Oxidator (Einfluss der Lewis-Zahl);

Werden die oben aufgeführten Mechanismen mit den in Kapitel 2.1.4 beschriebenen Ursachen laminarer Flammeninstabilitäten verglichen, so zeigt sich, dass Effekte, die bereits bei der Ausbreitung einer laminaren Flammenfront eine destabilisierende Wirkung gezeigt haben, ebenfalls zur Turbulenzproduktion beitragen.

Als weiterer Turbulenzpromotor ist speziell bei mageren Wasserstoff-Luft-Gemischen der Gravitationseinfluss zu berücksichtigen. Wie Patnaik et al. [PKO91, PK93], durch eine zweidimensionale Simulation am Beispiel einer sich vertikal ausbreitenden 11Vol.% H_2 -Flamme zeigen, führen Auftriebs-effekte zu einem Aufbrechen der Flammenfront und somit zu einer Induzierung von Scherströmungen.

Um eine quantitative Aussage über die Produktion von Turbulenz direkt durch die Flammenfront zu erhalten, haben Videto und Santavicca [VS90] Laser-Doppler-Anemometrie Messungen an einer sich frei ausbreitenden Flamme durchgeführt. Die Messung der Änderung der Turbulenzenergie über die Flammenfront ergab, dass sich die Normalkomponente der Turbulenzintensität um das fünf- bis sechsfache, die Parallelkomponente um das zwei- bis dreifache erhöht. Auch das integrale Längenmaß wird durch

die Flammenfront unterschiedlich beeinflusst und wächst in Normalenrichtung zur Flamme auf den zweifachen Wert, parallel zur Flammenfront jedoch nur auf den eineinhalbfachen Wert, verglichen mit der Strömung im unverbrannten Gas vor der Flamme, an. Es wird deutlich, dass die getroffene Annahme von isotroper Turbulenz bei der Modellierung turbulenter reaktiver Strömungen eine sehr starke Vereinfachung darstellt.

2.3.2 Turbulente Brennregimes

Im Gegensatz zum turbulenten Strömungsfeld besitzt die laminare Reaktionsfront eindeutig definierte Längen-, Zeit- und Geschwindigkeitsmaße. Diese werden genutzt, um sie mit den charakteristischen turbulenten Strömungsmaßen zu vergleichen und somit die Flammen-Turbulenz Wechselwirkung klassifizieren zu können. Als wichtige Kenngrößen werden hierfür die Damköhler-Zahl Da und die Karlovitz-Zahl Ka eingeführt. Die Damköhler-Zahl beschreibt das Verhältnis des integralen Zeitmaßes τ_{int} der turbulenten Strömung zum Zeitmaß der laminaren Flamme τ_L :

$$Da = \frac{\tau_{\text{int}}}{\tau_L} . \quad (2.3.1)$$

Die Karlovitz-Zahl entspricht dem Verhältnis des Zeitmaßes der laminaren Flamme zum Kolmogorov-Zeitmaß τ_η :

$$Ka = \frac{\tau_L}{\tau_\eta} . \quad (2.3.2)$$

Unter Berücksichtigung der Gleichungen 2.2.13, 2.1.12 und 2.2.1 können die Kennzahlen in den formalen Zusammenhang

$$\frac{v'}{s_L} = \frac{1}{Da} \frac{l_{\text{int}}}{d_L} \quad (2.3.3)$$

und

$$\frac{v'}{s_L} = Ka^{\frac{2}{3}} \left(\frac{l_{\text{int}}}{d_L} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (2.3.4)$$

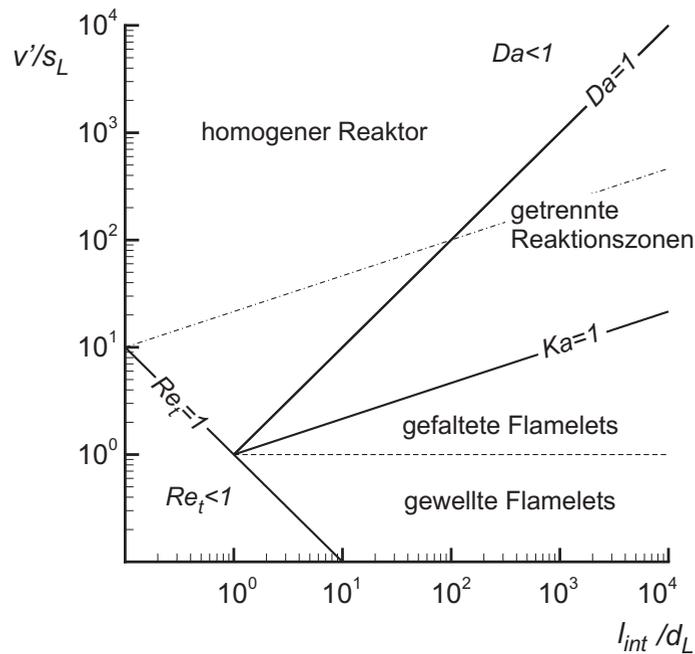


Abbildung 2.8: Diagramm zur Klassifizierung von Verbrennungszuständen einer vorge-mischten turbulenten Verbrennung nach Borghi [Bor88].

überführt werden. Werden die Verläufe für $Da = 1$ und $Ka = 1$ in einem Diagramm mit der Abszisse l_{int}/d_L und der Ordinate v'/s_L aufgetragen, so stellen diese Trennlinien zur Unterscheidung existierender Brennregimes dar. Diese Art der Darstellung (s. Abbildung 2.8) geht auf Borghi [Bor88] zurück und wird deshalb in der Literatur als Borghi-Diagramm bezeichnet.

Im Gegensatz zu Borghi nimmt Peters eine andere Unterteilung der Verbrennungszustände vor und modifiziert das Diagramm wie in Abbildung 2.9 dargestellt. Nach den heutigen Erkenntnissen ist das Diagramm nach Peters die präzisere Wiedergabe der auftretenden Phänomene und dient deshalb als Basis zur Klassifizierung der Verbrennungsvorgänge. Das Diagramm nach Borghi soll jedoch im Rahmen dieser Arbeit ebenfalls weiter berücksichtigt werden, da in der Literatur damit häufig Brennregimes identifiziert werden und eine Übertragung in das Peters Diagramm nicht immer eindeutig möglich ist. Im folgenden wird das Diagramm nach Peters beschrieben und als modifiziertes Borghi-Diagramm bezeichnet.

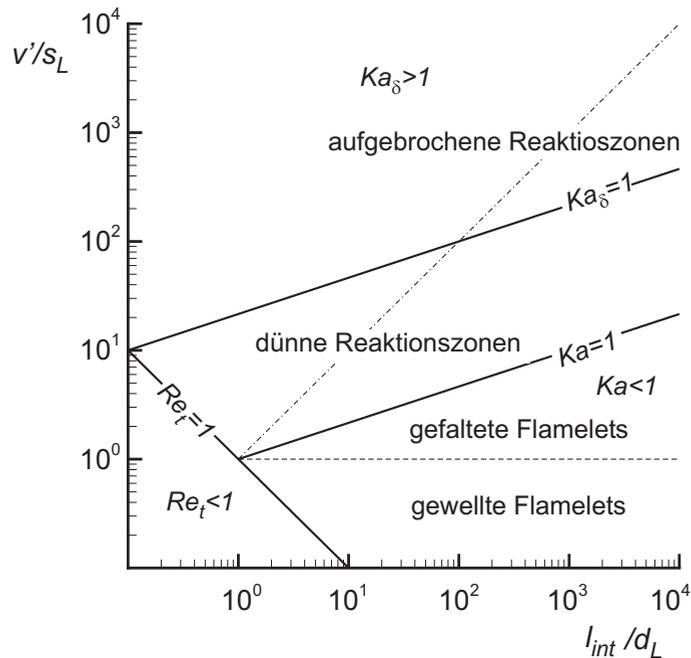


Abbildung 2.9: Diagramm zur Klassifizierung von Verbrennungszuständen einer vorge-mischten turbulenten Verbrennung nach Peters [Pet97].

Laminare Flamme

Die Identifikation des Bereiches der laminar propagierende Flamme erfolgt durch die turbulente Reynolds-Zahl

$$Re_t = \frac{v' l_{int}}{\nu}, \quad (2.3.5)$$

die unter Verwendung von Gleichung 2.1.12 auch durch

$$\frac{v'}{s_L} = Re_t \frac{l_{int}}{d_L} \quad (2.3.6)$$

ausgedrückt werden kann. Für Werte $Re_t < 1$ breitet sich die Flammenfront in einem laminaren Strömungsfeld aus. Laminare Flammeninstabilitäten bestimmen das Erscheinungsbild der propagierenden Flamme (s. Kapitel 2.1.4).

Flamelet-Bereich

Der Bereich $Ka < 1$ wird als Flamelet-Bereich bezeichnet. Ein Vergleich des chemischen Zeitmaßes mit dem Kolmogorovschen Zeitmaß der Strömung

zeigt, dass die chemische Reaktion schneller abläuft als die Bewegung der Kleinstwirbel $\tau_L < \tau_\eta$. Unter Verwendung der Gleichungen 2.1.13 und 2.2.13 kann die Karlovitz-Zahl auch als Funktion der charakteristischen Längenmaße dargestellt werden:

$$\text{Ka} = \frac{\tau_L}{\tau_\eta} = \frac{d_L^2}{\eta^2}. \quad (2.3.7)$$

Für $\text{Ka} < 1$ ergibt sich somit zudem, dass die kleinste Wirbelgröße der Strömung größer ist als die laminare Flammenfrontdicke und Wirbel dadurch nicht in die Flammenfront eindringen und diese zerstören können. Daraus folgt, dass die Verbrennung in einer quasi-laminaren Flammenfront stattfindet. Im Gegensatz zur laminaren Flamme erhöht sich jedoch die Gesamtreaktionsrate deutlich, da die durch die Turbulenz hervorgerufene Verwirbelung zu einer Vergrößerung der Flammenoberfläche führt. Laufen die Reaktionen in diesem Bereich im Vergleich zur Durchmischung sehr schnell ab, d.h. gilt $\tau_L \ll \tau_\eta$, wird die erzielte Umsatzrate hauptsächlich durch die turbulente Vermischung bestimmt. In diesem Fall wird von einem rein mischungslimitierten Verbrennungsvorgang, oder von einer Verbrennung im Bereich der „schnellen Chemie“ gesprochen. Bei Vormischflammen bezieht sich die Mischungslimitation auf die Durchmischung von heißen Produkten mit kalten Edukten.

Das Flamelet Regime kann in zwei Bereiche unterteilt werden: den gewellten Flamelet- und den gefalteten Flamelet-Bereich (englisch: *wrinkled flamelets* bzw. *corrugated flamelets*). Das Unterscheidungskriterium ist der Einfluss, den die laminare Flammeneigendynamik, bzw. die turbulenten Mischungsvorgänge auf die Ausbreitung der Reaktionsfront besitzen. In Bild 1 in Abbildung 2.10 ist eine Wasserstoff-Luft-Flamme im gewellten Flamelet Bereich dargestellt. Der Vergleich mit der laminaren Flammenfront, welche in Abbildung 2.5 (Seite 14) dargestellt ist, lässt aufgrund der Ähnlichkeit den Schluss zu, dass in diesem Regime die Effekte der laminaren Flammeninstabilitäten überwiegen. Im Gegensatz dazu wird, wie in Abbildung 2.10 Bild 2 gezeigt, im gefalteten Flamelet Bereich die Flammenausbreitung hauptsächlich durch die turbulente Verwirbelung geprägt. Dabei ist die Flammenkontur willkürlich durch die turbulente Strömung verformt und es kommt zu einer Abtrennung einzelner brennender Berei-

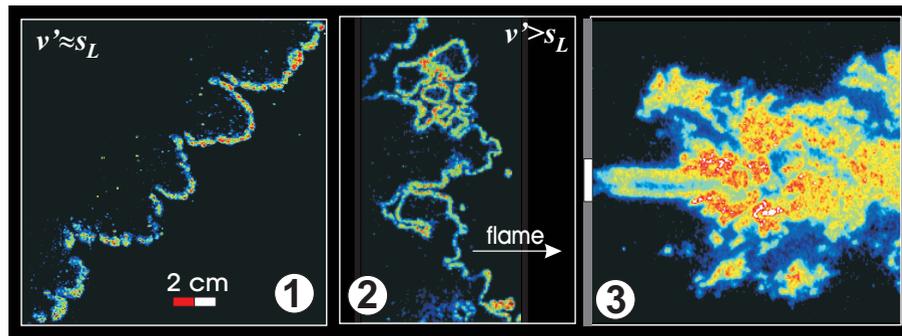


Abbildung 2.10: Darstellung unterschiedlicher Brennregimes. Visualisierung der Reaktionszonen einer Wasserstoff-Luft-Flamme mittels Laser-induzierter Prädissoziations-Fluoreszenz am OH Radikal nach Ardey [Ard98] bzw. Jordan [Jor99]. Bild 1 zeigt eine Flamme im gewellten Flamelet-Bereich, Bild 2 eine Flamme im gefalteten Flamelet-Bereich und Bild 3 eine Verbrennung im Regime des homogenen Reaktors

che (Taschenbildung). Die deutlich vergrößerte Oberfläche führt zu einer starken Erhöhung der Flammenausbreitungsgeschwindigkeit.

Bereich der dünnen Reaktionszonen

Die ursprüngliche Vorstellung von Borghi, dass Verbrennungsprozesse mit $Ka > 1$ und $Da > 1$ zu einer generellen Aufdickung der gesamten laminaren Flammenstruktur führen, wurde von Peters [Pet97] verworfen. Er unterteilte den Bereich $Ka > 1$ in zwei neue Teilbereiche. Dies sind der Bereich der dünnen und der Bereich der aufgebrochenen Reaktionszonen (englisch: *thin reaction zones*, *broken reaction zones*), die durch die Trennlinie für $Ka_\delta = 1$ im Diagramm unterschieden werden können. Die Größe Ka_δ entspricht der Karlovitz-Zahl bezogen auf die Dicke der Reaktionszone δ . Wird diese, wie für laminare vorgemischte Flammen üblich, mit einem zehntel der Dicke der Vorwärmzone abgeschätzt (s. Kapitel 2.1), so gilt

$$Ka_\delta = \frac{\tau_\delta}{\tau_\eta} = \frac{\delta^2}{\eta^2} = \frac{1}{100} Ka . \quad (2.3.8)$$

Das charakteristische Zeitmaß der Reaktionszone τ_δ wird dabei analog zu Gleichung 2.1.13 durch

$$\tau_\delta = \frac{\delta}{s_L} \quad (2.3.9)$$

bestimmt.

Der Bereich der dünnen Reaktionszonen ist durch $Ka > 1$ und $Ka_\delta < 1$ definiert. Der Vergleich der Längenmaße zeigt, dass in diesem Bereich die Kleinstwirbel einerseits kleiner als die Gesamtdicke der laminaren Flammenfront d_L , andererseits jedoch größer als die Reaktionszone δ sind. Dadurch bleibt die Struktur der Reaktionszone unbeeinflusst vom Strömungsfeld, wohingegen die Vorwärmzone durch turbulente Mischungsvorgänge stark vergrößert wird. Die resultierende Flammenausbreitung wird somit sowohl durch die Intensität der turbulenten Durchmischung, wie auch durch die effektive Reaktionsoberfläche bestimmt.

Messungen mittels einem OH-LIPF Verfahren ergeben eine ähnliche Verteilung wie in Bild 2 in Abbildung 2.10. Dies kann dadurch begründet werden, dass eine Bildung von OH erst in der Reaktionszone stattfindet (s. [Ard98]) und sich somit Veränderungen der Vorwärmzone optisch nicht deutlich auswirken.

Bereich der aufgebrochenen Reaktionszonen

Mit zunehmender Turbulenz treten immer kleinere Wirbel auf. Ist die Turbulenzintensität in der Strömung so stark, dass sich Kleinstwirbel ausbilden, die kleiner als die Reaktionszone sind, d.h. gilt $\eta < \delta$ und somit $Ka_\delta > 1$, so findet eine Veränderung der Reaktionszone durch turbulente Transportvorgänge statt. Der Vergleich der Zeitmaße $\tau_\eta < \tau_\delta$ zeigt, dass die konvektiven, turbulenten Wirbelbewegungen potentielle Reaktionspartner in der Reaktionszone vor Abschluss der chemischen Reaktion trennen können. Durch die verstärkte Vermischung von unverbranntem, kaltem Gas mit heißem, in Reaktion befindlichem Gas kann die Reaktion lokal unterbrochen werden, da die Zündtemperatur unterschritten wird. Die bereits gebildeten Reaktionszwischenprodukte werden abtransportiert und können an einem anderen Ort zu einem erneuten Zünden führen. Die Folge dieser Vorgänge ist, dass keine klar definierte Reaktionsfront und somit auch keine Flammenstruktur mehr erkennbar ist. Peters bezeichnet diesen Bereich deshalb als den Bereich der aufgebrochenen Reaktionszonen.

Ein Extremfall tritt auf, wenn die Turbulenz so stark ist, dass selbst das integrale turbulente Zeitmaß kleiner ist als das chemische Zeitmaß ($\tau_{\text{int}} < \tau_L$). In diesem Fall trennen bereits die großen Wirbel potentielle Reaktionspartner und führen durch die schnelle Durchmischung von kalten

Edukten mit heißen Produkten zu einem Löschen der Flamme (englisch: *quenching*). Da kleinere Wirbel ein kleineres charakteristisches Zeitmaß besitzen als die integralen Wirbel, stellt sich eine Homogenität in großen Bereichen des reaktiven Strömungsfeldes ein. Borghi identifizierte diesen Bereich für den $Da < 1$ gilt, als eigenes Regime und bezeichnete es als homogenen Reaktor (englisch: *well stirred reactor*). In diesem Bereich ist ein vollständiges Erlöschen der Flamme möglich, wenn der momentane Gemischzustand mit den damit verbundenen chemischen Gleichgewichtszuständen durch Wärmeverlust an der begrenzenden Geometrie entsprechend verändert wird. Das Regime des homogenen Reaktors wird auch als Bereich der langsamen Chemie oder als chemisch limitierter Bereich bezeichnet. Anschaulich dargestellt ist dieser Bereich in Bild 3 in Abbildung 2.10.

Auf der Basis experimenteller Untersuchungen führen Abdel-Gayed und Bradley [AGB89] ebenfalls ein Phasendiagramm der Verbrennung ein. Die Unterteilung in unterschiedliche Flammenphänomene erfolgt dabei in Abhängigkeit des Produkts des Karlovitz-Flammenstreckungsfaktors K mit der Lewis-Zahl Le . Der Wert für K errechnet sich analog zur Damköhler-Zahl aus dem Quotienten des chemischen Zeitmaßes zum turbulenten Zeitmaß. In diesem Fall wird jedoch das Taylorsche Zeitmaß [Tay35] als charakteristisches turbulentes Zeitmaß verwendet. Somit gilt

$$K = \frac{\tau_L}{\tau_{\lambda_T}} . \quad (2.3.10)$$

Mit der Definition des Taylorschen Zeitmaßes und des Taylorschen Mikromaßes durch

$$\tau_{\lambda_T} = \lambda_T / v' \quad (2.3.11)$$

und

$$\frac{\varepsilon}{\nu} = 15 \frac{v'^2}{\lambda_T^2} \quad (2.3.12)$$

kann K zusammen mit den Gleichungen 2.2.9, 2.1.12 und 2.1.13 durch

$$K = 0.157 \left(\frac{v'}{s_L} \right)^2 \sqrt{\frac{\nu}{v' l_{\text{int}}}} \quad (2.3.13)$$

in Abhängigkeit von integralen Wirbelgrößen ausgedrückt werden⁴. Basierend auf diesen Definitionen beobachteten Abdel-Gayed et al. ein vollständiges Verlöschen der Flamme für einen Wert von $K \cdot Le > 1.5$ bei einer turbulenten Reynolds-Zahl $Re_t > 300$. Für $Re_t < 300$ liegt die Löschgrenze bei $K \cdot Re_t^{-0.5}$.

Wird die Karlovitz-Zahl Ka analog zum Karlovitz-Flammenstreckungsfaktor K in Abhängigkeit integraler Größen ausgedrückt, so kann der Zusammenhang

$$Ka = \sqrt{15}K \quad (2.3.14)$$

erhalten werden. Daraus folgt, unter der Annahme einer Lewis-Zahl $Le = 0.4$ für Wasserstoff-Luft-Gemische, für hochturbulente Strömungen eine Löschgrenze von $Ka > 1,5 \cdot 2.5 \cdot \sqrt{15} \approx 15$. Dies ist in Vergleich zu der von Peters angegebenen theoretischen Grenze für das Auftreten von Löscheffekten durch $Ka > 100$ zu sehen.

2.3.3 Turbulente Brenngeschwindigkeit

Im vorherigen Kapitel wurde der Einfluss der Turbulenz auf den Verbrennungsprozess qualitativ beschrieben. Der quantitative Einfluss wird durch sogenannte Brenngesetze erfasst. Ziel ist es dabei, einen direkten Zusammenhang zwischen der turbulenten Brenngeschwindigkeit und den Turbulenzparametern abzuleiten. Basierend auf Damköhlers Arbeit [Dam40] gibt es eine Vielzahl von Ansätzen für das Brenngesetz. Als Beispiel seien die Arbeiten von Andrews et al. [ABL75], Al-Khishali et al. [AKBH83] und Beauvais [Bea94] erwähnt. Einen guten Überblick über mögliche Ansätze gibt Moser [Mos97] in ihrer Arbeit.

Im folgenden soll der tendenzielle Einfluss, den das turbulente Strömungsfeld auf die turbulente Brenngeschwindigkeit besitzt, beschrieben werden. Hierfür wird das in Abbildung 2.11 exemplarisch dargestellte Brenngesetz betrachtet, bei dem die dimensionslose turbulente Brenngeschwindigkeit s_t/s_L als Funktion der dimensionslosen Geschwindigkeitsfluktuation v'/s_L

⁴Im Gegensatz zu dem Ansatz in Gleichung 2.2.9 verwenden Abdel-Gayed et al. [AGB89] bei dieser Umrechnung $\varepsilon = Av'^3/l_{\text{int}}$ und geben für die Proportionalität den experimentell ermittelten Wert $15/A = 40,4$ für isotrope Turbulenz vor.

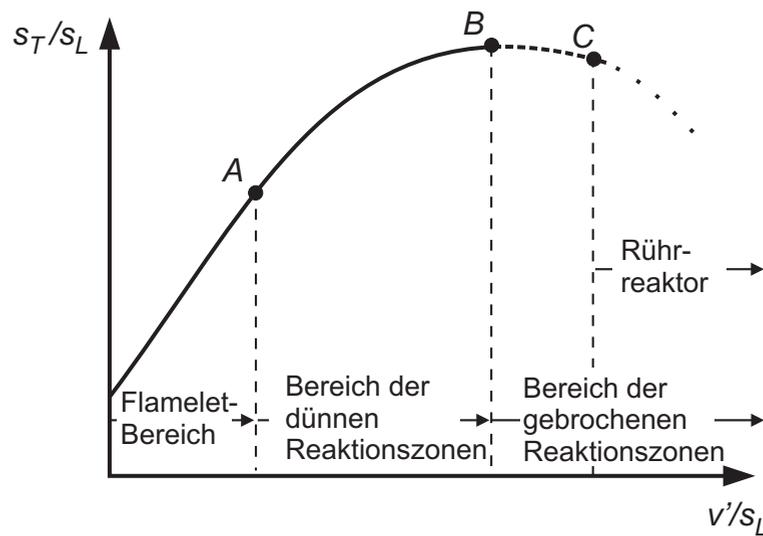


Abbildung 2.11: Exemplarischer Verlauf der, auf die laminare Brenngeschwindigkeit normierten, turbulenten Brenngeschwindigkeit in Abhängigkeit der ebenfalls normierten Geschwindigkeitsschwankungen (basierend auf Abdel-Gayed et al. [AGB81]).

aufgetragen ist. Wie der Verlauf zeigt, steigt im Bereich moderater Turbulenz s_t zunächst linear mit v' an. Ab einer gewissen Schwangungsgeschwindigkeit, hier repräsentiert durch den Punkt A, stellt sich jedoch ein sublineares Wachstum der Brenngeschwindigkeit ein. Dieser Effekt ist als *bending*-Effekt bekannt. Der Punkt A entspricht im modifizierten Borghi-Diagramm dem Wechsel der Flamme vom gefalteten Flamelet-Bereich in den Bereich der dünnen Reaktionszonen, [Kle00]. Bei einer weiteren Erhöhung der Turbulenzintensität tritt ab Punkt B eine Verringerung der turbulenten Brenngeschwindigkeit auf. Der Grund hierfür ist der Übergang der Flamme in das Regime der aufgebrochenen Reaktionszonen, bei dem lokale Löscheffekte eine Reduzierung der Flammenausbreitungsgeschwindigkeit zur Folge haben. Ab dem Punkt C wird die Flamme im Regime des homogenen Reaktors durch die großskalige Turbulenz so stark gestreckt, dass chemische Reaktionen unterbunden werden und keine klar definierbare Flammenfront mehr erkennbar ist.

Es ist anzumerken, dass Brenngesetze stark durch das herrschende integrale Längenmaß der zugrundeliegenden Strömung beeinflusst werden. Erfasst und klassifiziert wird der Einfluss durch die jeweilige turbulente Reynolds-Zahl, [AGB89]. Für unterschiedliche turbulente Reynolds-Zahlen kann so-

mit der Verlauf der Brenngeschwindigkeit deutlich von dem in Abbildung 2.11 gezeigten Beispielverlauf abweichen. Dieser dient jedoch lediglich zur Interpretation aller möglichen auftretenden Effekte.

2.4 Flammenausbreitungsmechanismen in Rohren

Ein häufig angewendetes Verfahren zur Untersuchung von Flammen-Turbulenz-Wechselwirkungen ist die Verbrennung eines homogen vorgemischten Gases in einem geschlossenen Rohr. Dabei wird durch die Zündung an einem Rohrende eine durch das Rohr propagierende Flamme initiiert. Zur Induzierung von Turbulenz werden dabei Blenden mit verschiedenen Blockierraten

$$BR = \frac{A_{Blende}}{A_{Kanal}} \quad (2.4.1)$$

verwendet, u.a. [Bre87], [KBVD97], [LKC84], [Bea94], [Ede01b]. Durch die Variation von Gemischzustand und Blockierrate können bei bestimmten Hinderniskonfigurationen die unterschiedlichen, in den vorherigen Kapiteln beschriebenen, Flammentypen generiert werden.

Die genaue Betrachtung des Verbrennungsprozesses zeigt, dass sich im Rohr kurz nach der Zündung des Gemisches zunächst eine laminare Flammenfront ausbildet. Diese schlägt aufgrund der in Kapitel 2.3.1 beschriebenen Effekte schnell in eine turbulente Flamme um, [EEM98]. Sobald die Flamme die ersten Hindernisse erreicht, ist davon auszugehen, dass die Turbulenz, die in den Scherströmungsgebieten zwischen den Berandungen und der von der Flamme induzierten Strömung verursacht wird, den Einfluss der anderen Turbulenzpromotoren (Turbulenzproduktion durch Gravitation und Flammeninstabilitäten) deutlich übersteigt. Durch die Wechselwirkung der Expansionsströmung mit den Hindernissen baut sich vor der Flamme ein hochturbulentes Strömungsfeld auf, das zu einer starken Beschleunigung der Flammenfront führt. In der weiteren Folge des Verbrennungsprozesses können verschiedene Flammenausbreitungsphänomene auftreten. Einen guten Überblick geben hierfür Lee et al. [LKC84]. Sie unterteilen in die folgenden Erscheinungsformen:

- Deflagrationen
 - *Quenching* Regime,
 - langsame Deflagration,
 - schallnahe Deflagration,
- Detonationen
 - Quasi-Detonations Regime und
 - Chapman-Jouguet Detonations Regime.

Der Unterschied zwischen Detonationen und Deflagrationen besteht im Ausbreitungsmechanismus. Bei einer Deflagration bewegt sich die Flamme durch molekulare und turbulente Transportprozesse gekoppelt mit chemischen Reaktionen relativ zum umgebenden Gasgemisch fort. Die Brenngeschwindigkeit ist dabei subsonisch in Bezug auf das unverbrannte Gemisch unmittelbar vor der Flamme. Dadurch, dass die Dichte und der Druck über die Flamme vom unverbrannten Bereich in den verbrannten Bereich abnehmen, handelt es sich um eine Expansionswelle. Anders als bei der Dichte bleibt das Druckverhältnis jedoch nahezu konstant und wird deshalb üblicherweise mit $p_b/p_u \approx 1$ abgeschätzt.

Bei Detonationen erfolgt die Flammenausbreitung durch die direkte Kopplung der Reaktionszone an eine vorauslaufende Stoßwelle, die sich mit Überschallgeschwindigkeit in das unverbrannte Gemisch ausbreitet. Turbulente sowie molekulare Transportprozesse, wie der Wärme- und Stofftransport in der Vorwärmzone einer laminaren Flammenfront spielen keine Rolle mehr. Die Zündung des Gemisches wird nach einer kurzen Induktionszeit durch die Kompression des Stoßes und die damit verbundene Erhitzung des Gemisches über die Selbstzündtemperatur hinaus erreicht. Die Ausbreitungsgeschwindigkeit einer Detonation kann auf Werte deutlich über 1500 m/s steigen. Die erreichten Maximalgeschwindigkeiten (Chapman-Jouguet-Geschwindigkeit) hängen nur von der Gemischzusammensetzung ab. Die Detonation entspricht einer Kompressionswelle, da die Dichte und der Druck über die Flammenfront hinweg, bezogen auf den Ausgangszustand, zunehmen.

Wird das Regime der Deflagrationen genauer betrachtet, so kann dieses weiter unterteilt werden. Wie Lee et al. [LKC84] am Beispiel von

Wasserstoff-Luft-Flammen zeigten, kann es im Falle von periodischen Hindernissen mit hoher Blockierrate zu sogenannten Freistrahls Zündungsprozessen kommen. Ausgangspunkt hierfür ist, dass es durch die Interaktion der Flammenfront mit dem hochturbulenten Strömungsfeld bei Damköhler-Zahlen $Da < 1$ zu einem Erlöschen der Flamme kommt. Ein Voranschreiten des Verbrennungsprozesses ist in der Folge nur dadurch möglich, dass heiße Produkte über einen turbulenten Freistrahls in die stromabwärts gelegene Kammer⁵ transportiert werden und dort zu einer volumetrischen Zündung führen. Das Phänomen des turbulenten Freistrahls wurde von Jordan [Jor99] am Beispiel eines Einzelhindernisses näher untersucht. Die beschriebene Form der deflagrativen Flammenausbreitung wird in der Literatur als *Quenching*-Regime beschrieben. Da Flammenfronten magerer Vormischflammen durch ein sehr großes chemisches Zeitmaß τ_L gekennzeichnet sind und somit eher die Neigung zum Löschen aufweisen, tritt dieses Phänomen hauptsächlich bei brennstoffarmen Gemischen auf.

Lee et al. [LKC84] zeigten zudem, dass sich in Abhängigkeit von der Brennstoffkonzentration und der Blockierrate der Hindernisse sowohl langsame Deflagrationen mit einer Flammenausbreitungsgeschwindigkeit von $v_F \approx 10 - 300$ m/s als auch schnelle Deflagrationen mit einer Flammenausbreitungsgeschwindigkeit von $v_F \approx 350 - 800$ m/s einstellen. Schnelle Deflagrationen werden in der Literatur auch als schallnahe Deflagrationen oder als Flammen im *choking*-Regime bezeichnet.

Bei einer schnellen Deflagration entwickelt sich eine führende Stoßwelle, an welche sich die Flammenfront koppelt. Im Gegensatz zur Detonation liegt jedoch der Verdichtungsstoß deutlich vor der Flammenfront, d.h. es findet keine direkte Zündung des Gemisches durch den Stoß statt. Die Flamme breitet sich somit deflagrativ in dem Gemisch aus, dessen Zustand durch den Stoß verändert wurde. Als maximale Ausbreitungsgeschwindigkeit von Flammen im *choking*-Regime geben Lee et al. [LKC84] die Schallgeschwindigkeit des isobar verbrannten Frischgasgemisches an. Näher beschrieben werden diese Vorgänge u.a. bei [Ede01b], [CG88], [Bre87] und [Bar75].

Eine genauere Betrachtung der detonativen Flammenausbreitungsmechanismen wird an dieser Stelle nicht durchgeführt, da sie nicht Gegenstand dieser Arbeit sind.

⁵Kammer ist definiert als der Zwischenraum zwischen zwei Hindernissen.

3 Mathematische Beschreibung und Modellansätze

3.1 Grundlagen der Berechnung

Die Grundlage der mathematischen Beschreibung von turbulenten, reaktiven Strömungen stellen die Erhaltungsgleichungen des Impulses, der Energie und der Masse (Navier-Stokes-Gleichungen siehe z.B. [ATP84]) dar. Zudem müssen Erhaltungsgleichungen für die Masse der an der Reaktion beteiligten sowie inert transportierten Spezies berücksichtigt werden. Da eine analytische Lösung dieses gekoppelten Differenzialgleichungssystems nicht möglich ist, werden zur Berechnung von Verbrennungsprozessen numerische Methoden angewandt. Eine wirklichkeitsnahe numerische Lösung des Gleichungssystems setzt voraus, dass die kleinsten Zeit- und Längenmaße sowohl der turbulenten Strömung als auch der chemischen Prozesse aufgelöst werden. Für die chemischen Vorgänge bedeutet dies die Erfassung aller bei der Verbrennung auftretenden Elementarreaktionen mit den jeweiligen Reaktionszwischenprodukten. Wie aus Abbildung 3.1 hervorgeht, stellt dies die größte Anforderung an die Simulation eines Verbrennungsprozesses dar, da die kleinsten chemischen Skalen im Regelfall niedriger sind als die kleinsten physikalischen Zeitskalen.

Werden bei der numerischen Lösung von turbulenten Strömungen alle auftretenden Vorgänge sowohl zeitlich wie auch örtlich aufgelöst, so wird von einer direkten numerischen Simulation (DNS) gesprochen, u.a. [Rey89]. Dabei werden die Gleichungen ohne Modellierungsansätze gelöst, was bereits bei der Simulation kalter turbulenter Strömungen eine enorme Anforderung an die Rechenleistung darstellt⁶. Mit der heutzutage verfügbaren Computerkapazität können dabei nur stationäre Probleme mit geringer Reynolds-Zahl ($Re \approx 10^3$) mittels DNS-Methoden gelöst werden. Da in dieser Arbeit instationäre Verbrennungsvorgänge mit sehr großen lokalen Reynolds-Zahlen ($Re \approx 2 \cdot 10^6$) untersucht werden, ist eine direkte numerische Simulation nicht möglich.

Eine Möglichkeit, die in den letzten Jahren immer mehr an Bedeutung ge-

⁶Die nötige Anzahl an Gitterpunkten N_P für die räumliche Auflösung wird mit Hilfe der auftretenden Reynolds-Zahl durch $N_P \propto Re^{\frac{9}{4}}$ abgeschätzt, u.a. [PF96].

wonnen hat, ist die *Large Eddy Simulation* (LES). Bei dieser Methode wird durch die Anwendung von Filterfunktionen das Differenzialgleichungssystem so umgewandelt, dass die Strömungsgrößen unter direkter Auflösung der großskaligen Wirbel bei gleichzeitiger Modellierung des Einflusses der kleinskaligen Wirbel berechnet werden. Durch diese Vorgehensweise kann sowohl die räumliche als auch die zeitliche Auflösung im Vergleich zur DNS-Methode deutlich verringert werden. Da die Anwendung von LES-Methoden jedoch zumindest die Auflösung des integralen Längenmaßes fordert, bleibt dieses Verfahren sehr rechenintensiv und wird erst in neueren Entwicklungen bei der turbulenten Verbrennungssimulation eingeschränkt eingesetzt, u.a. [NK93].

Eine technisch relevante Methode ergibt sich durch die statistische Betrachtungsweise der turbulenten Strömung. Hierbei wird die Turbulenz mit Hilfe von statistischen Informationen wie z.B. dem Mittelwert (Erwartungswert

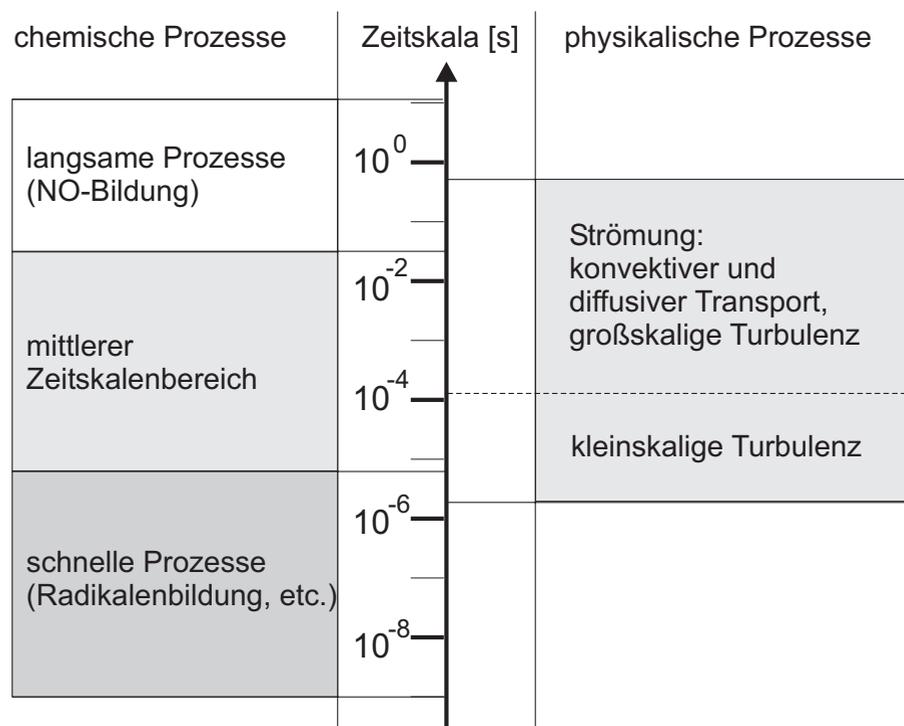


Abbildung 3.1: Vergleich von chemischen und physikalischen Zeitskalen aufbauend auf Warnatz und Maas [WM93]. Der physikalischen Zeitskala liegen Strömungen bei Verbrennungsprozessen in großskaligen Systemen zugrunde. Die Unterteilung in großskalige und kleinskalige Turbulenz stellt eine grobe Abschätzung dar.

Berechnungsverfahren	Auflösung	Erfasste Vorgänge
statistische Betrachtungsweise	$10^{-1} - 10^0\text{m}$	gemittelte Strömungsgrößen einschließlich Impulserhaltung ohne örtliche Schwankungen
Large Eddy Simulation	$10^{-2} - 10^{-1}\text{m}$	nichtlineare un stetige Bewegungen, einschließlich großskalige Turbulenz, ohne Dissipationsskalen, ohne Verbrennungsskalen
Direkte Numerische Simulation	$10^{-5} - 10^{-2}\text{m}$	alle Prozesse

Tabelle 1: Grobe Abschätzung der Anforderung an die Ortsauflösung in Abhängigkeit vom Berechnungsverfahren nach Klein [Kle00] für Verbrennungssimulationen in großskaligen Systemen.

oder auch erstes Moment genannt), der Varianz (zweites zentrales Moment) und den Momenten höherer Ordnung der Strömungsgrößen nachgebildet. Ausgangspunkt der statistischen Betrachtung sind Mittelungsverfahren, bei denen das Differenzialgleichungssystem so umgeformt wird, dass zeitliche Mittelwerte der Strömungsgrößen berechnet werden. Die bei diesem Verfahren entstehenden Momente müssen durch geeignete Modellansätze erfasst werden. Sie beschreiben den Einfluss der Prozesse, die durch die Mittelungsprozedur nicht aufgelöst werden.

Zur Übersicht sind in Tabelle 1 für die beschriebenen Lösungsverfahren die geforderte Ortsauflösung für Verbrennungssimulationen in großskaligen Systemen dargestellt.

Wird die turbulente Strömung durch statistische Methoden erfasst, stellt sich die Frage, welches Mittelungsverfahren verwendet wird. In Strömungen mit starken Dichteschwankungen ist es üblich, das Favre-Mittelungsverfahren [Fav65] dem Reynolds-Mittelungsverfahren [Rey95] vorzuziehen. Der Unterschied zwischen den beiden Verfahren besteht darin, dass bei der Reynolds-Mittelung der zeitliche Mittelwert einer Größe direkt verwendet wird, wohingegen bei der Favre-Mittelung der zeitliche Mittelwert einer Größe durch

$$\tilde{\phi} = \frac{\overline{\rho\phi}}{\bar{\rho}} \quad (3.1.1)$$

dichtegewichtet berechnet wird.

Beim Favre-Mittelungsverfahren werden zunächst die Variablen in dem betrachteten Gleichungssystem durch die jeweiligen Favre-Mittelwerte und die zugehörigen Schwankungswerte ausgedrückt, d.h. es gilt

$$\phi = \tilde{\phi} + \phi'' . \quad (3.1.2)$$

Anschließend werden die Gleichungen zeitlich gemittelt, wodurch sich das in Anhang A.1 ausführlich beschriebene Gleichungssystem ergibt. Der Vorteil dieser Vorgehensweise ist, dass im Gegensatz zur Reynoldsmittelung keine Korrelationen mit den Dichteschwankungen $\overline{\rho'\phi'}$ auftreten. Zudem sind Favre-Mittelwerte messtechnisch leichter zugänglich. Es muss beachtet werden, dass für den Druck p und die Dichte ρ die konventionelle Reynolds-Mittelung angewendet wird.

Das Favre-gemittelte Gleichungssystem ist jedoch wie das Reynolds-gemittelte Gleichungssystem nicht frei von unbekanntem Korrelationen. So treten in der Impulserhaltungsgleichung der sogenannte Reynolds Spannungstensor (englisch: *reynolds stress tensor*) $\overline{\rho u_i'' u_j''}$, sowie in der Energieerhaltungsgleichung und in den Spezieserhaltungsgleichungen die sogenannten Reynolds Flussterme (englisch: *reynolds flux terms*) $\overline{\rho u_k'' h''}$, bzw. $\overline{\rho u_k'' Y_i''}$ auf. Da diese Korrelationen 2. Ordnung nicht direkt aus den bekannten, gemittelten Strömungsgrößen berechnet werden können, stellen sie zusätzliche Unbekannte dar. Es kommt zu dem bekannten Schließungsproblem bei der Beschreibung turbulenter Strömungen. Möglichkeiten, diese Unbekannten zu bestimmen, werden unter dem Begriff der Turbulenzmodellierung zusammengefasst und in Kapitel 3.2 näher beschrieben.

Neben den bereits genannten Termen führt die Favre-Mittelung der Reaktionsrate ω_j in den Teilchenerhaltungsgleichungen (s. Anhang A.1) ebenfalls zu einem Schließungsproblem. Grund hierfür ist die nicht-lineare Abhängigkeit der Reaktionsrate von Variablen, die in turbulenten Strömungen starken Schwankungen unterworfen sind. Veranschaulicht werden kann dies am Beispiel der Reaktionsrate für das Reaktionsprodukt P der in Kapitel 2.1 vorgestellten Komplexreaktion. Werden die Reaktionsordnungen ν_B und ν_O vereinfachend mit 1 angenommen, so führt die Favre-Mittelung zu dem folgenden komplexen Zusammenhang [Dur00]:

$$\bar{\omega}_P = \frac{M_P}{M_B M_O} \tilde{\rho} k_f (\tilde{\rho} \tilde{Y}_B \tilde{Y}_O + \overline{\rho Y_B'' Y_O''}) + \overline{\rho (\rho k_f)'' Y_B'' Y_O''} +$$

$$\overline{\varrho(\varrho k_f)'' Y_O'' Y_B''} + \overline{\varrho(\varrho k_f)'' Y_B'' Y_O''} . \quad (3.1.3)$$

Da der Geschwindigkeitskoeffizient k_f ebenfalls stark nichtlinear von der Temperatur abhängt (Arrheniusansatz s. Gleichung 2.1.4), ergibt sich, dass die Favre-gemittelte Reaktionsrate nicht aus den Favre-gemittelten Größen berechnet werden kann. Nach Jones und Whitelaw [JW82] kann es dabei zu Abweichungen um mehrere Größenordnungen vom tatsächlichen Mittelwert kommen. Somit gilt

$$\overline{\omega}_P(T, Y_B, Y_O) \neq \omega_P(\widetilde{T}, \widetilde{Y}_B, \widetilde{Y}_O) . \quad (3.1.4)$$

Eine Modellierung der in Gleichung 3.1.3 auftretenden Korrelationen würde einen nicht zu rechtfertigenden Aufwand bedeuten. Deshalb werden bei der Simulation turbulenter Verbrennungsprozesse alternative Lösungsmöglichkeiten angewandt, die in Kapitel 3.3 vorgestellt werden.

3.2 Modell für turbulente Strömungen

Die Schließung des Favre-gemittelten Differenzialgleichungssystems erfordert die Bestimmung der unbekanntenen *reynolds stress* und *reynolds flux* Terme. Der naheliegendste Weg ist die Lösung von Transportgleichungen für die Terme $\overline{\varrho u_i'' u_j''}$, $\overline{\varrho u_k'' h''}$ bzw. $\overline{\varrho u_k'' Y_i''}$, wie es z.B. von Pope [Pop79] zur Simulation turbulenter Flammen vorgeschlagen wird. Bei der Herleitung dieser Gleichungen treten jedoch neue Unbekannte in Form von Korrelationen höherer Ordnung (3. Ordnung) auf und führen somit wiederum zu einem Schließungsproblem. Bei einem Reynolds-Spannungs-Modell (RSM) werden die Korrelationen 3. Ordnung modelliert und das Gleichungssystem auf diese Weise geschlossen. Man spricht dann von einem Schließungsmodell 2. Ordnung. Der Nachteil dieses Verfahrens ist, dass zusätzlich weitere Transportgleichungen gelöst werden müssen, wodurch der Rechenaufwand deutlich steigt.

In dieser Arbeit wird zur Schließung des Differenzialgleichungssystems ein sogenanntes Wirbelviskositätsmodell verwendet. Hierbei wird das komplexe Verhalten der Turbulenz auf Grund empirischer Information in vereinfachter Weise nachgebildet. Grundlage ist die Beschreibung der Reynolds

Spannungs- und Flussterme entsprechend der Bestimmung der molekularen diffusiven Transportterme. Für die *reynolds stress* Terme folgt aus dem Vergleich zu dem Ansatz des viskosen Schubspannungstensors, u.a. [Wil93]:

$$-\overline{\rho u_i'' u_j''} = \mu_t \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \left(\mu_t \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} + \overline{\rho k} \right) \delta_{ij}. \quad (3.2.1)$$

Die turbulente Viskosität μ_t wird in Analogie zu der Bestimmung der molekularen Viskosität nach den Gesetzen der kinetischen Gastheorie abgeleitet. Dabei wird die freie Weglänge und die Molekülgeschwindigkeit durch typische Längen- und Geschwindigkeitsmaße der turbulenten Strömung ersetzt. Nach Tennekes und Lumley [TL83] kann als Mischungslänge das integrale Längenmaß l_{int} und als Mischungsgeschwindigkeit die Geschwindigkeitsschwankung v' verwendet werden, woraus sich der proportionale Zusammenhang

$$\mu_t \propto \rho l_{\text{int}} v' \quad (3.2.2)$$

ergibt. Die Bestimmung von v' und l_{int} erfolgt durch das k - ε -Turbulenzmodell. Bei diesem Zweigleichungsmodell werden Transportgleichungen für die spezifische turbulente kinetische Energie k und die Dissipationsrate ε gelöst. Diese Gleichungen, die im Anhang A.2 aufgeführt sind, lassen sich nach der Reynoldszerlegung aus den Navier-Stokes-Gleichungen ableiten. Sie beschreiben die Dynamik der Turbulenzkaskade, da k der integralen turbulenten kinetischen Energie über alle Wellenzahlen und ε der Dissipationsrate dieser Energie entsprechen. Durch die in den Gleichungen 2.2.6 und 2.2.9 beschriebenen Zusammenhänge aus der Turbulenztheorie ergibt sich somit für die turbulente Viskosität

$$\mu_t = C_\mu \rho \frac{k^2}{\varepsilon}. \quad (3.2.3)$$

Der Wert des Parameters $C_\mu = 0.09$ ist empirisch ermittelt. Da μ_t direkt aus k und ε berechnet wird, besitzt der Wert keine Richtungsinformation. Die dem Ansatz zugrundeliegende Annahme der isotropen Turbulenz ist einer der Nachteile dieses Verfahrens.

In dem beschriebenen Ansatz wird die Produktion von turbulenter kinetischer Energie durch die turbulente Flammenfront nicht berücksichtigt (s.

Kapitel 2.3). Da es einerseits nur wenige, kaum getestete Ansätze [Bor88] für diese Phänomene gibt und andererseits die Turbulenzproduktion in erster Linie durch die Expansionsströmung vor der Flamme vorangetrieben wird, wird das Standard- k - ε -Modells ohne weitere Modifikationen angewandt.

Auf der Basis des vorgestellten Schliessungsansatzes werden auch die *reynolds flux* Terme beschrieben. Analog zu den diffusiven Transporttermen werden die turbulenten Mischungsvorgänge proportional zu dem Gradienten der jeweiligen Favre-gemittelten Strömungsgröße definiert. Unter Verwendung des sogenannten Gradiententransportansatzes gilt allgemein

$$\overline{\rho u_k'' \phi''} = -\bar{\rho} \Gamma_t \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial x_k} . \quad (3.2.4)$$

Die Größe Γ_t entspricht dem turbulenten Austauschkoefizienten. Basierend auf der Vorgabe der turbulenten Prandtl-, bzw. Schmidt-Zahl

$$Pr_t = \frac{\mu_t}{a_t} \quad \text{und} \quad Sc_t = \frac{\mu_t}{D_{t,i}} , \quad (3.2.5)$$

kann der jeweilige turbulente Austauschkoefizient durch die Wirbelviskosität ausgedrückt werden. Für die *reynolds flux* Terme in der Energieerhaltungsgleichung und den Teilchenerhaltungsgleichungen folgt somit:

$$\overline{\rho u_k'' h''} = -\bar{\rho} \frac{\mu_t}{Pr_t} \frac{\partial \tilde{h}}{\partial x_k} \quad \text{und} \quad \overline{\rho u_k'' Y_i''} = -\bar{\rho} \frac{\mu_t}{Sc_t} \frac{\partial \tilde{Y}_i}{\partial x_k} . \quad (3.2.6)$$

Bei hochturbulenten Strömungen übersteigt der turbulente Transport den molekularen Transport um Größenordnungen. Dadurch können im Gleichungssystem die molekularen Transportterme vernachlässigt werden. Werden diese dennoch berücksichtigt, wird ein effektiver Austauschkoefizient eingeführt, der sich allgemein aus

$$\Gamma_{\text{eff}} = \Gamma_t + \Gamma = \frac{\mu_t}{Pr_t} + \Gamma \quad (3.2.7)$$

($\Gamma = a, D_i$) bestimmen lässt. Der Koeffizient Pr_t wird als allgemeine turbulente Prandtl-Zahl bezeichnet.

Es gibt Diskussionen darüber, ob der Gradiententransportansatz zur Beschreibung der turbulenten Austauschkoefizienten gerechtfertigt ist. Sowohl Messungen [Mos79] als auch theoretische Untersuchungen [LB81] zeigen, dass ein turbulenter Transport generell gegen den Gradienten der gemittelten Werte möglich ist. Dies gilt insbesondere dann, wenn Verbrennungsprozesse untersucht werden und somit hohe Dichtegradienten vorhanden sind. Je nach Richtung des relativen Druck- und Geschwindigkeitsgradienten wird der turbulente Transport einer skalaren Größe verstärkt oder vermindert. Bereiche mit geringerer Dichte können unabhängig von der Information, die sie mit sich tragen, stärker beschleunigt werden, so dass ein Transport unabhängig von den jeweiligen Gradienten auftritt.

3.3 Überblick über Modellansätze für die Verbrennung

Zur vollständigen Schließung des Favre-gemittelten Gleichungssystems muss ein Modellansatz für die zeitgemittelte Reaktionsrate gefunden werden. Aufgrund der in Kapitel 2.3.2 beschriebenen Komplexität der Interaktion zwischen Turbulenz und Flammenfront und des damit verbundenen Einflusses auf die globale chemische Reaktionsrate, ist eine allgemeingültige Modellierung dieses Terms, d.h. die Verwendung eines Ansatzes für alle möglichen Verbrennungsregimes, bis heute Gegenstand theoretischer Untersuchungen. In der Literatur wird eine Vielzahl von Verbrennungsmodellen vorgeschlagen, die für einzelne Bereiche des modifizierten Borghi-Diagramms Gültigkeit besitzen. In der Regel wird für einen zu betrachtenden Verbrennungsprozess zunächst das erwartete Regime bestimmt und ein entsprechendes Verbrennungsmodell ausgewählt und optimiert, u.a. [BL99],[KDB99],[Mos97]).

Generell müssen zwei Arten von Verbrennungsmodellen unterschieden werden: **Volumenreaktionsmodelle** und **Flammenverfolgungsmodelle**. Bei Volumenreaktionsmodellen, auch *capturing*-Verfahren genannt, werden die *reynolds flux* Terme sowie die zeitlich gemittelten Reaktionsraten getrennt durch einen Modellansatz erfasst. Die turbulente Brenngeschwindigkeit der Flamme ergibt sich somit aus der Kopplung der turbulenten Transportvorgänge mit der Reaktionsrate. Dies ist analog zur lami-

naren Flammenausbreitung zu sehen, bei der die Brenngeschwindigkeit die Proportionalität $s_L \propto \sqrt{a\omega}$ aufweist (s. Gleichung 2.1.6). Im Gegensatz dazu bestimmen Flammenverfolgungsmodelle, auch *flame front tracking*-Verfahren genannt, direkt die Flammenausbreitung. Durch die Detektierung der Flammenoberfläche als infinitesimal dünne Front und der Vorgabe der Brenngeschwindigkeit, mit der sich die Flamme normal zu sich selbst ausbreitet, wird die Kopplung der turbulenten Transportvorgänge mit den Reaktionsraten vorweggenommen. Es ist dadurch nicht mehr nötig, diese Prozesse getrennt zu modellieren, wodurch sich veränderte Transportgleichungen ableiten lassen (s. Kapitel 3.3.2).

3.3.1 Volumenreaktionsmodelle

Modelle basierend auf der Beschreibung der Mischungsintensität

In einer 1971 veröffentlichten Arbeit erkannte Spalding [Spa71], dass für turbulente Verbrennungsprozesse die Modellierung des zeitlich gemittelten Reaktionsterms durch einen Arrheniusansatz unbefriedigende Ergebnisse liefert. Dies gilt insbesondere für den Fall, dass der betrachtete Verbrennungsprozess in den gewellten oder gefalteten Flamelet-Bereich fällt, da die Reaktionsrate dann hauptsächlich durch turbulente Mischungsvorgänge bestimmt wird. Spalding führte deshalb einen Ansatz ein, welcher vollständig auf chemische Kinetik verzichtet. Der Ansatz basiert auf der anschaulichen Betrachtung, dass turbulente Transportvorgänge an der Flammengrenze (Flammenoberfläche) zur Bildung von Gaspaketen führen, die durch unterschiedliche Verbrennungszustände gekennzeichnet sind. In vorgemischten Flammen existieren somit Pakete mit vollständig verbranntem heißem Gas neben Paketen mit unverbranntem kaltem Gas. In den Grenzbereichen der unterschiedlichen Pakete, welche die effektive Flammenoberfläche repräsentieren, findet eine im Vergleich zur Durchmischung sehr schnelle Reaktion statt. Die Beschreibung der Gesamtumsatzrate des Brennstoffs erfolgt somit durch die Bestimmung der effektiven Flammenoberfläche, welche wiederum von der Mischungsintensität abhängig ist. Diesem, als *Eddy-Break-Up* Modell bekannten Ansatz folgten weitere Modifikationen (s. u.a. Spalding [Spa76]), bzw. vergleichbare Ansätze wie das *Eddy-Dissipation Combustion* Modell von Magnussen et al. ([MH76]) oder der Bray-Moss-Libby (BML) Schließungsansatz für schnelle Chemie [BLM85].

Alle aufgeführten Modelle lassen sich in eine allgemeine Form überführen. Basis ist die Definition der Favre-gemittelten Fortschrittsvariablen

$$\tilde{c} = \frac{\tilde{Y}_P}{Y_{P,\infty}} . \quad (3.3.1)$$

Sie entspricht der normierten Produktkonzentration und steht repräsentativ für den Status der Verbrennung. Für unverbranntes Gas gilt $\tilde{c} = 0$ und für vollständig verbranntes Gas gilt $\tilde{c} = 1$. Wird der Verbrennungsvorgang vollständig durch \tilde{c} beschrieben, so genügt es, neben den Navier-Stokes-Gleichungen und den Gleichungen für k und ε eine zusätzliche Transportgleichung für \tilde{c} zu lösen, die sich direkt aus der Transportgleichung für \tilde{Y}_P ableiten lässt:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho}\tilde{c}) + \frac{\partial}{\partial x_k} (\bar{\rho}\tilde{u}_k\tilde{c}) = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\frac{\eta_t}{Sc_t} \frac{\partial \tilde{c}}{\partial x_k} \right) + \bar{\omega}_c . \quad (3.3.2)$$

Die Beschreibung der zeitlich gemittelten Gesamtumsatzrate erfolgt durch

$$\bar{\omega}_c = K \frac{1}{\tau_t} F(\tilde{c}) . \quad (3.3.3)$$

In diesem Ansatz wird die Mischungsintensität durch das charakteristische Zeitmaß τ_t berücksichtigt. Während Spalding das charakteristische Zeitmaß durch

$$\frac{1}{\tau_t} = \frac{\partial u}{\partial y} \quad (3.3.4)$$

bestimmt, wobei u der zeitlich gemittelten Geschwindigkeit in Hauptströmungsrichtung entspricht und y die Richtung mit dem stärksten Gradienten kennzeichnet, wird in neueren Arbeiten auf das charakteristische turbulente Zeitmaß der Strömung nach Gleichung 2.2.12 zurückgegriffen, u.a. [Tec97],[Adv95]. Somit folgt mit der turbulenten kinetischen Energie k und der Dissipationsrate ε :

$$\tau_t = \tau_{\text{int}} = \frac{k}{\varepsilon} . \quad (3.3.5)$$

In Gleichung 3.3.3 steht $F(\tilde{c})$ repräsentativ für eine bestimmte Funktion der Fortschrittsvariablen, die die Bedingung erfüllt, für $\tilde{c} = 0$ und $\tilde{c} = 1$ den Wert null anzunehmen. Für den Wert des Vorfaktors K gibt es keine klare Richtlinie. Während Spalding [Spa71] einen konstanten Wert von $K = 0.35$ vorschlägt erfolgt in neueren Anwendungen eine gezielte Anpassung an das jeweilige reaktive Gemisch. Als Beispiel seien hier Naji et al. [NSB89] genannt, die die Erweiterung

$$K = C'_{EBU} \left(1 + \frac{4.4}{1 + 3.2 \frac{\sqrt{k}}{s_L}} \right) \quad (3.3.6)$$

vorschlagen. Dabei entspricht C'_{EBU} einer Konstanten, die auf der Basis von experimentellen Daten ermittelt werden kann. Durch die vorgeschlagene Erweiterung wird der Vorfaktor K speziell im schwachturbulenten Bereich modifiziert. Auf die Grundlagen der beschriebenen Erweiterung von Naji et al. wird nochmals in Kapitel 4.3.2 genauer eingegangen.

Einen vollständig parameterfreien Ansatz stellt das BML Modell dar. Bei diesem Modell wird der Vorfaktor K aus der Struktur der laminaren Flammenfront bestimmt. Die Vorgehensweise zur Bestimmung von K ist in Kapitel 4.3 ausführlich dargestellt.

Der Vorteil der beschriebenen Ansätze ist die Fähigkeit, den linearen Zusammenhang zwischen der turbulenten Brenngeschwindigkeit s_t und der turbulenten Geschwindigkeitsschwankung im Bereich von moderaten Turbulenzintensitäten (Flamelet-Bereich)⁷ richtig wiederzugeben [HG84].

Der Nachteil dieser Modelle ist jedoch, dass bei höheren Turbulenzintensitäten mögliche Veränderungen der Struktur der Flammenfront durch hydrodynamische Vorgänge (Wirbel), welche in einem veränderten Brennverhalten resultieren, nicht erfasst werden. Es ist daher mit diesen Ansätzen nicht möglich, den *bending*-Effekt (s. Kapitel 2.3.3) richtig zu beschreiben, welcher sich durch den Übergang der Verbrennung vom Flamelet-Bereich in den Bereich der dünnen Reaktionszonen ergibt. Die Modelle versagen vollständig, wenn die Verbrennung durch die Turbulenzinteraktion in das Regime der aufgebrochenen Reaktionszonen verlagert wird, da es eine

⁷Es wird hierbei Bezug genommen auf den in Kapitel 2.3.3 dargestellten Beispielverlauf des Brenngesetzes.

weiter proportional steigende Reaktionsrate bestimmt und auftretende lokale Löscheffekte nicht berücksichtigt.

Die beschriebenen Vor- und Nachteile der Modelle werden durch Anwendungen von Kotchourko [KDB99] bestätigt. Er untersuchte turbulente Verbrennungsvorgänge in geschlossenen Rohren mit Hilfe des erweiterten EBU-Ansatzes von Naji et al.. Dabei wurde einerseits gezeigt, dass durch eine geringfügige Parameteranpassung eine gute Übereinstimmung zwischen Messung und Rechnung erzielt werden konnte, solange es sich um Verbrennungsvorgänge im *choking* Regime handelte. Die Verwendung des Modells ist jedoch nicht möglich, wenn die Verbrennung im *quenching* Regime erfolgt.

Eine Möglichkeit, die Schwachstelle des Modells zu umgehen, ist, dass in Abhängigkeit von der aktuellen lokalen Damköhler-Zahl ($Da = 1$) ein Umschalten zu einem Arrheniusansatz durchgeführt wird. Somit wird von einer Mischungslimitierten auf eine rein chemisch limitierte Berechnungsweise der Reaktionsrate übergegangen. Diese Vorgehensweise, die häufig in kommerziellen CFD-Codes implementiert ist (u.a. [Tec97]), ermöglicht es, Löscheffekte zu erfassen. Bei genauerer Betrachtung dieses Verfahrens zeigt sich jedoch, dass dadurch von einem für den Flamelet-Bereich optimierten Modell direkt auf einen Ansatz für den Bereich des homogenen Reaktors umgeschaltet wird, wodurch die dazwischenliegenden Bereiche der dünnen und der aufgebrochenen Reaktionszonen ignoriert werden.

Eine alternative Möglichkeit ist die Einführung der Wahrscheinlichkeitsfunktion L , welche die Wahrscheinlichkeit beschreibt, mit der ein Löschen der Flamme auftritt, u.a. [ZL95]. Wird L mit dem ursprünglichen Ansatz multipliziert, ergibt sich zur Berechnung der zeitlich gemittelten Reaktionsrate

$$\bar{\omega}_c = L K \frac{1}{\tau_t} F(\tilde{c}) . \quad (3.3.7)$$

Ausdrücke für L werden basierend auf der Theorie der laminaren Flammenausbreitung hergeleitet, [Cla85]. Dabei ergibt sich eine Abhängigkeit von Parametern wie der laminaren Brenngeschwindigkeit, der Temperaturleitfähigkeit und der Lewis Zahl.

Modell basierend auf der Beschreibung der turbulenten Brenngeschwindigkeit

Zimont et al. [ZL95],[KLZ94] schlagen basierend auf Gleichung 3.3.2 mit

$$\bar{\omega}_c = \rho_u s_t |\nabla \tilde{c}| \quad (3.3.8)$$

ein Modell vor, das die zeitlich gemittelte Reaktionsrate auf der Basis der turbulenten Brenngeschwindigkeit berechnet. Durch die Bestimmung von s_t mit einem Brenngesetz (s. Kapitel 2.3.3) werden sowohl die chemischen und stofflichen Eigenschaften des Gemisches sowie der Einfluss der Turbulenz bei der Berechnung von $\bar{\omega}_c$ berücksichtigt. Da mit diesem Modell ebenfalls keine Flammenlöscheffekte erfasst werden können, wird auch hier die Löschwahrscheinlichkeit L eingeführt und analog zu dem EBU-Modell mit $\bar{\omega}_c$ multipliziert.

Im Vergleich zu dem von Peters [Pet86] vorgestellten *Level-Set-Approach* (s. Kapitel 3.3.2) stellt sich jedoch die Frage, inwieweit die Vorgabe einer Brenngeschwindigkeit als Reaktionsrate sowie die getrennte Berücksichtigung der diffusiven Prozesse nicht zu einer Überbestimmung der Flammenausbreitung führen.

Modelle basierend auf statistischen Methoden

Basierend auf der Beschreibung von turbulenten Strömungsvorgängen unter der Verwendung von Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen (englisch: *Probability Density Functions*, kurz PDF) (s. [Lun67]) übertrugen Dopazo und O'Brian [DE74] sowie Pope [Pop79, Pop81, Pop85] dieses Verfahren erstmals auf reaktive turbulente Strömungen. Die vollständige statistische Erfassung des chemischen und thermodynamischen Zustandes durch eine mehrdimensionale PDF [Bro89] ermöglicht es, das chemische Schließungsproblem zu umgehen und eine zeitlich gemittelte Reaktionsrate zu bestimmen. Allgemein kann die mehrdimensionale PDF durch

$$P(\rho, T, Y_1, \dots, Y_{S-1}; \vec{x}, t) d\rho dT dY_1 \dots dY_{S-1} \quad (3.3.9)$$

ausgedrückt werden⁸, u.a. [WM93]. Sie beschreibt die Wahrscheinlichkeit, dass zur Zeit t , am Ort \vec{x} die Dichte zwischen ρ und $\rho + d\rho$, die Temperatur

⁸Der Massenbruch Y_S ist dabei nicht berücksichtigt, da dieser durch die Normalisierung $\sum_{i=1}^S Y_i = 1$ bestimmt ist.

zwischen T und $T + dT$ und die lokale Zusammensetzung des Gemisches zwischen Y_j und $Y_j + dY_j$ liegt. Für das Integral der mehrdimensionalen PDF über den gesamten Zustandsraum gilt durch die Normalisierungsbedingung

$$\int_0^1 \dots \int_0^1 \int_0^\infty \int_0^\infty P(\varrho, T, Y_1, \dots, Y_{S-1}; \vec{x}, t) d\varrho dT dY_1 \dots dY_{S-1} = 1. \quad (3.3.10)$$

Bei Kenntnis der lokalen augenblicklichen PDF kann damit der zeitliche Mittelwert aller Zustandsgrößen berechnet werden. Wird z.B. die Temperatur betrachtet, so kann durch die Wichtung mit der PDF durch

$$\bar{T}(\vec{x}, t) = \int_0^1 \dots \int_0^1 \int_0^\infty \int_0^\infty TP(\varrho, T, Y_1, \dots, Y_{S-1}; \vec{x}, t) d\varrho dT dY_1 \dots dY_{S-1} \quad (3.3.11)$$

die gemittelte Temperatur unter Berücksichtigung des Einflusses sämtlicher turbulenzbedingter Schwankungen der übrigen Zustandsgrößen bestimmt werden. In weiterer Folge können, aufbauend auf der bekannten PDF, Mittelwerte für beliebige Funktionen von Variablen des betrachteten Zustandsraumes gefunden werden. Für reaktive Strömungen bedeutet dies, dass die gemittelte Reaktionsrate ebenfalls durch eine Wichtung mit der PDF durch

$$\bar{\omega}_j(\vec{x}, t) = \int_0^1 \dots \int_0^1 \int_0^\infty \int_0^\infty \omega_j(\varrho, T, Y_1, \dots, Y_{S-1}) \cdot P(\varrho, T, Y_1, \dots, Y_{S-1}; \vec{x}, t) d\varrho dT dY_1 \dots dY_{S-1} \quad (3.3.12)$$

berechnet werden kann.

Die größte Schwierigkeit bei der Anwendung der PDF Methode ist die zeit- und ortsabhängige Bestimmung der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion. Pope [Pop76] und Borghi [Bor88] schlagen vor, eine eigene Transportgleichung für die PDF zu lösen. Dies stellt jedoch eine große Anforderung an die Modellbildung dar, da diese Transportgleichung nur mit komplexen, schwer zu realisierenden Ansätzen gelöst werden kann.

Eine alternative Methode stellt ein Monte Carlo Verfahren (s. u.a. [Pop81]) dar, das die PDF durch eine große Anzahl stochastischer Partikel beschreibt, welche jeweils einen eigenen thermodynamischen und chemischen

Zustand repräsentieren. Durch den Transport und die Veränderung der Partikel durch das Strömungsfeld lässt sich direkt aus den an einem Ort befindlichen Partikeln ein Mittelwert für jede Strömungsgröße finden. Eine gemittelte Reaktionsrate wird dementsprechend aus der Mittelung der für jeden Partikel spezifischen Reaktionsrate über die Gesamtanzahl der lokal vorhandenen Partikel gefunden. Diese Methode erfordert eine sehr hohe Rechenleistung, da einerseits nur eine große Anzahl von Partikeln eine sinnvolle statistische Beschreibung ermöglichen und andererseits für jeden Partikel ein vollständiger Satz der thermodynamischen und chemischen Größen berechnet und gespeichert werden muss. Deshalb wird bei der Verbrennungssimulation unter Verwendung der Monte Carlo Methode in der Regel auf einen reduzierten chemischen Reaktionsmechanismus zurückgegriffen, welcher nur die langsamsten Elementarreaktionen der Komplexreaktion erfasst. Um dennoch eine möglichst vollständige Beschreibung der chemischen Vorgänge zu realisieren, kann die von Maas [MP92] vorgeschlagene Methode der Suche nach Mannigfaltigkeiten niedriger Dimension im Zustandsraum (englisch: Intrinsic Low-Dimensional-Manifolds, kurz ILDM) angewandt werden.

Eine einfache Möglichkeit zur Bestimmung der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion ist die Methode der *angenommenen PDF*, u.a. [Bor88],[Bra79]. Dabei wird eine funktionale Form für die PDF vorgegeben, aus der die Verteilung der mehrdimensionalen PDF in Abhängigkeit von den Momenten⁹ der statistisch betrachteten Größen bestimmt werden kann. Um die PDF lokal und zeitabhängig berechnen zu können, müssen demnach zusätzliche Transportgleichungen für die Momente gelöst werden. Da einerseits die Rekonstruktion der mehrdimensionalen PDF aus den Momenten eine komplexe mathematische Anforderung darstellt und andererseits der Rechenaufwand durch die zusätzlichen Transportgleichungen enorm steigt, wird auch bei diesem Verfahren die Dimensionalität reduziert. Wie Bray [Bra80] zeigt, kann durch geeignete Annahmen der thermo-chemische Zustand des Gemisches in Abhängigkeit von einer Fortschrittsvariablen c ausgedrückt werden. Auf der Basis einer eindimensionalen PDF ist es dann möglich, technisch relevante Verbrennungsvorgänge mit dem Verfahren der angenommenen PDF mit einem vertretbaren Aufwand zu berechnen. In

⁹Unter den Begriff der Momente fallen bei mehrdimensionalen PDF's der Erwartungswert, die Varianzen sowie die Kovarianzen der einzelnen Größen, u.a. [Bro89].

Kapitel 4.2 wird dieses Verfahren ausführlich beschrieben.

Der Anwendungsbereich der PDF Methode ist nach Borghi [Bor88] davon abhängig, welche funktionale Form der PDF gewählt wird. Dies bedeutet, dass bei einer berechneten PDF oder durch geeignete Wahl der Form der PDF der gesamte Bereich des modifizierten Borghi Diagramms, mit Ausnahme des laminaren Bereichs, abgedeckt werden kann. Es ist jedoch anzumerken, dass die Stärken der PDF Methode hauptsächlich im chemisch limitierten Bereich liegen und somit Anwendungen, wie z.B. von Bohn [BL99], in den Bereich der Turbulenz-Flammeninteraktion fallen, bei dem die Flammenfront durch die Turbulenz beeinflusst wird.

3.3.2 Flammenverfolgungsmodell

Im Gegensatz zu den Volumenreaktionsmodellen wird die Flammenfront bei Flammenverfolgungsmodellen nicht aufgelöst. Die Flammenfront wird dabei als Diskontinuität betrachtet, die sich in einem fluiddynamischen System ausbreitet. Diese Vorgehensweise ist vergleichbar mit Verfolgungsverfahren zur Beschreibung der Stoßwellenausbreitung, u.a. [ATP84]. Der Vorteil dieser Methode gegenüber der *capturing*-Methode ist, dass bei der numerischen Lösung die extrem scharfen Gradienten, die sowohl bei der Stoßwellen-, als auch der Flammenausbreitung auftreten, nicht durch numerische Fehler verschmiert werden.

Um die Ausbreitung der Flammenfront als Diskontinuität zu realisieren, wird ein Skalarenfeld $G(\vec{x}, t)$ eingeführt, dessen Isoskalar $G = G_0$ mit der Oberfläche der Flamme zusammenfällt, weshalb dieser Ansatz häufig auch als *Level-Set-Approach* bezeichnet wird. Das transiente Skalarenfeld wird durch die von Markstein [Mar64] vorgeschlagene Transportgleichung

$$\frac{\partial G}{\partial t} + \vec{v}_u \cdot \nabla G = s |\nabla G| \quad (3.3.13)$$

berechnet. Diese Gleichung, häufig auch *G-Gleichung* genannt, zeichnet sich dadurch aus, dass sie keinen diffusiven Transportterm besitzt. Die diffusiven Einflüsse zur Flammenausbreitung sowie die chemische Reaktionsrate sind bereits im ersten Term auf der rechten Seite von Gleichung 3.3.13, in der Vorgabe der Brenngeschwindigkeit s , enthalten.

Ein wichtiger Punkt bei der Umsetzung des Flammenverfolgungsmodells ist die Erfassung der Rückkopplung der verfolgten Front auf das umgebende Strömungsfeld. Dies geschieht durch das Erzwingen des Diskontinuitätsprungs der Strömungsgrößen bei $G(\vec{x}, t) = G_0$, durch die Rankine-Hugoniot Beziehungen (s. u.a. [Kuo86]), die einen eindeutigen Zusammenhang zwischen den Zuständen vor und hinter der Flammenfront für eine laminare planare Flamme definieren. Wird somit eine Flamme betrachtet, welche eine laminare Flammenstruktur aufweist, kann der Sprung der Strömungsgrößen über die Flammenfront vorgegeben werden.

Peters [Pet92] zeigt, dass mit Gleichung 3.3.13 unter Verwendung der laminaren Brenngeschwindigkeit $s = s_L$ Lösungen für die laminare Flammenausbreitung berechnet werden können. Werden im Ansatz für die laminare Brenngeschwindigkeit die Effekte der Flammenstreckung nach Gleichung 2.1.18 berücksichtigt, können auch laminare Flammeninstabilitäten erfasst werden.

Eine Erweiterung für turbulente Flammen ist möglich, wenn Gleichung 3.3.13 in einer analogen Form für eine effektive mittlere Flammenoberfläche an der Stelle $\overline{G}(\vec{x}, t) = \overline{G}_0$ gelöst wird. An die Stelle der laminaren Brenngeschwindigkeit tritt die turbulente Brenngeschwindigkeit $s = s_t$. Zur Bestimmung von s_t wird auf turbulente Brenngesetze zurückgegriffen (siehe Kapitel 2.3.3). Eine ausführliche Beschreibung der Realisierung des Flammenverfolgungsmodells für turbulente Flammenfronten findet sich bei Smiljanovski et al. [SMK97]).

Moser [Mos97] zeigt, dass die Anwendung des Flammenverfolgungsmodells auf Flammenausbreitungsprozesse unter dem Einfluss von Hindernissen für magere Wasserstoff-Luft-Gemische in großskaligen Geometrien zu guten Ergebnissen führt. Es ist jedoch anzumerken, dass dieses Modell prinzipiell nur für die Bereiche des modifizierten Borghi-Diagramms gültig ist, bei denen die laminare Reaktionszone nicht durch turbulente Mischungsvorgänge beeinflusst wird (Flamelet-Bereich).

4 Modellierung der Verbrennung im Explosionsrohr

Die Schwierigkeit bei der numerischen Simulation von deflagrativ propagierenden Flammen in geschlossenen Röhren mit vorgemischten Reaktionspartnern besteht darin, dass verschiedene chemische bzw. physikalische Phänomene berücksichtigt werden müssen. Zu unterscheiden sind hierbei die Zündung des Gemisches durch die Zündkerze, der laminare Flammenanlauf, der Umschlag vom laminaren in den turbulenten Bereich sowie die anschließende turbulente Flammenausbreitung, bei der je nach untersuchtem Brennstoff, Brennstoffkonzentration, Skalierung der Geometrie sowie Blockierrate und Art der Hindernisse unterschiedliche turbulente Brennregimes (s. Kapitel 2.3.2) auftreten können. Da es kein Verbrennungsmodell gibt, welches in der Lage ist, alle beschriebenen Phänomene zu erfassen, ist zur Simulation des vollständigen Verbrennungsvorgangs im Explosionsrohr eine differenzierte Vorgehensweise nötig. Dabei werden der Zünd- und der Flammenanlaufprozess, wie in Kapitel 4.1 beschrieben, stark vereinfacht und unabhängig vom Verbrennungsmodell betrachtet. Zur Berücksichtigung von verschiedenen turbulenten Brennregimes werden in der vorliegenden Arbeit generell zwei, auf unterschiedlichen Ansätzen beruhende Verbrennungsmodelle angewandt.

Um Verbrennungsvorgänge im Flamelet-Bereich optimal beschreiben zu können, wird der auf dem Formalismus von Bray, Moss und Libby beruhende Ansatz [BLM85] für die Beschreibung der zeitlich gemittelten Reaktionsrate ausgewählt. Dieser Ansatz, der eine schnelle Chemie voraussetzt, wird im Kapitel 4.3 ausführlich beschrieben.

Besitzen chemische Prozesse, wie z.B. bei Verbrennungsvorgängen im *quenching* Regime, einen entscheidenden Einfluss auf die zeitlich gemittelte Reaktionsrate, ergeben sich durch die Verwendung des BML-Modells in der Standardform deutliche Fehler. Eine Möglichkeit, *quenching*-Effekte mit dem BML-Ansatz zu berücksichtigen, ist, das Modell um eine Löschkfunktion zu erweitern (s. Kapitel 3.3). Es ist jedoch fraglich, ob sich damit z.B. *hot jet ignition*-Prozesse, wie sie im *quenching* Regime auftreten, darstellen lassen, da die Basis der zeitlich gemittelten Reaktionsrate weiterhin in Abhängigkeit der turbulenten Durchmischung berechnet wird.

In der vorliegenden Arbeit wird davon ausgegangen, dass zur geeigneten Beschreibung von Verbrennungsprozessen im *quenching*-Regime chemische Vorgänge möglichst detailliert berücksichtigt werden müssen. Wie der Überblick über die vorgestellten Verbrennungsmodelle (s. Kapitel 3.3) zeigt, berechnet nur das PDF-Modell die zeitlich gemittelte Reaktionsrate auf der Basis eines chemischen Reaktionsmechanismus und ist somit in der Lage, chemische Einflüsse direkt abzubilden. In dieser Arbeit wird deshalb zur Simulation von turbulenten Flammenausbreitungsvorgängen alternativ zum BML-Modell das PDF-Modell verwendet. Dieses wird speziell für magere, vorgemischte Wasserstoff-Luft-Gemische angepasst und auf den Bereich der dünnen und aufgebrochenen Reaktionszonen optimiert. Näher beschrieben wird dieses Modell in Kapitel 4.2.

4.1 Zündprozess und laminarer Anlauf

Die Beschreibung des Zündprozesses erfordert, einen detaillierten chemischen Reaktionsmechanismus vorzugeben und die kleinsten chemischen Zeitskalen aufzulösen. Bielert [Bie99] zeigt, wie die Induzierung einer Flamme in einem vorgemischtem Wasserstoff-Luft-Gemisch durch eine Zündkerze berechnet werden kann und welche Zündverzugszeiten dabei je nach Gemischzusammensetzung auftreten. Da jedoch angenommen wird, dass der Zündprozess keine Auswirkung auf die spätere Entwicklung der turbulenten Flammenfront besitzt¹⁰, wird dieser nicht explizit abgebildet.

Bereits in nicht reaktiven Strömungen stellt die Berechnung des Umschlags einer laminaren in eine turbulente Strömung ein großes Problem dar. Dies wird deutlich erschwert, wenn zusätzlich Verbrennungsvorgänge berücksichtigt werden, da sowohl laminare Flammeninstabilitäten als auch die Expansionsströmung vor der Flamme Turbulenz erzeugen und somit den Umschlag einer laminaren in eine turbulent propagierende Flamme bewirken können. Es empfiehlt sich deshalb von Anfang an turbulent zu rechnen und den Zündprozess sowie den laminaren Anlaufvorgang in einer geeigneten Initialisierung zu berücksichtigen. Die genaue Vorgehensweise wird in Kapitel 6.2 beschrieben.

¹⁰Diese Annahme ist nur gültig wenn das Gemisch durch eine schwache Zündquelle, wie z.B. eine Zündkerze gezündet wird.

4.2 PDF-Formulierung

4.2.1 Reduzierung auf eine Fortschrittsvariable

In der vorliegenden Arbeit wird davon ausgegangen, dass der Verbrennungsprozess vollständig durch die Reaktionsfortschrittsvariable c beschrieben werden kann. Ausgangspunkt der Reduzierung des chemischen Systems auf eine Fortschrittsvariable ist die Betrachtung der Komplexreaktion



Dabei entsprechen Y_{H_2} , Y_{O_2} und Y_{H_2O} den Massenbrüchen für Wasserstoff, Sauerstoff und dem Reaktionsprodukt Wasser. Als inerte Größe tritt bei der Verbrennung eines Wasserstoff-Luft-Gemisches Stickstoff mit dem Massenbruch Y_{N_2} auf. Die Größe r_f ist das sogenannte stöchiometrische Massenverhältnis und kann mit den Reaktionsordnungen ν'_{H_2} und ν'_{O_2} sowie den molaren Massen M_{H_2} und M_{O_2} durch

$$r_f = \frac{M_{O_2} \nu'_{O_2}}{M_{H_2} \nu'_{H_2}} \approx 8. \quad (4.2.2)$$

abgeschätzt werden.

Wird der Reaktionsfortschritt wie in Gleichung 3.3.1 durch

$$c = \frac{Y_{H_2O}}{Y_{H_2O,\infty}}, \quad (4.2.3)$$

definiert, so gilt unter der Annahme, dass sich die Reaktion stets im Gleichgewicht befindet:

$$Y_{H_2} = Y_{H_2,0} - \frac{1}{1 + r_f} c Y_{H_2O,\infty} \quad (4.2.4)$$

$$Y_{O_2} = Y_{O_2,0} - \frac{r_f}{1 + r_f} c Y_{H_2O,\infty} \quad (4.2.5)$$

$$Y_{N_2} = 1 - (Y_{O_2,0} + Y_{H_2,0}). \quad (4.2.6)$$

In diesem Ansatz wird davon ausgegangen, dass sich im Ausgangsgemisch kein Reaktionsprodukt befindet, d.h. $Y_{H_2O,0} = 0$ gilt. Der Index 0 kennzeichnet die Zustandsgrößen des Gemisches vor der Verbrennung, der Index ∞ den Zustand nach der vollständigen Verbrennung.

Wird durch die Reaktionsfortschrittsvariable eine propagierende Flamme beschrieben und eine allgemeine Transportgleichung für c gelöst, so implizieren die in Gleichung 4.2.4 bis 4.2.6 aufgeführten Korrelationen eine einheitliche Schmidt-Zahl der Stoffe, d.h. $Sc_{H_2} = Sc_{O_2} = Sc_{H_2O} = Sc_{N_2} = \text{konstant}$.

Ausgehend von der Temperatur zu Beginn des Verbrennungsprozesses T_0 und der Reaktionsenthalpie Δ_{H_2O} kann unter der Annahme, dass die Verbrennung adiabat abläuft der formelle Zusammenhang

$$\int_{T_0}^T c_p dT = \Delta_{H_2O} c Y_{H_2O,\infty} \quad (4.2.7)$$

abgeleitet werden. Für eine gemittelte spezifische Wärmekapazität \bar{c}_p ergibt sich daraus mit dem Wärmefreisetzungsparameter

$$\tau = \frac{\Delta_{H_2O} Y_{H_2O,\infty}}{\bar{c}_p T_0} \quad (4.2.8)$$

die explizite Beziehung zwischen dem Reaktionsfortschritt und der Temperatur:

$$T(c) = T_0(1 + \tau c) . \quad (4.2.9)$$

Bei einer propagierenden Flamme, die durch eine Transportgleichung für c beschrieben wird, liegt diesem Zusammenhang auch die Annahme zugrunde, dass für das Verhältnis der effektiven Diffusivitäten von Temperatur und Stoff vereinfachend $Le_i = 1$ gilt. Zudem wird dabei der Dufour-Effekt, der den Wärmetransport aufgrund von Konzentrationsgradienten beschreibt und somit einen Einfluss auf die Temperaturentwicklung besitzt, vernachlässigt.

Der anteilmäßige Anstieg der Temperatur, der aus einer vollständigen Umwandlung von Bewegungsenergie in Wärme resultiert, kann durch

$$\frac{\Delta T}{T} \approx \frac{\frac{1}{2}U^2}{c_p T} \approx \text{Ma}^2 \frac{1}{2}(\kappa - 1). \quad (4.2.10)$$

abgeschätzt werden. Es ist leicht ersichtlich, dass für Mach-Zahlen $\text{Ma} \ll 1$ die auf diese Weise transferierte Energie im Vergleich zu der von der Verbrennung zugeführten Energie vernachlässigt werden kann. Findet die Verbrennung hingegen in einer Strömung mit großen Machzahlen statt, ist die direkte Korrelation zwischen T und c nach Gleichung 4.2.9 nicht mehr erfüllt.

Um eine direkte Korrelation zwischen der Dichte und dem Reaktionsfortschritt ableiten zu können, muss angenommen werden, dass die Verbrennung bei konstantem Druckniveau erfolgt. Dies ist bei deflagrativen Verbrennungsprozessen gegeben. Druckfluktuationen die aufgrund von turbulenten Schwankungsbewegungen entstehen, können durch

$$\frac{\Delta p}{p} \propto \text{Ma}^2 \quad (4.2.11)$$

abgeschätzt und somit in Strömungen niedriger Mach-Zahl vernachlässigt werden. Für die Zustandsgleichung folgt

$$p = p_0 = \frac{\varrho R_a T}{\bar{M}}. \quad (4.2.12)$$

Darauf basierend kann unter der Vorgabe, dass \bar{M} als konstante molare Masse betrachtet wird und der Verwendung von Gleichung 4.2.9 der Zusammenhang

$$\varrho = \frac{\varrho_0}{1 + \tau c} \quad (4.2.13)$$

abgeleitet werden.

Durch das Ersetzen der Größen Y_{H_2O} , Y_{H_2} , Y_{O_2} , T und ϱ mit den jeweiligen funktionellen Abhängigkeiten von c , kann die Reaktionsrate der Komplexreaktion (Gleichung 2.1.2) und somit auch die Produktionsrate von c als

reine Funktion der Fortschrittsvariablen dargestellt werden. Es gilt

$$\omega_{H_2O}(c) = M_{H_2O} \nu''_{H_2O} A e^{\frac{-E}{R_a T_0 (1+\tau c)}} \left(\frac{\rho_0}{1+\tau c} \right)^{\nu'_{H_2} + \nu'_{O_2}} \frac{1}{M_{H_2}^{\nu'_{H_2}}} \frac{1}{M_{O_2}^{\nu'_{O_2}}} \cdot \left(Y_{H_2,0} - \frac{1}{1+r_f} c Y_{H_2O,\infty} \right)^{\nu'_{H_2}} \left(Y_{O_2,0} - \frac{r_f}{1+r_f} c Y_{H_2O,\infty} \right)^{\nu'_{O_2}}. \quad (4.2.14)$$

Die Funktion $\omega_{H_2O}(c)$ wird im folgenden als ‐laminare Reaktionsrate‐ bezeichnet, da sie keinen Einfluss von turbulenten Schwankungsbewegungen berücksichtigt.

Basierend auf der laminaren Reaktionsrate $\omega_{H_2O}(c)$ reduziert sich der Ansatz der PDF-Formulierung in Gleichung 3.3.12 auf

$$\bar{\omega}_{H_2O}(\vec{x}, t) = \int_0^1 \omega_{H_2O}(c) P(c; \vec{x}, t) dc. \quad (4.2.15)$$

Dabei entspricht $P(c; \vec{x}, t)$ der eindimensionalen Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung von c . Die Integrationsgrenzen von 0 bis 1 ergeben sich aus der Definition von c in Gleichung 4.2.3. Da es sich bei den untersuchten Verbrennungsprozessen immer um eine orts- und zeitabhängige Lösung handelt, wird im folgenden auf die Notation \vec{x}, t verzichtet.

4.2.2 Die laminare Reaktionsrate

Die Berechnung der Reaktionsrate für die Globalreaktion durch Gleichung 4.2.14 erfordert die Vorgabe der Parameter

- A : preexponentieller Faktor,
- E : Aktivierungsenergie,
- ν'_{H_2} , ν'_{O_2} und ν'_{H_2O} : Reaktionsordnungen für Wasserstoff, Sauerstoff und Wasser.

Im Gegensatz zu den Elementarreaktionen gibt es keine eindeutige Wahl dieser Parameter für eine Komplexreaktion. So können z.B. die Reaktionsordnungen nicht entsprechend der molekularen Grundlage mit $\nu'_{H_2} = 2$, bzw. $\nu'_{O_2} = 1$ angesetzt werden sondern auch nichtganzzahlige oder negative Werte (Inhibierung) annehmen. Verschiedene Autoren, u.a. Varma et al. [VCB86], Marathe et al. [MMJ77] und Coffee et al. [CKM83] haben vorgemischte laminare Wasserstoff-Luft-Flammen untersucht, um einen geeigneten Satz Parameter für die Komplexreaktion abzuleiten. Einen guten Überblick über die unterschiedlichen Ansätze und deren Einfluss auf die laminare Reaktionsrate gibt Durst [Dur00] in seiner Arbeit. Er zeigt, dass die verschiedenen Parametersätze, angewandt auf Gleichung 4.2.14, zu Ergebnissen führen, die um mehrere Größenordnungen voneinander differieren können. Um die verschiedenen Modelle verifizieren zu können, führt Durst eine Simulation einer frei propagierenden, laminaren Flamme mit dem Programm INSFLA¹¹ durch. Er extrahiert aus der berechneten laminaren Flammenstruktur die zum jeweiligen Reaktionsfortschritt gehörende Reaktionsrate und vergleicht diese mit den Ergebnissen, die basierend auf Gleichung 4.2.14 mit den unterschiedlichen Parametersätzen erzielt wurden. Dabei zeigt sich, dass die Parametersätze von Coffee et al. und Marathe et al. die mit INSFLA bestimmten Reaktionsraten am besten wiedergeben, da hierbei zumindest eine größenordnungsmäßige Übereinstimmung auftritt. Für die Berechnung der PDF-Reaktionsraten greift Durst jedoch auf die mit INSFLA ermittelten Reaktionsraten zurück. Diese Vorgehensweise wird in dieser Arbeit übernommen und soll im folgenden kurz erörtert werden.

In Abbildung 4.1 ist beispielhaft der mit INSFLA berechnete Verlauf ausgewählter Speziesmassenkonzentrationen für eine eindimensionale Flammenfront in einem 13Vol.-%- H_2 in Luft Gemisch dargestellt. Bei der detaillierten Simulation der laminar propagierenden Flamme wurde die Vorgabe $Le_i = 1$ für den Stofftransport aller an der Verbrennung beteiligten Spezies gestellt. Begründet werden kann dies dadurch, dass das PDF-Modell auf Bereiche des Borghi-Diagramms optimiert wird, bei welchen durch eine sehr hohe Turbulenzintensität ein Aufbrechen der Flammenfront statt-

¹¹Dieses Programm wurde von Maas [Maa88], [MW88] an der Universität Stuttgart entwickelt. Dankenswerterweise wurde dieses Programm auch für die in dieser Arbeit durchgeführten Berechnungen zur Verfügung gestellt. Da das Programm INSFLA in dieser Arbeit nur angewandt wurde, wird auf eine nähere Beschreibung der Grundlagen des Programms verzichtet.

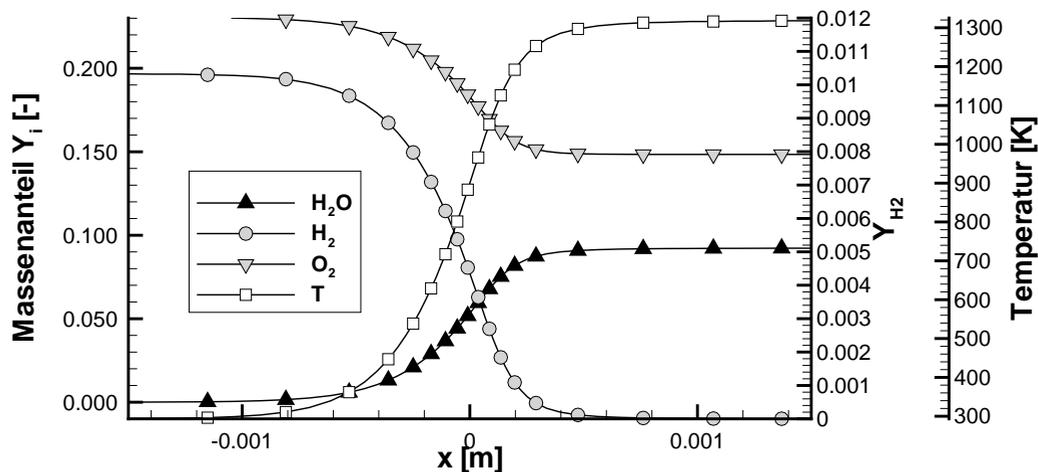


Abbildung 4.1: Verlauf von Y_{H_2O} , Y_{H_2} , Y_{O_2} und T als Funktion des Ortes für ein 13Vol.-%- H_2 in Luft Gemisch berechnet mit INSFLA.

findet (Bereich der dünnen Reaktionszonen und Bereich des homogenen Reaktors) und somit die effektive Diffusivität von turbulenten Transportvorgängen dominiert wird. Zudem stellt diese Annahme eine Grundvoraussetzung bei der Ableitung von Gleichung 4.2.14 dar. Wird aus den berechneten Verläufen der Speziesmassenkonzentrationen die Reaktionsrate ω_{H_2O} extrahiert und als Funktion des Reaktionsfortschritts ausgedrückt, so ergibt sich der in Abbildung 4.2 dargestellte Verlauf. In dieser Abbildung ist auch der Verlauf der Reaktionsrate abgebildet, der sich ergibt, wenn mit den ursprünglichen Stoff- und Wärmediffusivitäten gerechnet wird. Erwartungsgemäß führt die Annahme $Le_i = 1$ aufgrund der besseren Durchmischung von heißen Produkten mit kalten Edukten zu deutlich höheren Reaktionsraten.

In Abbildung 4.3 sind die Verläufe der Reaktionsraten für unterschiedliche Brennstoffkonzentrationen dargestellt. Daraus ist ersichtlich, dass im unterstöchiometrischen Bereich die Reaktionsraten mit der Brennstoffkonzentration zunehmen.

Für Wasserstoffkonzentrationen $Y_{H_2} < 12\%$ konnte keine laminar propagierende Flamme mit der INSFLA-Option $Le_i = 1$ berechnet werden. Dies ist

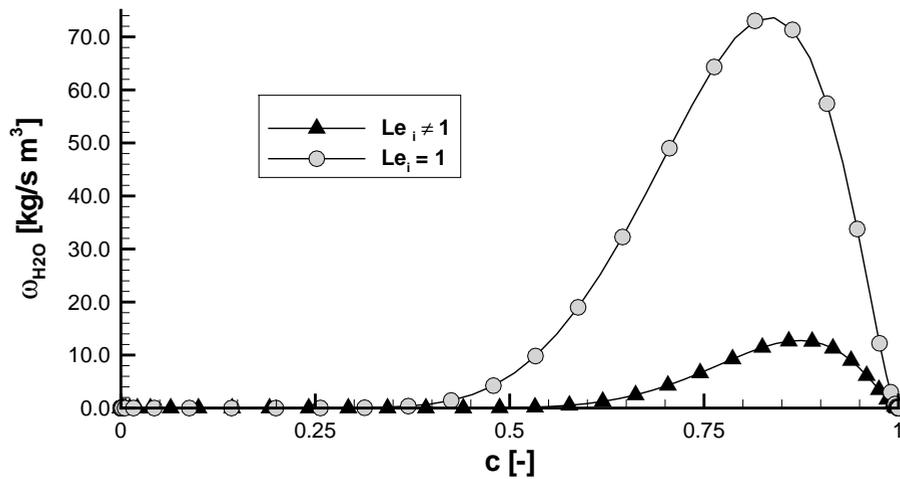


Abbildung 4.2: Reaktionsraten in Abhängigkeit der Fortschrittsvariable für ein 13Vol.-%- H_2 in Luft Gemisch. Einfluss der Vorgabe $Le_i = 1$ auf die Reaktionsraten.

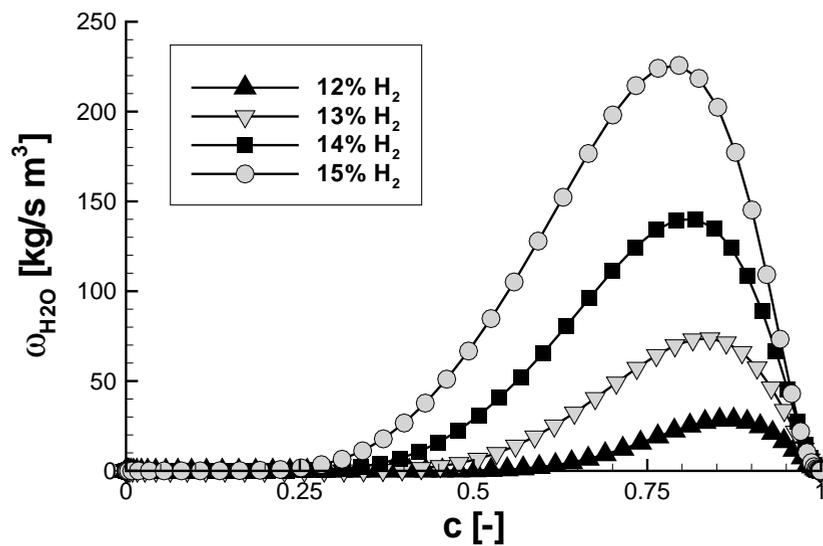


Abbildung 4.3: Reaktionsverläufe für unterschiedliche Wasserstoffkonzentrationen berechnet mit dem Programm INSFLA.

Parameter	Wert	Einheit
ν'_{H_2}	1.0	-
ν'_{O_2}	0.92	-
A	$5.14 \cdot 10^8$	$1/s \text{ (m}^3/\text{mol)}^{0.92}$
E	$57.767 \cdot 10^3$	J/mol

Tabelle 2: Parametersatz nach Marathe et al. [MMJ77].

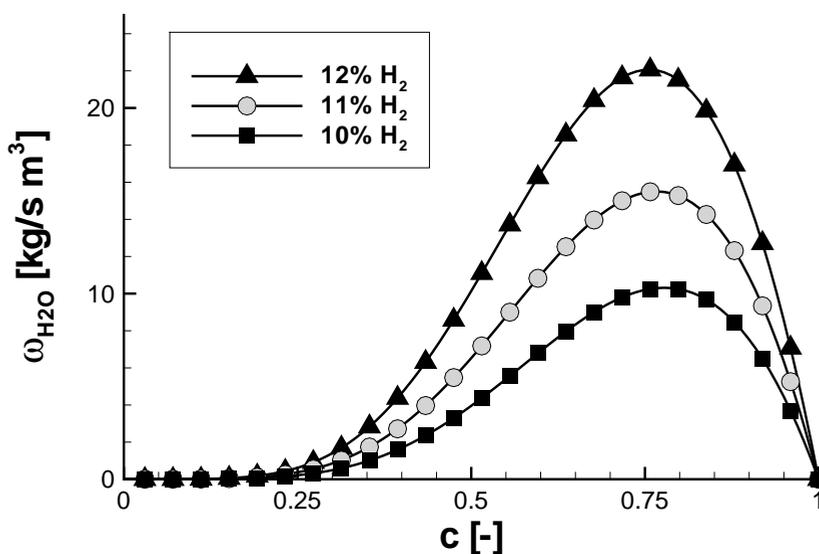


Abbildung 4.4: Reaktionsverläufe für unterschiedliche Wasserstoffkonzentrationen; berechnet basierend auf dem Ansatz nach Marathe [MMJ77].

vermutlich auf den deutlich erhöhten relativen Wärmetransport¹² zurückzuführen, der bei sehr mageren Wasserstoff-Luft-Gemischen ein Verlöschen der Flamme durch Wärmeverluste nach sich zieht. Deshalb wird zur Ermittlung der Reaktionsraten für die mageren Wasserstoff-Luft-Gemische auf Gleichung 4.2.14 mit dem Parametersatz nach Marathe et al. zurückgegriffen (s. Tabelle 2). Dieser zeichnet sich dadurch aus, dass die Parameter im Gegensatz zu denen nach Coffee oder Varma unabhängig von der Wasserstoffkonzentration sind. In Abbildung 4.4 sind die auf diese Weise ermittelten Reaktionsraten für unterschiedliche magere Wasserstoffkonzentrationen dargestellt.

¹²Für Wasserstoff-Luft-Gemische gilt $Le_{H_2} = a/D_{H_2} \approx 0,4$. Somit wird der Wärmetransport gegenüber dem Brennstofftransport durch die Vorgabe $Le_{H_2} = 1$ deutlich überschätzt.

4.2.3 Rekonstruktion der PDF

Bei der in der vorliegenden Arbeit angewandten Methode der angenommenen PDF wird eine funktionale Form der PDF vorgegeben und die lokale, zeitabhängige Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung aus den Momenten der Zufallsgrößen bestimmt. Für eine eindimensionale PDF, müssen deshalb zwei Transportgleichungen gelöst werden, um die PDF rekonstruieren zu können. Eine Transportgleichung für das erste Moment, welches der Favre-gemittelten Fortschrittsvariablen \tilde{c} (s. Gleichung 4.2.16) entspricht, und eine für das zweite zentrale Moment $\widetilde{c''^2}$, welches auch als Varianz bezeichnet wird.

Die Transportgleichung für \tilde{c} kann aus der Spezieserhaltungsgleichung für Y_{H_2O} (s. Anhang A.1) durch Division durch $Y_{H_2O,\infty}$ erhalten werden. In Favre-gemittelter Form ergibt sich unter Vernachlässigung der diffusiven Terme

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho}\tilde{c}) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho}\tilde{u}_i\tilde{c}) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\eta_t}{\text{Pr}_{t,c}} \frac{\partial \tilde{c}}{\partial x_i} \right) + \bar{\omega}_c . \quad (4.2.16)$$

Dabei entspricht $\bar{\omega}_c$ der zeitlich gemittelten Produktionsrate des Skalars c und $\text{Pr}_{t,c}$ der turbulenten Prandtl-Zahl. Die Produktionsrate $\bar{\omega}_c$ ergibt sich aus der zeitlich gemittelten Reaktionsrate $\bar{\omega}_{H_2O}$ durch den Zusammenhang:

$$\bar{\omega}_c = \frac{\bar{\omega}_{H_2O}}{Y_{H_2O,\infty}} . \quad (4.2.17)$$

Die Transportgleichung für $\widetilde{c''^2}$ wird aus der Gleichung für \tilde{c} unter Verwendung von Modellansätzen abgeleitet (s. z.B. [Hof95]) und lautet

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho}\widetilde{c''^2}) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho}\tilde{u}_i\widetilde{c''^2}) &= \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\eta_t}{\text{Pr}_{t,\text{var}}} \frac{\partial \widetilde{c''^2}}{\partial x_i} \right) + 2 \frac{\eta_t}{\text{Pr}_{t,\text{var}}} \left(\frac{\partial \tilde{c}}{\partial x_i} \right)^2 \\ &\quad - C_c \bar{\rho} \frac{\varepsilon}{k} \widetilde{c''^2} + 2 \overline{c''\omega_c} . \end{aligned} \quad (4.2.18)$$

Die Konstanten dieser Gleichung werden standardmäßig mit $\text{Pr}_{t,\text{var}} = 0.9$ und $C_c = 2.0$ [Pop79] angegeben.

In der Varianztransportgleichung treten drei verschiedene Quellterme auf, deren Bedeutung im folgenden kurz beschrieben werden soll:

- Gradientenproduktion

$$2 \frac{\eta_t}{\text{Pr}_{t,\text{var}}} \left(\frac{\partial \tilde{c}}{\partial x_i} \right)^2 \quad (4.2.19)$$

Dieser Term beschreibt die Produktion von Varianz durch den Gradienten in \tilde{c} .

- Skalardissipation

$$-\bar{\rho} C_c \frac{1}{\tau_{\text{int}}} \widetilde{c''^2} \quad (4.2.20)$$

Der Ansatz für die Skalardissipation geht zurück auf Corrsin [Cor57], der allgemein die Beziehung

$$\bar{\varepsilon}_\phi = \frac{1}{\tau_\phi} \overline{\phi'} \quad (4.2.21)$$

zur Beschreibung des Zusammenhangs zwischen einer skalaren Ungemischtheit $\overline{\phi'}$ der Größe ϕ und deren Vernichtung auf den kleinsten Skalen $\bar{\varepsilon}_\phi$ vorschlug. Das charakteristische Zeitmaß der skalaren Schwankung τ_ϕ ist dabei proportional zum charakteristischen Zeitmaß der Turbulenz, d.h. es gilt

$$\tau_\phi = C_\phi \tau_{\text{int}} . \quad (4.2.22)$$

Im Rahmen dieser Arbeit wird die Übertragbarkeit dieses Ansatzes auf Favre gemittelte Größen sowie die detaillierte Anpassung des Vorfaktors C_ϕ nicht näher untersucht. Stattdessen wird die u.a. von Jones und Whitelaw [JW82] vorgeschlagene Form aus Gleichung 4.2.20 mit dem empirischen Standardwert $C_c = 2.0$ übernommen.

- Quellterm durch Reaktion

$$2 \overline{c'' \omega_c} \quad (4.2.23)$$

Aufgrund der Produktion von \tilde{c} wird bei niedrigem Reaktionsfortschritt Varianz produziert, wohingegen bei hohem Reaktionsfortschritt der Zustand homogenisiert und somit Varianz vernichtet wird. Der Quellterm $\overline{c''\omega_c}$ beschreibt dieses Verhalten und wird mit der PDF $P(c)$ durch

$$\overline{c''\omega_c} = \int_0^1 \omega_c(c) c P(c) dc - \tilde{c}\overline{\omega_c}(c) \quad (4.2.24)$$

bestimmt. Für den Quellterm gilt zudem:

$$\overline{c''\omega_c} = \frac{\overline{c''w_{H_2O}}}{Y_{H_2O,\infty}} . \quad (4.2.25)$$

Sind die Momente der Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung bekannt, kann basierend auf einer vorgegebenen Form die PDF bestimmt werden. Standardmäßig gilt für die Definition des Erwartungswerts und der Varianz einer stetig verteilten Zufallsgröße [Bro89]

$$\overline{\Phi} = \int_0^1 \Phi P(\Phi) d\Phi, \quad (4.2.26)$$

bzw.

$$\overline{\Phi'^2} = \int_0^1 (\Phi - \overline{\Phi})^2 P(\Phi) d\Phi . \quad (4.2.27)$$

Wird diese Vorgehensweise jedoch auf Favre gemittelte Größen angewandt, ergibt sich durch das Lösen des Gleichungssystems

$$\tilde{c} = \int_0^1 c \tilde{P}(c) dc \quad (4.2.28)$$

$$\widetilde{c''^2} = \int_0^1 (c - \tilde{c})^2 \tilde{P}(c) dc \quad (4.2.29)$$

nach den Parametern der jeweiligen verwendeten PDF (s. Kapitel 4.2.4), eine sogenannte Favre-PDF $\tilde{P}(c)$, u.a. Bilger [Bil75]. Auf der Basis der

Favre-PDF berechnet sich die zeitlich gemittelte Produktionsrate anstelle von Gleichung 4.2.15 durch den Ansatz:

$$\bar{\omega}_c = \bar{\varrho} \int_0^1 \frac{1}{\varrho(c)} \omega_c(c) \tilde{P}(c) dc, \quad (4.2.30)$$

u.a. Durst [Dur00]. Wird dabei die zeitlich gemittelte Dichte nach Bray [Bra80] durch

$$\bar{\varrho} = \frac{\varrho_0}{1 + \tau \tilde{c}}, \quad (4.2.31)$$

und $\varrho(c)$ durch Gleichung 4.2.13 ersetzt, ergibt sich schließlich

$$\bar{\omega}_c = \frac{1}{1 + \tau \tilde{c}} \int_0^1 (1 + \tau c) \omega_c(c) \tilde{P}(c) dc. \quad (4.2.32)$$

Entsprechend der zeitlich gemittelten Reaktionsrate muss auch die Bestimmung des Quellterms $\overline{c''\omega_c}$ an die Favre-PDF angepasst werden, wodurch

$$\overline{c''\omega_c} = \frac{1}{1 + \tau \tilde{c}} \int_0^1 (1 + \tau c) \omega_c(c) c \tilde{P}(c) dc - \tilde{c} \bar{\omega}_c(c) \quad (4.2.33)$$

folgt.

4.2.4 Funktionale Form der PDF

In der Literatur findet sich kein Konsens, was die Wahl der funktionalen Form einer PDF zur Beschreibung von Verbrennungsvorgängen betrifft. Je nach Flammentyp schlagen beispielsweise Bray [Bra80] und Borghi [Bor88] unterschiedliche funktionale Formen vor. Prinzipiell unterliegt die eindimensionale PDF neben der Normalisierungsbedingung nur der Anforderung, auf den Bereich $0 \leq c \leq 1$ begrenzt zu sein. Um einen Überblick über die wichtigsten Formen zu bekommen, werden in den folgenden Kapiteln mögliche Funktionen vorgestellt und in Kapitel 6.3 der Einfluss auf das Ergebnis der Verbrennungssimulation untersucht.

β -PDF

Um Aufschluss über die Form der PDF zu bekommen, verglich Girimaji [Gir91] die Berechnung der turbulenten, inerten Mischung zweier Skalare basierend auf einer direkten numerischen Simulation mit der Berechnung mit einem zeitlich gemittelten Verfahren unter Verwendung einer angenommenen PDF Methode. Als PDF wurde eine β -Funktion ausgewählt. Es zeigte sich, dass das PDF Modell die Mischung der Skalare sehr gut wiedergibt und somit die Verwendung der β -Funktion für die Berechnung von reinen Mischungsvorgängen in Gasen geeignet ist. Trotz der Tatsache, dass dies nicht ohne weiteres auf reaktive Strömungen übertragbar ist, wird diese Form der PDF auch für vorgemischte Verbrennungsvorgänge verwendet (s. z.B. Bohn et al. [BL99], Jones et al. [JM80]). Der Mischungsprozess wird dabei als Mischung von vollständig verbranntem, in Reaktion befindlichem und unverbranntem Gas interpretiert.

Die β -Funktion ist allgemein definiert durch

$$P(c) = \frac{\Gamma(\beta_1 + \beta_2)}{\Gamma(\beta_1)\Gamma(\beta_2)} c^{\beta_1-1} (1-c)^{\beta_2-1} . \quad (4.2.34)$$

Für die in diesem Ansatz vorkommende Γ -Funktion gilt

$$\Gamma(\beta) = \int_0^{\infty} x^{\beta-1} e^{-x} dx . \quad (4.2.35)$$

Bronstein et al. [Bro89] geben, um den Lösungsprozess zu vereinfachen, Wertetabellen für die Γ -Funktion vor. Die Parameter der β -Funktion sind β_1 und β_2 .

Der große Vorteil dieser Funktion ist, dass die Parameter zur Rekonstruktion der Favre-PDF $\tilde{P}(c)$ in einer expliziten Weise aus den ersten zwei Momenten der Dichteverteilung berechnet werden können und somit kein aufwendiges Lösungsverfahren des Gleichungssystems, bestehend aus den Gleichungen 4.2.28 und 4.2.29, nötig ist. Es gilt:

$$\beta_1 = \tilde{c} \left[\frac{\tilde{c}(1-\tilde{c})}{\tilde{c}^{\prime 2}} - 1 \right] \quad (4.2.36)$$

und

$$\beta_2 = (1 - \tilde{c}) \left[\frac{\tilde{c}(1 - \tilde{c})}{\widetilde{c'^2}} - 1 \right]. \quad (4.2.37)$$

In Abbildung 4.5 sind beispielhafte Verläufe der β -PDF für die Erwartungswerte $\tilde{c} = 0.5$ und $\tilde{c} = 0.7$ dargestellt. Der Varianzbereich wird dabei durch die normierte Varianz

$$g = \frac{\widetilde{c'^2}}{\tilde{c}(1 - \tilde{c})}, \quad (4.2.38)$$

mit dem Wertebereich $0 < g < 1$ abgebildet. Für die Werte $g = 0$ bzw. $g = 1$ treten Singularitäten auf, die sich durch eine Doppeldeltafunktion bei $c = 0$ und $c = 1$ bzw. eine Deltafunktion beim jeweiligen Erwartungswert darstellen lassen. In den Abbildungen sind deshalb im Sinne einer übersichtlichen Darstellung die Bereiche $c \rightarrow 0$ und $c \rightarrow 1$ sowie $g \rightarrow 0$ und $g \rightarrow 1$ nicht berücksichtigt.

Es ist wichtig zu bemerken, dass, wie aus Abbildung 4.5 ersichtlich, für geringe Varianzen (d.h. für $g \ll 1$) die Form der β -PDF die Gestalt einer Gaußverteilung annimmt. Girimaji weist dies in [Gir91]) analytisch nach.

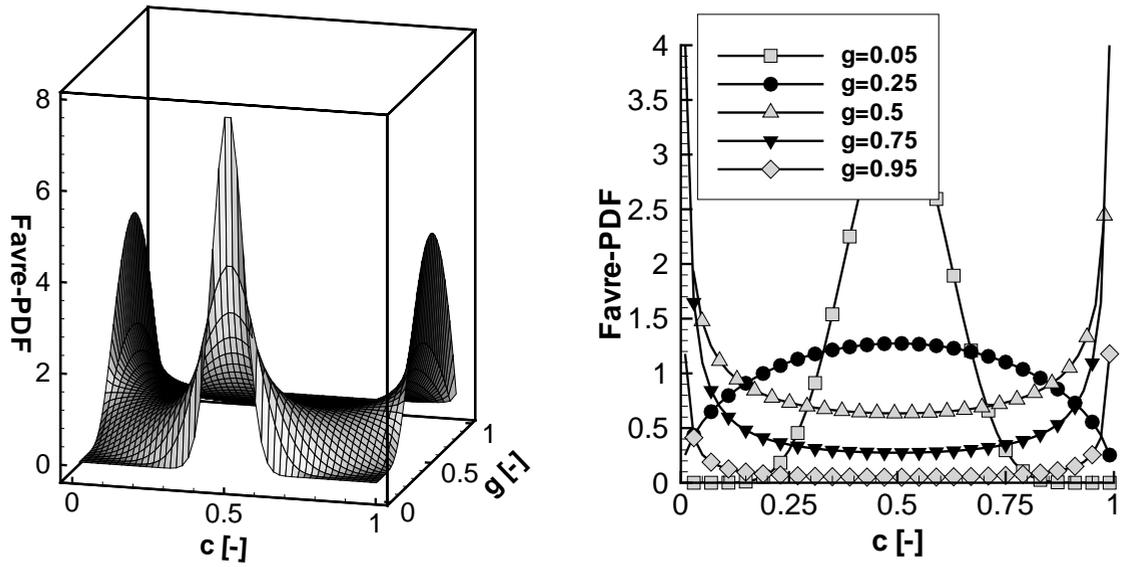
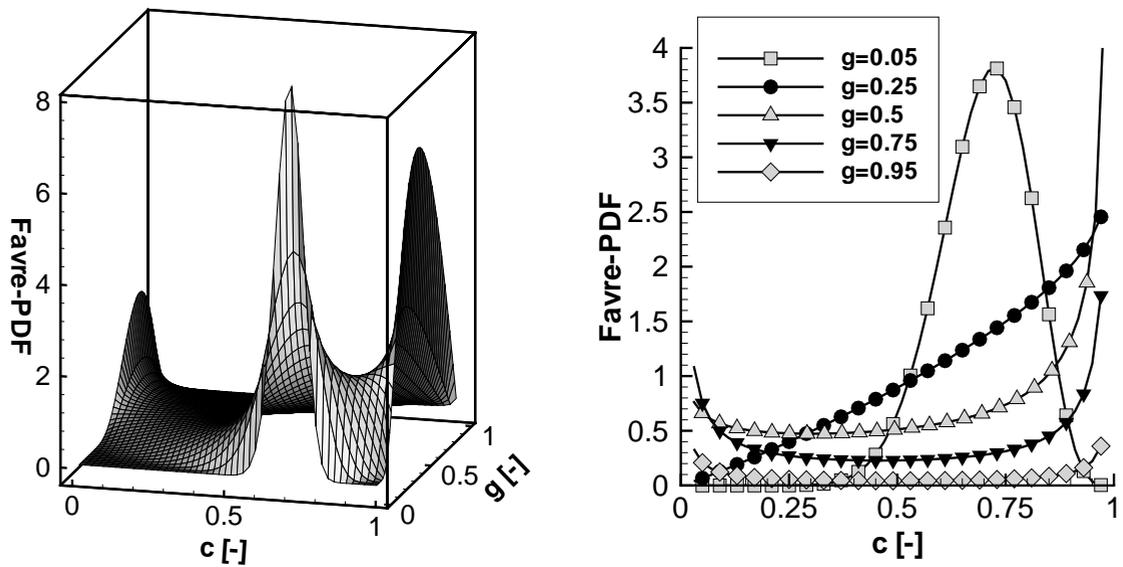
„Gestutzte“ Gauß-PDF

Lockwood and Naguib [LN75] schlagen eine „gestutzte“ Gaußfunktion als PDF für die Berechnung von turbulenten Diffusionsflammen vor. Durst [Dur00] überträgt diese Form der PDF auf die Berechnung einer vorgemischten Wasserstoff-Luft-Flamme. Ausgehend von der ursprünglichen Form der Gaußfunktion

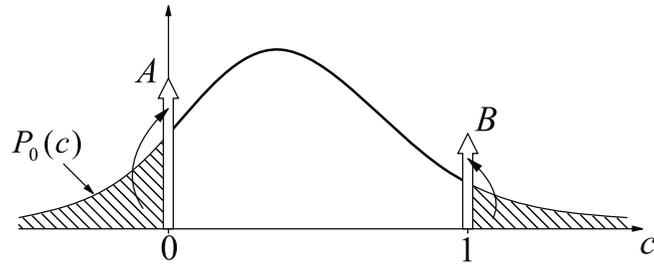
$$P_0(c) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{c - \mu}{\sigma} \right)^2 \right] \quad (4.2.39)$$

werden im ersten Schritt die Wahrscheinlichkeiten der nicht definierten Bereiche $c \leq 0$ bzw. $c \geq 1$ aufintegriert und als Wahrscheinlichkeit A bzw. B der diskreten Zufallsgröße $c = 0$ bzw. $c = 1$ dargestellt (s. Abbildung 4.6 Schritt I). Es gilt

$$A = \int_{-\infty}^0 P_0(c) dc \quad \text{und} \quad B = \int_1^{\infty} P_0(c) dc. \quad (4.2.40)$$

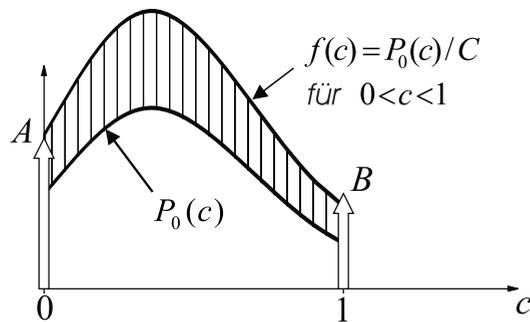
(a) Erwartungswert $\tilde{c} = 0.5$ (b) Erwartungswert $\tilde{c} = 0.7$ Abbildung 4.5: Favre-PDF auf der Basis einer β -Funktion.

Schritt I



$$P(c) = A \delta(c) + B \delta(1-c) + P_0(c) [H(c) - H(c-1)]$$

Schritt II



$$P(c) = A \delta(c) + B \delta(1-c) + C f(c) [H(c) - H(c-1)]$$

Abbildung 4.6: Bestimmung der „gestutzten“ Gaußfunktion als PDF.

Bray [Bra80] schlägt vor, in einem zweiten Schritt die PDF in dem Bereich $0 < c < 1$ mit der Wahrscheinlichkeit C so zu normieren, dass

$$\int_0^1 \frac{P_0(c)}{C} dc = \int_0^1 f(c) dc = 1 \quad (4.2.41)$$

gilt (s. Abbildung 4.6 Schritt II).

Es ergibt sich eine bis auf die Ränder stetige Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion, die mathematisch mit Hilfe der Dirac Deltafunktionen $\delta(c)$ und der Heavisidefunktion $H(c)$ durch

$$P(c) = A\delta(c) + B\delta(1-c) + C f(c)[H(c) - H(c-1)] \quad (4.2.42)$$

dargestellt werden kann. Dabei sind A , B und C die Wahrscheinlichkeiten dafür, unverbranntes, vollständig verbranntes und in Reaktion befindliches Gemisch vorzufinden. Durch die Normalisierungsbedingung für Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen

$$\int_{-\infty}^{\infty} P(c)dc = 1, \quad (4.2.43)$$

folgt

$$A + B + C = 1 \quad (4.2.44)$$

Die Werte A und B sind somit ein Maß für die augenblickliche Flammenschichtung (Intermittenz). Besteht das Gemisch aus einer Schichtung von unverbrannten und vollständig verbrannten Bereichen, so gilt $A + B \approx 1$ ($C \approx 0$). Befindet sich das gesamte Gemisch in Reaktion gilt $A + B \approx 0$ ($C \approx 1$). Die Wahrscheinlichkeit C stellt ein Maß für den momentanen Flammenanteil in der Mischung dar, dessen Zusammensetzung (Wahrscheinlichkeitsverteilung) durch die Funktion $f(c)$ beschrieben wird. Es ist wichtig zu bemerken, dass sich für sehr große Varianzen die Wahrscheinlichkeitsdichte in die Spitzen A und B verschiebt, was somit für das Vorhandensein dünner Flammenfronten steht.

Da die laminare Reaktionsrate $\omega_c(c)$ für die Werte $c = 0$ und $c = 1$ gleich null ist, tragen die Spitzen A und B nichts zur Reaktionsrate bei, wodurch sich die Berechnung der zeitlich gemittelten Produktionsrate durch das Faltungsintegral nach Gleichung 4.2.15 zu

$$\bar{\omega}_c = C \int_0^1 \omega_c(c) f(c) dc \quad (4.2.45)$$

vereinfacht.

Die Parameter der „gestutzten“ Gaußverteilung (Gleichung 4.2.42) sind μ und σ . Werden diese Parameter auf der Basis von Gleichung 4.2.28 und 4.2.29 bestimmt, so ergibt sich die Favre-PDF $\tilde{P}(c)$ für die „gestutzte“ Gaußverteilung. Für die genaue Vorgehensweise zur Lösung des impliziten Gleichungssystems wird auf die Arbeit von Durst [Dur00] verwiesen.

Auf der Basis einer Favre-PDF folgt nach Gleichung 4.2.32 somit für die Berechnung der zeitlich gemittelten Reaktionsrate:

$$\bar{\omega}_c = C \frac{1}{1 + \tau \tilde{c}} \int_0^1 (1 + \tau c) \omega_c(c) \tilde{f}(c) dc . \quad (4.2.46)$$

In Abbildung 4.7 sind beispielhafte Verläufe für die Favre-PDF basierend auf der „gestutzten“ Gaußverteilung für die Erwartungswerte $\tilde{c} = 0.5$ und $\tilde{c} = 0.7$ dargestellt. Die Spitzen bei A und B sind aufgrund der Visualisierbarkeit nur angedeutet. Dadurch ist in der Abbildung 4.7 in erster Linie die Funktion $C \cdot \tilde{f}(c)$ sichtbar.

Alternative Form der PDF

Wird das PDF-Modell für Verbrennungsvorgänge im Flamelet-Bereich angewandt, so schlagen sowohl Bray [Bra80] wie auch Borghi [Bor88], eine eigens für diesen Bereich optimierte funktionale Form der PDF vor. Diese ist analog zu Gleichung 4.2.42, d.h. sie setzt sich ebenfalls aus den drei Wahrscheinlichkeiten A , B und C zusammen. In diesem Fall wird jedoch die Wahrscheinlichkeitsverteilung des Flammenanteils $f(c)$ nicht aus den berechneten Momenten der Zufallsgröße c sondern aus der Betrachtung der exakten Verteilung von c im dünnen Flamelet gewonnen. Hierfür wird zunächst der auf die Flammendicke bezogene Weg senkrecht zur laminaren Flammenfront

$$\xi = \frac{x}{d_t} \quad (4.2.47)$$

eingeführt. Die Dichteverteilung von c in der laminaren Flammenfront orthogonal zur Oberfläche kann durch

$$f(c) = \left(\frac{dc}{d\xi} \right)^{-1} \quad (4.2.48)$$

bestimmt werden, was zugleich der PDF für den Flammenanteil entspricht. Durch diesen Ansatz ist zudem gewährleistet, dass die Normalisierungsbedingung $\int_0^1 f(c) dc = 1$ erfüllt wird. Für die vollständige PDF folgt so-

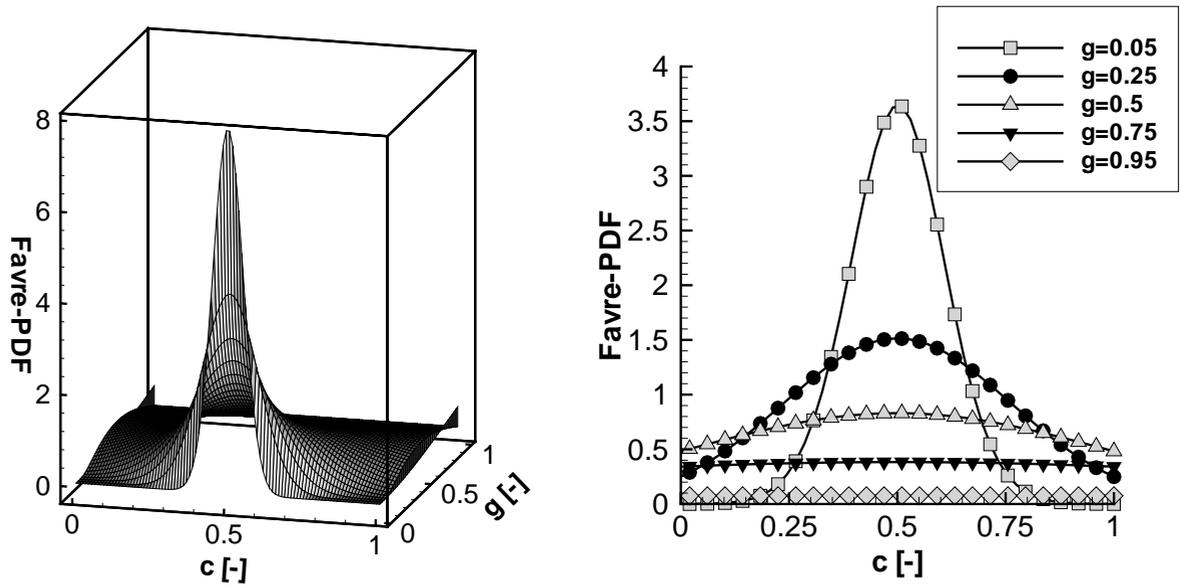
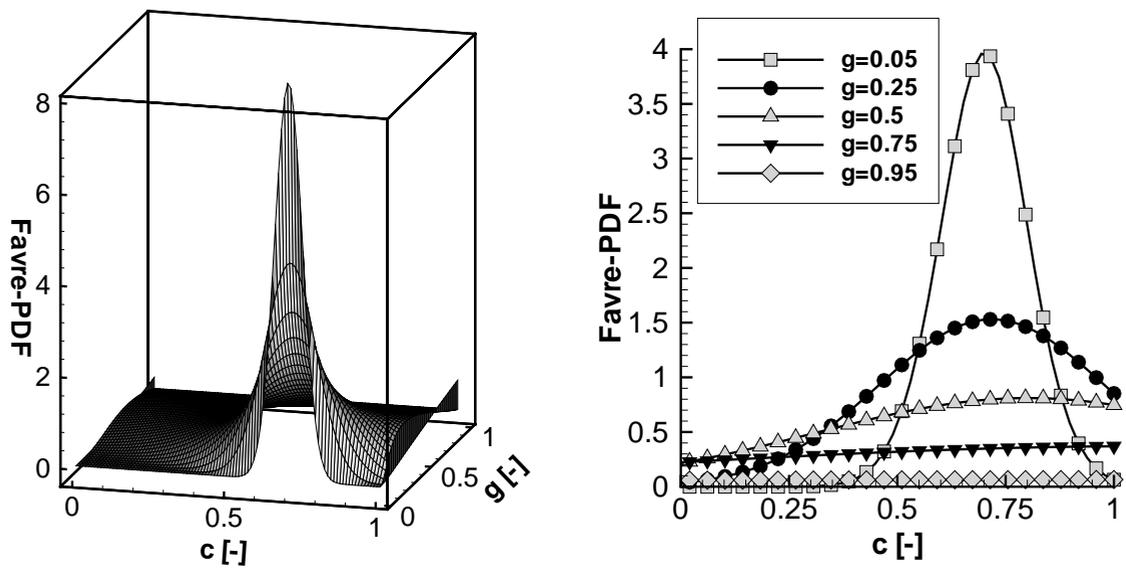
(a) Erwartungswert $\tilde{c} = 0.5$ (b) Erwartungswert $\tilde{c} = 0.7$

Abbildung 4.7: Favre-PDF auf Basis der „gestutzten“ Gauß-Funktion im Bereich $0 < c < 1$.

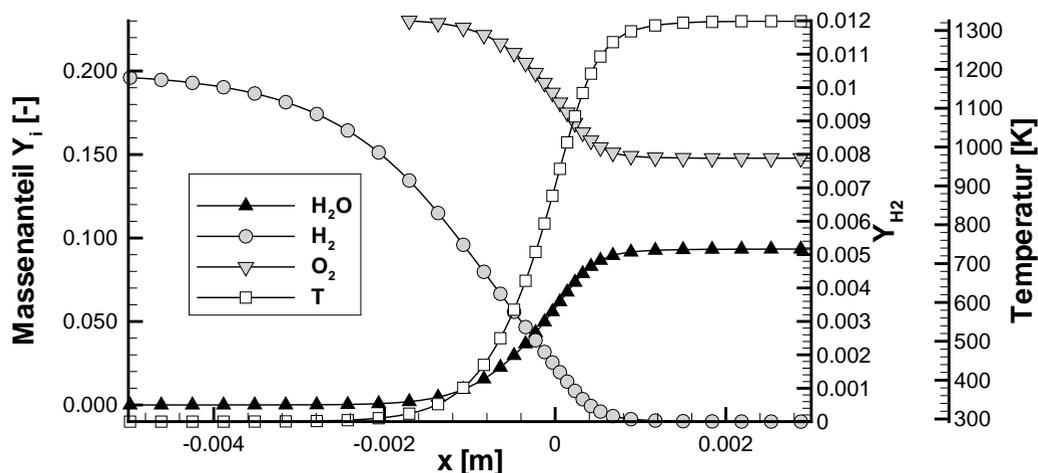


Abbildung 4.8: Verlauf von Y_{H_2O} , Y_{H_2} , Y_{O_2} und T als Funktion des Ortes für ein $13\text{vol}\% - H_2$ in Luft Gemisch.

mit unter Berücksichtigung der Wahrscheinlichkeit, vollständig verbranntes bzw. unverbranntes Gemisch vorzufinden

$$P(c) = A\delta(c) + B\delta(1 - c) + C \left(\frac{dc}{d\xi} \right)^{-1} [H(c) - H(c - 1)] . \quad (4.2.49)$$

Um die Ableitung der Funktion $f(c)$ anschaulich darzustellen, wird exemplarisch eine $13\text{Vol}\% - H_2$ in Luft Flamme untersucht. Grundlage der Bestimmung von $f(c)$ ist die detaillierte Berechnung einer laminar propagierenden Flamme mit dem Programm INSFLA. Die Berechnung basiert auf dem H_2 -Luft-Reaktionsmechanismus von Maas und Warnatz. Abbildung 4.8 zeigt die berechneten Profile ausgewählter Speziesmassenkonzentrationen in der planaren Flammenfront. Im Gegensatz zu der Berechnung der Profile die in Abbildung 4.1, Seite 58 dargestellt sind wurde in diesem Fall nicht mit der INSFLA-Option $Le_i = 1$ gerechnet, da es sich bei der turbulenten Flamme um Flamelets, d.h. um Flammen mit laminarer Flammenstruktur handelt.

Aus dem örtlichen Verlauf von Y_{H_2O} wird der in Abbildung 4.9 dargestellte Verlauf des Reaktionsfortschritts c als Funktion des dimensionslosen Wegs ξ ermittelt. Normalisiert wurde x mit dem aus der Simulation extrahierten Wert $d_l = 0.0081$ m. Mittels einem diskreten numerischen Verfahren wurde für die Funktion $c(\xi)$ die Ableitung $dc/d\xi$ bestimmt, welche ebenfalls

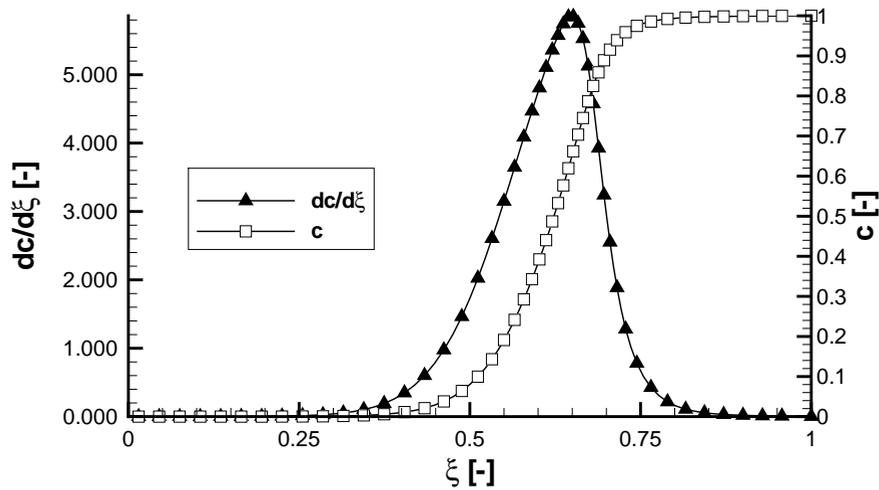


Abbildung 4.9: Verlauf von c und $dc/d\xi$ als Funktion des dimensionslosen Weges ξ für ein 13Vol.-%- H_2 in Luft Gemisch.

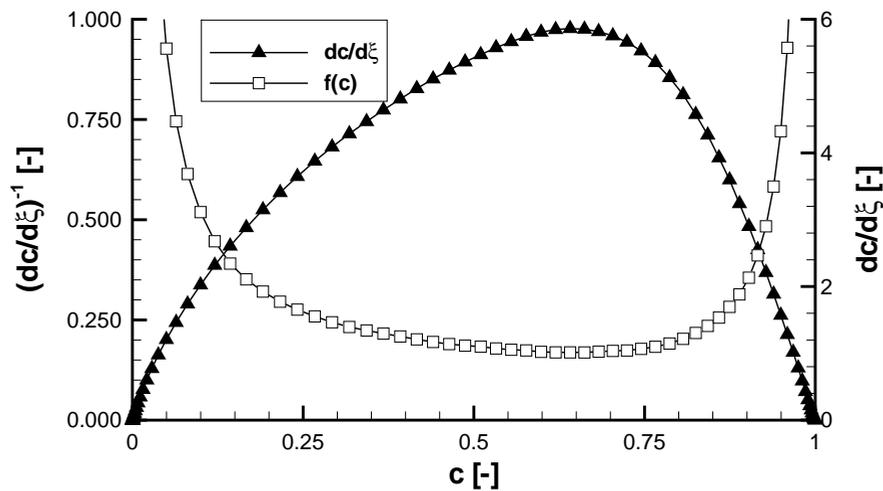


Abbildung 4.10: Verlauf von $dc/d\xi$ und $f(c)$ als Funktion von c für ein 13Vol.-%- H_2 in Luft Gemisch.

in Abbildung 4.9 dargestellt ist. Wird die Funktion $dc/d\xi$ in Abhängigkeit von c ausgedrückt, ergibt sich der in Abbildung 4.10 gezeigte Verlauf. Aus diesem kann schließlich durch Invertierung die Funktion $f(c) = (dc/d\xi)^{-1}$ abgeleitet werden. Es ist anzumerken, dass diese Form der PDF in dieser Arbeit nicht zur Bestimmung von PDF-Reaktionsraten benötigt wird, sondern dazu dient, die Konstanten im BML-Modell zu bestimmen. Dies wird in Kapitel 4.3.1 gesondert beschrieben.

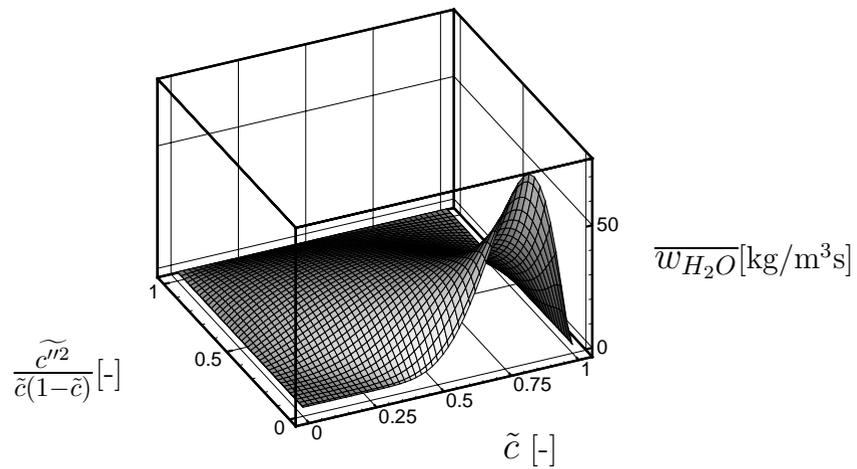
4.2.5 Die PDF Reaktionsraten

Auf der Basis der Favre-PDF sowie der laminaren Reaktionsrate kann die PDF-gewichtete Reaktionsrate durch das Faltungsintegral in Gleichung 4.2.32 berechnet werden. Da es für dieses Integral keine Lösung auf analytischem Weg gibt, wird die Berechnung in einem diskreten, numerischen Verfahren durchgeführt, [Dur00]. Aufgrund der hohen Anforderung an die Rechenleistung ist es zweckmäßig, die Berechnung der zeitgemittelten Reaktionsraten a priori, d.h. vor der eigentlichen Simulationsrechnung für alle möglichen Zustände durchzuführen und zu tabellarisieren. Der Wertebereich ist für die Favre-gemittelte Fortschrittsvariable auf den Bereich $0 < \tilde{c} < 1$ beschränkt. Für die Varianz gilt $0 \leq \tilde{c}''^2 \leq \tilde{c}(1 - \tilde{c})$, weshalb auch hier die normierte Varianz g (s. Gleichung 4.2.38) zur Tabellarisierung verwendet wird.

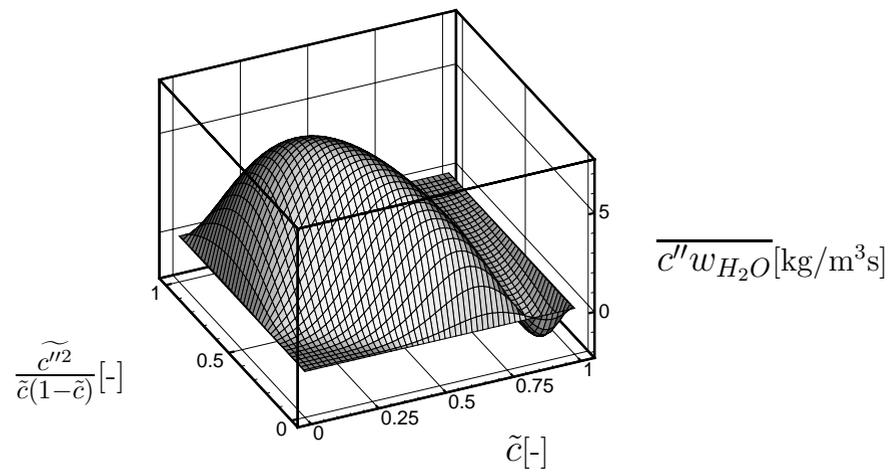
In Abbildung 4.11(a) sind die Werte einer Tabelle mit den PDF-gewichteten Reaktionsraten grafisch dargestellt. Der Berechnung zugrunde liegt die laminare Reaktionsrate für ein 13Vol.-%- H_2 in Luft Gemisch. Für die funktionale Form der PDF wurde eine „gestutzte“ Gaußverteilung verwendet. Aus der Abbildung ist ersichtlich, dass für geringe Fluktuationen $g \rightarrow 0$ die PDF-Reaktionsrate der laminaren Reaktionsrate entspricht (vgl. Abbildung 4.2). Dieser Bereich beschreibt einen Verbrennungsprozess, der rein durch chemische Prozesse bestimmt wird. Mit einem Anstieg der Varianz, d.h. für $g > 0$, reduziert sich das Maximum der Reaktionsrate und verschiebt sich zu kleineren Werten von \tilde{c} . Dies wird bedingt durch die Tatsache, dass immer mehr unverbranntes und vollständig verbranntes Gemisch auftritt, welches nichts zur Reaktionsrate beiträgt. Bei steigender Varianz wird somit die Wahrscheinlichkeit, ein reaktives Gemisch vorzufinden, immer geringer.

Werden die Schwankungen maximal, d.h. geht $g \rightarrow 1$, setzt sich die PDF hauptsächlich aus den beiden Wahrscheinlichkeiten A und B zusammen. Die PDF-Reaktionsrate reduziert sich deutlich, da für den Flammenanteil $C \rightarrow 0$ gilt. Der Einfluss der Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung des Flammenanteils $f(c)$ auf die Reaktionsrate verschwindet. Um in diesem Grenzbereich der schnellen Chemie eine realistische Reaktionsrate berechnen zu können, muss ein alternatives Berechnungsverfahren verwendet werden.

Neben der Berechnung der PDF-Reaktionsraten muss auch der Quellterm



(a) PDF-Reaktionsraten



(b) Quellterm in der Varianztransportgleichung

Abbildung 4.11: PDF-Tabellen für ein 13Vol.-%- H_2 in Luft Gemisch basierend auf einer „gestutzten“ Gaußfunktion.

$\overline{c''w_{H_2O}}$ in Gleichung 4.2.33 bestimmt werden, um ein geschlossenes Differenzialgleichungssystem zu erhalten. Analog zur zeitlichen gemittelten Reaktionsrate werden für den gesamten möglichen Wertebereich der diskreten Werte \tilde{c} und g die Ergebnisse für $\overline{c''w_{H_2O}}$ mit einem numerischen Verfahren vor dem eigentlichen Rechenlauf bestimmt und in einer Tabelle gespeichert (s. Abbildung 4.11(b)).

4.2.6 Variable Enthalpiezustände vor der Flammenfront

Es gibt zwei unterschiedliche Prozesse, die das Enthalpieniveau vor der Flamme ändern können. Dies ist zum einen eine langsame stetige Erhöhung der Enthalpie im gesamten unverbrannten Bereich des Rohres durch Druckwellen die von der Flamme ausgesandt wurden und zum anderen die sprunghafte Änderung des Zustands vor der Flamme durch eine führende Stoßwelle wie sie bei schnellen Deflagrationen auftritt. Da das bisher beschriebene PDF-Modell (Kapitel 4.2.1 bis 4.2.5) die Änderung der Enthalpie bei der Modellierung nicht berücksichtigt, diese sich aber entscheidend auf das Brennverhalten auswirkt, ist es nötig, dieses Modell dahingehend zu erweitern.

Die Anpassung des PDF-Verfahrens an das aktuelle Enthalpieniveau erfolgt im Rahmen der vorliegenden Arbeit weiterhin basierend auf einer eindimensionalen Form, d.h. basierend auf einer Fortschrittsvariablen. Bedingung hierfür ist, dass eine direkte Korrelation zwischen der Temperatur und dem Reaktionsfortschritt sowie der Dichte und dem Reaktionsfortschritt besteht. Wie in Kapitel 4.2.1 gezeigt wurde ist diese Bedingung bei Verbrennungsprozessen erfüllt, die in einer Strömung mit niedriger Mach-Zahl stattfinden.

Bei einer schnellen Deflagration kann durch die führende Stoßwelle eine erhebliche Strömung vor der Flamme induziert werden. Nach Oertl [Oer66] entspricht die Strömungsmachzahl hinter einem laufenden Verdichtungsstoß für ein perfektes Gas:

$$\text{Ma}_1 = \frac{f(\text{Ma}_s^2 - 1)}{(\text{Ma}_s^2 + 1)^{1/2}((2 + f)\text{Ma}_s^2 - 1)^{1/2}} \cdot \quad (4.2.50)$$

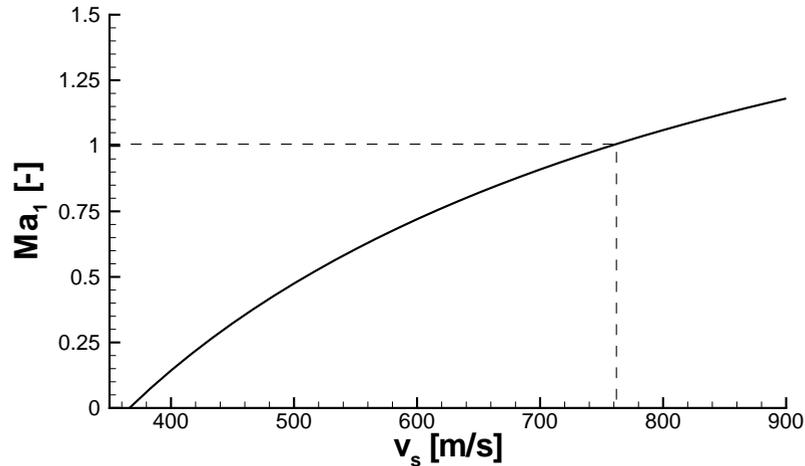


Abbildung 4.12: Machzahlen im Nachlauf einer Stoßwelle für ein perfektes Gas.

Dabei gilt zwischen f , der Zahl der energieaufnehmenden Freiheitsgrade und dem Isentropenexponenten κ der Zusammenhang

$$\kappa = \frac{2 + f}{f} . \quad (4.2.51)$$

Die Stoßmach-Zahl

$$Ma_s = \frac{v_s}{a_0} \quad (4.2.52)$$

entspricht dem Verhältnis der Ausbreitungsgeschwindigkeit des laufenden Stoßes v_s zur Schallgeschwindigkeit des unbewegten Gases vor dem Stoß a_0 . In Abbildung 4.12 sind die Mach-Zahlen im Nachlauf der Stoßwelle für ein perfektes Gas in Abhängigkeit von v_s basierend auf Gleichung 4.2.50 aufgetragen. Wie in dieser Darstellung zu erkennen ist, können Strömungsgeschwindigkeiten nach dem Stoß und somit vor der Flamme mit einer Mach-Zahl größer eins auftreten, wenn für die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit $v_F > 760$ m/s gilt. Dabei wird vereinfachend davon ausgegangen, dass die Flammenfront und die führende Stoßwelle in einem gekoppelten Zustand vorliegen, d.h. $v_F \approx v_s$ gilt. Da schnelle Deflagrationen in Explosionsrohren einen weiten Bereich möglicher Flammengeschwindigkeiten aufspannen ($v_F \approx 350 - 1000$ m/s, u.a. Eder [Ede01b], Lee et al.

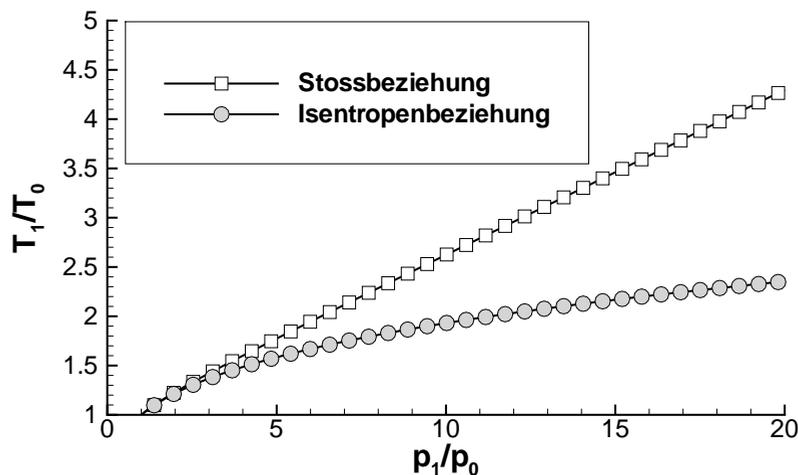


Abbildung 4.13: Vergleich der Temperaturänderung bei einer Stoßbeziehung und einer Isentropenbeziehung (s. u.a.[Oer66]).

[LKC84]) ist somit zu prüfen, inwieweit das verwendete eindimensionale PDF-Modell zur Berechnung schneller Deflagrationen geeignet ist (s. Kapitel 6.3.2).

Die Grundlage für die Anpassung des PDF-Modells an variable Enthalpizustände bildet die Berechnung der laminaren Reaktionsrate $w_{H_2O}(c)$ auf der Basis der Initialisierung mit unterschiedlichen Enthalpieniveaus. Die Enthalpieniveaus bestimmen sich aus dem Druckniveau p und der durch eine Isentropenbeziehung zugehörigen Temperatur T , die ausgehend von dem anfänglichen Gemischzustand berechnet wird. Es ist anzumerken, dass im Falle der Änderung des Gemischzustandes durch eine Stoßwelle die Beziehungen der Stoßkompression denen der isentropen Kompression vorzuziehen sind. Wie in Abbildung 4.13 dargestellt, ergeben sich auf Basis der beiden Beziehungen für geringe Druckverhältnisse nur geringe Unterschiede. Nach Oertl [Oer66] gilt für das Druckverhältnis über einen laufenden Verdichtungsstoß

$$\frac{p_1}{p_0} = \frac{(2 + f)Ma_s^2 - 1}{1 + f} . \quad (4.2.53)$$

Da bei schnellen Deflagrationen ausschließlich Stoßmachzahlen $Ma_s < 3$ ¹³

¹³Dieser Aussage liegt die Annahme zugrunde, dass für die schnellste deflagrative Flammenausbreitung $v_F \approx 1000$ m/s gilt und die gekoppelte Stoßwelle eine vergleichbare Geschwindigkeit aufweist

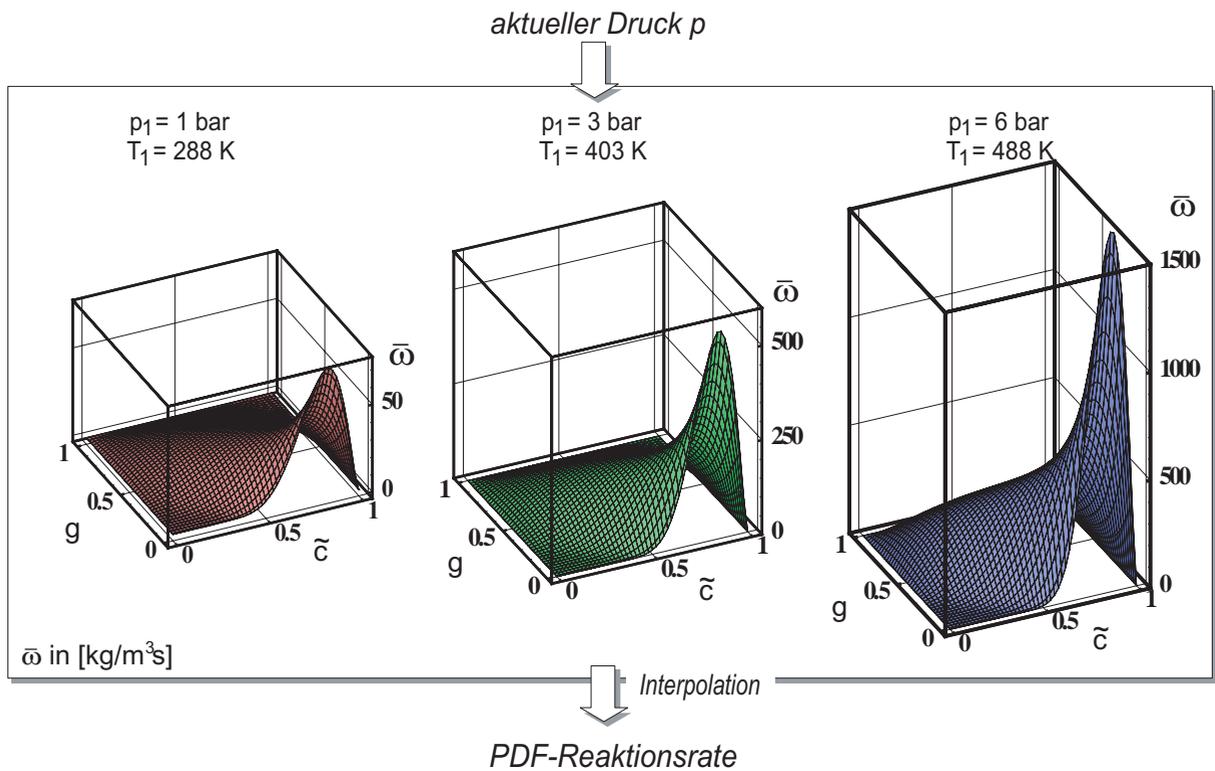


Abbildung 4.14: Bestimmung der PDF-Reaktionsrate in Abhängigkeit vom momentanen Druckniveau für ein 13Vol.-%- H_2 in Luft Gemisch.

und somit maximale Druckverhältnisse $p_1/p_0 \approx 10$ zu erwarten sind, wird aus Gründen der allgemeinen Anwendbarkeit für alle Flammenausbreitungsvorgänge die Isentropenbeziehung der Bestimmung des erhöhten Enthalpieniveaus zugrundegelegt.

Um den Einfluss der Enthalpieänderungen bei einer Simulation zu berücksichtigen, werden PDF-Reaktionstabellen für bestimmte, diskrete Enthalpieniveaus generiert. Während der Rechnung wird die zeitlich gemittelte Reaktionsrate unter der Berücksichtigung der statistischen Information aus \tilde{c} und \tilde{c}^2 , sowie des aktuellen statischen Drucks \bar{p}_1 , aus den PDF-Reaktionstabellen (s. Abbildung 4.14) interpoliert. Da eine deflagrative Flamme keine deutliche Druckänderung über die Flammenfront besitzt, ist durch dieses Verfahren sichergestellt, dass nur die Enthalpieerhöhung vor der Flamme und nicht die durch die Wärmefreisetzung der Flamme entstehende Enthalpieerhöhung einen Einfluss auf die Reaktionsrate besitzt.

4.3 BML-Formulierung

Nach Borghi [Bor88] kann im Limit der schnellen Chemie die gemittelte Reaktionsrate nicht mehr durch das Faltungsintegral

$$\bar{\omega}_c = C \int_0^1 \omega_c(c) f(c) dc \quad (4.3.1)$$

bestimmt werden, da in diesem Grenzbereich $\omega(c) \rightarrow \infty$ gilt. Zugleich besteht das Gemisch nur noch aus unverbrannten und vollständig verbrannten Bereichen, woraus für die Wahrscheinlichkeit eine Flamme vorzufinden $C \rightarrow 0$ folgt. Um dieses Problem zu umgehen, zeigt Bray [Bra80], dass sehr große Varianzen zu einer deutlichen Vereinfachung des PDF-Modells führen. Basierend auf dieser Vereinfachung, welche die Grundlage des Bray-Moss-Libby Modells [BLM85] darstellt, kann die zeitlich gemittelte Reaktionsrate als Funktion des Koeffizienten K_2 und der Skalardissipation $\bar{\chi}_c$ durch

$$\bar{\omega}_{c,BML} = K_2 \bar{\chi}_c \quad (4.3.2)$$

ausgedrückt werden. Wird zur Beschreibung der Skalardissipation der Ansatz

$$\bar{\chi}_c = C_c \bar{\rho} \frac{1}{\tau_{\text{int}}} \widetilde{c''^2} \quad (4.3.3)$$

verwendet (siehe auch Gleichung 4.2.20), folgt somit

$$\bar{\omega}_{BML} = K_2 C_c \bar{\rho} \frac{1}{\tau_{\text{int}}} \widetilde{c''^2} . \quad (4.3.4)$$

Im Bereich der schnellen Chemie kann davon ausgegangen werden, dass die Varianz $\widetilde{c''^2}$ der maximal möglichen Varianz

$$\widetilde{c''^2} = \widetilde{c''^2}_{\text{max}} = \tilde{c}(1 - \tilde{c}) \quad (4.3.5)$$

entspricht. Wird diese in Gleichung 4.3.4 eingesetzt und für das turbulente Zeitmaß Gleichung 2.2.12 zugrunde gelegt, ergibt sich der, dem EBU-Modell (s. Kapitel 3.3) ähnliche, Ansatz:

$$\bar{\omega}_{c,BML} = K_2 C_c \bar{\rho} \frac{\varepsilon}{k} \tilde{c} (1 - \tilde{c}) . \quad (4.3.6)$$

4.3.1 Bestimmung der Konstanten des BML-Modells

Die Anwendung des BML-Modells erfordert eine Bestimmung der Konstanten K_2 und C_c . Während C_c durch die Modellierung der Skalar­dissipation in der Varianztransportgleichung mit dem empirischen Standardwert $C_c = 2.0$ belegt ist, muss K_2 auf der Basis der Herleitung von Gleichung 4.3.2 als Grenzbetrachtung der PDF-Formulierung für sehr große Varianzen bestimmt werden. Prinzipiell gilt nach Bray [Bra80]

$$K_2 = \frac{1}{2c_m - 1} . \quad (4.3.7)$$

Dabei entspricht c_m dem reziproken Verhältnis der Momente ($c_m = I_2/I_1$)

$$I_1 = C \int_0^1 \omega_c(c) f(c) dc \quad (4.3.8)$$

und

$$I_2 = C \int_0^1 c \omega_c(c) f(c) dc . \quad (4.3.9)$$

Auch diese Momente sind einzeln nicht bestimmbar, da die selbe Problematik wie bei der Lösung von Gleichung 4.3.1 auftritt, d.h. dass im Limit der schnellen Chemie $\omega(c) \rightarrow \infty$ bei $C \rightarrow 0$ gilt. Das Verhältnis von I_2/I_1 kann jedoch bestimmt werden, wenn die Reaktionsrate $\omega(c)$ durch

$$\omega'_c(c) = \omega_c(c) \cdot \epsilon \quad (4.3.10)$$

so skaliert wird, dass $\omega'(c)$ der Reaktionsrate der laminaren Flammenfront entspricht. In diesem Fall gilt für das reziproke Verhältnis der Momente I_1 und I_2

$$c_m = \frac{I'_2}{I'_1} = \frac{\int_0^1 c \omega'_c(c) f(c) dc}{\int_0^1 \omega'_c(c) f(c) dc} , \quad (4.3.11)$$

wobei die laminare Reaktionsrate $\omega'_c(c)$ wie gewohnt aus der Berechnung einer planar propagierenden Flamme auf der Basis eines detaillierten Reaktionsschemas bestimmt werden kann (s. Kapitel 4.2.2)¹⁴. Die Skalierung der Reaktionsrate hat zur Folge, dass die Dicke der laminaren Flammenfront entsprechend zunimmt. Dieser Zusammenhang wird deutlich, wenn die Gleichung für die laminare Brenngeschwindigkeit in Gleichung 2.1.6 unter Berücksichtigung von Gleichung 2.1.12 zu

$$s_l \propto d_l \omega \quad (4.3.12)$$

umgeformt wird. Es zeigt sich, dass die Skalierung der Reaktionsrate mit ϵ eine Skalierung der Dicke der laminaren Flammenfront mit

$$d'_L = \frac{d_L}{\epsilon} \quad (4.3.13)$$

erfordert, um die Proportionalität und somit die laminare Brenngeschwindigkeit nicht zu verändern. Die Veränderung der Dicke der laminaren Flammenfront durch die Skalierung hat nur eine Auswirkung auf die Wahrscheinlichkeit C^{15} , die sich jedoch bei der Berechnung von c_m herauskürzt. Durch die beschriebene Vorgehensweise ist es somit möglich, mit einer vorgegebenen Funktion $f(c)$ den Vorfaktor K_2 zu bestimmen.

Die Funktion $f(c)$, die die Wahrscheinlichkeitsverteilung des Flammenanteils beschreibt, wird für den Bereich der schnellen Chemie auf Basis der in Kapitel 4.2.4 vorgestellten alternativen Form der PDF bestimmt. Wird das Beispiel eines 13Vol.% H_2 in Luft-Gemisches betrachtet, so ergeben sich damit die in Abbildung 4.15 dargestellten Verläufe für $f(c)$ und $\omega'_{H_2O}(c)$ ($\omega'_{H_2O} = \omega'_c Y_{H_2O, \infty}$). Durch eine numerische Integration werden aus diesen Verläufen die Momente

$$I'_1 = \int_0^1 \omega'_c(c) f(c) dc = 0,903 \quad (4.3.14)$$

und

$$I'_2 = \int_0^1 c \omega'_c(c) f(c) dc = 0,793 \quad (4.3.15)$$

¹⁴In diesem Fall wird jedoch nicht die INSFLA-Option $Le_i = 1$ gesetzt, da der Berechnung eine laminare Flammenfront zugrundeliegt.

¹⁵die Wahrscheinlichkeit C , ein reaktives Gemisch vorzufinden, steigt durch die Skalierung mit $\epsilon \ll 1$.

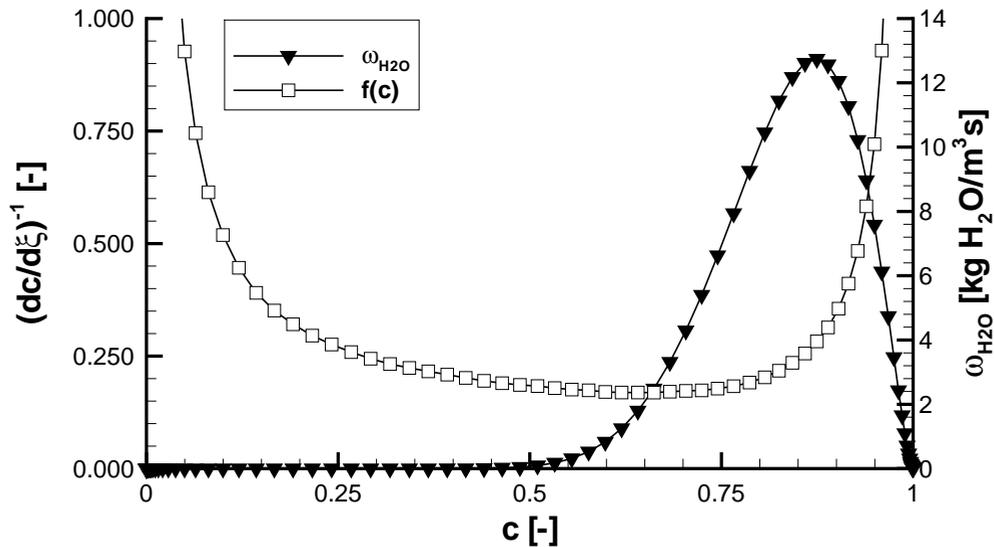


Abbildung 4.15: Reaktionsverlauf und Wahrscheinlichkeitsverteilung des Flammenanteils für eine laminare Flammenstruktur.

bestimmt, wodurch für das Verhältnis der Momente

$$c_m = \frac{I_2'}{I_1'} = 0,878 \quad (4.3.16)$$

und somit $K_2 = 1,32$ gilt.

Da sich die Flammenstruktur mit der Brennstoffkonzentration ändert, ist der c_m -Wert an das jeweilige Gemisch anzupassen. Aus Abbildung 4.16 ist ersichtlich, dass mit zunehmender Brennstoffkonzentration der Wert für c_m sinkt. Dies hat zur Folge, dass der Koeffizient K_2 bei höheren Wasserstoffkonzentrationen zunimmt und somit erwartungsgemäß zu höheren Reaktionsraten bei einem bestimmten turbulenten Mischungsgrad führt.

Die Flammenstruktur ändert sich ebenfalls, wenn die Flamme in einem Gemisch mit variablem Enthalpiezustand brennt. Es zeigt sich jedoch, dass die Anhebung des Enthalpieniveaus analog zu Kapitel 4.2.6 keinen großen Einfluss auf den Koeffizienten K_2 ($\Delta K_2 < 3.5\%$) besitzt, weshalb dieser für das jeweilige Gemisch als konstant angenommen wird.

Das vorgeschlagene Modell für unendlich schnelle Chemie beruht auf der Berechnung der Reaktionsraten des BML-Modells. Es entspricht jedoch nicht vollständig dem zugrundeliegenden Verfahren von Bray, Moss und

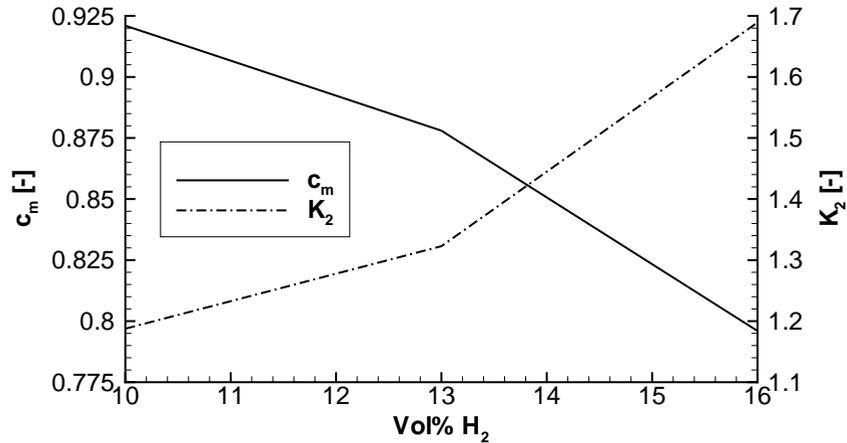


Abbildung 4.16: Verläufe des c_m -Wertes und des Koeffizienten K_2 bei veränderter Brennstoffkonzentration.

Libby [BLM85]. Im folgenden wird das Modell jedoch trotzdem vereinfacht als BML-Modell bezeichnet.

4.3.2 Anpassung des turbulenten Zeitmaßes

Nach Borghi [Bor88] ist speziell für Verbrennungszustände im gewellten Flamelet-Bereich, d.h. für v'/s_L in der Größenordnung von eins, die direkte Proportionalität zwischen dem charakteristischen Zeitmaß der skalaren Schwankung τ_c und dem turbulenten integralen Zeitmaß τ_{int} (s. Gleichung 4.2.22) und somit die direkte Proportionalität der Reaktionsrate zum inversen Wert des turbulenten integralen Zeitmaßes (siehe Herleitung der Gleichung 4.3.4) nicht mehr gültig. Begründet wird dies dadurch, dass sich das charakteristische turbulente Zeitmaß im Skalardissipationsansatz ändert, wenn die Varianz einer reaktiven Variablen betrachtet wird. Borghi schlägt deshalb eine spezielle Anpassung des turbulenten Zeitmaßes τ_c auf der Basis

$$\frac{\tau_{\text{int}}}{\tau_c} = f(Da, Re_t) \quad (4.3.17)$$

vor. Anhand von numerischen Untersuchungen präzisiert er den Ansatz und gibt als möglichen Zusammenhang

$$\frac{\tau_{\text{int}}}{\tau_c} = 1 + \frac{4,4}{1 + 2k^{1/2}/s_L} \quad (4.3.18)$$

an. Im Rahmen dieser Arbeit wird dieser Ansatz wie folgt berücksichtigt: Wird Gleichung 4.3.18 in Gleichung 4.3.4 eingesetzt, so ergibt sich die zeitlich gemittelte Reaktionsrate aus:

$$\bar{\omega}_{c,BML} = \bar{\rho} K_2 C_c \frac{1}{\tau_c} \tilde{c} (1 - \tilde{c}) \quad (4.3.19)$$

$$= \bar{\rho} K_2 C_c \left(1 + \frac{4,4}{1 + 2k^{1/2}/s_L} \right) \frac{\varepsilon}{k} \tilde{c} (1 - \tilde{c}) . \quad (4.3.20)$$

Durch diese Vorgehensweise ist einerseits ein Einfluss der laminaren Brenngeschwindigkeit auf die Reaktionsrate im Bereich moderater Turbulenzintensitäten abgebildet und andererseits gewährleistet, dass sich für Verbrennungszustände höherer Turbulenzintensitäten die Reaktionsrate dem Ansatz aus Gleichung 4.3.4 annähert. Dieser Ansatz liegt mit etwas veränderten Konstanten auch dem in Kapitel 3.3.1 vorgestellten Modell von Naji et al. zugrunde.

5 Numerisches Verfahren

Um den Schwerpunkt in dieser Arbeit auf die Modellentwicklung zur Beschreibung der Turbulenz-Flammen-Interaktion zu legen, wurde zur Berechnung des zugrundeliegenden, turbulenten Strömungsfeldes ein kommerzielles Programm-Paket zur Strömungssimulation verwendet. Bei diesem handelt es sich um den CFD-Code (aus dem Englischen: computational fluid dynamics code) CFX 4.2 von der Firma AEA Technology. Die Implementierung des Verbrennungsmodells erfolgte über vordefinierte, programmspezifische Benutzerschnittstellen. Mit diesen kann während des Lösungsprozesses gezielt auf bestimmte Variablen und Terme des diskretisierten Gleichungssystems zugegriffen werden, um diese zu modifizieren. Durch diese Vorgehensweise ergibt sich eine übersichtliche, modulare Realisierung des Verbrennungsmodells und somit eine leichte Übertragbarkeit auf andere Code-Plattformen.

Es wird an dieser Stelle auf eine ausführliche Beschreibung der numerischen Grundlagen des CFD-Codes verzichtet, da diese nicht Gegenstand dieser Arbeit waren. Für genauere Informationen wird auf das Handbuch von CFX 4.2 [Tec97] und Grundlagenwerke zur numerischen Simulation von Strömungen, wie z.B. Patankar [Pat80], Anderson et al. [ATP84] oder Peric und Ferziger [PF96] verwiesen. Im folgenden werden kurz die wichtigsten Merkmale des verwendeten CFD-Codes, Grundeinstellungen ausgewählter numerischer Parameter sowie die Implementierung des Verbrennungsmodells beschrieben.

5.1 Grundlagen

Zur Simulation einer turbulenten, kompressiblen Strömung unter Berücksichtigung von Wärmetransportvorgängen ist es nötig, die gekoppelten Transportgleichungen für Impuls, Energie, Massenerhaltung, turbulente kinetische Energie, Dissipationsrate sowie die Zustandsgleichung zu lösen (s. Anhang A.1). Diese Gleichungen, die im folgenden als Grundgleichungen bezeichnet werden, werden in CFX 4.2 basierend auf einer diskretisierten Geometrie gelöst. Hierfür wird das zu untersuchende Berechnungsgebiet mittels Kontrollvolumen körperangepasst (englisch: body fitted) nachbildet

und die Werte der Strömungsgrößen in den jeweiligen Kontrollvolumenmittelpunkten berechnet. Die Berechnung basiert auf dem Verfahren der Finiten Volumen, bei dem durch die Volumenintegration der Erhaltungsgleichungen über jedes Kontrollvolumen ein algebraisches Gleichungssystem abgeleitet wird. Dieses besitzt die Form einer Matrix-Gleichung, das z.B. durch den linearen Gleichungslöser nach Stone [Sto68] in einem iterativen Lösungsverfahren gelöst wird.

Die Bestimmung der Volumenintegrale über die diffusiven und die konvektiven Terme der Erhaltungsgleichungen erfolgt durch Approximationen, bei welchen Werte der Strömungsgrößen an Stellen benötigt werden, die nicht auf die Kontrollvolumenmittelpunkte fallen. Diese Positionen befinden sich auf den Grenzflächen des Kontrollvolumens, wodurch die benötigten Werte durch eine geeignete Interpolation aus den Werten benachbarter Kontrollvolumenmittelpunkte berechnet werden müssen. Dabei wird eine unterschiedliche Vorgehensweise für die diffusiven und die konvektiven Terme angewandt. Während bei den diffusiven Termen das Zentralfindifferenzenverfahren zur Interpolation des Wertes auf der Grenzfläche herangezogen wird, muss bei den konvektiven Termen aus Stabilitätsgründen auf alternative Verfahren zurückgegriffen werden. In dieser Arbeit wurde zur Diskretisierung der konvektiven Terme das von Leonard [Leo79] vorgeschlagene QUICK-Verfahren (englisch: Quadratic Upwind Interpolation for Convective Kinematics) angewandt. Da dieses Verfahren eine Genauigkeit 2. Ordnung besitzt, wird hierdurch die numerische Diffusion generell und somit auch ein unphysikalisches Verschmieren der Flamme im Vergleich zu Verfahren 1. Ordnung (UDS, englisch: Upwind Differencing Scheme) eingeschränkt.

Für die zeitliche Diskretisierung der Grundgleichungen wurde in dieser Arbeit ein voll implizites Verfahren verwendet. Im Gegensatz zu einem expliziten Verfahren ist es dabei notwendig, die Lösung zu jedem Zeitschritt der instationären Simulation durch ein Iterationsverfahren zu berechnen. Jede iterative Lösung erfordert ein Kriterium anhand dessen entschieden wird, ob der Lösungsprozess fortgesetzt wird, oder ob die aktuelle Genauigkeit genügt. Basis der Definition eines Abbruchkriteriums ist das Residuum R_p , welches angibt inwieweit die Lösung der diskretisierten algebraischen Grundgleichung für das Kontrollvolumen P stimmt. Im Gegensatz zu anderen Strömungslösern (s. z.B. [Adv95]) verwendet CFX 4.2

das ungewichtete Gesamtresiduum aller Kontrollvolumen $R_{\text{ges}} = \sum_P R_p$ der jeweiligen Transportgleichung zur Konvergenzüberprüfung. Dies kann bei der Berechnung von instationären Verbrennungsvorgängen zu Problemen führen, da sich das Gesamtresiduum während eines Rechenlaufs prinzipiell stark verändert¹⁶. Die Wahl eines festen Konvergenzkriteriums ist somit nicht möglich. Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurde deshalb folgende Vorgehensweise angewendet: Reduziert sich das Gesamtresiduum für eine Transportgleichung ausgehend vom Residuum des zweiten Iterationsschritts um zwei Größenordnungen, so gilt diese Gleichung als konvergiert. Dies muss für jede Gleichung zu jedem Zeitschritt der instationären Lösung erfüllt werden.

Zur Vermeidung der Druck-Geschwindigkeitsentkopplung bei der Berechnung des Strömungsfeldes wurde das SIMPLE-Verfahren (englisch: Semi Implicit Method of Pressure Linked Equations) angewendet (s. Caretto et al. [CGPS72]). Bei diesem wird aus der Kontinuitätsgleichung und der Impulsgleichung eine Druckkorrekturgleichung abgeleitet, welche zusammen mit der Impulsgleichung in einem iterativen Lösungsverfahren (Druckkorrekturverfahren) gelöst wird.

5.2 Implementierung des Verbrennungsmodells

Die Implementierung des Verbrennungsmodells in der, in den Kapiteln 4.2 und 4.3 beschriebenen Form, erfordert, dass neben den Grundgleichungen zwei zusätzliche Transportgleichungen gelöst werden müssen. Dies ist zum einen die Transportgleichung für den Reaktionsfortschritt

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{c}) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{c}) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\eta_t}{\text{Pr}_{t,c}} \frac{\partial \tilde{c}}{\partial x_i} \right) + \bar{\omega}_c \quad (5.2.1)$$

und zum anderen die Transportgleichung für die Varianz

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{c}''^2) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{c}''^2) &= \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\eta_t}{\text{Pr}_{t,\text{var}}} \frac{\partial \tilde{c}''^2}{\partial x_i} \right) + 2 \frac{\eta_t}{\text{Pr}_{t,\text{var}}} \left(\frac{\partial \tilde{c}}{\partial x_i} \right)^2 \\ &\quad - C_c \bar{\rho} \frac{\varepsilon}{k} \tilde{c}''^2 + 2 \overline{\tilde{c}'' \omega_c} . \end{aligned} \quad (5.2.2)$$

¹⁶Wird z.B. die Reaktionsenthalpie als Quellterm in der Energieerhaltungsgleichung zugeführt, so wächst das Gesamtenthalpieniveau im Rohr mit der Verbrennung ständig an. Dadurch verschiebt sich das berechnete Gesamtresiduum generell zu größeren Werten.

CFX 4.2 ermöglicht die Definition zusätzlicher Skalartransportgleichungen, welche die Standardform

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{\phi}) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{\phi}) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\eta_t}{\text{Pr}_{t,\phi}} \frac{\partial \tilde{c}}{\partial x_i} \right) + S \quad (5.2.3)$$

besitzen. In Gleichung 5.2.3 entspricht S dem Quellterm und $\text{Pr}_{t,\phi}$ der turbulenten Prandtl-Zahl bezogen auf die allgemeine Größe ϕ . Die Vorgabe des Quellterms S erfolgt durch benutzerdefinierte Schnittstellen.

In der vorliegenden Arbeit wurden zwei zusätzliche Skalartransportgleichungen unter der Vorgabe des jeweiligen Quellterms

$$S = S_c = \bar{\omega}_c \quad (5.2.4)$$

sowie

$$S = S_{\text{var}} = 2 \frac{\eta_t}{\text{Pr}_{t,\text{var}}} \left(\frac{\partial \tilde{c}}{\partial x_i} \right)^2 - C_c \bar{\rho} \frac{\varepsilon}{k} \tilde{c}^{\prime\prime 2} + 2 \overline{c'' \omega_c}, \quad (5.2.5)$$

gelöst. Die turbulente Prandtl-Zahl wurde in beiden Gleichungen mit $\text{Pr}_t = 0,9$ vorgegeben. Da die ständige Neuberechnung der Quellterme für das PDF-Modell einen enormen Rechenaufwand bedeuten würde, wurden die Reaktionstabellen für $\bar{\omega}_c$ und $\overline{c'' \omega_c}$ a priori bestimmt (s. Kapitel 4.2.5). Während der Verbrennungssimulation wurden die Reaktionsraten durch ein bilineares Interpolationsverfahren aus den PDF-Reaktionstabellen extrahiert. Die Berechnung der Reaktionsraten erfolgte explizit, d.h. am Ende eines Zeitschritts wurden auf Basis der berechneten Größen die zeitlich gemittelten Reaktionsraten des folgenden Zeitschritts bestimmt.

Durch die Verbrennungsreaktion ändert sich die chemische Zusammensetzung des Gemisches. Damit einhergehend ändert sich auch die molare Gesamtmasse des Gemisches über die Flammenfront durch den Zusammenhang

$$M_{\text{ges}} = \left(\sum_{i=1}^N \frac{Y_i}{M_i} \right)^{-1}. \quad (5.2.6)$$

Da die Gaskonstante R umgekehrt proportional zur Gesamtmolmasse M_{ges} ist, muss diese durch die Beziehung

$$R = \frac{R_a}{M_{\text{ges}}} \quad (5.2.7)$$

an das aktuelle Gemisch angepasst werden. Um dies in einen Rechenlauf mit CFX 4.2 zu implementieren, war es nötig, eine eigene benutzerdefinierte Schnittstelle zu programmieren, welche die Berücksichtigung der Veränderung von R in der allgemeinen Zustandsgleichung bewirkt. Da die Gemischzusammensetzung bei dem verwendeten Verbrennungsmodell allein durch den Reaktionsfortschritt bestimmt ist, wurde R als Funktion von \tilde{c} durch die Zusammenhänge in Kapitel 4.2.1 unter Berücksichtigung des inerten Anteils an Stickstoff berechnet.

Entsprechend zu R wurde auch die Veränderung der spezifischen Wärmekapazität c_p durch eine benutzerdefinierte Schnittstelle berücksichtigt. Hierfür gilt in allgemeiner Schreibweise

$$c_p = \sum_{i=1}^N Y_i c_{pi} . \quad (5.2.8)$$

$$c_{pi} = C_{1i} + C_{2i}T + C_{3i}T^2 + C_{4i}T^3 + C_{5i}T^4 \quad (5.2.9)$$

Die Temperaturintervalle sowie die jeweiligen Koeffizienten C_i der Spezies N , die in dieser Arbeit für die Wasserstoff-Luft-Verbrennung verwendet wurden, sind im Anhang A.3 in einer Tabelle aufgeführt.

6 Ergebnisse

Für die Validierung der numerischen Berechnungen wurden experimentelle Ergebnisse betrachtet, die in einer Versuchsanlage am Lehrstuhl für Thermodynamik der TU-München zur Untersuchung des Ausbreitungsverhaltens homogen vorgemischter turbulenter Wasserstoff-Luft-Flammen verwendet wurde. Diese Anlage ist im Detail in den Arbeiten von Brehm [Bre87], Beauvais [Bea94] und Eder [Ede01b] beschrieben, weshalb an dieser Stelle die im Rahmen der hier vorliegenden Arbeit wichtigsten Details dargestellt werden.

Die Versuchsstrecke (s. Abbildung 6.1) bestand aus einem 6,3 m langen, beidseitig geschlossenen Rohr mit einem Innendurchmesser von $d_i = 66$ mm. Es setzte sich zusammen aus einer Hindernisstrecke, einem variabel positionierbaren Fenstersegment für optische Messverfahren und einer Auslaufstrecke. Entlang des Rohres waren Fotodioden sowie Druckaufnehmer angebracht, um die Ausbreitung der turbulenten Flammenfront sowie der Druckwellen erfassen zu können. Als Hindernisse wurden kreisrunde Blenden verwendet, die kaskadenförmig angebracht waren (s. Abbildung 6.2). Sowohl der Abstand l_K und die Blockierate BR der Blenden sowie die Länge der Hindernisstrecke l_H konnten variiert werden. Die Zündung des Gemisches erfolgte am Beginn der Hindernisstrecke durch eine zentrisch angebrachte Zündkerze. Fixiert wurden die Hindernisse durch drei Gewindestangen, die wiederum an dem Zündflansch gegen ein Verrutschen gesichert waren. Durch eine Mantelheizung für das Rohr (siehe Beauvais

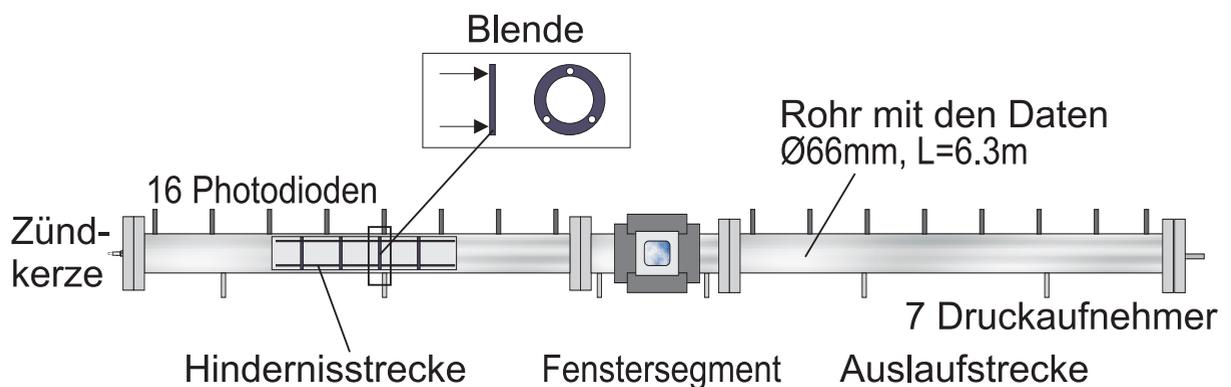


Abbildung 6.1: Schematische Darstellung der Versuchsanlage.

[Bea94]) konnte der Anfangszustand des Gemisches unterschiedlich temperiert werden, wodurch der Einfluss der Anfangstemperatur auf die Brenngeschwindigkeit untersucht werden konnte.

Ziel der hier vorliegenden Arbeit war es zunächst, die in Kapitel 4.2 und 4.3 vorgeschlagene PDF bzw. BML-Formulierung auf die Anwendbarkeit zur Simulation von turbulenten Flammenausbreitungsvorgängen in der Versuchsanlage zu untersuchen. Hierfür wurden Berechnungen unter den in Tabelle 3 aufgelisteten Randbedingungen durchgeführt. Detaillierte Informationen über die Konfigurationen bzw. Randbedingungen des, der Validierung zugrundegelegten Versuchs werden in den jeweiligen folgenden Unterkapiteln gegeben.

Standardmäßig wurde in dieser Arbeit für die Simulation mit dem PDF-Modell die „gestutzte“ Gauß-Funktion (s. Kapitel 4.2.4) als Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung verwendet. Für einige ausgewählte Beispiele wur-

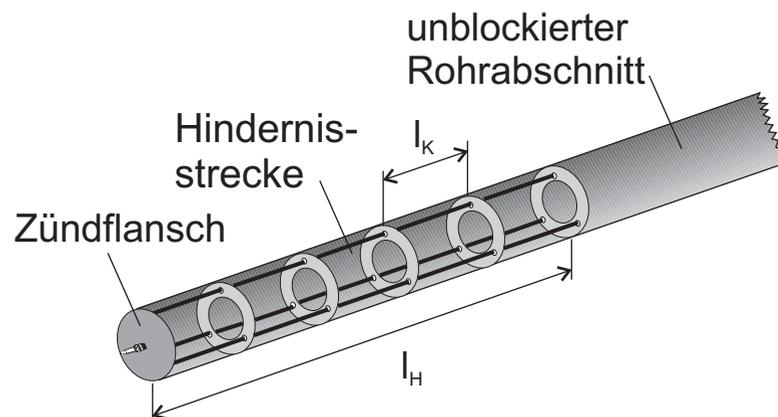
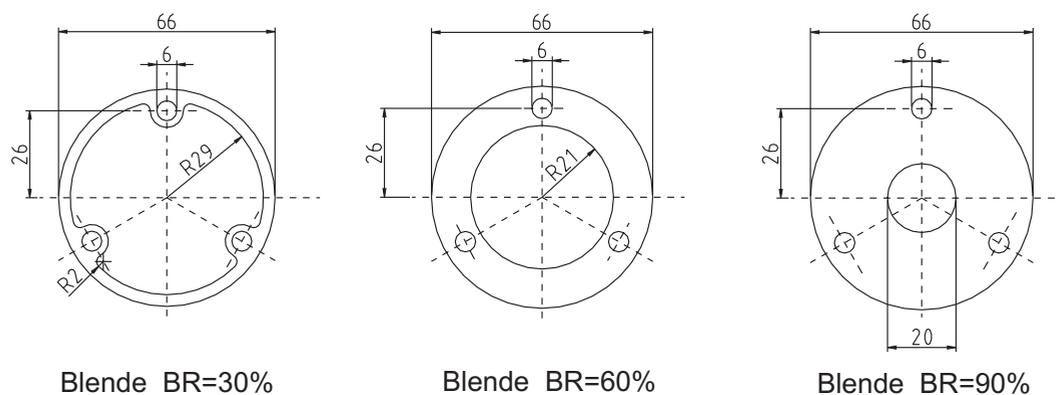


Abbildung 6.2: Schematische Darstellung der Hindernisstrecke der Versuchsanlage sowie der Blendengeometrie (s. [Ede01b]).

den Vergleichsrechnungen basierend auf einer β -Funktion durchgeführt.

Da Wasserstoff-Luft-Gemische einen weiten Detonationsbereich in Bezug auf die Anlagendimension aufweisen (nach Eder [Ede01b] ca. 16,4 – 61 Vol.% H_2 in Luft), wurden in dieser Arbeit ausschließlich magere Gemische in einem Konzentrationsbereich von 10 – 15 Vol.% H_2 in Luft betrachtet, in welchen lediglich schnelle, turbulente Deflagrationen beobachtet wurden.

Konfiguration	Messung zur Validierung	Konzentration
Leer-Rohr	Eder et al. [EEM98]	11, 13, 15 Vol.% H_2
Rohr mit Blenden $BR = 30\%$	Beauvais [Bea94]	12, 13, 14, 15 Vol.% H_2
Rohr mit Blenden $BR = 60\%$	Edlinger et al. [EPE ⁺ 99]	10, 11, 13, 15 Vol.% H_2

Tabelle 3: Überblick über berechnete Flammenausbreitungsvorgänge mit dem PDF, bzw. BML-Modell

6.1 Simulationsbedingungen

6.1.1 Rechengitter

Basis der numerischen Simulation ist die diskretisierte Geometrie der Versuchsanlage. Für die Hinderniskonfiguration mit der Länge $l_H = 3$ m und 16 Blenden mit einer Blockierrate von $BR = 60\%$ bei einem Horizontalabstand der Hindernisse von $l_K = 0.180$ m ist das Rechengitter in Abbildung 6.3 für die Versuchsanlage beispielsweise dargestellt. Die Geometrie wurde dabei unter Ausnutzung der Rotationssymmetrie durch ein blockstrukturiertes, zweidimensionales Netz repräsentiert. Dadurch war es nicht möglich, dreidimensionale Effekte wie z.B. den Auftriebseinfluss auf das Strömungsfeld und die Verbrennung zu berücksichtigen. Da sich dieser Einfluss jedoch bei den im Rahmen dieser Arbeit untersuchten Konfigurationen nur in der Anlaufphase der Verbrennung für sehr magere Wasserstoff-Luftgemische ($X_{H_2} \leq 10\%$) bemerkbar macht, war es gerechtfertigt, mit einem zweidimensionalen Gitter zu rechnen und somit eine höhere Gitterauflösung in den verbleibenden Raumrichtungen zu ermöglichen. Die Geometrie der Versuchsanlage wurde durch ca. 10000 Zellen aufgelöst. Wie in Abbildung 6.3 dargestellt, wurden die Blenden als einfache

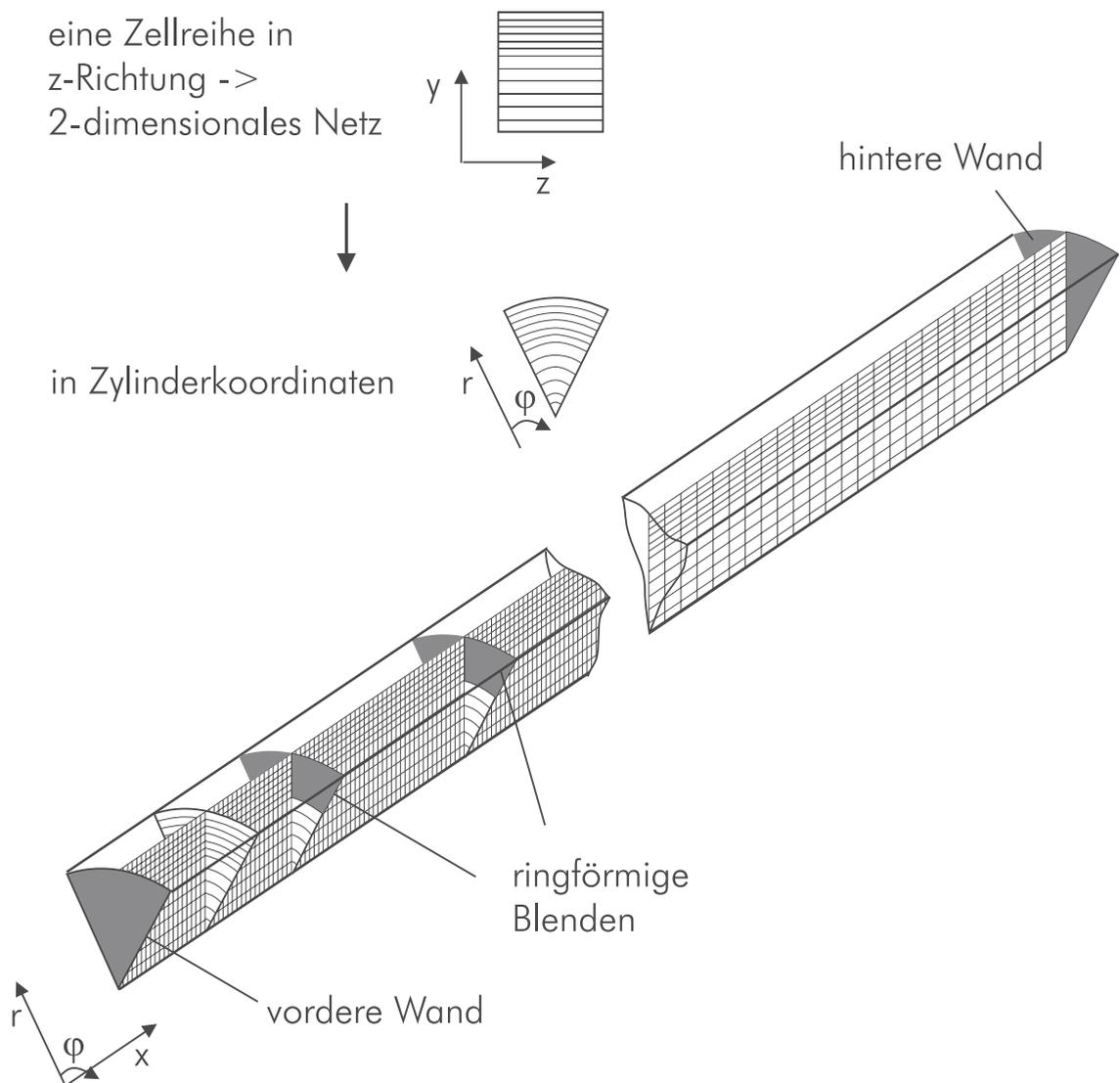


Abbildung 6.3: Geometrie der Versuchsanlage, nachgebildet durch ein zweidimensionales Netz unter Ausnutzung der Rotationssymmetrie.

kreisförmige Verblockung, d.h. ohne die Berücksichtigung der Halterungsvorrichtung (s. Abbildung 6.2), modelliert. Die Blenden wurden jedoch in ihrer Tiefe (Dicke $d_B = 5$ mm) aufgelöst.

Um den Einfluss zu untersuchen, den die Gitterauflösung auf das Rechenresultat besaß, wurden Vergleichsberechnungen in einem gröberen Gitter mit ca. 5000 Zellen und in einem feineren Gitter mit ca. 50000 Zellen durchgeführt. Bei der Zellverteilung wurde darauf geachtet, dass die Auflösung Δx in Flammenausbreitungsrichtung vom groben Gitter, über das Standardgitter (ca. 10000 Zellen) zum feinen Gitter jeweils verdoppelt wurde.

Dabei zeigte sich, dass eine Konvergenz in der Lösung bei der Gitterverfeinerung von Gitter *Standard* zu Gitter *Fein* bei den Berechnungen mit dem BML-Modell auftrat. Bei den Berechnungen mit dem PDF-Modell zeigten sich generell geringere Unterschiede in den Ergebnissen mit den verschiedenen Gittern, weshalb das Gitter mit der Auflösung von 10000 Zellen für alle, im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Berechnungen mit vergleichbarer Gittertopologie verwendet wurde.

6.1.2 Randbedingungen und Rechenlaufsteuerung

Die Wahl geeigneter Randbedingungen stellt eine der Grundvoraussetzungen für ein möglichst genaues Berechnungsergebnis der untersuchten Verbrennungsvorgänge dar. Für die durchgeführten Berechnungen waren an den Berandungen der Geometrie eine hydrodynamische sowie eine thermische Randbedingung zu setzen. Die Beschreibung exakter Wandrandbedingungen erfordert allgemein eine bestimmte strömungsabhängige Auflösung der wandnahen Bereiche, damit die verwendeten Grenzschichtmodelle [Tec97] eine gute Approximation der realen physikalischen Bedingungen ergeben. Da es sich bei den untersuchten Prozessen um stark instationäre Vorgänge mit einer deutlichen Veränderung des Strömungszustands handelte, war eine universelle optimale Auflösung des Wandgebietes nicht möglich.

Die Definition reibungsbehafteter Wände als hydrodynamische Randbedingung führte aufgrund der beschriebenen Problematik unter der Verwendung des k - ε -Turbulenzmodells zu teilweise unphysikalischen Ergebnissen. Durch die falsche Erfassung der Turbulenzproduktion bzw. der Dissipation in der Grenzschicht kam es zu deutlich überhöhten Reaktionsraten an der Wand¹⁷. Aus diesem Grund wurden die Wände prinzipiell als reibungsfrei betrachtet. Bei reibungsfreien Wänden wird bei der Berechnung, ähnlich wie bei einer Symmetrierandbedingung, der Geschwindigkeitsgradient in der Grenzschicht normal zur Wand auf null gesetzt. Für die in dieser Arbeit untersuchten Verbrennungsvorgänge stellte dies eine zulässige Vereinfachung dar. Dies liegt darin begründet, dass die Hindernisse in

¹⁷Die Berechneten Reaktionsraten sind direkt (BML-Modell) bzw. indirekt (PDF-Modell) abhängig von dem Quotienten ε/k .

der Versuchsstrecke den entscheidenden Einfluss auf die Turbulenzproduktion und somit auf die Strömung besitzen. Nur bei der Simulation des Anlaufvorgangs bewirkt, wie in Kapitel 6.2 dargestellt, die Annahme reibungsfreier Wände eine qualitative Verschlechterung der Ergebnisse.

Durch die thermische Randbedingung wird der Wärmeverlust hinter der Flammenfront bestimmt, welcher sich wiederum auf die Stärke der Expansionsströmung vor der Flammenfront auswirkt. Wie Ardey [Ard98] anhand der eindimensionalen Berechnung von Flammenausbreitungsvorgängen in geschlossenen Rohren zeigte, stellt die Vorgabe einer konstanten Wandtemperatur eine gute Reproduktion der thermischen Randbedingung dar.

Die Zeitschrittweite wurde bei den vorliegenden Simulationen so gewählt, dass die Ausbreitung der Flammenfront zeitlich aufgelöst wurde. Daraus ergab sich, bezogen auf die örtliche Diskretisierung, die Forderung

$$\Delta t < \frac{\Delta x}{v_F} . \quad (6.1.1)$$

Standardmäßig wurde eine Zeitschrittweite von $\Delta t = 5 \cdot 10^{-6}$ s bei einer Gitterweite von $\Delta x = 3$ mm in Ausbreitungsrichtung verwendet.

6.2 Flammenanlaufvorgänge

Zur Initiierung der Verbrennung wurde in dieser Arbeit angenommen, dass sich die Flamme bereits in kugelförmiger Form von der Zündquelle entfernt hat und sich in einem turbulenten Brennzustand befindet. Aufgrund der Netztopologie ist es nicht möglich, einen kugelförmigen Bereich zu definieren, weshalb ersatzweise ein zylindrisches Volumen mit einer Ausdehnung von $V \approx 2,5 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3$ (Radius=0.02 m, Höhe=0.02 m) am Rohranfang als „Zündbereich“ definiert wurde¹⁸. Das Gemisch wurde in diesem Bereich als nahezu vollständig verbrannt betrachtet, d.h. es wurde ein Reaktionsfortschritt von $\tilde{c} = 0.9$ vorgegeben. Da sich die Verbrennung im Anfangsstadium aufgrund der moderaten Turbulenz des Strömungsfeldes

¹⁸Diese Angabe bezieht sich auf die dreidimensionale Darstellung der Geometrie. Da in dieser Arbeit die Rotationssymmetrie ausgenutzt wurde, wird das Zündvolumen entsprechend an die 2-dimensionale Darstellung angepasst (s. Abb. 6.6).

im Flamelet-Regime befindet, wurde der Wert für die Varianz auf den maximal möglichen Wert ($\widetilde{c''^2}_{\max} = \tilde{c}(1 - \tilde{c}) = 0.09$) gesetzt. Dies entspricht physikalisch der Vorgabe eines rein Mischungslimitierten Verbrennungsprozesses.

Zur Initialisierung des turbulenten Strömungsfeldes mussten geeignete Startwerte für k und ε gewählt werden. Hierfür wurde die absolute Strömungsgeschwindigkeit vor der Flamme während der Initialphase abgeschätzt. Basierend auf der Annahme, dass sich die Flamme zunächst kugelförmig und größenordnungsmäßig mit laminarer Brenngeschwindigkeit s_L relativ zum Frischgas ausbreitet und die Strömungsgeschwindigkeit im verbrannten Gas hinter der Flamme gleich null ist, gilt für die Massenkonservierung über die Flammenfront in Abhängigkeit der radialen Flammenausbreitungsgeschwindigkeit v_F , s. [GJ96]:

$$\rho_u s_L = \rho_b v_F . \quad (6.2.1)$$

Die absolute Ausbreitungsgeschwindigkeit des Gemisches unmittelbar vor der Flammenfront kann dann über den Zusammenhang $\tilde{u}_1 = v_F - s_L$ (s. z.B. [Kuo86]) durch:

$$\tilde{u}_1 = s_L \left(\frac{\rho_u}{\rho_b} - 1 \right) \quad (6.2.2)$$

bestimmt werden. Basierend auf diesem unteren Richtwert für die absolute Strömungsgeschwindigkeit konnten unter der Vorgabe eines Turbulenzgrades Tu und eines integralen turbulenten Längenmaßes l_{int} Anfangswerte für das turbulente Strömungsfeld durch (Gleichungen 2.2.6 und 2.2.7):

$$k = \frac{3}{2} Tu^2 \tilde{u}_1^2 \quad (6.2.3)$$

und (Gleichung 2.2.11):

$$\varepsilon = \frac{k^{3/2}}{l_{\text{int}}} \quad (6.2.4)$$

gefunden werden. Bei der Vorgabe des Turbulenzgrades ist zu berücksichtigen, dass speziell beim Anlauf der Flamme Gravitationseffekte und Flammeninstabilitäten sowie die Wandgrenzschicht zu einer Produktion von

Turbulenz führen, wodurch ein Turbulenzgrad nur sehr schwer bestimmbar ist. Um diese Problematik zu umgehen, wird der Turbulenzgrad in dem physikalischen sinnvollen Bereich von ca. 4 – 8% als frei wählbar betrachtet. In dieser Arbeit wurde, wie später gezeigt wird, mit einem Turbulenzgrad von 6% eine gute Übereinstimmung zwischen Rechnung und Messung bei der Betrachtung von Flammenanlaufvorgängen erzielt. Deshalb wurde dieser Wert bei allen weiteren Simulationen als konstante Größe in der Initialisierung vorgegeben. Das turbulente integrale Längenmaß wird für Rohrströmungen hoher Reynoldszahl standardmäßig mit ungefähr 10% des Rohrdurchmessers ($l_{\text{int}} = 6.6 \text{ mm}$) angesetzt.

Da die laminare Brenngeschwindigkeit abhängig von der Brennstoffkonzentration ist (Gleichung 2.1.9), ergaben sich die Werte der Initialisierung in Abhängigkeit des jeweils untersuchten Gemisches. In Tabelle 4 sind die Anfangswerte dargestellt, die sich basierend auf den getroffenen Annahmen für ein Gemisch bei $p_0 = 1 \text{ atm}$ und $T_0 = 293 \text{ K}$ ergaben.

Wie bereits erwähnt wurde, wird eine Turbulenzproduktion durch Gravitationseinflüsse und Flammeninstabilitäten nicht durch das Standard- k - ε -Turbulenzmodell erfasst. Da zudem die Wände als reibungsfrei betrachtet werden (s. Kap.6.1.2), wurde zu Beginn der Simulation keine Produktion von Turbulenz berechnet. Dies hatte zur Folge, dass der in der Initialisierung bestimmte Wert der turbulenten kinetischen Energie aufgrund der vorgegebenen Dissipationsrate schnell vernichtet wird. Dadurch wurde die Turbulenz vor der Flamme in der Anlaufphase deutlich reduziert und es wurde trotz geeigneter Initialisierung eine falsche Flammenausbreitungsgeschwindigkeit berechnet. Um diese Problematik zu umgehen wurden die in der Initialisierung bestimmten Werte für k und ε als minimale Werte definiert, die in der Rechnung nicht unterschritten werden konnten. Dadurch war gewährleistet, dass sich die Flamme zunächst in einem abgeschätzten

	10% H_2	11% H_2	12% H_2	13% H_2	14% H_2	15% H_2
$s_L \text{ m/s}$	0.217	0.31	0.412	0.52	0.636	0.758
$k \cdot 1000 \text{ m}^2/\text{s}^2$	1.59	3.24	5.73	9.13	13.65	19.39
$\varepsilon \text{ m}^2/\text{s}^3$	0.009	0.028	0.066	0.132	0.242	0.409

Tabelle 4: Werte für k und ε zur Initialisierung des turbulenten Strömungsfeldes in Abhängigkeit der Wasserstoffkonzentration in Luft

turbulenten Strömungsfeld ausbreitet, bis der Einfluss der Turbulenzpromotoren durch die Hindernisse überwiegt.

Validiert wurde die beschriebene Vorgehensweise zur Simulation des Flammenanlaufs mit Messungen von Eder et al. in der Versuchsanlage ohne Hindernisse [EEM98]. Dabei wurde die Flammenausbreitung durch Thermoelemente bestimmt, die an der Ober- und Unterseite des Rohres mit ca. 8 mm Abstand zur Rohrwand auf den ersten 1000 mm in einem Abstand von 60 mm beginnend bei $x = 0.05$ m angebracht waren. Die gemessene Flammenausbreitung entsprach somit nicht der Flammenausbreitung auf der Rohrachse. In Abbildung 6.4 ist dieses Verhalten an einem Beispiel verdeutlicht.

Untersucht wurden in der Arbeit von Eder et al. magere Wasserstoff-Luftgemische mit einer Konzentration von 9 – 15 Vol.% H_2 in Luft. Die Messungen zeigten, dass nur bei sehr mageren Gemischen ($X_{H_2} \leq 10\%$) ein Einfluss der Gravitation auf die Flammenausbreitung zu sehen ist, der sich durch ein späteres Eintreffen der Flammenfront an der Unterseite im Vergleich zur Oberseite des Rohres ausdrückt.

In Abbildung 6.5 sind für verschiedene Wasserstoffkonzentrationen die Berechnungsergebnisse basierend auf dem BML-Verbrennungs-Modell den

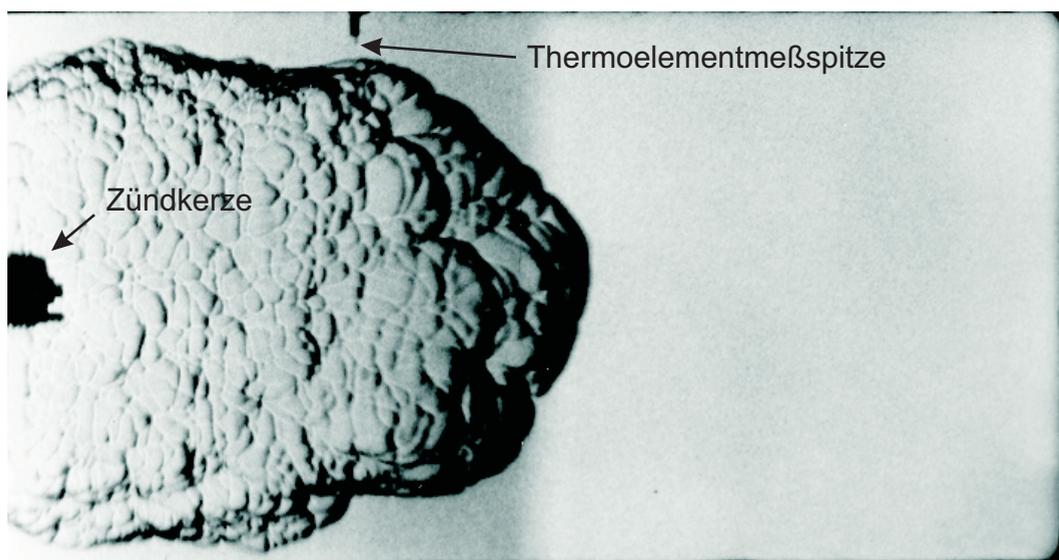


Abbildung 6.4: Schlierenaufnahme der Flamme im Glastube. Die Flamme hat das Thermoelement an der Bildoberseite noch nicht berührt [EEM98].

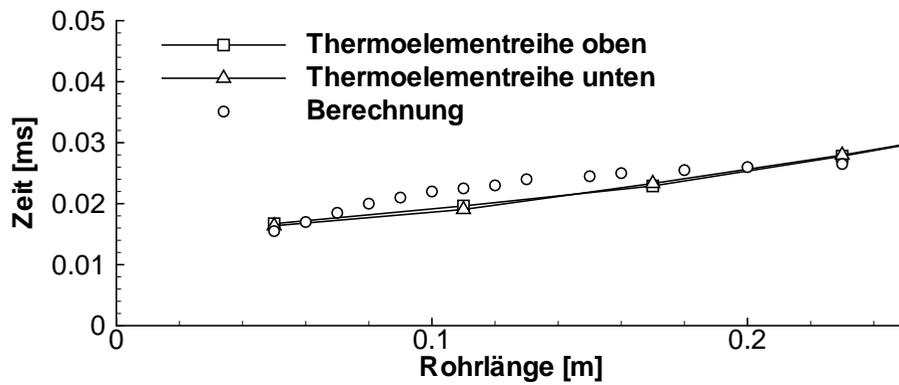
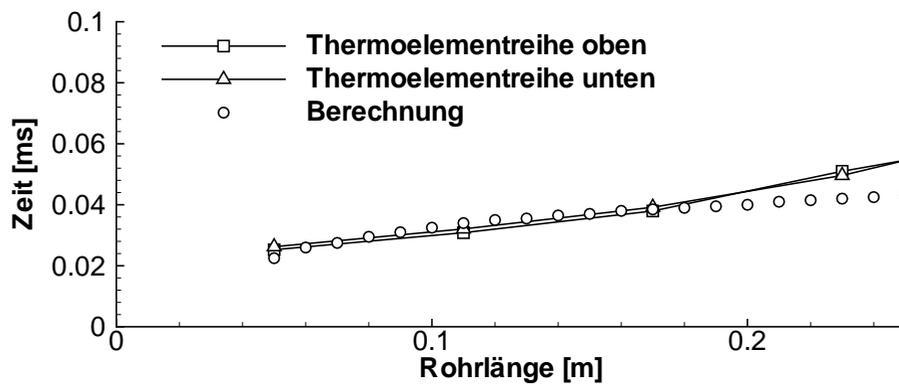
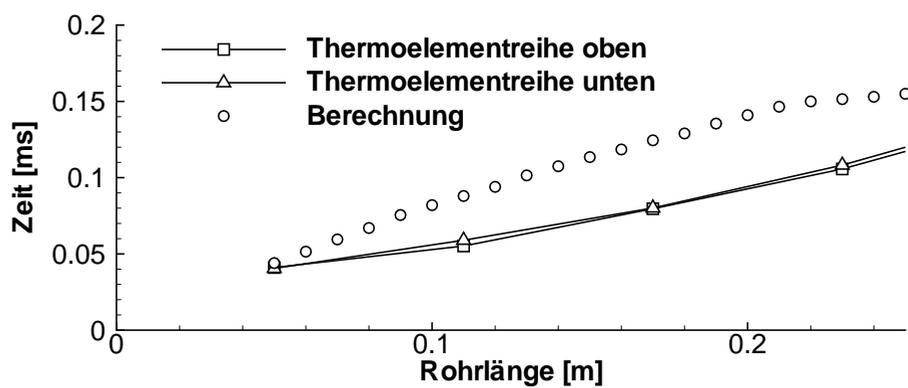
(a) 15 Vol.-%- H_2 (b) 13 Vol.-%- H_2 (c) 11 Vol.-%- H_2

Abbildung 6.5: Simulation des Flammenanlaufs für unterschiedliche Wasserstoffkonzentrationen.

Messergebnissen gegenübergestellt¹⁹. Bei der numerischen Simulation wurde dabei die Ausbreitung der Flammenfront entsprechend der Messung mit einem Wandabstand von 8.25 mm entlang der Rohrachse verfolgt. Hierfür wurde der Punkt der Flammenfront auf dieser Achse ermittelt, für den $\tilde{c} = 0.5$ galt. Dieser wurde als aktuelle Position der Flamme pro Zeitschritt abgespeichert. Wie sich zeigte, wurde die Flammenausbreitung für alle untersuchten Konzentrationen größenordnungsmäßig richtig wiedergegeben. Bei der Simulation stellte sich jedoch im betrachteten Bereich zwischen $x = 50$ mm und $x = 250$ mm im Vergleich zur Messung eine Beschleunigung der Flamme anstatt einer Verzögerung ein. Wie Eder et al. in ihrer Arbeit beschreiben, ist die gemessene Verzögerung auf den Reibungseinfluss an der Wand zurückzuführen. Schlierenmessungen in einer vergleichbaren Anlage beweisen (s. [EEM98]), dass die Flamme im Flammenanlauf beschleunigt, wenn die Ausbreitung entlang der Rohrmittelachse bestimmt wird. Da die Berechnung den Wandeinfluss nicht berücksichtigte (s. Kapitel 6.1.2), erklärt sich der qualitative Unterschied bei der Flammenausbreitung zwischen Rechnung und Messung. Der beschriebene Effekt konnte jedoch bei den folgenden Simulationen der turbulenten Flammenausbreitung in Rohren mit Blenden vernachlässigt werden, da die ersten Blenden bereits in 150 bzw. 180 mm Entfernung vom Rohranfang angebracht sind und somit der Wandeinfluss auf den Flammenanlauf keinen Einfluss mehr besitzt.

Um den berechneten Flammenanlauf zu veranschaulichen, sind in Abbildung 6.6 die Flamme und das induzierte Strömungsfeld für eine 13 Vol.% H_2 in Luft-Verbrennung dargestellt. Die Flammenfront wird hierbei durch die Isolinie für den Reaktionsfortschritt $\tilde{c} = 0.5$ repräsentiert. In der Abbildung ist zu erkennen, wie sich bereits kurz nach der „Zündung“ eine Expansionsströmung vor der Flamme entwickelte. Hinter der Flammenfront traten nur sehr geringe Strömungsbewegungen auf, wodurch die Annahme für die Ableitung der Initialisierung - die Strömungsgeschwindigkeit hinter der Flamme ist gleich null - gerechtfertigt war.

Die detaillierte Analyse der Berechnungsergebnisse ergab, dass die quan-

¹⁹Um eine Vergleichbarkeit der Ergebnisse zu ermöglichen wurden die berechneten Ergebnisse in der Zeit so verschoben, dass eine Übereinstimmung der Flammendurchtrittszeit an der ersten Photodiode hergestellt wurde. Für die Berechnung der 13 Vol.% H_2 in Luft-Flamme bedeutete dies z.B. ein $\Delta t = 0.092$ s.

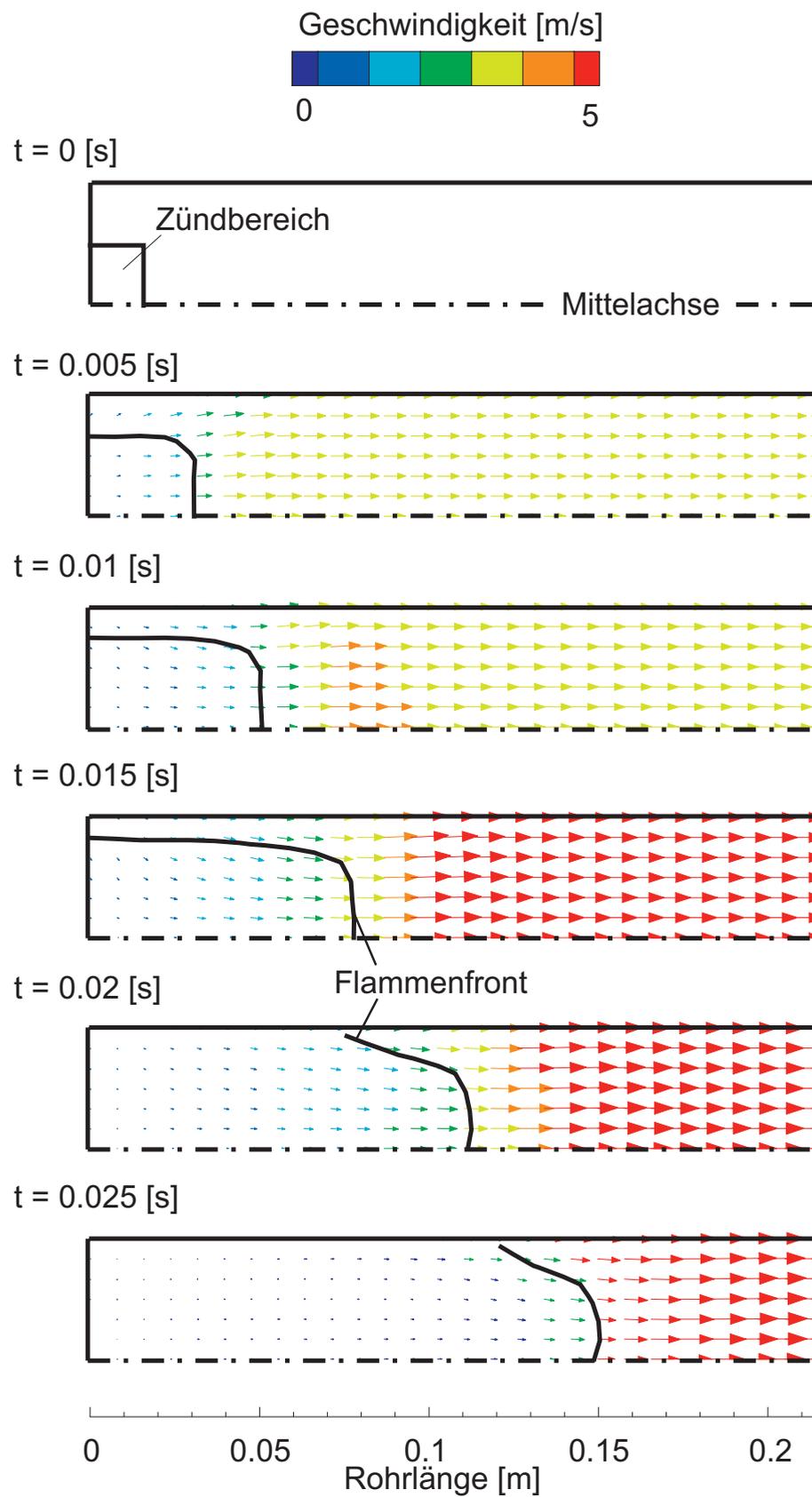


Abbildung 6.6: Simulation des Flammenanlaufs für eine 13 Vol.% H_2 in Luft-Flamme.

titativ gute Übereinstimmung zwischen Rechnung und Messung auf die Anpassung des turbulenten Zeitmaßes für den schwachturbulenten Bereich zurückzuführen war. Wie in Kapitel 4.3.2 beschrieben ist, wurde in diesem Bereich die Proportionalität im BML-Ansatz

$$\bar{\omega}_{c,BML} \propto \frac{1}{\tau_{\text{int}}} \quad (6.2.5)$$

durch

$$\bar{\omega}_{c,BML} \propto \frac{1}{\tau_c} \quad (6.2.6)$$

ersetzt, wobei das turbulente Zeitmaß der reaktiven Variablen τ_c durch den Zusammenhang:

$$\frac{\tau_{\text{int}}}{\tau_c} = 1 + \frac{4,4}{1 + 2k^{1/2}/s_L} \quad (6.2.7)$$

beschrieben wurde. Wie leicht zu erkennen ist, führt die Modifikation des turbulenten Zeitmaßes für sehr niedrige Turbulenz, wie sie beim Flammenanlauf zur Initialisierung vorgegeben wurde ($k \approx 1 \cdot 10^{-2}$ bei $s_L \approx 0.5$ m/s), zu einer Vervierfachung der Reaktionsrate. Ohne diese Anpassung wurde die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit während des Flammenanlaufs deutlich unterschätzt.

Bei der Berechnung des Flammenanlaufs mit dem PDF-Modell ergab sich keine Übereinstimmung zwischen der Messung und der Simulation. Zurückzuführen ist dies darauf, dass das PDF-Modell nicht für den Bereich moderater Turbulenzintensitäten geeignet ist und somit die Flammenausbreitung im Flammenanlauf größenordnungsmäßig unterschätzte. Prinzipiell kann durch eine Anpassung des turbulenten Zeitmaßes wie beim BML-Modell auch hier eine Verbesserung der Simulation erzielt werden. Im PDF-Modell wird das turbulente Zeitmaß zur Beschreibung der Skalar-dissipation (s. Gleichung 4.2.20) benötigt und wirkt sich somit indirekt auf die Reaktionsrate aus. In dieser Arbeit wurde diese Vorgehensweise jedoch nicht weiter verfolgt, da dies eine Verschiebung des PDF-Modells in den, bei der Wasserstoff-Luft-Verbrennung physikalisch nicht möglichen Bereich der niedrigen Turbulenz bei gleichzeitig chemisch limitierter Flammenausbreitung zur Folge hätte.

6.3 Verbrennungsprozess im Rohr mit Hindernissen

Basierend auf der beschriebenen Vorgehensweise zur Simulation des Flammenanlaufs wurden Verbrennungsprozesse in Geometrien mit Hindernissen betrachtet, bei denen aufgrund der Wechselwirkung zwischen der Flammenfront und der induzierten Turbulenz eine deutliche Steigerung der Reaktionsraten und somit eine starke Flammenbeschleunigung hervorgerufen wurde. Zur Untersuchung des Verbrennungsprozesses wurden sowohl Berechnungen mit dem BML-Modell, als auch dem PDF-Modell durchgeführt. Im folgenden werden die Ergebnisse dieser Berechnungen dargestellt, wobei auf allgemeine Phänomene des Verbrennungsprozesses wie:

- Flammenausbreitung, d.h. lokales Beschleunigen oder Verzögern der Flamme,
- Expansionsströmung vor der Flamme,
- Turbulenzgenerierung durch die Wechselwirkung der Gasbewegung mit den Hindernissen und
- Wechselwirkung Turbulenz - Flammenfront, d.h. Klassifizierung der Verbrennung,

geachtet wird. Zudem werden die Unterschiede aufgezeigt, die sich durch die Verwendung des BML-Modells im Vergleich zur Simulation mit dem PDF-Modell ergeben haben.

Zur Bestimmung der Flammenausbreitung, wurde bei der numerischen Simulation die Ausbreitung der Flammenfront entlang der Mittelachse des Rohres verfolgt. Hierfür wurde der Punkt der Flammenfront auf der Mittelachse ermittelt, für den $\tilde{c} = 0.5$ gilt. Dieser wird im folgenden als Flammenschwerpunkt bezeichnet. Begründet werden kann dies, wenn die berechnete Verteilung des Reaktionsfortschritts genauer betrachtet wird. Wie Durst [Dur00] in seiner Arbeit bemerkte, werden bei der numerischen Simulation aufgrund der zur Behandlung der Turbulenz notwendigen Zeitmittelung nur zeitgemittelte Größen wiedergegeben, wodurch sich, wie in Abbildung 6.7 schematisch dargestellt, eine zeitgemittelte Flammenkontur ergibt, die wesentlich breiter ist als die tatsächliche Flamme selbst. Der

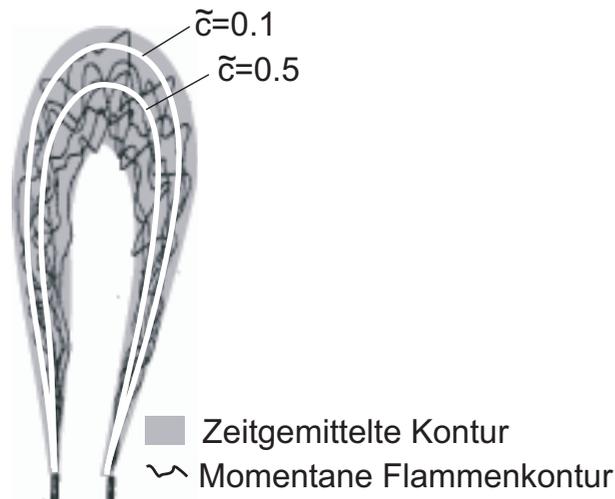


Abbildung 6.7: Momentane und zeitgemittelte Flammenkonturen am Beispiel eines Bunsenbrenners (s. u.a. [Dur00]).

Wert für $\tilde{c} = 0.5$ kann somit als momentaner Flammenmittelpunkt interpretiert werden, um den die momentanen Flammenkonturen schwanken²⁰. Zudem besitzt das BML-Modell aufgrund der Proportionalität

$$\bar{\omega}_{c,BML} \propto \tilde{c} \cdot (1 - \tilde{c}) \quad (6.3.1)$$

bei $\tilde{c} = 0.5$ das Maximum in der Reaktionsrate.

Zur Bestimmung der Flammenregimes ist es nötig, die hydrodynamischen Zustände vor der Flammenfront zu erfassen. Ausgewertet wurden hierfür deshalb die Werte, die bei dem Reaktionsfortschritt $\tilde{c} = 0.1$ (s. Abbildung 6.7) auftraten. Aufgrund der niedrigen Reaktionsrate bis zu diesem Reaktionsfortschritt (s. z.B. $\omega_{BML} \propto \tilde{c}(1 - \tilde{c})$) und dem damit verbundenen, geringen Einfluss auf die Strömung konnte davon ausgegangen werden, dass die Werte bei $\tilde{c} = 0.1$ näherungsweise denen vor der Flammenfront entsprachen.

6.3.1 Blenden mit 30% Blockierrate

Messergebnisse zur Validierung Beauvais [Bea94] untersuchte das Verhalten turbulenter Flammen in seiner Versuchsanlage mittels Laser-Doppler-

²⁰Dies ist in erster Linie nur für Mischungslimitierte Verbrennungsvorgänge gültig, da bei chemisch limitierten Verbrennungsvorgängen keine klar definierte Flammenfront mehr erkennbar ist.

Anemometrie-Messungen (LDA, s. [May01]). Dabei wurde das Fenstersegment in der Versuchsanlage so angebracht, dass in einem 1.6 m längs der Rohrachse vom Zündort entfernten LDA-Messvolumen zeitlich hochaufgelöste Strömungsmessungen in der Expansionsströmung durchgeführt werden konnten. Aus diesen zeitlichen Geschwindigkeitsverläufen bestimmte Beauvais [Bea94] Turbulenzintensität und turbulentes integrales Längenmaß mittels statistischer Methoden und die Brenngeschwindigkeit über eine gasdynamische Betrachtung. Die absolute Flammenausbreitungsgeschwindigkeit v_F kann aus den gemessenen Daten durch Superposition der ermittelten Brenngeschwindigkeit mit der Ausbreitungsgeschwindigkeit des Gases vor der Flamme bestimmt werden.

Zur Generierung von Turbulenz verwendete Beauvais unterschiedliche Hindernisstrecken. Variiert wurden dabei Abstand und Blockierrate der Blenden sowie die Länge der Hindernisstrecke. Im Rahmen dieser Arbeit wurde die Konfiguration näher untersucht, bei der Blenden mit 30% Blockierrate im Abstand von 150 mm beginnend an der Zündquelle über eine Länge von 3 m verwendet wurden. Im folgenden wird diese Konfiguration kurz mit „30-150-3000“ bezeichnet. Beauvais untersuchte in dieser Konfiguration Wasserstoffkonzentrationen von 11.4 bis 18.7% H_2 in Luft. Im Rahmen dieser Arbeit wurde jedoch nur der Konzentrationsbereich von 12 bis 15% H_2 in Luft näher betrachtet.

In Abbildung 6.8 sind die von Beauvais ermittelten Flammengeschwindigkeiten in Abhängigkeit der Wasserstoff-Konzentration aufgetragen. Wie das Ergebnis zeigt, ergab sich zwischen der jeweils maximalen bzw. minimalen Flammengeschwindigkeit v_F über den gesamten Konzentrationsbereich eine große Streuung. Die Flammengeschwindigkeit war jedoch in jedem der untersuchten Fälle subsonisch in Bezug auf den thermodynamischen Ausgangszustand und konnte somit als langsame Deflagrationen identifiziert werden.

Bei der Simulation dieser Flammenausbreitungsvorgänge ist zu beachten, dass Beauvais die zur Validierung verwendeten Messungen bei einem Ausgangszustand von $p_{init} = 1$ bar und $T_{init} = 373$ K durchgeführt hat. Dies bedeutete, dass sowohl der Vorfaktor K_2 im BML-Modell, wie auch die Reaktionstabellen $\overline{w_c}$ und $\overline{c''w_c}$ des PDF-Modells an den veränderten Zustand angepasst werden mussten. Da die Ableitung dieser Größen vollständig ana-

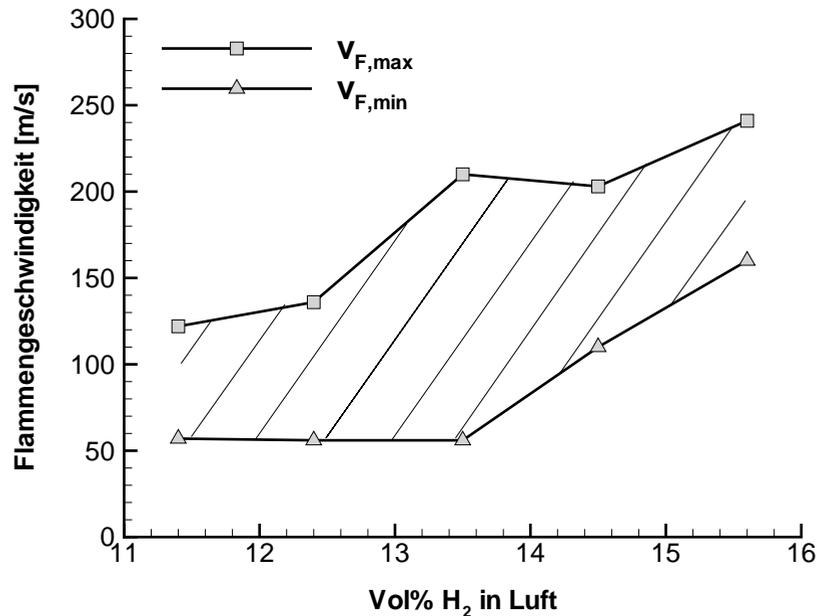


Abbildung 6.8: Flammenausbreitungsgeschwindigkeiten in Abhängigkeit der H_2 -Konzentration gemessen von Beauvais [Bea94]. Konfiguration: „30-150-3000“. Messposition bei $x = 1.6$ m.

log zu der in Kapitel 4 beschriebenen Vorgehensweise ist, wird an dieser Stelle nicht näher darauf eingegangen.

Die Veränderung der Ausgangstemperatur wirkt sich auch auf die laminare Brenngeschwindigkeit s_L aus. Da die Initialisierung des turbulenten Strömungsfeldes, wie in Kapitel 6.2 beschrieben, in Abhängigkeit der laminaren Brenngeschwindigkeit erfolgte, musste auch hier eine Anpassung durchgeführt werden. Als thermische Randbedingung für die Berechnung wurde eine konstante Wandtemperatur von $T_W = 373$ K an allen Berandungen der Geometrie definiert.

Flammenausbreitung Anhand des Beispiels der 13 Vol.% H_2 in Luft-Flamme wird im folgenden der Verbrennungsprozess in der Konfiguration „30-150-3000“ detailliert analysiert. Betrachtet wird hierfür zunächst die Flammenausbreitung in der Versuchsanlage. Berechnet wurde diese sowohl mit dem BML-Modell, als auch dem PDF-Modell basierend auf einer „gestutzten“ Gaußverteilung. Bei der Simulation wurde zur Erfassung der

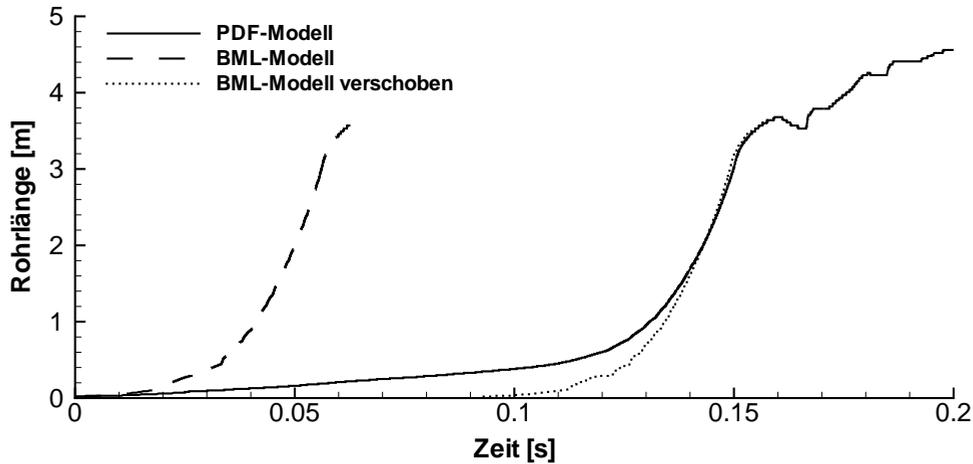


Abbildung 6.9: Berechnete Flammenausbreitung einer 13 Vol.% H_2 in Luft-Flamme.

Flammenausbreitung der Flammenschwerpunkt, für den $\tilde{c} = 0.5$ gilt, entlang der Mittelachse des Rohres verfolgt.

Wie Abbildung 6.9 zeigt, sagt das BML-Modell im Vergleich zum PDF-Modell eine deutlich größere Flammenbeschleunigung voraus. Zurückzuführen ist dies auf die Berechnung des Flammenanlaufs, auf den das BML-Modell durch das modifizierte turbulente Zeitmaß der reaktiven Variablen \tilde{c} optimiert wurde. Dadurch prognostizierte das BML-Modell von Beginn an eine deutlich höhere Flammengeschwindigkeit als das PDF-Modell, was wiederum in den ersten Hindernissen eine größere Expansionsströmung und somit stärkere Turbulenzgenerierung vor der Flamme zur Folge hatte. Die daraus resultierenden höheren Reaktionsraten bewirkten den beobachteten Unterschied in der Anfangsphase der Simulation. Im weiteren Verlauf der Flammenausbreitung glich sich jedoch, wie Abbildung 6.9 zeigt, das Ergebnis mit dem PDF-Modell dem des BML-Modells an. Da sich dadurch bezüglich des Verbrennungsprozesses ein ähnliches Verhalten ergeben hat, wird im folgenden die Berechnung mit dem BML-Modell als Diskussionsgrundlage verwendet. Auf wesentliche Unterschiede, die sich bei der Berechnung mit dem PDF-Modell ergeben haben, wird gezielt hingewiesen.

Aus dem in Abbildung 6.9 dargestellten Verlauf der Flammenposition über der Zeit kann die Flammengeschwindigkeit als Funktion des Ortes be-

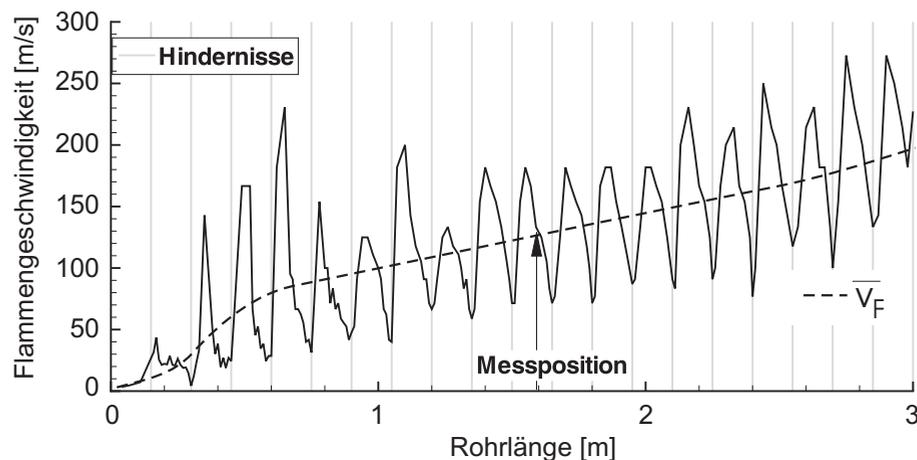


Abbildung 6.10: Flammenausbreitungsgeschwindigkeit berechnet mit dem BML-Modell als Funktion des Ortes.

stimmt werden, s. Abbildung 6.10. Dabei zeigte sich, dass v_F sehr starken lokalen Schwankungen unterworfen war. Die Flamme wurde beim Durchtritt durch die Hindernisse aufgrund der in diesem Bereich auftretenden starken Jetströmung mitgerissen (s. [Jor99]). Dadurch trat eine Beschleunigung der Flammenfront ein, obwohl die Brenngeschwindigkeit, gemessen an der lokalen Reaktionsrate, keine entsprechende Steigerung erfuhr. Nach dem Passieren des Hindernisses verzögerte sich v_F bis zum Durchtritt beim folgenden Hindernis, bei dem sich der beschriebene Vorgang wiederholte. Generell war ein Anstieg von v_F mit dem Laufweg der Flamme aufgrund der steigenden induzierten Turbulenz und der damit verbundenen erhöhten Reaktionsrate zu beobachten.

Die Auswertung der Flammengeschwindigkeit v_F an der Messposition $x = 1.6$ m ergab für die Berechnung mit dem BML-Modell ein lokales $v_F = 136$ m/s und für die Berechnung mit dem PDF-Modell ein $v_F = 100$ m/s. Der Vergleich mit den Messergebnissen in Abbildung 6.8, Seite 107 zeigt, dass sowohl das mit dem BML-Modell, wie auch das mit dem PDF-Modell gewonnene Ergebnis eine gute Lösung darstellt.

In Abbildung 6.11 ist der zeitliche Verlauf der mittleren Strömungsgeschwindigkeit in Achsrichtung an der Messposition $x = 1.6$ m dargestellt. Die horizontale Geschwindigkeitskomponente stieg bereits weit vor dem Passieren der Flammenfront aufgrund der durch die Flamme induzierten Verdrängungsströmung nahezu stetig an. Nach dem Erreichen des Maxi-

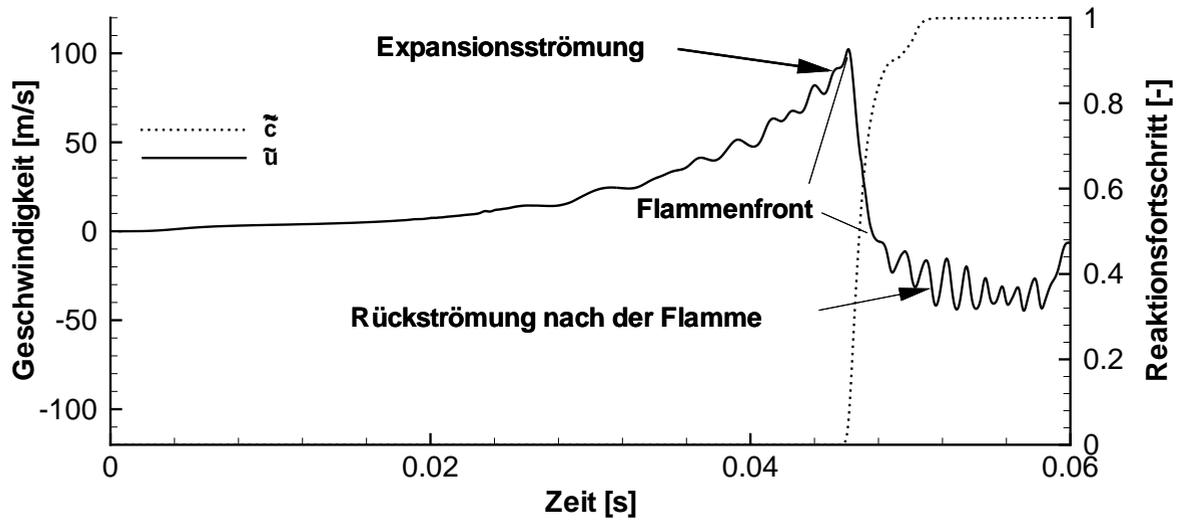


Abbildung 6.11: Zeitlicher Verlauf der axialen Strömungskomponente und des Reaktionsfortschritts an Position $x = 1.6$ m. Berechnung mit dem BML-Modell.

mums zeigte sich ein steiler Geschwindigkeitsabfall, der durch einen kurzen, annähernd sattelförmigen Verlauf beendet wurde. Im weiteren Verlauf ergab sich eine Rückströmung hinter der Flammenfront, die durch eine Vielzahl von Druckwellen überlagert wurde. Die Simulation reproduzierte mit dem beschriebenen Verhalten, wie der Vergleich mit dem in Abbildung 6.12 dargestellten, gemessenen Verlauf der axialen Strömungskomponente beweist, einen typischen Geschwindigkeitsverlauf in der Versuchsanlage. Beauvais ordnete in seiner Arbeit, wie aus Abbildung 6.12 ersichtlich ist, den Bereich des starken Geschwindigkeitsabfalls bis zum kurzen sattelförmigen Verlauf der Brennzone zu. Wird dies für die Berechnung analog durchgeführt, lässt sich eine Flammendurchgangszeit von $\Delta t_F \approx 1.3$ ms bestimmen. Der Verlauf in Abbildung 6.12 zeigt eine Flammendurchgangszeit von ca. 1 ms. Wird der berechnete Reaktionsfortschritt \tilde{c} betrachtet, zeigt sich, dass das Gemisch bis zum Zeitpunkt des sattelförmigen Verlaufs noch nicht vollständig abreagiert war und einen Reaktionsfortschritt von $\tilde{c} \approx 0.85$ aufwies. Da in diesem Bereich die Reaktionsrate des Gemisches bereits sehr niedrig ist, zeigt sich keine deutliche Auswirkung auf die Strömung mehr und ist somit messtechnisch nur schwer zu erfassen.

Entsprechend der Streuung bei den gemessenen Flammengeschwindigkei-

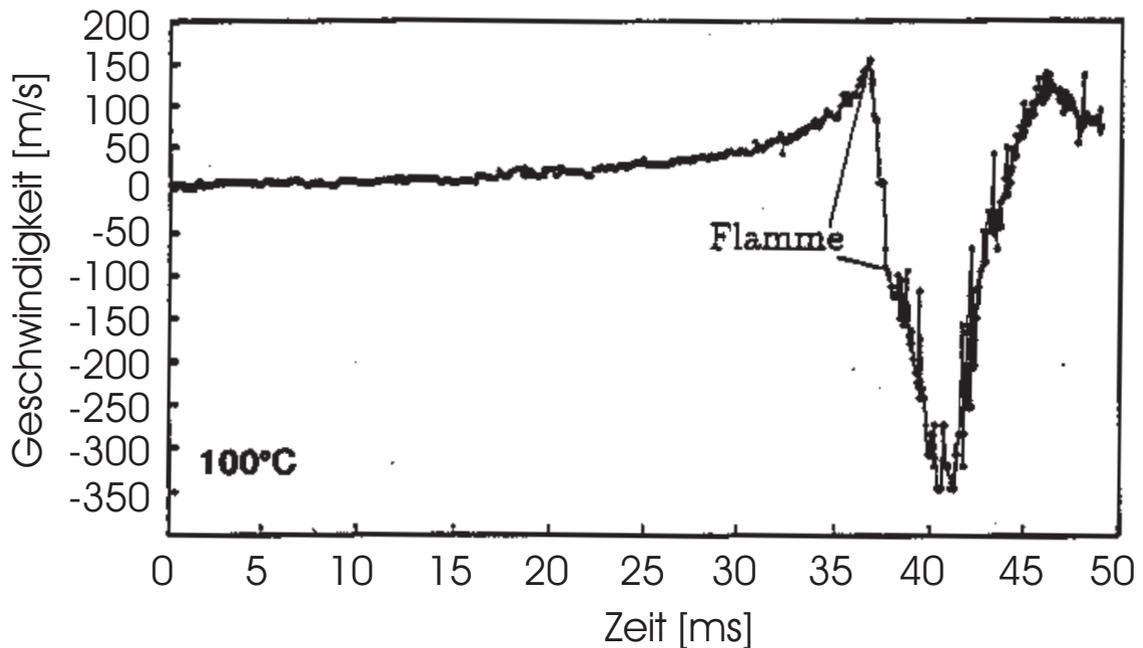


Abbildung 6.12: Typischer Verlauf der axialen, verbrennungsinduzierten Gasbewegung in der Versuchsanlage, Gemisch 12.4% H_2 in Luft [Bea94].

ten ergaben sich bei der Messung unterschiedlich ausgeprägte Expansionsströmungen vor der Flamme (s. Beauvais [Bea94]). Es zeigte sich jedoch, dass bei der Berechnung sowohl der Wert für die horizontale Geschwindigkeitskomponente in der Expansionsströmung mit $\tilde{u} \approx 100$ m/s, wie auch der Wert für die Rückströmung mit $\tilde{u} \approx -50$ m/s in diesem Streubereich lagen.

In Abbildung 6.13 ist zur Veranschaulichung das berechnete Strömungsfeld zusammen mit der Flammenfront im Bereich der Messposition dargestellt. Zur Repräsentierung des Beginns der Flammenfront ist die Iso-Linie $\tilde{c} = 0.1$ für den Reaktionsfortschritt dargestellt. Wie sich zeigt, war die Strömung vor der Flamme durch eine nahezu vollständige Ausrichtung in Achsrichtung gekennzeichnet. Die maximale Strömungsgeschwindigkeit vor der Flamme trat dabei kurz nach dem Hindernis auf der Mittelachse des Rohres auf. Durch dieses Strömungsverhalten wurde die Flammenfront beim Durchtritt durch das Hindernis, wie in Abbildung 6.13 Bild 2 ($t = 0.0456$ s) zu erkennen ist, kurzfristig beschleunigt. Nur in schmalen Bereichen hinter den Hindernissen zeigten sich kleine Verwirbelungen und Rückströmgebiete, welche, wie später gezeigt wird, zu Scherströmungen

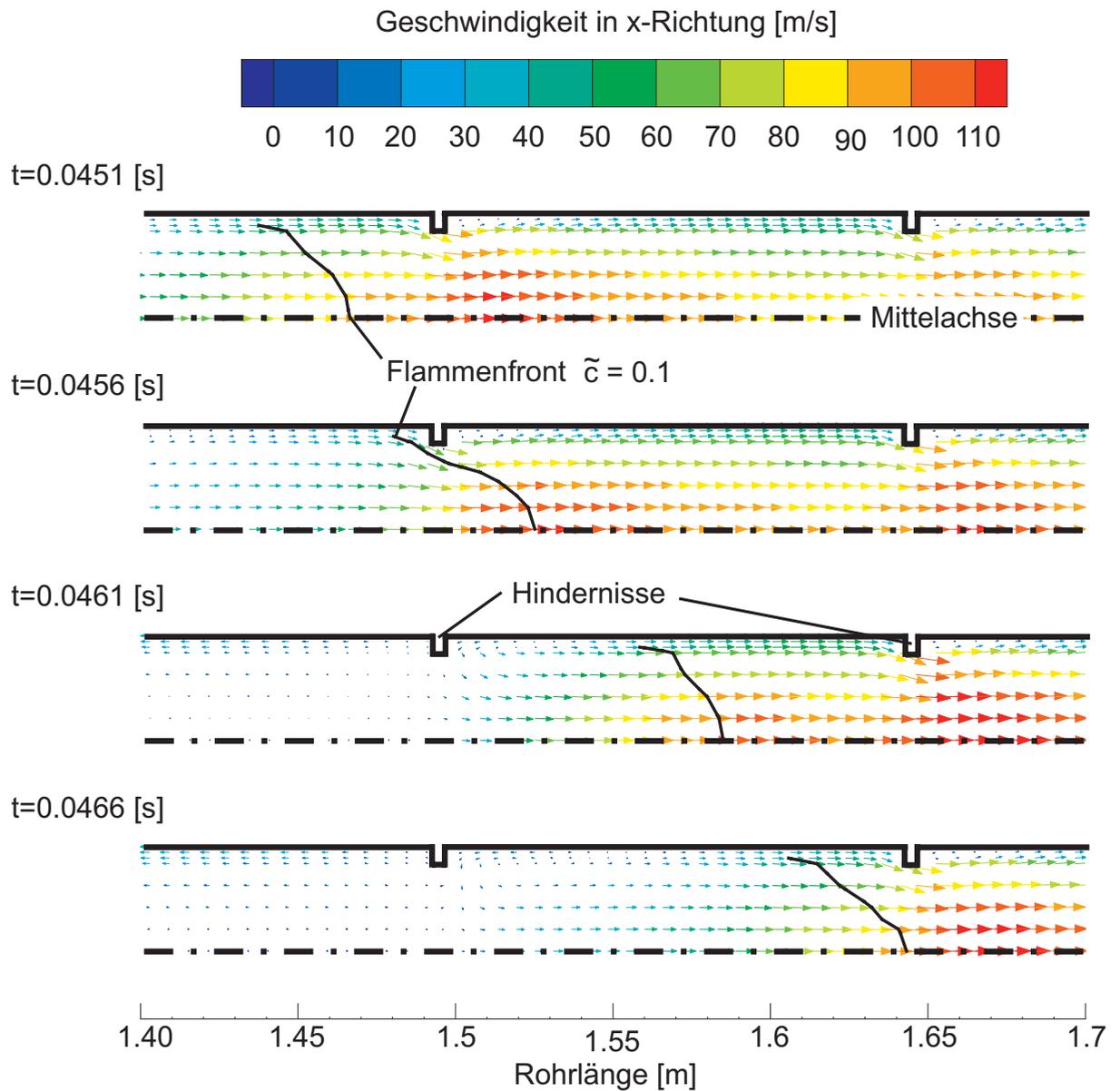


Abbildung 6.13: Zeitliche Entwicklung des Strömungsfeldes beim Durchtritt der Flamme durch das Hindernis bei $x = 1.49$ m.

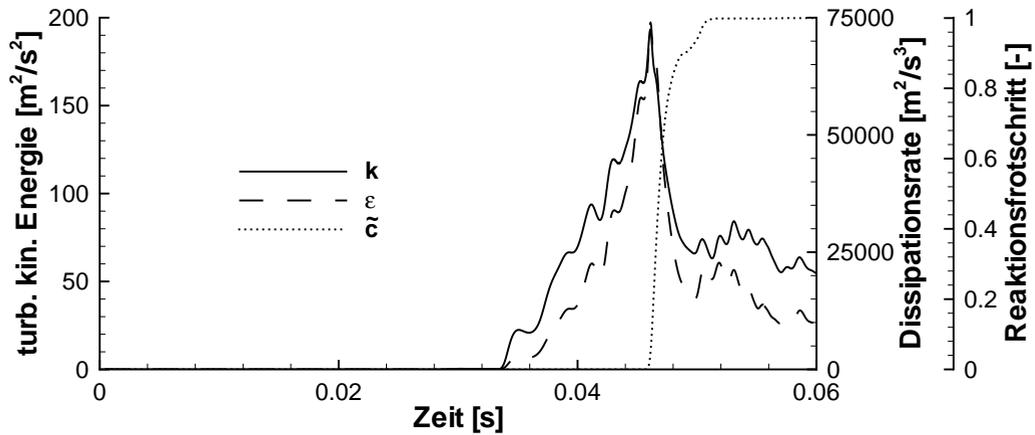


Abbildung 6.14: Zeitlicher Verlauf der turbulenten kinetischen Energie k und der Dissipationsrate ε an Position $x = 1.6$ m in der Versuchsanlage. Berechnung mit dem BML-Modell.

und somit zur Produktion von Turbulenz führten.

Turbulenz Für die Bestimmung der Turbulenz im Strömungsfeld wird der zeitliche Verlauf der turbulenten kinetischen Energie sowie der Dissipationsrate an der LDA-Messposition betrachtet. Wie in Abbildung 6.14 dargestellt, entwickelte sich die lokale Turbulenz analog zur Expansionsströmung bereits deutlich vor dem Eintreffen der Flammenfront. Das Maximum wurde jedoch erst kurz vor dem Passieren der Flammenfront mit Werten von $k = 189 \text{ m}^2/\text{s}^2$ und $\varepsilon = 73000 \text{ m}^2/\text{s}^3$ erreicht. Mit der zugehörigen mittleren Strömungsgeschwindigkeit $\tilde{u} \approx 100 \text{ m/s}$ lassen sich basierend auf Gleichung 2.2.6, 2.2.7 und Gleichung 2.2.9 die folgenden charakteristischen Werte der Turbulenz bestimmen:

- Turbulenzgrad $Tu \approx 11 \%$
- integrales Längenmaß $l_{\text{int}} \approx 6 \text{ mm}$.

Die Messung der Turbulenz ergab bei der betrachteten Konfiguration für alle untersuchten Konzentrationen Werte von $Tu \approx 6\%$ und $l_{\text{int}} \approx 3 \text{ mm}$. Wie der Vergleich zeigt, wurde durch die Simulation sowohl der Turbulenzgrad, wie auch das integrale Längenmaß höher als bei der Messung

prognostiziert. Dieser Unterschied ergab sich einerseits durch die Verwendung des k - ε -Turbulenzmodells, welches Turbulenz nur isotrop beschreiben kann und somit dreidimensionale Effekte nicht berücksichtigt. Andererseits ist die exakte Bestimmung des turbulenten integralen Längenmaßes mittels der Taylor-Hypothese, wie sie bei den Messungen von Beauvais angewandt wurde, an die idealen Bedingungen einer homogenen turbulenten Strömung mit konstanter Durchschnittsgeschwindigkeit geknüpft (s. u.a. [EEM98]). Diese Voraussetzung ist jedoch bei der Betrachtung von instationären Flammenausbreitungsvorgängen prinzipiell nicht gegeben. In Anbetracht der Tatsache, dass für turbulente, kalte Rohrströmungen bereits ohne Hindernisse ein Turbulenzgrad von bis zu 6% auftreten kann, scheint der ermittelte Wert von $Tu \approx 11\%$ noch im vernünftigen Bereich zu liegen. Auch das integrale Längenmaß, das in turbulenten Rohrströmungen mit hoher Reynolds-Zahl allgemein standardmäßig mit 10 % des Durchmessers abgeschätzt wird, stellte mit $l_{\text{int}} \approx 6$ mm bei einem Rohrdurchmesser von 66 mm ein akzeptables Maß dar.

Um das Verhalten der Turbulenz vor der Flammenfront zu verdeutlichen, sind in Abbildung 6.15 die Flammenposition und das zugrundeliegende Feld der turbulenten kinetischen Energie zu unterschiedlichen, kurz aufeinanderfolgenden Zeiten dargestellt. Der Beginn der Flammenfront wird hierbei wieder repräsentiert durch die Iso-Linie $\tilde{c} = 0.1$. Auch hier zeigte sich, dass sich die Turbulenz bereits deutlich vor der Flammenfront und hauptsächlich hinter den Hindernissen ausgebildet hat. Dadurch entstand eine räumliche Verteilung der Turbulenz zwischen den Kammern²¹. Wird aus dieser Verteilung und dem zugrundeliegenden Geschwindigkeitsfeld eine Verteilung des Turbulenzgrades ermittelt, ergibt sich ein Abfall des Wertes vom Rand zur Mitte des Rohres sowie vom Beginn der Kammer zum Ende der Kammer. Dieses Verhalten wurde für diese Konfiguration auch von Beauvais beobachtet. Zur Verdeutlichung ist in Abbildung 6.16 der berechnete radiale Verlauf des Turbulenzgrades Tu_R bei $x = 1.576$ m sowie der axiale Verlauf Tu_H für $r = 0.273$ m zum Zeitpunkt $t = 0.0456$ s dargestellt.

²¹Kammer ist definiert als der Bereich zwischen zwei Blenden (s. Abbildung 6.2, Seite 92).

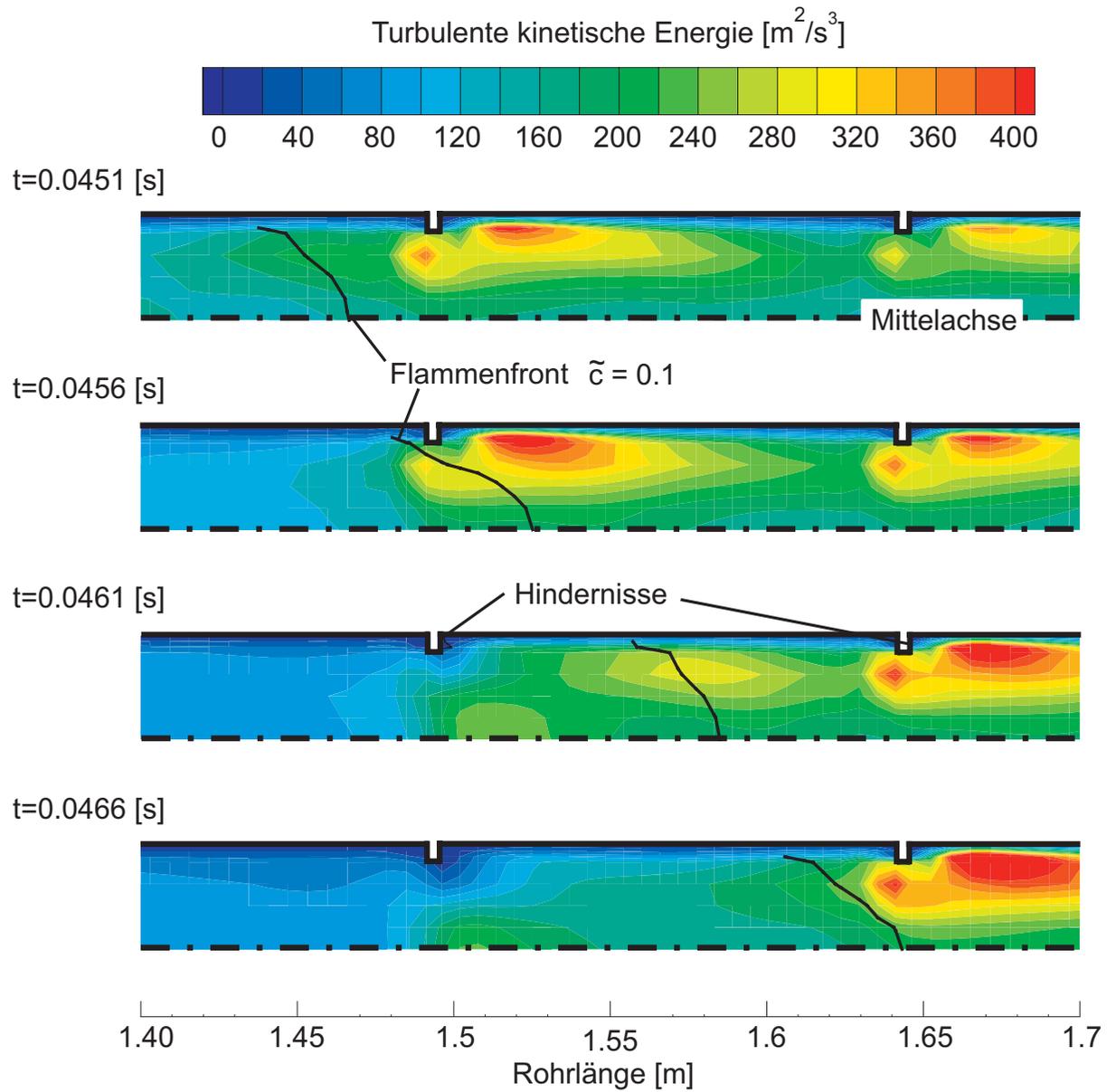


Abbildung 6.15: Zeitlicher Verlauf der turbulenten kinetischen Energie k in m^2/s^2 beim Durchtritt der Flamme durch ein Hindernis.

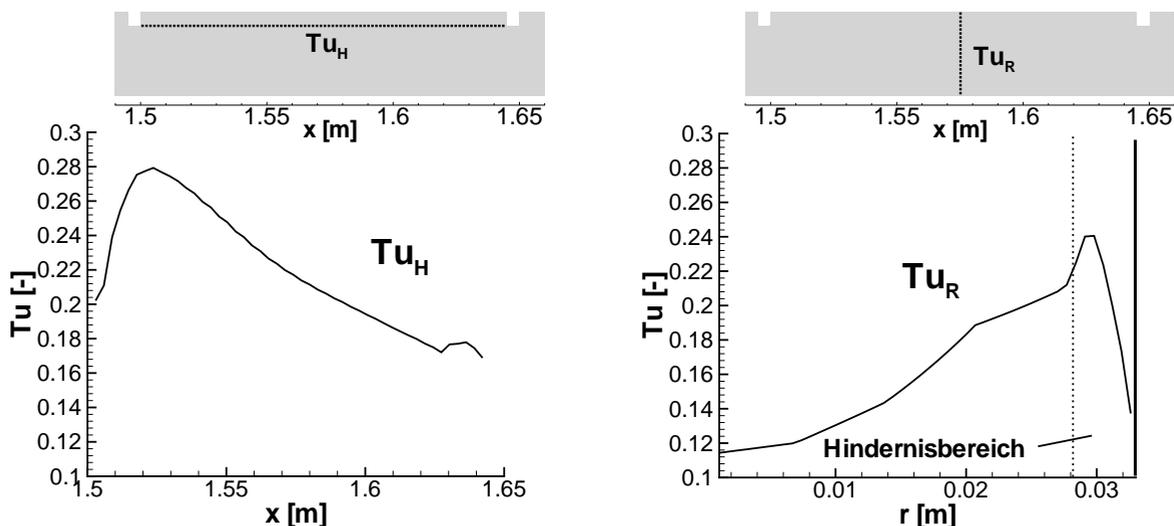


Abbildung 6.16: Örtlicher Verlauf des Turbulenzgrades zum Zeitpunkt $t = 0.0456$ s

Flammenregime Zur Klassifizierung des Verbrennungsprozesses in die unterschiedlichen Brennregimes (s. Kapitel 2.3.2), wurde die Karlovitz-Zahl als entscheidende Größe herangezogen. Diese ergibt sich in Abhängigkeit der berechneten turbulenten Strömungsgrößen k und ε . Auf der Basis von Gleichung 2.3.2 lässt sich unter Verwendung der Gleichungen 2.1.12²², 2.1.13 sowie 2.2.1 der Zusammenhang

$$\text{Ka} = \frac{\sqrt{\nu}}{s_L^2} \cdot \sqrt{\varepsilon} . \quad (6.3.2)$$

ableiten. Für die Damköhler-Zahl, welche als zusätzliche Information ebenfalls betrachtet wird, folgt basierend auf Gleichung 2.3.1 und 2.2.12 analog zur Ableitung von Gleichung 6.3.2

$$\text{Da} = \frac{s_L^2}{\nu} \cdot \frac{k}{\varepsilon} . \quad (6.3.3)$$

Da die laminare Brenngeschwindigkeit quadratisch in jede Gleichung eingeht, besitzt sie einen großen Einfluss auf die berechneten Kennzahlen. Dies ist in Anbetracht der Tatsache zu sehen, dass es, wie in Kapitel 2.1 beschrieben ist, speziell im mageren Bereich der Wasserstoff-Luft-Verbrennung verschiedene Ansätze für die laminare Brenngeschwindigkeit gibt. Je nach

²²Hierbei wird die Annahme $\nu \approx a$ getroffen.

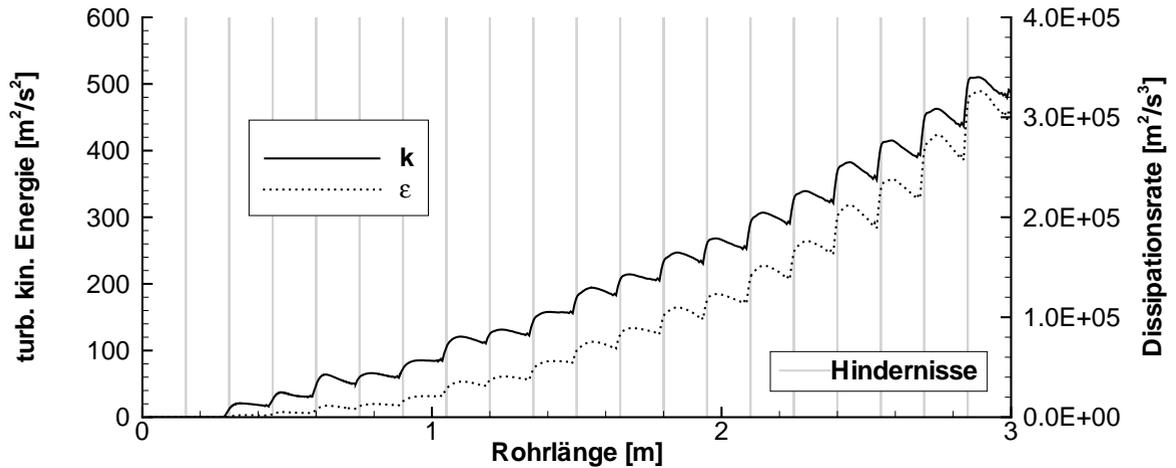
Ansatz können sich deutliche Unterschiede in den berechneten Kennzahlen ergeben.

Zur Bestimmung des Flammenregimes wurden die Zustände der Flamme auf der Rohrachse zu Beginn der Flammenfront, d.h. bei $\tilde{c} = 0.1$, als Funktion des Ortes in der Versuchsanlage untersucht. In Abbildung 6.17(a) wird zunächst der örtliche Verlauf der turbulenten kinetischen Energie und der Dissipationsrate betrachtet. Wie zu erwarten war, nahm die Turbulenz vor der Flamme in der Hindernisstrecke mit dem Voranschreiten der Flamme zu. Dabei traten, wie bereits beschrieben, kurz hinter dem Hindernis (markiert durch die grauen Balken) jeweils lokale Maxima der Turbulenz auf. Die turbulente kinetische Energie sowie die Dissipationsrate verhielten sich dabei nahezu analog.

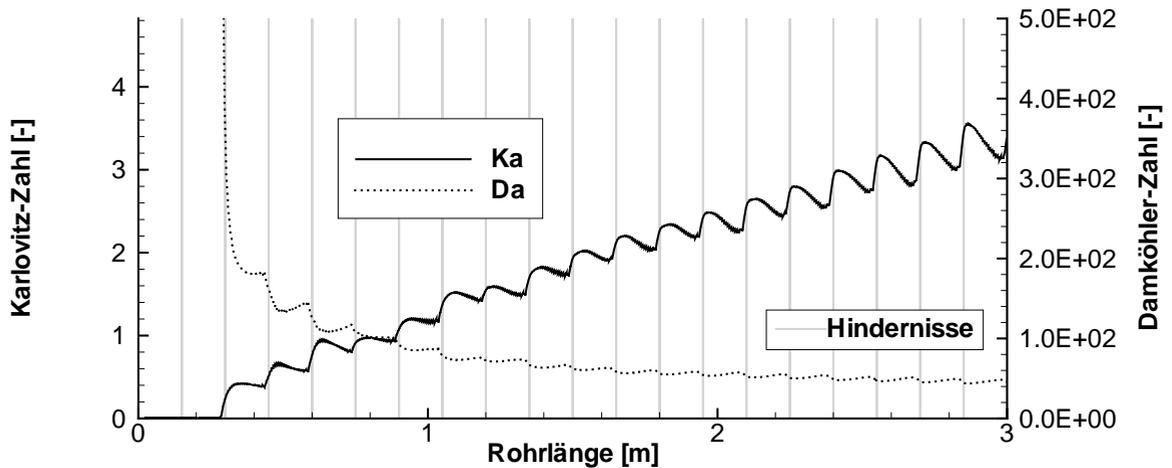
Die Auswirkungen der Turbulenz auf die Flammenfront sind in Abbildung 6.17(b) als Funktion der Karlovitz-Zahl dargestellt. Wie sich zeigt, wurde der Wert für $Ka = 1$, nach ca. 1 m in der Hindernisstrecke überschritten. Dadurch war aufgrund der Kennzahl eine Verlagerung der Verbrennung vom gefalteten Flamelet-Bereich in den Bereich der dünnen Reaktionszonen gekennzeichnet. Im weiteren Verlauf stieg die Karlovitz-Zahl in der Hindernisstrecke mit der Turbulenz weiter an und erreichte am Ende der Hindernisstrecke mit $Ka \approx 3$ ihren Maximalwert. In der anschließenden Auslaufstrecke, welche hier nicht dargestellt ist, reduzierte sich der Wert wieder. Invers zur Karlovitz-Zahl verlief, wie in Abbildung 6.17(b) dargestellt, die Damköhler-Zahl.

Zur Verdeutlichung der durchlaufenen Flammenregimes ist in Abbildung 6.18 der Zustand der Verbrennung für jeden vierten Zeitschritt der Berechnung in das modifizierte Borghi-Diagramm projiziert. Zunächst startete die Flamme, bedingt durch die Initialisierung im Bereich der gewellten Flamelets. Bereits beim Passieren des ersten Hindernisses trat ein Wechsel des Flammenregimes vom Bereich der gewellten in den Bereich der gefalteten Flamelets auf. Aufgrund der starken Änderung des turbulenten Feldes hinter den ersten zwei Hindernissen treten die Veränderungen im Borghi-Diagramm sprunghaft auf. Dieses Verhalten änderte sich ab dem dritten Hindernis. Die Turbulenzintensität in der Flammenfront nahm von da an bei nahezu konstantem integralen Längenmaß der turbulenten Strömung stetig zu. Dabei wechselte die Flamme nach dem sechsten Hindernis (s. Ab-

bildung 6.17(b)) vom Regime der gewellten Flamelets in den Bereich der dünnen Reaktionszonen. Erst nach dem Erreichen des Endes der Hindernisstrecke und dem damit verbundenen Maximalwert der Karlovitz-Zahl reduzierte sich die Turbulenzintensität in der Flammenfront wodurch sich



(a) Turbulente kinetische Energie und Dissipationsrate



(b) Karlovitz-Zahl und Damköhler-Zahl

Abbildung 6.17: Örtliche Entwicklung der Turbulenz und der Kennzahlen des turbulenten Verbrennungsprozesses in der Hindernisstrecke. Werte zu Beginn der Flammenfront bei $\tilde{c} = 0.1$.

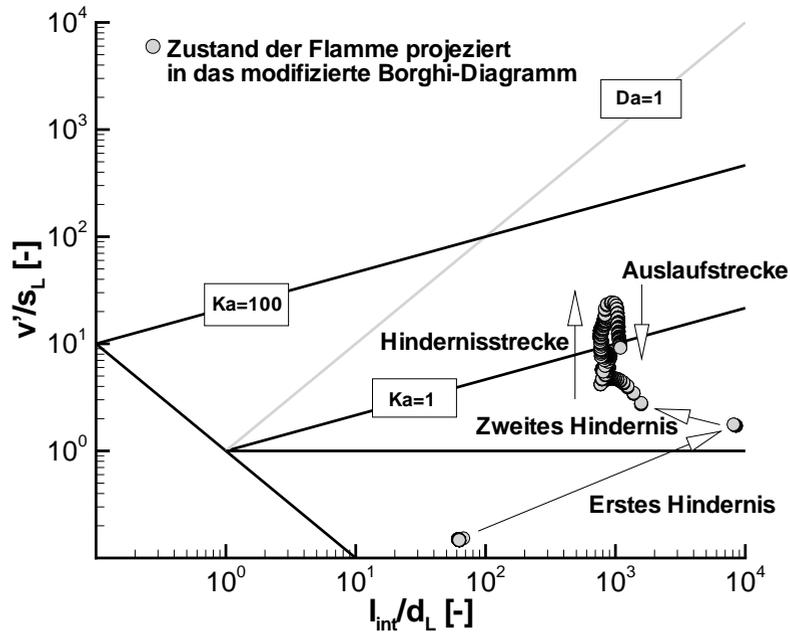


Abbildung 6.18: Momentan vorherrschendes Verbrennungsregime berechnet mit dem BML-Modell, projiziert in das modifizierte Borghi-Diagramm.

die Flamme wieder in Richtung Flamelet-Bereich orientierte. Für die Berechnung mit dem PDF-Modell ergab sich ein nahezu analoges Verhalten.

Prinzipiell ist bei den gewählten Darstellungen des Flammenzustands zu beachten, dass es sich um eine Auswertung der Zustände entlang der Rohrachse handelte. Es ist jedoch davon auszugehen, dass sich das Brennregime trotz der örtlich unterschiedlichen Strömungsverhältnisse (s. Abbildung 6.15) nicht ändert, da die Werte der Turbulenz in der gleichen Größenordnung lagen. Die Klassifizierung der Verbrennungszustände im Borghi-Diagramm erfolgt nur größenordnungsmäßig.

Funktionale Form der PDF Wie in Kapitel 4.2.4 beschrieben ist, gibt es verschiedene Ansätze für die funktionale Form der PDF. Eine Alternative, zu der in dieser Arbeit standardmäßig verwendeten „gestutzten“ Gaußfunktion, stellt die β -Funktion dar. Im folgenden soll die Auswirkung der Wahl der Form der PDF auf die berechnete Flammenausbreitung näher untersucht werden. In Abbildung 6.19 sind die Ergebnisse für die 13 Vol.% H_2 in Luft-Flamme in der Konfiguration „30-150-3000“ dargestellt. Wie sich

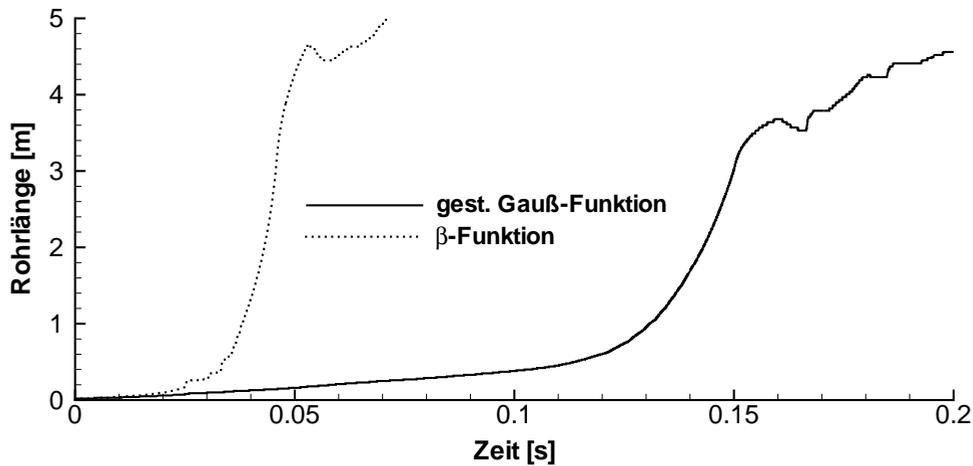


Abbildung 6.19: Flammenausbreitung einer 13 Vol.% H_2 in Luft-Flamme berechnet mit dem PDF-Modell auf der Basis unterschiedlicher Formen der PDF.

zeigt, ergaben sich deutlich unterschiedliche Verläufe, bei der die Berechnung mit der β -PDF eine zu schnelle Flammenausbreitung prognostizierte. Die lokalen Ausbreitungsgeschwindigkeiten an der Messposition $x = 1.6$ m von $v_F = 200$ m/s mit der β -PDF bzw. $v_F = 100$ m/s mit der „gestutzten“ Gaußfunktion bestätigen diese Aussage. Begründet werden kann dieser Unterschied, wenn die Reaktionstabellen (s. Kapitel 4.2.5) für beide Funktionen am Beispiel eines Druckniveaus gegenübergestellt werden (s. Abbildung 6.20). Exemplarisch wird hierfür die Reaktionstabelle für das Druckniveau von $p = 1$ bar genommen. Für andere Druckniveaus ergibt sich eine entsprechende Aussage. Wie Abbildung 6.20 zeigt, neigen sich die Reaktionsraten der β -PDF im Gegensatz zu den Reaktionsraten der „gestutzten“ Gauß-PDF „fahnenartig“ in Richtung niedrigerer Reaktionsfortschritte. Deutlicher ersichtlich wird dieses Verhalten in Abbildung 6.21, in der Schnitte durch die Reaktionstabellen für konstante Werte der Varianz abgebildet sind. Dabei zeigen sich Unterschiede in den Verläufen der parameterierten Kurven, was sowohl den Maximalwert, als auch den Ort des Maximums betrifft. Es fällt auf, dass sich bei den Kurven der β -PDF das Maximum der Reaktionsrate zu einem niedrigeren Reaktionsfortschritt, jedoch höheren Maximalwert verschiebt. Die Ursache dieser Verschiebung, welche auch der Grund für die unterschiedlichen Ergebnisse war, wird offensichtlich, wenn, wie in Abbildung 6.22 dargestellt, die β -PDF und die

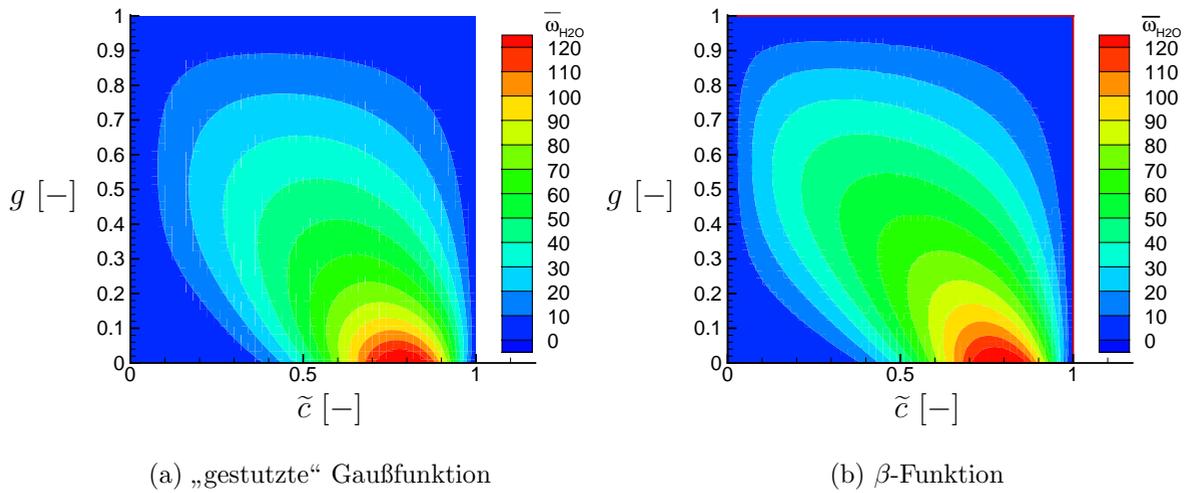


Abbildung 6.20: Reaktionstabellen für ein Druckniveau von $p = 1$ bar basierend auf unterschiedlichen Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen.

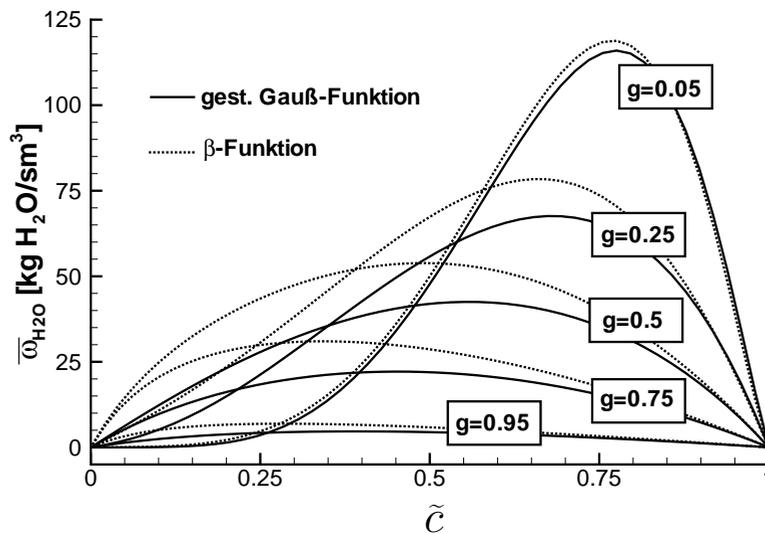


Abbildung 6.21: Reaktionsraten parametrisiert für bestimmte normierte Varianzen, basierend auf unterschiedlichen Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen.

„gestutzte“ Gauß PDF gegenüber der zu gewichtenden Funktion aufgetragen werden. Betrachtet werden exemplarisch die Wahrscheinlichkeitsverteilung für den Erwartungswert $\tilde{c} = 0.3$ für verschiedene normierte Varianzen. Bei der Darstellung ist zu beachten, dass die Werte der PDF für $c \rightarrow 0$

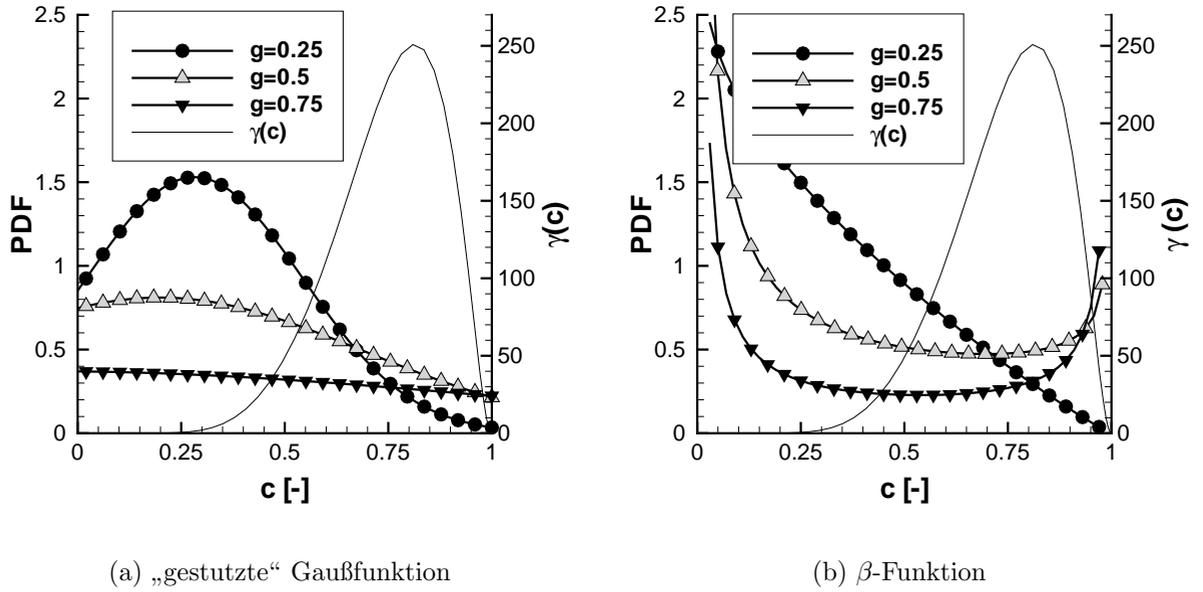


Abbildung 6.22: Verlauf der Favre-PDF für unterschiedliche normierte Varianzen bei einem Erwartungswert von $\tilde{c} = 0.3$. Funktion $\gamma(c)$, für die $\overline{\omega_{H_2O}} = \int_0^1 \gamma(c) \tilde{P}(c) dc$ gilt

bzw. $c \rightarrow 1$ weder für die β - noch für die „gestutzte“ Gaußverteilung²³ dargestellt sind. Da die zu gewichtende Funktion $\gamma(c)$ in diesen Bereichen gegen Null geht, besitzen die Bereiche $c \rightarrow 0$ bzw. $c \rightarrow 1$ ohnehin keinen Einfluss auf das Ergebnis des Faltungsintegrals

$$\overline{\omega_{H_2O}} = \int_0^1 \gamma(c) \tilde{P}(c) dc \quad (6.3.4)$$

und somit die berechnete Reaktionsrate. Die zu gewichtende Funktion

$$\gamma(c) = \frac{\bar{\varrho}}{\varrho(c)} \omega_{H_2O}(c) = \frac{1 + \tau c}{1 + \tau \tilde{c}} \omega_{H_2O}(c) \quad (6.3.5)$$

ergibt sich, wenn in dem Ansatz für die zeitlich gemittelte Reaktionsrate in Gleichung 4.2.32 alle nicht zu $\tilde{P}(c)$ gehörigen Anteile zusammengefasst werden²⁴. In Abbildung 6.22 zeigt sich, dass die β -Funktion durch ihre

²³Bei der Gaußverteilung ist nur die Verteilung des Flammenanteils $\tilde{f}(c)$ (siehe Kapitel 4.2.4) abgebildet.

²⁴Für die Darstellung der Funktion $\gamma(c)$ wurde $\tau \approx 3.0$ angenommen.

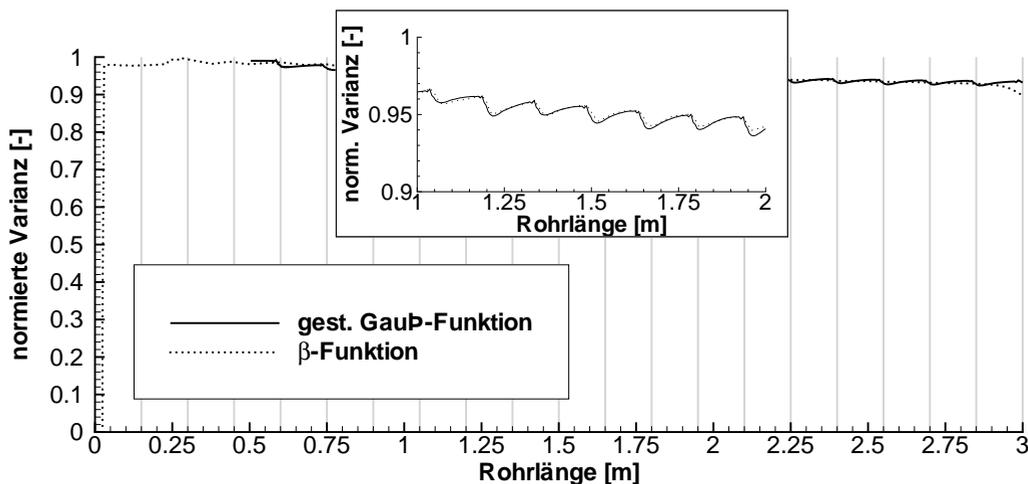


Abbildung 6.23: Örtlicher Verlauf der normierten Varianz im Flammenschwerpunkt.

charakteristische Verteilung, speziell bei größerer Varianz, höhere Funktionswerte in dem Bereich besitzt, in dem die Funktion $\gamma(c)$ das Maximum erreicht ($c \approx 0.75$). Folgenderweise ergeben sich größere Werte für die jeweilige Reaktionsrate \bar{w}_{H_2O} . Dieses Verhalten ist auf andere Erwartungswerte übertragbar, wodurch sich die in Abbildung 6.21 dargestellten unterschiedlichen Verteilungen der Reaktionsrate in Abhängigkeit der PDF ergeben.

Für die Grenzwerte der Varianz, $g \rightarrow 0$ bzw. $g \rightarrow 1$, entsprechen die Reaktionsraten basierend auf der „gestutzten“ Gauß-PDF denen basierend auf der β -PDF. Der Grund ist einerseits, dass sich die β -PDF für $g \rightarrow 0$ der Form der Gaußfunktion nähert (s. Kapitel 4.2.4). Andererseits besteht für $g \rightarrow 1$ eine immer größere Wahrscheinlichkeit, Bereiche mit einem Reaktionsfortschritt $c = 0$ und $c = 1$ vorzufinden. Da diese Bereiche, wie bereits erwähnt, nichts zur Reaktion beitragen, gehen die Reaktionstabellen in diesem Limit, sowohl basierend auf der β -PDF, als auch der „gestutzten“ Gaußfunktion gegen Null.

In Anbetracht des beschriebenen Verhaltens der PDF soll untersucht werden, welche momentanen Verteilungen der PDF sich während der Flammenausbreitung der 13 Vol.% H_2 in Luft-Flamme in der Konfiguration „30-150-3000“ ergeben haben. Betrachtet wird hierfür, wie in Abbildung 6.23 dargestellt, die örtliche Entwicklung der normierten Varianz im Flammenschwerpunkt. Wie sich zeigt, lagen die normierten Varianzen sowohl bei der Berechnung mit der β -PDF, als auch der „gestutzten“ Gauß-PDF

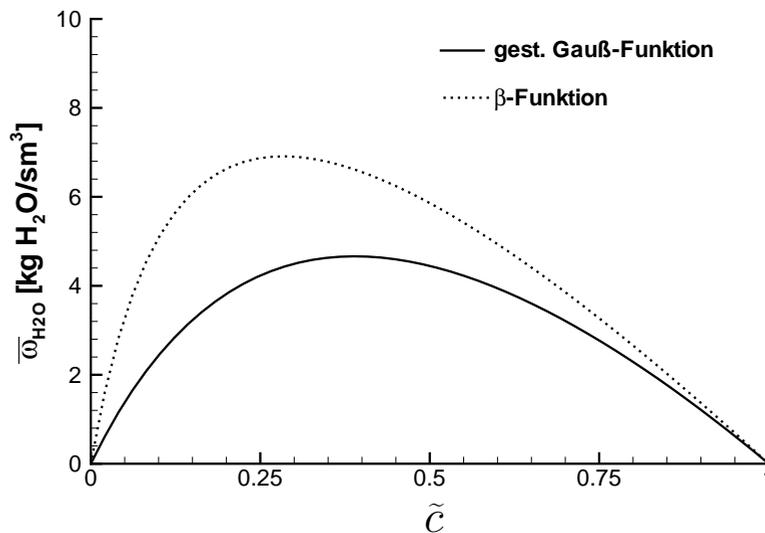


Abbildung 6.24: Reaktionsraten bei der normierten Varianzen $g = 0.95$, basierend auf unterschiedlichen Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen.

bei einer sehr hohen Varianz von $g \approx 0.95$. Vom physikalischen Gesichtspunkt bedeutete dies, dass der Verbrennungsprozess in der Nähe des mischungslimitierten Bereichs stattgefunden hat, da die Verteilung der PDF hauptsächlich aus den Grenzbereichen $c \rightarrow 0$ bzw. $c \rightarrow 1$ bestand. Diese Aussage deckt sich mit den Ergebnissen, die anhand der Auswertung der auftretenden Karlovitz-Zahl für die Vergleichsrechnung mit dem BML-Modell gefunden wurden. Werden, wie in Abbildung 6.24 dargestellt, die Reaktionsraten basierend auf der „gestutzten“ Gauß-PDF denen basierend auf der β -PDF für die normierte Varianz von $g = 0.95$ gegenübergestellt, kann erkannt werden, dass sich trotz der hohen Varianz deutliche Unterschiede ergeben.

Übersicht über weitere Ergebnisse Die Ergebnisse am Beispiel der 13 Vol.% H_2 in Luft-Flamme zeigten, dass die Berechnungen mit dem BML-Modell sowie dem PDF-Modell basierend auf einer „gestutzten“ Gauß-Verteilung, eine gute Übereinstimmung mit den Messergebnissen ergaben. Zurückgeführt werden kann dies auf die Tatsache, dass sich die Flammenausbreitung nach dem Passieren der ersten Hindernisse in das Regime der dünnen Reaktionszonen verschob (s. Abbildung 6.18, Seite 119). Wie in Kapitel 4 beschrieben, sind die in dieser Arbeit verwendeten Verbrennungs-

modelle für unterschiedliche Brennregimes optimiert. Handelt es sich um eine Verbrennung im Flamelet-Bereich, so ist das BML-Modell zu bevorzugen wohingegen das PDF-Modell für Verbrennungsvorgänge im Regime der aufgebrochenen Reaktionszonen seine Stärken besitzt. Im Zwischenbereich, d.h. im Regime der dünnen Reaktionszonen kann prinzipiell mit beiden Modellen gerechnet werden.

Die Aussagen, die für die 13 Vol.% H_2 in Luft-Flamme gewonnen wurden, können auf die Simulation von Verbrennungsvorgängen mit anderen, mageren H_2 -Konzentrationen in der Konfiguration „30-150-3000“ übertragen werden. Wie die Abbildung 6.25 beweist, ergaben sich sowohl mit dem

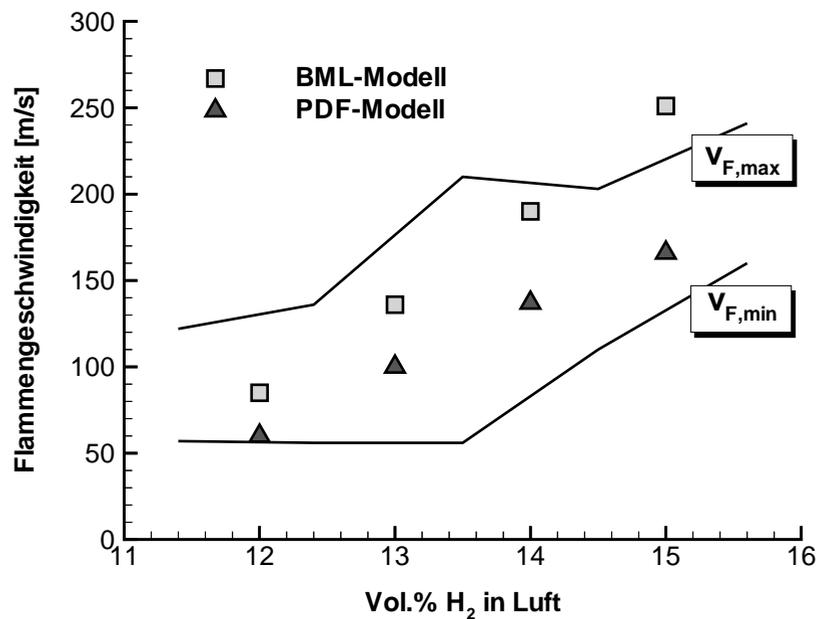


Abbildung 6.25: Flammenausbreitungsgeschwindigkeiten als Funktion der H_2 -Konzentration gerechnet mit dem BML-, bzw. PDF-Modell.

BML-Modell, als auch dem PDF-Modell für die Konzentrationen 12 bis 15 Vol.% H_2 in Luft gute Ergebnisse der berechneten Flammenausbreitungsgeschwindigkeit am Messpunkt $x = 1.6$ m.

6.3.2 Blenden mit 60% Blockierrate

Messungen zur Validierung Die Messungen zur Untersuchung des turbulenten Verbrennungsprozesses in der Versuchsanlage mit Blenden mit einer Blockierrate von 60% wurden von Edlinger [EPE⁺99] durchgeführt. Als Hinderniskonfiguration wurde eine Hindernisstrecke der Länge $l_H = 3$ m mit 16 Blenden der Dicke $d_B = 0.005$ m verwendet, welche einen Horizontalabstand von $l_K = 0.180$ m besaßen. Diese Konfiguration wird im folgenden kurz mit „60-180-3000“ bezeichnet. Zur Messung des Verbrennungsprozesses waren entlang der Versuchsstrecke, wie in Abbildung 6.1 (Seite 91) dargestellt, sieben Druckaufnehmer sowie sechzehn Fotodioden angebracht. Die Verteilung der Fotodioden und der Druckaufnehmer über die Rohrlänge ist in den Tabellen 5 und 6 aufgelistet. Anhand des Signals der Fotodioden konnte die Flammenposition in Abhängigkeit von der Zeit gemessen und somit die Ausbreitung der Flammenfront rekonstruiert werden. Durch die Druckaufnehmer wurde der Druckverlauf als Funktion der Zeit an verschiedenen Messpositionen bestimmt. Untersucht wurden mäßige Wasserstoffkonzentrationen in einem Konzentrationsbereich von ca. 10 bis 16 Vol.% H_2 in Luft. In Abbildung 6.26 ist ein Überblick über die

Photodiode	Position [mm]
F1	250
F2	650
F3	1050
F4	1450
F5	1750
F6	2150
F7	2550
F8	2950
F9	3550
F10	3950
F11	4350
F12	4750
F13	5250
F14	5650
F15	6050
F16	6450

Tabelle 5: Verteilung der Fotodioden

Druckaufnehmer	Position [mm]
P1	1150
P2	2250
P3	3050
P4	4250
P5	5550
P6	6500

Tabelle 6: Verteilung der Druckaufnehmer

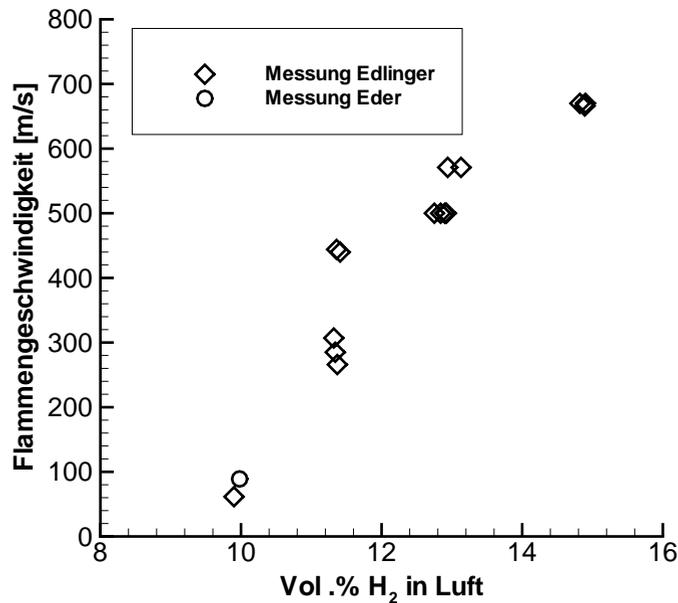


Abbildung 6.26: Messung der Flammenausbreitungsgeschwindigkeit am Ende der Hindernisstrecke für unterschiedliche Wasserstoffkonzentrationen (s. Edlinger et al. [EPE⁺99] und Eder [Ede01a]).

gemessenen Flammenausbreitungsgeschwindigkeiten am Ende der Hindernisstrecke dargestellt. Diese wurden durch Auswertung der Fotodiodensignale am Ende der Hindernisstrecke (Fotodioden F7 und F8) gewonnen und entsprechen somit einer über diesen Bereich gemittelten Flammenausbreitungsgeschwindigkeit. Wie sich zeigt, traten in dieser Konfiguration bereits ab einer Konzentration von 12 Vol.% H_2 in Luft, schnelle Deflagrationen (s. Kapitel 2.4) auf.

Flammenausbreitung Nachgerechnet wurde zunächst der Verbrennungsprozess einer 13 Vol.% H_2 in Luft-Flamme durch Simulationen mit dem BML-Modell sowie dem PDF-Modell basierend auf einer „gestutzten“ Gaußfunktion. Als Referenzmessung wurde hierfür die 12.94 Vol.% H_2 in Luft-Flamme aus Abbildung 6.26 ausgewählt. Um einen direkten Vergleich zwischen Messung und Rechnung zu ermöglichen, wurde das Simulationsergebnis entsprechend der Messung ausgewertet, d.h. es wurde die Flam-

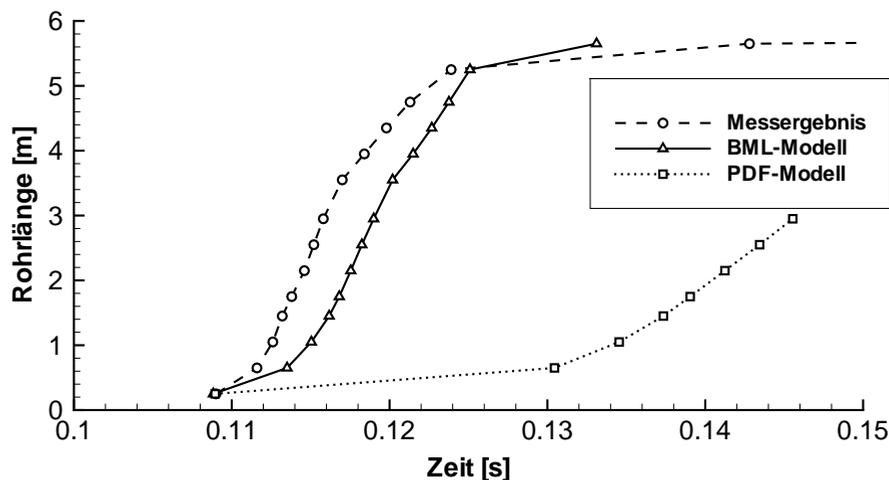


Abbildung 6.27: Flammenausbreitung einer 13 Vol.% H_2 in Luft-Flamme.

mendurchtrittszeit²⁵ an den Positionen der Fotodioden erfasst, um daraus die Flammenausbreitung zu rekonstruieren. Der auf diese Weise ermittelte Verlauf wurde anschließend so verschoben, dass die Flammenausbreitung bei der ersten Photodiode zur Deckung mit der Messung gebracht wurde. Der zeitliche Versatz, der dadurch kompensiert wurde, resultierte aus der Initialisierung der Berechnung. Beim Versuch begann die Zeiterfassung mit der Zündung durch die Zündkerze, wohingegen die Simulation mit einer bereits turbulenten Flammenfront gestartet wurde.

Wie Abbildung 6.27 beweist, wurde der gemessene Verlauf durch die Simulation mit dem BML-Modell im gesamten Bereich gut wiedergegeben. Speziell die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit am Ende der Hindernisstrecke wurde mit $v_F = 510$ m/s aus der Messung und mit $v_F = 508$ m/s aus der Berechnung sehr gut erfasst. Im Gegensatz zum BML-Modell unterschätzte das PDF-Modell die Flammenausbreitung im gesamten Bereich deutlich. Dies wurde durch den Wert $v_F = 230$ m/s am Ende der Hindernisstrecke bestätigt. Auf die Ursachen hierfür wird später eingegangen.

Die in Abbildung 6.27 dargestellten Verläufe geben nur den, zwischen zwei Fotodioden gemittelten, Flammenausbreitungsprozess wieder. Bei einer näheren Betrachtung am Beispiel der Berechnung mit dem BML-Modell

²⁵Die Flammendurchtrittszeit wurde durch das Passieren des Flammenschwerpunkts, d.h. des Reaktionsfortschritts $\tilde{c} = 0.5$ auf der Mittelachse an der jeweiligen betrachteten Position definiert.

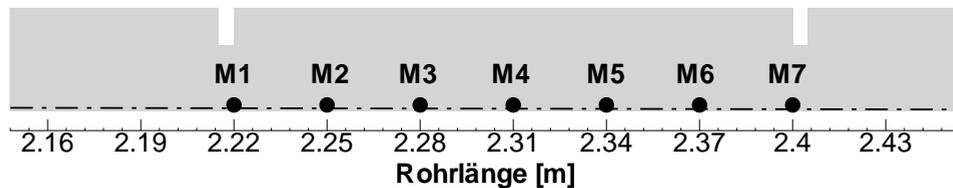


Abbildung 6.28: Definition von Positionen zur Auswertung des Flammenausbreitungsverhaltens zwischen zwei Blenden in der Konfiguration „60-180-3000“.

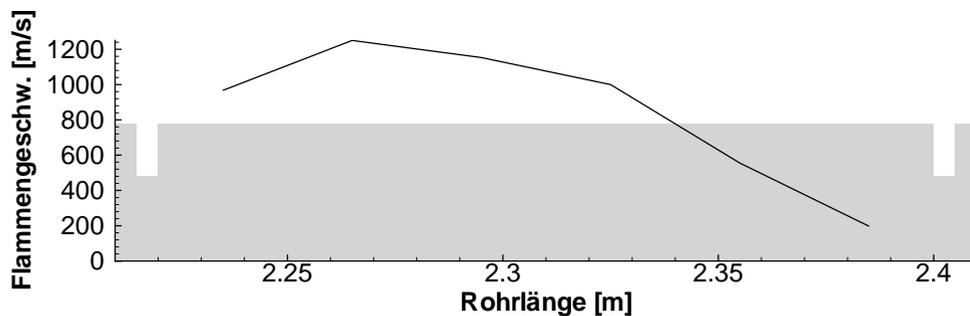


Abbildung 6.29: Flammenausbreitungsgeschwindigkeit berechnet mit dem BML-Modell als Funktion des Ortes.

zeigte sich, dass das lokale v_F starken Schwankungen unterworfen war. Um dies zu verdeutlichen wurden, wie in Abbildung 6.28 dargestellt, entlang der Mittelachse des Rohres zwischen $x = 2.21$ m und $x = 2.45$ m sieben Positionen definiert, an denen die Flammendurchtrittszeit ermittelt wurde. Aus dieser Information wurde ein örtlicher Verlauf von v_F innerhalb von zwei Blenden bestimmt. Wie das Ergebnis in Abbildung 6.29 zeigt, beschleunigte die Flamme im Bereich nach dem Hindernis zunächst sehr stark und fiel anschließend, beim Auflaufen auf das folgende Hindernis wieder stark ab. Dabei trat eine Spitzengeschwindigkeit bis zu $v_F \approx 1250$ m/s und eine Geschwindigkeitsdifferenz von bis zu $\Delta v_F \approx 1000$ m/s auf. Da ein qualitativ und quantitativ analoges Verhalten im Bereich der Hindernisstrecke von $x = 2 - 3$ m beobachtet werden konnte, ergab sich in diesem Bereich eine nahezu konstante mittlere Flammenausbreitungsgeschwindigkeit von $v_F \approx 500$ m/s.

Zu entsprechend hohen Flammenausbreitungsgeschwindigkeiten kommt es im deflagrativen Bereich nur, wenn die Flammenfront an eine vorausseilen-

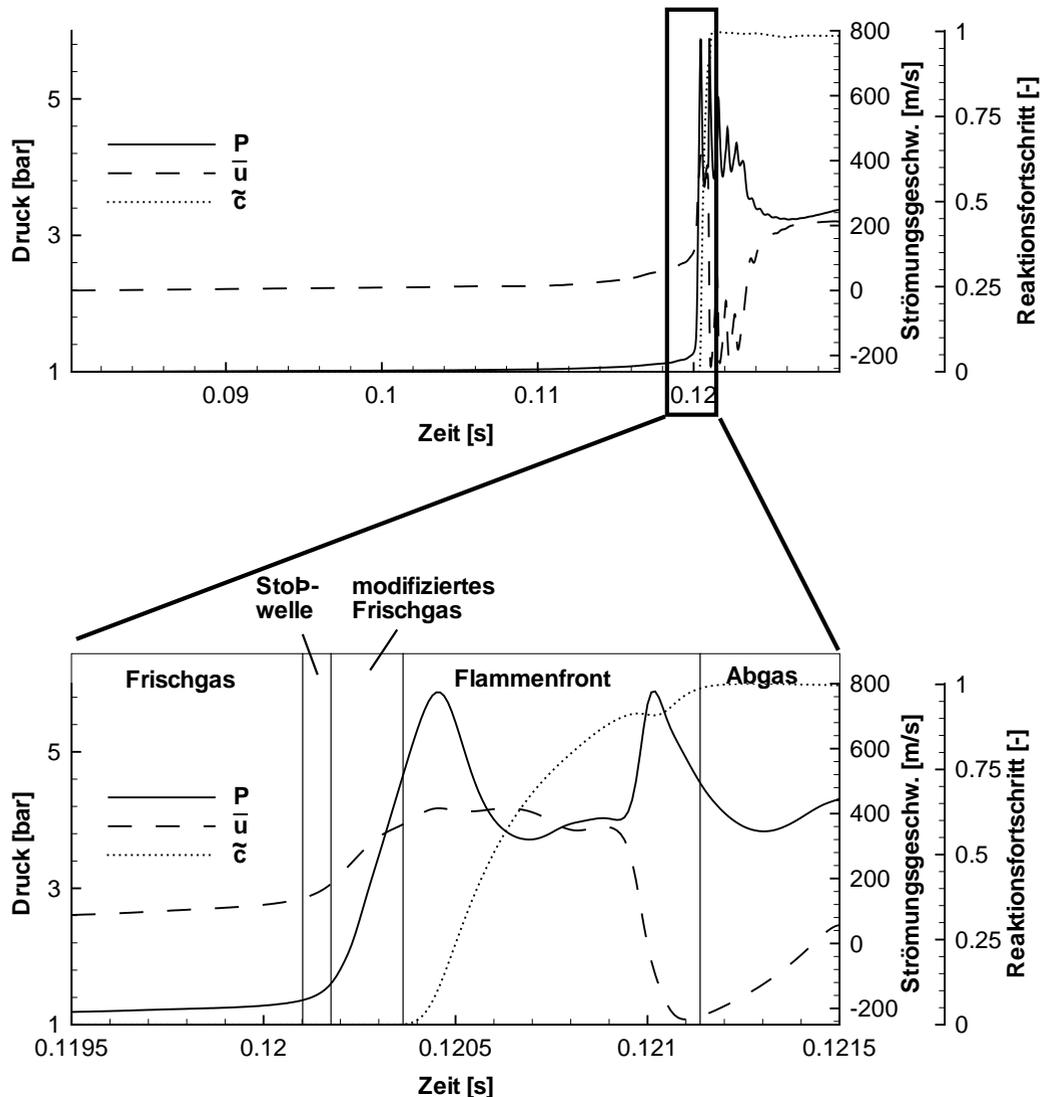


Abbildung 6.30: Zeitlicher Verlauf des Drucks, der axialen Strömungskomponente und des Reaktionsfortschritts auf der Mittelachse des Rohres bei $x = 2.22$ m.

de Stoßwelle gekoppelt ist. Wie Abbildung 6.30 beweist, trat dieses Verhalten bei der betrachteten Simulation entsprechend auf. Die Stoßwelle, welche durch den steilen Druckanstieg gekennzeichnet ist, passierte dabei den Messpunkt bei $x = 2.22$ m kurz vor der Flammenfront, welche durch die Entwicklung des Reaktionsfortschritts von $\tilde{c} = 0$ auf $\tilde{c} = 1$ identifiziert werden kann. Durch die Stoßwelle wurde kurz vor der Flammenfront ein deutlicher Geschwindigkeitsanstieg in der Expansionsströmung induziert. Aufgrund der örtlichen Auflösung der Geometrie sowie der numerischen

Diffusion, wie sie bei dem angewendeten, sogenannten *capturing Verfahren* [ATP84] unvermeidlich auftritt, verschmierte die Stoßwelle. Dadurch war es nicht möglich, einen eindeutigen Beginn, bzw. ein Ende der Stoßwelle zu identifizieren. Die Unterteilung in die einzelnen Bereiche, wie sie in Abbildung 6.30 vorgenommen wurde, ist somit nur approximativ.

Im Bereich $x = 1 - 3$ m, konnte bei der Flammenausbreitung eine starke dynamische Wechselwirkung zwischen der Stoßwelle und der Flammenfront beobachtet werden. Die Stoßwelle induzierte, wie in Abbildung 6.30 dargestellt, eine Expansionsströmung vor der Flammenfront. Diese Expansionsströmung wurde beim Durchtritt durch das Hindernis stark beschleunigt. In diesem Sog wurde die Flammenfront mitgerissen und dadurch, wie in Abbildung 6.29 dargestellt, ebenfalls beschleunigt. Beim Auflaufen auf das folgende Hindernis drehte sich der Vorgang um, d.h. die Ausbreitungsgeschwindigkeit der Stoßwelle und somit auch die Expansionsströmung vor der Flamme verlangsamte sich, wodurch die Flammenfront wieder an die vorausseilende Stoßwelle aufrückte. Dabei versorgte sie diese wieder mit neuer Energie, so dass sich der beschriebene Vorgang in nahezu identischer Weise beim nächsten Hindernis wiederholen konnte. Die beschriebene wechselseitige Beeinflussung von Flammenfront und Stoßwelle ist typisch für schnelle Deflagrationen, s. Eder [Ede01b].

In Abbildung 6.31 ist die örtliche Verteilung des Reaktionsfortschritts beim Durchtritt der Flamme durch das Hindernis bei $x = 2.22$ m für verschiedene Zeiten dargestellt. Hierbei zeigt sich wiederum das Aufdehnen der Flammenfront aufgrund der durch die Stoßwelle induzierten Strömung nach dem Durchtritt durch das Hindernis. Dabei verteilte sich zunächst der in Reaktion befindliche Anteil der Flamme (siehe Bild 3) auf einen großen Bereich in der Kammer. Anschließend begann das Gemisch in der Kammer an sehr reaktiven Stellen vollständig abzureagieren. Diese sehr reaktiven Bereiche bestimmen sich, wie später dargestellt wird, durch Bereiche mit sehr großer lokaler Turbulenz. Wie sich zeigte, reagierte in dem betrachteten Fall das Gemisch auch in direkter Wandnähe sehr stark. Dies ist auf die Tatsache zurückzuführen, dass durch die Randbedingung einer konstanten Wandtemperatur von $T = 293$ K zwar lokal die Temperatur des Gemisches reduziert wurde, dies jedoch keine Auswirkung auf die Reaktionsrate besaß, da diese allein abhängig vom Reaktionsfortschritt ist. Um ein lokales Verlöschen der Flamme durch Wandwärmeverluste abbilden zu können,

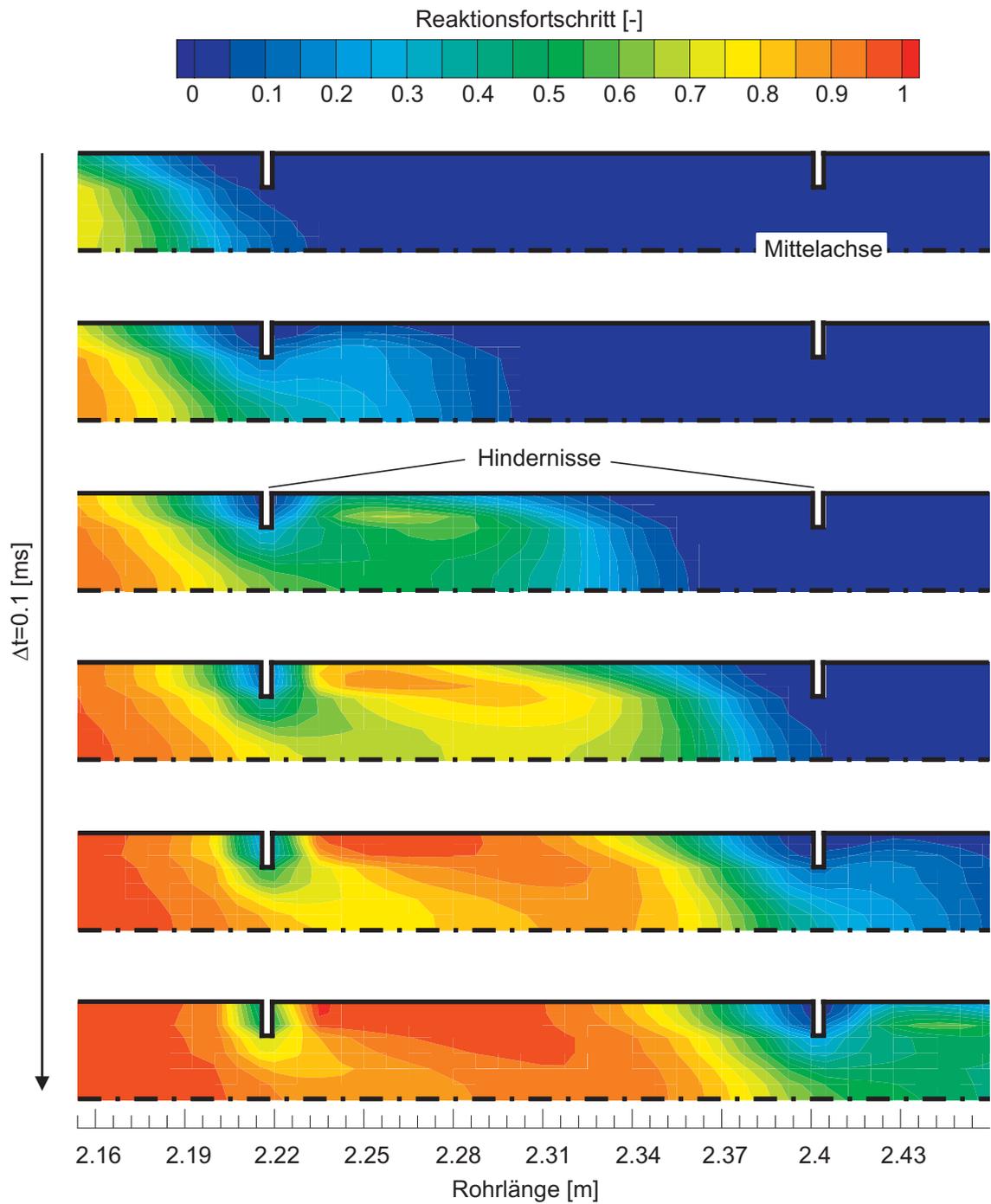


Abbildung 6.31: Zeitlicher Verlauf des Reaktionsfortschritts beim Durchtritt der Flamme durch das Hindernis bei $x = 2.22$ m

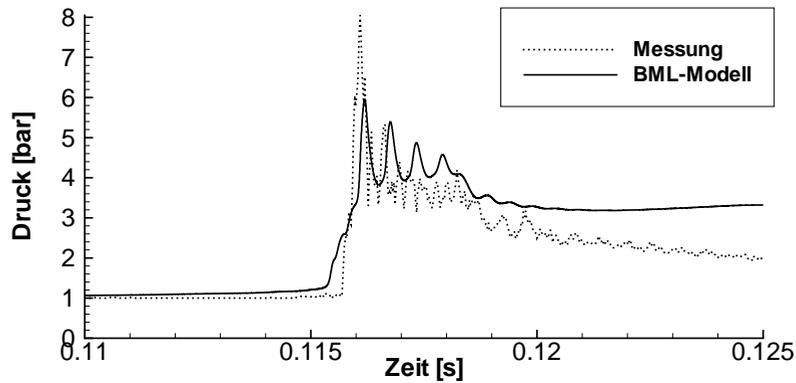
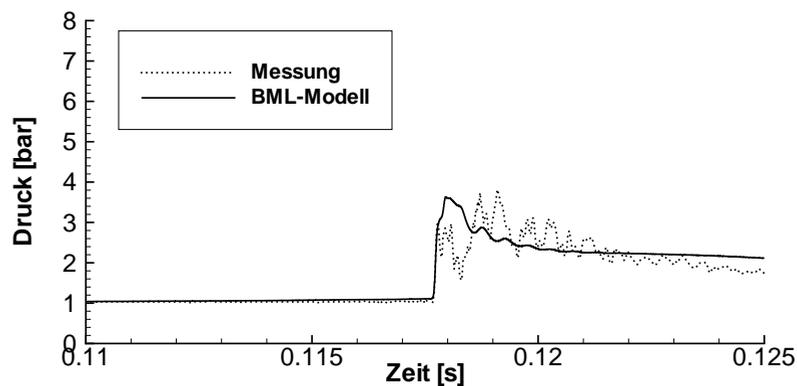
(a) Position $x = 2.25$ m(b) Position $x = 3.05$ m

Abbildung 6.32: Vergleich der gemessenen mit den berechneten Druckverläufen (BML-Modell).

müssten sowohl das BML, als auch das PDF-Modell um geeignete Ansätze erweitert werden.

Der Vergleich der berechneten mit den gemessenen Druckverläufen an der Position $x = 2.25$ m (s. Abbildung 6.32(a)) zeigt, dass die maximale Druckspitze durch die Berechnung mit $\bar{p} = 6$ bar im Vergleich zu $\bar{p} = 8$ bar unterschätzt wurde²⁶. Dies lag zum einen daran, dass die Zeit-

²⁶Wie in Abbildung 6.27 zu erkennen ist, passieren die gemessene und die berechnete Flamme zu einer unterschiedlichen Zeit die Positionen $x = 2.25$ m bzw. $x = 3.05$ m. Für den Vergleich der Druckverläufe, wurden die berechneten Kurve so in der Zeit verschoben, dass sie gleichzeitig mit der Messung die jeweilige Position erreichen.

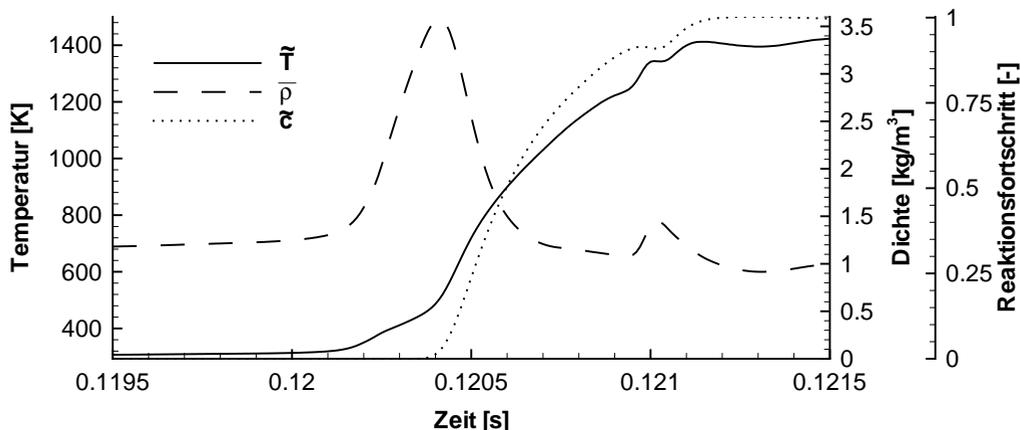


Abbildung 6.33: Zeitlicher Verlauf der Temperatur, der Dichte und des Reaktionsfortschritts auf der Mittelachse des Rohres bei $x = 2.22$ m.

und Ortsauflösung nur eine eingeschränkte Berechnung von Druckspitzen zulässt. Zum anderen weicht die Ausbreitungsgeschwindigkeit der berechneten Flamme an dieser Position noch von der gemessenen ab (s. Abbildung 6.27). Etwas besser wurde deshalb das Druckniveau an der Position $x = 3.05$ wiedergegeben (s. Abbildung 6.32(b)), an der die maximale Ausbreitungsgeschwindigkeit durch die Berechnung sehr gut vorhergesagt wurde.

Basierend auf der Simulation mit dem BML-Modell, welche die Messung sehr gut wiedergab, wurde nach Ursachen gesucht, warum das PDF-Modell die Flammenausbreitung so deutlich unterschätzte. Wie in Abbildung 6.33 dargestellt, wurde durch die Stoßwelle neben dem Druck auch die Dichte sowie die Temperatur vor der Flamme modifiziert (vgl. Abbildung 6.30). Durch die Simulation ergab sich somit vor der Flammenfront ein thermodynamischer Zustand von $\bar{p} = 5.2$ bar, $\tilde{T} = 468$ K und $\bar{\rho} = 3.5$ kg/m³. Um diese auftretenden Zustandsänderung bei der Simulation mit dem PDF-Modell zu berücksichtigen, wurde, wie in Kapitel 4.2.6 beschrieben, das Modell um eine variable Anpassung des Enthalpieniveaus an den jeweiligen Druck erweitert. Dabei wurde angenommen, dass sich die Zustände isentrop ändern, d.h. bezogen auf den Ausgangszustand würde somit bei dem vorgegebenen Druckanstieg für die Reaktion $\bar{\omega}_{H_2O}(c)$ eine Temperatur von $\tilde{T} = 469$ K und eine Dichte von $\bar{\rho} = 3.56$ kg/m³ angenommen (gilt für $\kappa = 1.4 = \text{konst.}$). Wie der Vergleich mit den Werten der Simulation

beweist, sind die abgeschätzten Werte erwartungsgemäß höher²⁷. Die Unterschiede sind jedoch trotz der Irreversibilität der Zustandsänderung bei der Simulation sehr gering. Übertragen auf die Berechnung mit dem PDF-Modell bedeutete dies, dass eine fehlerhafte Anpassung der Reaktionsraten an den aktuellen thermodynamischen Zustand somit als mögliche Ursache für das Versagen der PDF ausschied.

Der wahrscheinlichste Grund für die Defizite bei der Verwendung des PDF-Modells ist, dass zur Reduzierung des chemischen Systems auf eine Fortschrittsvariable angenommen wurde, dass zwischen Druck, Temperatur und Dichte eine direkte Korrelation besteht. Wie in Kapitel 4.2.1 gezeigt wurde, ist diese Annahme nur gültig, wenn es sich um einen Verbrennungsvorgang bei niedrigen Machzahlen handelt. Da bei der untersuchten Flammenausbreitung Strömungsmachzahlen vor der Flamme mit $Ma > 1$ auftreten, ist diese Bedingung nicht mehr erfüllt. Druckfluktuationen bzw. Temperaturschwankungen, die nicht direkt zum Reaktionsfortschritt korreliert sind, können sich stark auf die chemischen Prozesse auswirken und die jeweilige zeitlich gemittelte Reaktionsrate verändern. Dadurch, dass das PDF-Modell im Gegensatz zum BML-Modell sehr eng mit der Chemie verbunden ist, ergab sich somit eine deutliche Unterschätzung der auftretenden Reaktionsrate und daraus folgend der berechneten Flammenausbreitungsgeschwindigkeit. Dieses Verhalten wurde dadurch verstärkt, dass das verwendete PDF-Modell, wie in Kapitel 6.3.1 beschrieben, den Flammenanlauf nicht richtig erfasst und somit bereits zu Beginn der Flammenausbreitung zu niedrige Flammengeschwindigkeiten berechnet wurden. Zusammenfassend kann festgestellt werden, dass zur Simulation von schnellen Deflagrationen mit einem PDF-Modell, die Verwendung einer multidimensionalen PDF, mit z.B. der Temperatur als zusätzliche statistisch unabhängige Größe (s. z.B. Bohn [BL99]), unbedingt notwendig ist.

Bestätigt wird diese Aussage durch das Ergebnis der Berechnung mit dem PDF-Modell basierend auf einer angenommenen β -Verteilung. Wie bei der Simulation der 13 Vol.% H_2 in Luft-Flamme in der Konfiguration „30-150-2000“ ergab sich mit der β -PDF im Vergleich zur „gestutzten“ Gaußfunktion eine schnellere Flammenausbreitung. Die Ursachen hierfür wurden bereits in Kapitel 6.3.1 näher erörtert. Die erzielte maximale Endgeschwin-

²⁷Eine Stoßkompression führt bei gleichem Druckanstieg im Vergleich zu einer isentropen Kompression zu einer höheren Temperatur sowie Dichte (s. Kapitel 4.2.6 oder [Oer66]).

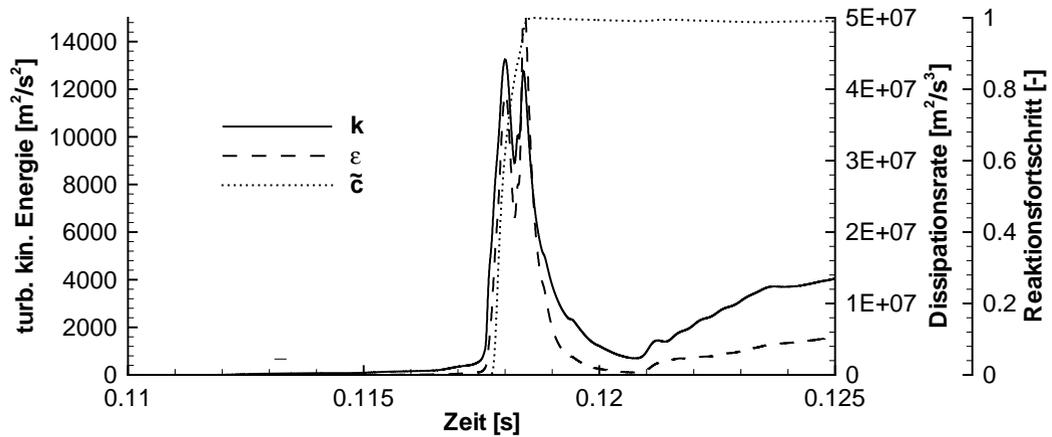


Abbildung 6.34: Zeitlicher Verlauf der turbulenten kinetischen Energie k und der Dissipationsrate ε an Position $x = 2.25$ m in der Versuchsanlage. Berechnung mit dem BML-Modell.

digkeit der Flammenausbreitung lag mit $v_F \approx 350$ m/s jedoch ebenfalls deutlich unterhalb des gemessenen Wertes von $v_F \approx 500$ m/s.

Turbulenz Zur Untersuchung der Turbulenz wird der, mit dem BML-Modell berechnete, zeitliche Verlauf der turbulenten kinetischen Energie sowie der Dissipationsrate an der Position $x = 2.25$ m auf der Mittelachse des Rohres für die 13 Vol.% H_2 in Luft-Flamme betrachtet. Aus Abbildung 6.34 wird ersichtlich, dass die Turbulenz, wie für schallnahe Deflagrationen üblich, unmittelbar vor der Flammenfront durch die von der Stoßwelle induzierten Strömung generiert wurde. Die Auswertung der an dieser Position maximal erreichten Turbulenz vor der Flamme von $k \approx 13000$ m²/s² ergab zusammen mit der zugehörigen mittleren Strömungsgeschwindigkeit von $\tilde{u} = 541$ m/s und einer Dissipationsrate von $\varepsilon \approx 4 \cdot 10^7$ m²/s³ basierend auf den Gleichungen 2.2.6, 2.2.7 und 2.2.11 folgende charakteristische Werte der Turbulenz:

- Turbulenzgrad $Tu \approx 18$ %
- integrales Längenmaß $l_{\text{int}} \approx 6$ mm .

Wie sich zeigt war der Turbulenzgrad mit $Tu = 18\%$ aufgrund der höheren Blockierrate auf der Mittelachse des Rohres erwartungsgemäß größer als

der bei der Konfiguration „30-150-2000“. Das integrale Längenmaß hingegen behielt, da sich die Geometrie nicht in den Grunddimensionen geändert hat, den nahezu identischen Wert.

Wie Abbildung 6.35 zeigt, entstand die Turbulenz knapp vor der Flammenfront. Die Flammenfront wird in dieser Abbildung durch die Iso-Linie $\tilde{c} = 0.1$ repräsentiert. Es zeigt sich weiter, dass neben den „typischen“ Bereichen hoher Turbulenz hinter dem Hindernis auch eine sehr hohe Turbulenz zwischen dem Hindernis generiert wurde. Zurückzuführen ist diese auf die oben beschriebene starke Beschleunigung der durch die Stoßwelle induzierten Expansionsströmung im Bereich der Hindernisse und den damit verbundenen Geschwindigkeitsgradienten in x-Richtung.

Flammenregime Zur Klassifizierung der Flammenausbreitung in Brennregimes werden die Zustände der Flamme auf der Rohrachse bei $\tilde{c} = 0.1$ als Funktion des Ortes in der Versuchsanlage untersucht. In Abbildung 6.36(a) ist der örtliche Verlauf der turbulenten kinetischen Energie und der Dissipationsrate dargestellt. Hierbei zeigt sich, dass k und ε in der Hindernisstrecke zunächst stetig angestiegen sind. Ab ca. 2 m stellte sich der bereits bei der Flammenausbreitung beobachtete Beharrungszustand ein, der durch ähnliche Verläufe der turbulenten Größen pro Kammer gekennzeichnet war. Nach dem Passieren des letzten Hindernisses bei $x = 2.95$ m fielen die Turbulenz in der Strömung und mit ihr die turbulente Dissipationsrate stark ab.

Basierend auf dem turbulenten Strömungsfeld lassen sich analog zu der Vorgehensweise in Kapitel 6.3.1 die Kennzahlen der turbulenten Verbrennung, die Karlovitz und die Damköhler-Zahl, ermitteln. Deren örtlicher Verlauf entlang der Mittelachse ist in Abbildung 6.36(b) dargestellt. Wie sich zeigt, ergaben sich entsprechend der Turbulenz deutlich größere Karlovitz-Zahlen wie bei der Konfiguration „30-150-2000“. Der Bereich, in dem die Verbrennung überwiegend stattfand, war mit maximalen Werten von $Ka \approx 60$ jedoch ebenfalls im Regime der dünnen Reaktionszonen. Invers zur Karlovitz-Zahl stellten sich minimale Werte der Damköhler-Zahl mit $Da \approx 6$ ein.

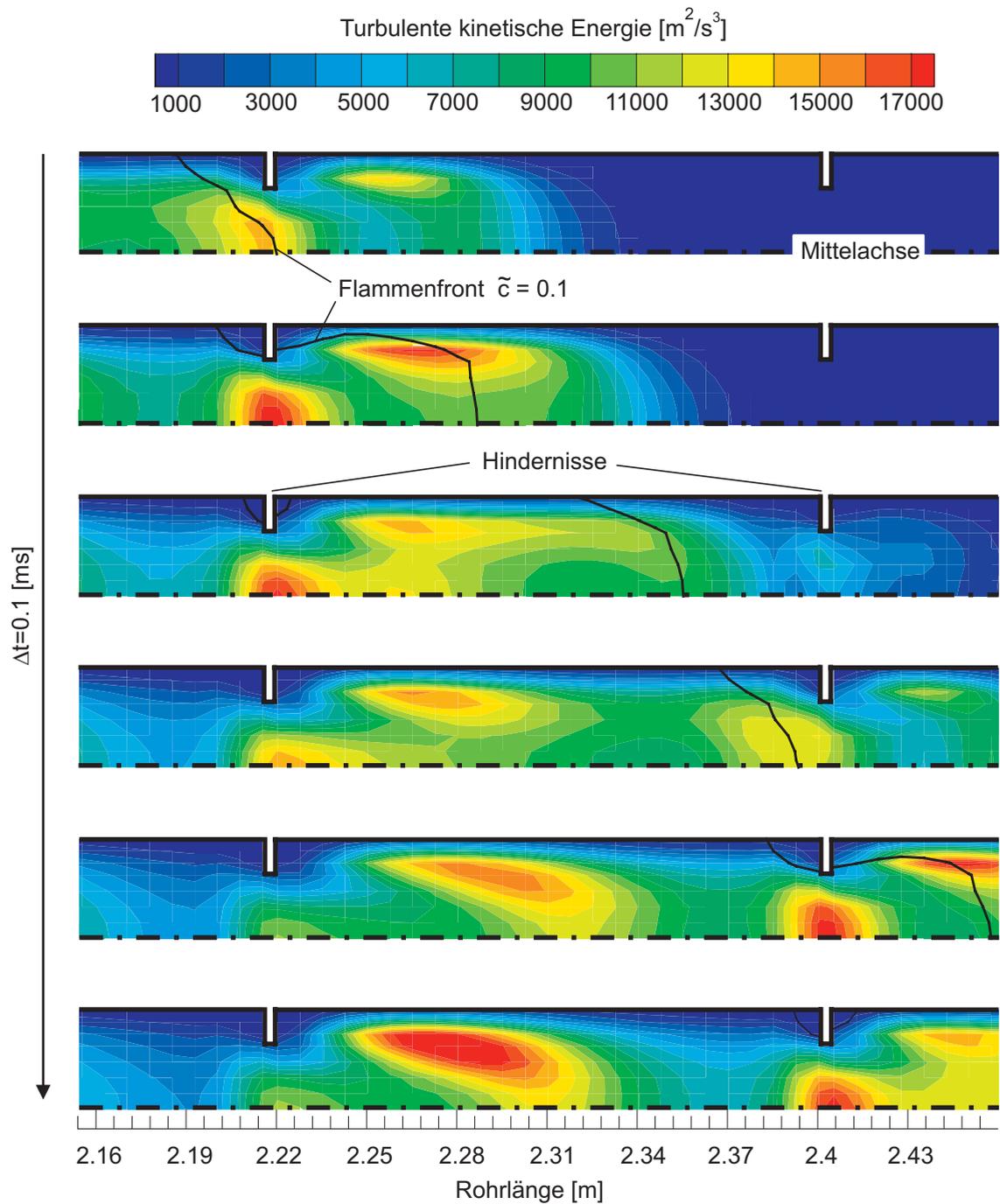
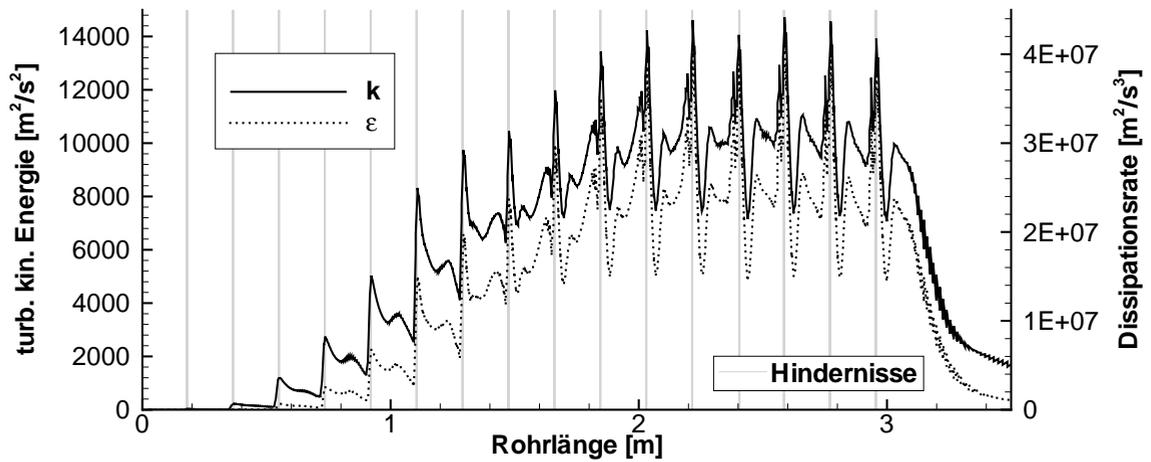
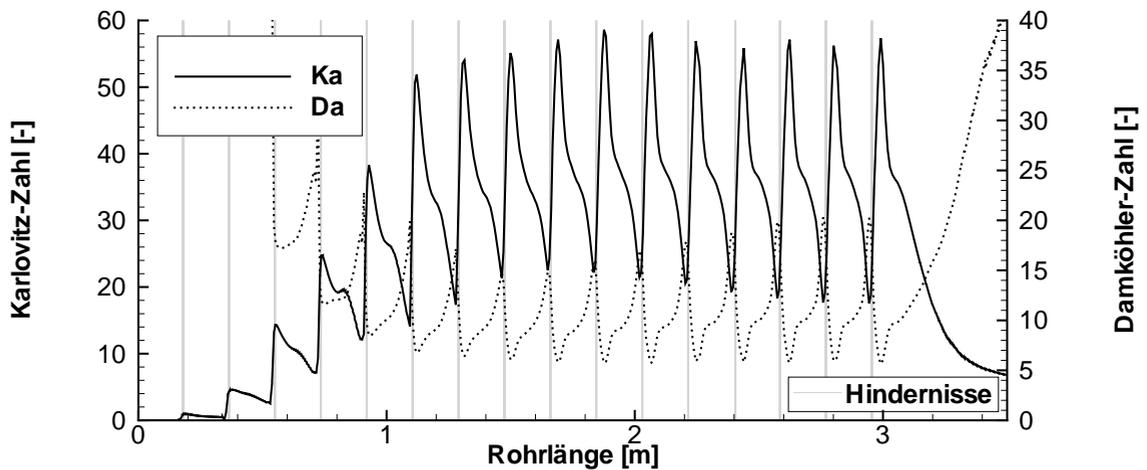


Abbildung 6.35: Zeitlicher Verlauf der turbulenten kinetischen Energie k in m^2/s^2 beim Durchtritt der Flamme durch das Hindernis bei $x = 2.22$ m.



(a) Turbulente kinetische Energie und Dissipationsrate



(b) Karlovitz-Zahl und Damköhler-Zahl

Abbildung 6.36: Darstellung des Zustands in der Flammenfront ($\tilde{c} = 0.5$) als Funktion der Position der Versuchsanlage für eine 13 Vol.% H_2 in Luft Flamme.

Zur Verdeutlichung der durchlaufenen Flammenregimes ist in Abbildung 6.37 der Zustand der Verbrennung für jeden vierten Zeitschritt der Berechnung in das modifizierte Borghi-Diagramm projiziert.

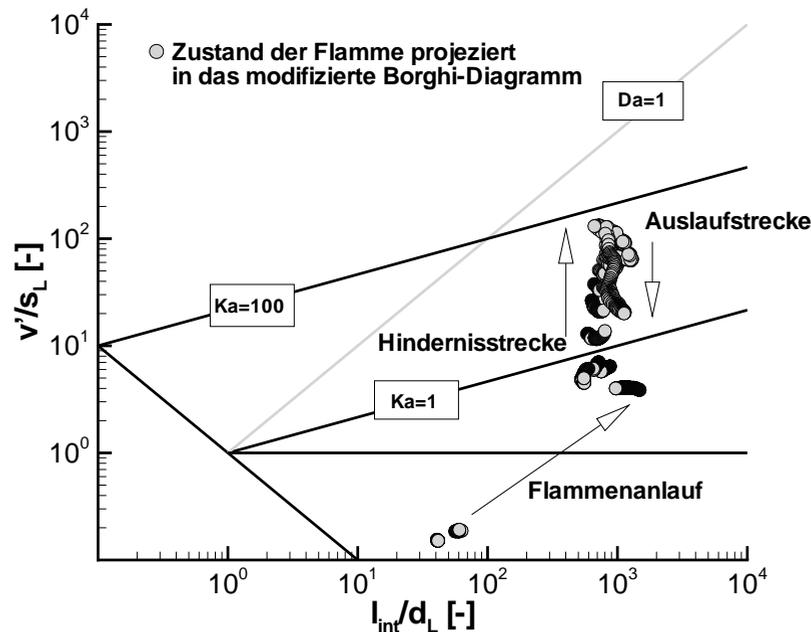


Abbildung 6.37: Momentan vorherrschendes Verbrennungsregime berechnet mit dem BML-Modell, projiziert in das modifizierte Borghi-Diagramm.

Zusammenfassung und weitere Ergebnisse In Abbildung 6.38 ist ein Überblick über berechnete Flammenausbreitungsgeschwindigkeiten am Ende der Hindernisstrecke für verschiedene magere Wasserstoff-Konzentrationen in der Konfiguration „60-180-3000“ im Vergleich zu den Messergebnissen dargestellt. Es zeigt sich, dass das BML-Modell im Bereich $X_{H_2} \geq 11$ Vol.% in Luft zu deutlich besseren Ergebnissen geführt hat als das PDF-Modell. Dies ist auf die Tatsache zurückzuführen, dass das verwendete PDF-Modell basierend auf einer Fortschrittsvariablen, wie am Beispiel der 13 Vol.% H_2 in Luft-Flamme gezeigt, generell nicht in der Lage ist, schnelle Deflagrationen richtig zu erfassen.

Anders verhält es sich bei Flammenausbreitungsvorgängen mit sehr mageren Wasserstoffkonzentrationen. Wie am Beispiel der 10 Vol.% H_2 in Luft-Flamme deutlich wird, lieferte in diesem Fall das PDF-Modell im Gegensatz zum BML-Modell eine gute Lösung. Dies lag einerseits daran, dass es sich hierbei um eine Verbrennung im langsamen deflagrativen Bereich handelte. Andererseits ergaben sich bei der Berechnung mit dem BML-Modell in der Hindernisstrecke, wie Abbildung 6.39 beweist, Karlovitz-Zahlen mit

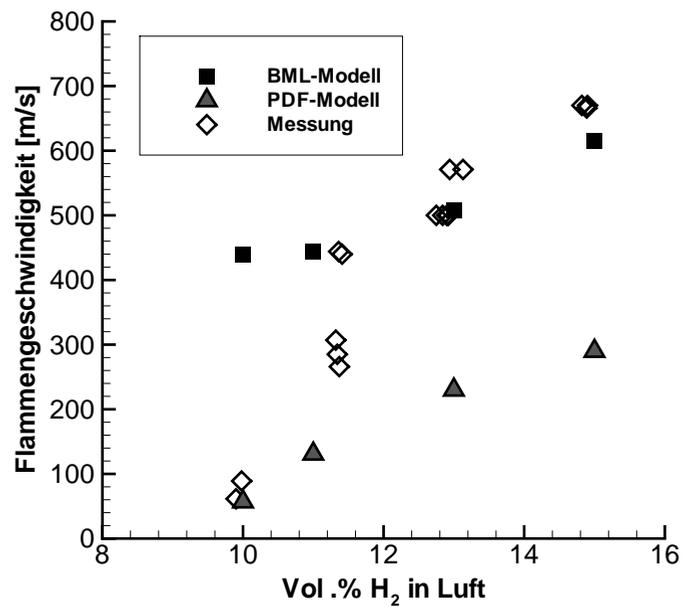


Abbildung 6.38: Berechnete und gemessene Flammenausbreitungsgeschwindigkeiten am Ende der Hindernisstrecke für unterschiedliche Wasserstoffkonzentrationen in der Versuchsanlage bei der Konfiguration „60-180-3000“.

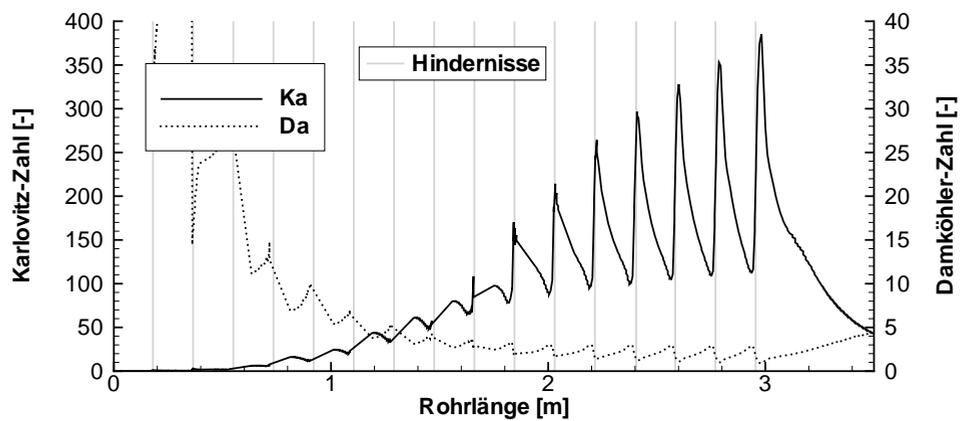


Abbildung 6.39: Momentan vorherrschendes Verbrennungsregime einer 10 Vol.% H₂ in Luft-Flamme in der Konfiguration „60-180-3000“, basierend auf einer Berechnung mit dem BML-Modell.

$Ka \gg 100$ und somit eine Verschiebung des Brennregimes in das Regime der gebrochenen Reaktionszonen. Da in diesem Regime, das durch das Auftreten von *quenching*-Effekten gekennzeichnet ist, keine klar definierte Flammenfront existiert und chemische Vorgänge die Verbrennung bestimmen, basiert die Berechnung der Reaktionsraten mit dem BML-Modell auf der physikalisch falschen Annahme einer mischungslimitierten Verbrennung. Für das Regime der gebrochenen Reaktionszonen, muss somit das PDF-Modell angewandt werden.

Werden die berechneten Flammengeschwindigkeiten am Ende der Hindernisstrecke betrachtet (Abbildung 6.38), fällt auf, dass die mit dem BML-Modell berechnete Flammengeschwindigkeit bei der 10 Vol.% H_2 in Luft-Flamme nur etwas langsamer als die der 13 Vol.% H_2 in Luft-Flamme war. Die Tatsache, dass sich trotz einer ähnlichen Flammenausbreitung deutliche Unterschiede in den Kennzahlen der turbulenten Verbrennung ergeben haben, begründet sich, wenn die Gleichung 6.3.2 zur Bestimmung der Karlovitz-Zahl aus integralen turbulenten Größen betrachtet wird. Da die laminare Brenngeschwindigkeit quadratisch in den Nenner der Gleichung eingeht, bewirkt der Unterschied in den laminaren Brenngeschwindigkeiten von $s_L \approx 0.2$ m/s bei 10 Vol.% H_2 in Luft zu $s_L \approx 0.5$ m/s bei 13 Vol.% H_2 in Luft (s. Tabelle 4, Seite 98) mehr als eine Versechsfachung der Karlovitz-Zahl bei gleicher zugrundeliegender Turbulenz.

6.3.3 Kopplung des BML-Modells mit dem PDF-Modell

Wie in den Kapiteln 6.3.1 und 6.3.2 gezeigt wurde, ist die optimale Wahl des zu verwendenden Verbrennungsmodells bei langsamen Deflagrationen abhängig vom Brennregime, in dem die Verbrennung stattfand. Für Verbrennungsvorgänge im Flamelet-Regime ist das BML-Modell zu bevorzugen, wohingegen im Regime der gebrochenen Reaktionszonen das PDF-Modell anzuwenden ist. Im dazwischenliegenden Regime der dünnen Reaktionszonen ergibt sich mit beiden Verbrennungsmodellen eine gute Übereinstimmung mit den Messergebnissen. Da während eines Flammenausbreitungsvorgangs in den betrachteten Geometrien alle unterschiedlichen Brennregimes auftreten können und eine eindeutige Klassifizierung der auftretenden Brennregimes a priori nicht möglich ist, wurde in der vorliegenden Arbeit ein Verfahren entwickelt, das eine allgemeiner gültige Be-

rechnung von langsamen Deflagrationen gewährleistet. Hierbei werden das BML-Modell und das PDF-Modell so miteinander gekoppelt, dass ein stufenloser Übergang zwischen den Modellen und den damit beschriebenen Brennregimes erzielt werden kann.

Überblendverfahren Zur Ableitung der Methode für die Kopplung des BML-Modells mit dem PDF-Modell wird der in Abbildung 2.11 S. 30 dargestellte Beispielerlauf der turbulenten Brenngeschwindigkeit in Abhängigkeit der Turbulenzintensität näher betrachtet. Wie sich dabei zeigt, tritt für niedrige Turbulenzintensitäten ein linearer Anstieg der Brenngeschwindigkeit mit der Turbulenzintensität auf. Dieser Zusammenhang wird, wie in Kapitel 3.3.1 beschrieben wurde, durch die Anwendung des BML-Modells richtig erfasst. Da dies ebenfalls durch die gute Übereinstimmung zwischen der Simulation mit dem BML-Modell und den Messergebnissen im Flamelet-Bereich bestätigt wurde, wird dieses Modell für niedrige Turbulenzintensitäten unverändert übernommen. Bei höheren Turbulenzintensitäten tritt ab der Karlovitz-Zahl $Ka = 1$ nach dem Wechsel des Brennregimes von dem gefalteten Flamelet-Bereich in den Bereich der dünnen Reaktionszonen der sogenannte *bending*-Effekt auf (s. Kapitel 2.3.3). Da dieser Effekt durch eine Interaktion der Turbulenz mit der Vorwärmzone hervorgerufen wird, stellt dies bereits eine effektive Beeinflussung der Flammenfront dar. Dadurch, dass das BML-Modell nicht in der Lage ist, den *bending*-Effekt zu erfassen, ist es deshalb folglich richtig, das Kopplungsverfahren an der Karlovitz-Zahl zu orientieren und somit ab $Ka = 1$ einen Einfluss des PDF-Modells auf die Berechnung der Reaktionsraten zu berücksichtigen. Realisiert wurde dies durch ein Verfahren, welches in Abhängigkeit von der Karlovitz-Zahl vom BML-Modell auf das PDF-Modell überblendet.

Als obere Grenze des Überblendverfahrens, die das vollständige Umschalten auf das PDF-Modell beschreibt, wurde der Wert für die Karlovitz-Zahl gesucht, ab dem der Verbrennungsvorgang und damit die Reaktionsrate von den chemischen Prozessen limitiert wird. Wie der Blick in das von Peters modifizierte Borghi-Diagramm (s. Abbildung 2.9, S. 24) zeigt, treten effektive Veränderungen der Reaktionszone durch die turbulente Strömung und somit erste lokale Löscheffekte theoretisch ab einer Karlovitz-Zahl von

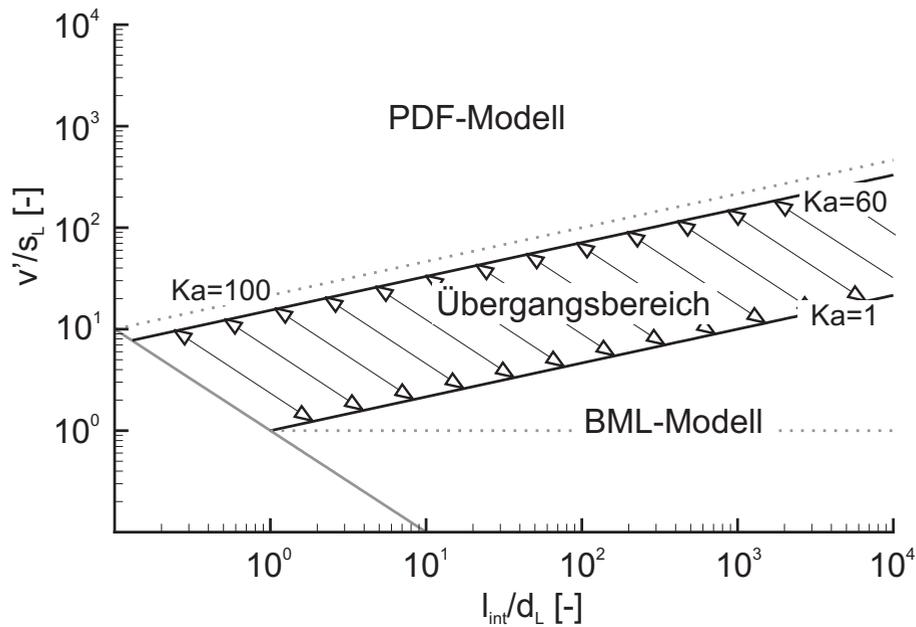


Abbildung 6.40: Überblendverfahren für die Kopplung des BML-Modells mit dem PDF-Modell.

$Ka = 100$ auf. Dem theoretischen Wert gegenüber stehen die experimentellen Ergebnisse von Abdel-Gayed et al. [AGB89], die, wie in Kapitel 2.3.2 dargestellt wurde, für Verbrennungsvorgänge bei hohen turbulenten Reynolds-Zahlen Re_t , bereits Löscheffekte ab $Ka > 15$ vorhersagen. Testrechnungen mit dem gekoppelten Modell zeigten, dass weder mit $Ka = 100$, noch mit $Ka = 15$ als oberen Grenzwert des Überblendverfahrens für alle betrachteten Fälle eine gute Übereinstimmung zwischen Messung und Simulation erzielt werden konnte. Deshalb wurde anhand von weiteren Testrechnungen ein Wert unter der Vorgabe $15 \leq Ka \leq 100$ gesucht, der in Bezug auf die in dieser Arbeit untersuchten langsamen Deflagrationen die besten Ergebnisse lieferte. Als Wert für die obere Grenze des Überblendverfahrens und somit als Kennzeichnung des Beginns eines chemisch limitierten Verbrennungsprozesses konnte $Ka = 60$ bestimmt werden. Die beschriebene Vorgehensweise ist vor dem Hintergrund zu sehen, dass die Karlovitz-Zahl prinzipiell nur eine größenordnungsmäßige Klassifizierung der Brennzustände zulässt. Zur Verdeutlichung der Kopplung des BML-Modells mit dem PDF-Modell ist in Abbildung 6.40 das vorgeschlagene Überblendverfahren dargestellt.

Prinzipiell gibt es keine physikalischen bzw. chemischen Vorgaben, wie das

Überblenden vom BML-Modell auf das PDF-Modell zwischen dem unteren und dem oberen Grenzwert des Überblendverfahrens zu definieren ist. Im Übergangsbereich $1 \leq \text{Ka} \leq 60$ wird davon ausgegangen, dass die Turbulenz mit steigender Karlovitz-Zahl immer stärker die Vorwärmzone modifiziert, die Reaktionszone aber unverändert bleibt. Dieser Vorgang bewirkt, dass die turbulente Brenngeschwindigkeit nicht mehr linear sondern nur noch sublinear mit der Turbulenzintensität wächst (*bending*-Effekt). Um diesen Effekt mit dem Überblendverfahren zu beschreiben, wurden die zeitlich gemittelten Reaktionsraten durch eine einfache lineare Interpolation zwischen den, auf dem BML- und den, auf dem PDF-Modell basierenden Reaktionsraten ermittelt. Dadurch wurde sichergestellt, dass mit steigender Karlovitz-Zahl das PDF-Modell und somit chemische Vorgänge einen zunehmenden Einfluss auf die Reaktionsrate bekommen. Die vollständige Vorgehensweise zur Kopplung der beiden Modelle wird durch den Ansatz

$$\bar{\omega}_c = \begin{cases} \bar{\omega}_{c,BML} & \text{Ka} < 1 \\ \frac{\text{Ka}-1}{60-1} \cdot \bar{\omega}_{c,PDF} + \left(1 - \frac{\text{Ka}-1}{60-1}\right) \cdot \bar{\omega}_{c,BML} & 1 \leq \text{Ka} \leq 60 \\ \bar{\omega}_{c,PDF} & \text{Ka} > 60 \end{cases}$$

beschrieben.

Um das Überblendverfahren zu realisieren, ist es nötig, die Varianztransportgleichung auch für das BML-Modell zu lösen. Prinzipiell kann diese bei der alleinigen Anwendung des BML-Modells durch die Annahme $\bar{c}''^2 = \bar{c}_{\max}''^2$ vernachlässigt werden. Da es jedoch bei dem vorgestellten Überblendverfahren zur Überschneidung des PDF-Modells mit dem BML-Modell kommt, müssen die Quell- und Senkenterme der Varianztransportgleichung ebenfalls für das BML-Modell berücksichtigt werden. Diese stimmen mit Ausnahme des Quellterms durch Reaktion (s. Gleichung 4.2.18) formell mit denen des PDF-Modells überein. Für den Quellterm durch Reaktion gilt beim BML-Modell

$$\overline{c''\omega_{c,BML}} = (c_m - \bar{c})\bar{\omega}_{BML} . \quad (6.3.6)$$

Um eine in sich geschlossene Vorgehensweise zu realisieren wurde somit der Quellterm durch Reaktion in der Varianztransportgleichung analog zu

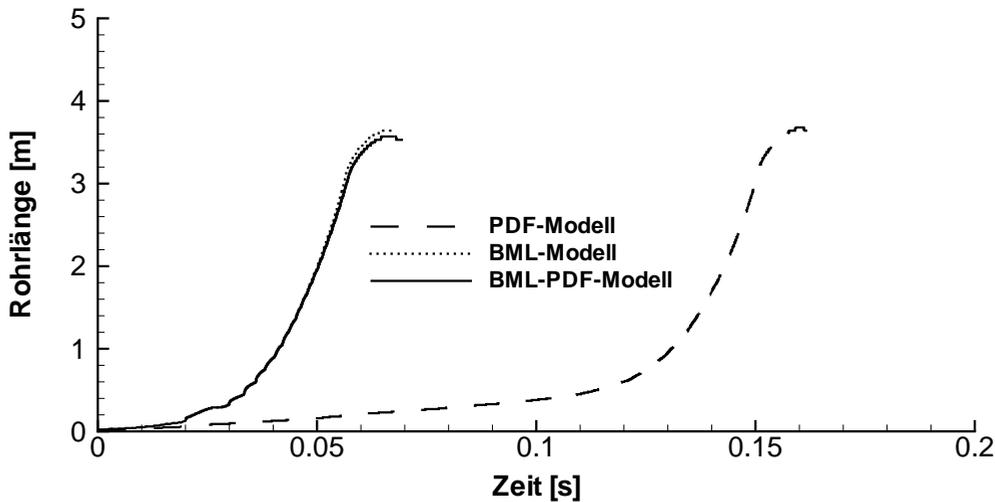


Abbildung 6.41: Berechnete Flammenausbreitung einer 13 Vol.% H_2 in Luft-Flamme in der Konfiguration „30-150-3000“.

dem Überblenden der Reaktionsrate bestimmt:

$$\overline{c''\omega_c} = \begin{cases} \overline{c''\omega_{c,BML}} & \text{Ka} < 1 \\ \frac{\text{Ka}-1}{60-1} \cdot \overline{c''\omega_{c,PDF}} + \left(1 - \frac{\text{Ka}-1}{60-1}\right) \cdot \overline{c''\omega_{c,BML}} & 1 \leq \text{Ka} \leq 60 \\ \overline{c''\omega_{c,PDF}} & \text{Ka} > 60 . \end{cases}$$

Das auf die beschriebene Weise gekoppelte Verfahren wird im folgenden als BML-PDF-Modell bezeichnet.

Ergebnisse Die Wirkungsweise des BML-PDF-Modells wird exemplarisch an zwei Beispielen demonstriert. Hierfür wird zunächst die Berechnung der 13 Vol.% H_2 in Luft-Flamme in der Konfiguration „30-150-3000“ und anschließend die Berechnung der 10 Vol.% H_2 in Luft-Flamme in der Konfiguration „60-180-3000“ betrachtet.

Wie die Abbildung 6.41 zeigt, ergab die Berechnung der 13 Vol.% H_2 in Luft-Flamme in der Konfiguration „30-150-3000“ mit dem BML-PDF-Modell ein nahezu identisches Ergebnis wie die Berechnung mit dem BML-Modell. Dies lag einerseits daran, dass, wie in Abbildung 6.42 dargestellt, die Verbrennung bei sehr niedrigen Karlovitz-Zahlen stattfand ($\text{Ka} \leq 3$) und somit das Überblendverfahren nur einen geringen Einfluss der mit

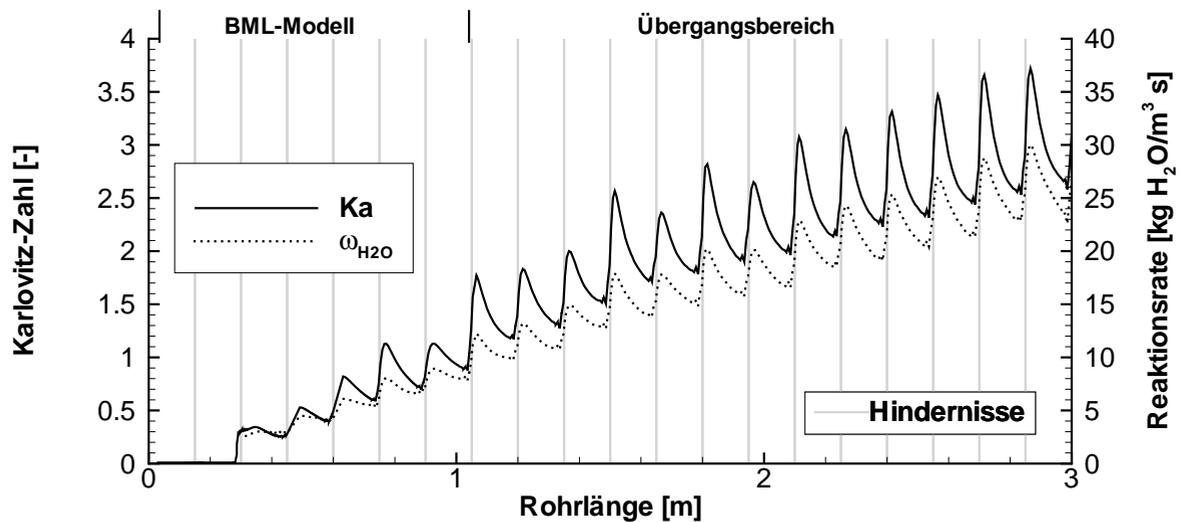


Abbildung 6.42: Entwicklung der örtlichen Karlovitz-Zahl und der örtlichen Reaktionsrate einer 13 Vol.% H_2 in Luft-Flamme in der Konfiguration „30-150-3000“ bei der Berechnung mit dem BML-PDF-Modell.

dem PDF-Modell berechneten Reaktionsraten zuließ. Andererseits zeigte die Berechnung mit dem PDF-Modell speziell in dem Bereich der Hindernisstrecke, bei dem das Überblendverfahren greift ($x > 1$ m), ein vergleichbares Ergebnis wie das BML-Modell. In Abbildung 6.42 ist markiert, auf Basis welchen Modellansatzes die dargestellten Reaktionsraten bestimmt wurden. Wie sich dabei zeigt wurden die Reaktionsraten im Anlaufvorgang ausschließlich durch das BML-Modell bestimmt. Erst ab ca. $x = 1$ m bis zum Ende der Hindernisstrecke basierten die durch das Überblendverfahren berechneten Reaktionsraten sowohl auf dem BML-, wie auch anteilmäßig auf dem PDF-Modell.

Mit dem gekoppelten Modell ergab sich an der Messposition $x = 1.6$ m eine lokale Flammenausbreitungsgeschwindigkeit von $v_F = 125$ m/s. Der Vergleich mit den Messergebnissen (siehe Kapitel 6.3.1) zeigt eine gute Übereinstimmung.

In der Konfiguration „60-180-3000“ wird die Auswirkung der Kopplung des BML-Modells mit dem PDF-Modell am Beispiel der 10 Vol.% H_2 in Luft-Flamme erörtert. Wie der in Abbildung 6.43 dargestellte Vergleich der Simulation mit der Messung, die von Eder [Ede01a] durchgeführt wurde, zeigt, unterschätzte das PDF-Modell die Flammengeschwindigkeit speziell

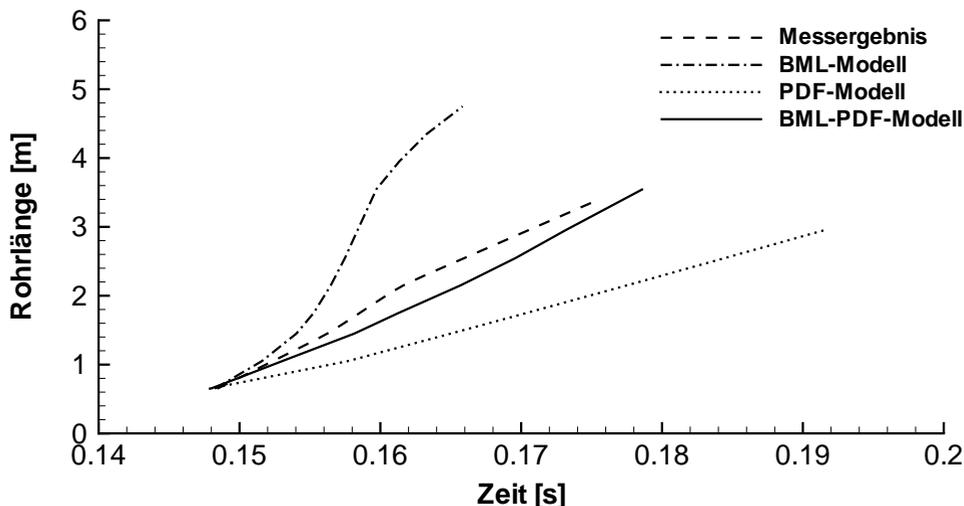


Abbildung 6.43: Berechnete Flammenausbreitung einer 10 Vol.% H_2 in Luft-Flamme.

zu Beginn der Flammenausbreitung. Im Gegensatz dazu überschätzte das BML-Modell die Flammengeschwindigkeit während des gesamten Flammenausbreitungsprozesses deutlich. Durch die Kopplung der beiden Modelle mit dem in dieser Arbeit vorgeschlagenen Überblendverfahren war es möglich, den gesamten Flammenausbreitungsprozess besser zu erfassen. Die berechnete Flammenausbreitungsgeschwindigkeit am Ende der Hindernisstrecke stimmte mit $v_F = 115$ m/s gut mit den Messergebnissen überein.

Die Wirkungsweise des BML-PDF-Modells wird offensichtlich, wenn die Entwicklung der örtlichen Karlovitz-Zahl in Abbildung 6.44 betrachtet wird. Nach dem Passieren des zweiten Hindernisses bei $x = 0.365$ m überstieg die Karlovitz-Zahl den Wert $Ka = 1$, wodurch das Überblenden vom BML-Modell auf das PDF-Modell begonnen wurde. Ab dem siebten Hindernis bei $x = 1.29$ m fand durch $Ka > 60$ erstmalig ein vollständiges Umschalten auf das PDF-Modell statt. Dieser Brennzustand trat jedoch nur vorübergehend auf, d.h. nach dem Durchtritt der Flamme durch das Hindernis fiel die Karlovitz-Zahl wieder unter $Ka = 60$. Im weiteren Verlauf der Hindernisstrecke wiederholte sich dieser Vorgang qualitativ. Dabei erreichte die Karlovitz-Zahl jeweils kurz nach dem Durchtritt durch das Hindernis ihren Maximalwert. Damit verbunden war der Wechsel des Brennzustands in den chemisch limitierten Bereich und somit das Umschalten auf die Berechnung mit dem PDF-Modell. Dieser ständige Wechsel des

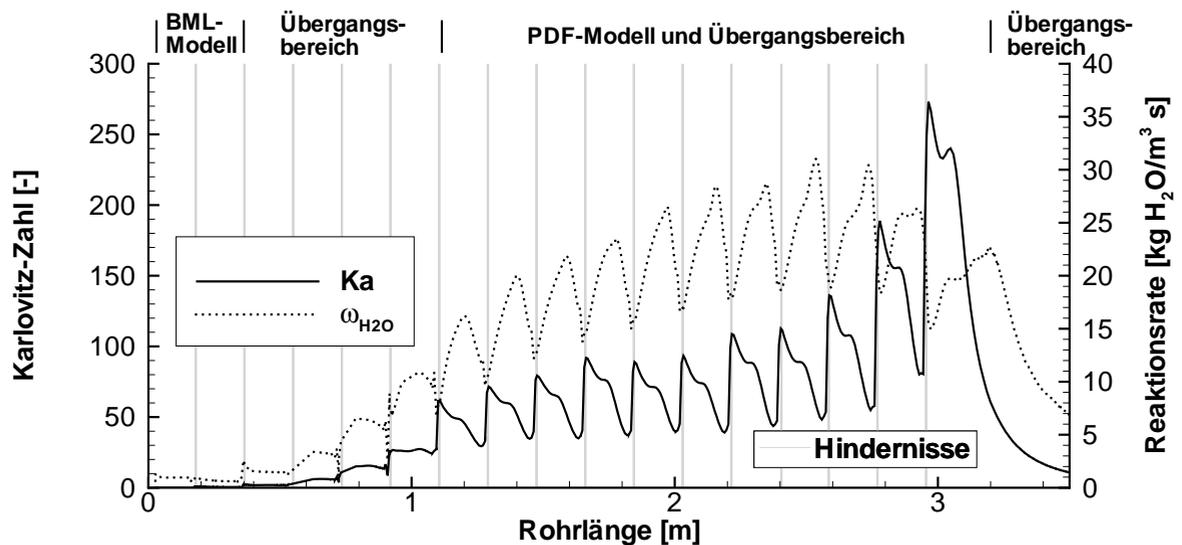


Abbildung 6.44: Entwicklung der örtlichen Karlovitz-Zahl und der örtlichen Reaktionsrate einer 10 Vol.% H_2 in Luft-Flamme in der Konfiguration „60-180-3000“ bei der Berechnung mit dem BML-PDF-Modell.

Brennzustands deutet auf eine Flammenausbreitung im *quenching*-Regime (s. Kapitel 2.4) hin. Ab ca. 2/3 der Weglänge zwischen den Hindernissen fiel die Karlovitz-Zahl wieder unter $Ka = 60$, womit ein Übergang in den Bereich der dünnen Reaktionszonen verbunden war und somit die Berechnung der Reaktionsraten im Übergangsbereich auf Basis des BML- und des PDF-Modells stattfand.

Wird das Messergebnis der Flammenausbreitung der 10 Vol.% H_2 in Luft-Flamme näher betrachtet (s. Abbildung 6.43), zeigt sich, dass die Flamme bis zur Position $x \approx 2$ m beschleunigte. Ab dieser Position jedoch verlangsamte sich die Flamme im weiteren Verlauf in der Hindernisstrecke und es stellte sich eine nahezu konstante Ausbreitungsgeschwindigkeit ein. Zurückgeführt werden kann dies ebenfalls auf ein Brennverhalten im *quenching*-Regime, bei dem sich die Flamme nur durch eine Art wiederholtes Zünden von Kammer zu Kammer im rein chemisch limitierten Bereich des Borghi-Diagramms im Rohr fortbewegt. Verglichen mit den Ergebnissen aus der Berechnung bedeutet dies, dass das beschriebene BML-PDF-Modell prinzipiell in der Lage ist, Verbrennungsvorgänge im *quenching*-Regime zu beschreiben. Um jedoch eine qualitativ verbesserte Übereinstimmung zwischen Simulation und Messung zu erzielen ist es nötig, das verwendete

Überblendverfahren zu überarbeiten und z.B. anstelle des linearen Verlaufs ein exponentielles Überblenden zu definieren. Bezogen auf die Berechnung der 10 Vol.% H_2 in Luft-Flamme in der Konfiguration „60-180-3000“ wäre es somit möglich, eine stärkere Beschleunigung der Flamme in der Anfangsphase und ein schärferes Überblenden auf den chemisch limitierten Bereich zu modellieren. Dies zu untersuchen war jedoch nicht mehr Gegenstand dieser Arbeit.

7 Zusammenfassung

In Rahmen dieser Arbeit wurden Flammenausbreitungsvorgänge von mageren Wasserstoff-Luft-Flammen in kleinskaligen Geometrien numerisch simuliert. Ziel war es dabei, den gesamten turbulenten Flammenausbreitungsprozess modelltechnisch zu erfassen. Als Basis der Simulation wurden zwei, in ihrem Ansatz unterschiedliche, Verbrennungsmodelle ausgewählt und an die gegebenen Bedingungen angepasst bzw. optimiert. Hierbei handelte es sich einerseits um ein Verbrennungsmodell basierend auf einer angenommenen Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (englisch probability density function - PDF) mit einer Reaktionsfortschrittsvariablen und andererseits um das Bray-Moss-Libby-Modell (kurz BML-Modell). Beide Modelle wurden in einer modularen Form in den kommerziellen CFD-Code CFX 4.2 von der Firma AEA Technology implementiert.

Bei der Berechnung des Flammenausbreitungsprozesses wurde der turbulente Brennzustand zu jedem Zeitpunkt der Verbrennung in dem von Peters modifizierten Borghi-Diagramm [Pet97] klassifiziert. Dabei zeigte sich, dass während eines Flammenausbreitungsvorgangs unterschiedliche Brennregimes auftraten, die aus Sicht der Modellierung differenziert zu betrachten sind. Nach dem Zündprozess und dem laminaren Flammenanlauf, die bei der Simulation durch eine geeignete Initialisierung erfasst wurden, startete die Flamme zunächst im Bereich der gewellten Flamelets. Durch die Wechselwirkung mit der, durch Hindernisse in die Expansionsströmung vor der Flamme eingebrachten Turbulenz, verlagerte sich der Brennzustand in den Bereich der gefalteten Flamelets und schließlich in den Bereich der dünnen Reaktionszonen. Bei sehr mageren Gemischen fand bei bestimmten Konfigurationen ein weiterer Übergang des turbulenten Brennzustands in den Bereich der gebrochenen Reaktionszonen statt.

Der Vergleich der Berechnungsergebnisse mit den, der Literatur entnommenen Messergebnissen zeigte, dass im Bereich moderater Turbulenzintensitäten (Flamelet-Regime) nur das BML-Modell mit einer Anpassung des turbulenten Zeitmaßes auf den schwachturbulenten Bereich in der Lage ist, den Flammenausbreitungsprozess richtig vorherzusagen. Das PDF-Modell unterschätzte die Flammenausbreitung in der Anfangsphase größenordnungsmäßig. Nach der Verlagerung der Verbrennung in den Bereich der

dünnen Reaktionszonen ergaben sich sowohl mit dem BML- wie auch dem PDF-Modell gute Ergebnisse. Fand hingegen ein Übergang des Brennzustands in den Bereich der gebrochenen Reaktionszonen statt, so zeigte sich nur mit dem PDF-Modell eine gute Übereinstimmung der gemessenen mit der gerechneten Flammenausbreitung. In diesem Fall überschätzte das BML-Modell die mittlere Flammenausbreitungsgeschwindigkeit deutlich.

Um den Einfluss der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion auf den mit dem PDF-Modell berechneten Flammenausbreitungsprozess zu untersuchen, wurden neben der standardmäßig verwendeten „gestutzten“ Gaußfunktion Berechnungen auf Basis der β -Funktion durchgeführt. Hierbei zeigte sich, dass die Wahl der zugrundegelegten angenommenen Wahrscheinlichkeitsverteilung einen starken Einfluss auf den gesamten berechneten Flammenausbreitungsprozess ausübte. Für die in dieser Arbeit untersuchten Konfigurationen ergab sich mit dem verwendeten PDF-Verbrennungsmodell basierend auf der „gestutzten“ Gaußverteilung im Gegensatz zur β -Verteilung eine gute Übereinstimmung zwischen der gemessenen und der berechneten Flammenausbreitung.

Ein weiteres, für die Modellierung entscheidendes Unterscheidungskriterium, war die maximal erzielte Flammenausbreitungsgeschwindigkeit des betrachteten Verbrennungsprozesses. Wurde die Flamme in der Geometrie so stark beschleunigt, dass ein Übergang von einer langsamen in eine schnelle Deflagration stattfand, so ergaben sich nur mit dem BML-Modell zufriedenstellende Simulationsergebnisse. Das verwendete PDF-Modell unterschätzte die Flammenausbreitung deutlich. Zurückzuführen ist dies auf die Tatsache, dass durch die führende Stoßwelle eine Strömung mit hoher Mach-Zahl vor der Flamme induziert wurde. Durch die Limitierung des verwendeten PDF-Modells, basierend auf einer Reaktionsfortschrittsvariablen, auf niedrige Mach-Zahlen konnte somit trotz adaptiver Anpassung der PDF-Reaktionsraten an das momentan vorherrschende Enthalpieniveau keine gute Übereinstimmung zwischen Messung und Rechnung erzielt werden.

Aufgrund der unterschiedlichen Qualitäten des BML-, bzw. des PDF-Modells bezogen auf das jeweilige Brennregime konnte durch die Kopplung der beiden Modelle für langsame Deflagrationen ein erweitertes Verfahren zur Simulation turbulenter Verbrennungsvorgänge abgeleitet wer-

den. Für die im Rahmen dieser Arbeit betrachteten Konfigurationen wurde ein Überblendverfahren in Abhängigkeit von der Karlovitz-Zahl definiert, durch welches eine automatische optimale Anpassung der berechneten Reaktionsraten an das jeweilige Brennregime stattfand. Dieses Verfahren ermöglicht somit eine universelle Anwendung für magere turbulente Wasserstoff-Luft-Flammen im langsamen deflagrativen Bereich.

A Anhang

A.1 Favre gemittelttes Gleichungssystem

Das Favre-gemittelte Gleichungssystem zur Simulation turbulenter Verbrennungsprozesse setzt sich zusammen aus folgenden Erhaltungsgleichungen:

Massenerhaltung

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i) = 0, \quad (\text{A.1.1})$$

wobei $\bar{\rho}$ für die zeitlich gemittelte Dichte und \tilde{u}_i die Favre gemittelte Geschwindigkeit in i -Richtung beschreiben. Für diese Gleichung und für alle folgenden gilt die Einsteinsche Summationskonvention.

Impulserhaltung

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j) = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\tau}_{ij} + \overline{\rho u_i'' u_j''}) + F_i. \quad (\text{A.1.2})$$

Dabei steht \bar{p} für den statischen Druck und F_i für äußere einwirkende Kräfte wie z.B. die Erdbeschleunigung. Der viskose Schubspannungstensor $\bar{\tau}_{ij}$ kann für Newtonsche Fluide in Favre-gemittelter Form ausgedrückt werden durch (s. [Wil93])

$$\bar{\tau}_{ij} = -\mu \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) + \frac{2}{3} \mu \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij}. \quad (\text{A.1.3})$$

Hierbei entspricht μ der dynamischen Viskosität und δ_{ij} dem Kronecker-Delta, für das $\delta_{ij} = 1$ bei $i = j$ und $\delta_{ij} = 0$ bei $i \neq j$ gilt.

Spezieserhaltungsgleichung

Bei reaktiven Strömungen müssen zusätzlich zu den Navier-Stokes Gleichungen Transportgleichungen für alle an der Reaktion beteiligten Spezies aufgestellt werden. Die Transportgleichung für den jeweiligen Favre-gemittelten Massenbruch \tilde{Y}_j der Spezies j lautet

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{Y}_j) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{Y}_j) = -\frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{j}_{j,i}^S + \overline{\rho u_i'' Y_j''}) + M_j \bar{\omega}_j. \quad (\text{A.1.4})$$

Die Beschreibung der molekularen Stoffstromdichte $j_{j,i}^S$ mit

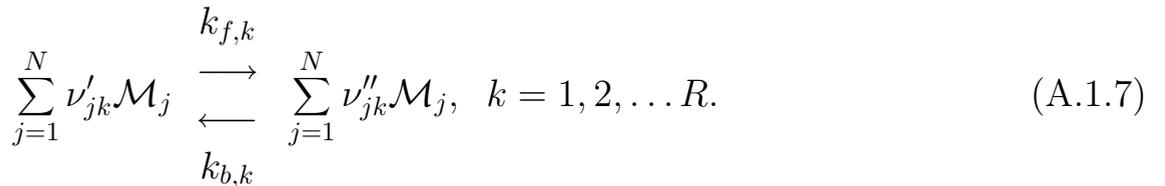
$$j_{j,i}^S = -\varrho D_{j,D} \frac{\partial Y_j}{\partial x_i} - \frac{D_{j,T}}{T} \frac{\partial T}{\partial x_i} \quad (\text{A.1.5})$$

beinhaltet sowohl die molekulare Diffusion der Spezies j im Gemisch (molekularer Diffusionskoeffizient $D_{j,D}$) als auch die Thermodiffusion (Soret-Effekt mit Thermodiffusionskoeffizient $D_{j,T}$). Der Diffusionskoeffizient einer Spezies in einem Mehrstoffsystem hängt prinzipiell von den Gradienten der anderen Spezieskonzentrationen ab. Da die exakte Berücksichtigung sehr aufwendig ist, wird diese vereinfacht mit Hilfe des konstanten binären Diffusionskoeffizienten $D_{j,D}$ in der Mischung nach dem Fickschen Gesetz beschrieben. Zudem wird der Einfluss der Thermodiffusion vernachlässigt und die zeitgemittelte Stromdichte durch

$$\overline{j_{j,i}^S} \approx -\overline{\varrho} D_{j,D} \frac{\partial \widetilde{Y}_j}{\partial x_i} = -\overline{\Gamma}_j \frac{\partial \widetilde{Y}_j}{\partial x_i} \quad (\text{A.1.6})$$

in Abhängigkeit der Favre-gemittelten Massenbrüche abgeschätzt. Dies ist zulässig, da im Fall einer turbulenten Strömung, der Einfluss der molekularen Diffusion deutlich geringer ist als der Einfluss der Reynoldsschen Flussterme $\overline{\varrho u_i'' Y_j''}$.

Der Term $M_j \omega_j$ stellt den chemischen Quellterm der Spezies j dar. M_j entspricht dabei der molaren Masse und ω_j der Reaktionsgeschwindigkeit, welche durch die Bilanzierung über alle chemischen Reaktionen eines Reaktionssystems berechnet werden kann. Allgemein kann ein Reaktionssystem bestehend aus N Spezies und R chemischen Reaktionen ausgedrückt werden durch



\mathcal{M}_j ist das chemische Symbol für die Komponente j , ν'_{jk} und ν''_{jk} die ganzzahligen stöchiometrischen Koeffizienten der Edukte und der Produkte der

k'ten Reaktion. Die Größen $k_{f,k}$ und $k_{b,k}$ entsprechen den Geschwindigkeitskoeffizienten der Vorwärts-, bzw. der Rückwärtsreaktionen. Diese werden allgemein durch die Arrheniusbeziehung

$$k_k = A_k T^{n_k} \exp\left(-\frac{E_k}{R_a T}\right), \quad (\text{A.1.8})$$

beschrieben, wobei A_k den preexponentiellen Faktor, n_k den Temperatur-exponenten und E_k die Aktivierungsenergie der k'ten Reaktion bezeichnen. Die Bilanzierung über alle Reaktionen ergibt die Gesamtreaktionsgeschwindigkeit

$$\omega_j = \sum_{k=1}^R \left\{ (\nu''_{jk} - \nu'_{jk}) \left[k_{f,k}(T) \prod_{i=1}^N \left(\frac{\rho Y_i}{M_i} \right)^{\nu'_{ik}} - k_{b,k}(T) \prod_{i=1}^N \left(\frac{\rho Y_i}{M_i} \right)^{\nu''_{ik}} \right] \right\}. \quad (\text{A.1.9})$$

Die Bestimmung des Mittelwertes $M_j \overline{\omega_j}$ ist jedoch nicht mit Gleichung A.1.9 basierend auf den Favre-gemittelten Werten möglich (s. Kapitel 3.1). Die Bestimmung der zeitlich gemittelten Reaktionsrate ist in Kapitel 4 näher beschrieben worden. Die detaillierte Beschreibung des Ausgangsterms $M_j \omega_j$ dient nur zur Veranschaulichung der Problematik.

Energieerhaltung

Bei kompressiblen und reaktiven Strömungen wird im Rahmen der Navier-Stokes-Gleichungen zusätzlich die Energieerhaltungsgleichung gelöst. Dabei hat sich die Darstellung der Transportgleichung mit der spezifischen Totalenthalpie h_t bewährt. Werden Einflüsse durch die viskose Arbeit vernachlässigt, so gilt für die Energiegleichung in Favre-gemittelter Form mit

$$\tilde{h}_t = \tilde{h} + \frac{\tilde{u}_j \tilde{u}_j}{2} + \frac{1}{2} \frac{\overline{\rho u_j'' u_j''}}{\bar{\rho}}, \quad (\text{A.1.10})$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{h}_t) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{h}_t) = \frac{\partial \bar{p}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\bar{j}_i^T - \overline{\rho u_i'' h_t''} \right) + \bar{Q}. \quad (\text{A.1.11})$$

Der Quellterm \bar{Q} beinhaltet externe Energiequellen wie z.B. durch Strahlung übertragene Wärme. Er beinhaltet jedoch nicht die Wärmefreisetzung durch chemische Reaktion. Diese wird berücksichtigt durch die Umwandlung von Bindungsenthalpie in fühlbare Wärme.

Bei einem Mehrstoffsystem gilt für die Favre-gemittelte Enthalpie der Mischung

$$\tilde{h} = \sum_{j=1}^N \tilde{Y}_j \tilde{h}_j , \quad (\text{A.1.12})$$

mit Definition der Enthalpie der einzelnen Spezies durch

$$\tilde{h}_j = h_{j,ref} + \int_{T_{ref}}^{\tilde{T}} c_{p,j}(T') dt' . \quad (\text{A.1.13})$$

Dabei entspricht $h_{j,ref}$ der Bildungsenthalpie der Spezies j zur Temperatur T_{ref} (in der Regel gilt $T_{ref} = 298$ K) und $c_{p,j}$ der spezifischen Wärmekapazität der Spezies j bei konstantem Druck p .

Bei alternativen Ansätzen wird zur Bilanzierung der Energie durch die Erhaltungsgleichung das Enthalpieniveau auf $h_{ref} = \sum_{j=1}^N h_{j,ref}$ angehoben. Dadurch werden Bildungsenthalpien der einzelnen Spezies $h_{j,ref}$ in Gleichung A.1.13 unterdrückt. Zur Berücksichtigung der Wärmefreisetzung durch chemische Reaktionen muss dann der Quellterm um die entsprechenden Bildungsenthalpien erweitert werden:

$$\bar{Q} = \bar{Q} + \sum_{j=1}^N \Delta_j M_j \bar{\omega}_j . \quad (\text{A.1.14})$$

Dabei entspricht Δ_j der Bildungsenthalpie pro Masseneinheit der Spezies j .

Die Wärmestromdichte j_i^T ergibt sich empirisch aus dem Fourierschen Wärmeleitungsgesetz und dem diffusiven Transport der spezifischen Enthalpie. Wird die Druckabhängigkeit vernachlässigt, so gilt

$$j_i^T = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} + \sum_{j=1}^N h_j j_{j,i}^S . \quad (\text{A.1.15})$$

Dieser Term kann mit Gleichung A.1.6 und dem Anwenden der Kettenregel auf $\partial h / \partial x_i$ unter Berücksichtigung der Abhängigkeit von T und Y_i durch

$$j_i^T = -\frac{\lambda}{c_p} \frac{\partial h}{\partial x_i} + \frac{\lambda}{c_p} \sum_{j=1}^N h_j \left(1 - \frac{1}{\text{Le}_j} \right) \frac{Y_j}{x_i} \quad (\text{A.1.16})$$

ausgedrückt werden. Im Falle hochturbulenter Strömungen wird dieser Term weiter vereinfacht, da die diffusiven Einflüsse eine untergeordnete Rolle spielen. So führt die Annahme $Le_j = 1$ zu

$$j_i^T = -\frac{\lambda}{c_p} \frac{\partial h}{\partial x_i}, \quad (\text{A.1.17})$$

woraus die zeitgemittelte Form

$$\overline{j_i^T} \approx -\frac{\lambda}{c_p} \frac{\partial \tilde{h}}{\partial x_i} \quad (\text{A.1.18})$$

abgeschätzt werden kann. Zudem wird häufig $\tilde{h} \approx \tilde{h}_t$ gesetzt, wodurch sich die Gleichung weiter vereinfachen lässt (s.[Tec97]).

Zustandsgleichung

Zur Schließung des Gleichungssystems wird die Zustandsgleichung in Favre-gemittelter Form verwendet. Werden Fluktuationen der spezifischen Gas-konstanten vernachlässigt, so wird durch

$$\bar{p} = \bar{\rho} R \tilde{T} \quad (\text{A.1.19})$$

ein Zusammenhang zwischen dem statischen Druck \bar{p} und der Dichte $\bar{\rho}$ geschaffen.

A.2 Transportgleichungen für \tilde{k} und $\tilde{\varepsilon}$

Die Transportgleichungen für \tilde{k} und $\tilde{\varepsilon}$ lauten standardmäßig (s. z.B. [Wil93]):

\tilde{k} -Transportgleichung

$$\bar{\rho} \frac{\partial \tilde{k}}{\partial t} + \bar{\rho} \tilde{u}_i \frac{\partial \tilde{k}}{\partial x_i} = P - \bar{\rho} \tilde{\varepsilon} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\left(\mu + \frac{\mu_t}{Pr_{t,k}} \right) \frac{\partial \tilde{k}}{\partial x_i} \right) + G \quad (\text{A.2.1})$$

$\tilde{\varepsilon}$ -Transportgleichung

$$\bar{\rho} \frac{\partial \tilde{\varepsilon}}{\partial t} + \bar{\rho} \tilde{u}_i \frac{\partial \tilde{\varepsilon}}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{Pr_{t,\varepsilon}} \right) \frac{\partial \tilde{\varepsilon}}{\partial x_i} \right] + C_1 \frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{k}} (P + C_3 G) - C_2 \bar{\rho} \frac{\tilde{\varepsilon}^2}{\tilde{k}}. \quad (\text{A.2.2})$$

Dabei gilt für den Scherproduktionsterm

$$P = \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} \overline{\rho u_i'' u_j''} = \quad (\text{A.2.3})$$

$$= \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} \left((\mu + \mu_t) \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \left(\overline{\rho \tilde{k}} + (\mu + \mu_t) \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \right) \delta_{ij} \right) \quad (\text{A.2.4})$$

und für den Produktionsterm durch Körperkräfte

$$G = -g_i \frac{\mu_t}{\overline{\rho} \text{Pr}_t} \frac{\partial \overline{\rho}}{\partial x_i}, \quad (\text{A.2.5})$$

Für die im k - ε -Modell vorkommenden Konstanten werden die folgenden Werte verwendet:

$$C_\mu = 0.09 \quad C_1 = 1.44, \quad C_2 = 1.92, \quad \text{Pr}_{t,k} = 1.0, \quad \text{Pr}_{t,\varepsilon} = 1.3 .$$

Das k - ε Modell in dieser Form wurde für dichtebeständige Fluide abgeleitet und verifiziert. Dadurch entsprechen die Favre-gemittelten Werte denen der Reynoldsmittelung, d.h. es gilt $\tilde{k} = \overline{k} = k$ und $\tilde{\varepsilon} = \overline{\varepsilon} = \varepsilon$.

A.3 Berechnung der spezifischen Wärmekapazität

H_2					
Temperatur [K]	C_1	C_2	C_3	C_4	C_5
300.0	.2742060293600E+09	.6858585247400E+05	-.6770102671000E+02	-.7877875827600E-02	.3437732580800E-04
1000.0	.2487069082200E+09	.5820335421600E+05	-.4683964599200E+01	-.7675133949200E-03	.1315899929660E-06
5000.0	.2671234990400E+09	.9373921929600E+05	-.4785663110000E+02	.1092357587220E+00	-.7290175795600E-04
O_2					
Temperatur [K]	C_1	C_2	C_3	C_4	C_5
300.0	.2671234990400E+09	.9373921929600E+05	-.4785663110000E+02	.1092357587220E+00	-.7290175795600E-04
1000.0	.3074166349200E+09	.5100802785800E+05	-.1046601238800E+02	.1475968623400E-02	-.9448323915600E-07
5000.0	.2815820438800E+09	.2889100034800E+06	-.5283294254400E+03	.5793678243400E+00	-.2083977263200E-03
H_2O					
Temperatur [K]	C_1	C_2	C_3	C_4	C_5
300.0	.2815820438800E+09	.2889100034800E+06	-.5283294254400E+03	.5793678243400E+00	-.2083977263200E-03
1000.0	.2221621353000E+09	.2541002000200E+06	-.7258338164000E+02	.9985084069600E-02	-.5313991205200E-06
5000.0	.2742520057800E+09	.1170811068560E+06	-.3295022770800E+03	.4690355571000E+00	-.2032651615600E-03
N_2					
Temperatur [K]	C_1	C_2	C_3	C_4	C_5
300.0	.2742520057800E+09	.1170811068560E+06	-.3295022770800E+03	.4690355571000E+00	-.2032651615600E-03
1000.0	.2433208496000E+09	.1237103911520E+06	-.4726309464000E+02	.8394677393200E-02	-.5614736021400E-06
5000.0	.6912259600000E+16	.1651991800000E+09	.8424160500000E+14	.0000000000000E+00	.0000000000000E+00

Abbildung A.1: Koeffizienten zur Berechnung der Wärmekapazität c_p basierend auf der *Sandia gas phase chemical kinetics subroutine library* [KRM89] (auch bekannt als CHEMKIN)

Literatur

- [ABL75] G. E. Andrews, D. Bradley, and S. B. Lwakabamba. Turbulence and turbulent flame propagation. *Combust. and Flame*, 24:285–304, 1975.
- [Adv95] Advanced Scientific Computing. Tascflow – theory manual. Handbuch, 1995.
- [AGB81] R. G. Abdel-Gayed and D. Bradley. A two-eddy theory of premixed turbulent flame propagation. *Phil. Trans. R. Soc. London*, 301(Series A), 1981.
- [AGB89] R. G. Abdel-Gayed and D. Bradley. Combustion regimes and the straining of turbulent premixed flames. *Combust. and Flame*, 76:213–218, 1989.
- [AKBH83] K. J. Al-Khishali, D. Bradley, and S. F. Hall. Turbulent combustion of near-limit hydrogen-air mixtures. *Combust. and Flame*, 54:61–70, 1983.
- [Ard98] N. Ardey. *Struktur und Beschleunigung turbulenter Wasserstoff-Luft-Flammen in Räumen mit Hindernissen*. PhD thesis, TU München, 1998.
- [ATP84] D. A. Anderson, J. C. Tannehill, and R. H. Pletcher. *Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer*. Hemisphere Publishing Corp., McGraw-Hill Book Company, New York, 1984.
- [Bar75] F. Bartlmä. *Gasdynamik der Verbrennung*. Springer-Verlag, New York, 1975.
- [Bea94] R. Beauvais. *Brennverhalten vorgemischter, turbulenter Wasserstoff-Luft-Flammen in einem Explosionsrohr*. PhD thesis, TU München, 1994.
- [Bie99] U. Bielert. Modeling the ignition of hydrogen-steam-air mixtures during severe accidents in nuclear power plants. In *17th International Colloquium on Dynamics of Explosions and Reactive Systems (ICDERS)*, Heidelberg, 1999.
- [Bil75] R. W. Bilger. A note on Favre averaging in variable density flows. *Combust. Sci. and Tech.*, 11:215–217, 1975.
- [BL99] D. E. Bohn and J. Lepers. Numerical simulation of turbulent premixed combustion using a joint-pdf approach based on a systematically reduced multi-step reaction mechanism. *ASME Turbo Expo Indianapolis*, 1999.
- [BLM85] K. N. C. Bray, P. A. Libby, and J. B. Moss. Unified modeling approach for premixed turbulent combustion—part i: General formulation. *Combust. and Flame*, 61:87–102, 1985.
- [Bor88] R. Borghi. Turbulent combustion modelling. *Prog. in Energy and Combust. Sci.*, 14:245–292, 1988.
- [Bra79] K. N. C. Bray. The interaction between turbulence and combustion. In *17th (Int.) Symposium on Combust.*, pages 223–233. The Combustion Institute, 1979.

- [Bra80] K. N. C. Bray. Turbulent flows with premixed reactants. In P. A. Libby and F. A. Williams, editors, *Turbulent Reacting Flows*, chapter 4, pages 115–183. Academic Press, London, 1980.
- [Bre87] N. Brehm. *Ein Beitrag zum Phänomen des Übergangs von der Deflagration in die Detonation*. PhD thesis, TU München, 1987.
- [Bro89] I. N. und Semendjajew K. A. Bronstein. *Taschenbuch der Mathematik*. BSB B. G. Teubner Verlagsgesellschaft, Leipzig, 1989.
- [CG88] C. K. Chan and D. R. Greig. The structures of fast deflagrations and quasi-detonations. In *22nd (Int.) Symposium on Combust.*, pages 1733–1739. The Combustion Institute, 1988.
- [CGPS72] L. S. Caretto, A. D. Gosman, S. V. Patankar, and 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, and M. S. Miller. The overall reaction concept in premixed, laminar, steady-state flames. I. Stoichiometries. *Combust. and Flame*, 54:155–169, 1983.
- [Cla85] P. Clavin. Dynamic behavior of premixed flame fronts in laminar and turbulent flows. *Prog. in Energy and Combust. Sci.*, 11:1–59, 1985.
- [Cla94] P. Clavin. Premixed combustion and gasdynamics. *Annu. Rev. in Fluid Mech.*, 26:321–352, 1994.
- [Cor57] S. Corrsin. Simple theory of an idealized mixer. *A.I.Ch.E. Journal*, 3:329–332, 1957.
- [CW82] P. Clavin and F. A. Williams. Effects of molecular diffusion and of thermal expansion on the structure and dynamics of premixed flames in turbulent flows of large scale and low intensity. *J. of Fluid Mechanics*, 116:251–282, 1982.
- [Dam40] G. Damköhler. Der Einfluß der Turbulenz auf die Flammengeschwindigkeit in Gasgemischen. *Zeitschrift für Elektrochemie und angewandte Physikalische Chemie*, 46:601–626, 1940. siehe auch NACA Techn. Memorandum No. 1112, (1947).
- [Dar38] G. Darrieus. Propagation d’un front de flamme, 1938. unveröffentlichte Arbeit, präsentiert bei La Technique Moderne (1938) und beim Congrès de Mécanique Appliquée Paris (1945).
- [DE74] C. Dopazo and O’Brien E. *Acta Astronautica*, 1:1239–1240, 1974.
- [Dö90] K. Döbbling. *Experimentelle und theoretische Untersuchungen an stark verdrahten, turbulenten isothermen Strömungen*. PhD thesis, Universität Karlsruhe (T.H.), 1990.

- [Dur00] B. Durst. *Messungen und Simulationen zur Wechselwirkung zwischen Turbulenz und vorgemischten Flammen*. PhD thesis, TU München, 2000.
- [Ede01a] A. Eder, 2001. Private Mitteilung.
- [Ede01b] A. Eder. *Brennverhalten schallnaher und überschall-schneller Wasserstoff-Luft-Flammen*. PhD thesis, TU München, 2001.
- [EEM98] A. Eder, B. Edlinger, and F. Mayinger. Einfluß Containment-typischer Strömungshindernisse auf die Ausbreitung von Wasserstoff-Luft-Flammen - Band III: Anlaufvorgänge und Maßstabeffekte, 1998. Abschlussbericht zum Forschungsvorhaben BMFT Nr. 150 0957.
- [EPE⁺99] B. Edlinger, C. Poruba, A. Eder, F. Mayinger, U. Bielert, A. Vesper, A. Kotchourko, W. Breitung, P. Royle, H. Scholtzyssek, H. Wilkening, T. Huld, M. Movahed, F. Dabbene, and E. Studer. Multidimensional simulation of hydrogen distribution and turbulent combustion in severe accidents, 1999. Final report of EU Project, European Comm.
- [Fav65] A. Favre. Equations de gaz compressible. *J. de Mécanique*, 4:361–421, 1965.
- [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.
- [GJ96] P. W. Guilbert and I. P. Jones. Modelling of explosions and deflagrations. HSE Contract Research Report No. 93/1996, 1996. CFDS, Harwell Laboratory.
- [GMP94] J. Göttgens, F. Mauss, and N. Peters. Analytic approximations of burning velocities and flame thickness of lean hydrogen, methane, ethylene, ethane, acetylene and propane flames. In *24th (Int.) Symposium on Combust.*, pages 129–135. The Combustion Institute, 1994.
- [GW70] A. G. Gaydon and H. G. Wolfhard. Flames: their structure, radiation and temperature. *Chapman and Hall*, 5:112, 1970.
- [HG84] B. Hakberg and A.D. Gosman. Analytical determination of turbulent flame speed from combustion models. In *20th (Int.) Symposium on Combust.*, page 225. The Combustion Institute, 1984.
- [Hof95] D. Hofmann. Erweiterung des Finite-Volumenprogramms TASCflow um ein PDF-Verbrennungsmodell zur Simulation von turbulenten Wasserstoff-Luft-Flammen. Diplomarbeit, Dezember 1995. Lehrstuhl A für Thermodynamik, Technische Universität München.
- [JM80] W. P. Jones and J. McGuirk. Computation of a round turbulent jet discharging into a confined cross flow. *Turbulent Shear Flows*, 2:233, 1980.
- [Jor99] M. Jordan. *Zündung und Verbrennung in vorgemischten turbulenten Freistrahlen*. PhD thesis, TU München, 1999.

- [JW82] W. P. Jones and J. H. Whitelaw. Calculation methods for reacting turbulent flows: A review. *Combust. and Flame*, 48:1–26, 1982.
- [KBVD97] A. S. Kotchourko, W. Breitung, A. Vesper, and S. B. Dorofeev. Tube experiments and numerical simulation on turbulent hydrogen-air combustion. In *21st (Int.) Symp. on Shock Waves*, pages 3220.1–3220.6, Great Keppel Island, Australia, 1997.
- [KDB99] A. S. Kotchourko, S. B. Dorofeev, and W. Breitung. Test of extended eddy break up model in simulations of turbulent h_2 -air combustion. In *17-th Int. Colloq. on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems (ICDERS)*, 1999.
- [KKM93] G. W. Koroll, Kumar R. K., and Bowles E. M. Burning velocities of hydrogen-air mixtures. *Combust. and Flame*, 94:330–340, 1993.
- [Kle00] R. Klein. Detailed modelling flame acceleration and DDT. In *State-of-the-Art Report on Flame Acceleration Deflagration-to-detonation Transition in Nuclear Safety*. OECD, 2000. To be published.
- [KLZ94] V. P. Karpov, A. N. Lipatnikov, and V. L. Zimont. A model of premixed turbulent combustion and its validation. *Archivum Combustionis*, 14:3–19, 1994.
- [Kol41] A. Kolmogoroff. The local structure of turbulence in incompressible viscous fluid for very large reynolds numbers. In *Comptes Rendus (Doklady) de l'Académie des Sciences de l'URSS*, volume 30, pages 301–305, 1941.
- [KRM89] R. J. Kee, F. M. Rupley, and 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.
- [Kuo86] K. K. Kuo. *Principles of Combustion*. John Wiley & Sons Inc., New York, 1986.
- [Lan44] L. Landau. Theory of slow combustion. *Acta Physicochim. (URSS)*, 19:77, 1944.
- [LB81] P. A. Libby and K. N. C. Bray. Countergradient diffusion in premixed turbulent flames. *AIAA J.*, 19(2):205–213, 1981.
- [Leo79] B.P. Leonard. A stable and accurate convection modelling procedure based on quadratic upstream interpolation. *Comput. Meth. Appl. Mech. Engrg.*, 19:59–98, 1979.
- [LKC84] J. H. Lee, R. Knystautas, and C. K. Chan. Turbulent flame propagation in obstacle-filled tubes. In *20th (Int.) Symposium on Combust.*, pages 1663–1672. The Combustion Institute, 1984.
- [LM83] D.D.S. Liu and R. MacFarlane. Laminar burning velocities of hydrogen-air-steam flames. *Combust. and Flame*, 49:59–71, 1983.

- [LN75] F. C. Lockwood and A. S. Naguib. The prediction of fluctuations in the properties of free, round-jet, turbulent, diffusion flames. *Combust. and Flame*, 24:109–124, 1975.
- [LS74] B. E. Launder and D. B. Spalding. The numerical computation of turbulent flows. *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.*, 3:269–289, 1974.
- [Lun67] T. Lundgren. Distribution function in the statistical theory of turbulence. *Phys. Fluids*, 10:969–975, 1967.
- [Maa88] U. Maas. *Mathematische Modellierung instationärer Verbrennungsprozesse unter Verwendung detaillierter Reaktionsmechanismen*. PhD thesis, Universität Heidelberg, 1988.
- [Mar51] G. H. Markstein. Experimental and theoretical studies of flame front stability. *J. Aerospace Sci.*, 18:199–209, 1951.
- [Mar64] G. H. Markstein. *Non-Steady Flame Propagation*, volume AGARDograph No. 75. Pergamon Press Ltd., 1964.
- [May01] O. Mayinger, F. und Feldmann. *Optical Measurements. Techniques and Applications*, volume 2. Auflage. Springer Verlag, 2001.
- [MBP97] U. C. Müller, M. Bollig, and N. Peters. Approximations for burning velocities and markstein numbers for lean hydrocarbon and methanol flames. *Combust. and Flame*, 108:349–356, 1997.
- [McI95] A. C. McIntosh. Influence of pressure waves in the initial development of an explosion kernel. *AIAA Journal*, 33/9, 1995.
- [MH76] B. F. Magnussen and B. H. Hjertager. On mathematical modeling of turbulent combustion with special emphasis on soot formation and combustion. In *16th (Int.) Symposium on Combust.*, pages 719–729. The Combustion Institute, 1976.
- [MK82] M. Metghalchi and J. C. Keck. Burning velocities of mixtures of air with methanol, isooctane and indolene at high pressures and temperatures. *Combust. and Flame*, 48:191–210, 1982.
- [ML83] E. Mallard and H. L. LeChatelier. *Recherches experimentales et theoretiques sur la combustion des melanges gazeux explosifs*, 1883.
- [MMJ77] A. G. Marathe, H. S. Mukunda, and V. K. Jain. Some studies on hydrogen-oxygen diffusion flame. *Combust. Sci. and Tech.*, 15:49–64, 1977.
- [Mos79] J.B. Moss. Simultaneous measurements of concentration and velocity in an open premixwd turbulent flame. *Combust. Sci. and Tech.*, 22:115, 1979.

- [Mos97] V. Moser. *Simulation der Explosion magerer Wasserstoff-Luft-Gemische in großskaligen Geometrien*. Aachener Beiträge zum Kraftfahr- und Maschinenwesen Band 11. Verlag der Augustinus Buchhandlung, 1997.
- [MP92] U. Maas and S. B. Pope. Implementation of simplified chemical kinetics based on intrinsic low-dimensional manifolds. In *24th (Int.) Symposium on Combust.*, pages 103–112. The Combustion Institute, 1992.
- [MW88] U. Maas and J. Warnatz. Ignition processes in hydrogen-oxygen mixtures. *Combust. and Flame*, 74:53, 1988.
- [NK93] K. Naitoh and K. Kuwahare. Large eddy simulation of the premixed flame in an engine. In *Progress in Astronautics and Aeronautics*. AIAA, 1993.
- [NSB89] N. Naji, R. Said, and R. Borghi. Towards a general turbulent combustion model for spark ignition engines. In *SAE Technical Paper Series*, volume 890672, 1989.
- [Oer66] H. Oertl. *Stossrohre*. Springer Verlag, Wien, New York, 1966.
- [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.*, pages 1231–1250. The Combustion Institute, 1986.
- [Pet92] N. Peters. *Fifteen lectures on laminar and turbulent combustion*, 1992.
- [Pet97] N. Peters. *Four lectures on turbulent combustion*, 1997.
- [PF96] M. Perić and J. H. Ferziger. *Computational Methods for Fluid Dynamics*. Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, 1996.
- [PK93] G. Patnaik and Kailasanath. Effect of gravity on multidimensional burner-stabilized flames. In *Proceedings of the 1993 ASME Winter Annual Meeting New Orleans*, volume 269, pages 76–78, New York, 1993. ASME.
- [PKO91] G. Patnaik, K. Kailasanath, and E. S. Oran. Effect of gravity on flame instabilities in premixed gases. *AIAA Journal*, 29/12:2141–2148, 1991.
- [Pop76] S. B. Pope. The probability approach to the modelling of turbulent reacting flows. *Combust. and Flame*, 27:299–312, 1976.
- [Pop79] S. B. Pope. The statistical theory of flames. *Phil. Trans. R. Soc. London*, A 291:529–568, 1979.
- [Pop81] S. B. Pope. A Monte Carlo method for the PDF equations of turbulent reactive flow. *Combust. Sci. and Tech.*, 25:159–174, 1981.
- [Pop85] S. B. Pope. PDF methods for turbulent reacting flows. *Prog. in Energy and Combust. Sci.*, 11:119–192, 1985.

- [Rey95] O. Reynolds. On the dynamical theory of incompressible viscous fluids and the determination of the criterion. *Phil. Trans. R. Soc. London*, 186(Series A):123, 1895.
- [Rey89] W.C. Reynolds. The potential and limitations of direct and large-eddy simulation. In *Lecture Notes in Physics*, page 313. Springer Verlag, New York, 1989.
- [Rot72] J. C. Rotta. *Turbulente Strömungen*. Teubner, Stuttgart, 1972.
- [Siv77] G. I. Sivashinsky. Diffusional-thermal theory of cellular flames. *Combust. Sci. and Tech.*, 15:137, 1977.
- [SMK97] V. Smiljanovski, V. Moser, and R. Klein. A capturing-tracking hybrid scheme for deflagration discontinuities. *Journal of 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.*, pages 643–657. The Combustion Institute, 1971.
- [Spa76] D. B. Spalding. Mathematical models of flames; a review. *Combust. Sci. and Tech.*, 13:3–25, 1976.
- [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 part i/ii. In *Proceedings of the Royal Society of London*, volume 873/A, pages 421–464, 1935.
- [Tec97] AEA Technology. Cfx 4.2 – solver manual. Handbuch, 1997.
- [THH86] T. Tsuruda, M. Harayama, and T. Hirano. Growth of flame front turbulence. *Journal of Heat Transfer*, 108:877–881, 1986.
- [TL83] H. Tennekes and J. L. Lumley. *A First Course in Turbulence*. MIT Press, Cambridge, Massachusetts, 1983.
- [VCB86] A. K. Varma, A. U. Chatwani, and F. V. Bracco. Studies of premixed laminar hydrogen–air flames using elementary and global kinetics models. *Combust. and Flame*, 64:233–236, 1986.
- [VS90] B. D. Videto and D. A. Santavicca. Flame-turbulence interactions in a freely-propagating, premixed flame. *Combust. Sci. and Tech.*, 70:47–73, 1990.
- [Wil93] D. C. Wilcox. *Turbulence Modeling for CFD*. DCW Industries, La Cañada, California, 1993.
- [WM93] J. Warnatz and U. Maas. *Technische Verbrennung*. Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, 1993.

- [WMD99] J. Warnatz, U. Mass, and R.W. Dibble. *Combustion: Physical and Chemical Fundamentals, Modeling and Simulation, Experiments, Pollutant Formation*. Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, 1999.
- [ZFK38] Y. B. Zel'dovich and D. A. FrankKamenetsky. A theory of thermal propagation of flame. *Acta Physicochem. URSS*, 9:341–350, 1938. See also Ostriker 1992, pp. 262-270.
- [ZL95] V.L. Zimont and A. N. Lipatnikov. A numerical model of premixed turbulent combustion of gases. *Chem. Phys. Reports*, 14(7):993–1025, 1995.