

Technische Universität Graz
Institut für Verbrennungskraftmaschinen und Thermodynamik

Diplomarbeit

Aufwärmprozess einer Brennstoffzelle

Betreuer:

Ao.Univ.-Prof. Dipl.-Ing. Dr. techn. Raimund Almbauer (TU Graz)

DI (FH) Mario Brunner (AVL List GmbH Graz)

Constantin Kiesling

23. Februar 2012

Danksagung

Ich möchte mich an diese Stelle bei Herrn ao.Univ.-Prof. Dipl.-Ing. Dr. techn. Raimund Almbauer bedanken, meinem Betreuer seitens des Institutes für Verbrennungskraftmaschinen und Thermodynamik an der Technischen Universität Graz. Mit seinem Expertenwissen im Bereich der numerischen Verfahren in der Thermodynamik, war er mir eine wichtige Stütze bei der Durchführung der Diplomarbeit und bot mir nebenbei auch interessante Einblicke in seine Forschungsgebiete am Institut.

Mein Dank gebührt auch Herrn DI (FH) Mario Brunner, meinem Betreuer bei der AVL List GmbH Graz. Er ermöglichte die Durchführung der Diplomarbeit und stellte mir die notwendigen Ressourcen zur Verfügung. Er stand der Diplomarbeit immer optimistisch gegenüber, auch wenn meine Stimmung zwischendurch gedämpft war.

Auch bei meinen Kollegen in den Abteilungen DAM und DAC in der AVL List GmbH möchte ich mich herzlich bedanken. Sie standen mir bei vielen Problemstellungen zur Seite - war es die Bedienung der verschiedenen Berechnungsprogramme oder das Programmieren in Python. Ich weiß es sehr zu schätzen, dass sie, die ohnedies mit eigenen Projekten beschäftigt sind, sich oft viel Zeit für die Beantwortung meiner Fragen genommen und zum Teil sogar Arbeit für mich übernommen haben.

Schließlich möchte ich mich auch bei meiner Familie, insbesondere bei meinen Eltern und Großeltern, für die emotionale und finanzielle Unterstützung während des gesamten Studiums bedanken. Ohne Sie wäre eine akademische Ausbildung in dieser Form nicht möglich gewesen.

Eidesstattliche Erklärung

Ich erkläre an Eides statt, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig verfasst, andere als die angegebenen Quellen/Hilfsmittel nicht benutzt, und die den benutzten Quellen wörtlich und inhaltlich entnommenen Stellen als solche kenntlich gemacht habe.

Graz, am

.....

(Unterschrift)

Kurzfassung

Die vorliegende Arbeit befasst sich mit Fragestellungen zum instationären Aufwärmprozess eines Festoxid-Brennstoffzellenstacks.

Die Festoxid-Brennstoffzelle (Solid Oxide Fuel Cell, SOFC), die im Rahmen dieser Arbeit näher betrachtet wird, weist eine Betriebstemperatur von etwa 800 °C auf und zählt damit zu den Hochtemperatur-Brennstoffzellen. Bevor die elektrochemischen Prozesse ablaufen können, muss solch ein Brennstoffzellenstack (zu Deutsch „Zellstapel“) daher aufgeheizt werden. Zu diesem Zweck wird heiße Luft durch die Kathodenkanäle geblasen, bis der Stack eine Mindesttemperatur, die nahe der Betriebstemperatur liegt, erreicht hat.

Bei der Durchströmung des Stacks mit heißer Luft kommt es in den Bauteilen zu starken räumlichen und zeitlichen Temperaturgradienten zwischen Ein- und Auslassseite. Außerdem bestehen die verwendeten Bauteile aus verschiedenen Werkstoffen mit unterschiedlichen thermischen Eigenschaften, wie Wärmeleitfähigkeiten und Temperaturdehnungen. Die thermische Wechselbeanspruchung bei vielen Aufwärm- und Abkühlprozessen führt daher zu einer Schädigung des Brennstoffzellenstacks.

In dieser Arbeit wird eine Methodik entwickelt, um die zeitliche Entwicklung des Temperaturfeldes eines Festoxid-Brennstoffzellenstacks während des Aufwärmprozesses berechnen zu können. Hierfür wird zunächst ein einfaches, zweidimensionales Modell entwickelt: Ein kreisrundes Rohr, das mit heißer Luft durchströmt wird. Das Rohr repräsentiert dabei einen der 900 Kathodenkanäle des realen Brennstoffzellenstacks. Die Berechnung der zeitlichen Entwicklung des Temperaturfeldes des Rohres erfolgt mit der Finiten-Volumen-Methode in Microsoft Excel, bzw. später in einem Python-Script und erlaubt viele einfache Abschätzungen, die auch für den eigentlichen Brennstoffzellenstack Gültigkeit besitzen.

Mit Hilfe des Modelles „Rohr“ können außerdem Erkenntnisse gewonnen werden, die die Modellierung des eigentlichen Stacks mittels der Software Abaqus/CAE ermöglichen. Eine Herausforderung in Abaqus/CAE stellt die Koppelung von Luft- und Wandtemperaturen dar, da die Software für eine derartige Problemstellung prinzipiell kaum geeignet ist. Die Berechnung der zeitlichen Entwicklung des Temperaturfeldes erfolgt in der Arbeit exemplarisch für einen Stack mit drei Zellen.

Ein weiterer Teil dieser Arbeit befasst sich mit der Untersuchung der Gleichverteilung der heißen Luft auf die Kathodenkanäle. Würde sich die heiße Luft während des Aufwärmprozesses nicht gleichmäßig auf alle feinen Kathodenkanäle des Brennstoffzellenstacks verteilen (das bedeutet unterschiedliche Strömungsgeschwindigkeiten in verschiedenen Kanälen), so kann es zu unerwünschten Effekten bei der zeitlichen Entwicklung des Temperaturfeldes kommen: Z.B. zu einem größeren Energieeintrag in Kanälen, in denen eine höhere Strömungsgeschwindigkeit vorherrscht, und somit zu schnellerer Aufwärmung in diesem Bereich des Stacks. Es wird daher eine Baugruppe mit zwei Brennstoffzellenstacks sowie Zu- und Ablaufgeometrie mittels der Software AVL Fire modelliert und die Gleichverteilung der Luft auf die Kathodenkanäle untersucht.

Abschließend werden die Ergebnisse der Arbeit zusammengefasst und die wesentlichen Erkenntnisse hervorgehoben. Im Ausblick werden die nächsten logischen Arbeitsschritte und die weiteren Herausforderungen beschrieben, die nicht mehr Teil dieser Arbeit sind.

Abstract

This thesis deals with problems regarding the transient warm-up process of a Solid Oxide Fuel Cell stack.

The Solid Oxide Fuel Cell (SOFC), which is examined in this thesis, has an operating temperature of approximately 800 °C and is hence ranked among the high temperature fuel cells. Therefore, a SOFC stack has to be heated up before the electrochemical processes can start. For this purpose, hot air is blown through the cathode channels until the stack has reached a minimum temperature, which lies close to the operating temperature.

As the hot air flows through the cathode channels during the stack heat-up process, steep spatial and temporal temperature gradients occur inside the solid between inlet and outlet region. Furthermore, the used parts consist of different materials with diverse thermal properties like thermal conductivities and thermal elongations. Therefore, the thermal cycling leads to damage of the fuel cell stack.

In this thesis, a methodology is developed to calculate the chronological evolution of the temperature field of a Solid Oxide Fuel Cell stack during the heat-up process. As a start, a simple, two-dimensional model is set up: A circular pipe, which is purged with hot air. The pipe represents one of the 900 cathode channels of the real fuel cell stack. The calculation of the chronological evolution of the pipe's temperature field is carried out with the Finite-Volume-Method in Microsoft Excel (later on, the Microsoft Excel file is replaced with a Python script). With this pipe model, many estimations can be done, which are also valid for the real fuel cell stack.

With the pipe model, there are also findings made, which allow to model the actual fuel cell stack with the software Abaqus/CAE. A challenge within this software is to achieve the coupling between air and wall temperatures, since Abaqus/CAE is basically not very well suited for such a problem. The calculation of the chronological evolution of the temperature field is performed as an example for a fuel cell stack with three cells.

Another section of the thesis deals with the analysis of the uniformity of air distribution to the cathode channels. If the hot air was not distributed uniformly to all cathode channels (this would mean varying flow velocities in different channels), unwanted effects regarding the chronological evolution of the temperature field may occur: E.g. an increased heat transfer from air to wall in channels with higher flow velocity and hence a faster heat-up in this region of the stack. An assembly including two fuel cell stacks and the air manifolding is modeled with the software AVL Fire to investigate the uniformity of air distribution to the cathode channels.

Finally, the results of the performed work are summarized and the main findings are pointed out. An outlook describes the next logical steps and the upcoming challenges, which are not part of this thesis any more.

Inhaltsverzeichnis

| | | |
|----------|-----------------------------------------------------------------------|-----------|
| 1 | Einleitung | 1 |
| 1.1 | Aufgabenstellung..... | 1 |
| 1.2 | Vorgangsweise..... | 1 |
| 2 | Die Brennstoffzelle..... | 2 |
| 2.1 | Geschichte der Brennstoffzelle | 2 |
| 2.2 | Funktionsweise der Brennstoffzelle | 2 |
| 2.3 | Arten von Brennstoffzellen | 3 |
| 2.4 | Die Festoxid-Brennstoffzelle (SOFC)..... | 5 |
| 2.4.1 | Funktionsweise der SOFC | 5 |
| 2.4.2 | Charakterisierung der SOFC | 6 |
| 2.4.3 | Mögliche Bauweisen der Zelle..... | 7 |
| 2.4.4 | Mögliche Bauweisen der Stützschiicht..... | 8 |
| 2.4.5 | Werkstoffe der SOFC | 9 |
| 2.4.6 | Schädigung durch Strukturspannungen | 10 |
| 2.4.7 | Die SOFC als Diesel-APU | 10 |
| 3 | Wärmeübertragung | 12 |
| 3.1 | Wärmeleitung..... | 12 |
| 3.2 | Konvektion..... | 13 |
| 3.2.1 | Die Geschwindigkeitsgrenzschicht | 14 |
| 3.2.2 | Die Temperaturgrenzschicht | 15 |
| 3.2.3 | Laminare und turbulente Strömung..... | 15 |
| 3.2.4 | Mathematische Formulierungen zur Beschreibung der Konvektion | 16 |
| 3.2.5 | Reynolds-Zeitmittelung | 21 |
| 3.2.6 | Modellierung der turbulenten Schwankungsbewegungen..... | 22 |
| 3.2.7 | Das k-ε Modell (Modell mit zwei Erhaltungsgleichungen) | 23 |
| 3.2.8 | Wandnahe turbulente Strömung | 24 |
| 3.3 | Wärmestrahlung..... | 25 |
| 4 | Numerische Verfahren | 27 |
| 4.1 | Diskretisierung..... | 27 |
| 4.2 | Finite-Volumen-Methode..... | 27 |
| 4.2.1 | KV-Formulierung und Profilannahme für die Wärmeleitungsgleichung..... | 27 |
| 4.2.2 | Leitprinzipien & Grundregeln bei der numerischen Behandlung..... | 29 |
| 4.2.3 | Anfangs- und Randbedingungen | 30 |
| 4.2.4 | Zeitabhängigkeit | 30 |
| 4.2.5 | Konvektion und Diffusion | 32 |
| 4.2.6 | Lösung des Gleichungssystems | 35 |
| 4.3 | CFD Software AVL Fire..... | 35 |
| 4.4 | Finite-Elemente-Methode | 36 |
| 4.4.1 | Das einheitliche diskrete System..... | 36 |
| 4.4.2 | Allgemeine Vorgehensweise in der Finite-Elemente-Methode | 37 |
| 4.5 | FE Software Abaqus..... | 41 |

| | | |
|----------|----------------------------------------------------------------|-----------|
| 5 | Beschreibung der verwendeten Bauteile..... | 42 |
| 5.1 | Der Stack..... | 42 |
| 5.1.1 | Zelle | 43 |
| 5.1.2 | Interkonnektorplatte | 44 |
| 5.2 | Der Luft Zu- und Ablauf | 45 |
| 6 | Untersuchung der Gleichverteilung der Kathodenluft..... | 47 |
| 6.1 | Simulation des Druckverlustes des Stacks..... | 47 |
| 6.1.1 | Randbedingungen | 47 |
| 6.1.2 | Ergebnisse..... | 48 |
| 6.2 | Simulation der Gleichverteilung der Luft | 50 |
| 6.2.1 | Randbedingungen | 50 |
| 6.2.2 | Ergebnis (300 °C Wand- und Lufttemperatur) | 51 |
| 6.2.3 | Ergebnis (800 °C Wand- und Lufttemperatur) | 53 |
| 7 | Berechnung des Temperaturfeldes | 56 |
| 7.1 | Anfangs- und Randbedingungen | 56 |
| 7.2 | Abschätzung des Wärmeübergangs von Luft an Wand | 57 |
| 7.2.1 | Vereinfachtes Modell „kreisrundes Rohr“ | 57 |
| 7.2.2 | Numerische Behandlung des Problems in Microsoft Excel..... | 58 |
| 7.2.3 | Überführung der Excel-Berechnung in ein Python-Script | 67 |
| 7.2.4 | Sensitivitätsanalysen am kreisrunden Rohr mit Python..... | 69 |
| 7.2.5 | Globale Energiebilanz am kreisrunden Rohr mit Python | 73 |
| 7.3 | Temperaturfeldberechnung in Abaqus | 76 |
| 7.3.1 | Annäherung über das Rohr-Beispiel..... | 76 |
| 7.3.2 | Temperaturfeldberechnung eines Stacks mit drei Zellen | 79 |
| 8 | Conclusio..... | 92 |
| 8.1 | Gleichverteilung der Kathodenluft..... | 92 |
| 8.2 | Berechnung des Temperaturfeldes..... | 92 |
| 8.3 | Örtliche Auflösung der Luftströmung und Zeitschrittweite | 93 |
| 9 | Ausblick..... | 94 |
| 9.1 | Verfeinerung der angewandten Methodik in Abaqus/CAE..... | 94 |
| 9.2 | Zukünftige Methode zur Berechnung des Temperaturfeldes..... | 94 |
| 9.3 | Thermo-mechanisches Verhalten und Aufwärmstrategie | 94 |
| 9.4 | Detaillierte Betrachtung der Zelle | 94 |
| 9.5 | Elektrochemische Modellierung..... | 95 |
| 9.6 | Validierung | 95 |
| | Abkürzungen..... | 96 |
| | Formelzeichen..... | 96 |
| | Römische Buchstaben..... | 96 |
| | Griechische Buchstaben..... | 98 |
| | Indizes | 99 |

| | |
|------------------------------------|------------|
| Hochstellungen | 99 |
| Abbildungsverzeichnis | 99 |
| Tabellenverzeichnis | 103 |
| Literaturverzeichnis | 104 |

1 Einleitung

In diesem einführenden Kapitel werden die Aufgabenstellung und die Vorgangsweise kurz erläutert.

1.1 Aufgabenstellung

Die AVL List GmbH strebt an, sich an nationalen und internationalen Forschungs- und Entwicklungsprojekten zur Festoxid-Brennstoffzelle (Solid Oxide Fuel Cell, SOFC) zu beteiligen. Das dadurch gewonnene Know-How kann dann in einem nächsten Schritt auch in Kundennutzen umgewandelt werden.

Innerhalb der Abteilung DAM (Design Analysis Mechanical) soll in Zukunft das thermo-mechanische Alterungsverhalten eines SOFC-Stacks detailliert simuliert werden. Als erster Schritt in diese Richtung wird der Aufwärmprozess eines Stacks näher untersucht. Ziel ist es, eine Methodik zu finden, die es erlaubt, das thermo-mechanische Verhalten eines Stacks beim Aufwärmprozess unter Berücksichtigung des gekoppelten Wärmeübergangproblems zwischen Luft und Wand in einer Simulation möglichst realitätsgetreu abzubilden. In der vorliegenden Arbeit liegt der Fokus auf der Berechnung der zeitlichen Entwicklung des Temperaturfeldes eines SOFC-Stacks beim Aufwärmprozess.

Für den Aufwärmprozess erzeugt ein externer Brenner heiße Abgase, die über einen Wärmetauscher Luft erhitzen. Die heiße Luft wird dann durch die kathodenseitigen Kanäle des Stacks geführt, um den Stack auf eine Temperatur von etwa 700 °C zu bringen. Erst bei dieser Temperatur wird Brennstoff durch die anodenseitigen Kanäle geleitet. Der elektrochemische Prozess kann dann stattfinden, wodurch sich der Stack weiter auf seine Betriebstemperatur von etwa 800 °C erhitzt. Die elektrochemischen Vorgänge werden in dieser Arbeit nicht modelliert, das Hauptaugenmerk liegt auf dem Aufwärmen des Stacks mit heißer Luft.

1.2 Vorgangsweise

Zu Beginn der Arbeit ist es notwendig, die theoretischen Grundlagen zur Brennstoffzelle zu erarbeiten. Auch wenn die Elektrochemie bei der vorliegenden Aufgabenstellung nur indirekt eine Rolle spielt, so ist es doch wichtig, auch diese Vorgänge in den Grundzügen zu verstehen. Weiters werden die theoretischen Grundlagen zur numerischen Simulation des Aufwärmprozesses des Stacks näher betrachtet (insbesondere die Finite-Volumen-Methode).

Die Berechnung der zeitlichen Entwicklung des Temperaturfeldes bzw. der Gleichverteilung der Kathodenluft auf die Kanäle eines ausgewählten Stacks erfolgt im praktischen Teil der Arbeit mit Hilfe eines eigenen, einfachen Modells sowie mit den kommerziellen Softwarepaketen AVL Fire und Abaqus/CAE. Die einzelnen Simulationsschritte sowie deren Ergebnisse werden in den Kapiteln 5 bis 7 detailliert beschrieben.

2 Die Brennstoffzelle

2.1 Geschichte der Brennstoffzelle

Die Entdeckung des Funktionsprinzips der Brennstoffzelle geht auf zwei wichtige Persönlichkeiten zurück: Sir William Robert Grove (1811 – 1896; Großbritannien) und Christian Friedrich Schönbein (1799 – 1868; Deutschland). [Voigt, Höller, Küter 2007, S. 20]

Schönbein fand 1838 heraus, dass der Elektrolyseprozess umkehrbar ist. Unter *Elektrolyse* versteht man die elektrochemische Zerlegung einer Substanz durch Stromzufuhr. Elektrische Energie wird dabei in chemische Energie umgewandelt. [Eichseder, Klell 2010, S. 77]

Daraufhin entwickelte Grove 1839 die erste Brennstoffzelle, also einen Apparat, in dem ein umgekehrter Elektrolyseprozess abläuft. Abbildung 2-1 zeigt eine historische Brennstoffzelle, die Grove im Jahre 1842 konstruierte. [Voigt, Höller, Küter 2007, S. 20]

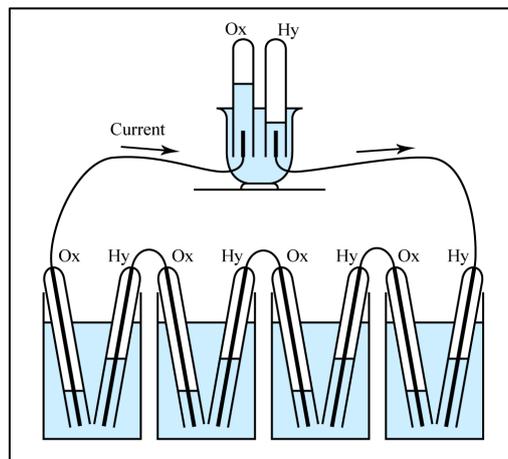


Abbildung 2-1: Historische Brennstoffzelle von Grove [Voigt, Höller, Küter 2007, S. 20]

Diese Brennstoffzelle besteht aus vier hintereinander geschalteten Elementen. In die Gefäße mit verdünnter Schwefelsäure werden je zwei Elektroden aus Platin eingetaucht. Die Elektroden befinden sich in Glasröhren und werden darin von Wasserstoff (Anode) bzw. Sauerstoff (Kathode) umspült. Der dadurch erzeugte Strom versorgt einen Elektrolyseur. [Voigt, Höller, Küter 2007, S. 20]

2.2 Funktionsweise der Brennstoffzelle

In einer Brennstoffzelle wird chemische Energie in elektrische Energie umgewandelt. Eine einzelne Zelle besteht aus einer Elektrolytschicht (bzw. einer Elektrolytflüssigkeit), die in Kontakt mit einer Anode und einer Kathode steht. Es findet eine Redox-Reaktion statt und durch das Fließen von Elektronen wird dabei Arbeit verrichtet. Als Reduktionsmittel verwendet man Wasserstoff, Methanol, Erdgas oder Kohlenmonoxid. Das Oxidationsmittel ist typischerweise Sauerstoff und dieser kommt meist aus der Umgebungsluft. [Eichseder, Klell 2010, S. 219]

Das Funktionsprinzip soll nun an Hand einer Wasserstoff-Sauerstoff-Brennstoffzelle mit alkalischem Elektrolyten (Abbildung 2-2) genauer erläutert werden:

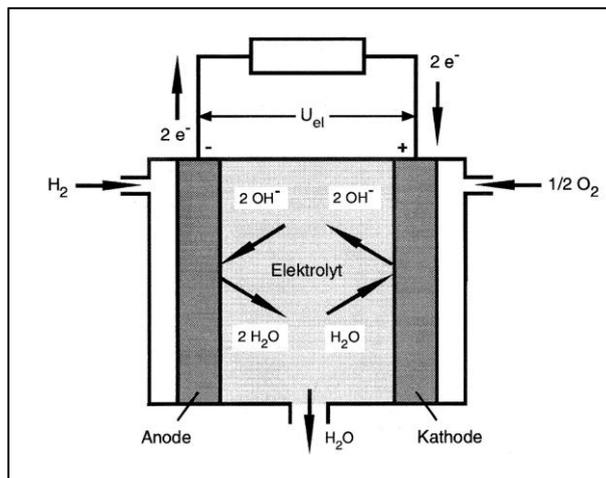
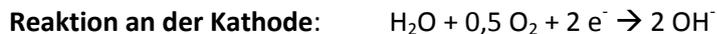


Abbildung 2-2: Wasserstoff-Sauerstoff Brennstoffzelle [Eichlseder, Klell 2010, S. 221]

Der Brennstoff (Wasserstoff) wird an die Anode (Brennstoffelektrode, Minuspol) geführt und reagiert dort mit negativ geladenen Hydroxid-Ionen (OH^-) zu Wasser. Dabei werden zwei Elektronen abgegeben, welche die Anode aufnimmt. Der Wasserstoff wird oxidiert:



Der Elektrolyt leitet die Elektronen nicht, weshalb diese über den äußeren Stromkreis zur Kathode fließen. Dort stehen sie für die Reduktionsreaktion zur Verfügung. An der Kathode (Sauerstoffelektrode, Pluspol) reagiert Sauerstoff mit Wasser unter Aufnahme von Elektronen zu Hydroxid-Ionen.



Die OH^- Ionen wandern durch den Elektrolyten auf die Anodenseite und schließen so die Reaktionskette. Die Gesamtreaktion lautet wie folgt:



Es fließt ein Strom von 2e^- je H_2 -Molekül. Die Elektroden der Brennstoffzelle sind porös ausgebildet, sodass die Diffusion der gasförmigen Reaktanden zum Elektrolyten erleichtert und eine große Oberfläche für die Reaktion zur Verfügung gestellt wird. Zusätzlich ist diese Oberfläche bei Niedertemperatur-Brennstoffzellen mit einem Katalysator aus Edelmetall versehen, um die Reaktion noch weiter zu beschleunigen. [Eichlseder, Klell 2010: S. 222]

Der wesentliche Unterschied zwischen Brennstoffzelle und Batterie besteht darin, dass die Reaktanden bei der Brennstoffzelle kontinuierlich zugeführt werden. [Eichlseder, Klell 2010: S. 219]

2.3 Arten von Brennstoffzellen

Eine Einteilung der Brennstoffzellen erfolgt entweder nach deren Betriebstemperatur oder nach der Art des verwendeten Elektrolyten. Hinsichtlich der Betriebstemperatur unterscheidet man zwischen Niedertemperaturbrennstoffzellen (NT) und, ab etwa $600 \text{ }^\circ\text{C}$, Hochtemperaturbrennstoffzellen (HT). Nach dem Elektrolyten wird unterteilt in die Alkalische Brennstoffzelle (AFC), die Polymerelektrolytmembran-Brennstoffzelle (PEMFC), die Phosphorsäure-Brennstoffzelle (PAFC), die Schmelzcarbonat-Brennstoffzelle (MCFC) und die Oxidkeramische Brennstoffzelle (SOFC). [Eichlseder, Klell 2010, S. 229]

Tabelle 2-1 gibt einen vergleichenden Überblick über verschiedene Brennstoffzellentypen.

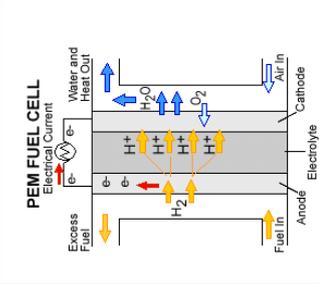
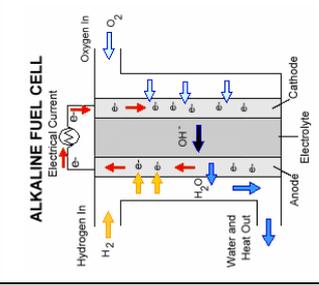
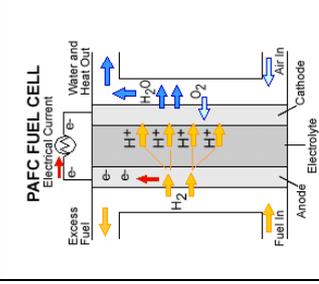
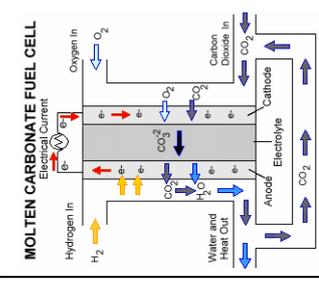
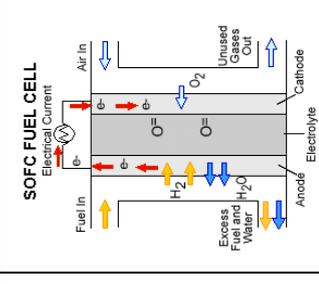
| Fuel Cell Type | Niedertemperatur | | | Hochtemperatur | | |
|----------------------|---------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--|
| | PEMFC | AFC | PAFC | MCFC | SOFC | |
| Elektrolyt | Protonenleitende Membran (Polymerelektrolyt) | Wässrige Kalilauge | Konzentrierte Phosphorsäure | Karbonatschmelze | Ionenleitende Funktionskeramiken | |
| Oxidant (Kathode) | Sauerstoff oder Luft | Reiner Sauerstoff | Luft | Luft | Luft | |
| Reaktion Kathode | $2 H^+ + 2 e^- + 0,5 O_2 \rightarrow H_2O$ | $O_2 + 2 H_2O + 4 e^- \rightarrow 4 OH^-$ | $2 H^+ + 2 e^- + 0,5 O_2 \rightarrow H_2O$ | $0,5 O_2 + CO_2 + 2 e^- \rightarrow CO_3^{2-}$ | $0,5 O_2 + 2 e^- \rightarrow O^{2-}$ | |
| Brennstoff (Anode) | Wasserstoff | Reiner Wasserstoff | Wasserstoff | Wasserstoff, Kohlenmonoxid, Methan | Wasserstoff, Kohlenmonoxid, Methan | |
| Reaktion Anode | $H_2 \rightarrow 2 H^+ + 2 e^-$ | $2 H_2 + 4 OH^- \rightarrow 4 H_2O + 4 e^-$ | $H_2 \rightarrow 2 H^+ + 2 e^-$ | $H_2 + CO_3^{2-} \rightarrow H_2O + CO_2 + 2 e^-$ $CO + CO_3^{2-} \rightarrow 2 CO_2 + 2 e^-$ $CH_4 - 4 CO_3^{2-} \rightarrow 5 CO_2 + 2 H_2O + 8 e^-$ | $H_2 - O^{2-} \rightarrow H_2O + 2 e^-$ $CO + O^{2-} \rightarrow CO_2 + 2 e^-$ $CH_4 + 4 O^{2-} \rightarrow CO_2 + 2 H_2O + 8 e^-$ | |
| Reaktion gesamt | $H_2 + 0,5 O_2 \rightarrow H_2O$ | $2 H_2 + O_2 \rightarrow 2 H_2O$ | $H_2 + 0,5 O_2 \rightarrow H_2O$ | $H_2 + 0,5 O_2 \rightarrow H_2O$ $CO + 0,5 O_2 \rightarrow CO_2$ $CH_4 + 2 O_2 \rightarrow CO_2 + 2 H_2O$ | $H_2 + 0,5 O_2 \rightarrow H_2O$ $CO + 0,5 O_2 \rightarrow CO_2$ $CH_4 + 2 O_2 \rightarrow CO_2 + 2 H_2O$ | |
| Brennstoff Bedingung | $CO < 10 - 100 \text{ ppmV}$ | Reiner Wasserstoff | $CO < 1 \text{ vol.-%}$ $N_2 < 4 \text{ vol.-%}$ | | | |
| Betriebstemperatur | 50 – 90 °C | 50 – 90 °C | 160 – 220 °C | 600 – 660 °C | 700 – 1000 °C | |
| Elektr. Wirkungsgrad | 35 – 60 % | 50 – 70 % | 35 – 50 % | 40 – 55 % | 45 – 60 % | |
| Anwendungsbereich | Mobile, stationäre Stromerzeugung | Militär, Raumfahrt | Kraft-Wärme-Kopplung | Kraft-Wärme-Kopplung | Kraft-Wärme-Kopplung Auxiliary Power Units | |
| Vorteile | Schnelles Hochfahren Gute Leistungsdichte Einbaulage flexibel | Hochaktive Kathode Unedle Katalysatoren Guter Wirkungsgrad | Gut Ausgereift Kraft-Wärme Kopplung Toleriert CO und N2 | Guter Wirkungsgrad Kraft-Wärme-Kopplung Interne Reformierung Unedle Katalysatoren | Planar/tubular möglich Guter Wirkungsgrad Flexibilität bei Brennstoff Unedle Katalysatoren | |
| Nachteile | Teure Katalysatormaterialien Neigt zu CO-Vergiftung Braucht Wasserstoffspeicher | Reiner Brennstoff und Oxidant notwendig Neigt zu CO ₂ -Vergiftung | Schlechter Wirkungsgrad Brauch Pt-Katalysator Groß und schwer | Korrosiver Elektrolyt Hoher Verschleiß wegen hoher Temperatur | Langsamer Start-Up Thermische Abdichtung Hoher Verschleiß wg. Temperatur | |
| Funktionsschema |  |  |  |  |  | |

Tabelle 2-1: Übersicht über die verschiedenen Brennstoffzellentypen [Nagel 2008, S. 45]

2.4 Die Festoxid-Brennstoffzelle (SOFC)

In diesem Kapitel wird näher auf die Festoxid-Brennstoffzelle (Solid Oxide Fuel Cell, SOFC) eingegangen, da diese Type im praktischen Teil der Arbeit von Bedeutung ist.

2.4.1 Funktionsweise der SOFC

Mit einer Betriebstemperatur zwischen 750 °C und 1000 °C zählt die SOFC zu den Hochtemperaturbrennstoffzellen. Der Elektrolyt der Zelle besteht aus einem unveränderlichen, festen keramischen Werkstoff. Dafür kommt etwa yttriumdotiertes Zirkoniumdioxid (YSZ) in Frage, welches bei Betriebstemperatur Sauerstoffionen leitet. Elektronen werden allerdings nicht geleitet. Die Kathode besteht aus einem Material, das Elektronen und Ionen leitet, wie zum Beispiel Lanthan-Strontium-Manganoxid (LSM). Für die Anode wird ein keramisch-metallischer Cermet-Werkstoff verwendet, der ebenfalls ionen- und elektronenleitfähig ist. Der Ladungstransport im Elektrolyten erfolgt mittels O^{2-} -Ionen. [Eichseder, Klell 2010, S. 238]

Zur Veranschaulichung der Reaktionen ist die Solid Oxide Fuel Cell in Abbildung 2-3 nochmals schematisch dargestellt:

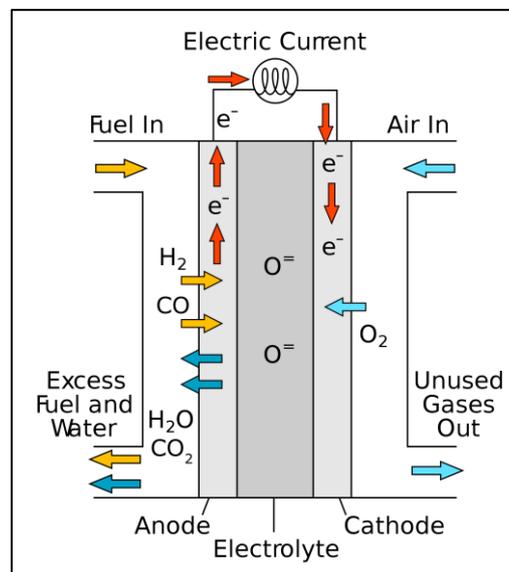


Abbildung 2-3: Schematische Darstellung der SOFC [Fuel Cell Markets 2011]

| | | |
|------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------|------------------------------|
| Anode: | $H_2 + O^{2-} \rightarrow H_2O + 2 e^-$ $CO + O^{2-} \rightarrow CO_2 + 2 e^-$ | Oxidation/Elektronenabgabe |
| Kathode: | $0,5 O_2 + 2 e^- \rightarrow O^{2-}$ | Reduktion/Elektronenaufnahme |
| Gesamtreaktion: | $H_2 + 0,5 O_2 \rightarrow H_2O$ $CO + 0,5 O_2 \rightarrow CO_2$ | Redoxreaktion |

Die erreichbare Zellspannung kann aus einem Spannungs-Strom-Diagramm (Abbildung 2-4) ermittelt werden. In diesem ist zuoberst die Heizwertspannung E_H^0 aufgetragen (theoretisch maximal erreichbares Spannungsniveau bei Standardzustand). Die Heizwertspannung vermindert sich jedoch um den Entropieanteil $T\Delta S$, der aufgrund eines vom Standardzustand abweichenden Umgebungszustandes nicht genutzt werden kann. So erhält man das Standardpotenzial E^0 . [Eichseder, Klell 2010, S. 224]

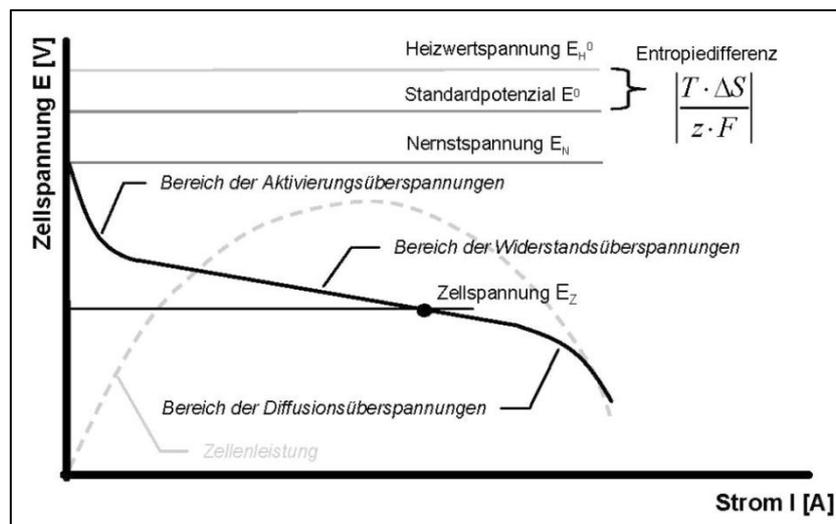


Abbildung 2-4: Strom-Spannungs-Kennlinie einer Brennstoffzelle [Eichlseder, Klell 2010, S. 224]

Gibt es Abweichungen vom Standardzustand, so wird nur die so genannte Nernstspannung E_N (auch als Leerlaufspannung bekannt) erreicht. Diese berücksichtigt die Temperatur und die Aktivitäten der Reaktionspartner. [Eichlseder, Klell 2010, S. 225]

Davon ausgehend verringert sich die reale Zellspannung nochmals bei Belastung (Anschluss eines Verbrauchers) aufgrund unterschiedlicher Hemmungen des Ladungstransports. Die resultierende effektive Spannung der Zelle wird als Zellspannung E_Z bezeichnet. Bei den Verlusten sind drei Bereiche zu unterscheiden: Bereich der Aktivierungsüberspannungen, der Widerstandsüberspannungen und der Diffusionsüberspannungen. [Eichlseder, Klell 2010, S. 225]

- Aktivierungsüberspannungen: Begründet durch die Endlichkeit der Ladungsdurchtrittsgeschwindigkeit durch die Phasengrenzfläche zwischen Elektrode und Elektrolyt.
- Widerstandsüberspannungen: Treten aufgrund des Innenwiderstandes der Zelle auf (Ohm'sche Verluste). Die Zellspannung sinkt annähernd linear mit steigender Stromstärke.
- Diffusionsüberspannungen: Aufgrund unzureichender Transportprozesse bei hohen Strömen. Die Zufuhr der Reaktionsgase zur Reaktionszone sowie der Abtransport der Produkte aus der Reaktionszone laufen zu langsam ab.

In Abbildung 2-4 ist außerdem die elektrische Zellenleistung grau strichliert dargestellt ($P_{el} = U \cdot I$).

Der Zellenwirkungsgrad wird definiert durch das Verhältnis zwischen der tatsächlichen momentanen Zellspannung E_Z zur theoretischen Heizwertspannung E_H^0 : [Eichlseder, Klell 2010, S. 225]

$$\eta_Z = \frac{E_Z}{E_H^0} \quad (2-1)$$

2.4.2 Charakterisierung der SOFC

Positive Eigenschaften der SOFC:

- Da Temperaturen über 500 °C vorliegen, ist die Brennstoffzelle in der Lage, den Brennstoff intern mit Hilfe von Katalysatormetallen wie Ruthenium und Cer zu Kohlenmonoxid und

Wasserstoff zu reformieren (die Reformierung muss allerdings nicht intern erfolgen). [Eichlseder, Klell 2010, S. 238]

- Die SOFC ist einfach und robust aufgebaut. Es ist kein Flüssigkeitsmanagement erforderlich (wie etwa bei der feuchten Membran einer PEM Brennstoffzelle). [Eichlseder, Klell 2010, S. 238]
- Verschiedene Bauweisen realisierbar (planar, tubular, monolithisch). [EG&G 2004, S. 1-12]
- Durch die hohe Betriebstemperatur können kostengünstige Katalysatormaterialien zur Anwendung kommen: z.B. Nickel an der Anode (statt Platin wie bei der Anode der PEM Brennstoffzelle). [Nagel 2008, S. 46]
- Bei Abwärmenutzung der SOFC in einer Kraft-Wärme-Kopplung kann der hohe Wirkungsgrad nochmals gesteigert werden. [Eichlseder, Klell 2010, S. 238]

Negative Eigenschaften der SOFC:

- Die hohe Betriebstemperatur erfordert teure Werkstoffe hinsichtlich der Dichtungen und der Bipolarplatten (engl. „Interconnects“). [Nagel 2008, S. 47]
- Start-up und Shut-down dauern lang, und die Toleranz der SOFC gegenüber Temperaturzyklen ist gering. [Nagel 2008, S. 47]

2.4.3 Mögliche Bauweisen der Zelle

Derzeit existieren zwei praktisch umsetzbare Bauweisen von Zellen: Die tubulare (rohrförmige) und die planare (ebene) Bauweise. In diesem Kapitel sollen beide näher erläutert werden.

2.4.3.1 Tubulare (rohrförmige) Bauweise

Bei der tubularen Bauweise kann die größte aktive Zelloberfläche erreicht werden. Die langen Zellrohre werden durch Extrusion hergestellt. Auf einem keramischen Kathodenrohr bringt man Elektrolyt und Anode außen in dünnen Schichten auf. Das Kathodenrohr ist an einem Ende verschlossen, weshalb man keine Dichtung zur Trennung von Brennstoff und Oxidationsmittel benötigt. Das Oxidationsmittel wird durch ein zweites, koaxiales Keramikrohr in die Nähe des geschlossenen Endes des Kathodenrohres eingeblasen. Am offenen Ende des Rohres wird die überschüssige Luft mit dem überschüssigen Brennstoff verbrannt. [Nagel 2008, S. 50 f.]

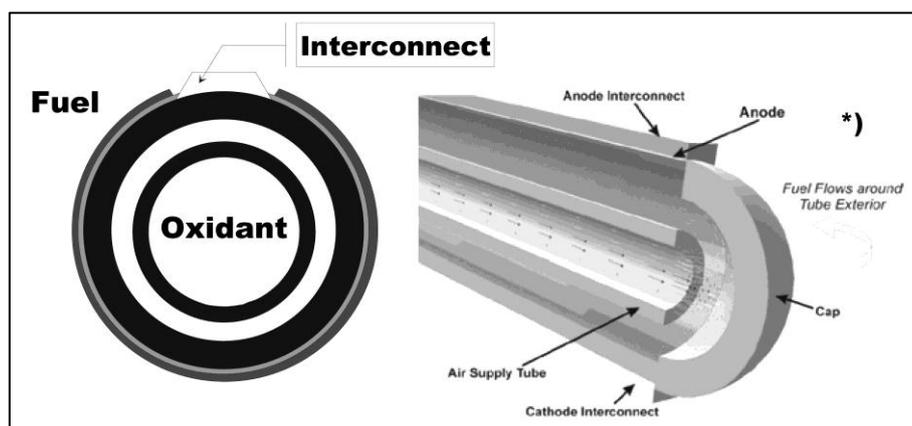


Abbildung 2-5: Tubulare Bauweise einer Brennstoffzelle [Nagel 2008, S. 51]

Die tubulare Bauweise ist zuverlässig und robust, jedoch kann nur eine geringe Leistungsdichte erreicht werden. Dies erklärt sich durch hohe Ohm'sche Verluste (lange Strompfade) sowie durch unzureichende Transportprozesse des Sauerstoffs zur Reaktionszone der dicken Kathodenschicht. Ein Nachteil sind außerdem die hohen Herstellungskosten, die durch die teure Beschichtungstechnik der Keramikrohre (z.B. elektrochemisches Aufdampfen) entstehen. [Nagel 2008, S. 51]

2.4.3.2 Planare (ebene) Bauweise

Bei der planaren Bauweise sind die Zellen in Ebenen aufgestapelt. Die Kanäle für Brennstoff und Oxidationsmittel werden durch die Bipolarplatten (interconnects) definiert, die die einzelnen Zellen verbinden. Man unterscheidet zwischen Gleichstrom-, Querstrom- oder Gegenstromkonfiguration. [Nagel 2008, S. 51 f.]

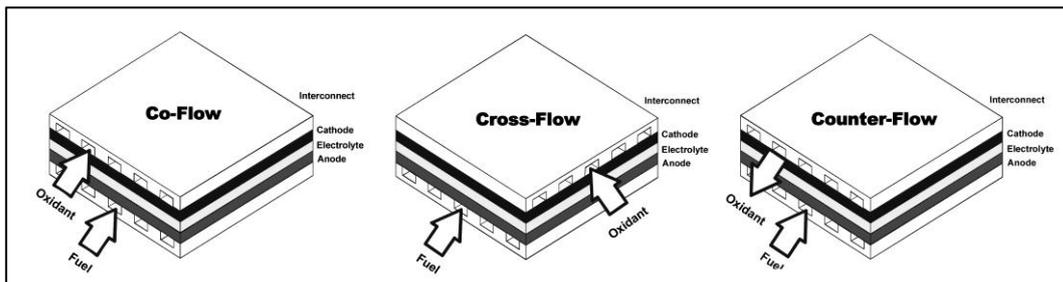


Abbildung 2-6: Durchströmung eines planaren Brennstoffzellenstacks [Nagel 2008, S. 52]

Die planare Bauweise ermöglicht eine hohe Leistungsdichte, weil die Strompfade kürzer sind (weniger Ohm'sche Verluste) und die Zellen sich einfach, in Serie geschaltet, zu einem Stack stapeln lassen. Die simple, flache Zellenbauweise besitzt hohes Potenzial hinsichtlich Kostenreduktion durch Massenproduktion. Die Zellgröße ist jedoch durch die Fertigungstechnik limitiert. Problematisch an der planaren Bauweise ist, dass Dichtungen zur Trennung von Brennstoff und Oxidationsmittel benötigt werden. [Nagel 2008, S. 52]

Auch die Temperaturbelastung ist bei planaren Zellen ein wichtiges Thema, da diese nicht so robust gebaut sind wie die tubularen. Hohe mechanische Spannungen können etwa entstehen durch die gegenseitige Beeinflussung von Werkstoffen, schlecht ausgewogene endothermische/exothermische Reaktionen und durch den transienten Betrieb der Zelle. [Nagel 2008, S. 52]

2.4.4 Mögliche Bauweisen der Stützschrift

Die Stützschrift ist das tragende Bauelement der Zelleinheit. Dafür kommen entweder Kathoden-, Elektrolyt- oder Anodenschicht in Frage. Auch eine passive Stützschrift kann verwendet werden. Mögliche Konfigurationen werden in Abbildung 2-7 gezeigt:

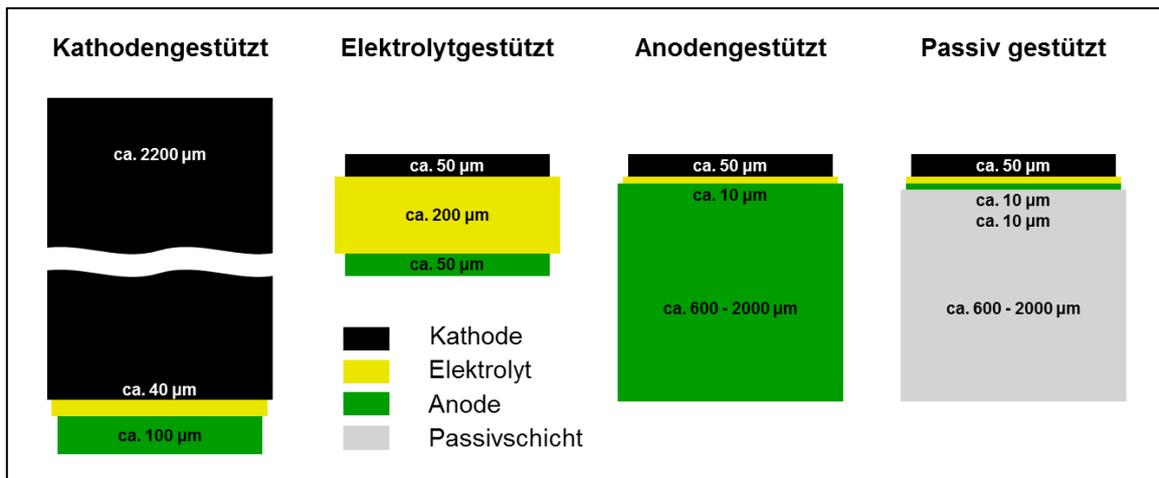


Abbildung 2-7: Mögliche Bauweisen der Stützschrift [Nagel 2008, S. 53]

Bei tubularen Zellen wird in der Regel die Kathodenschicht als Stützschrift verwendet. Das Kathodenrohr kann günstig durch Extrusion gefertigt werden und ist robust ausgebildet. Der dicke Querschnitt bedeutet allerdings eine beeinträchtigte Gasdurchlässigkeit, was zu hohen Diffusionsüberspannungen führt. [Nagel 2008, S. 53]

Der Elektrolyt als Träger ist ebenfalls robust, jedoch leidet die Zelle in diesem Fall unter hohen Ohm'schen Verlusten. Als Gegenmaßnahme werden solche Zellen bei hohen Temperaturen um ca. 1000 °C betrieben. [Nagel 2008, S. 53]

Durch die Anode als Stützschrift können hohe Ohm'sche Verluste beim Elektrolyt vermieden werden. Die gute Leitfähigkeit der Anode erlaubt deshalb auch eine etwas niedrigere Betriebstemperatur von ca. 700 bis 800 °C, wodurch ferritischer Chromstahl für die Bipolarplatten verwendet werden kann (mindert nochmals die Ohm'schen Verluste). Durch die dicke Anodenschicht werden auch Voraussetzungen für eine bessere interne Reformierung geschaffen (größere Oberfläche, mehr Porenraum). [Nagel 2008, S. 54]

Eine passive Stützschrift (Keramik oder Metall) erlaubt es, Anode, Elektrolyt und Kathode sehr dünn auszubilden. Metall als Stützschrift ist mechanisch stark beanspruchbar, stabil gegenüber Redox-Reaktionen und besitzt das Potenzial für Betriebstemperaturen unter 600 °C, was sich auch positiv hinsichtlich der Start-up Zeit auswirkt. Metall ist außerdem billiger als Keramik und lässt sich einfacher fügen. Die gute Wärmeleitfähigkeit verhindert starke, lokale Temperaturgradienten. Eine Diskrepanz ergibt sich jedoch zwischen der Temperaturdehnung von Metall und den restlichen Zellschichten. Außerdem sind Metalle anfällig für Korrosionsprozesse und müssen daher unter den gegebenen Bedingungen aufwendig legiert werden. [Nagel 2008, S. 54]

2.4.5 Werkstoffe der SOFC

Die wichtigsten Anforderungen an die Bestandteile der Zelle sind jene hinsichtlich der Leitfähigkeit von Elektronen und Sauerstoffionen. [Nagel 2008, S. 54 f.]

- Die Elektroden müssen Elektronen gut leiten. Ionenleitung ist ebenfalls anzustreben.
- Der Elektrolyt muss Sauerstoffionen gut leiten, Elektronen hingegen gar nicht.
- Die Bipolarplatten dürfen keine Sauerstoffionen leiten, sollen aber dafür den Elektronen keinen Widerstand leisten.

Weitere Anforderungen, die die SOFC Werkstoffe erfüllen müssen: [Nagel 2008, S. 55]

- Mechanische und chemische Stabilität bei hohen Temperaturen und gegenüber Redox-Reaktionen.
- Ähnliche thermo-mechanische Eigenschaften (z.B. Wärmeausdehnungskoeffizient).
- Niedrige Kosten und leicht zu bearbeiten.
- Optimale Gasdiffusion (bei den Elektroden).
- Gasdichtheit (beim Elektrolyten)

Die derzeit üblichen Werkstoffe nochmals zusammengefasst: [Nagel 2008, S. 55 ff.]

- Anode: Cermet Verbundwerkstoff aus Nickeloxid und yttriumdotiertem Zirkoniumdioxid
- Elektrolyt: Yttriumdotiertes Zirkoniumdioxid
- Kathode: Lanthan-Strontium-Manganoxid (bzw. LSM-YSZ Mischungen), aber auch Lanthan-Strontium-Kobaltoxid oder Cer-Gadoliniumoxid
- Bipolarplatten: Metallisch (z.B. ferritisch mit bis zu 17 % Chrom) oder keramisch
- Dichtungen: Typischerweise aus Glas- oder glaskeramischen Werkstoffen

2.4.6 Schädigung durch Strukturspannungen

Es gibt mehrere Mechanismen, durch die eine Zelle während ihrer Lebensdauer geschädigt werden kann. Dazu zählen etwa Veränderungen in der Zellstruktur, Kohlenstoffablagerung am Katalysatormaterial oder Katalysatorvergiftung. Näher eingegangen wird an dieser Stelle jedoch nur auf Schädigung durch Spannungen in der Zellstruktur.

Spannungen in der Zellstruktur können hervorgerufen werden durch: [Nagel 2008, S. 66 f.]

- Unterschiedliche Wärmeausdehnungskoeffizienten der verwendeten Werkstoffe
- Externe mechanische Belastungen
- Räumliche und zeitliche Temperaturgradienten

Insbesondere der letzte Punkt und seine Auswirkungen auf die Lebensdauer der Zelle sollen mit Hilfe dieser Diplomarbeit beim Aufwärmprozess einer Brennstoffzelle näher untersucht werden.

2.4.7 Die SOFC als Diesel-APU

Die Oxidkeramik-Brennstoffzelle besitzt das Potenzial, als APU (Auxiliary Power Unit) zur Marktreife zu gelangen. Als wichtiger Anwendungsbereich gelten Lastkraftwagen in den Vereinigten Staaten von Amerika, die, durch Gesetzgebungen eingeschränkt, in Zukunft nicht mehr die Verbrennungskraftmaschine zur Erzeugung von Strom bei Stillstand des Fahrzeuges laufen lassen dürfen.

Der Betrieb einer Brennstoffzelle mit dem Dieseltreibstoff aus dem Tank des Fahrzeuges erfordert jedoch eine vorgelagerte Reformation. Es gibt mehrere Möglichkeiten, um aus dem Diesel Wasserstoff zu generieren: [Eichseder, Klell 2010, S. 64 ff.]

1. **Partielle Oxidation:** Der Diesel wird mit Sauerstoff unter Einsatz eines Katalysators bei einer Temperatur von 600 °C bis 850 °C zu Wasserstoff und Kohlenmonoxid reformiert (leicht exotherm).
2. **Dampfreformierung:** Kohlenwasserstoffverbindungen und Wasserdampf reagieren zu Kohlenmonoxid und Wasserstoff. Die Reaktion läuft endotherm bei Temperaturen von 700

°C bis 900 °C und Drücken von 20 bar bis 40 bar ab; Katalysatoren werden zur Beschleunigung eingesetzt.

3. **Autotherme Reformierung:** Verknüpfung von Vorteilen der Dampfreformierung (höhere Wasserstoffausbeute) und der partiellen Oxidation (Abgabe von Wärmeenergie) in einem kombinierten Prozess. Jedoch ergibt sich eine höhere Komplexität der Anlage und wegen hoher Temperaturen entstehen Stickoxide.

3 Wärmeübertragung

In diesem Kapitel sollen die Grundlagen der Wärmeübertragung erörtert werden. Dazu zählen wichtige Gesetze, Begriffe und physikalische Größen, die zur Lösung technischer Aufgaben von Bedeutung sind. Zu allererst stellt sich die Frage, was man unter Wärmeübertragung versteht:

„Wärmeübertragung ist die Übertragung von thermischer Energie aufgrund einer Temperaturdifferenz.“ [Incropera, De Witt 2002, S. 2]

Immer, wenn eine Temperaturdifferenz in einem Medium oder zwischen Medien vorherrscht, kommt es zu Wärmeübertragung. Die Wärme fließt dabei immer in Richtung der niedrigeren Temperatur. Man unterscheidet zwischen drei Mechanismen der Wärmeübertragung, die in den folgenden Unterkapiteln näher behandelt werden:

- Wärmeleitung
- Konvektion
- Wärmestrahlung

3.1 Wärmeleitung

Unter Wärmeleitung versteht man das Fließen von Wärmeenergie aufgrund eines Temperaturgradienten in einem Festkörper oder einem ruhenden Fluid. Dies ist zurückzuführen auf die Bewegung von Atomen oder Molekülen eines Stoffes. [Incropera, De Witt 2002, S. 3]

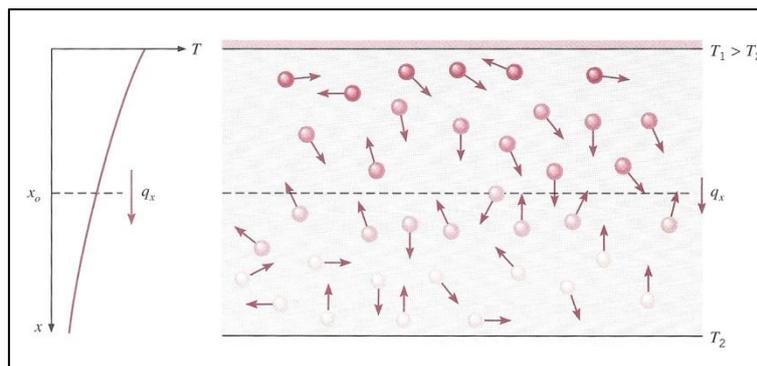


Abbildung 3-1: Wärmeleitung aufgrund molekularer Bewegung [Incropera, De Witt 2002, S. 3]

Energie wird von Teilchen mit höherer kinetischer Energie auf Teilchen mit niedrigerer kinetischer Energie übertragen. In Gasen und Flüssigkeiten können sich die Teilchen frei bewegen und es kommt zu Kollisionen die zur Weitergabe der Energie führen, während in Festkörpern die Oszillation des Gitters und die Bewegung von freien Elektronen für die Wärmeleitung verantwortlich sind. Die Wärmeleitung wird beschrieben durch das Fourier'sche Gesetz: [Incropera, De Witt 2002, S. 4]

$$\dot{\vec{q}} = -\lambda \vec{\nabla} T \quad (3-1)$$

Die Gleichung besagt, dass die lokale Wärmestromdichte q (Wärmestrom pro Flächeneinheit) proportional dem lokalen Temperaturgradienten ist. Als Proportionalitätskonstante dient die Wärmeleitfähigkeit λ . Das Minuszeichen auf der rechten Seite der Gleichung ist notwendig, da die Wärme immer in Richtung zur tieferen Temperatur fließt.

Das Fourier'sche Gesetz ist ein Erfahrungssatz und basiert auf Experimenten. Es konnte bisher nicht in fundamentaler Weise aus physikalischen Gesetzen hergeleitet werden. [Incropera, De Witt 2002, S. 52]

Die Wärmeleitung in fluiden Medien, insbesondere in Gasen, ist aufgrund der größeren intermolekularen Abstände geringer als in Festkörpern. Die Einflüsse von Temperatur, Druck und chemischer Spezies können anhand der kinetischen Gastheorie erklärt werden. Die Wärmeleitfähigkeit ist direkt proportional der Anzahl von Teilchen pro Volumseinheit n , der mittleren molekularen Geschwindigkeit c und indirekt proportional dem mittleren freien Weg λ_W , d.h. der durchschnittlich zurückgelegten Distanz bis zu einer Kollision. Es gilt daher: [Incropera, De Witt 2002, S. 57]

$$\lambda = f(n \bar{c} \lambda_W) \quad (3-2)$$

Die molekulare Geschwindigkeit c (und somit die Wärmeleitfähigkeit) steigt mit höherer Temperatur und sinkender molekularer Masse. Da n und λ direkt bzw. indirekt proportional zum Druck sind, ist die Wärmeleitfähigkeit in einem weiten Bereich vom Druck unabhängig. Die temperaturabhängige Wärmeleitfähigkeit einiger Gase zeigt Abbildung 3-2:

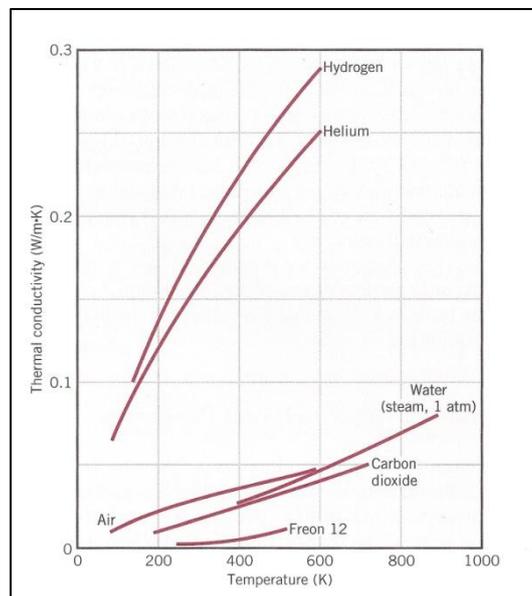


Abbildung 3-2: Temperaturabhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit ausgewählter Gase [Incropera, De Witt 2002: S.57]

3.2 Konvektion

Unter Konvektion versteht man den Energietransfer zwischen einer Oberfläche und einem Fluid, das sich über die Oberfläche bewegt. Obwohl der Mechanismus der Diffusion dabei eine Rolle spielt, kommt der überwiegende Teil der Wärmeübertragung durch die makroskopische Bewegung der Fluidteilchen zustande. Man spricht von *erzwungener Konvektion*, wenn der Teilchentransport durch äußere Einwirkung (z.B. durch ein Gebläse) hervorgerufen wird. Im Gegensatz dazu steht die *freie* oder *natürliche Konvektion*, bei der der Teilchentransport rein durch Auswirkungen des Temperaturgradienten (z.B. Auf- oder Abtrieb des Fluids) bewirkt wird. [Incropera, De Witt 2002, S. 326]

Die Konvektion soll nun näher am Beispiel einer ebenen Platte der Länge L mit der konstanten Oberflächentemperatur T_s erläutert werden (Abbildung 3-3). Die Platte wird längs angeströmt von einem Fluid mit der Geschwindigkeit u_∞ und der Temperatur T_∞ , es kommt zu konvektivem Wärmeübergang.

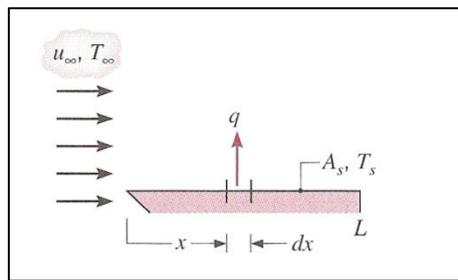


Abbildung 3-3: Konvektiver Wärmeübergang an einer ebenen Platte [Incropera, De Witt 2002, S. 327]

Die lokale Wärmestromdichte q kann eindimensional wie folgt ausgedrückt werden (Newton's law of cooling): [Incropera, De Witt 2002, S. 326]

$$q = \alpha(T_s - T_\infty) \quad (3-3)$$

Dabei ist α der lokale Wärmeübergangskoeffizient. Da sich die Strömungsverhältnisse entlang der Platte ändern, sind auch q und α über x nicht konstant. Der gesamte Wärmestrom \dot{Q} kann durch Integration der Wärmestromdichte über die Plattenoberfläche ermittelt werden: [Incropera, De Witt 2002, S. 326]

$$\dot{Q} = \int_0^L \dot{q} dx \quad (3-4)$$

3.2.1 Die Geschwindigkeitsgrenzschicht

Jene Fluidteilchen, die bei der Längsanströmung einer ebenen Platte mit deren Oberfläche in Kontakt treten, werden auf die Geschwindigkeit null abgebremst. Diese Teilchen bremsen wiederum jene in der nächstoberen Fluidschicht und so weiter, bis der Effekt schließlich bei einem Abstand $y = \delta$ von der Oberfläche vernachlässigbar klein wird. Die Abbremsung des Fluids steht in Zusammenhang mit Schubspannungen τ , die in Ebenen parallel zur Fluidgeschwindigkeit auftreten. [Incropera, De Witt 2002, S. 331]

Je größer der Abstand in y -Richtung wird, umso mehr nimmt auch die Fluidgeschwindigkeit u zu, bis die Geschwindigkeit u_∞ der Außenströmung erreicht ist. Der Abstand δ wird als *Grenzschichtdicke* bezeichnet und ist typischerweise definiert als jener Wert von y , für den $u = 0,99 \cdot u_\infty$ gilt. Das *Geschwindigkeitsprofil* in der Grenzschicht stellt einen Zusammenhang zwischen der Geschwindigkeit u und dem Abstand y innerhalb der Grenzschicht her. [Incropera, De Witt 2002, S. 331]

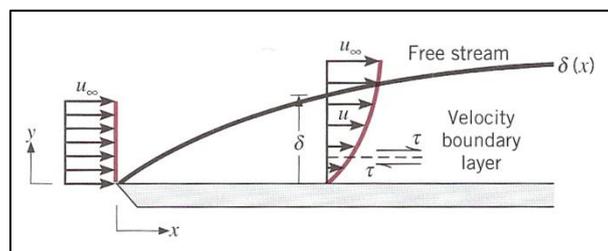


Abbildung 3-4: Geschwindigkeitsgrenzschicht an einer ebenen Platte [Incropera, De Witt 2002, S. 331]

Je Größer der Abstand von der Eintrittskante der Platte wird, umso mehr wirken sich auch die Effekte der Viskosität in die Außenströmung aus. Die Grenzschichtdicke δ steigt daher mit x .

3.2.2 Die Temperaturgrenzschicht

Mit Ausbildung einer Geschwindigkeitsgrenzschicht kommt es auch zur Ausbildung einer Temperaturgrenzschicht, sofern die Temperatur des ankommenden Fluids und die Temperatur der Plattenoberfläche unterschiedlich sind. Fluidteilchen, die in Kontakt mit der Oberfläche treten, nehmen deren Temperatur an. Diese Teilchen geben ihre thermische Energie an die nächste Fluidschicht weiter usw., es kommt zur Ausbildung von Temperaturgradienten. Jene Schicht, in der Temperaturgradienten existieren, wird als *Temperaturgrenzschicht* δ_t bezeichnet. Mit zunehmendem Abstand von der Eintrittskante der Platte dringen die Effekte des Wärmeübergangs weiter in die Außenströmung ein und die Temperaturgrenzschicht δ_t wächst: [Incropera, De Witt 2002, S. 332]

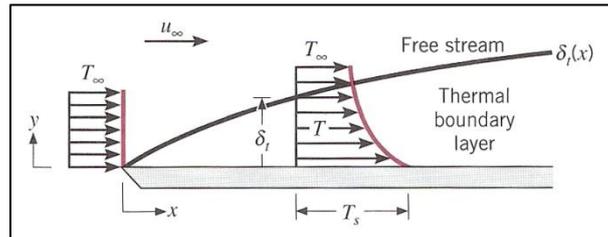


Abbildung 3-5: Temperaturgrenzschicht an einer ebenen Platte [Incropera, De Witt 2002, S. 332]

Der Zusammenhang zwischen der Temperaturgrenzschicht und dem Wärmeübergangskoeffizienten kann wie folgt hergestellt werden: Bei einem Abstand x von der Eintrittskante der Platte wird die lokale Wärmestromdichte q ermittelt durch Anwendung des Fourier'schen Gesetzes (Gleichung (3-1)) auf das Fluid bei $y = 0$. [Incropera, De Witt 2002, S. 332]

$$\dot{q}_s = -\lambda_f \left. \frac{\partial T}{\partial y} \right|_{y=0} \quad (3-5)$$

Der Ausdruck ist gültig, da an der Oberfläche die Geschwindigkeit null ist und daher nur Wärmeleitung zum Tragen kommt. Durch Kombination von Gleichung (3-5) mit Gleichung (3-3) (Newton's law of cooling), kann der lokale Wärmeübergangskoeffizient α wie folgt ausgedrückt werden: [Incropera, De Witt 2002, S. 333]

$$\alpha = \frac{-\lambda_f \left. \frac{\partial T}{\partial y} \right|_{y=0}}{T_s - T_\infty} \quad (3-6)$$

Es wird dadurch klar, dass der Temperaturgradient ausschlaggebend für die Wärmeübertragung ist. Der Temperaturgradient ist wiederum stark abhängig von den Gegebenheiten in der Temperaturgrenzschicht. Da die Temperaturgrenzschichtdicke δ_t mit x zunimmt, nimmt der Temperaturgradient ab - Und damit auch der Wärmeübergangskoeffizient α . [Incropera, De Witt 2002, S. 333]

3.2.3 Laminare und turbulente Strömung

Reibung an der Oberfläche und Wärmeübergang hängen stark davon ab, ob die Geschwindigkeitsgrenzschicht laminar oder turbulent ist. Laminar bedeutet, dass die Teilchenbewegung geordnet und entlang von Stromlinien stattfindet. Die Stromlinien haben auch Geschwindigkeitskomponenten in y -Richtung (normal zur Platte), da die Grenzschicht ja in x -Richtung wächst. [Incropera, De Witt 2002, S. 336]

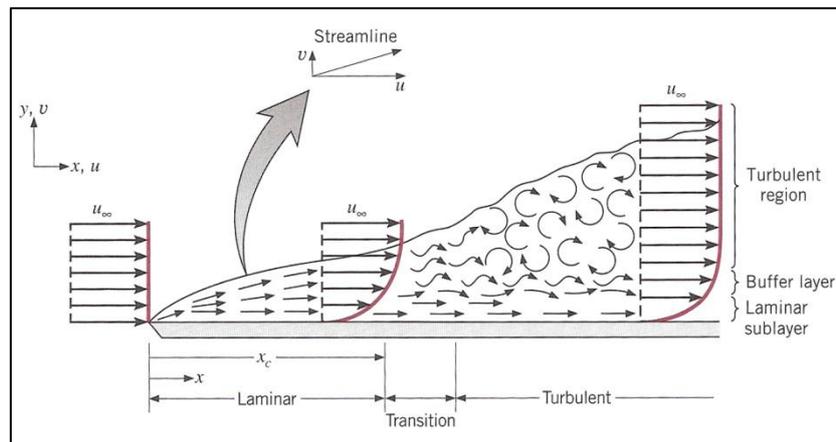


Abbildung 3-6: Entwicklung der Geschwindigkeitsgrenzschicht an einer ebenen Platte [Incropera, De Witt 2002, S. 336]

Im Gegensatz zur laminaren Strömung ist die turbulente Strömung durch eine hochgradig ungeordnete Bewegung der Teilchen geprägt und es kommt zu Geschwindigkeitsschwankungen. Diese Fluktuation führt zu einem erhöhten Austausch von Energie und damit zu höheren Wärmeübergangsraten, aber auch zu erhöhter Reibung an der Oberfläche. [Incropera, De Witt 2002, S. 337]

Abbildung 3-6 zeigt, dass die Grenzschicht von der Eintrittskante weg laminar ist. Nach einer gewissen Distanz x_c werden allerdings kleine Störungen immer weiter verstärkt, bis sich eine turbulente Strömung ausbildet. In der turbulenten Zone wird zwischen drei Regionen unterschieden: Dem *Laminar Sublayer*, wo die Wärmeleitung dominiert, dem *Buffer layer*, wo Diffusion und turbulente Mischung gleichzeitig auftreten, und der *Turbulent Region*, in der die turbulente Mischung vorherrscht. [Incropera, De Witt 2002, S. 337]

3.2.4 Mathematische Formulierungen zur Beschreibung der Konvektion

An dieser Stelle sollen die zur Beschreibung der Konvektion notwendigen Gleichungen näher erläutert werden. Dies sind insbesondere die Kontinuitätsgleichung (Massenerhaltung), Strömungsgleichung (Impulserhaltung) und Energieerhaltungsgleichung. Die Lösung dieses Systems von fünf Gleichungen (plus Zustandsgleichung des Mediums) mit den Variablen u , v , w , Druck p , Dichte ρ und Temperatur T ist in der Regel nur mit Hilfe numerischer Methoden möglich.

3.2.4.1 Kontinuitätsgleichung (Massenerhaltung)

In Abbildung 3-7 sind die **Massenflüsse** für ein kartesisches Gitter im zweidimensionalen Fall dargestellt. Daraus ergeben sich ein- und ausfließende Massenströme.

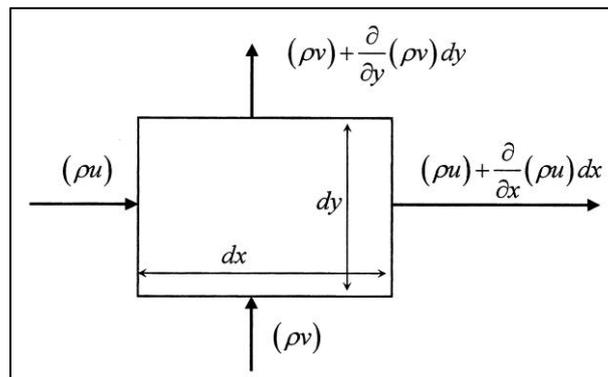


Abbildung 3-7: Massenflüsse im zweidimensionalen Fall für ein kartesisches Gitter

$$\text{Ein: } \rho u dy + \rho v dx \quad (3-7)$$

$$\text{Aus: } \left(\rho u + \frac{\partial \rho u}{\partial x} dx \right) dy + \left(\rho v + \frac{\partial \rho v}{\partial y} dy \right) dx \quad (3-8)$$

Die zeitliche Änderungsrate der Masse im Volumen $\partial \rho / \partial t dx dy$ folgt aus der Summe der Massenflüsse:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} dx dy = \rho u dy + \rho v dx - \left[\left(\rho u + \frac{\partial \rho u}{\partial x} dx \right) dy + \left(\rho v + \frac{\partial \rho v}{\partial y} dy \right) dx \right] \quad (3-9)$$

Zusammengefasst für den zweidimensionalen bzw. den dreidimensionalen Fall ergeben sich:

$$2D: \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u}{\partial x} + \frac{\partial \rho v}{\partial y} = 0 \quad (3-10)$$

$$3D: \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u}{\partial x} + \frac{\partial \rho v}{\partial y} + \frac{\partial \rho w}{\partial z} = 0 \quad (3-11)$$

3.2.4.2 Strömungsgleichung (Impulserhaltung)

Da der Impuls eine vektorielle Größe ist, sind drei Gleichungen zur vollständigen Darstellung notwendig. Die Summe der Kräfte, die auf das Fluidelement wirken, ist ausschlaggebend für die Änderungsrate des Impulses. Man unterscheidet zwischen Oberflächenkräften (z.B. Druckkräfte, viskose Kräfte) und Körperkräften (z.B. Gravitation, Zentrifugalkraft, Corioliskraft). [Versteeg, Malalasekera 2007, S. 14]

Abbildung 3-8 zeigt die Impulsflüsse über die Oberflächen und die Kräfte auf ein Fluidelement für den Impuls in x-Richtung (Geschwindigkeitskomponente u) dargestellt:

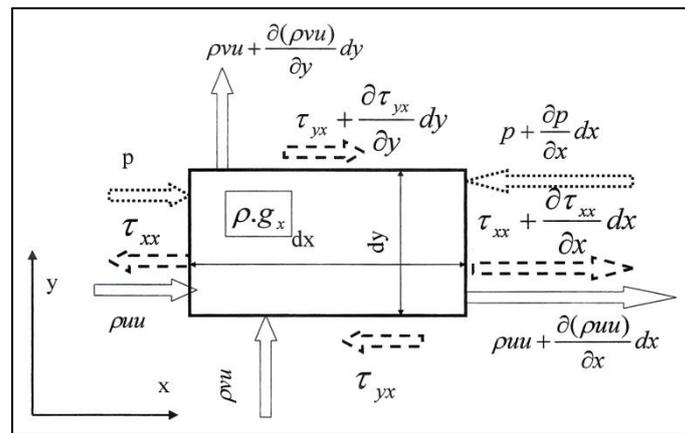


Abbildung 3-8: Impulsflüsse über die Oberflächen und Kräfte auf ein Fluidelement (x-Richtung)

Die **Impulsströme** ergeben sich zu:

$$\text{Ein: } (\rho u) u dy + (\rho v) u dx \quad (3-12)$$

$$\text{Aus: } \left[(\rho u) u + \frac{\partial}{\partial x} (\rho u) u dx \right] dy + \left[(\rho v) u + \frac{\partial}{\partial y} (\rho v) u dy \right] dx \quad (3-13)$$

$$\text{Summe: } -\frac{\partial}{\partial x} (\rho u) u dx dy - \frac{\partial}{\partial y} (\rho v) u dx dy \quad (3-14)$$

Die Summe der **viskosen Kräfte** ergibt sich zu:

$$\left(-\tau_{xx} + \tau_{xx} + \frac{\partial}{\partial x} \tau_{xx} dx \right) dy + \left(-\tau_{yx} + \tau_{yx} + \frac{\partial}{\partial y} \tau_{yx} dy \right) dx = \frac{\partial}{\partial x} \tau_{xx} dx dy + \frac{\partial}{\partial y} \tau_{yx} dy dx \quad (3-15)$$

Die Summe der **Druckkräfte** ergibt:

$$\left[p - \left(p + \frac{\partial p}{\partial x} dx \right) \right] dy = -\frac{\partial p}{\partial x} dx dy \quad (3-16)$$

Als **Quellterm** kommt beispielhaft die Erdbeschleunigung in x-Koordinatenrichtung zum Tragen:

$$\rho g_x dx dy \quad (3-17)$$

Daraus ergibt sich die Änderungsrate des Impulses (zweidimensional, auf ein Volumen $dx \cdot dy \cdot 1$ bezogen) in Vektorschreibweise:

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial \rho u u}{\partial x} + \frac{\partial \rho v u}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \rho g_x \quad (3-18)$$

In Tensorschreibweise:

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + \rho g_i \quad (3-19)$$

Durch Anwendung des Stokes'schen Gesetzes für Newton'sche Fluide (Schubspannung proportional zur Formänderungsgeschwindigkeit) kann die Gleichung wie folgt angeschrieben werden (Navier-Stokes Gleichung):

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \rho g_i \quad (3-20)$$

3.2.4.3 Energieerhaltung

Zunächst soll ganz allgemein die Erhaltung einer skalaren Größe (z.B. Energie, Temperatur, turbulente kinetische Energie usw.) für den zweidimensionalen Fall hergeleitet werden. In Abbildung 3-9 sind die Flüsse einer skalaren Größe über die Oberflächen des Kontrollvolumens dargestellt.

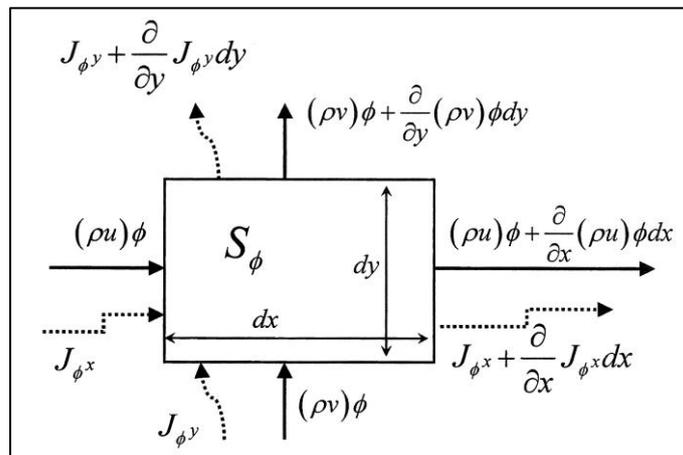


Abbildung 3-9: Erhaltung einer skalaren Größe im zweidimensionalen Fall

Die Differenz aus ein- und ausfließenden Strömen (konvektiver Transport) ergibt sich zu:

$$-\frac{\partial}{\partial x}(\rho u)\phi dx dy - \frac{\partial}{\partial y}(\rho v)\phi dy dx \quad (3-21)$$

Die Differenz aus ein- und ausfließendem molekularem Transport ergibt:

$$-\frac{\partial}{\partial x} J_{\phi,x} dx dy - \frac{\partial}{\partial y} J_{\phi,y} dy dx \quad (3-22)$$

Als Quellterm kommt zum Tragen:

$$\rho S_\phi dx dy \quad (3-23)$$

Daraus folgt nun die vollständige zweidimensionale Erhaltungsgleichung:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho \phi \, dx \, dy = & - \frac{\partial}{\partial x} (\rho u) \phi \, dx \, dy - \frac{\partial}{\partial y} (\rho v) \phi \, dx \, dy - \frac{\partial}{\partial x} J_{\phi x} \, dx \, dy \\ & - \frac{\partial}{\partial y} J_{\phi y} \, dx \, dy + \rho S_{\phi} \, dx \, dy \end{aligned} \quad (3-24)$$

Diese lautet in Tensorschreibweise, bezogen auf ein Volumen:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho \phi + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j) \phi = - \frac{\partial}{\partial x_j} J_{\phi j} + \rho S_{\phi} \quad (3-25)$$

Der molekulare Transport wird mit dem Fick'schen Gesetz berechnet. Der molekulare Diffusionsfluss ist dabei negativ proportional zum Gradienten der skalaren Größe (in x-Richtung):

$$J_{\phi x} = -\Gamma_{\phi} \frac{\partial \phi}{\partial x} \quad (3-26)$$

Oder in Tensorschreibweise allgemein:

$$J_{\phi j} = -\Gamma_{\phi} \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \quad (3-27)$$

Damit ergibt sich die Erhaltungsgleichung in Tensorschreibweise, bezogen auf ein Volumen, wie folgt:

$$\frac{\partial \rho \phi}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j \phi}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Gamma_{\phi} \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \right) + \rho S_{\phi} \quad (3-28)$$

Zur Herleitung der Energiebilanz erfolgt eine Betrachtung des Transports der spezifischen Enthalpie h unter Vernachlässigung des Mach-Zahl-Einflusses (inkompressible Strömung) und der Dissipation. Mit Temperatur T , Wärmeleitfähigkeit k und Wärmequelle S_h lautet die Energieerhaltungsgleichung wie folgt:

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial u_i h}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(k \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) + S_h \quad (3-29)$$

Für ideale Gase bei Druckänderungen gilt:

$$c_p \frac{\partial T}{\partial x_i} = \frac{\partial h}{\partial x_i} \quad (3-30)$$

Daraus ergibt sich für die Energiegleichung:

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial u_i T}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{k}{c_p} \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) + \frac{S_h}{c_p} \quad (3-31)$$

3.2.4.4 Charakteristische Kennzahlen

Das kombinierte Strömungs- und Temperaturfeld hängt von mehreren dimensionslosen Kennzahlen ab, die in diesem Kapitel näher beschrieben werden sollen. Die Kennzahlen können aus dimensionsloser Impuls- und Energieerhaltungsgleichung hergeleitet werden.

Die **Reynolds-Zahl** charakterisiert einen Strömungszustand. Ein dimensionsloses Druck- oder Geschwindigkeitsfeld wird sich dann nicht ändern, wenn die charakteristische Länge verändert wird, aber auch die kinematische Viskosität und/oder die Geschwindigkeit so angepasst werden, dass die Reynolds-Zahl konstant bleibt. [Spurk, Aksel 2010, S. 110]

$$Re = \frac{u_{\infty} L}{\nu} \quad (3-32)$$

Die **Prandtl-Zahl** beschreibt das Verhältnis der Dicken von Geschwindigkeitsgrenzschicht und Temperaturgrenzschicht [Spurk, Aksel 2010, S. 467]

$$Pr = \frac{\nu}{a} \quad (3-33)$$

$$\text{mit } a = \frac{\lambda}{\rho_{\infty} c_p} \quad (3-34)$$

Die **Grashof-Zahl** steht für das Verhältnis aus Auftriebskräften und Zähigkeitskräften: [Spurk, Aksel 2010, S. 473]

$$Gr = \frac{g_x \beta L^3 (T_s - T_{\infty})}{\nu^2} \quad (3-35)$$

Die **Eckert-Zahl** gibt Aufschluss über das Verhältnis kinetische Energie zur Enthalpiedifferenz zwischen Wand und Flüssigkeit: [Spurk, Aksel 2010, S. 468]

$$Ec = \frac{u_{\infty}^2}{c_p (T_s - T_{\infty})} \quad (3-36)$$

Schließlich beschreibt noch die **Nusselt-Zahl** (dimensionslose Wärmeübergangszahl) das Verhältnis von wirklicher Wärmestromdichte zu Wärmestromdichte bei reiner Leitung im ruhenden Fluid: [Spurk, Aksel 2010, S. 472]

$$Nu = \frac{\alpha L}{\lambda} \quad (3-37)$$

Die Nusselt-Zahl hängt ab vom Ort an der Oberfläche und von dessen Beschaffenheit, sowie weiters von Re , Pr , Gr und Ec . Sie ist jedoch nicht abhängig von der y -Koordinate (gilt nur direkt an der Wand).

3.2.5 Reynolds-Zeitmittelung

Die Navier-Stokes Gleichungen gelten sowohl für laminare als auch für turbulente Strömungen. Man spricht von einer direkten numerischen Simulation, wenn alle Bewegungen der turbulenten Strömung aufgelöst werden können. Im Vergleich dazu ist es jedoch numerisch „kostengünstiger“,

das gesamte Turbulenzspektrum zu modellieren, d.h. durch einige wenige Größen darzustellen. [Fröhlich 2006, S. 54]

Die turbulente Größe wird bei der Reynolds-Zeitmittelung in einen zeitlichen Mittelwert \bar{u} und in eine Schwankungsbewegung u' gespalten: [Spurk, Akxel 2010, S. 224 f.]

$$u_i = \bar{u}_i + u_i' \quad (3-38)$$

Die Mittelungszeit ist klein im Vergleich mit der Entwicklung der Hauptströmung, aber groß im Vergleich mit dem Zeitmaß der turbulenten Schwankungsbewegungen. Wird die Reynolds-Zeitmittelung auf die Impulsgleichung

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \tau_{ij} + \rho g_i \quad (3-39)$$

angewandt, so ergibt sich nach dem Streichen jener Terme, die null ergeben:

$$\frac{\partial \rho \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho}{\partial x_j} (\bar{u}_i \bar{u}_j + \overline{u_i' u_j'}) = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \bar{\tau}_{ij} + \rho g_i \quad (3-40)$$

Dies lässt sich umformen zu folgender Gleichung (Reynolds-averaged Navier-Stokes):

$$\frac{\partial \rho \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho (\bar{u}_i \bar{u}_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} [\bar{\tau}_{ij} - \rho \overline{u_i' u_j'}] + \rho g_i \quad (3-41)$$

Man erhält also formal dieselben Erhaltungsgleichungen wie in Gleichung (3-39), jedoch mit einem, durch die Zeitmittelung entstandenen, zusätzlichen Korrelationsterm in der eckigen Klammer auf der rechten Seite. Dieser Term repräsentiert die sogenannten *Reynoldsspannungen*, welche durch die turbulente Zusatzbewegung des Fluids entstehen und ähnlich wie eine erhöhte Zähigkeit wirken. Für alle skalaren Größen wirkt die Turbulenz ebenso ähnlich wie ein erhöhter Diffusionskoeffizient.

3.2.6 Modellierung der turbulenten Schwankungsbewegungen

Die Reynoldsspannungen bilden im dreidimensionalen Fall eine Matrix von neun Korrelationstermen, die über die Hauptdiagonale symmetrisch sind (d.h. sechs neue Unbekannte). Werden diese jeweils als skalare Größen mit Hilfe einer Erhaltungsgleichung gelöst, so spricht man vom Reynoldsschubspannungsmodell (Turbulenzschließung 2. Ordnung). [Fröhlich 2006, S 52]

Technisch am wichtigsten seit 20 Jahren sind jedoch die sogenannten Wirbelviskositätsmodelle (Boussinesq-Ansatz; Turbulenzschließung 1. Ordnung), bei denen der Einfluss der Turbulenz nur über eine Größe berücksichtigt wird. [Fröhlich 2006, S 49]

Bei den Wirbelviskositätsmodellen werden die Reynoldsspannungen wie eine erhöhte laminare Viskosität behandelt. Die „turbulenten Spannungen“ werden analog wie die viskosen Spannungen für ein Newton'sches Fluid berechnet. Darin ist μ_t die turbulente Viskosität, die keine Stoffgröße darstellt, sondern vom Strömungszustand (Turbulenzgrad) abhängt. Für den dreidimensionalen Fall ergeben sich in Tensorschreibweise folgende Terme: [Fröhlich 2006, S. 49]

$$\tau_t = -\overline{\rho u'_i u'_j} = -\rho u_i u_j = \mu_t \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \rho k \delta_{ij} \quad (3-42)$$

Der Term ganz rechts in Gleichung (3-42) ist notwendig, da bei Index i gleich j die Summe der Normalspannungen aus Kontinuitätsgründen null wird. Das Kronecker-Delta δ_{ij} nimmt den Wert eins an, wenn Index i gleich j ist, sonst den Wert null. Die Variable k ist die kinetische Energie der turbulenten Schwankungsbewegungen. Sie ist definiert als ein halb Mal die Summe der drei Eigenkorrelationsterme der Schwankungsgeschwindigkeiten in die kartesischen Richtungen: [Fröhlich 2006, S. 18]

$$k = \frac{1}{2} \overline{u'_i u'_i} \quad (3-43)$$

Da die Formulierungen für laminare und turbulente Viskosität gleich sind, lassen sich beide zu einer „effektiven Viskosität“ addieren:

$$\mu_{eff} = \mu_l + \mu_t \quad (3-44)$$

Daher ergibt sich für die Reynoldsgleichungen mit dem Wirbelviskositätsansatz:

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu_{eff} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \rho k \delta_{ij} \right] + \rho g_i \quad (3-45)$$

Analog zum Wirbelviskositätsmodell kann der Korrelationsterm bei skalaren Größen ϕ mit dem Wirbeldiffusivitätsmodell behandelt werden:

$$-\overline{\rho u'_i \phi'} = \Gamma_t \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \quad (3-46)$$

Die Wirbeldiffusivität Γ_t wird aus der turbulenten Viskosität über einen meist konstanten Faktor errechnet:

$$\Gamma_t = \frac{\mu_t}{\sigma_t} \quad (3-47)$$

Darin ist σ_t die turbulente Prandtl-Zahl (für die Energieerhaltungsgleichung) bzw. die turbulente Schmid-Zahl für Stoffaustausch. Beide sind empirische Werte.

Alles in Allem gilt es nun, die „turbulente Zähigkeit“ μ_t zu beschreiben, um ein lösbares Gleichungssystem zu schaffen. Dabei wird unterschieden zwischen Turbulenzmodellen ohne Erhaltungsgleichung, mit einer Erhaltungsgleichung und mit zwei oder mehr Erhaltungsgleichungen. Im folgenden Kapitel soll näher auf die Turbulenzmodellierung mit zwei Erhaltungsgleichungen und insbesondere auf das k - ϵ Modell eingegangen werden.

3.2.7 Das k - ϵ Modell (Modell mit zwei Erhaltungsgleichungen)

Prandtl wies darauf hin, dass die turbulente Viskosität aus Dimensionsgründen als Produkt einer Länge und einer Geschwindigkeit notiert werden kann:

$$\mu_t = \rho L_m u \quad (3-48)$$

Bei einem Zweigleichungsmodell werden nun zur Bestimmung der turbulenten Viskosität Transportgleichungen für den turbulenten Geschwindigkeitsmaßstab u und den Mischungsweg L_m (charakteristischer turbulenter Längenmaßstab) gelöst. Die beiden Variablen können auch Kombinationen dieser Größen sein, so wie das etwa beim k - ε Modell der Fall ist. [Fröhlich 2006, S. 50 f.]

Das k - ε Modell ist der bekannteste Ansatz für ein Zweigleichungsmodell zur Modellierung der Turbulenz. Darin ist ε die Dissipationsrate für die turbulente kinetische Energie k . Der Modellansatz für die turbulente Viskosität lautet dabei: [Versteeg, Malalasekera 2007: S. 75]

$$\mu_t = c_\mu \rho \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (3-49)$$

Dieser Ansatz für μ_t ergibt sich aus dem turbulenten Geschwindigkeitsmaßstab $u = k^{1/2}$ und dem Mischungsweg $L_m = k^{3/2}/\varepsilon$, die Konstante c_μ muss empirisch berechnet werden.

Die Erhaltungsgleichung für die Turbulenzenergie k lautet wie folgt:

$$\frac{\partial k}{\partial t} + \frac{\partial u_j k}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Gamma_k \frac{\partial k}{\partial x_j} \right) + P_k - \varepsilon \quad (3-50)$$

Dabei ist P_k die Produktion von k („Quelle“), während die Dissipation ε eine „Senke“ darstellt. Für die Dissipation ε wird ebenfalls eine Erhaltungsgleichung formuliert:

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \frac{\partial u_j \varepsilon}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Gamma_\varepsilon \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right) + P_\varepsilon - E_\varepsilon \quad (3-51)$$

Die turbulenten Diffusionskoeffizienten für die turbulente kinetische Energie und die Dissipationsrate werden analog zu Gleichung (3-47) mit einer turbulenten Schmid-Zahl berechnet. [Fröhlich 2006, S. 51]

Es stehen nun neben zeitgemittelter Kontinuitätsgleichung, zeitgemittelten Impulsgleichungen und der zeitgemittelten Transportgleichung für skalare Größen auch die zwei Gleichungen aus dem k - ε Modell zur Schließung des Gleichungssystems zur Verfügung. Für die numerische Lösung werden alle Gleichungen auf eine allgemeine Form zurückgeführt, um einen einheitlichen Gleichungslöser anwenden zu können.

3.2.8 Wandnahe turbulente Strömung

In der Nähe einer festen Wand werden bei turbulenter Strömung die Fluktuationen stark gedämpft und sind auf der Wand selbst null. Es muss daher ein geeigneter Weg gefunden werden, die Geschwindigkeitsgrenzschicht zu modellieren. Die vollständige Auflösung der viskosen Unterschicht (laminar sublayer) würde ein sehr feines Gitter erfordern, was die numerische Lösung aufwändig macht. [Fröhlich 2006, S. 52 f.]

Abhilfe kann geschaffen werden, indem der viskose Teil der Grenzschicht quasi überbrückt wird. Der wandnächste Gitterpunkt wird in den turbulenten Bereich der Grenzschicht gelegt, wo das logarithmische Wandgesetz gültig ist: [Fröhlich 2006, S. 53 f.]

$$u^+ = \frac{1}{\kappa} \ln(y^+) + B \quad (3-52)$$

Dieses kann ausgewertet werden und liefert Randbedingungen für das Turbulenzmodell. Für die Konstanten κ und B sind die Werte $\kappa = 0,4$ bzw. $B = 5,5$ etabliert. [Fröhlich 2006, S. 33]

3.3 Wärmestrahlung

Der Transport von Wärme durch Strahlung geschieht mittels elektromagnetischer Wellen und benötigt kein Transportmedium. Die Emission ist zurückzuführen auf Veränderungen in der Elektronenkonfiguration der einzelnen Atome bzw. Moleküle. Sie kann sowohl von festen Körpern als auch von Flüssigkeiten und Gasen ausgehen. [Incropera, De Witt 2002, S. 9]

Abbildung 3-10 zeigt beispielhaft die Emission von Strahlung von der Oberfläche eines Festkörpers. Der Strahlungsfluss E (Strahlungsenergie je Flächeneinheit) wird durch das Stefan-Boltzmann-Gesetz beschrieben: [Incropera, De Witt 2002, S. 9]

$$E_b = \sigma T_s^4 \quad (3-53)$$

Dabei ist T_s die Absoluttemperatur an der Oberfläche und σ die Stefan-Boltzmann-Konstante ($\sigma = 5,67 \cdot 10^{-8} \text{ W}/(\text{m}^2 \cdot \text{K}^4)$). Eine derartige Oberfläche wird als idealer Strahler bzw. schwarzer Körper bezeichnet.

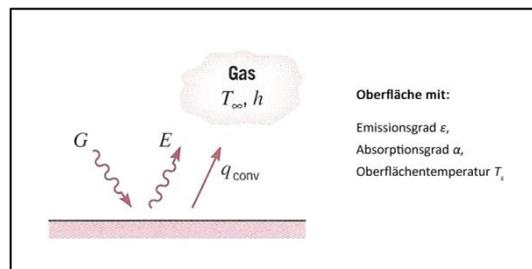


Abbildung 3-10: Strahlungsaustausch an einer Oberfläche [Incropera, De Witt 2002, S. 9]

Der Strahlungsfluss, der von einer realen Oberfläche bei gleicher Temperatur emittiert wird, ist kleiner als jener des schwarzen Körpers und wird beschrieben durch: [Incropera, De Witt 2002, S. 10]

$$E_b = \epsilon \sigma T_s^4 \quad (3-54)$$

Der *Emissionsgrad* ϵ ist eine Strahlungseigenschaft der Oberfläche und nimmt Werte $0 \leq \epsilon \leq 1$ an. Er gibt an, wie effizient eine Oberfläche Strahlungsenergie im Vergleich zum schwarzen Körper emittiert und hängt stark von der Beschaffenheit der Oberfläche ab.

Strahlung kann auch auf eine Oberfläche einfallen, etwa von der Sonne oder von anderen strahlenden Oberflächen ausgehend. Unabhängig von der Quelle wird die einfallende Strahlung je Flächeneinheit als *Wärmeeinstrahlung* G bezeichnet. Diese kann von der Oberfläche absorbiert werden, was zu einer Erhöhung der thermischen Energie des Körpers führt. Die Absorption wird beschrieben durch den *Absorptionsgrad* α , der angibt, welcher Anteil der Wärmeeinstrahlung von der Oberfläche absorbiert wird: [Incropera, De Witt 2002, S. 10]

$$G_{abs} = \alpha G \quad (3-55)$$

Der Absorptionsgrad nimmt Werte $0 \leq \alpha \leq 1$ an. Wenn $\alpha < 1$ und die Oberfläche undurchsichtig ist, so wird ein Teil der einfallenden Strahlung reflektiert. Ist die Oberfläche semitransparent, so wird ein Teil der Strahlung durchgelassen (transmittiert). Reflexion und Transmission haben - im Gegensatz zur Emission und Absorption - keinen Einfluss auf die thermische Energie, die im Körper gespeichert ist. [Incropera, De Witt 2002, S. 10]

4 Numerische Verfahren

4.1 Diskretisierung

Unter Diskretisierung versteht man die Herleitung algebraischer Gleichungen, die die unbekanntes, über eine Differentialgleichung gegebenen Werte einer Variable ϕ an diskreten Gitterpunkten beschreiben. Der Verlauf von ϕ zwischen zwei Gitterpunkten muss dabei angenommen werden, wofür stückweise Profile (Segmente) verwendet werden. Jedes Segment beschreibt die Variation von ϕ über ein kleines Gebiet in Abhängigkeit von den benachbarten ϕ -Werten. Je größer die Anzahl an Gitterpunkten für ein Untersuchungsgebiet gewählt wird, desto mehr entspricht die Lösung der Diskretisierungsgleichung der exakten Lösung. [Patankar 1980, S. 26 f.]

Die Diskretisierungsgleichung kann mit verschiedenen Verfahren hergeleitet werden. Unterschiede bestehen in den Profilannahmen und den Methoden der Herleitung. Prinzipiell wird der Verlauf der Lösung zwischen den Gitterpunkten durch mehr oder weniger hochgradige Polynome angenähert. Die dafür notwendigen Stützwerte werden etwa bei der **Finite-Differenzen-Methode** oder der **Finite-Elemente-Methode** so berechnet, dass der Funktionsverlauf an den *Gitterpunkten* die Differentialgleichung erfüllt (Punktkollokation bzw. Galerkin-Verfahren). Bei der **Finite-Volumen-Methode** werden die Stützwerte so berechnet, dass der Funktionsverlauf in den *Finiten Volumen* im Mittel die Differentialgleichung erfüllt (Gebietskollokation). [Patankar 1980, S. 27]

4.2 Finite-Volumen-Methode

Bei der Diskretisierung einer Differentialgleichung mittels der *Finiten-Volumen-Methode* wird das Rechengebiet in Kontrollvolumen (KV) zerlegt. Die Diskretisierung erfolgt nach folgendem Schema: [Patankar 1980, S. 30 f.]

- Zerlegung des Rechengebietes in Kontrollvolumen. Jeder Gitterpunkt ist von einem KV umgeben, es dürfen weder Lücken noch Überschneidungen auftreten.
- Integration der Differentialgleichung über jedes KV.
- Auswertung der Integrale mit stückweisen Profilen für die Variable ϕ .
- Ergebnis ist die Diskretisierungsgleichung, die die ϕ -Werte für eine Gruppe von Punkten beschreibt.

Für Erhaltungsgrößen wie Masse, Energie usw. ist die integrale Bilanz in jedem *Finiten Volumen* erfüllt, was durch die Diskretisierungsgleichung ausgedrückt wird.

4.2.1 KV-Formulierung und Profilannahme für die Wärmeleitungsgleichung

Die Kontrollvolumen-Formulierung soll in diesem Kapitel exemplarisch an der eindimensionalen stationären Wärmeleitung erklärt werden. Durch Wegfallen des Instationär- und des Konvektionsterms ergibt sich aus Gleichung (3-31):

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) + S = 0 \quad (4-1)$$

Dabei steht S für eine Quelle (Wärmeerzeugung pro Volumeneinheit). Für die weitere Betrachtung wird die Kompassnotation für die Bezeichnung der Gitterpunkte eingeführt:

- P Betrachteter, zentraler Punkt (Mittelpunkt des KV)
- W Westlicher (linker) Nachbarpunkt
- E Östlicher (rechter) Nachbarpunkt

- w Grenzfläche zum westlichen Nachbarpunkt
- e Grenzfläche zum östlichen Nachbarpunkt
- Δx Ausdehnung des KV in x-Richtung
- $(\delta x)_{w/e}$ Abstände zwischen den Mittelpunkten der KV

Durch Annahme einer Einheitsdicke in y- und z-Richtung ergibt sich das Volumen zu $\Delta V = \Delta x \cdot 1 \cdot 1$. Die Bezeichnung der Orte ist in Abbildung 4-1 dargestellt:

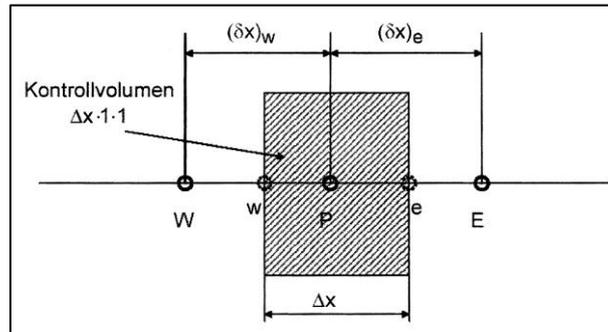


Abbildung 4-1: Bezeichnung der Orte in einem Finiten Volumen [Patankar 1980, S. 32]

Die Integration der Wärmeleitungsgleichung über Δx von w nach e ergibt:

$$\int_w^e \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) + S \right] dx = 0 \quad (4-2)$$

$$\left(k \frac{\partial T}{\partial x_j} \right)_e - \left(k \frac{\partial T}{\partial x_j} \right)_w + \int_w^e S dx = 0 \quad (4-3)$$

Im nächsten Schritt muss der T -Verlauf zwischen den Gitterpunkten beschrieben werden. Als Profilannahme wird hier ein stückweise lineares Profil gewählt (es sind jedoch auch weitere Interpolationsfunktionen möglich). Dadurch ist der Gradient an den KV-Oberflächen bestimmt, allerdings nicht in den Gitterpunkten selbst, was aber auch nicht notwendig ist.

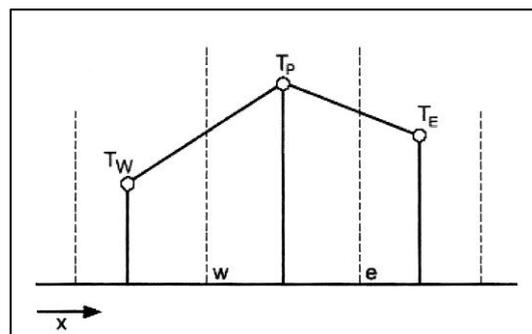


Abbildung 4-2: Darstellung der Gradienten über die Oberflächen in einem Finiten Volumen [Patankar 1980, S. 33]

Aus den Stützwerten und geometrischen Abmessungen lässt sich nun die Diskretisierungsgleichung bilden. Aus einer Taylorreihenentwicklung unter Vernachlässigung von Termen höherer Ordnung folgt:

$$\left(k \frac{\partial T}{\partial x_j} \right)_e = k_e \frac{(T_E - T_P)}{(\delta x)_e} \quad (4-4)$$

$$\frac{k_e(T_E - T_P)}{(\delta x)_e} - \frac{k_w(T_P - T_W)}{(\delta x)_w} + \bar{S} \Delta x = 0 \quad (4-5)$$

Dabei ist \bar{S} der über das KV gemittelte, auf das Volumen bezogene Quellterm. Die Gleichung wird nun nach den Temperaturen ausgedrückt und schließlich so umgeformt, dass die Temperatur des betrachteten Gitterpunkts links und die restlichen Terme rechts stehen:

$$\frac{k_e}{\delta x_e} T_E - \left[\frac{k_e}{\delta x_e} + \frac{k_w}{\delta x_w} \right] T_P + \frac{k_w}{\delta x_w} T_W + \bar{S} \Delta x = 0 \quad (4-6)$$

$$\left[\frac{k_e}{\delta x_e} + \frac{k_w}{\delta x_w} \right] T_P = \frac{k_e}{\delta x_e} T_E + \frac{k_w}{\delta x_w} T_W + \bar{S} \Delta x \quad (4-7)$$

Daraus lässt sich eine allgemeine Standardform der Diskretisierungsgleichung bilden (mit dem zentralen T_P -Term links und den Nachbarpunkten und einem konstanten Term rechts):

$$a_P T_P = a_E T_E + a_W T_W + b \quad (4-8)$$

Wobei gilt, dass $a_P = a_E + a_W$. Bei Betrachtung aller Finiten Volumen kann die Diskretisierungsgleichung als Satz von Koeffizienten für ein lineares Gleichungssystem (LGS) verstanden werden, welches sich numerisch lösen lässt.

4.2.2 Leitprinzipien & Grundregeln bei der numerischen Behandlung

Da eine Vielfalt von Formulierungen für die Diskretisierung möglich ist, sind für eine sinnvolle Auswahl einige zusätzliche einschränkende Forderungen zu stellen. Eine Methode soll für jede Gitterpunktzahl

- physikalisch sinnvolle Ergebnisse und
- die globale (integrale) Erhaltungseigenschaft liefern.

Das bedeutet, dass Massen-, Wärme- und Impulsströme mit entsprechenden Quellen und Senken eine perfekte Erhaltung ergeben, unabhängig von der Anzahl der Finiten Volumen.

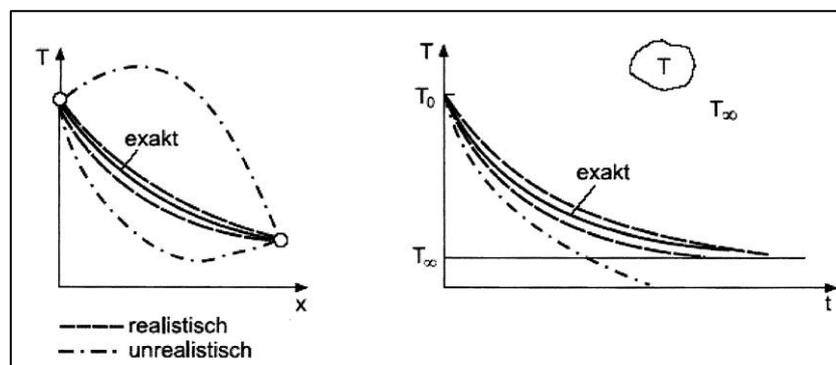


Abbildung 4-3: Realistische und unrealistische (unphysikalische) Verteilungen in Anlehnung an Patankar [1980, S. 34]

Zur Sicherung der oben erläuterten Leitprinzipien lassen sich vier wesentliche Grundforderungen formulieren: [Patankar 1980, S. 36 ff.]

1. Konsistenz an den Flächen der Kontrollvolumina: D.h. ein Fluss, der ein KV verlässt, muss gleich dem Fluss sein, der in das nächste KV durch die gemeinsame Oberfläche eintritt
2. Positive Koeffizienten: Alle Koeffizienten (a_p, a_{NB}) sollten immer positiv sein.
3. Linearisierung des Quellterms: Bei Linearisierung des Quellterms mit $S = S_C + S_P T_P$ muss stets $S_P < 0$ sein, wodurch die Diagonaldominanz der Matrix gesichert wird.
4. Summe der Nachbarkoeffizienten: Der Koeffizient a_p entspricht der Summe der Werte der Nachbarkoeffizienten.

Diese Grundregeln gelten für alle Schritte und sind anwendbar auf eine allgemeine Variable ϕ .

4.2.3 Anfangs- und Randbedingungen

In diesem Kapitel soll näher auf die Bedeutung der Anfangs- und Randbedingungen bei der Lösung eines Gleichungssystems eingegangen werden.

4.2.3.1 Anfangsbedingungen

Bei stationären Problemstellungen ist die Bedeutung der Anfangsbedingungen nicht so groß, da die Lösung des Gleichungssystems iterativ erfolgt. Deshalb beeinflusst die Qualität der Anfangsbedingungen im Allgemeinen nur die Anzahl der notwendigen Iterationen.

Bei instationären Fällen beschreiben die Anfangsbedingungen jenen Zustand der Variablen im Rechengebiet, von dem aus die zeitliche Entwicklung beginnt. Die Anfangsbedingungen sollten die Gleichungen erfüllen, da sonst eine gewisse Zeit für das Abklingen der eingebrachten Fehler notwendig ist.

4.2.3.2 Randbedingungen

Für jene Finiten Volumen, die an der Oberfläche des Berechnungsgebietes liegen, müssen Randbedingungen angegeben werden. Dazu bestehen hauptsächlich folgende drei Möglichkeiten, die hier für die Wärmeleitungsgleichung exemplarisch aufgezählt werden: [Patankar 1980, S. 50]

- Temperatur der Randzelle T_B gegeben
- Wärmefluss über den Rand der letzten Zelle q_B gegeben
- Wärmefluss als lineare Funktion von T_B gegeben

Bei konvektivem Wärmeübergang an der Oberfläche zu einem strömenden Medium ist der Wärmefluss von der Temperatur des Mediums abhängig, was berücksichtigt werden muss.

4.2.4 Zeitabhängigkeit

Zusätzlich zu den Termen aus Kapitel 4.2.1 wird nun auch der Instationärterm der Wärmeleitungsgleichung betrachtet. Ausgehend von ρ, c_p konstant und ohne Wärmequelle ergibt sich: [Patankar 1980, S. 54]

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right) \quad (4-9)$$

Die Zeit ist eine einseitig gerichtete Koordinate, woraus sich ein Fortschrittsverfahren in Zeitrichtung ergibt. In einem typischen Zeitschritt wird ausgehend von der bekannten Verteilung der

Temperatur T zur Zeit t die Verteilung zur Zeit $t + \Delta t$ berechnet. Es wird daher über Zeit und Ort integriert.

Die Diskretisierungsgleichung aus Integration von Gleichung (4-9) über ein KV und einen Zeitschritt von t bis $t + \Delta t$ ergibt:

$$\rho c_p \int_w^e \int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial T}{\partial t} dt dx = \int_t^{t+\Delta t} \int_w^e \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right) dx dt \quad (4-10)$$

Die linke Seite kann unter Verwendung des räumlichen Mittelwertes zum jeweiligen Zeitpunkt wie folgt diskretisiert werden:

$$\int_w^e \int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial T}{\partial t} dt dx = \Delta x (T^1 - T^0) \quad (4-11)$$

Dabei steht T^0 für die Temperatur zum Zeitpunkt t und T^1 für die Temperatur zum Zeitpunkt $t + \Delta t$. Was die rechte Seite von Gleichung (4-10) angeht, so kann die zweite Ableitung in Raumrichtung wie bei der stationären Wärmeleitungsgleichung diskretisiert werden:

$$\rho c_p (T^1 - T^0) \Delta x = \int_t^{t+\Delta t} \left(\frac{k_e [T_E - T_P]}{\delta x_e} - \frac{k_w [T_P - T_W]}{\delta x_w} \right) dt \quad (4-12)$$

Die Lösung des Zeitintegrals auf der rechten Seite erfordert die Wahl eines Verlaufs der Temperatur über dem Zeitschritt. Ausgehend von einem linearen Verlauf mit dem Wichtungsfaktor f ergibt sich:

$$\int_t^{t+\Delta t} T_P dt = [f T_P^1 + (1-f) T_P^0] \Delta t \quad (4-13)$$

Der Wert für f muss hierbei zwischen null und eins liegen. Aus Gleichungen (4-12) und (4-13) ergibt sich schließlich die Diskretisierungsgleichung für Gleichung (4-9):

$$\rho c_p (T^1 - T^0) \Delta x = \Delta t \left\{ f \left[\frac{k_e (T_E^1 - T_P^1)}{\delta x_e} - \frac{k_w (T_P^1 - T_W^1)}{\delta x_w} \right] + (1-f) \left[\frac{k_e (T_E^0 - T_P^0)}{\delta x_e} - \frac{k_w (T_P^0 - T_W^0)}{\delta x_w} \right] \right\} \quad (4-14)$$

Fasst man alle Koeffizienten der einzelnen Variablen zu den Einflussstermen a_P , a_P^0 , a_E , a_W zusammen, so kann die Diskretisierungsgleichung unter Weglassen des Zeitindex 1 wie folgt geschrieben werden:

$$a_P T_P = a_E [f T_E + (1-f) T_E^0] + a_W [f T_W + (1-f) T_W^0] + [a_P^0 - (1-f) a_E - (1-f) a_W] T_P^0 \quad (4-15)$$

Man spricht von einem *expliziten Zeitschema*, wenn der Wichtungsfaktor null gesetzt wird. T_P ist dann nur von den bereits bekannten Werten zum alten Zeitpunkt abhängig: $T_P = f(T_P^0, T_E^0, T_W^0)$. Wenn $f \neq 0$, so ergibt sich ein *implizites Zeitschema*. Für $f = 1$ heißt dieses Schema voll implizites Schema, für $f = 0,5$ heißt es Crank-Nicholson Schema. Da in beiden letzteren Fällen die Werte der

Nachbarnpunkte zum neuen Zeitpunkt einfließen, ist jedenfalls die Lösung eines linearen Gleichungssystems notwendig. [Patankar 1980, S. 56]

4.2.5 Konvektion und Diffusion

Konvektion und Diffusion werden meist gemeinsam betrachtet, da beide Effekte einen Transport über die Oberfläche des Kontrollvolumens darstellen. Der Konvektionsterm beeinflusst die in Gleichung (4-8) eingeführten Einflussterte a_i zu den benachbarten Stützwerten. Das lineare Gleichungssystem bleibt jedoch erhalten, daher können weiterhin die Lösungsmethoden für algebraische Gleichungen verwendet werden. [Patankar 1980, S. 79 ff.]

Die Diskretisierung des Konvektionsterms gilt als anspruchsvoll und bedarf einiger Überlegungen. Wichtig ist unter anderem, dass das zugrunde liegende Strömungsfeld bestimmte Eigenschaften erfüllt: [Patankar 1980, S. 82]

- Erfüllung der Kontinuitätsgleichung. Da diese Forderung für ein in Finiten Volumen vorhandenes Geschwindigkeitsfeld nur mit den Massenflüssen über die KV-Oberflächen genau erfüllt wird, muss die Erhaltungsgleichung für eine beliebige Erhaltungsgröße ϕ dieselben Finiten Volumen verwenden.
- Erfüllung der Impulserhaltung
- Erfüllung der Energieerhaltung

Es soll nun der Fall eines stationären eindimensionalen Transports in x-Richtung ohne Quellterm betrachtet werden: [Patankar 1980, S. 80 ff.]

$$\frac{d}{dx}(\rho u \phi) = \frac{d}{dx} \left(\Gamma \frac{d\phi}{dx} \right) \quad (4-16)$$

Im eindimensionalen Fall ist ρu konstant, es fließt also der gleiche Massenstrom ein wie aus. In der Kontrollvolumendarstellung wird ein äquidistantes Gitter verwendet.

Gleich wie in Kapitel 4.2.1 werden die Gradienten der Diffusionsterme mit Hilfe einer linearen Verteilung der Größe ϕ zwischen den Nachbarwerten dargestellt. Dieselbe Verteilung wird nun vorerst auch für die Berechnung des Konvektionsterms benutzt. Es ergibt sich durch Integration über dx :

$$(\rho u \phi)_e - (\rho u \phi)_w = \left(\Gamma \frac{d\phi}{dx} \right)_e - \left(\Gamma \frac{d\phi}{dx} \right)_w \quad (4-17)$$

Zur Ermittlung des konvektiven Flusses müssen also die Werte von ϕ an den KV-Oberflächen e und w während des Zeitschrittes bekannt sein. Unter Annahme einer linearen Funktion zwischen den Gitterpunkten W und P bzw. P und E (bezeichnet als „Central Differencing Scheme“, CDS) folgt:

$$\phi_e = \frac{1}{2}(\phi_E + \phi_P); \quad \phi_w = \frac{1}{2}(\phi_W + \phi_P) \quad (4-18)$$

Eingesetzt in die Diskretisierungsgleichung ergibt sich:

$$(\rho u)_e \frac{\phi_E + \phi_P}{2} - (\rho u)_w \frac{\phi_W + \phi_P}{2} = \Gamma_e \frac{(\phi_E - \phi_P)}{\delta x_e} - \Gamma_w \frac{(\phi_P - \phi_W)}{\delta x_w} \quad (4-19)$$

Es werden nun die Bezeichnungen F und D für konvektiven und diffusiven Fluss über die Zellgrenzen eingeführt:

$$F = \rho u; \quad D = \frac{\Gamma}{\delta x} \quad (4-20)$$

Durch Einsetzen in Gleichung (4-19) führt dies zu:

$$F_e \frac{\phi_E + \phi_P}{2} - F_w \frac{\phi_W + \phi_P}{2} = D_e(\phi_E - \phi_P) - D_w(\phi_P - \phi_W) \quad (4-21)$$

Ausgedrückt nach den Erhaltungsgrößen ϕ :

$$\phi_P \left[\frac{F_e}{2} - \frac{F_w}{2} + D_e + D_w \right] = \phi_E \left(D_e - \frac{F_e}{2} \right) + \phi_W \left(D_w + \frac{F_w}{2} \right) \quad (4-22)$$

Die allgemeine Diskretisierungsgleichung lautet daher:

$$a_P \phi_P = a_E \phi_E + a_W \phi_W \quad (4-23)$$

Die Koeffizienten a_E und a_W führen zu Problemen, wenn $|F| > 2D$ wird. Für diesen Fall nimmt nämlich einer der beiden Koeffizienten (abhängig von der Strömungsrichtung) einen negativen Wert an, was die Grundregel 2 aus Kapitel 4.2.2 verletzt. Weiters tritt ein Problem auf, wenn keine Diffusion vorhanden ist und Kontinuität vorliegt ($F_e = F_w$). Dann ist der Polkoeffizient a_P gleich null und die Diskretisierungsgleichung kann nicht mehr durch ein Punktlösungsverfahren gelöst werden. [Patankar 1980, S. 83]

Als wichtige Erkenntnis kann festgehalten werden, dass dieses Zentralfdifferenzen-Schema („Central Differencing Scheme“) bei hohem Konvektionsanteil nicht funktioniert.

Es wird nun die Peclet-Zahl als charakteristische Größe zur Beurteilung des Verhältnisses von konvektivem zu diffusivem Transport eingeführt (bei konstanten Werten für Diffusionskoeffizienten und Massenfluss): [Patankar 1980, S. 85]

$$Pe = \frac{\rho u L}{\Gamma} = \frac{\text{Konvektion}}{\text{Diffusion}} \quad (4-24)$$

Bei $Pe = 0$ herrscht reine Diffusion bzw. Leitung vor. Für $Pe > 0$ wird der Wert ϕ an einem Gitterpunkt auch durch den *stromauf* liegenden Nachbarpunkt beeinflusst. Für $Pe \gg 0$ liegt der Wert ϕ an einem Gitterpunkt bereits nahe dem Wert des stromauf liegenden Nachbarpunktes.

Für große Peclet-Zahlen (hoher Konvektionsanteil) ist es daher naheliegend, ein Diskretisierungsschema zu verwenden, welches den Wert in der stromaufwärts liegenden Zelle höher gewichtet. Dazu zählt unter anderem das „1st Order Upwind Schema“ (auch bezeichnet als Upwind Differencing Scheme, UDS), auf das in Folge näher eingegangen wird.

Beim UDS wird beim konvektiven Fluss für den ϕ -Wert an der KV-Oberfläche der ϕ -Wert des stromauf liegenden Gitterpunktes übernommen, was in Abbildung 4-4 dargestellt ist. [Patankar 1980, S. 83 f.]

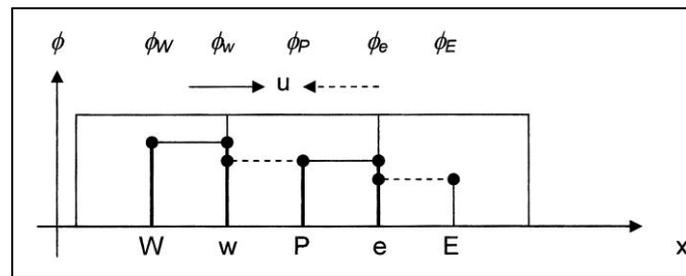


Abbildung 4-4: Grafische Darstellung des 1st Order Upwind Schemas [Patankar 1980, S. 33]

Dies lässt sich in Abhängigkeit der Strömungsrichtung wie folgt formulieren:

$$F_e > 0: \phi_e = \phi_P \quad (4-25)$$

$$F_e < 0: \phi_e = \phi_E \quad (4-26)$$

Unter Verwendung des Operators $MAX(a, b)$ (der größere Wert von a und b) kann man für den konvektiven Transport schreiben:

$$F_e \phi_e = \phi_P MAX(F_e, 0) - \phi_E MAX(-F_e, 0) = \phi_P F_e^+ - \phi_E F_e^- \quad (4-27)$$

Die Diskretisierungsgleichung lautet nach wie vor:

$$a_P \phi_P = a_E \phi_E + a_W \phi_W \quad (4-28)$$

Mit den Koeffizienten $a_E = D_e + F_e^-$ und $a_W = D_w + F_w^+$ wird klar, dass diese niemals negativ werden können, was zu physikalisch richtigen Lösungen führt – allerdings nur für Strömungen mit hoher Peclet-Zahl. Da der numerische Aufwand für das UDS klein ist, wird dieses immer noch häufig verwendet.

Weitere Diskretisierungsschemata für die Konvektion (Konvektionsschemata) sind:

- **Hybrid-Schema:** Abhängig von der Peclet-Zahl kommen das Central Differencing Scheme oder das Upwind Differencing Scheme zum Tragen. [Patankar 1980, S. 88 ff.]
- **2nd Order Upwind Schema:** Die Werte an der Zelloberfläche werden mittels einer Geraden von zwei stromauf liegenden Zellen her extrapoliert. [Versteeg, Malalasekera 2007, S. 165]
- **2nd Order Upwind TVD Schema:** Wie oben, jedoch mit TVD (Total Variation Diminishing) Eigenschaft, d.h. es dürfen keine neuen Extremwerte entstehen und existierende Extremstellen dürfen nicht verstärkt werden. [Versteeg, Malalasekera 2007, S. 167 f.]

Zur Bewertung von Diskretisierungsschemata können vier Kriterien formuliert werden: [Versteeg, Malalasekera 2007, S. 141]

1. **Beschränktheit:** Der konvektive Transport einer Größe ϕ darf keine Werte erzeugen, die höher als der Maximalwert oder niedriger als der Minimalwert sind. Hinreichend dafür ist die Forderung nach positiven Einflusskoeffizienten.

2. **Genauigkeit:** Die Verteilung der transportierten Größe soll möglichst genau erhalten werden. Dies wird im Allgemeinen durch ein feines Gitter und durch Verfahren höherer Ordnung erreicht.
3. **Transportivität:** Der konvektive Transport erfolgt nur in einer ausgezeichneten Richtung, d.h. der Term wird nur durch stromauf liegende Werte von ϕ beeinflusst. Die Eigenschaft wird von allen Upwind-Schemata erfüllt.
4. **Erhaltung der Größe (Konservativität):** Wenn man von Quellen- und Senkenfreiheit ausgeht, so muss die Größe über ein Kontrollvolumen hinweg erhalten werden.

4.2.6 Lösung des Gleichungssystems

Die Navier-Stokes Gleichungen (System nicht-linearer, gekoppelter, partieller Differentialgleichungen) sind schwer zu lösen, insbesondere weil zu Beginn sowohl Druckfeld als auch Geschwindigkeitsfeld unbekannt sind. [Patankar 1980, S. 113 f.]

Das Druckfeld wird indirekt durch die Kontinuitätsgleichung beschrieben: Bei Einsetzen des korrekten Druckfelds in die Impulserhaltungsgleichungen erfüllt das resultierende Geschwindigkeitsfeld die Kontinuitätsgleichung. Diese indirekte Formulierung ist leider nicht sehr hilfreich, außer die diskretisierten Gleichungen für Kontinuität und Impulserhaltung werden gleichzeitig und direkt gelöst. In der Regel werden die Erhaltungsgleichungen allerdings einzeln betrachtet und iterativ gelöst. [Patankar 1980, S. 114]

Eine derartige Lösung von Strömungsproblemen kann mittels einer Druckkorrekturmethode erfolgen. Eine bekannte, auf Patankar [1980, S. 126 ff.] zurückgehende Berechnungsprozedur ist hierbei der SIMPLE-Algorithmus (Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations). Die wichtigsten Schritte sollen an dieser Stelle kurz erläutert werden:

1. Schätzen eines Druckfeldes p^*
2. Lösung der Impulsgleichungen für p^* mit u^*, v^*, w^* als Ergebnis
3. Druckkorrektur p' berechnen
4. Den korrigierten Druck aus $p = p^* + p'$ berechnen
5. Die korrigierten Geschwindigkeiten u, v, w berechnen
6. Lösen der Gleichungen für weitere skalare Größen wie T, k, ε usw.
7. Der korrigierte Wert p ist der Ausgangswert p^* für die nächste Iteration

Schritte zwei bis sieben werden solange wiederholt, bis eine konvergente Lösung erreicht ist. Wenn eine skalare Größe aus Schritt sieben das Strömungsfeld nicht beeinflusst, sollte sie erst nach Bestehen einer konvergenten Lösung berechnet werden. [Patankar 1980, S. 126]

4.3 CFD Software AVL Fire

Die kommerzielle CFD Software AVL Fire basiert auf der Finiten-Volumen-Methode. Der verwendete Lösungsalgorithmus ist auch für unstrukturierte Gitter (unter Verwendung von polyedrischen Kontrollvolumen) geeignet. Der Code kann zur Lösung von inkompressiblen, kompressiblen und Überschall-Strömungen herangezogen werden. [Fire 2010, S. 2-1]

Für turbulente Strömungen kommen die zeitgemittelten Reynoldsgleichungen zum Tragen. Die Schließung des Gleichungssystems erfolgt über Wirbelviskositäts- bzw. Wirbeldiffusivitätsmodelle. Das am meisten verwendete Modell ist das k- ε Modell. [Fire 2010, S. 2-6 ff.]

Die Randbedingungen an festen Wänden werden für Geschwindigkeit und Temperatur über eine Wandfunktion, basierend auf dem logarithmischen Wandgesetz, berechnet (Voraussetzung: der Gitterpunkt liegt im turbulenten Bereich der Grenzschicht; Bei AVL Fire beziffert mit $y^+ > 11,63$).

Für $y^+ < 11,63$ wird ein linearer Zusammenhang zwischen Geschwindigkeit und Randabstand angenommen ($u^+ = y^+$). [Fire 2010, S. 2-17 f.]

4.4 Finite-Elemente-Methode

Bei der Finiten-Elemente-Methode (FE-Methode) wird das Rechengebiet in endlich große „Finite Elemente“ (begrenzt durch Linien oder Oberflächen) unterteilt. Diese Elemente sind an einer diskreten Anzahl von Knotenpunkten, welche sich an der Oberfläche der Elemente befinden, miteinander verbunden. [Zienkiewicz, Taylor 2000a, S. 18]

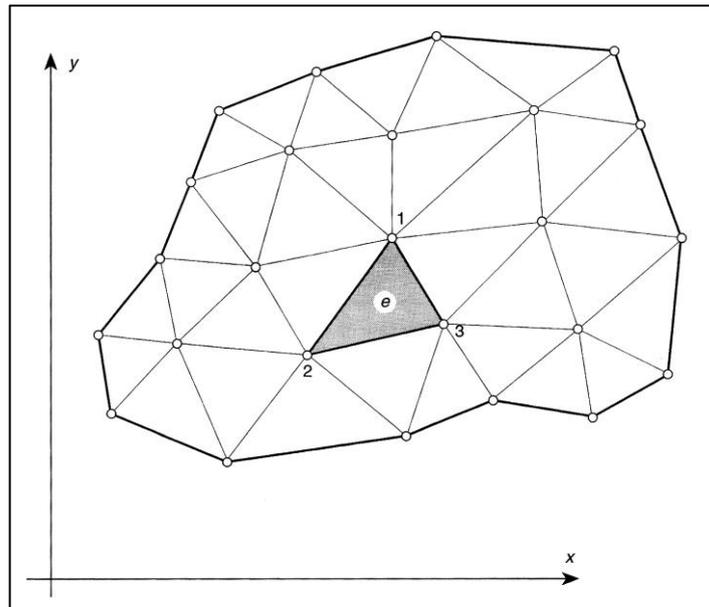


Abbildung 4-5: Unterteilung des Berechnungsgebietes in endlich große Elemente [Zienkiewicz, Taylor 2000a, S. 20]

4.4.1 Das einheitliche diskrete System

Die Finite-Elemente-Methode kommt aus der Strukturmechanik, lässt sich aber in einer verallgemeinerten Form auch auf andere Probleme anwenden. Zur Beschreibung des zu Grunde liegenden, einheitlichen, diskreten Systems können folgende Feststellungen gemacht werden (die Formelzeichen stehen in Kapitel 4.4 durchgängig für Matrizen): [Zienkiewicz, Taylor 2000a, S. 14]

Es lässt sich ein Satz diskreter Parameter identifizieren, der sowohl das Verhalten eines Elements e , als auch jenes des gesamten Systems beschreibt. Dieser wird üblicherweise mit a_i (Systemparameter) bezeichnet und steht z.B. für *Verschiebungen* in der Strukturmechanik. Die Systemparameter sind zunächst unbekannt.

Für jedes Element e lässt sich ein Satz von Größen q_i^e abhängig von den Systemparametern a_i berechnen. Prinzipiell kann dieser Zusammenhang nichtlinear sein. Die Element-Größen stehen z.B. für *Kräfte* in der Strukturmechanik.

$$q_i^e = q_i^e(a) \quad (4-29)$$

In vielen Fällen existiert ein linearer Zusammenhang, der wie folgt beschrieben werden kann:

$$q_i^e = K_{i1}^e a_1 + K_{i2}^e a_2 + \dots + f_i^e \quad (4-30)$$

Der Index i steht für einen bestimmten Knoten, das hochgestellte e steht für ein bestimmtes Element. Die verallgemeinerte *Steifigkeitsmatrix* K stellt hierbei den linearen Zusammenhang zwischen den Kraftkomponenten q am Knoten i eines Elements e und den Verschiebungen a an den Knoten eines Elements her. Der Lastvektor f_i^e steht für Ausgangsgrößen an einem Knoten i (z.B. Kraftkomponenten durch Temperaturbelastung in der Strukturmechanik).

Die sogenannten *Systemgrößen* werden mit r bezeichnet. Man berechnet sie etwa für einen Knoten i durch Aufsummieren aller Elementgrößen, die einen Einfluss auf denselben Knoten nehmen:

$$r_i = \sum_{e=1}^m q_i^e \quad (4-31)$$

Für den oben beschriebenen, linearen Fall ergibt sich daraus folgendes Gleichungssystem:

$$Ka + f = r \quad (4-32)$$

Wobei gilt, dass:

$$K_{ij} = \sum_{e=1}^m K_{ij}^e \quad (4-33)$$

$$f_i = \sum_{e=1}^m f_i^e \quad (4-34)$$

Unter Einsatz von adäquaten Randbedingungen lässt sich nun eine Lösung für die Systemparameter a finden.

Es sei angemerkt, dass es oft nützlich ist, für ein einzelnes Element ein Koordinatensystem zu wählen, welches sich vom globalen Koordinatensystem unterscheidet – Die Umrechnung geschieht mittels einer Koordinatentransformation und erspart dem Computer Rechenzeit bei der Lösung des Gesamtsystems. [Zienkiewicz, Taylor 2000a, S. 15]

Über die Systemparameter a (z.B. *Verschiebung der Knotenpunkte*) kann schließlich eine gesuchte Größe (z.B. die *Verschiebung* u) in jedem beliebigen Punkt eines Elements mittels einer Approximation berechnet werden:

$$u \approx \hat{u} = \sum_k N_k a_k^e = [N_i, N_j, \dots] \begin{Bmatrix} a_i \\ a_j \\ \vdots \end{Bmatrix} = Na^e \quad (4-35)$$

Hierbei stellen die Komponenten von N sogenannte *Formfunktionen* dar, die den Zusammenhang zwischen den Systemparametern a und der gesuchten Größe u für ein Element beschreiben. [Zienkiewicz, Taylor 2000a, S. 20]

4.4.2 Allgemeine Vorgehensweise in der Finite-Elemente-Methode

Viele kontinuumsmechanische Probleme werden durch Differenzialgleichungen und zugehörige Randbedingungen beschrieben. In diesem Kapitel soll darauf eingegangen werden, wie solche Problemstellungen allgemein mit der Finite-Elemente-Methode behandelt werden können.

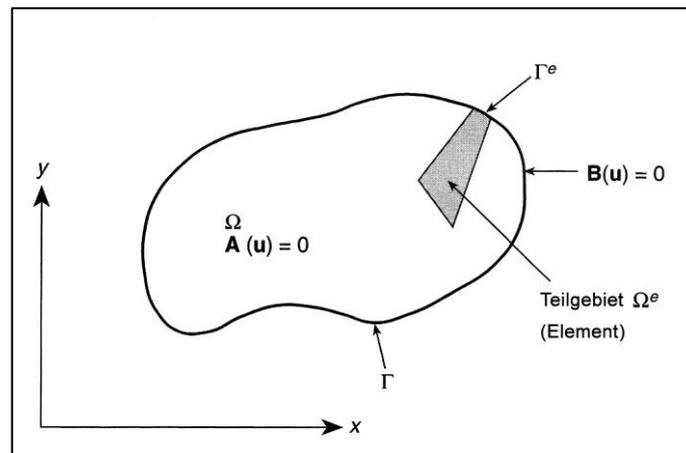


Abbildung 4-6: Berechnungsgebiet Ω mit Rand Γ [Zienkiewicz, Taylor 2000a, S. 40]

Prinzipiell ist eine Problemstellung dadurch gekennzeichnet, dass eine unbekannte Funktion u gesucht wird, und zwar so, dass ein Satz von Differentialgleichungen A innerhalb eines Problemgebietes Ω erfüllt wird. Dabei kann u für eine skalare oder eine vektorielle Größe stehen. [Zienkiewicz, Taylor 2000a, S. 39]

$$A(u) = \begin{Bmatrix} A_1(u) \\ A_2(u) \\ \vdots \end{Bmatrix} = 0 \quad (4-36)$$

Außerdem müssen gewisse Randbedingungen B am Rand Γ des Problemgebietes erfüllt werden:

$$B(u) = \begin{Bmatrix} B_1(u) \\ B_2(u) \\ \vdots \end{Bmatrix} = 0 \quad (4-37)$$

In der FE-Methode wird eine Lösung in folgender, approximierter Form angestrebt:

$$u \approx \hat{u} = \sum_{i=1}^n N_i a_i = Na \quad (4-38)$$

Das heißt, wie schon weiter oben beschrieben: Die Lösung u (in jedem beliebigen Punkt des Problemgebietes) ist abhängig von Werten an den Knotenpunkten a multipliziert mit Formfunktionen N . Die Formfunktionen sind nur von unabhängigen Variablen (z.B. von den Koordinaten x, y usw.) abhängig. Die Systemparameter a sind zunächst unbekannt.

Um die Parameter a_i des diskreten Systems zu berechnen, wird die Approximationsgleichung, in eine integrale Form gebracht: [Zienkiewicz, Taylor 2000a, S. 40]

$$\int_{\Omega} G_j(\hat{u}) d\Omega + \int_{\Gamma} g_j(\hat{u}) d\Gamma = 0 \quad \text{mit } j = 1 \dots n \quad (4-39)$$

Wobei G_j und g_j bekannte Funktionen sind. Diese integrale Form erlaubt es, die Approximation elementweise zu erlangen und das Zusammensetzen der Elemente wie in Kapitel 4.4.1 beschrieben durchzuführen, da die Gleichung auch wie folgt notiert werden kann:

$$\int_{\Omega} G_j d\Omega + \int_{\Gamma} g_j d\Gamma = \sum_{e=1}^m \left(\int_{\Omega^e} G_j d\Omega + \int_{\Gamma^e} g_j d\Gamma \right) = 0 \quad (4-40)$$

Hierbei steht Ω^e für das Gebiet eines Elements und Γ^e für den Anteil eines Elements am Rand des Problemgebiets. Um die Approximationsgleichung in dieser integralen Form zu erhalten, wird in der Regel die „Methode der gewichteten Residuen“ (und hierbei das *Galerkin-Verfahren*) verwendet. Dafür ist es zunächst notwendig, die „Schwache Formulierung“ einer Differentialgleichung einzuführen. Gleichung (4-36) zeigt, dass der Satz Differentialgleichungen an jedem Punkt des Problemgebiets null sein muss. Daraus folgt, dass:

$$\int_{\Omega} v^T A(u) d\Omega = \int_{\Omega} [v_1 A_1(u) + v_2 A_2(u) + \dots] d\Omega = 0 \quad (4-41)$$

Wobei v ein Satz beliebiger Funktionen ist. Die Anzahl der Komponenten von v ist gleich der Anzahl der Differentialgleichungen in A .

$$v = \begin{Bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \end{Bmatrix} \quad (4-42)$$

Man kann nun feststellen, dass, wenn Gleichung (4-41) für alle v erfüllt ist, die Differentialgleichungen (4-36) an allen Punkten des Problemgebiets erfüllt sind, da sonst das Ergebnis ungleich null wäre. [Zienkiewicz, Taylor 2000a, S. 42]

Analog zu Gleichung (4-41) gilt für die Randbedingungen (mit einem Satz \bar{v} beliebiger Funktionen):

$$\int_{\Gamma} \bar{v}^T B(u) d\Gamma = \int_{\Gamma} [\bar{v}_1 B_1(u) + \bar{v}_2 B_2(u) + \dots] d\Gamma = 0 \quad (4-43)$$

Zusammengefasst kann man sagen, dass die integrale Formulierung

$$\int_{\Omega} v^T A(u) d\Omega + \int_{\Gamma} \bar{v}^T B(u) d\Gamma = 0 \quad (4-44)$$

die für alle v und \bar{v} erfüllt ist, gleichbedeutend ist mit der Erfüllung der Differentialgleichungen A und deren Randbedingungen B . Für v und \bar{v} sollten Funktionen gewählt werden, die integrierbar sind.

An die Funktionen $A(u)$ und $B(u)$ wird folgende Forderung gestellt: Wenn Ableitungen n -ter Ordnung in einem Term in A oder B vorkommen, so müssen die $(n - 1)$ -ten Ableitungen stetig sein. Dies gilt als schwierig zu erfüllen. Oft kann Gleichung (4-44) jedoch in einer anderen Weise formuliert und partiell integriert werden: [Zienkiewicz, Taylor 2000a, S. 43]

$$\int_{\Omega} C(v)^T D(u) d\Omega + \int_{\Gamma} E(\bar{v})^T F(u) d\Gamma = 0 \quad (4-45)$$

In dieser Gleichung beinhalten die Operatoren C bis F üblicherweise Ableitungen niedrigerer Ordnung als die Operatoren A und B , wodurch eine Stetigkeit geringerer Ordnung für die Funktion u von Nöten ist, allerdings unter höheren Stetigkeitsanforderungen für v und \bar{v} . Die in Gleichung (4-45)

beschriebene Formulierung wird als „**Schwache Formulierung**“ bezeichnet und ist „toleranter“ als die Problemstellung in ihrer eigentlichen Form. [Zienkiewicz, Taylor 2000a, S. 43]

Wird eine unbekannte Funktion u durch Gleichung (4-38) angenähert, also

$$u \approx \hat{u} = \sum_{i=1}^n N_i a_i = Na \quad (4-46)$$

so ist es im Allgemeinen nicht möglich, die Differentialgleichungen samt Randbedingungen zu erfüllen. Die integralen Formulierungen (4-44) und (4-45) erlauben eine Approximation, wenn an Stelle der beliebigen Funktionen v und \bar{v} ein finiter Satz von angenäherten Funktionen tritt:

$$v = \sum_{j=1}^n w_j \delta a_j \quad (4-47)$$

$$\bar{v} = \sum_{j=1}^n \bar{w}_j \delta a_j \quad (4-48)$$

Hierbei steht δa_j für einen Satz beliebiger Parameter und n für die Anzahl an Unbekannten in der Problemstellung. Werden die Approximationen aus (4-47) und (4-48) in Gleichung (4-44) eingesetzt, so erhält man:

$$\delta a_j^T \left[\int_{\Omega} w_j^T A(Na) d\Omega + \int_{\Gamma} \bar{w}_j^T B(Na) d\Gamma \right] = 0 \quad (4-49)$$

Da δa_j beliebig gewählt werden kann, steht nun ein geschlossenes Gleichungssystem zur Berechnung der Parameter a_j zur Verfügung mit:

$$\int_{\Omega} w_j^T A(Na) d\Omega + \int_{\Gamma} \bar{w}_j^T B(Na) d\Gamma = 0 \quad \text{mit } j = 1 \dots n \quad (4-50)$$

Oder mit der schwachen Formulierung aus Gleichung (4-45):

$$\int_{\Omega} C(w_j)^T D(Na) d\Omega + \int_{\Gamma} E(\bar{w}_j)^T F(Na) d\Gamma = 0 \quad \text{mit } j = 1 \dots n \quad (4-51)$$

Führt man sich vor Augen, dass $A(Na)$ das Residuum bzw. den Fehler repräsentiert, der durch Einsetzen der Approximation in die Differentialgleichung entsteht (und $B(Na)$ das Residuum der Randbedingungen), so wird klar, dass Gleichung (4-50) ein *gewichtetes Integral von Residuen* darstellt und daher der Name „Methode der gewichteten Residuen“ rührt. [Zienkiewicz, Taylor 2000a, S. 46]

Zum Zweck der Gewichtung kann fast jeder Satz unabhängiger Funktionen w_j verwendet werden. Eine Auswahl üblicher Gewichtungsmethoden lautet wie folgt: [Zienkiewicz, Taylor 2000a, S. 46]

1. **Punktlokation:** Die Residuen werden an den Knotenpunkten voll gewichtet, sonst allerdings gar nicht. Die Differentialgleichungen müssen daher nur an den Knotenpunkten erfüllt sein.
2. **Gebietslokation:** Das Residuum wird für ein Teilgebiet Ω_j voll gewichtet, sonst gar nicht. Dadurch wird der Fehler über ein definiertes Teilgebiet null.
3. **Galerkin-Verfahren:** Hierbei wird $w_j = N_j$ gesetzt und somit die jeweilige Formfunktion als Gewichtungsfunktion benutzt. Diese Vorgehensweise führt meist zu symmetrischen Matrizen und wird daher fast immer in der Finite-Elemente-Methode verwendet.

4.5 FE Software Abaqus

Die kommerzielle Software Abaqus wird von der Firma Simulia (Tochter von Dassault Systèmes) entwickelt und dient zur Lösung von Randwertproblemen auf der Grundlage der Finite-Elemente-Methode. Das Softwarepaket umfasst mit Abaqus/CAE (für Pre- und Postprocessing) sowie die Solver Abaqus/Standard und Abaqus/Explicit. Eine Reihe von Ingenieurwissenschaften wird durch Abaqus unterstützt, es besteht die Möglichkeit zur Bearbeitung von folgenden Problemstellungen: [TU Harburg 2011]

- Mechanische Analysen
- Thermische Analysen
- Mechanisch-thermische Analysen
- Mechanisch-hydraulische Analysen
- Mechanisch-akustische Analysen
- Diffusionsanalysen
- uvm.

Das Programm kann parallelisiert auf mehreren Prozessoren arbeiten. Über Schnittstellen können Benutzer eigene Subroutinen einbinden (z.B. eigene Materialmodelle, eigene Finite Elemente etc.). [TU Harburg 2011]

5 Beschreibung der verwendeten Bauteile

Dieses Kapitel dient dazu, auf jenen SOFC-Stack näher einzugehen, der für diese Arbeit herangezogen wurde. Beschrieben wird neben den Einzelteilen des Stacks (Zellen, Interkonnektoren etc.) auch der Zulaufkrümmer, der die Luft auf die enthaltenen Stacks der Anlage verteilt.

5.1 Der Stack

Der verwendete Stack besteht aus dreißig übereinander angeordneten Einzelzellen, die mittels Interkonnektorplatten in Serie geschaltet werden. Abbildung 5-1 zeigt eine Explosionsansicht des Stacks, jedoch sind darin nur zwei Zellen dargestellt.

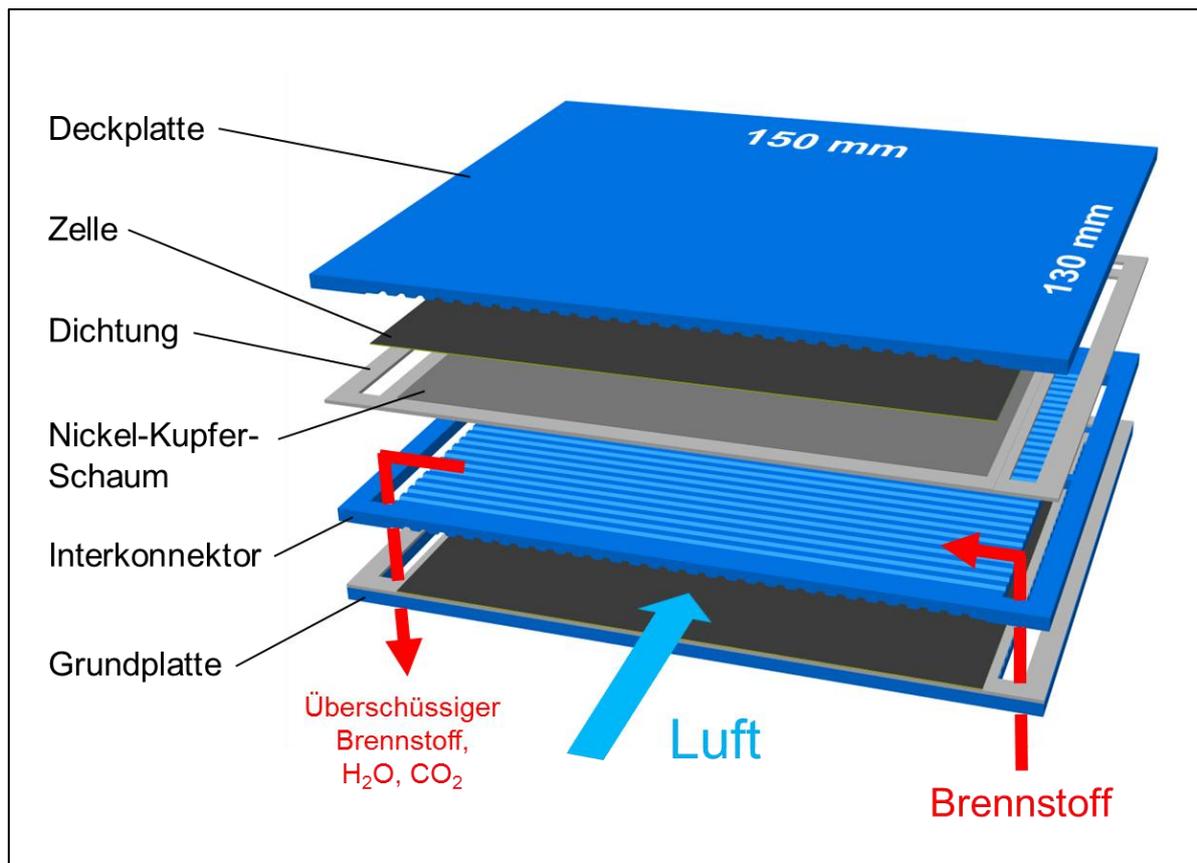


Abbildung 5-1: Explosionsansicht der Brennstoffzellenstacks

Die Luftkanäle führen geradlinig von einer zur anderen Seite des Stacks. Im Betrieb wird die gesamte „offene“ Stirnseite des Stacks mit Luft angeströmt, was als „Offene Kathode“ (engl. „Open Cathode“) bezeichnet wird. Ebenso führt die gesamte gegenüberliegende Seite des Stacks in den Luftablauf.

Die Führung des Brennstoffes gestaltet sich komplizierter. Anders als bei der Luft, wird der überschüssige Brennstoff wieder aufgefangen und teilweise in das System rückgeführt. Der Brennstoff gelangt über Zuleitungen von unten in den Stack. Längliche Bohrungen in den Interkonnektorplatten erlauben, dass sich der Brennstoff dann entlang der Hochachse des Stacks auf alle Zellen verteilt. Die eigentlichen Brennstoffkanäle, die entlang den Zellen verlaufen, sind quer zu den Luftkanälen angeordnet (engl. „Cross Flow“). Ein poröser Nickel-Kupfer-Schaum zwischen Anode und Interkonnektorplatte sorgt dafür, dass sich der Brennstoff gleichmäßig auf die Zelle ausbreiten kann.

5.1.1 Zelle

Die verwendete Zelle ist elektrolytgestützt, d.h. die Elektrolytschicht (gelb) ist deutlich stärker ausgebildet als Anoden- und Kathodenschicht, was aus Abbildung 5-2 hervorgeht:

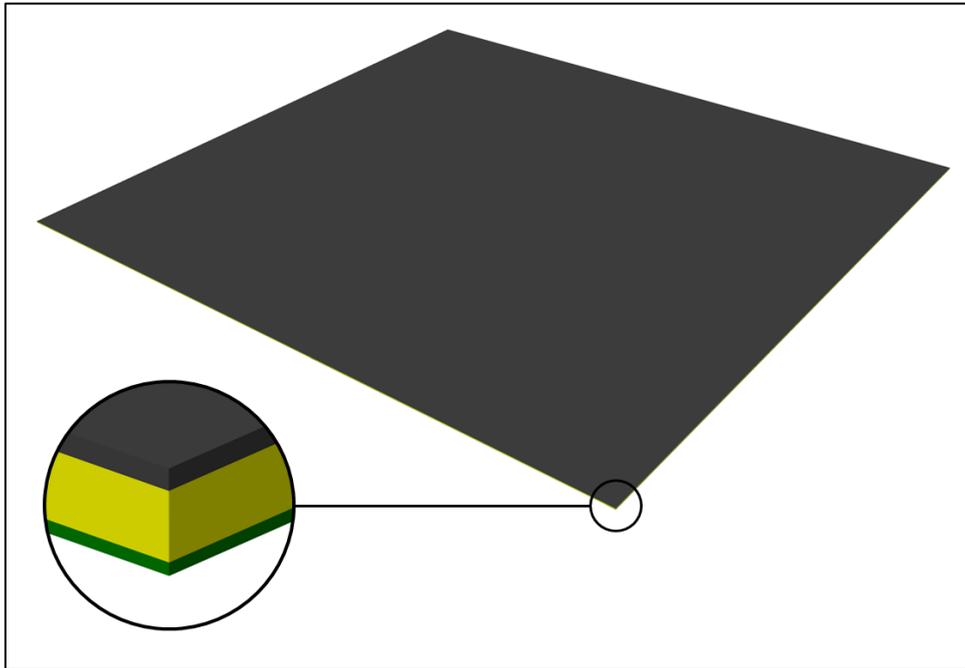


Abbildung 5-2: Elektrolytgestützte Zelle

Die drei Schichtstärken sind in Abbildung 5-3 ersichtlich, ebenfalls dargestellt ist der Nickel-Kupfer-Schaum auf der Anodenseite.

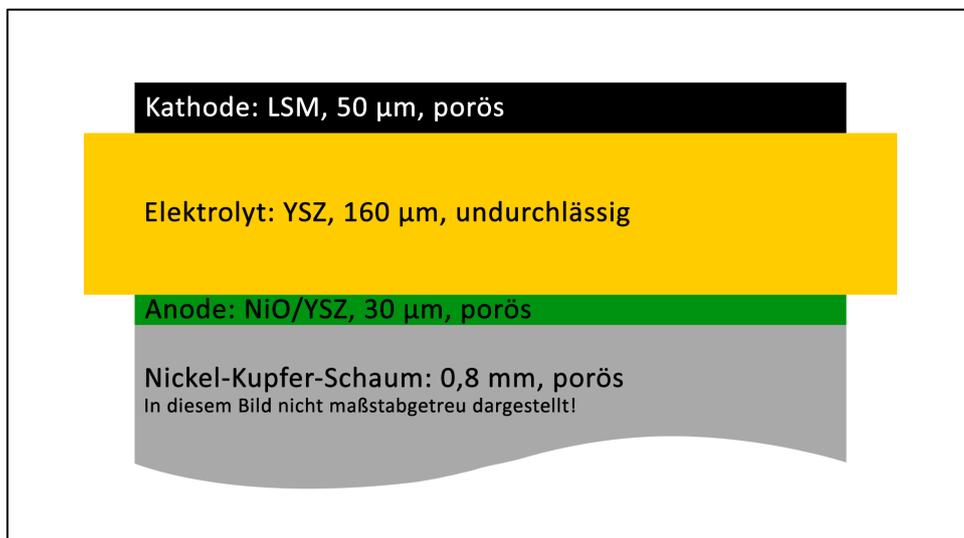


Abbildung 5-3: Schichtstärken und Werkstoffe der Zelle

Als Elektrolyt wird Yttriumdotiertes Zirkoniumdioxid verwendet. Für die Anode kommt ein Verbundwerkstoff aus Nickeloxid (NiO) und yttriumdotiertem Zirkoniumdioxid (YSZ) zum Einsatz. Die Kathode besteht aus Lanthan-Strontium-Manganoxid (LSM).

Für die in Kapitel 7 beschriebene Berechnung des Temperaturfeldes werden Elektrolyt- und Elektrodenschichten nur als eine einzelne, homogene Schicht modelliert. Die thermischen Materialeigenschaften werden vom Elektrolytwerkstoff YSZ übernommen (der Elektrolyt macht den größten Teil der Zelle aus, außerdem sind die thermischen Materialeigenschaften der Elektrodenwerkstoffe ähnlich jenen des Elektrolyts).

Die Durchströmung des porösen Materials der Kathode mit Luft beim Aufheizvorgang des Stacks wird nicht modelliert (Behandlung wie undurchlässiges Material).

5.1.2 Interkonnektorplatte

Die Interkonnektorplatten (sowie auch Grund- und Deckplatte) des Stacks bestehen aus „Crofer“, einem ferritischen, korrosionsbeständigen Stahl. Dieser bildet bei Temperaturen bis 900 °C eine Chrom-Manganoxid-Schicht an der Oberfläche aus, die thermodynamisch sehr stabil und elektrisch gut leitend ist. Der Wärmeausdehnungskoeffizient ist jenem der keramischen Zellwerkstoffe angepasst. [Crofer 2010]

In die Interkonnektorplatte sind, wie schon aus Abbildung 5-1 ersichtlich, auch die Kanäle für Luft- und Brennstoffzufuhr eingearbeitet. Deren Querschnitt ist trapezförmig. Da die Luftkanäle eine entscheidende Rolle beim Wärmeübergang von der Luft auf die Bauteile des Stacks spielen, sind diese hier nochmals besser abgebildet. Abbildung 5-4 zeigt dazu eine Interkonnektorplatte (mit dreißig Luftkanälen) von unten:

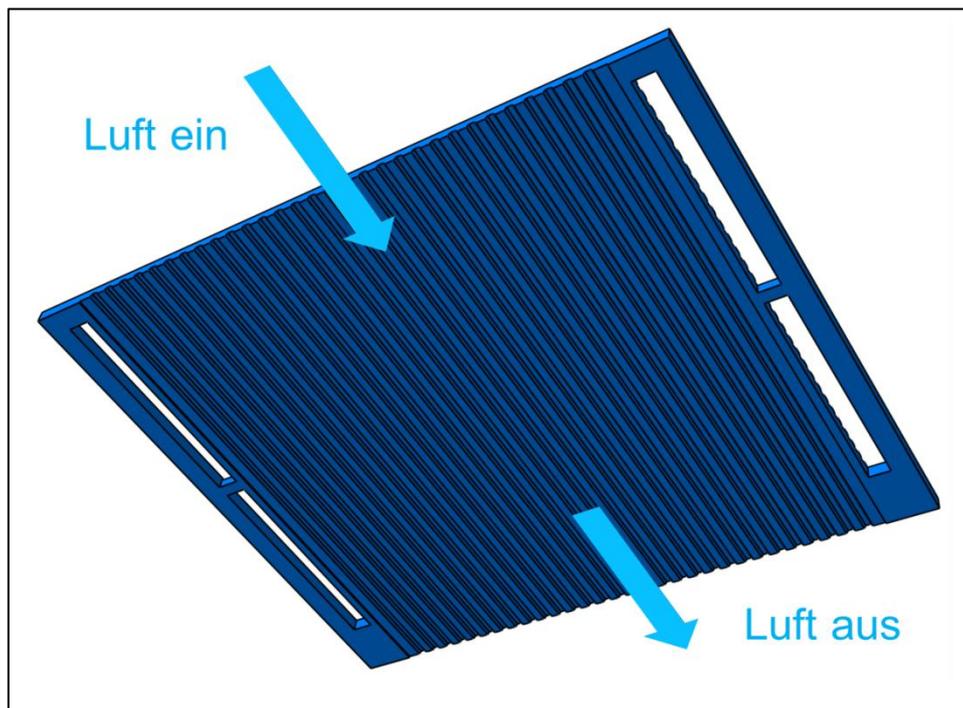


Abbildung 5-4: Luftkanäle in der Interkonnektorplatte (Ansicht von unten)

Um sich eine Vorstellung von den Abmessungen des Trapesquerschnitts machen zu können, sind diese in folgender Skizze (Abbildung 5-5) dargestellt (Maße in mm):

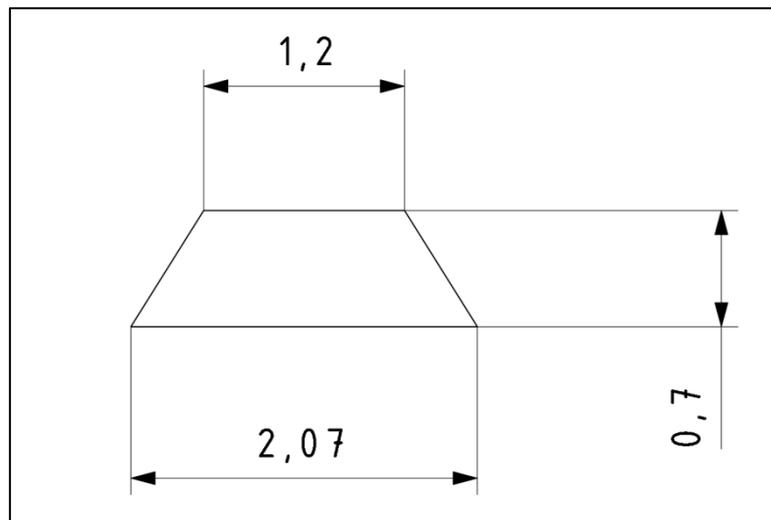


Abbildung 5-5: Abmessungen des Trapezquerschnitts der Luftkanäle (Maße in mm)

Für einfache Abschätzungen zum Druckverlust und Wärmeübergang wird mit dem hydraulischen Durchmesser

$$d_h = \frac{4A}{U} = 0,93 \text{ mm} \quad (5-1)$$

gerechnet, der es erlaubt, wie mit einem kreisrunden Rohr zu verfahren. Der hydraulische Durchmesser setzt sich zusammen aus der Querschnittsfläche A und dem Querschnittsumfang U des trapezförmigen Kanals.

5.2 Der Luft Zu- und Ablauf

Der Luft Zu- und Ablauf (engl. „Manifolding“) ist bei diesem System (wie auch bei vielen anderen Systemen) sehr simpel gelöst. Vor und nach dem Stack werden je ein Luftkasten mit einem Zulauf- bzw. einem Ablaufrohr angebaut. Diese Luftkästen werden aus dem Isolationsmaterial gebildet, mit dem die Stacks umgeben sind. Im betrachteten Fall werden zwei übereinander angeordnete Stacks von einem gemeinsamen Zulauf gespeist. Die Geometrie der sich ergebenden Kanäle zeigt Abbildung 5-6:

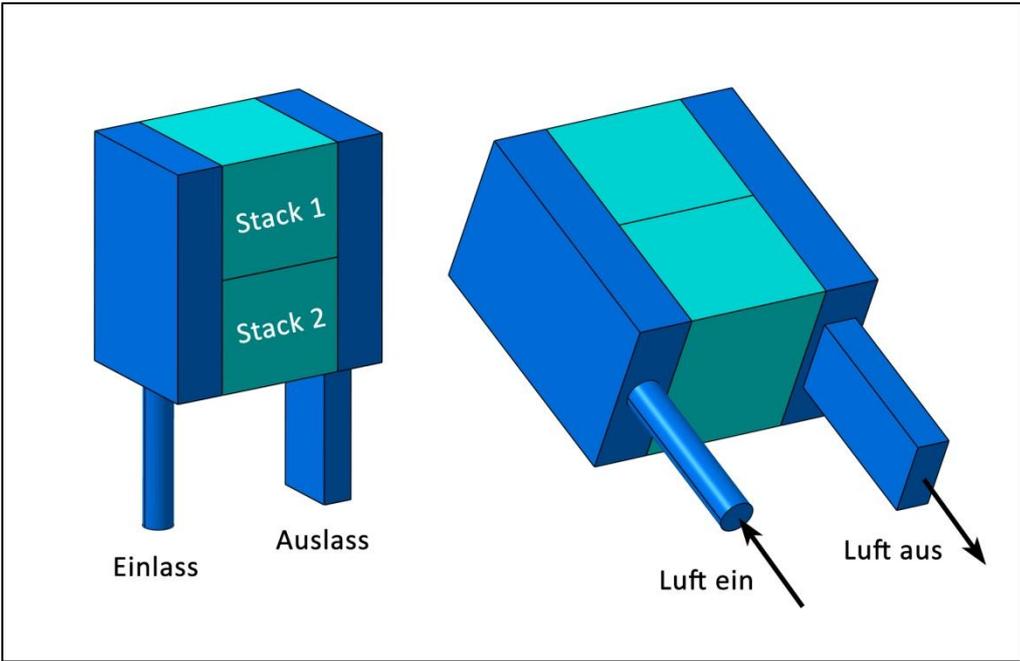


Abbildung 5-6: Luft Zu- und Ablauf der Stacks

6 Untersuchung der Gleichverteilung der Kathodenluft

Eine wichtige Ausgangsbasis für die Simulation des thermomechanischen Verhaltens des Stacks beim Aufwärmprozess ist die Gleichverteilung der heißen Luft auf alle Kanäle. Ist eine Gleichverteilung gegeben, so kann man davon ausgehen, dass in jedem Kanal dieselben Verhältnisse herrschen (Eingangstemperatur, Volumenstrom etc.), was die Simulation einfacher gestaltet.

Der Entwickler eines Brennstoffzellensystems strebt ohnedies immer eine Gleichverteilung der Luft auf alle Kanäle an, damit über die gesamte Zellfläche möglichst dasselbe Luftverhältnis erreicht wird. Der unvermeidbare Systemgegendruck sowie konstruktive Maßnahmen an der Geometrie des Zulaufs sind hierbei die üblichen Werkzeuge des Entwicklers.

In dieser Diplomarbeit soll beispielhaft der Nachweis der Gleichverteilung der Luft für die gegebene Geometrie des Zu- und Ablaufs erbracht werden. Die angewandte Methodik umfasst:

- Die Simulation des Druckverlustes des Stacks über dem Massenstrom
- Die eigentliche Simulation der Gleichverteilung der Luft auf alle Kanäle

Der Druckverlust versteht sich als Ausgangsbasis für die Simulation der Gleichverteilung der Luft, für die auf ein Porositätsmodell nach Forchheimer zurückgegriffen wird (der Stack wird als poröses Medium betrachtet, da eine Simulation mit detaillierter Geometrie der Kanäle zu aufwändig wäre). Die zwei angeführten Punkte werden in den Abschnitten 6.1 und 6.2 näher beschrieben.

6.1 Simulation des Druckverlustes des Stacks

Da über den Stack noch keine experimentellen Daten zum Druckverlust vorliegen, muss der Druckverlust in Abhängigkeit vom Massenstrom (bzw. vom Volumenstrom) durch eine CFD-Simulation in AVL FIRE ermittelt werden.

Die Simulation wird für vier verschiedene Massenströme durchgeführt. Daraus resultieren vier verschiedene Werte für den Druckverlust, aus denen eine Funktion 2. Ordnung für den Druckverlust über dem Massenstrom gebildet wird.

6.1.1 Randbedingungen

Für die Simulation wird ein Ausschnitt von 15 x 15 Kanälen (von insgesamt 30 x 30 Kanälen) detailliert vernetzt. Als Zulauf dient eine einfache „Box“, welche in Kanalrichtung angeströmt wird. Eine derartige Box wird auch als Ablauf verwendet. Abbildung 6-1 zeigt die Netzgeometrie für die Druckverlustberechnung.

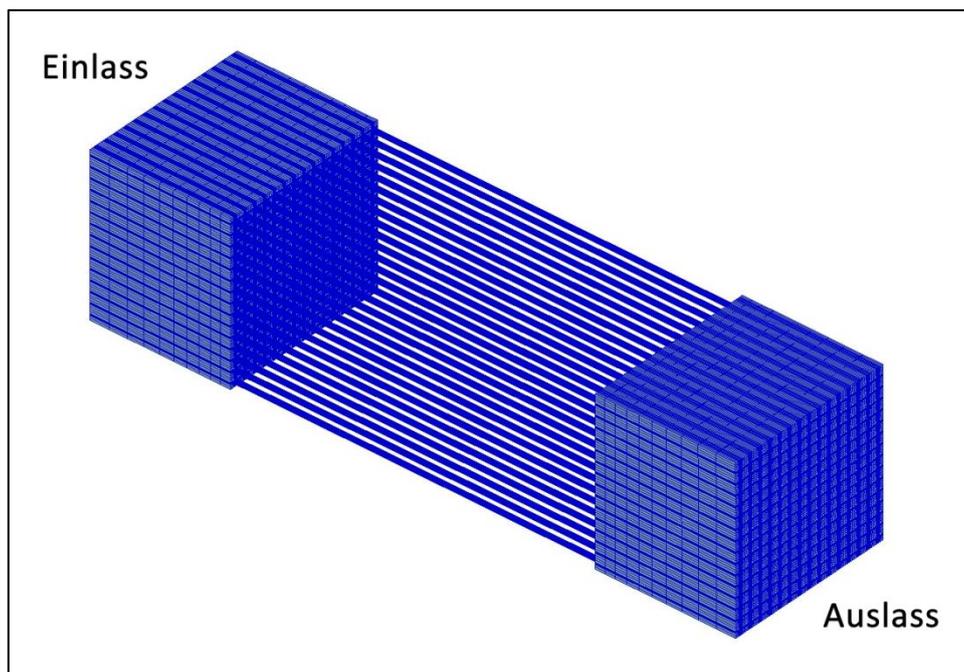


Abbildung 6-1: Isometrische Ansicht der Netzgeometrie für die Druckverlustberechnung

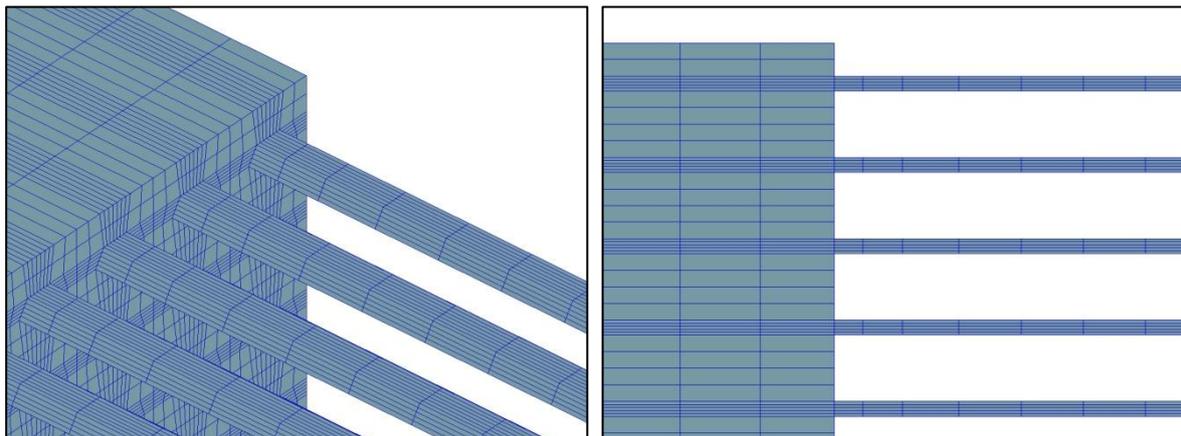


Abbildung 6-2: Isometrische Detailansicht der Netzgeometrie für die Druckverlustberechnung (links)
Abbildung 6-3: Seitliche Detailansicht der Netzgeometrie für die Druckverlustberechnung (rechts)

Da der Ausschnitt von 15 x 15 Kanälen ein Viertel aller Kanäle des Stacks darstellt, wird auch jeweils ein Viertel des realen Massenstroms als Randbedingung am Eingang aufgebracht. Als Randbedingung am Ausgang dient der Umgebungsdruck von 1 bar. Die Simulation wird in allen Fällen isotherm bei 300 °C durchgeführt, d.h. als Eingangstemperatur der Luft sowie als Wandtemperatur werden 300 °C aufgebracht. Es findet also kein Wärmeübergang zwischen Luft und Wand statt, was erlaubt, eine stationäre Berechnung durchzuführen, die für die Parametrierung des Porositätsmodells nach Forchheimer (siehe Kapitel 6.2) ausreichend ist.

6.1.2 Ergebnisse

Als Beispiel soll das Ergebnis für einen Massenstrom von 0,625 g/s (d.h. 2,5 g/s am vollen Stack) näher betrachtet werden (Abbildung 6-4). Dieser Massenstrom entspricht auch jenem Massenstrom, der beim Aufheizvorgang eingestellt wird.

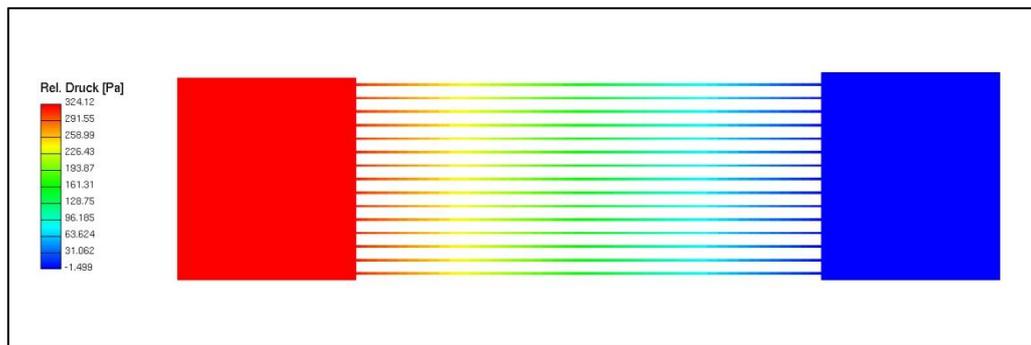


Abbildung 6-4: Ergebnis der Druckverlustberechnung in FIRE für den Nennmassenstrom (Seitenansicht)

Über die Kanallänge von 130 mm ergibt sich in diesem Fall ein Druckverlust von 325 Pascal bzw. 3,25 mbar. Ausgehend von diesem Nennmassenstrom wurde der Druckverlust auch für den halben bzw. den 1,5-fachen und den doppelten Massenstrom berechnet. Die Ergebnisse sind in Tabelle 6-1 zusammengefasst:

| Massenstrom (1/4 Stack) [g/s] | Massenstrom (Vollstack) [g/s] | Druckdifferenz [mbar] |
|----------------------------------|----------------------------------|--------------------------|
| 0,3125 | 1,25 | 1,56 |
| 0,6250 | 2,50 | 3,25 |
| 0,9375 | 3,75 | 5,08 |
| 1,2500 | 5,00 | 7,10 |

Tabelle 6-1: Ergebnisse der FIRE-Simulation des Druckverlustes in Abhängigkeit vom Massenstrom

Der Druckverlust wurde für den Brennstoffzellenstack unter gleichen Randbedingungen auch in einer einfachen Berechnung mit hydraulischem Durchmesser und unter Zuhilfenahme des Moody-Diagramms anhand der Gleichung

$$\Delta p = \frac{\rho u^2}{2} \left(\lambda \frac{l}{d_h} + \zeta \right) \quad (6-1)$$

abgeschätzt, welche dem Druckverlustterm in der erweiterten Bernoulli-Gleichung entspricht. Die Rohrreibungszahl λ wird bei laminaren Strömungsverhältnissen (hier $Re \approx 125$) mit $\lambda = 64/Re$ berechnet. Der Einströmwiderstand ζ wird mit $\zeta = 0,2$ abgeschätzt. Die Ergebnisse liegen in derselben Größenordnung wie jene der FIRE-Simulation und sind in Tabelle 6-2 zu finden:

| Massenstrom (1/4 Stack) [g/s] | Massenstrom (Vollstack) [g/s] | Druckdifferenz [mbar] |
|----------------------------------|----------------------------------|--------------------------|
| 0,3125 | 1,25 | 2,87 |
| 0,6250 | 2,50 | 5,75 |
| 0,9375 | 3,75 | 8,63 |
| 1,2500 | 5,00 | 11,51 |

Tabelle 6-2: Ergebnisse der Abschätzung des Druckverlustes mit Hilfe des Moody-Diagrammes

Da die FIRE-Simulation genau auf die verwendete Kanalgeometrie eingeht, werden deren Ergebnisse für die weiteren Berechnungen in Kapitel 6.2 herangezogen.

6.2 Simulation der Gleichverteilung der Luft

Für die Simulation der Gleichverteilung der Luft werden die zwei Stacks in FIRE als poröse Medien modelliert. Dadurch müssen die feinen Kanäle nicht detailaufgelöst werden, was eine Ersparnis an Rechenaufwand bedeutet. Eine solche Methodik wird auch für die Simulation der Gleichverteilung des Abgases bei Katalysatoren im Abgasstrang von Kraftfahrzeugen verwendet. Ähnlich dem Brennstoffzellenstack, besteht dort ebenfalls eine „gerichtete Porosität“ in Form vieler feiner, gerader Kanäle durch den Katalysator, die gleichmäßig über die angeströmte Fläche verteilt sind.

6.2.1 Randbedingungen

FIRE bietet zur Simulation von Porosität ein Modell nach Forchheimer an: [Fire 2010, S. 5-6]

$$\frac{\partial p}{\partial x_i} = -\alpha_i \mu w_i - \zeta \frac{\rho}{2} |w| w_i \quad (6-2)$$

Der Druckgradient ist hierbei abhängig von einem Term, in den die Geschwindigkeit linear eingeht (Viskositätsterm) und von einem Term, in den die Geschwindigkeit zum Quadrat eingeht (Trägheitsterm). Die Koeffizienten α und ζ werden im vorliegenden Fall durch die in Kapitel 6.1 beschriebene Simulation des Druckverlustes des Stacks ermittelt.

Wie schon angesprochen, wird nun der gesamte Brennstoffzellenstack als „poröser Ziegel“ modelliert. Die feinen Luftkanäle werden nicht detailaufgelöst. Die Modellierung als poröses Medium stellt allerdings auch einige Anforderungen an die Vernetzung: So muss das Netz im Bereich des porösen Mediums strukturiert und, bei einer ausgezeichneten Richtung der Porosität, entlang dieser Richtung fluchtend sein. An den Berührflächen zu nicht-porösen Bereichen des Strömungsfeldes müssen noch zwei Zellschichten den oben genannten Forderungen hinsichtlich Strukturiertheit und Ausrichtung folgen.

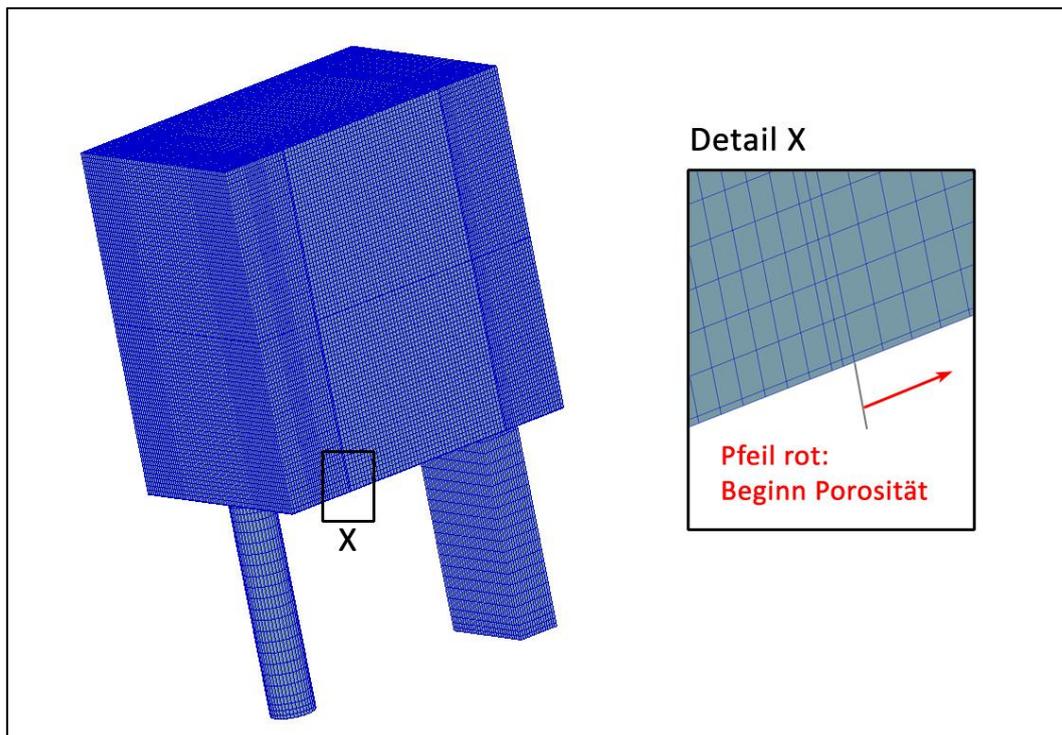


Abbildung 6-5: Netzgeometrie für die Simulation der Gleichverteilung der Luft

Gerechnet wird mit dem Nennmassenstrom von 5 g/s (d.h. 2,5 g/s pro Stack), der am Einlass aufgebracht wird. Als Randbedingung am Auslass dient der Umgebungsdruck von 1 bar. Die Simulation wird wiederum bei isothermen Verhältnissen, d.h. konstanten Wand- und Lufttemperaturen von 300 °C, durchgeführt.

In einer zweiten, eigenen Rechnung werden die Wand- und Lufttemperaturen auf 800 °C erhöht, wobei die restlichen Randbedingungen wie Massenstrom und Umgebungsdruck gleich bleiben.

6.2.2 Ergebnis (300 °C Wand- und Lufttemperatur)

Wird das Ergebnis der Simulation bei 300 °C in einem „Surface Cut“ betrachtet, so ergibt sich Abbildung 6-6:

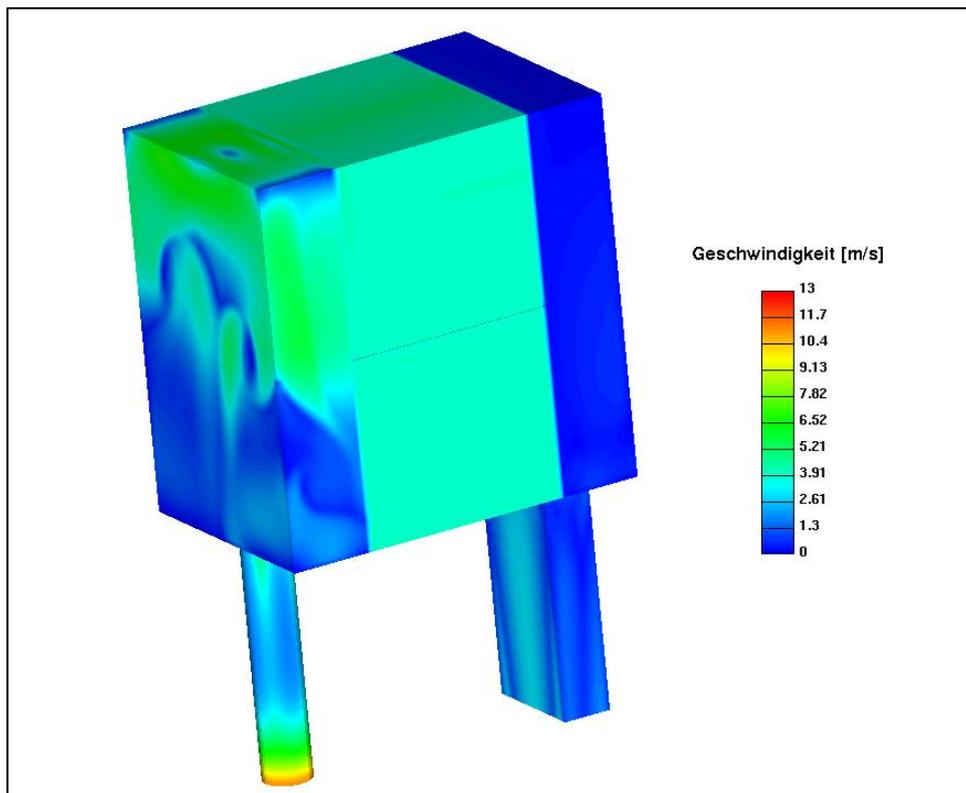


Abbildung 6-6: Ergebnis der Gleichverteilungssimulation (300 °C) in einem Surface Cut

Einen Einblick in das Innere der Geometrie erlaubt jedoch erst ein Längsschnitt durch das System:

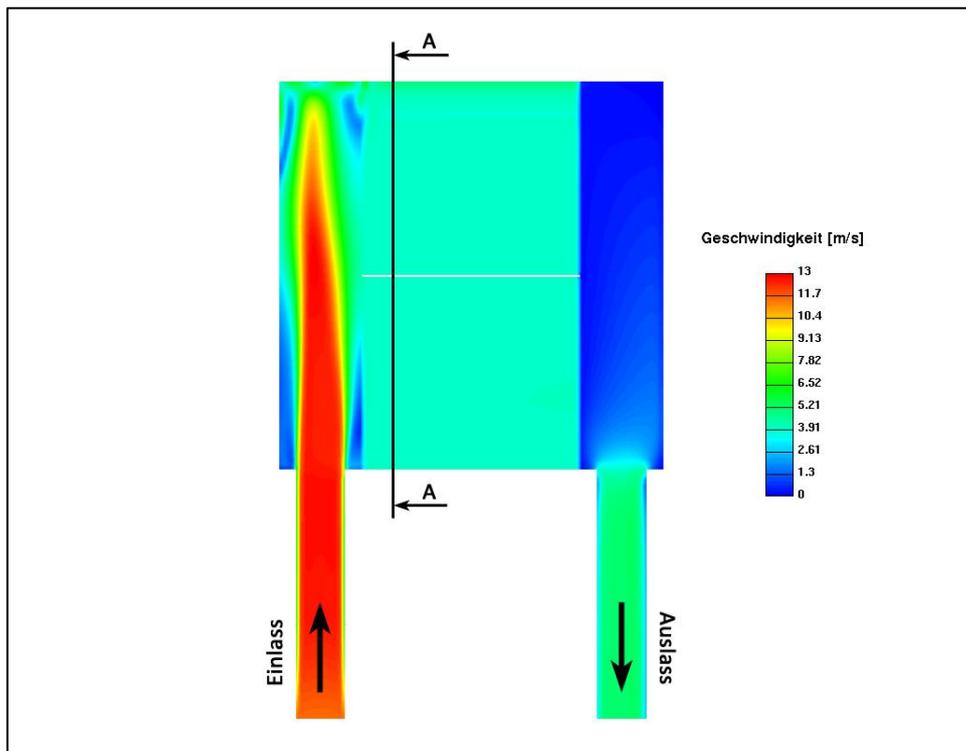


Abbildung 6-7: Ergebnis der Gleichverteilungssimulation (300 °C) in einem Längsschnitt

In Abbildung 6-7 ist die Vergleichmäßigung der Strömung an der Eintrittsfläche der zwei Stacks gut zu erkennen. Die durchschnittliche Geschwindigkeit der Luft in den Kanälen der Stacks liegt bei etwa vier Meter pro Sekunde, was mit einer einfachen Abschätzung korreliert.

Der in Abbildung 6-7 eingezeichnete Schnitt A:A ist in folgender Grafik dargestellt. Der Schnitt befindet sich fünfzehn Millimeter von der Eintrittsfläche in die Stacks entfernt.

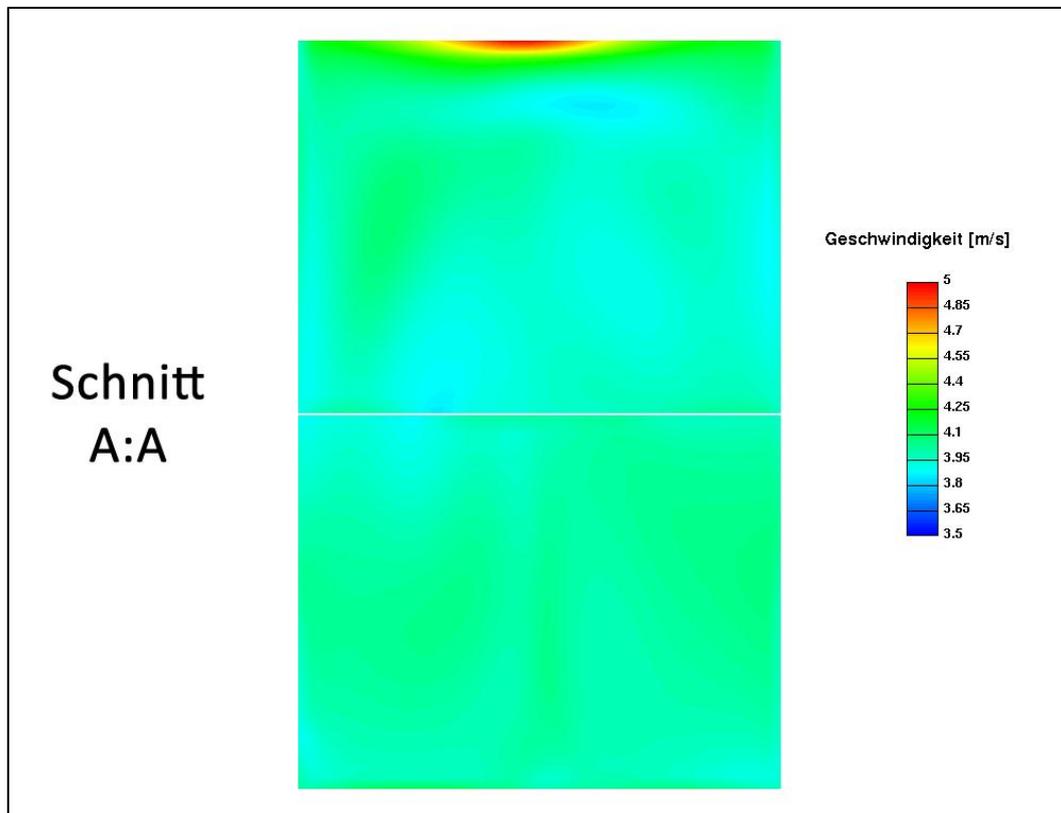


Abbildung 6-8: Ergebnis der Gleichverteilungssimulation (300 °C, Querschnitt durch beide Stacks)

An der Oberkante des oberen Stacks ist eine höhere Geschwindigkeit von fünf Metern pro Sekunde zu erkennen, bedingt durch den Staudruck in der Zulaufbox. Davon abgesehen ist das Geschwindigkeitsfeld jedoch sehr gleichmäßig. Ob und welchen Einfluss der Bereich mit höherer Geschwindigkeit in Wirklichkeit nimmt, ist nicht eindeutig feststellbar, da die reale Einströmfläche nicht kontinuierlich porös ist.

Der in Abbildung 6-8 gezeigte Schnitt bleibt über die weitere Kanallänge unverändert. Das Geschwindigkeitsfeld wird charakterisiert durch folgende Werte:

- Maximale Geschwindigkeit: 5,05 m/s
- Minimale Geschwindigkeit: 3,85 m/s
- Durchschnittliche Geschwindigkeit: 3,99 m/s

Es ergibt sich eine maximale Abweichung von 26,5 Prozent von der Durchschnittsgeschwindigkeit.

6.2.3 Ergebnis (800 °C Wand- und Lufttemperatur)

Analog zu Abbildung 6-7 und Abbildung 6-8 werden hier die Ergebnisse der zweiten Berechnung mit höheren Wand- und Lufttemperaturen von 800 °C betrachtet:

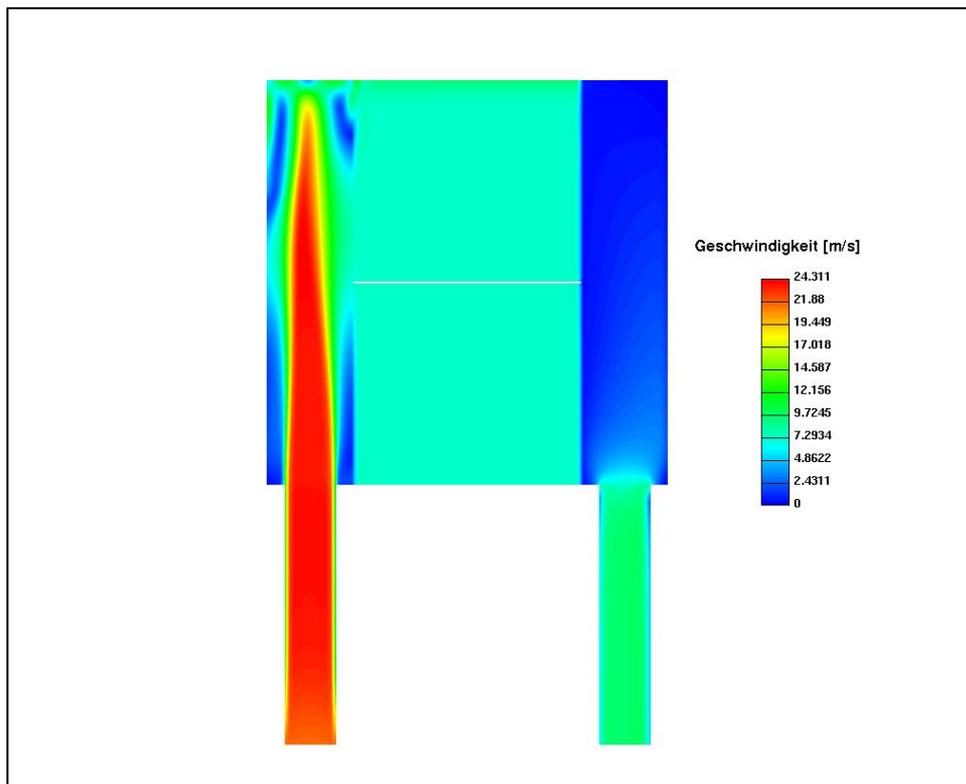


Abbildung 6-9: Ergebnis der Gleichverteilungssimulation (800 °C) in einem Längsschnitt

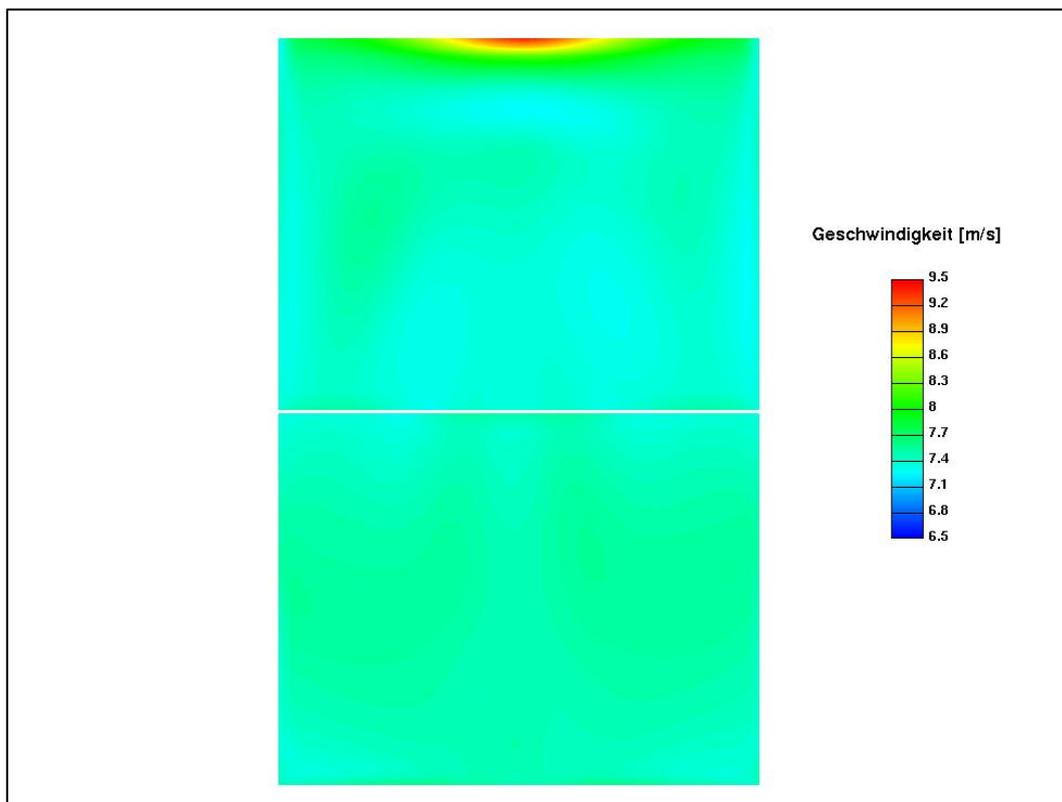


Abbildung 6-10: Ergebnis der Gleichverteilungssimulation (800 °C, Querschnitt durch beide Stacks)

Wie auch schon bei Abbildung 6-8 der Fall, befindet sich in Abbildung 6-10 der Querschnitt fünfzehn Millimeter von der Eintrittsfläche der Stacks entfernt und bleibt über die weitere Kanallänge unverändert. Auch in diesem Fall ergibt sich an der Oberkante des oberen Stacks eine höhere Geschwindigkeit als im restlichen Bereich des Querschnitts. Für das Geschwindigkeitsfeld ergeben sich folgende Werte:

- Maximale Geschwindigkeit 9,36 m/s
- Minimale Geschwindigkeit 7,27 m/s
- Durchschnittliche Geschwindigkeit 7,47 m/s

Die maximale Abweichung von der Durchschnittsgeschwindigkeit beträgt 25,3 Prozent.

Wird das Ersatzmodell „Rohr“ (siehe Kapitel 7.2) unter sonst gleich bleibenden Randbedingungen, aber mit einem 25 Prozent höheren Massenstrom durchströmt, so zeigt sich in der Berechnung eine um etwa 20 % verkürzte Aufwärmdauer sowie leicht erhöhte Temperaturgradienten in der Rohrwand in axialer Richtung. Inwiefern sich die höheren Gasgeschwindigkeiten in den Kanälen des realen Stacks auswirken, sollte in einer detaillierten Untersuchung an einem Vollstack näher betrachtet werden.

7 Berechnung des Temperaturfeldes

In diesem Kapitel wird die instationäre Berechnung des Temperaturfeldes des gegebenen SOFC-Stacks beschrieben. Auch die hierfür notwendigen ersten Schritte mit einem sehr einfachen Modell werden in diesem Abschnitt behandelt.

7.1 Anfangs- und Randbedingungen

Für das Verständnis des Aufwärmprozesses des Brennstoffzellenstacks ist es unumgänglich, sich zuerst mit den Rand- und Anfangsbedingungen auseinanderzusetzen.

Die Anfangsbedingungen lassen sich wie folgt beschreiben: Zu Beginn der Simulation haben alle beteiligten Bauteile sowie die Luft in den Kanälen eine einheitliche Temperatur von 20 °C.

Hinsichtlich der Randbedingungen wurde für den gegebenen Stack im Labor eine Aufwärmstrategie festgelegt, die für die Simulation genau übernommen wurde:

- **Phase 1:** 300 Sekunden Anströmen des Stack mit 300 °C heißer Luft
- **Phase 2:** Anströmen des Stack mit 800 °C heißer Luft bis das Temperaturfeld des Stack an jeder Stelle eine Mindesttemperatur von 700 °C erreicht hat (es sei an dieser Stelle vorab angemerkt, dass die Dauer von Phase 2 etwa eine Stunde und zwanzig Minuten beträgt)

Der Massenstrom wird in beiden Phasen vom Gebläse konstant auf 2,5 g/s ausgegelt.

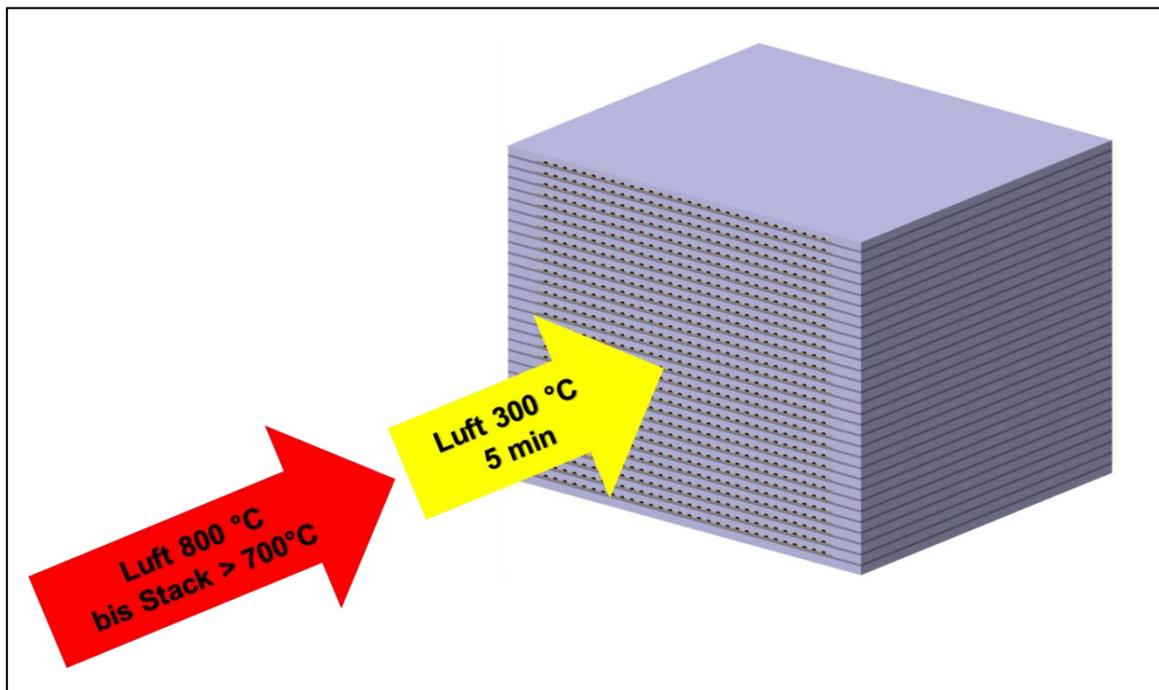


Abbildung 7-1: Aufwärmstrategie mit zwei Aufwärmphasen

Für die Simulation wird angenommen, dass die Zulaufkanäle zum Stack („Manifolding“) perfekt isoliert sind, und die Luft daher mit exakt 300 °C bzw. 800 °C an der Stirnfläche des Stack, an der sich die Eintrittsöffnungen der Kathodenkanäle befinden, ankommt. Es wird weiters von einer perfekten Gleichverteilung der Luft auf alle Kathodenkanäle ausgegangen, d.h. die Geschwindigkeit ist an allen Kanaleintrittsöffnungen gleich.

Von entscheidender Bedeutung ist der Wärmeübergang von der heißen Luft an die Struktur des Stacks. Abbildung 7-2 soll am Beispiel eines einzelnen Kanals zeigen, an welchen Stellen in der Simulation diesbezüglich Randbedingungen aufgebracht werden:

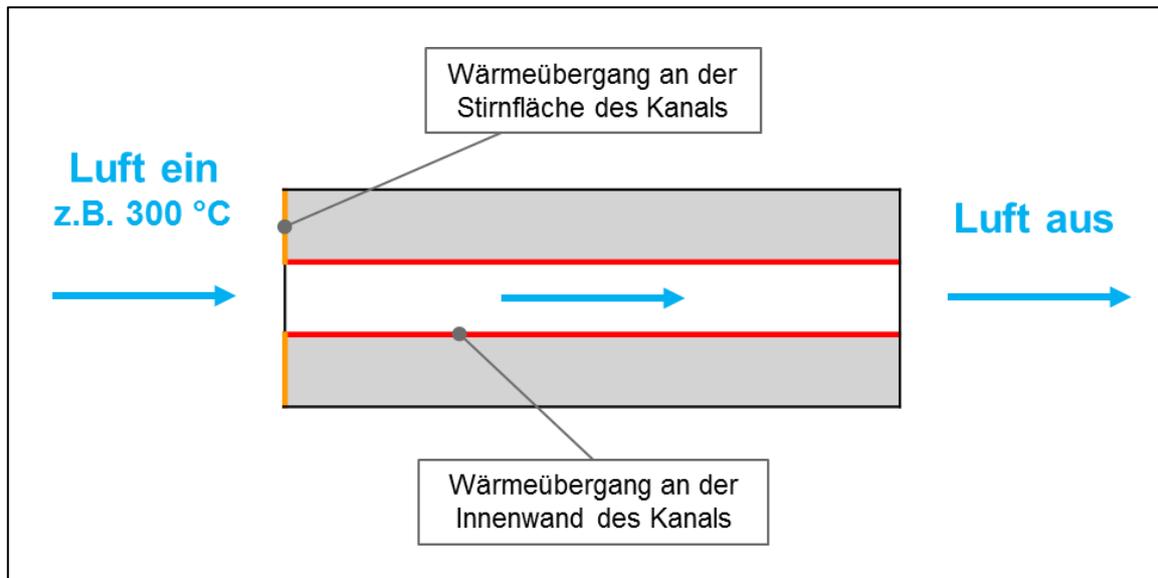


Abbildung 7-2: Wärmeübergangsrandbedingungen am Kathodenkanal

Wie aus der Grafik hervorgeht, spielt der Wärmeübergang für die Simulation in zwei Bereichen eine Rolle: An der Stirnfläche des Stacks (orange) sowie an den Wänden der Kathodenkanäle (rot). Der Wärmeübergang zwischen Luft und Struktur an der rückseitigen Stirnfläche des Stacks wird vernachlässigt, da für diese Fläche sowohl Temperaturdifferenz und Wärmeübergangskoeffizient klein sind.

Wie schon in Kapitel 5.2 angesprochen, ist der Stack an den Seitenflächen mit einer sechs Zentimeter dicken Schicht aus temperaturfestem Isolationsmaterial eingepackt, damit dem Prozess möglichst wenig Wärme verloren geht. Die Seitenflächen des Stacks werden daher als adiabat angenommen.

Es ist weiters zu bedenken, dass sich im Inneren des Stacks auch jene Hohlräume befinden, durch die der Brennstoff fließt. Das Gebläse für den Brennstoff wird jedoch erst aktiviert, wenn der Aufwärmvorgang des Stacks abgeschlossen ist, d.h. während des Aufwärmvorgangs sind die Brennstoffkanäle nicht durchströmt, somit kommt es dort auch zu keinem konvektiven (Ab-)Transport von Wärmeenergie. Da die spezifische Wärmekapazität des stillstehenden Gases in den Brennstoffkanälen sehr klein ist, wird der Wärmeübergang von der Struktur an das Gas in den Brennstoffkanälen vernachlässigt.

7.2 Abschätzung des Wärmeübergangs von Luft an Wand

Ein Schlüsselproblem bei der transienten Berechnung des Temperaturfeldes im Stack ist der Wärmeübergang von der Luft an die Kanalwände. Es handelt sich um ein gekoppeltes Problem, bei dem die örtlichen Temperaturen der Luft Einfluss auf die örtlichen Temperaturen im Stack nehmen und umgekehrt. Nur wenn diese Koppelung berücksichtigt wird, kann das Temperaturfeld transient richtig berechnet werden.

7.2.1 Vereinfachtes Modell „kreisrundes Rohr“

Für erste Berechnungen ist es sinnvoll, aus den vielen Kathodenkanälen einen herauszupicken und diesen auf ein kreisrundes Rohr überzuführen.

Wie schon in Kapitel 5 beschrieben, weisen die Kathodenkanäle einen trapezförmigen Querschnitt auf. Für diesen Querschnitt wird der hydraulische Durchmesser

$$d_h = \frac{4A}{U} = 0,93 \text{ mm} \quad (7-1)$$

berechnet, der die Betrachtung des Kanals wie mit einem kreisrunden Querschnitt ermöglicht. Der Außendurchmesser des Rohres wird so gewählt, dass die Querschnittsfläche des Rohres jener Querschnittsfläche des Festkörpers bei Betrachtung eines einzelnen Kathodenkanals entspricht.

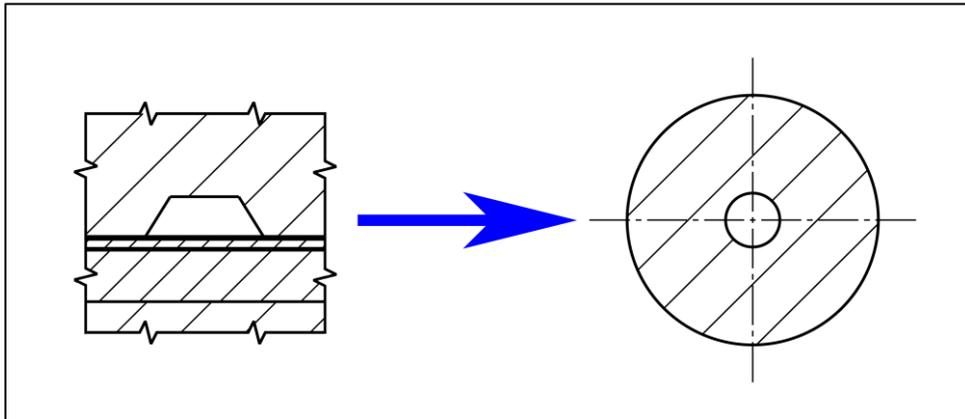


Abbildung 7-3: Überführung der Querschnittsfläche eines Kanals auf die Querschnittsfläche eines kreisrunden Rohres

Die Kanallänge bleibt mit 130 mm unverändert. Es ergibt sich also ein langes, dünnes Rohr, welches im Laufe der Arbeit für mehrere einfache Abschätzungen und Berechnungen als Ersatzmodell für einen einzelnen Kathodenkanal dient:

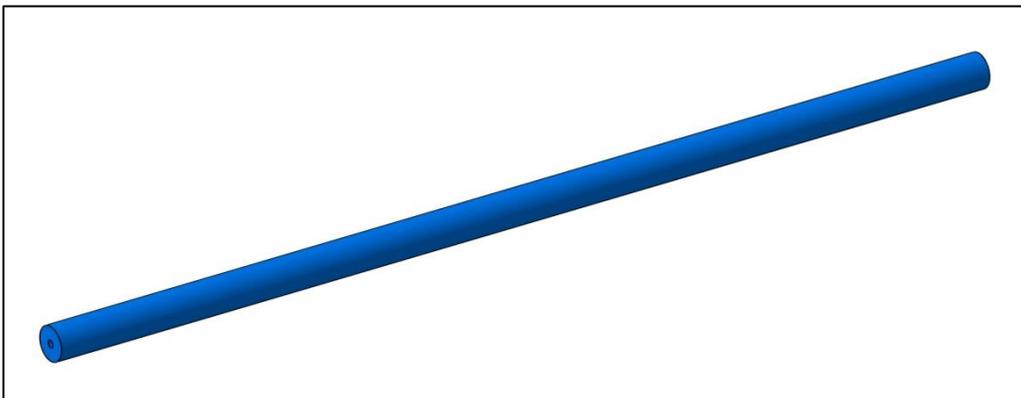


Abbildung 7-4: Kreisrundes Rohr als einfaches Ersatzmodell für einen Kathodenkanal (Maßstab ca. 1:1)

Wie schon in Kapitel 6 beschrieben, liegt die Strömung in den kathodenseitigen Kanälen des Brennstoffzellenstacks weit im laminaren Bereich, was auch für die weiteren Betrachtungen von Bedeutung ist.

7.2.2 Numerische Behandlung des Problems in Microsoft Excel

Mittels eines zweidimensionalen Finiten-Volumen-Ansatzes in Microsoft Excel lässt sich die gekoppelte Problemstellung anhand des Beispiels des kreisrunden Rohres mit Hilfe der diskretisierten Energieerhaltungsgleichung näher untersuchen. Dies erfordert eine Diskretisierung des Rohres entlang der Rohrachse sowie normal zur Rohrachse (Abbildung 7-5).

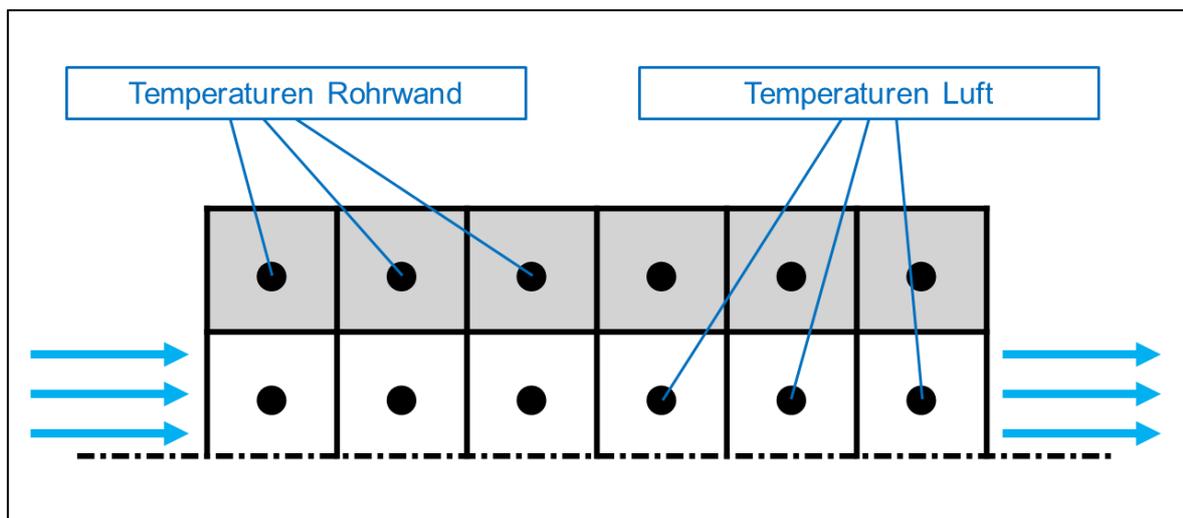


Abbildung 7-5: Räumliche Diskretisierung des kreisrunden Rohres

Abbildung 7-5 zeigt schematisch das räumlich diskretisierte Rohr. Die Anzahl der Finiten Volumen in axialer Richtung (z.B. sechs Stück in obiger Abbildung) ist variabel, bei den ersten Berechnungen hat sich eine Anzahl von 26 Finiten Volumen (d.h. fünf Millimeter Länge pro Finitem Volumen) als ausreichend genau erwiesen. In radialer Richtung bekommen jeweils die Luft und das Rohr ein Finites Volumen zugewiesen.

Die schwarzen Punkte stehen für die Temperaturen der jeweiligen Finiten Volumen. Ziel ist es, die Temperaturen aller Finiten Volumen zu allen Zeitpunkten des Aufwärmprozesses zu berechnen.

7.2.2.1 Energieströme über die Grenzen der Finiten Volumen

Es ist zunächst wichtig zu verstehen, welche Energieströme über die Grenzen der Finiten Volumen fließen. Hierfür wird eine beliebige „Scheibe“ aus dem Inneren des Rohres betrachtet - bestehend aus einem Paar Finiten Volumen Wand/Luft - welche in Abbildung 7-6 schwarz umrandet dargestellt ist. Aus dem Inneren des Rohres deshalb, weil die Finiten Volumen an den Stirnseiten einer eigenen Betrachtung bedürfen (siehe dazu Abbildung 7-7).

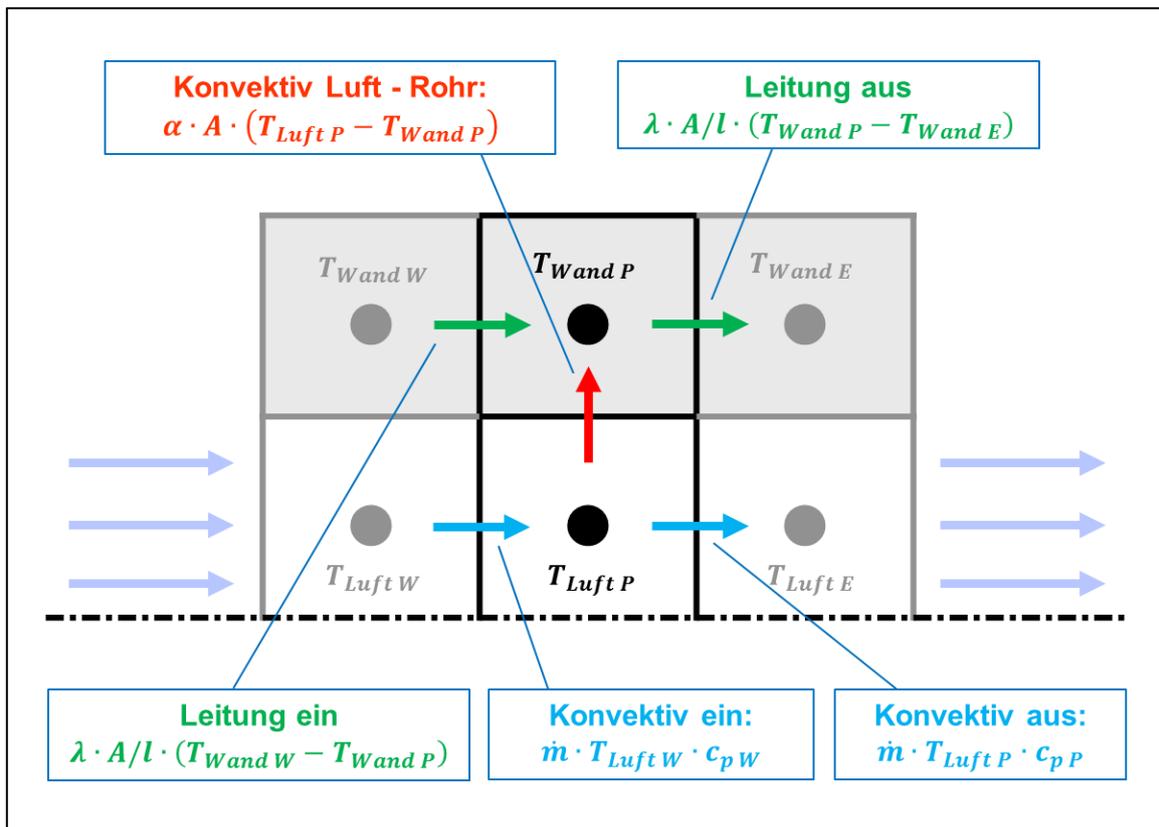


Abbildung 7-6: Energieströme über die Grenzen der Finiten Volumen im Inneren des Rohres

Die Indizes der Temperaturen in obiger Darstellung (W, P, E) folgen, analog zu Kapitel 4.2.1, der Kompassnotation. Die farbigen Pfeile im Inneren des Rohres stellen die Energieströme über die Grenzen der Finiten Volumen dar:

- Grün: Wärmeleitung im Festkörper des Rohres. Der Wärmeübergang durch Leitung zwischen zwei benachbarten Finiten Volumen hängt ab von deren Wärmeleitfähigkeit λ , deren Grenzfläche A (in diesem Fall ein Kreisring), deren Temperaturdifferenz sowie dem Abstand l zwischen deren Mittelpunkten.
- Blau: Konvektiver Transport von Energie mit der Luft. Da die Temperatur eines Finiten Volumens der Luft hauptsächlich von der Temperatur im stromauf liegenden Finiten Volumen beeinflusst wird, kommt hier ein First Order Upwind Schema zur Verwendung. Der einfließende Energiestrom ist also abhängig vom Massenstrom, sowie der stromauf liegenden Temperatur (und der davon abhängigen spezifischen Wärmekapazität c_p) der Luft.
- Rot: Konvektiver Wärmeübergang zwischen Luft und Rohrwand. Der Wärmeübergang von der Luft an das Rohr ist abhängig vom Wärmeübergangskoeffizienten α , der Fläche A (hier eine Zylinderoberfläche) sowie der Temperaturdifferenz zwischen Luft und Wand.

Die Rohrenden müssen eigens betrachtet werden, da dort andere Energieströme auftreten, die von den Randbedingungen geprägt sind. Abbildung 7-7 zeigt exemplarisch die Behandlung der Stirnfläche am Eintritt des Rohres:

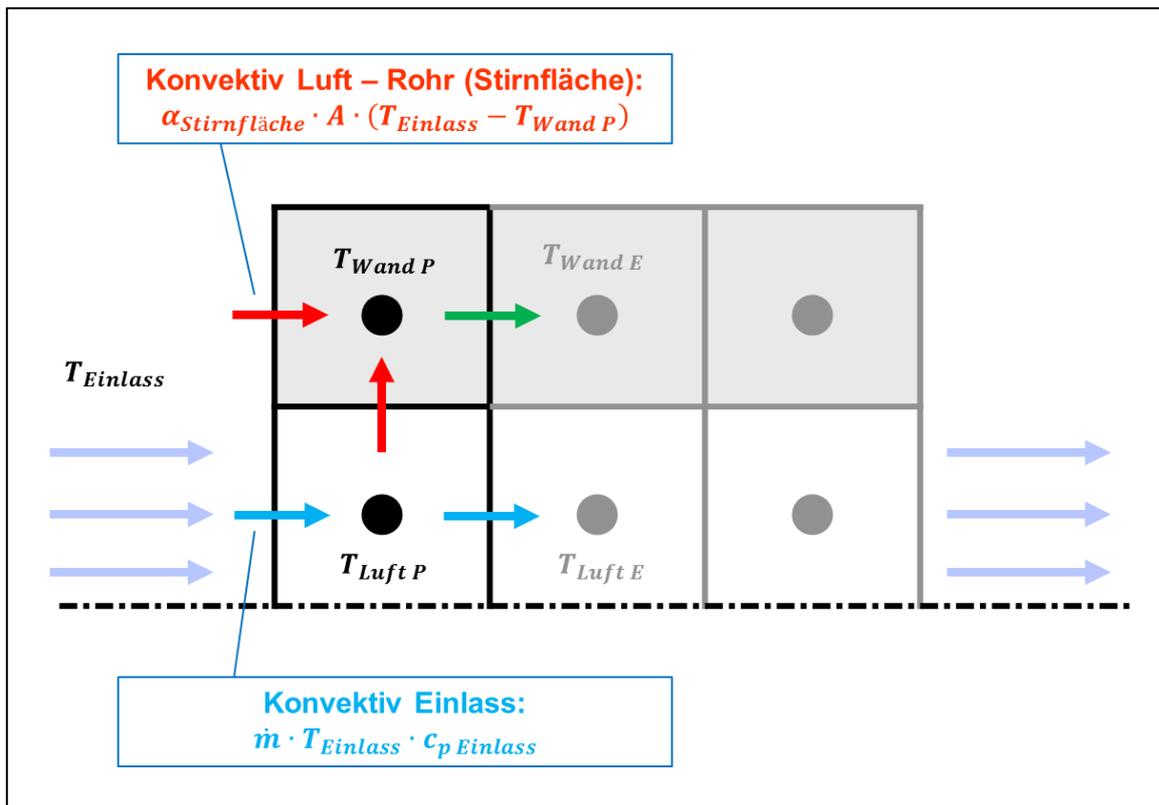


Abbildung 7-7: Energieströme über die Grenzen der Finiten Volumen an der vorderen Stirnfläche des Rohres

An der Stirnfläche des Rohres sind zwei Energieströme zu erkennen:

- Rot: Konvektiver Wärmeübergang von der Luft an das Rohr über die Stirnfläche des Rohres. Der Energiestrom ist abhängig von dem Wärmeübergangskoeffizienten α an der Stirnfläche, von der Fläche (hier: Kreisring) und von der Differenz zwischen Einlasstemperatur und Wandtemperatur.
- Blau: Konvektiver Transport von Energie mit der Luft. Analog zu Abbildung 7-6, jedoch wird, statt der Temperatur des westlichen Nachbarvolumens, die Einlasstemperatur zur Bestimmung der eingebrachten Energie herangezogen.

Die in Abbildung 7-7 nicht näher beschriebenen Pfeile verhalten sich analog zu Abbildung 7-6.

Die in den vorangehenden zwei Abbildungen gezeigten Energieströme sorgen dafür, dass sich die Temperaturen in Luft und Rohr ändern. Eine instationäre Berechnung der Temperaturen erfordert natürlich auch eine zeitliche Diskretisierung des Problems. Dafür wird in Microsoft Excel ein explizites Zeitschema verwendet, bei dem die Temperaturen zu einem neuen Zeitpunkt nur von den Temperaturen zum vorangegangenen, alten Zeitpunkt abhängen.

7.2.2.2 Berechnungsalgorithmus

In Folge soll näher darauf eingegangen werden, welche Schritte bei der Berechnung des Aufwärmprozesses und insbesondere bei der Berechnung eines neuen Zeitschrittes durchlaufen werden. Ein Flussdiagramm (Abbildung 7-8) beschreibt die in Excel durchgeführten Berechnungsschritte:

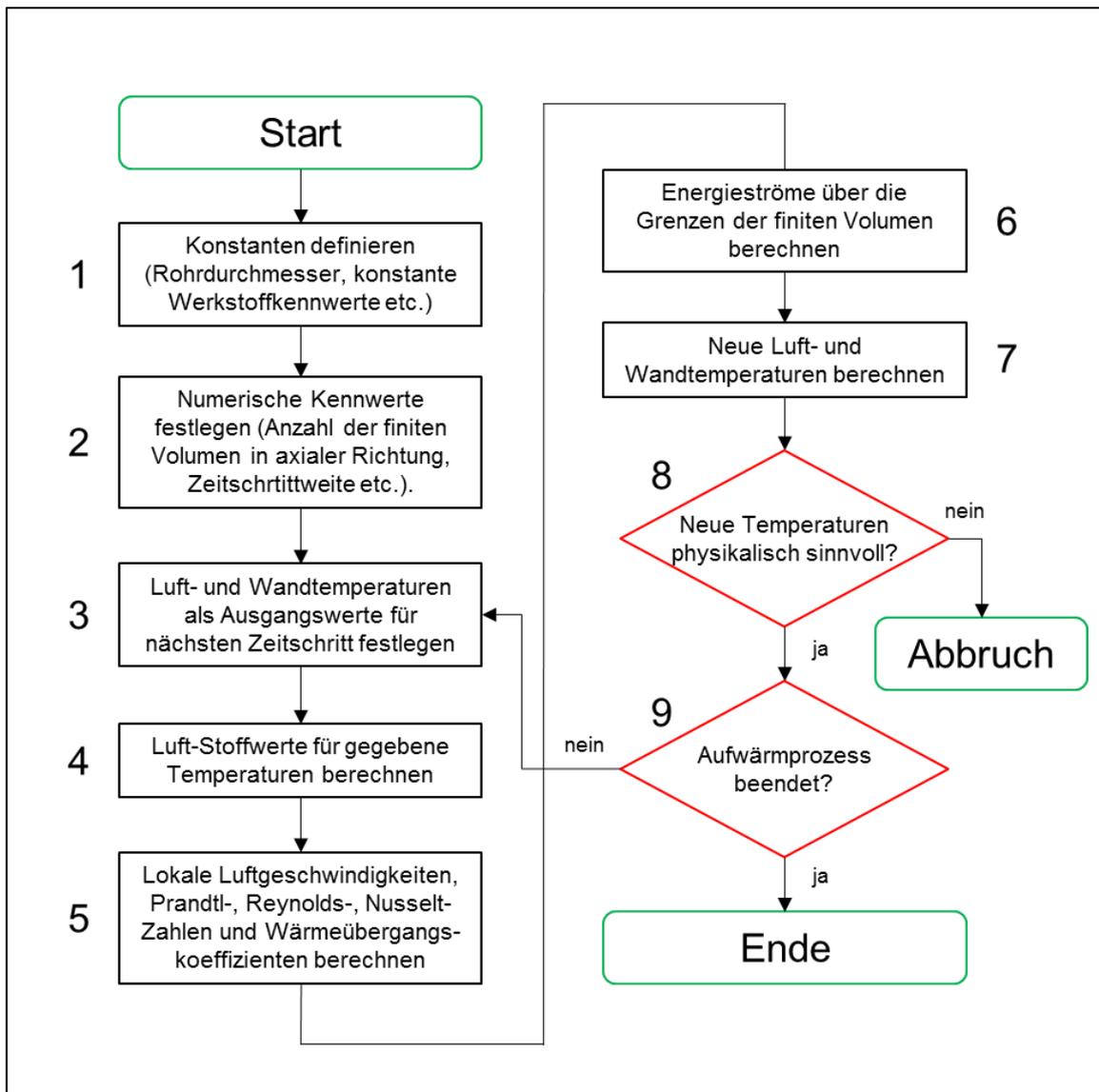


Abbildung 7-8: Flussdiagramm zur Berechnung eines Zeitschrittes bzw. des gesamten Aufwärmprozesses

In Abbildung 7-8 ist gut zu erkennen, dass eine Schleife durchlaufen wird, solange der Aufwärmprozess noch nicht abgeschlossen ist. Die einzelnen Schritte aus obigem Flussdiagramm werden nun näher erläutert:

1. Zu Beginn der Berechnung ist es notwendig, die Rohrgeometrie und die konstanten Werkstoffkennwerte (d.h. jene des Stahls, aus dem das Rohr besteht) festzulegen.
2. Auch hinsichtlich der numerischen Behandlung müssen Kennwerte wie die Anzahl der Finiten Volumen in axialer Richtung (z.B. üblicherweise 26 Stück) sowie die Zeitschrittweite (z.B. 0,0005 Sekunden) festgelegt werden.
3. Im dritten Schritt werden sowohl für die Luft als auch für die Wand die „alten“ Temperaturen zur Berechnung eines neuen Zeitschrittes festgelegt. Vor dem allerersten Zeitschritt müssen hier die Ausgangstemperaturen (d.h. 20 °C in allen Finiten Volumen) eingesetzt werden.

4. Die Stoffwerte der Luft sind abhängig von der Temperatur und müssen daher für jedes Finite Volumen der Luft eigens berechnet werden. Dazu zählen die Dichte ρ , die dynamische Viskosität η , die kinematische Viskosität ν , die thermische Leitfähigkeit λ , und die spezifische Wärmekapazität c_p .
5. Bei konstantem Massenstrom ändert sich mit der Lufttemperatur auch die Geschwindigkeit des Luftstroms im Kanal. Es werden daher die lokalen, über den Querschnitt gemittelten Geschwindigkeiten für alle Finiten Volumen der Luft berechnet. Mit den mittleren Geschwindigkeiten und den Stoffwerten können nun die dimensionslosen Prandtl-, Reynolds- und Nusselt-Zahlen ermittelt werden. Mittels eines Ansatzes aus dem VDI-Wärmeatlas lassen sich daraus die Wärmeübergangskoeffizienten α für die zylindrische Oberfläche der Finiten Volumen der Luft berechnen.
6. Nun stehen alle benötigten Werte zur Verfügung, um die in Abbildung 7-6 gezeigten Energieströme zu berechnen.
7. Die Energieströme wirken nur für die definierte Zeitschrittlänge, daher werden aus den Energieströmen absolute Energien. Es werden nun für alle Finiten Volumen Energiebilanzen aufgestellt. Eine überschüssige Energie aus den Energieflüssen führt zur Aufwärmung des jeweiligen Finiten Volumens. Über die Masse und die spezifischen Wärmekapazitäten der Finiten Volumen können die neuen Temperaturen am Ende des Zeitschrittes berechnet werden.
8. In diesem Schritt des Flussdiagramms muss geklärt werden, ob die neuen Temperaturen ein physikalisch sinnvolles Ergebnis darstellen. Hierfür reicht vorerst eine Sichtkontrolle der Darstellung der Temperaturen in einem Diagramm.
9. Im neunten Schritt wird entschieden, ob der Aufwärmprozess mit diesem Zeitschritt beendet ist (d.h. Temperaturen an allen Stellen des Rohres größer 700 °C), oder ob der Aufwärmprozess fortgesetzt werden muss. Während des Aufwärmprozesses ist Zweiteres der Fall, und die neu errechneten Temperaturen werden als Ausgangstemperaturen für den nächsten Zeitschritt eingesetzt.

7.2.2.3 Herausforderung Zeitschrittweite

Wie bereits angesprochen, wird in Microsoft Excel ein explizites Zeitschrittverfahren eingesetzt, was bedeutet, dass die Temperaturen zu einem neuen Zeitpunkt nur von den Temperaturen des vorangehenden Zeitpunktes abhängen. Der Vorteil dieses Verfahrens besteht darin, dass kein lineares Gleichungssystem gelöst werden muss, um die neuen Temperaturen zu berechnen. Die Implementierung des Verfahrens ist daher ohne Visual-Basic-Programmierung möglich.

Ein wesentlicher Nachteil besteht darin, dass die Zeitschrittweite sehr eingeschränkt ist. Dies ist dadurch bedingt, dass die Courant-Friedrichs-Levy Zahl

$$c = \frac{u \cdot \Delta t}{\Delta x} \quad (7-2)$$

nicht größer eins werden darf, da sonst die heiße Luft (und die darin enthaltene Wärmeenergie) in einem Zeitschritt von der Strömung theoretisch durch mehr als eine Zelle transportiert wird (in der Rechnung nicht abbildbar), wodurch physikalisch nicht sinnvolle Ergebnisse entstehen. Die eingeschränkte Zeitschrittweite, die sich beim vorliegenden Fall im Zehntausendstel-Sekunden-Bereich bewegt, führt zu langen Rechenzeiten, wenn die gesamte Aufwärmung des Festkörpers über etwa eineinhalb Stunden durchgerechnet werden soll.

Hier kann mit einem „Beschleunigungsfaktor“ Abhilfe geschaffen werden. Die Entwicklung des Temperaturfeldes im Festkörper wird unter anderem von der Fourier-Zahl bestimmt. Dabei handelt es sich um eine dimensionslose Kenngröße, die das Verhältnis der geleiteten zur gespeicherten Wärme angibt:

$$Fo = \frac{\lambda t}{c_p \rho l^2} \quad (7-3)$$

Man definiert nun einen Beschleunigungsfaktor f , der die reale Zeit t in Relation mit der Simulationszeit t^* setzt:

$$t = f \cdot t^* \quad (7-4)$$

Gleichzeitig steht der Beschleunigungsfaktor auch für das Verhältnis der realen spezifischen Wärmekapazität c_p des Festkörpers und der spezifischen Wärmekapazität c_p^* in der Simulation:

$$f = \frac{c_p}{c_p^*} \quad (7-5)$$

Nun kann gezeigt werden, dass sich die reale Fourier-Zahl Fo nicht von der Fourier-Zahl Fo^* der Simulation unterscheidet:

$$Fo^* = \frac{\lambda t^*}{c_p^* \rho l^2} = \frac{\lambda}{c_p^* \rho l^2} \cdot \frac{t}{f} = \frac{\lambda}{c_p^* \rho l^2} \cdot \frac{c_p t}{c_p} = \frac{\lambda t}{c_p \rho l^2} = Fo \quad (7-6)$$

Die Simulation der Aufwärmung des Festkörpers kann also durch Herabsetzen der spezifischen Wärmekapazität um einen gewissen Faktor beschleunigt werden. Die Zeit der Simulation muss allerdings für die Auswertung um ebendiesen Faktor uminterpretiert werden.

7.2.2.4 Wärmeübergangskoeffizienten an Rohrwand und Stirnfläche

Ein weiterer wichtiger Punkt ist die Berechnung des Wärmeübergangskoeffizienten zwischen Luft und Rohrwand. In der finiten-Volumen-Berechnung in Microsoft Excel wird das Rohr in radialer Richtung nur grob diskretisiert (je ein finites Volumen für Luft und Festkörper). Außerdem wird nur die Energieerhaltungsgleichung gelöst. Dies bedeutet, dass an der Rohrwand für die Luft weder Geschwindigkeits- noch Temperaturschicht aufgelöst werden können, die einen direkten Aufschluss über den lokalen Wärmeübergangskoeffizienten gäben.

Es wird daher auf den VDI Wärmeatlas zurückgegriffen. Darin ist die Berechnung der mittleren Nusselt-Zahl für Wärmeübertragung für Rohre bei konstanter Wandtemperatur und hydrodynamisch ausgebildeter Laminarströmung beschrieben [Gnielinski 2006, S. Ga 1 f.]

$$Nu = \left\{ 3,66^3 + 0,7^3 + \left[1,615 \cdot \left(Re \cdot Pr \cdot \frac{d}{l} \right)^{1/3} - 0,7 \right]^3 \right\}^{1/3} \quad (7-7)$$

Die Nusselt-Zahl ist abhängig von Reynolds- und Prandtl-Zahl, sowie von dem Verhältnis von Durchmesser zu Länge des Rohres. In diesem Verhältnis wird als Länge l die Länge eines finiten

Volumens eingesetzt. Mit der Nusselt-Zahl kann so der mittlere Wärmeübergangskoeffizient für ein Finites Volumen berechnet werden.

Gleichung (7-7) gilt für eine hydrodynamisch ausgebildete Strömung. Die Länge des hydrodynamischen Anlaufes kann etwa mit dem zehnfachen Durchmesser abgeschätzt werden, was bedeutet, dass die ersten zwei Finiten Volumen davon betroffen sind (bei einer gewählten Länge von 5 mm pro finitem Volumen). Der Einfluss des hydrodynamischen Anlaufes wird jedoch bei dieser Berechnung nicht berücksichtigt.

Für den Wärmeübergangskoeffizient an der vorderen Stirnfläche des Rohres (siehe Abbildung 7-7) wird $\alpha_{\text{Stirnfläche}} = 15 \text{ W/m}^2\text{K}$ angenommen. Der Wärmeübergang an der Stirnfläche des Rohres ist stark abhängig von der Anströmsituation. Auf den Stack übertragen heißt das, es kann große Unterschiede je nach Position auf der globalen Stack-Stirnfläche geben und es bedarf diesbezüglich einer genaueren Untersuchung, welche nicht Teil dieser Diplomarbeit ist.

7.2.2.5 Darstellung der Ergebnisse in Microsoft Excel

Abbildung 7-9 zeigt die Bildschirmansicht der numerischen Berechnung in Microsoft Excel. Die Anzahl der benötigten Zeilen entspricht der Anzahl an Finiten Volumen in axialer Richtung (hier beispielsweise 26 Stück). Die Spalten gliedern sich wie folgt auf:

- Die zwei rot hinterlegten Spalten enthalten die „alten“ Temperaturen von Luft und Wand eines Zeitschrittes.
- Die weiß hinterlegten Spalten dienen zur Berechnung der Stoffwerte, der dimensionslosen Kennzahlen und der Wärmeübergangskoeffizienten.
- Die grün hinterlegten Spalten dienen zur Berechnung der Energieströme über die Grenzen der Finiten Volumen.
- In den blau hinterlegten Spalten werden schließlich die Energieströme für alle Finiten Volumen bilanziert und daraus die neuen Temperaturen eines Zeitschrittes berechnet.

Die Schleife zur wiederholten Berechnung neuer Zeitschritte wird so realisiert, dass die blauen Spalten mit den „neuen“ Temperaturen kopiert und als Ausgangswerte für den nächsten Zeitschritt in die roten Spalten der „alten“ Temperaturen eingesetzt werden. Diese Tätigkeit wird automatisiert von einem Makro durchgeführt.

Kapitel 7: Berechnung des Temperaturfeldes

Aufwärmprozess einer Brennstoffzelle

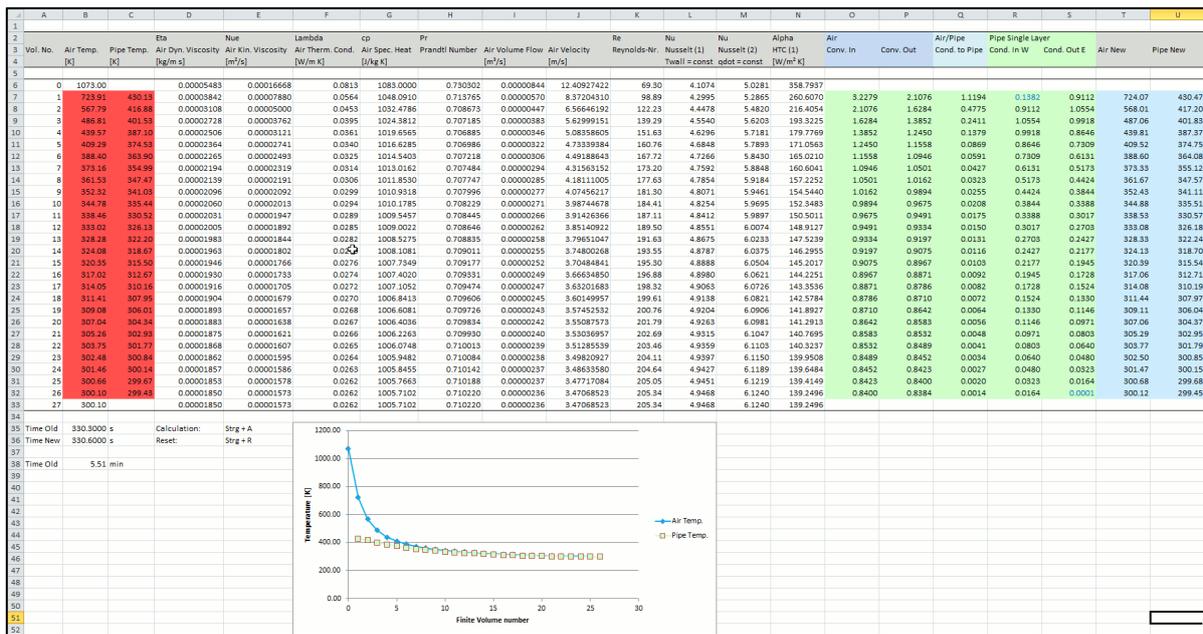


Abbildung 7-9: Bildschirmansicht der numerischen Berechnung in Microsoft Excel

Die aktuellen Temperaturen von Finiten Volumen der Luft und des Festkörpers werden in einem Diagramm gezeigt (Abbildung 7-10). Bei jeder Berechnung eines neuen Zeitschrittes ändert sich das Diagramm mit, d.h. bei schnell aufeinanderfolgenden Berechnungen neuer Zeitschritte kann die Änderung der Temperaturkurven ähnlich wie in einem Video mitverfolgt werden.

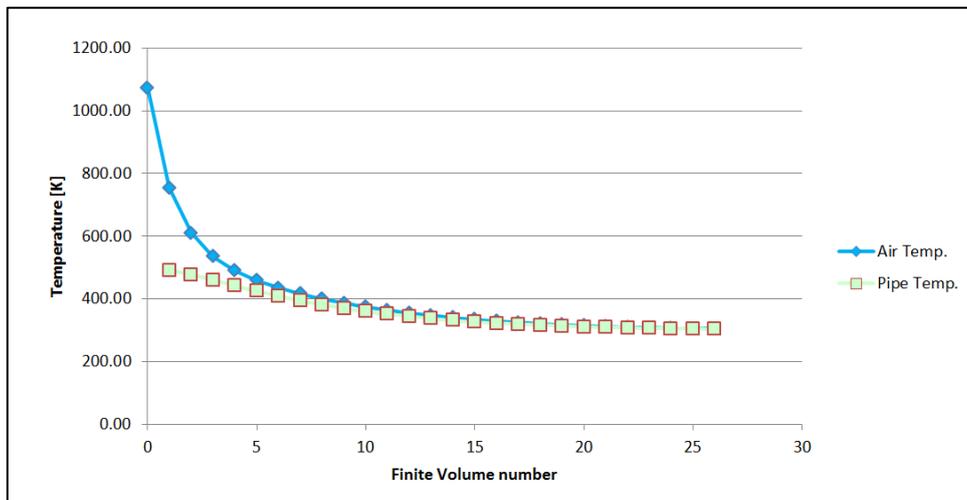


Abbildung 7-10: Darstellung der Luft- und Wandtemperaturen in einem Diagramm

Insgesamt lassen sich für die Berechnung in Microsoft Excel einige positive Aspekte aufzählen:

- Übersichtlichkeit: Alle berechneten Werte eines Zeitschrittes sind am Schirm sichtbar, Fehler können leicht aufgeklärt werden.
- Einfacher Aufbau, d.h. kein Programmieraufwand.

Es gibt jedoch auch Nachteile, die da lauten:

- Die transiente Berechnung läuft verhältnismäßig langsam ab und dauert daher lange (insbesondere bei feinem Gitter und dementsprechend kleinen Zeitschritten).
- Die zeitliche Geschichte wird nicht aufgezeichnet, d.h. es wird nur der aktuelle Zeitschritt angezeigt.
- Soll das Gitter in axialer Richtung verfeinert werden, so muss die Excel-Tabelle verhältnismäßig aufwändig angepasst werden (Erhöhung der Zeilenzahl).
- Generell bedarf es bei „Experimenten“ oft einer aufwendigen Anpassung der Excel-Tabelle.

7.2.3 Überführung der Excel-Berechnung in ein Python-Script

Die logische Antwort auf oben genannte Nachteile ist die Überführung des Excel-Algorithmus in die Skriptsprache Python. Damit lassen sich folgende Eigenschaften elegant realisieren:

- Schnelle Berechnung von vielen Zeitschritten, auch bei feinem Gitter.
- Die Temperaturen aller Zeitschritte können in einem Array gespeichert und anschließend ausgegeben bzw. in eine eigene Datei geschrieben werden.
- Die Temperaturen können für jeden Zeitschritt automatisch geplottet und als Bild abgespeichert werden. Diese Bilder lassen sich in ein Video umwandeln.
- Das Gitter kann in axialer Richtung sehr einfach verfeinert werden.
- Generell bietet das Skript eine große Variabilität und kann an spezielle Wünsche angepasst werden.

An dieser Stelle soll nochmals auf das bereits angesprochene Schlüsselproblem der Koppelung von Luft- und Wandtemperaturen eingegangen werden. Man betrachte zum Beispiel anhand Abbildung 7-11 den Temperaturplot für das kreisrunde Rohr nach 320 Sekunden, d.h. zu Beginn der zweiten Aufwärmphase; 800 °C Einlasstemperatur:

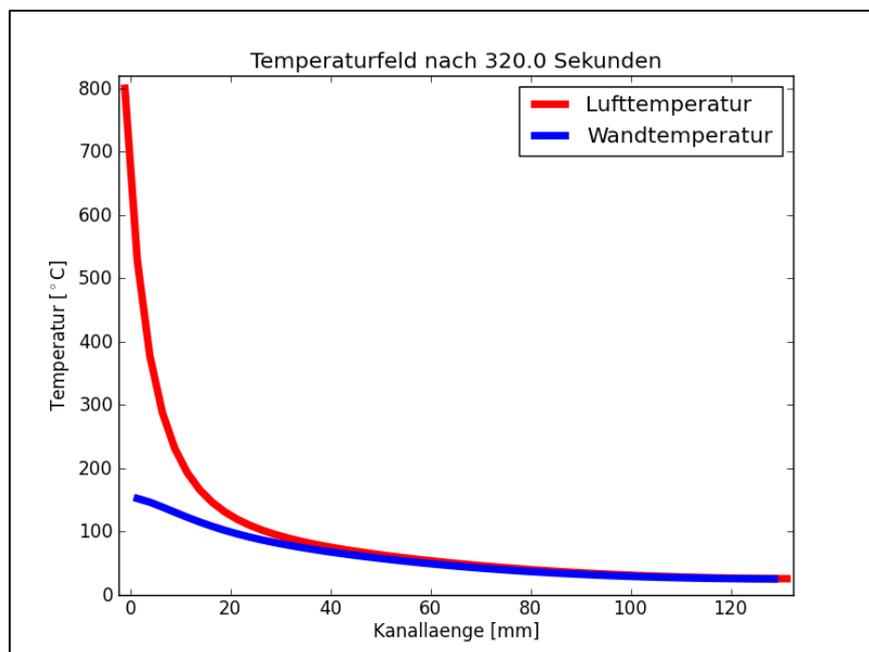


Abbildung 7-11: Luft- und Wandtemperaturen des kreisrunden Rohres nach 320 Sekunden

Man erkennt, dass die Wand noch verhältnismäßig niedrige Temperaturen im Vergleich zur Einlasstemperatur aufweist. Die Luft kühlt bald nach dem Eintritt in den Kanal quasi auf Wandtemperatur ab. Die Temperaturdifferenz ist deshalb vor allem im Bereich des Kanaleintrittes groß, die Wand wärmt sich somit dort schneller auf.

Anders sieht die Situation nach 2300 Sekunden (ca. 38 Minuten) in Abbildung 7-12 aus. Die Wand hat sich bereits stark erwärmt. Dementsprechend hat sich auch die Kurve der Lufttemperaturen verändert. Da die Temperaturdifferenz zwischen Einlasstemperatur der Luft und der Wandtemperatur stark abgenommen hat, verlangsamt sich auch der Aufwärmprozess.

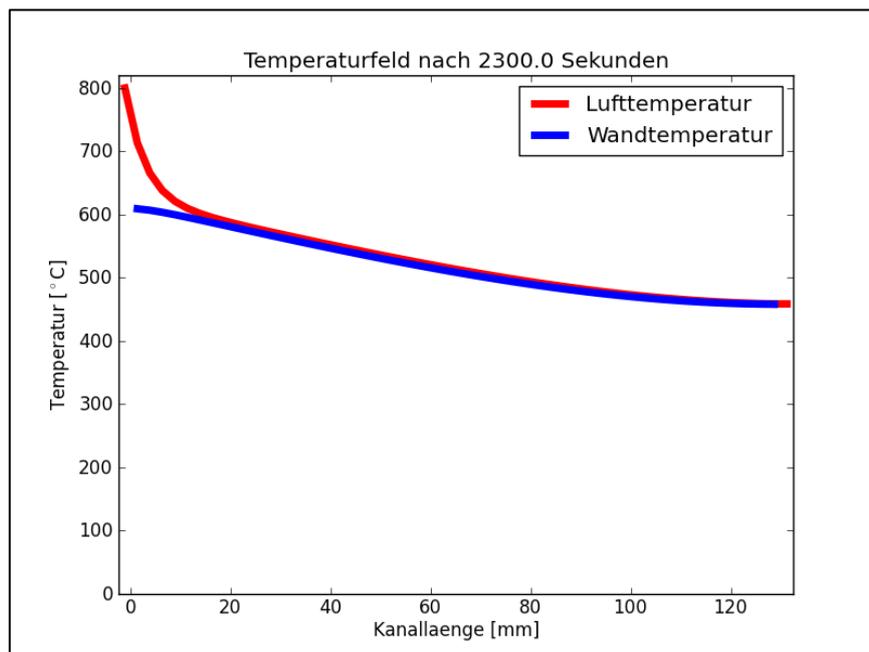


Abbildung 7-12: Luft- und Wandtemperaturen des kreisrunden Rohres nach 2300 Sekunden

Es soll zum Ausdruck gebracht werden, dass sowohl die Lufttemperaturen einen großen Einfluss auf die Wandtemperaturen haben als auch umgekehrt. Es ist daher nicht zielführend, den transienten Aufwärmvorgang über einen längeren Zeitraum ohne Koppelung zwischen Luft und Wand zu berechnen.

An dieser Stelle ist auch ein weiteres Diagramm interessant (Abbildung 7-13), das die zeitliche Entwicklung der Temperaturen in der Rohrwand am Einlass und am Auslass zeigt:

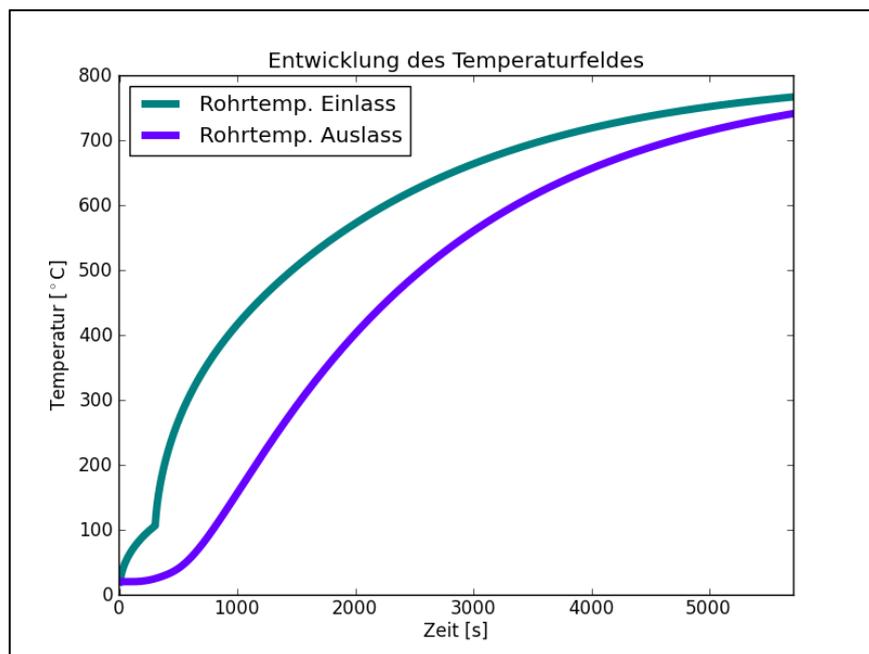


Abbildung 7-13: Zeitliche Entwicklung der Temperaturen der Rohrwand an Einlass und Auslass

Gut zu erkennen ist, dass in einem Zeitbereich von etwa 600 bis 2000 Sekunden nach Beginn des Aufwärmprozesses eine große Temperaturdifferenz von bis zu 250 °C zwischen Einlass und Auslass des Rohres vorherrscht. Dieser steile Temperaturgradient in der Rohrwand ist es sicherlich wert, hinsichtlich der thermomechanischen Spannungen näher untersucht zu werden.

Weiters ist im Diagramm zu erkennen, dass der Temperaturverlauf des Einlasses einen Knick aufweist, der durch die zwei unterschiedlichen Aufwärmphasen verursacht wird. Am Auslass kann man hingegen nichts vom Übergang von der ersten zur zweiten Phase bemerken.

7.2.4 Sensitivitätsanalysen am kreisrunden Rohr mit Python

In diesem Kapitel wird untersucht, welche Einflüsse getroffene Annahmen und Vereinfachungen auf das Verhalten des Rohres während des transienten Aufwärmprozesses haben.

7.2.4.1 Wärmeübergangskoeffizient an der Stirnfläche am Kanaleintritt

Für den Wärmeübergangskoeffizient an der Stirnfläche des Rohres (siehe Abbildung 7-7) wird für die Berechnung $\alpha_{Stirnfläche} = 15 \text{ W/m}^2\text{K}$ angenommen. In einer Sensitivitätsanalyse wird dieselbe Berechnung jeweils auch mit $\alpha_{Stirnfläche} = 0$ (kein Wärmeeintrag an der Stirnfläche) und $\alpha_{Stirnfläche} = 30$ durchgeführt.

Zur Betrachtung des Resultates wird als Beispiel der Zeitpunkt von 550 Sekunden nach Beginn des Aufwärmprozesses herangezogen. Zu diesem Zeitpunkt herrscht in der Wand eine große Temperaturdifferenz von etwa 250 °C zwischen Kanaleintritt und Kanalausritt. Dieser „globale“ Temperaturgradient wird durch die beschriebene Variation von α um etwa $\pm 5 \%$ verändert. In folgenden Abbildung 7-14 und Abbildung 7-15 sind die leicht unterschiedlichen Wandtemperaturen am Einlass zu erkennen.

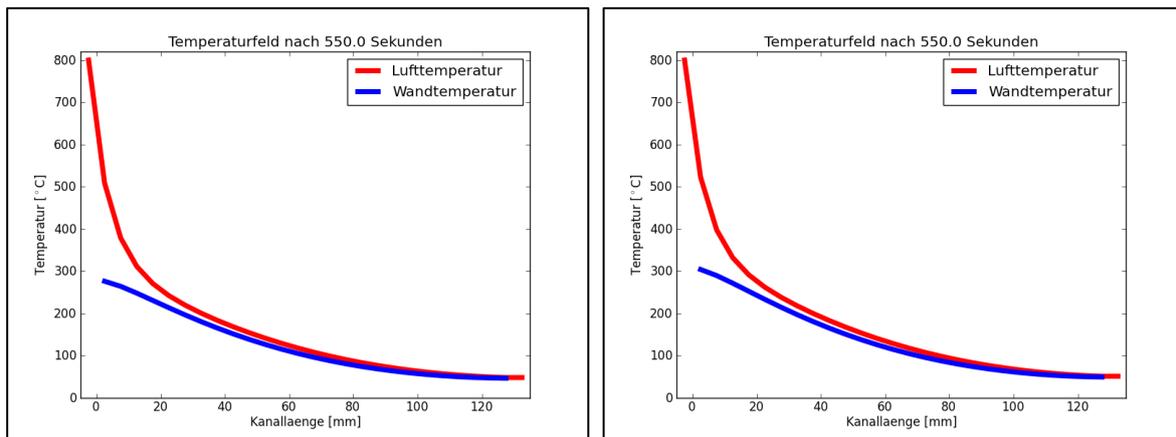


Abbildung 7-14 (links): Wand- und Lufttemperaturen nach 550 Sekunden bei $\alpha_{\text{Stirnfläche}} = 0 \text{ W/m}^2\text{K}$
Abbildung 7-15 (rechts): Wand- und Lufttemperaturen nach 550 Sekunden bei $\alpha_{\text{Stirnfläche}} = 30 \text{ W/m}^2\text{K}$

Die Dauer des gesamten Aufwärmprozesses wird bei $\alpha_{\text{Stirnfläche}} = 0$ (kein Wärmeeintrag an der Stirnfläche) um vier Prozent verlängert, bzw. bei $\alpha_{\text{Stirnfläche}} = 30$ um 3,5 Prozent verkürzt. Der Einfluss des Wärmeübergangskoeffizienten an der Stirnfläche kann also insgesamt als gering eingestuft werden. Wie bereits in Kapitel 7.2.2.4 beschrieben, bedarf es allerdings noch einer genauen Untersuchung der Anströmsituation des Stacks, um einen quantitativ richtigen Wärmeübergangskoeffizienten für die Stirnfläche zu bestimmen.

7.2.4.2 Wärmeübergangskoeffizienten an der Rohrrinnenwand

Wie schon in Kapitel 7.2.2.2 beschrieben, berechnet das Python-Skript für jedes Finite Volumen der Luft und für jeden Zeitschritt einen eigenen Wärmeübergangskoeffizienten. Eine Sensitivitätsanalyse soll klären, wie sich ein zeitlich und örtlich gemittelter Wärmeübergangskoeffizient (d.h. ein einziger, gemittelter Wärmeübergangskoeffizient für alle Finiten Volumen und alle Zeitschritte) auf die instationäre Berechnung auswirkt.

Der Wärmeübergangskoeffizient ist abhängig von den örtlichen Lufttemperaturen. Diese beeinflussen nämlich insbesondere die Geschwindigkeit, mit der sich die Luft durch den Kanal bewegt. Da die örtlichen Lufttemperaturen über die Kanallänge abnehmen (die Wärmeenergie wird an das Rohr abgegeben), nehmen auch die örtlichen Wärmeübergangskoeffizienten über die Kanallänge ab.

In einem ersten Schritt sollen die Luft- und Wandtemperaturen 550 Sekunden nach Beginn des Aufwärmprozesses verglichen werden. Die folgende, linke Abbildung zeigt jenes Temperaturfeld, das mit individuellen Wärmeübergangskoeffizienten für jedes Finite Volumen berechnet wurde. Die rechte Abbildung zeigt das Temperaturfeld, bei dem ein räumlich und zeitlich gemittelter Wärmeübergangskoeffizient von $\alpha = 200 \text{ W/m}^2\text{K}$ zum Einsatz kam.

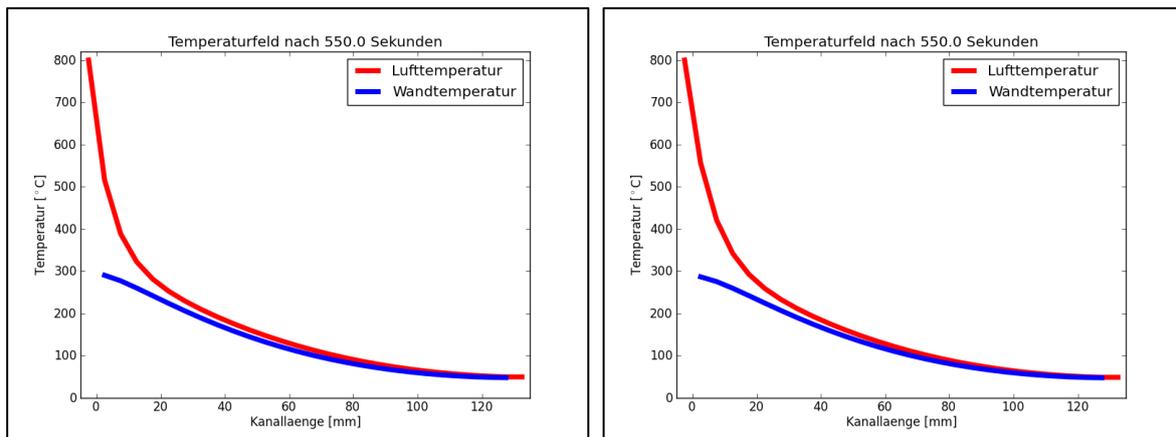


Abbildung 7-16 (links): Wand- und Lufttemperaturen nach 550 Sek. bei individuellen Wärmeübergangskoeffizienten je FV
 Abbildung 7-17 (rechts): Wand- und Lufttemperaturen nach 550 Sekunden bei $\alpha = 200 \text{ W/m}^2\text{K} = \text{const.}$

Aus Abbildung 7-16 und Abbildung 7-17 wird ersichtlich, dass die Berechnung mit gemitteltem Wärmeübergangskoeffizienten bis zum gezeigten Zeitpunkt von 550 Sekunden sehr gut mit der Berechnung mit individuellen Wärmeübergangskoeffizienten je Finitem Volumen übereinstimmt.

Analog zu obigen Abbildungen, werden auch die Temperaturfelder für den Zeitpunkt von 3000 Sekunden (50 Minuten) nach Beginn des Aufwärmprozesses gezeigt (Abbildung 7-18 und Abbildung 7-19):

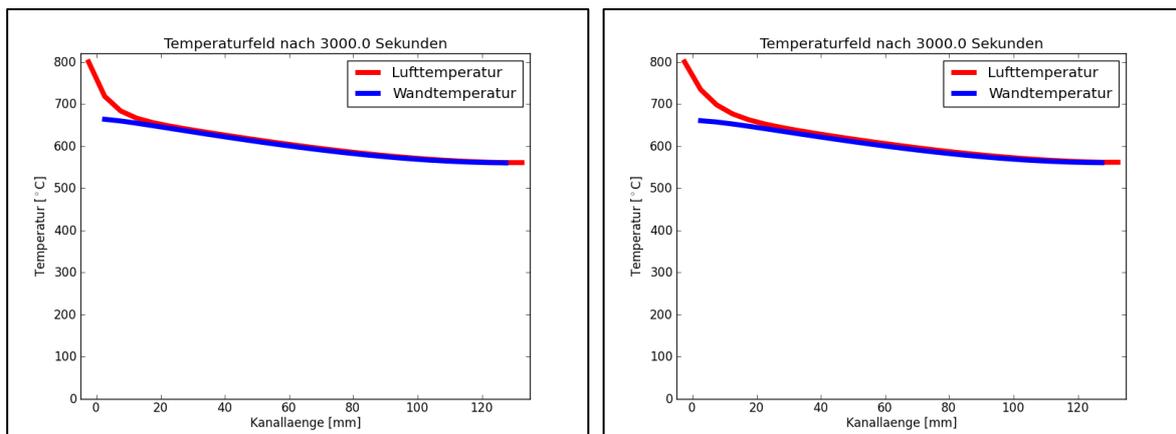


Abbildung 7-18 (links): Wand- und Lufttemperaturen nach 3000 Sek. bei individuellen Wärmeübergangskoeffizienten je KV
 Abbildung 7-19 (rechts): Wand- und Lufttemperaturen nach 3000 Sekunden bei $\alpha = 200 \text{ W/m}^2\text{K} = \text{const.}$

Aus den Diagrammen wird ersichtlich, dass die Berechnung mit dem gemittelten Wärmeübergangskoeffizienten von $\alpha = 200$ der Berechnung mit individuellen Wärmeübergangskoeffizienten je Finitem Volumen auch in einem fortgeschrittenen Stadium des Aufwärmprozesses sehr gut entspricht. Man kann bei genauerem Hinsehen erkennen, dass der gemittelte Wärmeübergangskoeffizient zu diesem Zeitpunkt etwas zu niedrig angesetzt ist, was sich jedoch nur auf den Temperaturgradienten der Luft auswirkt (im rechten Diagramm etwas flacher). Die Wandtemperaturen sind davon quasi unbeeinträchtigt, weil die Wärmeleitung im Festkörper den leicht abweichenden Wärmeeintrag der Luft „verschmiert“.

Als letzter Punkt soll hier geklärt werden, inwiefern sich das Temperaturfeld für eine Berechnung mit $\alpha = 100 \text{ W/m}^2\text{K} = \text{const.}$ beziehungsweise mit $\alpha = 300 = \text{const.}$ ändert. Der ursprüngliche, räumlich und zeitlich gemittelte Wärmeübergangskoeffizient von $\alpha = 200 = \text{const.}$ wird also um je

100 Watt je Quadratmeter und Kelvin nach oben bzw. unten variiert. Analog zu Abbildung 7-16 und Abbildung 7-17 wird nun nochmals der Zeitpunkt von 550 Sekunden nach Beginn des Aufwärmprozesses betrachtet. Die folgenden Diagramme (Abbildung 7-20 und Abbildung 7-21) zeigen die Temperaturfelder für die variierten Wärmeübergangskoeffizienten:

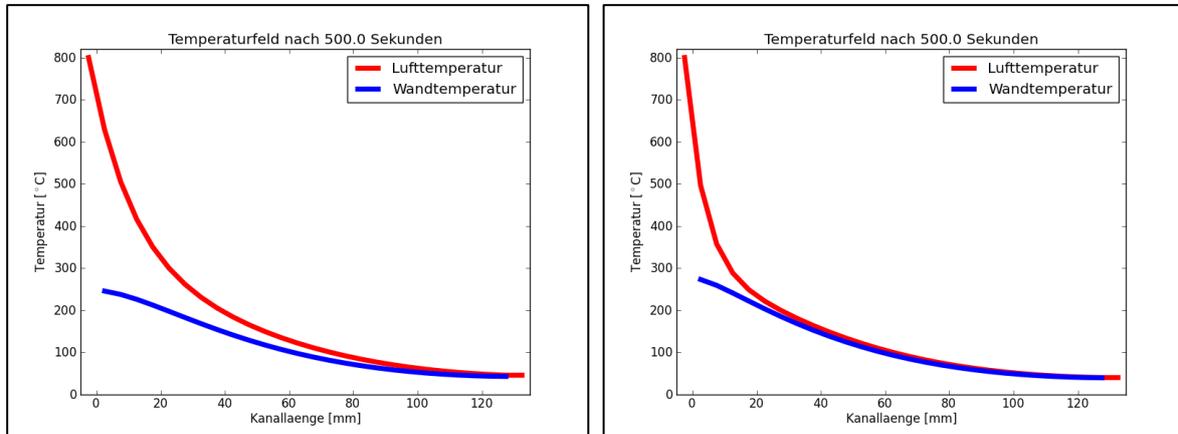


Abbildung 7-20 (links): Wand- und Lufttemperaturen nach 550 Sekunden bei $\alpha = 100 \text{ W/m}^2\text{K} = \text{const.}$
Abbildung 7-21 (rechts): Wand- und Lufttemperaturen nach 550 Sekunden bei $\alpha = 300 \text{ W/m}^2\text{K} = \text{const.}$

In oben gezeigten Diagrammen ist der Einfluss der veränderten Wärmeübergangskoeffizienten auf die Lufttemperaturkurve gut zu erkennen. Ein niedriger Wärmeübergangskoeffizient (links) sorgt für einen flacheren Temperaturgradienten, da es länger braucht, bis die von der Strömung transportierte Wärmeenergie in das Rohr eingetragen wird. Umgekehrt wird der Temperaturgradient bei einem hohen Wärmeübergangskoeffizienten (rechts) steiler, die Wärmeenergie geht also schneller auf das Rohr über.

Weiters ist zu erkennen, dass sich die Kurven der Wandtemperatur, trotz stark variiertem Wärmeübergangskoeffizienten, kaum unterscheiden. Das eigentliche Problem der Aufwärmung des Festkörpers wird also immer noch gut abgebildet. Der Grund hierfür ist wiederum, dass die Wärmeleitung im Festkörper den lokal unterschiedlichen Wärmeeintrag durch die Luft „verschmiert“.

Interessant ist an dieser Stelle auch die Untersuchung der Dauer des gesamten Aufwärmprozesses (also jene Zeitdauer, bis in allen Finiten Volumen des Rohres eine Temperatur von mindestens 700 °C erreicht ist). Folgende Tabelle zeigt die Zeitdauer in Abhängigkeit des Wärmeübergangskoeffizienten:

| Wärmeübergangskoeffizient [W/m ² K] | Dauer des Aufwärmprozesses [s] |
|---------------------------------------------------|-----------------------------------|
| Individuelle Berechnung je FV | 4698 |
| $\alpha = 100 = const.$ | 4744 |
| $\alpha = 200 = const.$ | 4702 |
| $\alpha = 300 = const.$ | 4692 |

Tabelle 7-1: Dauer des Aufwärmprozesses in Abhängigkeit der Wärmeübergangskoeffizienten im Rohr

Die Abweichung der Zeitdauer des Aufwärmprozesses bei einer Berechnung mit konstantem Wärmeübergangskoeffizienten (100, 200 oder 300 W/m²K) von der Zeitdauer bei der Berechnung mit variablem Wärmeübergangskoeffizienten liegt in allen drei Fällen unter einem Prozent. Dies kann dadurch begründet werden, dass die Luft am Kanalausstritt trotz Variation des Wärmeübergangskoeffizienten auf die Temperatur der Rohrwand abgekühlt ist. Erst ein sehr kleiner mittlerer Wärmeübergangskoeffizient würde bedingen, dass am Ende des Kanals noch eine nicht zu vernachlässigende Temperaturdifferenz zwischen Luft und Rohrwand vorherrscht und somit Wärmeenergie ungenutzt „verloren“ geht (was sich dann auf die Dauer des Aufwärmprozesses auswirkt).

7.2.4.3 Beschleunigungsfaktor zur Reduktion der Simulationszeit

Eine Sensitivitätsanalyse soll klären, welchen Einfluss die Variation des in Kapitel 7.2.2.3 beschriebenen Beschleunigungsfaktors auf das Berechnungsergebnis nimmt. Prinzipiell wirkt der Beschleunigungsfaktor f im vorliegenden Fall so, als ob die Luft in einem Zeitschritt der Simulation die f -fache Energie an den Festkörper abgibt, im Vergleich zu jener Energie, die in Realität während dieses Zeitschrittes abgegeben würde.

Ein großer Beschleunigungsfaktor steht also quasi für einen großen realen Zeitschritt. Ist dieser Zeitschritt jedoch so groß, dass sich inzwischen die Lufttemperaturen wesentlich ändern, so ist der Energieeintrag in die Wand – und damit das Berechnungsergebnis – nicht mehr korrekt.

Für das einfache Beispiel „Rohr“ hat sich herausgestellt, dass sich das Berechnungsergebnis bis zu einem Beschleunigungsfaktor $f = 10^3$ nur vernachlässigbar ändert. Bei einem Beschleunigungsfaktor von $f = 10^4$ weicht das Berechnungsergebnis bereits leicht von den Resultaten für kleinere f ab. Es wird daher für die Berechnungen in Python (und in weiterer Folge in Abaqus) ein Beschleunigungsfaktor von $f = 10^3$ verwendet.

7.2.5 Globale Energiebilanz am kreisrunden Rohr mit Python

Eine Möglichkeit zur Plausibilisierung der Berechnung in Python ist, die Energiebilanz für das System „Rohr“ aufzustellen. Hierfür wird der erste Hauptsatz der Thermodynamik herangezogen:

$$\frac{dU}{dt} = \sum_i \dot{Q}_i + \sum_e \dot{m}_e h_e - \sum_a \dot{m}_a h_a \quad (7-8)$$

Im vorliegenden Fall des kreisrunden Rohres werden für jeden Zeitschritt die über Massen- und Wärmeströme in das System eintretende Energie sowie die aus dem System austretende Energie berechnet. Werden diese Energien für alle Zeitschritte aufsummiert, so erhält man die gesamten, während des Aufwärmprozesses ein- bzw. austretenden Energien. Die eintretenden Energien sind:

- Luft-Massenstrom über den Kanaleintritt
- Konvektiver Energietransport über die Stirnfläche des Rohres

Die austretende Energie ist:

- Luft-Massenstrom über den Kanalaustritt

Berechnet man die Differenz zwischen gesamter ein- und ausgetretener Energie, so erhält man jenen Energiebetrag, der dem Festkörper insgesamt zugeführt wurde. Diese insgesamt zugeführte Energie muss gleich sein der Differenz der im Festkörper zu Beginn und zu Ende des Aufwärmprozesses enthaltenen Energie. Auf diese Weise lässt sich relativ einfach abschätzen, ob die Berechnung einen gravierenden Fehler aufweist.

Beim Ermitteln der Werte für die Energiebilanz des Systems „Rohr“ (für einen Zeitraum von 1000 Sekunden) stellt sich heraus, dass es beim ersten Hauptsatz der Thermodynamik zu einer Differenz zwischen linker und rechter Seite der Gleichung kommt. Die Vermutung liegt nahe, dass der Fehler durch den bereits oben beschriebenen Beschleunigungsfaktor f entsteht. Es wird also untersucht, wie sich der Fehler in der Energiebilanz bei Variation des Beschleunigungsfaktors verhält. Hierbei kann gezeigt werden, dass der Wert des Beschleunigungsfaktors bei dem verwendeten Berechnungsschema quasi linear in den Wert des Fehlers eingeht:

| f | $\frac{dU}{dt}$ | $\sum_i \dot{Q}_i + \sum_e \dot{m}_e h_e - \sum_a \dot{m}_a h_a$ | ΔE |
|----------------------------|-------------------------------------------|------------------------------------------------------------------|---------------|
| Beschleunigungs- faktor | Änderung der Energie im Festkörper [J] | Summe zu- und abge- führter Energien [J] | Differenz [J] |
| 1 | 1901,21 | 1901,23 | 0,02 |
| 10 | 1901,07 | 1901,27 | 0,2 |
| 100 | 1899,68 | 1901,64 | 1,96 |
| 1000 | 1884,95 | 1904,59 | 19,64 |

Tabelle 7-2: Einfluss des Beschleunigungsfaktor auf die Energiebilanz bei einem Berechnungszeitraum von 1000 s

Aus Tabelle 7-2 geht hervor, dass bei einem Beschleunigungsfaktor $f = 1$ (also „normale“ Berechnung) eine quasi fehlerfreie Energiebilanz errechnet werden kann (der Fehler beträgt lediglich 0,001 % der insgesamt zugeführten Energie). Bei einem Beschleunigungsfaktor $f = 10^3$ beträgt der Fehler etwa 1 % der insgesamt zugeführten Energie.

Wird der gesamte Aufwärmprozess der Rohres (etwa 4700 Sekunden) mit einem Beschleunigungsfaktor $f = 10^3$ durchgerechnet, so ergibt sich in der Energiebilanz eine Differenz von etwa 40 Joule, was einer mittleren Temperaturabweichung im Festkörper von 5,1 °C entspricht. Bei der großen Temperaturspanne während des Aufwärmprozesses (20 °C bis > 700 °C) ist dieser verhältnismäßig kleine Fehler akzeptabel, insbesondere da ja der Beschleunigungsfaktor $f = 10^3$ den Vorteil einer wesentlich kürzeren Berechnungszeit aufweist.

7.3 Temperaturfeldberechnung in Abaqus

Unter Berücksichtigung der bisher gewonnenen Erkenntnisse aus den zweidimensionalen numerischen Berechnungen für das kreisrunde Rohr, soll nun ein Modell des Brennstoffzellenstacks in Abaqus aufgebaut werden. Für experimentelle Rechnungen, die schnell laufen und als Vergleich zu den bisherigen Python-Berechnungen dienen, wird jedoch vorerst nochmals das kreisrunde Rohr herangezogen.

7.3.1 Annäherung über das Rohr-Beispiel

Die Software Abaqus/CAE wird normalerweise nicht zur Berechnung von Strömungsproblemen herangezogen. Um die Koppelung zwischen Luft- und Wandtemperaturen mit Abaqus/CAE richtig darstellen zu können, bedarf es daher einiger „Tricks“. Das prinzipielle Vorgehen bei der Modellierung in Abaqus/CAE soll anhand des kreisrunden Rohres beschrieben werden.

Da das Rohr achssymmetrisch ist, ist es in Abaqus möglich, das dreidimensionale Problem als zweidimensionales Problem zu modellieren. Die Vorgangsweise sieht so aus, dass sowohl für den Festkörper als auch für die Luft ein eigenes Teil und somit in weiterer Folge auch ein eigenes Netz erstellt wird, was aus Abbildung 7-22 ersichtlich wird:

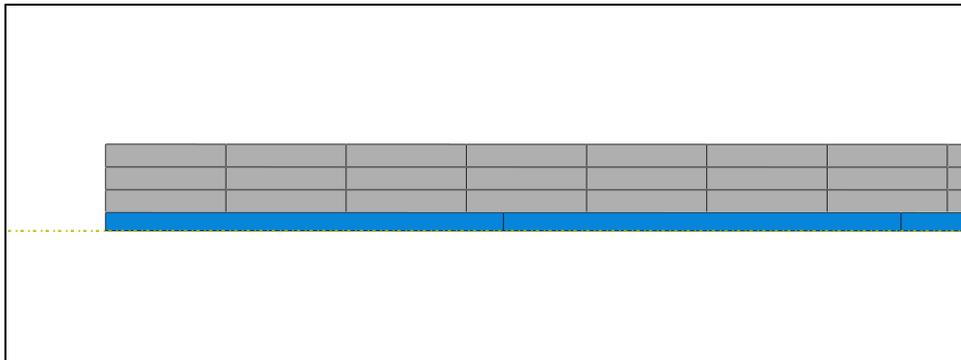


Abbildung 7-22: Netz des Festkörpers (grau) und der Luft (blau)

Das Netz für die Luft ist notwendig, um den konvektiven Energietransport im Kanal zu modellieren. Abaqus erlaubt es, für ein Netz einen Massenstrom zu definieren. Somit wird es möglich, am Kanaleingang eine Eingangstemperatur zu definieren, die dann mit dem Strom in den Kanal transportiert wird.

Die Luft ist in diesem Beispiel bewusst grob vernetzt (13 Elemente für die gesamte Rohrlänge), da dies einen Einfluss auf die maximale Zeitschrittweite hat (siehe Courant-Friedrichs-Levy-Zahl in Kapitel 7.2.2.3). Für das Netz kommen „Heat Transfer“ Elemente Typ DCCAX4D zur Verwendung, die für Konvektion und Diffusion geeignet sind und auch über die Eigenschaft „Dispersion control“ verfügen (was bedeutet, dass der Zeitschritt so gewählt wird, dass die Courant-Friedrichs-Levy-Zahl kleiner eins bleibt).

An der Grenzfläche zwischen Luft und Festkörper wird eine Kontaktbedingung („Interaction“) definiert, in welcher der Wärmeübergangskoeffizient in Abhängigkeit des Spaltes zwischen den beiden Netzen vorgegeben werden kann. Da der Spalt während der gesamten Berechnung konstant null ist (ausgenommen Rundungsfehler, die in einer Toleranz berücksichtigt werden), bleibt der Wärmeübergangskoeffizient ebenfalls konstant bei der vorgegebenen Größe $\alpha = 200 \text{ W/m}^2\text{K}$.

Neben dem Wärmeeintrag an der Rohrwand kommt es, wie schon in Kapitel 7.1 beschrieben, auch zu einem Wärmeeintrag an der Stirnfläche des Rohres. Hierfür wird in Abaqus an der Stirnfläche

eine sogenannte „Film Condition“ aufgebracht. Das bedeutet, dass für die Stirnfläche des Rohres ein Wärmeübergangskoeffizient ($\alpha_{Stirnfläche} = 15 \text{ W/m}^2\text{K}$) und eine Gastemperatur vorgegeben werden. Die Gastemperatur entspricht der Einlasstemperatur der jeweiligen Aufwärmphase.

Das Ergebnis der Berechnung des Aufwärmprozesses des kreisrunden Rohres wird in Abbildung 7-23 für bestimmte Zeitpunkte dargestellt. Im Bild zeigt jeder Streifen einen Teilschnitt (d.h. die obere Hälfte) der achssymmetrischen Rohr-Luft Baugruppe. Es ist jeweils nur der vordere Rohrabschnitt zu sehen (ca. 65 mm von insgesamt 130 mm, Einlass links), da vor allem dort die interessanten Vorgänge auftreten.

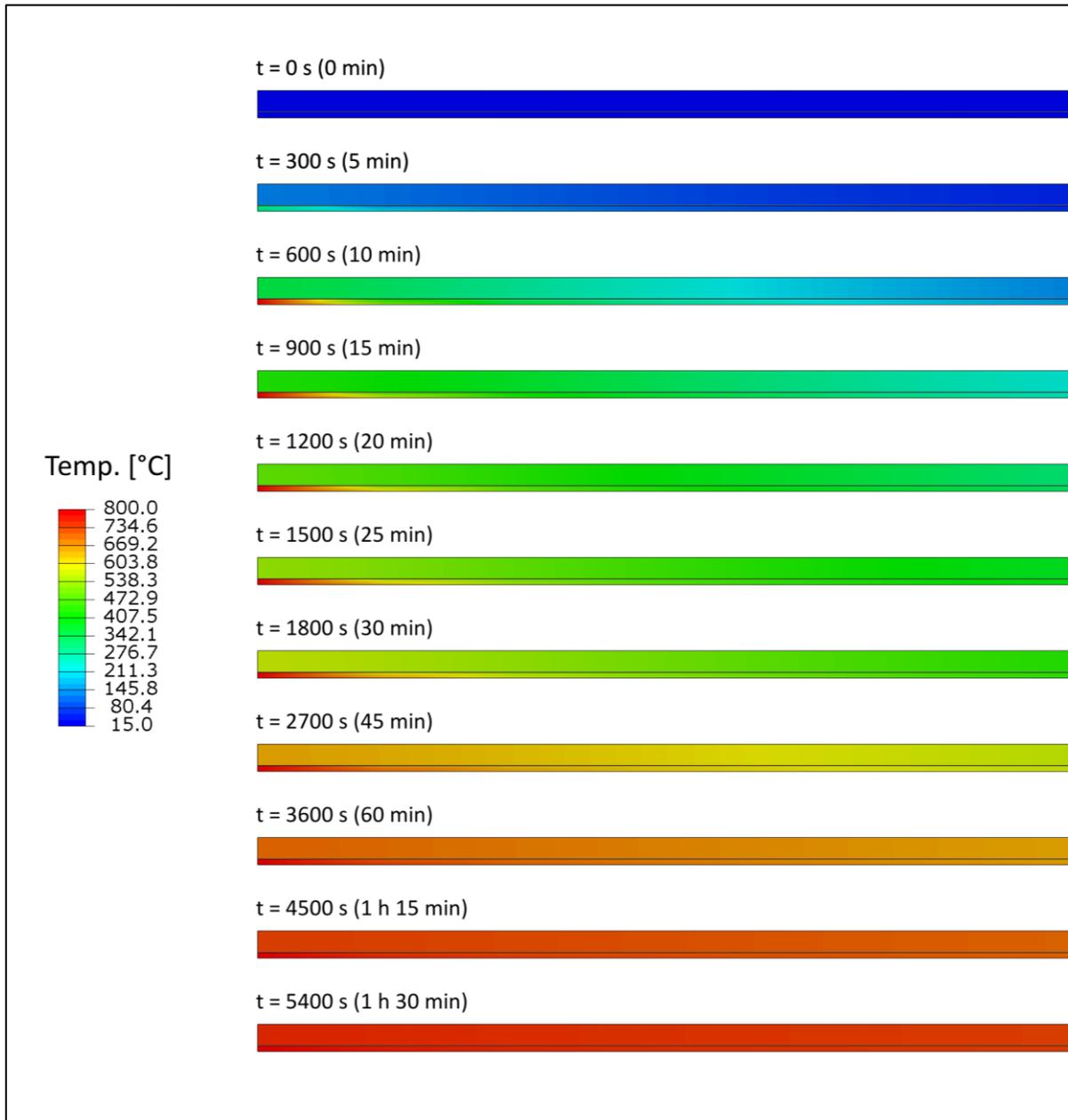


Abbildung 7-23: Luft- und Wandtemperaturen zu bestimmten Zeitpunkten des Aufwärmprozesses

Gut zu erkennen ist, dass beim Zeitpunkt $t = 300$ s noch die erste Aufwärmphase aktiv ist. Die Einlasstemperatur der Luft ist daher mit 300 °C niedriger als bei den folgenden Zeitpunkten, wo schon 800 °C heiße Luft in den Kanal strömt.

Hinsichtlich des kreisrunden Rohres, das sowohl in Python als auch in Abaqus mit derselben Geometrie und denselben Randbedingungen modelliert wurde, soll nun untersucht werden, ob die Berechnungsergebnisse für ausgewählte Zeitpunkte übereinstimmen.

Als erstes Beispiel wird der Zeitpunkt von 550 Sekunden (ca. 9 Minuten) nach Beginn des Aufwärmprozesses herangezogen. Abbildung 7-24 und Abbildung 7-25 zeigen das Ergebnis des Python-Modells (links) und das Ergebnis des Abaqus-Modells (rechts). Wie zu erkennen ist, kann eine gute Übereinstimmung erzielt werden.

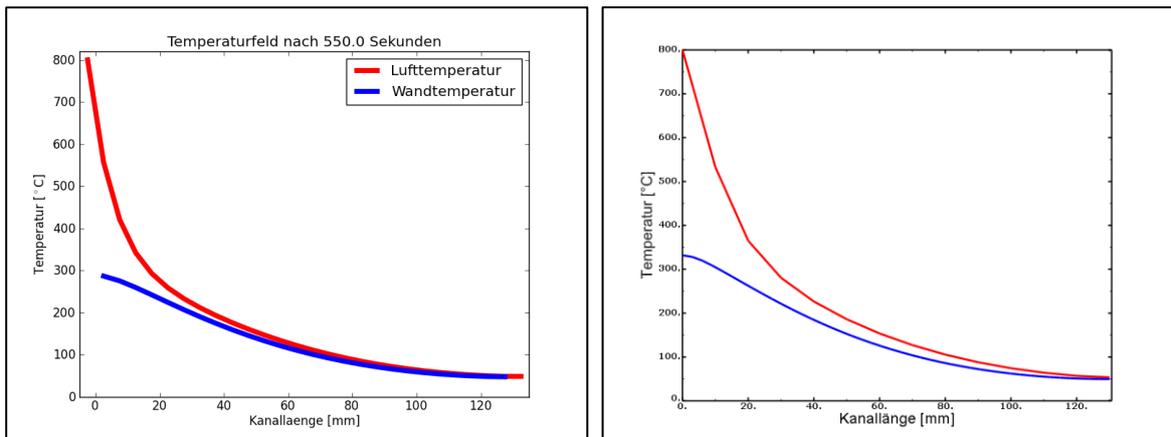


Abbildung 7-24 (links): Wand- und Lufttemperaturen nach 550 Sekunden (Python-Modell)
Abbildung 7-25 (rechts): Wand- und Lufttemperaturen nach 550 Sekunden (Abaqus-Modell)

Als zweites Beispiel wird der Zeitpunkt von 3000 Sekunden (50 Minuten) nach Beginn des Aufwärmprozesses betrachtet (Abbildung 7-26 und Abbildung 7-27). In diesem Fall sind die Berechnungsergebnisse des Python-Modells (links) und des Abaqus-Modells (rechts) nahezu identisch:

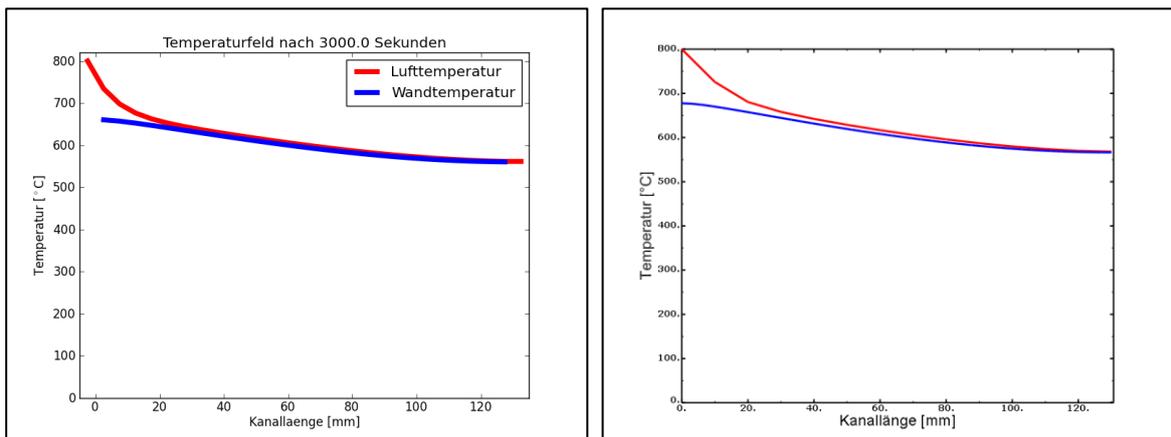


Abbildung 7-26 (links): Wand- und Lufttemperaturen nach 3000 Sekunden (Python-Modell)
Abbildung 7-27 (rechts): Wand- und Lufttemperaturen nach 3000 Sekunden (Abaqus-Modell)

Auch anhand des Beispiels der zeitlichen Entwicklung der Temperaturen im Rohr am Einlass und am Auslass können Abaqus- und Python-Modell verglichen werden (Abbildung 7-28, Abbildung 7-29):

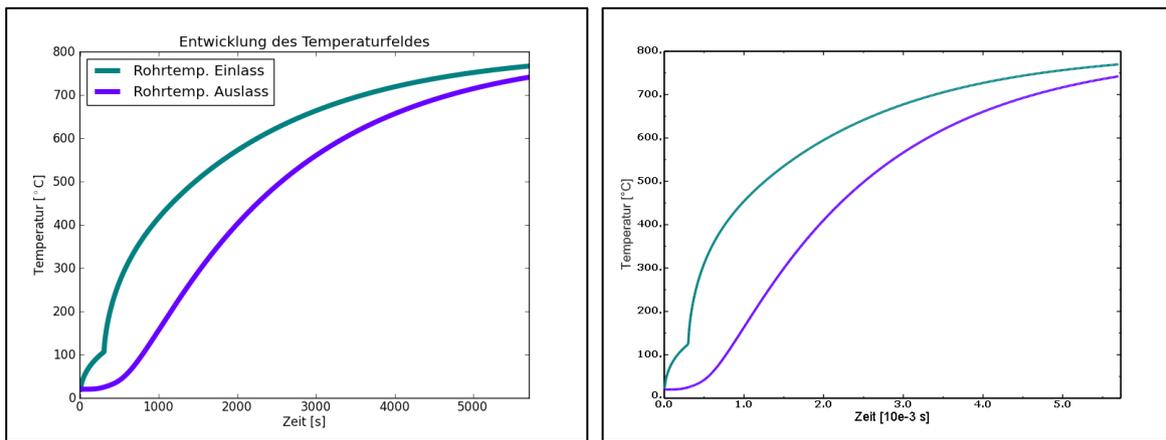


Abbildung 7-28 (links): Zeitliche Entwicklung der Wandtemperaturen an Einlass und Auslass (Python-Modell)
Abbildung 7-29 (rechts): Zeitliche Entwicklung der Wandtemperaturen an Einlass und Auslass (Abaqus-Modell)

7.3.2 Temperaturfeldberechnung eines Stacks mit drei Zellen

Die Modellierung des Stacks mit drei Zellen ist sehr ähnlich der in Kapitel 7.3.1 beschriebenen Modellierung des kreisrunden Rohres. Sowohl der Festkörper als auch die Luft in den Kathodenkanälen werden als eigenes Teil in Abaqus modelliert und vernetzt.

Abbildung 7-30 zeigt das Modell des Stacks mit drei Zellen. Gut zu erkennen sind die Luft in den Kanälen (rot), die Interkonnectoren bzw. Grund- und Deckplatte (blau) sowie die Glasdichtungen (grau). Der Luftmassenstrom beträgt in diesem Modell klarerweise ein Zehntel des Massenstromes des „Voll-Stacks“ mit 30 Zellen.

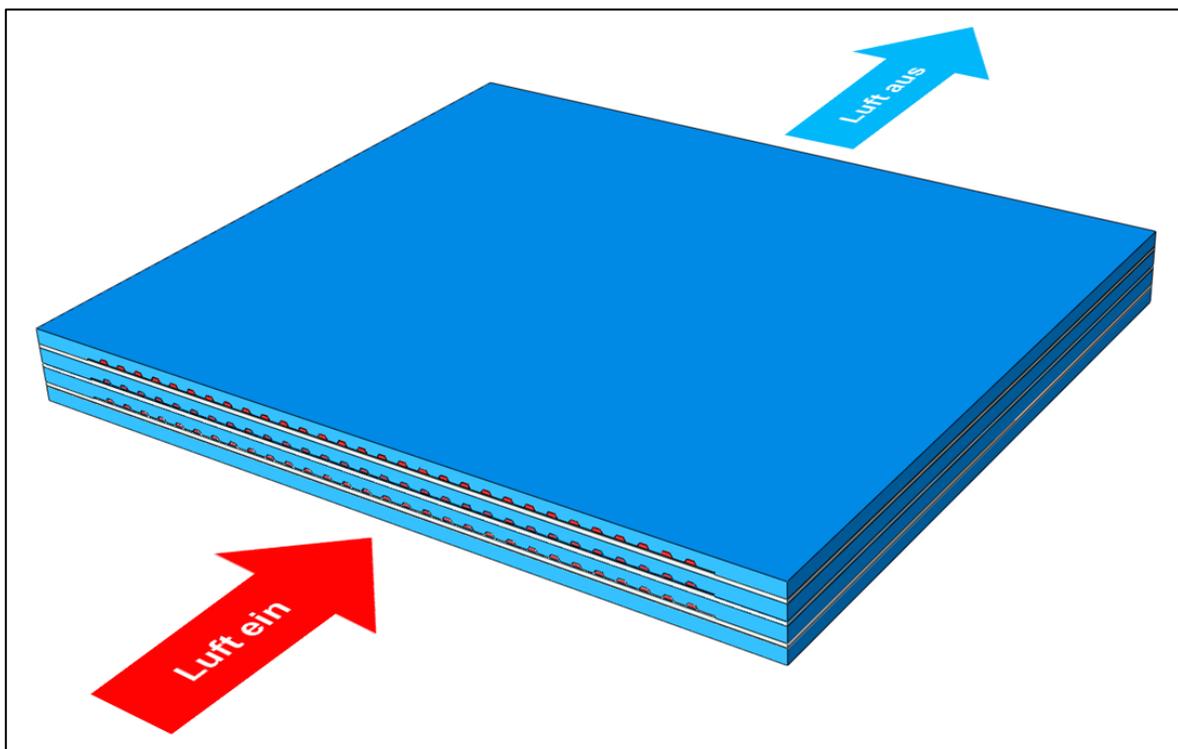


Abbildung 7-30: Modell des Stacks mit drei Zellen

7.3.2.1 Wärmeübergang von der Luft an die Kanalwand

Im Falle des Stacks setzt sich die Kanalwand jeweils aus Interkonnektor und Zelle zusammen, was aus Abbildung 7-31 hervorgeht (Luft rot, Interkonnektor blau, Zelle dunkelgrau):

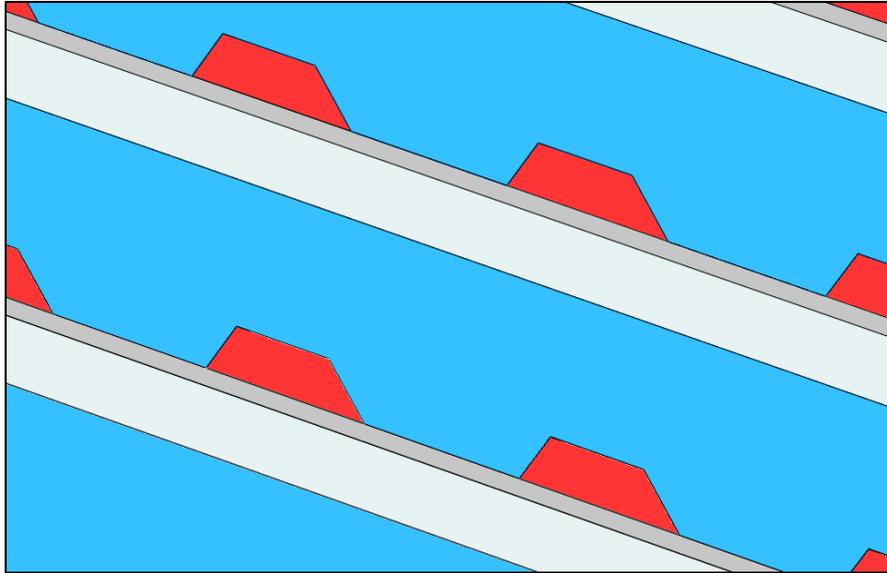


Abbildung 7-31: Zusammensetzung der Kanalwand aus Interkonnektor (blau) und Zelle (dunkelgrau)

Es werden daher für den Wärmeübergang Interaktionen zwischen Luft und Interkonnektor sowie zwischen Luft und Zelle definiert. Als Wärmeübergangskoeffizient kommt bei beiden Interaktionen der räumlich und zeitlich gemittelte Wärmeübergangskoeffizient von $\alpha = 200 \text{ W/m}^2\text{K} = \text{const.}$ zum Einsatz, der von den Berechnungen am kreisrunden Rohr, welches ja den hydraulischen Durchmesser des Trapezquerschnitts der Kathodenkanäle des Stacks besitzt, herrührt.

Auf den letzten zehn Millimetern der Kathodenkanäle (d.h. an der Auslassseite, nicht abgebildet) kommt es aufgrund der Bauteilgeometrien von Zelle und Interkonnektorplatte zu einer Veränderung des Kanalquerschnittes. Der Wärmeübergangskoeffizient ist für diesen Kanalabschnitt daher nicht mehr als korrekt anzusehen. Der Fehler ist allerdings vernachlässigbar, da die Temperaturdifferenz zwischen Luft und Wand an dieser Stelle der Kanäle bereits sehr klein ist.

7.3.2.2 Wärmeübergang an der Stirnfläche des Stacks

An der Stirnfläche des Stacks, die mit heißer Luft angeströmt wird, findet ebenfalls ein Wärmeeintrag statt. Besagte Fläche ist in Abbildung 7-32 rot dargestellt:

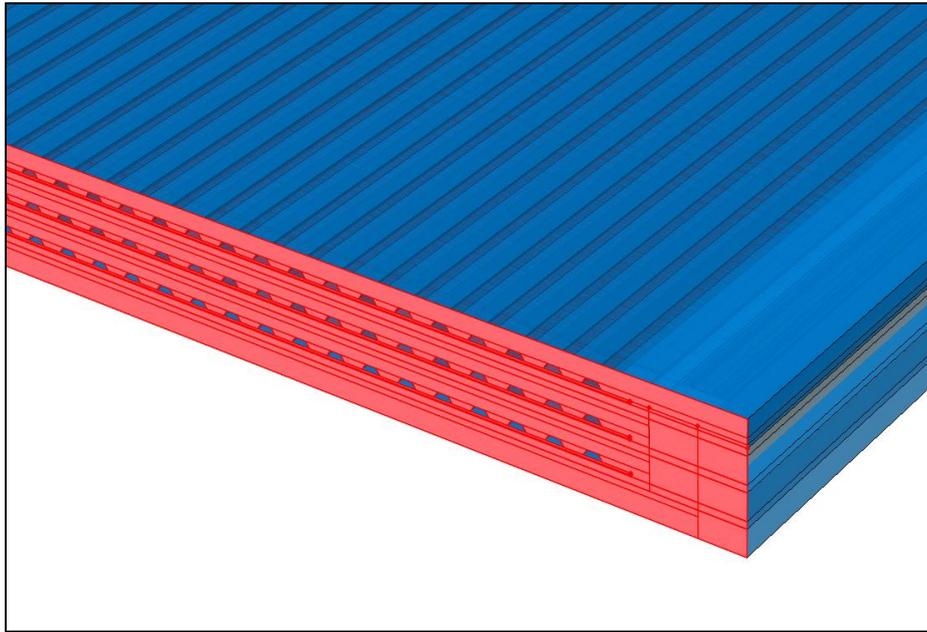


Abbildung 7-32: Stirnfläche des Brennstoffzellenstacks

Für die Stirnfläche werden in Abaqus ein Wärmeübergangskoeffizient und eine Gastemperatur als Randbedingung vorgegeben. Die Gastemperatur entspricht der Luft-Einlasstemperatur der jeweiligen Aufwärmphase (d.h. 300 °C oder 800 °C). Der Wärmeübergangskoeffizient wird mit $\alpha_{\text{Stirnfläche}} = 15 \text{ W/m}^2\text{K}$ abgeschätzt.

7.3.2.3 Annahmen und Vereinfachungen

Im Zuge der Modellierung des Brennstoffzellenstacks in Abaqus wurden einige Annahmen getroffen bzw. Vereinfachungen gemacht, die an dieser Stelle dokumentiert werden. Teilweise wurden die Punkte auch bereits im Kapitel 7.1 (Anfangs- und Randbedingungen) beschrieben.

- Die Seitenwände sowie Boden- und Deckfläche des Stackes sind in Realität mit einer sechs Zentimeter dicken Schicht aus Isolationsmaterial versehen, damit dem Prozess möglichst wenig Wärmeenergie verloren geht. Diese Flächen am Stack werden daher für die Berechnung als adiabatisch angenommen.
- Im Inneren des Stackes befinden sich neben den Kathodenkanälen für die Luft auch noch die Brennstoffkanäle. Diese sind während des Aufwärmvorgangs nicht durchströmt, somit kommt es dort auch zu keinem konvektiven (Ab-) Transport von Wärmeenergie. Da die spezifische Wärmekapazität des stillstehenden Gases in den Brennstoffkanälen sehr klein ist, wird der Wärmeübergang von der Struktur an das Gas in den Brennstoffkanälen vernachlässigt.
- Für die Kathodenkanäle wird eine ideale Gleichverteilung der Luft angenommen, d.h. der Massenstrom ist in allen Kathodenkanälen gleich. Die Annahme ist durchaus realistisch, da ja die Gleichverteilung vom Systementwickler angestrebt wird und durch relativ einfache Maßnahmen (z.B. Anpassung des Manifoldings an der Einlassseite) erreicht werden kann. Kann durch solche Maßnahmen keine Gleichverteilung der Luft erreicht werden, so müssen die unterschiedlichen Massenströme in der Simulation des Aufwärmprozesses des Stackes berücksichtigt werden.
- Die Porositäten der beteiligten Bauteile (Zelle, Nickel-Kupfer-Netz) werden nicht berücksichtigt. Die Bauteile werden für die Berechnung des Aufwärmprozesses als undurchlässig angenommen.

Betroffen ist für die Berechnung sowieso nur die Kathode der Zelle, da an der Anode (und somit auch am Nickel-Kupfer-Netz) beim Aufwärmprozess keine erzwungene Strömung auftritt.

- Die Zelle wird für den Aufwärmprozess nicht in Elektroden und Elektrolyt unterteilt, sondern als eine einzige Schicht modelliert. Über die verwendeten Werkstoffe ist hinsichtlich Eigenschaften wie thermischer Leitfähigkeit und spezifischer Wärmekapazität leider von vornherein wenig bekannt (insbesondere, wenn man auch eine Temperaturabhängigkeit berücksichtigen möchte). Für die vereinfachte Zelle werden die Werkstoffkennwerte von YSZ verwendet, da der Großteil der Zelle davon geprägt ist (in diesem Fall Elektrolyt und Anode, siehe Kapitel 5.1.1).

7.3.2.4 Berechnungsergebnis für den Stack mit drei Zellen

An dieser Stelle wird das Berechnungsergebnis für den gesamten Stack mit drei Zellen dokumentiert. Einige Bilder sollen einen Eindruck vom Aufwärmprozess vermitteln.

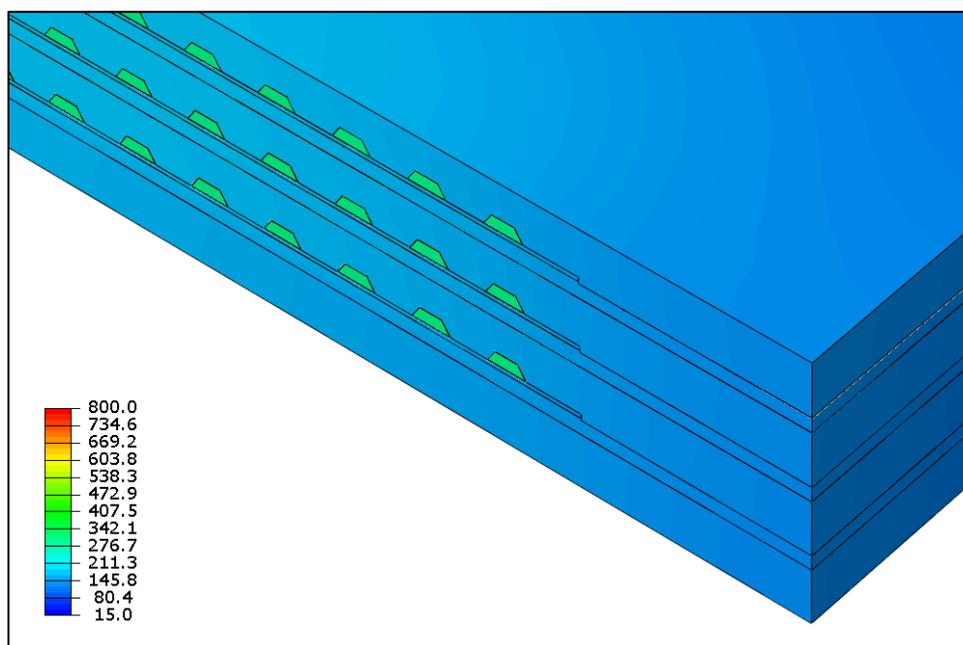


Abbildung 7-33: Nahaufnahme des Temperaturfeldes des Stacks nach 300 Sekunden

Abbildung 7-33 zeigt eine Nahaufnahme des Temperaturfeldes des Brennstoffzellenstacks 300 Sekunden nach Beginn des Aufwärmprozesses. Die hellgrünen Trapeze stellen die Temperatur der Luft am Kanaleintritt dar. Der Rest ist der Festkörper des Stacks. Die weiteren Bilder sollen einen Überblick über den gesamten Stack ermöglichen.

In Abbildung 7-34 ist zu erkennen, dass noch Aufwärmphase eins im Gange ist (Lufttemperatur am Einlass 300 °C), während in den nachfolgenden fünf Abbildungen nur noch Phase zwei gezeigt wird (800 °C Lufttemperatur am Einlass).

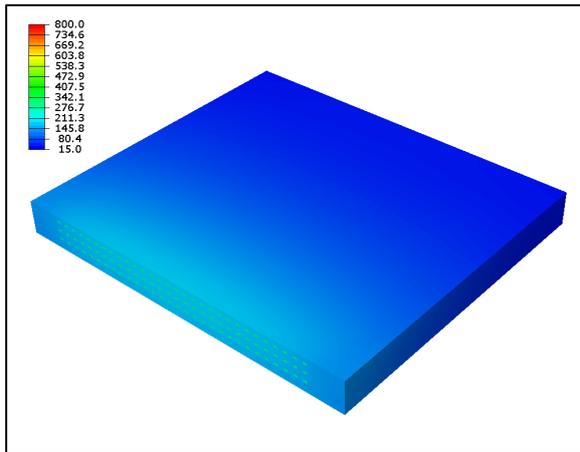


Abbildung 7-34 (links): Temperaturfeld des Stacks nach 300 Sekunden (5 min)

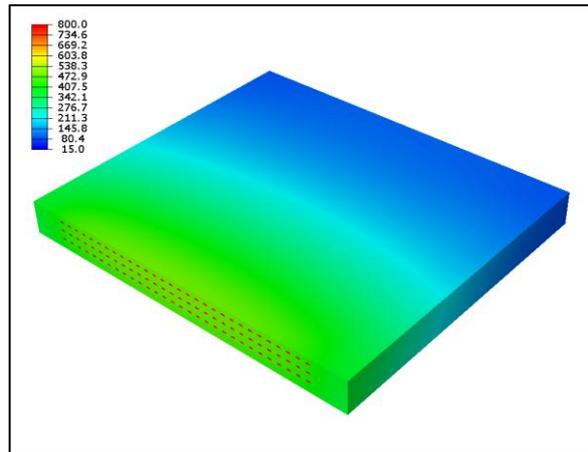


Abbildung 7-35 (rechts): Temperaturfeld des Stacks nach 600 Sekunden (10 min)

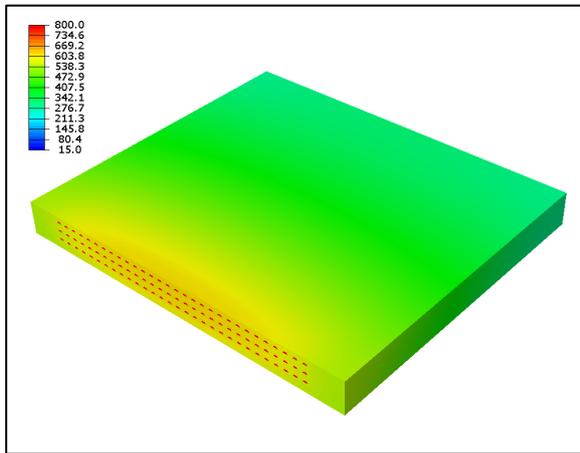


Abbildung 7-36 (links): Temperaturfeld des Stacks nach 1200 Sekunden (20 min)

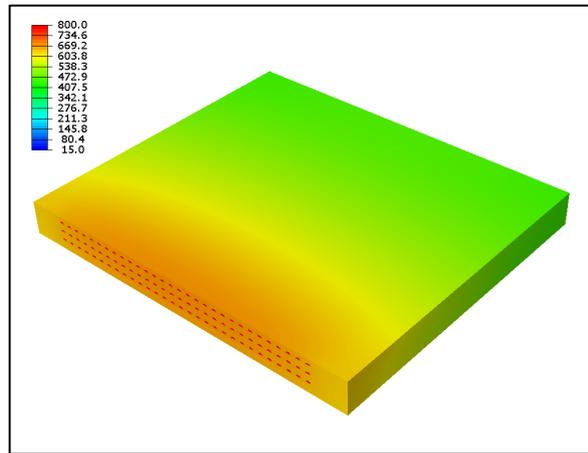


Abbildung 7-37 (rechts): Temperaturfeld des Stacks nach 1800 Sekunden (30 min)

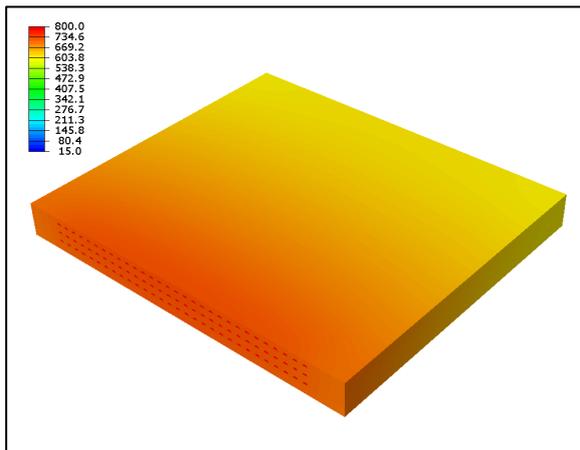


Abbildung 7-38 (links): Temperaturfeld des Stacks nach 2700 Sekunden (45 min)

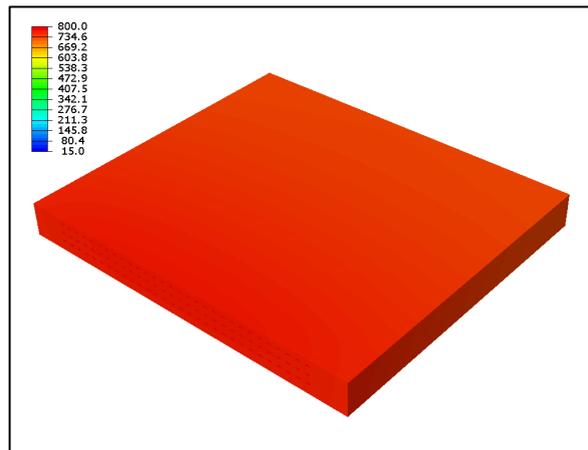


Abbildung 7-39 (rechts): Temperaturfeld des Stacks nach 4500 Sekunden (1 h 15 min)

Für den gesamten Stack ergibt sich eine Aufwärmzeit von etwa 3700 Sekunden (gut eine Stunde), bis im Festkörper überall eine Mindesttemperatur von 700 °C erreicht ist.

Um einen Einblick in das Innere des Stacks zu erlangen, wird eine einzelne Interkonnektorplatte mit den zugehörigen Kathodenkanälen in Abbildung 7-40 von unten näher betrachtet. Es handelt sich um jene Interkonnektorplatte, die über der mittleren Zelle liegt.

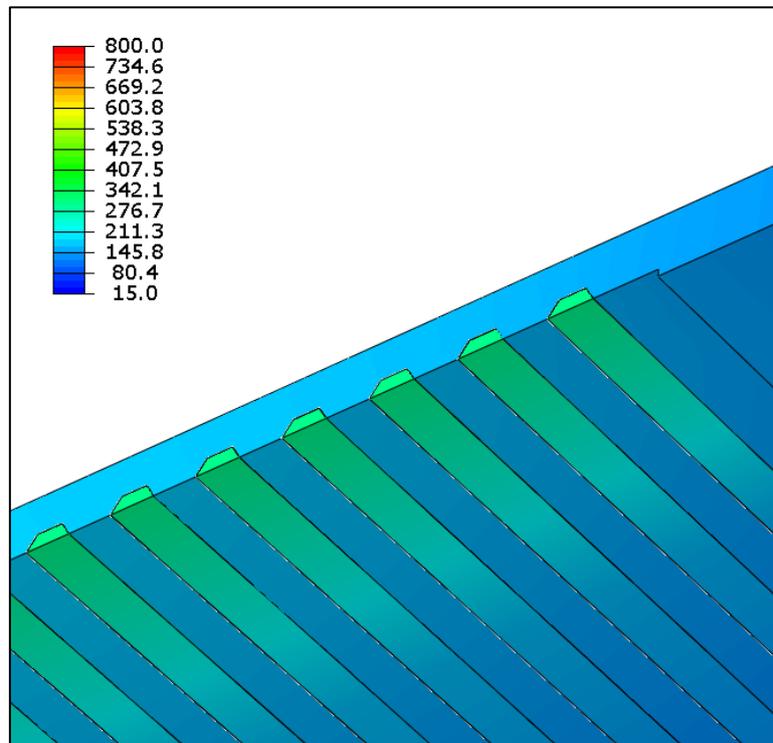


Abbildung 7-40: Nahaufnahme des Temperaturfeldes der Interkonnektorplatte bzw. der zugehörigen Luftkanäle nach 300 s

Wiederum sind die Lufttemperaturen und die Temperaturen des Festkörpers zu sehen. Die folgenden sechs Abbildungen zeigen jeweils das Temperaturfeld der ganzen Interkonnektorplatte mitsamt Lufttemperaturen.

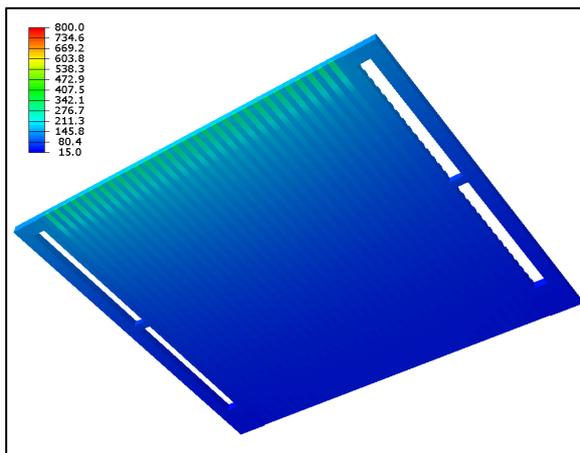


Abbildung 7-41 (links): Temperaturfeld der Interkonnektorplatte nach 300 Sekunden (5 min)

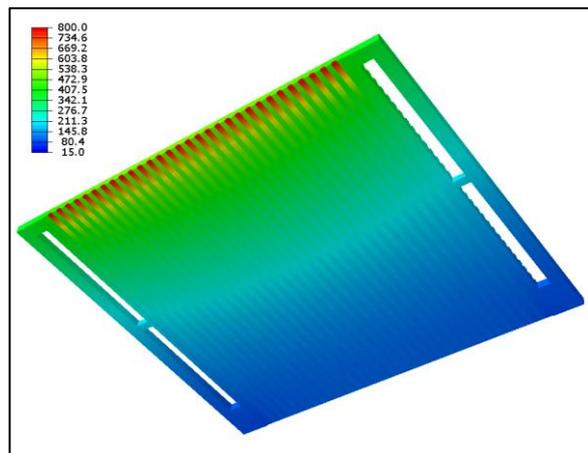


Abbildung 7-42 (rechts): Temperaturfeld der Interkonnektorplatte nach 600 Sekunden (10 min)

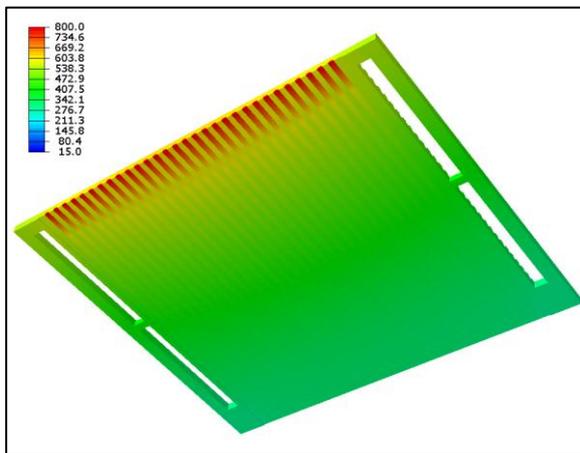


Abbildung 7-43 (links): Temperaturfeld der Interkonnektorplatte nach 1200 Sekunden (20 min)

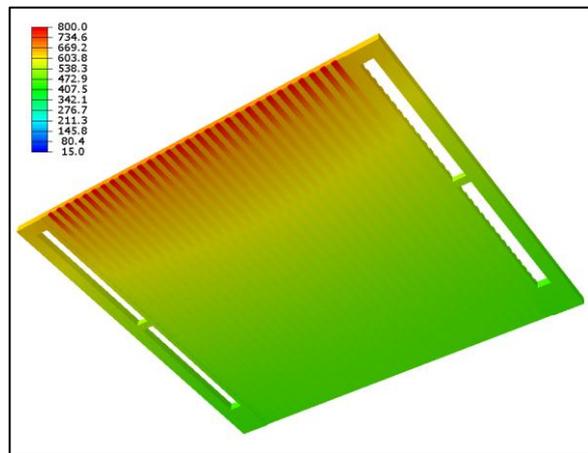


Abbildung 7-44 (rechts): Temperaturfeld der Interkonnektorplatte nach 1800 Sekunden (30 min)

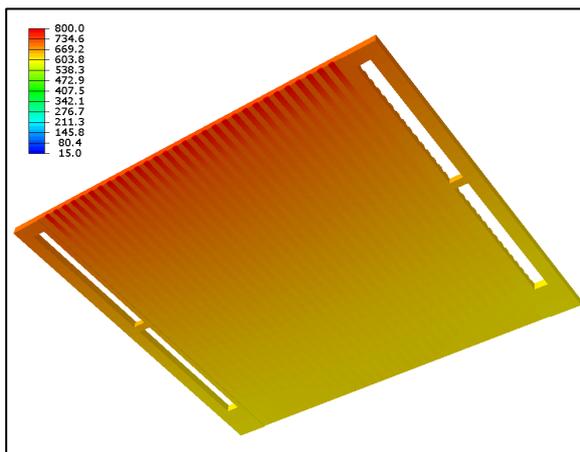


Abbildung 7-45 (links): Temperaturfeld der Interkonnektorplatte nach 2700 Sekunden (45 min)

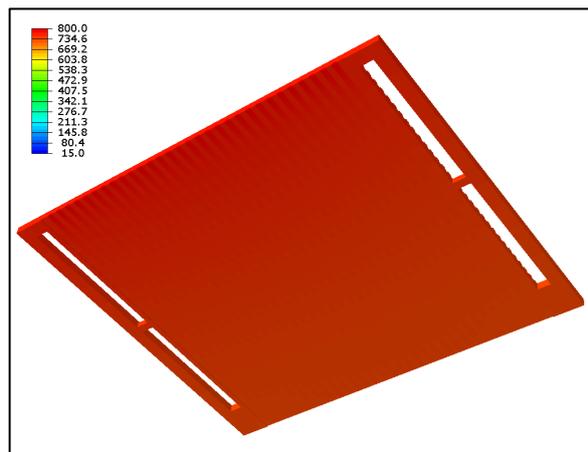


Abbildung 7-46 (rechts): Temperaturfeld der Interkonnektorplatte nach 4500 Sekunden (1 h 15 min)

Für den oben gezeigten Interconnect wird exemplarisch der vierte Kanal von rechts gewählt, um die zeitliche Entwicklung der Wandtemperaturen an Ein- und Auslass sowie die Luft- und Wandtemperaturen über die Kanallänge zu bestimmten Zeitpunkten näher zu betrachten.

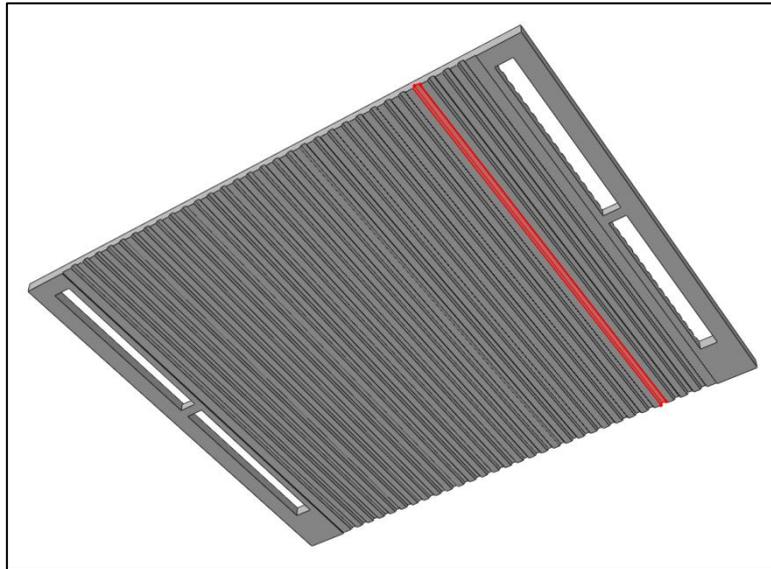


Abbildung 7-47: Exemplarisch gewählter Kanal (rot) der Interkonnektorplatte

Das Diagramm in Abbildung 7-48 zeigt die zeitliche Entwicklung der Wandtemperaturen des Kanals im Interconnect an Ein- und Auslass. Aus der blauen Kurve lässt sich die Dauer des Aufwärmprozesses abschätzen, da der auslassseitige Punkt des Interconnects als letzter die Zieltemperatur von 700 °C erreicht (Abschätzung deswegen, weil der gewählte Punkt nicht repräsentativ für den gesamten Stack ist. Es existieren weitere Punkte, die erst mit einer leichten Verzögerung 700 °C erreichen).

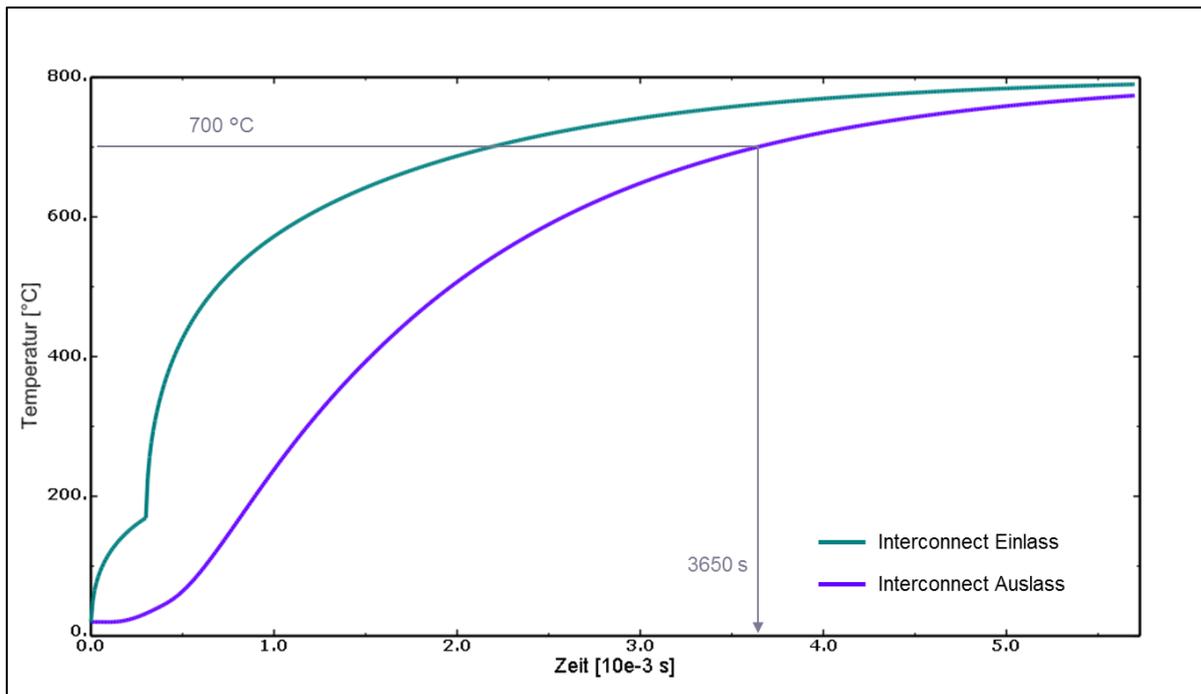


Abbildung 7-48: Zeitliche Entwicklung der Wandtemperaturen an Einlass und Auslass am Interconnect

Aus dem Diagramm in Abbildung 7-48 geht wiederum hervor, dass über einen weiten Zeitbereich des Aufwärmprozesses große Temperaturdifferenzen zwischen Einlass und Auslass vorherrschen und es somit zu einem steilen Temperaturgradienten im Festkörper kommt.

In weiterer Folge sollen die Luft- und Wandtemperaturen zu gewissen Zeitpunkten untersucht werden. Zu Beginn werden die Luft- und Wandtemperaturen über der Kanallänge nach 300 Sekunden (5 Minuten) in Abbildung 7-49 gezeigt:

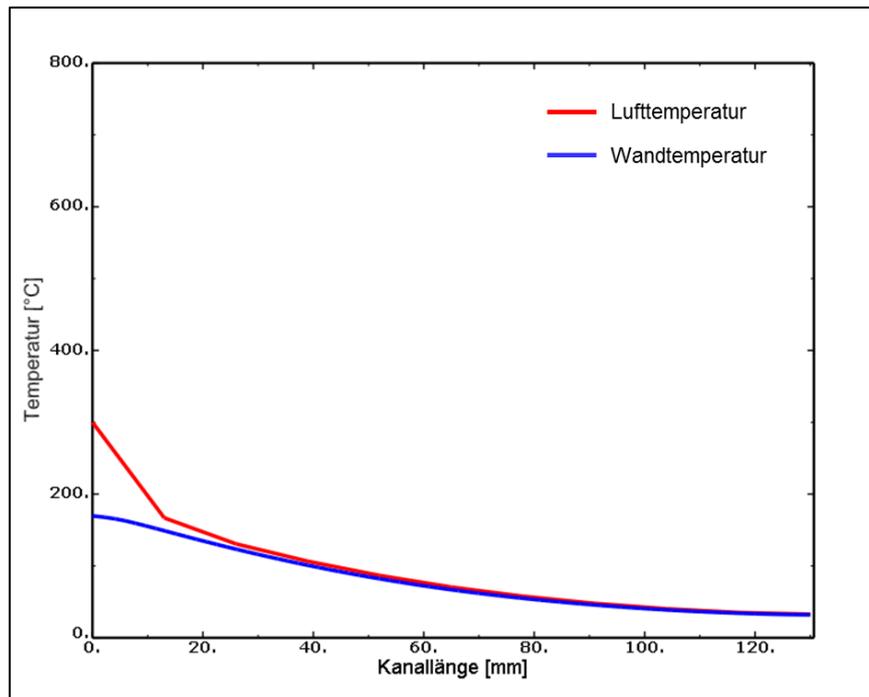


Abbildung 7-49: Luft- und Wandtemperaturen nach 300 Sekunden (5 Minuten)

Durch die grobe Vernetzung des Luftkanals in axialer Richtung kommt es zu eher groben Polygonzügen für die Lufttemperaturen in den gezeigten Diagrammen. Um einen ersten Eindruck vom Verhalten von Luft- und Wandtemperaturen zu bekommen, ist diese grobe Vernetzung ausreichend genau und erlaubt eine etwas größere Zeitschrittweite in der Berechnung, was wiederum zu einer kürzeren Gesamtrechnungszeit führt. Für eine exaktere Abbildung der Lufttemperaturkurve müsste die Luft im Kanal hingegen feiner vernetzt werden.

Nach 500 Sekunden (ca. 8,3 Minuten) kommt es bereits zu einem sehr steilen Temperaturgradienten in der Wand (Abbildung 7-50). Die Temperaturdifferenz in der Wand zwischen Einlass und Auslass ist größer 300 °C:

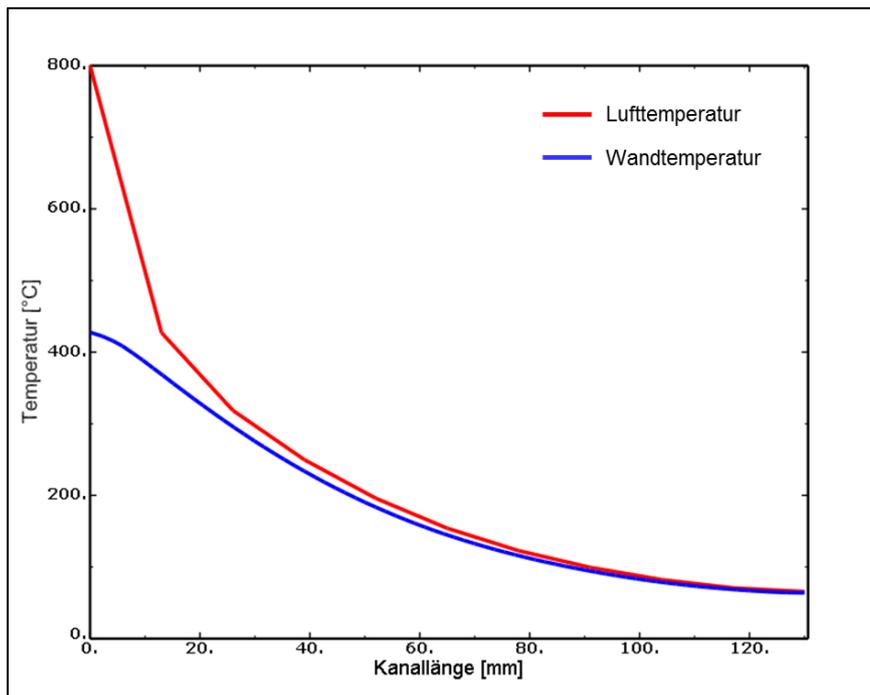


Abbildung 7-50: Luft- und Wandtemperaturen nach 500 Sekunden (8,3 Minuten)

Nach 1200 Sekunden (20 Minuten) ist der Temperaturgradient in der Wand wieder wesentlich flacher, was aus Abbildung 7-51 hervorgeht. Durch den immer geringer werdenden Netto-Enthalpiestrom, der in das System eingebracht wird, wird der gesamte Aufwärmprozess verlangsamt.

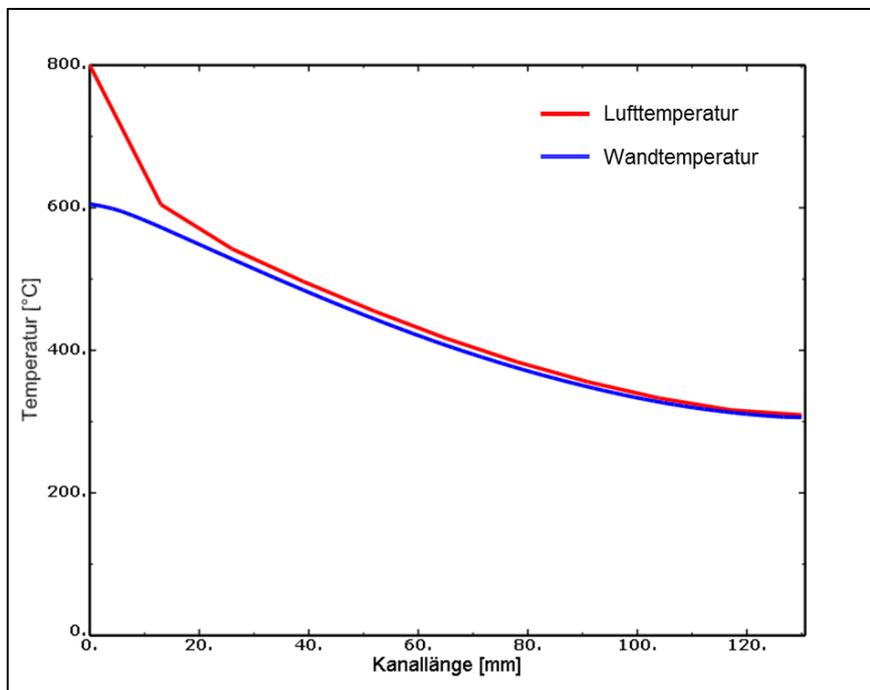


Abbildung 7-51: Luft- und Wandtemperaturen nach 1200 Sekunden (20 Minuten)

Im letzten Diagramm soll noch der Zeitpunkt von 2700 Sekunden (45 Minuten) nach Beginn des Aufwärmprozesses gezeigt werden (Abbildung 7-52). Die Wand ist bereits überall wärmer als 600 °C,

jedoch dauert es ab hier noch verhältnismäßig lange, bis die geforderten 700 °C erreicht werden, da die Differenz zwischen ein- und ausströmendem Enthalpiestrom immer weiter abnimmt.

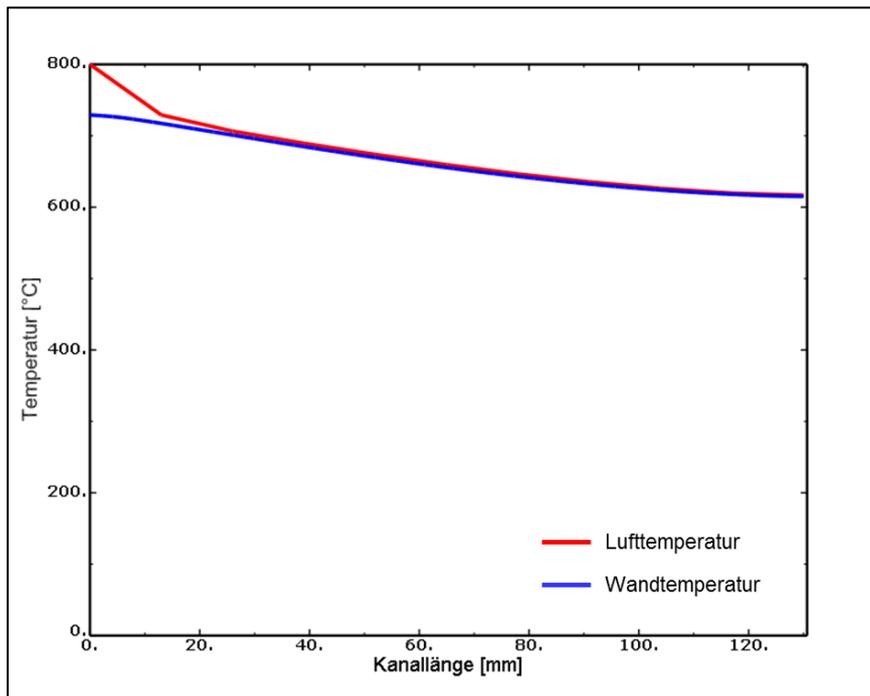


Abbildung 7-52: Luft- und Wandtemperaturen nach 2700 Sekunden (45 Minuten)

Einen weiteren interessanten Einblick in das Innere des Stacks bietet eine exemplarische Zelle. Abbildung 7-53 zeigt die mittlere der drei Zellen mitsamt den zugehörigen Luftkanälen.

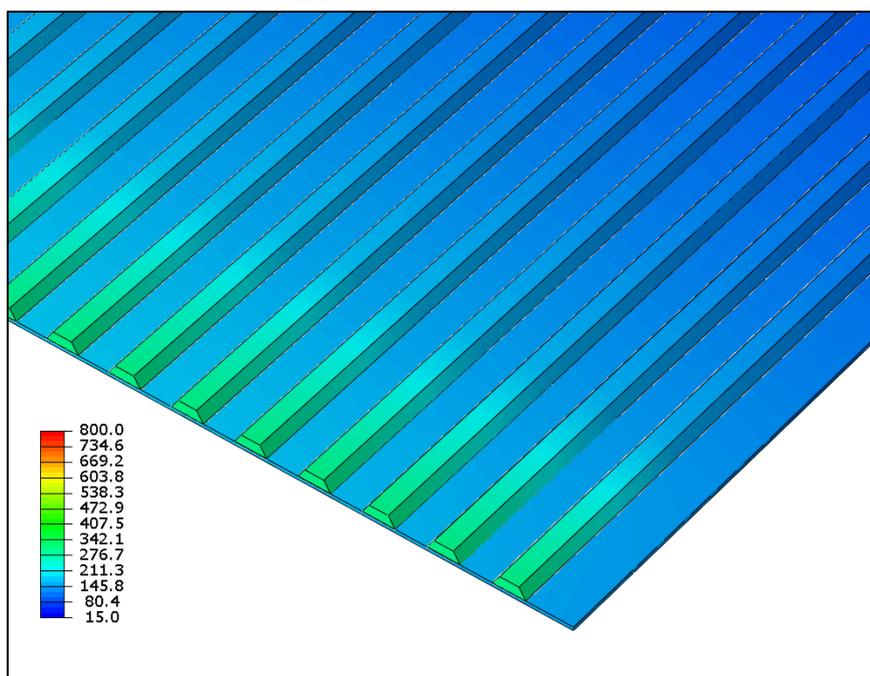


Abbildung 7-53: Nahaufnahme des Temperaturfeldes der Zelle bzw. der zugehörigen Luftkanäle nach 300 s

Die folgenden sechs Abbildungen zeigen die Temperaturfelder von Zelle und Luftkanälen zu verschiedenen Zeitpunkten während des Aufwärmprozesses.

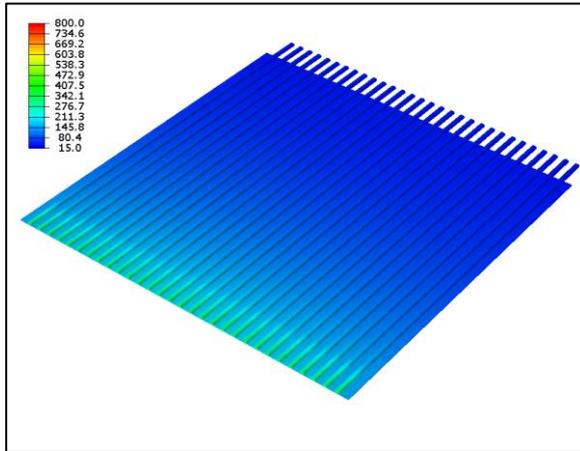


Abbildung 7-54 (links): Temperaturfeld der Zelle nach 300 Sekunden (5 min)

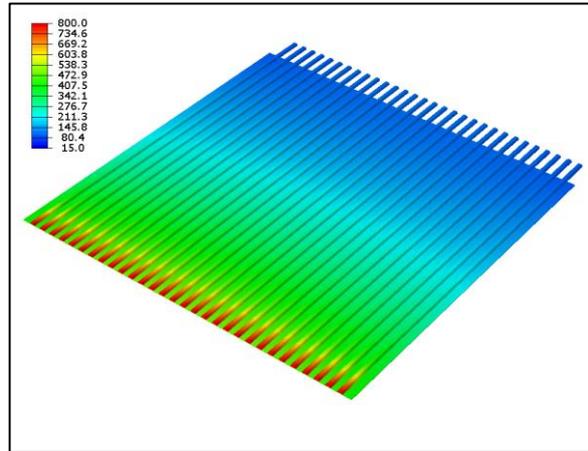


Abbildung 7-55 (rechts): Temperaturfeld der Zelle nach 600 Sekunden (10 min)

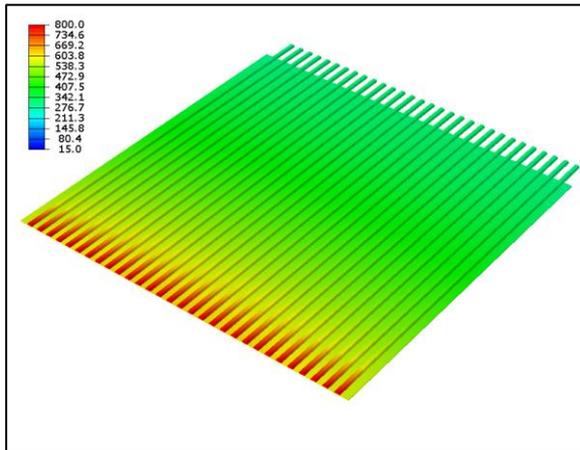


Abbildung 7-56 (links): Temperaturfeld der Zelle nach 1200 Sekunden (20 min)

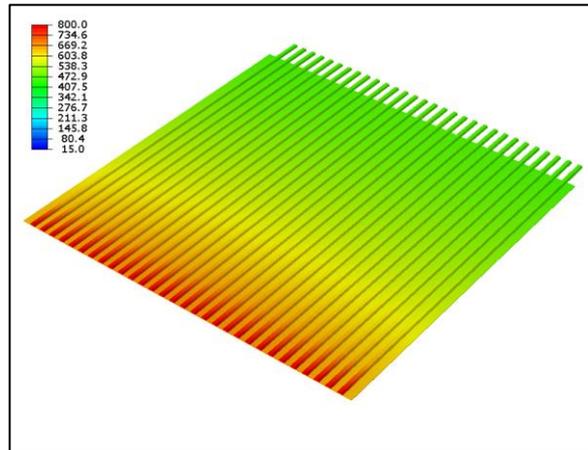


Abbildung 7-57 (rechts): Temperaturfeld der Zelle nach 1800 Sekunden (30 min)

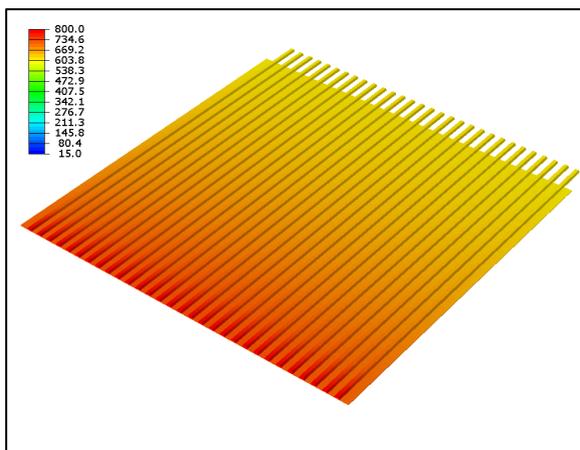


Abbildung 7-58 (links): Temperaturfeld der Zelle nach 2700 Sekunden (45 min)

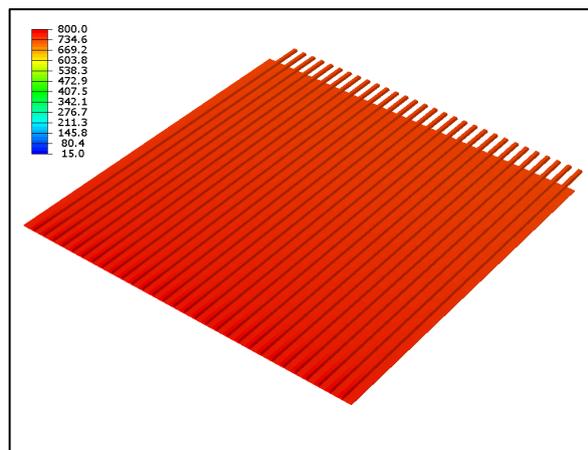


Abbildung 7-59 (rechts): Temperaturfeld der Zelle nach 4500 Sekunden (1 h 15 min)

Die zeitliche Entwicklung der Wandtemperaturen des Kanals für den Ein- und Auslassbereich ist für die Zelle in Abbildung 7-60 dargestellt. Das Verhalten ist fast ident mit dem Verhalten der Interkonnektorplatte.

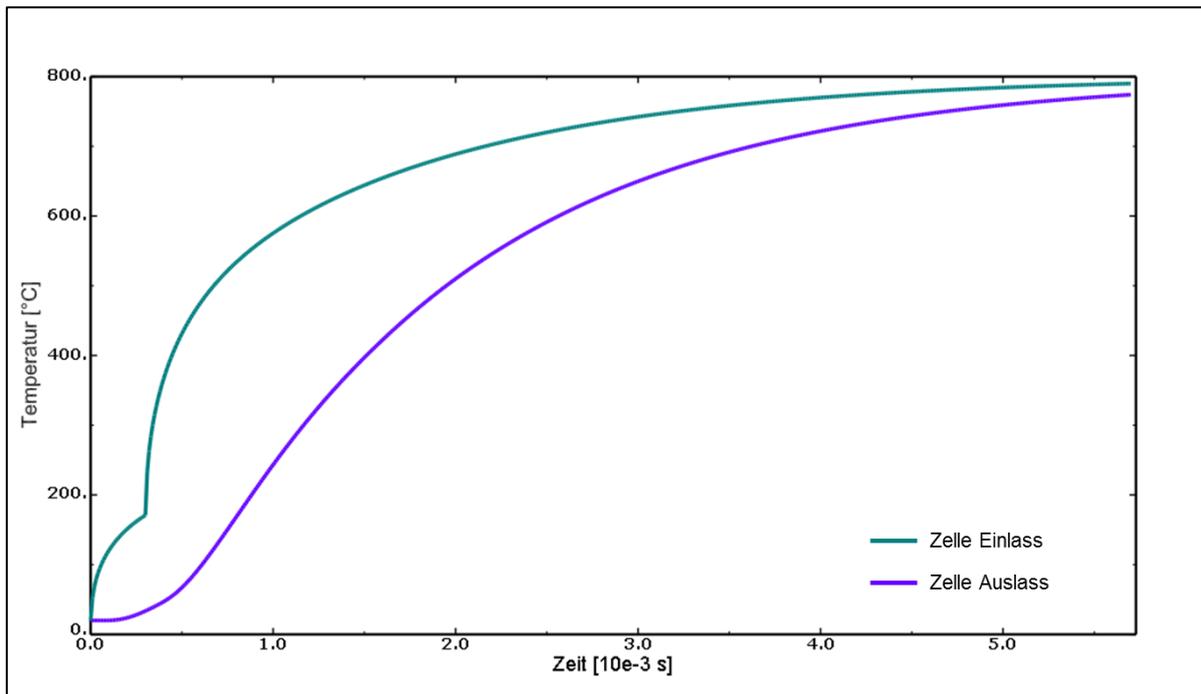


Abbildung 7-60: Zeitliche Entwicklung der Wandtemperaturen an Einlass und Auslass an der Zelle

8 Conclusio

In diesem Kapitel sollen die Ergebnisse der Arbeit zusammengefasst und die wichtigsten Erkenntnisse herausgearbeitet werden.

8.1 Gleichverteilung der Kathodenluft

In Kapitel 6 wird die Gleichverteilung der Luft auf die Kathodenkanäle des Stacks untersucht. Es wird deutlich, dass für die vorgegebene Geometrie von Zu- und Ablauf keine vollständige Gleichverteilung der Luft auf die Kathodenkanäle zu erwarten ist. Eine Abweichung von der mittleren Eintrittsgeschwindigkeit in die Kathodenkanäle von etwa +25 % ergibt sich insbesondere am oberen Ende der Zulauf-Box, verursacht durch den Staudruck in diesem Bereich (siehe Seite 51 ff.).

Eine Gleichverteilung der Kathodenluft kann jedoch mit hoher Wahrscheinlichkeit durch einfache konstruktive Maßnahmen an der Zulauf-Box erreicht werden. Die Gleichverteilung ist, wie bereits beschrieben, nicht nur aus Gründen des Aufwärmprozesses, sondern auch wegen des gewünschten, konstanten Luftverhältnisses über alle Zellflächen anzustreben.

8.2 Berechnung des Temperaturfeldes

Schon bei der Berechnung der zeitlichen Entwicklung des Temperaturfeldes beim einfachen Modell „Rohr“ konnte gezeigt werden, dass eine Koppelung von Luft- und Wandtemperaturen für eine korrekte Abbildung des instationären Vorganges von großer Bedeutung ist.

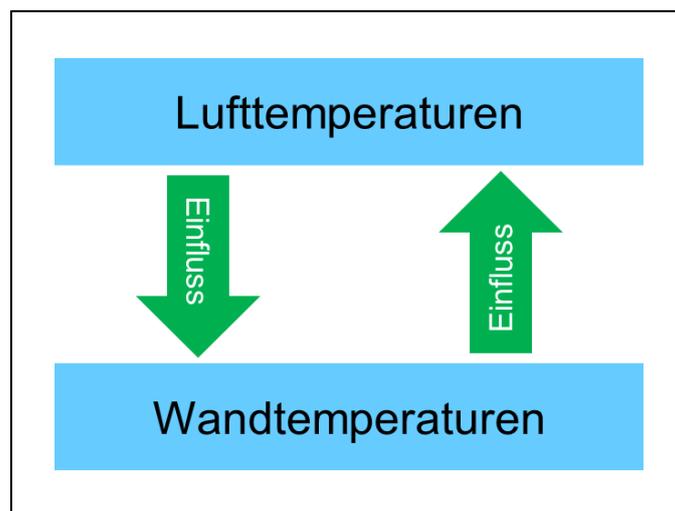


Abbildung 8-1: Gegenseitige Beeinflussung von Luft- und Wandtemperaturen über die Zeit

Wie in Abbildung 8-1: Gegenseitige Beeinflussung von Luft- und Wandtemperaturen über die Zeit Abbildung 8-1 gezeigt, beeinflussen sich Luft- und Wandtemperaturen gegenseitig. Auch wenn der gegenseitige Einfluss nicht im Bereich von Zehntelsekunden oder Sekunden deutlich wird, so dauert der gesamte Aufwärmprozess mit etwa eineinhalb Stunden viel zu lange, als dass man ohne Koppelung von Luft- und Wandtemperaturen auskäme.

In der Arbeit wird gezeigt, dass in einer ersten, einfachen Modellierung, also ohne detailaufgelöste CFD-Berechnung der Luftkanäle, hinreichend genaue gaseitige Randbedingungen für die Berechnung der zeitlichen Entwicklung des Temperaturfeldes im Festkörper aufgestellt werden können.

8.3 Örtliche Auflösung der Luftströmung und Zeitschrittweite

In Kapitel 7.2.2.3 wurde gezeigt, dass die Zeitschrittweite bei einem expliziten Berechnungsschema für den konvektiven Transport durch die Bedingung eingeschränkt ist, dass die Courant-Friedrichs-Levy-Zahl kleiner eins bleiben muss. Die maximale Zeitschrittweite ist also abhängig von der Strömungsgeschwindigkeit und vom Gitterabstand. In dieser Arbeit wurde daher zumeist ein eher mit groben Gittern für die Luftströmung gerechnet, um eine größere Zeitschrittweite und somit kürzere Gesamtrechendauern zu erzielen.

Es wurde allerdings in Kapitel 7.2.2.3 auch ein Beschleunigungsfaktor eingeführt, der es durch Herabsetzen der spezifischen Wärmekapazität des Festkörpers erlaubt, die Berechnung der Aufwärmung des Festkörpers zu beschleunigen. Es ist notwendig, ein Optimum zu finden, so dass ein hinreichend feines Gitter mit einem Beschleunigungsfaktor kombiniert wird, der noch innerhalb der erlaubten Grenzen liegt, und die Gesamtrechenzeit akzeptabel bleibt.

9 Ausblick

9.1 Verfeinerung der angewandten Methodik in Abaqus/CAE

Der Wärmeübergang von der heißen Luft an die Rohrwand wurde bei der Berechnung des Temperaturfeldes des SOFC-Stacks in dieser Arbeit mit räumlich und zeitlich gemittelten Wärmeübergangskoeffizienten ermittelt. Mit einer Subroutine in Abaqus/CAE könnte man eine Abhängigkeit des Wärmeübergangskoeffizienten von der Gastemperatur realisieren, ähnlich wie sie beim einfachen Modell „Rohr“ zur Anwendung kommt.

Auch weitere vereinfachte Randbedingungen, wie etwa die adiabaten Seitenwände des Brennstoffzellenstacks, könnten durch realistischere Randbedingungen ersetzt werden, wenn mehr Information über das Gesamtsystem, also z.B. über Isolierung, Umgebungseinflüsse usw., zur Verfügung steht.

9.2 Zukünftige Methode zur Berechnung des Temperaturfeldes

Eine elegantere Methode zur Berechnung des Temperaturfeldes des Brennstoffzellenstacks während des Aufwärmprozesses wäre eine Koppelung zwischen CFD- und FE-Simulation, wobei die Luftströmung detailaufgelöst wird.

Insbesondere bei einer Kanalgeometrie, die nicht gerade verläuft, bzw. mit Querschnittsänderungen behaftet ist, stößt die in dieser Arbeit angewandte vereinfachte Modellierung der lokalen Wärmeübergangskoeffizienten zwischen Luft und Wand an ihre Grenzen. Eine Auflösung der Grenzschicht der Luftströmung an der Rohrwand schafft in diesem Fall Abhilfe, der Wärmeübergang wird aus dem Geschwindigkeitsprofil in der Grenzschicht berechnet.

Auch der Wärmeübergang an der angeströmten Stirnfläche des Brennstoffzellenstacks müsste nicht mehr abgeschätzt werden, sondern könnte durch die CFD-Simulation aus dem lokalen Strömungszustand berechnet werden.

9.3 Thermo-mechanisches Verhalten und Aufwärmstrategie

Die vorliegende Arbeit befasst sich mit der zeitlichen Entwicklung des Temperaturfeldes im SOFC-Stack. Der nächste logische Schritt ist die Betrachtung des damit einhergehenden thermo-mechanischen Verhaltens des Stack, um in weiterer Folge auch Aussagen zur Schädigung der Bauteile durch die Temperaturwechselbeanspruchung treffen zu können.

In diesem Zusammenhang muss auch untersucht werden, inwiefern sich die Aufwärmstrategie, bzw. in weiterer Folge auch die Abkühlstrategie optimieren lassen, um eine möglichst lange Lebensdauer des Stack zu erzielen. Die Freiheitsgrade beim Aufwärmen und beim Abkühlen sind allerdings durch die Regelbarkeit des Brenners, dessen heiße Abgase über einen Wärmetauscher die heiße Luft erzeugen, beschränkt. Auch Betrachtungen des Wirkungsgrades des Brenners in bestimmten Betriebsbereichen könnten hierbei in Zukunft eine Rolle spielen.

9.4 Detaillierte Betrachtung der Zelle

Die in Abbildung 9-1 gezeigten drei Schichten der Zelle (schwarz, gelb, grün) werden in dieser Arbeit für die Berechnung des Temperaturfeldes nur als eine einzige, homogene Schicht modelliert.

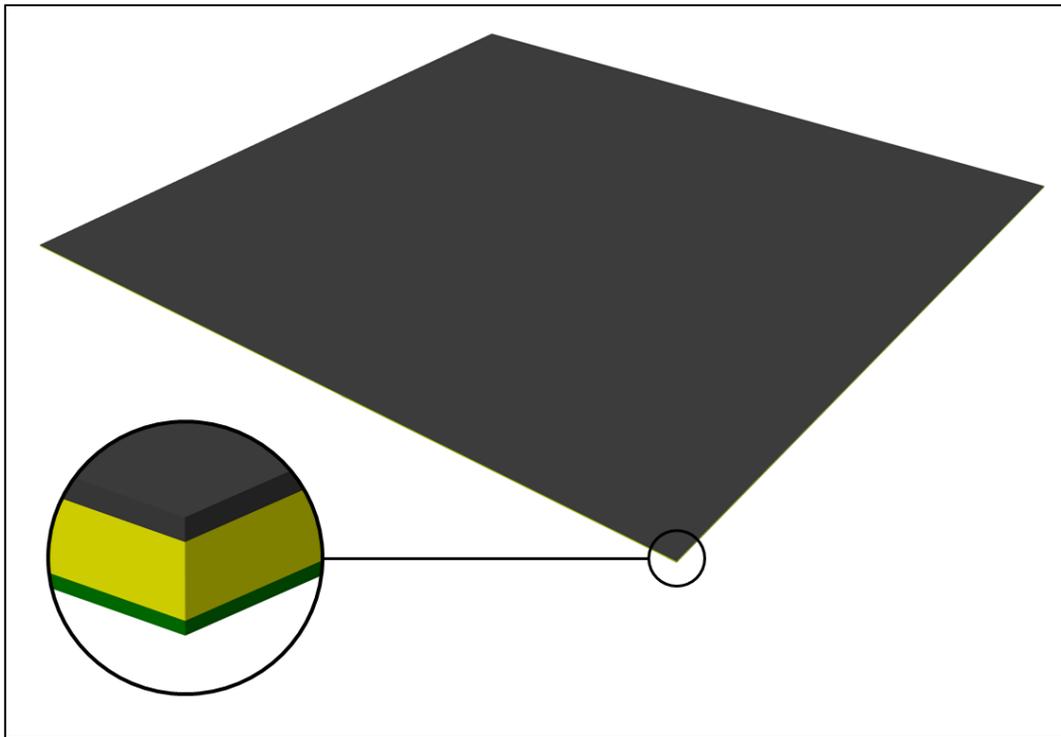


Abbildung 9-1: Detailansicht der Zellschichten (Kathode Schwarz, Elektrolyt gelb, Anode grün)

Für zukünftige Betrachtungen wird die detaillierte Modellierung der Zelle mit Elektrolyt- und Elektrodenschichten, sowie weiteren, dünnen Funktionsschichten, je nach Detaillierungsgrad, unumgänglich sein, um das thermo-mechanische Verhalten auf Zellebene untersuchen zu können.

Eine große Herausforderung stellen hierbei die Werkstoffkennwerte dar, die zum Teil noch unbekannt sind und erst durch Experimente bzw. Berechnungen ermittelt werden müssen. Es bestehen Abhängigkeiten von Temperatur und Porosität.

9.5 Elektrochemische Modellierung

Ein weiterer wichtiger Punkt für zukünftige Simulationen von SOFC-Brennstoffzellen ist die Modellierung der elektrochemischen Vorgänge. Diese haben ebenfalls einen wesentlichen Einfluss auf das Temperaturfeld im Stack.

Was den Aufwärmprozess betrifft, so kann der elektrochemische Prozess bereits ab einer gewissen Temperatur, die nahe der Betriebstemperatur liegt, beginnen. Der Aufwärmprozess des Stacks wird dadurch beschleunigt. Welchen Einfluss der elektrochemische Prozess auf das Temperaturfeld des Stacks im Detail nimmt, muss anhand eines Modells untersucht werden, in dem eben dieser Vorgang mit abgebildet wird.

9.6 Validierung

Abschließend soll erwähnt werden, dass eine Validierung am Prüfstand durchgeführt werden muss, um die Ergebnisse der Simulation zu prüfen. Hierfür könnte etwa ein realer Stack mit Thermoelementen bestückt werden, um die Temperaturen des Festkörpers an einigen, ausgesuchten Stellen mit jenen der Berechnung zu vergleichen. Auch Ein- und Auslasstemperatur könnten am Prüfstand sehr einfach gemessen und mit der Simulation verglichen werden.

Abkürzungen

| | |
|-----|------------------------------------------------------------------------|
| AVL | Anstalt für Verbrennungskraftmaschinen List |
| CAE | Computer Aided Engineering |
| CFD | Computational Fluid Dynamics |
| FEM | Finite-Elemente-Methode |
| FV | Finites Volumen |
| FVM | Finite-Volumen-Methode |
| LGS | Lineares Gleichungssystem |
| LSM | Lanthanum Strontium Manganese Oxide (dt. Lanthan-Strontium-Manganoxid) |
| NiO | Nickel oxide (dt. Nickeloxid) |
| YSZ | Yttria-stabilized Zirconia (dt. yttriumdotiertes Zirkoniumdioxid) |

Formelzeichen

Die runden Klammern (FVM bzw. FEM) sollen die Relation zur Finite-Volumen-Methode bzw. zur Finite-Elemente-Methode andeuten. Die Einheiten sind in eckigen Klammern angeführt.

Römische Buchstaben

| | |
|--------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| A | Satz von Differentialgleichungen (FEM); Querschnittsfläche, [m^2] |
| a | Temperaturleitfähigkeit, [m^2/s]; Koeffizient in der Diskretisierungsgleichung (FVM); Systemparameter (FEM) |
| B | Satz von Randbedingungen (FEM) |
| C, D, E, F | Funktionen zur partiellen Integration von A und B (FEM) |
| \bar{c} | mittlere molekulare Geschwindigkeit, [m/s] |
| c_p | spezifische Wärmekapazität bei konstantem Druck, [$J/(kg \cdot K)$] |
| D | diffusiver Fluss |
| d | Durchmesser, [m] |
| d_h | hydraulischer Durchmesser, [m] |
| E_b | Strahlungsfluss, [W/m^2] |
| Ec | Eckert-Zahl |
| E_Z | tatsächliche, momentane Zellspannung, [V] |
| E_H^0 | theoretische Heizwertspannung, [V] |
| F | konvektiver Fluss |
| Fo | Fourier-Zahl |

| | |
|----------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------|
| f | Wichtungsfaktor (FVM); Lastvektor (FEM); Beschleunigungsfaktor für die numerische Simulation |
| G | Wärmeeinstrahlung, $[W/m^2]$; bekannte Funktion (FEM) |
| G_{abs} | absorbierte Wärmeeinstrahlung, $[W/m^2]$ |
| Gr | Grashof-Zahl |
| g | Gravitationsfeldstärke, $[m/s^2]$; bekannte Funktion (FEM) |
| h | spezifische Enthalpie, $[J/kg]$ |
| J | Fluss (FVM) |
| K | Steifigkeitsmatrix (FEM) |
| k | Wärmeleitfähigkeit, $[W/(m \cdot K)]$; turbulente kinetische Energie |
| L | Plattenlänge, $[m]$ |
| l | charakteristische Länge, $[m]$; Kanallänge, $[m]$ |
| \dot{m} | Massenstrom, $[kg/s]$ |
| N | Formfunktion (FEM) |
| Nu | Nusselt-Zahl |
| n | Anzahl von Teilchen pro Volumseinheit |
| Pe | Peclet-Zahl |
| Pr | Prandtl-Zahl |
| p | Druck, $[N/m^2]$ |
| \dot{Q} | Wärmestrom, $[W]$ |
| \dot{q}, \dot{q}_s | Wärmestromdichte, $[W/m^2]$ |
| q | Element-Größe (FEM) |
| Re | Reynolds-Zahl |
| r | System-Größe (FEM) |
| S | Quelle (FVM) |
| T | Temperatur, $[K]$ |
| T_s | Temperatur an der Oberfläche (surface), $[K]$ |
| T_∞ | Temperatur in der freien Strömung, $[K]$ |
| t | Zeit, $[s]$ |
| U | Umfang, $[m]$; innere Energie des Systems, $[J]$ |

| | |
|--------------|-------------------------------------------------------------------------|
| u, v, w | Geschwindigkeitskomponenten in x-, y- und z-Richtung (FVM), [m/s] |
| u_∞ | Geschwindigkeit der freien Strömung (FVM), [m/s] |
| u | gesuchte Größe (FEM) |
| \hat{u} | Approximation der gesuchten Größe (FEM) |
| v, \bar{v} | Satz beliebiger Funktionen (für Rechengebiet bzw. Randbedingungen; FEM) |
| w, \bar{w} | Gewichtungsfunktionen (für Rechengebiet bzw. Randbedingungen; FEM) |
| x, y, z | kartesische Koordinaten, [m] |

Griechische Buchstaben

| | |
|---------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| α | Wärmeübergangskoeffizient, [$W/(m^2 \cdot K)$]; Absorptionsgrad; Koeffizient (Porositätsmodell nach Forchheimer) |
| β | Wärmeausdehnungskoeffizient, [$1/K$] |
| δ | Grenzschichtdicke, [m] |
| δ_t | Temperaturgrenzschichtdicke, [m] |
| δ_{ij} | Kronecker-Delta |
| ε | Dissipationsrate der turbulenten kinetischen Energie |
| ζ | Druckverlustbeiwert (erweiterte Bernoulli-Gleichung); Koeffizient (Porositätsmodell nach Forchheimer) |
| η_z | Zellenwirkungsgrad |
| κ | Von Karman-Konstante |
| λ | Wärmeleitfähigkeit, [$W/(m \cdot K)$]; Luftverhältnis; Rohrreibungszahl |
| λ_f | Wärmeleitfähigkeit des Fluids, [$W/(m \cdot K)$] |
| λ_w | mittlerer freier Weg, [m] |
| μ | dynamische Viskosität, [$kg/(m \cdot s)$] |
| ν | kinematische Viskosität, [m^2/s] |
| ρ | Dichte, [kg/m^3] |
| σ | Stefan-Boltzmann-Konstante, [$W/(m^2 \cdot K^4)$] |
| σ_t | turbulente Schmid-Zahl bzw. turbulente Prandtl-Zahl |
| τ | Schubspannung, [N/m^2] |
| ϕ | Erhaltungsgröße |
| Γ | Diffusionskoeffizient (FVM); Rand des Berechnungsgebiets (FEM) |
| Ω | Berechnungsgebiet (FEM) |

Indizes

| | |
|------------|---------------------------------------------------------|
| <i>a</i> | aus |
| <i>E</i> | östlicher (rechter) Gitterpunkt |
| <i>e</i> | Grenzfläche zum östlichen (rechten) Gitterpunkt; ein |
| <i>eff</i> | effektiv |
| <i>NB</i> | Nachbarn |
| <i>P</i> | betrachteter, zentraler Gitterpunkt (Pol) |
| <i>W</i> | westlicher (linker) Gitterpunkt |
| <i>w</i> | Grenzfläche zum westlichen (linken) Gitterpunkt |

Hochstellungen

| | |
|----------|---------------------------------------------------------|
| + | dimensionslose Größe |
| * | angenommener Wert; auf die Simulation bezogener Wert |
| ' | Korrekturwert |
| <i>e</i> | Element-Nummer |
| <i>T</i> | transponiert |

Abbildungsverzeichnis

| | |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| Abbildung 2-1: Historische Brennstoffzelle von Grove [Voigt, Höller, Küter 2007, S. 20] | 2 |
| Abbildung 2-2: Wasserstoff-Sauerstoff Brennstoffzelle [Eichlseder, Klell 2010, S. 221] | 3 |
| Abbildung 2-3: Schematische Darstellung der SOFC [Fuel Cell Markets 2011]..... | 5 |
| Abbildung 2-4: Strom-Spannungs-Kennlinie einer Brennstoffzelle[Eichlseder, Klell 2010, S. 224] | 6 |
| Abbildung 2-5: Tubulare Bauweise einer Brennstoffzelle [Nagel 2008, S. 51] | 7 |
| Abbildung 2-6: Durchströmung eines planaren Brennstoffzellenstacks [Nagel 2008, S. 52] | 8 |
| Abbildung 2-7: Mögliche Bauweisen der Stützschiicht [Nagel 2008, S. 53]..... | 9 |
| Abbildung 3-1: Wärmeleitung aufgrund molekularer Bewegung [Incropera, De Witt 2002, S. 3]..... | 12 |
| Abbildung 3-2: Temperaturabhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit ausgewählter Gase [Incropera, De Witt 2002: S.57]..... | 13 |
| Abbildung 3-3: Konvektiver Wärmeübergang an einer ebenen Platte [Incropera, De Witt 2002, S. 327] | 14 |
| Abbildung 3-4: Geschwindigkeitsgrenzschiicht an einer ebenen Platte [Incropera, De Witt 2002, S. 331]..... | 14 |
| Abbildung 3-5: Temperaturgrenzschiicht an einer ebenen Platte [Incropera, De Witt 2002, S. 332]... | 15 |

| | |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| Abbildung 3-6: Entwicklung der Geschwindigkeitsgrenzschicht an einer ebenen Platte [Incropera, De Witt 2002, S. 336] | 16 |
| Abbildung 3-7: Massenflüsse im zweidimensionalen Fall für ein kartesisches Gitter | 17 |
| Abbildung 3-8: Impulsflüsse über die Oberflächen und Kräfte auf ein Fluidelement (x-Richtung) | 18 |
| Abbildung 3-9: Erhaltung einer skalaren Größe im zweidimensionalen Fall | 19 |
| Abbildung 3-10: Strahlungsaustausch an einer Oberfläche [Incropera, De Witt 2002, S. 9] | 25 |
| Abbildung 4-1: Bezeichnung der Orte in einem Finiten Volumen [Patankar 1980, S. 32] | 28 |
| Abbildung 4-2: Darstellung der Gradienten über die Oberflächen in einem Finiten Volumen [Patankar 1980, S. 33] | 28 |
| Abbildung 4-3: Realistische und unrealistische (unphysikalische) Verteilungen in Anlehnung an Patankar [1980, S. 34]..... | 29 |
| Abbildung 4-4: Grafische Darstellung des 1 st Order Upwind Schemas [Patankar 1980, S. 33]..... | 34 |
| Abbildung 4-5: Unterteilung des Berechnungsgebietes in endlich große Elemente [Zienkiewicz, Taylor 2000a, S. 20] | 36 |
| Abbildung 4-6: Berechnungsgebiet Ω mit Rand Γ [Zienkiewicz, Taylor 2000a, S. 40]..... | 38 |
| Abbildung 5-1: Explosionsansicht der Brennstoffzellenstacks | 42 |
| Abbildung 5-2: Elektrolytgestützte Zelle | 43 |
| Abbildung 5-3: Schichtstärken und Werkstoffe der Zelle | 43 |
| Abbildung 5-4: Luftkanäle in der Interkonnektorplatte (Ansicht von unten) | 44 |
| Abbildung 5-5: Abmessungen des Trapezquerschnitts der Luftkanäle (Maße in mm)..... | 45 |
| Abbildung 5-6: Luft Zu- und Ablauf der Stacks..... | 46 |
| Abbildung 6-1: Isometrische Ansicht der Netzgeometrie für die Druckverlustberechnung..... | 48 |
| Abbildung 6-2: Isometrische Detailansicht der Netzgeometrie für die Druckverlustberechnung (links) | 48 |
| Abbildung 6-3: Seitliche Detailansicht der Netzgeometrie für die Druckverlustberechnung (rechts) . | 48 |
| Abbildung 6-4: Ergebnis der Druckverlustberechnung in FIRE für den Nennmassenstrom (Seitenansicht)..... | 49 |
| Abbildung 6-5: Netzgeometrie für die Simulation der Gleichverteilung der Luft..... | 51 |
| Abbildung 6-6: Ergebnis der Gleichverteilungssimulation (300 °C) in einem Surface Cut..... | 52 |
| Abbildung 6-7: Ergebnis der Gleichverteilungssimulation (300 °C) in einem Längsschnitt | 52 |
| Abbildung 6-8: Ergebnis der Gleichverteilungssimulation (300 °C, Querschnitt durch beide Stacks) .. | 53 |
| Abbildung 6-9: Ergebnis der Gleichverteilungssimulation (800 °C) in einem Längsschnitt | 54 |
| Abbildung 6-10: Ergebnis der Gleichverteilungssimulation (800 °C, Querschnitt durch beide Stacks) | 54 |
| Abbildung 7-1: Aufwärmstrategie mit zwei Aufwärmphasen | 56 |
| Abbildung 7-2: Wärmeübergangsrandbedingungen am Kathodenkanal | 57 |

| | |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| Abbildung 7-3: Überführung der Querschnittsfläche eines Kanals auf die Querschnittsfläche eines kreisrunden Rohres..... | 58 |
| Abbildung 7-4: Kreisrundes Rohr als einfaches Ersatzmodell für einen Kathodenkanal (Maßstab ca. 1:1)..... | 58 |
| Abbildung 7-5: Räumliche Diskretisierung des kreisrunden Rohres | 59 |
| Abbildung 7-6: Energieströme über die Grenzen der Finiten Volumen im Inneren des Rohres | 60 |
| Abbildung 7-7: Energieströme über die Grenzen der Finiten Volumen an der vorderen Stirnfläche des Rohres..... | 61 |
| Abbildung 7-8: Flussdiagramm zur Berechnung eines Zeitschrittes bzw. des gesamten Aufwärmprozesses | 62 |
| Abbildung 7-9: Bildschirmansicht der numerischen Berechnung in Microsoft Excel | 66 |
| Abbildung 7-10: Darstellung der Luft- und Wandtemperaturen in einem Diagramm..... | 66 |
| Abbildung 7-11: Luft- und Wandtemperaturen des kreisrunden Rohres nach 320 Sekunden..... | 67 |
| Abbildung 7-12: Luft- und Wandtemperaturen des kreisrunden Rohres nach 2300 Sekunden..... | 68 |
| Abbildung 7-13: Zeitliche Entwicklung der Temperaturen der Rohrwand an Einlass und Auslass..... | 69 |
| Abbildung 7-14 (links): Wand- und Lufttemperaturen nach 550 Sekunden bei $\alpha_{Stirnfläche} = 0 \text{ Wm}^2\text{K}$ | 70 |
| Abbildung 7-15 (rechts): Wand- und Lufttemperaturen nach 550 Sekunden bei $\alpha_{Stirnfläche} = 30 \text{ Wm}^2\text{K}$ | 70 |
| Abbildung 7-16 (links): Wand- und Lufttemperaturen nach 550 Sek. bei individuellen Wärmeübergangskoeffizienten je FV | 71 |
| Abbildung 7-17 (rechts): Wand- und Lufttemperaturen nach 550 Sekunden bei $\alpha = 200 \text{ Wm}^2\text{K} = \text{const.}$ | 71 |
| Abbildung 7-18 (links): Wand- und Lufttemperaturen nach 3000 Sek. bei individuellen Wärmeübergangskoeffizienten je KV | 71 |
| Abbildung 7-19 (rechts): Wand- und Lufttemperaturen nach 3000 Sekunden bei $\alpha = 200 \text{ Wm}^2\text{K} = \text{const.}$ | 71 |
| Abbildung 7-20 (links): Wand- und Lufttemperaturen nach 550 Sekunden bei $\alpha = 100 \text{ Wm}^2\text{K} = \text{const.}$ | 72 |
| Abbildung 7-21 (rechts): Wand- und Lufttemperaturen nach 550 Sekunden bei $\alpha = 300 \text{ Wm}^2\text{K} = \text{const.}$ | 72 |
| Abbildung 7-22: Netz des Festkörpers (grau) und der Luft (blau)..... | 76 |
| Abbildung 7-23: Luft- und Wandtemperaturen zu bestimmten Zeitpunkten des Aufwärmprozesses | 77 |
| Abbildung 7-24 (links): Wand- und Lufttemperaturen nach 550 Sekunden (Python-Modell)..... | 78 |
| Abbildung 7-25 (rechts): Wand- und Lufttemperaturen nach 550 Sekunden (Abaqus-Modell) | 78 |
| Abbildung 7-26 (links): Wand- und Lufttemperaturen nach 3000 Sekunden (Python-Modell)..... | 78 |
| Abbildung 7-27 (rechts): Wand- und Lufttemperaturen nach 3000 Sekunden (Abaqus-Modell) | 78 |

| | |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| Abbildung 7-28 (links): Zeitliche Entwicklung der Wandtemperaturen an Einlass und Auslass (Python-Modell)..... | 79 |
| Abbildung 7-29 (rechts): Zeitliche Entwicklung der Wandtemperaturen an Einlass und Auslass (Abaqus-Modell)..... | 79 |
| Abbildung 7-30: Modell des Stacks mit drei Zellen..... | 79 |
| Abbildung 7-31: Zusammensetzung der Kanalwand aus Interkonnektor (blau) und Zelle (dunkelgrau) | 80 |
| Abbildung 7-32: Stirnfläche des Brennstoffzellenstacks | 81 |
| Abbildung 7-33: Nahaufnahme des Temperaturfeldes des Stacks nach 300 Sekunden..... | 82 |
| Abbildung 7-34 (links): Temperaturfeld des Stacks nach 300 Sekunden (5 min)..... | 83 |
| Abbildung 7-35 (rechts): Temperaturfeld des Stacks nach 600 Sekunden (10 min)..... | 83 |
| Abbildung 7-36 (links): Temperaturfeld des Stacks nach 1200 Sekunden (20 min) | 83 |
| Abbildung 7-37 (rechts): Temperaturfeld des Stacks nach 1800 Sekunden (30 min)..... | 83 |
| Abbildung 7-38 (links): Temperaturfeld des Stacks nach 2700 Sekunden (45 min) | 83 |
| Abbildung 7-39 (rechts): Temperaturfeld des Stacks nach 4500 Sekunden (1 h 15 min)..... | 83 |
| Abbildung 7-40: Nahaufnahme des Temperaturfeldes der Interkonnektorplatte bzw. der zugehörigen Luftkanäle nach 300 s | 84 |
| Abbildung 7-41 (links): Temperaturfeld der Interkonnektorplatte nach 300 Sekunden (5 min)..... | 85 |
| Abbildung 7-42 (rechts): Temperaturfeld der Interkonnektorplatte nach 600 Sekunden (10 min) | 85 |
| Abbildung 7-43 (links): Temperaturfeld der Interkonnektorplatte nach 1200 Sekunden (20 min)..... | 85 |
| Abbildung 7-44 (rechts): Temperaturfeld der Interkonnektorplatte nach 1800 Sekunden (30 min) ... | 85 |
| Abbildung 7-45 (links): Temperaturfeld der Interkonnektorplatte nach 2700 Sekunden (45 min)..... | 85 |
| Abbildung 7-46 (rechts): Temperaturfeld der Interkonnektorplatte nach 4500 Sekunden (1 h 15 min) | 85 |
| Abbildung 7-47: Exemplarisch gewählter Kanal (rot) der Interkonnektorplatte | 86 |
| Abbildung 7-48: Zeitliche Entwicklung der Wandtemperaturen an Einlass und Auslass am Interconnect | 86 |
| Abbildung 7-49: Luft- und Wandtemperaturen nach 300 Sekunden (5 Minuten) | 87 |
| Abbildung 7-50: Luft- und Wandtemperaturen nach 500 Sekunden (8,3 Minuten) | 88 |
| Abbildung 7-51: Luft- und Wandtemperaturen nach 1200 Sekunden (20 Minuten) | 88 |
| Abbildung 7-52: Luft- und Wandtemperaturen nach 2700 Sekunden (45 Minuten) | 89 |
| Abbildung 7-53: Nahaufnahme des Temperaturfeldes der Zelle bzw. der zugehörigen Luftkanäle nach 300 s..... | 89 |
| Abbildung 7-54 (links): Temperaturfeld der Zelle nach 300 Sekunden (5 min) | 90 |
| Abbildung 7-55 (rechts): Temperaturfeld der Zelle nach 600 Sekunden (10 min) | 90 |
| Abbildung 7-56 (links): Temperaturfeld der Zelle nach 1200 Sekunden (20 min) | 90 |

Abbildung 7-57 (rechts): Temperaturfeld der Zelle nach 1800 Sekunden (30 min) 90
Abbildung 7-58 (links): Temperaturfeld der Zelle nach 2700 Sekunden (45 min) 90
Abbildung 7-59 (rechts): Temperaturfeld der Zelle nach 4500 Sekunden (1 h 15 min) 90
Abbildung 7-60: Zeitliche Entwicklung der Wandtemperaturen an Einlass und Auslass an der Zelle.. 91
Abbildung 8-1: Gegenseitige Beeinflussung von Luft- und Wandtemperaturen über die Zeit..... 92
Abbildung 9-1: Detailansicht der Zellschichten (Kathode Schwarz, Elektrolyt gelb, Anode grün)..... 95

Tabellenverzeichnis

Tabelle 2-1: Übersicht über die verschiedenen Brennstoffzellentypen [Nagel 2008, S. 45] 4
Tabelle 6-1: Ergebnisse der FIRE-Simulation des Druckverlustes in Abhängigkeit vom Massenstrom 49
Tabelle 6-2: Ergebnisse der Abschätzung des Druckverlustes mit Hilfe des Moody-Diagrammes 50
Tabelle 7-1: Dauer des Aufwärmprozesses in Abhängigkeit der Wärmeübergangskoeffizienten im Rohr 73
Tabelle 7-2: Einfluss des Beschleunigungsfaktor auf die Energiebilanz bei einem Berechnungszeitraum von 1000 s..... 74

Literaturverzeichnis

Crofer 2010: Crofer 22 APU Datasheet, Edition May 2010, ThyssenKrupp VDM GmbH, Werdohl, Germany

EG&G 2004: Fuel Cell Handbook, 7. Edition, U.S. Department of Energy, Office of Fossil Energy, West Virginia/USA

Eichseder H., Klell M. 2010: Wasserstoff in der Fahrzeugtechnik, 2. Auflage, Vieweg+Teubner Verlag, Wiesbaden

Fire 2010: AVL FIRE Version 2010 Manual, AVL Advanced Simulation Technologies, Graz

Fröhlich J., 2006: Large Eddy Simulation turbulenter Strömungen, 1. Auflage, Teubner Verlag, Wiesbaden

Fuel Cell Markets 2011: Fuel Cell Markets Homepage, www.fuelcellmarkets.com, 23. 8. 2011

Incropera F., De Witt D., 2002: Fundamentals of Heat and Mass Transfer, 5. Auflage, John Wiley & Sons Verlag, Hoboken, New Jersey, USA

Nagel F-P., 2008: Electricity from wood through the combination of gasification and solid oxide fuel cells, Dissertation (ETH Zürich, no. 17856), Zürich

Patankar S. V., 1980: Numerical Heat Transfer and Fluid Flow, McGraw-Hill Verlag, New York

Spurk J. H., Aksel N., 2010: Strömungslehre, 8. Auflage, Springer Verlag, Heidelberg

TU Harburg 2011: TU Harburg Website, <http://www.tu-harburg.de>, 19. 10. 2011

Gnielinski V., 2006: Wärmeübertragung bei der Strömung durch Rohre, in VDI Wärmeatlas, 10. Auflage, Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, Abschnitt Ga

Versteeg H. K., Malalasekera W. 2007: An Introduction to Computational Fluid Dynamics, 2. Auflage, Pearson Education Limited, Harlow, England

Voigt C., Höller S., Küter U. 2007: Brennstoffzellen im Unterricht, 2. Auflage, Hydrogeit Verlag, Kremmen

Zienkiewicz O. C., Taylor R. L., 2000a: The Finite Element Method, Volume 1 (The Basis), 5. Auflage, Butterworth-Heinemann Verlag, Oxford

Zienkiewicz O. C., Taylor R. L., 2000b: The Finite Element Method, Volume 3 (Fluid Dynamics), 5. Auflage, Butterworth-Heinemann Verlag, Oxford