

Kapitel 5

Zusammenfassung und Ausblick

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurde ein Rechenmodell erstellt, mit dem untersucht wurde, welchen Einfluß die Reaktionsfähigkeit von Partikeln auf die Flammenentstehung und –ausbreitung in einem Gas/Partikel–Gemisch hat. Eine weitere Fragestellung war der Einfluß der Wärmestrahlung auf das Verhalten des reaktiven Gas/Partikel–Systems.

Als Modellproblem für die Untersuchungen diente ein abgeschlossenes Gefäß, das mit einem stöchiometrischen Methan/Luft– bzw. Wasserstoff/Sauerstoff–Gemisch und Kohlenstoffpartikeln gefüllt ist. Die Arbeit zeigt im einzelnen die modellhaft erfaßten Einflüsse von Partikelgröße, Partikelkonzentration, Partikelvolumenanteil, Partikelreaktivität sowie der Wärmestrahlung auf die Zündvorgänge und die Anfangsphase der eindimensionalen Flammenausbreitung. Die Anfangsbedingungen für die Partikeldurchmesser lagen bei 370 nm, 3,7 μm und 37 μm , die Partikelkonzentrationen zwischen $3 \cdot 10^3 \text{ cm}^{-3}$ und $3 \cdot 10^9 \text{ cm}^{-3}$, wobei als Partikelvolumenanteile $7,9 \cdot 10^{-5}$ bzw. $7,9 \cdot 10^{-4}$ gewählt wurden. Die heterogenen Gas/Partikel–Reaktionen wurden über globale Reaktionen von Kohlenstoff mit O, O₂ und OH modelliert, die homogenen Gasphasenreaktionen über vereinfachte Elementarreaktionsmechanismen. Die chemischen Reaktionen und die Strömungsprozesse wurden durch die Vorgabe einer am Rand des Rechengebietes von 800 K auf 1100 K erhöhten Temperatur (hot spot) in Gang gesetzt und auf den ersten 120 μs bzw. 300 μs per Simulation verfolgt.

Die Untersuchung wurde auf der Basis eines instationären, eindimensionalen Bilanzgleichungssystem für Massen, Impulse und Energien von Gas und Partikeln sowie für die Partikelkonzentration durchgeführt, wobei Gas– und Partikelphase als Kontinua betrachtet wurden. Viskositäten, Diffusion und Wärmeleitung in der Gasphase wurden in das Modell integriert, da u.a. Flammenausbreitungsphänomene untersucht werden sollten. Die physikalischen Austauschprozesse zwischen den Phasen wurden über Modelle für die heterogenen Reaktionen, für die Strömungswiderstände des Gases an den Partikeln sowie für die Wärmeübertragung durch Konvektion und durch Strahlung berücksichtigt. Für die

Modellierung der Wärmestrahlung kam die Zonenmethode von Hottel und Sarofim [31] zum Einsatz. Turbulenzeffekte wurden nicht in das Modell integriert. Ihre Untersuchung bleibt ebenso wie die Erhöhung der Raumdimension weiterführenden Arbeiten vorbehalten.

Die numerische Lösung des Problems erfolgte mit Flußdifferenz–Splitting–Verfahren nach Harten und Yee [33] bzw. Harten, Lax und van Leer [34] für die Behandlung der Ortsableitungen und dem impliziten Löser DASSL [37] für die Zeitintegration. Die Auflösung des Rechengitters wurde im Bereich starker Gradienten von Temperatur, Druck und Massenbrüchen mit einem dynamisch adaptiven Gitteralgorithmus [35] durch Zusammenziehung von Punkten erhöht, die aus Gebieten weitgehend konstanter Größen abgezogen wurden. Kontrollrechnungen mit 200 gegenüber 100 Rechenzellen ergaben keine sichtbaren Unterschiede in den Lösungsverläufen, so daß davon ausgegangen werden kann, daß das Rechengitter mit 100 anzupassenden Rechenzellen ausreichend hoch aufgelöst war.

Für eine Rechenzeit von $300 \mu\text{s}$ zeigen die Simulationsergebnisse für stöchiometrische CH_4/Luft –Gemische mit reaktiven Partikeln einen langsameren Anstieg der Gastemperatur im Bereich der Flammenentstehung, also eine höhere Zündverzugszeit, als die Simulationen ohne Partikel. Dieser Effekt ist auf den modellierten OH–Radikalverbrauch der heterogenen Reaktionen zurückzuführen, der sich in den Simulationsergebnissen deutlich zeigt. Die CO–Konzentration steigt durch die Gas/Partikel–Reaktionen deutlich an, zudem auch ein Teil des Sauerstoffs durch die heterogenen Reaktionen verbraucht wird.

Die mit einem stöchiometrischen H_2/O_2 –Anfangsgemisch durchgeführten Untersuchungen zum Einfluß von Partikelgröße und –konzentration bei konstantem Partikelvolumenanteil von $\epsilon = 7,9 \cdot 10^{-5}$ ergaben, daß wenige große Partikel ($D_P = 37 \mu\text{m}$, $n_P = 3 \cdot 10^3 \text{ cm}^{-3}$) aufgrund ihrer relativ geringen für die heterogenen Reaktionen zur Verfügung stehenden Gesamtoberfläche die Zustandsgrößen Gastemperatur, Druck und Molenbrüche nur sehr geringfügig beeinflussen. Kleinere Partikeldurchmesser bei dementsprechend erhöhter Partikelkonzentration bewirken wiederum einen Anstieg der Zündverzugszeit.

Die Erhöhung des Partikelvolumenanteils von $\epsilon = 7,9 \cdot 10^{-5}$ auf $\epsilon = 7,9 \cdot 10^{-4}$ bei gleichem Anfangsdurchmesser $D_P = 3,7 \mu\text{m}$ führte zu einer starken Verminderung der Verbrennungsendtemperatur von ca. 3000 K auf ca. 1800 K. Mehr Partikel bieten dem Gas eine größere Oberfläche an und entziehen dem Gas mehr Wärme und mehr O– und OH–Radikale. Die bei den Gas/Partikel–Reaktionen entstehende Wärme reicht offensichtlich nicht aus, um die Gastemperatur entsprechend zu erhöhen. Dem verminderten Temperaturniveau entsprechend laufen die heterogenen Reaktionen jedoch etwas langsamer ab, so daß der einzelne Partikeldurchmesser langsamer abnimmt. Auf die bei der Zündung entstehende Druckwelle, die sich mit Schallgeschwindigkeit durch das Gas bewegt, hat die

erhöhte Partikelanzahl eine stark dämpfende Wirkung. Bei einer künstlichen Erhöhung der Partikelreaktivitäten ist in erster Linie eine Erhöhung der Zündverzugszeit zu beobachten.

Die Wärmestrahlung schließlich erwies sich für die vorliegenden Partikel/Gas-Gemische als eher zu vernachlässigender physikalischer Effekt. Die emittierte und absorbierte Partikelstrahlung ist bei den hier betrachteten Größen-/anzahl-Kombinationen zu gering, um das Reaktionsgeschehen spürbar zu beeinflussen. Die Untersuchung, in welchen Bereichen von Partikelgröße und -anzahl die Berücksichtigung der Partikelwärmestrahlung eine Auswirkung auf das Systemverhalten zeigt, bleibt weiterführenden Arbeiten vorbehalten.