

Experimentelle Untersuchung der Selbstzündung von Kohlenwasserstoffen in nicht-vorgemischten turbulenten Strömungen

Dem Fachbereich Maschinenbau
an der Technischen Universität Darmstadt
zur
Erlangung des Grades eines Doktor-Ingenieurs (Dr.-Ing.)
genehmigte

D i s s e r t a t i o n

vorgelegt von

Felix Peter Eitel, M. Sc.

aus Neustadt an der Weinstraße

Berichterstatter:	Prof. Dr. rer. nat. A. Dreizler
Mitberichterstatter:	Prof. Dr.-Ing. F. Dinkelacker
Tag der Einreichung:	26. Mai 2015
Tag der mündlichen Prüfung:	15. Juli 2015

Darmstadt 2015

D17

Bibliografische Information der Deutschen Bibliothek

Die Deutsche Bibliothek verzeichnet diese Publikation in der Deutschen Nationalbibliografie; detaillierte bibliografische Daten sind im Internet über <http://dnb.ddb.de> abrufbar.

Eitel, Felix P.:

Experimentelle Untersuchung der Selbstzündung von Kohlenwasserstoffen
in nicht-vorgemischten turbulenten Strömungen
ISBN 978-3-86376-166-0

Alle Rechte vorbehalten

1. Auflage 2015

© Optimus Verlag, Göttingen

© Coverfotos: Felix P. Eitel

URL: www.optimus-verlag.de

Printed in Germany

Papier ist FSC zertifiziert (holzfrei, chlorfrei und säurefrei,
sowie alterungsbeständig nach ANSI 3948 und ISO 9706)

Das Werk, einschließlich aller seiner Teile, ist urheberrechtlich geschützt. Jede Verwertung außerhalb der engen Grenzen des Urheberrechtsgesetzes in Deutschland ist ohne Zustimmung des Verlages unzulässig und strafbar. Dies gilt insbesondere für Vervielfältigungen, Übersetzungen, Mikroverfilmungen und die Einspeicherung und Verarbeitung in elektronischen Systemen.

Danksagung

Die vorliegende Arbeit entstand im Rahmen meiner dreieinhalbjährigen Zeit als Stipendiat und Wissenschaftlicher Mitarbeiter am Fachgebiet Reaktive Strömungen und Messtechnik an der TU Darmstadt.

Mein ausdrücklicher Dank geht dabei an Fachgebietsleiter Prof. Dr. rer. nat. Andreas Dreizler, der mir die Möglichkeit zur Promotion gab. Seine Unterstützung durch fachliche Diskussionen, zahlreiche Ideen und Ratschläge trugen maßgeblich zum Gelingen dieser Arbeit bei. Letztendlich war es vor allem das mir entgegengebrachte Vertrauen der vergangenen Jahre, das eine produktive Atmosphäre schuf, und aus der heraus diese Arbeit entstand.

Ein weiteres großes Dankeschön gilt Prof. Dr.-Ing. Friedrich Dinkelacker vom Institut für Technische Verbrennung der Leibniz Universität Hannover für die Übernahme des Koreferats meiner Dissertation und dem fachlichen Interesse an meiner Arbeit.

Des Weiteren bin ich allen Kollegen der Fachgebiete RSM und EKT einen großen Dank schuldig, die eine freundschaftliche Arbeitsatmosphäre schufen, in der das gegenseitige Unterstützen selbstverständlich war. Meinen Bürokollegen Johannes Weinkauff und Thabo Stahler sowie Roman Stiehl und Christoph Heeger aus der Anfangszeit meiner Promotion danke ich nicht nur für die fachlichen Diskussionen, sondern auch für ihren Humor, der die Tage im Büro überaus belebte. Ein ganz besonders herzlicher Dank geht an Simone Schönfelder wegen ihrer Unterstützung im Labor und der unentbehrlichen Hilfe beim Umbau des Prüfstands. Die produktiven sowie kurzweiligen Tage im Labor werden mir immer in bester Erinnerung bleiben. Jhon Pareja danke ich für die Hilfe während der Durchführung der Messkampagnen, der mit viel Einsatz, Tatkraft und Ausdauer zum Gelingen dieser Arbeit in hohem Maße beitrug. Außerdem danke ich Jens Hermann, Elias Baum und Philipp Trunk, die neben ihren fachlichen Hilfestellungen stets für eine herzliche Gesellschaft sorgten und mir die letzten Jahre, auch nach Dienstschluss, immer wieder aufs Neue eine Bereicherung waren. Ebenfalls ein großes Dankeschön geht an Andreas Ludwig für die Unterstützung im Labor und insbesondere für die Übernahme des Lektorats dieser Arbeit. Auch Dirk Geyer gilt ein besonderer Dank für die vielen fruchtbaren Diskussionen und Ideen während meiner Zeit am Fachgebiet. Stellvertretend für alle Mitarbeiter der mechanischen Werkstatt danke ich Roland Berntheisel für die Durchführung aller großen und kleinen Arbeiten, ohne die weder Aufbau noch Betrieb des Prüfstandes möglich gewesen wäre.

Aus tiefstem Herzen danke ich meiner Familie, vor allem meinem Eltern Petra und Helmut Eitel, die mich Zeit meines Lebens immer unterstützten und mir die Möglichkeit zum Studium gaben. Ihr unentwegter Rückhalt und das permanente Vertrauen in mich bedeuten mir sehr viel und spornten mich stets an.

Ein Dank, der kaum in Worte zu fassen ist, gilt meiner Freundin Marina Grigoreva, die mich seit Beginn meines Studiums in meinem Leben begleitet und die mir durch ihre bedingungslose Unterstützung und Ermutigung immer wieder Kraft gibt, neue Herausforderungen anzugehen und diese auch zu bestehen.

Darmstadt, im Mai 2015

Felix Eitel

*„Wenn man es nur versucht, so geht's.
Das heißt mitunter, doch nicht stets.“*

Heinrich Christian Wilhelm Busch

Deutscher humoristischer Dichter und Zeichner.

* 15. April 1832 in Weidensahl, † 9. Januar 1908 in Mechtshausen

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Motivation	1
1.2	Stand der Forschung	3
1.3	Zielsetzung und Aufbau der Arbeit	5
2	Theoretische Grundlagen	7
2.1	Turbulente Strömungen	7
2.1.1	Bilanzgleichung	7
2.1.2	Turbulenz	10
2.2	Verbrennung	15
2.2.1	Reaktionskinetik	15
2.2.2	Zündprozesse	18
3	Selbstzündungsprüfstand	29
3.1	Designkriterien	29
3.2	Prüfstands Aufbau	30
3.2.1	Mikrowellen-Plasmabrenner	30
3.2.2	Strömungskonditionierung	33
3.2.3	Brennerkopf	34
3.2.4	Prüfstandsregelung und -infrastruktur	38
3.3	Betriebsbereich	40
3.4	Randbedingungen	41
3.4.1	Co-Flow-Temperatur	41
3.4.2	Jet-Temperatur	44
3.4.3	Stickoxide	46
3.4.4	Hydroxyl-Radikal	50
4	Messtechnik	51
4.1	Particle Image Velocimetry	51
4.1.1	Partikel	51
4.1.2	Abbildung	53
4.1.3	Vektorkalkulation	55
4.1.4	Stereoskopisches PIV	56
4.2	Laserinduzierte Fluoreszenz	57
4.2.1	Molekülaufbau	58
4.2.2	Fluoreszenzsignal	68
4.2.3	Laserinduzierte Fluoreszenz am Hydroxyl-Radikal	69
4.2.4	Laserinduzierte Fluoreszenz an Formaldehyd	71

4.3	Chemilumineszenz	76
5	Globale Flammenstruktur	79
5.1	Experimenteller Aufbau	79
5.1.1	Betriebspunkte	79
5.1.2	Zeitaufgelöste Chemilumineszenz	82
5.1.3	Experimentdurchführung	83
5.2	Auswertung und Bestimmung der Abhebehöhen	83
5.3	Ergebnisse und Diskussion	85
5.3.1	Flammenstruktur und zeitliche Entwicklung der Abhebehöhe	85
5.3.2	Einflussfaktoren auf die Abhebehöhe	88
5.4	Bewertung und Ausblick	93
6	Entstehung und zeitliche Entwicklung von Zündkernen	95
6.1	Experimenteller Aufbau	95
6.1.1	Allgemein	95
6.1.2	Zeitaufgelöstes Stereoskopisches PIV	96
6.1.3	Zeitaufgelöstes OH-PLIF	99
6.1.4	Zeitaufgelöstes CH ₂ O-PLIF	108
6.1.5	Zeitaufgelöste Chemilumineszenz	113
6.1.6	Experimentdurchführung	114
6.2	Zündkernentstehung	120
6.2.1	Datenauswertung und Struktur der OH- und CH ₂ O-PLIF-Aufnahmen	120
6.2.2	Frühe Zündphase	126
6.2.3	Flammenstabilisierung	132
6.2.4	Bewertung und Ausblick	139
6.3	Zündkernentwicklung	141
6.3.1	Datenauswertung	141
6.3.2	Zündkernwachstum	144
6.3.3	Selbstzündung im turbulenten Strömungsfeld	147
6.3.4	Bewertung und Ausblick	153
7	Zusammenfassung und Ausblick	155
A	Anhang - Betriebspunkte	159
B	Anhang - Globale Flammenstruktur	161
C	Anhang - Zündkernentstehung/-entwicklung	163
	Literaturverzeichnis	167

Nomenklatur

Die Einheiten sind als Produkt der SI-Einheiten m, kg, s, A, K, mol, cd angegeben, wobei $N = \text{kg m s}^{-2}$ und $J = \text{N m}$ substituiert sind. Ein Querstrich (–) in der Spalte Einheit steht für eine dimensionslose Einheit. Eine Variable, deren Einheit nicht eindeutig festgelegt ist, trägt die Einheit a. u..

Eine doppelte Belegung der Variablen konnte nicht immer vermieden werden, allerdings ergibt sich aus dem Kontext eine eindeutige Zuordnung. Für die Indizes i, j, k gilt die Einsteinsche Summenkonvention.

Große lateinische Buchstaben		Einheit
A	Fläche	m^2
	Präexponentieller Faktor des Arrhenius-Ansatzes	a. u.
A'	Präexp. temperaturabhängiger Faktor des Arrhenius-Ansatzes	a. u.
A_{ji}	Einsteinkoeffizient für die spontane Emission	s^{-1}
$\mathcal{A}$	Anregungsterm	a. u.
B_{ij}	Einsteinkoeffizient für die stimulierte Absorption	s^{-1}
D	Diffusionskoeffizient	$\text{m}^2 \text{s}^{-1}$
D_m	Diffusionskoeffizient der Spezies m	$\text{m}^2 \text{s}^{-1}$
$\mathcal{D}$	Detektionsterm	a. u.
E	Energie	J
$E_{\text{e/r/v}}$	Elektronische/rotatorische/vibratorische Energie	J
$E_{\text{p,h/M}}$	Harmonisches-/Morse-Potential	J
E_{A}	Aktivierungsenergie	J
$\mathcal{E}$	Emissionsterm	a. u.
F	Akkumulierte Wahrscheinlichkeit	–
F_{f}	Detektierter Spektralanteil der Fluoreszenz	–
G	Wahrscheinlichkeit	–
G_{σ}	Gauß'scher Kern	–
I	Intensität	a. u.
	Bildmatrix	–
J	Rotationsquantenzahlen eines Moleküls	–
$\vec{J}$	Gesamtdrehimpuls eines Mehrelektronensystems	N s
$\mathcal{L}$	Charakteristische Längenskala	m
$\vec{L}$	Gesamtbahndrehimpuls eines Mehrelektronensystems	N s
M	Maskierungsmatrix	–

M	Modulation	—
	Richtungsquantenzahl eines Moleküls	—
M_0	Abbildungsmaßstab	—
M_m	Molmasse der Spezies m	kg mol^{-1}
$\overline{M}$	Mittlere Molmasse eines Gasgemisches	kg mol^{-1}
N	Skalare Dissipationsrate	s^{-1}
	Teilchenzahldichte	m^{-3}
N_A	Anzahl der Atome	—
N_R	Anzahl der Reaktionen	—
N_S	Anzahl der Spezies	—
N_T	Anzahl der Teilstücke	—
P	Leistung	J s^{-1}
P_j	Dissoziationsterm in Zustand j	a. u.
$\mathcal{P}$	Produktionsterm	a. u.
Q	Konfigurationskoordinate	a. u.
	Wirbelkriterium (Q-Kriterium)	s^{-2}
Q_{norm}	Wirbelkriterium (normiertes Q-Kriterium)	—
Q_j	Quenching-Konstante in Zustand j	s^{-1}
Q_x	x-Prozent-Quantil	—
R_{ij}	Autokovarianz	—
R_s	Individuelle Gaskonstante	$\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$
$\mathcal{R}$	Allgemeine Gaskonstante, $\mathcal{R} = 8,314 \text{ J mol}^{-1} \text{K}^{-1}$	$\text{J mol}^{-1} \text{K}^{-1}$
S	Signalintensität	a. u.
S_{∇}	Gradientenschwellwert der Flussfunktion g	—
S_{ij}	Deformationsgeschwindigkeitstensor	s^{-1}
$\vec{S}$	Gesamtspin eines Mehrelektronensystems	N s
T	Temperatur	K
T^*	Dimensionslose Temperatur	—
$T_{\text{Co-Flow,ctrl}}$	Co-Flow-Kontrolltemperatur	K
T_{ign}	Zündtemperatur	K
T_{TZ}	Temperatur der thermischen Zersetzung	K
$\mathcal{T}$	Transportterm	a. u.
U	Wirbelkriterium (U-Kriterium)	s^{-2}
$\mathcal{U}$	Charakteristische Geschwindigkeit	m s^{-1}
V	Volumen	m^3
$V_{m,i}$	Diffusionsgeschwindigkeit der Spezies m in Richtung i	m s^{-1}
X_i	Pixelbasierte Koordinate des Kamerachips (X, Y)	m
X_m	Stoffmengenanteil der Spezies m	—
Y_m	Massenanteil der Spezies m	—
Z	Beliebige skalare Größe	a. u.

Kleine lateinische Buchstaben		Einheit
c_m	Molare Konzentration der Spezies m	mol m^{-3}
c_m	Kennzahl der Monotonie einer Punktwolke	—
$c_{\Delta\text{OH}}$	Kennzahl der Änderung des OH-Signals	—
$c_{\Delta\text{A}}$	Kennzahl der relativen Wachstumsrate	s^{-1}
c_p	Spezifische Wärmekapazität bei konstantem Druck	$\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$
d	Durchmesser	m
f	Frequenz	s^{-1}
f_B	Boltzmann-Faktor	—
$f_{\#}$	Blendenzahl	—
g	Flussfunktion	—
h	Spezifische Enthalpie	J kg^{-1}
	Planck'sches Wirkungsquantum, $h = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ J s}$	J s
k	Geschwindigkeitskoeffizient einer chemischen Reaktion	a. u.
	Ortsfrequenz	m^{-1}
	Turbulente kinetische Energie	$\text{m}^2 \text{s}^2$
k_i	Volumenkräfte in Richtung i	m s^2
l	Länge	m
	Drehimpulsquantenzahl	—
l_0	Integrales Längenmaß	m
l_{hyd}	Hydraulischer Einlauf	m
l_{η}	Kolmogorov-Länge	m
m_l	Magnetische Quantenzahl	—
m_s	Magnetische Spinquantenzahl	—
$\dot{m}$	Massenstrom	kg s^{-1}
$\dot{m}_{\text{ax}}$	Axialmassenstrom	kg s^{-1}
$\dot{m}_{\text{tang}}$	Tangentialmassenstrom	kg s^{-1}
$\dot{m}_{\text{seed}}$	Seedingmassenstrom	kg s^{-1}
n	Hauptquantenzahl	—
p	Druck	N m^{-2}
$q_{\text{ab/zü}}$	Volumetrisch abgeführte/zugeführte Wärmestromdichte	$\text{J m}^{-3} \text{s}^{-1}$
r	Radius	m
r^*	Dimensionsloser Radius	—
r_l	Chemische Reaktionsrate der Elementarreaktion l	$\text{mol m}^{-3} \text{s}^{-1}$
r_s	Rangkorrelationskoeffizient nach Spearman	—
s	Spinquantenzahl	—
s_{ij}	Fluktuationen des Geschwindigkeitsgradiententensors	s^{-1}
s_l	Laminare Flammgeschwindigkeit	m s^{-1}
t	Zeit	s
t_{exp}	Belichtungszeit	s
u_i	Geschwindigkeit (u, v, w)	m s^{-1}
v_i	i -te Molekül-Normalschwingung	—

x_i	Kartesische Koordinate (x, y, z)	m
x_i^*	Dimensionslose kartesische Koordinate (x^*, y^*, z^*)	—

Große griechische Buchstaben	Einheit
------------------------------	---------

Γ	Spektrales Überlappungsintegral	—
Ω	Raumwinkel	°
Ω_{ij}	Rotationsgeschwindigkeitstensor	s ⁻¹
Φ	Beliebige physikalische Größe	a. u.
Ψ	Wellenfunktion	a. u.
Ψ_n	Eigenfunktion der Wellenfunktion	a. u.

Kleine griechische Buchstaben	Einheit
-------------------------------	---------

α, β, γ	Winkel	°
$\delta(z)$	Schärfentiefe	m
δ_{ij}	Kronecker-Symbol	—
ϵ_{ijk}	Permutationssymbol	—
ϵ	Transmissionseffizienz der Photonen	—
ε	Dissipationsterm	a. u.
η	Dynamische Viskosität	kg m ⁻¹ s ⁻¹
	Umwandlungseffizienz	—
λ	Mittlere freie Weglänge	m
	Wellenlänge	m
	Wärmeleitfähigkeit	J m ⁻¹ s ⁻¹ K ⁻¹
λ^*	Erste Lamé-Konstante	N m ⁻²
ν	Kinematische Viskosität	m ² s ⁻¹
	Frequenz der elektromagnetischen Strahlung	s ⁻¹
	Vibrationsquantenzahl eines Moleküls	—
ν'_m	Stöchiometrischer Koeffizient der Reaktantenspezies m	—
ν'_i	Vibratorischer Endzustand der i -ten Molekülschwingung	—
ν''_m	Stöchiometrischer Koeffizient der Produktspezies m	—
ν''_i	Vibratorischer Ausgangszustand der i -ten Molekülschwingung	—
ρ	Dichte	kg m ⁻³
τ	Zeitspanne	s
τ_0	Integrales Zeitmaß	s
τ_{ij}	Spannungstensor der Oberflächenkräfte	kg m ⁻¹ s ⁻¹
τ_{ign}	Zündverzugszeit	s
ω_i	Wirbelstärke um die Achse i	s ⁻¹
$\dot{\omega}_m$	Chemischer Quellterm der Spezies m	kg m ⁻³ s ⁻¹
ξ	Mischungsbruch	—
ξ_{mr}	Reaktivster Mischungsbruch	—

Tiefgestellte Indizes

·a	Außen
·b	Rückreaktion
·Co–Flow	Co-Flow
·eq	Gleichgewicht
·f	Vorwärtsreaktion
·F	Fluid
·i	Innen
· i,j,k,l,m	Indexwert (ganzzahlig)
·in	Einlass
·Jet	Brennstoffjet
·max	Maximum
·min	Minimum
·N	Normbedingungen, $p_N = 1,02325$ bar, $T_N = 273,15$ K
·out	Auslass
·P	Partikel
·r	Radius
·raw	Rohbild
·rec	Aufnahme
·ref	Referenz
·thresh	Schwellwert

Hochgestellte Indizes

·'	Ausgangszustand
·''	Endzustand
·*	Angeregter Zustand eines Moleküls

Operatoren und Symbole

*	Faltung
∇	Nabla-Operator
$\Delta\phi$	Differenz zwischen zwei Werten der Größe ϕ
$\bar{\phi}$	Mittelwert der Größe ϕ
ϕ'	Fluktuation der Größe ϕ um den Mittelwert $\bar{\phi}$
$\sigma(\phi)$	Standardabweichung der gemittelten Größe ϕ
$\sigma_{\text{rel},\phi}$	Relative Standardabweichung der Größe ϕ
$\sigma_{\text{R2R},\phi}$	Run-to-Run-Stabilität der Größe ϕ
$\dot{\phi}$	Zeitliche Ableitung der Größe ϕ
$\hat{H}$	Hamiltonoperator
$\text{rg}(\phi)$	Rang der Zahl ϕ innerhalb eines Datensatzes

$ \phi $	Betrag der Zahl ϕ
$ \phi _F$	Frobenius-Norm einer Matrix ϕ

Dimensionslose Kennzahlen

Kn	Knudsen-Zahl
Ma	Mach-Zahl
Re	Reynolds-Zahl
Re_t	turbulente Reynolds-Zahl

Abkürzungen

a. u.	Arbitrary unit (dt.: Beliebige Einheit)
CL	Chemilumineszenz
CMOS	Complementary Metal–Oxide–Semiconductor
DNS	Direkte Numerische Simulation
FPGA	Field Programmable Gate Array
IRO	Intensified Relay Optic (dt: Linsengekoppelter Bildverstärker)
LDA	Laser-Doppler-Anemometrie
LIF	Laserinduzierte Fluoreszenz
LOH	Lift-off height (dt.: Abhebehöhe)
Lp	Linienpaare
MAK	Maximale Arbeitsplatz-Konzentration
MFC	Mass flow controller (dt.: Massenflussregler)
MWPB	Mikrowellen-Plasmabrenner
PIV	Particle Image Velocimetry
PLIF	Planare Laserinduzierte Fluoreszenz
px	Pixel
SPIV	Stereoskopische Particle Image Velocimetry

Kapitel 1

Einleitung

Die vorliegende Arbeit beschäftigt sich mit der experimentellen Untersuchung von Selbstzündungsphänomenen in einer turbulenten nicht vorgemischten Strömungskonfiguration, um einen detaillierten Einblick in die Prozesse zu erlangen, die zur Selbstentzündung des Gemisches führen. In diesem ersten Abschnitt folgt zunächst die Motivation für diese Arbeit, gefolgt von einer Zusammenfassung des Stands der Forschung zu diesem Thema. Den Abschluss bildet ein Abschnitt über die Zielsetzung und den Aufbau der weiteren Arbeit.

1.1 Motivation

Die Flamme eines Feuers übt seit jeher eine bestimmte Faszination auf Menschen aus. Die durch sie freigesetzte Energie in Form von Wärme und Licht macht sich die Menschheit als einzige Spezies dieses Planeten vermutlich seit mehr als einer Millionen Jahren [11] daher aktiv zunutze. Die breite Anwendungspalette der so gewonnenen Energie reicht vom anfänglichen einfachen Beleuchten einer dunklen Höhle über das Garen von Nahrungsmitteln bis hin zu heutigen Anwendungen, etwa in Verbrennungsmotoren und Flugtriebwerken zur Fortbewegung oder der Nutzung in Kraftwerken zur Stromerzeugung. Die Beherrschung der hierbei ablaufenden chemischen Reaktion zwischen Brennstoff und Oxidator ist somit ein wesentlicher Bestandteil der Menschheitsentwicklung bis in die heutige Zeit hinein.

Neben diesen positiven Aspekten der Energiegewinnung durch Verbrennung besitzt die intensive Nutzung fossiler Energieträger auch eine negative Kehrseite. So ist heutzutage in weiten Teilen der Wissenschaft allgemein anerkannt, dass die Freisetzung von Abgasen durch Verbrennungsprozesse, wie etwa Kohlendioxid (CO_2), einen maßgeblichen Anteil an der Verstärkung des Treibhauseffekts der Erde besitzt [2]. Die Folgen des verstärkten Treibhauseffekts sind etwa die globale Erderwärmung und die Versauerung der Meere. Je nach Simulationsszenario des Intergovernmental Panel on Climate Change (IPCC) wird eine Erwärmung der mittleren Oberflächentemperatur der Erde bis zum Ende des 21. Jahrhunderts zwischen 1,5 und 4,6 °C erwartet [165]. Die konservativen Schätzungen belaufen sich hierbei auf Szenarien, bei denen eine Stagnation des CO_2 -Ausstoßes eintritt. Unter der Berücksichtigung des anhaltenden Wachstums der Industrienationen und Schwellenländern wie den BRICS-Staaten¹, deren Wachstumsrate in Bezug auf den CO_2 -

¹Die Abkürzung BRICS steht für den Zusammenschluss der Schwellenländer Brasilien, Russland, Indien, China und Südafrika.

Ausstoß diejenigen der Industrienationen noch übersteigt, ist eine mittel- bis langfristige Stagnation oder gar Abnahme des globalen Ausstoßes an Treibhausgasen wenig realistisch. Die weitreichenden Auswirkungen der globalen Erwärmung, wie häufigere Wetterextreme, Verschiebung von Klimazonen oder steigende Meeresspiegel, sind jedoch durch die Rückkopplung mit teils unzureichend erforschten Phänomenen, wie dem Auftauen von Permafrostböden oder dem Schmelzen der Polkappen, nur schwer zu prognostizieren. Eine Zunahme von lokalen wie globalen Krisen, die hierdurch verursacht werden, sind jedoch wahrscheinlich.

Die globale Primärenergieproduktion beruht nach Angaben des World Energy Council (WEC) aus dem Jahr 2013 zu etwa 82 % auf der Verbrennung von fossilen Energieträgern, wie Kohle, Öl oder Erdgas. Da diese Rohstoffe nur in endlicher Menge auf der Erde vorhanden sind und ihre Gewinnung immer aufwendiger und damit kostspieliger wird, ist ein nachsichtiger Verbrauch mit ihnen unabdingbar. Eine Effizienzsteigerung der bestehenden Verbrennungssysteme wird daher aus ökologischen und ökonomischen Gründen mit Nachdruck seit vielen Jahren in Forschung und Wirtschaft gleichermaßen verfolgt. Wurde die Weiterentwicklung von Verbrennungssystemen wie der Dampfmaschine in der Zeit der industriellen Revolution in der Mitte des 18. Jahrhunderts oft nach den Prinzip von Versuch und Irrtum vorangetrieben, so wandelte sie sich im Laufe von mehr als zwei Jahrhunderten zu einem Forschungsgebiet, dessen Fokus auf einem tief greifenden Verständnis der Prozesse und vorherrschenden Phänomenen während der Verbrennung liegt. Vor allem die Entwicklung nicht invasiver optischer Messtechniken in den vergangenen Dekaden bietet ein potentes Instrument, um diese Prozesse zeitlich und räumlich hochauflösend zu untersuchen. Durch diese Analysen wird es möglich, neben Untersuchungen an realitätsnahen technischen Systemen auch generische Testfälle zu erforschen, die im Anschluss daran der Validierung von numerischer Simulationssoftware dienen. Gerade das Zusammenspiel von Experimenten, Simulationen und Flammentheorie bilden in ihrer Kombination die Werkzeuge, die eine Steigerung der Effizienz bei gleichzeitiger Reduktion der Schadstoffemissionen von Verbrennungssystemen in Zukunft erlauben.

Die Interaktion der chemischen Verbrennungsreaktion mit dem umgebenden Strömungsfeld führt zu einer mannigfaltigen Ausprägung von unterschiedlichen Flammentypen und Regimen, in denen sich die Energiewandlungsprozesse abspielen. Der Fokus vieler Untersuchungen liegt hier auf der Analyse von vollständig ausgebildeten Flammen. Viele technische Prozesse beruhen jedoch auf dem Wechsel von unverbrannten Luft-Brennstoff-Gemischen zu verbranntem Abgas, die stets über einen Zündprozess initiiert werden. Die Zündung kann hierbei durch einen Zündfunken, wie beim Ottomotor oder dem Wiedierzünden eines Flugtriebwerks (engl.: altitude relight), oder durch Selbstzündung, wie etwa bei Dieselmotoren oder in Motoren nach dem Konzept der homogenen Kompressionszündung (engl.: homogeneous charged compression ignition, HCCI), erfolgen. Neben den genannten technischen Systemen, in denen die Zündung ein bewusst eingeleiteter Vorgang ist, besitzen Selbstzündungsvorgänge auch als ungewollt auftretende Phänomene z. B. als Klopfen im Ottomotor, in mager vorgemischten Gasturbinen (engl.: lean premixed preavaporized, LPP) und in sicherheitstechnischen Fragestellungen, eine hohe Relevanz.

Selbstzündungsprozesse in vorgemischten ruhenden Systemen sind hierbei seit vielen Jahrzehnten bereits sehr intensiv untersucht und in der Literatur eingehend beschrieben

[67, 95, 105, 182]. Treffen hingegen kalter Brennstoff und Oxidator hoher Temperatur erst in einem strömenden System aufeinander, so werden die eintretenden chemischen Reaktionen, die zur Zündung führen, massiv durch die Mischungsprozesse beeinflusst, gerade wenn die Strömung, wie in technischen Umgebungen üblich, turbulent ist. So führt erst der turbulente konvektive Transport der Strömung in Verbindung mit der anschließenden Diffusion zu einer schnellen Durchmischung von Brennstoff und Oxidator und erlaubt dadurch auf der einen Seite die Bildung eines zündfähigen Gemisches. Auf der anderen Seite hingegen werden durch die Strömung lokal gebildete Wärme und Radikale abtransportiert und verteilt, was die Zündung verzögert oder gar verhindert. Bisherige Untersuchungen dieser Vorgänge beziehen sich vor allem auf die Erhebung statistisch unabhängiger Daten. Eine Untersuchung, die die raumzeitliche Dynamik von Selbstzündungsphänomenen analysiert und so die zeitliche Entwicklung der stark gekoppelten Prozesse erfasst, sind bisher gerade im experimentellen Bereich nur wenig vorhanden.

1.2 Stand der Forschung

Die Analyse von Selbstzündungsprozessen nicht vorgemischter Strömungssysteme basiert in der Regel auf der Untersuchung von kalten Brennstoffen, die in ein heißes Oxidatormedium eintreten, sich im Anschluss daran mit diesem durchmischen und letztendlich unter den passenden Randbedingungen zünden. Die Strömungskonfiguration nicht vorgemischter Systeme, in der Brennstoff und Oxidator aufeinandertreffen, lässt sich dabei in Jetströmungen, Gegenstromkonfigurationen und Scherströmungen weiter unterteilen. Da Scherströmungen bisher nicht Gegenstand von experimentellen oder numerischen Selbstzündungsuntersuchungen waren, werden daher nachfolgend nur die beiden erstgenannten Konfigurationen näher beleuchtet.

Bei der Gegenstromkonfiguration strömen ein heißes Gemisch aus Sauerstoff, Stickstoff sowie Abgasen einer vorgeschalteten mageren Verbrennung gegen ein Strom aus einem vorgemischten Brennstoff/Luft-Gemisch. In der Stagnationsebene dieser beiden Ströme bildet sich eine Flamme aus, deren Verlöschgrenzen sich in dieser vorgeheizten Konfiguration im Vergleich zu kalten Gegenstromkonfigurationen in hohem Maße erweitern lassen und bereits Gegenstand experimenteller Analysen waren [121]. Jedoch eignet sich diese Art der Strömungskonfiguration nur schwer für den Vergleich mit numerischen Modellen, da sich die turbulente Strömung in der Stagnationsebene nicht durch eine voll entwickelte Turbulenz beschreiben lässt, die eine grundlegende Annahme vieler numerischer Modelle darstellt.

Im Gegensatz zur Gegenstromflamme stellen die Jetströmungen diejenige Konfiguration dar, welche mit Abstand am detailliertesten durch experimentelle sowie numerische Untersuchungen analysiert sind. Die bestehenden Prüfstände der experimentellen Arbeiten auf diesem Gebiet lassen sich hierbei in zwei grundlegend verschiedenen Konzepte unterteilen.

Das erste Konzept, das auf die Arbeitsgruppe um B. W. Dibble [33] aus Berkley zurückgeht und baugleich auch von R. Masri in Sydney untersucht wird, ist eine Weiterentwicklung des Brenners von Chen et al. [35]. Es basiert auf einer mager vorgemischten Wasserstoff- oder Methan-Flamme, die durch eine Vielzahl an gleichmäßig verteilten kleinen Flam-

men ein heißes Abgas/Luft-Gemisch erzeugt. In dieses heiße Gemisch wird stromab der mageren Vorverbrennung ein Jet aus Brennstoff geleitet und damit die sogenannte JVC-Konfiguration (engl.: jet in vitiated co-flow) gebildet, die der mager vorgemischten Konfiguration einer LPP-Gasturbine ähnelt. Weitere Abwandlungen dieses Konzepts werden in den Arbeitsgruppen um B. B. Dally in Adelaide unter dem Begriff Jet-in-Hot-Coflow (JHC) [42] und von D. J. E. M. Roekarts in Delft als Delft-Jet-in-Hot-Coflow (DJHC) [131] untersucht. Das Konzept des JHC kann hierbei in Bezug zu den anderen als ein Brenner im MILD-Regime (engl.: moderate or intense low oxygen dilution) gesehen werden. In diesem Brennerkonzept, das eine NO_x -Reduktion durch die Verbrennung bei niedrigen Temperaturen verspricht, beginnt die Verbrennung in einer räumlich stark ausgedehnten Oxidationszone, in der Brennstoff, Oxidator und die Verbrennungsprodukte zeitgleich vorliegen. Der Übergang in die eigentliche Flamme geschieht hier graduell ohne erkennbare Grenze der heißen Flammenzone.

Das zweite etablierte Konzept besteht aus einem elektrisch vorgeheizten Luftstrom, in den ein Brennstoffjet eingeleitet wird. Die Vorteile, die sich durch dieses von der Arbeitsgruppe um E. Mastorakos aus Cambridge entwickelte Konzept [116] ergeben, sind die höheren erreichbaren Strömungsgeschwindigkeiten sowie die durch austauschbare Gitter variierbaren Turbulenzgrade der Strömung. Des Weiteren sind die chemischen Randbedingungen hier klarer definiert, da sich in der Oxidatorströmung keine Produkte des Abgases oder Radikale unbekannter Konzentration befinden, wie es im zuvor beschriebenen Konzept mit vorgeschalteter Verbrennung der Fall ist. Nachteilig spiegeln sich in diesem Konzept die hohe thermische Masse des Prüfstandes wieder, die zu langen Aufheiz- und Abkühlzeiten führen und nur geringe Temperaturtransienten zulassen, was die Handhabbarkeit des Prüfstands im Laborbetrieb erschwert. Auch liegen die maximal erreichbaren Temperaturen hier mit um die 1050 K unterhalb derer der JVC-Konzepte, bei denen die maximal auftretende Temperatur in der Oxidatorströmung von 1045 K [33] beim JVC bis zu etwa 1540 K [132] beim DJHC reicht. Eine weitere Arbeitsgruppe, die Untersuchungen an einem Brenner mit elektrischer Vorheizung vornimmt, ist diejenige um S. H. Chung, der erst in Seoul, später in Thuwal daran arbeitet.

In mehreren experimentellen Studien sind bereits punktweise Messungen der Geschwindigkeit [190] durch Laser-Doppler-Anemometrie (LDA) sowie die Vermessung des thermokinetischen Zustandes durch kombinierte Raman/Rayleigh-Spektroskopie durch Cabra et al. [32, 33] erfolgt. Die experimentellen Untersuchungen von Gordon et al. [72] mit kombinativer planarer Rayleigh-Spektroskopie, OH-LIF sowie CH_2O -LIF wie auch spätere numerische Arbeiten [98, 191], lieferten die Erkenntnis, dass sich die Stabilisierung von etablierten abgehobenen Flammen, wie ebenfalls bereits durch Cabra et al. [33] vermutet, vor allem durch Selbstzündungsprozesse stattfindet, die durch Vorprodukte der Niedertemperaturchemie [192] induziert werden. Diese relevanten Vorprodukte sind bei den Kohlenwasserstoffflammen vor allem CH_2O [72, 73, 94] und bei Wasserstoffflammen HO_2 [98, 191]. Ihr Auftreten stromauf der etablierten abgehobenen Flamme bedeutet ein deutliches Zeichen für den Ablauf von Selbstzündungsprozessen. Da die chemischen Reaktionen, die zur Bildung dieser Vorprodukte führen, nach dem Arrhenius-Ansatz stark nicht linear mit der Temperatur skalieren, sind auch die Abhebehöhen dieser Flammen, wie in mehreren Arbeiten numerisch und experimentell für Wasserstoff [74, 116] sowie

verschiedene Kohlenwasserstoffe [32, 36–38, 43, 99, 132, 133] beschrieben, eine stark nicht lineare Funktion der Oxidatortemperatur.

Die Bedeutung der skalaren Dissipationsrate auf die Selbstzündung wurde anfangs zunächst nur numerisch [89, 119, 120] und später auch experimentell [117] näher untersucht. Die Studien zeigen einstimmig, dass die Selbstzündung vornehmlich an Orten eintritt, an denen die skalare Dissipationsrate gering ist. Eine weitere Erkenntnis, die sich vor allem aus den zuvor genannten sowie weiteren [16, 49, 86, 98, 171, 191] numerischen Untersuchungen durch Direkte Numerische Simulation (DNS) ergibt, ist diejenige, dass die Selbstzündung mit der größten Wahrscheinlichkeit an einem wohldefinierten Mischungsbruch auftritt, der mit dem englischen Begriff *most reactive mixture fraction* bezeichnet wird, was ins Deutsche etwa mit reaktivster Mischungsbruch oder Mischungsbruch höchster chemischer Reaktivität zu übersetzen ist. Bei den hier untersuchten Konfigurationen einer heißen Oxidatorströmung und eines kalten Brennstoffs liegt der Wert des Mischungsbruchs stets im Mageren.

Der Einfluss der Turbulenz auf die Selbstzündung wurde bisher vor allem durch DNS-Analysen [86, 109] untersucht. Bedingt durch die kostenintensive Rechenzeit, beruht die statistische Aussage hierbei jedoch meist auf einigen wenigen Einzelrechnungen, die die chemischen und turbulenten Zeitskalen zueinander parametrisch variieren. Auf die Erkenntnisse dieser Untersuchungen wird aus Gründen des Umfangs in Abschnitt 2.2.2.3 in der Diskussion über die Zündverzugszeit näher eingegangen. Experimentelle Analysen, die detailliert die Interaktion der chemischen Prozesse mit der turbulenten Strömung untersuchen, fehlen aufgrund der begrenzten Betriebsbereiche der bestehenden Prüfstandskonzepte, die eine Oxidatorströmung mit hoher Temperatur und gleichzeitig hohen Strömungsgeschwindigkeiten bei hohen Turbulenzgraden nicht darstellen können.

1.3 Zielsetzung und Aufbau der Arbeit

Das vorrangige Ziel dieser Dissertation ist es, Selbstzündungsprozesse in turbulenten Strömungen unter definierten Randbedingungen detailliert zu untersuchen und dabei über deren Beschreibung und die Analyse ihrer Einflussfaktoren ein tiefer gehendes Verständnis dieser Prozesse zu erlangen. Um dies zu bewerkstelligen, wurde zu Beginn der Arbeit eine umfassende Charakterisierung der Randbedingungen eines vollkommen neuartigen und weltweit einmaligen Prüfstandkonzepts durchgeführt, das im Vorfeld dieser Arbeit am Fachgebiet Reaktive Strömungen und Messtechnik (RSM) aufgebaut wurde. Neben der Prüfstandcharakterisierung erfolgt in dieser Arbeit eine erste Untersuchung der Flammenstruktur, die sich in den verschiedenen Bereichen des ausgedehnten Betriebsbereichs des Prüfstands einstellt. Weiterhin wird die Interaktion von chemischen Prozessen mit dem umgebenden turbulenten Strömungsfeld im Zuge der Selbstzündungsprozesse durch die Kombination mehrerer simultaner und zeitaufgelöster Skalarfeldmessungen bzw. kombinativer Strömungs- und Skalarfeldmessungen näher untersucht. Neben der Betrachtung von einzelnen Zündereignissen, die einen guten ersten Einblick in die Natur der Selbstzündungsprozesse liefern, liegt bei diesen Analysen das Augenmerk auch auf der statistischen Beschreibung der Zündereignisse. Die so gewonnenen Daten können in Zukunft in Ver-

bindung mit den gut dokumentierten Randbedingungen des Prüfstands als Grundlage für die Validierung von numerischen Simulationen dienen.

Der Aufbau der vorliegenden Arbeit gliedert sich in insgesamt sieben Kapitel. An das aktuelle Kapitel der Einleitung schließt sich das zweite Kapitel über die theoretischen Grundlagen an. Es gibt zum einen eine kurze Einführung in die Thematik der turbulenten Strömung, und zum anderen arbeitet es die Grundlagen von Zündprozessen auf, wobei der Fokus dieses Kapitels auf der Betrachtung von Selbstzündungsprozessen in turbulenten nicht vorgemischten Strömungen liegt. In Kapitel 3 erfolgt die detaillierte Beschreibung von Designkriterien, Aufbau, Betriebsbereich und Randbedingungen des am RSM entwickelten Selbstzündungsprüfstandes. Die Grundlagen der Messtechniken, die zur Analyse der Selbstzündungsprozesse in Kapitel 5 und 6 angewendet werden, erfolgt in Kapitel 4. Das Hauptaugenmerk dieses Abschnitts liegt neben der einführenden Betrachtung der Particle Image Velocimetry (PIV) und der Chemilumineszenzdetektion auf der tiefer gehenden Beschreibung der Laserinduzierten Fluoreszenz (LIF), insbesondere von Formaldehyd. Die Analyse der globalen Flammenstruktur erfolgt in Kapitel 5. Sie zeigt die globale räumliche und zeitliche Struktur der abgehobenen Flamme sowie den Einfluss verschiedener Prüfstandsparameter auf ihre Abhebehöhe. Das Kapitel 6 befasst sich mit der Analyse der Entstehung und zeitlichen Entwicklung von Selbstzündungskernen durch die Anwendung kombinativer Skalar- sowie Strömungsfeldmessungen. Den Abschluss der Arbeit bildet Kapitel 7, in dem eine Zusammenfassung der Arbeit sowie ein Ausblick auf weiterführende Untersuchungen erfolgt.

Kapitel 2

Theoretische Grundlagen

Die in dieser Arbeit untersuchten Verbrennungsphänomene entstehen durch einen nicht vorgeheizten Brennstoffjet, der sich mit einer erhitzten Oxidatorströmung turbulent durchmischt. Während der Durchmischung von kaltem Brennstoff und heißem Oxidator kommt es zur Bildung von chemischen Radikalen, die im Anschluss unter günstigen Bedingungen in sogenannten Zündkernen zur Zündung des Brennstoff-Oxidator-Gemisches führen. Im Anschluss an die Zündung interagieren diese Zündkerne in vielfältiger Weise mit der umgebenden turbulenten Strömung, welche die chemischen Prozesse beeinflusst.

Im folgenden Kapitel wird zum besseren Verständnis der vorherrschenden Phänomene ein Überblick über die Grundlagen der turbulenten Strömungen und der Verbrennung gegeben.

2.1 Turbulente Strömungen

Der nachfolgende Abschnitt über die Grundlagen turbulenter Strömungen beginnt mit einer beschreibenden Einführung der Bilanzgleichungen der Strömungsmechanik, auf die eine Erläuterung des Turbulenzbegriffs folgt.

2.1.1 Bilanzgleichung

In der Strömungsmechanik wird die Bewegung und der energetische Zustand von Fluiden mithilfe von Bilanzgleichungen allumfassend beschrieben. In dieser Betrachtungsweise, auch Kontinuumsmechanik genannt, wird ein infinitesimal kleines Volumenelement als Einheit betrachtet, obwohl es aus einer diskreten Anzahl an Molekülen besteht. Die Rechtfertigung dieser Annahme wird bei einer Analyse der Knudsen-Zahl (Kn) deutlich:

$$Kn = \frac{\lambda}{\mathcal{L}}. \quad (2.1)$$

Die Knudsen-Zahl beschreibt das Verhältnis von mittlerer freier Weglänge λ eines Moleküls zur charakteristischen Längenskala $\mathcal{L}$ der Strömung. Unter Umgebungsdruck beträgt die Größenordnung von λ ca. 10^{-7} m. Die zu erwartenden Größenordnung von $\mathcal{L}$ liegt im Bereich von 10^{-3} m. Somit ist $Kn \ll 1$, was nach Pope [138] die Annahme der Kontinuumsmechanik rechtfertigt. Im nachfolgenden Abschnitt werden daher die Gleichungen

der Kontinuumsmechanik für Massenerhaltung, Speziestransport, Impulserhaltung und den thermodynamischen Zustand näher erläutert.

Massenerhaltung

Die Massenerhaltung besagt, dass die zeitliche Änderung der Dichte ρ eines Volumenelements gleich dem konvektiven Fluss über die Grenzflächen, hervorgerufen durch die anliegenden Geschwindigkeitskomponenten u_j , entspricht. Die Bilanzgleichung der Massenerhaltung, auch Kontinuitätsgleichung genannt, besitzt daher keine Terme für Quellen oder Senken und lautet in ihrer differentiellen Form:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j) = 0. \quad (2.2)$$

Speziestransport

Eine chemische Reaktion bedeutet die Umwandlung einer, jedoch meist mehrerer (N_S) Spezies untereinander, welche aus einer begrenzten Anzahl an Elementen bestehen. Analog zur Erhaltung der Masse gilt hierbei ebenfalls die Erhaltung der chemischen Elemente, da sie lediglich untereinander umgewandelt, jedoch nicht gebildet oder vernichtet werden können². Eine mathematische Beschreibung dieser Vorgänge bietet die Speziestransportgleichung:

$$\frac{\partial \rho Y_m}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho(u_i + V_{m,i})Y_m) = \dot{\omega}_m. \quad (2.3)$$

Der Massenanteil Y_m bezeichnet den Anteil der Speziesmasse M_m an der Gesamtmasse M . Die Summe über alle Massenanteile ist stets gleich 1. Der chemische Quellterm $\dot{\omega}_m$ (vgl. Abs. 2.2.1) kennzeichnet die Umsetzung der Spezies untereinander durch chemische Reaktionen. Der Term $V_{m,i}Y_m$, Teilchenstromdichte genannt, repräsentiert die Diffusion der Spezies durch Konzentrationsunterschiede und kann durch das sogenannte Fick'sche Gesetz folgendermaßen geschrieben werden:

$$V_{m,i}Y_m = -D_m \frac{\partial Y_m}{\partial x_i}. \quad (2.4)$$

Den Proportionalitätsfaktor zwischen Teilchenstromdichte und lokalem Konzentrationsgradient $\partial Y_m / \partial x_i$ bildet der Diffusionskoeffizient D_m . Er ist im Allgemeinen eine Funktion der Spezies m , der Temperatur und der Massenanteile der übrigen Gemischspezies.

Impulserhaltung

Die Impulserhaltung beschreibt, dass der Gesamtimpuls innerhalb eines Systems konstant ist. Sie beruht auf dem zweiten und dritten Newton'schen Axiom. Hiernach ist zunächst

²In der Betrachtungsweise der Teilchenphysik ist die Bildung und der Zerfall von Elementen durch radioaktive Prozesse sehr wohl möglich, spielt jedoch im Kontext dieser Arbeit keine Rolle.

die zeitliche Änderung des Gesamtimpuls eines Systems proportional zu den von außen einwirkenden Kräften. Des Weiteren gilt, dass an einem ruhenden System sich die äußerlich angreifenden Kräfte in Richtung und Betrag ausgleichen und so das System in Ruhe halten (actio = reactio). In ihrer partiellen Form lautet die Bilanzgleichung für die Impulserhaltung folgendermaßen:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_i u_j) = \rho k_i + \frac{\partial}{\partial x_j} \tau_{ij}. \quad (2.5)$$

Die Impulsgleichung in dieser Form wird auch erste Cauchy'sche Bewegungsgleichung genannt und gilt unabhängig vom Material für jedes Kontinuum. In ihr bezeichnet k_i die einwirkenden Volumenkräfte und τ_{ij} den Spannungstensor für die Oberflächenkräfte. Bei der Voraussetzung eines Newton'schen Fluids, für das die Schergeschwindigkeit proportional zur Scherspannung ist, ergibt sich τ_{ij} zu:

$$\tau_{ij} = -p\delta_{ij} + \lambda^* \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} + 2\eta \left[\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right]. \quad (2.6)$$

Hier ist p der Druck, λ^* die erste Lamé-Konstante und η die dynamische Viskosität. Die Annahme eines Newton'schen Fluids ist im Allgemeinen für Gase wie Methan, Luft und Wasserdampf gerechtfertigt [162]. Wird die Bilanzgleichung (2.5) mit dem Materialgesetz für Newton'sche Fluide aus Gleichung (2.6) vereint, so lautet die Bezeichnung, für die hieraus resultierende Gleichung, Navier-Stokes-Gleichung:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_i u_j) = \rho k_i + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(-p + \lambda^* \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\eta \left[\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right] \right). \quad (2.7)$$

Zustandsgleichung

Die thermodynamische Zustandsgleichung (2.8) setzt die Dichte ρ eines Volumenelements in Beziehung zu dessen Temperatur T und dessen Druck p . Für Fluide, welche sich als ideale Gase bezeichnen lassen, gilt der folgende Zusammenhang:

$$\rho = \frac{p}{T R_s}. \quad (2.8)$$

In dieser Form der Zustandsgleichung bezeichnet R_s die individuelle Gaskonstante für das jeweilige Volumenelement und ergibt sich aus dem Quotient der allgemeinen Gaskonstanten $\mathcal{R} = 8,314 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$ und dem mittleren molaren Gewicht $\overline{M}$. Nach Gleichung (2.9) ergibt sich die mittlere Molmasse $\overline{M}$ aus den individuellen molaren Gewichten M_m und den Massenanteilen Y_m aller N_s Einzelspezies zu:

$$\overline{M} = \sum_{m=1}^{N_s} \frac{M_m}{Y_m}. \quad (2.9)$$

2.1.2 Turbulenz

Die Turbulenz einer Strömung lässt sich durch verschiedene Größen, wie etwa der Reynolds-Zahl (Re), beschreiben, ist aber nicht über diese definiert. Vielmehr lassen sich turbulente Strömungen durch ihre charakteristische Eigenschaften beschreiben. So besitzt jede turbulente Strömung ein stochastisches Verhalten, das durch fluktuierende dreidimensionale Strömungsstrukturen, wie etwa Wirbel, verursacht wird. Die Wirbel werden hierbei mit der Zeit kleiner und dissipieren dabei letztendlich ihre kinetische Energie in innere Energie. Der Zerfall dieser Wirbel führt ebenfalls dazu, dass sich die Wirbelgrößen über viele Größenordnungen hinweg verteilen.

Nachfolgend wird daher eine kurze Einführung in den stochastischen, dissipativen und dreidimensionalen Charakter der Turbulenz gegeben. Für ein tiefer gehendes Studium sei hier auf die Standardwerke für turbulente Strömungen von Pope [138] oder Tennekes und Lumley [174] verwiesen.

Stochastisch

Eine strömungsbeschreibende Größe ϕ , wie etwa die Geschwindigkeit u oder der Druck p , besitzt im Fall einer turbulenten Strömung ein stochastisches Verhalten. Das heißt, dass ihr Wert an einem ortsfesten Punkt trotz gleichbleibender Randbedingungen unterschiedliche Werte annimmt. Für ϕ wird daher in turbulenten Strömungen die sogenannte Reynolds-Zerlegung aus Gleichung (2.10) angewandt.

$$\phi(t) = \bar{\phi} + \phi'(t). \quad (2.10)$$

Hierbei wird die zeitabhängige Größe $\phi(t)$ in ihren zeitlichen Mittelwert $\bar{\phi}$ und die zeitabhängige Schwankungsgröße $\phi'(t)$ aufgeteilt. Der Mittelwert $\bar{\phi}$ ergibt sich aus der Mittelung von $\phi(t)$ über den Zeitraum τ :

$$\bar{\phi} = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \int_{t_0}^{t_0+\tau} \phi(t) dt. \quad (2.11)$$

Ein Maß für die zeitliche Fluktuation um den Mittelwert einer Größe $\phi(t)$ ist durch die Standardabweichung $\sigma(\phi(t))$ gegeben, welche über folgenden Zusammenhang definiert ist:

$$\sigma(\phi(t)) = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{\tau} \int_{t_0}^{t_0+\tau} \phi'^2(t) dt \right)^{1/2}. \quad (2.12)$$

Die Fluktuationen in turbulenten Strömungen lassen sich ebenfalls durch eine Auftrittswahrscheinlichkeit $G(\phi)$ eines bestimmten Wertes der Größe ϕ beschreiben. Ist $G(\phi) = 0$, so tritt das Ereignis nie ein. Gilt $G(\phi) = 1$, so tritt das Ereignis immer ein. Die akkumulierte Verteilungsfunktion der Auftrittswahrscheinlichkeit wird mit $F(\phi)$ bezeichnet. Für $\phi \rightarrow -\infty$ ist $F = 0$ und für $\phi \rightarrow +\infty$ ist $F = 1$.

Die Schwankungen der Größe ϕ werden, wie eingangs erwähnt, durch Strömungsstrukturen mit unterschiedlicher räumlicher und zeitlicher Ausdehnung hervorgerufen. Zwei Werte

$\phi(x_0, t_0)$ und $\phi(x_0 + \Delta x, t_0 + \tau)$ zu unterschiedlichen Orten bzw. Zeitpunkten sind daher voneinander nicht unbedingt unabhängig. Die Abhängigkeit dieser räumlich und/oder zeitlich getrennten Wertepaare wird durch die Autokorrelationsfunktion $R_{ij}(x_0, t_0, \Delta x, \tau)$ in folgender Weise beschrieben:

$$R_{ij}(x_0, t_0, \Delta x, \tau) = \frac{\overline{\phi'(x_0, t_0)\phi'(x_0 + \Delta x, t_0 + \tau)}}{\left(\overline{\phi'^2(x_0, t_0)} \overline{\phi'^2(x_0 + \Delta x, t_0 + \tau)}\right)^{1/2}}. \quad (2.13)$$

Ist hierbei $\tau = 0$, so spricht man von der räumlichen und für $\Delta x = 0$ von der zeitlichen Autokorrelation. Zwischen Wertepaaren mit $R_{ij} = 0$ besteht keine Abhängigkeit, sie werden auch als unkorrelierte Ereignisse bezeichnet und sind statistisch vollkommen unabhängig. Gilt jedoch $R_{ij} = 1$ bzw. $R_{ij} = -1$, werden die Ereignisse als perfekt korreliert bzw. antikorreliert bezeichnet. Dies bedeutet, dass die Ereignisse entweder sich gegenseitig verursachen und somit eine Kausalität zwischen ihnen besteht oder dass sie durch ein drittes Ereignis bedingt werden und somit eine Scheinkausalität vorliegt. Es besteht allerdings ebenfalls die Möglichkeit, dass die Abhängigkeit der Daten rein zufällig ist. Aus dem Vorhandensein einer Korrelation folgt somit nicht unbedingt eine Kausalität, d. h. eine ursächliche Abhängigkeit zweier Ereignisse.

Dissipativ

Der dissipative Charakter turbulenter Strömungen lässt sich durch das von Richardson [143] entwickelte Modell der Energiekaskade beschreiben. Hierbei nimmt die Strömung die Energie in großen Längenskalen, also durch große Strömungsstrukturen, zunächst auf. Die auftretenden Scherkräfte innerhalb turbulenter Strömung führen zur Deformation dieser großen Strömungsstrukturen und somit zu deren Zerfall in Wirbel kleinerer Längenskalen. Die Energie wird durch den Zerfall von großen Wirbeln über alle Größenordnungen hinweg zu kleineren Wirbeln transportiert. Ab einem bestimmten Grenzwert wird die Energie der Wirbel in innere Energie und somit Wärme dissipiert.

Einen mathematischen Einblick in diesen Zusammenhang gibt die Reynold'sche Gleichung (2.14), die eine Vereinfachung der Navier-Stokes-Gleichung darstellt. Sie ergibt sich durch die Anwendung der Reynolds-Zerlegung (2.10) auf die Kontinuitätsgleichung (2.2) und die Navier-Stokes-Gleichung (2.7) unter der Vernachlässigung von Dichteschwankungen ($\partial\rho/\partial t = 0$) und Viskositätsschwankungen ($\partial\eta/\partial t = 0$) zu:

$$\rho \bar{u}_j \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} = \rho k_i - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \eta \frac{\partial^2 \bar{u}_i}{\partial x_j \partial x_j} - \frac{\partial (\rho \overline{u'_i u'_j})}{\partial x_j}. \quad (2.14)$$

Der Term $\overline{u'_i u'_j}$ in (2.14) wird als Reynolds-Stress-Tensor bezeichnet. Der entstehende Tensor enthält neben den Normalspannungen auf der Hauptdiagonalen auch die Schubspannungen auf den Nebendiagonalen. Diese Schubspannungen sind in aller Regel ungleich null, da diese beiden Größen korreliert sind (vgl. Gl. (2.13)). Dies führt dazu, dass das Gleichungssystem der so entstandenen Reynoldsgemittelten Navier-Stokes-Gleichung (RANS)

nicht mehr geschlossen ist. Die Substitution dieser Schubspannungseinträge durch Modelle ist daher fundamentaler Bestandteil bei der Simulation turbulenter Strömungen.

Über die Normalspannungen des Reynolds-Stress-Tensors lässt sich nach Gleichung (2.15) ebenfalls die turbulente kinetische Energie k bestimmen. Sie ist ein Maß für die Energie, welche in den turbulenten Strömungsstrukturen enthalten ist.

$$k = \frac{\overline{u'_i u'_i}}{2}. \quad (2.15)$$

Die Bilanzgleichung der turbulenten kinetischen Energie k

$$\frac{\partial \rho k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i k) + \frac{\partial}{\partial x_j} \mathcal{T}_j = \mathcal{P} - \varepsilon \quad (2.16)$$

zeigt, dass die zeitliche Variation der turbulenten kinetischen Energie k und deren Transport $\mathcal{T}$ gleich der Differenz zwischen Produktion $\mathcal{P}$ und Dissipation ε ist. Der Term $\mathcal{P}$ ist nach (2.17) stets positiv, weshalb er als Produktionsterm bezeichnet wird.

$$\mathcal{P} = -\overline{u'_i u'_j} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j}. \quad (2.17)$$

Die Definition des Dissipationsterms ε aus (2.16) lautet in Abhängigkeit von kinematischer Viskosität und dem symmetrischen Anteil der Fluktuationen des Geschwindigkeitgradiententensors (2.19):

$$\varepsilon = 2\nu \overline{s_{ij} s_{ij}}, \quad (2.18)$$

$$s_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u'_j}{\partial x_i} \right). \quad (2.19)$$

Hieraus wird ersichtlich, dass die Dissipation der Turbulenz durch den fluktuierenden Anteil der Scherung und die viskosen Kräfte erfolgt. Der Energiekaskade nach Richardson (vgl. Abb. 2.1) lassen sich somit der Energieproduktion (Injektionsbereich), dem Energietransport (Inertialbereich) und der Energieumwandlung in Wärme (Dissipationsbereich) somit eindeutige Terme zuordnen. Die Abgrenzung der einzelnen Bereiche untereinander wird durch eine Reihe sogenannter Längenmaße gegeben.

Die kleinsten auftretenden Wirbel liegen am rechten Rand der Energiekaskade. Unterhalb dieses Längenmaßes wird die kinetische Energie der Wirbel in Wärme dissipiert. Kleinere Wirbel treten daher nicht auf. Die Größe der kleinsten Wirbel wird als Kolmogorov-Länge l_η bezeichnet, welche in Abhängigkeit der Viskosität ν und dem Dissipationsterm ε wie folgt definiert ist:

$$l_\eta = \left(\frac{\nu^3}{\varepsilon} \right)^{1/4}. \quad (2.20)$$

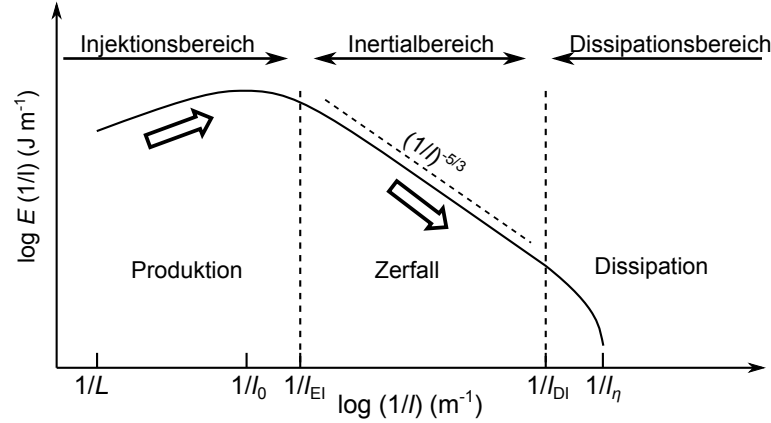


Abbildung 2.1: Schematische Darstellung der Energiekaskade für voll ausgebildete Turbulenz, inklusive der Kolmogorov-Länge l_η , der Grenze zwischen Inertialbereich und Dissipation l_{DI} , der Grenze zwischen Energieproduktion und Inertialbereich l_{EI} , dem integralen Längenmaß l_0 und dem charakteristischen Längenmaß des Strömungssystems $\mathcal{L}$, nach [138].

Die Abgrenzung zwischen dem Inertial- und dem Dissipationsbereich bildet das Grenzlängenmaß l_{DI} . Zwischen diesem Längenmaß und dem Grenzlängenmaß l_{EI} zwischen Injektions- und Inertialbereich bildet der Bereich des Energietransports, in dem die Großen Wirbel zu kleineren zerfallen. Das integrale Längenmaß l_0 gibt die Dimension der energiereichsten auftretenden Wirbel in der Strömung an. Dieses ist eine Funktion der charakteristischen Systemlänge $\mathcal{L}$ und lassen sich über eine räumliche Autokorrelation von u'_i bestimmen.

$$l_0 = \int_0^\infty R_{ij}(x, t, \Delta x) ds. \quad (2.21)$$

Analog hierzu ergibt sich das turbulente Zeitmaß τ_0 zu:

$$\tau_0 = \int_0^\infty R_{ij}(x, t, \tau) d\tau. \quad (2.22)$$

Die charakteristische Länge kennzeichnet die größten auftretenden Wirbel und wird durch die geometrischen Randbedingungen der Strömungskonfiguration, etwa dem Rohrdurchmesser, bestimmt. Über dieses Längenmaß, der charakteristischen Geschwindigkeit $\mathcal{U}$ und der kinematischen Viskosität ν lässt sich eine dimensionslose Kenngröße, die Reynolds-Zahl Re , bilden.

$$Re = \frac{\mathcal{U}\mathcal{L}}{\nu}. \quad (2.23)$$

Die Reynolds-Zahl lässt sich als Verhältnis zwischen Trägheitskräften und Viskositätskräften einer Strömung verstehen. Die Trägheitskräfte wirken hierbei störend, die Kräfte durch die Viskosität stabilisierend auf die Strömung. Die Turbulenz innerhalb eines Systems steigt somit mit zunehmender Re an. Oberhalb eines kritischen Wertes ($Re \geq Re_{krit}$) kann die Strömung durch das Einwirken von kleinsten Störungen von einer laminaren