

Anhang A

Mathematischer Charakter des Modellgleichungssystems

Die Kenntnis des mathematischen Charakters des Differentialgleichungssystems, das aus der Ergänzung der Bilanzgleichungen mit den Transportgleichungen entstanden ist, ist wichtig für die numerische Behandlung des Systems. Man unterscheidet zwischen elliptischen, hyperbolischen und parabolischen Systemen. Der Typ erlaubt Aussagen über den Einflußbereich von Störungen und ist deshalb für die Auswahl des Lösungsverfahrens entscheidend. Für Systeme, in denen Zeit und Weg die Koordinaten sind, ermöglicht der Charakter des Differentialgleichungssystems Aussagen über Ausbreitungsgeschwindigkeit und Ausbreitungsrichtung von Störungen:

- In elliptischen Systemen erfolgt die Informationsausbreitung in alle Richtungen mit unendlich großer Signalausbreitungsgeschwindigkeit,
- in hyperbolischen Systemen kann die Informationsausbreitung in alle Richtungen mit begrenzter Signalausbreitungsgeschwindigkeit erfolgen,
- in parabolischen Systemen erfolgt die Informationsausbreitung nur in eine Richtung mit unendlich großer Signalausbreitungsgeschwindigkeit.

Insbesondere lassen elliptische Systeme auf das Vorliegen eines „schlecht gestellten Anfangswertproblems“ schließen, bei denen kleine Veränderungen der Anfangsbedingungen große Änderungen bei der Lösung bewirken.

Die hier betrachteten Gleichungen bilden ein Differentialgleichungssystem erster Ordnung in der Zeit und zweiter Ordnung im Ort, global also ein Differentialgleichungssystem zweiter Ordnung. Um dies zu verdeutlichen, werden die in dieser Arbeit verwendete

ten Gleichungen noch einmal aufgeführt:

$$(\rho_G^{(k)})_t + \left(\rho_G^{(k)} u_G - \rho_G D^{(k)} (Y_G^{(k)})_x + \rho_G \frac{M_G^{(k)}}{\bar{M}_G} D^{(k)} \Theta^{(k)} \frac{1}{T_G} T_{Gx} \right)_x = \dot{\omega}^{(k)},$$

$$k = 1 \dots K, \quad (\text{A.1})$$

$$(\rho_G u_G)_t + p^* \epsilon_x + \left(\rho_G u_G^2 + (1 - \epsilon) p - \frac{4}{3} \eta u_{Gx} \right)_x = J u_P + f, \quad (\text{A.2})$$

$$(\rho_G e_G)_t + u_G p^* \epsilon_x + \left(u_G (\rho_G e_G + (1 - \epsilon) p - \frac{4}{3} \mu u_{Gx}) - \lambda T_{Gx} + \rho_G \sum_k h_G^{(k)} (-D^{(k)} (Y_G^{(k)})_x + \frac{M_G^{(k)}}{\bar{M}_G} D^{(k)} \Theta^{(k)} \frac{1}{T_G} T_{Gx}) \right)_x = J e_P + f u_P + \dot{q}, \quad (\text{A.3})$$

$$(\rho_P)_t + (\rho_P u_P)_x = -J, \quad (\text{A.4})$$

$$(\rho_P u_P)_t - p^* \epsilon_x + (\rho_P u_P^2 + \epsilon p)_x = -J u_P - f, \quad (\text{A.5})$$

$$(\rho_P e_P)_t - u_P p^* \epsilon_x + (\rho_P e_P u_P + \epsilon p u_P)_x = -J e_P - f u_P - \dot{q}, \quad (\text{A.6})$$

Die Indizes t und x stehen für Ableitungen nach der Zeit und dem Ort. p^* wurde eingeführt, um den Einfluß des „Partikeldruck–Korrekturterms“ auf den mathematischen Charakter des Systems zu erläutern. Wird $p^* = p$ gesetzt, liegt der für die Rechnungen benutzte Satz von Gleichungen vor. Um das System untersuchen zu können, wird es in ein System erster Ordnung überführt, indem $K + 2$ zusätzliche Variable u_{7k}, u_8 und u_9 und die $K + 2$ zusätzlichen Gleichungen eingeführt werden, in denen die neuen Variablen definiert werden. Der Charakter des gesamten Differentialgleichungssystems wird hierdurch nicht verändert. Die $2 \cdot K + 7$ Variablen lauten nun:

$$u_{1k} = \rho_G^{(k)}, \quad (\text{A.7}) \quad u_6 = \rho_P e_P, \quad (\text{A.12})$$

$$u_2 = \rho_G u_G, \quad (\text{A.8}) \quad u_{7k} = -\rho_G D^{(k)} (Y_G^{(k)})_x + \rho_G \frac{M_G^{(k)}}{\bar{M}_G} D^{(k)} \frac{\Theta^{(k)}}{T_G} T_{Gx}, \quad (\text{A.13})$$

$$u_3 = \rho_G e_G, \quad (\text{A.9}) \quad u_8 = -\frac{4}{3} \eta u_{Gx}, \quad (\text{A.14})$$

$$u_4 = \rho_P, \quad (\text{A.10}) \quad u_9 = -\lambda T_{Gx}, \quad (\text{A.15})$$

$$u_5 = \rho_P u_P, \quad (\text{A.11})$$

mit $k = 1 \dots K$.

Das System kann wieder in Matrix–Vektor–Form geschrieben werden:

$$\mathbf{A} \mathbf{u}_t + \mathbf{B}(\mathbf{u}) \mathbf{u}_x = \mathbf{g}(\mathbf{u}) \quad (\text{A.16})$$

mit

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \delta_k^j & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \quad k = 1..K + 5, \quad j = 1..K + 5 \quad (\text{A.17})$$

und

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} -Y_G^{(k)} u_G^{(k)} + u_G^{(k)} \delta_k^j & Y_k & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ \frac{R_m T_G}{M_G^{(k)}} - u_G^2 & 2u_G & 0 & \frac{p^*}{\rho_{P0}} & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ a_{31k} & \frac{u_3 + p_G + u_s}{\rho} & u_G & u_G \frac{p^*}{\rho_{P0}} & 0 & 0 & h_G^{(k)} & u_G & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{\epsilon}{1-\epsilon} \frac{R_m}{M^{(k)}} T_G & 0 & 0 & \frac{1}{1-\epsilon} \frac{p_{gas}}{\rho_{P0}} - u_P^2 - \frac{p^*}{\rho_{P0}} & 2u_P & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{\rho_P u_P T_G}{\rho_{P0} - \rho_P} \frac{R_m}{M^{(k)}} & 0 & 0 & \frac{\epsilon u_P p}{1-\epsilon} - u_P \left(e_P + \frac{p^*}{\rho_{P0}} \right) & e_P + \frac{p_G}{\rho_{P0} - \rho_P} & u_P & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -D^{(k)} \delta_k^j + D^{(k)} Y_G^{(k)} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{4}{3} \frac{\eta u_G}{\rho_G} & -\frac{4}{3} \frac{\eta}{\rho_G} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{\lambda}{\rho_G c_V} (u_G^2 - e_G) & \frac{\lambda u_G}{\rho_G c_V} & -\frac{\lambda}{\rho_G c_V} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{A.18})$$

mit $a_{31k} = -u_G \left(e_G + \frac{p_G}{\rho_G} - \frac{4}{3} \frac{\eta}{\rho_G} u_{Gx} \right) + \frac{R_m}{M_G^{(k)}} T_G$ sowie k und j als den Zeilen– und Spaltenindizes der Untermatrizen, die beide von 1 bis K laufen. δ_k^j ist das Kronecker–Symbol, das durch $\delta_k^j = 1$ für $k = j$ und $\delta_k^j = 0$ für $k \neq j$ definiert ist.

Eine Klassifizierung des Systems erfordert eine Untersuchung der Eigenwerte und Eigenvektoren. Die Eigenwerte ξ sind die Lösungen der Gleichung:

$$|\mathbf{B}\xi - \mathbf{A}| = 0 \quad (\text{A.19})$$

Die Eigenvektoren \mathbf{x} ergeben sich aus:

$$\mathbf{B}\xi \mathbf{x} = \mathbf{A} \mathbf{x} \quad (\text{A.20})$$

Nach Zauderer [49] ist das System

elliptisch, wenn alle Eigenwerte komplex sind,

hyperbolisch, wenn alle Eigenwerte reell sind und alle Eigenvektoren linear unabhängig sind, was insbesondere der Fall ist, wenn alle Eigenwerte reell und voneinander verschieden sind,

parabolisch, wenn alle Eigenwerte reell, aber nicht alle voneinander verschieden sind und die Eigenvektoren nicht linear unabhängig sind.

Das charakteristische Polynom des Systems ist:

$$P(\xi) = \pm \xi^{K+2} (\xi u_P - 1) \xi \frac{\lambda}{c_v} \xi^K (-D^{(k)} \delta_k^j + D^{(k)} Y_G^{(k)}) \frac{4}{3} \frac{\eta}{\rho_G} \xi \quad (\text{A.21})$$

$$\cdot \left[\xi^2 \left(\frac{1}{1 - \epsilon} \frac{p}{\rho_{P0}} - u_P^2 - \frac{p^*}{\rho_{P0}} \right) + 2\xi u_P - 1 \right] \quad (\text{A.22})$$

Die Eigenwerte des vorliegenden Systems sind:

$$\xi_{1k} = \xi_2 = \xi_3 = \xi_{7k} = \xi_8 = \xi_9 = 0 \quad (\text{A.23})$$

$$\xi_4 = 1/u_P \quad (\text{A.24})$$

$$\xi_5 = 1/ \left[u_P - \sqrt{\frac{p - (1 - \epsilon)p^*}{(1 - \epsilon)\rho_{P0}}} \right] \quad (\text{A.25})$$

$$\xi_6 = 1/ \left[u_P + \sqrt{\frac{p - (1 - \epsilon)p^*}{(1 - \epsilon)\rho_{P0}}} \right] \quad (\text{A.26})$$

Mit $p^* = 0$ werden die Eigenwerte ξ_5 und ξ_6 :

$$\xi_5 = 1/ \left[u_P - \sqrt{\frac{p}{(1 - \epsilon)\rho_{P0}}} \right] = 1/ \left[u_P - \frac{1}{1 - \epsilon} \sqrt{\frac{p_G}{\rho_{P0}}} \right] \quad (\text{A.27})$$

$$\xi_6 = 1/ \left[u_P + \sqrt{\frac{p}{(1 - \epsilon)\rho_{P0}}} \right] = 1/ \left[u_P + \frac{1}{1 - \epsilon} \sqrt{\frac{p_G}{\rho_{P0}}} \right] \quad (\text{A.28})$$

Für $p^* = p$, also für das in dieser Arbeit verwendete Modell, ergeben sich die Eigenwerte ξ_5 und ξ_6 als

$$\xi_5 = 1/ \left[u_P - \sqrt{\frac{\epsilon p}{(1 - \epsilon)\rho_{P0}}} \right] = 1/ \left[u_P - \frac{1}{1 - \epsilon} \sqrt{\frac{\epsilon p_G}{\rho_{P0}}} \right] \quad (\text{A.29})$$

$$\xi_6 = 1 / \left[u_P + \sqrt{\frac{\epsilon p}{(1 - \epsilon)\rho_{P0}}} \right] = 1 / \left[u_P + \frac{1}{1 - \epsilon} \sqrt{\frac{\epsilon p_G}{\rho_{P0}}} \right] \quad (\text{A.30})$$

In beiden Fällen sind alle Eigenwerte reell. Das System ist also nicht elliptisch, anders als bei einem ähnlichen Fall, der von Stuhmiller [8] untersucht wurde. Dort führte die Annahme $p^* = p$ zu komplexen Eigenwerten, die für lineare Systeme auf ein schlecht gestelltes Anfangswertproblem hindeuten.

Da 0 ein mehrfacher Eigenwert ist, müssen die Eigenvektoren betrachtet werden, um zu entscheiden, ob das System hyperbolisch oder parabolisch ist. Die Eigenvektoren für den mehrfachen Eigenwert $\xi = 0$ sind die Lösungen der Gleichung:

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{0} \quad (\text{A.31})$$

Nur $K + 2$ linear unabhängige Lösungsvektoren sind möglich:

$$\mathbf{x}_{1k} = (0_K \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ \mathbf{e}_k^T \ 0 \ 0)^T, \quad k = 1 \dots K, \quad (\text{A.32})$$

$$\mathbf{x}_2 = (0_K \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0_K \ 1 \ 0)^T, \quad (\text{A.33})$$

$$\mathbf{x}_3 = (0_K \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0_K \ 0 \ 1)^T. \quad (\text{A.34})$$

0_K steht für einen Nullvektor der Dimension K . \mathbf{e}_k ist der kanonische Einheitsvektor der Dimension K , dessen k -te Komponente 1 ist, während die anderen Komponenten 0 sind. Da die Anzahl der linear unabhängigen Eigenvektoren für diesen Eigenwert kleiner ist als seine Vielfachheit ($2 \cdot K + 4$), sind die Eigenvektoren nicht linear unabhängig. Das System ist also von parabolischem Typus. Insbesondere liegt kein schlecht gestelltes Anfangswertproblem vor. Bemerkenswert ist, daß die Einführung des Druckkorrekturterms $p_{gas} \epsilon_x$ den Charakter des Differentialgleichungssystems nicht beeinflußt.

Anhang B

Wärmestrahlungsmodell

Die Änderungen $\dot{q}_{rad_{G_j}}$ und $\dot{q}_{rad_{P_j}}$ der inneren Energien von Gas- und Partikelphase durch Wärmestrahlung in den einzelnen Zellen werden aus den von den jeweiligen Phasen und den Behälterwänden absorbierten und emittierten Strahlungsenergien berechnet:

$$\dot{q}_{rad_{G_j}} = \dot{q}_{abs_{G_j}} - \dot{q}_{em_{G_j}} \quad (\text{B.1})$$

$$\dot{q}_{rad_{P_j}} = \dot{q}_{abs_{P_j}} - \dot{q}_{em_{P_j}} \quad (\text{B.2})$$

In diesem Abschnitt werden zunächst die benötigten Grundbegriffe der Wärmestrahlung eingeführt, mit denen dann die Berechnung der Absorptions- und Emissionswärmeströme erläutert wird.

B.1 Grundbegriffe

Eine wesentliche Größe zur Beschreibung des Emissions- und Absorptionsverhalten von Gasen oder Feststoffen bezüglich Wärmestrahlung ist die **Strahlungsintensität I** . Sie beschreibt die pro Flächenelement in ein Raumwinkelement abgestrahlte Strahlungsleistung. Bei den in dieser Arbeit betrachteten grauen Oberflächen ist die Intensität I unabhängig von der Abstrahlrichtung. Die von einem infinitesimalen Flächenelement dA_1 (vgl. Abb. B.1) in ein Raumwinkelement $d\Omega$ unter dem Winkel β zur Flächennormalen (bezüglich dA_1) gelangende Strahlungsleistung $d\dot{Q}_\beta$ ist nach dem Lambert'schen Kosinusetz:

$$d\dot{Q}_\beta = I \cos \beta dA_1 d\Omega = I_\beta dA_1 d\Omega \quad (\text{B.3})$$

Mit der Beschreibung des Raumwinkelements

$$d\Omega = \sin \beta d\beta d\varphi \quad (\text{B.4})$$

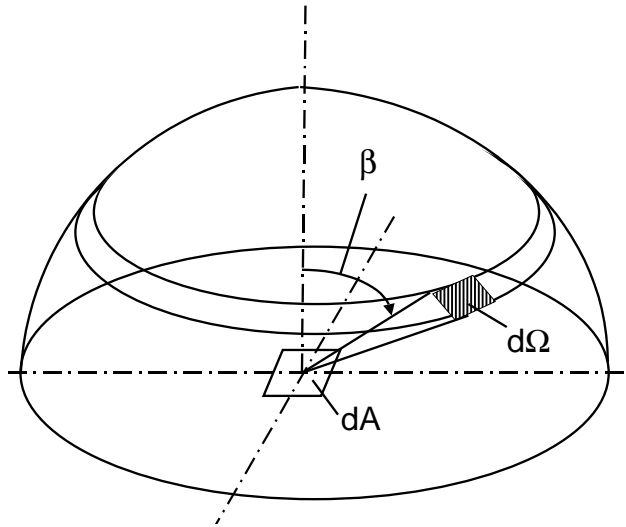


Abbildung B.1: Bezeichnungen für Winkel und Flächen bei der Strahlung in einen Halbraum

läßt sich daraus die in den Halbraum abgestrahlte Leistung des Flächenelementes berechnen, die gleichzeitig die gesamte abgestrahlte Abstrahlung des infinitesimalen Flächenelementes dA_1 darstellt, da der andere Halbraum nicht von Wärmestrahlen von dA_1 erreicht werden kann:

$$\begin{aligned}
 \dot{q}_{em} &= \frac{d\dot{Q}_{em}}{dA_1} = \int_0^{2\pi} I \cos \beta d\Omega = \int_0^{2\pi} \int_0^{\frac{\pi}{2}} I \cos \beta \sin \beta d\beta d\varphi \\
 &= I \int_0^{2\pi} \frac{1}{2} \sin^2 \beta \Big|_0^{\frac{\pi}{2}} d\varphi \tag{B.5}
 \end{aligned}$$

Zusammengefaßt ergibt das:

$$\dot{q}_{em} = I \pi \tag{B.6}$$

Das Beer'sche Gesetz beschreibt die Abnahme dI der Intensität entlang einer Strecke ds mit Hilfe des Absorptionskoeffizienten K , der von der Temperatur und vom Partialdruck des absorbierenden Mediums abhängt:

$$dI = -K I ds \tag{B.7}$$

Daraus läßt sich die absorbierte Intensität entlang einer Strecke s , auf der der Absorptionskoeffizient K konstant ist, berechnen.

$$I_0 - I = I_0 (1 - e^{-K s}) \tag{B.8}$$

Der Absorptionsgrad α ist dann als dimensionslose, absorbierte Intensität zu verstehen:

$$\alpha = \frac{I_0 - I}{I_0} = 1 - e^{-K s} \quad (\text{B.9})$$

Neben dem Absorptionsgrad spielt der Emissionsgrad ε eine wesentliche Rolle. Er setzt die reale Emissionsleistung \dot{q}_{em} eines Körpers ins Verhältnis zur Emissionsleistung eines schwarzen Strahlers gleicher Temperatur T .

$$\varepsilon = \frac{\dot{q}_{em}}{\sigma T^4} \quad (\text{B.10})$$

Hierin ist $\sigma = 5,67 \cdot 10^{-8} \text{ W}/(\text{m}^2 \text{ K}^4)$ die Stefan–Boltzmann–Konstante. Für die hier betrachteten diffus grauen Strahler (Gase und Körper) sind Emissions– und Absorptionsgrade von der Wellenlänge der Strahlung unabhängig. Außerdem sind bei diffus grauen Strahlern Emissionsgrad und Absorptionsgrad gleich.

$$\varepsilon = \alpha = \frac{I_0 - I}{I_0} = 1 - e^{-K s} \quad (\text{B.11})$$

B.2 Strahlungskennwerte von Gas und Partikeln

Zur Berechnung der Wärmeströme werden unter der zuvor gemachten Annahme grauer Strahler nur die Emissionsgrade von Gas und Partikeln benötigt.

Für die einzelnen **Gasspezies** sind die Emissionsgrade in Diagrammen als Funktion der Gastemperatur und des Produktes aus Schichtdicke und Gaspartialdruck abgelegt.

$$\varepsilon_k = \varepsilon_k(T_G, p_k s) \quad (\text{B.12})$$

Der Index k bezeichnet die Gasspezies. Für die vorliegende Arbeit wurden nur H_2O und CO_2 als absorbierende Gase berücksichtigt, deren Daten aus den in [50] angegebenen Diagrammen für 1 bar Gesamtdruck ermittelt wurden (Abb. B.2 und B.3). Höhere Drücke sowie die Änderungen durch das gleichzeitige Vorhandensein von H_2O und CO_2 werden über in [47] dargestellte Korrekturfaktoren $f_{p,\text{H}_2\text{O}}$ und f_{p,CO_2} sowie einen Korrektur-emissionsgrad $\Delta\varepsilon$ berücksichtigt.

$$\varepsilon = f_{p,\text{H}_2\text{O}} \varepsilon_{\text{H}_2\text{O}} + f_{p,\text{CO}_2} \varepsilon_{\text{CO}_2} + \Delta\varepsilon \quad (\text{B.13})$$

Für die numerische Berechnung wurden die Kurven in den Diagrammen für die Emissionsgrade und die Druckkorrekturfaktoren durch analytische Formeln angenähert. Die

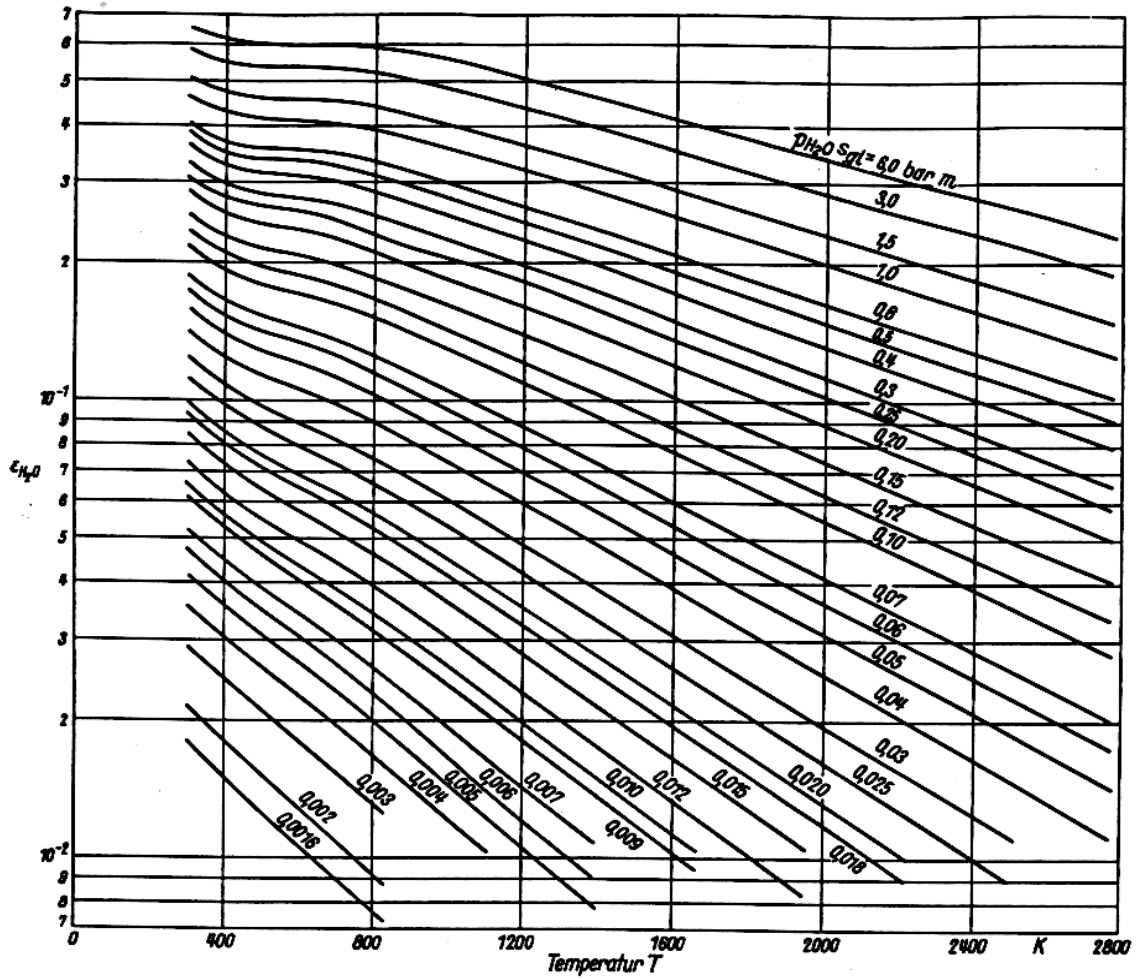


Abbildung B.2: Diagramm zur Bestimmung des Emissionsgrades von H_2O in Abhängigkeit von Temperatur und dem Produkt aus Schichtdicke und Partialdruck nach Hottel und Egbert [52].

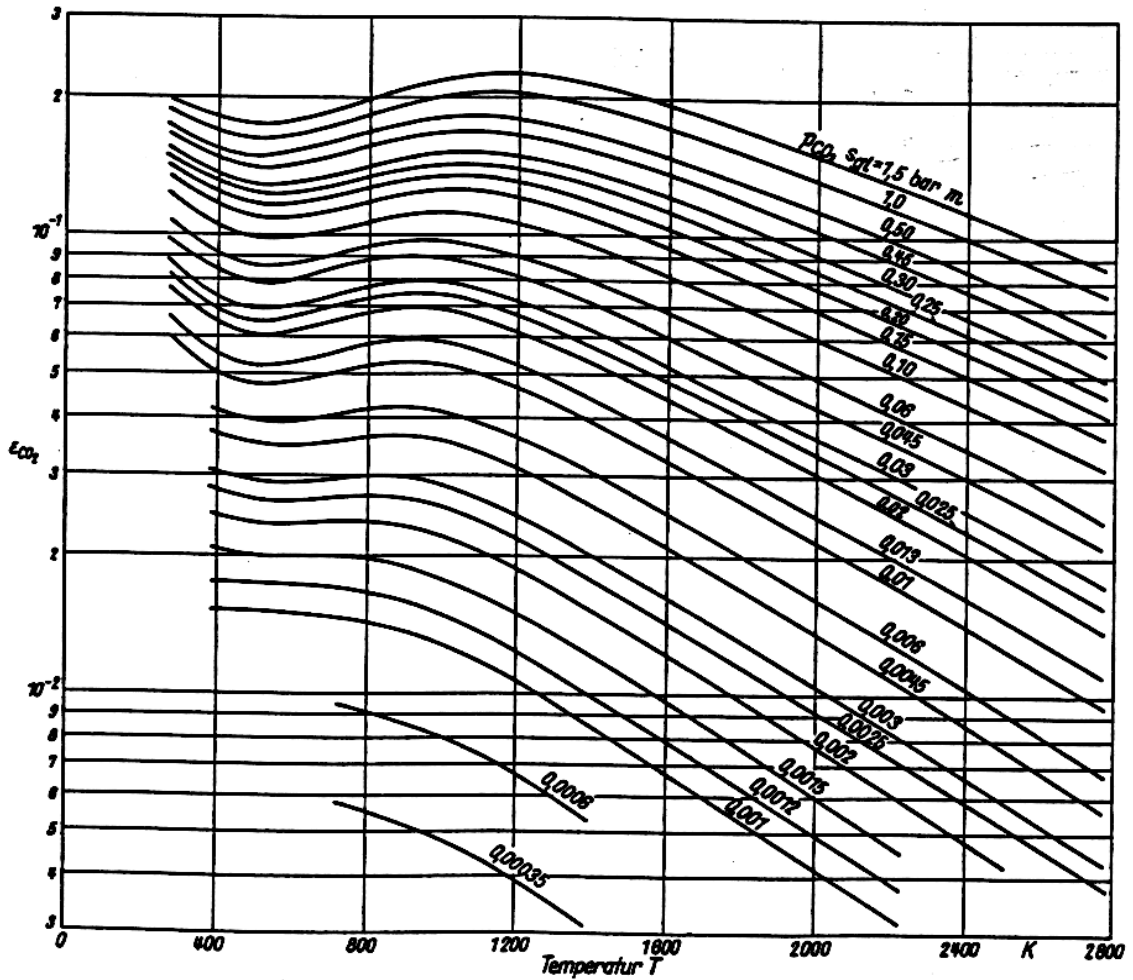


Abbildung B.3: Diagramm zur Bestimmung des Emissionsgrades von CO_2 in Abhängigkeit von Temperatur und dem Produkt aus Schichtdicke und Partialdruck nach Hottel und Egbert [52].

Korrekturremissionsgrade wurden durch lineare Interpolation zwischen diskretisierten Werten der Kurvenverläufe berechnet [51].

Bei den Strahlungseigenschaften der **Kohlenstoffpartikel** ist neben Absorption und Emission i.a. die Streuung der Strahlung von Bedeutung. Ihre Effekte werden bei der Berechnung des Partikelemissionsgrades ε_P berücksichtigt. Für die insgesamt emittierte Strahlung ist die Partikelbeladung ein wesentlicher Parameter. Hohe Beladungen führen zu einem hohen Absorptionsvermögen des Gas/Partikel-Gemisches in Verbindung mit einem hohen Anteil an rückwärtsgerichteter Streuung. Die Aufteilung zwischen Streuung und Absorption ist über die Mie-Theorie berechenbar, die bei

$$p_S = \frac{\pi D_P}{\lambda} > 5 \quad (\text{B.14})$$

gilt. Bei $p_S < 1$ befindet man sich im Bereich der Rayleigh-Streuung, dazwischen liegt ein Übergangsbereich. D_P bezeichnet den Partikeldurchmesser, λ die Wellenlänge der auftreffenden Strahlung.

Für die untersuchten Fälle ergeben sich für Wellenlängen $\lambda = 0,1..100 \mu\text{m}$ die in der folgenden Tabelle aufgeführten Kennzahlen p_S :

D_P [μm]	p_S
0,369	11,6 .. 0,0116
3,69	116 .. 0,116
36,9	1160 .. 1,16

Die Fälle liegen zum größten Teil im Bereich der Mie-Theorie, die deshalb in dieser Arbeit zur Berechnung von Emissionsgrad ε_P und Absorptionskoeffizient K_P der Partikel eingesetzt wurde. Der Partikelemissionsgrad ε_P wurde schließlich unter Berücksichtigung der rückwärts gerichteten Streuung nach der folgenden Formel berechnet:

$$\varepsilon_P = \left(1 - \frac{\zeta - 1}{\zeta + 1}\right) \frac{1 - \exp(-\phi)}{1 - \frac{\zeta - 1}{\zeta + 1} \exp(-\phi)} \quad (\text{B.15})$$

mit

$$\zeta = \sqrt{1 + \frac{2 Q_{rstr}}{Q_{abs}}} \quad (\text{B.16})$$

$$\phi = Q_{abs} \frac{3 \rho_P s \zeta}{2 \rho_P^0 D_P} \quad (\text{B.17})$$

D_P ist der Partikeldurchmesser. Die Partikeldichte ρ_P ist die auf das Gesamtvolumen $V = V_G + V_P$ bezogene Partikelmasse:

$$\rho_P = n_P \rho_P^0 \frac{\pi}{6} D_P^3 \quad (\text{B.18})$$

Q_{rstr} und Q_{abs} stellen die relativen Wirkungsquerschnitte bezüglich Rückwärtsstreuung und Absorption dar. In ihnen sind die optischen Eigenschaften verschiedener Staubpartikel enthalten, die anhand von Meßwerten und durch iterative Rechnungen nach der Mie-Theorie als Funktion des Partikeldurchmessers bestimmt und in [53] dargestellt sind.

In den folgenden Abschnitten werden u.a. die Absorptionskoeffizienten K_G und K_P von Gas und Partikeln verwendet. Sie berechnen sich entsprechend Gleichung B.11 aus der Schichtdicke s und den Emissionskoeffizienten ε_G und ε_P von Gas und Partikeln:

$$K_G = \frac{\ln(1 - \varepsilon_G)}{-s} \quad K_P = \frac{\ln(1 - \varepsilon_P)}{-s} \quad (\text{B.19})$$

B.3 Emittierte Strahlung

Benötigt werden Gleichungen zur Berechnung der emittierten Strahlungsenergieströme von Gas und Partikeln aus den einzelnen Zellen sowie die von den Behälterwänden emittierte Strahlungsleistung.

Gesamtemission eines infinitesimalen, strahlungsdurchlässigen Volumens dV

Mit Hilfe der folgenden Gedankenschritte wird eine Berechnungsformel für die von einem Volumen dV in alle Raumrichtungen von Gas bzw. Partikeln abgegebene Strahlungsleistung hergeleitet. Abbildung B.4 zeigt die dazu angenommene Konfiguration.

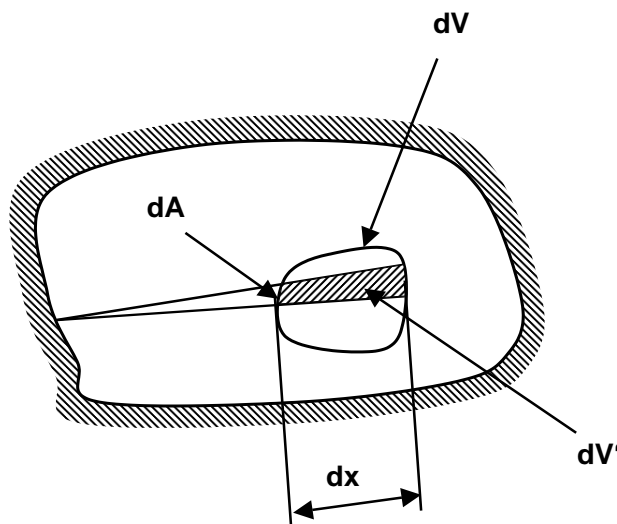


Abbildung B.4: Volumenelement dV in einem abgeschlossenen Raum mit schwarz strahlenden Wänden. Ein von der Wand ausgehendes Lichtstrahl durchdringt das Teilvolumen $dV' = dA \, dx$ von dV .

- Ein mit einem strahlungsdurchlässigen Medium gefülltes Volumenelement dV befindet sich in einem abgeschlossenen Behälter, dessen Wände schwarze Körper sind. Zwischen dem Volumen dV und den Wänden findet keine Absorption statt. Das Medium in dV ist ein graues Medium. Das System befindet sich im thermischen Gleichgewicht, d.h. die Temperaturen von Wänden und dV sind gleich.
- Mit $\dot{Q}_{em,dV}$ wird der vom infinitesimalen Volumen dV insgesamt in seine Umgebung durch Wärmestrahlung abgegebene Energiestrom bezeichnet.
- Die Intensität, die auf das Volumen dV einstrahlt, ist die Intensität I_s der schwarz strahlenden Wände, die naturgemäß keine Strahlung reflektieren.
- Betrachtet wird ein von der Behälterwand unter dem Raumwinkel $d\Omega$ ausgehendes Strahlungsbündel, das das Volumen dV durchquert. Das Strahlungsbündel tritt durch die Fläche dA in das Volumen dV mit der Intensität I_s ein und durchläuft es auf der Strecke dx . Das von diesem Strahlungsbündel durchleuchtete Teilvolumen von dV ist $dV' = dA dx$. Die durch dieses Bündel im Volumen absorbierte Strahlungsleistung ist dann:

$$I_s dA d\Omega K dx = I_s d\Omega K dV' \quad (\text{B.20})$$

- Die im ganzen Volumen absorbierte Strahlungsleistung aus dem Raumwinkel $d\Omega$ ist:

$$K I_s d\Omega \int_{dV} dV' = K I_s d\Omega dV \quad (\text{B.21})$$

- Die aus allen Raumrichtungen ($\Omega = 4\pi$) absorbierte Strahlung ist dann:

$$\dot{Q}_{abs,dV} = K I_s 4\pi dV \quad (\text{B.22})$$

- Die Intensität einer schwarz strahlenden Oberfläche kann nach Gleichung (B.6) und mit Hilfe des Stefan–Boltzmann–Gesetzes durch

$$I_s = \frac{\dot{q}_{em,s}}{\pi} = \frac{\sigma T^4}{\pi} \quad (\text{B.23})$$

ersetzt werden. Zusammen mit der Gleichheit von absorbierter und emittierter Strahlung aufgrund des thermischen Gleichgewichtes folgt:

$$\dot{Q}_{em,dV} = \dot{Q}_{abs,dV} = 4 K \sigma T^4 dV \quad (\text{B.24})$$

Hiermit lassen sich die Emissionen \dot{Q}_{em,G_j} und \dot{Q}_{em,P_j} von Gas und Partikeln in Zelle j folgendermaßen aufschreiben:

$$\dot{Q}_{em,G_j} = 4 K_{G_j} \Delta V_j \sigma T_{G_j}^4 \quad (\text{B.25})$$

$$\dot{Q}_{em,P_j} = 4 K_{P_j} \Delta V_j \sigma T_{P_j}^4 \quad (\text{B.26})$$

Für die in den Gleichungen B.1 und B.2 benötigten volumenbezogenen Emissionsenergieströme folgt dann:

$$\dot{q}_{em,G_j} = 4 K_{G_j} \sigma T_{G_j}^4 \quad (\text{B.27})$$

$$\dot{q}_{em,P_j} = 4 K_{P_j} \sigma T_{P_j}^4 \quad (\text{B.28})$$

Der für die Absorptionsenergieströme im folgenden Unterabschnitt außerdem benötigte Wandemissionsterm \dot{Q}_{em,W_m} berechnet sich aus Wandemissionsgrad ε_{W_m} , Wandfläche A_{W_m} und Wandtemperatur T_{W_m} nach dem Stefan–Boltzmann–Gesetz:

$$\dot{Q}_{em,W_m} = \varepsilon_{W_m} A_{W_m} \sigma T_{W_m}^4 \quad (\text{B.29})$$

B.4 Absorbierte Strahlung

Für die Berechnung der Strahlungsenergieströme \dot{q}_{rad,G_j} und \dot{q}_{rad,P_j} werden nach Gl. B.1 und B.2 neben den emittierten Strahlungsenergieströmen die volumenbezogenen, absorbierten Strahlungswärmeströme \dot{q}_{abs,G_j} und \dot{q}_{abs,P_j} benötigt, die vom Gas und von den Partikeln getrennt in jeder Zelle absorbiert werden. Im folgenden wird die Bestimmung der in einer Zelle j absorbierten Strahlungsenergieströme \dot{Q}_{abs,G_j} und \dot{Q}_{abs,P_j} (s. Gleichungen B.63 und B.64) erläutert, aus denen sich die benötigten volumenbezogenen Größen \dot{q}_{abs,G_j} und \dot{q}_{abs,P_j} durch Division durch das Zellvolumen ΔV_j ergeben:

$$\dot{q}_{abs,G_j} = \frac{\dot{Q}_{abs,G_j}}{\Delta V_j} \quad (\text{B.30})$$

$$\dot{q}_{abs,P_j} = \frac{\dot{Q}_{abs,P_j}}{\Delta V_j} \quad (\text{B.31})$$

In diesen Termen soll nicht nur die Strahlungsenergie berücksichtigt werden, die direkt von einer Zelle i auf eine Zelle j einstrahlt und dort absorbiert wird, sondern zusätzlich der Strahlungsenergieanteil, der durch Zelle j transmittiert, von den Behälterwänden beliebig oft reflektiert und dann erst in Zelle j absorbiert wird (Abb. B.5). Mit Hilfe der

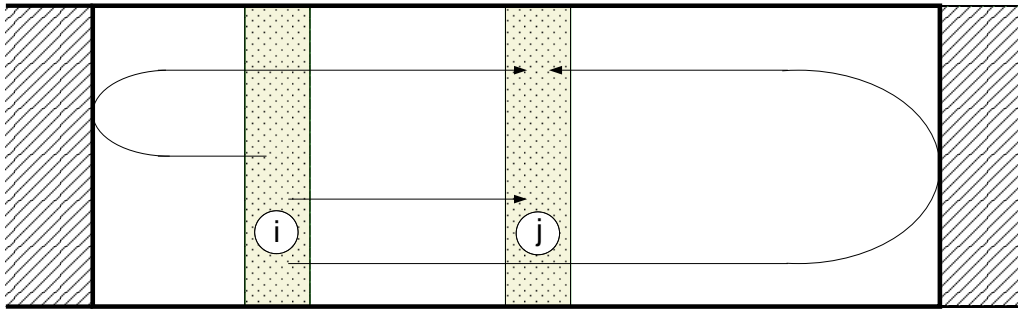


Abbildung B.5: Zelle j empfängt Strahlung direkt von Zelle i oder indirekt über Reflexionen der Strahlung von Zelle i an den Wänden. Nicht absorbierte Strahlungsanteile laufen so lange im Gefäß hin und her, bis die komplette Strahlung absorbiert worden ist. Alle anderen Zellen wirken bei der Berechnung des Strahlungsenergieflusses von Zelle i in Zelle j nur strahlungsabsorbierend.

Zonenmethode von Hottel und Sarofim [31] und den dort eingeführten totalen Austauschflächen lassen sich diese Strahlungsenergieströme bestimmen, von denen die auf **direktem** Wege empfangenen und absorbierten Strahlungsenergieströme naturgemäß ein Teil sind. Letztere werden bei Hottel und Sarofim mit Hilfe der direkten Austauschflächen berechnet. Folglich setzen sich die totalen Austauschflächen aus den direkten Austauschflächen und einem Anteil, der die wiederholten Behälterwandreflexionen berücksichtigt, zusammen. Der auch mögliche Berechnungsweg der auf direktem Wege emittierten und absorbierten Strahlungsenergieströme über gleichwertige Schichtdicken wird hier nicht weiter erläutert.

Direkte Austauschflächen

Zur Berechnung der auf direktem Weg ausgetauschten Strahlung ist es sinnvoll, zunächst die **direkten Austauschflächen** einzuführen, was anhand des Strahlungsenergiestromes $\dot{Q}_{d,W_i W_{i+1}}$, der durch eine mit Gas und Partikeln gefüllte Zelle i von einer Zellgrenzfläche zur anderen durchgelassen (transmittiert) wird, geschehen kann. Hottel und Sarofim [31] geben für diesen Energiestrom an:

$$\dot{Q}_{d,W_i W_{i+1}} = a_{W_i W_{i+1}} \sigma T_{W_i}^4 \quad (\text{B.32})$$

Der Faktor $a_{W_i W_{i+1}}$ zwischen schwarzer Emission der Zellgrenzfläche und der von der anderen Wand empfangenen Strahlungsleistung wird als direkte Austauschfläche bezeichnet und berechnet sich für zwei beliebig zueinander liegende Flächen A_i und A_j nach der For-

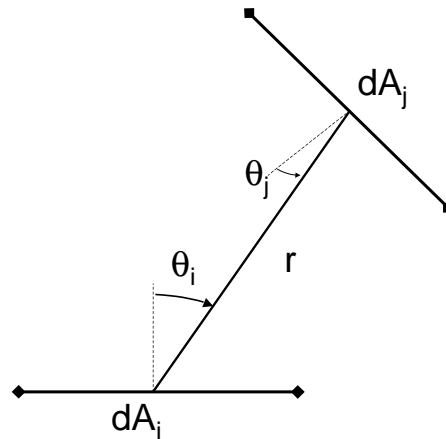


Abbildung B.6: Geometrische Verhältnisse für die Berechnung des Strahlungsenergieaustausches zwischen Wandelementen

mel:

$$a_{A_i A_j} = \int_{A_i} \int_{A_j} \frac{dA_i \cos \theta_i dA_j \cos \theta_j \tau(r)}{\pi r^2} \quad (\text{B.33})$$

In dieser Formel ist r die Abstandsfunktion zwischen den Flächen (Abb. B.4), und $\tau(r)$ ist die Transmissivitätsfunktion

$$\tau(r) = \exp \left[- \int_0^r K(r) dr \right], \quad (\text{B.34})$$

wobei der K der Absorptionskoeffizient des Mediums zwischen Strahlungssender und Strahlungsempfänger ist. Wenn Strahlungssender- und -empfängerfläche nicht direkt aneinander grenzen, ist K also der Absorptionskoeffizient des dazwischenliegenden Gas/Partikel-Gemisches. Bemerkenswert ist die Symmetrie der Formel für die direkte Austauschfläche, d.h. eine Vertauschung von Strahlungssender- und Empfängerfläche führt auf die gleiche direkte Austauschfläche $a_{A_i A_j}$.

Für den in der vorliegenden Arbeit untersuchten Fall zweier zueinander paralleler, ebener, unendlich ausgedehnter Zellgrenzflächen W_i und W_{i+1} mit den differentiellen Flächenelementen dA_i und dA_j wird die direkte Austauschfläche:

$$a_{W_i W_{i+1}} = \int_{W_i} \int_{W_j} \frac{dA_i \cos \theta_i dA_j \cos \theta_j \tau(r)}{\pi r^2} \quad (\text{B.35})$$

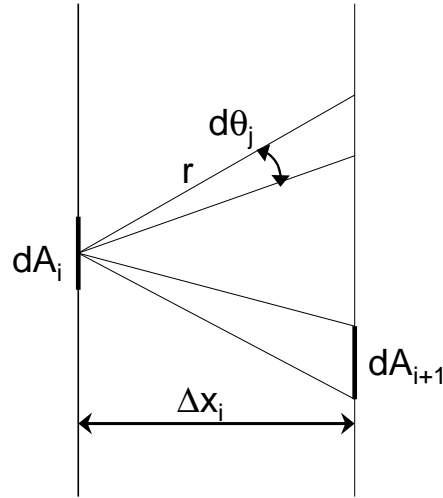


Abbildung B.7: Bezeichnungen für die Integration zur Berechnung der direkten Austauschflächen zwischen zwei parallelen Wandelementen

Zur Durchführung der Integrationen werden die Flächen dA_i , die sich im Abstand r von Flächenelement dA_j befinden, als Kreisringe mit dem Umfang $2\pi r \sin \theta$ und der Breite $r d\theta / \cos \theta$ betrachtet (Abb. B.7). θ ist der Öffnungswinkel des Kegels, der durch die Spitze dA_j und den Kreisring dA_i bestimmt wird. Der Abstand r läßt sich mit dem Kegelwinkel θ und der Zellbreite Δx_i formulieren: $r = \Delta x_i / \cos \theta$. Für die Kreisringfläche ergibt sich $dA_i = 2\pi r^2 \tan \theta d\theta$, und es folgt:

$$a_{W_i W_{i+1}} = \int_{W_j} \int_0^{\pi/2} 2 \sin \theta \cos \theta e^{-K \Delta x_i / \cos \theta} d\theta dA_j \quad (\text{B.36})$$

Die direkte Austauschfläche wird dann:

$$a_{W_i W_{i+1}} = A_j \int_0^{\pi/2} 2 \sin \theta \cos \theta e^{-K \Delta x_i / \cos \theta} d\theta \quad (\text{B.37})$$

Mit der Substitution $y = \frac{1}{\cos \theta}$ folgt $\sin \theta \cos \theta d\theta = \cos^3 \theta dy = \frac{dy}{y^3}$, so daß

$$a_{W_i W_{i+1}} = A_j 2 \int_1^{\infty} \frac{e^{-K \Delta x_i y}}{y^3} dy = A_j 2 E_3(K \Delta x_i), \quad (\text{B.38})$$

wobei K der in der Zelle i zwischen Zellgrenzfläche W_i und Zellgrenzfläche W_{i+1} konstante Absorptionskoeffizient ist. Das Integral wird auch als drittes Exponentialintegral

bezeichnet und läßt sich näherungsweise über folgende Reihe darstellen:

$$E_3(K\Delta x) = \frac{1}{2} - K\Delta x + \frac{1}{2}[0,92278 - \ln(K\Delta x)](K\Delta x)^2 - \sum_{m=3}^{\infty} \frac{(-K\Delta x)^m}{(m-2)m!} \quad (\text{B.39})$$

Ihr Verlauf ist in Abbildung B.8 dargestellt.

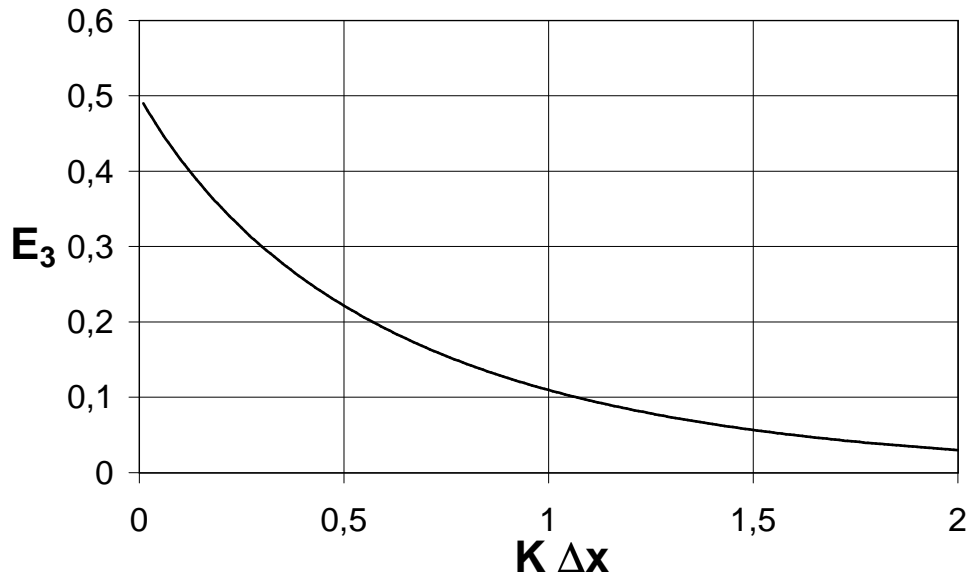


Abbildung B.8: Verlauf der Approximationsfunktion $E_3(K\Delta x)$ für das dritte Exponentialintegral $\int_1^{\infty} \exp(-K\Delta x y)y^{-3}dy$

Für die weitere Herleitung ist die Einführung einer dimensionslosen direkten Austauschfläche

$$a'_{W_i W_{i+1}} = \frac{a'_{W_i W_{i+1}}}{A_j} = 2 E_3(K\Delta x_i)$$

hilfreich. Mit ihr läßt sich der pro m^2 auf die Strahlungsempfängerfläche treffende Strahlungsenergiestrom der direkt von der unendlich ausgedehnten Zellgrenzfläche W_i kommenden Strahlung einfach darstellen:

$$\frac{\dot{Q}_{d,W_i W_{i+1}}}{A_{i+1}} = a'_{W_i W_{i+1}} \sigma T_{W_i}^4 = 2 E_3(K\Delta x_i) \sigma T_{W_i}^4 \quad (\text{B.40})$$

Anschaulich beschrieben gibt die dimensionslose direkte Austauschfläche $a'_{W_i W_{i+1}}$ den Anteil der von Zellgrenzfläche W_i an Zellgrenzfläche W_{i+1} durchgelassenen Strahlung wieder. Von der zur Zellgrenzfläche W_{i+1} durchgelassenen Strahlung wird wiederum nur der Anteil $a'_{W_{i+1} W_{i+2}}$ zur Zellgrenzfläche W_{i+2} durchgelassen, so daß $a'_{W_i W_{i+2}} = a'_{W_i W_{i+1}} \cdot a'_{W_{i+1} W_{i+2}}$ ist.

Zwischen zwei beliebigen Zellgrenzflächen W_i und W_j ist die dimensionslose direkte Austauschfläche für die hier vorliegende Geometrie also das Produkt der dimensionslosen Austauschflächen der durchquerten Zellen:

$$a'_{W_i W_j} = \prod_{k=i}^{j-1} a'_{W_k W_{k+1}} = \prod_{k=i}^{j-1} 2E_3(K_k \Delta x_k) \quad (\text{B.41})$$

Die Indizierung des Produktzeichens ist hier für den Fall $i < j$ angegeben. Für $i > j$ muß der Index k des Produktes dementsprechend von j bis $i - 1$ laufen (vgl. Nummerierung von Zellgrenzflächen und Zellen in Abb. B.9). K_k ist der Absorptionskoeffizient des Gas/Partikel-Gemisches in Zelle k . $2E_3(K_k \Delta x_k)$ ist also der durch die Zelle k durchgelassene Anteil, demnach ist $1 - 2E_3(K_k \Delta x_k)$ der in Zelle k absorbierte Anteil. Da der Gesamtabsorptionskoeffizient des Gas/Partikel-Gemisches a priori nicht bekannt ist, wird der Term $2E_3(K_k \Delta x_k)$ aus der Bedingung abgeleitet, daß die Gesamtabsorption in Zelle k sich aus den bereits bekannten Absorptionen von Gas und Partikeln zusammensetzt:

$$1 - 2E_3(K_k \Delta x_k) = [1 - 2E_3(K_{G_k} \Delta x_k)] + [1 - 2E_3(K_{P_k} \Delta x_k)] \quad (\text{B.42})$$

Für die weitere Berechnung der benötigten direkten Austauschflächen ist die Definition der von der linken Zellgrenzfläche W_i im Gas bzw. in den Partikeln derselben Zelle absorbierten Strahlungsenergieanteile, also der direkten Austauschfläche $a'_{W_i G_i}$ bzw. $a'_{W_i P_i}$, hilfreich:

$$a'_{W_i G_i} = 1 - 2E_3(K_{G_i} \Delta x_i) \quad (\text{B.43})$$

$$a'_{W_i P_i} = 1 - 2E_3(K_{P_i} \Delta x_i) \quad (\text{B.44})$$

Hiermit lassen sich die direkten Austauschflächen einer beliebigen Zellgrenzfläche W_i mit der Gasphase bzw. Partikeln der Zelle j konstruieren, indem der von Zellgrenzfläche W_i an Zellgrenzfläche W_j durchgelassene Strahlungsanteil mit dem Anteil der von Zellgrenzfläche W_j kommenden und in Zelle j absorbierten Strahlung multipliziert wird:

$$a'_{W_i G_j} = a'_{W_i W_j} \cdot a'_{W_j G_j} = \prod_{k=i}^{j-1} [2E_3(K_k \Delta x_k)] \cdot [1 - 2E_3(K_{G_j} \Delta x_j)] \quad (\text{B.45})$$

$$a'_{W_i P_j} = a'_{W_i W_j} \cdot a'_{W_j P_j} = \prod_{k=i}^{j-1} [2E_3(K_k \Delta x_k)] \cdot [1 - 2E_3(K_{P_j} \Delta x_j)] \quad (\text{B.46})$$

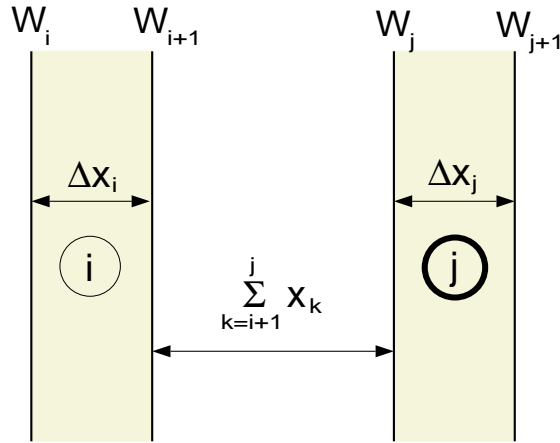


Abbildung B.9: Nomenklatur für Zell- und Zellgrenzflächennummerierung am Beispiel der Zellen i und j .

Auf gleiche Art läßt sich die direkte Austauschfläche zwischen dem Gas in Zelle i und dem Gas in Zelle j berechnen (vgl. Abbildung B.9).

$$\begin{aligned}
 a'_{G_i G_j} &= a'_{G_i W_j} \cdot a'_{W_j G_j} \\
 &= a'_{W_j G_i} \cdot a'_{W_j G_j} \\
 &= \prod_{k=i+1}^{j-1} [2E_3(K_k \Delta x_k)] [1 - 2E_3(K_{G_i} \Delta x_i)] \cdot [1 - 2E_3(K_{G_j} \Delta x_j)] \\
 &= [1 - 2E_3(K_{G_i} \Delta x_i)] [1 - 2E_3(K_{G_j} \Delta x_j)] \cdot \prod_{k=i+1}^{j-1} [2E_3(K_k \Delta x_k)] \quad (\text{B.47})
 \end{aligned}$$

Hier wurde die Symmetrie der Formeln für die Strahlungsaustauschflächen ausgenutzt:

$$a'_{W_j G_i} = a'_{G_i W_j} \quad (\text{B.48})$$

Die direkte Austauschfläche zwischen den Partikelphasen zweier verschiedener Zellen berechnet sich auf gleiche Weise:

$$a'_{P_i P_j} = [1 - 2E_3(K_{P_i} \Delta x_i)] [1 - 2E_3(K_{P_j} \Delta x_j)] \cdot \prod_{k=i+1}^{j-1} [2E_3(K_k \Delta x_k)] \quad (\text{B.49})$$

Für die direkte Austauschfläche zwischen Gas und Partikeln in verschiedenen Zellen i und j führt dies zu:

$$\begin{aligned}
 a'_{G_i P_j} &= a'_{G_i W_j} \cdot a'_{W_j P_j} = a'_{W_j G_i} \cdot a'_{W_j P_j} \\
 &= [1 - 2E_3(K_{G_i} \Delta x_i)] [1 - 2E_3(K_{P_j} \Delta x_j)] \cdot \prod_{k=i+1}^{j-1} [2E_3(K_k \Delta x_k)] \quad (\text{B.50})
 \end{aligned}$$

Per Definition soll der Strahlungswärmeaustausch zwischen Gas und Partikeln in derselben Zelle i vernachlässigt werden:

$$a'_{G_i P_i} = a'_{P_i G_i} = 0 \quad (\text{B.51})$$

Für eine Verfeinerung der Modellierung der Wärmestrahlung kann für $a'_{G_i P_i} = a'_{P_i G_i}$ ein geeignetes Absorptionsmodell eingesetzt werden.

Auch die direkten Austauschflächen für Gas und Partikel in derselben Zelle i sind nicht mit der oben gezeigten Produktbildungsmethode ableitbar. Die Eigenabsorption von Gas und Partikeln ergibt sich aus einer Bilanzierung der emittierten Energien aus einer Zelle i :

$$a'_{G_i G_i} = 4K_{G_i} \Delta x_i - a'_{G_i W_i} - a'_{G_i W_{i+1}} - a'_{G_i P_i} \quad (\text{B.52})$$

$$a'_{P_i P_i} = 4K_{P_i} \Delta x_i - a'_{P_i W_i} - a'_{P_i W_{i+1}} - a'_{P_i G_i} \quad (\text{B.53})$$

Das bedeutet, daß die Eigenabsorption die Differenz zwischen der vom Gas bzw. von den Partikeln emittierten Strahlung $4K_{G_i} \Delta x_i$ bzw. $4K_{P_i} \Delta x_i$ und den von dort an den Wänden derselben Zelle ankommenden Strahlungsenergien ist, abzüglich der Wärmeabgabe an die jeweils andere Phase in derselben Zelle, die jedoch in Gleichung (B.51) zu null festgelegt worden sind.

Totale Austauschflächen

Bei Kenntnis der totalen Austauschflächen $A_{G_i G_j}$, $A_{P_i G_j}$ usw. kann auf einfache Art der von einer Phase in der Zelle j oder einer Behälterwand insgesamt absorbierte Strahlungsenergiestrom berechnet werden, der sich aufgrund der Emission einer Phase aus der Zelle i oder von einer Behälterwand einstellt, einschließlich aller die Zelle j auf direktem Wege oder über Behälterwandreflexionen erreichenden Strahlungsenergieströme.

$$\dot{Q}_{abs, G_i G_j} = A_{G_i G_j} \sigma T_{G_i}^4 \quad (\text{B.54})$$

$$\dot{Q}_{abs, P_i G_j} = A_{P_i G_j} \sigma T_{P_i}^4 \quad (\text{B.55})$$

$$\dot{Q}_{abs, W_i G_j} = A_{W_i G_j} \sigma T_{W_i}^4 \quad (\text{B.56})$$

$$\dot{Q}_{abs, G_i P_j} = A_{G_i P_j} \sigma T_{G_i}^4 \quad (\text{B.57})$$

$$\dot{Q}_{abs, P_i P_j} = A_{P_i P_j} \sigma T_{P_i}^4 \quad (\text{B.58})$$

$$\dot{Q}_{abs, W_i P_j} = A_{W_i P_j} \sigma T_{W_i}^4 \quad (\text{B.59})$$

$$\dot{Q}_{abs, G_i W_j} = A_{G_i W_j} \sigma T_{G_i}^4 \quad (\text{B.60})$$

$$\dot{Q}_{abs, P_i W_j} = A_{P_i W_j} \sigma T_{P_i}^4 \quad (\text{B.61})$$

$$\dot{Q}_{abs, W_i W_j} = A_{W_i W_j} \sigma T_{W_i}^4 \quad (\text{B.62})$$

Die totalen Austauschflächen enthalten also

- die Emissionseigenschaften der strahlungsendenden Zelle,
- die Absorptionseigenschaften der empfangenden Zelle,
- die Transmissionseigenschaften aller von der Strahlung durchquerten Zellen,
- den Einfluß der Geometrie der Strahlungsflächen und –körper und
- die zusätzlichen Strahlungsanteile durch die Reflexionen der transmittierten Strahlung an den Behälterwänden.

Mit ihrer Hilfe läßt sich die vom Gas oder den Partikeln in einer Zelle oder einer Behälterwand insgesamt empfangene, absorbierte Strahlung \dot{Q}_{abs,G_j} , \dot{Q}_{abs,P_j} bzw. \dot{Q}_{abs,W_m} bestimmen. Die entsprechenden volumenbezogenen Größen werden hieraus nach den Gleichungen B.30 und B.31 berechnet. Strahlungsquellen sind wiederum die Behälterwände sowie Gase und Partikel in den einzelnen Zellen.

$$\begin{aligned}\dot{Q}_{abs_{G_j}} &= \sum_{i=1}^N \dot{Q}_{abs,G_i G_j} + \sum_{i=1}^N \dot{Q}_{abs,P_i G_j} + \sum_{i=1}^{N_W} \dot{Q}_{abs,W_i G_j} \\ &= \sum_{i=1}^N A_{G_i G_j} \sigma T_{G_i}^4 + \sum_{i=1}^N A_{P_i G_j} \sigma T_{P_i}^4 + \sum_{i=1}^{N_W} A_{W_i G_j} \sigma T_{W_i}^4\end{aligned}\quad (\text{B.63})$$

$$\begin{aligned}\dot{Q}_{abs_{P_j}} &= \sum_{i=1}^N \dot{Q}_{abs,G_i P_j} + \sum_{i=1}^N \dot{Q}_{abs,P_i P_j} + \sum_{i=1}^{N_W} \dot{Q}_{abs,W_i P_j} \\ &= \sum_{i=1}^N A_{G_i P_j} \sigma T_{G_i}^4 + \sum_{i=1}^N A_{P_i P_j} \sigma T_{P_i}^4 + \sum_{i=1}^{N_W} A_{W_i P_j} \sigma T_{W_i}^4\end{aligned}\quad (\text{B.64})$$

$$\begin{aligned}\dot{Q}_{abs_{W_j}} &= \sum_{i=1}^N \dot{Q}_{abs,G_i W_j} + \sum_{i=1}^N \dot{Q}_{abs,P_i W_j} + \sum_{i=1}^{N_W} \dot{Q}_{abs,W_i W_j} \\ &= \sum_{i=1}^N A_{G_i W_j} \sigma T_{G_i}^4 + \sum_{i=1}^N A_{P_i W_j} \sigma T_{P_i}^4 + \sum_{i=1}^{N_W} A_{W_i W_j} \sigma T_{W_i}^4\end{aligned}\quad (\text{B.65})$$

Die Betrachtung des Zusammenhangs zwischen direkten und totalen Austauschflächen a und A wird durch die Verwendung der **dimensionslosen** direkten und totalen Austauschflächen vereinfacht, die durch einen hochgestellten Strich gegenüber den dimensionsbehafteten Austauschflächen gekennzeichnet sind. Für die Austauschfläche zwischen der

Gasphase der Zelle i und der Gasphase der Zelle j wird die Entdimensionierung auf folgende Art erreicht, wobei A_i die Fläche des Strahlungsempfängers j ist:

$$A'_{G_i G_j} = \frac{A_{G_i G_j}}{A_j} \quad (\text{B.66})$$

Mit ihnen läßt sich nach [54] der gesuchte Zusammenhang aus der Energiebilanz für die von der Behälterwand m pro m^2 abgestrahlte Energie \dot{q}_{W_m} ($m = 1, 2$ für die linke und rechte Wand des Reaktionsgefäßes) ableiten:

$$\dot{q}_{W_m} = \varepsilon_m E_{W_m} + \rho_m \left(\sum_{\substack{n=1 \\ n \neq m}}^2 a_{W_n W_m} \dot{q}_{W_n} + \sum_{j=1}^N a'_{G_j W_m} E_{G_j} + \sum_{j=1}^N a'_{P_j W_m} E_{P_j} \right) \quad (\text{B.67})$$

ε_m und ρ_m sind der Emissionsgrad und der Reflexionsgrad der Wand m . E_{W_m} , E_{G_j} und E_{P_j} sind die jeweiligen Strahlungsleistungsdichten schwarzer Strahler bei Temperatur T_{W_m} an der Wand m und Gastemperatur T_{G_j} bzw. Partikeltemperatur T_{P_j} in Rechenzelle j :

$$\begin{aligned} E_{W_m} &= \sigma T_{W_m}^4 \\ E_{G_j} &= \sigma T_{G_j}^4 \\ E_{P_j} &= \sigma T_{P_j}^4 \end{aligned}$$

Zur Berechnung der totalen Austauschflächen werden hieraus die von Wand m bzw. n abgestrahlten Energien $\dot{q}_{G_i W_m}$ bzw. $\dot{q}_{G_i W_n}$ bestimmt, die sich für den Fall ergeben, wenn nur in Rechenzelle i die Gastemperatur $T_{G_i} \neq 0$ ist. Die Temperaturen in allen anderen Rechenzellen und der beiden Wände sind dann also null, d.h. $E_{W_m} = 0$ ($n = 1 \dots 2$), $E_{G_j} = 0$ ($j \neq i$) und $E_{P_j} = 0$ ($j = 1 \dots N$). Dann ergibt sich:

$$\dot{q}_{G_i W_m} = \rho_m \left(\sum_{\substack{n=1 \\ n \neq m}}^2 a'_{W_n W_m} \dot{q}_{G_i W_n} + a'_{G_i W_m} E_{G_i} \right) \quad \begin{array}{l} m = 1, 2 \\ i = 1, N \end{array} \quad (\text{B.68})$$

Es entsteht ein Satz von $2 \cdot N$ Gleichungen mit den $2 \cdot N$ Unbekannten $\frac{\dot{q}_{G_i W_m}}{E_{G_i}}$ ($i = 1 \dots N$ und $m = 1 \dots 2$), das nach diesen Größen aufgelöst werden kann. Nach kurzer Rechnung ergibt sich mit $a_{W_1 W_2} = a_{W_2 W_1}$:

$$\frac{\dot{q}_{G_i W_1}}{E_{G_i}} = \frac{\rho_1 (a'_{W_1 W_2} \rho_2 a'_{G_i W_2} + a'_{G_i W_1})}{1 - \rho_1 \rho_2 a'^2_{W_1 W_2}} \quad (\text{B.69})$$

$$\frac{\dot{q}_{G_i W_2}}{E_{G_i}} = \frac{\rho_2 (a'_{W_1 W_2} \rho_1 a'_{G_i W_1} + a'_{G_i W_2})}{1 - \rho_1 \rho_2 a'^2_{W_1 W_2}} \quad (\text{B.70})$$

Für die Berechnung der totalen dimensionslosen Austauschflächen wird jetzt auf ihre Definition zurückgegriffen: Die totale von Rechenzelle i emittierte Energie, die von der Wand m pro m^2 absorbiert wird, ist $A'_{G_i W_m} E_{G_i}$. Mit der Gleichheit von Emissionsgrad ε und Absorptionsgrad α bei grauen Strahlern folgt, daß auf Wand m pro m^2 die Energie $A'_{G_i W_m} E_{G_i} / \varepsilon_m$ eintrifft, von der wiederum $\rho_m A'_{G_i W_m} E_{G_i} / \varepsilon_m$ von der Wand m reflektiert wird. Da alle anderen Zellen und Wände keine Energie abstrahlen, ist diese Energie die von Wand m pro m^2 aufgrund der Strahlung von Zelle i abgestrahlte Energie $\dot{q}_{G_i W_m}$:

$$\dot{q}_{G_i W_m} = \frac{A'_{G_i W_m} E_{G_i}}{\varepsilon_m} \rho_m \quad (\text{B.71})$$

woraus sich durch Umformung die totale Austauschfläche $A'_{G_i W_m}$ ergibt:

$$A'_{G_i W_m} = \frac{\varepsilon_m}{\rho_m} \frac{\dot{q}_{G_i W_m}}{E_{G_i}} \quad (\text{B.72})$$

Die totale Austauschfläche von Wand m zu Rechenzelle i läßt sich durch die Ausnutzung der Eigenschaft, daß bei überall gleicher Temperatur der Strahlungsaustausch zwischen Rechenzelle i und Wand m — und umgekehrt — null sein muß, bestimmen. Aus

$$A'_{G_i W_m} E_{G_i} = A'_{W_m G_i} E_{W_m} = 0 \quad (\text{B.73})$$

folgt mit $E_{G_i} = E_{W_m}$ (weil $T_{G_i} = T_{W_m} = \text{const.}$):

$$A'_{W_m G_i} = A'_{G_i W_m} \quad (\text{B.74})$$

Die totale Austauschfläche zwischen zwei Rechenzellen i und j ergibt sich dann durch die Überlegung, daß die durch die Zelle j aufgenommene Energie gleich der Summe aus der direkt von Zelle i eintreffenden Energie und der von Zelle i kommenden, an den Wänden reflektierten Energie ist:

$$A'_{G_i G_j} E_{G_i} = a'_{G_i G_j} E_{G_i} + \sum_{m=1}^2 a'_{W_m G_j} \dot{q}_{G_i W_m} \quad (\text{B.75})$$

Durch Division der Gleichung durch E_{G_i} ergibt sich die dimensionslose totale Austauschfläche; die dann auf der rechten Seite der Gleichung auftretenden Größen sind bekannt. Die dimensionslosen totalen Austauschflächen $A'_{G_i P_j}$, $A'_{P_i G_j}$ und $A'_{P_i P_j}$ ergeben sich durch umbenennen.

Die dimensionslosen totalen Austauschflächen $A'_{W_n W_m}$ zwischen den Wänden ($m = 1, 2$ und $n = 1, 2$) werden schließlich aus der Energiebilanz für die von Wand m aufgrund einer allein strahlenden Wand n abgegebene Strahlung $\dot{q}_{W_n W_m}$ bestimmt:

$$\dot{q}_{W_n W_m} = \frac{A'_{W_n W_m} E_{W_n}}{\varepsilon_m} \rho_m + \delta_m^n \varepsilon_n E_{W_n} \quad (\text{B.76})$$

δ_m^n ist das Kronecker-Symbol, für das gilt:

$$\delta_m^n = \begin{cases} 0 & \text{für } m \neq n \\ 1 & \text{für } m = n \end{cases} \quad (\text{B.77})$$

Die Gleichung (B.76) läßt sich nach $A'_{W_n W_m}$ auflösen. Die Abstrahlung der Wand m aufgrund der allein strahlenden Wand n ergibt sich aus Gleichung (B.67), wenn dort $E_{W_m} = 0$ und alle $E_{G_j} = 0$ und $E_{P_j} = 0$ gesetzt werden:

$$\dot{q}_{W_n W_m} = \delta_m^n \varepsilon_m E_{W_m} + \rho_m a'_{W_1 W_2} \dot{q}_{W_n W_1} \quad (\text{B.78})$$

$$\Leftrightarrow \frac{\dot{q}_{W_n W_m}}{E_{W_n}} = \delta_m^n \varepsilon_m + \rho_m a'_{W_1 W_2} \frac{\dot{q}_{W_n W_1}}{E_{W_n}} \quad (n = 1 \dots 2, m = 1 \dots 2) \quad (\text{B.79})$$

mit

$$l = \begin{cases} 1 & \text{wenn } m = 2 \\ 2 & \text{wenn } m = 1 \end{cases}$$

Aus diesen vier Gleichungen ergeben sich die vier in den Gleichungen B.76 benötigten dimensionslosen Energieströme $\frac{\dot{q}_{W_n W_m}}{E_{G_n}}$.

Insgesamt ergeben sich dann die nachfolgend aufgeführten Berechnungsformeln für die dimensionslosen totalen Austauschflächen:

$$A'_{W_1 W_1} = \frac{\varepsilon_1^2 \rho_2 a'^2_{W_1 W_2}}{1 - \rho_1 \rho_2 a'^2_{W_1 W_2}} \quad (\text{B.80})$$

$$A'_{W_1 W_2} = A'_{W_2 W_1} = \frac{\varepsilon_1 \varepsilon_2 a'_{W_1 W_2}}{1 - \rho_1 \rho_2 a'^2_{W_1 W_2}} \quad (\text{B.81})$$

$$A'_{W_1 G_i} = A'_{G_i W_1} = \frac{\varepsilon_1 (a'_{W_1 G_i} + \rho_2 a'_{W_1 W_2} a'_{W_2 G_i})}{1 - \rho_1 \rho_2 a'^2_{W_1 W_2}} \quad (\text{B.82})$$

$$A'_{W_2 G_i} = A'_{G_i W_2} = \frac{\varepsilon_2 (a'_{W_2 G_i} + \rho_1 a'_{W_1 W_2} a'_{W_1 G_i})}{1 - \rho_1 \rho_2 a'^2_{W_1 W_2}} \quad (\text{B.83})$$

$$A'_{W_1 P_i} = A'_{P_i W_1} = \frac{\varepsilon_1 (a'_{W_1 P_i} + \rho_2 a'_{W_1 W_2} a'_{W_2 P_i})}{1 - \rho_1 \rho_2 a'^2_{W_1 W_2}} \quad (\text{B.84})$$

$$A'_{W_2P_i} = A'_{P_iW_2} = \frac{\varepsilon_2(a'_{W_2P_i} + \rho_1 a'_{W_1W_2} a'_{W_1P_i})}{1 - \rho_1\rho_2 a'^2_{W_1W_2}} \quad (\text{B.85})$$

$$A'_{G_iG_j} = A'_{G_jG_i} = a'_{G_iG_j} + \frac{a'_{W_1G_j}\rho_1(a'_{W_1G_i} + \rho_2 a'_{W_1W_2} a'_{W_2G_i})}{1 - \rho_1\rho_2 a'^2_{W_1W_2}} + \frac{a'_{W_2G_j}\rho_2(a'_{W_2G_i} + \rho_1 a'_{W_1W_2} a'_{W_1G_i})}{1 - \rho_1\rho_2 a'^2_{W_1W_2}} \quad (\text{B.86})$$

$$A'_{P_iP_j} = A'_{P_jP_i} = a'_{P_iP_j} + \frac{a'_{W_1P_j}\rho_1(a'_{W_1P_i} + \rho_2 a'_{W_1W_2} a'_{W_2P_i})}{1 - \rho_1\rho_2 a'^2_{W_1W_2}} + \frac{a'_{W_2P_j}\rho_2(a'_{W_2P_i} + \rho_1 a'_{W_1W_2} a'_{W_1P_i})}{1 - \rho_1\rho_2 a'^2_{W_1W_2}} \quad (\text{B.87})$$

$$A'_{G_iP_j} = A'_{P_jG_i} = a'_{G_iP_j} + \frac{a'_{W_1P_j}\rho_1(a'_{W_1G_i} + \rho_2 a'_{W_1W_2} a'_{W_2G_i})}{1 - \rho_1\rho_2 a'^2_{W_1W_2}} + \frac{a'_{W_2P_j}\rho_2(a'_{W_2G_i} + \rho_1 a'_{W_1W_2} a'_{W_1G_i})}{1 - \rho_1\rho_2 a'^2_{W_1W_2}} \quad (\text{B.88})$$

Anhang C

Zellwandflüsse nach Harten und Yee

Beim Harten/Yee–Verfahren [33] sind die numerischen Flüsse an der Zellgrenze $i + 1/2$ nach folgendem Schema aufgebaut:

$$\mathbf{F}_{i+1/2} = \frac{1}{2} \left(\mathbf{F}_i + \mathbf{F}_{i+1} + \overline{\mathbf{R}}_{i+1/2} \overline{\Phi}_{i+1/2} \right) \quad (\text{C.1})$$

Die Flüsse \mathbf{F}_i und \mathbf{F}_{i+1} werden mit den Zellmittelwerten der links und rechts der Zellgrenze liegenden Zellen gebildet. Der Term $\overline{\mathbf{R}}_{i+1/2} \overline{\Phi}_{i+1/2}$ enthält die Flußkorrektur zur Berücksichtigung der Einflußrichtungen in der Strömung. Die Striche über den Buchstaben zeigen an, daß diese Terme mit Hilfe der Roe–Mittelwerte (Anhang D) ausgewertet werden. $\overline{\mathbf{R}}_{i+1/2}$ ist Rechtseigenvektormatrix der Jacobi–Matrix $\mathbf{A} = \partial \mathbf{F} / \partial \mathbf{U}$. Die Jacobi–Matrix \mathbf{A} hat die Eigenwerte $\lambda^{(l)}$. Die Berechnungsformel für die Komponenten $\overline{\Phi}_{i+1/2}^{(l)}$ des Vektors $\overline{\Phi}_{i+1/2}$ lautet:

$$\overline{\Phi}_{i+1/2}^{(l)} = \begin{aligned} & \sigma_i(\lambda_{i+1/2}^{(l)}) (g_{i+1}^{(l)} + g_i^{(l)}) \\ & - \psi(\lambda_{i+1/2}^{(l)} + \beta_{i+1/2}^{(l)}) \overline{\alpha}_{i+1/2}^{(l)} \end{aligned} \quad (\text{C.2})$$

$\sigma_i(z)$ und $\psi(z)$ sind Funktionen für Zeit- und Entropiekorrektur:

$$\sigma_i(z) = \frac{1}{2} \left[\psi(z) - \frac{2\Delta t}{\Delta x_i + \Delta x_{i+1}} z^2 \right] \quad (\text{C.3})$$

$$\psi(z) = \begin{cases} |z| & |z| \geq \delta \\ \frac{z^2 + \delta^2}{2\delta} & |z| < \delta \end{cases} \quad (\text{C.4})$$

Für die empirische Schranke δ der Entropiekorrektur erwies sich der von He in [55] verwendete Wert von $\delta = 10^{-7}$ auch für die Berechnungen dieser Arbeit als zielführend. Des weiteren werden die Wellenstärken $\overline{\alpha_{i+1/2}^{(l)}}$ und die Eigenwerte $\lambda^{(l)}$ der Jacobi-Matrix \mathbf{A} benötigt. Sie sind die Komponenten des Vektors der charakterischen Variablen $\overline{\mathbf{R}_{i+1/2}^{-1}} \overline{\Delta \mathbf{q}}$ des Roe-Verfahrens. Für eine bessere Übersichtlichkeit wird der Index $i + 1/2$ bei den Größen $\Delta \rho$, Δp und Δu in der folgenden Gleichung nicht geschrieben.

$$\overline{\alpha_{i+1/2}} = \begin{pmatrix} \overline{\alpha_{i+1/2}^{(1)}} \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \overline{\alpha_{i+1/2}^{(K)}} \\ \overline{\alpha_{i+1/2}^{(K+1)}} \\ \overline{\alpha_{i+1/2}^{(K+2)}} \end{pmatrix} = \overline{\mathbf{R}_{i+1/2}^{-1}} \overline{\Delta \mathbf{q}_{i+1/2}} = \begin{pmatrix} \Delta \rho^{(1)} - \overline{Y^{(1)}} \Delta p / \overline{c}^2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \Delta \rho^{(K)} - \overline{Y^{(K)}} \Delta p / \overline{c}^2 \\ \frac{1}{2}(\Delta p / \overline{c}^2 + \overline{\rho} \Delta u / \overline{c}) \\ \frac{1}{2}(\Delta p / \overline{c}^2 - \overline{\rho} \Delta u / \overline{c}) \end{pmatrix} \quad (\text{C.5})$$

Die Größen $\Delta \rho^{(k)}$, Δp und Δu sind als Differenzen der benachbarten Zustände zu bilden:

$$\Delta \rho^{(k)} = \Delta \rho_{i+1/2}^{(k)} = \rho_{i+1}^{(k)} - \rho_i^{(k)} \quad (\text{C.6})$$

$$\Delta p = \Delta p_{i+1/2} = p_{i+1} - p_i \quad (\text{C.7})$$

$$\Delta u = \Delta u_{i+1/2} = u_{i+1} - u_i \quad (\text{C.8})$$

Hinter der Größe $g_i^{(l)}$ verbergen sich limitierte Wellenstärken. Sie werden, je nach Wahl der Limitierfunktion, auf verschiedene Art aus den Wellenstärken $\overline{\alpha_{i-1/2}^{(l)}}$ und $\overline{\alpha_{i+1/2}^{(l)}}$ gebildet:

$$g_i^{(l)} = \text{Limitierfunktion}(\overline{\alpha_{i-1/2}^{(l)}}, \overline{\alpha_{i+1/2}^{(l)}}) \quad (\text{C.9})$$

Zum Einsatz kamen drei Limitierfunktionen:

- Minmod-Limiter:

$$g_i^{(l)} = \text{sign}(\overline{\alpha_{i+1/2}^{(l)}}) \max\{0, \min\{|\overline{\alpha_{i+1/2}^{(l)}}|, \overline{\alpha_{i-1/2}^{(l)}} \text{sign}(\overline{\alpha_{i+1/2}^{(l)}})\}\} \quad (\text{C.10})$$

- Superbee-Limiter:

$$g_i^{(l)} = \begin{cases} \max\{0, \min(1, 2 \frac{\overline{\alpha_{i-1/2}^{(l)}}}{\overline{\alpha_{i+1/2}^{(l)}}}), \min(2, \frac{\overline{\alpha_{i-1/2}^{(l)}}}{\overline{\alpha_{i+1/2}^{(l)}}})\} \overline{\alpha_{i+1/2}^{(l)}} & \text{für } \overline{\alpha_{i+1/2}^{(l)}} \neq 0 \\ 0 & \text{für } \overline{\alpha_{i+1/2}^{(l)}} = 0 \end{cases} \quad (\text{C.11})$$

- Van Leer-Limiter:

$$g_i^{(l)} = \begin{cases} \frac{\overline{\alpha_{i+1/2}^{(l)}} \overline{\alpha_{i-1/2}^{(l)}} + |\overline{\alpha_{i+1/2}^{(l)}} \overline{\alpha_{i-1/2}^{(l)}}|}{\overline{\alpha_{i+1/2}^{(l)}} + \overline{\alpha_{i-1/2}^{(l)}}} & \text{für } \overline{\alpha_{i+1/2}^{(l)}} + \overline{\alpha_{i-1/2}^{(l)}} \neq 0 \\ 0 & \text{für } \overline{\alpha_{i+1/2}^{(l)}} + \overline{\alpha_{i-1/2}^{(l)}} = 0 \end{cases} \quad (\text{C.12})$$

Verwendet wurde in den meisten Fällen der Limiter nach van Leer.

Mit den limitierten Wellenstärken $g_i^{(l)}$ kann nun der Term $\beta_{i+1/2}^{(l)}$ angegeben werden:

$$\beta_{i+1/2}^{(l)} = \begin{cases} \frac{\sigma_i(\lambda_{i+1/2}^{(l)}) (g_{i+1}^{(l)} - g_i^{(l)})}{\overline{\alpha_{i+1/2}^{(l)}}} & \text{für } \overline{\alpha_{i+1/2}^{(l)}} \neq 0 \\ 0 & \text{für } \overline{\alpha_{i+1/2}^{(l)}} = 0 \end{cases} \quad (\text{C.13})$$

Anhang D

Berechnungsformeln für die Roe–Mittelwerte

Beim Roe–Schema wird das Gleichungssystem

$$\mathbf{q}_t + \mathbf{F}_x = \mathbf{Q} \quad (\text{D.1})$$

im wesentlichen durch das System

$$\mathbf{q}_t + \mathbf{A}(\bar{\mathbf{q}}) \mathbf{q}_x = \mathbf{Q} \quad (\text{D.2})$$

ersetzt. Die Matrix \mathbf{A} approximiert $\partial \mathbf{F} / \partial \mathbf{q}$ lokal. Die Roe–Mittelwerte $\bar{\mathbf{q}}$ sind derart konstruiert, daß u.a. folgende Bedingung erfüllt wird:

$$\mathbf{F}(\mathbf{q}_R) - \mathbf{F}(\mathbf{q}_L) = \mathbf{A}(\bar{\mathbf{q}})(\mathbf{q}_R - \mathbf{q}_L) \quad (\text{D.3})$$

\mathbf{q}_R und \mathbf{q}_L sind die Anfangszustände rechts und links der Diskontinuität eines Riemannproblems. Der Roe–Mittelwertvektor $\bar{\mathbf{q}}$ läßt sich aus den beiden Zuständen berechnen.

In der vorliegenden Arbeit werden die Roe–Mittelwerte nur für die Berechnung der Flüsse nach dem Verfahren von Harten und Yee [33] in den Erhaltungsgleichungen der Gasphase eingesetzt. Liu und Vinokur [56] geben Formeln für die zur Berechnung von $\mathbf{A}(\bar{\mathbf{q}})$ in diesem Falle notwendigen Zustandsvariablen an. Da sich alle hier auftretenden Größen auf die Gasphase beziehen, wird aus Gründen der Übersichtlichkeit auf die Indizierung "G" verzichtet.

$$\bar{\rho} = \sqrt{\rho_L \rho_R} \quad (\text{D.4})$$

$$\bar{Y}^{(k)} = \frac{\rho_L}{\rho_L + \bar{\rho}} + \frac{\rho_R}{\rho_R + \bar{\rho}} \quad (\text{D.5})$$

$$\bar{u} = \frac{(\rho u)_L}{\rho_L + \bar{\rho}} + \frac{(\rho u)_R}{\rho_R + \bar{\rho}} \quad (\text{D.6})$$

$$\bar{h} = \frac{(\rho e + p)_L}{\rho_L + \bar{\rho}} + \frac{(\rho e + p)_R}{\rho_R + \bar{\rho}} \quad (\text{D.7})$$

e ist die innere Energie des Gases einschließlich des kinetischen Energieanteils und ist identisch mit e_G aus Gleichung (2.11). Für Einphasenströmungen reichen die angegebenen Größen zur Berechnung von $\mathbf{A}(\bar{\mathbf{q}})$ aus. Bei Mehrphasenströmungen sind für ihre Berechnung nach [56] noch weitere, gemittelte Größen $\bar{\chi}^{(k)}$ und $\bar{\kappa}^*$ notwendig, die sich aus der Differentiation der thermischen Zustandsgleichung ergeben:

$$dp = \sum_{k=1}^K \chi^{(k)} d\rho^{(k)} + \kappa^* de \quad (\text{D.8})$$

Hier sind:

$$\kappa^* = \frac{\sum_{k=1}^K \rho^{(k)} R^{(k)}}{\sum_{k=1}^K \rho^{(k)} (c_v)^{(k)}} \quad (\text{D.9})$$

$$\chi^{(k)} = R^{(k)} T_G - \kappa^* e_i^{(k)} \quad (\text{D.10})$$

wobei $e^{(k)}$ die innere Energie der Komponente k ist. Liu und Vinokur [56] geben die Roe-Mittelwerte an:

$$\bar{\chi}^{(k)} = \frac{D \hat{\chi}^{(k)} + \hat{c}^2 \Delta \rho^{(k)} \delta p}{D - \Delta p \delta p} \quad (\text{D.11})$$

$$\bar{\kappa}^* = \frac{D \hat{\kappa}^*}{D - \Delta p \delta p} \quad (\text{D.12})$$

$$\text{mit } \delta p = \Delta p - \sum_{k=1}^K \chi^{(k)} \Delta \rho^{(k)} - \kappa^* \Delta e \quad (\text{D.13})$$

$$\text{und } D = \sum_{k=1}^K (\hat{c}^2 \Delta \rho^{(k)})^2 + (\Delta p)^2 \quad (\text{D.14})$$

Die Zeichen $\Delta()$ und $\hat{()}$ bezeichnen darin die Differenzen bzw. das arithmetische Mittel zwischen den beiden Nachbarzuständen rechts und links der betrachteten Stelle:

$$\Delta() = ()_R - ()_L \quad ; \quad \hat{()} = \frac{()_R + ()_L}{2} \quad (\text{D.15})$$

Die Schallgeschwindigkeit c ergibt sich aus:

$$c^2 = (\kappa + 1) \frac{p}{\rho} = \gamma R T \quad (\text{thermisch ideales Gas}) \quad (\text{D.16})$$

Schließlich wird für die Berechnung einiger Komponenten von \mathbf{A} und der Eigenvektoren noch der Roe-Mittelwert $\overline{c^2}$ des Quadrates der lokalen Schallgeschwindigkeit benötigt. Er berechnet sich aus:

$$\overline{c^2} = \sum_{k=1}^K \left[\overline{Y^{(k)}} \overline{\chi^{(k)}} \right] + \overline{\kappa^*} \left(\overline{h} - \frac{1}{2} \overline{u} \overline{u} \right) \quad (\text{D.17})$$

Anhang E

Zeitintegrationsverfahren DASSL

Für die Zeitintegration wurde das Integrationsprogramm DASSL [37] herangezogen. Sein Name leitet sich aus der Abkürzung für "Differential Algebraic System Solver" her. Mit dem Programmpaket können Systeme von Differentialgleichungen und algebraische Gleichungen der Form

$$\mathbf{f}(\dot{\mathbf{y}}, \mathbf{y}, t) = \mathbf{0}, \quad \mathbf{y}(t_0) = \mathbf{y}_0, \quad \dot{\mathbf{y}}(t_0) = \dot{\mathbf{y}}_0 \quad (\text{E.1})$$

gelöst werden.

Zur numerischen Lösung des Systems wird der Vektor der zeitlichen Ableitungen $\dot{\mathbf{y}}$ ersetzt durch einen Differenzenquotientenvektor \mathbf{d} . Der Lösungsvektor \mathbf{y} ist dann der Lösungsvektor $\mathbf{y}^{(n+1)}$ zum neuen Zeitpunkt $t^{(n+1)}$.

$$\mathbf{f}(\mathbf{d}, \mathbf{y}^{(n+1)}, t^{(n+1)}) = \mathbf{0} \quad (\text{E.2})$$

Für \mathbf{d} wird ein rückwärtiger Differenzenquotient von maximal 5. Ordnung verwendet, sodaß das Lösungsverfahren implizit ist. Der Differenzenquotientenvektor \mathbf{d} läßt sich als Linearkombination des Lösungsvektors $\mathbf{y}^{(n+1)}$ und einem Funktionsvektor \mathbf{g} der Lösungsvektoren zu früheren Zeitpunkten darstellen:

$$\mathbf{d} = \alpha \mathbf{y}^{(n+1)} + \mathbf{g}(\dots, \mathbf{y}^{(n-1)}, \mathbf{y}^{(n)}) \quad (\text{E.3})$$

DASSL wählt die Ordnung des Differenzenquotienten und den Zeitschritt in Abhängigkeit vom Verhalten der Lösung, von den vorgegebenen Fehlerschranken und von der Konvergenz des zur Lösung herangezogenen modifizierten Newton-Verfahrens. Mit dem modifizierten Newton-Verfahren wird der Nullstellenvektor $\mathbf{y}^{(n+1)}$ des Systems zum zu berechnenden Zeitpunkt $t^{(n+1)}$ schrittweise (Iterationsindex m) ermittelt:

$$(\mathbf{y}^{(n+1)})^{(m+1)} = (\mathbf{y}^{(n+1)})^{(m)}$$

$$-c \underbrace{\left(\alpha \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{d}} + \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{y}^{(n+1)}} \right)}_{\mathbf{H}}^{-1} \mathbf{f}(\mathbf{d}, (\mathbf{y}^{(n+1)})^{(m)}, t^{(n+1)}) \quad (\text{E.4})$$

Da die Bestimmung der Iterationsmatrix \mathbf{H} numerisch sehr aufwendig ist, wird diese, nachdem sie einmal an einer Stelle $(\mathbf{y}^{(n+1)})^{(m_0)}$ bestimmt worden ist, für möglichst viele Iterations- und Zeitschritte beibehalten. Falls das Newton-Verfahren nicht konvergiert, wird der Zeitschritt verkleinert oder/und die Iterationsmatrix \mathbf{H} mit den aktuellen Zuständen neu bestimmt.

Der in Gleichung (E.4) auftretende Dämpfungsfaktor c berechnet sich aus:

$$c = \frac{2}{1 + \frac{\hat{\alpha}}{\alpha}} \quad (\text{E.5})$$

wobei $\hat{\alpha}$ der jeweils aktuelle Wert für den Koeffizienten in Gleichung (E.4) ist, während α auf dem Stand der gerade verwendeten Iterationsmatrix ist. Er berücksichtigt eine Änderung im Differenzenquotientenvektor \mathbf{d} , die z.B. durch eine veränderte Zeitschrittlänge bewirkt werden kann.

Das in dieser Arbeit behandelte Problem kann — mit Einschränkungen bei der Wärmestrahlung — so formuliert werden, daß die Iterationsmatrix \mathbf{H} eine Bandstruktur annimmt, d.h. nur die mittleren Diagonalen sind besetzt. Bei der Lösung des Differentialgleichungssystems mit DASSL kann die Bandstruktur zur effizienteren Lösung ausgenutzt werden. Anschaulich kann die Breite der Bandstruktur als Maß für die Größe des numerischen, örtlichen Abhängigkeitsbereichs der Zustände in einer Zelle von den Zuständen in den anderen Zellen bei der Berechnung der Lösung zu einem neuen Zeitpunkt interpretiert werden. Eine Nichtausnutzung der Bandstruktur hätte bei dem untersuchten System schon für die Untersuchung von Zündvorgängen mit der für die Simulationen zur Verfügung stehenden Rechnerleistung zu Rechenzeiten im Bereich von einigen Wochen bis Monaten geführt.

Formelzeichen

Symbol	Einheit	Bedeutung
a_{min}	m/s	Minimale Signalausbreitungsgeschwindigkeit
a_{max}	m/s	Maximale Signalausbreitungsgeschwindigkeit
a_P	m^2/m^3	Volumenbezogene Partikeloberfläche
A_P	m^2	Partikeloberfläche
A	m^2	Fläche
A_j	$(cm^3/mol)^{n-1}/s$	Frequenzfaktor für Geschwindigkeitskoeffizient einer Reaktion der Ordnung n
$a_{G_iG_j}$	m^2	Direkte Strahlungsaustauschfläche zwischen den Gasphasen der Zellen i und j
$a_{P_iG_j}$	m^2	Direkte Strahlungsaustauschfläche zwischen den Partikeln der Zelle i und der Gasphase der Zelle j
$a_{W_iG_j}$	m^2	Direkte Strahlungsaustauschfläche zwischen der Wand i und der Gasphase der Zelle j
$A_{G_iG_j}$	m^2	Totale Strahlungsaustauschfläche zwischen den Gasphasen der Zellen i und j
$A_{P_iG_j}$	m^2	Totale Strahlungsaustauschfläche zwischen den Partikeln der Zelle i und der Gasphase der Zelle j
$A_{W_iG_j}$	m^2	Totale Strahlungsaustauschfläche zwischen der Wand i und der Gasphase der Zelle j
B	1	Koeffizient in Strömungswiderstandsgleichung
c	m/s	Schallgeschwindigkeit
c_{drag}	1	Strömungswiderstandsbeiwert
$c_{j,i}$	1	Gewichtungsfaktor für Größe j in der Gewichtungsfunktion in Zelle i
c_p	J/kg/K	Wärmekapazität bei konstantem Druck
c_v	J/kg/K	Wärmekapazität bei konstantem Volumen
D	m^2/s	Diffusionskoeffizient
D_P	m	Partikeldurchmesser
e	J/kg	Innere Energie
E	W/m^2	Strahlungsleistungsdichte eines schwarzen Körpers
g	J/Mol	Freie Enthalpie
g_i	diverse	Limitierfunktion bei der Flußberechnung
G_k	—	Platzhalter für Namen von Gasspezies k

Symbol	Einheit	Bedeutung
G_i	1	Wert der Gewichtungsfunktion für Rechengitteradaption in Zelle i
Gr	1	Grashoffzahl
h	J/kg	Enthalpie
I	W/m ²	Strahlungsintensität
j_q	J/m ²	Diffusiver Energiefluß
J	kg/m ³ /s	Gesamtproduktionsterm der Gasphase
k_j	(cm ³ /mol) ⁿ⁻¹ /s	Geschwindigkeitskoeffizient einer Reaktion der Ordnung n
K	1	Anzahl der Gasspezies
K	1/m	Im Abschnitt Wärmestrahlung: Absorptionskoeffizient
$K_{c,j}$	diverse	Gleichgewichtskonstante
K_G	1/m	Strahlungsabsorptionskoeffizient des Gases
K_P	1/m	Strahlungsabsorptionskoeffizient der Partikel
Kn	1	Knudsenzahl
l	m	Mittlere freie Weglänge
m_{G_k}	kg	Masse der Gaskomponente k
m_P	kg	Partikelmasse
M	kg/Mol	Molmasse
M_i	1/m	Wert der Monitorfunktion in Zelle i
N	1	Anzahl der Rechenzellen
n_i	1/m	Rechenzellendichte (Gitteradaption)
n_P	1/m ³	Partikelkonzentration
N_P	1	Partikelanzahl
N_{het}	1	Anzahl der (heterogenen) Gas/Partikelreaktionen
N_{hom}	1	Anzahl der (homogenen) Gasphasenreaktionen
N_W	1	Anzahl der Wände des Reaktionsgefäßes (hier: $N_W = 2$)
Nu	1	Nusseltzahl
p	Pa	Druck
p_S	1	Kennzahl zur Einteilung der Strahlungsbereiche
P	—	Platzhalter für Feststoff in Reaktionsgleichung
Pr	1	Prandtlzahl
\dot{q}	W/m ³	Volumenbezogener Energiestrom in die Gasphase
\dot{q}_d	W/m ²	Flächenbezogener Strahlungsenergiestrom durch direkte Einstrahlung
\dot{Q}_d	W	Strahlungsenergiestrom durch direkte Einstrahlung

Symbol	Einheit	Bedeutung
\dot{q}_{em}	W/m ²	Fächenbezogener, emittierter Strahlungsenergiestrom
\dot{q}_{emG_j}	W/m ³	Volumenbezogener, vom Gas in Zelle j emittierter Strahlungsenergiestrom
\dot{q}_{emP_j}	W/m ³	Volumenbezogener, von den Partikeln in Zelle j emittierter Strahlungsenergiestrom
\dot{q}_{absG_j}	W/m ³	Volumenbezogener, vom Gas in Zelle j absorbierter Strahlungsenergiestrom
\dot{q}_{absP_j}	W/m ³	Volumenbezogener, von den Partikeln in Zelle j absorbierter Strahlungsenergiestrom
\dot{q}_{radG_j}	W/m ³	Volumenbezogener Strahlungsenergiestrom in das Gas der Zelle j
\dot{Q}_{radG_j}	W	Strahlungsenergiestrom in das Gas der Zelle j
\dot{q}_{radP_j}	W/m ³	Volumenbezogener Strahlungsenergiestrom in die Partikelphase der Zelle j
\dot{Q}_{radP_j}	W	Strahlungsenergiestrom in die Partikelphase der Zelle j
$\dot{q}_{G_iW_m}$	W/m ²	Auf Wand m auftreffende Strahlungsleistungsdichte aufgrund der Wärmestrahlung des Gases der Zelle i
Q_{abs}	1	Relativer Wirkungsquerschnitt für Absorption
Q_{rstr}	1	Relativer Wirkungsquerschnitt für Rückwärtsstreuung
r	m	Ortskoordinate
Re	1	Reynoldszahl
R_G	J/kg/K	Stoffspezifische Gaskonstante
R_m	J/Mol/K	Allgemeine (molare) Gaskonstante
\dot{r}_j	Mol/m ³ /s	Reaktionsgeschwindigkeit
R_j	Mol/m ³ /s	Homogene Reaktionsgeschwindigkeit der Reaktion j
S_j	Mol/m ³ /s	Heterogene Reaktionsgeschwindigkeit der Reaktion j
s	m	Weg
t	s	Zeit
T	K	Temperatur
u	m/s	Geschwindigkeit
V	m ³	Volumen
V_G	m ³	Gasvolumen
V_P	m ³	Partikelvolumen
x	m	Weg, Ort
X	1	Molenbruch, Volumenbruch
Y	1	Massenbruch

Symbol	Einheit	Bedeutung
Z_k	Mol/m ² /s	Stoßzahl der Gaskomponente k

Vektoren und Matrizen

Einheiten beziehen sich auf eine einzelne Komponente. Vektoren und Matrizen sind durch **Fettdruck** gekennzeichnet.

Symbol	Einheit	Bedeutung
E	1	Einheitsmatrix
f	N/m ³	Vektor der Kräfte auf die Gasphase
f	diverse	Allgemeine vektorielle Funktion
F	diverse	Flußvektor
f_{drag}	N/m ³	Vektor der Strömungswiderstandskräfte
f_p	N/m ³	Vektor der volumenbezogenen Druckkräfte auf die Partikel
F_p	N	Vektor der Druckkräfte auf die Partikel
g	diverse	Allgemeine vektorielle Funktion
j	kg/m ² /s	Vektor der diffusiven Massenflüsse
j_q	J/m ² /s	Vektor der diffusiven Energieflüsse
q	diverse	Vektor der bilanzierten Größen
Q	diverse	Vektor der Quellterme
R	diverse	Rechtseigenvektormatrix der Jacobi-Matrix
R⁻¹	diverse	Linkseigenvektormatrix der Jacobi-Matrix
u	m/s	Geschwindigkeitsvektor
w	diverse	Vektor der charakteristischen Variablen
y	diverse	Lösungsvektor
ȳ	diverse	Zeitliche Ableitung des Lösungsvektors

Operatoren

d	Differentiationsoperator
∂	Partielle Ableitung
δ	Operator für Berandung
δ_k^j	Kronecker-Symbol
Δ	Differenzoperator
∇	Gradientenoperator

Indizes

∞	Zustand bei $x \rightarrow \infty$
a	Aktivierung
abs	Absorption
$conc$	Konzentration
$corr$	Korrektur
d	direkt (Wärmestrahlung)
D	Diffusion
$drag$	Strömungswiderstand
em	Emission
$frei$	Freie Konvektion
G	Gas
i	Ortsindex der Zelle i
$i + 1/2$	Bezeichnung für rechte Zellgrenze von Zelle i
$i - 1/2$	Bezeichnung für linke Zellgrenze von Zelle i
j	$\left\{ \begin{array}{l} \text{Index für chemische Reaktion} \\ \text{Zellindex (im Abschnitt Wärmestrahlung)} \end{array} \right.$
$-j$	Index für chemische Rückreaktion
k	Stoffindex
$konvektiv$	Konvektion
L	links
n	Zeitschrittindex
por	Poren
P	Partikel
q	Energie
R	rechts
S	Schwarzer Strahler
th	thermisch
$therm$	Thermodiffusion
W	Wand

Griechische Zeichen

Symbol	Einheit	Bedeutung
α	W/m ² /K	Wärmeübergangskoeffizient
α	1	Im Abschnitt Wärmestrahlung: Absorptionsgrad

Symbol	Einheit	Bedeutung
$\overline{\alpha}_{i+1/2}$	diverse	Wellenstärken für Zellwandflüsse
α_W	1	Wandabsorptionsgrad (Wärmestrahlung)
α_j	1	Reaktionswahrscheinlichkeit (heterogene Reaktionen)
β	1	Winkel
ϵ	1	Partikelvolumenbruch
ϵ_{por}	1	Partikelporosität
ϵ	1	Emissionsgrad
ϵ_{G_j}	1	Emissionsgrad der Gasphase in Zelle j
ϵ_{P_j}	1	Partikelemissionsgrad in Zelle j
ϵ_W	1	Wandemissionsgrad
ϵ_m	1	Emissionsgrad von Wand m
η	Ns/m ²	Dynamische Viskosität
γ	1	Isentropenexponent
κ^*	1	Dichtegewichteter Isentropenexponent für Roe–Mittelwerte
λ	W/m/K	Wärmeleitfähigkeit
λ	m	Wellenlänge
Λ	diverse	Diagonalisierte Jacobi–Matrix
$\dot{\omega}$	kg/m ³ /s	Chemischer Produktionsterm
Ω	1	Raumwinkel
μ_j	1	Stöchiometrischer Koeffizient für Feststoff in Reaktion j
$\nu_{k,j}$	1	Stöchiometrischer Koeffizient für Gaskomponente k in Reaktion j
ν	m ² /s	Kinematische Viskosität
φ	1	Winkel
ϕ	1	Begrenzungskoeffizient für Zellbreitenverhältnis (Gitteradaption)
Φ	diverse	Vektor für Harten/Yee–Flüsse
ψ	1	Entropiekorrekturfunktion für Harten/Yee–Fluß
\mathbf{g}	diverse	Allgemeine vektorielle Funktion
ρ_W	1	Wandreflexionsgrad (Wärmestrahlung)
ρ_m	1	Reflexionsgrad von Wand m (Wärmestrahlung)
ρ_G	kg/m ³	Gasdichte bezogen auf Gesamtvolumen von Gas und Partikeln
ρ_G^0	kg/m ³	Gasdichte bezogen auf Gasvolumen
ρ_P	kg/m ³	Partikeldichte bezogen auf Gesamtvolumen von Gas und Partikeln
ρ_P^0	kg/m ³	Partikelmaterialdichte
σ	N/m ²	Tensor der Druck– und Zähigkeitsspannungen bzw.
σ	W/m ² /K ⁴	bei Wärmestrahlung: Boltzmann–Konstante ($\sigma = 5,67 \cdot 10^{-8} \text{ W/m}^2/\text{K}^4$)

Symbol	Einheit	Bedeutung
σ_i	1	Zeitkorrekturfunktion für Harten/Yee-Fluß in Zelle i
$\sigma_{Stoß}$	m	molekularer Stoßdurchmesser
τ	N/m ²	Reibspannungstensor
τ_W	1	Wandtransmissionsgrad (Wärmestrahlung)
τ_g	s	Zeitkonstante für Gitterbewegung (Gitteradaption)
Θ	1	Thermodiffusionskoeffizient
ξ	s/m	Eigenwerte
χ	J/kg	Hilfsgröße für Roe-Mittelwerte

Literaturverzeichnis

- [1] PROUST, C. und B. VEYSSIÈRE: *Fundamental Properties of Flames Propagating in Starch Dust–Air Mixtures*. Combust. Sci. and Tech., 62:149–172, 1988.
- [2] AUSTIN, P.J., C.W. KAUFFMAN und M. SICHEL: *Ignition and Volatile Combustion of Cellulosic Particles*. Proceedings of the 14th International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems, Coimbra, 1993.
- [3] PERALDI, O., C. LANDRY, J.H. LEE und R. KNYSTAUTAS: *Influence of Particle Size on Dust Explosions in a Small Scale Spherical Vessel*. Proceedings of the 14th International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems, Coimbra, 1993.
- [4] LEBECKI, K., K. CYBULSKI, J. ŚLIŹ, Z. DYDUCH und P. WOLAŃSKI: *Large Scale Dust Explosions Research in Poland*. Proceedings of the 14th International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems, Coimbra, 1993.
- [5] BAER, M.R. und J.W. NUNZIATO: *A Two–Phase Mixture Theory for the Deflagration-to-Detonation Transition (DDT) in Reactive Granular Materials*. Int. J. Multiphase Flow, 12(6):861–889, 1986.
- [6] IGRA, O. und G. BEN-DOR: *Dusty Shock Waves*. Appl. Mech. Rev. 41, Seiten 379–437, 1988.
- [7] SIRIGNANO, W.A.: *Fluid Dynamics of Sprays–1992 Freeman Scholar Lecture*. J. Fluids Eng., 115:345–378, 1993.
- [8] STUHMILLER, J.H.: *The Influence of Interfacial Pressure Forces on the Character of Two-Phase Flow Model Equations*. Int. J. Multiphase Flow 3, Seiten 551–560, 1977.
- [9] EMBID, P.F. und M.R. BAER: *On the Equations for Reactive Granular Flow*. Numerical Combustion, 351:269–276, 1989.

- [10] KRAZINSKI, J.L., R.O. BUCKIUS und H. KRIER: *Coal Dust Flames: A review and Development of a Model for Flame Propagation*. Prog. Energy Combust. Sci., 5:31–71, 1979.
- [11] SICHEL, M.: *Numerical Approaches to Combustion Modeling*, Band 135 der Reihe *Progress in Aeronautics and Astronautics*, Kapitel 14: Numerical Modeling of Heterogeneous Detonations, Seiten 447–479. Ed. E.S. Oran, J.P. Boris, AIAA, Inc, 370 L'Enfant Promenade, SW, Washington, DC, 20024-2518, 1991.
- [12] KHASAINOV, B.A. und B. VEYSSIÈRE: *Transformation of Detonation Modes in Hybrid Two-Phase Mixtures*. Proceedings of the International Conference on Combustion dedicated to the 80th anniversary of Yakov Borisovich Zel'dovich (Zel'dovich Memorial), Voronovo, Moscow Region, Russia, 1994.
- [13] HA, M.Y. und B.R. CHOI: *Numerical Study on the Combustion of a Single Carbon Particle Entrained in a Steady Flow*. Combust. Flame, 97:1–16, 1994.
- [14] SMIRNOV, N.N.: *Combustion and Detonation in multi-phase media. Initiation of Detonation in dispersed-film systems behind a shock wave*. Int. J. Heat Mass Transfer, 31(4):779–793, 1988.
- [15] SMIRNOV, N.N. und M.V. TYURNIKOV: *A Study of Deflagration and Detonation in Multiphase Hydrocarbon-Air Mixtures*. Combust. Flame, 96:130–140, 1994.
- [16] FAN, B. und M. SICHEL: *A Comprehensive Model for the Structure of Dust Detonations*. 22nd Symp. (Int.) Combust., Seiten 1741–1750, 1988.
- [17] TSUJI, Y., N.Y. SHEN und Y. MORIKAWA: *Numerical Simulation of Gas-Solid Flows I and II*. Technology Reports of the Osaka University, 39(1976):233–254, 1989.
- [18] HAYASHI, A.K. und T. FUYUTO: *Numerical Simulation of Shock Waves through a Combustible Two-Phase*. Technischer Bericht Department of Aeronautical Engineering, Nagoya University, Japan, 1993.
- [19] KEE, R.J., J.A. MILLER und T.H. JEFFERSON: *CHEMKIN: A General-Purpose, Problem-Independent, Transportable, FORTRAN Chemical Kinetics Code Package*. Technischer Bericht Sandia National Laboratories, SAND80-8003, 1980.
- [20] KEE, R.J., J. WARNATZ und J.A. MILLER: *A FORTRAN Computer Code Package for the Evaluation of Gas-Phase Viscosities, Conductivities and Diffusion Coefficients*. Technischer Bericht Sandia National Laboratories, SAND83-8209, 1983.

- [21] HIRSCHFELDER, J.O., C.F. CURTISS und R.B. BIRD: *Molecular theory of gases and liquids*. John Wiley & Sons, 1954.
- [22] MATHUR, S., P.K. TONDON und S.C. SAXENA: *Thermal Conductivity of Binary, Ternary and Quarternary Mixtures of Rare Gases*. Mol. Phys., 12:569–, 1967.
- [23] WARNATZ, J.: *Numerical Methods in Flame*, Kapitel Influence of Transport Models and Boundary Conditions on Flame Structure. Ed. N. Peters, J. Warnatz, Vieweg, Wiesbaden, 1982.
- [24] BOOTHROYD, R.G.: *Flowing Gas–Solids Suspensions*. Chapman and Hall, London, Seiten 13–14, 1971.
- [25] FRIEDLANDER, S.K.: *Smoke, Dust and Haze*. John Wiley and Sons, 1977.
- [26] FROHN, A.: *Einführung in die Kinetische Gastheorie*. Aula–Verlag, Wiesbaden, 1988.
- [27] DREW, D.A.: *Two–Phase Flows: Constitutive Equations for Lift and Brownian Motion and Some Basic Flows*. Arch. Ration. Mech. Anal. 62, 2:149–163, 1976.
- [28] REICHELT, B., P. ROTH und L. WANG: *Stoßwellen in Gas–Partikel–Gemischen mit Massenaustausch zwischen den Phasen*. Wärme– und Stoffübertragung, 19:101–111, 1985.
- [29] CHELLIAH, H.K.: *The Influence of Heterogeneous Kinetics and Thermal Radiation on the Oxidation of Graphite Particles*. Combustion and Flame 104, Seiten 81–94, 1996.
- [30] GÜNTHER, R.: *Verbrennung und Feuerungen*. Springer–Verlag, 1974.
- [31] HOTTEL, H.C. und A.F. SAROFIM: *Radiative Transfer*. McGraw–Hill, 1967.
- [32] UPHOFF, U.: *Numerische Simulation von Verbrennungswellen in Gas/Partikel–Gemischen*. Dissertation, Gerhard–Mercator–Universität GH Duisburg, 1997.
- [33] YEE, H. C.: *Upwind and Symmetric Shock Capturing Schemes*. NASA TM 89464, 1987.
- [34] HARTEN, A., P.D. LAX und B. VAN LEER: *On Upstream Differencing and Godunov–Type Schemes for Hyperbolic Conservation Laws*. SIAM Rev., 25:35–61, 1983.
- [35] DORFI, E.A. und L.O’C. DRURY: *Simple Adaptive Grids for 1–D Initial Value Problems*. J. Comp. Phys., 69:175–195, 1987.

- [36] MACK, A., H.-J. WEBER und P. ROTH: *A Moving Grid Method Applied to One-Dimensional Non-Stationary Flame Propagation*. Int. J. Num. Meth. Fluids, 13:869–882, 1991.
- [37] PETZOLD, L.R.: *A Description of DASSL: A Differential/Algebraic System Solver*. Amsterdam, North-Holland, 1983.
- [38] KAUFMANN, D.: *Numerische Simulation der Flammenausbreitung in vorreagierenden Gasen*. Dissertation, Universität Duisburg, 1989.
- [39] WARNATZ, J.: *Flame Velocity and Structure of Laminar Hydrocarbon-Air Flames*. AIAA: 7th ICOGER, Göttingen, Seiten 501–521, 1979.
- [40] SKINNER, G.B., A. LIFSHITZ, K. SCHELLER und A. BURCAT: *Kinetics of Methane Oxidation*. J. Chem. Phys., 56(8):3853–3861, 1972.
- [41] WEBER, H.J.: *Numerische Simulation von Zünd- und Verbrennungswellen in vorge-mischten Gasen*. Dissertation, Gerhard-Mercator-Universität GH Duisburg, 1996.
- [42] WARNATZ, J.: *Combustion Chemistry*, Kapitel Rate Coefficients in the C/H/O system. W.C. Gardiner, Springer, New York, 1984.
- [43] GERSUM, S. VON und P. ROTH: *Soot Oxidation in High Temperature N₂O/Ar Mixtures*. 24th Symp. Int. Combust., Seiten 999–1006, 1992.
- [44] ROTH, P., O. BRANDT und S. VON GERSUM: *High Temperature Oxidation of Suspended Soot Particles Verified by CO and CO₂ Measurements*. 23rd Symp. (Int.) Combust., Seiten 1485–1491, 1990.
- [45] GERSUM, S. VON: *Untersuchungen zum Reaktionsverhalten von C-haltigen Aerosolen bei hohen Temperaturen*. Dissertation, Gerhard-Mercator-Universität GH Duisburg, 1995.
- [46] LUTZ, A.E., KEE, R.J. und J.A. MILLER: *SENKIN: A FORTRAN program for Predicting Homogeneous Gas Phase Chemical Kinetics with Sensitivity Analysis*. Technischer Bericht Sandia National Laboratories, SAND87-8248, 1988.
- [47] RICHTER, W., S. MICHELFELDER und D. VORTMEYER: *VDI-Wärmeatlas*, Kapitel Ke: Wärmestrahlung in Brennräumen. VDI-Verlag, Düsseldorf, 1994.
- [48] BRUMMEL, H.G. und E. KAKARAS: *Wärmestrahlungsverhalten von Gas-Feststoff-Gemischen bei niedrigen, mittleren und hohen Staubbeladungen*. Chem.-Ing.-Techn., 66(3), 1994.

- [49] ZAUDERER, E.: *Partial differential equations of applied mathematics*. John Wiley & Sons, 1983.
- [50] VORTMEYER, D.: *VDI-Wärmeatlas*, Kapitel Kc: Strahlung von Gasgemischen. VDI-Verlag, Düsseldorf, 1994.
- [51] DOBLER, A.: *Untersuchung des Wärmeaustausches durch Strahlung zwischen Kohlenstoffpartikeln und einem umgebenden Gas*. Studienarbeit, Institut für Verbrennung und Gasdynamik, Gerhard-Mercator-Universität Duisburg, 1997.
- [52] HOTTEL, H.C. und R.B. EGBERT: *The radiation of furnace gases*. Trans. A.S.M.E., Seiten 297–307, 1941.
- [53] VORTMEYER, D. und H.-G. BRUMMEL: *VDI-Wärmeatlas*, Kapitel Kd: Wärmestrahlung von Gas-Feststoff-Gemischen. VDI-Verlag, Düsseldorf, 1994.
- [54] YANG, W.-J., H. TANIGUCHI und K. KUDO: *Radiative Transfer by the Monte Carlo Method*, Band 27 der Reihe *Advances in Heat Transfer*. Academic Press, 1995.
- [55] HE, L.T.: *Etude des phénomènes d'allumage. Applications aux mélanges H₂/O₂*. Dissertation, Université de Provence, 1991.
- [56] LIU, Y. und M. VINOKUR: *Upwind Algorithms for General Thermo-Chemical Nonequilibrium Flows*. AIAA-89-0201, 27th Aerospace Sciences Meeting, Reno/Nevada, 1989.

Lebenslauf

Persönliche Daten

Name	<u>Thomas</u> Werner Ludwig
Geburtsdatum, -ort	12. Mai 1966 in Walsum, jetzt Duisburg
Familienstand	ledig

Schulbildung

1972–1976	Grundschule in Walsum
1976–1985	Kopernikus–Gymnasium in Walsum, Abschluß: Abitur

Wehrdienst

1985–1986	Grundwehrdienst
-----------	-----------------

Studium

1986–1992	Allgemeiner Maschinenbau an der Universität–GH Duisburg, darin:
1989–1990	Studienaufenthalt an der Ecole Nationale Supérieure de Mécanique et d'Aérotechnique (ENSMA) in Poitiers (Frankreich)

Beruflicher Werdegang

März 1992 –Okt. 1998	Wissenschaftlicher Mitarbeiter/Assistent am Institut für Verbrennung und Gasdynamik der Gerhard–Mercator–Universität GH Duisburg
seit Nov. 1998	Entwicklungsingenieur bei der Robert Bosch GmbH, Stuttgart, Vorausentwicklung Dieseleinspritzsysteme