

Modellierung turbulenter Vormischverbrennung

D I S S E R T A T I O N

zur Erlangung des akademischen Grades
Doktor der Ingenieurwissenschaften
im Fach Chemieingenieurwesen

eingereicht an der
Fakultät für Chemieingenieurwesen
Universität Karlsruhe (TH)

von
Herr Dipl.-Ing. Arne B. Hoffmann
geboren am 23.11.1970 in Karlsruhe

Gutachter:

1. Prof. Dr.-Ing. H. Bockhorn
2. Prof. Dr. rer.nat H. Buggisch

eingereicht am: 04.06.2004
Tag der mündlichen Prüfung: 10.12.2004

*Research is what you are doing,
when you do not know what you are doing.*

Wernher Freiherr von Braun

Meinen Eltern gewidmet

Vorwort

Die vorliegende Arbeit entstand während meiner Zeit am Lehrstuhl für Verbrennungstechnik der Universität Karlsruhe (T.H.).

Mein erster Dank gilt meinem Doktorvater Herrn Prof. Dr.-Ing. Henning Bockhorn nicht nur für die Möglichkeit, die Arbeit an seinem Lehrstuhl durchführen zu können und für die Betreuung der Arbeit, sondern auch für das mir entgegengebrachte Vertrauen sowie für die Freiheit in der Bearbeitung der mir gestellten wissenschaftlichen Aufgabe.

Herrn Prof. Dr. rer. nat. Hans Buggisch möchte ich für die Übernahme des Koreferats und für sein wohlwollendes Interesse an meiner Arbeit danken.

Herrn Prof. Dr.-Ing Bernhard Lenze danke ich für die stets hilfsbereite und tatkräftige Unterstützung bei der Bewältigung organisatorischer Probleme des Institutsalltags, Herrn Prof. Dr.-Ing. Nikolaous Zarzalis für sein Interesse an meiner Arbeit.

Mein Dank gilt auch allen Kolleginnen und Kollegen, mit denen ich während meiner Zeit am Lehrstuhl zusammenarbeiten durfte. Die kollegiale Atmosphäre sowie die gemeinsamen Aktivitäten werden mir immer in guter Erinnerung bleiben. Viele der Ergebnisse und Erkenntnisse resultieren aus Anregungen und Diskussionen innerhalb der Theoriegruppe mit Peter Habisreuther, Matthias Hettel, Gerd Knochenhauer und Frank Wetzel. Außerdem gebührt mein Dank meinen Seminar- und DiplomarbeiterInnen Ina Grißtede, Danrong Chen, Dirk Großschmidt und Thomas Lischer, wobei ich mich sehr gefreut habe, daß die beiden letztgenannten mir als wertvolle Kollegen erhalten geblieben sind. Ich möchte außerdem Martin Zajadatz hervorheben, der mir freundlicherweise seine Meßergebnisse zur Verfügung gestellt hat und stets ein wertvoller und kritischer Diskussionspartner gewesen ist. Weiterhin gilt mein Dank meinem langjährigen Zimmerkollegen Stefan Koger für eine schöne Zeit im alten Maschinenbaugebäude und die mir entgegengebrachte Geduld, Wolfgang Paulat und Walter Pfeffinger für die vielfältige Unterstützung im Hard- und Softwarebereich sowie ihr Engagement beim Institutsumbau, das die Heimkehr der Theoriegruppe in das EBI mit ermöglicht hat, Heidi Bösch für ihre Hilfe bei allen Fragen der Projektabrechnung, Klaus Merkle, Christian Kulsheimer, Kai Ehrhardt, Andreas Kufferath, Martin Lohrmann, Volker Ricken als immer hilfsbereite Kollegen in fachlichen wie insbesondere nicht fachlichen gemeinsamen Aktivitäten, die ein besonderes und wertvolles Kennzeichen des Instituts sind und schließlich den „Altvorderen“ Bernd Bartenbach, Andreas Heilos, Michael Ziegler, Günther Sybon und Dieter Stapf für die gelungene Übergabe der Institutstraditionen.

Meinen Eltern danke ich für die Möglichkeit meines Studiums sowie ihren Rückhalt, der die Voraussetzungen für die vorliegende Arbeit gewesen ist. Meinem Vater danke ich zudem für die Durchsicht der Endform der Arbeit sowie für die vielen Anregungen in deren Verlauf.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Motivation	1
1.2	Zielsetzung	3
1.3	Gliederung der Arbeit	5
2	Grundlagen	6
2.1	Allgemeine Gleichungen reaktiver Gasströmungen	6
2.1.1	Erhaltungsgleichungen	6
2.1.2	Phänomenologische Gleichungen	8
2.1.3	Thermodynamische Größen	11
2.1.4	Transportkoeffizienten	12
2.2	Beschreibung homogener Gasphasenreaktionen	14
2.3	Zeitlich mittlere Bilanzgleichungen	17
2.4	Charakterisierung der Turbulenz	20
2.4.1	Turbulenzkaskade	20
2.4.2	Das Energiespektrum	23
2.5	Turbulenzmodelle	26
2.5.1	Wirbelviskositätsmodelle	26
2.5.2	Reynoldsspannungsmodelle	28
2.5.3	Direkte Numerische Simulation	29
2.5.4	Grobstruktursimulation	29
2.5.5	Das k - ε -Modell	30
2.5.6	Das k - ω -Modell	31
2.5.7	Das Baseline-Modell von MENTER	31
2.5.8	Turbulenter Transport von Skalaren	33
2.6	Reduktion von Reaktionsmechanismen	34
2.6.1	Globale Kinetiken	35
2.6.2	Lumping Verfahren	35
2.6.3	Klassische Reduktionsmethoden	36
2.6.4	Dynamische Reduktionsmethoden	38
3	Beschreibung laminarer und turbulenter Vormischverbrennung	43
3.1	Die laminare Vormischflamme	43
3.1.1	Struktur der laminaren ungestreckten Vormischflamme	45
3.1.2	Flammengeschwindigkeit, Flammenfrontgeschwindigkeit und Brenn- geschwindigkeit	46
3.1.3	Die laminare ungestreckte Vormischflamme als Diskontinuitätsfläche	48
3.1.4	Asymptotische Betrachtung für 1-Schritt Reaktionen	49

3.1.5	Asymptotische Betrachtung für Mehrschrittreaktionen	52
3.1.6	Dynamik laminarer Vormischflammen	56
3.2	Phänomenologische Betrachtung turbulenter Vormischverbrennung – Verbrennungsdiagramm	63
3.3	Definition der turbulenten Flammengeschwindigkeit	70
3.4	Überblick über Modelle turbulenter Vormischverbrennung	73
3.4.1	Modelle auf Basis der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion	75
3.4.2	Modelle auf Basis der skalaren Dissipationsrate	77
3.4.3	Modelle auf Basis der Flammenfrontgeometrie	81
3.5	Turbulenter Transport reagierender Skalare	95
4	Das Konzept der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik	97
4.1	Einleitung	97
4.2	Mathematische Beschreibung der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik	100
4.2.1	Definition der Reaktionsfortschrittsvariable	100
4.2.2	Homogenes System	100
4.2.3	„Reaktiv-diffusives“ System	104
4.2.4	Bestimmung der globalen Reaktionsrate des Brennstoffabbaus	107
4.2.5	Bestimmung der Reaktionsgeschwindigkeit in der Ausbrandzone	110
4.2.6	Bestimmung der Radikalkonzentrationen	110
4.3	Ergebnisse der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik für Methan	113
4.3.1	Bestimmung des stöchiometrischen Koeffizienten ν_{O_2}	113
4.3.2	Ergebnisse für das homogene System bei Annahme des Wassergasgleichgewichts	113
4.3.3	Ergebnisse für das homogene System bei Annahme von langsamer CO-Oxidation	117
4.3.4	Bestimmung der kinetischen Parameter	117
4.3.5	Ergebnisse für die laminare Vormischflamme bei Annahme des Wassergasgleichgewichts	120
4.3.6	Ergebnisse für die laminare Vormischflamme bei Annahme langsamer CO-Oxidation	124
4.4	Ergebnisse der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik für höhere Kohlenwasserstoffe	129
4.4.1	Ergebnisse der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik für Propan	129
4.4.2	Ergebnisse der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik für Kerosin	129
4.5	Schlußfolgerungen	133
5	Verbrennungsmodell auf Basis angenommener Wahrscheinlichkeitsdichten	135
5.1	Mathematische Grundlagen	135
5.2	Schließung des Reaktionsquellterms und Bestimmung der zeitlich mittleren Feldgrößen	139
5.3	Angenommene Verteilungen	143
5.3.1	Abgeschnittene Gaußverteilung	143
5.3.2	β -Funktion	144
5.4	Mischungsmodell	147
5.5	Stabilisierungsmodell	150

6	Verbrennungsmodell auf Basis der Flammenfrontoberflächendichte	151
6.1	Allgemeine Transportgleichung der Flammenfrontoberflächendichte	151
6.2	Modellierung der $\bar{\Sigma}$ -Gleichung	154
6.2.1	Oberflächengemittelte Geschwindigkeit	154
6.2.2	Turbulenter Transport	155
6.2.3	Flammenfrontdehnung	156
6.2.4	Propagationsterm	160
6.2.5	Flammenfrontkrümmung	161
6.2.6	Modellierte Form der $\bar{\Sigma}$ -Transportgleichung	163
6.3	Wandquenchmodell	164
6.4	Berücksichtigung detaillierter Chemie	166
6.4.1	Beschreibung des Flamelets	166
6.4.2	Bestimmung der zeitlichen Mittelwerte	168
6.5	Mischungsmodell	170
6.6	Zusammenstellung der untersuchten Modelle	171
7	Numerische Verfahren	174
7.1	Strömungslöser	174
7.2	Linearisierung der Quellterme	177
7.2.1	Flammenfrontoberflächendichte	178
7.2.2	Reaktionsfortschrittsvariable	179
7.2.3	Reaktionsfortschrittsvarianz	180
7.3	Prä- und Postprozessor	182
7.3.1	Tabellen des <i>c</i> -PDF Verbrennungsmodells	182
7.3.2	Tabellen des Flammenfrontdichtemodells	184
8	Ergebnisse und Diskussion	186
8.1	Einordnung der untersuchten Flammen in das Verbrennungsdiagramm	186
8.2	TECFLAM-Bunsenflamme	188
8.2.1	Experimenteller Aufbau	188
8.2.2	Randbedingungen	189
8.2.3	Ergebnisse	191
8.3	Matrixbrenner	201
8.3.1	Experimenteller Aufbau	201
8.3.2	Randbedingungen	201
8.3.3	Ergebnisse für die Testflamme R403	205
8.3.4	Ergebnisse für die Testflamme R309	213
8.3.5	Ergebnisse für die Testflamme R408	220
8.4	JOULE-Flamme	228
8.4.1	Experimenteller Aufbau	228
8.4.2	Randbedingungen	228
8.4.3	Ergebnisse	230
8.5	Schlußfolgerungen	242
8.5.1	Bewertung der Flammenfrontdichtemodelle	242
8.5.2	Bewertung der Wahrscheinlichkeitsdichtemodelle	245
8.6	Ausblick auf weiterführende Arbeiten	246
9	Zusammenfassung	248

Literaturverzeichnis	253
A Reaktionsmechanismen	272
A.1 Detaillierter Reaktionsmechanismus	272
A.2 Reduzierte Kinetiken der Methanverbrennung	273
A.2.1 Der 4-Schritt Mechanismus	273
A.2.2 Der 3-Schritt Mechanismus	275
A.2.3 2-Schritt Mechanismen für die magere Verbrennung	276
A.3 Einschrittkinetik der Methanverbrennung	279
A.4 Abbildung der adiabaten Verbrennungstemperatur	280
A.5 Konstanten der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik	281
B KPP-Theorem	282
C Ableitung der kinematischen Transportgleichung für die Flammenfrontdichte	284
D Schlüsselwörter zur Steuerung der Verbrennungsmodelle in TASCflow	286

Abbildungsverzeichnis

2.1	Turbulenter Freistrah.	20
2.2	Turbulenzstruktur.	21
2.3	Mechanismen der Turbulenz.	22
2.4	Schematische Darstellung des Energiespektrums.	24
2.5	Reaktionsflußanalyse einer stöchiometrischen Methan/Luft Flamme.	34
2.6	Beispiel für eine eindimensionale ILDM einer Methan/Luft Verbrennung.	40
3.1	Struktur einer mageren CH ₄ /Luft Flamme.	44
3.2	Vormischflamme als Diskontinuitätsfläche.	48
3.3	Asymptotische Struktur der Vormischflamme für große Aktivierungsenergien.	49
3.4	Asymptotische Struktur der Vormischflamme für unendlich große Aktivierungsenergien.	51
3.5	Struktur einer vorgemischten Methan/Luft Flamme bei Annahme des Wassergasgleichgewichts.	54
3.6	Struktur einer vorgemischten Methan/Luft Flamme für Wasserstoff im quasistationären Zustand.	55
3.7	Dreidimensionales Flammenfrontelement mit lokalem flammenfrontbezogenem Koordinatensystem.	56
3.8	Vergleich der normierten adiabaten Flammentemperatur als Funktion der Karlovitzzahl für ein Wasserstoff/Luft ($\lambda = 0.2$) und ein Methan/Luft Gemisch ($\lambda = 0.9$).	61
3.9	Gemessene Marksteinzahlen für verschiedene Brennstoffe.	62
3.10	Modifiziertes Verbrennungsdiagramm.	65
3.11	Struktur turbulenter Vormischflammen in Abhängigkeit der Karlovitzzahl Ka_t .	66
3.12	Einordnung unterschiedlicher Flammentypen in das Verbrennungsdiagramm.	69
3.13	Schematische Darstellung der Flammenfrontstruktur nach Damköhler.	70
3.14	Schematische Darstellung prinzipieller Ansätze zur Modellierung turbulenter Vormischverbrennung.	74
3.15	Darstellung des EBU-Modells im Verbrennungsdiagramm.	78
3.16	Darstellung des BML-Modells im Verbrennungsdiagramm.	80
3.17	Darstellung der G-Gleichung im Verbrennungsdiagramm.	82
3.18	Darstellung des Fraktalmodells im Verbrennungsdiagramm.	85
3.19	Darstellung des CPB-Modells im Verbrennungsdiagramm.	87
3.20	Darstellung des ITNFS-Modells im Verbrennungsdiagramm.	88
3.21	Darstellung der CF-3 und CF-3b Modelle im Verbrennungsdiagramm.	89
3.22	Darstellung des MB-Modells im Verbrennungsdiagramm.	91
3.23	Darstellung des Modells von Schmid im Verbrennungsdiagramm.	93
3.24	Gültigkeitsbereich der Gegengradientendiffusion im Verbrennungsdiagramm.	96

4.1	Schematische Darstellung der Vormischverbrennung in einem homogenen System.	101
4.2	Schematische Darstellung der Vormischverbrennung in einem „reaktiv-diffusiven“ System, d.h. einer Vormischflamme.	105
4.3	Exemplarische Darstellung der unkorrigierten, korrigierten und geglätteten H-Atomkonzentration.	112
4.4	Ergebnisse der 2-Bereich Kinetik im homogenen System unter Annahme des Wassergasgleichgewichts für $\lambda \leq 1$	114
4.5	Ergebnisse der 2-Bereich Kinetik im homogenen System unter Annahme des Wassergasgleichgewichts für $\lambda > 1$	115
4.6	Ergebnisse der 2-Bereich Kinetik im homogenen System unter Annahme langsamer CO-Oxidation für $\lambda \leq 1$	118
4.7	Ergebnisse der 2-Bereich Kinetik im homogenen System unter Annahme langsamer CO-Oxidation für $\lambda > 1$	119
4.8	Vergleich berechneter Temperatur- und Konzentrationsverläufe einer Methan/Luft Vormischflamme für unterschiedliche Stöchiometrien und $T_u = 298\text{K}$ unter Annahme des Wassergasgleichgewichts.	121
4.9	Vergleich berechneter Temperatur- und Konzentrationsverläufe einer mageren Methan/Luft Vormischflammen für $T_u = 298\text{K}$ und $T_u = 698\text{K}$ unter Annahme des Wassergasgleichgewichts.	122
4.10	Vergleich berechneter Flammengeschwindigkeiten von Methan unter Annahme des Wassergasgleichgewichts.	123
4.11	Vergleich berechneter Temperatur- und Konzentrationsverläufe einer stöchiometrischen und Methan/Luft Vormischflamme für $T_u = 698\text{K}$ unter Annahme des Wassergasgleichgewichts.	126
4.12	Vergleich berechneter Temperatur- und Konzentrationsverläufe zweier mageren Methan/Luft Vormischflammen für $T_u = 698\text{K}$ unter Annahme des Wassergasgleichgewichts.	127
4.13	Vergleich berechneter Flammengeschwindigkeiten von Methan bei langsamer CO-Oxidation.	128
4.14	Vergleich gemessener und berechneter Flammengeschwindigkeiten von Propan.	130
4.15	Vergleich gemessener und berechneter Flammengeschwindigkeiten von Jet-A.	132
5.1	Zur Definition der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion.	136
5.2	Exemplarische Darstellung der zeitlich mittleren Reaktionsquellterme des c -Pdf Modells.	141
5.3	Zur Veranschaulichung der abgeschnittenen Gaußfunktion.	143
5.4	Beispiele für Verteilungen, die durch die abgeschnittene Gaußfunktion dargestellt werden können.	144
5.5	Funktionaler Zusammenhang zwischen \tilde{c} , \tilde{c}''^2 , c_μ und c_σ	145
5.6	Beispiele für Verteilungen, die durch die β -Funktion dargestellt werden können.	146
5.7	Schematische Darstellung des Mischungsmodells.	148
6.1	Zur Veranschaulichung der Definition der Flammenfrontdichte.	152
6.2	Zur Modellierung der oberflächengemittelten Strömungsgeschwindigkeit.	154

6.3	Schematische Darstellung der Flammenfrontdehnung aufgrund von Änderungen der mittleren Strömung.	156
6.4	Schematische Darstellung der turbulenten Flammenfrontfaltung.	160
6.5	Zur Modellierung des Krümmungsterms.	161
6.6	Schematische Darstellung des Flammenquenchs in Wandnähe.	164
6.7	Schematische Darstellung der zonalen Unterteilung des wandnahen Bereichs durch das modifizierte FIST-Modell.	165
6.8	Schematische Darstellung der Gegenstromflammenkonfiguration.	166
7.1	Schematische Darstellung des in TASCflow verwendeten Kontrollvolumens.	175
7.2	Zur Veranschaulichung der Linearisierung des Destruktionsterms	180
7.3	Schematische Darstellung einer Verbrennungsrechnung mit dem c -PDF Modell.	183
7.4	Schematische Darstellung einer Verbrennungsrechnung mit dem Flammenfrontdichtemodell (CF-5).	185
8.1	Einordnung der Testflammen in das Verbrennungsdiagramm.	187
8.2	Brennerkopf des TECFLAM-Bunsenbrenners.	188
8.3	Strömungsrandbedingungen für Düse und Co-Flow der Testflamme G26.	190
8.4	Gittergeometrie und Randbedingungen der Testflamme G26.	191
8.5	Testflamme G26. Vergleich gemessener und berechneter Axialgeschwindigkeiten sowie der turbulenten kinetischen Energie.	192
8.6	Testflamme G26. Vergleich gemessener und mit Hilfe des CF-1, CF-2, CPB und MB Modells berechneter Methankonzentrationen.	194
8.7	Testflamme G26. Vergleich gemessener und mit Hilfe des CF-3, CF-4 und CF-5 Modells berechneter Methankonzentrationen.	195
8.8	Testflamme G26. Vergleich gemessener und mit Hilfe der Wahrscheinlichkeitsdichtemodelle berechneter Methankonzentrationen.	196
8.9	Testflamme G26. Vergleich gemessener und mit Hilfe des Wahrscheinlichkeitsdichtemodells berechneter CO-Konzentrationen.	198
8.10	Testflamme G26: Flammenfrontstruktur.	200
8.11	Skizze des Matrixbrenners bestehend aus Turbulenzerzeuger, Düse und Wasserstoffstabilisierung.	202
8.12	Verlauf der charakteristischen Geschwindigkeitsschwankung als Funktion des dimensionslosen axialen Abstandes x/D	203
8.13	Gittergeometrie und Randbedingungen der Matrixflammen.	204
8.14	Testflamme R403. Vergleich gemessener und mit Hilfe des k - ω -Modells berechnetem Strömungsfeld.	205
8.15	Testflamme R403. Vergleich gemessener und mit Hilfe des CF-1, CF-2, CPB bzw. MB Modells berechneter Temperaturfelder.	207
8.16	Testflamme R403. Vergleich gemessener und mit Hilfe des CF-3, CF-4 bzw. CF-5 Modells berechneter Temperaturfelder.	208
8.17	Testflamme R403. Vergleich gemessener und mit Hilfe der Wahrscheinlichkeitsdichtemodelle berechneter Temperaturfelder.	209
8.18	Testflamme R403. Vergleich gemessener und mit Hilfe des Wahrscheinlichkeitsdichtemodells berechneter CH_4 sowie CO-Konzentrationen.	210
8.19	Testflamme R403: Flammenfrontstruktur.	212

8.20	Testflamme R309. Vergleich gemessener und mit Hilfe des CF-1, CF-2, CPB bzw. MB Modells berechneter Temperaturfelder.	214
8.21	Testflamme R309. Vergleich gemessener und mit Hilfe des CF-3, CF-4 bzw. CF-5 Modells berechneter Temperaturfelder.	215
8.22	Testflamme R309. Vergleich gemessener und mit Hilfe der Wahrscheinlichkeitsdichtemodelle berechneter Temperaturfelder.	216
8.23	Testflamme R309. Vergleich gemessener und mit Hilfe des Wahrscheinlichkeitsdichtemodells berechneter CH ₄ sowie CO-Konzentrationen.	217
8.24	Testflamme R309: Flammenfrontstruktur.	219
8.25	Testflamme R408. Vergleich gemessener und mit Hilfe des <i>k</i> - ω -Modells berechnetem Strömungsfeld.	220
8.26	Testflamme R408. Vergleich gemessener und mit Hilfe des CF-1, CF-2, CPB bzw. MB Modells berechneter Temperaturfelder.	222
8.27	Testflamme R408. Vergleich gemessener und mit Hilfe des CF-3, CF-4 bzw. CF-5 Modells berechneter Temperaturfelder.	223
8.28	Testflamme R408. Vergleich gemessener und mit Hilfe der Wahrscheinlichkeitsdichtemodelle berechneter Temperaturfelder.	224
8.29	Testflamme R408. Vergleich gemessener und mit Hilfe des Wahrscheinlichkeitsdichtemodells berechneter CH ₄ sowie CO-Konzentrationen.	225
8.30	Testflamme R408: Flammenfrontstruktur.	227
8.31	Skizze des JOULE-Bunsenbrenners bestehend aus Düse und Pilotbrennerplatte.	228
8.32	Gittergeometrie und Randbedingungen der JOULE-Flamme.	229
8.33	Strömungsrandbedingungen für Düse und Pilotbrennerplatte der Testflamme F3.	230
8.34	Testfeld F3. Vergleich von gemessenem und berechnetem isothermen Strömungsfeld.	231
8.35	Testflamme F3. Vergleich von gemessenem und berechnetem reagierendem Strömungsfeld.	232
8.36	Testflamme F3. Vergleich gemessener und mit Hilfe des CF-1, CF-2, CPB und MB Modells berechneter Temperaturfelder.	234
8.37	Testflamme F3. Vergleich gemessener und mit Hilfe des CF-3, CF-4 bzw. CF-5 Modells berechneter Temperaturfelder.	235
8.38	Testflamme F3. Vergleich gemessener und mit Hilfe der Wahrscheinlichkeitsdichtemodelle berechneter Temperaturfelder.	236
8.39	Testflamme F3: Flammenfrontstruktur.	239
8.40	Testflamme F3H. Vergleich gemessener und mit Hilfe des CPDF-1B Modells berechneter Konzentrationsverläufe.	240
8.41	Testflamme F3. Vergleich gemessener und mit Hilfe des CF-5 Modells berechneter Konzentrationsverläufe.	241

Tabellenverzeichnis

2.1	Konstanten des Standard k - ε -Modells.	31
2.2	Konstanten des k - ω -Modells von WILCOX.	31
2.3	Konstanten des Baseline-Modells von MENTER.	32
6.1	Konstanten der untersuchten Flammenfrontdichtemodelle	173
8.1	Globale charakteristische Betriebsbedingungen der untersuchten Flammen.	186
8.2	Randbedingungen der Testflamme G26.	191
8.3	Randbedingungen der Matrixflammen R403, R408 und R309.	204
8.4	Randbedingungen der Testflamme F3.	229
9.1	Zusammenstellung und Bewertung der untersuchten Modellansätze. Gute Wiedergabe des Experiments: (+), Schlechte Wiedergabe des Experiments: (-), Bedingt gute Wiedergabe (0).	251
A.2	Parameter zur Beschreibung der adiabaten Verbrennungstemperatur von Methan.	280
A.3	Parameter zur Beschreibung der adiabaten Verbrennungstemperatur von Propan.	280
A.4	Parameter zur Beschreibung der adiabaten Verbrennungstemperatur von Jet-A.	280
A.5	Konstanten der Brennstoffabbaureaktion der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik.	281
A.6	Stöchiometrische Koeffizienten der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik.	281

Nomenklatur

Lateinische Symbole

A_{c^*}	m^2	Flammenfrontoberfläche
a		Koeffizienten eines Polynoms
B	mol, m, s, K	präexponentieller Faktor des Arrhenius Ansatzes
b		Temperaturrexponent des Arrhenius Ansatzes
c		Reaktionsfortschrittvariable
c_μ		Erwartungswert der Gaußfunktion
c_σ		Varianz der Gaußfunktion
c_a		Parameter der β -Funktion
c_b		Parameter der β -Funktion
C_k	mol/m ³	molare Konzentration der Komponente k
C_μ		Proportionalitätskonstante der turbulenten Viskosität
C_ϕ		Proportionalitätskonstante in der Transportgleichung eines Skalars ϕ
c_p	J/kg·K	spezifische Wärmekapazität bei konstantem Druck
D_{kl}	m ² /s	binärer Diffusionskoeffizient der Komponente k in die Komponente l
D_k	m ² /s	Diffusionskoeffizient der Komponente k in der Mischung
D_t	m ² /s	turbulente Diffusivität
Da		Damköhlerzahl
\hat{d}		Varianz der Reaktionsfortschrittvariable \tilde{c}^{r2}
E		Tensor
E_A	J	Aktivierungsenergie
Eu		Euckenkorrektur
e_k	J/kg	Spezifische innere Energie der Komponente k
F		Koeffizient der 2-Bereich Kinetik
F	kg/m ³ ·sec	Stromfunktion der eindimensionalen Gegenstromflamme
f		Mischungsbruch
f_t		dimensionslose Funktion des Modellenergiespektrums für den integralen Bereich
f_η		dimensionslose Funktion des Modellenergiespektrums für den dissipativen Bereich
G		Indikatorfunktion des G -Gleichungsmodells
G	kg/m ³ ·sec	Ableitung der Stromfunktion F
ΔG°	J/mol·K	molare freie Reaktionsenthalpie

g		Konstante des BML-Modells
g		Varianz des Mischungsbruchs $\widetilde{f''^2}$
g_k	J/kg	spezifische freie Enthalpie der Komponente k
h_k	J/kg	spezifische Enthalpie der Komponente k
I		Einheitstensor
J		Jacobi-Matrix
\mathbf{j}_k	kg/m ² ·s	Diffusionsstromdichte der Komponente k
\mathbf{j}_k^d	kg/m ² ·s	Massendiffusionsstromdichte der Komponente k
\mathbf{j}_k^T	kg/m ² ·s	Thermodiffusionsstromdichte der Komponente k
\mathbf{j}_{korr}	kg/m ² ·s	Korrekturterm der Diffusionsstromdichte
\mathbf{j}_q^c	W/m ² ·s	Energiestromdichte aufgrund von Wärmeleitung
\mathbf{j}_q^d	W/m ² ·s	Energiestromdichte aufgrund von Massendiffusion
K	1/s	Dehnungsrate der Flammenfront
K_A	1/s	Dehnungsrate bezogen auf die Flammenfrontoberfläche
K_m	1/s	Dehnungsrate der Flammenfront aufgrund der zeitlich mittleren Strömung
K_t	1/s	Dehnungsrate der Flammenfront aufgrund turbulenter Wirbel
$K_{C,i}$	mol, m ³	Gleichgewichtskonstante der Reaktion i
Ka		Karlovitzzahl
Ka^*		verallgemeinerte Karlovitzzahl unter Annahme der AEA
Ka_k		verallgemeinerte Karlovitzzahl der Komponente k
Ka_T		verallgemeinerte Karlovitzzahl der Temperatur
k	m ² /s ²	kinetische Energie
k_{fi}	mol, m,	Geschwindigkeitskoeffizient der Hinreaktion i
	K	
k_{bi}	mol, m,	Geschwindigkeitskoeffizient der Rückreaktion i
	K	
L_y	m	Längenmaß der Flammenfrontkrümmung
Le	m	Lewiszahl
l_c	m	kritisches Längenmaß (<i>cut-off scale</i>)
l_F	m	charakteristische Dicke der laminaren Vormischflamme
l_G	m	Gibson-Längenmaß
l_t	m	integrales turbulentes Längenmaß
l_δ	m	Dicke der Reaktionszone der laminaren Vormischflamme
l_η	m	Kolmogorov-Längenmaß
Ma		Marksteinzahl
M	kg	Masse
M		oberflächengemittelter Wert der Flammennormalen
m		globale Ordnung einer Bruttoreaktion
\dot{m}	kg/m ² ·s	Massenstromdichte
m		oberflächengemittelter Wert des fluktuierenden Anteils der Flammennormalen
N_B		Brayzahl
N_i		Anzahl der Reaktionen i
N_k		Anzahl der chemischen Komponenten k
n		globale Ordnung einer Bruttoreaktion

\mathbf{n}		Normalenvektor
O		Koeffizient der 2-Bereich Kinetik
o	kg/kg	Massenanteil Sauerstoff in der Luft (Oxidationsmittel)
P_k	J/m ³ ·s	Produktionsrate der turbulenten kinetischen Energie
Pr		Prandtlzahl
p	N/m ²	Druck
q_i	kg/m ³ ·s	Reaktionsgeschwindigkeit der Reaktion i
\mathbf{R}		Tensor der Ortskorrelation
Re		Reynoldszahl
Re_t		turbulente Reynoldszahl
r	m	Radius
r		massenbezogener stöchiometrischer Koeffizient
\dot{r}_i	1/s	Reaktionsgeschwindigkeit der i -ten Reaktion
S_c	m/s	Brenngeschwindigkeit
S_F	m/s	lokale Ausbreitungsgeschwindigkeit der Flammenfront
S_l	m/s	Flammgeschwindigkeit der laminaren planaren Flammenfront
S_t	m/s	turbulente Flammgeschwindigkeit
Sc		Schmidtzahl
s_k	J/mol·K	Spezifische Entropie der Komponente k
T	K	Temperatur
\mathbf{T}	N/m ²	Zähigkeitsspannungstensor
t	s	Zeit
t_F	s	chemisches Zeitmaß der Flamme
t_t	s	integrales turbulentes Zeitmaß
t_η	s	dissipatives turbulentes Zeitmaß
\mathbf{U}		Matrix der rechten Eigenvektoren
\mathbf{U}^{-1}		Matrix der linken Eigenvektoren
\mathbf{u}	m/s	Strömungsgeschwindigkeit
u_t	m/s	R.M.S-Wert der Strömungsgeschwindigkeit
u_η	m/s	charakteristische Geschwindigkeit der Kolmogorov-Wirbel
V	m ³	Volumen
W_k	kg/mol	Molgewicht der Komponente k
w_y	kg/m ³	Reaktionsumsatz pro Flammendurchgang
\dot{w}_k	kg/m ³ ·s	Produktionsgeschwindigkeit der Komponente k
\mathbf{w}	m/s	Absolutgeschwindigkeit eines materiellen Punktes
X_k	mol/mol	Molenbruch der Komponente k
\mathbf{x}	kg/kg	Ortskoordinaten (x, y, z)
Y_k	kg/kg	Massenbruch der Komponente k
Z_j	kg/kg	Elementmassenbruch des Elements j
Ze		Zel'dovichzahl

Griechische Symbole

α	gewichtetes Verhältnis von CO zu H ₂ in der Ausbrandzone
----------	---

β		Verhältnis von CO zu H ₂ in der Ausbrandzone
$\bar{\Gamma}_k$		Effektivitätsfunktion des ITNFS-Modells
γ		thermischer Expansionsfaktor
δ		Dirac-Funktion
δ		Expansionsfaktor der Reaktionszone
ε		Expansionsfaktor der Ausbrandzone
ε	m ² /s ²	Dissipationsrate der kinetischen Energie
$\tilde{\zeta}$	m	turbulente Längenskala
ζ_j	mol/kg	molspezifischer Elementmassenbruch des Elements j
Θ_k		Thermodiffusionsverhältnis der Komponente k
κ		Flammenfrontkrümmung
$\boldsymbol{\kappa}$	1/m	Wellenzahlvektor
$\boldsymbol{\Lambda}$		Matrix der Eigenwerte
λ	W/m ² ·K	Wärmeleitfähigkeit
λ		Luftzahl
λ_n		n -ter Eigenwert
μ	kg/m·s	dynamische Viskosität
μ_d	kg/m·s	Volumenviskosität
μ_t	kg/m·s	turbulente Viskosität ($\mu_t = C_\mu \tilde{k}^2 / \tilde{\varepsilon}$)
ν	m ² /s	kinematische Viskosität
ν		Expansionsfaktor der Vorwärmzone
$\bar{\nu}_y$	1/s	zeitlich mittlere Flammendurchgangsfrequenz
$\nu_k^{(j)}$		Anzahl der Atome j im Molekül k
ν_{ki}		stöchiometrischer Koeffizient der Komponente k in der i -ten Reaktion $\nu_{ki} \equiv \nu_{ki}^- - \nu_{ki}^+$
ν_{ki}^+		stöchiometrischer Koeffizient des Edukts k in der i -ten Reaktion
ν_{ki}^-		stöchiometrischer Koeffizient des Produkts k in der i -ten Reaktion
Ξ	1/m	Flammenfrontkrümmung
$\boldsymbol{\xi}$	m	Flammenfrontbezogenes Koordinatensystem
ρ	kg/m ³	Dichte
Σ	m ² /m ³	Flammenfrontoberflächendichte
σ	m ² /kg	massenspezifische Flammenfrontoberflächendichte
σ_k	m	effektiver Stoßquerschnitt der Komponente k
σ_{kl}	m	arithmetisch gemittelter Stoßquerschnitt der Komponenten k und l
$\bar{\sigma}_y$		zeitlich mittleres Produkt aus momentaner Flammenfrontorientierung und Ausbreitungsrichtung der turbulenten Flammenfront
T		Glättungsfunktion der 2-Bereich Kinetik
τ		Wärmefreisetzungsparameter
Φ		Korrekturfunktion der 2-Bereich Kinetik
ϕ		skalare Feldgröße
χ	1/s	skalare Dissipationsrate
$\boldsymbol{\xi}$	m	Koordinaten eines bewegten Systems (ξ, η, ζ)
ξ		dimensionslose Flammenkoordinate

Ψ		Tensor der Verteilungsfunktion der Geschwindigkeitsfluktuationen
ψ_k	mol/kg	spezifische Molzahl der Komponente k
$\hat{\psi}_k$		molspezifische Konzentrationen im Raum der Eigenvektoren
Ω_c	kg/m ² ·s	Umsatzgeschwindigkeit der Flammenfront
$\Omega_k^{(1,1)}$		reduziertes Stoßintegral der Komponente k
$\Omega_k^{(2,2)}$		Stoßintegral der Komponente k
ω		dimensionslose Produktionsgeschwindigkeit
$\dot{\omega}_k$	mol/m ³ ·s	Molare Produktionsrate der Komponente k

Lateinische kaligraphische Symbole

\mathcal{A}		Wahrscheinlichkeit unverbranntes Gemisch vorzufinden
\mathcal{B}		Wahrscheinlichkeit verbranntes Gemisch vorzufinden
\mathcal{C}		Wahrscheinlichkeit reagierendes Gemisch vorzufinden
\mathcal{D}	m ² /s ³	Dissipation von \mathcal{E}
\mathcal{D}		Verteilungsfunktion
\mathcal{E}	m ² /s ²	Energiedichtespektrum
\mathcal{F}		Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion des reagierenden Gemischs
\mathcal{G}		Gaußfunktion
\mathcal{H}		Heavyside-Funktion
\mathcal{P}		Wahrscheinlichkeitsdichte
\mathcal{R}	J/mol·K	Universelle Gaskonstante
\mathcal{T}	m ² /s ³	Umverteilung von \mathcal{E} im Trägheitsbereich

Subskripte

<i>ad</i>	adiabatischer Zustand
<i>b</i>	ausreagierter Zustand
<i>char</i>	charakteristischer Wert
<i>F</i>	Brennstoff
<i>iso</i>	isotrop
<i>kin</i>	kinetisch
<i>L</i>	Luft
<i>l</i>	laminar
<i>Ox</i>	Oxidator
<i>P</i>	Produkt
<i>R</i>	Frischgemisch
<i>ref</i>	Referenzwert
<i>t</i>	turbulent
<i>u</i>	unreagierter Zustand
η	Kolmogorov-Bereich

Superskripte

\circ	Standardzustand ($p^\circ = 1 \text{ bar}$, $T^\circ = 298 \text{ K}$)
0	bezogen auf die Reaktionszone der laminaren Vormischflamme oder eine ungestreckte planare laminare Vormischflamme
<i>eq</i>	thermodynamisches Gleichgewicht
<i>PEQ</i>	partielles Gleichgewicht
<i>QSSA</i>	quasistationärer Zustand
<i>Z</i>	Übergang von der Vorwärmzone zur Reaktionszone

Operatoren

$(\cdot)'$	Reynolds-Schwankungswert
$(\cdot)''$	Favre-Schwankungswert
$\overline{(\cdot)}$	Reynolds-Mittelwert
$\widetilde{(\cdot)}$	Favre-Mittelwert
$\langle \cdot \rangle_s$	oberflächengemittelter Wert
\mathcal{L}	Transportoperator

Kapitel 1

Einleitung

1.1 Motivation

Die ausreichende Verfügbarkeit von Energie ist die Grundlage für Produktion, Dienstleistung, Mobilität und Kommunikation. Sie trägt auf diese Weise maßgeblich zu unserem Wohlbefinden, zu Wohlstand und zur Entwicklung einer modernen Industrie- und Wissensgesellschaft bei. Energietechnologie verbindet in besonderer Weise Chancen zur Erhöhung der Prosperität einer Volkswirtschaft und Risiken durch nachgelagerte Umweltschäden, die zur Belastung nachfolgender Generationen führen können. Das Zusammenspiel von überproportionalem Wachstum der Weltbevölkerung verbunden mit einem Anstieg des Energieverbrauchs und begrenzten Rohstoffreserven erfordern andererseits bereits heute ressourcen- und umweltschonende Verfahren zur nachhaltigen Energieerzeugung. Bei der Verbrennung fossiler Energieträger entstehen eine Reihe von Schadstoffen, die mehr oder minder umweltschädigend sind. Außerdem ist heute bekannt, daß das beim Verbrennungsprozeß zwangsläufig gebildete Kohlendioxid maßgeblich zur Erwärmung der Erdatmosphäre beiträgt. In mittelfristiger Hinsicht besteht aber zu der Verbrennung fossiler Energieträger keine wirtschaftliche Alternative. Kernenergie kommt wegen der ungeklärten Entsorgungsfrage und aus politischen Gründen nicht in Betracht. Regenerative Energiequellen wie Sonnenenergie, Windkraft oder Erdwärme sind entweder wirtschaftlich nicht konkurrenzfähig oder besitzen kein ausreichendes Potential. Daher kommt der effizienten Nutzung fossiler Brennstoffe in der nächsten Zeit besondere Bedeutung zu.

Im Jahr 2020 werden voraussichtlich 90% des Energiebedarfs durch fossile Brennstoffe gedeckt werden. Erdgas wird dabei mit einem Anteil von heute knapp 30% eine wichtige Stellung einnehmen, da es von allen Kohlenwasserstoffen das niedrigste C:H Verhältnis besitzt, und damit am ehesten zur angestrebten Decarbonisierung beitragen kann. Zudem besitzt die bisher bekannten Erdgasvorräte eine größere Nutzungsreichweite als die Erdölvorkommen.

Der größte Anteil der momentan freigesetzten anthropogenen Kohlendioxid- und Stickoxid-Emissionen hat seinen Ursprung in der Verbrennung fossiler Energieträger¹. Nennenswerte Schadstoffreduktionen werden zur Zeit vor allem durch den Einsatz von Sekundärmaßnahmen, wie z. B. Katalysatoren, erzielt. Der Verbrennung nachgeschaltete Maßnahmen sind aber immer mit einem hohen apparativen Aufwand und somit mit zusätzlichen Kosten verbunden. Ein Ziel der Verbrennungsforschung ist daher, effiziente und

¹Deutsches Nationales Komitee des Weltenergieerates (DNK), Energie für Deutschland Fakten, Perspektiven und Positionen im globalen Kontext.

schadstoffarme Verbrennungsprozesse zu gestalten. Als eine zukunftsfähige Verbrennungsführung hat in den letzten Jahren vor allem das Konzept der mageren Vormischverbrennung besondere Aufmerksamkeit erfahren. Hierbei wird dem Brennraum ein bereits homogen vermisches, zündfähiges Brennstoff/Luft Gemisch zugeführt, welches dort gezündet und verbrannt wird. Das Gemisch zeichnet sich durch einen hohen Luftüberschuß aus, wodurch niedrige Verbrennungstemperaturen realisiert werden, was eine weitestgehende Unterdrückung der Stickoxidbildung zur Folge hat. Aufgrund der mageren Verhältnisse wird zugleich ein vollständiger Ausbrand sichergestellt, wodurch zusätzlich die Bildung von Ruß unterdrückt und die Emissionen von Kohlenmonoxid minimiert werden. Das Konzept der mageren Vormischverbrennung wird zur Zeit in den meisten technischen Systemen, wie Ottomotor, Dieselmotor (HCCI Konzept², engl.: *Homogenous Charged Compression Ignition*), Gasturbine, Haushaltsbrenner und Industriebrenner, angewendet bzw. erprobt. Im Fall von flüssigen Einsatzstoffen wird durch der Brennstoff durch eine der Verbrennung vorgeschaltete Zerstäubung und Verdampfung aufbereitet (LPP Konzept, engl.: *Lean Prevaporazied Premixed*). Allerdings ist diese Art der Verbrennungsführung auch mit einigen Schwierigkeiten verbunden, wie Flammenrückschlag, thermoakustischem Instabilitäten und Selbstzündung.

In der Vergangenheit stützte sich die Brennerneuentwicklung zum größten Teil auf Erfahrung und experimentelle Untersuchungen. Die empirische Weiterentwicklung von Verbrennungsprozessen ist aber nicht mehr ausreichend, um die Anforderungen, die an innovative Verbrennungskonzepte gestellt werden, in einem vertretbaren Zeitrahmen zu erfüllen. Es ist vielmehr ein tiefergehendes Verständnis der ablaufenden chemischen und physikalischen Prozesse erforderlich. Dieses kann aber nur im Zusammenspiel von generischen Experimenten, mathematischer Modellbildung und numerischer Simulation erworben werden. Messungen liefern immer nur Momentaufnahmen von Zuständen, die aus dem komplexen Zusammenspiel vieler Teilprozesse resultieren. Sie sind zwar damit unverzichtbare Basis aller Modellentwicklungen, Aussagen über die Bedeutung der einzelnen Teilprozesse erlauben sie aber nur bedingt. Hierzu sind mathematische Modelle erforderlich, die mit Hilfe numerischer Verfahren gelöst und anhand neuer Meßergebnisse validiert werden können. In der Vergangenheit war die Simulation von Verbrennungsprozessen auf einfache, technisch irrelevante Systeme beschränkt und das Objekt wissenschaftlicher Forschung. Diese Forschung hat aber im letzten Jahrzehnt zu praktikablen und verlässlichen Modellen geführt, die im Zusammenspiel mit der gestiegenen Leistung moderner Computer die Möglichkeit eröffnet, technisch relevante Systeme zu simulieren. Auch wenn diese Modellrechnungen einen komplexen Verbrennungsvorgang noch nicht vollständig beschreiben können, so stellen sie doch mittlerweile ein Auslegungswerkzeug dar, welches in der Entwicklung moderner Verbrennungsanlagen zunehmend Bedeutung erfährt. Hinter der verstärkt modellgestützten Entwicklung stehen vermehrte Anstrengungen der Industrie, in Zusammenarbeit mit Hochschulen und Forschungsanstalten anwendungsorientierte Modelle und numerische Verfahren zur Simulation reagierender Strömungen zu entwickeln. Auf deutscher Ebene sind hier z. B. die Arbeitsgemeinschaft TECFLAM und das Projekt AG Turbo, auf europäischer das JOULE, LowNOX und CFD4C Programm zu nennen. Auch die US-Amerikaner haben Projekte mit ähnlichen Zielsetzungen aufgelegt. Die erfolgreiche Anwendung von numerischer Strömungssimulation (CFD, engl.: *Computational*

²Die Kompressionszündung eines homogenen Gemisches vereint ottomotorische (homogene Gemischbildung) mit dieselmotorischen (Kompressionszündung) Merkmalen und führt zu drastischen NO_x-Reduktionen bei Vermeidung von Rußemissionen.

Fluid Dynamics) im industriellen Umfeld setzt jedoch voraus, daß die der Verbrennung zugrundeliegenden physikalisch- chemischen Prozesse mit der erforderlichen Genauigkeit bei gleichzeitig minimalen Aufwand beschrieben werden können.

1.2 Zielsetzung

Die bei der turbulenten Vormischverbrennung auftretenden Phänomene lassen sich in drei Teilbereiche gliedern: Turbulenzmodellierung, Chemie der Verbrennung und die Interaktion dieser beiden Prozesse. Die meisten technischen Verbrennungsprozesse finden unter turbulenten Strömungsbedingungen statt, da nur durch turbulente Transportprozesse die erforderliche Energiedichte sichergestellt werden kann. Turbulente Strömungen stellen auch ohne überlagerte Verbrennung ein äußerst komplexes Phänomen dar, welches immer noch Gegenstand intensiver Forschung ist. Der Einsatz von fortgeschrittenen Modellen, wie z. B. die Grobstruktursimulation (LES, engl.: *Large Eddy Simulation*) oder gar eine direkt numerische Simulation (DNS; engl.: *Direct Numerical Simulation*) ist zwar wünschenswert, verbietet sich aber aufgrund des damit verbundenen Rechenaufwands. Deshalb werden zur Simulation komplexer, turbulenter, reagierender Strömungen fast immer einfachere Turbulenzmodelle, sogenannte zeitgemittelte Verfahren (RANS, engl.: *Reynolds Averaged Navier Stokes*) eingesetzt. Obwohl die Einschränkungen dieser Modelle bekannt sind, gibt es bisher keine überzeugende Alternative, insbesondere im Hinblick auf die Simulation industrieller Probleme. Da die im Rahmen dieser Arbeit entwickelten Verbrennungsmodelle industriellen Anforderungen gerecht werden sollen, und der Schwerpunkt auf der Beschreibung der Interaktion von Turbulenz und Verbrennung lag, wurde auf einfachere RANS-Modelle zur Berechnung der turbulenten Strömung zurückgegriffen. Zudem wurden einfache Strömungssysteme zur Validierung der Verbrennungsmodelle ausgewählt, die durch die Turbulenzmodelle mit ausreichender Genauigkeit beschrieben werden.

Neben der Strömung spielt bei Vormischflammen die Chemie der Verbrennung eine maßgebliche Rolle. Sie stellt ebenfalls ein komplexes Problem dar, da sie nicht nur eine Vielzahl von chemischen Spezies und Reaktionen umfaßt sondern auch innerhalb sehr unterschiedlicher Zeitskalen verläuft. Mit Hilfe von detaillierten Reaktionsmechanismen, wie sie für gasförmige Brennstoffe existieren, lassen sich zwar detaillierte Kenntnisse über die Flammenstruktur sowie Schadstoffe gewinnen, es ist jedoch aufgrund des damit verbundenen Rechenaufwands auch auf absehbare Zeit nicht möglich, diese auf turbulente Strömungsvorgänge anzuwenden. Daher kommen bei der Modellierung turbulenter Verbrennungsprozesse immer reduzierte Reaktionsmechanismen zum Einsatz, die nur wenige Spezies und Reaktionen umfassen, aber die wesentlichen Charakteristiken der Flamme, wie z.B. die Brenngeschwindigkeit, in einem beschränkten Parameterbereich wiedergeben zu können.

Zentrales Problem der Modellierung turbulenter vorgemischter Verbrennung ist die angemessene Beschreibung der Interaktion von Turbulenz und Verbrennung. Dies gilt insbesondere für die Modellierung des zeitlich mittleren Reaktionsquellterms, der sich nicht geschlossen darstellen läßt. Alle turbulenten Reaktionsmodelle basieren auf charakteristischen Zeit- sowie Längenskalen von turbulenter Strömung und der Chemie, die mehrere Größenordnungen umfassen. Sind die charakteristischen Zeitmaße der Strömung, d. h. der Mischung, viel größer als die der im allgemeinen schnell ablaufenden Chemie, dann können die beiden Prozesse entkoppelt voneinander betrachtet werden. Sind sie dagegen,

wie im Fall der hochturbulenten Verbrennung, die sich durch extrem kurze Mischzeiten auszeichnet, in der gleichen Größenordnung, dann ist eine entkoppelte Beschreibung nicht zulässig.

In diesem Fall besteht ein möglicher Lösungsansatz in der Einführung einer Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion, mit deren Hilfe der zeitlich mittlere Reaktionsquellterm bestimmt werden kann. Das Modellierungsproblem verschiebt sich somit auf die Bestimmung der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion. Diese Arbeit beschäftigt sich mit angenommenen Formen von Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen, da diese einen guten Kompromiss zwischen vertretbarem Rechenaufwand und angestrebter Aussagegenauigkeit darstellen. Die verwendete Methode setzt aber voraus, dass der Reaktionsverlauf durch eine einzige Reaktionsfortschrittsvariable beschrieben werden kann. Deshalb wurde auf der Basis von Quasistationaritäts- und partiellen Gleichgewichtsannahmen das Konzept der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik entwickelt, um dieser Forderung Rechnung zu tragen. Die Methode der angenommenen Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion ist immer dann erfolgversprechend, wenn es ausreicht, die Interaktion zwischen turbulenter Strömung und chemischer Reaktion, durch ihre Statistik zu beschreiben. Messungen zeigen aber, daß die Wechselwirkungen zwischen turbulenten Wirbelelementen und der Flammenfront nicht immer regellos sind. Hierbei wird angenommen, daß die instationäre, dreidimensionale, turbulente Flammenstruktur durch ein Ensemble von quasistationären, eindimensionalen, laminaren Flammenstrukturen, sogenannten „Flamelets“, angenähert werden kann. Die Abläufe chemischer und strömungsmechanischer Prozesse können in diesem Fall unabhängig voneinander betrachtet, d. h. chemische und turbulente Zeit- und Längenskalen können separiert werden. Verbrennungsmodelle, für die diese Näherung zutrifft, werden daher auch als Flamelet-Modelle bezeichnet. Die in dieser Arbeit verwendeten Flamelet-Modelle basieren auf dem Konzept der „kohärenten Flamme“. Hierbei wird die zeitlich mittlere Reaktionsgeschwindigkeit über die laminare Flammengeschwindigkeit und die lokal zur Verfügung stehende Flammenfrontoberflächendichte bestimmt. Die Flammengeschwindigkeit repräsentiert Einflüsse der Chemie, während die Flammenfrontoberflächendichte implizit die Interaktion von Chemie und Turbulenz beinhaltet. Für sie kann eine Transportgleichung aufgestellt werden, die alle relevanten Prozesse wie konvektiver und turbulenter Transport, Bildung und Abbau beschreibt. Außerdem ist es mit diesem Ansatz möglich, den Einfluß detaillierter Chemie zu berücksichtigen. Die Arbeit vergleicht in der Literatur vorgeschlagene Modelle und stellt eine neue Formulierung der Transportgleichung der Flammenfrontdichte im Kontext favregemittelter Erhaltungsgleichungen vor. Dieses Modell wurde zudem um Teilmodelle zur Berücksichtigung von Wand- sowie nicht-isenthalpischen Effekten erweitert. Die Anwendbarkeit der Verbrennungsmodelle auf technisch relevante Systeme nimmt im Rahmen dieser Arbeit einen besonderen Stellenwert ein. Daher wurden sie in den kommerziellen Strömungslöser TASCflow3d implementiert, der die Lösung beliebiger zwei- und dreidimensionaler turbulenter, regierender Strömungen erlaubt. Die Modelle wurde anhand detailliert vermessener Vormischflammen validiert und miteinander verglichen. Die Testflammen umfassen sowohl nieder als auch hochturbulente Flammen: Das Verhalten der Modelle im Bereich schwacher und mittlerer Turbulenzintensität wurde anhand einer Standard-Bunsenflamme, die im Rahmen des TECFLAM Forschungsvorhabens vermessen wurde, untersucht. Das sogenannte Matrixbrennersystem wurde im Hinblick auf die Erforschung gasturbinenspezifischer Verbrennung entwickelt und zeichnet sich durch sehr hohe Turbulenzintensitäten und Reynoldszahlen aus. Die vermessenen Testflammen eignen sich daher hervorragend zur Validierung der Verbrennungsmodelle im hochturbulenten Bereich. Der Einfluß der Flammenfrontstreckung wurde schließlich

anhand einer turbulenten, vorgemischte Freistrahlf Flamme, die sich durch sehr große Karlovitzzahlen auszeichnet, untersucht.

1.3 Gliederung der Arbeit

Das folgende Kapitel gibt zunächst einen Überblick über die wichtigsten Gleichungen zur Beschreibung turbulenter reagierender Strömungen. Diese bilden die Grundlage für Kapitel 3, in dem anhand eines Literaturüberblicks die wesentlichen Ansätze zur Beschreibung der laminaren und turbulenten Vormischverbrennung vorgestellt werden. Im Vorgriff auf die Diskussion der Ergebnisse in Kapitel 8 werden die turbulenten Verbrennungsmodelle zudem anhand der turbulenten Flammengeschwindigkeit als charakteristische Kenngröße turbulenter Vormischverbrennung klassifiziert und bewertet. Eine neue, dimensionsanalytisch motivierte Darstellung im Verbrennungsdiagramm ermöglicht hierbei einen schnellen Überblick über die Eigenschaften und Gültigkeitsbereiche der Modelle. Die in Kapitel 3 aufgezeigten Theorien zur asymptotischen Beschreibung laminarer Flammenfronten bilden die Grundlage der bereits erwähnten 2-Bereich-1-Schritt Kinetik. Diese wird in Kapitel 4 abgeleitet und ihre Anwendbarkeit anhand der Verbrennung von Methan sowie höherer Kohlenwasserstoffe demonstriert. Kapitel 5 und 6 befassen sich mit der Ableitung und Modellierung der angewendeten turbulenten Verbrennungsmodelle. Die Implementierung der Modelle in den kommerziellen Strömungslöser TASCflow sowie die im Rahmen dieser Arbeit entwickelten Programme für das Prä- und Postprocessing ist Thema von Kapitel 7. Eine Bewertung der verwendeten Verbrennungsmodelle anhand eines breiten Spektrums detailliert vermessener turbulenter Vormischflammen findet sich in Kapitel 8. Dieses enthält zudem einen Ausblick auf weiterführende Untersuchungen. Eine Zusammenfassung der wichtigsten Ergebnisse beschließt die Arbeit.

Kapitel 2

Grundlagen

2.1 Allgemeine Gleichungen reaktiver Gasströmungen

Die Grundlage für die Berechnung von reagierenden Gasgemischen bilden die Bilanzgleichungen der Kontinuumsmechanik. Diese setzen sich aus der Massen- und Impulsbilanz, anhand derer die örtlichen Geschwindigkeiten und der Druck bestimmt, und den Erhaltungsgleichungen für die Konzentrationen der reagierenden Komponenten sowie der Enthalpie, aus denen die Temperatur und damit die Dichte berechnet werden, zusammen. Die mit der Wärmefreisetzung einer Verbrennungsreaktion verbundene Dichteänderung wirkt schließlich auf das Strömungsfeld zurück. Daher ist es notwendig zur vollständigen Beschreibung der Wechselwirkung von Chemie und Strömung alle im folgenden vorgestellten Bilanzgleichungen zu berücksichtigen. Ausführliche Ableitungen auf Basis der Kontinuumsmechanik finden sich z. B. in BIRD, STEWART und LIGHTFOOT [18], WILLIAMS [238] oder BUGGISCH [46].

2.1.1 Erhaltungsgleichungen

Bilanz der Gesamtmasse

Die Erhaltung der Gesamtmasse wird auch als Kontinuitätsgleichung bezeichnet und lautet

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0, \quad (2.1)$$

wobei ρ die Massendichte des Gasgemisches und \mathbf{u} den Geschwindigkeitsvektor bezeichnet. Sie beinhaltet neben der lokalen zeitlichen Änderung $\partial/\partial t$ konvektive Änderungen aufgrund von Strömungsdivergenz und Expansionseffekten durch Dichteänderungen.

Bilanz der Teilchenmassen

Ebenso wie für die Gesamtmasse gilt für die Massen aller chemischen Komponenten eines Systems N_k bzw. ihres Massenbruchs Y_k eine Erhaltungsgleichung:

$$\frac{\partial (\rho Y_k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} Y_k) + \nabla \cdot \mathbf{j}_k = \dot{w}_k \quad k = 1, \dots, N_k. \quad (2.2)$$

Im Gegensatz zur Bilanzgleichung der Gesamtmasse sind jedoch ein Diffusionsstrom \mathbf{j}_k , aufgrund unterschiedlicher Schwerpunktgeschwindigkeiten der Teilchen, und ein Produktionsterm \dot{w}_k , der die Änderung der Teilchendichte durch chemische Reaktionen beschreibt,

zu berücksichtigen. Da die Summe aller Partialdichten $\rho_k = \rho Y_k$ gleich der mittleren Dichte ρ ist, sind nur $N_k - 1$ Gleichungen von einander unabhängig und es gilt

$$\sum_{k=1}^{N_k} Y_k = 1. \quad (2.3)$$

Bilanz des Impulses

Die Impulserhaltung beschreibt die zeitliche Änderung des Impulses eines Massenelementes aufgrund von Oberflächen- und Massenkraften. Im Rahmen dieser Arbeit betrachtete Oberflächenkräfte sind der hydrostatische Druck p sowie viskose Spannungen, die durch den Zähigkeitsspannungstensor \mathbf{T} beschrieben werden. Von den Massenkraften ist bei Verbrennungsprozessen i. a. nur die Schwerkraft $\rho \mathbf{g}$ von Bedeutung. Die Impulsbilanz lautet dann

$$\frac{\partial (\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) + \nabla p + \nabla \cdot \mathbf{T} = \rho \mathbf{g}. \quad (2.4)$$

Bilanz der Energie

Das Prinzip der Energieerhaltung besagt, daß sich die Gesamtenergie in einem Volumen beliebiger Größe nur durch einen Wärmestrom über die Systemgrenze oder durch Fernwirkung, z. B. elektromagnetischer Strahlung, nicht aber durch Energieproduktion innerhalb des betrachteten Volumens verändern kann¹. Damit gilt für die Erhaltung der inneren Energie e

$$\frac{\partial (\rho e)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} e) = -\nabla \cdot \mathbf{j}_q + p \nabla \cdot \mathbf{u} - \mathbf{T} : \nabla \mathbf{u} + q_R. \quad (2.5)$$

Die rechte Seite beinhaltet neben Energietransport aufgrund von Teilchendiffusion \mathbf{j}_q , Volumenarbeit, Arbeit durch Reibungskräfte und Energiezufuhr durch Fernwirkung q_R , wobei bei Verbrennungsprozessen in erster Linie Wärmestrahlung von Bedeutung ist.

Unter Verwendung der Definition

$$h = e + p/\rho \quad (2.6)$$

läßt sich weiterhin die Bilanzgleichung der spezifischen Enthalpie ableiten

$$\frac{\partial (\rho h)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} h) = -\nabla \cdot \mathbf{j}_q - \frac{\partial p}{\partial t} - \mathbf{T} : \nabla \mathbf{u} + q_R. \quad (2.7)$$

Dies ist die bevorzugte Form der Energieerhaltung, da für viele Verbrennungsprozesse der Druck als konstant angesehen werden kann, und somit der Druckterm auf der rechten Seite entfällt.

Bilanz der Elementmassen

Neben den Massenbrüchen der chemischen Komponenten lassen sich auch die Massenbrüche der chemischen Elemente Z_j bilanzieren. Diese sind mit den Speziesmassenbrüchen über die folgende Beziehung verknüpft

$$Z_j = \sum_{k=1}^{N_k} \nu_k^{(j)} \frac{W_j}{W_k} Y_k, \quad (2.8)$$

¹Der Einfluß relativistischer Kräfte ist hierbei ausgeschlossen.

wobei a_{jk} die Anzahl der Atome des Elements j in der Komponente k beschreibt, und W_j bzw. W_k die Molmassen des Elements j bzw. der Komponente k sind. Da die Elemente im Gegensatz zu den Verbindungen während der chemischen Reaktion weder verbraucht noch gebildet werden, bleibt ihre Masse in einem homogenen System unverändert und es gilt

$$\frac{\partial(\rho Z_j)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} Z_j) + \nabla \cdot \mathbf{j}_j = 0. \quad (2.9)$$

Der Diffusionsstrom \mathbf{j}_j des betrachteten Elements j kann hierbei als gewichteter Diffusionsstrom $\sum \nu_k^{(j)} W_j / W_k \mathbf{j}_k$ auf Basis der Komponentenflüsse \mathbf{j}_k berechnet werden. Die normierte Form des Elementmassenbruchs wird als Mischungsbruch f bezeichnet:

$$f = \frac{Z_j - Z_{j,\min}}{Z_{j,\max} - Z_{j,\min}}. \quad (2.10)$$

Die entsprechende Erhaltungsgleichung ist durch

$$\frac{\partial(\rho f)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} f) + \nabla \cdot \mathbf{j}_f = 0 \quad (2.11)$$

gegeben. Die Definition des Mischungsbruchs (2.10) hängt von der Problemstellung ab und kann auf unterschiedliche Art und Weise erfolgen. Im allgemeinen wird er als Linearkombination einer oder mehrerer Elementmassenbrüche geschrieben, die auf charakteristische Eintrittszustände bezogen werden. Im Rahmen dieser Arbeit ist der Mischungsbruch als Summe der Elementmassenbrüche von Kohlenstoff und Wasserstoff definiert:

$$f = \frac{(Z_C + Z_H) + (Z_C + Z_H)_L}{(Z_C + Z_H)_R + (Z_C + Z_H)_L}. \quad (2.12)$$

Da es sich bei den betrachteten Flammen um freibrennende Vormischflammen handelt, sind die Referenzzustände durch den Eintrittszustand der Reaktanten (R) und der Umgebungsluft (L) gegeben.

Gleichung (2.11) besitzt einen Diffusionsstrom \mathbf{j}_f , der von der Definition des Mischungsbruchs abhängt, und somit eine Funktion aller Diffusionsströme \mathbf{j}_k ist. Im allgemeinen wird bei der Anwendung von Gleichung (2.11) aber davon ausgegangen, daß \mathbf{j}_f direkt über den Mischungsbruch und über ein Ficksches Diffusionsgesetz (siehe Abschnitt 2.1.2) beschrieben werden kann.

2.1.2 Phänomenologische Gleichungen

Das System der in Kapitel 2.1 vorgestellten Bilanzgleichungen ist erst in sich geschlossen, wenn der Zähigkeitsspannungstensor \mathbf{T} , der Wärmestrom \mathbf{j}_q , der Diffusionsstrom \mathbf{j}_k sowie der Reaktionsquellterm \dot{w}_k als Funktion der abhängigen Variablen bekannt sind. Außerdem ist eine Zustandsgleichung erforderlich, die den Zusammenhang zwischen Druck, Temperatur und Dichte bzw. Konzentrationen beschreibt. Die erforderlichen Gesetze, die diese Funktionen bereitstellen, sind empirischer Natur, weshalb sie als phänomenologischen Gleichungen bezeichnet werden. Auf die Darstellung des Strahlungsquelltermes q_R der Energieerhaltung wird im Rahmen dieser Arbeit nicht näher eingegangen, da er für die betrachteten Flammen von untergeordneter Bedeutung ist.

Der Newton'sche Schubspannungsansatz

Die viskosen Eigenschaften eines Fluids und damit der Zähigkeitsspannungstensor werden durch ein Materialgesetz, eine sogenannte rheologische Gleichung beschrieben. Die meisten Fluide verhalten sich wie newtonsche Fluide und gehorchen dem Newton'schen Schubspannungsansatz. Dieser besagt, daß die auf ein Oberflächenelement einwirkenden Scherkräfte proportional zum negativen Wert des Geschwindigkeitsgradienten sind, und lautet in seiner allgemeinen Formulierung [197]

$$\mathbf{T} = -\mu \left[(\nabla \mathbf{u} + \mathbf{u}^T) + \left(\frac{2}{3} \mu - \mu_d \right) (\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbf{I} \right]. \quad (2.13)$$

Hierbei bezeichnet μ die Viskosität des Gasgemisches, μ_d die Druckzähigkeit oder Volumenviskosität und \mathbf{I} den Einheitstensor. Die Druckzähigkeit μ_d berücksichtigt Reibungseffekte, die bei der Expansion eines Fluids auftreten und durch Relaxationseffekte zwischen inneren Freiheitsgraden der Moleküle und der Translationsbewegung hervorgerufen werden [238]. Ihr Beitrag ist im Gegensatz zu den Reibungskräften sehr gering, weshalb sie im allgemeinen vernachlässigbar ist [97].

Das Fick'sche Diffusionsgesetz

Der Diffusionsstrom \mathbf{j}_k ist als Differenz zwischen der Schwerpunktgeschwindigkeit der Komponente k und der mittleren Strömungsgeschwindigkeit definiert. Im Fall von Verbrennungsprozessen läßt er sich in zwei wesentliche Anteile aufspalten: Die Massendiffusion, die auch als Fick'sche Diffusion bezeichnet wird, und die Thermodiffusion.

$$\mathbf{j}_k = \mathbf{j}_k^d + \mathbf{j}_k^T \quad (2.14)$$

Weiterhin können Druckgradienten oder äußere Feldkräfte das Auftreten von Diffusionseffekten bewirken. Diese Phänomene spielen jedoch bei Verbrennungsvorgängen nur eine sehr untergeordnete Rolle und können deshalb vernachlässigt werden [18]. Aus der kinetischen Gastheorie lassen sich für die Massen- und Thermodiffusion die folgenden Ausdrücke ableiten [18]:

$$\mathbf{j}_k^d = \frac{\rho W_k}{\bar{W}} \sum_{l \neq k}^{N_k} \mathcal{D}_{kl} \nabla Y_l \quad (2.15)$$

$$\mathbf{j}_k^T = -D_k^T \nabla (\ln T) \quad (2.16)$$

Hierbei bezeichnet \bar{W} die mittlere molare Masse der Mischung, \mathcal{D}_{kl} die polynären Diffusionskoeffizienten und D_k^T den Thermodiffusionskoeffizienten. Die polynären Diffusionskoeffizienten sind konzentrationsabhängig weshalb ihre Bestimmung aus den bekannten binären Diffusionskoeffizienten D_{kl} äußerst aufwendig ist. Deshalb wird die Diffusionsstromdichte aufgrund von Konzentrationsgradienten häufig über eine Näherungsformel berechnet, die die Diffusion einer Komponente k in die Mischung beschreibt, und in ihrer Form dem Fick'schen Diffusionsgesetz eines binären Gemisches entspricht [110]:

$$\mathbf{j}_k^d = -\rho W_k D_k \nabla Y_k. \quad (2.17)$$

Der mischungsbezogene Diffusionskoeffizient ist hierbei zu

$$D_k = \frac{1 - Y_k}{\sum_{l \neq k}^{N_k} \frac{X_l}{D_{kl}}} \quad (2.18)$$

definiert. Die Autoren konnten zeigen, daß diese Gleichung für Mehrkomponentengemische mit einer Überschußkomponente eine hinreichend genaue Näherung darstellt. Allerdings ist zu berücksichtigen, daß sich aufgrund der Näherung die Diffusionsströme nicht zwangsläufig zu Null addieren. Um die Erhaltung der Gesamtmasse zu erzwingen, ist deshalb ein Korrekturterm der Form

$$\mathbf{j}_{korrr} = - \sum_{k=1}^{N_k} \mathbf{j}_k \quad (2.19)$$

erforderlich [65].

Gleichung (2.17) läßt sich auch in der folgenden Form anschreiben

$$\mathbf{j}_k^d = - \frac{\mu}{Sc_k} \nabla Y_k, \quad (2.20)$$

wobei Sc_k die Schmidtzahl der Komponente k bezeichnet und über folgende Beziehung definiert ist.

$$Sc_k = \frac{\mu}{\rho D_k} \quad (2.21)$$

Sie setzt den diffusiven Transport von Impuls in das Verhältnis zum diffusiven Transport von Masse.

Der Fourier'sche Wärmeleitungsgesetz

Der Wärmestrom über eine Oberfläche \mathbf{j}_q setzt sich aus Wärmeleitung \mathbf{j}_q^c , Transport von Enthalpie aufgrund von Diffusion \mathbf{j}_q^d und dem Dufour-Effekt zusammen. Da die Energie, die aufgrund des Dufour Effektes transportiert wird, im Vergleich zur Energie, die aufgrund von Diffusion transportiert wird, meist vernachlässigbar klein ist [18], gilt

$$\mathbf{j}_q = \mathbf{j}_q^c + \mathbf{j}_q^d. \quad (2.22)$$

Der Fluß von thermischer Energie ist durch das Fourier'sche Wärmeleitungsgesetz gegeben und proportional zum negativen Temperaturgradienten [8]

$$\mathbf{j}_q^c = -\lambda \nabla T. \quad (2.23)$$

Der zweite Anteil beschreibt den Enthalpiestrom, der sich durch Diffusion von Komponenten unterschiedlicher spezifischer Enthalpie h_k einstellt [18]

$$\mathbf{j}_q^d = \sum_{k=1}^{N_k} h_k \mathbf{j}_k. \quad (2.24)$$

Der Diffusionsstrom der Komponente k ist dabei durch Gleichung (2.14) gegeben. Kombination der Gleichungen (2.20) und (2.22)–(2.24) sowie Einführung der Prandtlzahl

$$Pr = \frac{\mu c_p}{\lambda} \quad (2.25)$$

führt auf

$$\mathbf{j}_q = - \frac{\mu}{Pr} \left[\nabla h + \sum_{k=1}^{N_k} \left(\frac{Pr}{Sc_k} - 1 \right) h_k \nabla Y_k \right]. \quad (2.26)$$

Dieser Ausdruck reduziert sich, für den Fall daß die Lewis Zahlen der Komponenten, definiert als

$$Le_k = \frac{Sc_k}{Pr} = \frac{\lambda}{\rho c_p D_k}$$

zu eins gesetzt werden können, auf Gleichung (2.23).

Thermische Zustandsgleichung

Neben der rheologischen Gleichung und den Transportansätzen ist noch eine weitere Beziehung erforderlich, die den thermischen Zustand und damit die thermodynamischen Eigenschaften des Gasgemisches beschreibt. Dieser Zusammenhang ist durch die thermische Zustandsgleichung gegeben, die die Zustandsvariablen p , T und ρ bzw. Y_k miteinander verknüpft. Das Verhalten von Gasen wird meistens mit Hilfe eines Polynomansatzes, der sogenannten Virialgleichung abgebildet [213]. Für die bei Verbrennungsprozessen vorherrschenden Bedingungen ist der thermodynamische Zustand jedoch mit ausreichender Genauigkeit durch das ideale Gasgesetz beschrieben

$$p(\rho, T) = \frac{\rho}{W} \mathcal{R} T, \quad (2.27)$$

in dem die idealen Gaskonstante den Wert $\mathcal{R} = 8.3147 \text{ J/mol}\cdot\text{K}$ besitzt.

2.1.3 Thermodynamische Größen

Im Rahmen dieser Arbeit wird davon ausgegangen, daß sich die betrachteten Komponenten wie ideale Gase verhalten und ideal mischen. Unter dieser Voraussetzung ist die spezifische Enthalpie der Mischung gleich der Summe der gewichteten spezifischen Enthalpien der Komponenten des Systems [214]

$$h = \sum_{k=1}^{N_k} h_k Y_k. \quad (2.28)$$

Bei idealen Gasen ist die Enthalpie lediglich eine Funktion der Temperatur gemäß [213]

$$h_k(T) = h_k^\circ + \int_{T^0}^T c_{pk}(T) dT. \quad (2.29)$$

Hierbei bezeichnet h_k° den Absolutwert der spezifischen Enthalpie bei 298K und c_{pk} die spezifische Wärmekapazität der Komponente k bei konstantem Druck.

Analog zu Gleichung (2.28) ist die spezifische Entropie s einer idealen Gasmischung definiert durch [214]

$$s = \sum_{k=1}^{N_k} s_k Y_k. \quad (2.30)$$

Im Gegensatz zur Enthalpie ist die spezifische Entropie aber eine Funktion sowohl der Temperatur als auch des Drucks [213]:

$$s_k(T, p_k) = s_k^\circ + \int_{T^0}^T \frac{c_{pk}(T)}{T} dT - \int_{p^\circ}^{p_k} \frac{\mathcal{R}}{p W_k} dp. \quad (2.31)$$

Die Berechnung der spezifischen Wärmekapazitäten kann z. B. mit Hilfe von Polynomansätzen erfolgen

$$c_{pk}(T) = a_1 + a_2 T + a_3 T^2 + a_4 T^3 + a_5 T^4, \quad (2.32)$$

die die experimentellen Daten der JANAF-Tabellen [215] wiedergeben. Zusammen mit den Standard-Enthalpien h_k° und Standard-Entropien s_k° lassen sich daraus alle weiteren thermodynamischen Größen ableiten [111].

2.1.4 Transportkoeffizienten

Die rheologische Gleichung und die Transportgesetze für Energie und Teilchenmasse beinhalten Proportionalitätsfaktoren in Form der dynamischen Viskosität μ , der Wärmeleitfähigkeit λ und der Diffusionskoeffizienten D_k . Ihre Werte lassen sich für Verbrennungsvorgänge mit ausreichender Genauigkeit unter Zuhilfenahme der Theorie verdünnter Gase abschätzen [97, 18, 69].

Dynamische Viskosität

Für die dynamische Viskosität eines reinen Gases liefert die Chapman-Enskog Theorie die folgende Zahlenwertgleichung [97]

$$\mu_k = 2,6693 \cdot 10^{-5} \frac{\sqrt{W_k T}}{\sigma_k^2 \Omega_k^{(2,2)}}, \quad (2.33)$$

wobei die Temperatur T in K und der effektive Stoßquerschnitt σ_k in Angström eingesetzt werden müssen. Das Stoßintegral $\Omega_k^{(2,2)}$ ist eine eindeutige Funktion der Temperatur und kann mit Hilfe der Parameter des Lennard-Jones Potentials berechnet werden [110].

Für Mehrkomponentengemische läßt sich der Viskositätskoeffizient der Mischung über die folgende empirische Formel [110]

$$\mu = \frac{1}{2} \left(\sum_{k=1}^{N_k} X_k \mu_k + \left(\sum_{k=1}^{N_k} \frac{X_k}{\mu_k} \right)^{-1} \right) \quad (2.34)$$

aus den Viskositätskoeffizienten der reinen Komponenten bestimmen. Hierin bezeichnet X_k den Molenbruch der Komponente k , die mit den Massenbrüchen über $X_k = \overline{W} Y_k / W_k$ verknüpft ist.

Für viele technischen Anwendungen ist die Temperaturabhängigkeit der dynamischen Viskosität der Mischung durch die von SUTHERLAND [6] angegebene Näherungsformel ausreichend genau bestimmt:

$$\mu(T) = \mu_{ref}(T_{ref}) \left(\frac{T}{T_{ref}} \right)^{3/2} \frac{T_{ref} + T_\mu}{T + T_\mu}. \quad (2.35)$$

Darin ist μ_{ref} die Viskosität bei der Referenztemperatur T_{ref} und T_μ eine stoffabhängige Konstante. Für Luft werden von SUTHERLAND [6] die folgenden Werte angegeben

$$T_\mu = 110\text{K} \quad T_{ref} = 280\text{K} \quad \mu_{ref} = 1.75 \cdot 10^{-5} \text{kg/m}\cdot\text{s}.$$

Wärmeleitfähigkeit

Die Wärmeleitfähigkeit verdünnter Gase kann bei Kenntnis der Viskosität mit Hilfe der folgenden Beziehung berechnet werden [110]

$$\lambda_k = E_k \frac{15}{4} \frac{\mathcal{R}}{\overline{W}_k} \mu_k, \quad (2.36)$$

wobei die sogenannte Eucken-Korrektur E_k den Einfluß der inneren Freiheitsgrade berücksichtigt.

$$E_k = 1 + \frac{4}{15} \frac{\rho D_{kk}}{\mu_k} \left(\frac{c_{pk}}{\mathcal{R}} - \frac{5}{2} \right) \quad (2.37)$$

Aus praktischen Gründen wird häufig eine einfache Eucken-Korrektur mit $\rho D_{k,k}/\mu_k = 4/3$ verwendet.

In Analogie zum Viskositätskoeffizienten läßt sich die Wärmeleitfähigkeit einer Mischung idealer Gase mit für Verbrennungsvorgänge ausreichender Genauigkeit über die Beziehung [110]

$$\lambda = \frac{1}{2} \left(\sum_{k=1}^{N_k} X_k \lambda_k + \left(\sum_{k=1}^{N_k} \frac{X_k}{\lambda_k} \right)^{-1} \right) \quad (2.38)$$

aus den Wärmeleitfähigkeitskoeffizienten der reinen Komponenten bestimmen.

In Analogie zum Sutherland-Gesetz (2.35) läßt sich auch eine Näherungsgleichung für die mittlere Wärmeleitfähigkeit aufstellen. Anhand von Gleichung (2.36) ist jedoch ersichtlich, daß die dynamische Viskosität und die Wärmeleitfähigkeit in sehr ähnlicher Weise variieren. Deshalb kann die Wärmeleitfähigkeit der Mischung für praktische Anwendungen über die Definition der als konstant angenommenen Prandtlzahl bestimmt werden:

$$\lambda = \frac{\mu C_p}{Pr}. \quad (2.39)$$

Diffusionskoeffizient

Die Berechnung der binären Diffusionskoeffizienten für die Diffusion einer Komponente k relativ zu einer Komponente l basiert ebenso wie die Berechnung der Viskosität und der Wärmeleitfähigkeit auf der Chapman-Enskog-Theorie. Die entsprechende Zahlenwertgleichung lautet [97]

$$D_{kl} = 1,331 \cdot 10^{-9} \frac{\sqrt{T^3 (W_k + W_l) / (W_k W_l)}}{p \sigma_{kl}^2 \Omega^{(1,1)}}, \quad (2.40)$$

wobei der Druck p in Atmosphären einzusetzen ist. Der Stoßquerschnitt σ_{kl} ist das arithmetische Mittel der Stoßquerschnitte beider Komponenten $\sigma_{kl} = (\sigma_k + \sigma_l) / 2$, und das reduzierte Stoßintegral $\Omega^{(1,1)}$ des Lennard-Jones Potentials ist eine eindeutige Funktion der reduzierten Temperatur.

Thermodiffusionskoeffizient

Da Thermodiffusionseffekte bei Verbrennungsreaktionen nur für sehr kleine Verbindungen bzw. Atome, die im allgemeinen nur in geringen Konzentrationen vorkommen, eine Rolle spielen, läßt sich die Berechnung der Thermodiffusionskoeffizienten erheblich vereinfachen. In diesem Fall kann das Gemisch in guter Näherung als eine binäre Mischung der betrachteten Komponente k mit einer Mischung aller übrigen Komponenten betrachtet werden, und der Thermodiffusionskoeffizient läßt sich mit Hilfe der folgenden Gleichungen berechnen:

$$D_k^T = \frac{D_{km} \Theta_k}{X_k}. \quad (2.41)$$

D_k^T bezeichnet den gemittelten Diffusionskoeffizienten nach Gleichung (2.18) und Θ_k das Thermodiffusionsverhältnis, gegeben durch

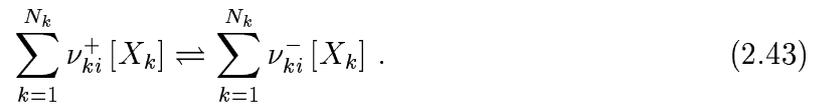
$$\Theta_k = \sum_{j=k}^{N_k} \theta_{kj}, \quad (2.42)$$

wobei die Matrix θ_{kj} in Gleichung (2.42) eine komplexe Funktion der Stoßintegrale ist [110].

2.2 Beschreibung homogener Gasphasenreaktionen

Die Thermodynamik ist nur in der Lage den Gleichgewichtszustand eines Gasgemisches als Funktion seines Anfangszustandes zu beschreiben, sie liefert jedoch keine Aussage über die Zeit und Weg, die zum Erreichen des Gleichgewichtszustandes erforderlich ist. Über diese Zeitdauer und den Reaktionsweg gibt die chemische Kinetik Auskunft. Das Verständnis des Reaktionsablaufs ist zudem essentiell für das Verständnis des Verbrennungsvorganges, da dieser neben der Bildung und Zersetzung von Schadstoffen auch die Zündung und das Verlöschen von Flammen bestimmt.

Die in einer homogenen Gasphase ablaufenden chemischen Prozesse werden durch das Zusammenspiel aller möglichen Elementarreaktionen der beteiligten Komponenten bestimmt. Elementarreaktionen beschreiben reaktive Stöße der beteiligten Moleküle bzw. Atome im mikroskopischen Bereich und lassen sich verallgemeinert in der folgenden Form anschreiben



In Reaktionsgleichung (2.43) bezeichnet ν_{ki}^+ den stöchiometrischen Koeffizienten der Reaktanten der Reaktion i sowie ν_{ki}^- den der Produkte. Der Ausdruck $[X_k]$ symbolisiert die chemische Bezeichnung der Verbindung k , z. B. CH_4 oder OH . Läßt sich eine Reaktion hingegen in mehrere Elementarreaktionen zerlegen, spricht man von Bruttoreaktionen oder zusammengesetzten Reaktionen. Die Summe aller Elementarreaktionen wird als Reaktionsmechanismus bezeichnet.

Die chemische Reaktionsgeschwindigkeit ist die zentrale Größe der chemischen Kinetik. Sie ist ein Maß für die Umsatzgeschwindigkeit einer Reaktion i und läßt sich im Fall von Elementarreaktionen aus den molaren Konzentrationen

$$C_k = \rho \frac{Y_k}{W_k} \quad (2.44)$$

der an der Reaktion beteiligten Komponenten, den stöchiometrischen Koeffizienten und den Geschwindigkeitskoeffizienten bestimmen:

$$q_i = k_{f,i} \prod_{k=1}^{N_k} C_k^{\nu_{ki}^+} - k_{b,i} \prod_{k=1}^{N_k} C_k^{\nu_{ki}^-} . \quad (2.45)$$

Gleichung (2.45) trägt dem Prinzip der mikrochemischen Reversibilität Rechnung, welches besagt, daß zu jeder Elementarreaktion eine Rückreaktion existiert. Deren Geschwindigkeitskoeffizient $k_{b,i}$ ist mit dem Geschwindigkeitskoeffizienten der Hinreaktion $k_{f,i}$ über die Gleichgewichtskonstante $K_{C,i}$ verknüpft:

$$\frac{k_{f,i}}{k_{b,i}} = K_{C,i}(T) . \quad (2.46)$$

Damit läßt sich Gleichung (2.45) auch in der folgenden Form schreiben:

$$q_i = k_{f,i} \left(\prod_{k=1}^{N_k} C_k^{\nu_{ki}^+} - \frac{1}{K_{C,i}} \prod_{k=1}^{N_k} C_k^{\nu_{ki}^-} \right) . \quad (2.47)$$

Die Reaktionsgeschwindigkeitskonstanten hängen stark und nicht-linear von der Temperatur ab, weshalb sie einen entscheidenden Einfluß auf den Reaktionsverlauf besitzen.

Ihre Temperaturabhängigkeit läßt sich mit ausreichender Genauigkeit durch einen modifizierten Arrheniusansatz wiedergeben [12]

$$k_i(T) = B_i T^{b_i} \exp\left(-\frac{E_{A_i}}{\mathcal{R}T}\right). \quad (2.48)$$

Die Aktivierungsenergie E_{A_i} kann als Energieschwelle gedeutet werden, die zum erfolgreichen Ablauf der Reaktion überwunden werden muß. Sie entspricht maximal den Bindungsenergien der an der Reaktion beteiligten Verbindungen, wie im Fall von Dissoziationsreaktionen. Sie kann jedoch auch wesentlich kleiner sein, wenn simultan zum Aufbrechen einer bestehenden Bindung neue Bindungen gebildet werden. B_i bezeichnet den präexponentiellen Faktor, der nach der kinetischen Gastheorie die Wahrscheinlichkeit einer Kollision der Reaktanten wiedergibt. Die in Experimenten beobachtete schwache Temperaturabhängigkeit des präexponentiellen Faktors wird durch den Temperaturexponenten b_i berücksichtigt. Die Aktivierungsenergie sowie der präexponentielle Faktor lassen sich theoretisch für ideale Gase mit Hilfe der kinetischen Gastheorie berechnen. Die auf diese Weise bestimmten Werte weichen jedoch in der Realität stark von den experimentell ermittelten ab. Die reaktionskinetischen Konstanten B_i , b_i sowie E_{A_i} werden daher bevorzugt durch Anpassung an experimentelle Ergebnisse bestimmt.

Die Gleichgewichtskonstante $K_{C,i}$ ist eine Funktion der Temperatur und durch die Änderung der freien Enthalpie bei der Reaktion ΔG_i^0 bestimmt

$$K_{C,i}(T) = \left(\frac{p_0}{\mathcal{R}T}\right)^{\sum_k \nu_{ki}} \exp\left(-\frac{\Delta G_i^0}{\mathcal{R}T}\right), \quad (2.49)$$

wobei ΔG_i^0 wie folgt definiert ist

$$\Delta G_i^0 = \sum_{k=1}^{N_k} \nu_{ki} W_k (h_k - T s_k^0), \quad (2.50)$$

und

$$\nu_{ki} = \nu_{ki}^+ - \nu_{ki}^- \quad (2.51)$$

die Matrix der stöchiometrischen Koeffizienten bezeichnet. Im chemischen Gleichgewicht ist die Reaktionsgeschwindigkeit gleich Null und Kombination der Gleichungen (2.45) und (2.46) führt auf eine Beziehung

$$\prod_{k=1}^{N_k} C_k^{\nu_{ki}} = K_{C,i}(T), \quad (2.52)$$

die als Massenwirkungsgesetz bekannt ist.

Die in Gleichung (2.2) benötigte Bildungsgeschwindigkeit einer Komponente läßt sich als Summe über die Geschwindigkeiten aller Reaktionen i , multipliziert mit den entsprechenden stöchiometrischen Koeffizienten berechnen

$$\dot{w}_k = W_k \dot{\omega}_k = W_k \sum_{i=1}^{N_i} \nu_{ki} q_i, \quad (2.53)$$

wobei $\dot{\omega}_k$ die molare Bildungsgeschwindigkeit bezeichnet.

In einem homogenen System, in dem keine Transportprozesse stattfinden, ist die zeitliche Änderung einer Spezieskonzentration aufgrund einer irreversiblen 1-Schritt Reaktion durch Kombination der Gleichungen (2.2), (2.45) und (2.53) beschrieben:

$$\frac{dC_k}{dt} = \nu_k k_f \prod_j^{N_k} C_j^{\nu_j^+} = \nu_k k_f \rho^{\sum \nu_j} \prod_j^{N_k} Y_j^{\nu_j^+}. \quad (2.54)$$

Unter diesen Bedingungen bezeichnet $n = \sum \nu_j$ die globale Ordnung der Reaktion, die manchmal auch als Druckexponent bezeichnet wird, und ν_k die Molekularität oder die Ordnung der Reaktion bezüglich des Reaktanten j . Im Fall von Elementarreaktionen ist die Molekularität durch die Anzahl der an der Reaktion beteiligten Moleküle definiert. Demzufolge sind Elementarreaktionen durch ganzzahlige Molekularitäten gekennzeichnet, während für Bruttoreaktionen rationale Werte für ν_j^+ charakteristisch sind. Für eine einfache irreversible Verbrennungsreaktion, bei der Brennstoff mit einem Oxidationsmittel zu Produkten umgesetzt wird



kann die folgende Bruttoreaktionsgleichung angeschrieben werden

$$\frac{dC_F}{dt} = k C_F^m C_{O_x}^n. \quad (2.56)$$

Die beiden Exponenten n und m sind in diesem Fall die Ordnung bezüglich des Brennstoffes und des Oxidators und ihre Summe die globale Reaktionsordnung. Der Ansatz einer Reaktion als Bruttoreaktionsgleichung (2.56) erlaubt keinen Einblick in die tatsächlich auf molekularer Ebene ablaufenden chemischen Vorgänge. Zumeist verbergen sich hinter einem globalen Reaktionsansatz zahlreiche Zwischenschritte mit entsprechenden Zwischenprodukten, die durch Kombination von Elementarreaktionen der Form (2.43) beschrieben werden können.

2.3 Zeitlich mittlere Bilanzgleichungen

Die in Kapitel 2.1 vorgestellten instantanen Bilanzgleichungen beschreiben sowohl laminare als auch turbulente Strömungsvorgänge. Numerische Verfahren, die diese Gleichungen ohne weitere Annahmen lösen, werden als direkte numerische Simulation (DNS, engl.: *Direct Numerical Simulation*) bezeichnet. Turbulente Strömungen besitzen jedoch Strukturen, deren Größenabmessungen in technisch relevanten Systemen mehrere Größenordnungen umfassen können. In einer direkten numerischen Simulation müssen alle diese Skalen aufgelöst werden, was einen erheblichen numerischen Aufwand bedeutet, der selbst von heutigen Großrechnern noch nicht bewältigt werden kann². Die direkt numerische Lösung der Navier-Stokes Gleichungen ist damit noch auf sehr einfache Probleme beschränkt, bei denen die Anzahl charakteristischer Zeit- und Längenskalen nicht zu groß ist.

Die Unterscheidung zwischen laminaren und turbulenten Strömungszuständen erfolgt anhand der von REYNOLDS [185] eingeführten Ähnlichkeitskennzahl, der sogenannten Reynoldszahl

$$Re = \frac{u_{\text{char}} L_{\text{char}}}{\nu}, \quad (2.57)$$

die Strömungssysteme mit ähnlichen geometrischen und kinematischen Randbedingungen klassifiziert. Sie kann als Verhältnis der destabilisierenden Massenträgheitskräfte zu den dämpfenden und damit stabilisierenden Zähigkeitskräften gedeutet werden. In der Regel sind laminare Strömungen bei großen Reynoldszahlen instabil gegenüber kleinen Störungen. Diese Störungen wechselwirken mit sich selbst und wachsen bis zur Transition, dem laminar-turbulenten Strömungsumschlag, an. Eine weitere Erhöhung der Reynoldszahl führt zum turbulenten Strömungszustand, der sich durch einen im Gegensatz zur laminaren Strömung deutlich intensiveren Transport von Impuls, Stoff und Energie auszeichnet, der turbulenten Diffusion. Bei ausreichend hohen Reynoldszahlen strebt das Strömungssystem schließlich einen Zustand kinematischer Selbstähnlichkeit entgegen, in dem das Strömungsfeld von der Reynoldszahl unabhängig ist.

Im Gegensatz zu laminaren Strömungen, die als geordnet und regulär betrachtet werden können, sind turbulente Strömungen immer instationär, dreidimensional, wirbelbehaftet und stochastisch. Sie sind jedoch nicht regellos und können deshalb mit Methoden der Wahrscheinlichkeitsrechnung beschrieben werden. In vielen technischen Anwendung sind nur der zeitliche Mittelwert einer Feldgröße und die Intensität ihrer Fluktuation, ausgedrückt durch die Varianz von Interesse. Nach einem Vorschlag von REYNOLDS [186] kann dann der Momentanwert in eine zeitlich mittlere und eine fluktuierende Größe, die Abweichung des Momentanwertes vom Mittelwert, aufgespalten werden:

$$Q(\mathbf{x}, t) = \overline{Q}(\mathbf{x}) + Q'(\mathbf{x}, t). \quad (2.58)$$

Hierbei bezeichnet der Querstrich $\overline{(\cdot)}$ eine zeitlich gemittelte Größe und der Strich $(\cdot)'$ eine fluktuierende Größe. Die zeitlich gemittelte Größe läßt sich gemäß der folgenden Vorschrift berechnen:

$$\overline{Q}(\mathbf{x}) = \lim_{\Delta t \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{\Delta t} \int_0^{\Delta t} Q(\mathbf{x}, t) dt \right). \quad (2.59)$$

²Typische DNS Simulationen benötigen heute bereits mehrere CPU-Monate bei Rechenleistungen von 10-100 GFLOPs. Die Abmessungen des Rechengbietes turbulenter reagierender Strömungen sind daher zur Zeit nicht größer als wenige Zentimeter.

Bei Strömungsvorgängen, die auch im zeitlichen Mittel instationär sind, würde eine zeitliche Mittelung nach Gleichung (2.59) die transienten Anteile eliminieren. Solche Vorgänge lassen sich aber durch Einführung einer Ensemble-Mittelung über eine ausreichende Anzahl von identischen Versuchen, die alle unter gleichen Anfangs- und Randbedingungen durchgeführt werden beschreiben:

$$\overline{Q}(\mathbf{x}, t) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{N} \sum_n^N Q(\mathbf{x}, t) \right). \quad (2.60)$$

Sofern sich die charakteristischen Zeiten der turbulenten Schwankungen und der instationären mittleren Strömung genügend voneinander unterscheiden, ist es möglich einen laufenden Mittelwert

$$\overline{Q}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\Delta t} \int_{t-\Delta t/2}^{t+\Delta t/2} Q(\mathbf{x}, t) \quad (2.61)$$

zu definieren. Dabei ist zu beachten, daß das Mittelungsintervall Δt im Vergleich zu den turbulenten Schwankungen groß, im Vergleich zur instationären Hauptströmung jedoch ausreichend klein gewählt werden muß, um eine begründete Basis für die Anwendung von Gleichung (2.58) zu bilden. Die obigen Formen der Mittelung lassen sich auf die Bilanzgleichungen anwenden, wobei die resultierenden Gleichungen als Reynolds-gemittelte Navier-Stokes (RANS; engl. *Reynolds Averaged Navier-Stokes*) Gleichungen bezeichnet werden.

Reagierende Strömungen weisen große Dichtegradienten und damit -schwankungen auf. Die Reynolds-Mittelung führt daher auf weitere unbekannte Korrelationen [132], weshalb nach einem Vorschlag von FAVRE [74] auf dichtegewichtete Mittelwerte zurückgegriffen wird. Für die sogenannten Favre-Mittelung gilt

$$Q(\mathbf{x}, t) = \tilde{Q}(\mathbf{x}) + Q''(\mathbf{x}, t) \quad (2.62)$$

mit

$$\tilde{Q} = \frac{\overline{\rho Q}}{\overline{\rho}} \quad (2.63)$$

Um Favre-gemittelte Größen von Reynolds-gemittelten Größen zu unterscheiden, werden die Mittelwerte mit einer Tilde ($\tilde{\cdot}$) und die Abweichungen vom Mittelwert mit einem doppelten Strich (\cdot'') gekennzeichnet.

Anwendung der Favre-Mittelung auf die Bilanzgleichungen (2.1), (2.2), (2.4) und (2.5) führt auf die Favre-gemittelten Navier-Stokes (FANS, engl.: *Favre Averaged Navier-Stokes*) Gleichungen, die im Rahmen dieser Arbeit die Grundlage der Beschreibung turbulenter reaktiver Strömungen bilden:

$$\frac{\partial \overline{\rho}}{\partial t} + \nabla \cdot (\overline{\rho \tilde{\mathbf{u}}}) = 0 \quad (2.64)$$

$$\frac{\partial (\overline{\rho \tilde{Y}_k})}{\partial t} + \nabla \cdot (\overline{\rho \tilde{\mathbf{u}} \tilde{Y}_k}) = -\nabla \cdot \overline{\mathbf{j}_k} - \nabla \cdot (\overline{\rho \tilde{\mathbf{u}}'' \tilde{Y}_k''}) + \overline{\dot{w}_k} \quad (2.65)$$

$$\frac{\partial (\overline{\rho \tilde{\mathbf{u}}})}{\partial t} + \nabla \cdot (\overline{\rho \tilde{\mathbf{u}} \tilde{\mathbf{u}}}) = -\nabla \overline{p} - \nabla \cdot \overline{\mathbf{T}} - \nabla \cdot (\overline{\rho \tilde{\mathbf{u}}'' \tilde{\mathbf{u}}''}) = 0 \quad (2.66)$$

$$\frac{\partial (\overline{\rho Y_k})}{\partial t} + \nabla \cdot (\overline{\rho \tilde{\mathbf{u}} \tilde{h}_k}) = \nabla \cdot \overline{\mathbf{j}_q} + \overline{\mathbf{T} : \nabla \cdot \mathbf{u}} - \nabla \cdot (\overline{\rho \tilde{\mathbf{u}}'' \tilde{h}''}) + \frac{\partial \overline{p}}{\partial t}. \quad (2.67)$$

Das Gleichungssystem wird ergänzt durch eine gemittelte Form des idealen Gasgesetzes

$$\bar{p} = \mathcal{R} \sum_{k=1}^{N_s} \frac{1}{W_k} \left(\bar{\rho} \tilde{T} \tilde{Y}_k + \rho \widetilde{T'' Y_k''} \right). \quad (2.68)$$

Bei ähnlichen molaren Massen kann die Fluktuation der mittleren Molmasse näherungsweise vernachlässigt werden [132], und Gleichung (2.68) reduziert sich auf die wesentlich einfachere und allgemein gebräuchliche Form [132, 6]

$$\bar{p} = \bar{\rho} \mathcal{R} \sum_{k=1}^{N_s} \frac{Y_k}{W_k}. \quad (2.69)$$

Die Druckfluktuationen p' aufgrund von Kompressibilitätseffekten können in Gleichung (2.66) und (2.67) vernachlässigt werden, solange die Machzahl, gebildet mit den mittleren Strömungsgrößen $Ma = |\mathbf{u}| \sqrt{(c_v \bar{p}) / (c_p \bar{p})}$, klein ist [96].

Die Aufgabe der Modellierung turbulenter Verbrennung besteht in der Bereitstellung von Schließungsansätzen für die unbekanntenen Korrelationen, die in den Gleichungen (2.64)–(2.67) auftreten. Eine Überblick über die in dieser Arbeit verwendeten Modelle bietet das folgende Kapitel.

Abschließend sei an dieser Stelle auf die folgenden Aspekte zur Wahl von Reynolds- bzw. Favre-gemittelten Transportgleichungen hingewiesen. Die existierenden Turbulenzmodelle für reagierende Strömungen mit Dichteänderungen übernehmen generell die für inkompressible, isotherme Strömungen entwickelten Schließungsannahmen. Inwieweit diese Annahmen jedoch übertragbar sind, ist eine noch nicht vollständig beantwortete Frage und Gegenstand laufender Forschungsarbeiten [175]. Die Erfolge in der Beschreibung turbulenter reagierender Strömungen deuten aber darauf hin, daß die verwendeten Modelle weitgehend dem Favre-Ansatz entsprechen und damit implizit Informationen über die Dichteschwankungen enthalten.

2.4 Charakterisierung der Turbulenz

2.4.1 Turbulenzkaskade

Nach der Vorstellung von RICHARDSON [187] weist eine turbulente Strömung ein breites Spektrum unterschiedlich großer Wirbel auf. Diese sind durch eine Abmessung l und eine Geschwindigkeit $u(l)$, die als Differenz der Geschwindigkeit über l gedeutet werden kann, charakterisiert. Die Wirbelabmessung l entzieht sich einer exakten Definition, wird aber nach einem Vorschlag von TAYLOR [217] als die Größe eines Fluidelements gedeutet, das eine „kohärente Struktur“ aufweist, d. h. dessen Geschwindigkeitsschwankungen korreliert sind. Abbildung 2.1 zeigt die verschiedenen Wirbelklassen, wie sie sich bei einem turbulenten Freistrahls ausbilden.

Am oberen Ende der Energiekaskade stehen die großen Wirbelballen mit der Abmessung l_t und der Geschwindigkeit u_t , die ihre Energie aus den von außen angreifenden Geschwindigkeitsgradienten bezieht. Die in die Turbulenzkaskade eingespeiste massenspezifische Leistung ist daher von der Größenordnung $\mathcal{P} \propto O(u_t^3/l_t)$. RICHARDSON [187] postulierte, daß die großen Wirbel instabil sind und ihre Energie auf die Wirbelelemente der nächst kleineren Ordnung übertragen. Man spricht in diesem Zusammenhang von einer Energiekaskade infolge von Wirbelfadenstreckung. Hierbei werden Wirbelfäden mit einem Durchmesser der Größenordnung l_t durch die Geschwindigkeitsgradienten der Hauptströmung gestreckt, und Energie von der Hauptströmung in die Schwankungsbewegung eingespeist. Da im Bereich großer Skalen dieser Prozeß näherungsweise als reibungsfrei betrachtet werden kann, vergrößert sich die Wirbelstärke in Richtung der gestreckten Achse. Wegen der Erhaltung des Drehimpulses verringert sich gleichzeitig der Querschnitt des gestreckten Wirbelfadens. Die vergrößerte Wirbelstärke der gestreckten Wirbelelemente führt wiederum zu einer Streckung kleinerer Wirbelfäden. Die ursprünglich der Hauptströmung entzogene kinetische Energie wird auf diese Weise durch den Prozeß der Wirbelfadenstreckung von größeren zu kleineren Turbulenzelementen transferiert. Während der

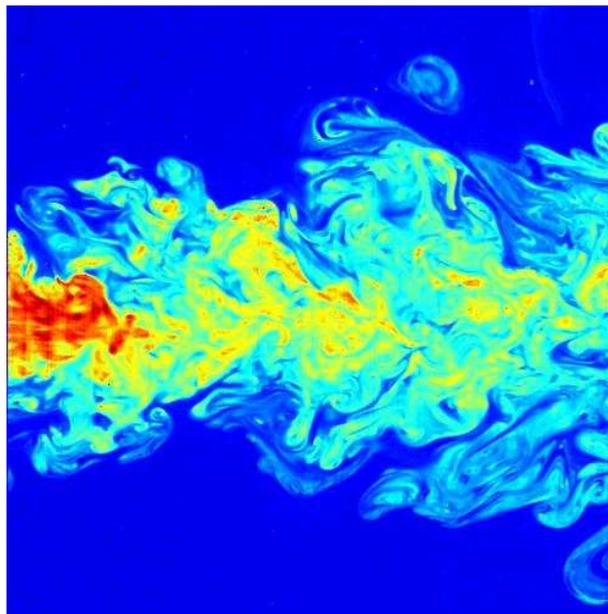


Abbildung 2.1: LIF-Aufnahme eines turbulenten Freistrahls (FUKUSHIMA und WESTERWEEL, Technical University of Delft

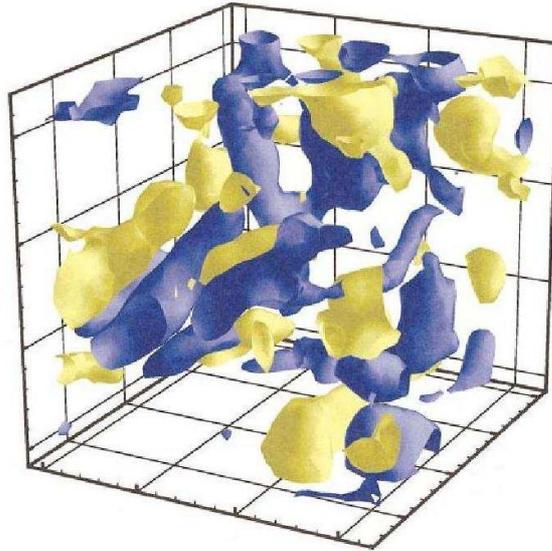


Abbildung 2.2: Turbulenzfäden. Blaue Objekte sind Bereiche großer Wirbelstärke, gelbe Bereiche kennzeichnen Bereiche mit großer Streckungsrate. PIV-Messung von VAN DER BOS ET AL. [26].

Durchmesser der Wirbelfäden immer weiter abnimmt, steigen die Geschwindigkeitsgradienten innerhalb der Elemente stark an, so daß die viskosen Kräfte immer mehr an Einfluß gewinnen bis schließlich die kinetische Energie der Schwankungsbewegung in Wärme dissipiert wird. Ein weiterer Mechanismus, der zur Bildung dissipativer Wirbelfäden führt, ist das Aufrollen von Wirbeln aufgrund von instabilen Scherschichten. Im Gegensatz zu den Vorstellungen von RICHARDSON weiß man jedoch heute, daß diese Prozesse, gekennzeichnet durch Streckungsrate und Wirbelstärke, nicht gleichmäßig im Strömungsfeld verteilt, sondern jeder für sich in „koheränten Strukturen“ konzentriert sind. Turbulenz kann daher wie in Abbildung 2.2 dargestellt als Ansammlung von „Spaghetti“-ähnlichen Wirbelfäden betrachtet werden, die über eine Vielzahl von Mechanismen miteinander wechselwirken. Der Prozeß der Wirbelbildung durch Aufrollen sowie Wirbelstreckung steht mit der Wirbeldissipation annähernd im Gleichgewicht, so daß die entstehenden Strukturen stabil und langlebig sind. Austauschvorgänge finden daher nicht innerhalb dieser rotierenden Strukturen sondern vielmehr zwischen den Wirbelementen in Bereichen mit großen Streckungsraten statt, wie sie zwischen zwei Wirbeln mit gleicher Drehrichtung existieren. Abbildung 2.3 verdeutlicht die wesentlichen physikalischen Mechanismen der Turbulenz.

KOLMOGOROV [117] ist eine weitergehende theoretische Analyse der Turbulenzkaskade zu verdanken, insbesondere spezifizierte er die Abmessung der kleinsten, dissipativen Wirbelklasse, die nach ihm deshalb als Kolmogorov-Länge bezeichnet wird. KOLMOGOROV hat in seiner Betrachtung der Energiekaskade drei wesentlichen Annahmen getroffen, die sogenannten Kolmogorov-Hypothesen.

Die Hypothese lokaler Isotropie besagt, daß für ausreichend große Reynoldszahlen alle Wirbel mit einer Abmessung $l < l_{iso}$ richtungsunabhängiges Verhalten aufweisen. Diese Wirbelklassen besitzen im Gegensatz zu den (anisotropen) Wirbelementen der charakteristischen Länge $l > l_{iso}$ keine Informationen mehr über die Randbedingungen der Strömung. Die Turbulenz kann daher in diesem Bereich als universell angesehen werden. Dies führt auf Kolmogorovs erste Ähnlichkeitshypothese, die besagt, daß in vollturbulente Strömungen das universelle Verhalten der isotropen Wirbelklassen allein von der Dissipati-

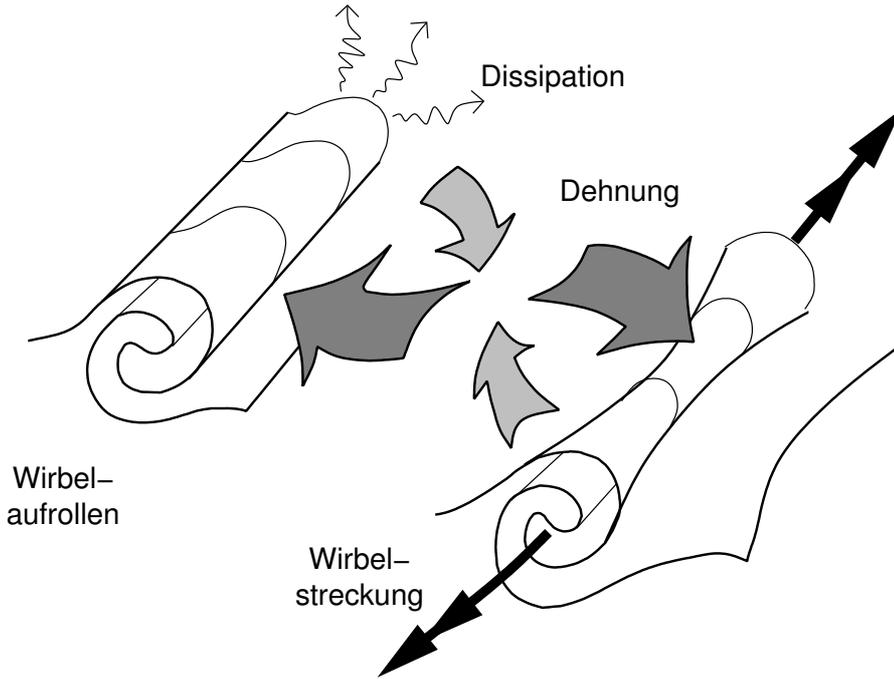


Abbildung 2.3: Schematische Darstellung von Wirbelfäden und den Mechanismen der Wirbelstreckung, des Wirbeleinrollens und der Dissipation aufgrund viskoser Kräfte.

onsrate der turbulenten kinetischen Energie ε und der kinematischen Viskosität bestimmt wird. In diesem sogenannten universellen Gleichgewichtsbereich ist die charakteristische Zerfallszeit der Wirbelelemente $t = l/u(l)$ klein gegenüber der der energietragenden Wirbel $t_t = l_t/u_t$ anzusehen, so daß sie sich mit der von den großen Skalen produzierten Energie im Gleichgewicht befinden. Mit Hilfe der Dissipationsrate ε und der kinematischen Viskosität lassen sich nun die sogenannten Kolmogorov-Skalen definieren, die die kleinsten, dissipativen Elemente der Turbulenzkaskade charakterisieren

$$l_\eta = (\nu^3/\varepsilon)^{1/4} \quad (2.70)$$

$$u_\eta = (\varepsilon\nu)^{1/4} \quad (2.71)$$

$$t_\eta = (\nu/\varepsilon)^{1/2} \quad (2.72)$$

Zwischen den turbulenz erzeugenden und dissipativen Wirbelelementen gibt es eine Wirbelklasse mit der Abmessung $l_t > l > l_\eta$. Basierend auf der Überlegung, daß die turbulente Reynoldszahl dieser Klasse groß ist, und somit der Energietransport nur durch die Massenträgheitskräfte bestimmt wird, formulierte KOLMOGOROV seine zweite Ähnlichkeitshypothese. Diese besagt, daß für ausreichend große Reynoldszahlen der Energietransport der Wirbelelemente $l_t > l > l_\eta$ nur von der Dissipationsrate ε bestimmt wird, und unabhängig von der kinematischen Viskosität ν ist.

Für diesen sogenannten Inertialbereich lassen sich für ein gegebenes Längenmaß l mittels dimensionsanalytischer Betrachtung die folgenden charakteristischen Geschwindigkeiten und Zeiten ableiten:

$$u(l) = (\varepsilon l)^{1/3} \quad (2.73)$$

$$t(l) = l/u(l) = (l^2/\varepsilon)^{1/3} \quad (2.74)$$

Das Verhältnis der integralen zu den Kolmogorov-Skalen ist durch die Gleichungen (2.73)–(2.74) gegeben, wobei davon ausgegangen wird, daß die größten Skalen mit $\varepsilon \propto u_t^3/l_t$ skalieren:

$$l_\eta/l_t \propto Re^{-3/4} \quad (2.75)$$

$$u_\eta/u_t \propto Re^{-1/4} \quad (2.76)$$

$$t_\eta/t_t \propto Re^{-1/2} \quad (2.77)$$

2.4.2 Das Energiespektrum

Turbulente Strömungen zeichnen sich durch ein kontinuierliches Spektrum von Längen- und Zeitskalen aus, welches sich anhand von Korrelationen an zwei Raumpunkten, sogenannten Ortskorrelationen beschreiben läßt. Eine ausführliche Betrachtung und Herleitung der folgenden Darstellungen finden sich z. B. in HINZE [96], TENNEKES und LUMLEY [218] oder POPE [182].

Ausgangspunkt aller statistischen Betrachtungen der Turbulenz ist die Ortskorrelation der Geschwindigkeitsschwankungen, die über den Tensor

$$\mathbf{R}(\mathbf{x}, \mathbf{r}, t) = \overline{\mathbf{u}'(\mathbf{x}, t) \mathbf{u}'(\mathbf{x} + \mathbf{r}, t)} \quad (2.78)$$

definiert ist. Durch eine Fouriertransformation im Raum läßt sich der Tensor \mathbf{R} in den Tensor Ψ überführen, der die spektrale Verteilungsdichte der Geschwindigkeitsfluktuationen im Wellenzahlraum $\boldsymbol{\kappa}$ beschreibt.

$$\Psi(\mathbf{x}, \boldsymbol{\kappa}, t) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^\infty \int_0^\infty \int_0^\infty \exp(-i\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{r}) \mathbf{R}(\mathbf{x}, \mathbf{r}, t) d\mathbf{r}. \quad (2.79)$$

Gleichung (2.79) kann anschaulich als Anteil der turbulenten kinetischen Energie gedeutet werden, der Wirbel mit den Abmessungen zwischen $\boldsymbol{\kappa}$ und $\boldsymbol{\kappa} + d\boldsymbol{\kappa}$ am Ort \mathbf{x} zur Zeit t besitzt. Eine herausragende Stellung in der Turbulenzbeschreibung nimmt die turbulente kinetische Energie ein. Sie beinhaltet die kinetische Energie aller Wirbelklassen, und ist über

$$k(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{2} \overline{\mathbf{u}' \cdot \mathbf{u}'}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{2} \int_0^\infty \int_0^\infty \int_0^\infty \mathbf{E} \Psi(\mathbf{x}, \boldsymbol{\kappa}, t) d\boldsymbol{\kappa}. \quad (2.80)$$

definiert. Die entsprechenden Schubspannungen erhält man durch die Integration der zugehörigen spektralen Verteilung über den Wellenzahlraum, z. B.

$$\overline{u'_1 u'_1}(\mathbf{x}, t) = \int_0^\infty \int_0^\infty \int_0^\infty \Psi_{11}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\kappa}, t) d\boldsymbol{\kappa}. \quad (2.81)$$

Für den Fall isotroper homogener Turbulenz kann die Integration über den Vektor der Wellenzahl $\boldsymbol{\kappa}$ auf eine Integration über seinen Betrag $\kappa = |\boldsymbol{\kappa}|$ reduziert werden, deren Ergebnis die Energiedichte $\mathcal{E}(\kappa, t)$ ist. Diese wird auch als Energiespektrum bezeichnet.

Die Dynamik des Energiespektrums ist für isotrope homogene Turbulenz durch die folgende Gleichung gegeben

$$\frac{\partial \mathcal{E}(\kappa, t)}{\partial t} = \mathcal{T}(\kappa, t) - \mathcal{D}(\kappa, t), \quad (2.82)$$

wobei \mathcal{T} die Umverteilung turbulenter kinetischer Energie im Trägheitsbereich und \mathcal{D} die Dissipation turbulenter kinetischer Energie aufgrund viskoser Effekte im Dissipationsbereich der Kolmogorov-Skalen beschreibt. Die Kolmogorov-Theorie besagt, daß turbulente kinetische Energie im Trägheitsbereich weder produziert noch vernichtet sondern nur

(spektral) vom Produktionsbereich der energietragenden Skalen zum Dissipationsbereich transportiert wird, so daß

$$\int_0^{\infty} \mathcal{T}(\kappa, t) = 0 \quad (2.83)$$

gilt. Der Dissipationsterm beschreibt die Umwandlung von kinetischer Energie in Wärme aufgrund viskoser Effekte und ist durch

$$\mathcal{D}(\kappa, t) = 2\nu\kappa^2\mathcal{E}(\kappa, t) \quad (2.84)$$

gegeben. Die für die Turbulenzmodellierung wichtigen Größen turbulente kinetische Energie k und ihre Dissipationsrate ε sind für den Fall isotroper homogener Turbulenz durch

$$k(t) = \int \mathcal{E}(\kappa, t) d\kappa \quad (2.85)$$

und

$$\varepsilon(t) = 2\nu \int \kappa^2 \mathcal{E}(\kappa, t) d\kappa \quad (2.86)$$

definiert.

Gemessene Energiespektren lassen sich mit Hilfe der folgenden Modellfunktion gut wiedergeben [182]

$$\mathcal{E}(\kappa, t) = C\varepsilon^{-2/3}\kappa^{-5/3}f_t(\kappa l_t)f_\eta(\kappa l_\eta), \quad (2.87)$$

wobei f_t und f_η dimensionslose Funktionen sind, die den Verlauf der Energiedichte im Bereich der großskaligen Wirbel und des Kolmogorov-Bereiches beschreiben. C wird als Kolmogorovsche Konstante bezeichnet, der ein ungefährender Wert von 1.5 zugewiesen wird [96].

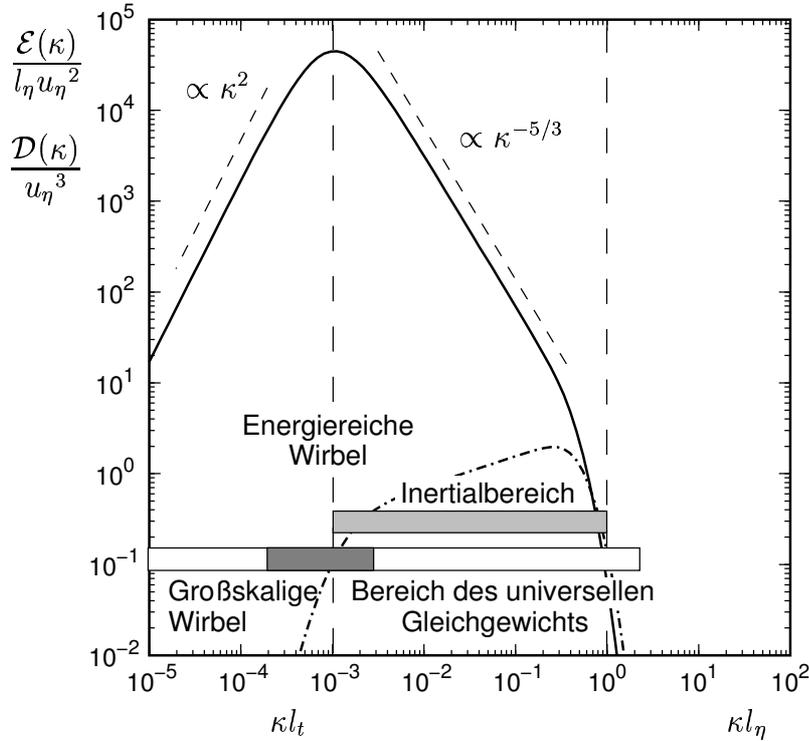


Abbildung 2.4: Schematische (normierte) Darstellung des Energiespektrums für $Re = 37500$. Durchgezogene Linie: normierte Energiedichte $\mathcal{E}(\kappa, t) / (l_\eta u_\eta^2)$, gestrichelte Linie: normierte Dissipationsfunktion $\mathcal{D}(\kappa, t) / (l_\eta u_\eta^3)$.

Die Verteilung des Energiespektrums für eine turbulente Reynoldszahl von $Re_t = 37500$, normiert mit den Kolmogorov-Skalen, ist in Abbildung 2.4 schematisch dargestellt. Das Energiedichtefunktion $\mathcal{E}(\kappa, t)$ ist durch die durchgezogene Linie gegeben während die strichpunktierte Linie den Verlauf der Dissipationsfunktion $\mathcal{D}(\kappa, t)$ wiedergibt. Die Proportionalität $\propto \kappa^{-5/3}$ im Transferbereich sowie der exponentielle Abfall der Energiedichte im Bereich der Kolmogorov-Skalen ist deutlich zu erkennen.

2.5 Turbulenzmodelle

In technischen Anwendungen sind zumeist nur die statistischen Eigenschaften einer turbulenten Strömung, insbesondere die Mittelwerte, von Bedeutung. Numerische Verfahren zur Berechnung praxisrelevanter Strömungskonfigurationen beruhen daher fast ausnahmslos auf der statistischen Beschreibung der Turbulenz. Hierbei werden die Transportgleichungen nach den Vorschlägen von REYNOLDS [186] bzw. FAVRE [75], wie in Kapitel 2.3 beschrieben, lokal zeitlich gemittelt. In diesen RANS- oder FANS-Gleichungen treten aufgrund des nichtlinearen Verhaltens der Konvektionsterme zusätzliche Unbekannte in Form zweiter statistischer Momente der Geschwindigkeitsschwankungen auf. Für diese sogenannten Reynoldsspannungen lassen sich ebenfalls Transportgleichungen ableiten, in denen jedoch wiederum unbekannte Terme in Gestalt höherer statistischer Momente auftreten, die durch ein Modell geschlossen werden müssen. Diese Verkettung der Transportgleichungen niederer und höherer Momente ist kennzeichnend für die sogenannten statistischen Turbulenzmodelle. Prinzipiell ist keine vollständige Schließung des Systems auf Basis von Transportgleichungen höherer Momente möglich. Die Einteilung der statistischen Turbulenzmodelle erfolgt daher anhand des gewählten Abbruchs der Schließungskette. Anwendungsorientierte Modelle brechen die Schließungskette aus Rechenzeitgründen fast ausschließlich bei statistischen Momenten zweiter Ordnung ab. Modelle, die die Reynoldsspannungen nur mit Hilfe von Momenten 1. Ordnung, d. h. der mittleren Geschwindigkeit, modellieren, werden als Wirbelzähigkeitsmodelle bezeichnet. Bei den sogenannten Transportgleichungs-Reynoldsspannungsmodellen erfolgt hingegen der Abbruch nach den Momenten zweiter Ordnung und die statistischen Momente höherer Ordnung werden durch ein Turbulenzmodell geschlossen.

2.5.1 Wirbelviskositätsmodelle

Die Boussinesq-Hypothese

Wirbelviskositätsmodelle lösen das Schließungsproblem der Turbulenz durch eine direkte Modellierung des Reynoldsspannungstensors mit Hilfe der mittleren Gradienten der Strömung. Die Schließungsannahme basiert auf der Analogie zwischen viskosen und turbulenten Spannungen und wurde erstmals 1877 von BOUSSINESQ [28] formuliert. Sie geht davon aus, daß die turbulenten Spannungen analog zu den viskosen Spannungen proportional zu den Gradienten der zeitlich mittleren Scherraten sind. Die verallgemeinerte Formulierung der Boussinesq-Hypothese für den Fall variabler Dichte lautet

$$\widetilde{\rho \mathbf{u}'' \mathbf{u}''} = -\bar{\rho} \nu_t (\nabla \tilde{\mathbf{u}} + \nabla^T \tilde{\mathbf{u}}) + \frac{2}{3} \tilde{k} \mathbf{I}. \quad (2.88)$$

Hierin bezeichnet k die turbulente kinetische Energie, die in Anlehnung an Gleichung (2.80) zu

$$\tilde{k} = \frac{1}{2} \frac{1}{\bar{\rho}} \widetilde{\rho \mathbf{u}'' \cdot \mathbf{u}''} \quad (2.89)$$

definiert ist. Im Gegensatz zur laminaren Viskosität ν ist die Wirbelviskosität ν_t kein Stoffwert, sondern eine von der lokalen Struktur der Turbulenz abhängige Feldgröße, zu deren Berechnung ein weiteres Modell benötigt wird. Damit ist das Schließungsproblem der Turbulenzmodellierung auf die Bestimmung der Feldgröße ν_t verschoben. Modelle dieser Klasse werden daher als Wirbelviskositätsmodelle (EVM, engl.: *Eddy Viscosity*

Model) bezeichnet. Die Einführung der Wirbelviskosität als skalare, richtungsunabhängige Größe spiegelt die Annahme isotroper Turbulenz wieder, und ist die wesentliche Einschränkung der Wirbelviskositätsmodelle. Diese lassen sich weiter nach der Anzahl der zusätzlich mitgeführten Transportgleichungen klassifizieren, die für die Bestimmung von ν_t verwendet werden. Unterschieden wird zwischen Nullgleichungs-, Eingleichungs- und Zweigleichungsmodellen. Während die beiden ersten Modellklassen nur sehr einfache Strömungskonfigurationen beschreiben können, sind die Zweigleichungsmodelle in der Berechnung praxisrelevanter Strömungsproblemen weit verbreitet. Bei diesen Modellen wird die Wirbelzähigkeit als Funktion von zwei Turbulenzgrößen dargestellt, für die zusätzliche Bilanzgleichungen gelöst werden.

Wirbelviskositätsmodelle, die auf der Boussinesq-Hypothese (2.88) beruhen, berücksichtigen nur lineare Terme zur Bestimmung des Reynoldsspannungstensors. Daneben gibt es auch nichtlineare Wirbelviskositätsmodelle, die Tensorentwicklungen höherer Ordnung verwenden, und in der Modellierung isothermer Strömungen verstärkt an Bedeutung gewinnen.

Zweigleichungsmodelle

Zweigleichungsmodelle bestimmen die turbulente Viskosität aus je einer Gleichung für das turbulente Zeitmaß und für das turbulente Längenmaß. Anstelle eines turbulenten Zeitmaßes wird häufig ein turbulentes Geschwindigkeitsmaß

$$u_t = \sqrt{\frac{2}{3} \tilde{k}} \quad (2.90)$$

zur Charakterisierung der Turbulenz herangezogen. Dieses wird aus der turbulenten kinetischen Energie \tilde{k} bestimmt, für die eine modellierte Transportgleichung der folgenden Form gelöst wird

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{k})}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \tilde{k}) = \nabla \cdot \left(\bar{\rho} \left(\nu + \frac{\nu_t}{Pr_k} \right) \nabla \tilde{k} \right) + P_k - \bar{\rho} \tilde{\varepsilon}. \quad (2.91)$$

Hierin bezeichnen $P_k = \widetilde{\rho \mathbf{u}'' \mathbf{u}''} : \nabla \tilde{\mathbf{u}}$ die Produktion und $\tilde{\varepsilon} = \nu \widetilde{(\nabla \mathbf{u}'')^2}$ die Dissipation turbulenter kinetischer Energie. Im Fall inkompressibler Strömungen mit ausreichend großer Reynoldszahl und angenommener lokaler Isotropie ist der Produktionsterm in Gleichung (2.91) durch

$$P_k = \bar{\rho} \nu_t (\nabla \tilde{\mathbf{u}} + \nabla^T \tilde{\mathbf{u}}) : \nabla \tilde{\mathbf{u}} \quad (2.92)$$

gegeben. Die turbulente Viskosität läßt sich verallgemeinert durch eine geeignete Kombination der Variablen \tilde{k}^n und $\tilde{\zeta}$ darstellen

$$\nu_t \propto \tilde{k}^a \tilde{\zeta}^b, \quad (2.93)$$

wobei die Exponenten a und b die richtige Dimension sicherstellen müssen. Die Größe $\tilde{\zeta}$ ist eine beliebige Kombination der Zeit- und Längenskalen, gemäß

$$\tilde{\zeta} \propto \left(\tilde{k}^{1/2-a} l_t \right)^{1/b}. \quad (2.94)$$

Ihre Transportgleichung läßt sich analog zu der der turbulenten kinetischen Energie formulieren

$$\frac{\partial (\overline{\rho \tilde{\zeta}})}{\partial t} + \nabla \cdot (\overline{\rho \tilde{\mathbf{u}} \tilde{\zeta}}) = \nabla \cdot \left(\overline{\rho} \left(\nu + \frac{\nu_t}{Pr_\zeta} \right) \nabla \tilde{\zeta} \right) + C_{\zeta 1} \frac{\tilde{\zeta}}{k} P_k - C_{\zeta 2} \overline{\rho} \frac{\tilde{\zeta}}{k} \tilde{\varepsilon} + S_\zeta. \quad (2.95)$$

$C_{\zeta 1}$ und $C_{\zeta 2}$ sind Konstanten, deren Wert von der gewählten Form von $\tilde{\zeta}$ abhängt und S_ζ bezeichnet weitere mögliche Quellterme, die sich bei unterschiedlichen Formulierungen für $\tilde{\zeta}$ ergeben können. Die ζ -Gleichung läßt sich entweder als semi-empirische Bilanzgleichung (2.95) formulieren oder auf Basis von statistischen Momenten ableiten. Die exakte Gleichung besitzt aber eine Vielzahl ungeschlossener Terme, die modelliert werden müssen und damit auf eine der Gleichung (2.95) ähnliche Form führen.

Die turbulenten Zeit- und Längenmaße sind dynamisch, weshalb Zweigleichungsmodelle viele Eigenschaften der Turbulenz und somit viele Strömungsprobleme gut beschreiben können. Allerdings besitzt der isotrope Wirbelzähigkeitsansatz erhebliche konzeptionelle Defizite hinsichtlich der Beschreibung komplexer turbulenter Austauschmechanismen. Schwierigkeiten treten bei der Modellierung von Ablösevorgängen unter Einfluß eines positiven Druckgradienten oder der krümmungsinduzierten Variation turbulenter Schubspannungen auf [192]. Trotz dieser Defizite bilden lineare Wirbelzähigkeitsmodelle bis heute die Basis für die Mehrzahl industrieller praxisnaher Berechnung turbulenter Strömungen. Ihre große Popularität liegt in erster Linie in der hohen numerischen Stabilität und Robustheit des resultierenden Gesamtsystems und in ihrer einfachen, effizienten Implementierung begründet. Dies gilt insbesondere für industrielle Anwendungen, in denen numerische Effizienz und Genauigkeit die gleiche Priorität besitzen.

Es existieren eine Reihe von Vorschlägen für die Größe $\tilde{\zeta}$, die jeweils Vor- und Nachteile besitzen. Die Modelle unterscheiden sich besonders hinsichtlich der Behandlung von festen Wänden und freien Rändern. Zu den verbreitetsten Zweigleichungsmodellen zählen das k - ε -Modell von LAUNDER und SPALDING und das k - ω -Modell von WILCOX. Diese beiden Modelle wurden im Rahmen dieser Arbeit angewendet und werden in den Abschnitten 2.5.5 bis 2.5.7 kurz beschrieben.

2.5.2 Reynoldsspannungsmodelle

Im Gegensatz zu EVM lösen die sogenannten Transportgleichungs-Reynoldsspannungsmodelle (RSTM, engl.: *Reynolds Stress Transport Model*) zusätzliche Transportgleichungen für die sechs Reynoldsspannungen $\overline{\mathbf{u}'\mathbf{u}'}$. Die dabei auftretenden Tripelkorrelationen werden durch Modellannahmen geschlossen. Obwohl solche Ansätze seit vielen Jahren zur Verfügung stehen [191, 125, 78, 107, 212], haben sie sich im industriellen Einsatz trotz ihrer Vorteile gegenüber EVM bei der Berechnung komplexer Strömungsprobleme nicht durchsetzen können. Die Ursache hierfür liegt im hohen Speicherplatz- und Rechenzeitbedarf, der mit der Lösung von sieben eng gekoppelten Transportgleichungen verbunden ist, die stark nichtlinear und numerisch steif sind. Ihre konvektive Bindung an die gemittelten Impulsgleichungen schwächt ihre numerische Stabilität und verursacht eine erheblichen Implementierungsaufwand. Während neuere ad-hoc Ansätze auf der Grundlage nichtlinearer Umverteilungsterme mit Skepsis betrachtet werden [211], sind erfahrungsgemäß einfache lineare RSTM nicht in der Lage alle Defizite der EVM zu beheben. Ungeachtet ihrer theoretischen Vorteile steht daher die erfolgreiche Validierung fortschrittlicher RSTM

hinsichtlich der genaueren Abbildung komplexer, praxisnaher Strömungskonfigurationen trotz erster vielversprechender Arbeiten noch aus [29].

2.5.3 Direkte Numerische Simulation

Die direkte numerische Simulation (DNS, engl.: *Direct Numerical Simulation*) basiert auf der vollständigen Lösung der in Kapitel 2.1 vorgestellten instationären Bilanzgleichungen. Ihre Anwendung verlangt die Auflösung sowohl aller turbulenter als auch chemischer Zeit- und Längenskalen. Sie zählt daher eigentlich nicht zu den Turbulenzmodellen, findet aber aufgrund gestiegener Rechnerkapazitäten zunehmend Anwendung im Bereich der Grundlagenuntersuchung turbulenter Strömungsvorgänge. Man erhofft sich von ihrem Einsatz Aufschlüsse über die Modellierung von ungeschlossenen Termen der statistischen Turbulenzmodelle und die in Large-Eddy-Simulationen verwendeten Feinstrukturmodelle. Auch im Bereich der Verbrennungsmodellierung spielen direkte numerische Simulationen eine zunehmende Rolle, da sie im Gegensatz zu Experimenten in der Lage sind, alle benötigten Informationen zur Verfügung zu stellen. Die Durchführung und Auswertung solcher Rechnungen ist jedoch extrem aufwendig, so daß bisher nur wenige Modelle auf Basis von DNS entwickelt wurden.

Die entscheidende Einschränkung der direkten numerischen Simulation liegt in ihrem prohibitiven Bedarf an Speicherplatz und Rechenzeit. Die für eine DNS erforderliche Anzahl von Gitterpunkten skaliert bei einer nicht-reagierenden Strömung mit $Re_t^{9/5}$. Bei einer für technische Systeme typischen Reynoldszahl von $10^2 < Re < 10^5$ werden für eine DNS zwischen 10^5 und 10^{11} Gitterpunkte benötigt. Im Fall reagierender Strömungen erhöht sich diese Anzahl nochmals, da zusätzlich die Reaktionszone aufgelöst werden muß. Die Simulation von praktischen Systemen ist daher aus heutiger Sicht auch in naher Zukunft mit den dann zur Verfügung stehenden Rechnern nicht möglich. Die für Ingenieure wichtigen Parameterstudien sind sogar völlig ausgeschlossen.

2.5.4 Grobstruktursimulation

Im Unterschied zur statistischen Modellierung ermöglicht die Grobstruktursimulation (LES, engl.: *Large-Eddy Simulation*) detaillierte Einsichten in die strömungsphysikalischen Prozesse. Während statistische Ansätze auch bei instationären Strömungen einen im Prinzip zeitlich gemittelten Prozeß betrachten, löst die LES die dreidimensionale instationäre Dynamik aller makroskopisch relevanter Wirbelstrukturen durch das numerische Verfahren direkt. Die energetisch untergeordneten Beiträge der kleinsten, nahezu isotropen Wirbelklassen werden dagegen analog zur RANS-Technik über ein Turbulenzmodell (SGS, engl.: *SubGrid-Scale Model*) geschlossen. Die LES umgeht damit das Problem der DNS im Bezug auf die völlige Skalenauflösung, ohne jedoch auf die Beschreibung der wesentlichen turbulenten Austauschvorgänge zu verzichten, und stellt somit einen Kompromiß zwischen DNS und RANS Modellen dar.

Die technische Anwendung von LES auf eingeschlossene Strömungen ist jedoch zur Zeit auf einfache Konfigurationen mit mäßig hohen Reynoldszahlen ($Re \leq 10^4$) begrenzt. Grund ist der extrem hohe Aufwand der zur Auflösung der dünnen aber hinsichtlich der Turbulenzstruktur sehr komplexen Wandgrenzschicht erforderlich ist. Während der Aufwand zur Auflösung des Außenbereichs einer turbulenten Grenzschicht lediglich proportional mit $Re^{0.4}$ anwächst, steigt diese Proportionalität bei Annäherung an die viskose Unterschicht auf $Re^{1.8}$ an. Zudem ist die Qualität der LES mit steigender Reynoldszahl

zunehmend von der Güte des SGS-Modells im Wandbereich abhängig. Deshalb entspricht die Auflösung der Wandgrenzschicht bei LES Simulationen heute häufig denen von DNS.

Im Hinblick auf eine physikalisch fundierte und zugleich praxisnahe Strategie galt die Grobstruktursimulation lange Zeit als Hoffnungsträger der ingenieurwissenschaftlich orientierten Turbulenzforschung. Aus den oben genannten Gründen rückt aber mittlerweile die modellierungsbehaftete Vorgehensweise stärker in den Vordergrund. Bei der Berechnung instationärer Probleme zeichnet sich gegenwärtig die Verwendung von sogenannten Hybrid-Modellen ab. Hierbei werden sowohl zonale Verfahren, die das Rechengebiet in wandferne und wandnahe Gebiete unterteilen, und nichtzonale hybride Techniken wie die Very-Large-Eddy Simulation (VLES) untersucht.

2.5.5 Das k - ε -Modell

Das k - ε -Modell ist das bekannteste Zweigleichungsmodell und wurde 1972 von JONES und LAUNDER [106] vorgestellt. Es erfreut sich trotz seiner Defizite hinsichtlich der Beschreibung komplexer turbulenter Austauschvorgänge dank seiner Effizienz und numerischen Stabilität im Bereich der angewandten Strömungssimulation großer Beliebtheit.

Das Standard k - ε -Modell ist ein halbempirisches Turbulenzmodell das zusätzliche Transportgleichungen für die turbulente kinetische Energie \tilde{k} (Gleichung (2.91)) und die Dissipationsrate $\tilde{\varepsilon}$ der turbulenten kinetischen Energie löst. Die exakte Form der Dissipationsrate ε läßt sich aus den statistischen Momenten der Geschwindigkeiten gewinnen, sie ist aber aufgrund der vielen ungeschlossenen Terme inakzeptabel komplex. Deshalb wird im allgemeinen auf eine semi-empirische Transportgleichung (2.95) zurückgegriffen

$$\frac{\partial (\bar{\rho}\tilde{\varepsilon})}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}\tilde{\mathbf{u}}\tilde{\varepsilon}) = \nabla \cdot \left(\bar{\rho} \left(\nu + \frac{\nu_t}{Sc_\varepsilon} \right) \nabla \tilde{\varepsilon} \right) + C_{\varepsilon 1} \frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{k}} P_k - C_{\varepsilon 2} \bar{\rho} \frac{\tilde{\varepsilon}^2}{\tilde{k}}. \quad (2.96)$$

Gleichung (2.96) modelliert die Produktion von $\tilde{\varepsilon}$ aufgrund mittlerer Gradienten über $C_{\varepsilon 1} \left(\tilde{\varepsilon}/\tilde{k} \right) P_k$ und approximiert die Differenz zwischen Produktion aufgrund turbulenter Geschwindigkeitsschwankungen und Dissipation durch $C_{\varepsilon 2} \left(\tilde{\varepsilon}/\tilde{k} \right) \tilde{\varepsilon}$. Die diffusiven Transportterme werden in Analogie zur k -Gleichung mit Hilfe eines Gradientenansatzes ausgedrückt. Diese Art der Modellierung ist charakteristisch für alle Zweigleichungsmodelle und findet sich auch in der Beschreibung des turbulenten Transports von Skalaren wieder.

Die Wirbelviskosität ist bei Verwendung von \tilde{k} und $\tilde{\zeta} = \tilde{\varepsilon}$ wegen Gleichung (2.93) durch den folgenden Ansatz gegeben

$$\nu_t = C_\mu \frac{\tilde{k}^2}{\tilde{\varepsilon}}, \quad (2.97)$$

mit $n = -b = 1$ und $a = 2$. Das turbulente Längenmaß ist damit proportional zu

$$l_t \propto \frac{\tilde{k}^{3/2}}{\tilde{\varepsilon}}. \quad (2.98)$$

Das k - ε -Modell enthält fünf Proportionalitätskoeffizienten, die an eine Vielzahl experimenteller Ergebnisse angepaßt wurden und in Tabelle 2.1 zusammengestellt sind. Die Werte stellen einen Kompromiss für unterschiedlichste Strömungskonfigurationen dar. Die Genauigkeit des k - ε -Modells läßt sich zwar durch eine Anpassung der Konstanten an eine spezielle Strömung verbessern, seine Allgemeingültigkeit geht damit aber verloren.

C_μ	Sc_k	Sc_ε	$C_{\varepsilon 1}$	$C_{\varepsilon 2}$
0.09	1.0	1.3	1.44	1.92

Tabelle 2.1: Konstanten des Standard k - ε -Modells.

Seit Bestehen des k - ε -Modells wurde deshalb eine Vielzahl von Modifikationen für die ε -Gleichung vorgeschlagen, deren bekanntesten von HANJALIĆ und LAUNDER [90] sowie POPE [178] stammen. Untersuchungen von HANJALIĆ [89] haben jedoch gezeigt, daß auch diese Modelle nicht die breite Anwendbarkeit des Standardmodells besitzen und nur für spezielle Strömungskonfigurationen bessere Ergebnisse liefern.

2.5.6 Das k - ω -Modell

Die Wahl der Wirbelstärke $\zeta = \tilde{\omega}$ als zweites charakteristisches Maß der Turbulenz läßt sich auf KOLMOGOROV [118] zurückführen, sie gelangte aber erst durch das von WILCOX [236] entwickelte k - ω -Modell zu einer großen Popularität. Die Wirbelstärke kann als inverses Zeitmaß der energietragenden Wirbel interpretiert werden, und ist zu

$$\tilde{\omega} = \frac{1}{C_\mu} \frac{\tilde{\varepsilon}}{k} \quad (2.99)$$

definiert. WILCOX löst in seinem Modell neben den RANS- und der k -Gleichung zusätzlich die folgende Transportgleichung für $\tilde{\omega}$

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{\omega})}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \tilde{\omega}) = \nabla \cdot \left(\bar{\rho} \left(\nu + \frac{\nu_t}{Pr_\omega} \right) \nabla \tilde{\omega} \right) + (C_{\varepsilon 1} - 1) \frac{\tilde{\omega}}{k} P_k - C_\mu (C_{\varepsilon 2} - 1) \tilde{\omega}^2, \quad (2.100)$$

wobei die turbulente Viskosität aufgrund von Gleichung (2.93) zu

$$\nu_t = \frac{\tilde{k}}{\tilde{\omega}} \quad (2.101)$$

bestimmt ist. Die von WILCOX angegebenen Werte für die fünf Koeffizienten des Modells sind in Tabelle 2.2 zusammengefaßt.

Der Vorteil des k - ω gegenüber dem k - ε -Modell liegt in seiner Fähigkeit den semi-viskosen und voll-turbulenten Bereich der Wandgrenzschicht konsistent zu beschreiben. Aufgrund seiner Formulierung ist das Modell jedoch sehr sensitiv gegenüber den Zuströmrandbedingungen der Längenmaßvariablen. Da die Vorgabe eines Längenmaßes an einem Einströmrand nicht trivial ist, sind in den letzten Jahren Kombinationen von k - ε und k - ω -Modell entwickelt worden, welche die spezifischen Vorteile der beiden Modelle kombinieren.

2.5.7 Das Baseline-Modell von MENTER

Das Baseline-Modell von MENTER [150, 151] ist eine Kombination des k - ε -Modells im äußeren und des k - ω -Modells im wandnahen Bereich. Hierzu wird die Transportgleichung

C_μ	Pr_k	Pr_ω	$C_{\varepsilon 1}$	$C_{\varepsilon 2}$
0.09	2.0	2.0	1.55	1.83

Tabelle 2.2: Konstanten des k - ω -Modells von WILCOX.

	C_μ	Pr_k	$Pr_{\varepsilon/\omega}$	$C_{\varepsilon/\omega 1}$	$C_{\varepsilon/\omega 2}$
k - ε -Modell	0.09	1.0	1.0	0.44	0.0828
k - ω -Modell	0.09	2.0	0.856	5/9	3/40

Tabelle 2.3: Konstanten des Baseline-Modells von MENTER.

der turbulenten Dissipationsrate ε auf die Form der ω -Transportgleichung gebracht und die beiden Gleichungen mit einer Gewichtungsfunktion F_1 bzw. $(1 - F_1)$ multipliziert. Dies führt auf die folgenden zusätzlichen Transportgleichungen:

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{k})}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \tilde{k}) = \nabla \cdot \left(\bar{\rho} \left(\nu + \frac{\nu_t}{Pr_k^*} \right) \nabla \tilde{k} \right) + P_k - C_\mu \bar{\rho} \tilde{k} \tilde{\omega} \quad (2.102)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{\omega})}{\partial t} + \nabla \cdot (\tilde{\mathbf{u}} \tilde{\omega}) = \\ \nabla \cdot \left(\bar{\rho} \left(\nu + \frac{\nu_t}{Pr_\omega^*} \right) \nabla \tilde{\omega} \right) + C_{\omega 1}^* \frac{\tilde{\omega}}{\tilde{k}} P - C_{\omega 2}^* \omega^2 + (1 - F_1) \frac{2}{Pr_\omega} \frac{1}{\tilde{\omega}} \nabla \tilde{k} \cdot \nabla \tilde{\omega}. \end{aligned} \quad (2.103)$$

Der letzte Term in Gleichung (2.103) wird als Kreuzdiffusionsterm bezeichnet. Die Konstanten des Modells sind abhängig von der Gewichtungsfunktion F_1 , die den Übergang vom k - ω -Modell ($F_1 = 1$) zum k - ε -Modell ($F_1 = 0$) festlegt. Die Konstanten der Gleichungen (2.102) und (2.103) lassen sich damit durch folgende lineare Überlagerung aus den Konstanten des k - ε und k - ω -Modells bestimmen

$$C^* = F_1 C_{k-\omega} + (1 - F_1) C_{k-\varepsilon}. \quad (2.104)$$

MENTER gibt die Übergangsfunktion mit

$$F_1 = \tanh(\arg^4), \quad (2.105)$$

$$\arg = \min \left[\max \left(\frac{\sqrt{\tilde{k}}}{C_\mu \tilde{\omega} y}, \frac{500\nu}{\tilde{\omega} y^2} \right), \frac{4\bar{\rho} \tilde{k}}{Pr_\omega CD_{k-\omega} y^2} \right] \quad \text{und} \quad (2.106)$$

$$CD_{k-\omega} = \max \left(2\bar{\rho} \frac{1}{Pr_\omega} \nabla \tilde{k} \cdot \nabla \tilde{\omega}, 10^{-20} \right) \quad (2.107)$$

an. Die Variable y steht in diesem Zusammenhang für den Wandabstand. Der Konstantensatz des Baseline-Modells findet sich in Tabelle 2.3.

Der Gültigkeitsbereich des k - ω -Modells läßt sich durch einen modifizierten Ausdruck von F_1 auf die viskose Unterschicht und den sich daran anschließenden Übergangsbereich beschränken. Daraus resultiert ein zonales k - ε -Modell, daß anstelle des logarithmischen Wandgesetzes das k - ω -Modell zur Beschreibung der wandnahen Unterschicht verwendet. Das modifizierte Argument der Funktion F_1 ist in diesem Fall durch

$$\arg = \min \left(\frac{500\nu}{\tilde{\omega} y^2}, \frac{4\bar{\rho} \tilde{k}}{Pr_\omega CD_{k-\omega} y^2} \right) \quad (2.108)$$

gegeben.

2.5.8 Turbulenter Transport von Skalaren

Die zeitliche Mittelung der Bilanzgleichung einer skalaren Größe ϕ führt auf einen unbekanntem turbulent-diffusiven Transportterm $\overline{\rho \mathbf{u}'' \phi''}$. Seine Modellierung erfolgt im allgemeinen auf der gleichen Hierarchiestufe wie das verwendete Turbulenzmodell. Da die Mischung eines Skalars in erster Linie durch den turbulenten Transport bestimmt wird, kann die Vorhersage des Mischungsfeldes nicht besser ausfallen als die des turbulenten Strömungsfeldes. Im Rahmen von Zweigleichungsmodellen wird der skalare Fluß in Analogie zur Boussinesq-Hypothese (2.88) mit Hilfe eines sogenannten Gradientenansatzes modelliert. Die allgemeine Formulierung des Gradientenflußansatzes lautet

$$\overline{\rho \mathbf{u}'' \phi''} = -\bar{\rho} \frac{1}{Sc_\phi} \left(\frac{\tilde{k}}{\tilde{\varepsilon}} \right)^n \left(\frac{\overline{\phi''^2}}{\tilde{\chi}_\phi} \right)^m \nabla \tilde{\phi}, \quad (2.109)$$

wobei $\tilde{\chi}_\phi$ die skalare Dissipationsrate und Sc_ϕ die turbulente Schmidtzahl ist. Die Exponenten m und n dürfen nach POPE [180] jedoch nur die Werte $n = 1$ und $m = 0$ annehmen, um die Unabhängigkeitsbedingung nicht zu verletzen. Damit reduziert sich Gleichung (2.109) auf die allgemein bekannte Form des Gradientenansatzes

$$\overline{\rho \mathbf{u}'' \phi''} = -\bar{\rho} D_t \nabla \tilde{\phi}. \quad (2.110)$$

Hierbei bezeichnet D_t die turbulente Diffusivität, die analog zum laminaren Fall über

$$D_t = \frac{\nu_t}{Sc_\phi} \quad (2.111)$$

definiert ist. Diese Art der Modellierung ist im Rahmen der Annahmen des $k - \varepsilon$ -Modells gültig für isotherme Strömungsvorgänge. Verschiedene Autoren [42, 167] weisen allerdings darauf hin, daß dies für reaktive Strömungen nicht unbedingt der Fall sein muß. Der Verbrennungsvorgang beeinflusst das turbulente Spektrum und damit die Annahmen, auf denen Gleichung (2.110) basiert. Diese Problematik wird in Kapitel 3.5 nochmals aufgegriffen und genauer betrachtet.

2.6 Reduktion von Reaktionsmechanismen

Obwohl für viele gasförmige Brennstoffe die reaktionskinetischen Daten in Form von B_i , b_i und E_{Ai} bekannt sind [230, 12, 11, 207], macht die Vielzahl von Elementarreaktionen und die damit verbundene große Anzahl von chemischen Komponenten die Behandlung von detaillierten Kinetiken äußerst aufwendig. Zudem umfassen die beteiligten Reaktionen Zeitskalen, die sich um mehrere Größenordnungen unterscheiden, weshalb das Gleichungssystem mathematisch steif ist. Dies hat zur Folge, daß die Lösung der detaillierten Kinetik einer reaktiven Strömung wesentlich mehr Rechenzeit benötigt als die Lösung des Strömungsfeldes. Der Aufwand zur Lösung der Chemie hängt zum einen von der Anzahl der reagierenden Komponenten N_k , zum anderen von der Anzahl unabhängiger Reaktionen N_i ab. Daher ist man bestrebt eine detaillierte Kinetik, die im Fall von Kohlenwasserstoffen mehrere hundert Elementarreaktionen umfaßt, auf diejenigen Reaktion zu reduzieren, die den Reaktionsablauf maßgeblich prägen und die Eigenschaften des vollständigen Reaktionsmechanismus möglichst genau wiedergeben.

Die Analyse von Verbrennungsvorgängen zeigt, daß je nach Reaktionsbedingungen, d. h. Stöchiometrie, Druck und Temperatur, unterschiedliche Reaktionspfade eingeschlagen werden. Eine anschauliche Darstellung dieses Sachverhalts liefert die Reaktionsflußanalyse nach WARNATZ [229], die in Abbildung 2.5 für eine vorgemischte stöchiometrische Methan/Luft Flamme schematisch dargestellt ist. Neben der Komplexität des Verbren-

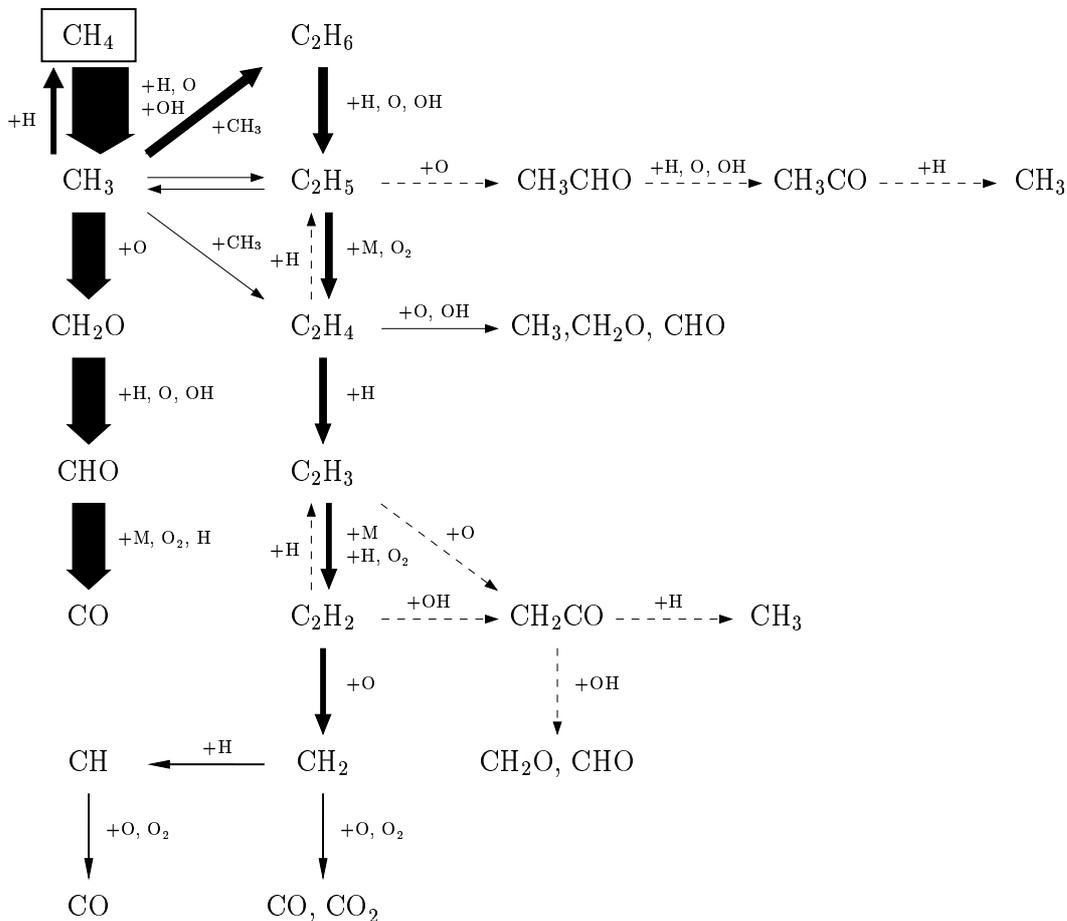


Abbildung 2.5: Reaktionsflußanalyse einer stöchiometrischen Methan/Luft Flamme.

nungsvorganges zeigt das Reaktionsflußschema auch, daß es dominierende Reaktionspfade gibt. Diese Reaktionspfade sowie die geschwindigkeitsbestimmenden Elementarreaktion zu finden, ist das Ziel unterschiedlicher Reduktionsstrategien. In der Literatur finden sich hierzu eine Vielzahl von Ansätzen, die sich prinzipiell in vier Gruppen gliedern lassen:

1. Globale Kinetiken
2. Lumping-Methoden
3. Klassische Reduktionsverfahren (Semi-Heuristische Methoden)
4. Dynamische Methoden

2.6.1 Globale Kinetiken

Globale Reaktionskinetiken vereinfachen den Reaktionsablauf auf eine oder mehrere Reaktionen, die die Bildung von Produkten bzw. Zwischenprodukten beschreibt. Die bekanntesten Kinetiken sind die von WESTBROOK und DRYER [234] sowie HAUTMANN ET AL. [92]. Diese globale Kinetiken zielen darauf ab, die wesentlichen Eigenschaften des chemischen System, wie Flammengeschwindigkeit oder Zündverzugszeit, nach Möglichkeit mit einer einzigen Reaktionsfortschrittsvariablen abzubilden. Sie können aber keine Aussagen über komplexere Prozesse treffen, die mit der Bildung von reaktiven Zwischenprodukten verbunden sind, wie Schadstoffbildung, Flammenverlöschten oder Zweistufenzündung.

Globale Kinetiken finden immer dann ihre Anwendung, wenn für den Prozeß entweder keine ausreichend validierten detaillierten Mechanismen existieren, oder eine Berücksichtigung von komplexeren Kinetiken aufgrund des damit verbundenen numerischen Aufwands ausgeschlossen ist. So wird die Kohleverbrennung oder die Vergasung von Kunststoffen bis heute fast ausschließlich mit Hilfe globaler Ansätze beschrieben. Ebenso werden für viele technische Brennstoffe, die fast immer ein schwer zu spezifizierendes Gemisch unterschiedlichster Kohlenwasserstoffverbindungen sind, zumindest teilweise global-kinetische Ansätze verwendet. Aber auch wenn für einen chemischen Prozeß detaillierte Kinetiken existieren, ist ihr Einsatz wegen des erforderlichen Rechenzeit- und Speicherplatzbedarfs auch in Zukunft auf die Beschreibung sehr einfacher Systeme beschränkt. Sowohl für die Simulation von technischen Systemen, als auch für direkte numerische Simulationen werden deshalb meistens globale Kinetiken angewendet.

2.6.2 Lumping Verfahren

Das Lumping Verfahren reduziert die Anzahl der Komponenten, indem Eigenschaften und Informationen einer Gruppe von Verbindungen durch eine repräsentative Variable zusammengefaßt werden. Am verbreitetsten sind lineare Methoden, bei denen die repräsentative Variable durch eine lineare Kombination der Komponenten dargestellt wird. Nicht-lineare Methoden sind zwar breiter anwendbar, ihre Komplexität verhindert aber einen effizienten Einsatz [220]. Lumping Verfahren können sowohl auf Kenntnis der chemischen Abläufe, sogenanntes chemisches Lumping, als auch auf rein mathematischen Ansätzen basieren.

Am erfolgreichsten wurde das chemische Lumping zur Reduktion von Niedertemperaturmechanismen eingesetzt, deren bekanntester Vertreter das Shell-Modell ist [86]. Ein Algorithmus zur numerischen Umsetzung des chemischen Lumpings computergenerierter Niedertemperaturmechanismen wurde von BOUNACEUR ET AL. [27] vorgeschlagen, und

anhand der Oxidation höherwertiger Alkane validiert. LISSANSKI und GARDINER [137] haben durch chemisches Lumping einen reduzierten Mechanismus zur Beschreibung der Selbstzündung und der laminaren Flammgeschwindigkeit von Methan entwickelt, der jedoch nicht die Massenerhaltung erfüllt, und dessen Anwendung daher mit Skepsis betrachtet werden muß. Ein weiteres Anwendungsgebiet von Lumping Verfahren sind Polymerisationsreaktionen und heterogene Gasphasenreaktionen, wobei an dieser Stelle die Rußmodellierung zu nennen ist [76].

Lumping Verfahren besitzen nicht das Potential der im folgenden vorgestellten Ansätze, sie sind aber in der Lage sehr große Reaktionsmechanismen, die viele Isomere berücksichtigen, mit minimalem Verlust an chemisch-kinetischer Information zu reduzieren, und bieten damit einen guten Ausgangspunkt für weitere Reduktionsverfahren.

2.6.3 Klassische Reduktionsmethoden

Klassische Reduktionsmethoden vereinfachen einen detaillierten Reaktionsmechanismus in mehreren Schritten. Der erste Schritt besteht in einer Reaktionspfadanalyse, bei der Reaktionspfade, deren Beitrag unter den betrachteten Bedingungen vernachlässigbar ist, und Verbindungen, die an den wichtigen Reaktionen nicht teilnehmen, eliminiert werden [231]. Die geschwindigkeitsbestimmenden Reaktionen der verbleibenden Reaktionspfade lassen sich dann mit Hilfe einer Sensitivitätsanalyse identifizieren [156]. Im nächsten Schritt werden die unabhängigen Reaktionen dieses sogenannten Rumpfmechanismus zusammengefaßt, so daß die Stöchiometrie des chemischen Systems durch Kombination dieser Elementarreaktionen wiedergegeben wird [70, 159]. Schließlich wird die Anzahl der zu lösenden Differentialgleichungen durch die Annahme der Quasistationarität von ausgesuchten Spezies und die Annahme des partiellen Gleichgewichts ausgesuchter Reaktionen weiter reduziert, ohne daß wichtige Reaktionen oder Komponenten vernachlässigt werden [169]. Diese Strategie wurde von einer Reihe von Autoren zur Erstellung von reduzierten Mechanismen für Methan und einer Vielzahl von niedermolekularen Brennstoffen angewendet. Eine Zusammenstellung der Ergebnisse sowie die Anwendung auf laminare Vormisch- und Diffusionsflammen findet in sich in SMOOKE (Ed.) [208] sowie PETERS und ROGG (Ed.) [168].

Die Prinzipien der Quasistationarität und des partiellen Gleichgewichts sollen im folgenden anhand der Speziesbilanz (2.2) in ihrer allgemeinen Form

$$\mathcal{L}(\psi_k) = \sum_{i=1}^{N_R} \nu_{ki} \dot{\omega}_k. \quad (2.112)$$

erläutert werden. Hierbei bezeichnet \mathcal{L} einen allgemeinen Transportoperator und ψ_k die spezifischen Molzahlen

$$\psi_k = \frac{Y_k}{W_k}. \quad (2.113)$$

Quasistationarität von Verbindungen

Das Prinzip der Quasistationarität wird auf den zeitlichen Verlauf der Konzentrationen von Zwischenprodukten angewendet. Häufig sind Zwischenprodukte, insbesondere Radikale, sehr reaktiv, d. h. sie besitzen im Vergleich zu den übrigen Produkten nur eine sehr kurze Lebensdauer. Ihre Bildungsgeschwindigkeit ist daher näherungsweise gleich ihrer

Verbrauchsgeschwindigkeit. Demnach nähert sich eine Verbindung dem quasistationären Zustand, wenn die folgende Bedingung erfüllt ist [57]:

$$\frac{|\dot{\omega}_k^+ - \dot{\omega}_k^-|}{\max(|\dot{\omega}_k^+|, |\dot{\omega}_k^-|)} \ll \delta, \quad (2.114)$$

wobei δ eine kleine Zahl ist. Der Fehler, der durch die Annahme der Quasistationarität gemacht wird, ist proportional zum Verhältnis der Konzentrationen der quasistationären Verbindung zu den Hauptspezies des resultierenden Mechanismus [161]. Das obige Kriterium kann erweitert werden, wenn die Konzentration einer interessierenden Komponente klein gegenüber den Hauptspezies ist. In diesem Fall läßt sich eine modifizierte Quasistationaritätsbedingung formulieren, die Gleichung (2.114) und die Konzentration der betrachteten Komponente in Form des Molenbruchs X_k berücksichtigt [57]:

$$X_k \frac{|\dot{\omega}_k^+ - \dot{\omega}_k^-|}{\max(|\dot{\omega}_k^+|, |\dot{\omega}_k^-|)} \ll \delta. \quad (2.115)$$

Die Anwendung der Quasistationaritätsannahme führt auf einen algebraischen Ausdruck für die eliminierte Verbindung k als Funktion der übrigen Komponenten, wobei das resultierende Gleichungssystem häufig nicht-linear zwischen den quasistationären Spezies gekoppelt ist. Zur Lösung dieser Gleichungen sind daher innere Iterationen mit Hilfe funktionaler oder Newton-Verfahren erforderlich.

Diese Vorgehensweise ist zwar sehr erfolgreich in der Reduktion eines Rumpfmehanismus auf einige wenige globale Reaktionen, die Erstellung des reduzierten Mechanismus ist aber sehr aufwendig und aufgrund der erforderlichen algebraischen Umformungen fehleranfällig. Deshalb wurde von CHEN [58] das Programm CARM (engl.: *Computer Assisted Reduction Mechanism code*) entwickelt, welches die Reduktion weitestgehend automatisiert, und den erforderlichen Quellcode zur Berechnung der gesuchten Bildungsgeschwindigkeiten generiert.

Partielles Gleichgewicht von chemischen Reaktionen

Eine weitere Möglichkeit zur Reduzierung der Anzahl von Gleichungen stellt die Annahme des partiellen Gleichgewichts einer Reaktion dar. Eine Reaktion befindet sich im partiellen Gleichgewicht, wenn die Geschwindigkeiten sowohl der Vorwärts- als auch der Rückreaktion sehr viel größer als die resultierende Reaktionsgeschwindigkeit sind. In diesem Fall läßt sich die rechte Seite des Differentialgleichungssystems (2.112) in zwei Anteile aufspalten [162]:

$$\mathcal{L}(\psi_k) = \sum_{i=1}^{N_l} \nu_{ki} q_i + \sum_{i=N_l+1}^{N_i} \nu_{ki} q_i = \sum_{i=1}^{N_l} \nu_{ki} q_i + \mathcal{Q}_l. \quad (2.116)$$

Der erste Term der rechten Seite summiert über die N_l linear unabhängigen Reaktionen, während im zweiten Term die linear abhängigen Reaktionen zusammengefaßt sind. Dieses Gleichungssystem kann nun invertiert und nach \dot{q} aufgelöst werden. Mit Hilfe von Gleichung (2.47) folgt

$$\prod_{l=1}^{N_k} \psi_l^{\nu_{li}^+} - \frac{1}{K_{c,i}} \prod_{l=1}^{N_k} \psi_l^{\nu_{li}^-} = \frac{1}{k_{fi}} \sum_{k=1}^{N_l} \nu_{ki}^{-1} (L(\psi_k) - \mathcal{Q}_l), \quad (2.117)$$

wobei ν_{ki}^{-1} die Inverse der Koeffizientenmatrix ν_{ki} ist. Diese Gleichung verdeutlicht das Prinzip des partiellen Gleichgewichts. Für sehr große Geschwindigkeitskonstanten wird der Ausdruck auf der rechten Seite klein, und im Grenzfall einer verschwindenden rechten Seite geht Gleichung (2.117) in das Massenwirkungsgesetz (2.52) über. Dieser Ausdruck läßt sich nach einer Konzentration auflösen, und somit eine weitere Bestimmungsgleichung anschreiben, welche die Ordnung des Differentialgleichungssystems (2.112) um eine Ordnung reduziert. Im allgemeinen ist der Gültigkeitsbereich partieller Gleichgewichtsannahmen jedoch sehr beschränkt, so daß für Verbrennungsreaktionen meist Quasistationaritätsannahmen angewendet werden [231].

Die Kombination von Quasistationaritäts- und partiellen Gleichgewichtsannahmen erlaubt eine drastische Reduktion detaillierter Reaktionsmechanismen. Das Ergebnis ist ein reduzierter Mechanismus mit quasi-Elementarreaktionen der Form $\text{Reaktanten} \rightleftharpoons \text{Produkte}$, deren Reaktionsgeschwindigkeiten als eine lineare Kombination der Reaktionsgeschwindigkeiten der zugrunde liegenden Elementarreaktionen des detaillierten Mechanismus ausgedrückt werden. Die für die Ratenberechnung erforderlichen Massenbrüche der mit Hilfe von Quasistationaritäts- und partiellen Gleichgewichtsannahmen aus dem System eliminierten Komponenten sind durch mehr oder weniger komplexe algebraische Funktionen der verbleibenden Spezies beschrieben und können mit Hilfe numerischer Verfahren bestimmt werden. Dies ist gleichzeitig der größte Nachteil dieser Art der systematischen Reduktion von Reaktionsmechanismen, da diese algebraischen Funktionen die Lösung des reduzierten Gleichungssystems (2.112) merklich erschweren können. Eine Reduzierung der kinetischen Gleichungen bedeutet daher nicht zwangsläufig eine drastische Verringerung der Rechenzeit, die zur Lösung des Systems erforderlich ist.

Ein wesentlicher Vorteil klassischer Reduktionsmethoden gegenüber den im folgenden Kapitel beschriebenen dynamischen, computergestützten Reduktionsmethoden ist sicherlich, daß am Ende dieses systematischen Verfahrens ein lesbarer Reaktionsmechanismus steht. Durch weitere Vereinfachungen lassen sich häufig explizite Ausdrücke für Reaktionsgeschwindigkeiten und Massenfraktionen ableiten, die eine weitere Verwendung der reduzierten Mechanismen zur analytischen Vorhersage von laminaren Flammenstrukturen [203, 239], Zündprozessen [154, 200, 67] und Schadstoffbildung [95, 196] erlauben. In neuerer Zeit haben die auf klassische Weise reduzierten Mechanismen im Zusammenhang mit der Modellierung turbulenter Verbrennung mit Hilfe von Monte-Carlo-Methoden wieder Beachtung gefunden, da sie aufgrund ihrer geringen Anzahl an unabhängigen Variablen, die Anzahl der möglichen Realisierungen und damit die Rechenzeit deutlich senken können [17].

2.6.4 Dynamische Reduktionsmethoden

Die Reduktion von Mechanismen mit Hilfe von Quasistationaritäts- und partiellen Gleichgewichtsannahmen ist mühsam und sehr zeitaufwendig. Zusätzlich ist eine gute Kenntnis über den Reaktionsablauf Voraussetzung, um die richtigen Annahmen bezüglich Quasistationarität und partiellem Gleichgewicht treffen zu können. Da der Aufwand mit dem Umfang des Mechanismus stark zunimmt, ist eine „manuelle“ Reduktion größerer Reaktionsmechanismen kaum noch zu handhaben. Es wurde und wird deshalb nach Methoden gesucht, die eine automatische Reduktion des Mechanismus ermöglichen, die von einem Rechner, d. h. ohne Kenntnis des Reaktionsablaufs, durchgeführt werden kann. Allen diesen Methoden ist gemeinsam, daß sie die schnellen Prozesse, d. h. Reaktionen mit den kleinsten Zeitskalen, mit Hilfe von Eigenwertanalysen aus dem Gleichungssystem elimi-

nieren.

Eigenwertanalyse

Die zeitliche Änderung der spezifischen Molzahlen (2.113), und somit die Dynamik des Mischungsraumes in einem isobaren, adiabaten homogenen System, ist durch das folgende System von gewöhnlichen Differentialgleichungen beschrieben

$$\frac{d\psi_k}{dt} = \dot{\mathbf{r}}(\boldsymbol{\psi}), \quad (2.118)$$

wobei $\dot{\mathbf{r}}(\boldsymbol{\psi})$ den Vektor der Reaktionsgeschwindigkeiten $\sum \nu_{ki} \dot{q}_k / \rho$ bezeichnet. Die kürzesten Zeitskala, die in diesem System auftritt, ist durch das Minimum der Inversen des Reaktionsgeschwindigkeitsvektors gegeben:

$$t_{kin, min} = \min_k (|\dot{\mathbf{r}}_k(\boldsymbol{\psi})|^{-1}). \quad (2.119)$$

Diese Zeitskala bezieht sich aber nur auf die momentane zeitliche Entwicklung des Systems und gibt keine Auskunft über die Zeitskalen der gleichzeitig ablaufenden Elementarreaktionen, die die mathematische Steifheit des Gleichungssystems bestimmen. Diese Zeitskalen können aber auf Basis der folgenden Transformationen auf rein numerischen Wege ohne Kenntnis der zugrundeliegenden Chemie ermittelt werden.

Die zeitliche Änderung des Reaktionsgeschwindigkeitsvektors $\dot{\mathbf{r}}$ ist nach der Kettenregel bestimmt durch

$$\frac{d\dot{\mathbf{r}}}{dt} = \left(\frac{\partial \dot{\mathbf{r}}}{\partial \boldsymbol{\psi}} \right)^T \cdot \frac{d\boldsymbol{\psi}}{dt} = \mathbf{J}^T \dot{\mathbf{r}}. \quad (2.120)$$

Hierbei bezeichnet $\mathbf{J} = \partial \dot{\mathbf{r}}_i / \partial \psi_k$ die Jacobi-Matrix von $\dot{\mathbf{r}}$. Diese kann in ihre Eigenwerte zerlegt werden, gemäß

$$\mathbf{J} = \mathbf{U} \boldsymbol{\Lambda} \mathbf{U}^{-1}, \quad (2.121)$$

wobei $\boldsymbol{\Lambda}$ die Eigenwertmatrix sowie \mathbf{U} die Matrixform der rechten Eigenvektoren (als Spaltenvektoren) und \mathbf{U}^{-1} die Matrix der linken Eigenvektoren (als Zeilenvektoren) bezeichnen.

Eine Störungsanalyse zeigt, daß eine kleine Änderung $\delta\boldsymbol{\psi}$ des Konzentrationsvektors $\boldsymbol{\psi}$ aus Gleichung (2.118) die folgende Gleichung erfüllt:

$$\frac{d(\delta\boldsymbol{\psi})}{dt} = \left(\frac{\partial \dot{\mathbf{r}}}{\partial \boldsymbol{\psi}} \right)^T \cdot \delta\boldsymbol{\psi} = \mathbf{J}^T \delta\boldsymbol{\psi}. \quad (2.122)$$

Die analytische Lösung dieser Gleichung lautet

$$\delta\boldsymbol{\psi} = \mathbf{U} \exp(\boldsymbol{\Lambda}t) \mathbf{U}^{-1} \delta\boldsymbol{\psi}|_{t=0}. \quad (2.123)$$

Die Störung läßt sich mit $\delta\hat{\boldsymbol{\psi}} = \mathbf{U}^{-1} \delta\boldsymbol{\psi}$ in die Basis der Eigenvektoren transformieren und man erhält als Ergebnis die zeitliche Entwicklung des Betrags der aufgeprägten Störung im Raum der Eigenvektoren. In Komponentenschreibweise geschrieben gilt

$$\delta\hat{\psi}_k = \exp(\lambda_k^{\text{Real}}t) \hat{\psi}_k|_{t=0}, \quad (2.124)$$

Der Betrag des Realteils des k -ten Eigenwertes λ_k^{Real} beschreibt, wie schnell eine Störung abklingt, während das Vorzeichen entscheidet, ob eine Störung in Richtung des k -ten Eigenvektors mit der Zeit anwächst, konstant bleibt oder abklingt.

ILDm

Die ILDM-Methode basiert auf dem Umstand, daß alle möglichen Zustände eines chemisch reagierende System in einem Zustandsraum befinden, der durch die Zustandsvariablen p , h und Y_k aufgespannt wird. Wie alle dynamischen Systeme besitzt auch ein chemisches System, welches durch den zugehörigen Reaktionsmechanismus beschrieben ist, einen Gleichgewichtspunkt im Zustandsraum. Dieser ist im Falle des chemisch reagierenden Systems bei Vorgabe von Druck, Gesamtenthalpie und Elementzusammensetzung durch die zugehörige Gleichgewichtszusammensetzung gegeben. Eine chemische Reaktion wird sich daher immer, unabhängig von den gewählten Anfangsbedingungen, entlang einer Trajektorie durch den Zustandsraum auf den Gleichgewichtspunkt hin bewegen. Alle Trajektorien treffen sich demnach im Gleichgewichtspunkt. Eine Analyse der Trajektorien zeigt nun, daß selbst Trajektorien, die zu sehr unterschiedlichen Anfangsbedingungen gehören, sich schon lange vor dem Erreichen des Gleichgewichts bündeln wie dies in Abbildung 2.6 dargestellt ist.

Dies bedeutet, daß im vieldimensionalen Zustandsraum mehrdimensionale Flächen, sogenannte Mannigfaltigkeiten, existieren, denen sich die Trajektorien sehr schnell nähern. Da diese Mannigfaltigkeiten eine niedrigere Dimension als der Zustandsraum, in dem sie sich befinden, besitzen, spricht man von intrinsischen niederdimensionalen Mannigfaltigkeiten (ILDm, engl.: *Intrinsic Low Dimensional Manifolds*). Diese beschreiben die Relaxation eines Zustandes auf Unterräume niedriger Dimension. Physikalisch läßt sich das Verhalten der Trajektorien mit Hilfe stark differierender Zeitskalen der beteiligten chemischen Reaktionen erklären. Während das schnelle Einschwenken der Trajektorien in Richtung der anziehenden Mannigfaltigkeiten durch die schnellsten Reaktionen bestimmt ist, spiegelt die Bewegung entlang dieser Mannigfaltigkeiten auf den Gleichgewichtspunkt hin den Ablauf der langsamsten Reaktionen wieder.

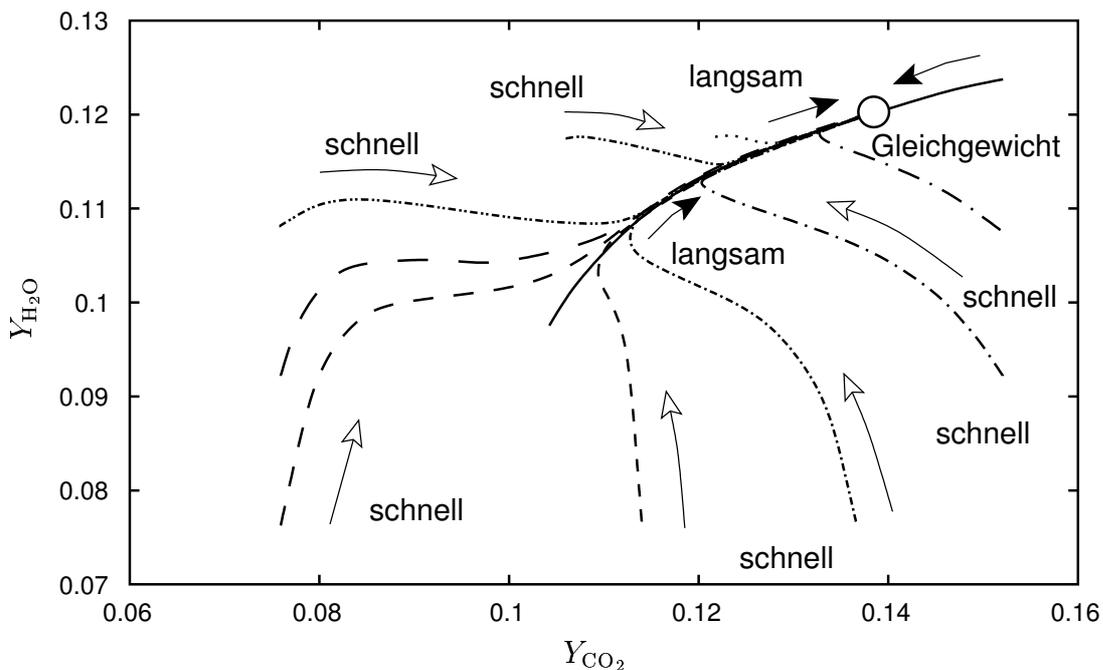


Abbildung 2.6: Beispiel für eine eindimensionale ILDM einer Methan/Luft Verbrennung (nach SCHMIDT [199]).

Die gesuchte Mannigfaltigkeit wird durch eine Eigenwertanalyse ähnlich der im vorigen Abschnitt beschriebenen bestimmt. Hierzu wird das System hinsichtlich aller Freiheitsgrade gestört, und die lokalen Zeitskalen analysiert. Im vorherigen Abschnitt wurde gezeigt, daß mit Hilfe der Eigenwertanalyse die schnell in ihr partielles Gleichgewicht relaxierenden Reaktionen identifiziert werden können. Diese Reaktionen sind für die Beschreibung des globalen Reaktionsfortschritts von untergeordneter Bedeutung, da sie die Lösung immer wieder in Richtung der anziehenden Mannigfaltigkeiten führen, wo sie sich nahe des Gleichgewichts befinden. Das Reaktionssystem wird im Zustandsraum, der durch seine Eigenvektoren aufgespannt wird, durch die um ψ_0 linearisierte Form des Differentialgleichungssystems (2.118) beschrieben

$$\frac{\partial \hat{\psi}}{\partial t} = \mathbf{U}^{-1} \dot{\mathbf{r}}(\psi_0) + \mathbf{\Lambda} \hat{\psi}. \quad (2.125)$$

Werden die Eigenwerte λ_k des System ihrer Größe nach geordnet, d. h. λ_1 ist der größte und λ_{N_k} der kleinste Eigenwert, läßt sich Gleichung (2.125) in zwei Systeme aufspalten:

$$\frac{\partial \hat{\psi}_{\text{slow}}}{\partial t} = \mathbf{U}_{\text{slow}}^{-1} \dot{\mathbf{r}}(\psi_0) + \mathbf{\Lambda}_{\text{slow}} \hat{\psi}_{\text{slow}}, \quad (2.126)$$

$$\frac{\partial \hat{\psi}_{\text{fast}}}{\partial t} = \mathbf{U}_{\text{fast}}^{-1} \dot{\mathbf{r}}(\psi_0) + \mathbf{\Lambda}_{\text{fast}} \hat{\psi}_{\text{fast}}. \quad (2.127)$$

Demnach beinhaltet $\mathbf{\Lambda}_{\text{slow}}$ die Zeitskalen der langsamen und $\mathbf{\Lambda}_{\text{fast}}$ die der schnellen Reaktionen im jeweiligen Unterraum, der durch die zugehörigen Eigenvektoren \mathbf{U}_{slow} bzw. \mathbf{U}_{fast} aufgespannt wird. Der Umstand, daß die schnellen Reaktionen sich sehr schnell ihrem Gleichgewichtszustand nähern, kann daher durch die folgende Bedingung ausgedrückt werden:

$$\mathbf{U} \cdot \dot{\mathbf{r}} = 0. \quad (2.128)$$

Die intrinsische niedrigdimensionale Mannigfaltigkeit ist also durch Punkte, die die Gleichung (2.128) erfüllen, definiert. Da die Mannigfaltigkeiten eine geringere Dimensionalität als der gesamte Zustandsraum haben, werden zur Approximation des Reaktionsablaufs nicht mehr die Konzentrationen aller Verbindungen benötigt, und man erhält auf diese Weise eine an jedem Punkt im Zustandsraum eine optimal reduzierte Kinetik. Die notwendige Anzahl der Komponenten zur ausreichend genauen Beschreibung des Reaktionsverlaufs ist durch die Lage des Systems zum Gleichgewichtspunkt und der Komplexität des Reaktionsmechanismus bestimmt. Es hat sich gezeigt, daß zur Abbildung von Deflagrationen zwei bis drei Fortschrittsvariablen ausreichen, während zur Simulation von Zündvorgängen mindestens fünf bis sieben benötigt werden.

Die Auswertung der Gleichung (2.128) und die damit verbundene Berechnung der Eigenwerte und Eigenvektoren ist sehr aufwendig, weshalb die ILDM vorab berechnet und meistens in Form von Tabellen dem eigentlichen Strömungslöser zur Verfügung gestellt wird [142, 141, 143]. Das Konzept der ILDM besitzt gegenüber Kinetiken, die mit Hilfe von klassischen Reduktionsverfahren reduziert wurden, zwei wesentliche Vorteile. Zum einen beinhalten die Mannigfaltigkeiten die Ergebnisse der mit Hilfe von Quasistationaritäts- und Gleichgewichtsannahmen erstellten Kinetiken. Zum anderen sind sie in der Lage unterschiedliche Bereiche innerhalb des Zustandsraumes abzubilden, die separate reduzierte Kinetiken zu ihrer Beschreibung erfordern würden. Herausragendes Beispiel im Kontext der Verbrennungsschemie ist die gemeinsame Beschreibung von Selbstzündprozessen, die im Niedertemperaturbereich stattfinden, und der Flammenfortpflanzung, die

mit dem Hochtemperaturbereich assoziiert ist. Bei Niedertemperaturmechanismen liegt der Schwerpunkt auf der Beschreibung der Radikalbildung und des langsamen Temperaturanstieges, während Deflagrationen durch den molekularen Transport von Wärme und Radikalen bestimmt sind (siehe Kapitel 3.1). Die dominierenden Reaktionspfade sind daher abhängig von der Art und Weise wie Chemie und Strömung miteinander gekoppelt sind.

Die Berücksichtigung von Transporteffekten, wie sie für Flammen charakteristisch sind, erschwert die Anwendung der ILDM jedoch erheblich, da in diesem Fall die Dynamik des Systems durch die allgemeine Speziestransportgleichung (2.2) gegeben ist. Auch wenn zu erwarten ist, daß der Reaktionsfortschritt entlang von Attraktoren verläuft, haben jedoch der Konvektions- und der Diffusionsterm Anteile, die in Richtung der schnellen Eigenvektoren der Jacobimatrix weisen, und die einen Zustand von der Mannigfaltigkeit wegbewegen können. Obwohl Ansätze vorgestellt wurden, die dieses Problem lösen, befindet sich die Anwendung der ILDM in technischen Strömungssimulationen, die auf der Lösung der allgemeinen Erhaltungsgleichungen beruhen, noch in der Entwicklungsphase. Breitere Anwendung hat das ILDM-Konzept im Bereich von Monte-Carlo Simulationen gefunden. Diese stochastischen Methode betrachtet die zeitliche Entwicklung eines Massepunktes, die durch eine gewöhnliche Differentialgleichung (2.118) beschrieben wird, weshalb sich in diesem Fall die ILDM ohne Einschränkung anwenden läßt.

Abschließend soll nicht unerwähnt bleiben, daß die eigentlichen Schwierigkeiten der ILDM mit den erforderlichen numerischen Methoden verbunden sind, die zur Bestimmung der Mannigfaltigkeiten benötigt werden. Dies trifft sowohl auf die Erstellung der Jacobi-Matrix, die zur Durchführung der Eigenwertanalyse erforderlich ist, als auch auf die effektive Erstellung und Speicherung der Tabelle zu. Es hat sich gezeigt, daß sehr aufwendige und spezialisierte Verfahren benötigt werden, um die Vorteile dieser an sich eleganten Methode nutzen zu können.

CSP

Das Verfahren der CSP (engl.: *Computational Singular Perturbations*) wurde von LAM und GOUSSIS [124] vorgeschlagen, und ist ein Algorithmus zur asymptotischen Analyse von komplexen Reaktionsmechanismen. Wie bei klassischen Reduktionsmethoden wird die Steifheit des Gleichungssystems durch die Entkopplung schneller Zeitskalen reduziert. Hierzu wird von den Autoren ein iteratives Verfahren vorgeschlagen, das eine Identifikation und Trennung von schnellen und langsamen Prozessen ermöglicht. Dieses Verfahren wird im Rahmen einer Strömungssimulation lokal angewendet, d. h. der Reaktionsmechanismus wird in Abhängigkeit der lokal vorliegenden Bedingungen optimal reduziert, und kann daher wie die Methode der ILDM unterschiedliche Reaktionspfade erfassen. Ein wesentlicher Nachteil ist aber der Umstand, daß die Methode die Informationen des gesamten skalaren Feldes benötigt, d. h. es erfolgt keine Reduktion der Dimension des Differentialgleichungssystems. Die Anwendung des CSP-Verfahrens ist aus diesem Grund auf die Simulation einfacher Systeme beschränkt und hat daher in der Literatur noch keine breitere Anwendung gefunden.

Kapitel 3

Beschreibung laminarer und turbulenter Vormischverbrennung

3.1 Die laminare Vormischflamme

Dieses Kapitel soll einen kurzen Überblick über die Struktur der laminaren Vormischflamme und die Möglichkeiten ihrer mathematische Beschreibung geben. Die Kenntnis über die Vorgänge der laminaren Flammenausbreitung ist für das weitere Verständnis der Arbeit aus zwei Gründen erforderlich: Zum einen findet die laminare Vormischflamme als Modellsystem zur Validierung der in Kapitel 4 entwickelten Kinetik Verwendung, zum anderen bilden die im folgenden vorgestellten Überlegungen die Grundlage der in Kapitel 5 und 6 behandelten turbulenten Verbrennungsmodelle.

Die laminare Vormischflamme zeichnet sich durch ein homogenes Gemisch von Brennstoff und Oxidant aus, in welches sich die Flammenfront mit der sogenannten laminaren Flammengeschwindigkeit ausbreitet. Diese ist für den idealen Fall einer adiabaten planaren Flammenfront eine Stoffgröße, d. h. nur vom thermodynamischen Zustand der Reaktanten und ihrer chemischen Zusammensetzung abhängig. Mathematisch betrachtet ist sie die Eigenwertlösung der Bilanzgleichungen aus Kapitel 2.1.1.

In der Literatur findet sich eine Vielzahl von Arbeiten, deren Ziel die Bestimmung der Flammengeschwindigkeit sowie der Struktur der Reaktionszone ist. Sie werden in den Lehrbüchern von KUO [121] und WILLIAMS [238] sowie einem Übersichtsartikel von SEHADRI [203] ausführlich dargestellt. In den folgenden Kapiteln werden die wesentlichen Theorien kurz zusammengefaßt, da sie ein besseres Verständnis der laminaren Vormischflamme und der ihr zugrunde liegenden physikalisch-chemischen Prozesse ermöglichen. Die Betrachtungen beziehen sich auf Methan-Flammen, da diese den Schwerpunkt dieser Arbeit bilden, sind jedoch auch für höhere Kohlenwasserstoffe gültig [171], und wurden auch auf Wasserstoffflammen angewendet [164]. Grundlage der Analysen bildet die Beschreibung der Flammenfrontstruktur in Kapitel 3.1.1. Darauf aufbauend werden, geordnet nach Komplexität, asymptotische Analysen zur Abschätzung der Flammengeschwindigkeit und der Flammenfrontstruktur vorgestellt. Abschließend wird in Kapitel 3.1.6 auf die Dynamik laminarer Vormischflammen und die Effekte von Flammenfrontkrümmung und -streckung eingegangen.

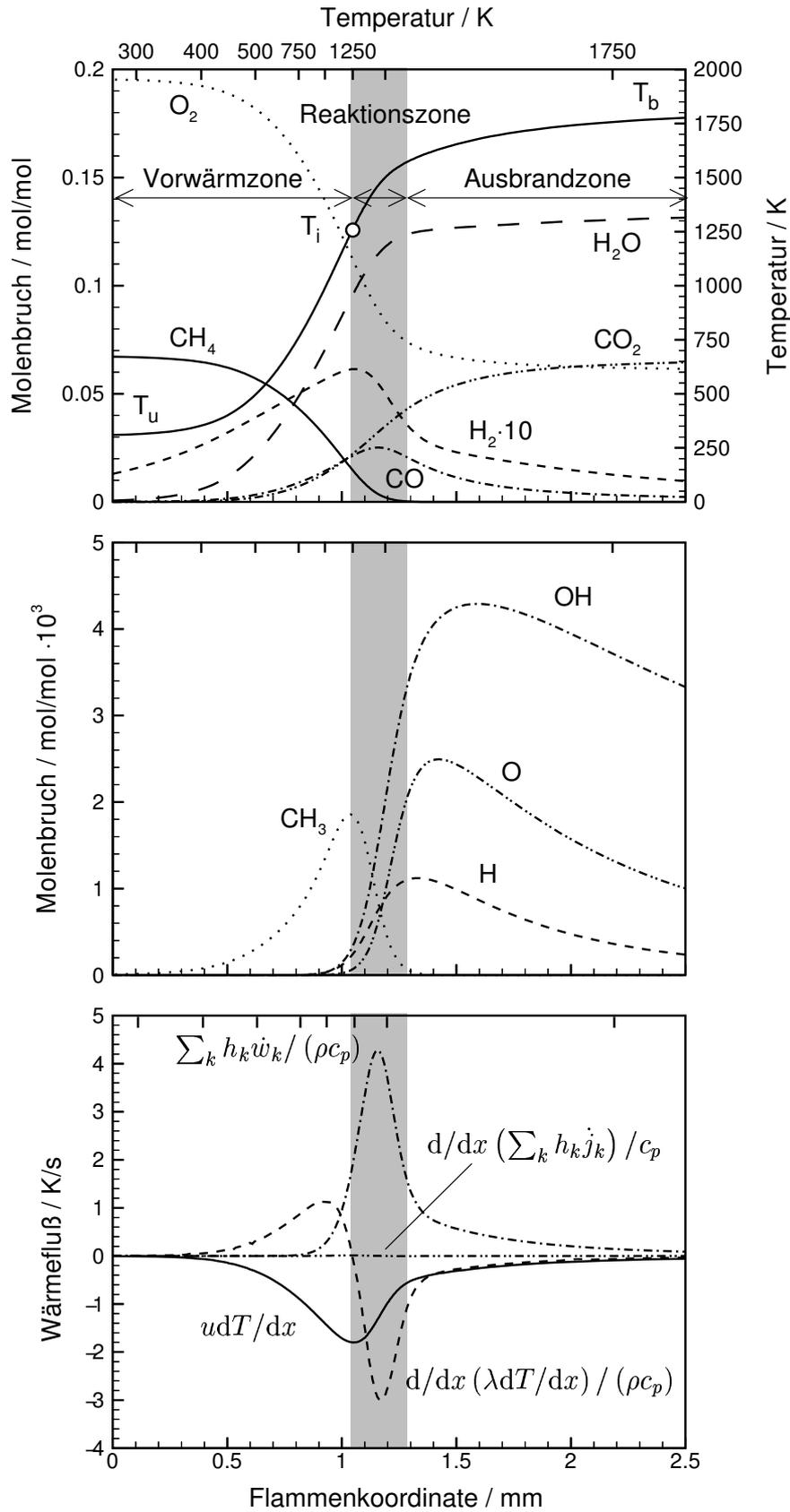


Abbildung 3.1: Struktur einer mageren CH_4 /Luft Flamme. Oberes Bild: Profile der Temperatur und der stabilen Zwischenprodukte und Endprodukte. Mittleres Bild: Profile wichtiger Radiakale und Atome. Unteres Bild: Vergleich konvektiver, konduktiver, diffusiver und chemischer Beiträge zur Energieerhaltung.

3.1.1 Struktur der laminaren ungestreckten Vormischflamme

Die Struktur der laminaren Vormischflamme läßt sich in drei Zonen aufteilen, die sich hinsichtlich der physikalisch-chemischen Prozesse unterscheiden. Abbildung 3.1 zeigt die Struktur einer leicht unterstöchiometrischen Methan/Luft Flamme unter Standardbedingungen. In den beiden oberen Diagrammen sind die Verläufe der Temperatur und der Konzentrationen der stabilen Verbindungen sowie wichtiger Radikale dargestellt. Die Terme der Energieerhaltungsgleichung (2.5), mit Ausnahme des instationären Terms, sind im unteren Diagramm aufgetragen. Die Profile verdeutlichen, daß der Temperaturverlauf durch Konvektion, Wärmeleitung und chemischer Reaktion bestimmt wird, während der Wärmestrom aufgrund partieller Diffusion vernachlässigbar ist. Die in Abbildung 3.1 dargestellten Verläufe sind charakteristisch für alle Kohlenwasserstoffflammen, weshalb sich die folgenden Ausführungen nicht auf Methan/Luft Gemische beschränken.

Die Flammenfront einer Kohlenwasserstoffflamme läßt sich bei Betrachtung von Abbildung 3.1 wie folgt charakterisieren: Die unverbrannten Reaktanten mit der Vorwärmtemperatur T_v , in die sich die Flammenfront mit der Geschwindigkeit S_l^0 , der sogenannten Flammengeschwindigkeit, fortpflanzt, werden in der so genannten Vorwärmzone auf die Zündtemperatur T_i aufgeheizt. Dieser Vorgang verläuft in erster Näherung ohne Wärmefreisetzung, d. h. es herrscht in dieser Zone ein Gleichgewicht zwischen Konvektion und Konduktion bzw. Diffusion. Die Dicke dieser Vorwärmzone ist daher von den molekularen Transportprozessen von Wärme und Stoff bestimmt. Die eigentliche Wärmefreisetzung durch Umsetzung des Brennstoffes zu den stabilen Zwischenprodukten H_2 und CO erfolgt in der Reaktionszone, die deutlich dünner als die Vorwärmzone ist. In diesem Bereich ist der konvektiv transportierte Energiestrom in erster Näherung vernachlässigbar gegenüber dem konduktiv transportierten und der freigesetzten Reaktionswärme. In der Reaktionszone wird der Brennstoff größtenteils über die Reaktionen $CH_4 + H \rightleftharpoons CH_3 + H_2$ (R11)¹ und $CH_4 + OH \rightleftharpoons CH_3 + H_2O$ (R12) abgebaut. Unter stöchiometrischen und unterstöchiometrischen Bedingungen wird das Methylradikal CH_3 zum Formylradikal CHO und schließlich zum CO oxidiert [230]. Die Oxidation des CH_4 zum CO wird durch das OH -Radikal sowie das O - und H -Atom gesteuert, deren Produktion wiederum maßgeblich durch die Kettenverzweigungsreaktion $O_2 + H \rightleftharpoons OH + O$ (R1) bestimmt wird, über die der Abbau des Sauerstoffs stattfindet. Die Konzentrationen der Radikale liegen in der Reaktionszone weit oberhalb des Gleichgewichts, weshalb dieser Zustand auch als Superequilibrium bezeichnet wird. Die Radikale diffundieren aus der Reaktionszone sowohl stromab in die Ausbrand-, als auch stromauf in die Vorwärmzone. Aufgrund ihrer großen chemischen Reaktivität reagieren sie hier jedoch vollständig mit den anströmenden Brennstoffmolekülen und den Zwischenprodukten des Brennstoffabbaus, so daß die Vorwärmzone als chemisch inert betrachtet werden kann. Der Übergang von der Vorwärm- zur Reaktionszone ist somit durch die Temperatur T_i gekennzeichnet, bei der Kettenverzweigungsreaktionen (R1) und Kettenfortpflanzungsreaktionen wie (R11) und (R12) gleich schnell sind [77]. Reaktionen der Brennstoffabbaukette binden die Kettenträger OH , O , und H sehr effektiv und haben deshalb die Bedeutung von Kettenabbruchsreaktionen. Der Prozeß der Flammenfortpflanzung ist nur stabil, wenn der zur Vorwärmung erforderliche Temperaturgradient durch die exothermen Reaktionen in der Reaktionszone aufgebaut werden kann. Erhöhter Transport von Wärme oder Radikalen aus der Reaktionszone kann aber zu einem Zusammenbruch der Kettenreaktion führen, was ein Verlöschen der Flamme nach sich

¹Die Nummerierung der Reaktionen orientiert sich am Mechanismus für die Methanverbrennung, der im Anhang A.1 aufgeführt ist.

zieht. Aus Abbildung 3.1 ist auch ersichtlich, daß im Gegensatz zu den sehr reaktiven Komponenten OH, O und H, das stabilere Wasserstoffmolekül H_2 aufgrund seiner großen Diffusivität in der Lage ist, weit in die Vorwärmzone hinein zu diffundieren. Das gilt auch für das CH_3 -Radikal, das unter unterstöchiometrischen Bedingungen stromauf aufgrund fehlender Radikale nur sehr langsam reagiert und daher ebenfalls in das Frischgasgemisch diffundieren kann.

Im Anschluß an die Reaktionszone folgt die Ausbrandzone, in der die stabilen Zwischenprodukte zu den Verbrennungsendprodukten CO_2 und H_2O oxidiert werden. Diese Reaktionen verlaufen deutlich langsamer als die Reaktionen, die den Brennstoffabbau bestimmen, und sind für die Bestimmung der Flammengeschwindigkeit von nachgeordneter Bedeutung. Am Ende der Ausbrandzone befinden sich die Verbrennungsgase im thermodynamischen Gleichgewicht und besitzen die adiabate Verbrennungstemperatur T_b .

Neben einer charakteristischen Geschwindigkeit, der Flammengeschwindigkeit, lassen sich zwei charakteristische Längenmaße der laminaren Flammenfront definieren. Die Ausdehnung der gesamten Flammenfront kann über den Temperaturgradienten am Ort der Zündtemperatur T_i abgeschätzt werden

$$l_F = \frac{T_b - T_u}{(\partial T / \partial x)_i}. \quad (3.1)$$

Die Auswertung von Gleichung (3.1) setzt die Kenntnis des Temperaturprofils voraus. Dieses erfordert die Lösung der Erhaltungsgleichungen oder die experimentelle Bestimmung des Temperaturprofils und ist daher relativ aufwendig. BLINT [19] konnte jedoch zeigen, daß eine Abschätzung der Flammenfrontdicke über das Verhältnis von thermischer Leitfähigkeit und laminarer Flammengeschwindigkeit

$$l_F = \left(\frac{\lambda}{\rho c_p} \right)_b \frac{1}{S_l^0}, \quad (3.2)$$

zu vergleichbaren Werten führt. Hierbei sind die Stoffwerte der Reaktanten für die adiabate Verbrennungstemperatur zu bestimmen. Mit Hilfe der Flammengeschwindigkeit und der Flammenfrontdicke läßt sich das kinetische Zeitmaß der Vormischflamme definieren.

$$t_F = \frac{l_F}{S_l^0} \quad (3.3)$$

Die Reaktionszone ist für die Flammenfrontfortpflanzung von entscheidender Bedeutung. Ihre Dicke wird durch die Brennstoffabbaureaktionen bestimmt, und kann über asymptotische Betrachtungen abgeschätzt werden. Diese Betrachtungen ergeben, daß die Dicke der Reaktionszone zu der der Vorwärmzone über einen Parameter δ in Beziehung gesetzt werden kann

$$l_\delta = \delta l_F \quad (3.4)$$

Der Parameter δ ist eine Funktion des Drucks und der Vorwärmtemperatur und kann für stöchiometrische Methan/Luft Flammen unter Standardbedingungen zu 0.1 abgeschätzt werden. Auf seine Bestimmung wird in den Kapiteln 3.1.4 und 3.1.5 näher eingegangen.

3.1.2 Flammengeschwindigkeit, Flammenfrontgeschwindigkeit und Brenngeschwindigkeit

Die Flammengeschwindigkeit S_l^0 wurde in Kapitel 3.1.1 als die Geschwindigkeit definiert, mit der sich eine planare, eindimensionale Flammenfront relativ zum anströmende Frischgasgemisch ausbreitet. Sie ist auf den unverbrannten Zustand des Gemisches bezogen und

stellt einen Spezialfall der Flammenfrontgeschwindigkeit S_F dar. Die Flammenfrontgeschwindigkeit $S_F(c^*)$ bezeichnet die Geschwindigkeit einer Isofläche $c = c^*$ relativ zur Strömungsgeschwindigkeit des Frischgasgemisches. Die Variable c bezeichnet hierbei eine normierte Temperatur $c = (T - T_u) / (T_b - T_u)$, die auch als Reaktionsfortschrittsvariable bezeichnet wird. Die Geschwindigkeit der Isofläche kann damit als das totale Differential der normierten Temperatur, berechnet für $c = c^*$, dargestellt werden [175]:

$$S_F(c^*) = \left(\frac{1}{|\nabla c|} \frac{Dc}{Dt} \right)_{c=c^*}. \quad (3.5)$$

Dieser Ausdruck läßt sich mit Hilfe der eindimensionalen Form der Energieerhaltung (2.7) koppeln

$$S_F(c^*) = \left(\frac{1}{|\nabla c|} \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) - \frac{\partial T}{\partial x} \left(\rho \sum_{k=1}^{N_k} c_{p,k} \mathbf{j}_k \right) - \sum_{k=1}^{N_k} h_k \dot{w}_k \right] \right)_{c=c^*}, \quad (3.6)$$

wobei die einzelnen Terme der Gleichung (3.6) anhand von Flammenrechnungen bestimmt werden können. Die Flammenfrontgeschwindigkeit S_F variiert über die Flammenfront hinweg, und zwar von der Flammengeschwindigkeit $S_l^0 = S_{F,u} = S_F(c = 0)$ im unverbrannten bis zur Flammenfrontgeschwindigkeit der Rauchgase $S_{F,b} = S_F(c = 1)$. Sie ist daher im Gegensatz zur Flammengeschwindigkeit experimentell nur schwer zu bestimmen, spielt aber im Bereich der Verbrennungsmodellierung eine große Rolle. Bei bekannter Flammengeschwindigkeit S_l^0 und bekanntem Wärmefreisetzungsparameter

$$\tau = \frac{T_b}{T_u} - 1 \quad (3.7)$$

kann die Flammenfrontgeschwindigkeit näherungsweise über die Beziehung

$$S_F(c) = S_l^0 (1 + \tau c) \quad (3.8)$$

berechnet werden.

Neben der Flammengeschwindigkeit und der Flammenfrontgeschwindigkeit läßt sich noch eine dritte charakteristische Geschwindigkeit der laminaren Vormischflamme definieren, die sogenannte Brenngeschwindigkeit. Sie ist ein Maß für die Geschwindigkeit, mit der die Reaktanten innerhalb der Flammenfront umgesetzt werden, und kann folglich über die Reaktionsgeschwindigkeiten bzw. die integrale Wärmefreisetzung definiert werden [98]:

$$S_c = - \frac{1}{\rho_u \left(\left(\sum_{k=1}^{N_k} c_{p,k} Y_k \right)_u T_u - \left(\sum_{k=1}^{N_k} c_{p,k} Y_k \right)_b T_b \right)} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\sum_{k=1}^{N_k} h_k \dot{w}_k \right) dn. \quad (3.9)$$

Hierbei bezeichnet n die Flammenkoordinate und die Indizes u sowie b den Zustand des unverbrannten ($n = -\infty$) bzw. verbrannten ($n = \infty$) Gemisches. Während Flammengeschwindigkeit und Flammenfrontgeschwindigkeit lokale Größen sind, die für einen ganz bestimmten Wert der Reaktionsfortschrittsvariablen c definiert sind, stellt die Brenngeschwindigkeit eine integrale Größe dar. Eine exakte Verbindung zwischen der Flammenfrontgeschwindigkeit und der Brenngeschwindigkeit kann daher nicht hergestellt werden. Die Brenngeschwindigkeit kann aber über die Flammenfrontgeschwindigkeit abgeschätzt werden, indem die Isofläche definiert durch das Maximum der Wärmefreisetzungsrates betrachtet wird.

3.1.3 Die laminare ungestreckte Vormischflamme als Diskontinuitätsfläche

Die größte Vereinfachung hinsichtlich der Beschreibung der laminaren Flammenfront besteht in der Annahme einer unendlich dünnen Flammenfront, die das Frischgasgemisch von dem Rauchgas, das sich im chemischen Gleichgewicht befindet, trennt. Die Betrachtung der Flammenfront als Diskontinuitätsfläche ist somit identisch mit der Annahme unendlich schnell ablaufender chemischer Reaktionen. Ein wesentlicher Mechanismus der Flammenausbreitung, der molekulare Transport von Stoff und Wärme, bleibt diesem Modell unberücksichtigt, weshalb die laminare Flammengeschwindigkeit als einzige charakteristische Skala verbleibt.

Die mathematische Beschreibung der Modellflamme mit Hilfe der in Kapitel 2.1.1 vorgestellten Beziehungen in ihrer eindimensionalen Form führt auf die sogenannten Rankine-Hugoniot Gleichungen [238]. Die Rayleigh-Linie stellt den Zusammenhang zwischen der Geschwindigkeit der Reaktanten, d. h. der Flammengeschwindigkeit, und der der Rauchgase her, während die Hugoniot-Gleichung den thermodynamischen Zustand der Reaktanten und der Produkte verknüpft. Bei bekanntem thermodynamischen Zustand der Reaktanten und gegebener Flammengeschwindigkeit sind Dichte, Druck, Zusammensetzung und Temperatur der Produkte sowie ihre Geschwindigkeit berechenbar. Die im Rahmen dieser Arbeit betrachteten Flammenausbreitungen sind Deflagrationen, d. h. über die Flammenfront hinweg kommt es zu einem Druckabfall². Dieser ist bei der Verbrennung von Kohlenwasserstoffen sehr klein, weshalb der Druck in guter Näherung als konstant betrachtet werden kann. Der thermodynamische Zustand der Produkte lässt sich dann mit Hilfe einfacher Gleichgewichtsrechnungen bestimmen. Abbildung 3.2 zeigt die Struktur der Vormischflamme unter den obigen Annahmen, die einer rein kinematischen Behandlung der Flammenfront entsprechen.

²Eine Detonation hingegen ist durch einen Druckanstieg und einer Verdichtung der Rauchgase gekennzeichnet. Der Begriff Explosion umfasst sowohl die Deflagration als auch die Detonation und bezeichnet allgemein die Ausbreitung einer Reaktionsfront in ein brennbares Gasgemisch.

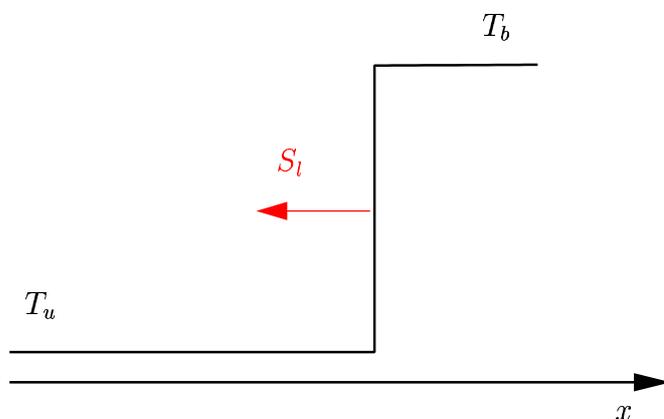


Abbildung 3.2: Struktur der Vormischflamme bei Vernachlässigung molekularer Transporteeffekte und unter der Annahme unendlich schneller Chemie.

3.1.4 Asymptotische Betrachtung für 1-Schritt Reaktionen

Bei der Betrachtung der Flamme als Diskontinuitätsfläche wird die Chemie als unendlich schnell angenommen, weshalb keine Aussage über die Struktur der Flammenfront getroffen werden kann. Die Beschreibung der Flammenfrontstruktur und die Bestimmung der laminaren Flammgeschwindigkeit ist deshalb das Ziel der im folgenden vorgestellten Theorien. Die ersten grundlegenden Arbeiten zu diesem Thema stammt von MALLARD und LE CHATELIER [145]. In ihrer thermischen Theorie der laminaren Vormischflamme unterteilen sie die Flammenfront in eine inerte Vorwärmzone, in der die Reaktanten durch Wärmeleitung auf Zündtemperatur gebracht werden, und die Reaktionszone, in der der chemische Reaktionsumsatz stattfindet. SEMENOV, ZEL'DOVICH und FRANK-KAMENETSKII [202] greifen in ihrer Theorie diese Idee der zonalen Unterteilung auf. Im Gegensatz zu MALLARD und LE CHATELIER berücksichtigen sie jedoch nicht nur die Massen- und Energieerhaltung, sondern nach einem Ansatz von VAN KÁRMÁN [109] auch die Spezieserhaltung.

VAN KÁRMÁN sowie SEMENOV, ZEL'DOVICH und FRANK-KAMENETSKII betrachten in ihrer Abschätzung der laminaren Flammgeschwindigkeit jedoch nur unimolekulare 1-Schritt Reaktionen der Form $F \rightarrow P$, wie sie z. B. für Ozonflammen gelten. Die Abbildung der Verbrennung von Kohlenwasserstoffen erfordert aber eine 1-Schritt Reaktion mit mindestens zwei Reaktanten. CLAVIN und WILLIAMS [238] erweiterten deshalb die Theorie auf eine allgemeine 1-Schritt Reaktion, bei der ein Brennstoff (F) mit dem Oxidator (O) zu den Verbrennungsprodukten P gemäß der Gleichung $F + \nu_O O \rightarrow \nu_P P$ umgesetzt wird. Auch diese Theorie basiert auf der bereits erwähnten zonalen Struktur der Vormischflamme. In der Vorwärmzone kann der Anteil der Reaktionsgeschwindigkeit aufgrund der exponentiellen Temperaturabhängigkeit in erster Näherung vernachlässigt werden. In diesem quasi-inerten Bereich herrscht unter dieser Annahme ein Gleichgewicht zwischen konvektivem und diffusivem Transport von Energie und Stoff. Die zugehörige Gleichung läßt sich nach der Methode der „übereinstimmenden Asymptoten“ [238] in eine Folge von Differentialgleichungen entwickeln, deren Randbedingungen durch den Zustand am Übergang zwischen Vorwärm- und Reaktionszone gegeben sind. In der Reaktionszone ist hingegen der Anteil des konvektiven Transports gegenüber der Wärmefreisetzung

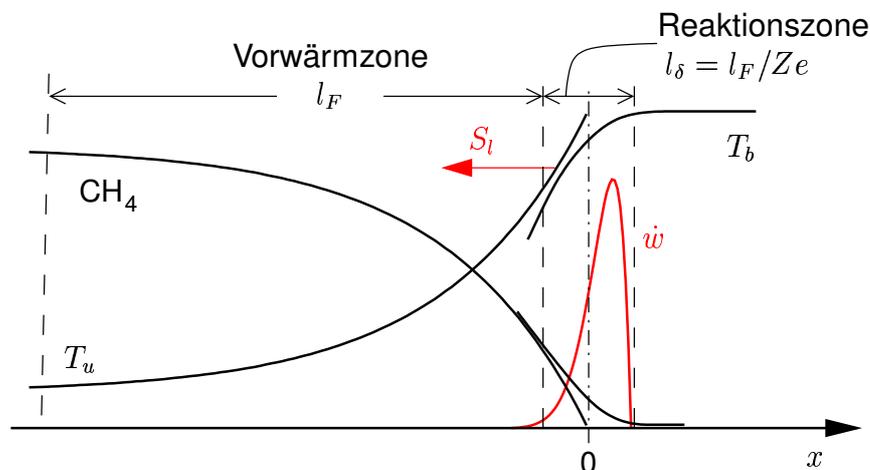


Abbildung 3.3: Struktur der Vormischflamme für große Aktivierungsenergien bzw. Zel'dovichzahlen wie sie durch eine AEA-Analyse beschrieben wird [238].

und der Diffusion von untergeordneter Bedeutung, weshalb dieser Bereich als Reaktions-Diffusionszone bezeichnet wird. Auch hier läßt sich eine Folge von Differentialgleichungen aufstellen. Diese werden aufgrund der asymptotischen Betrachtungen in sogenannten gestreckten Variablen ausgedrückt, die eine dimensionslose Betrachtung des Problems und eine spätere Linearisierung ermöglichen. Charakteristischer Parameter dieser Variablen ist die Zel'dovichzahl [238]

$$Ze = \frac{E_A(T_b - T_u)}{\mathcal{R}T_b^2}, \quad (3.10)$$

die das Verhältnis von Aktivierungsenergie zur Wärmefreisetzung beschreibt. Sie wird hier als sehr große Zahl angenommen, weshalb analytische Untersuchungen dieser Art als Methode der Aktivierungsenergieasymptote (AEA, engl.: *Activation Energy Asymptotics*) bezeichnet werden. Am Übergang zwischen Vorwärm- und Reaktionszone müssen die Folgen der asymptotischen Gleichungen, d. h. die Werte der gestreckten Variablen sowie ihre Ableitungen, übereinstimmen. Mit Hilfe dieser Bedingung lassen sich die Gleichungssysteme lösen, und die Flammengeschwindigkeit berechnen. Die resultierende Flammenfrontstruktur für eine magere Methanflamme ist in Abbildung 3.3 dargestellt.

Die Theorie von CLAVIN und WILLIAMS geht von einer eindimensionalen, planaren, laminaren Flamme aus, in der Strahlung, Soret- und Dufoureffekte sowie Druckdiffusion vernachlässigbar sind. Die Gasmischung verhält sich ideal, alle Komponenten besitzen konstante mittlere spezifische Wärmekapazitäten, und die Lewiszahlen sind konstant. Die Verbrennungsreaktion wird durch eine 1-Schritt Reaktion der Form



beschrieben, so daß sich die Reaktionsgeschwindigkeit des Brennstoffes mit Hilfe eines globalen Ansatzes der Form

$$\dot{\omega} = BT^b \exp[-E_A/RT] C_{\text{CH}_4}^n C_{\text{O}_2}^m \quad (3.12)$$

darstellen läßt. Mit Hilfe der obigen Annahmen leiten die Autoren die folgende Bestimmungsgleichung für die Flammengeschwindigkeit ab [238]:

$$S_t^0 = \left[\frac{2\lambda_b \nu_{\text{CH}_4}^{1-m} \nu_{\text{O}_2}^m \rho_b^{m+n} B T_b^b Y_{\text{CH}_4}^{m+n-1} G(a, m, n)}{\rho_u^2 c_{p,b} W_{\text{O}_2}^{m+n} Z e^{m+n+1} L e_{\text{O}_2}^{-m} L e_{\text{CH}_4}^{-n}} \right]^{1/2} \exp[-E_A/2RT_b]. \quad (3.13)$$

Hierbei ist die Funktion G durch

$$G(a, m, n) = \int_{-\infty}^{\infty} y^m (y+a)^n \exp[-y] dy \quad (3.14)$$

definiert, und der Parameter a

$$a = Ze(\phi^{-1} - 1) / Le_{\text{CH}_4,u} \quad (3.15)$$

beschreibt den Einfluß der Stöchiometrie, ausgedrückt durch das Brennstoff/Luft-Verhältnis

$$\phi = \frac{W_{\text{CH}_4} Y_{\text{O}_2,u}}{W_{\text{O}_2} Y_{\text{CH}_4,u}}. \quad (3.16)$$

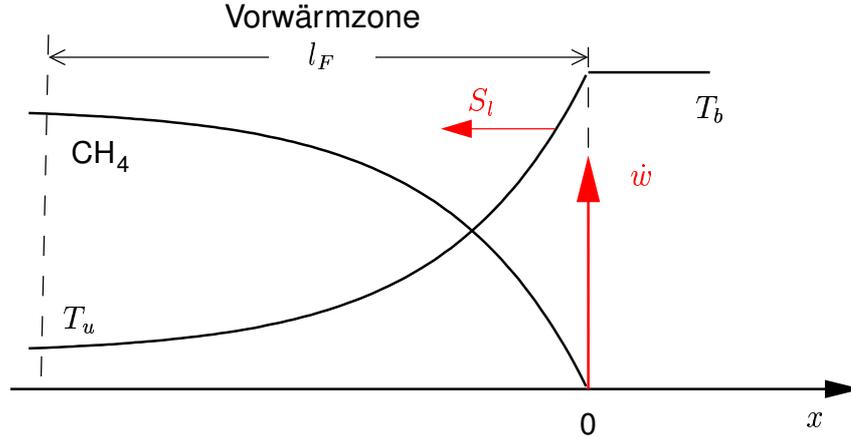


Abbildung 3.4: Struktur der Vormischflamme für unendlich große Aktivierungsenergien $Ze \rightarrow \infty$.

Für den in dieser Arbeit interessierenden Bereich der stöchiometrischen und mageren Vormischverbrennung gilt näherungsweise $G(a, m, n) = \Gamma(n + m + 1)$, wobei Γ die Gamma-Funktion ist. In diesem Grenzfall, und unter der Voraussetzung, daß die Reaktionsexponenten die Werte $m = 1$ und $n = 2$ annehmen, gilt:

$$S_l^0 = \left[\frac{4\lambda_b \nu_{O_2}^2 \rho_b^3 B T_b^b Y_{O_2,u}^2}{\rho_u^2 c_{pb} W_{CH_4}^2 Z e^4 L e_{O_2}^{-2} L e_{CH_4}^{-1}} \right]^{1/2} \exp[-E_A/2RT_b]. \quad (3.17)$$

Gleichung (3.17) zeigt, daß die Flammgeschwindigkeit proportional zur Quadratwurzel der Temperaturleitfähigkeit $\lambda/\rho c_p$ und einem kinetischen Zeitmaß $B T_b^b \exp[-E_A/2RT_b]$ ist. Der Einfluß des Drucks wird über die Dichten des unverbrannten ρ_u bzw. verbrannten Gemisches ρ_b erfaßt, während sich die Abhängigkeit von der Vorwärmtemperatur T_u in der Zel'dovichzahl Ze und implizit in der adiabaten Verbrennungstemperatur T_b findet. Zusammen mit den Anfangskonzentrationen der Reaktanten $Y_{O_2,u}$ und $Y_{CH_4,u}$ beschreibt sie zudem den Einfluß der Stöchiometrie auf die Flammgeschwindigkeit. Schließlich lassen sich mit Gleichungen (3.13) und (3.17) über die Lewiszahlen der Reaktanten der Einfluß bevorzugter Diffusion auf die Flammgeschwindigkeit abschätzen.

Die Methode der AEA liefert aber nicht nur Beziehungen für die Flammgeschwindigkeit, sondern macht auch Aussagen über die Struktur der Flammenfront in Form charakteristischer Längenmaße. Die Dicke der Vorwärmzone ist demnach durch das Verhältnis von Temperaturleitfähigkeit und laminarer Flammgeschwindigkeit

$$l_F = \frac{\bar{\lambda}}{\rho_u S_l^0 \bar{c}_p} \approx \left(\frac{\lambda}{c_p} \right)_b \frac{1}{\rho_u S_l^0} \quad (3.18)$$

gegeben. Hierbei sind $\bar{\lambda}$ und \bar{c}_p die über die Vorwärmzone gemittelte Wärmeleitfähigkeit und spezifische Wärmekapazität. Eine für viele Abschätzungen ausreichende Näherung erhält man, wenn die Stoffwerte für die Reaktanten bei der adiabaten Verbrennungstemperatur berechnet werden. Aufgrund der angenommenen hohen Aktivierungsenergie bzw. Zel'dovichzahl kommt es erst zu einer nennenswerten Wärmefreisetzung, wenn die dimensionslose Temperatur $(T_b - T)/(T_b - T_u)$ in der Größenordnung von Ze^{-1} ist. Demnach ist auch die Dicke der Reaktionszone umgekehrt proportional zur Zel'dovichzahl, gemäß

$$l_\delta = \delta \cdot l_F = \frac{l_F}{Ze} \quad (3.19)$$

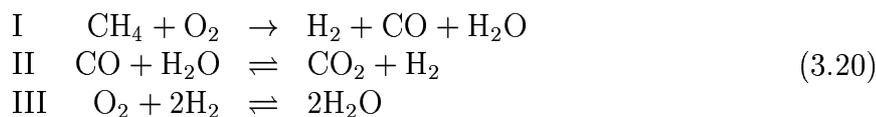
Der Parameter δ in Gleichung (3.4) entspricht in diesem Fall Ze^{-1} . Repräsentative Werte der Zel'dovichzahl liegen zwischen 5 und 15, für stöchiometrische Methanflammen bei Standardbedingungen bei ungefähr 8.

Die Gleichungen (3.13) und (3.17) erfordern Informationen über die reaktionskinetischen Parameter B , b , E_A , n und m . Diese Größen können nicht direkt aus den Reaktionsgeschwindigkeitskonstanten entsprechender Elementarreaktionen abgeleitet werden, und müssen daher als Anpassungsparameter für einen mehr oder weniger großen Bereich von Randbedingungen betrachtet werden. Trotzdem geben Analysen dieser Art Aufschlüsse über den Einfluß thermodynamischer und chemischer Größen auf die Flammengeschwindigkeit. Außerdem läßt sich mit ihrer Hilfe die Dynamik von Flammenfronten hinsichtlich äußerer Störungen, wie Flammenkrümmung und -streckung, studieren (siehe z. B. CLAVIN [63] oder LAW [126]).

Für viele Untersuchungen kann die Reaktionsfront als unendlich dünn betrachtet werden, d. h. $Ze \rightarrow \infty$. In diesem Fall mutiert die Funktion der Reaktionsgeschwindigkeit \dot{w} zu einer Diracschen Delta-Funktion, die die entsprechenden Sprungbedingungen an der Reaktionsfläche beschreibt. Die Struktur der Flammenfront für diesen Grenzfall ist in Abbildung 3.4 dargestellt.

3.1.5 Asymptotische Betrachtung für Mehrschrittreaktionen

Die komplexe Struktur einer Vormischflamme wie sie in Abbildung 3.1 zu sehen ist, kann mit einer einzigen globalen Reaktion nicht wiedergegeben werden. Eine Globalreaktion der Form (3.11) ist vor allem nicht in der Lage das Wesen einer Radikalkettenreaktion, wie sie für Verbrennungsvorgänge typisch ist, wiederzugeben. WILLIAMS und PETERS [169] haben deshalb in einer richtungweisenden Arbeit die asymptotische Struktur stöchiometrischer und überstöchiometrischer Methanflammen untersucht, die auf einem 3-Schritt Mechanismus basieren. Dieser Mechanismus, dessen Ableitung in Anhang A.2 ausführlich beschrieben ist, wurde von den Autoren durch systematische Reduktion eines detaillierten CH_4 Mechanismus mit Hilfe von Quasistationaritäts- und partiellen Gleichgewichtsannahmen gewonnen. Er beschreibt die Umsetzung des Brennstoffes zu den Zwischenprodukten H_2 und CO sowie zu den Produkten H_2O und CO_2 gemäß der folgenden Reaktionsschritte



Die globalen Reaktionsgeschwindigkeiten werden in der Analyse durch die geschwindigkeitsbestimmenden Reaktionen beschrieben. Die Brennstoffabbaureaktion I wird unter stöchiometrischen und unterstöchiometrischen Bedingungen über den Abbau des Methanmoleküls $\text{CH}_4 + \text{H} \rightarrow \text{CH}_3 + \text{H}_2$ (R11) bestimmt, während die Oxidation des CO durch die entsprechende Elementarreaktion $\text{CO} + \text{OH} \rightleftharpoons \text{CO}_2 + \text{H}$ (R10) und die des H_2 durch die als Kettenabbruchreaktion wirkende Reaktion $\text{O}_2 + \text{H} + M \rightleftharpoons \text{HO}_2 + M$ (R5) kontrolliert wird. Die zur Berechnung der Reaktionsgeschwindigkeiten erforderlichen Radikalkonzentrationen lassen sich auf Basis der stabilen Spezies numerisch oder analytisch berechnen.

Abbildungen 3.5 und 3.6 zeigen schematisch die entsprechende Struktur der Vormischflamme bestehend aus Vorwärm-, Reaktions- und Oxidationszone. In der Reaktionszone erfolgt der Umsatz des Brennstoffes gemäß der Bruttoreaktion I mit Radikalen zu den Zwischenprodukten CO und H_2 sowie H_2O . In der sich anschließenden Oxidationszone werden die beiden Zwischenprodukte zu ihren Endprodukten CO_2 und H_2O oxidiert.

Die asymptotische Betrachtungen gehen davon aus, daß der Brennstoffabbau sehr viel schneller verläuft als die Oxidation der Zwischenprodukte. Diese Annahme bedeutet, daß die charakteristische Damköhlerzahl des Reaktionsschrittes I, Da_I^3 , sehr viel größer ist als diejenigen der Schritte II und III, Da_{II} und Da_{III} . Die Reaktionszone ist also sehr viel dünner als die sich anschließende Oxidationszone. Der gesuchte Ausdruck für die Flammgeschwindigkeit läßt sich durch Analyse von Vorwärm-, Reaktions- und Oxidationszone gewinnen, wobei die Randbedingungen durch die jeweils stromauf gelegene Zone gegeben sind. Eine zentrale Rolle in der Analyse spielt die charakteristische Temperatur der Reaktionszone T^0 , die die Bedeutung einer Zündtemperatur besitzt [169].

Die Reaktion (R11) besagt, daß der Brennstoff nur abgebaut werden kann, wenn ausreichend H-Atome vorhanden sind. Ihre Konzentration ist in erster Näherung proportional zu $1 - (q_{11f}/q_{1f})$, wobei das Verhältnis der Reaktionsgeschwindigkeiten die Gewichtung von Kettenabbruch zu Kettenverzweigung ausdrückt. Die Reaktionszone ist somit durch ein Verhältnis kleiner Eins gekennzeichnet. Ein charakteristisches Maß für die Konzentration des Brennstoffes in der Reaktionszone und damit die Reaktionszonendicke ist der Parameter

$$\delta = \left(\frac{k_{1f}}{k_{11f}} \frac{Y_{O_2}}{W_{O_2}} \right)^0 \frac{W_{CH_4}}{Y_{CH_4,u}}, \quad (3.21)$$

wobei der hochgestellte Index 0 Bedingungen in der Brennstoffabbauzone bezeichnet. Die Annahme $\delta \ll 1$ besagt folglich, daß das Verhältnis der Reaktionsgeschwindigkeiten klein ist und erfordert keine Annahme bezüglich der Aktivierungsenergie bzw. -temperatur. Diese ist für die Reaktion (R11) mit 4000K auch zu klein, um die Methode der Aktivierungsenergieasymptote zu rechtfertigen. Der charakteristische Parameter ist daher im Gegensatz zur Methode der AEA keine inverse Aktivierungsenergie in Form von Ze^{-1} , sondern ein Verhältnis von Reaktionsgeschwindigkeiten, die die Chemie kontrollieren. Diese Art der asymptotischen Analyse wird deshalb als Methode der „Reaktionsgeschwindigkeitsverhältnisasymptote“ (RRA, engl.: *Rate Ratio Asymptotics*) bezeichnet, und stellt eine fundamentale Verbesserung hinsichtlich des Verständnisses der Flammenstruktur dar. Unter den Voraussetzungen der AEA-Methode kommt die Reaktion aufgrund des exponentiellen Abfalls der Reaktionsgeschwindigkeit mit abnehmender Temperatur zum Erliegen. Die RRA-Analyse hingegen verdeutlicht, daß ein Mangel an Radikalen die Verbrennung unterbindet. Dies bedeutet, daß in der AEA-Analyse die Vorwärmzone als chemisch eingefroren in der RRA-Analyse jedoch korrekterweise als chemisch inert betrachtet wird.

In der H_2/CO -Oxidationszone ist die Brennstoffkonzentration vernachlässigbar klein, weshalb die Reaktionen der C_1 -Kette in Tabelle A.1 keine Rolle spielen und in der Analyse nur die Reaktionen (R1)–(R8) berücksichtigt werden müssen, die als Linearkombinationen in den Geschwindigkeiten der beiden Globalreaktionen II und III erscheinen. Analytische Lösungen für die Flammgeschwindigkeit lassen sich für zwei Grenzfälle ableiten, die durch die Damköhlerzahlen Da_{II} und Da_{III} der Reaktionsschritte II und III gegeben sind.

Für $Da_{II} \gg Da_{III}$ befindet sich die Reaktion II näherungsweise im partiellen Gleichgewicht, und der Ausbrand wird durch die Wassergasreaktion bestimmt. Die geschwindigkeitsbestimmende Reaktion der Bruttoreaktion III ist die als Kettenabbruchreaktion wirkende Rekombinationsreaktion $H + O_2 + M \rightarrow HO_2 + M$ (R5). Sie besitzt eine Ak-

³Die Damköhlerzahl ist in diesem Zusammenhang als das Verhältnis von charakteristischer Zeit des konvektiv-diffusiven Transports in der Vorwärmzone l_F^0/S_I^0 zur charakteristischen Zeit der betrachteten Globalreaktion $(\dot{w}_I/\rho)^0$. Die Reaktionsgeschwindigkeit ist hierbei für die Temperatur T^0 der Reaktionszone zu berechnen.

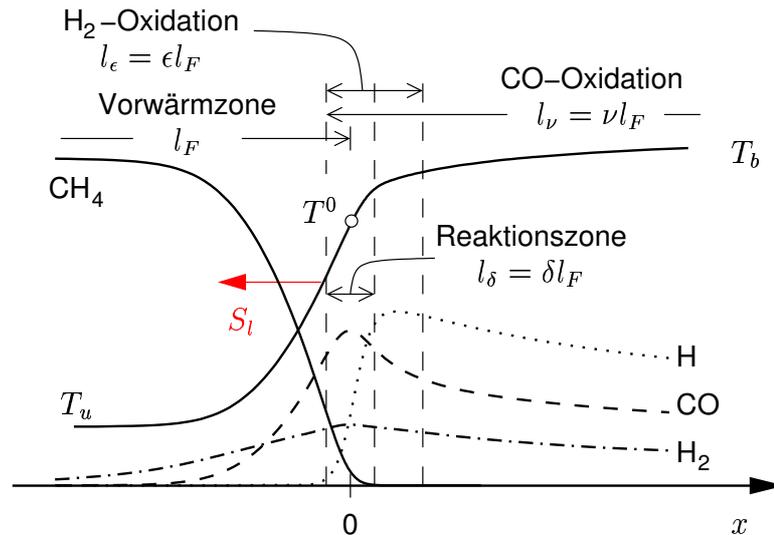


Abbildung 3.6: Struktur einer vorgemischten Methan/Luft Flamme im Fall der RRA-Analyse unter Annahme der Quasistationaritat fur H₂ in der Ausbrandzone.

definiert. Fur den Bereich der H₂-Oxidation gilt hingegen

$$\epsilon = \left(Da_{\text{III}}^{-2/5} \right)^0 \propto \nu \frac{Y_{\text{H}_2}^0 W_{\text{CH}_4}}{W_{\text{H}_2} Y_{\text{CH}_4,u}} \quad (3.25)$$

Die Voraussetzung $\epsilon \ll \nu$ ist also immer dann erfullt, wenn der Wasserstoff in der Ausbrandzone in sehr geringen Konzentrationen vorkommt. Dies ist fur magere Flammen bei maigen Drucken der Fall, und bildet die Grundlage der asymptotischen Analyse von BUI-PHAM ET AL. [47]. Abbildung 3.6 zeigt eine schematische Darstellung der Flammenfrontstruktur unter der Annahme der Quasistationaritat des Wasserstoffs.

Wie bereits erwahnt ist die Zundtemperatur T^0 , die die Reaktionszone charakterisiert, eine zentrale Groe der RRA basierten Analysen. Sie kann als kritische Temperatur interpretiert werden, ab der die Kettenverzweigungsreaktionen die Kettenabbruchreaktionen uberwiegen und es zu einem nennenswerten Reaktionsumsatz kommt. Die Zundtemperatur beinhaltet alle Informationen uber die chemische Kinetik der Verbrennung und ist somit eine brennstoffspezifische Groe. Sie lat sich nur numerisch bestimmen, weshalb MULLER ET AL. [153] fur eine Reihe von Kohlenwasserstoffen T^0 als Funktion von Druck, Stochiometrie und Vorwarmtemperatur angegeben haben. Mit Kenntnis der Zundtemperatur lat sich die Flammgeschwindigkeit durch folgende Gleichung berechnen

$$S_l^0 = Y_{\text{F},u}^m A(T^0, T_u, p) \frac{T_u}{T^0} \left(\frac{T_b - T^0}{T_b - T_u} \right)^n \quad (3.26)$$

Die Parameter n und m sind hierbei brennstoffspezifische Parameter und die Funktion A ist eine Funktion des Drucks p , der Vorwarmtemperatur T_u und der Stochiometrie sowie der Zundtemperatur T^0 . Sie beinhaltet somit alle thermodynamischen und kinetischen Groen des Systems. MULLER ET AL. [153] haben fur unterschiedliche Kohlenwasserstoffe diese Parameter bestimmt und die Funktionen in Form von Polynomen angegeben.

3.1.6 Dynamik laminarer Vormischflammen

In den vorangegangenen Kapiteln wurde der Idealfall einer eindimensionalen, laminaren Flammenfront betrachtet. In der Realität ist die Flammenfront jedoch aufgrund eines divergenzbehafteten Strömungsfeldes mehr oder weniger gekrümmt. Dies gilt insbesondere für turbulente Strömungsfelder, in denen Wirbelbewegungen zu einer Auffaltung und damit zu einer Streckung und Stauchung der Flammenfront führen. Die Interaktion der Flammenfront mit dem turbulenten Strömungsfeld wird im folgenden Kapitel ausführlicher beleuchtet, und der prinzipielle Einfluß von Flammenfrontkrümmung auf die Flammengeschwindigkeit betrachtet.

Hierzu soll das dreidimensionale Flammenfrontelement aus Abbildung 3.7 betrachtet werden. Die Lage der Flammenfront im Raum soll durch die Reaktionsfortschrittsvariable c definiert sein, die Werte zwischen 0 (unverbrannt) und 1 (verbrannt) annimmt. Eine Flammenfrontoberfläche ist unter diesen Voraussetzungen eine beliebige Isofläche, auf der die Reaktionsfortschrittsvariable den Wert $c = c^*$ annimmt. Auf einer solchen Oberfläche läßt sich ein lokales flammenfrontbezogenes Koordinatensystem $\xi = (\xi, \psi, \zeta)$ definieren. Die Bogenlängen in diesem ξ -System sind durch die Transformationsfaktoren $h_\xi = |\partial \mathbf{x} / \partial \xi|$, $h_\psi = |\partial \mathbf{x} / \partial \psi|$ und $h_\zeta = |\partial \mathbf{x} / \partial \zeta|$ gegeben. Der Einheitsvektor eines betrachteten Flammenfrontoberflächenelementes, welches durch seinen Normalenvektor \mathbf{n} gekennzeichnet ist, läßt sich über den Gradienten der Reaktionsfortschrittsvariablen ausdrücken $\mathbf{n} = \mathbf{e}_\xi = -\nabla c / |\nabla c|$ und weist aufgrund dieser Definition in Richtung des Frischgasgemisches. Die Absolutgeschwindigkeit eines Flammenfrontoberflächenelementes \mathbf{w} ist die Summe von Strömungsgeschwindigkeit \mathbf{u} und die Ausbreitungsgeschwindigkeit der betrachteten Isofläche S_F

$$\mathbf{w} = \mathbf{u} + \mathbf{n}S_F \quad (3.27)$$

Die relative Änderung der Masse innerhalb des Flammenfrontelementes aufgrund eines inhomogenen Strömungsfeldes läßt sich nach einem Vorschlag von DE GOEY ET AL. [83]

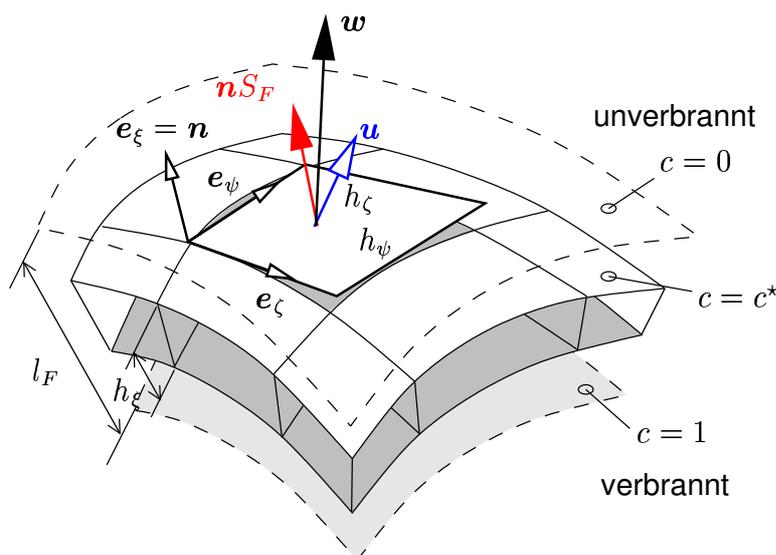


Abbildung 3.7: Dreidimensionales Flammenfrontelement mit lokalem flammenfrontbezogenem Koordinatensystem.

durch die massenbezogene Dehnungsrate K beschreiben.

$$K = \frac{1}{M} \frac{dM}{dt} \quad (3.28)$$

Unter Verwendung der in Abbildung 3.7 veranschaulichten Größen kann die Dehnungsrate in eine Form überführt werden, die eine anschaulichere Deutung der physikalischen Effekte, die zur Flammenstreckung beitragen, ermöglicht:

$$\begin{aligned} K = & -\mathbf{n}\mathbf{n} : \nabla \cdot \mathbf{u} + \nabla \cdot \mathbf{u} + S_F \nabla \cdot \mathbf{n} \\ & + \mathbf{n} \cdot \nabla (\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} + S_F) + \frac{1}{\rho} \frac{d\rho}{dt}. \end{aligned} \quad (3.29)$$

Der erste Term auf der rechten Seite steht für die normalen Anteile des Deformationsgeschwindigkeitstensors, und beschreibt den Streckungseinfluß infolge von Strömungsinhomogenitäten entlang der Oberfläche des Flammenfrontelementes. Strömungsdivergenzen tragen ebenso wie Krümmungen der Isofläche zu einer Dehnung des Flammenelementes bei, und werden durch den zweiten bzw. dritten Term auf der rechten Seite berücksichtigt. Der vierte Term repräsentiert instationäre Änderungen der Flammenfrontdicke aufgrund von unterschiedlicher Ausbreitungsgeschwindigkeiten der Flammenfrontflächen und der letzte Term erfaßt Beiträge von Dichteänderungen entlang der betrachteten Isofläche.

Für den Fall, daß die Isoflächen der Dichte parallel zu den Isoflächen der Konzentrationen verlaufen, d. h. die Lewiszahlen gleich Eins sind, entfällt der letzte Term in Gleichung (3.29). Die Annahme einer sehr dünnen Flammenfront hat zur Folge, daß in erster Näherung sowohl der vierte Term als auch der letzte Term der rechten Seite vernachlässigt werden kann. Die verallgemeinerte Definition der Dehnungsrate K geht unter diesen Voraussetzungen in die von WILLIAMS [238] vorgeschlagene und allgemein verwendete Form über:

$$\lim_{t_F \rightarrow \infty} K = K_A = \frac{1}{A} \frac{dA}{dt}. \quad (3.30)$$

Die Dehnungsrate K_A ist hierbei als eine relative Änderung eines Flammenfrontoberflächenelementes dA definiert, welches sich mit der lokalen Flammengeschwindigkeit $S_l = S_F (c = 0)$ relativ zum Frischgasgemisch bewegt. Gleichung (3.30) ist eine verallgemeinerte Darstellung des ursprünglich von KARLOVITZ ET AL. [108] eingeführten und später von LEWIS und VON ELBE [130] aufgenommenen Konzepts der Flammenstreckung, mit dessen Hilfe Phänomene wie Flammenlöschung in Spalten erklärt wurden.

Um den relativen Einfluß der Dehnungsrate auf die Struktur der Flammenfront zu charakterisieren, haben KLIMOV [115] und WILLIAMS [237] die dimensionslose Karlovitzzahl Ka eingeführt. Sie beschreibt das Verhältnis von kinetischem Zeitmaß der Vormischflamme (3.3) und Zeitmaß der Dehnungsrate:

$$Ka = K \cdot t_F. \quad (3.31)$$

Gemäß Gleichung (3.31) kann die Karlovitzzahl somit als Maß der Stromfadenaufweitung innerhalb der Flammenfront betrachtet werden.

Die anhand von Gleichung (3.28) angeführten Effekte können die lokalen Verhältnisse von Stoff- und Wärmetransport maßgeblich beeinflussen, was wiederum zu einer Änderung der Flammentemperatur bzw. der lokalen Struktur der Reaktionszone und somit der gestreckten laminaren Flammengeschwindigkeit S_l gegenüber ihrem ungestreckten Wert

S_l^0 führt. Unter der Annahme, daß Transporteffekte senkrecht zur Flammenfrontausbreitung in erster Näherung vernachlässigbar sind, lassen sich die Erhaltungsgleichungen für Masse, Stoffkonzentration und Energie im lokalen ξ -Koordinatensystem in Form der sogenannten Flamelet-Gleichungen anschreiben [126, 127, 82]:

$$\frac{\partial}{\partial n} (dA\rho_u S_F) = -dA\rho K, \quad (3.32)$$

$$\frac{\partial}{\partial n} (dA\rho_u S_F Y_k) = \frac{\partial}{\partial n} \left(dA\rho D_{km} \frac{\partial Y_k}{\partial n} \right) + dA\dot{w}_k - dA\rho K Y_k, \quad (3.33)$$

$$\frac{\partial}{\partial n} (dA\rho_u S_F h) = \frac{\partial}{\partial n} \left(dA\rho \frac{\lambda}{c_p} \frac{\partial h}{\partial n} \right) + \sum_{k=1}^{N_k} \left(\frac{1}{Le_k} - 1 \right) \frac{\partial}{\partial n} \left(dA \frac{\lambda}{c_p} h_k^{\circ} \frac{\partial Y_k}{\partial n} \right) - dA\rho K h. \quad (3.34)$$

Hierbei bezeichnet $\partial n = h_{\xi} \partial \xi$ die Bogenlänge senkrecht zur Flammenfront und $dA = h_{\psi} h_{\zeta}$ das Flammenfrontoberflächenelement, durch welches Stoff- und Energietransport erfolgen. Integration der eindimensionalen Erhaltungsgleichungen für chemische Spezies Y_k und Enthalpie h führt auf die verallgemeinerten Karlovitzzahlen der Spezies

$$Ka_k = \frac{Le_k}{(dA\dot{m}^0)_b} \int_{n_u}^{n_b} dA\rho K \frac{Y_k - Y_{k,u}}{Y_{k,b} - Y_{k,u}} dn \quad (3.35)$$

und der Temperatur

$$Ka_T = \frac{1}{(dA\dot{m}^0)_b} \int_{n_u}^{n_b} dA\rho K \frac{h - h_u}{h_b - h_u} dn \quad (3.36)$$

\dot{m}^0 steht hierbei für den in der ungestreckten Flammenfront umgesetzten Massenstrom, und die Indizes u und b bezeichnen den unverbrannten bzw. verbrannten Zustand. Mit Hilfe dieser beiden Gleichungen lassen sich die folgenden exakten Beziehungen für die Änderung der Elementzusammensetzung

$$\Delta Z_{j,b} = Z_{j,b} - Z_{j,b}^0 = -\frac{1}{\dot{m}_b/\dot{m}_b^0 + Ka_T} \sum_{k=1}^{N_k} \mu_{kj} \left(\frac{Ka_k}{Le_k} - Ka_T \right) (Y_{k,b} - Y_{k,u}) \quad (3.37)$$

und die Enthalpieänderung

$$\Delta h_b = h_b - h_b^0 = -\frac{1}{\dot{m}_b/\dot{m}_b^0 + Ka_T} \sum_{k=1}^{N_k} h_k^{\circ} \left(\frac{Ka_k}{Le_k} - Ka_T \right) (Y_{k,b} - Y_{k,u}) \quad (3.38)$$

ableiten. Die Gleichungen (3.38) und (3.37) beschreiben den Einfluß der Flammendehnung und der bevorzugten Diffusion auf die lokale Zusammensetzung und Enthalpie der Rauchgase über die Karlovitzzahlen Ka_T sowie Ka_k und die Lewiszahlen Le_k . Wie mit Hilfe der Analysen ungestreckter Flammen in den vorangehenden Kapiteln gezeigt wurde, ist der Reaktionsumsatz und somit die Flammengeschwindigkeit S_l maßgeblich durch die Enthalpie und Zusammensetzung in der Reaktionszone bestimmt. Die Analysen ergaben weiterhin, daß der Zustand in der Reaktionszone eng mit dem Zustand der Rauchgase verknüpft ist. Daraus läßt sich unmittelbar folgern, daß die Flammengeschwindigkeit der gestreckten Flamme eine Funktion der dimensionslosen Kennzahlen Ka_T , Ka_k und Le_k sein muß.

Der gesuchte Massenumsatz einer gedehnten Flammenfront, bezogen auf das Rauchgas, läßt sich auf Basis der obigen Gleichung wie folgt abschätzen [82]:

$$\dot{m}_b = \dot{m}_b^0(h_u, h_b, Z_{k,b})(1 - Ka_T), \quad (3.39)$$

Der Massenumsatz der ungestreckten Flamme $\dot{m}_b^0 = \rho_b S_{F,b}^0$ und somit Dichte und Ausbreitungsgeschwindigkeit des Rauchgases sind für den thermodynamischen Zustand, d. h. Enthalpie und Zusammensetzung, der gestreckten Flamme zu berechnen, der durch die Gleichungen (3.37) und (3.38) bestimmt ist. Gleichung (3.39) beschreibt die Umsatzgeschwindigkeit gestreckter Flammen unabhängig von der Stärke der Dehnungsrate. Die Annahme, daß die Reaktionsfront sehr dünn ist, stellt somit die einzige Einschränkung in der Ableitung der Flamelet-Gleichungen (3.32)–(3.34) dar. Das Gleichungssystem ist aber nicht geschlossen, da die Karlovitzzahlen bzw. die Integrale in den Gleichungen (3.35) und (3.36) unbestimmt sind. Daher läßt sich anhand von Gleichung (3.39) auch keine Aussage über die Flammengeschwindigkeit S_l treffen. Entsprechende analytische Ausdrücke können aber unter der Annahme unendlich hoher Aktivierungsenergie abgeleitet werden.

Die erste grundlegende Arbeit auf diesem Gebiet stammt von MARKSTEIN [148], der die Flammengeschwindigkeit einer gekrümmten zweidimensionalen Flammenfront analytisch in Form einer Reihenentwicklung bestimmt hat. Diese Theorie wurde z. B. von CLAVIN [63], LAW [126] sowie von LAW und SUNG [127] auf der Grundlage der Methode der Aktivierungsenergieasymptote verallgemeinert und erweitert. Unter der Voraussetzung einer Einschnittreaktion der Form $F + rOx \rightarrow (1 + r)P$ sowie der Annahme, daß die Lewiszahlen aller Komponenten gleich groß sind $Le_k = Le$, vereinfachen sich die Karlovitzintegrale (3.35) und (3.36) zu

$$Ka = \frac{\bar{\lambda}\rho_b}{\bar{c}_p(\rho S_F)_u} K, \quad (3.40)$$

und Gleichung (3.39) läßt sich in die folgende analytische Beziehung entwickeln (vgl. [216]):

$$\frac{\dot{m}_b}{\dot{m}_b^0} = \frac{S_{F,b}}{S_{F,b}^0} = \exp\left[\frac{2}{Ze} Ma \cdot Ka^*\right] - Ka^*. \quad (3.41)$$

Hierbei bezeichnet Ka^* eine verallgemeinerte Karlovitzzahl, die sowohl Dehnung als auch instationäre Einflüsse über die absolute Flammenfrontgeschwindigkeit $w_{F,u}$ beinhaltet

$$Ka^* = \frac{w_{F,u} l_F}{S_{F,u}} \nabla \cdot \mathbf{n} \frac{\gamma^0 - 1}{\tau^0} + Ka^0 \gamma^0, \quad (3.42)$$

und Ma die Marksteinzahl

$$Ma = \left(\frac{1}{Le} - 1\right) \frac{Ze}{2}, \quad (3.43)$$

die Effekte der bevorzugten Diffusion beschreibt. Der Einfluß der thermischen Expansion auf die Aufweitung des Stromfadens wird durch den Faktor γ^0 erfaßt, der zu

$$\gamma^0 = 1 + \ln\left(\frac{1}{1 + \tau^0} + \frac{\tau^0}{1 + \tau^0} e^{-1}\right) \quad (3.44)$$

definiert ist, wobei $\tau^0 = T_b^0/T_u - 1$ der Wärmefreisetzungsparameter bezogen auf die ungestreckte Flamme ist. Gleichung (3.41) wird ergänzt durch die Beziehungen für die Flammentemperatur T_b , die Flammenfrontdicke l_F und die Flammengeschwindigkeit S_l :

$$\frac{T_b - T_u}{T_b^0 - T_u} = 1 - \frac{2}{Ze} Ma \cdot Ka^* \quad (3.45)$$

$$\frac{l_F}{l_F^0} = \exp[-Ma \cdot Ka^*] \quad (3.46)$$

$$\frac{S_l}{S_l^0} = \frac{S_{F,u}}{S_{F,u}^0} = \exp[Ma \cdot Ka^*] - \left[\frac{w_{F,u}}{S_{F,u}} \left(\frac{\gamma^0 - 1}{\tau^0} + \gamma^0 \right) + 1 \right] l_F \nabla \cdot \mathbf{n} \quad (3.47)$$

Die Gleichungen (3.41) sowie (3.46)–(3.47) stellen jedoch ein gekoppeltes Gleichungssystem dar, da die Karlovitzzahl Ka selbst von lokalen Größen abhängt. Für den Fall kleiner Streckungsraten kann aber die Karlovitzzahl mit Hilfe ungestreckter Größen gebildet werden, d. h. $Ka^0 = \bar{\lambda} \rho_b^0 / (\bar{c}_p \rho_u S_u^0) K$, und der Exponentialausdruck $\exp[Ma^0 \cdot (Ka^*)^0]$ läßt sich in $1 + Ma^0 \cdot Ka^0 \cdot \gamma^0$ linearisieren. Ergebnis sind die bekannten linearen Zusammenhänge, wie sie z. B. von LAW und SUNG [127] sowie GOEY [82] gefunden wurden.

Anhand der Gleichungen (3.45)–(3.47) lassen sich die folgenden Aussagen treffen: Gemische, in denen Stoff- und Wärmetransport gleich schnell verlaufen, d. h. die die Bedingung $Le = 1$ erfüllen, ist die Marksteinzahl gleich Null, und eine Änderung der Flammengeschwindigkeit S_l wird allein durch eine Krümmung der Flammenfront $\nabla \cdot \mathbf{n}$ hervorgerufen. Im Gegensatz dazu ändert sich die Brenngeschwindigkeit $S_{F,b}$ allein durch das Einwirken von Streckungseffekten, die durch die Karlovitzzahl beschrieben werden. Die adiabate Flammentemperatur der gestreckten Flamme T_b , und damit die Dicke der Flammenfront l_F bleiben nach dieser Theorie hingegen unverändert. Sie sind in diesem Fall unabhängig von Streckungs- und Krümmungseffekten. Ein weit größeren Einfluß auf die Flammengeschwindigkeit ist für das gemeinsame Auftreten von Streckung und bevorzugter Diffusion, d. h. $Le \neq 1$ und somit $Ma \neq 0$, zu erwarten. Negative Marksteinzahlen bewirken bei positiver (negativer) Streckung ein Ansteigen (Abfallen) der Flammentemperatur, Flammenfrontdicke und Flammengeschwindigkeit, während positive Marksteinzahlen zu einem Abfall (Ansteigen) dieser Größen führen. Interessanterweise sind im Gegensatz zu der Flammengeschwindigkeit die Flammentemperatur und damit auch die Flammenfrontdicke sowie die Brenngeschwindigkeit unabhängig von der Flammenfrontkrümmung $\nabla \cdot \mathbf{n}$.

Die Auswertung der obigen Gleichungen ist aufwendig. Die Gleichungen vereinfachen sich aber wesentlich für den Fall einer idealen Gegenstromflamme. In dieser Strömungskonfiguration ist die Flamme stationär und erfährt keine Krümmungseffekte, d. h. $w_{F,u} = 0$ und $\nabla \cdot \mathbf{n} = 0$. Die Flamelet-Gleichungen wurden in Verbindung mit einem detaillierten Reaktionsmechanismus mit einem Rechenprogramm gelöst, das im Rahmen dieser Dissertation entwickelt wurde. Für weitergehende Informationen sei an dieser Stelle auf den Bericht von HOFFMANN [99] verwiesen. In Abbildung 3.8 ist die Dynamik einer Wasserstoff/Luft und einer Methan/Luft Flamme anhand der normierten adiabaten Flammentemperatur dargestellt. Die im linken Diagramm dargestellte Wasserstoffflamme zeichnet sich durch eine große Lewiszahl von $Le = 2.2$ aus, d. h. die Flammenverlöschung tritt bereits für Karlovitzzahlen kleiner Eins ein. In diesem Fall stimmen die Ergebnisse der nichtlinearen Analyse mit denen der detaillierten Rechnung gut überein. Die lineare Analyse ist hingegen nicht in der Lage den Verlöschpunkt vorherzusagen. Anhand dieses Beispiels ist ersichtlich, daß die Dynamik der Flammenfront nahe der Verlöschgrenze nur mit komplexeren Modellen wiedergegeben werden kann. Dies gilt auch für den Fall größerer Karlovitzzahlen. Im rechten Diagramm der Abbildung 3.8 ist das Verhalten einer leicht fetten Methanflamme ($\lambda = 0.9$) mit einer Lewiszahl von $Le = 1.1$ zu sehen. Die detaillierte Rechnung sagt ein Verlöschen bei einer relativ großen Karlovitzzahl von $Ka^0 \approx 5$ vorher, die nichtlineare Analyse sogar erst bei $Ka^0 \approx 8$. Da die Lewiszahl nahe Eins ist, verliert nach Gleichung (3.45) die Dehnungsrate an Bedeutung und es kommt ein anderer Effekt

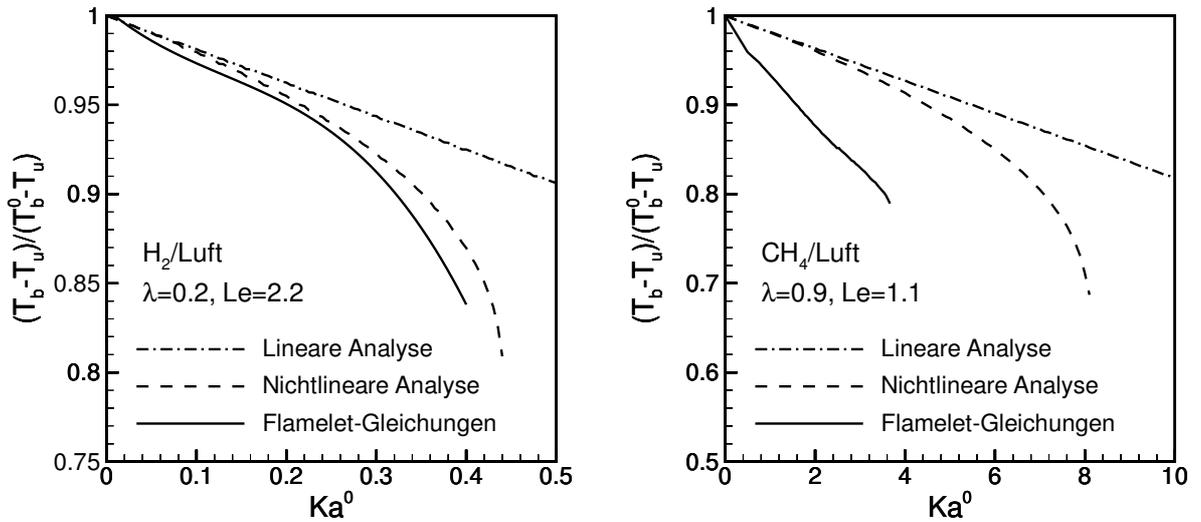


Abbildung 3.8: Vergleich der normierten adiabaten Flammentemperatur als Funktion der Karlovitzzahl für ein Wasserstoff/Luft ($\lambda = 0.2$) (links) und ein Methan/Luft Gemisch ($\lambda = 0.9$) (rechts). Durchgezogene Linien: Flamelet-Gleichungen (3.32)–(3.34), gestrichelte Linie: Nichtlineare Analyse auf Basis der Gleichungen (3.45)–(3.47), strichgepunktete Linie: Lineare Analyse.

zum Tragen, der zu einer Temperaturabsenkung führt und ein früheres Verlöschen bewirkt. Die analytische Betrachtungsweise vernachlässigt, daß die Dicke der Flammenfront endlich ist. Mit großen Dehnungsraten findet aber eine Annäherung der Reaktionszone an den Staupunkt statt. Ist der Abstand der Reaktionszone vom Staupunkt kleiner als ihre Abmessung können die Reaktanten nicht mehr vollständig umgesetzt werden, und die Temperatur sowie die Flammengeschwindigkeit nimmt bis zum Verlöschen ab. Dieser Effekt tritt auch im Fall von Lewiszahlen kleiner Eins auf. Die Gleichung (3.47) sagt hier ein unbegrenztes Ansteigen der Flammengeschwindigkeit voraus, was im Widerspruch zu der Lösung der Flamelet-Gleichungen und Experimenten führt. SUN ET AL. [216] schlagen für diesen Fall Korrekturen der lokalen Stöchiometrie und der Aktivierungsenergie vor, die das zu lösende Gleichungssystem aber weiter verkomplizieren.

Wie sich obigen Gleichungen entnehmen läßt, wird eine Änderung der Flammengeschwindigkeit im wesentlichen durch das Produkt von Karlovitz- und Marksteinzahl bestimmt. Beide Parameter sind jedoch nur für den Fall schwach gestreckter und gekrümmter Flammen analytisch bestimmbar. Außerdem trägt die Analyse auf Basis der AEA, wie bereits Kapitel 3.1.5 dargelegt, der Charakteristik der Flamme bzw. der in der Reaktionszone ablaufenden Chemie nur bedingt Rechnung. Vergleiche von Verlöschgrenzen, die mit Hilfe analytischer Beziehungen und komplexen Mechanismen gewonnen wurden, zeigen, daß die Theorie die Verlöschgrenzen überschätzt [189, 190, 48]. Dies liegt in erster Linie an der stark unterschiedlichen Diffusivität der Radikale, die den Verbrennungsverlauf kontrollieren. Die Definition einer repräsentativen Lewiszahl insbesondere für nahe stöchiometrische Gemische gestaltet sich daher als sehr schwierig. Andererseits bieten die analytischen Beziehungen bisher die einzige Möglichkeit, den Einfluß der Dehnung auf die Flammengeschwindigkeit ohne großen Aufwand zu beschreiben. Aus dieser Überlegung

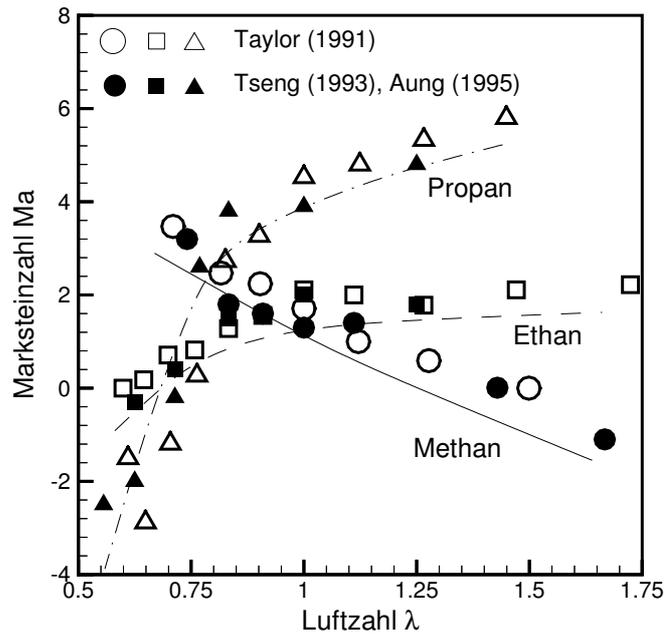


Abbildung 3.9: Gemessene Marksteinzahlen für verschiedene Brennstoffe nach BRUTSCHER [45].

heraus wurden Ansätze vorgeschlagen, die die linearisierte Form der Gleichung (3.41) verwenden, und alle nichtlinearen Effekte in einer experimentell oder numerisch zu bestimmende Marksteinzahl zusammenfassen. Es wurden deshalb in den letzten Jahren eine Reihe von Anstrengungen unternommen, die Marksteinzahl experimentell zu bestimmen (siehe z. B. [45] für eine Übersicht). Abbildung 3.9 kann entnommen werden, daß die Marksteinzahlen überwiegend positiv sind. Lediglich für sehr fette Propan- und sehr magere Methangemische finden sich negative Marksteinzahlen. Bei den in dieser Arbeit untersuchten mageren Methanflammen hingegen sind die Marksteinzahlen nahe Null, so daß der Einfluß von Streckung und bevorzugter Diffusion auf die Flammencharakteristika nach der obigen Theorie in erster Näherung vernachlässigbar sein sollte.

3.2 Phänomenologische Betrachtung turbulenter Vormischverbrennung – Verbrennungsdiagramm

Im diesem Abschnitt soll eine Klassifizierung der Flammen, die bei der turbulenten vorgemischten Verbrennung anzutreffen sind, basierend auf dem Vergleich charakteristischer Zeitskalen vorgenommen werden. Diese Art der Klassifizierung führt auf ein Verbrennungsdiagramm, mit dessen Hilfe sich die verschiedenen Regime turbulenter Vormischverbrennung als Funktion dimensionsloser Kennzahlen graphisch darstellen lassen. Eine Vielzahl von Autoren hat es in ähnlicher Form vorgeschlagen, wie BRAY [31], BORGHI [21], WILLIAMS [238] und PETERS [160, 165]. Neben diesen klassischen Diagrammen, die in erster Linie auf phänomenologischen Überlegungen beruhen, haben POINSOT ET AL. [173] auf der Basis direkter numerischer Simulationen ein sogenanntes „Spektral-diagramm“ entwickelt. In diesem Diagramm wird die Interaktion der Flammenfront mit dem vollständigen Wirbelspektrum und nicht nur mit einer charakteristischen Wirbelklasse betrachtet. Während diese Darstellungsweise eine vollständigere Beschreibung der Interaktion von Turbulenz und Chemie ermöglicht, ist sie für die Einordnung von Verbrennungsmodellen, die in der Regel auf einer einzigen charakteristischen Wirbelklasse basieren, weniger geeignet. Die folgenden Ausführungen beziehen sich daher weitgehend auf die Überlegungen von BORGHI und PETERS.

Die phänomenologische Beschreibung turbulenter Vormischverbrennung basiert auf dem Vergleich charakteristischer Skalen der zwei grundlegenden Prozesse, nämlich turbulenter Mischung und chemischer Kinetik, in den Dimensionen Raum und Zeit. Der lokale Turbulenzzustand läßt sich anhand der turbulenten Reynoldszahl definieren, die im Gegensatz zur Reynoldszahl (2.57) auf der Basis lokaler integraler Turbulenzskalen definiert ist:

$$Re_t = \frac{u_t l_t}{\nu} . \quad (3.48)$$

Hierbei bezeichnen u_t die charakteristische Geschwindigkeitsschwankung und l_t das integrale Längenmaß der Turbulenz (siehe Kapitel 2.4.1) sowie ν die kinematische Viskosität des Fluids. Ein turbulenter Strömungszustand liegt vor, wenn der turbulente Impulsaustausch die viskosen Kräfte überwiegen, d. h. wenn die turbulente Reynoldszahl (3.48) größer als Eins ist. Unter der Annahme, daß die kinematische Viskosität und der repräsentative Diffusionskoeffizient der Mischung gleich groß, d.h die Schmidtzahl

$$Sc = \frac{\nu}{D} \quad (3.49)$$

gleich eins ist, läßt sich die Reynoldszahl als Funktion turbulenter und chemischer Skalen schreiben

$$Re_t = \frac{u_t l_t}{S_l^0 l_F^0} . \quad (3.50)$$

Die charakteristische Zeit vorgemischter Flammen kann nach Gleichung (3.3) anhand der Flammenfrontdicke l_F^0 und der Flammengeschwindigkeit S_l^0 der ungestreckten, laminaren, planaren Flamme abgeschätzt werden. Zusammen mit den integralen Skalen der Turbulenz läßt sich die Damköhlerzahl als Verhältnis charakteristischer Geschwindigkeiten und Längenmaße definieren:

$$Da_t = \frac{t_F}{t_t} = \frac{u_t l_F^0}{S_l^0 l_t} . \quad (3.51)$$

Wie in Kapitel 2.4.1 dargelegt, ist das Turbulenzspektrum neben den energietragenden, integralen Skalen durch die dissipativen Skalen charakterisiert. Mit diesen sogenannten Kolmogorovskalen läßt sich die Karlovitzzahl (3.40) wie folgt anschreiben:

$$Ka_t = \frac{t_F}{t_\eta} = \left(\frac{l_F^0}{l_\eta} \right)^2 = \left(\frac{u_\eta}{S_l^0} \right)^2. \quad (3.52)$$

Sie setzt das Zeitmaß der dissipativen Wirbel ins Verhältnis zur charakteristischen Zeit der Flamme und definiert somit den Grenzfall, in dem die dissipativen Wirbel mit der Flammenfront interagieren. Mit Hilfe der Relationen (2.75) und (2.76) läßt sich die Karlovitzzahl auch unter Verwendung der integralen Turbulenzskalen darstellen

$$Ka_t = \left(\frac{u_t}{S_l^0} \right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{l_t}{l_F^0} \right)^{-\frac{1}{2}}, \quad (3.53)$$

wobei von Gleichung (3.49) Gebrauch gemacht wurde.

Anstelle der Flammenfrontdicke l_F läßt sich auch eine Karlovitzzahl auf Basis der Reaktionszonendicke l_δ definieren

$$Ka_\delta = \left(\frac{l_\delta}{l_\eta} \right)^2 = \delta^2 Ka_t. \quad (3.54)$$

Der Parameter δ , der über eine inverse Zel'dovichzahl abgeschätzt werden kann (vgl. Gleichung (3.18)), liegt für die meisten Vormischflammen zwischen 5 und 10. Die beiden Karlovitzzahlen (3.52) und (3.54) unterscheiden sich daher um einen Faktor von 25 – 100.

Mit Hilfe der dimensionslosen Kennzahlen (3.50), (3.51), (3.53) sowie (3.54) läßt sich nach den Vorschlägen von BORGHI [21] und PETERS [165] das eingangs erwähnte und in Abbildung 3.10 dargestellte doppellogarithmische Verbrennungsdiagramm konstruieren. Die vorgemischte Verbrennung kann anhand dieses Diagramms in die folgenden Bereiche eingeteilt werden:

- $Re_t < 1$: Bereich der laminaren Flamme. Jenseits der Linie $Re_t < 1$ findet keine turbulente, sondern eine laminare Verbrennung statt. Es gelten die in Kapitel 3.1 formulierten Gesetzmäßigkeiten der laminaren Flamme. Eine Beeinflussung der Flamme erfolgt nur durch Inhomogenitäten der laminaren Strömung.
- $Re_t > 1, l_t/l_F^0 < l_c/l_F^0$: Bereich der pseudo-laminaren Flammen. Dieser Bereich ist durch Wirbel gekennzeichnet, deren Abmessungen l geringer sind als eine kritische Länge l_c (engl.: *cut-off scale*). Das Längenmaß l_c ist als diejenige Längenskala definiert, die gerade noch zu einer nennenswerten Veränderung der Flammenfrontgeschwindigkeit aufgrund von Dehnungs- und Krümmungseffekten führt. POINSOT ET AL. [176] haben für l_c durch Analyse von DNS-Daten die folgende Beziehung abgeleitet

$$\frac{l_c}{l_F^0} = 0.2 + 5.5 \left(\frac{u_t}{S_l^0} \right)^{-1/2} \left(\frac{l_t}{l_F^0} \right)^{1/6}. \quad (3.55)$$

Anhand von Gleichung (3.55) ist ersichtlich, daß l_c immer größer als $0.2l_F$ und somit auch größer als die Dicke der Reaktionszone l_δ ist. Weiterhin läßt sich durch Umformung von Gleichung (3.55) zeigen, daß l_c auch immer größer als die Kolmogorovlänge l_η ist. Physikalisch bedeutet dies, daß in diesem Bereich die dissipativen Wirbel nicht

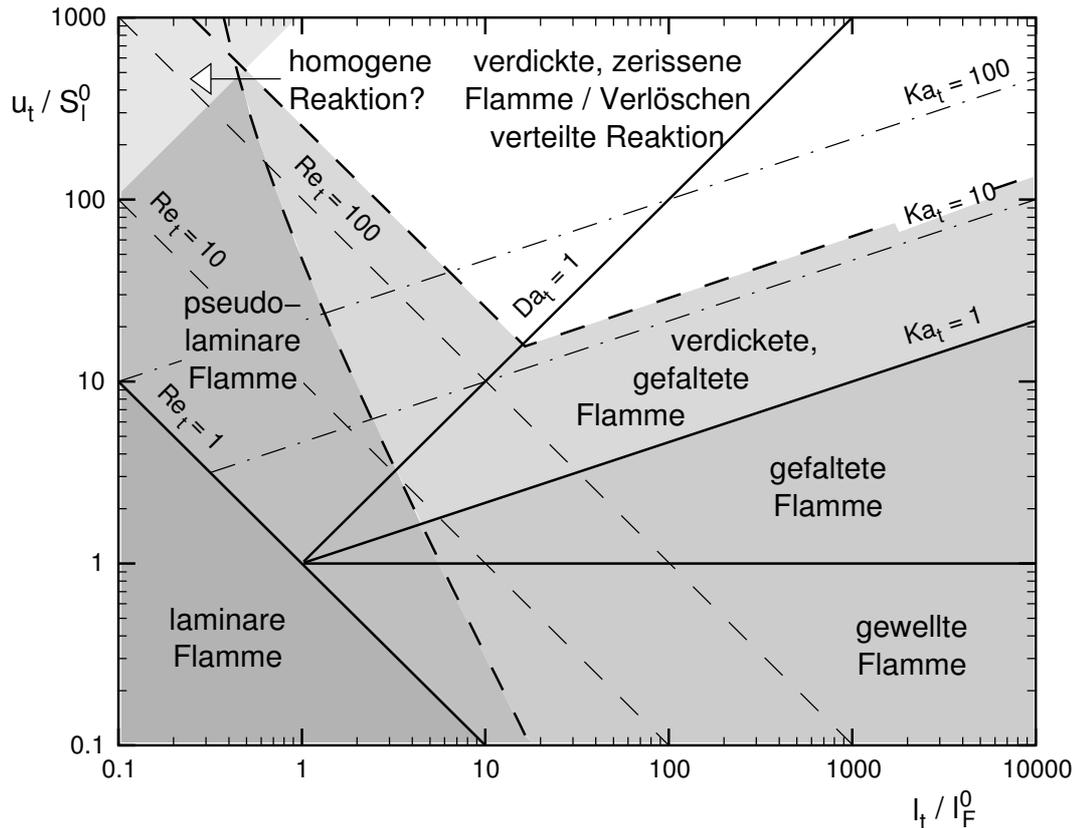


Abbildung 3.10: Modifiziertes Verbrennungsdiagramm.

über ausreichende Energie verfügen, um die Flammenstruktur zu beeinflussen. Wirbelklassen für die $l_n < l_c$ gilt, werden vielmehr in der Vorwärmzone aufgrund der mit der Temperatur zunehmenden Viskosität dissipiert. In diesem Bereich dominieren die molekularen Effekte, und die Interaktion von Flammenfront und turbulentem Strömungsfeld bleibt schwach. Dieser Fall läßt sich, wie in Kapitel 3.1.6 ausgeführt, mit Hilfe der Methode der Aktivierungsenergieasymptote analytisch beschreiben. Dieser Bereich ist im Hinblick auf technisch realisierte Flammen, und damit auf die im Rahmen dieser Dissertation behandelten Verbrennungsmodelle, von untergeordneter Bedeutung.

- $Ka < 1$: „Flamelet Bereich“. In diesem Bereich ist die chemische Zeitskala stets kleiner als die Zeitskala der kleinsten Turbulenzelemente. Die Reaktionszone ist daher gegenüber allen Wirbelabmessungen als dünn anzusehen und wird durch die turbulente Strömung lediglich deformiert und konvektiv transportiert. Die innere Struktur der Reaktionszone bleibt ungestört und kann wie ein laminares Flammenelement beschrieben werden, welches als „Flamelet“ bezeichnet wird. Dieser Bereich läßt sich nochmals unterteilen, je nachdem ob das Verhältnis u_t/S_l^0 kleiner oder größer als Eins ist.
 - $u_t/S_l^0 < 1$: Gewellte Flammen. Die charakteristische Schwankungsgeschwindigkeit u_t , die auch als Rotationsgeschwindigkeit der grobskaligen Strukturen interpretiert werden kann, ist im Vergleich zur Flammengeschwindigkeit zu gering um die Flammenfronten ausreichend aufzuwellen, so daß die Fronten

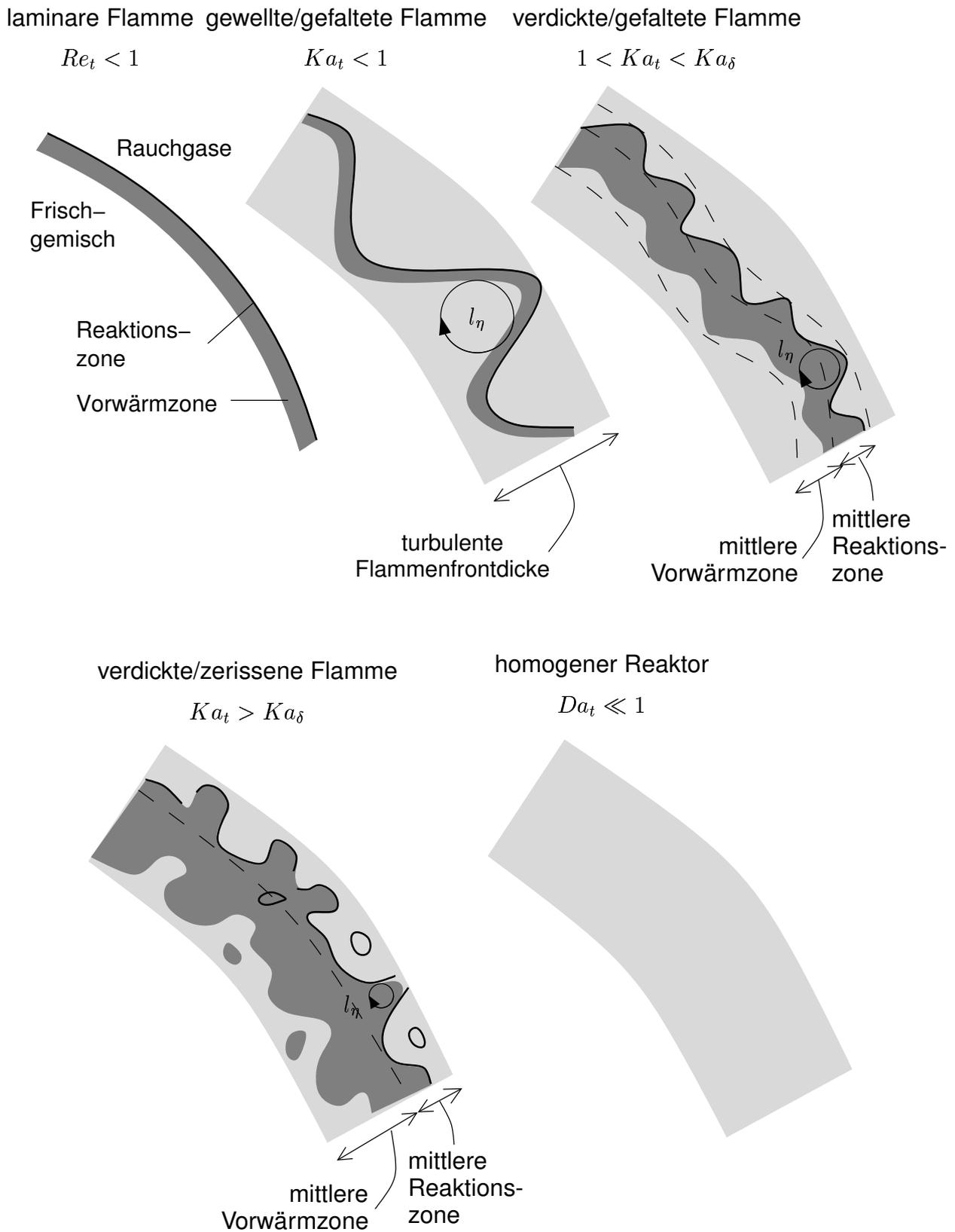


Abbildung 3.11: Struktur turbulenter Vormischflammen in Abhängigkeit der Karlovitzzahl Ka_t .

nicht miteinander interagieren können. Die Bedingung $u_t = S_l^0$ definiert das Gibson-Längenmaß l_G [79, 80], welches durch die Beziehung

$$l_G = \frac{(S_l^0)^3}{\tilde{\varepsilon}} \quad \text{bzw.} \quad \frac{l_G}{l_F^0} = \left(\frac{l_t}{l_F^0} \right) \left(\frac{u_t}{S_l^0} \right)^{-1/3} \quad (3.56)$$

dargestellt wird. PETERS [160] weist dem Gibson-Längenmaß die gleiche Bedeutung wie dem kritischen Längenmaß l_c zu. Diese auf kinematischen Überlegungen basierende Betrachtung vernachlässigt aber viskose Effekte und dynamische Effekte, weshalb das kritische Längenmaß l_c die tatsächliche Interaktion von Flamme und Turbulenz besser charakterisieren sollte als l_G . Im Gegensatz zu Gleichung (3.56) läßt sich Gleichung (3.55) jedoch nicht direkt aus physikalischen Überlegungen heraus ableiten, sondern ist das Ergebnis einer Auswertung von Experimenten und DNS-Daten. Diese überdecken aber nicht den Bereich sehr großer Längenverhältnisse l_t/l_F^0 , weshalb dort die Gültigkeit dieser Beziehung kritisch zu sehen ist. Wie im Fall der pseudo-laminaren Flammen wird auch in diesem Bereich die Interaktion der Flamme mit den unterschiedlichen Wirbelklassen durch molekulare Prozesse kontrolliert und läßt sich mit den gleichen Methoden beschreiben.

- $u_t/S_l^0 > 1$: Gefaltete Flammen. In diesem Fall sind die Wirbel energiereich genug, um die Flammenfronten ausreichend zu wellen und Interaktionen benachbarter Flammenfronten hervorzurufen. Neben der Flammendehnung gewinnt auch die Flammenkrümmung und somit auch Effekte bevorzugter Diffusion an Bedeutung. Da aber noch keine Wirbelklasse in der Lage ist, in die Vorwärmzone einzudringen und diese nennenswert zu beeinflussen, behalten die Flammenfronten noch ihren laminaren eindimensionalen Charakter.
- $1 < Ka_t < Ka_\delta$: Verdickte, gefaltete Flammen. In diesem Fall sind die kleinsten Turbulenzelemente in der Lage in die Vorwärmzone einzudringen und diese aufzudicken. Sie sind jedoch kaum in der Lage die Reaktionszone zu beeinflussen, die weiterhin dünn bleibt und ihren laminaren Charakter beibehält. PETERS [160, 167] verwendet aus diesem Grund den Begriff der „dünnen Flamme“ (engl.: *thin flame regime*). In diesem Bereich liegt demnach eine direkte Interaktion von Flamme und Turbulenz vor, d. h. beide Prozesse können nicht getrennt voneinander betrachtet werden. Eine analytische Beschreibung dieser Strukturen ist daher nicht mehr möglich.
- $Ka_t > Ka_\delta$: Verdickte, zerissene Flammen / Bereich der verteilten Reaktionsfronten. Die dissipativen Wirbelstrukturen sind nun von der Größenordnung der Reaktionszone und können mit dieser interagieren, so daß keine laminare Flammenfrontstruktur mehr identifiziert werden kann. Über das Aussehen dieser Flammenstrukturen gehen in der Literatur die Meinungen auseinander. Dies liegt daran, daß bis heute für diesen Bereich weder ausreichend DNS-basierte Simulationen noch eindeutige Messungen durchgeführt werden konnten. In der neueren Literatur wird, teilweise gestützt durch Experimente, davon ausgegangen, daß oberhalb dieser Karlovitzzahlen Verlöschung eintritt [33, 176, 165]. CHOMIAK [62] hingegen postuliert, daß in diesem Bereich die Verbrennung in dissipativen Strukturen unter nahezu homogenen Bedingungen stattfindet. POINSOT ET AL. [176] haben auf der Grundlage

von DNS-Daten das folgende Verlöschkriterium postuliert:

$$\left(\frac{u_t}{S_l^0}\right) \left(\frac{l_t}{l_F^0}\right) > 250 \quad \text{und} \quad \left(\frac{u_t}{S_l^0}\right)^3 \left(\frac{l_t}{l_F^0}\right)^{-1} > 10^3. \quad (3.57)$$

Diese Beziehung wird auch durch Bombenexperimente von ABDEL-GAYED und BRADLEY [4, 5] gestützt, die Flammenlöschung für die Bedingungen $(u_t/S_l^0) (l_t/l_F^0) > 300$ und $(u_t/S_l^0)^3 (l_t/l_F^0)^{-1} > 6500$ gefunden haben.

- $Da_t \ll 1$: Bereich der homogenen Reaktion. Der Begriff der Flammenfront verliert hier vollends seine Bedeutung. Da die chemische Reaktionen sehr viel langsamer verlaufen als der Zerfall aller Wirbelklassen, liegt ein nahezu ideal rückvermisches System vor. Bisher konnte noch kein Beweis für die Existenz dieser Flammenstruktur erbracht werden. Dies liegt in der extrem kleinen Zeitskala der Reaktionszone ($t_\delta < 10^{-6}$ s) und der Schwierigkeit, die erforderliche feinskalige Turbulenz experimentell zu erzeugen, begründet. Im Kontext der Verbrennungsschemie können aber einige langsam verlaufende Schadstoffbildungsreaktionen, wie die thermische NO_x -Bildung, diesem Bereich zugeordnet werden. Diese Reaktionen tragen aber im allgemeinen nicht zur Wärmefreisetzung bei und sind daher für die Entwicklung von Verbrennungsmodellen von untergeordneter Bedeutung.

Die unterschiedlichen Interaktionen zwischen den kleinsten Wirbelelementen und der Flammenfront sowie die resultierenden Flammenstrukturen sind in Abbildung 3.11 schematisch dargestellt.

Das Verbrennungsdiagramm dient nicht nur dem besseren Verständnis der Interaktion von Turbulenz und Chemie, sondern ist auch hilfreich bei der Einordnung technischer Verbrennungsvorgänge. In Abbildung 3.12 sind die technisch bedeutenden Systeme Ottomotor und Gasturbine in das Diagramm eingetragen. Daneben sind im Diagramm die Auswertungen einer Vielzahl unterschiedlicher Flammentypen, wie Staufflamme, Drallflamme und Bombe, zu sehen, die alle am Engler-Bunte-Institut vermessen wurden [138, 128, 244, 45]. Wie Abbildung 3.12 zeigt, finden technische Verbrennungsprozesse fast ausnahmslos im Bereich der gefalteten und verdickten Flammen statt. Die meisten Verbrennungsmodelle werden jedoch für den Bereich großer Damköhler- bzw. kleiner Karlovitzzahlen abgeleitet, und verlieren für $Ka_t > 1$ ihre Gültigkeit. Ein Ziel dieser Arbeit war es daher, die Anwendbarkeit dieser Modelle auf stark gewinkelte und verdickte Flammen zu untersuchen, und diese nötigenfalls zu verbessern.

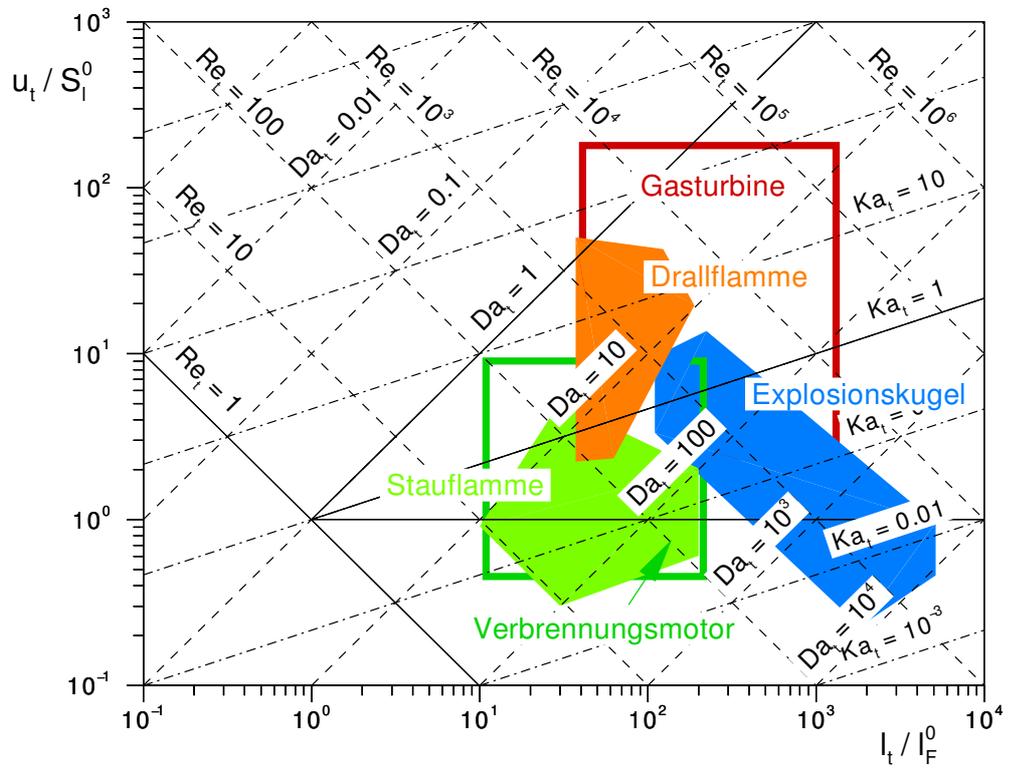


Abbildung 3.12: Einordnung unterschiedlicher Flammentypen in das Verbrennungsdiagramm.

3.3 Definition der turbulenten Flammengeschwindigkeit

Die Ausbreitungsgeschwindigkeit einer Reaktionszone innerhalb eines turbulenten Strömungsfeldes und relativ zur mittleren Strömungsgeschwindigkeit ist als turbulente Flammengeschwindigkeit definiert. Die ersten theoretischen Überlegungen zur Beschreibung der turbulenten Flammengeschwindigkeit wurden 1940 von DAMKÖHLER angestellt [66]. Er identifizierte zwei Grenzfälle der Interaktion von Flammenfront und turbulenter Strömung, hervorgerufen durch grobskalige bzw. feinskalige Turbulenz. Obwohl zu dieser Zeit die Vorstellung der Turbulenzkaskade noch nicht entwickelt war, sind seine Überlegungen die Grundlage für alle weiteren Ansätze zur Beschreibung der turbulenten Flammengeschwindigkeit.

Nach der Vorstellung von DAMKÖHLER ist die Wechselwirkung im Fall der grobskaligen Turbulenz, die dem in Kapitel 3.2 identifizierten Bereich der gewellten Flammen entspricht, rein kinematischer Natur und demnach unabhängig vom turbulenten Längenmaß. Um die turbulente Flammengeschwindigkeit zu bestimmen, betrachtete DAMKÖHLER eine ursprünglich glatte Flammenfront mit der Oberfläche A , die durch den Einfluß „grobballiger“ Wirbel gewellt und auf die Oberfläche A_t vergrößert wird. Diese in Abbildung 3.13(a) dargestellte Flammenstruktur entspricht der Vorstellung gewellter Flammen, die durch die Bedingung $Ka_t \ll 1$ charakterisiert sind. Damit die Flammenfront im zeitlichen Mittel örtlich stationär bleibt, muß aufgrund der Massenerhaltung die folgende Gleichheit erfüllt sein

$$\dot{m} = \rho_u S_t A_t = \rho_u S_t A. \quad (3.58)$$

Die turbulente Flammengeschwindigkeit ist aufgrund dieser Definition wie die laminare Flammengeschwindigkeit S_t auf das unverbrannte Gemisch bezogen. Da sowohl die Flammenfrontoberfläche als auch die laminare Flammengeschwindigkeit lokale Größen sind, ist auch die turbulente Flammengeschwindigkeit eine Feldgröße. An dieser Stelle ist anzumerken, daß DAMKÖHLER in seiner Arbeit die laminare Flammengeschwindigkeit mit der laminaren planaren Flammengeschwindigkeit identifiziert und auf diese Weise Strömungseffekte von Einflüssen der Chemie entkoppelt. Er konnte ferner auf der Basis einfacher geometrischer Überlegungen zeigen, daß die Zunahme an Flammenfrontoberflä-

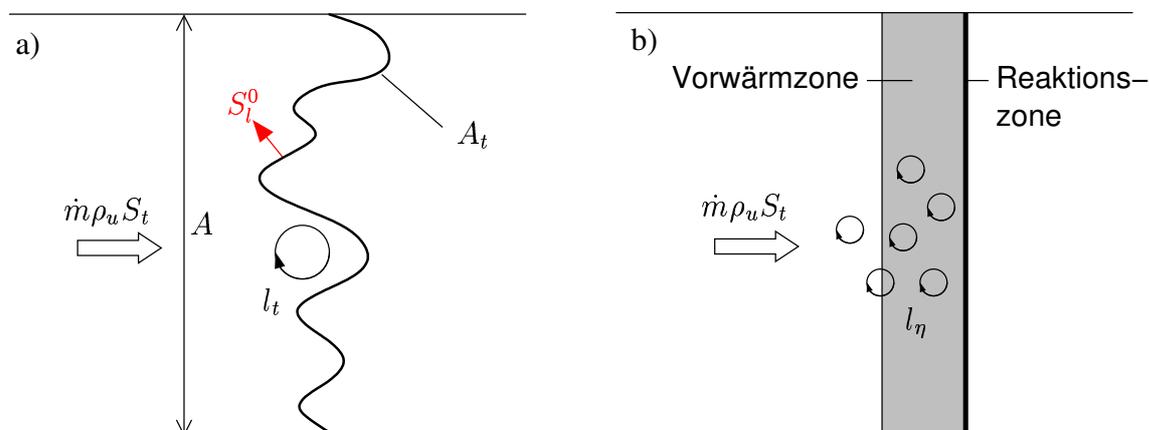


Abbildung 3.13: Schematische Darstellung der Vorstellung des Turbulenzeinflusses auf die Struktur der Flammenfront nach DAMKÖHLER [66]: a) grobskalige Turbulenz ($Ka_t \ll 1$), b) feinskalige Turbulenz ($Ka_t \gg 1$).

che A_t bezogen auf die Querschnittsfläche A proportional zur Zunahme an turbulenter Flammenfrontgeschwindigkeit aufgrund Geschwindigkeitsschwankungen bezogen auf die laminare Flammengeschwindigkeit ist:

$$\frac{A_t}{A} = \frac{S_t^0 + u_t}{S_t^0}. \quad (3.59)$$

Kombination der Gleichungen (3.58) und (3.59) führt auf die folgende Beziehung für die turbulente Flammengeschwindigkeit

$$\frac{S_t}{S_t^0} = 1 + \frac{u_t}{S_t^0}, \quad (3.60)$$

die im Grenzfall großer Damköhler- bzw. kleiner Karlovitzzahlen gültig ist. Die von DAMKÖHLER gefundene Abhängigkeit der turbulenten Flammengeschwindigkeit von der charakteristischen Schwankungsgeschwindigkeit der Turbulenz wurde seitdem durch Experimente von ABDEL-GAYED und BRADLEY [2, 1, 3] oder theoretische Ansätze z. B. von SHCHELKIN [205], KLIMOV [115] oder CLAVIN und WILLIAMS [64] bestätigt, die alle auf Korrelationen der Art

$$\frac{S_t}{S_t^0} = 1 + C \left(\frac{u_t}{S_t^0} \right)^n \quad (3.61)$$

führen. Dem Exponent n werden von den Autoren Werte zwischen 0.5 und 2 zugewiesen. Basierend auf den Arbeiten von YAKHOT [240] konnte POCHEAU [172] schließlich mit Hilfe der Renormalisierungstheorie zeigen, daß nur eine Beziehung der Form

$$\frac{S_t}{S_t^0} = \left(1 + C \left(\frac{u_t}{S_t^0} \right)^n \right)^{1/n} \quad (3.62)$$

in der Lage ist, die von DAMKÖHLER postulierte Unabhängigkeit der turbulenten Flammengeschwindigkeit von Längenskalen der Turbulenz zu erfüllen.

Neben dem Grenzfall der „grobballigen“ Turbulenz betrachtete DAMKÖHLER auch den Fall der „feinballigen“ Turbulenz, den man heute mit der Bedingung $1 < Ka_t < Ka_\delta$ identifizieren würde. Die dissipativen Wirbelelemente sind unter diesen Bedingungen kleiner als die Abmessung der Flammenfront und können daher in die Flammenfront eindringen (siehe Abbildung 3.13(b)). Auf diese Weise verstärken sie den molekularen Transport von Wärme und Stoff, der gemäß Gleichung (3.13) über die Temperaturleitfähigkeit $(\lambda/(\rho c_p))_b$ maßgeblich die Flammengeschwindigkeit bestimmt. Im Fall der laminaren Flamme ist die Flammengeschwindigkeit über die Beziehung

$$S_t^0 \propto \left(\frac{D}{t_F} \right)^{1/2} \quad (3.63)$$

mit der Temperaturleitfähigkeit und der charakteristischen chemischen Zeit verknüpft. DAMKÖHLER formulierte daher aufgrund einer Analogiebetrachtung für die turbulente Flammengeschwindigkeit im Grenzfall der „feinballigen“ Turbulenz die folgende Proportionalität

$$S_t \propto \left(\frac{D_t}{t_F} \right)^{1/2}, \quad (3.64)$$

wobei er die molekulare Temperaturleitfähigkeit einfach durch den turbulente Diffusionskoeffizienten ersetzte. Gleichung (3.64) besagt implizit, daß das chemische Zeitmaß t_F

auch unter Einwirkung „feinskaliger“ Turbulenz unverändert bleibt. Eine Verdickung der Flammenfront muß daher immer mit einer Zunahme der lokalen Flammengeschwindigkeit S_t einhergehen. Unter der Annahme großer turbulenter Reynoldszahlen und gleicher molekularer Transportkoeffizienten findet DAMKÖHLER schließlich die folgende Beziehung für die turbulente Flammengeschwindigkeit im Fall „feinballiger“ Turbulenz

$$\frac{S_t}{S_l^0} = C \cdot \left(\frac{D_t}{D} \right)^{1/2} = C \cdot \left(\frac{u_t l_t}{S_l^0 l_F^0} \right)^{1/2} = C \cdot Re_t^{1/2}. \quad (3.65)$$

Der Proportionalitätskonstante C wird von ihm der Wert Eins zugewiesen. Die von Gleichung (3.65) vorhergesagte Abhängigkeit der turbulenten Flammengeschwindigkeit von der turbulenten Reynoldszahl bzw. einer Kombination von Geschwindigkeits- und Längenmaßstab u_t/S_l^0 bzw. l_t/l_F wurde für den Fall großer turbulenter Reynoldszahlen durch eine Vielzahl von Experimenten bestätigt [7, 155, 138, 128, 244, 45]. Der Versuch einer vereinheitlichten Darstellung der von DAMKÖHLER postulierten Grenzfälle der Interaktion von Flamme und Turbulenz blieb jedoch lange Zeit erfolglos. SCHMID [198] entwickelte zwar 1995 ein semi-empirisches Modell, welches auf einer Überlagerung charakteristischer Zeitskalen beruht (siehe Gleichung 3.116), PETERS [166] blieb es aber vorbehalten im Rahmen seines G-Gleichungsmodells (siehe Kapitel 3.4.3) eine theoretisch fundierte Beziehung für die turbulente Flammengeschwindigkeit zu formulieren, die für den Bereich $Ka_t < Ka_\delta$ gültig ist:

$$\frac{S_t}{S_l^0} = 1 - C \frac{l_t}{l_F^0} + \left(\left(C \frac{l_t}{l_F^0} \right)^2 + 4 \cdot C \cdot Re_t \right)^{1/2}. \quad (3.66)$$

Er konnte außerdem zeigen, daß die turbulente Flammengeschwindigkeit im Bereich kleiner Karlovitzzahlen ($Ka_t < 1$) durch Flammenfaltung und somit u_t/S_l^0 kontrolliert wird, während im Bereich großer Karlovitzzahlen $1 < Ka_t < Ka_\delta$ die Krümmung der Flammenfront, und damit das Verhältnis der charakteristischen Skalen $(u_t l_t)/(S_l^0 l_F^0)$ dominiert. Die Vorstellung einer verteilten Reaktion, wie sie in der Literatur häufig diskutiert wird, ist daher nicht notwendig, um die experimentell bestätigte Reynoldszahlabhängigkeit zu erklären. Den zur Zeit umfassendsten Überblick über Messungen und Modelle der turbulenten Flammengeschwindigkeit bietet der Übersichtsartikel von LIPATNIKOV und CHOMIAK [135].

3.4 Überblick über Modelle turbulenter Vormischverbrennung

Die in Kapitel 2.3 vorgestellten zeitlich gemittelten Erhaltungsgleichungen (2.64)–(2.67) ermöglichen die ingenieurmäßige Behandlung turbulenter reagierender Strömungen, führen dabei jedoch auf eine Reihe ungeschlossener Ausdrücke. Während die turbulenten Transportterme nicht reagierender skalarer Größen durch das Turbulenzmodell bestimmt werden, erfolgt die Schließung des turbulent-diffusiven Spezietransports und der zeitlich mittleren Reaktionsquellterme \bar{w}_k durch das Verbrennungsmodell. Der turbulent-diffusive Transport reagierender Komponenten kann häufig analog zu dem Transport eines passiven Skalars modelliert werden und stellt damit kein Problem dar. Es gibt aber Bedingungen, unter denen der klassische Gradientenansatz (2.110) nicht mehr gültig ist, und daher eine andere Art der Modellierung erfordern. Diese Problematik wird in Kapitel 3.5 ausführlicher besprochen. Das Grundproblem der Verbrennungsmodellierung besteht somit in der Bestimmung von \bar{w}_k , da durch den Reaktionsquellterm die Interaktion von Turbulenz und Chemie beschrieben wird. BORGHI [20] konnte zeigen, daß es aufgrund der starken Nichtlinearität der Reaktionsgeschwindigkeit bezüglich der Temperatur durch Momentenmethoden, wie sie in der RANS-Modellierung angewendet werden, nicht möglich ist, dieses sogenannte Schließungsproblem zu lösen. Es wurden daher andere Ansätze entwickelt, die in den folgenden Abschnitten kurz vorgestellt werden sollen.

Dem besseren Verständnis wegen soll die Chemie durch eine einzige Fortschrittsvariable c beschreibbar sein, die den Wert Null im unverbrannten und den Wert Eins im verbrannten Zustand annimmt. Unter der Annahme eines isobaren, adiabaten Verbrennungsprozesses lassen sich damit alle Zustandsgrößen (p , T und \mathbf{Y}) und die Reaktionsgeschwindigkeit \dot{w}_k als eindeutige Funktionen des Reaktionsfortschritts darstellen. Der zeitliche Mittelwert des Reaktionsfortschritts ist durch die folgende Favre-gemittelte Transportgleichung gegeben

$$\frac{\partial (\bar{\rho}\tilde{c})}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}\tilde{\mathbf{u}}\tilde{c}) = \nabla \cdot \left(\bar{\rho} \frac{\nu_t}{Sc_c} \nabla \tilde{c} \right) + \bar{w}_c. \quad (3.67)$$

Die Dynamik des Reaktionsfortschritts und damit die turbulente Mischung ist durch das Spektrum der momentanen Schwankung c''^2 definiert. Dieses läßt sich in Analogie zum Spektrum der turbulenten kinetischen Energie durch eine Schwankungsintensität und ein Längenmaß charakterisieren. Anstelle der zeitlich mittleren turbulenten kinetischen Energie tritt hierbei die Varianz des Reaktionsfortschritts \tilde{c}''^2 , für die sich eine Transportgleichung der Form (vgl. z. B. BRAY und MOSS [42], BRAY [31], WILLIAMS [238], POINSOT und VEYNANTE [175])

$$\begin{aligned} \frac{\partial (\bar{\rho}\tilde{c}''^2)}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}\tilde{\mathbf{u}}\tilde{c}''^2) &= \nabla \cdot (\overline{\rho D \nabla c''^2}) + \overline{2c'' \nabla (\rho D \nabla \tilde{c})} \\ &\quad - \nabla \cdot (\overline{\rho \mathbf{u}'' c''^2}) - \overline{2\rho \mathbf{u}'' c''^2 \nabla \tilde{c}} - \overline{2\rho D (\nabla c'' \cdot \nabla c'')} + \overline{2c'' \dot{w}_c} \end{aligned} \quad (3.68)$$

ableiten läßt. Die in Gleichung (3.68) auftretende skalare Dissipationsrate

$$\bar{\rho}\tilde{\chi}_c = \overline{\rho D \nabla c'' \cdot \nabla c''} \quad (3.69)$$

beschreibt analog zur Dissipationsrate der turbulenten kinetischen Energie $\tilde{\varepsilon}$ die turbulente Mikromischung und besitzt damit die Bedeutung eines Mischungslängenmaßes.

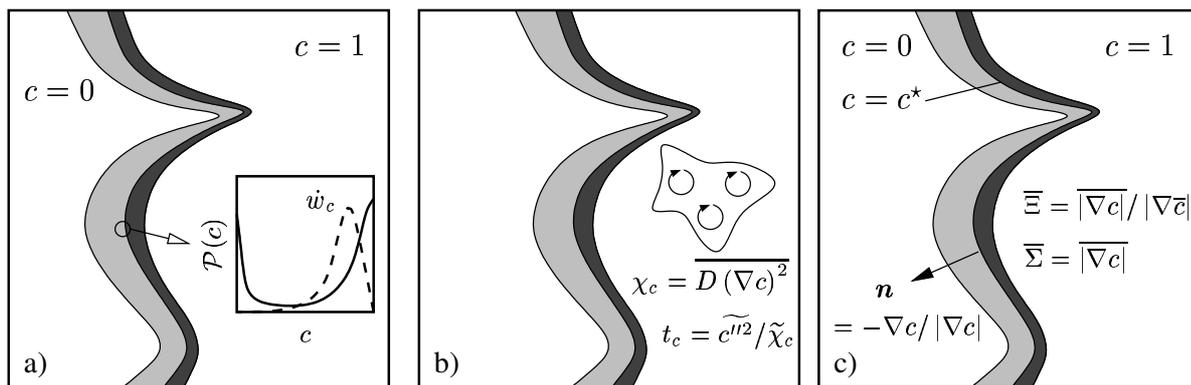


Abbildung 3.14: Schematische Darstellung prinzipieller Ansätze zur Modellierung turbulenter Vormischverbrennung: a) Ein-Punkt Statistik, b) skalare Dissipationsrate, c) Kinematik der Flammenfront durch Betrachten von Isoflächen bzw. der Flammenfrontorientierung.

Wie sich bei der phänomenologischen Betrachtung der turbulenten Vormischverbrennung in Kapitel 3.2 und 3.3 gezeigt hat, ist die Struktur der Flammenfront bei der Beschreibung der Flammenausbreitung und somit der Umsatzgeschwindigkeit \bar{w}_c von besonderer Bedeutung, da die wärmefreisetzenden Reaktionen nur innerhalb dieser lokalisierten Strukturen stattfinden. Die momentane Lage dieser Reaktionszonen ist durch Werte der Reaktionsfortschrittvariable c zwischen Null und Eins charakterisiert, während ihre Topologie durch die Form der jeweiligen Isoflächen $c = c^*$ gegeben ist. Die Dynamik dieser Isoflächen wiederum läßt sich anhand der Bewegungsgleichung ihres Normalenvektors $\mathbf{n} = \nabla c / |\nabla c|$ beschreiben. Alle bekannten Modelle turbulenter Vormischverbrennung im Kontext der Favre-gemittelten Navier-Stokes Gleichungen greifen auf eine oder mehrere dieser Variablen zurück. Es lassen sich somit drei prinzipielle Ansätze für die Modellierung der zeitlich mittleren Umsatzgeschwindigkeit \bar{w}_c identifizieren, die in Abbildung 3.14 skizziert sind:

- Statistische Beschreibung. Zeitlich mittlere Größen werden mit Hilfe lokaler Ein-Punkt Verteilungsfunktionen berechnet. Ansätze dieser Art werden daher als PDF (engl.: *Probability Density Function*) bezeichnet. Wird ein System von Transportgleichungen für die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion gelöst, spricht man von Transport-PDF Modellen. Die Parametrisierung einer angenommenen Verteilungsform mit Hilfe einer oder mehrerer statistischer Momente hingegen führt dagegen auf die sogenannten presumed-PDF Modelle.
- Beschreibung auf Basis der skalaren Dissipationsrate. Modelle dieser Kategorie basieren auf der Annahme kleiner Karlovitzzahlen $Ka_t \ll 1$. Die charakteristischen Zeitskalen der Chemie sind in diesem Fall immer kleiner als die der Turbulenz, und die Mischung im Bereich der dissipativen Skalen, charakterisiert durch $\tilde{\chi}_c$, kontrolliert den Reaktionsumsatz. Die Flammenfront kann unter diesen Voraussetzungen als dünn betrachtet werden, so daß eine entkoppelte Beschreibung von Turbulenz und Chemie vorgenommen werden kann.
- Beschreibung der Flammenfrontgeometrie. Alle Modellansätze, die dieser Klasse zuzuordnen sind, beschreiben die Kinematik der Flammenfront. Die Flammenfront,

oder zumindest die Reaktionszone, wird hierbei als dünn gegenüber den Abmessungen der kleinsten turbulenten Skalen betrachtet, weshalb die Gültigkeit dieser Modelle ebenfalls auf den (erweiterten) „Flamelet“-Bereich ($Ka_t < Ka_\delta$) beschränkt ist. Die Kinematik der Flammenfront kann entweder durch die Topologie und Dynamik von Isoflächen oder durch die zeitliche Entwicklung der Flammenfrontnormalen beschrieben werden.

Die folgenden Abschnitte geben einen Überblick über die bekanntesten Verbrennungsmodelle und ordnen sie in das Verbrennungsdiagramm ein. Hierzu wird mit Hilfe des in Anhang B beschriebenen KPP-Theorems die Modellgleichung der mittleren Umsatzgeschwindigkeit in eine Beziehung für die turbulente Flammengeschwindigkeit umgeformt. Da die turbulente Flammengeschwindigkeit immer eine Funktion der charakteristischen Geschwindigkeits- und Längenskalen von Chemie und Turbulenz ist, läßt sie sich in das Verbrennungsdiagramm eintragen und ermöglicht so eine anschauliche Diskussion der wesentlichen Eigenschaften des jeweiligen Verbrennungsmodells.

3.4.1 Modelle auf Basis der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion

Eine Möglichkeit zur Beschreibung turbulenter reagierender Strömungen besteht in der Anwendung von Methoden der Wahrscheinlichkeitsrechnung. Hierzu wird an einem Ort \mathbf{x} die Verteilung der Reaktionsfortschrittsvariablen betrachtet, d. h. es wird eine sogenannte Einpunktstatistik durchgeführt. Die zugehörige Verteilung wird durch die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion $\mathcal{P}(c, \mathbf{x})$ (PDF, engl.: *Probability Density Function*) der Reaktionsfortschrittsvariablen c beschrieben. Diese gibt an, mit welcher Wahrscheinlichkeit der Reaktionsfortschritt c an einem Ort \mathbf{x} in einem Bereich dc um den Wert c^* liegt (siehe Kapitel 5). Ist die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion bekannt, lassen sich mit ihrer Hilfe alle statistischen Momente der interessierenden Zustandsgrößen, wie Mittelwert oder Varianz, berechnen. Insbesondere ist die mittlere Reaktionsgeschwindigkeit geschlossen darstellbar:

$$\bar{w}_c(\mathbf{x}) = \int_0^1 \dot{w}_c \mathcal{P}(c, \mathbf{x}) dc. \quad (3.70)$$

Gleichung (3.70) verdeutlicht, daß statistische Schließungsansätze die Interaktion von Chemie und Turbulenz ohne weitere Annahmen gekoppelt beschreiben können. Da der Momentanwert der Reaktionsgeschwindigkeit \dot{w}_c durch den Reaktionsmechanismus gegeben und somit bekannt ist, verschiebt sich die Aufgabe der Verbrennungsmodellierung auf die Berechnung bzw. Bestimmung der noch unbekanntenen Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion $\mathcal{P}(c, \mathbf{x})$. Es gibt zwei prinzipielle Möglichkeiten um die PDF zu bestimmen. Der theoretische eleganteste Weg besteht in der Lösung einer Transportgleichung für $\mathcal{P}(c, \mathbf{x})$, wie sie zuerst von DOPAZO und O'BRIEN [72] aus den Erhaltungsgleichungen reagierender Skalare abgeleitet wurde. Diese PDF-Transportgleichung ist jedoch extrem aufwendig zu lösen, weshalb POPE [179] die Anwendung von Monte-Carlo Methoden vorschlug, die bis heute die bevorzugte Lösungsmethode darstellt. Obwohl dieser Ansatz ein mächtiges Werkzeug in der Beschreibung turbulenter reagierender Strömungen darstellt, wird er aufgrund der aufwendigen und rechenintensiven Lösungsverfahren bis heute nicht zur Simulation praktischer Systeme eingesetzt und besitzt daher mehr akademischen Charakter. Einen Überblick über die Möglichkeiten von Transport-PDF Methoden bietet der Übersichtsartikel von DOPAZO [71].

Die zweite Möglichkeit besteht in empirischen Annahmen über die Form der PDF und ihrer Parametrisierung mit Hilfe von statistischen Momenten. Man spricht in diesem Zusammenhang von angenommenen Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen (engl.: *presumed pdf*). Für diese Momente müssen Transportgleichungen abgeleitet und gelöst werden, was ihre Anzahl in der Praxis auf einige wenige reduziert, und somit die möglichen Formen der PDF im Gegensatz zu den aus Transportgleichungen bestimmten Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen stark einschränkt. Es hat sich aber gezeigt, daß die wesentlichen Ergebnisse turbulenten Verbrennungssimulationen auf der Basis von angenommenen Wahrscheinlichkeitsdichten nicht sehr empfindlich auf die gewählte Form der PDF reagieren. Die meisten Ansätze bilden daher die PDF mit Hilfe von Mittelwert und Varianz der Reaktionsfortschrittsvariablen ab (vgl. z. B. [31, 24, 22]). Das erste und bekannteste Verbrennungsmodell, das auf angenommenen Wahrscheinlichkeitsdichten beruht, ist das sogenannte BML Modell, welches im folgenden kurz vorgestellt werden soll.

Das Bray-Moss-Libby (BML) Modell

Dieses Modell ist nach den Anfangsbuchstaben seiner Autoren BRAY, MOSS und LIBBY benannt und wurde erstmals 1977 veröffentlicht [42]. Es war seitdem Objekt einer Vielzahl von Untersuchungen, die zu einer Reihe von Verbesserungen geführt haben [41, 43, 38, 40, 34]. Das Modell beschreibt den Zustand eines reagierenden vorgemischten Gasgemisches mit Hilfe von Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen und ist in der Lage eine Reihe von Phänomenen turbulenter vorgemischer Verbrennung wie „Gegengradientendiffusion“ und flammeninduzierte Turbulenz zu beschreiben.

Neben der Annahme einer irreversiblen 1-Schritt Reaktion, die den Umsatz von Brennstoff F und Oxidator O zu den Verbrennungsprodukten P beschreibt, werden perfekten Gase, konstante thermochemischen Eigenschaften und konstante Lewiszahlen vorausgesetzt. Die grundlegende Idee des Modells besteht in der Annahme einer geeigneten lokalen Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion $\mathcal{P}(c, \mathbf{x})$ der Reaktionsfortschrittsvariablen c . Diese wird als Summe von unverbrannten, verbrannten und reagierenden Anteilen ausgedrückt

$$\mathcal{P}(c, \mathbf{x}) = \mathcal{A}(\mathbf{x}) \delta(c) + \mathcal{B}(\mathbf{x}) \delta(1 - c) + \mathcal{C}\mathcal{F}(c, \mathbf{x}), \quad (3.71)$$

wobei \mathcal{A} , \mathcal{B} bzw. \mathcal{C} die Wahrscheinlichkeit bezeichnen, Frischgas, Rauchgas bzw. reagierendes Gemisch vorzufinden. δ ist die Dirac-Funktion und die Funktion $\mathcal{F}(c, \mathbf{x})$ steht für die Wahrscheinlichkeitsdichte des reagierenden Gemisches. Die mittlere turbulente Reaktionsrate besitzt dann die folgende geschlossene Form:

$$\bar{w}_c(\mathbf{x}) = \int_0^1 \dot{w}_c \mathcal{P}(c, \mathbf{x}) dc = \mathcal{C} \int_0^1 \dot{w}_c \mathcal{F}(c, \mathbf{x}) dc. \quad (3.72)$$

Die in Kapitel vorgestellten Verbrennungsregime lassen sich anhand des BML-Modells identifizieren, indem die Transportgleichungen für den Mittelwert sowie die Varianz des Reaktionsfortschritts in dimensionsloser Form angeschrieben werden. Hierzu werden die folgenden dimensionslosen Größen eingeführt:

$$\begin{aligned} \mathbf{x}^+ &= \mathbf{x}/l_{t,u} \\ \mathbf{u}^+ &= \mathbf{u}/u_{t,u} \\ \rho^+ &= \rho/\rho_u \\ \nu^+ &= \nu/\nu_u. \end{aligned} \quad (3.73)$$

Hierbei bezeichnen $l_{t,u}$, $u_{t,u}$, ρ_u und ν_u das integrale Längenmaß, die Turbulenzintensität, die Dichte sowie die kinematische Viskosität bezogen auf das anströmende Frischgas. Die dimensionslose Form der Transportgleichung für den Reaktionsfortschritt lautet dann:

$$\nabla^+ \cdot (\bar{\rho} \mathbf{u}^+ \tilde{c}) = \frac{1}{Re_t} \nabla^+ \cdot (\overline{\rho^+ \nu^+ \nabla^+ c}) + \nabla^+ \cdot (\overline{\rho^+ (\mathbf{u}'')^+ c''}) + \frac{1}{Da_t} \frac{\bar{w}_c}{\dot{w}_{c,\max}}. \quad (3.74)$$

Die Wahrscheinlichkeit einen reagierenden Zustand anzutreffen ist demnach umgekehrt proportional zur turbulenten Damköhlerzahl $\mathcal{C} \propto 1/Da_t$. Für den Fall, daß $Re_t \gg Da_t \gg 1$ gilt, ist die Verbrennung durch den turbulenten Transport bestimmt d. h. $\mathcal{C} \ll 1$. Diese Annahme bedingt jedoch keine Aussage über die Struktur der Flammen, sie besagt lediglich, daß Frisch- und Rauchgasballen durch dünne Reaktionszonen getrennt sind. Dies können sowohl dünne, gefaltete Flammenfronten oder dissipative Wirbelstrukturen (vgl. CHOMIAK [62]) sein. Die Bestimmung der zeitlich mittleren Reaktionsgeschwindigkeit mit Hilfe von Gleichung (3.72) wird für $\mathcal{C} \ll 1$ aber zunehmend ungenau. Im Rahmen des BML-Modells wurden deshalb zwei Schließungsansätze entwickelt, die entweder auf der statistischen Analyse einer idealisierten Reaktionsfortschrittsvariablen [37, 39, 35] oder auf der Berechnung der skalaren Dissipationsrate [42] beruhen.

3.4.2 Modelle auf Basis der skalaren Dissipationsrate

Die skalare Dissipationsrate $\tilde{\chi}_c$ beschreibt die Relaxationsgeschwindigkeit der Fluktuationen c''^2 aufgrund von Mikromischung. Da der Umsatz proportional zu der Geschwindigkeit ist, mit der Reaktanten und Reaktionsfronten in Kontakt kommen, erscheint die skalare Dissipationsrate direkt oder indirekt im Schließungsansatz von \bar{w}_c . Zudem herrscht in vorgemischten Systemen eine starke Kopplung von turbulenter Mischung und chemischer Reaktion. Dies läßt sich unschwer anhand der Gleichung für die Varianz des Reaktionsfortschritts (3.68) erkennen, die dominante Quellterme sowohl in Form der skalaren Dissipationsrate $\tilde{\chi}_c$ als auch durch chemische Reaktion $\bar{w}_c c''$ enthält.

Für die skalare Dissipationsrate läßt sich in Analogie zur Dissipationsrate der kinetischen Energie eine Transportgleichung ableiten [243, 107]. Sie enthält aber ebenso wie die ε -Gleichung eine Vielzahl unbestimmter Terme, deren praktikable Schließung bis heute nur mit Hilfe semi-empirischer Ansätze möglich ist [25, 23, 146]. Klassische Modelle [218] hingegen postulieren eine einfache lineare Relaxation der Fluktuationen gemäß

$$\bar{\rho} \tilde{\chi}_c = \bar{\rho} \frac{\tilde{\varepsilon}}{k} c''^2. \quad (3.75)$$

Für große Damköhlerzahlen kann die Verteilung des Reaktionsfortschritts als bimodal angesehen werden, d. h. die Schwankungsintensität c''^2 nimmt immer ihr Maximum an

$$c''^2 = \overline{\rho (c - \tilde{c})^2} = \bar{\rho} \tilde{c} (1 - \tilde{c}). \quad (3.76)$$

Die skalare Dissipationsrate ist dann durch die einfache Beziehung

$$\bar{\rho} \tilde{\chi}_c = \bar{\rho} \frac{\tilde{\varepsilon}}{k} \tilde{c} (1 - \tilde{c}) \quad (3.77)$$

gegeben.

Das Wirbelzerfallsmodell („Eddy-Break-Up Modell“)

SPALDING [209, 210] entwickelte 1971 ein Verbrennungsmodell für Vormischflammen, das auf Überlegungen Damköhlers im Grenzfall großer Reynolds- und Damköhlerzahlen beruht. Er ging davon aus, daß die Reaktionszone als eine Ansammlung von Frischgas und Rauchgasballen angesehen werden kann, die durch sehr dünne Flammenfronten voneinander getrennt werden. In diesem Fall ($Da_t \gg 1$) ist der Einfluß der Chemie vernachlässigbar und die turbulente Umsatzgeschwindigkeit wird durch die Wirbelzerfallszeit $t_t = \tilde{k}/\tilde{\varepsilon}$ sowie die Fluktuationen der Reaktionsfortschrittsvariablen kontrolliert. Das Wirbelzerfallsmodell (EBU, engl.: *Eddy-Break-Up*) lautet damit in seiner gebräuchlichen Form

$$\bar{w}_c = C_{EBU} \bar{\rho} \frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{k}} \tilde{c} (1 - \tilde{c}) . \quad (3.78)$$

Dieses Modell erfreut sich bis heute großer Beliebtheit bei der Berechnung technischer Verbrennungsprozesse, da es die turbulente Umsatzgeschwindigkeit auf bekannte Feldgrößen zurückführt und keine weiteren Transportgleichungen benötigt. Ungeachtet dieser Vorteile besitzt es aber auch zwei grundlegende Nachteile. Zum einen enthält Gleichung (3.78) keinerlei Informationen über die chemische Kinetik. Es berücksichtigt lediglich die Gleichgewichtszustände. Zum anderen neigt es dazu die Reaktionsrate in Bereichen hoher Dehnungsraten zu überschätzen. Diese Unzulänglichkeit macht sich insbesondere bei aerody-

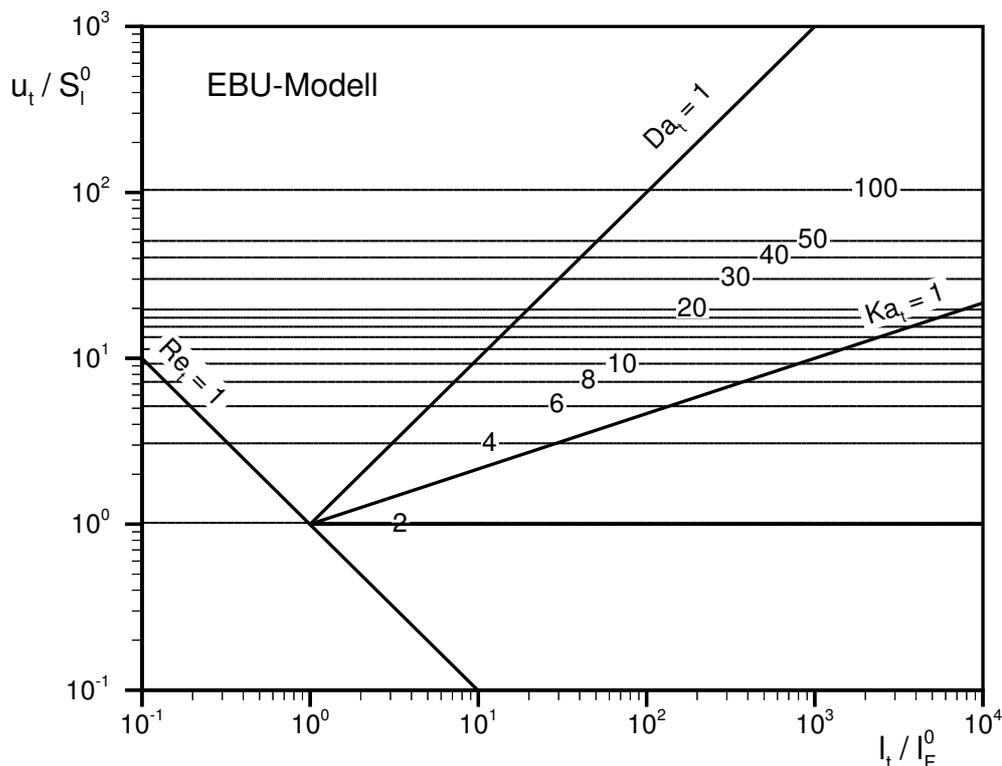


Abbildung 3.15: Darstellung der Chemie-Turbulenz Interaktion wie sie durch das EBU-Modell im Fall der stationären eindimensionalen turbulenten Flammenfront im Verbrennungsdiagramm beschrieben wird. Isolinien sind normierte turbulente Flammgeschwindigkeiten gemäß Gleichung (3.79).

namisch stabilisierten Flammen und wandnahen Strömungen bemerkbar. In der Literatur finden sich einige Vorschläge, um diese Nachteile auszugleichen [195, 9], sie ändern jedoch nichts daran, daß der Erfolg dieses Modells maßgeblich durch die richtige Wahl der Konstante C_{EBU} bestimmt wird.

Eine KPP-Analyse der Gleichung (3.78) führt auf den folgenden Ausdruck für die turbulente Flammengeschwindigkeit einer eindimensionalen, planaren Flamme:

$$\frac{S_T}{S_l^0} = \left(\frac{C_{\text{EBU}} C_\mu}{S c_c} \right)^{1/2} \frac{u_t}{S_l^0}. \quad (3.79)$$

Gleichung (3.79) läßt sich in dem in Abbildung 3.15 gezeigten Verbrennungsdiagramm anschaulich darstellen. Eine wesentliche Grundlage des EBU-Modells ist die Annahme unendlich schneller Chemie ($Da_t \gg 1$), weshalb eine Erhöhung der turbulenten Flammengeschwindigkeit nur aufgrund einer Flammenfrontauffaltung zustande kommt. Die einzige verbleibende Skala ist somit das charakteristische Geschwindigkeitsverhältnis u_t/S_l^0 . Die Isolinien der normierten Flammengeschwindigkeit S_t/S_l^0 verlaufen parallel zur Achse des Längenmaßstabes l_t/l_F . Während das Modell im Bereich der gewellten Flammen gute Ergebnisse liefert, ist für den Bereich größerer Karlovitzzahlen mit seinem Versagen zu rechnen, da hier der Längenmaßstab l_t/l_F an Einfluß gewinnt.

Schließungsansatz des BML-Modells auf Basis der skalaren Dissipationsrate

BRAY [30] konnte auf Basis des BML-Modells durch Kombination der Transportgleichungen für den Mittelwert (3.67) und die Varianz (3.68) des Reaktionsfortschritts zeigen, daß die mittlere Reaktionsgeschwindigkeit unter der Bedingung großer Reynolds- und Damköhlerzahlen proportional zur skalaren Dissipationsrate ist

$$\bar{w}_c = 2 \frac{\bar{\rho} \tilde{\chi}_c}{2c_m - 1}. \quad (3.80)$$

Der Parameter c_m charakterisiert hierbei die chemische Reaktion und ist zu

$$c_m = \frac{\int_0^1 c \dot{w}_c \mathcal{F}(c) dc}{\int_0^1 \dot{w}_c \mathcal{F}(c) dc} \quad (3.81)$$

definiert. Die Kombination der Gleichungen (3.80) und (3.77) resultiert in dem bekannten Ergebnis

$$\bar{w}_c = \frac{1}{2c_m - 1} \bar{\rho} \frac{\tilde{\varepsilon}}{k} \tilde{c} (1 - \tilde{c}). \quad (3.82)$$

Das BML-Modell kann in dieser Form als eine theoretisch fundierte Ableitung des auf phänomenologischen Überlegungen basierenden EBU-Modells betrachtet werden. Es berücksichtigt jedoch einen Einfluß der Chemie über die Funktion c_m und ist somit im Gegensatz zum EBU-Modell in der Lage Verlöschvorgänge wiederzugeben⁴.

⁴Dies gilt nur für den Fall, daß c_m nicht als konstante Größe betrachtet, sondern auf Basis von Gleichung (3.81) berechnet wird. Da die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion $\mathcal{F}(c)$ eine Feldgröße ist, die vom Turbulenzzustand abhängt, berücksichtigt das BML-Modell auf diese Weise Chemie-Turbulenz Interaktionen.

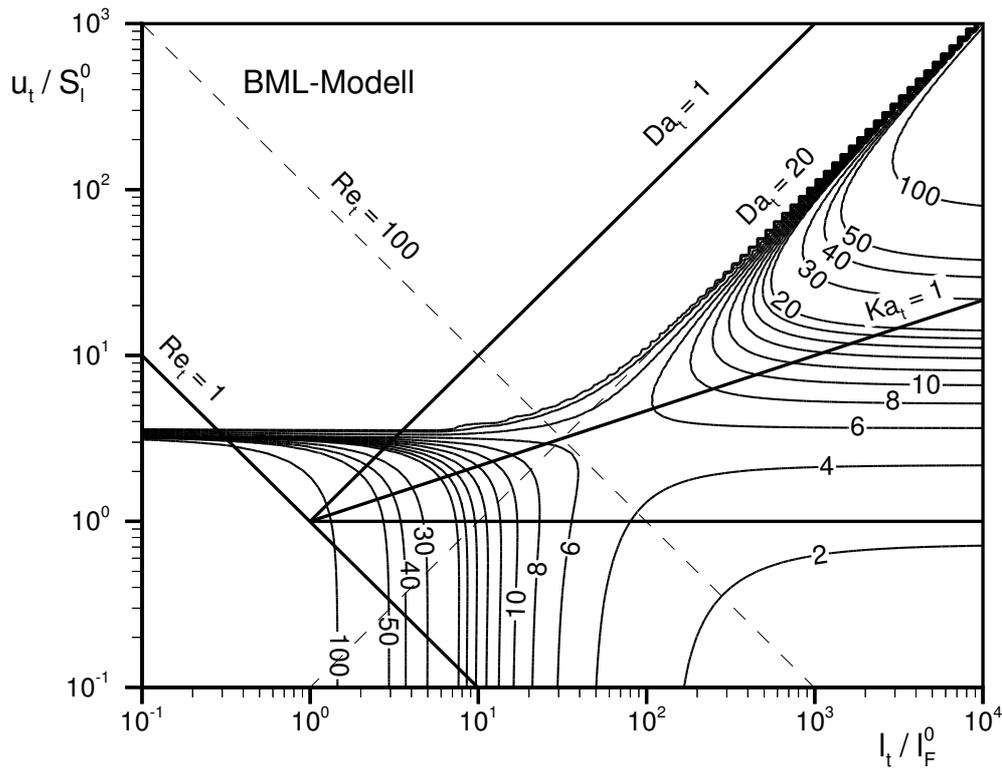


Abbildung 3.16: Darstellung der Chemie-Turbulenz Interaktion wie sie durch das BML-Modell im Fall der stationären eindimensionalen turbulenten Flammenfront im Verbrennungsdiagramm beschrieben wird. Isolinien sind normierte turbulente Flammgeschwindigkeiten gemäß Gleichung (3.83).

Gleichung (3.82) läßt sich mit Hilfe des KPP-Theorems in einen Ausdruck für die normierte Flammgeschwindigkeit umformen:

$$\frac{S_t}{S_l^0} = 1 + 1.14 \frac{u_t}{S_l^0} \left(1 + \left[126 - 8.33 \left(\frac{u_t}{S_l^0} \right)^2 \right] \frac{1}{Re_t} \right). \quad (3.83)$$

Das Ergebnis ist in Abbildung 3.16 dargestellt. Es zeigt, daß für den Gültigkeitsbereich des Modells ($Re_t > 100$, $Da_t > 20$) die bezogene Flammgeschwindigkeit proportional zum Geschwindigkeitsverhältnis u_t/S_l^0 ist. Für kleine Damköhlerzahlen hingegen verliert das Modell seine Gültigkeit und sagt daher im Einklang mit der klassischen Flamelet-Theorie von KLIMOV und WILLIAMS [238] ein Verlöschen der Flamme voraus. Für kleine turbulente Reynoldszahlen liefert das Modell hingegen unphysikalische Resultate, da hier die Flammgeschwindigkeit mit abnehmender Reynoldszahl ansteigt. Auf den ersten Blick erscheint dieser Bereich die verdickte Flamme von DAMKÖHLER wiederzugeben, da die Abmessungen der energietragenden Wirbel in die Größenordnung der laminaren Flammenfrontdicke kommen. Diese Betrachtung vernachlässigt jedoch, daß diese Wirbel eine verhältnismäßig kleine charakteristische Schwankungsgeschwindigkeit $u_t < S_l^0$ und somit eine kleine turbulente kinetische Energie besitzen. Die Wirbelelemente können unter diesen Umständen gar nicht in die Flammenfront eindringen und sie beeinflussen. Die Flammenfront wandert vielmehr über diese Wirbel hinweg ohne nennenswert mit ihnen

zu interagieren. Dies zeigt, daß die Interaktion von Flammenfront und Turbulenz nicht allein auf dem Vergleich der charakteristischen Längen- oder Geschwindigkeitsskala erfolgen kann, sondern immer auf dem Vergleich einer Kombination dieser beiden Skalen. Ein Vergleich des Verhältnisses von Längen- und Geschwindigkeitsskala ist mit einem Verhältnis der Zeitskalen von Mischung und chemischer Reaktion identisch und wird durch die Damköhler bzw. die inverse Karlovitzzahl beschrieben. Das Produkt der beiden Skalen hingegen spiegelt das Verhältnis von turbulentem zu molekularem Impulsaustausch wieder und wird durch die turbulente Reynoldszahl charakterisiert.

Abschließend sei bemerkt, daß die Modellierung der skalaren Dissipationsrate mit Hilfe von Gleichung (3.75) mit der Annahme statistisch gleich verteilter Gradienten der Reaktionsfortschrittsvariablen identisch ist. Hierbei wird jedoch die Tatsache ignoriert, daß für $\mathcal{C} \ll 1$ Gradienten der Reaktionsfortschrittsvariablen nur innerhalb der dünnen Reaktionszonen anzutreffen sind. Aus diesem Grund ist die Anwendbarkeit von Modellen, die auf Gleichung (3.82) beruhen, aus physikalischer Sicht zumindest fragwürdig, und unterstreicht die Notwendigkeit einer Modellierung der skalaren Dissipationsrate.

3.4.3 Modelle auf Basis der Flammenfrontgeometrie

Modelle, die die zeitliche Entwicklung der Flammenfrontgeometrie beschreiben, gehen generell davon aus, daß die Reaktionsfront als dünn gegenüber den Abmessungen der Wirbelelemente betrachtet werden kann. Ihre Gültigkeit ist damit auf den Bereich der „Flamelets“ ($Ka_t > 1$) begrenzt, weshalb Ansätze dieser Kategorie auch als „Flamelet“-Modelle bezeichnet werden. Da definitionsgemäß die Reaktionszone nicht durch die turbulente Strömung verändert wird, erlauben diese Modelle eine entkoppelte Beschreibung von Turbulenz und Chemie. Im Gegensatz zu PDF-Modellen können sie daher beliebig komplexe Chemie über sogenannte „Flamelet“-Bibliotheken berücksichtigen [160, 51]. Die Geometrie der Flammenfront läßt sich mit Hilfe von drei unterschiedlichen, aber mathematisch äquivalenten Methoden beschreiben: Feldgleichungen für Isoflächen (G -Gleichungsansatz), Bilanzgleichungen für die Flammenfrontdichte und Bilanzgleichungen für die Flammenfrontkrümmung.

Feldgleichungen für Isoflächen: G -Gleichung

Die momentane Transportgleichung der Reaktionsfortschrittsvariable lautet in ihrer reaktiv-diffusiven Form:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla c = \frac{1}{\rho} \left[\frac{\nabla \cdot (\rho D \nabla c) + \dot{w}}{|\nabla c|} \right] |\nabla c| = S_F |\nabla c|. \quad (3.84)$$

Sie entspricht in ihrer mathematischen Formulierung einer Huygens-Gleichung, und beschreibt die Fortpflanzung einer Isofläche des Reaktionsfortschritts mit der Geschwindigkeit S_F in das Frischgas. Die Ausbreitung einer Flammenfront läßt sich durch Einführen eines passiven Skalars, eines sogenannten Indikators, beschreiben, wobei der Wert $G = G^0$ die momentane Lage der Flammenfront markiert. Die resultierende Gleichung wird als „ G -Gleichung“ bezeichnet [113]:

$$\frac{\partial G}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla G = S_F |\nabla G|. \quad (3.85)$$

PETERS [162, 163, 166, 167] hat Gleichung (3.85) durch zeitliche Mittelung und rigore Modellierung der ungeschlossenen Terme auf turbulente Flammen übertragen:

$$\bar{\rho} \frac{\partial \bar{G}}{\partial t} + \bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \cdot \nabla \bar{G} = \bar{\rho} S_t |\nabla \bar{G}| - \bar{\rho} D_t \tilde{\kappa} |\nabla \bar{G}|. \quad (3.86)$$

Der erste Term der rechten Seite beschreibt die Änderung des G -Feldes aufgrund turbulenter Flammenausbreitung im Bereich der gefalteten Flammen ($Ka_t < 1$). Der zweite Term berücksichtigt den Einfluß der mittleren Flammenfrontkrümmung $\tilde{\kappa}$, welcher im Bereich der verdickten Flammen ($1 < Ka_t < Ka_\delta$) einen dominierenden Einfluß ausübt. Um die Gleichung zu schließen wird noch eine Bestimmungsgleichung für die turbulente Flammengeschwindigkeit S_t benötigt. Hierzu leitet PETERS [165, 166] aus der G -Gleichung eine Transportgleichung für die Flammenfrontkrümmung ab. Diese überführt er mit Hilfe asymptotischer Überlegungen in die folgende Beziehung für die turbulente Flammengeschwindigkeit:

$$\frac{S_t}{S_l^0} = 1 - C \frac{l_t}{l_F^0} + \left(\left(C \frac{l_t}{l_F^0} \right)^2 + 4 \cdot C \frac{u_t}{S_l^0} \frac{l_t}{l_F^0} \right)^{1/2}. \quad (3.87)$$

Die Konstante C soll universellen Charakter haben und wird von PETERS mit $C = 0.195$ angegeben. Gleichung (3.87) stellt eine asymptotische Überlagerung der beiden von DAMKÖHLER identifizierten Grenzfälle dar. Für den Bereich der „groskaligen“ Turbulenz,

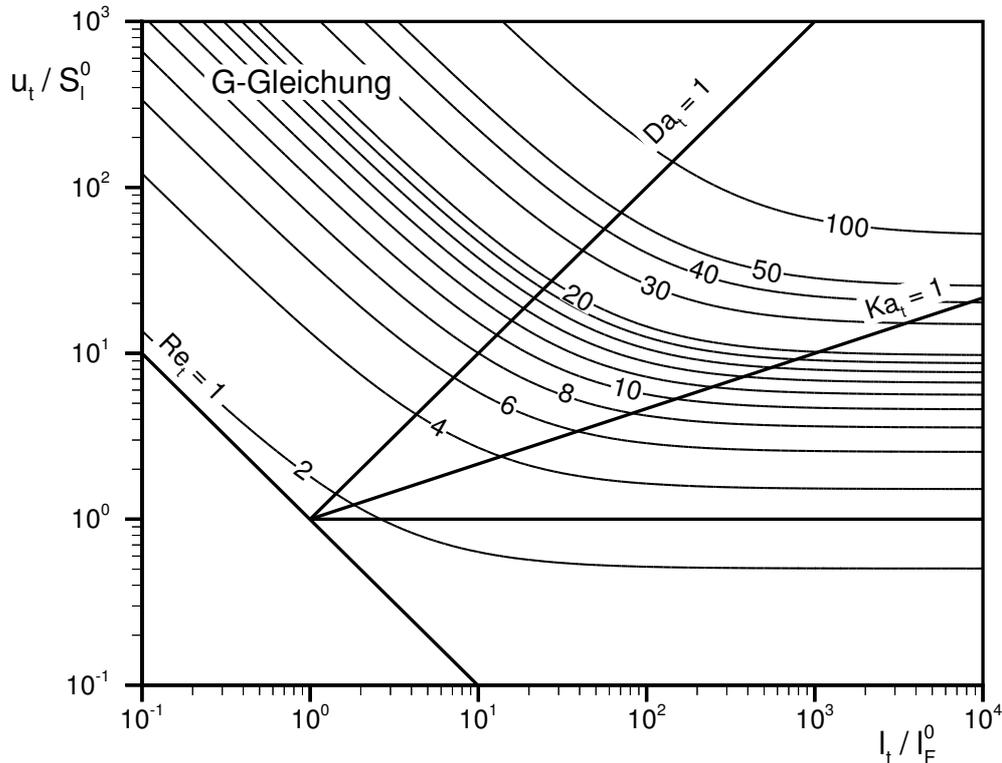


Abbildung 3.17: Darstellung der Chemie-Turbulenz Interaktion wie sie durch das G -Gleichungsmodell von PETERS [166] im Fall der stationären eindimensionalen turbulenten Flammenfront im Verbrennungsdiagramm beschrieben wird. Isolinien sind normierte turbulente Flammengeschwindigkeiten gemäß Gleichung (3.87).

also der gefalteten Flammen, gilt $l_t/l_F^0 \rightarrow \infty$ und Gleichung (3.87) reduziert sich auf $S_t/S_l^0 = 1 - 2Cu_t/S_l^0$. Der Bereich der verdickten, gefalteten Flammen hingegen korrespondiert mit $l_t/l_F^0 \rightarrow 0$, was auf die Beziehung $S_t/S_l^0 = 1 + \sqrt{4C} \cdot Re_t^{1/2}$ führt. Abbildung 3.17 zeigt Gleichung (3.87) im Verbrennungsdiagramm, in welchem die beiden Grenzfälle des Modells klar erkennbar sind. Das Modell liefert in dieser Form aber keine Informationen über Flammenlöschung, der im Bereich $Ka_t > Ka_\delta$ auftreten sollte. Hierzu sind offensichtlich Informationen über die Interaktion der Turbulenz mit der Flammenfront erforderlich, die das Lösen des vollständigen Gleichungssystems der G -Gleichung erfordert.

Die G -Gleichung besitzt gegenüber anderen „Flamelet“-Modellen zwei Vorteile. Zum einen konnte PETERS im Rahmen seiner Arbeiten zeigen, daß die G -Gleichung keine dünnen Flammenfronten voraussetzt und somit auch für $Ka_t < Ka_\delta$ gültig ist. Zum anderen tritt in der G -Gleichung keine „Gegengradientendiffusion“ auf, da es sich bei der Indikatorfunktion G um einen passiven Skalar handelt. Die G -Gleichung weist jedoch auch zwei gravierende Nachteile auf. Da G ein passiver Skalar ist, besitzt das resultierende Gleichungssystem keine Informationen über die Massenerhaltung der reagierenden Komponenten. Die Kopplung von G - und Enthalpie- bzw. Temperaturgleichung stellt damit eines der zentralen Probleme bei der Verwendung der G -Gleichung dar [175]. Eine weitere Schwierigkeit besteht in der numerischen Lösung der G -Gleichung, die im Vergleich zu klassischen Transportgleichungen aufwendig und rechenintensiv ist [114, 157, 94].

Modelle auf Basis der Flammenfrontdichte

Modelle dieser Kategorie identifizieren die Reaktionszone als sehr dünne Fläche, innerhalb derer die Reaktion stattfindet. Wie in Kapitel 6 gezeigt wird, läßt sich unter dieser Voraussetzung die mittlere Umsatzgeschwindigkeit als Funktion einer lokalen Umsatzgeschwindigkeit und der Flammenfrontdichte darstellen:

$$\bar{w}_c = \bar{\Omega}_c \bar{\Sigma}. \quad (3.88)$$

Die zeitlich gemittelte Flammenfrontoberflächendichte $\bar{\Sigma}$ ist hierbei ein Maß für die pro Volumeneinheit zur Verfügung stehende Flammenfrontoberflächendichte und $\bar{\Omega}_c$ ist die ebenfalls zeitlich gemittelte lokale Umsatzgeschwindigkeit pro Flammenfrontoberflächeneinheit. Dieser Ansatz entkoppelt formal die Beschreibung der Chemie und die Beschreibung der Turbulenz: Die Flammenfront wird als materielle Fläche betrachtet, die durch das turbulente Strömungsfeld konvektiv und diffusiv transportiert sowie gekrümmt und gestreckt wird. Die Interaktion von Flamme und Turbulenzfeld wird somit über die Flammenfrontdichte modelliert. Die Eigenschaften der Chemie werden mehr oder weniger komplex über $\bar{\Omega}_c$ beschrieben, wobei die einfachste Betrachtungsweise von einer laminaren, planaren, ungestreckten Flamme mit $\bar{\Omega}_c = \rho_u S_c = \rho_u S_l^0$ ausgeht, während komplexere Modelle die Flammenfrontdynamik und damit den Turbulenzeinfluß berücksichtigen.

Die Flammenfrontoberflächendichte läßt sich entweder auf der Basis algebraischer Gleichungen abschätzen, oder mit Hilfe einer Transportgleichung bestimmen. Der zuletzt genannte Ansatz war Thema der vorliegenden Arbeit und wird in Kapitel 6 ausführlich beleuchtet. Im folgenden sollen die beiden bekanntesten analytischen Modelle kurz vorgestellt, und ihre prinzipiellen Eigenschaften anhand des Verbrennungsdiagrammes diskutiert werden.

Analytisches Modell von BRAY Das Modell von BRAY [37] basiert auf einer statistischen Analyse der Reaktionsfortschrittsvariablen. Im Fall sehr großer Damköhlerzahlen nimmt die Verteilung des Reaktionsfortschritts eine bimodale Form an, und die mittlere Reaktionsgeschwindigkeit $\bar{w}_c(\mathbf{x})$ kann als zeitliche Mittelung einer Serie von Diracfunktionen betrachtet werden, die jeweils den Durchgang einer Flammenfront am Ort $\mathbf{x}(t)$ repräsentieren. Aufgrund dieser Betrachtung läßt sich die mittlere Reaktionsgeschwindigkeit als Produkt von „Flammendurchgangsfrequenz“ $\bar{\nu}_y$ und Reaktionsumsatz pro Flammendurchgang w_y darstellen:

$$\bar{w}_c = \bar{\nu}_y \cdot w_y . \quad (3.89)$$

Als „Flammendurchgangsfrequenz“ wird die Häufigkeit bezeichnet, mit der die Flammenfront einen Ort \mathbf{x} pro Längeneinheit passiert. Sie läßt sich mit Hilfe einer Ortskorrelation bestimmen, und ist mit dem charakteristischen Längenmaß der Flammenfrontkrümmung \bar{L}_y über die Beziehung

$$\bar{L}_y = \frac{g\bar{c}(1-\bar{c})}{\bar{\nu}_y} \quad (3.90)$$

verknüpft. Die Konstante g ist hierbei von der angenommenen Form der Verteilungsfunktion des Flammenfrontdurchganges abhängig und nimmt Werte zwischen 1 und 2 an [37]. Im allgemeinen wird das charakteristische Längenmaß aus den integralen Größen der Turbulenz bestimmt [32]

$$\bar{L}_y = C \cdot l_t \left(\frac{u_t}{S_l^0} \right)^{-n} , \quad (3.91)$$

und der Reaktionsumsatz w_y wird durch

$$w_y = \rho_u S_l^0 \frac{1}{\bar{\sigma}_y} \quad (3.92)$$

modelliert. Der Faktor $\bar{\sigma}_y$ beschreibt das zeitlich gemittelte Produkt von momentaner Flammenfrontorientierung und Ausbreitungsrichtung der turbulenten Flammenfront. Er wird häufig als konstant angenommen, ist aber für große Karlovitzzahlen eine Funktion des Turbulenzzustandes [55]. Ein Vergleich der Gleichungen (3.88), (3.89) und (3.90) führt auf den gesuchten analytischen Ausdruck für die Flammenfrontdichte:

$$\bar{\Sigma} = \frac{g}{\bar{\sigma}_y \bar{L}_y} \bar{c}(1-\bar{c}) = \frac{g}{\bar{\sigma}_y L_y} \frac{1+\tau}{(1+\tau\tilde{c})^2} \tilde{c}(1-\tilde{c}) . \quad (3.93)$$

Kombination der Gleichungen (3.88), (3.91) und (3.93) resultiert in einer Beziehung für die zeitlich mittlere Umsatzgeschwindigkeit, die mit dem EBU-Modell identisch ist. Sie beinhaltet aber aufgrund von Gleichung (3.93) implizit Informationen über Dichteänderungen, die durch den Wärmefreisetzungsparameter τ beschrieben werden. Dieses Modell verhält sich im Verbrennungsdiagramm wie das in Abbildung 3.15 dargestellte EBU-Modell, und wird daher nicht gesondert dargestellt.

Fraktalmodell von Gouldin Eine weitere Möglichkeit zur der Bestimmung der Flammenfrontdichte besteht in der Anwendung der Fraktaltheorie auf die Oberfläche der gefalteten Flammenfront. GOULDIN ET AL. [84, 85] leiten den folgenden Ausdruck für die Flammenfrontoberflächendichte ab:

$$\bar{\Sigma} = \frac{1}{l_t} \left(\frac{l_t}{l_\eta} \right)^{D-2} . \quad (3.94)$$

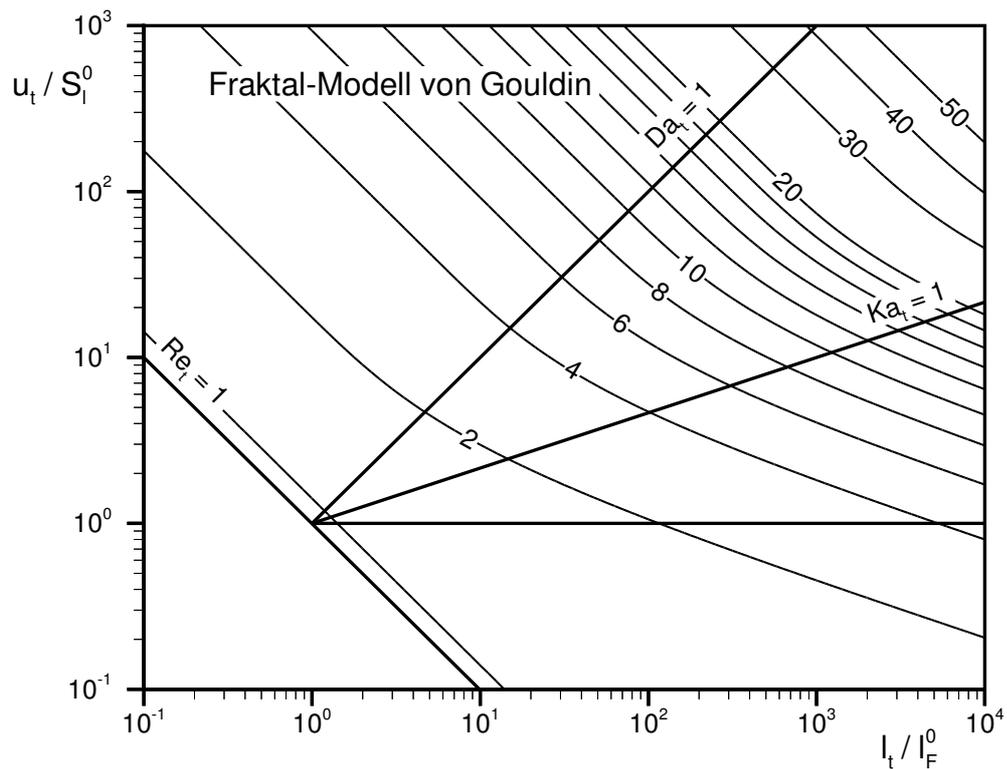


Abbildung 3.18: Darstellung der Chemie-Turbulenz Interaktion wie sie durch das Fraktalmodell von GOULDIN ET AL. [84] im Fall der stationären eindimensionalen turbulenten Flammenfront im Verbrennungsdiagramm beschrieben wird. Isolinien sind normierte turbulente Flammgeschwindigkeiten.

$\bar{\Sigma}$ ist hierbei eine Funktion der fraktalen Dimension D , die experimentell bestimmt werden muß, sowie von zwei turbulenten Längenskalen, die das Längenspektrum begrenzen und im allgemeinen durch das dissipative bzw. das integrale Längenmaß abgeschätzt werden. Das resultierende Reaktionsmodell beinhaltet im Gegensatz zu dem Modell von BRAY eine weitere Information über das Turbulenzspektrum in Form des dissipativen Längenmaßes l_η und ist daher, wie in Abbildung 3.18 gezeigt, in der Lage die Reynoldszahlabhängigkeit im Bereich kleiner Damköhler- bzw. großer Karlovitzzahlen wiederzugeben. Es erfüllt jedoch nicht die geforderte Reynoldszahlunabhängigkeit im Bereich kleiner Karlovitzzahlen, weshalb das Modell auf Bereiche $Ka_t \gtrsim 1$ beschränkt ist.

Transportgleichung für die Flammenfrontoberflächendichte Anstelle von algebraischen Beziehungen läßt sich für die Flammenfrontoberflächendichte auch eine Transportgleichung lösen. MARBLE und BROADWELL [147] haben bereits 1977 auf der Basis phänomenologischer Überlegungen eine Transportgleichung für die Flammenfrontoberflächendichte abgeleitet, um die Verbrennung nicht vorgemischter Flammen mit schneller Chemie zu beschreiben. Dieses Konzept wurde Anfang der 90er Jahre wieder aufgegriffen, und Ableitungen auf Basis geometrischer Überlegungen [48, 221] und statistischer Betrachtungen [183, 50, 222] entwickelt. Die Überführung dieser Gleichungen in eine zeitlich gemittelte Transportgleichung beinhalten jedoch eine Reihe von Termen, die auf Ba-

sis phänomenologischer Überlegungen modelliert werden müssen. Auf die Herleitung der zeitlich gemittelten Transportgleichung und die Modellierung der ungeschlossenen Terme wird an dieser Stelle auf das Kapitel 6 verwiesen. Unabhängig von den in der Literatur vorgeschlagenen Schließungsannahmen läßt sich die Σ -Gleichung in der folgenden verallgemeinerten Form anschreiben:

$$\frac{\partial (\bar{\Sigma})}{\partial t} + \nabla \cdot (\tilde{u}\bar{\Sigma}) - \nabla \cdot \left(\frac{\nu_t}{Sc_\Sigma} \nabla \bar{\Sigma} \right) = (K_m + K_t + P) \bar{\Sigma} - D \bar{\Sigma}^2. \quad (3.95)$$

Hier bezeichnen K_m und K_t die Produktion von Flammenfrontoberfläche aufgrund von Streckung durch das zeitlich mittlere Strömungsfeld bzw. die Interaktion mit Wirbelelementen, P die Produktion bzw. Destruktion aufgrund von laminarer Flammenausbreitung und D die Vernichtung von Flammenfrontoberflächendichte aufgrund von Krümmungseffekten. In der Literatur finden sich im wesentlichen drei Modelle, die für die Berechnung turbulenter Flammen angewendet wurden.

Das CPB-Modell Das CPB-Modell ist nach seinen Autoren CANT, POPE und BRAY [50] benannt und von einer exakten kinematischen Transportgleichung für die Flammenfrontoberflächendichte abgeleitet. Das Modell vernachlässigt die Produktion von Flammenfrontoberflächendichte durch die zeitlich mittlere Strömung sowie die laminare Flammenausbreitung und modelliert die turbulente Streckungsrate auf Basis der Kolmogorov-Wirbel. Der Destruktionsterm wird aus geometrischen Überlegungen abgeleitet und enthält keine Informationen über die lokale Turbulenzstruktur:

$$K_t = \frac{u_t}{l_t} (Re_t)^{1/2}, \quad (3.96a)$$

$$D = C_{D,1} \frac{2 + \exp[-C_{D,2} (1 - \bar{c}) / (\bar{\Sigma} S_l) (u_t/l_t)]}{(1 - \bar{c})}. \quad (3.96b)$$

Um eine Beziehung für die turbulente Flammengeschwindigkeit zu erhalten, muß das KPP-Theorem auf das gekoppelte Gleichungssystem von Reaktionsfortschritt und Flammenfrontdichte angewendet werden. Die Vorgehensweise ist im Anhang B beschrieben und führt auf

$$\frac{S_t}{S_l^0} = \left(\frac{C_{EBU} C_\mu}{Sc_c} \right)^{1/2} \frac{u_t}{S_l^0}. \quad (3.97)$$

Abbildung 3.19 verdeutlicht die Eigenschaften des CPB-Modells anhand des Verbrennungsdiagrammes. Der Ansatz von CANT, BRAY und POPE beruht auf der Vorstellung, daß die kleinsten Wirbelelemente für die turbulente Dehnungsrate und damit die Aufaltung der Flammenfront bestimmend sind. Die Autoren des Modells begründen ihren Ansatz mit direkten numerischen Simulationen einer materiellen Fläche in einem turbulenten Strömungsfeld [241]. Sie vernachlässigen damit aber den Einfluß der Vorwärmzone, die aufgrund einer ansteigenden Viskosität eine Interaktion dieser kleinsten Wirbelklasse mit der Flammenfront verhindert. Es ist daher davon auszugehen, daß dieses Modell die Bildung von Flammenfrontoberflächendichte überschätzt. Außerdem erfüllt diese Modellvorstellung nicht die Reynoldszahlunabhängigkeit im Bereich kleiner Karlovitzzahlen und großer Längenskalen.

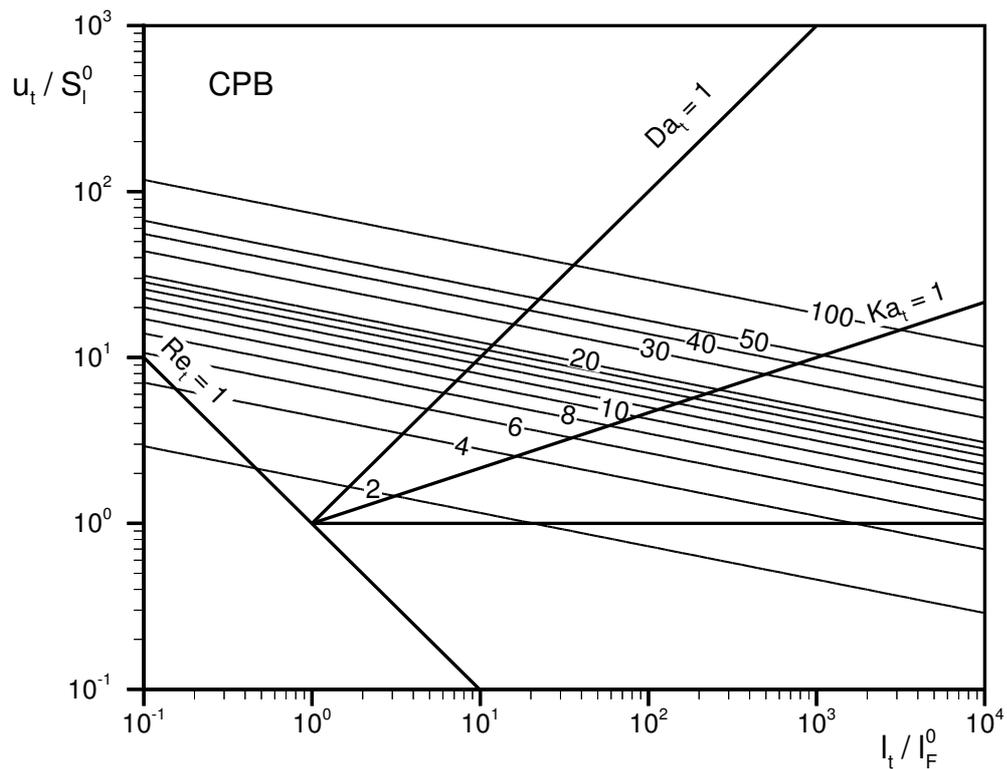


Abbildung 3.19: Darstellung der Chemie-Turbulenz Interaktion wie sie durch das CPB-Modell von BRAY, CANT und POPE [50] im Fall der stationären eindimensionalen turbulenten Flammenfront im Verbrennungsdiagramm beschrieben wird. Isolinien sind normierte turbulente Flammgeschwindigkeiten gemäß Gleichung (3.97).

Das CF-Modell Das Modell der „kohärente Flamme“ (CFM, engl.: *Coherent Flame Model*) basiert auf Arbeiten von CANDEL und Mitarbeitern, die das von MARBEL und BROADWELL [147] entwickelte phänomenologische Modell, das ursprünglich für Diffusionsflammen vorgesehen war, auf die turbulente Vormischverbrennung übertragen haben [122, 68, 144, 223]. Es existieren mehrere Versionen dieses Modellansatzes, die sich hinsichtlich der Formulierung der turbulenten Streckungsrate und des Destruktionsterms unterscheiden. Eine Zusammenstellung dieser Modelle sowie eine Diskussion ihrer Eigenschaften findet sich der Arbeit von DUCLOS ET AL. [73].

Die erste Form, im folgenden als CF-1 Modell bezeichnet, modelliert die turbulente Streckung auf Basis integraler Turbulenzgrößen und folgt in der Modellierung des Destruktionsterms den geometrischen Überlegungen von CANT, POPE und BRAY, ohne jedoch deren erweiterte Form zu verwenden. Die verbleibenden Terme werden durch das CF-1 Modell ebenfalls vernachlässigt. Die modellierten Terme lauten:

$$K_t = \frac{u_t}{l_t}, \quad (3.98a)$$

$$D = C_{D,1} \frac{S_l^0}{(1 - \bar{c})}. \quad (3.98b)$$

Das Model besitzt hinsichtlich der turbulenten Flammgeschwindigkeit die gleichen Ei-

genschaften wie das EBU-Modell und führt daher auf das gleiche, in Abbildung 3.15 dargestellte, Verbrennungsdiagramm.

Eine weitere Formulierung dieses Modells (CF-1b) versucht den Einfluß der Turbulenz auf den Destruktionsterm über

$$D = C_{D,1} \frac{(S_l^0 + C_{D,2} u_t)}{(1 - \bar{c})} \quad (3.99)$$

zu berücksichtigen. Für diese Formulierung wird von den Autoren keine physikalische Begründung geliefert, weshalb sie als empirischer Ansatz betrachtet werden muß. Die Beziehung für die turbulente Flammgeschwindigkeit wird durch die Art der Formulierung jedoch nicht verändert.

Eine erweiterte Formulierung des CF-Modells (CF-3) inkorporiert Ergebnisse von Direkten Numerischen Simulationen in Form des ITNFS-Modells (engl.: *Intermittent Turbulent Net Flame Stretch*), um zu einer verbesserten Beschreibung des turbulenten Einflusses auf die Flammenauffaltung zu gelangen. Die turbulente Dehnungsrate wird hierbei mit Hilfe der integralen Skalen und einer Effizienzfunktion $\bar{\Gamma}_k$ modelliert:

$$K_t = \bar{\Gamma}_k \left(\frac{u_t}{S_l^0}, \frac{l_t}{l_F^0} \right) \frac{u_t}{l_t}. \quad (3.100)$$

Daneben wird in DUCLOS ET AL. [73] eine Modellierung des Destruktionsterms vorgeschlagen, die die Vernichtung von Flammefrontfläche sowohl im verbrannten als auch

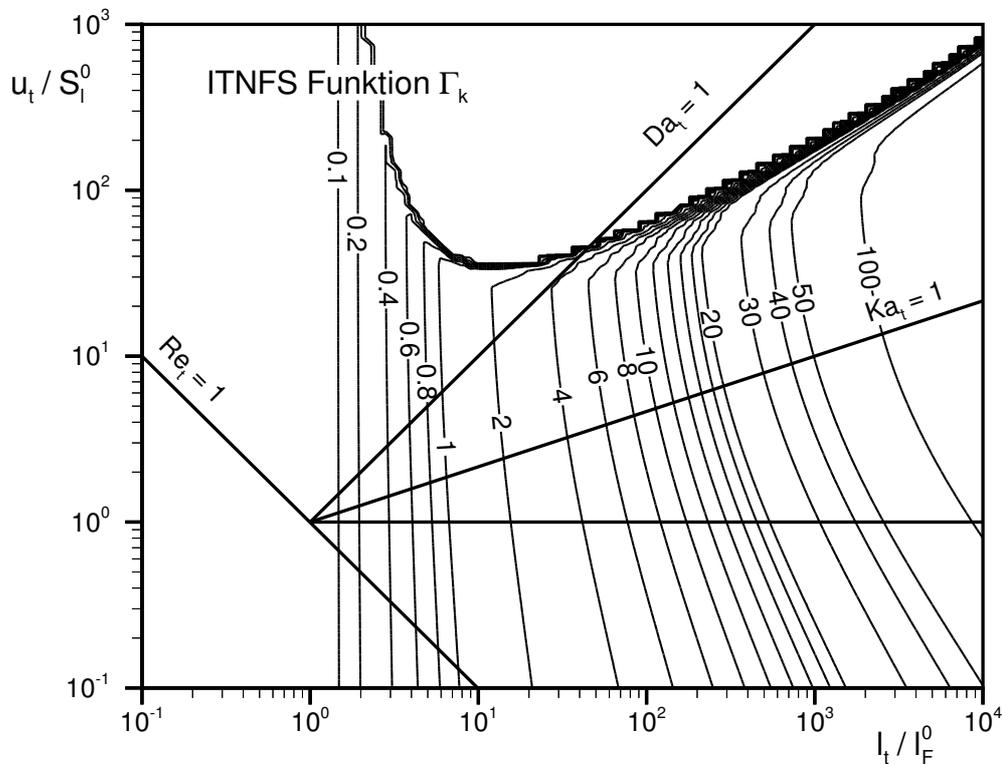


Abbildung 3.20: Darstellung der Effektivitätsfunktion (3.103) des ITNFS-Modells im Verbrennungsdiagramm.

im unverbrannten Gemisch sicherstellt (CF-3b):

$$D = C_{D,1} \frac{S_l^0 + C_{D,2} u_t}{\bar{c}(1 - \bar{c})}. \quad (3.101)$$

$\bar{\Gamma}_k$ ist die sogenannte Effektivitätsfunktion des ITNFS-Modells und beschreibt den effektiven Einfluß aller Wirbelklassen auf die Produktion bzw. Destruktion der Flammenfrontoberfläche als Funktion der charakteristischen Geschwindigkeits- und Längenskalen u_t/S_l^0 bzw. l_t/l_F^0 . Die Autoren geben die Ergebnisse ihrer DNS-Untersuchungen in Form einer parametrisierten Gleichung an:

$$\log(\bar{\Gamma}_k) = -\frac{1}{s+0.4} e^{-(s+0.4)} + (1 - e^{-(s+0.4)}) (\sigma_1 s - 0.11) \quad (3.102)$$

mit

$$s = \log\left(\frac{l_t}{l_F^0}\right) \quad \text{und} \quad \sigma_1 = \frac{2}{3} \left(1 - \frac{1}{2} \exp\left[-\left(\frac{u_t}{S_l^0}\right)^{\frac{1}{3}}\right]\right) \quad (3.103)$$

Die Funktion ist, wie Abbildung 3.20 zeigt, nur leicht vom Geschwindigkeitsverhältnis u_t/S_l^0 abhängig. Für den Fall eines sehr kleinen Längenverhältnisses nimmt auch $\bar{\Gamma}_k$ ab

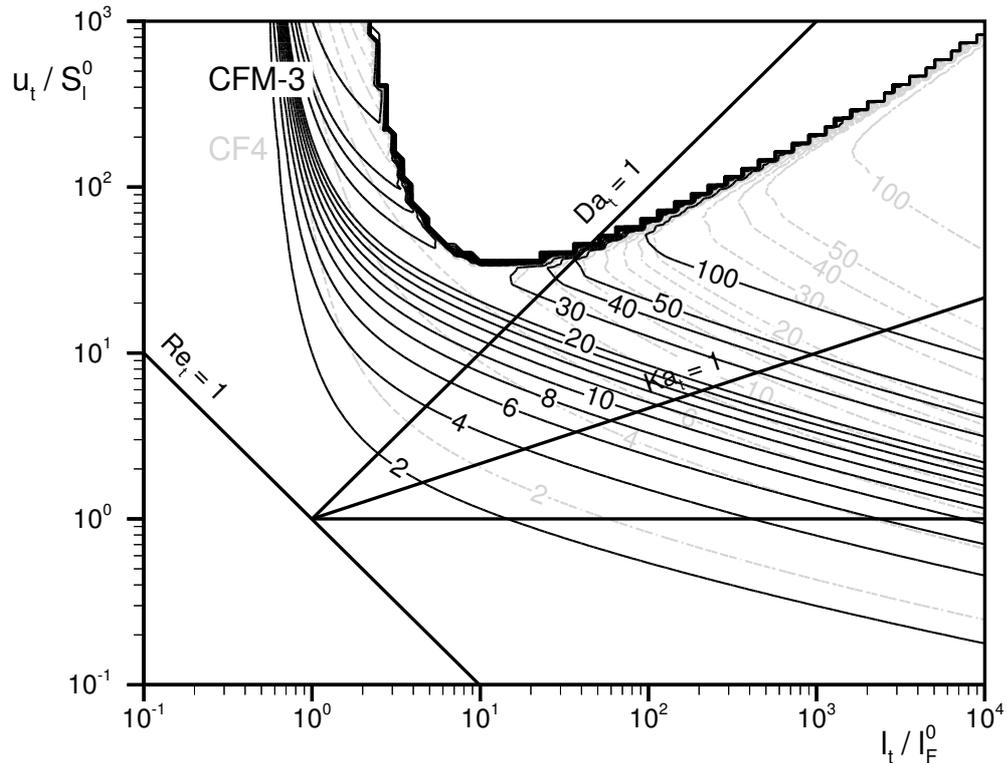


Abbildung 3.21: Darstellung der Chemie-Turbulenz Interaktion wie sie durch das CF-3 (schwarze Linien) bzw. CF-3b Modell (graue Linien) im Fall der stationären eindimensionalen turbulenten Flammenfront im Verbrennungsdiagramm beschrieben wird. Isolinien sind normierte turbulente Flammengeschwindigkeiten gemäß Gleichungen (3.104) und (3.105).

und verringert damit die effektive Dehnungsrate. In dem untersuchten Bereich ist der Verlauf der Effektivitätsfunktion für ein konstantes Geschwindigkeitsverhältnis u_t/S_l^0 eine monotone steigende Funktion der dimensionslosen Längenskala l_t/l_F^0 und korrespondiert damit implizit mit einer Steigerung der turbulenten Reynoldszahl Re_t .

Die Einführung der Effektivitätsfunktion $\bar{\Gamma}_k$ stellt eine wesentliche Verbesserung des CF- Modells dar. Dies wird deutlich, wenn die Beziehungen der turbulenten Flammgeschwindigkeit für das CF-3

$$\frac{S_t}{S_l^0} = \left(\frac{\bar{\Gamma}_k C_\mu}{Sc_c} \right)^{1/2} \frac{u_t}{S_l^0} \quad (3.104)$$

bzw. das CF-3b Modell

$$\frac{S_t}{S_l^0} = \left(\frac{\bar{\Gamma}_k C_\mu}{Sc_c} \right)^{1/2} \frac{(1 + C_{D,1} (1 + C_{D,2} u_t/S_l^0) Sc_\Sigma / Sc_c)^{1/2} u_t}{1 + C_{D,1} (1 + C_{D,2} u_t/S_l^0) Sc_\Sigma / Sc_c} \frac{u_t}{S_l^0} \quad (3.105)$$

in das Verbrennungsdiagramm eingetragen werden. Anhand von Abbildung 3.21 ist deutlich zu erkennen, daß die Modelle nun die beiden Grenzfälle sowie das Verlöschen in Bereichen sehr großer Karlovitzzahlen vorhersagen können. Da die Effektivitätsfunktion $\bar{\Gamma}_k$ in Bereichen hoher Dehnungsrate die Produktion von Flammenfrontoberfläche verringert, ist sie in der Lage die Vorhersagegenauigkeit von allen Verbrennungsmodellen, die auf dem Flamelet-Ansatz basieren, zu verbessern [123].

Das MB-Modell Das Modell von MANTEL und BORGHI [146] basiert auf einer semi-empirischen Transportgleichung der skalaren Dissipationsrate unter der Annahme konstanter Dichte. Diese Transportgleichung läßt sich unter Verwendung der Flamelet-Annahme in eine Bilanzgleichung für die Flammenfrontoberflächendichte umformen. Im Gegensatz zu den CF- Modellen wird der Einfluß der turbulenten Streckungsrate wie beim CPB-Modell durch die charakteristischen Größen der Kolmogorov-Wirbel modelliert. Außerdem wird der Einfluß der mittleren Streckung berücksichtigt, und die Ableitung liefert einen zusätzlichen Term, der als anisotroper Beitrag der turbulenten Streckung gedeutet werden kann. Der Destruktionsterm ist komplexer als bei den übrigen Modellen und skaliert wie der Quellterm durch turbulente Streckung mit der turbulenten Reynoldszahl:

$$K_t = \frac{u_t}{l_t} Re_t^{1/2}, \quad (3.106a)$$

$$K_m = \frac{\mathbf{S}}{k} : \nabla \tilde{\mathbf{u}}, \quad (3.106b)$$

$$P = C_{S,3} \frac{u_t^2}{S_l^0} (\nabla \tilde{c})^2, \quad (3.106c)$$

$$D = C_{D,1} \frac{S_l^0 Re_t^{1(2)}}{\bar{c} (1 - \bar{c}) (1 + C_{D,2} S_l^0 / u_t)^{C_{D,3}}}. \quad (3.106d)$$

Die turbulente Flammgeschwindigkeit ist damit eine Funktion sowohl der Längen, als auch der Geschwindigkeitsskalen:

$$\frac{S_t}{S_l^0} = 1 + \left(\frac{6C_\mu C_{S,1}}{Sc_c} \right)^{1/2} Re_t^{1/2} \frac{\left(\left(d + C_{D,1} Sc_\Sigma / Sc_c Re_t^{1/2} \right) d \right)^{1/2}}{\left(d + C_{D,1} Sc_\Sigma / Sc_c Re_t^{1/2} \right)} \quad (3.107)$$

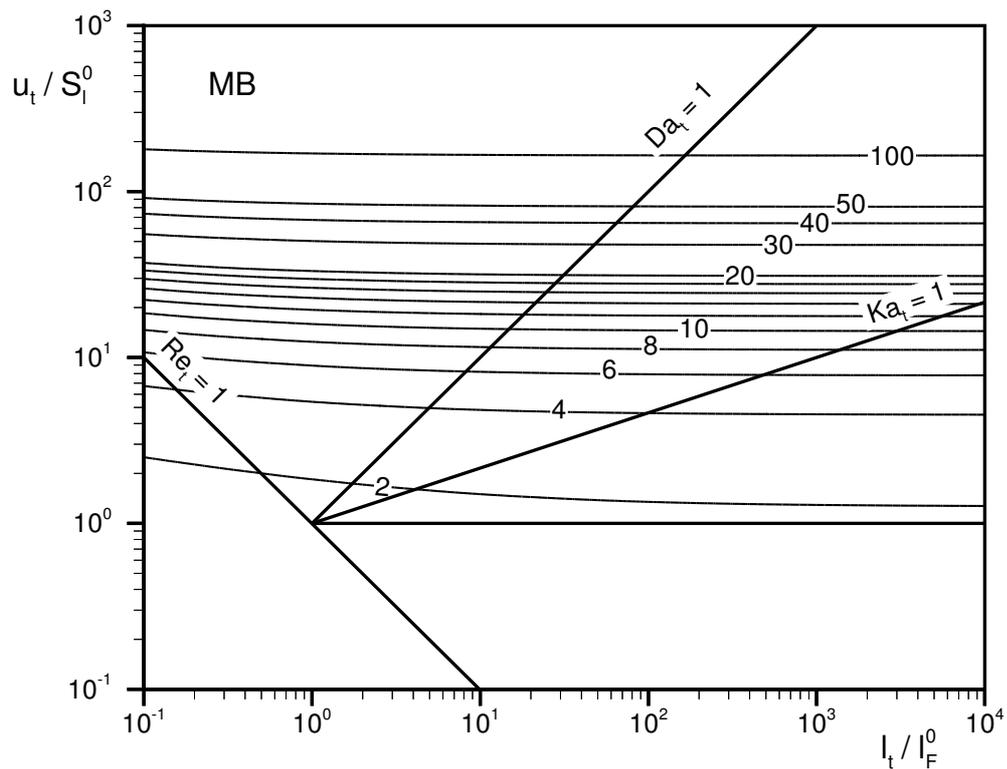


Abbildung 3.22: Darstellung der Chemie-Turbulenz Interaktion wie sie durch das MB Modell im Fall der stationären eindimensionalen turbulenten Flammenfront im Verbrennungsdiagramm beschrieben wird. Isolinien sind normierte turbulente Flammengeschwindigkeiten gemäß Gleichung (3.107).

mit

$$d = \left(1 + C_{D,2} \frac{S_l^0}{u_t} \right)^{C_{D,3}} \quad (3.108)$$

Gleichung (3.107) beschreibt für große turbulente Damköhler- und Reynoldszahlen die Flammengeschwindigkeit wie gefordert als reine Funktion des Geschwindigkeitsverhältnisses u_t/S_l^0 . Für kleine turbulente Damköhler- und Reynoldszahlen geht sie hingegen formal in Gleichung (3.97) über. Eine Transformation von Gleichung (3.107) in das Verbrennungsdiagramm zeigt aber, daß im interessierenden Bereich das MB-Modell nur eine geringe Abhängigkeit der Flammengeschwindigkeit vom Längenmaßstab zeigt. Die Reynoldszahlabhängigkeit hingegen kommt erst für Bereiche im Verbrennungsdiagramm zum Tragen, die für praktische Flammen irrelevant sind.

Modelle auf Basis der Flammenfrontfaltung

In Kapitel 3.3 wurde gezeigt, daß die turbulente Flammengeschwindigkeit und damit die zeitlich mittlere Umsatzgeschwindigkeit vom Grad der Flammenfrontfaltung A_t/A abhängt. Die Flammenfrontfaltung kann als Verhältnis von turbulenter Flammenfrontoberfläche zu ihrer Projektionsfläche in Richtung der Flammenfrontausbreitung n_p geschrieben

werden:

$$\Xi = \frac{1}{\mathbf{n}_p \cdot \mathbf{n}}. \quad (3.109)$$

Eine praktikablere Definition der zeitlich mittleren Flammenfrontfaltung beruht auf dem Gradienten der Reaktionsfortschrittsvariablen und der Flammenfrontdichte:

$$\bar{\Xi} = \frac{|\overline{\nabla c}|}{|\nabla \bar{c}|} = \frac{\bar{\Sigma}}{|\nabla \bar{c}|}. \quad (3.110)$$

Die zeitlich mittlere Umsatzgeschwindigkeit berechnet sich damit zu

$$\bar{w}_c = \rho_u S_l^0 \bar{\Xi} |\nabla \bar{c}|. \quad (3.111)$$

Ebenso wie für die Flammenfrontdichte läßt sich für die Flammenfrontfaltung eine Transportgleichung formulieren. WELLER [232] leitet in seiner Arbeit die folgende Bilanzgleichung ab:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\Xi}}{\partial t} + \tilde{\mathbf{u}} \cdot \nabla \bar{\Xi} = \nabla \cdot D_t \nabla \bar{\Xi} + (K_t + K_m) \bar{\Xi} - R \bar{\Xi}^2 \\ + \left(S_l \bar{\Xi} \left(\bar{\Xi} - \frac{1}{\bar{\Xi}} \right) \mathbf{n} + D_t \nabla \bar{\Xi} \right) \frac{\nabla |\nabla \bar{c}|}{|\nabla \bar{c}|} + \text{Corr} \end{aligned} \quad (3.112)$$

Die Terme der ersten Zeile gleichen den entsprechenden Termen der Transportgleichung für die Flammenfrontdichte und basieren auf analogen Betrachtungen. Der zweite und dritte Term auf der rechten Seite beschreibt die Bildung bzw. Abbau von Flammenfrontkrümmung aufgrund des zeitlich mittleren Strömungsfeldes, turbulenter Strukturen und aufgrund von Flammenfrontausbreitung. Die Koeffizienten K_t und R sind Funktionen turbulenter bzw. chemischer Zeit- und Längenskalen sowie des Wärmefreisetzungsparameters. Sie können entweder über ein separates Spektralmodell, welches die Wechselwirkung von Flammenfront und turbulenter Strömung beinhaltet, oder durch semi-empirische Ansätze der turbulenten Dehnungsrate sowie der turbulenten Flammengeschwindigkeit berechnet werden [233, 232]. Der vierte Term beschreibt die frischgasseitige Glättung der Flammenfront und der letzte Term berücksichtigt weitere Einflüsse aufgrund von Dichteänderungen. Die Transportgleichung der Flammenfrontfaltung ist wesentlich komplexer als die Σ -Gleichung und die Mehrzahl der Terme ist schwieriger zu modellieren. In Form von Gleichung (3.112) ist das Modell nur schwer handhabbar, weshalb es sich gegen die Flammenfrontdichtemodelle nicht durchsetzen konnte und in der Literatur keine Anwendung gefunden hat.

Gleichung (3.112) vereinfacht sich aber deutlich, falls die Ausbreitung der Flammenfront an Punkten betrachtet wird, für die $\nabla \cdot \nabla |\bar{c}| = 0$ gilt. Diese Punkte definieren eine Fläche auf der im zeitlichen Mittel keine Auffaltung der Flammenfront stattfindet, und auf der die Gradienten der zeitlich mittleren Flammenfrontkrümmung von vernachlässigbarer Größe sind. Unter diesen Annahmen befinden sich die Bildung von Flammenfrontkrümmung und ihr Abbau im Gleichgewicht, und die Notwendigkeit eine Transportgleichung für $\bar{\Xi}$ zu lösen entfällt. Die zeitlich mittlere Flammenfrontkrümmung ist damit durch ihren Gleichgewichtswert $\bar{\Xi}_{\text{eq}}$ gegeben, der dem Verhältnis von turbulenter zu laminarer Flammengeschwindigkeit entspricht:

$$\bar{\Xi}_{\text{eq}} = \frac{S_t}{S_l^0}. \quad (3.113)$$

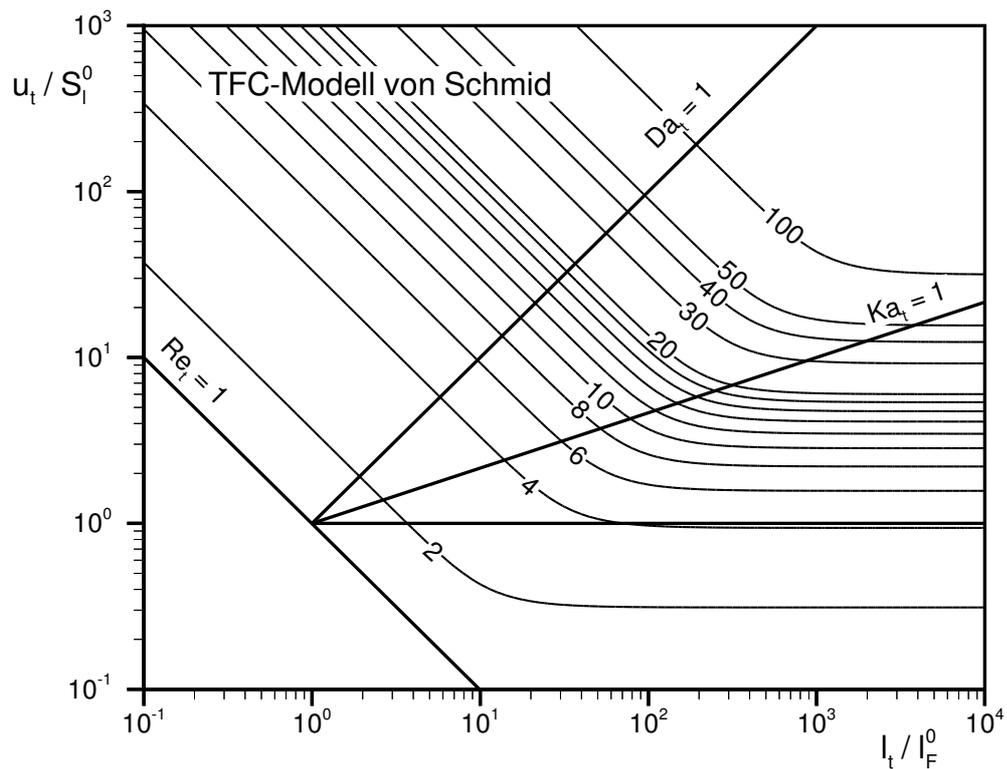


Abbildung 3.23: Darstellung der Chemie-Turbulenz Interaktion wie sie durch das Modell von SCHMID [198] im Fall der stationären eindimensionalen turbulenten Flammenfront im Verbrennungsdiagramm beschrieben wird. Isolinien sind normierte turbulente Flammengeschwindigkeiten gemäß Gleichung (3.116).

Damit läßt sich die folgende einfache Beziehung für die zeitlich mittlere Umsatzgeschwindigkeit formulieren [232]:

$$\bar{w}_c = \rho_u S_t |\nabla \tilde{c}| . \quad (3.114)$$

Unter diesen Bedingungen entspricht das sogenannte Eingleichungsmodell von WELLER dem als TFC (engl.: *Turbulent Flamespeed Closure*) bezeichneten Modell von ZIMONT und LIPATNIKOV [245]. Das Weller-Modell kann daher auch als theoretische Basis für die Klasse der TFC-Modelle betrachtet werden. Modelle dieser Art eröffnen die Möglichkeit, experimentell bestimmte Korrelationen der turbulenten Flammengeschwindigkeit auf einfache Art in ein turbulentes Verbrennungsmodell zu implementieren. Die Gleichung für die Reaktionsfortschrittsvariable sagt in dieser Form für eine instationäre Flammenfrontausbreitung jedoch eine ständige Zunahme der turbulenten Flammenfrontdicke aufgrund des turbulenten Transports vorher [232, 167]. Das Modell sollte daher nur auf kleine Brennraumgeometrien, wie z. B. Ottomotoren angewendet werden [227, 134].

Der Kernpunkt des Weller-Modells ist die Beziehung für die turbulente Flammengeschwindigkeit S_t . In der Literatur wurden eine Vielzahl von Ansätzen vorgestellt, die in einem Übersichtsartikel von LIPATNIKOV und CHOMIAK [135] zusammengestellt und vergleichend bewertet wurden. Ein erfolgversprechender Ansatz, der ähnlich dem Modell von PETERS beide Grenzfälle der Flamme-Turbulenz Interaktion abdeckt wurde 1995 von SCHMID [198] vorgestellt. Dem Modell liegt die Idee zugrunde, daß der Verbrennungs-

verlauf sowohl durch die chemische Reaktion als auch durch die vorgelagerte turbulente Mischung bestimmt wird. Die relevante charakteristische Zeit kann demnach als additive Überlagerung der beiden Zeitskalen t_F und t_t geschrieben werden

$$t_{\text{eff}} = (t_F^2 + t_t^2)^{1/2}, \quad (3.115)$$

wobei die quadratische Überlagerung einen glatten Übergang der beiden asymptotischen Grenzfälle gewährleisten soll. Auf Basis dieser Überlegung leitet SCHMID den folgenden Ausdruck für die turbulente Flammengeschwindigkeit ab:

$$\frac{S_t}{S_t^0} = 1 + \frac{u_t}{S_t^0} \left(\frac{Da_t^2}{1 + Da_t^2} \right)^{0.25}. \quad (3.116)$$

Abbildung 3.23 veranschaulicht die Eigenschaften des Modells im Verbrennungsdiagramm. Es ist dem Modell von PETERS sowohl qualitativ als auch quantitativ sehr ähnlich. Lediglich der Übergangsbereich $1 < Ka_t < Ka_\delta$ wird von den beiden Modellen etwas unterschiedlich beschrieben. Das Peters-Modell gibt hier die experimentell ermittelten Abhängigkeit tendenziell besser wieder.

3.5 Turbulenter Transport reagierender Skalare

Der turbulente Transport eines reagierenden Skalars c , $\overline{\rho \mathbf{u}'' c''}$, wird im Allgemeinen über einen Gradientenflußansatz modelliert (siehe Kapitel 2.5.8):

$$\overline{\rho \mathbf{u}'' c''} = -\overline{\rho} \frac{\nu_t}{S_{c_c}} \nabla \tilde{c}. \quad (3.117)$$

Die wegweisenden theoretischen Überlegungen von BRAY ET AL. [131, 36] im Kontext des BML-Modells und daraufhin durchgeführte Experimente [38, 206] haben aber gezeigt, daß in niederturbulenten Vormischflammen der turbulente Diffusionsstrom $\overline{\rho \mathbf{u}'' c''}$ und der Gradient der zeitlich mittleren Fortschrittsvariablen $\nabla \tilde{c}$ das gleiche Vorzeichen besitzen können. Gleichung (3.117) ist unter diesen Umständen nicht mehr gültig und macht auch qualitativ eine falsche Aussage. Dieses Phänomen wird als Gegengradientendiffusion bezeichnet und ist seit der Veröffentlichung des BML-Modells Gegenstand kontroverser Diskussionen, da in Experimenten sowohl Gradienten- als auch Gegengradientendiffusion beobachtet wurde. Die Möglichkeit der direkten numerischen Simulation reagierender turbulenter Strömungen [194, 225] hat schließlich gezeigt, daß das Auftreten von Gradienten- bzw. Gegengradientendiffusion von der betrachteten Flamme abhängt. Gegengradientendiffusion ($\overline{\rho \mathbf{u}'' c''} / \nabla \tilde{c} > 0$) ist demnach zu beobachten, wenn das Strömungsfeld im Bereich der Flammenfront durch Expansionseffekte aufgrund der exothermen Verbrennungsreaktionen dominiert wird. In diesem Fall überlagert die Beschleunigung der reagierenden Wirbel den turbulenten Transport bis hin zu Gegengradientendiffusion. Dies bedeutet, daß die Reynolds-gemittelte Strömungsgeschwindigkeit bezogen auf das Frischgasgemisch $\overline{\mathbf{u}}_u$ über die turbulente Flammenfront hinweg größer als Reynolds-gemittelte Strömungsgeschwindigkeit bezogen auf das Rauchgas $\overline{\mathbf{u}}_b$ ist. Für ausreichend intensive Turbulenz überwiegt hingegen der turbulente Austausch die Expansionseffekte, und es liegt Gradientendiffusion $\overline{\rho \mathbf{u}'' c''} / \nabla \tilde{c} < 0$ vor. Durch DNS konnte weiterhin gezeigt werden, daß in Übereinstimmung mit der BML-Theorie das Auftreten von Gegengradientendiffusion maßgeblich durch das Geschwindigkeitsverhältnis u_t / S_l^0 und den Wärmefreisetzungsparameter τ (Gl. 3.7) bestimmt wird. VEYNANTE ET AL. [225] führen daher in ihrer Analyse der turbulenten Diffusion reagierender Skalare die Brayzahl

$$N_B = \frac{\tau S_l^0}{2\overline{\Gamma} u_t} \quad (3.118)$$

ein. Hierbei bezeichnet $\overline{\Gamma}^5$ eine Effektivitätsfunktion, die wie die Effektivitätsfunktion $\overline{\Gamma}_k$ des ITNFS-Modells die Interaktion der Flammenfront mit dem Wirtelspektrum berücksichtigt und eine Korrekturfunktion für das integrale Geschwindigkeitsmaß u_t darstellt [225]. Falls die Brayzahl kleiner als Eins ist, muß mit Gegengradientendiffusion gerechnet werden, sonst überwiegt, wie in Abbildung 3.24 dargestellt, die Gradientendiffusion. Für die meisten Methan/Luft Vormischflammen hat der Wärmefreisetzungsparameter Werte zwischen 5 und 7. Nach Gleichung (3.118) tritt Gegengradientendiffusion demnach in den Bereichen der gewellten und gefalteten sowie pseudolaminaren Flamme auf. Abbildung 3.24 zeigt, daß sich die Grenze mit steigendem Wärmefreisetzungsparameter τ zwar in Bereiche höherer Turbulenz verschiebt, stark gefaltete Flammen weisen aber immer Gradientendiffusion auf.

⁵Anhand der von VEYNANTE ET AL. [225] veröffentlichten Daten läßt sich die Effektivitätsfunktion als Funktion des Längenverhältnisses l_t / l_F^0 durch $\overline{\Gamma} = \exp(-16.6 / (l_t / l_F^0 + 0.4)^{1.5})$ darstellen.

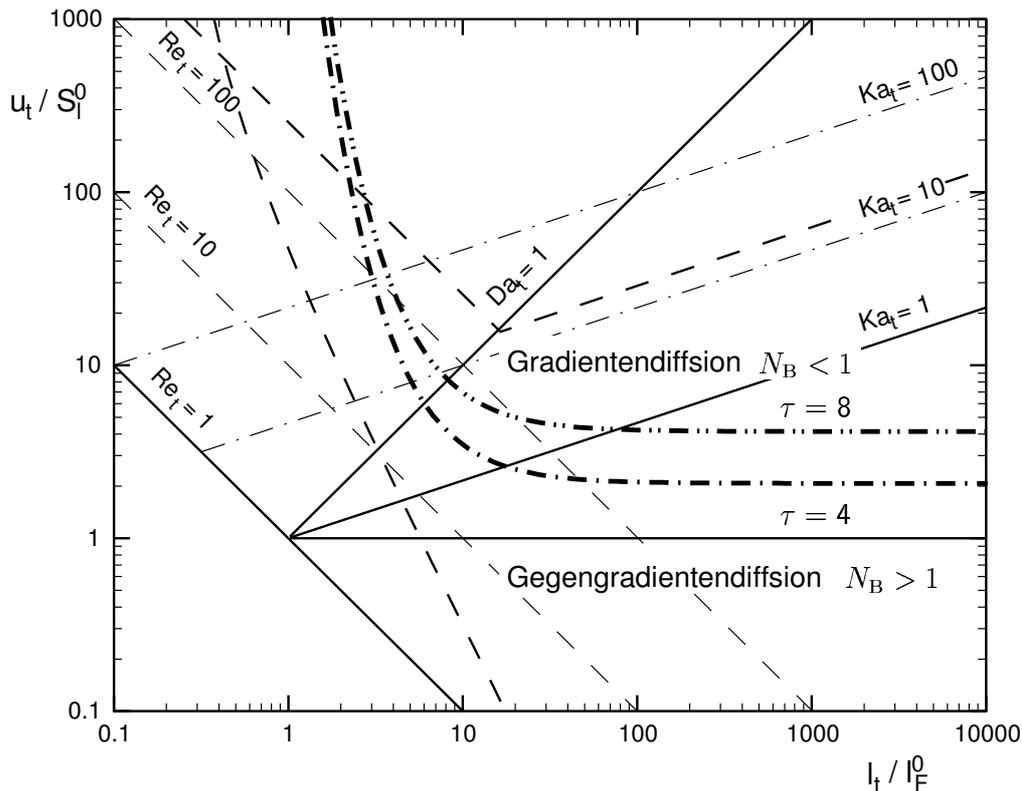


Abbildung 3.24: Gültigkeitsbereich der Gegengradientendiffusion im Verbrennungsdiagramm. Das Diagramm zeigt den Übergangsbereich, definiert durch $N_B = \tau S_t^0 / (2\bar{\Gamma}u_t) = 1$, der den Bereich der Gegengradientendiffusion vom Bereich der Gradientendiffusion trennt. Dargestellt sind die Grenzlinien für zwei unterschiedliche Wärmefreisetzungparameter $\tau = 4$ und $\tau = 8$.

Eine Möglichkeit Gegengradientendiffusion zu berücksichtigen besteht in der Anwendung von Schließungsansätzen zweiter Ordnung (siehe Kapitel 2.5.2). BRAY und MOSS [42] leiten deshalb eine Bilanzgleichung für den turbulenten Diffusionsstrom $\bar{\rho}u''c''$ ab. Diese besitzt jedoch eine Reihe ungeschlossener Terme, deren Modellierung sehr schwierig und mit großen Unsicherheiten behaftet ist. Außerdem ist der Rechenaufwand erheblich, da neben den zeitlich gemittelten Massen-, Impuls- und Reaktionsfortschrittsleichungen zusätzlich sechs Reynoldsspannungsgleichungen, drei Gleichungen für den turbulenten Transport sowie eine Gleichung für die Dissipationsrate der kinetischen Energie gelöst werden müssen. Diese Gleichungen sind zudem stark gekoppelt und deshalb nur mit erheblichem numerischen Aufwand zu lösen. Aus diesem Grund kommen Modelle, die auf Schließungsansätzen zweiter Ordnung basieren, im allgemeinen nicht zur Anwendung [9]. Die Auswertung von Ergebnissen direkter numerischer Simulationen eröffnen in Zukunft aber die Möglichkeit den klassischen Gradientenansatz zu verbessern. Die als konstant angenommene Schmidtzahl könnte z. B. als Funktion der Brayzahl formuliert werden und somit den Einfluß der Gegengradientendiffusion beschreiben. Die Entwicklung und Validierung eines solchen Modells steht aber noch aus.

Im Rahmen dieser Arbeit wurde deshalb durchweg ein Gradientenansatz (3.117) verwendet, um die turbulente Diffusion zu modellieren. Da fast alle betrachteten Flammen hochturbulent sind und daher Brayzahlen kleiner Eins besitzen, ist diese Vorgehensweise auch physikalisch gerechtfertigt.

Kapitel 4

Das Konzept der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik

4.1 Einleitung

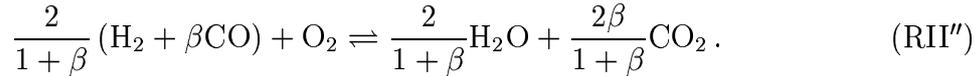
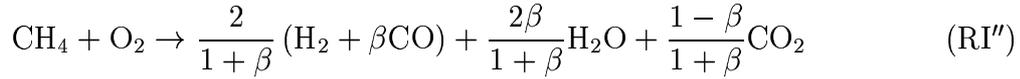
Modelle turbulenter Vormischverbrennung, die auf statistischen Methoden beruhen, benötigen einen reduzierten Reaktionsmechanismus, um den Rechenaufwand in einem vertretbaren Rahmen zu halten. Soll ferner das Prinzip der angenommenen Wahrscheinlichkeiten angewendet werden, muß sich jede thermochemische Variable und somit auch die Kinetik durch eine einzige Fortschrittsvariable ausdrücken lassen. Im Fall der Methanverbrennung bedeutet dies, daß der Reaktionsverlauf durch die Einschrittreaktion



beschrieben wird. Diese Globalreaktion kann jedoch nicht die wichtigen Zwischenprodukte CO und H₂ berücksichtigen. Informationen über die Konzentrationen dieser beiden Spezies sind aber notwendig, um den Radikalhaushalt in der Ausbrandzone und damit die adiabate Verbrennungstemperatur richtig wiederzugeben. BRAY ET AL. [43] haben deshalb einen Ansatz vorgeschlagen, der den sequentiellen Charakter der Verbrennung dazu benutzt, um die Chemie mit Hilfe von zwei Fortschrittsvariablen zu beschreiben. Die zeitlich mittlere Reaktionsgeschwindigkeit wird von den Autoren über eine Verbundwahrscheinlichkeitsdichte bestimmt, die auf der Annahme statistischer Unabhängigkeit dieser beiden Variablen beruht. Wie die Betrachtungen der Flammenfront in Kapitel 3.1 gezeigt haben, ist die Reaktionszone aber immer dünn, weshalb die Konzentrationen der Reaktionspartner immer korreliert sind, und die Annahme der statistischen Unabhängigkeit sicherlich nicht aufrecht erhalten werden kann.

Um dieses Problem zu umgehen, wurde das Konzept der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik entwickelt. Diese hat zum Ziel, die Oxidation von Kohlenwasserstoffen bei gleichzeitiger Berücksichtigung der stabilen Zwischenprodukte CO und H₂ mit Hilfe einer einzigen Reaktionsfortschrittsvariablen beschreiben zu können. Diese Kinetik läßt sich dann in ein Wahrscheinlichkeitsdichtemodell einbinden, womit der Reaktionsquellterm geschlossen und die zeitlich mittleren Konzentrationen der stabilen Verbindungen sowie wichtiger Radikale bzw. Atome berechnet werden können. Ein weiteres Ziel war die Übertragbarkeit dieses Konzepts auf unterschiedliche Brennstoffe, insbesondere auf Gemische höherer Kohlenwasserstoffe wie Kerosin oder Benzin, für die noch keine ausreichend validierten Reaktionsmechanismen verfügbar sind und somit eine Reduktion nach klassischen Methoden oder mit Hilfe des ILDM-Verfahrens ausscheidet.

Die 2-Bereich-1-Schritt Kinetik ist eine konsequente Weiterführung der in Kapitel 3.1.5 diskutierten RRA-Analyse von PETERS und WILLIAMS [169] bzw. von BUI-PHAM ET AL. [47]. Diese reduzieren den Mechanismus der Methanverbrennung wie im Anhang A.2 dargestellt mit Hilfe von Quasistationaritäts- und partiellen Gleichgewichtsannahmen auf einen Zweischrittmechanismus. PETERS und WILLIAMS gehen dabei davon aus, daß sich im Ausbrandbereich die Wassergasreaktion im partiellen Gleichgewicht befindet und erhalten den folgenden Zweischrittmechanismus (siehe Kapitel A.2.3):

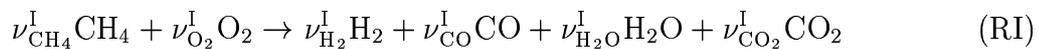


Dieser beschreibt die Methanverbrennung durch zwei Reaktionen: Brennstoffabbau (RI'') und Oxidation der Zwischenprodukte CO und H₂ zu CO₂ und H₂O (RII''). Während in der Reaktionszone beide Reaktionen parallel verlaufen, spielt in der Ausbrandzone aufgrund des bereits verbrauchten Brennstoffes die Reaktion (RI'') keine Rolle mehr. BUI-PHAM ET AL. gehen im Gegensatz zu PETERS und WILLIAMS in ihrer Analyse davon aus, daß die CO-Oxidation langsam verläuft, und sich somit Wasserstoff immer im stationären Zustand befindet. Der resultierende Zweischrittmechanismus lautet unter dieser Voraussetzung (siehe Kapitel A.2.3):



Beide Mechanismen reduzieren sich unter der Annahme eines quasistationären Zustandes des Kohlenmonoxids auf den Einschrittmechanismus (RI'''').

Die 2-Bereich-1-Schritt Kinetik macht sich diese Analyse zunutze und verknüpft sie mit einem empirischen Ansatz für den Brennstoffabbau, um die Reduktion des Mechanismus auf eine einzige Reaktionsfortschrittsvariable zu erreichen. Sie geht, wie die asymptotischen Analysen, davon aus, daß die Reaktionszone, in der der Umsatz des Brennstoffes erfolgt, und die Ausbrandzone räumlich getrennt sind. Der Verbrauch des Brennstoffes und seine Umsetzung zu den Produkten H₂, CO, H₂O und CO₂ wird in diesem Bereich anstatt durch zwei Parallelreaktionen durch eine Bruttoreaktion der Form



beschrieben. Anstelle geschwindigkeitsbestimmender Elementarreaktionen tritt bei der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik ein erweiterter Arrheniusansatz

$$q_{\text{I}} = B_{\text{I}} T^{b_{\text{I}}} e^{-T_{\text{A},\text{I}}/T} C_{\text{CH}_4}^{n_{\text{CH}_4}} C_{\text{O}_2}^{n_{\text{O}_2}}, \quad (4.1)$$

um den Brennstoffabbau zu beschreiben. Hierbei bezeichnen B_{I} den Frequenzfaktor, b_{I} den Temperaturexponenten, die $T_{\text{A},\text{I}}$ Aktivierungstemperatur und n_{CH_4} sowie n_{O_2} die Reaktionsordnungen bezüglich des Brennstoffes bzw. des Sauerstoffs. Ihre Werte können in erster Näherung Arbeiten über globale Mechanismen entnommen werden (vgl. [92, 234, 235, 177]). Es ist jedoch zu erwarten, daß sie für die 2-Bereich-1-Schritt Kinetik angepasst werden müssen. Wie in Kapitel 4.2.4 gezeigt wird, ist es aber mit Hilfe von Ergebnissen

der AEA- und RRA-Analyse möglich den erforderlichen Aufwand zu minimieren. Der Reaktionspfad des Brennstoffabbaus ist durch die noch unbekannt stöchiometrischen Koeffizienten ν_k^I festgelegt. Das Verfahren zu ihrer Bestimmung wird im zweiten Abschnitt von Kapitel 4.2.2 erläutert.

Die Ausbrandzone ist durch die Abwesenheit des Brennstoffes gekennzeichnet. Die Chemie kann in dieser Zone durch die Reaktionen (II'') bzw. (II''') beschrieben werden. Die entsprechenden Reaktionsgeschwindigkeiten sind, wie im Anhang A.2 gezeigt, durch die geschwindigkeitsbestimmenden Reaktionen (5) bzw. (10) gegeben. Um die jeweiligen Reaktionsgeschwindigkeiten q_{II} bzw. q_{III} zu bestimmen, sind Informationen über alle Spezies inklusive der Radikale erforderlich. Diese lassen sich aber, wie in Kapitel 4.2.6 gezeigt wird, mit Hilfe der Elementerhaltung und bei Kenntnis der stöchiometrischen Koeffizienten als eindeutige Funktion einer Reaktionsfortschrittsvariablen darstellen.

Die obigen Annahmen erklären auch den Namen der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik: Der Reaktionsablauf wird in *zwei Bereiche* unterteilt, deren Chemie jeweils durch eine *Einschrittkinetik* abgebildet wird. Im folgenden Kapitel wird das Konzept der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik ausführlich erläutert und auf die Bestimmung der erforderlichen Parameter eingegangen. Das Kapitel 4.3 beschäftigt sich dann mit der Anwendung der Kinetik auf die Beschreibung der Vormischverbrennung von Methan/Luft-Gemischen. Abschließend wird das Potential der 2-Bereich-Kinetik anhand berechneter Flammengeschwindigkeiten höherer Kohlenwasserstoffe demonstriert.

4.2 Mathematische Beschreibung der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik

4.2.1 Definition der Reaktionsfortschrittsvariable

Die Aufgabe einer Reaktionsfortschrittsvariablen besteht in der eindeutigen Beschreibung des chemischen Systems sowie aller thermodynamischer Größen. Sie muß über den gesamten Bereich der Flamme einen monotonen Verlauf besitzen, weshalb als mögliche Variablen nur O_2 , H_2O oder CO_2 in Frage kommen. Im Rahmen dieser Arbeit wurde der Massenbruch des Sauerstoffs Y_{O_2} als Reaktionsfortschrittsvariable gewählt, die in ihrer normierten Form zu

$$c = \frac{Z_O - Y_{O_2}}{Z_O - Y_{O_2,b}} \quad (4.2)$$

definiert ist. Hierbei bezeichnet Z_O den Elementmassenbruch (Gl. (2.8)) des Sauerstoffs und $Y_{O_2,b}$ seine Konzentration im ausgebrannten Zustand, d. h. seine Gleichgewichtskonzentration. Im folgenden sollen nur vorgemischte, adiabate, isobare Systeme betrachtet werden. Einzige Zustandsgröße des Systems ist dann die Reaktionsfortschrittsvariable c , während sich alle anderen Größen als eindeutige Funktionen der Reaktionsfortschrittsvariablen darstellen lassen, d. h. $T(c)$, $\mathbf{Y}(c)$, $\rho(c)$, $\dot{w}(c)$ etc. Während das Verbrennungsmodell in Kapitel 5 auf die normierte Form (4.2) zurückgreift, wird im Rahmen dieses Kapitels der Übersichtlichkeit wegen der Massenbruch des Sauerstoffs als Reaktionsfortschrittsvariable bezeichnet. Die folgenden Abschnitte beschreiben die funktionalen Zusammenhänge zwischen der Reaktionsfortschrittsvariable Y_{O_2} und der Temperatur $T(Y_{O_2})$ sowie den Massenbrüchen der „passiven“ Komponenten $Y_k(Y_{O_2})$. Hierbei muß zwischen homogenen Systemen und reaktiv-diffusiven Systemen unterschieden werden, da der zonale Aufbau beider Systeme, wie in Abbildung 4.1 bzw. 4.2 dargestellt, unterschiedlich ist.

4.2.2 Homogenes System

Zunächst soll die 2-Bereich-1-Schritt Kinetik für die Verbrennung in einem homogenen System untersucht werden. Abbildung 4.1 zeigt die Verläufe der Temperatur und der „passiven“ Komponenten, d. h. der abhängigen Massenbrüche, als Funktion der normierten Reaktionsfortschrittsvariablen c , wie sie durch einen detaillierten Mechanismus vorhergesagt werden. Anhand dieser Abbildung läßt sich erkennen, daß der Verbrennungsverlauf in eine Reaktions-, d. h. Brennstoffabbauzone, und eine Ausbrandzone unterteilt werden kann. In der Reaktionszone sind sechs Komponenten zu berücksichtigen, nämlich der Brennstoff (CH_4), O_2 , H_2 , CO , H_2O und CO_2 . Um diese Größen sowie die Temperatur als Funktion von Y_{O_2} beschreiben zu können, sind neben drei Erhaltungsgleichungen für die Elemente C, H, und O zwei weitere Kopplungsbedingungen erforderlich. Auf diese wird in den beiden folgenden Abschnitten eingegangen. Abschließend werden die notwendigen Gleichungen zur Bestimmung der „passiven“ Komponenten in der Ausbrandzone vorgestellt. Dort sind nur fünf Komponenten zu berücksichtigen, da der Brennstoff in der Reaktionszone definitionsgemäß vollständig umgesetzt wurde. Neben den Elementbilanzen kommt noch eine Randbedingung für den Zonenübergang hinzu, da der Konzentrationsverlauf hier stetig sein muß. Die noch fehlende Gleichung zur Bestimmung der „passiven“ Komponenten liefert schließlich die Annahme des partiellen Gleichgewichts der Wassergasreaktion bzw. die Annahme eines quasistationären Verhaltens des Wasserstoffs.

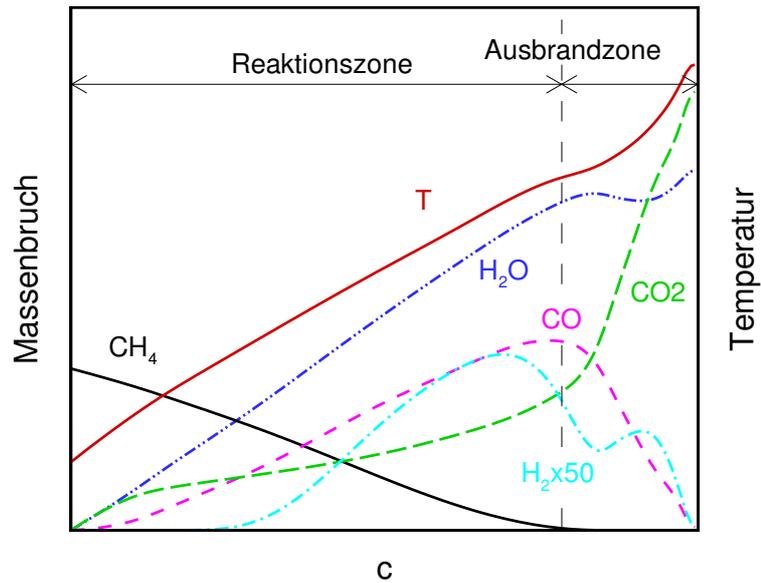


Abbildung 4.1: Schematische Darstellung einer mageren Vormischverbrennung in einem homogenen System. Reaktions- und Ausbrandzone können als separate Bereiche betrachtet werden. In der Reaktionszone herrscht ein nahezu linearer Zusammenhang zwischen den Konzentrationen.

Berechnung der Spezieskonzentrationen in der Reaktionszone

Die Verbrennung in einem abgeschlossenen, räumlich homogenen System ist von molekularen Transportprozessen wie Diffusion oder Wärmeleitung unabhängig. Der Verbrennungsverlauf wird daher allein durch den Reaktionsterm bestimmt:

$$\rho \frac{dY_k}{dt} = W_k \dot{\omega}_k \quad k = 1, \dots, N_K. \quad (4.3)$$

Bei einer Einschrittkinetik der Form (RI) sind alle reagierenden Komponenten über den stöchiometrischen Koeffizienten linear mit der Reaktionsrate q_I verknüpft:

$$\rho \frac{dY_k}{dt} = W_k \nu_k^I q_I \quad k = 1, \dots, N_K. \quad (4.4)$$

Die Kopplung von Gleichung (4.3) mit der entsprechenden Erhaltungsgleichung für die Fortschrittsvariable Y_{O_2} liefert unter Ausnutzung der Transformationsregel

$$\frac{dY_k}{dt} = \frac{\partial Y_k}{\partial Y_{O_2}} \frac{dY_{O_2}}{dt} \quad (4.5)$$

daher einen linearen Zusammenhang zwischen den Spezieskonzentrationen

$$\frac{\partial Y_k}{\partial Y_{O_2}} = \frac{W_k \nu_k^I}{W_{O_2} \nu_{O_2}^I}. \quad (4.6)$$

Eine Integration mit den Randbedingungen $Y_k(t=0) = Y_{k,u}$ führt schließlich auf die gesuchte Beziehung für die Speziesmassenbrüche in der Brennstoffabbauzone

$$Y_k(Y_{O_2}) = Y_{k,u} + (Y_{O_2} - Z_{O_2}) \frac{W_k \nu_k^I}{W_{O_2} \nu_{O_2}^I}. \quad (4.7)$$

Ein homogenes System zeichnet sich durch konstante Elementzusammensetzung aus. Deshalb sind die Konzentrationen im unverbrannten Zustand $Y_{k,u}$ bekannt, d. h. für den Sauerstoff gilt $Y_{O_2,u} = Z_O$ und für den Brennstoff $Y_{F,u} = Z_C + Z_H$. Gleichung (4.7) kann jedoch nur zur Berechnung der Konzentrationen herangezogen werden, wenn die stöchiometrischen Koeffizienten bekannt sind.

Bestimmung der stöchiometrischen Koeffizienten

Um die Konzentrationen aller sechs Komponenten in der Brennstoffabbauzone auf Basis der Reaktionsfortschrittsvariable Y_{O_2} bestimmen zu können, sind neben den drei Elementerhaltungsgleichungen zwei weitere Schließungsbedingungen erforderlich. Eine der Gleichungen ist durch die Bedingung stetiger Konzentrationsverläufe am Übergang von der Brennstoffabbau- zur Ausbrandzone gegeben. Die Konzentration der Reaktionsfortschrittsvariable am Übergang ist jedoch noch unbekannt. Sie kann aber mit Hilfe von Gleichung (4.7) bestimmt werden, gesetzt den Fall, daß die stöchiometrischen Koeffizienten ν_{O_2} sowie ν_F bekannt sind. Da es sich bei den stöchiometrischen Koeffizienten um bezogene Größen handelt, reicht es aus, einen der beiden zu bestimmen, während der andere willkürlich festgelegt werden kann. Im allgemeinen wird die Stöchiometrie der Reaktion auf den Brennstoff bezogen, d. h. der stöchiometrische Koeffizient der Brennstoffes wird mit

$$\nu_F = -1 \quad (4.8)$$

festgelegt. Der stöchiometrische Koeffizient des Oxidators ist somit der einzig verbleibende Parameter, der den Reaktionspfad des Brennstoffabbaus beschreibt. Er ist brennstoffspezifisch und wird im allgemeinen auch eine mehr oder weniger starke Funktion der Stöchiometrie, der Enthalpie¹ und des Drucks sein:

$$\nu_{O_2} = \nu_{O_2}(\mathbf{Z}, h, p) . \quad (4.9)$$

Er läßt sich z. B. mit Hilfe homogener Reaktorrechnungen, wie in Kapitel 4.3 gezeigt wird, oder anhand laminarer Flammgeschwindigkeiten (siehe Kapitel 4.4) bestimmen.

Aus der zusätzlichen Randbedingung am Zonenübergang läßt sich der stöchiometrische Koeffizient des Wassers ableiten

$$\nu_{H_2O} = -\nu_F \frac{W_F}{W_{H_2O}} \frac{Y_{H_2O}}{Y_{F,u}} , \quad (4.10)$$

und die verbleibenden Koeffizienten folgen unmittelbar aus den Elementerhaltungen zu

$$\nu_{H_2} = \frac{1}{2} \nu_F^{(H)} - \nu_{H_2O} \quad (4.11)$$

$$\nu_{CO} = 2\nu_{O_2} + \nu_{H_2O} - 2\nu_F^{(C)} \nu_F \quad (4.12)$$

$$\nu_{CO_2} = -\nu_{CO} - \nu_F^{(C)} \nu_F \quad (4.13)$$

Damit ist das Gleichungssystem geschlossen, und die Konzentrationen der Komponenten in der Reaktionszone können bei bekanntem stöchiometrischen Koeffizienten ν_{O_2} mit Hilfe von Gleichung (4.7) berechnet werden.

¹Da im Rahmen dieser Arbeit nur adiabate vorgemischte Systeme betrachtet wurden, sind Enthalpie und Elementmassenbrüche konstant, und die Speziesmassenbrüche im unverbrannten Zustand $Y_{k,u}$ können direkt aus den Elementmassenbrüchen Z_j berechnet werden. Die Vorwärmtemperatur ist daher eine eindeutige Funktion dieser beiden Größen und kann auf iterativem Wege bestimmt werden (siehe z. B. Gl. (4.52)).

Berechnung der Spezieskonzentrationen in der Ausbrandzone

Partielles Gleichgewicht der Wassergasreaktion Mit Hilfe der Gleichungen für die Erhaltung der Elemente C, H und O sowie der Annahme des partiellen Gleichgewichts der Wassergasreaktion, lassen sich auf Basis der Reaktionsfortschrittsvariablen Y_{O_2} die Konzentrationen der Verbrennungsprodukte CO, CO₂, H₂ und H₂O bestimmen. Die Elementerhaltung, ausgedrückt durch den Elementmassenbruch Z_j , läßt sich als Funktion der Speziesmassenbrüche Y_k der Molmassen, der jeweiligen Moleküle k bzw. Elemente j sowie der Molekülzusammensetzung $\nu_k^{(j)}$ schreiben (Gl. (2.8)). Eine kompaktere Schreibweise erzielt man durch Einführen der molspezifischen Größen

$$\psi_k = \frac{Y_k}{W_k} \quad (4.14)$$

und

$$\zeta_j = \frac{Z_j}{W_j}. \quad (4.15)$$

Die molspezifische Form der Elementerhaltung (2.8) lautet damit

$$\zeta_j = \sum_k^{N_k} \nu_k^{(j)} \psi_k. \quad (4.16)$$

Die fehlende Bedingung zur Schließung des Gleichungssystems liefert das partielle Gleichgewicht der Wassergasreaktion

$$\frac{\psi_{CO}}{\psi_{H_2}} = \frac{\psi_{CO_2}}{\psi_{H_2O}} \frac{1}{K_{II}}, \quad (4.17)$$

wobei von der Beziehung $C_k = \rho Y_k / W_k = \rho \psi_k$ Gebrauch gemacht wurde. Ergebnis ist eine quadratische Gleichung für ψ_{H_2}

$$a_2 \psi_{H_2}^2 + a_1 \psi_{H_2} + a_0 = 0 \quad (4.18)$$

mit den Koeffizienten

$$a_2 = (1 - K_{II}) \quad (4.19a)$$

$$a_1 = (O - F)(1 - K_{II}) + K_{II}F \quad (4.19b)$$

$$a_0 = \left(O - \frac{1}{2}\zeta_H\right) \frac{1}{2}\zeta_H K_{II} \quad (4.19c)$$

sowie

$$F = \zeta_C + \frac{1}{2}\zeta_H \quad (4.19d)$$

$$O = \zeta_O - 2\psi_{O_2} \quad (4.19e)$$

Hierbei läßt sich der Term F als ein Maß für den Mischungszustand und der Term O als ein Maß für den Reaktionsfortschritt interpretieren. Gleichung (4.18) besitzt zwei Lösungen, von denen jedoch nur diejenige mit der positiven Wurzel physikalisch sinnvoll ist. Die verbleibenden Komponenten können schließlich mit Hilfe der Elementerhaltung bestimmt werden. Da die Gleichgewichtskonstante eine Funktion der Temperatur ist, muß die Berechnung der Spezieskonzentrationen iterativ erfolgen, d. h. aus den berechneten Konzentrationen und der vorgegebenen Enthalpie läßt sich ein neuer Schätzwert für die Temperatur und somit eine neue Konstante K_{II} bestimmen, die wiederum auf eine verbesserte Lösung der Zusammensetzung führt.

Wasserstoff im quasistationären Zustand Für den Fall, daß sich der Wasserstoff in der Ausbrandzone in guter Näherung im quasistationären Zustand befindet, ist seine Konzentration unter Vernachlässigung der Reaktion (5b) durch folgende Beziehung gegeben (siehe Anhang A.2.3):

$$\psi_{\text{H}_2} = \frac{k_{10f} \psi_{\text{CO}} \psi_{\text{H}_2\text{O}}}{K_3 (k_{10b} \psi_{\text{CO}_2} - 2k_{5f} C_{\text{M}} \psi_{\text{O}_2})} \quad (4.20)$$

Nahe des chemischen Gleichgewichts muß jedoch auch die Rückreaktion (5b) an Bedeutung gewinnen, da die Rate q_{III} sonst endlich wäre. Unter Ausnutzung der Beziehung für das Peroxyradikal sowie des Wasserstoffatoms resultiert folgende Kopplungsbedingung für die Wasserstoffkonzentration ψ_{H_2}

$$\begin{aligned} \frac{k_{10f}}{K_3} \psi_{\text{CO}} \psi_{\text{H}_2\text{O}} \psi_{\text{H}_2}^{1/2} - (k_{10b} \psi_{\text{CO}_2} + 2k_{5f} C_{\text{M}} \psi_{\text{O}_2}) \psi_{\text{H}_2}^{3/2} \\ + 2 \frac{k_{5f} k_{5b}}{K_{\text{IV}}^{3/2}} C_{\text{M}}^2 \psi_{\text{O}_2}^{1/2} \psi_{\text{H}_2\text{O}} \frac{\psi_{\text{H}_2}}{(k_{6f} + k_{7f} + k_{8f}) \psi_{\text{H}_2} + k_{9f} / K_3 \psi_{\text{H}_2\text{O}}} = 0 \end{aligned} \quad (4.21)$$

Die gesuchte Wasserstoffkonzentration läßt sich aus Gleichung (4.21) sowie den Elementerhaltungen numerisch bestimmen. Die verbleibenden Komponenten können anschließend mit Hilfe der Elementerhaltung berechnet werden. Da Gleichung (4.21) und die Elementerhaltungen (4.16) miteinander gekoppelt sind, ist eine äußere Iteration notwendig, die gleichzeitig die Temperaturabhängigkeit der Reaktionsgeschwindigkeitskonstanten berücksichtigt.

Eine analytische Lösung, die nur unwesentlich von der obigen abweicht, liefert der Einsatz von Gleichung (4.20). Sie führt unter Einbeziehen der Elementerhaltung auf eine quadratische Gleichung für die Konzentration des Kohlenmonoxids ψ_{CO}

$$a_2 \psi_{\text{CO}}^2 + a_1 \psi_{\text{CO}} + a_0 = 0. \quad (4.22)$$

Die Koeffizienten sind hierbei zu

$$a_2 = k_{10f} - K_3 k_{10b} \quad (4.23a)$$

$$a_1 = -\zeta_{\text{O}} + 2\psi_{\text{O}_2} + \zeta_{\text{C}} (2 + K_3 k_{10b}) + \frac{1}{2} \zeta_{\text{H}} (1 - k_{10f}) - 2K_3 k_{5f} C_{\text{M}} \psi_{\text{O}_2} \quad (4.23b)$$

$$a_0 = \left(-\zeta_{\text{O}} + 2\psi_{\text{O}_2} + 2\zeta_{\text{C}} + \frac{1}{2} \zeta_{\text{H}} \right) (K_3 k_{10b} \zeta_{\text{C}} + 2K_3 k_{5f} C_{\text{M}} \psi_{\text{O}_2}) \quad (4.23c)$$

bestimmt. Die positive Wurzel der Lösung der quadratischen Gleichung liefert die gesuchte CO-Konzentration und — unter Verwendung der Elementerhaltung — die übrigen Verbrennungsprodukte. Da die Reaktionsgeschwindigkeitskonstanten stark temperaturabhängig sind, ist auch hier eine äußere Iteration erforderlich.

4.2.3 „Reaktiv-diffusives“ System

Im Gegensatz zum homogenen System ist ein „reaktiv-diffusives“ System durch das Vorhandensein eines Konvektions- und Diffusionsterm gekennzeichnet. Die laminare Vormischflamme ist ein solches System, welches neben der Reaktions- und Ausbrandzone zusätzlich eine inerte Vorwärmzone besitzt. Die Struktur der Flammenfront wurde bereits ausführlich in Kapitel 3.1.1 diskutiert und ist in Abbildung 4.2 diesmal im Reaktionsfortschrittsraum dargestellt.

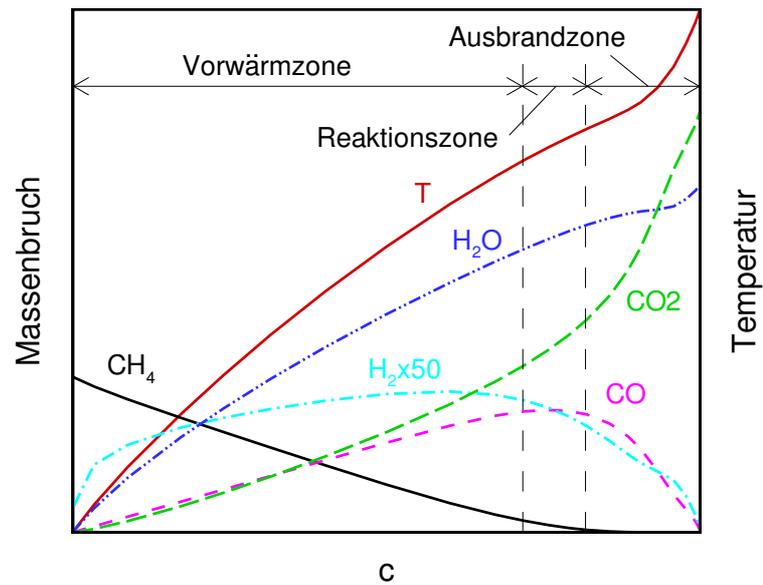


Abbildung 4.2: Schematische Darstellung einer mageren Vormischverbrennung in einem „reaktiv-diffusiven“ System, d.h. einer laminaren Vormischflamme. Vorwärm-, Reaktions- und Ausbrandzone können als separate Bereiche betrachtet werden.

Der folgende Abschnitt beschreibt die Methodik zur Berechnung der Spezieskonzentrationen in der Vorwärm- und Reaktionszone. Die Konzentrationen sowie die stöchiometrischen Koeffizienten in der Ausbrandzone können auf Basis der in Abschnitt 4.2.2 abgeleiteten Gleichungen bestimmt werden.

Berechnung der Spezieskonzentrationen in der Vorwärm- und Reaktionszone

Die Transportgleichung für eine reagierende Komponente in einem eindimensionalen stationären System lautet [238]:

$$\rho_u S_l^0 \frac{dY_k}{dx} - \frac{1}{Le_k} \frac{d}{dx} \left(\frac{\lambda}{c_p} \frac{dY_k}{dx} \right) = \nu_k W_k \dot{q}. \quad (4.24)$$

Für die folgende Analyse empfiehlt es sich, die obige Gleichung durch Einführen der Variablen

$$\begin{aligned} \xi &= \int_0^x (\rho u) \frac{c_p}{\lambda} dx \\ \psi_k &= \frac{Y_k}{W_k} \\ \omega &= \frac{\dot{q}}{(\rho_u S_l^0)^2} \frac{\lambda}{c_p} \end{aligned} \quad (4.25)$$

auf die folgende Form zu bringen:

$$\frac{d\psi_k}{d\xi} - \frac{1}{Le_k} \frac{d^2\psi_k}{d\xi^2} = \nu_k \omega. \quad (4.26)$$

Da die Spezieskonzentrationen Y_k bzw. ψ_k eine Funktion der Reaktionsfortschrittsvariablen Y_{O_2} bzw. ψ_{O_2} sind, gelten die folgenden Transformationen:

$$\frac{d\psi_k}{d\xi} = \frac{\partial\psi_k}{\partial\psi_{O_2}} \frac{d\psi_{O_2}}{d\xi} \quad (4.27a)$$

$$\frac{d^2\psi_k}{d\xi^2} = \frac{\partial\psi_k}{\partial\psi_{O_2}} \frac{d^2\psi_{O_2}}{d\xi^2} + \frac{\partial^2\psi_k}{\partial\psi_{O_2}^2} \left(\frac{d\psi_{O_2}}{d\xi} \right)^2. \quad (4.27b)$$

Werden diese Regeln auf Gleichung (4.26) angewendet, folgt

$$\frac{\partial\psi_k}{\partial\psi_{O_2}} \frac{d\psi_{O_2}}{d\xi} - \frac{1}{Le_k} \frac{\partial\psi_k}{\partial\psi_{O_2}} \frac{d^2\psi_{O_2}}{d\xi^2} - \frac{1}{Le_k} \frac{\partial^2\psi_k}{\partial\psi_{O_2}^2} \left(\frac{d\psi_{O_2}}{d\xi} \right)^2 = \nu_k \omega. \quad (4.28)$$

In der Vorwärmzone kann der Anteil des Reaktionsterms in erster Näherung vernachlässigt werden (siehe Kapitel 3.1), und Gleichung (4.28) reduziert sich auf

$$\frac{\partial\psi_k}{\partial\psi_{O_2}} \frac{d\psi_{O_2}}{d\xi} - \frac{1}{Le_k} \frac{\partial\psi_k}{\partial\psi_{O_2}} \frac{d^2\psi_{O_2}}{d\xi^2} - \frac{1}{Le_k} \frac{\partial^2\psi_k}{\partial\psi_{O_2}^2} \left(\frac{d\psi_{O_2}}{d\xi} \right)^2 = 0. \quad (4.29)$$

Analog gilt für die Transportgleichung der Reaktionsfortschrittsvariable in der Vorwärmzone:

$$\frac{d\psi_{O_2}}{d\xi} - \frac{1}{Le_{O_2}} \frac{d^2\psi_{O_2}}{d\xi^2} = 0. \quad (4.30)$$

Unter der Voraussetzung, daß die Lewiszahlen der Komponente k und des Sauerstoffs von der gleichen Größenordnung sind, was für alle Komponenten mit Ausnahme von H_2 der Fall ist, folgt durch Kombination der Gleichungen (4.29) und (4.30)

$$-\frac{1}{Le_k} \frac{\partial^2\psi_k}{\partial\psi_{O_2}^2} \left(\frac{d\psi_{O_2}}{d\xi} \right)^2 = 0. \quad (4.31)$$

Da der Term $(d\psi_{O_2}/d\xi)^2$ von null verschieden ist, muß der Ausdruck $\partial^2\psi_k/\partial\psi_{O_2}^2$ gleich null sein, damit die obige Gleichung erfüllt ist. Demnach sind in der quasi-inerten Vorwärmzone die Massenbrüche über

$$\frac{\partial\psi_k}{\partial\psi_{O_2}} = \textit{konstant} \quad (4.32)$$

mit der Reaktionsfortschrittsvariablen verknüpft.

In der Reaktionszone ist der konvektive Term von untergeordneter Bedeutung, d. h. $d\psi_{O_2}/d\xi \approx 0$, so daß sich Gleichung (4.28) auf

$$-\frac{1}{Le_k} \frac{\partial\psi_k}{\partial\psi_{O_2}} \frac{d^2\psi_{O_2}}{d\xi^2} = \nu_k \omega \quad (4.33)$$

bzw.

$$-\frac{1}{Le_{O_2}} \frac{d^2\psi_{O_2}}{d\xi^2} = \nu_{O_2} \omega \quad (4.34)$$

vereinfacht. Durch Kombination beider Gleichungen läßt sich der unbekannte Quellterm ω eliminieren

$$\frac{\partial\psi_k}{\partial\psi_{O_2}} = -\frac{\nu_k Le_k}{\nu_{O_2} Le_{O_2}}, \quad (4.35)$$

und die gesuchte Bestimmungsgleichung für die $\psi_k = \psi_k(\psi_{O_2})$ ableiten. Diese Gleichung definiert die erste Randbedingung für Gleichung (4.31), da die Gradienten am Übergang von Vorwärm- und Reaktionszone in nullter Näherung übereinstimmen müssen. Die zweite Randbedingung ist durch die bekannte Zusammensetzung des Frischgemisches gegeben, d. h. $\psi_k = \psi_{k,u}$. Die Lösung der Gleichung lautet somit

$$\psi_k = \psi_{k,u} - \frac{\nu_k Le_k}{\nu_{O_2} Le_{O_2}} (\psi_{O_2} - \psi_{O_2,u}) . \quad (4.36)$$

In der Reaktionszone gilt analog

$$\psi_k = \psi_k^Z - \frac{\nu_k Le_k}{\nu_{O_2} Le_{O_2}} (\psi_{O_2} - \psi_{O_2}^Z) , \quad (4.37)$$

wobei der hochgestellte Index Z den Übergang von der Vorwärm- zur Reaktionszone bezeichnet. Da an dieser Stelle auch die Konzentration übereinstimmen müssen, gilt sowohl für die Vorwärmzone als auch die Reaktionszone der gleiche lineare Zusammenhang, der durch Gleichung (4.36) beschrieben ist. Damit lassen sich bei bekannten stöchiometrischen Koeffizienten alle Konzentrationen als Funktion der Reaktionsfortschrittsvariablen darstellen.

Dieser durch Gleichung (4.36) beschriebene lineare Zusammenhang findet sich auch bei der Auswertung von eindimensionalen Flammenrechnungen, wie die Konzentrationsverläufe für CH_4 , CO , CO_2 und H_2O in Abbildung 4.2 deutlich zeigen. Eine deutlichere Abweichung ist bei dem Verlauf für H_2 erkennbar, ein Umstand, der in der hohen Reaktivität und Diffusivität des Wasserstoffs begründet liegt. Dennoch ist diese Approximation ausreichend, um die Flammenstruktur gut wiederzugeben, wie die Ergebnisse im folgenden Kapitel zeigen.

Berechnung der Spezieskonzentrationen in der Ausbrandzone

Die Konzentrationen in der Ausbrandzone können mit den Gleichungen, die für das homogene System aufgestellt wurden, berechnet werden. Im „reaktiv-diffusiven“ System gewinnt aber die unterschiedliche Diffusivität der Komponenten an Bedeutung, weshalb die spezifischen Speziesmassenbrüche mit der Lewiszahl gebildet werden sollten:

$$\psi_k = \frac{Y_k}{W_k} \frac{1}{Le_k} . \quad (4.38)$$

Dies hat jedoch nur Auswirkungen für die Konzentration des Wasserstoffs, da sich dessen Diffusivität, ausgedrückt durch die Lewiszahl, deutlich von den übrigen Komponenten unterscheidet.

4.2.4 Bestimmung der globalen Reaktionsrate des Brennstoffabbaus

Die Reaktionsrate der globalen Einschnittreaktion für den Brennstoffabbau (RI) wird im Rahmen dieser Arbeit durch folgenden Ansatz beschrieben:

$$q_I = BY_F^n Y_{O_2}^m \exp(-T_A/T) . \quad (4.39)$$

Die Reaktionsordnungen des Brennstoffes und des Sauerstoffs wurden hierbei, unabhängig von der Art des Brennstoffs, zu $m = 1$ und $n = 2$ gesetzt. Der Frequenzfaktor B und die Aktivierungstemperatur T_A sind für Elementarreaktionen konstante Parameter. Dies gilt jedoch nicht für Globalreaktionen, die einem Ansatz nach Gleichung (4.39) genügen. Berechnungen laminarer Flammgeschwindigkeiten mit Hilfe dieses Ansatzes haben gezeigt, daß zur korrekten Wiedergabe der Flammgeschwindigkeit entweder der Frequenzfaktor B oder die Aktivierungstemperatur T_A als eine Funktion der Stöchiometrie² und der Vorwärmtemperatur ausgedrückt werden muß. Deshalb werden im folgenden Abschnitt Proportionalitäten abgeleitet, die eine gute Approximation der Funktion $B(\phi, T_u)$ ermöglichen.

Ausgangspunkt ist die asymptotische Analyse von CLAVIN (siehe Kapitel 3.1.4), der den folgenden Ausdruck für die laminare Flammgeschwindigkeit abgeleitet hat:

$$S_l^0 = \left[\frac{2\lambda_b \nu_F^{1-m} \nu_{O_2}^m \rho_b^{m+n} B T_b^b Y_F^{m+n-1} G(a, m, n)}{\rho_u^2 c_{p,b} W_F^{m+n} Z e^{m+n+1} L e_{O_2}^{-m} L e_F^{-n}} \right]^{1/2} \exp[-E_A/2RT_b]. \quad (4.40)$$

Diese Gleichung läßt sich nach dem Frequenzfaktor B auflösen. Hierbei wird die Temperaturabhängigkeit von $\lambda_b/c_{p,b}$ durch die Korrelation [238]

$$\left(\frac{\lambda}{c_p} \right)_b = \left(\frac{\lambda}{c_p} \right)_u \left(\frac{T_b}{T_u} \right)^{0.75-1} \quad (4.41)$$

berücksichtigt. Die Flammgeschwindigkeit S_l^0 in Gleichung (4.40) kann durch den funktionalen Zusammenhang (3.26), den die in Kapitel 3.1.5 beschriebene die RRA-Analyse liefert, ersetzt werden. Die Funktion $G(a, m, n)$ läßt sich nur numerisch auswerten, vereinfacht sich aber für nahestöchiometrische Gemische ($\phi \approx 1$) auf [238]

$$G(a, m, n) = \Gamma(m+n+1) = (m+n+1)! = 24. \quad (4.42)$$

Mit Hilfe der Gleichungen (4.40)–(4.42) läßt sich die folgende Beziehung für den Frequenz-

²Die Stöchiometrie einer Mischung ist durch den Vektor der Elementmassenbrüche \mathbf{Z} gegeben. Da für den Brennstoff und den Oxidator, im allgemeinen Luft, die Elementverhältnisse immer konstant sind, kann der Elementmassenbruchvektor durch eine einzige Größe, den Mischungsbruch f (siehe Gleichung (2.12)) beschrieben werden.

In ingenieurtechnischen Anwendungen wird anstelle des Mischungsbruchs häufiger das Brennstoff/Luft bzw. Luft/Brennstoff Verhältnis verwendet, um die Stöchiometrie zu beschreiben. Die Brennstoffzahl ϕ ist zu

$$\phi = \frac{\nu_{O_2} W_{O_2}}{\nu_F W_F} \frac{Y_{F,u}}{Y_{O_2,u}}$$

definiert. Die im deutschen Sprachraum geläufigere Luftzahl λ ist der Kehrwert der Brennstoffzahl:

$$\lambda = \frac{1}{\phi}.$$

Mischungsbruch und Brennstoffzahl sind über

$$\phi = \frac{(Z_C + Z_H) r}{1 - (Z_C + Z_H) o}$$

miteinander verknüpft, wobei r die massenbezogene Stöchiometrie $(\nu_{O_2} W_{O_2}) / (\nu_F W_F)$ und o der relative Massenanteil des Oxidators $Y_{O_2,u} / (Y_{O_2,u} + Y_{Inert,u})$ ist.

faktor ableiten

$$B = B^\circ p^2 \cdot \left(\frac{T^\circ}{T_u}\right)^{n+m-2} \left(\frac{Y_{F,u}^{n_1}}{Y_{O_2,u}}\right)^{n+m-1} \times \left(\frac{T_A}{T_b}\right)^{n+m+1} \frac{1}{T_b^{n+m+1}} \left(\frac{T_b}{T_u}\right)^{1/4+n+m-2} (T_b - T_u)^{n+m+1-2n_2} \exp\left[\frac{1}{2}\left(\frac{T_A}{T_b}\right)\right]. \quad (4.43)$$

Gleichung (4.43) beschreibt die Abhängigkeiten des Frequenzfaktors vom Druck p , der Vorwärmtemperatur T_u , der Stöchiometrie, in Form der Konzentrationen von Brennstoff und Oxidator im Frischgasgemisch sowie der stöchiometrischen Koeffizienten, und der Kinetik in Form der Aktivierungstemperatur $T_A = E_A/\mathcal{R}$. Die adiabate Verbrennungstemperatur ist eine eine Funktion der Zustandsgrößen p , T_u , und \mathbf{Y}_u und kann durch Gleichgewichtsrechnungen bestimmt werden. Im Anhang A.4 ist die Verbrennungstemperatur als Funktion von Vorwärmtemperatur und Stöchiometrie für $p = 1\text{bar}$ für verschiedene Brennstoffe angegeben. Der Referenzfrequenzfaktor B° ist für $\phi = 1$ und eine Referenztemperatur T° zu bestimmen.

Die Exponenten in Gleichung (4.43) besitzen nicht die Bedeutung exakt abgeleiteter Größen, sondern sollten als Anpassungsparameter verstanden werden, da m sowie n stöchiometrieabhängig sind, und die Beziehungen für die Flammengeschwindigkeit auf einer Vielzahl von Annahmen beruhen [238]. Deshalb wurde im Rahmen dieser Arbeit die folgende Beziehung für den Frequenzfaktor im Bereich magerer Gemische verwendet:

$$B_{\phi < 1} = B^\circ p^2 \cdot \left(\frac{T^\circ}{T_u}\right)^{3/4} \left(\frac{Y_{F,u}^{n_1}}{Y_{O_2,u}}\right)^2 \times \left(\frac{T_A}{T_b}\right)^3 \frac{1}{T_b^3} \left(\frac{T_b}{T_u}\right)^{1/4-2} (T_b - T_u)^{3-2n_2} \exp\left[\left(\frac{T_A}{T_b}\right)\right]. \quad (4.44)$$

Die Exponenten n_1 und n_2 sind hierbei von der Art des Brennstoffes abhängig und müssen an gemessene oder berechnete Flammengeschwindigkeiten angepaßt werden. Es hat sich im Rahmen dieser Arbeit aber gezeigt, daß für alle untersuchten Brennstoffe $n_2 = 2$ zu guten Ergebnissen geführt hat. Damit liegt der Wert von n_2 nahe bei den von MÜLLER ET AL. [153] vorgeschlagenen Werten. Die brennstoffabhängigen Werte für n_1 finden sich im Ergebnisteil dieses Kapitels.

Gleichung (4.44) gilt nur für magere und nahestöchiometrische Gemische, in denen das Brennstoff/Luft-Verhältnis kleiner oder gleich eins ist. Indem in Gleichung (4.40) die Indizes von Brennstoff und Oxidator vertauscht werden, läßt sich ein Ausdruck für die Flammgeschwindigkeit im Grenzfall sehr fetter Gemische ableiten [238]. Damit ändern sich auch die Exponenten der Zel'dovichzahl und der Konzentrationen. Der Frequenzfaktor wurde im Fall fetter Gemische zu

$$B_{\phi > 1} = B^\circ p^2 \cdot \left(\frac{T^\circ}{T_u}\right)^{3/4} \left(\frac{1}{Y_{F,u}}\right) \times \left(\frac{T_A}{T_b}\right)^2 \frac{1}{T_b^2} \left(\frac{T_b}{T_u}\right)^{1/4} (T_b - T_u)^{2-2n_2} \exp\left[\left(\frac{T_A}{T_b}\right)\right]. \quad (4.45)$$

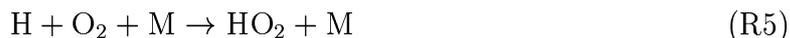
bestimmt. Nahe der stöchiometrischen Zusammensetzung wird eine Überlagerung der Form

$$B = (1/B_{\phi < 1}^{10} + 1/B_{\phi > 1}^{10})^{1/10} \quad (4.46)$$

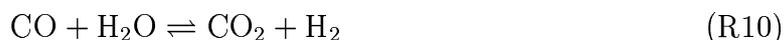
verwendet, um einen glatten Verlauf des Frequenzfaktors über den gesamten Mischungsraum zu erreichen.

4.2.5 Bestimmung der Reaktionsgeschwindigkeit in der Ausbrandzone

Die globale Reaktionsgeschwindigkeit der Reaktion (II) in der Ausbrandzone ist durch die geschwindigkeitsbestimmende Elementarreaktion kontrolliert. Wie im Anhang A.2.3 gezeigt wird, sind dies die Rekombinationsreaktion



bzw. die Oxidationsreaktion



des Kohlenmonoxids. Welche der beiden Reaktionen die geschwindigkeitsbestimmende Reaktion ist, hängt von den charakteristischen Geschwindigkeiten der Globalreaktionen q_{II}^Z bzw. q_{III}^Z ab. Der hochgestellte Index Z zeigt an, daß die Reaktionsgeschwindigkeiten für den Zustand am Zonenübergang zu berechnen ist. Für den Fall, daß die Geschwindigkeit der Globalreaktion (II) größer als die der Reaktion (III) ist, befindet sich die Reaktion (II), d. h. die Wassergasreaktion, näherungsweise im partiellen Gleichgewicht (siehe auch Kapitel 3.1.5). Als geschwindigkeitsbestimmende Reaktion kann in diesem Fall die Reaktion (5) identifiziert werden, und die Reaktionsgeschwindigkeit der Globalreaktion (II) ist durch

$$q_{\text{II}} = k_{5f} C_{\text{H}} C_{\text{O}_2} C_{\text{M}} - k_{5b} C_{\text{HO}_2} C_{\text{M}} \quad (4.47)$$

gegeben. Gilt hingegen $q_{\text{III}}^Z > q_{\text{II}}^Z$, befindet sich der Wasserstoff näherungsweise in einem quasistationären Zustand, und die Oxidation des Kohlenmonoxids, beschrieben durch die Reaktion (10), bestimmt die Reaktionsgeschwindigkeit der Globalreaktion (II):

$$q_{\text{II}} = k_{10f} C_{\text{CO}} C_{\text{OH}} - k_{10b} C_{\text{CO}_2} C_{\text{H}}. \quad (4.48)$$

Zur Auswertung der Gleichungen (4.47) und (4.48) sind neben Informationen über die stabilen Spezies auch die Konzentrationen des Wasserstoffatoms sowie des Hydroxyl- und Peroxyradikals erforderlich. Ihre Bestimmung beschreibt das folgende Kapitel.

4.2.6 Bestimmung der Radikalkonzentrationen

Die 2-Bereich-1-Schritt Kinetik betrachtet nur die Konzentrationen des H- und O-Atoms sowie des OH-Radikals. Da der Brennstoffabbau über eine Bruttoreaktion beschrieben wird, sind in der Reaktionszone keine Informationen über die Konzentration der Atome bzw. Radikale erforderlich. In der Ausbrandzone spielen sie aber eine wichtige Rolle, da sie sowohl die Reaktionsgeschwindigkeit als auch die adiabate Verbrennungstemperatur kontrollieren. Die Atome bzw. Radikale befinden sich hier in guter Näherung in einem quasistationären Zustand und können daher mit Hilfe der Gleichungen (A.11), (A.12) und (A.13) berechnet werden. Die Annahme der Quasistationarität verliert aber bei Annäherung an die Reaktionszone ihre Gültigkeit, und die Gleichungen sagen zu hohe Konzentrationen von H, O und OH voraus. Der Grund hierfür liegt in der Vernachlässigung der Reaktionen der Brennstoffabbaukette. Wie in Kapitel 3.1.1 gezeigt wurde, reagieren

die Kettenträger OH, O, und H aufgrund ihrer großen chemischen Reaktivität mit dem Brennstoff bzw. seinen Abbauprodukten in der dünnen Reaktionszone vollständig. Um auch im Übergangsbereich von Reaktions- zu Ausbrandzone die Konzentrationen von H, O und OH zumindest näherungsweise wiedergeben zu können, ist eine Beziehung erforderlich, die einen stetigen Verlauf der Konzentrationen ermöglicht. Diese läßt sich aus dem Vergleich der Kettenverzweigungsreaktion (R1) sowie den Kettenfortpflanzungsreaktionen (R5) und (R11) ableiten [169]:

$$\Phi = 1 - \frac{k_{5f}}{k_{1f}} - \frac{k_{11f}}{k_{1f}} \frac{\psi_F}{\psi_{O_2}}. \quad (4.49)$$

Der Faktor Φ korrigiert die Wasserstoffatomkonzentration, die auf Basis von Quasistationaritätsannahmen berechnet wurde, indem er näherungsweise den Einfluß der Reaktionen der Brennstoffabbaukette berücksichtigt. Die H-Atomkonzentration berechnet sich mit Hilfe von Gleichung (4.49) zu

$$\psi_H = \psi_H^{\text{QSSA}} \sqrt{\max(0, \Phi)} \cdot T, \quad (4.50)$$

wobei ψ_H^{QSSA} die Konzentration des Wasserstoffatoms gemäß Gleichung (A.13) ist. Mit Hilfe der Funktion Φ kann die chemisch-inerte Vorwärmzone identifiziert werden, die durch Werte kleiner gleich Null definiert ist. Mit abnehmender Brennstoffkonzentration nimmt auch Φ positive Werte an und nähert sich in der Ausbrandzone schnell dem Wert eins, da hier die angenommene Quasistationarität der Kettenträger in guter Näherung erfüllt ist. Im Zündbereich, d. h. für $\Phi = 0$, ist der Verlauf der ersten Ableitung von ψ_H nicht stetig, weshalb eine zusätzliche empirische Glättungsfunktion T eingeführt wurde:

$$T = \frac{1}{1 + \exp(-(T - T^Z)/\Delta T)}. \quad (4.51)$$

Hierbei bezeichnet T^Z die Temperatur an der Grenze zwischen Reaktions- und Ausbrandzone und ΔT eine Temperaturdifferenz, die die Breite der Glättungsfunktion definiert. Ihre untere Grenze ist durch die Temperatur bestimmt, für die die Korrekturfunktion Φ den Wert null annimmt, während ihre obere Grenze durch die Grenztemperatur T^Z gegeben ist. Die Grenztemperatur T^Z kann bei gegebener Enthalpie h und Druck p iterativ mit Hilfe der Vorschrift

$$T^{(n+1)} = T^{(n)} + \frac{h - h(\mathbf{Y}^{(n)}, T^{(n)})}{c_p(\mathbf{Y}^{(n)}, T^{(n)})} \quad (4.52)$$

berechnet werden. Die Spezieskonzentrationen $\mathbf{Y}^{(n)}$ zum Iterationsschritt n sind dabei unter der zusätzlichen Randbedingung $Y_F = 0$ mit Hilfe der Gleichungen (4.18) oder (4.22) zu berechnen. Die „Zündtemperatur“ T^0 ist durch die Bedingung $\Phi = 0$ definiert und kann iterativ mit Hilfe von Gleichung (4.49) bestimmt werden. Da dies aber recht aufwendig ist, wurde im Rahmen dieser Arbeit die Breite der Glättungsfunktion zu $\Delta T = 50\text{K}$ gesetzt. Für die Glättungsfunktion T wurde eine Vielzahl von Ansätzen untersucht. Dabei hat sich gezeigt, daß die Flammencharakteristik von der gewählten Funktion nahezu unabhängig ist, die numerische Stabilität aber durch eine geeignete Funktion T deutlich verbessert werden kann. Dies gilt insbesondere im Hinblick auf die laminare Vormischflamme, da hier ein Strömungsproblem zu lösen ist, welches empfindlich auf Unstetigkeiten reagiert. Deshalb wurde schließlich die durch Gleichung (4.51) beschriebene sigmoidale Funktion ausgewählt.

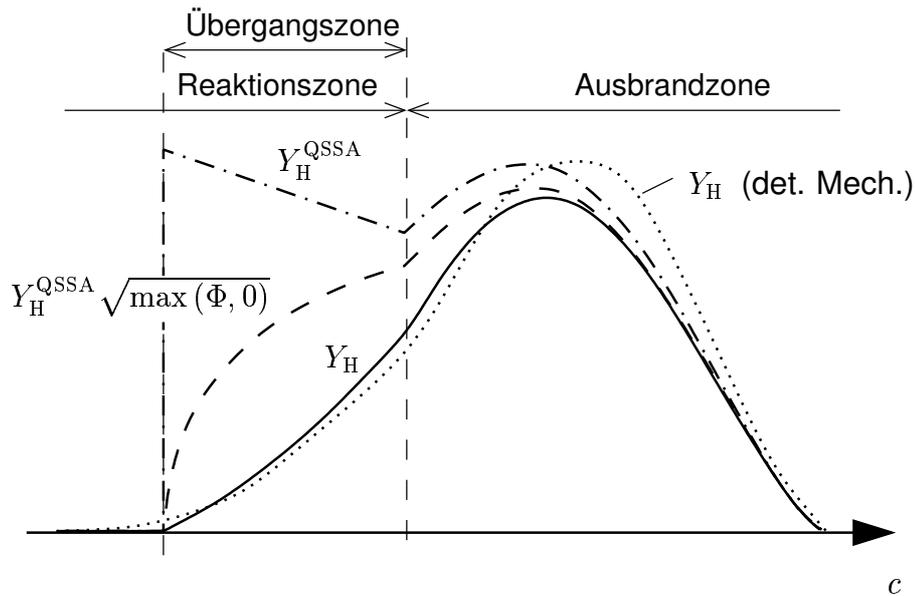


Abbildung 4.3: Exemplarische Darstellung der unkorrigierten (strichpunktirt), korrigierten (gestrichelt) und geglätteten (ausgezogen) H-Atomkonzentration, Y_H^{QSSA} , $Y_H^{QSSA} \sqrt{\max(\Phi, 0)}$ bzw. Y_H im homogenen System. Zum Vergleich ist der mit Hilfe eines detaillierten Mechanismus berechnete Massenbruch aufgetragen (gepunktete Linie).

Abbildung 4.3 zeigt die Konzentrationsverläufe für die unkorrigierte, korrigierte und geglättete H-Atomkonzentration Y_H^{QSSA} , $Y_H^{QSSA} \sqrt{\max(\Phi, 0)}$ bzw. Y_H . Außerdem ist zum Vergleich der mit Hilfe eines detaillierten Mechanismus berechnete Massenbruch aufgetragen. Das Versagen der Quasistationaritätsannahme im Bereich der Reaktionszone ist deutlich zu erkennen. Die grob vereinfachte Berücksichtigung der Brennstoffabbaureaktionen durch Φ stellt demgegenüber zwar eine Verbesserung dar, das resultierende Konzentrationsprofil weicht aber immer noch deutlich von dem des durch den detaillierten Mechanismus berechneten ab. Erst die Einführung der Glättungsfunktion T führt auf die gewünschte Übereinstimmung.

4.3 Ergebnisse der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik für Methan

4.3.1 Bestimmung des stöchiometrischen Koeffizienten ν_{O_2}

Ein wesentlicher Parameter der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik ist der stöchiometrische Koeffizient des Sauerstoffs ν_{O_2} . Ist ein Rumpfmehanismus bekannt, läßt sich der Konzentrationsverlauf $\mathbf{Y}(t)$ in einem homogenen System berechnen, und der gesuchte stöchiometrische Koeffizient kann mit Hilfe von Gleichung (4.7) über

$$\nu_{\text{O}_2}^{\text{I}} = \frac{W_{\text{F}}}{W_{\text{O}_2}} \frac{Z_{\text{O}} - Y_{\text{O}_2}^{\text{ZI}}}{(Z_{\text{C}} + Z_{\text{H}}) - Y_{\text{F}}^{\text{Z}}} = \frac{W_{\text{F}}}{W_{\text{O}_2}} \frac{\Delta Y_{\text{O}_2}}{\Delta Y_{\text{F}}} \quad (4.53)$$

berechnet werden. Aufgrund des nahezu linearen Verlaufs von $Y_{\text{F}}(Y_{\text{O}_2})$ bietet es sich an, die Steigung $\Delta Y_{\text{O}_2}/\Delta Y_{\text{F}}$ durch lineare Regression zu bestimmen.

Für Methan sind ausreichend validierte Reaktionsmechanismen in der Literatur veröffentlicht (siehe z. B. [207], [120], [105]). Im Rahmen dieser Arbeit wurde der Mechanismus des *Gas Research Institut* [207] als Referenzmechanismus gewählt, der auch im Rahmen der internationalen Arbeitsgruppe *Turbulent Non-Premixed Workshop* Verwendung findet [91]. Die Konzentrationsverläufe im homogenen System wurden durch das FORT-RAN77 Programm SENKIN [140] berechnet, welches auf dem CHEMKIN Paket [111] basiert. Es löst das gekoppelte System der gewöhnlichen Differentialgleichungen für die Massenbrüche und die Temperatur mit Hilfe des Lösers DASAC [53], der auf dem impliziten Zeitintegrator DASSL [170] beruht. Die Steigung $\Delta Y_{\text{O}_2}/\Delta Y_{\text{F}}$ wurde für eine Vielzahl von Rechnungen über einen weiten Stöchiometrie- und Vorwärmtemperaturbereich bestimmt, und durch Fehlerminimierung die folgende Funktion des stöchiometrischen Koeffizienten ν_{O_2} ermittelt:

$$\nu_{\text{O}_2} = -1.5 - 2.536 \left(\frac{1}{\phi} - 0.5 \right)^{0.074} + 2.246 \left(\frac{T_u}{T^\circ} \right)^{0.070} . \quad (4.54)$$

Gleichung (4.54) zeigt, daß sich die Einflüsse von Stöchiometrie und Vorwärmtemperatur auf den stöchiometrischen Koeffizienten in sehr guter Näherung additiv verhalten, d. h. getrennt beschrieben werden können.

4.3.2 Ergebnisse für das homogene System bei Annahme des Wassergasgleichgewichts

Um die Konzentrations- und Temperaturverläufe auf Basis der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik zu berechnen, muß lediglich die Differentialgleichung (4.3) gelöst werden. Die übrigen Speziesmassenbrüche lassen sich dann mit den in Kapitel 4.2.2 vorgestellten Gleichungen berechnen. Da Druck und Enthalpie in einem adiabaten, homogenen System konstant sind, können mit ihrer Hilfe alle übrigen thermodynamischen Größen wie Temperatur, Dichte und spezifische Wärmekapazität bestimmt werden. Hierzu wurde das Programm SENKIN entsprechend modifiziert und erweitert, so daß die angestrebte Kompatibilität zum CHEMKIN-Format gewährleistet wurde. Die erforderlichen Unterprogramme der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik sind modular aufgebaut und können ohne großen Aufwand in andere CHEMKIN-basierte Programme integriert werden, wie z. B. den in Kapitel 5 beschriebenen PDF-Präprozessor.

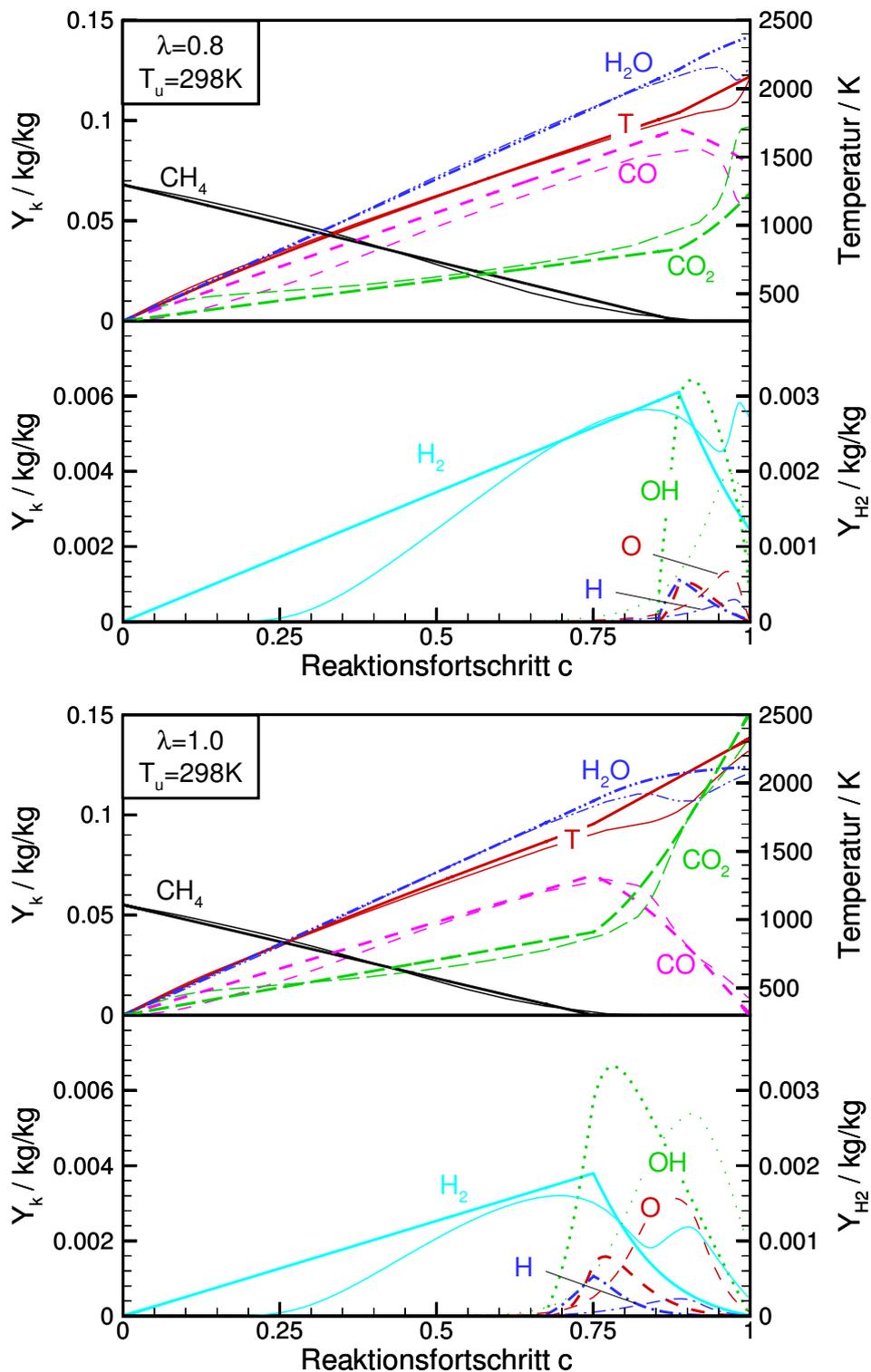


Abbildung 4.4: Ergebnisse der 2-Bereich Kinetik im homogenen System für fette und stöchiometrische Bedingungen unter Annahme des Wassergasgleichgewichts. Dicke Linien: 2-Bereich Kinetik, dünne Linien: detaillierte Kinetik.

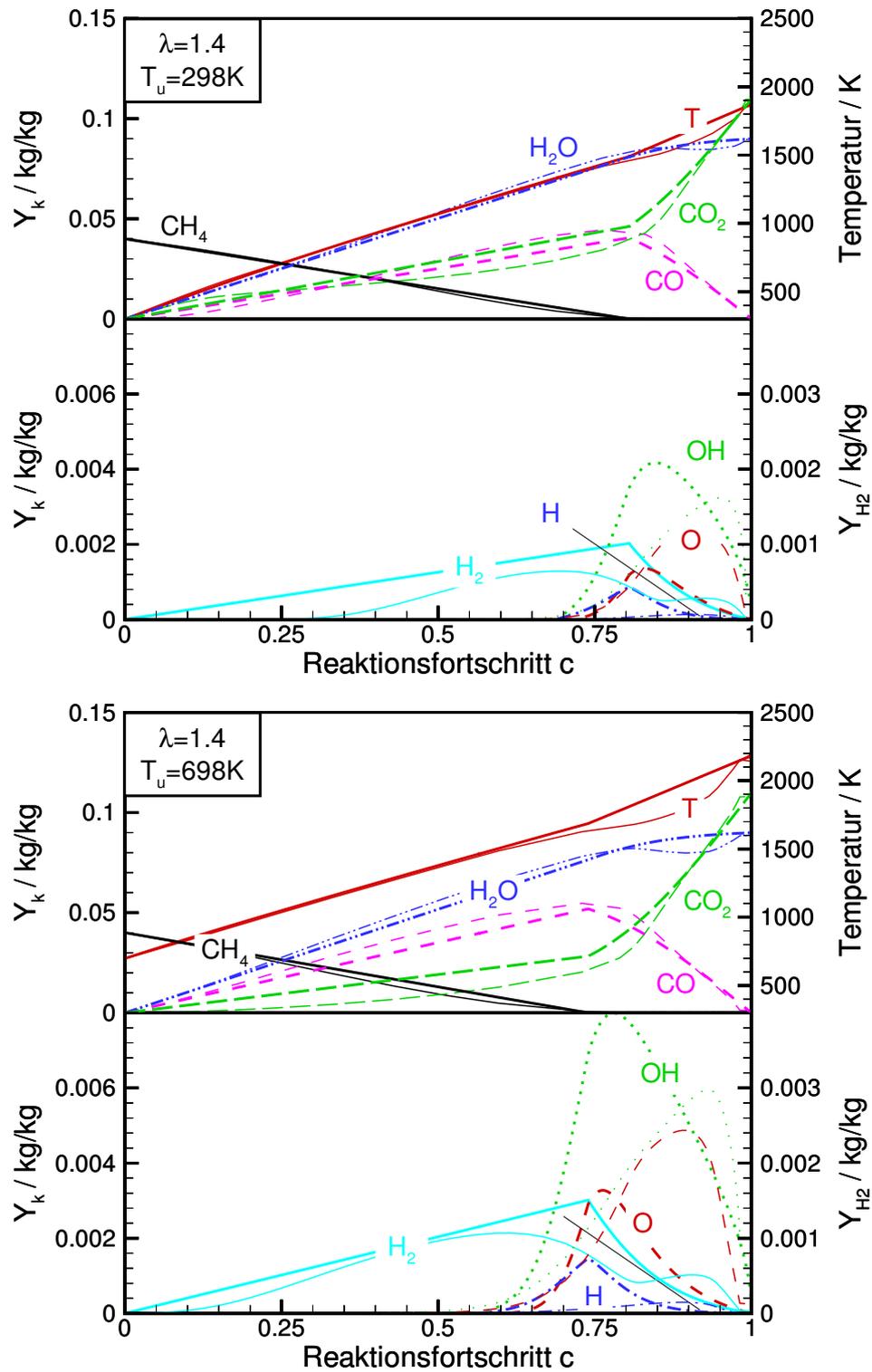


Abbildung 4.5: Ergebnisse der 2-Bereich Kinetik im homogenen System für magere Bedingungen und unterschiedliche Vorwärmtemperaturen unter Annahme des Wassergasgleichgewichts. Dicke Linien: 2-Bereich Kinetik, dünne Linien: detaillierte Kinetik.

Die Abbildungen 4.4 und 4.5 zeigen Vergleiche von detaillierter und 2-Bereich-1-Schritt Kinetik bei Annahme des Wassergasgleichgewichts. Dargestellt sind Temperatur- und Konzentrationsverläufe für drei unterschiedliche Luftzahlen 0.8, 1.0 und 1.4 für eine Vorwärmtemperatur von $T_u = 298\text{K}$ sowie für eine Luftzahl von 1,4 und eine Vorwärmtemperatur von $T_u = 698\text{K}$. Der durch die 2-Bereich Kinetik postulierte lineare Verlauf der Konzentrationen im Bereich der Reaktionszone ist deutlich erkennbar. Einzige Ausnahme bildet der Wasserstoff, der ein deutliches nicht-lineares Verhalten zeigt. Dies liegt in den Reaktionen der C1-Kette und des H/O-Systems begründet, an denen der Wasserstoff maßgeblich beteiligt ist. Da eine Einschrittkinetik immer einen linearen Zusammenhang der Konzentrationen bedingt, ist offensichtlich, daß die korrekte Vorhersage der Wasserstoffkonzentration die Berücksichtigung von mindestens drei Parallelreaktionen erfordert. Wie der detaillierte Mechanismus zeigt, sind in der Brennstoffabbauzone die Konzentrationen von O, H und OH verschwindend gering. Grund sind, wie bereits in Kapitel 3.1.1 ausgeführt, die Zwischenprodukte des Brennstoffabbaus (CH_3 , CHO_2 , CHO , etc.), die die über die Reaktionen (R1)-(R3) gebildeten Atome, bzw. Radikale O,H und OH nahezu vollständig abbauen. O,H und OH treten daher erst in der Ausbrandzone in nennenswerten Konzentrationen auf.

An die Reaktionszone schließt sich im realen System, wie es durch die detaillierte Kinetik wiedergegeben wird, eine Übergangszone an, in der die Annahmen, auf denen die 2-Bereich Kinetik im Ausbrandbereich basiert, noch nicht erfüllt sind. Die Breite der Übergangszone läßt sich an dem an- und wieder absteigenden Konzentrationsverlauf der Kettenträger O, H und OH festmachen. Wie Abbildung 4.3 zeigt, sind die Quasistationaritätsannahmen des Wasserstoffatoms und damit aller anderen Radikale erst im Bereich abfallender Konzentrationen näherungsweise erfüllt. Die Breite der Übergangszone nimmt, in Übereinstimmung mit Ergebnissen der RRA-Analyse, mit abnehmender Luftzahl (zunehmender Brennstoffzahl) zu. Die grundlegende Annahme eines sequentiellen Verbrennungsverlaufs verliert daher unter fetter werdenden Bedingungen zunehmend an Gültigkeit. Grund für dieses Verhalten ist die mit abnehmender Luftzahl (zunehmender Brennstoffzahl) steigende Konzentration der Zwischenprodukte des Brennstoffabbaus bei gleichzeitiger Abnahme der Konzentrationen von O, H und OH. Im Ausbrandbereich liefert die 2-Bereich-1-Schritt Kinetik bei Annahme des Wassergasgleichgewichts für die stabilen Produkte CO , H_2O und CO_2 unter fetten Bedingungen erwartungsgemäß nur befriedigende Übereinstimmungen mit der detaillierten Kinetik. Mit zunehmender Luftzahl (abnehmender Brennstoffzahl) nimmt aber auch die Fähigkeit der 2-Bereich Kinetik zu, die Konzentrationsverläufe richtig vorherzusagen. Bei Betrachtung der Abbildungen 4.4 und 4.5 fällt auf, daß auch unter mageren Bedingungen die Krümmung der Konzentrationsverläufe für alle Komponenten im Ausbrandbereich qualitativ falsch wiedergegeben werden. Die Annahme des Wassergasgleichgewichts ist offensichtlich nicht für den gesamten Ausbrandbereich gültig. Eine Analyse der Reaktionsgeschwindigkeiten zeigt dann auch, daß die Reaktionsgeschwindigkeit q_{II} nur im Bereich unmittelbar nach der Übergangszone und nahe des thermodynamischen Gleichgewichts größer als die Reaktionsgeschwindigkeit q_{III} ist, und somit die Annahme einer langsamen CO-Oxidation zu besseren Ergebnissen führen sollte.

Die schlechte Vorhersage der Wasserstoffkonzentration im Ausbrandbereich bedingt auch die anhand der Abbildungen 4.4 und 4.5 ersichtliche mangelhafte Wiedergabe der O-, H- und OH-Konzentrationen. Dies hat wiederum eine falsche Vorhersage der Reaktionsgeschwindigkeiten zur Folge.

Abschließend sei angemerkt, daß die Konzentration des Wasserstoffs am Übergang von

Reaktions- zu Ausbrandzone maßgeblich durch die Gleichgewichtskonstante K_{II} bestimmt ist (siehe Gl. (4.18) und (4.19)). Da die Annahme des Wassergasgleichgewichts unter den Bedingungen der Übergangszone aber nur mäßig erfüllt ist, muß davon ausgegangen werden, daß die Konzentrationen des Wasserstoffs über Gleichung (4.18) nur näherungsweise wiedergegeben wird. Eine genauere Betrachtung zeigt, daß die Wasserstoffkonzentration in diesem Bereich zu hoch vorhergesagt wird (siehe auch Kapitel 3.1.5). Aus diesem Grund wurde die Gleichgewichtskonstante K_{II} in Gleichung (4.18) mit einem ad hoc Faktor von 0.5 multipliziert, um die in den Abbildungen 4.4 und 4.5 dargestellten Ergebnisse zu erhalten.

4.3.3 Ergebnisse für das homogene System bei Annahme von langsamer CO-Oxidation

Deutlich bessere Ergebnisse werden erzielt, wenn die CO-Oxidation als langsam und ein quasistationäres Verhalten des Wasserstoffs angenommen wird. Die Ergebnisse mit diesem Modell sind in den Abbildungen 4.6 und 4.7 dargestellt, wiederum für ein fettes, stöchiometrisches und mageres Gemisch bei $T_u = 298\text{K}$ sowie $T_u = 698\text{K}$. Die 2-Bereich-1-Schritt Kinetik liefert in diesem Fall sehr gute Ergebnisse für alle Stöchiometrien. Dies zeigt sich bei Betrachtung der Ausbrandzone, wo alle Konzentrationsverläufe inklusive der Radikale hervorragend wiedergegeben werden. Dies gilt insbesondere im Hinblick auf die groben Vereinfachungen, auf denen die Kinetik beruht. Da die Gleichgewichtskonzentrationen durch die 2-Bereich Kinetik ebenfalls richtig vorhergesagt werden, stimmen auch die adiabaten Verbrennungstemperaturen fast miteinander überein.

Die Annahme einer langsamen CO-Oxidation erweist sich unter homogenen Bedingungen der Annahme eines Wassergasgleichgewichts als überlegen. Quantitativ und vor allem qualitativ wird die Wasserstoffkonzentration im Ausbrandbereich sehr gut wiedergegeben. Daher findet sich auch für die Konzentrationen von O, H und OH eine gute Übereinstimmung, die zur richtigen Berechnung der Reaktionsgeschwindigkeit und damit des Ausbrandverhaltens entscheidend sind. Für zunehmende Brennstoff/Luft Verhältnisse nimmt jedoch auch unter Voraussetzung einer langsamen CO-Oxidation die Fähigkeit der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik ab, die O-, H-, und OH-Konzentrationen vorherzusagen. Ursache sind wiederum die Zwischenprodukte des Brennstoffabbaus, die durch die 2-Bereich Kinetik nicht berücksichtigt werden. Sie werden nur implizit über die Konzentration des Brennstoffs und damit über den Korrekturfaktor Φ erfaßt. Gleichung (4.49) ist aber unter der Voraussetzung magerer Gemische abgeleitet worden, und verliert daher für kleine Luftzahlen ihre Gültigkeit. Gleichung (4.49) ließe sich verbessern, indem man weitere Reaktionen der C1-Kette berücksichtigen würde. Dies wiederum erfordert die Kenntnis der Konzentrationen von CH_3 , CHO_2 und CHO , was prinzipiell möglich, aber mit einem nicht unerheblichen Aufwand verbunden ist. Da im Rahmen dieser Arbeit fast ausschließlich magere Methan/Luft Vormischflammen betrachtet werden, für die die 2-Bereich-1-Schritt Kinetik in ihrer vorgestellten Formulierung sehr gute Ergebnisse liefert, ist obige Korrekturmöglichkeit nicht weiter verfolgt worden.

4.3.4 Bestimmung der kinetischen Parameter

Neben dem stöchiometrischen Koeffizienten ν_{O_2} sind noch die kinetischen Parameter der Reaktion (I) in Gleichung (4.39) zu bestimmen, um die 2-Bereichs-Kinetik zu kompletieren. Der Frequenzfaktor B , die Aktivierungstemperatur T_A sowie Reaktionsordnungen

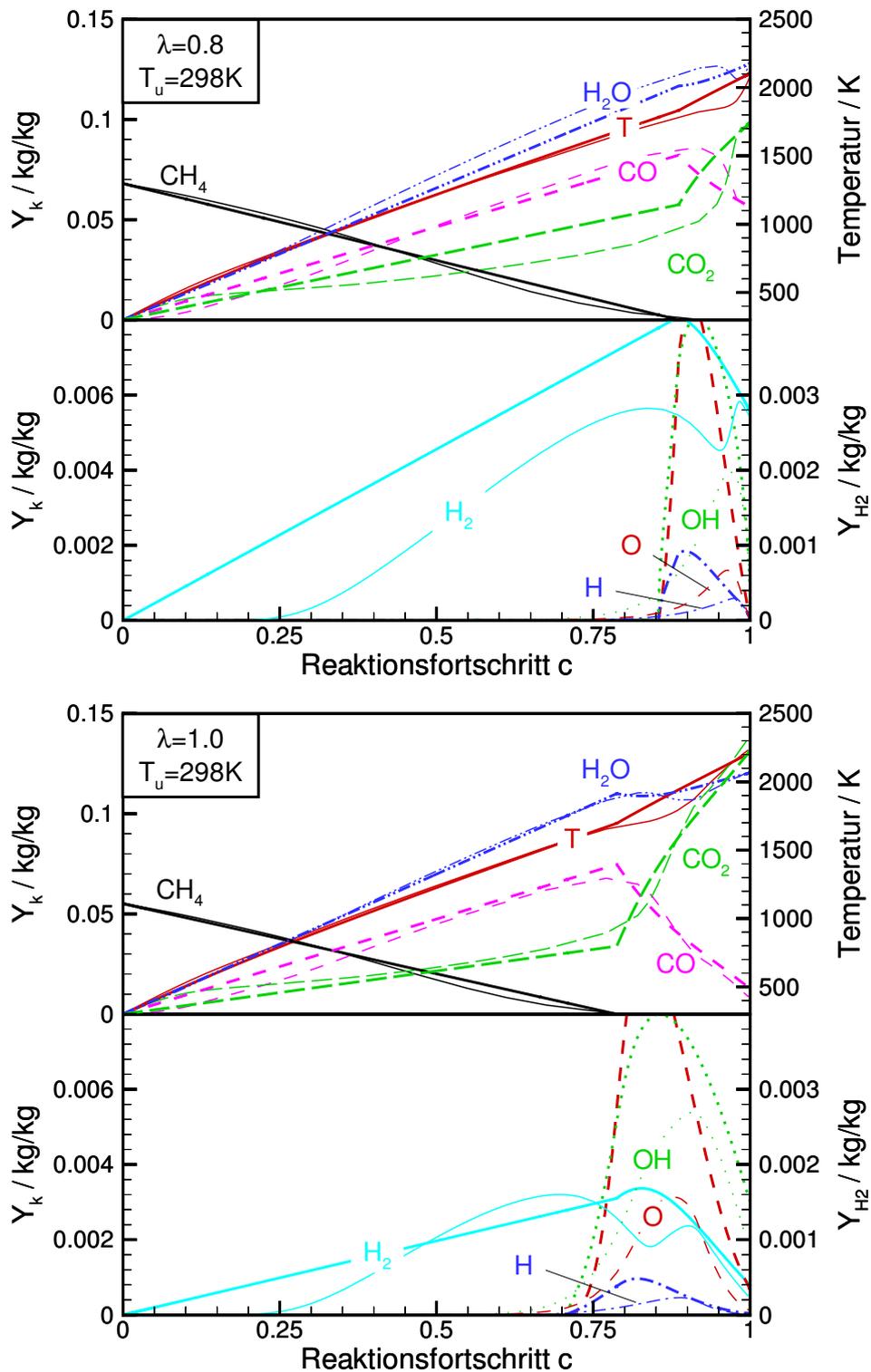


Abbildung 4.6: Ergebnisse der 2-Bereich Kinetik im homogenen System für fette und stöchiometrische Bedingungen bei einer Vorwärmtemperatur von 298K unter Annahme langsamer CO-Oxidation. Dicke Linien: 2-Bereich Kinetik, dünne Linien: detaillierte Kinetik.

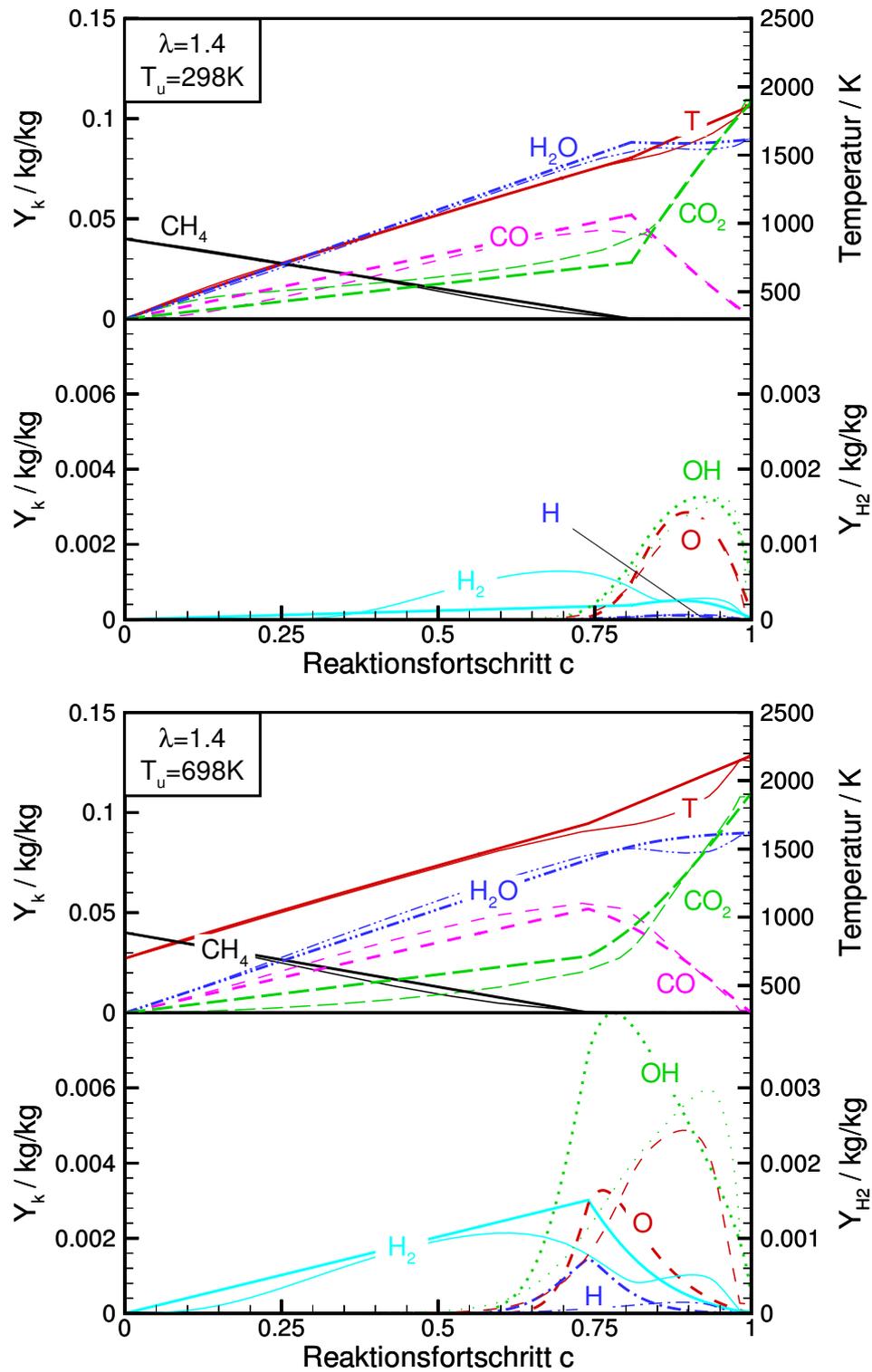


Abbildung 4.7: Ergebnisse der 2-Bereich Kinetik im homogenen System für magere Bedingungen und unterschiedliche Vorwärmtemperaturen unter Annahme langsamer CO-Oxidation. Dicke Linien: 2-Bereich Kinetik, dünne Linien: detaillierte Kinetik.

n und m hängen von der Art des Brennstoffs ab und sind mehr oder weniger starke Funktionen des Drucks, der Vorwärmtemperatur und der Stöchiometrie.

Im Rahmen dieser Arbeit wurden die Reaktionsordnungen sowie die Aktivierungstemperatur für den betrachteten Bereich konstant gehalten. Die Aktivierungstemperatur stellt eine Schwelle für das Anlaufen der Reaktion dar und bestimmt daher den Anstieg von $q_1(c)$. Eine gute Übereinstimmung mit Ergebnissen der detaillierten Kinetik lieferte eine Aktivierungstemperatur von $T_A = 22850\text{K}$, ein Wert, der von SÁNCHEZ ET AL. [196] vorgeschlagen wurde. Für die Reaktionsordnungen bezüglich des Brennstoffs und des Sauerstoffs wurde $n = 1$ und $m = 2$ gewählt. Diese Werte orientieren sich zum einen an Werten aus der Literatur [235, 177, 196] zum anderen lieferte dieser Parametersatz die besten Ergebnisse sowohl für das homogene System als auch die laminare Vormischflamme.

Der Frequenzfaktor B bestimmt das Maximum der Reaktionsgeschwindigkeit und wird, wie in Kapitel 4.2.4 erläutert, als Funktion von Stöchiometrie, Vorwärmtemperatur und Druck betrachtet. Gleichung (4.44) und (4.45) drücken diese Abhängigkeiten aus, erfordern aber die Bestimmung zweier Parameter, des Referenzfrequenzfaktors B° und des Exponenten n_1 , der den Stöchiometrieinfluss beschreibt. Um diese Parameter zu bestimmen, wurde die laminare Flammgeschwindigkeit für Stöchiometrien von $\lambda = 0.75$ bis $\lambda = 1.75$ und Vorwärmtemperaturen von 298K, 498K sowie 698K unter Verwendung des detaillierten Mechanismus berechnet. Die so ermittelten Werte dienen als Referenzwerte für die 2-Bereich Kinetik. Der Frequenzfaktor B° wurde für ein stöchiometrisches Brennstoff/Luft Gemisch ($\lambda = 1$) bei der Referenztemperatur $T^\circ = 298\text{K}$ bestimmt. Die Konzentrationsverläufe in der Reaktionszone hängen von den Konzentrationen am Zonenübergang und somit von der Kinetik in der Ausbrandzone ab. Daher ergeben sich für den Faktor B° unter Annahme des Wassergasgleichgewichts bzw. der langsamen CO-Oxidation leicht unterschiedliche Werte von $B^\circ = 1.0 \cdot 10^9 \text{cm}^3 \cdot \text{K} / \text{mol} \cdot \text{s}$ bzw. $B^\circ = 1.3 \cdot 10^9 \text{cm}^3 \cdot \text{K} / \text{mol} \cdot \text{s}$. Um den Exponenten n_1 zu bestimmen, wurden für die Referenzwerte der Flammgeschwindigkeit die entsprechenden Frequenzfaktoren ermittelt, und anschließend eine Regression anhand von Gleichung (4.45) durchgeführt. Ergebnis dieser Anpassung ist ein Exponent von $n_1 = 0.5$.

Die Funktionen für den stöchiometrischen Koeffizienten ν_{O_2} und den Frequenzfaktor B können nur bestimmt werden, wenn ausreichend Meßergebnisse oder eine detailliertere Kinetik existieren. Deshalb wurde untersucht, inwieweit die Flammgeschwindigkeit als charakteristische Größe der Vormischverbrennung von diesen Funktionen abhängt. Hierzu wurde zum einen der stöchiometrische Koeffizient ν_{O_2} mit 1.5 konstant gehalten, und zum anderen der Frequenzfaktor über die vereinfachte Beziehung

$$B = B^\circ \left(\frac{T^\circ}{T_u} \right)^{0,75} (Ze)^3 (T_b - T_u)^{-4} \exp \left(-\frac{T_A}{T_b} \right) \left(\frac{p}{p^\circ} \right)^2 \quad (4.55)$$

beschrieben. Gleichung (4.55) berücksichtigt im Gegensatz zu Gleichung (4.44) die Stöchiometrieabhängigkeit nur noch indirekt über die adiabate Verbrennungstemperatur, die eine starke Funktion der Luftzahl ist (siehe Anhang A.4).

4.3.5 Ergebnisse für die laminare Vormischflamme bei Annahme des Wassergasgleichgewichts

Die Abbildungen 4.8 und 4.9 zeigen exemplarisch berechnete Temperatur- und Konzentrationsverläufe bei drei unterschiedlichen Luftzahlen sowie zwei Vorwärmtemperaturen

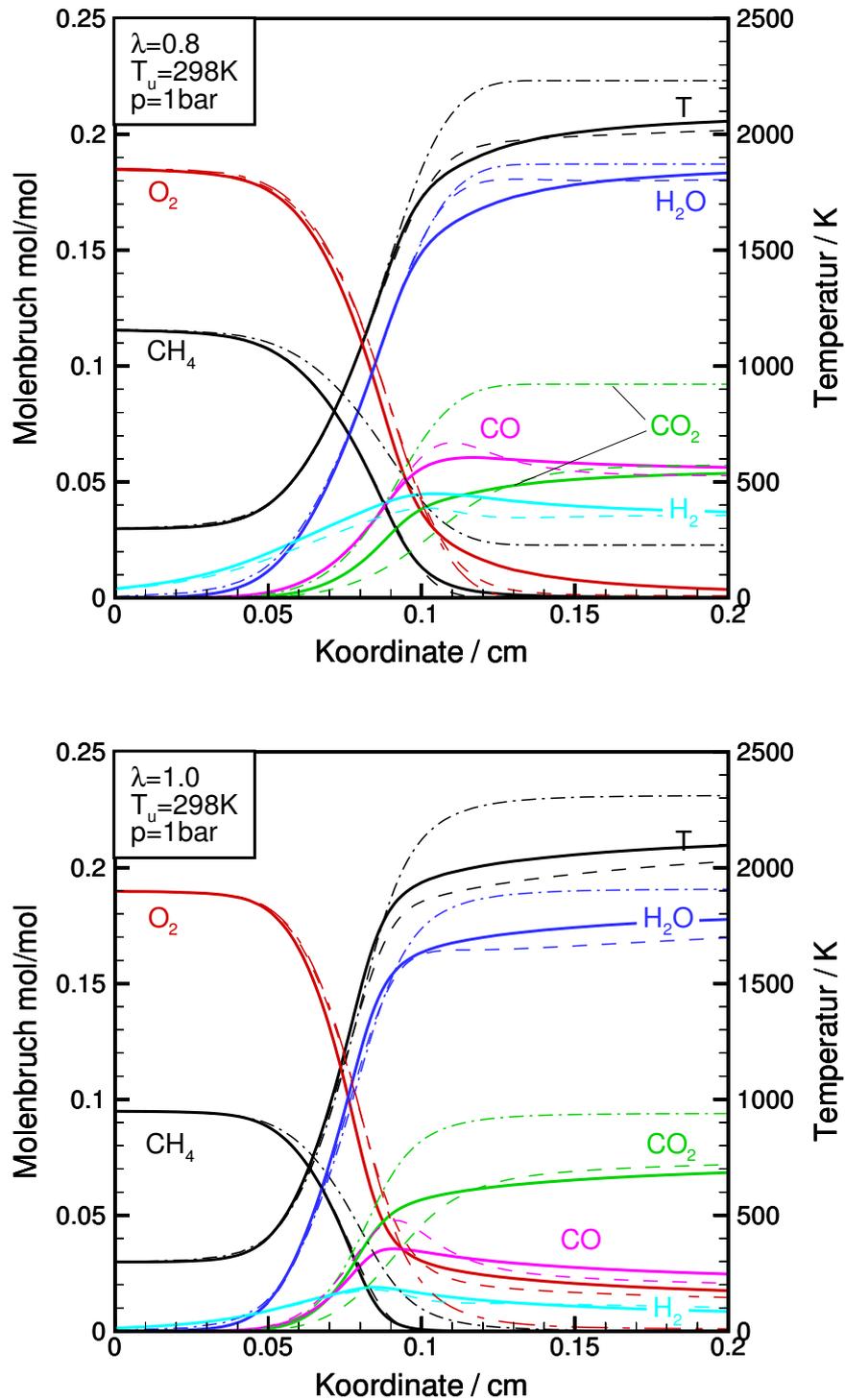


Abbildung 4.8: Vergleich berechneter Temperatur- und Konzentrationsverläufe einer Methan/Luft Vormischflamme für unterschiedliche Stöchiometrien und $T_u = 298\text{K}$ unter Annahme des Wassergasgleichgewichts. Dicke ausgezogene Linie: 2-Bereich-1-Schritt Kinetik, dünne gestrichelte Linie: detaillierter Mechanismus, dünne strichpunktete Linie: Einschrittkinetik.

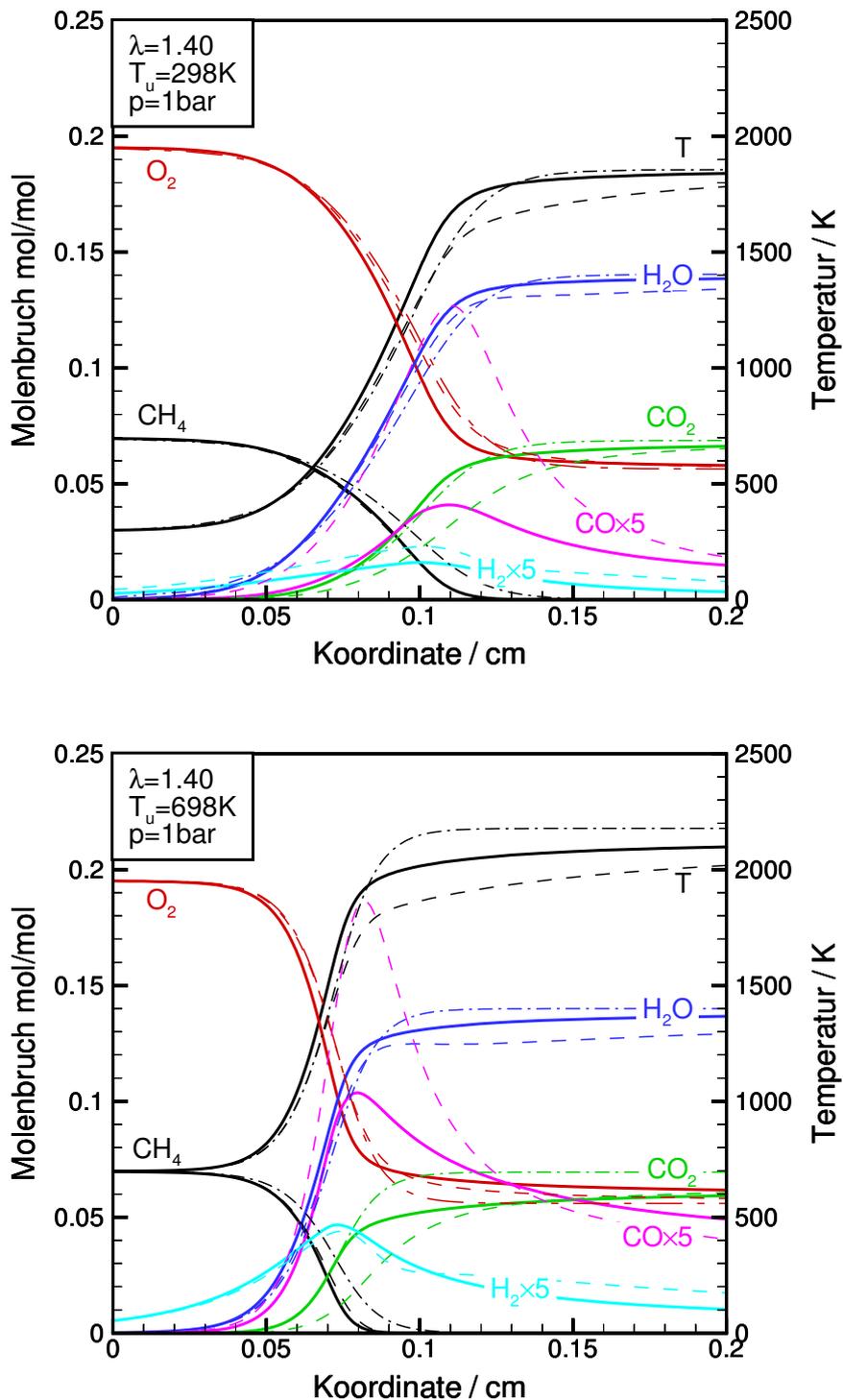


Abbildung 4.9: Vergleich berechneter Temperatur- und Konzentrationsverläufe einer mageren Methan/Luft Vormischflamme für $T_u = 298\text{K}$ und $T_u = 698\text{K}$ unter Annahme des Wassergasgleichgewichts. Dicke ausgezogene Linie: 2-Bereich-1-Schritt Kinetik, dünne gestrichelte Linie: detaillierter Mechanismus, dünne strichpunktete Linie: Einschrittkinetik.

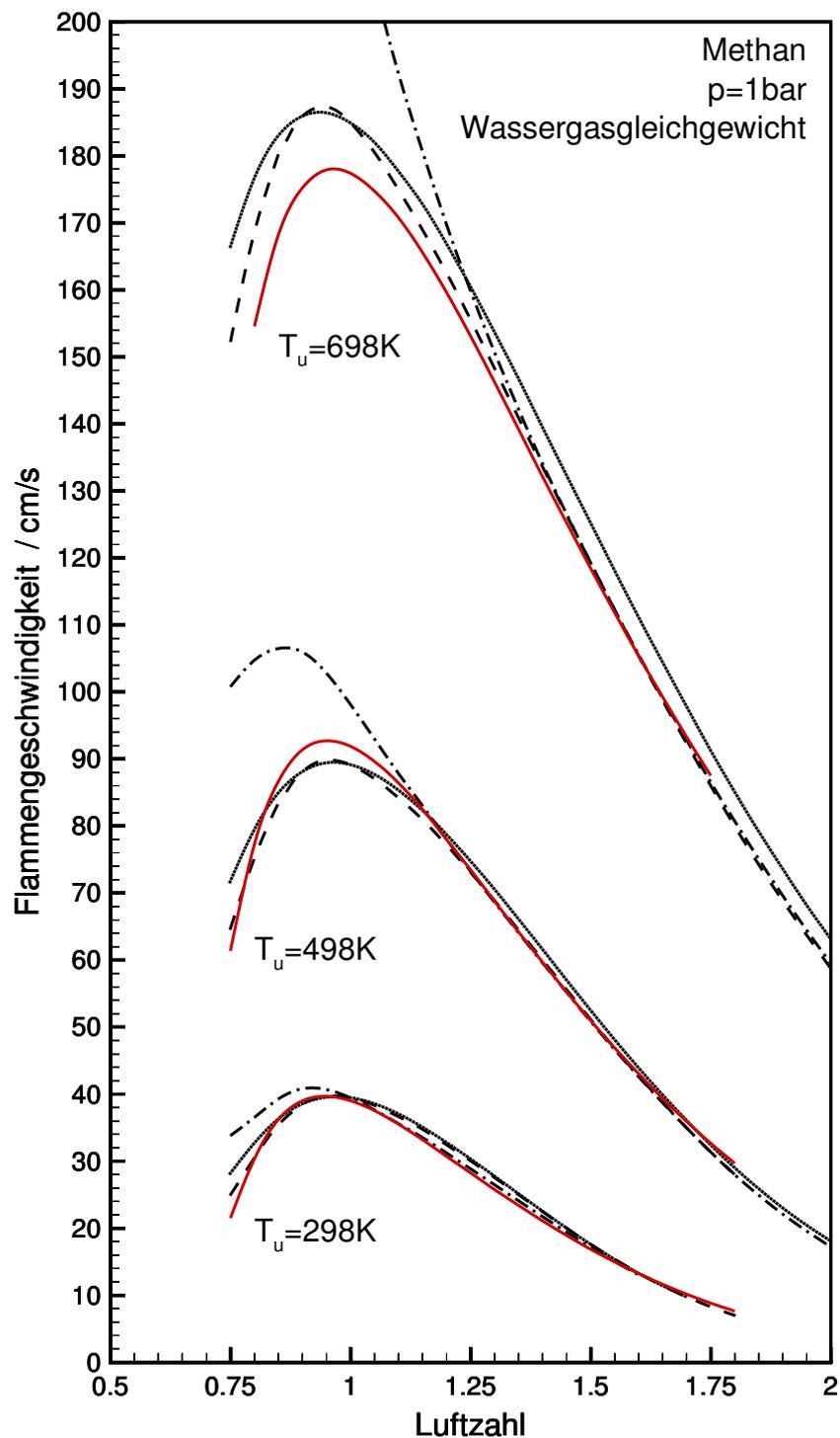


Abbildung 4.10: Vergleich berechneter Flammengeschwindigkeiten von Methan für Vorwärmtemperaturen von 298K, 498K und 698K unter der Annahme des Wassergasgleichgewichts. Ausgezogene Linie: detaillierte Kinetik, gestrichelte Linie: 2-Bereich Kinetik mit ν_{O_2} nach Gl.(4.54) und B nach Gl.(4.46), strichpunktierte Linie: 2-Bereich-Kinetik mit $\nu_{\text{O}_2} = -1.5$ und B nach Gl.(4.46), punktierte Linie: 2-Bereich Kinetik mit $\nu_{\text{O}_2} = -1.5$ und B nach Gl.(4.55).

unter Annahme des Wassergasgleichgewichts. Verglichen werden jeweils Ergebnisse basierend auf der detaillierten Kinetik (GRI-Mechanismus [207]), einer Einschrittkinetik (siehe Anhang A.3) und der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik.

Ein Vergleich der Temperaturprofile verdeutlicht die Überlegenheit der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik über eine gewöhnliche Einschrittkinetik. Dies gilt vor allem für fette und nahestöchiometrische Gemische, bei denen die Konzentrationen von CO und H₂ nicht mehr vernachlässigt werden können. Die Ergebnisse der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik und die des detaillierten Mechanismus weisen hingegen insgesamt eine gute Übereinstimmung auf, offenbaren aber auch einige Defizite. Diese lassen sich vor allem an den Konzentrationsverläufen der stabilen Zwischenprodukte CO₂ und H₂ festmachen. Während die Gleichgewichtswerte gut übereinstimmen, weichen die Profile in der Reaktionszone deutlich voneinander ab. Diese Abweichung läßt sich über den gesamten untersuchten Stöchiometrie- und Vorwärmtemperaturbereich beobachten, hat aber auf die Vorhersagegenauigkeit der Flammengeschwindigkeiten keinen nennenswerten Einfluß. Dies zeigt Abbildung 4.10, in der die mit Hilfe der 2-Bereich-1-Schritt-Kinetik sowie des detaillierten Mechanismus berechneten Flammengeschwindigkeiten eingetragen sind. Die Ursache hierfür liegt im Temperaturprofil, durch welches die Wärmefreisetzung- und damit die Flammgeschwindigkeit bestimmt ist (siehe Kapitel (3.1)). Da das Temperaturprofil durch die 2-Bereich-1-Schritt Kinetik gut wiedergegeben wird, stimmen auch die berechneten Flammgeschwindigkeiten gut mit denen des Referenzmechanismus überein. Die Grafik veranschaulicht auch den Einfluß des Frequenzfaktors B und des stöchiometrischen Koeffizienten ν_{O_2} auf die Qualität der Ergebnisse. Die beste Übereinstimmung von 2-Bereich-1-Schritt Kinetik, dargestellt durch die gestrichelte Linie, und Referenzmechanismus, dargestellt durch die durchgezogene Linie, ergibt sich erwartungsgemäß bei Verwendung der komplexen Funktionen für den stöchiometrischen Koeffizienten (4.54) sowie den Frequenzfaktor (4.43). Wird der funktionale Zusammenhang $\nu_{O_2}(\phi, T_u)$ durch einen konstanten Wert $\nu_{O_2} = -1.5$ ersetzt, so ist das Ergebnis nur unwesentlich schlechter. Einen größeren Einfluß besitzt die Form des funktionalen Zusammenhangs $B(\phi, T_u)$. Wird die Stöchiometrieabhängigkeit nur über die adiabate Verbrennungstemperatur berücksichtigt, so werden die Flammgeschwindigkeiten im nahestöchiometrischen und fetten Bereich falsch wiedergegeben. Die Abweichungen werden dabei mit zunehmender Vorwärmtemperatur größer. Im mageren Bereich liefert die Kinetik mit der vereinfachten Funktion (4.55) jedoch ausreichend genaue Ergebnisse.

4.3.6 Ergebnisse für die laminare Vormischflamme bei Annahme langsamer CO-Oxidation

Die Abbildungen 4.11 und 4.12 zeigen die Temperatur- und Konzentrationsprofile von laminaren Vormischflammen wiederum für die 2-Bereich-1-Schritt Kinetik (dicke ausgezogene Linie), den Referenzmechanismus (dünne gestrichelte Linie) und den Einschrittmeechanismus (dünne strichpunktierte Linie). Im Gegensatz zum Abschnitt 4.3.5 werden bei der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik die Konzentrationen im Ausbrandbereich unter Annahme einer langsam verlaufenden CO-Oxidation berechnet. Die Übereinstimmung der Verläufe für den untersuchten Stöchiometrie- und Vorwärmtemperaturbereich im Vergleich zum Referenzmechanismus ist sehr gut. Dies gilt auch für die CO-Konzentrationen, die im Vergleich zu den unter Annahme des Wassergasgleichgewichts berechneten sowohl in der Ausbrand- als auch in der Reaktionszone gut übereinstimmen. Die Konzentrationen des

Wasserstoffs hingegen wird im Ausbrandbereich immer zu hoch vorhergesagt, da die Umsatzgeschwindigkeit des Wasserstoff \dot{w}_{H_2} aufgrund der Quasistationaritätsannahme gleich null ist. Der Vorteil der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik gegenüber einer globalen Einschrittkinetik, die keine Aussage über diese Konzentrationen liefert, ist aber offensichtlich.

Die Annahme einer langsam verlaufenden CO-Oxidation ist nur für nahestöchiometrische und magere Gemische gültig. Für fette Gemische besitzen die Bestimmungsgleichungen (4.21) und (4.22) keine Lösung mehr, so daß in den Abbildungen 4.11, 4.12 und 4.13 nur Flammenstrukturen bzw. Flammengeschwindigkeiten für Luftzahlen von 1.0, 1.45 sowie 1.75 dargestellt sind.

Abbildung 4.13 zeigt den Vergleich berechneter Flammengeschwindigkeiten. Die ausgezogene Linie steht für den Referenzmechanismus, während die gestrichelten der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik unter Verwendung der funktionalen Zusammenhänge (4.46) und (4.54) entsprechen. Die Ergebnisse der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik zeigen in diesem Fall im Bereich magerer Gemische für die untersuchten Vorwärmtemperaturen eine herausragende Übereinstimmung mit dem Referenzmechanismus. Wird für den stöchiometrischen Koeffizienten wie in Abschnitt 4.3.5 ein konstanter Wert von $\nu_{\text{O}_2} = -1.5$ angenommen ergibt sich der durch die strichpunktierte Linie dargestellte Verlauf der Flammengeschwindigkeit. Unter dieser Voraussetzung weicht die berechnete Flammengeschwindigkeit im nahestöchiometrischen Bereich bei höheren Vorwärmtemperaturen deutlich von den Referenzwerten ab.

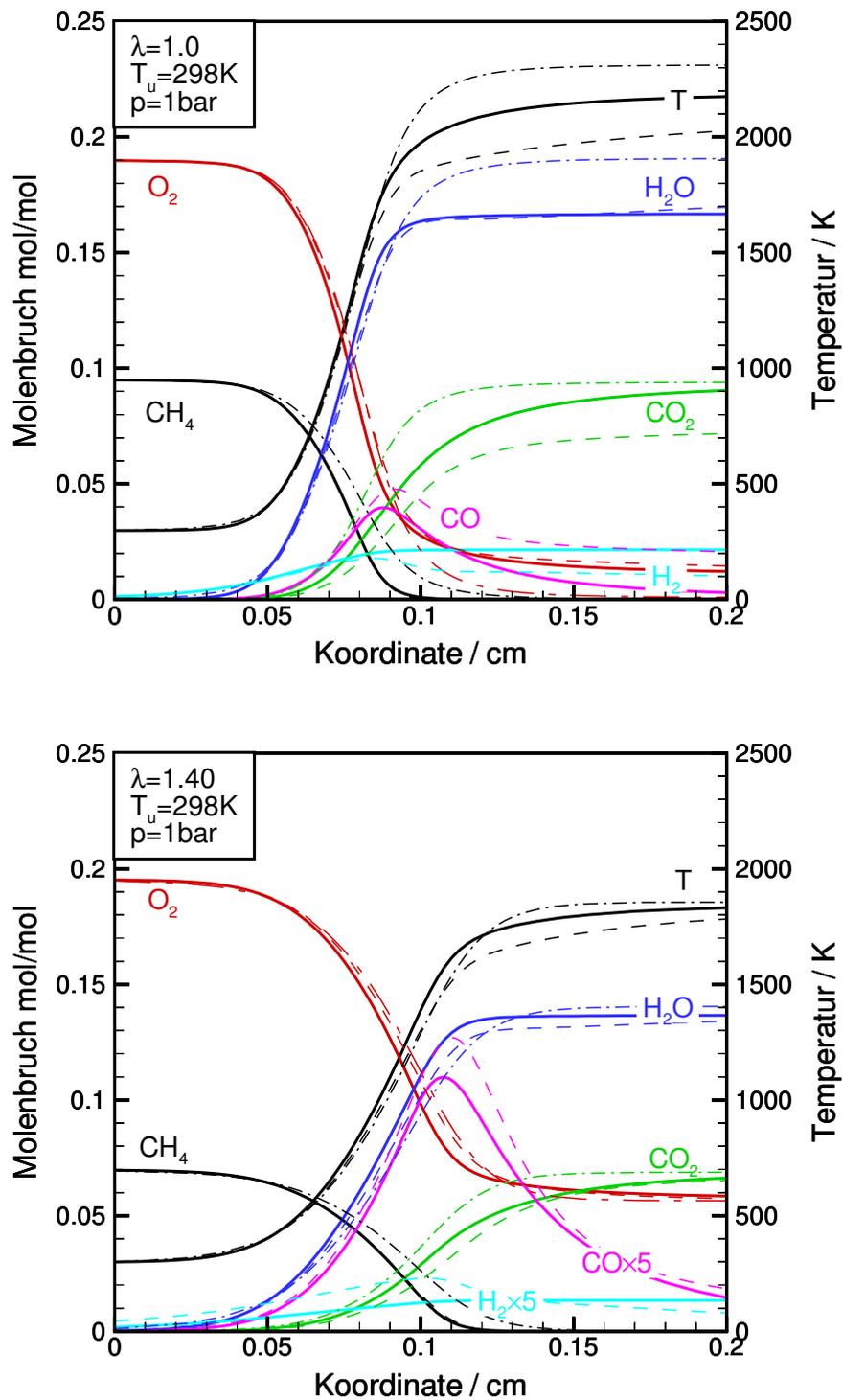


Abbildung 4.11: Vergleich berechneter Temperatur- und Konzentrationsverläufe einer stöchiometrischen und mageren Methan/Luft Vormischflamme für $T_u = 298\text{K}$ unter Annahme des Wassergasgleichgewichts. Dicke ausgezogene Linie: 2-Bereich-1-Schritt Kinetik, dünne gestrichelte Linie: detaillierter Mechanismus, dünne strichpunktierte Linie: Einschrittkinetik.

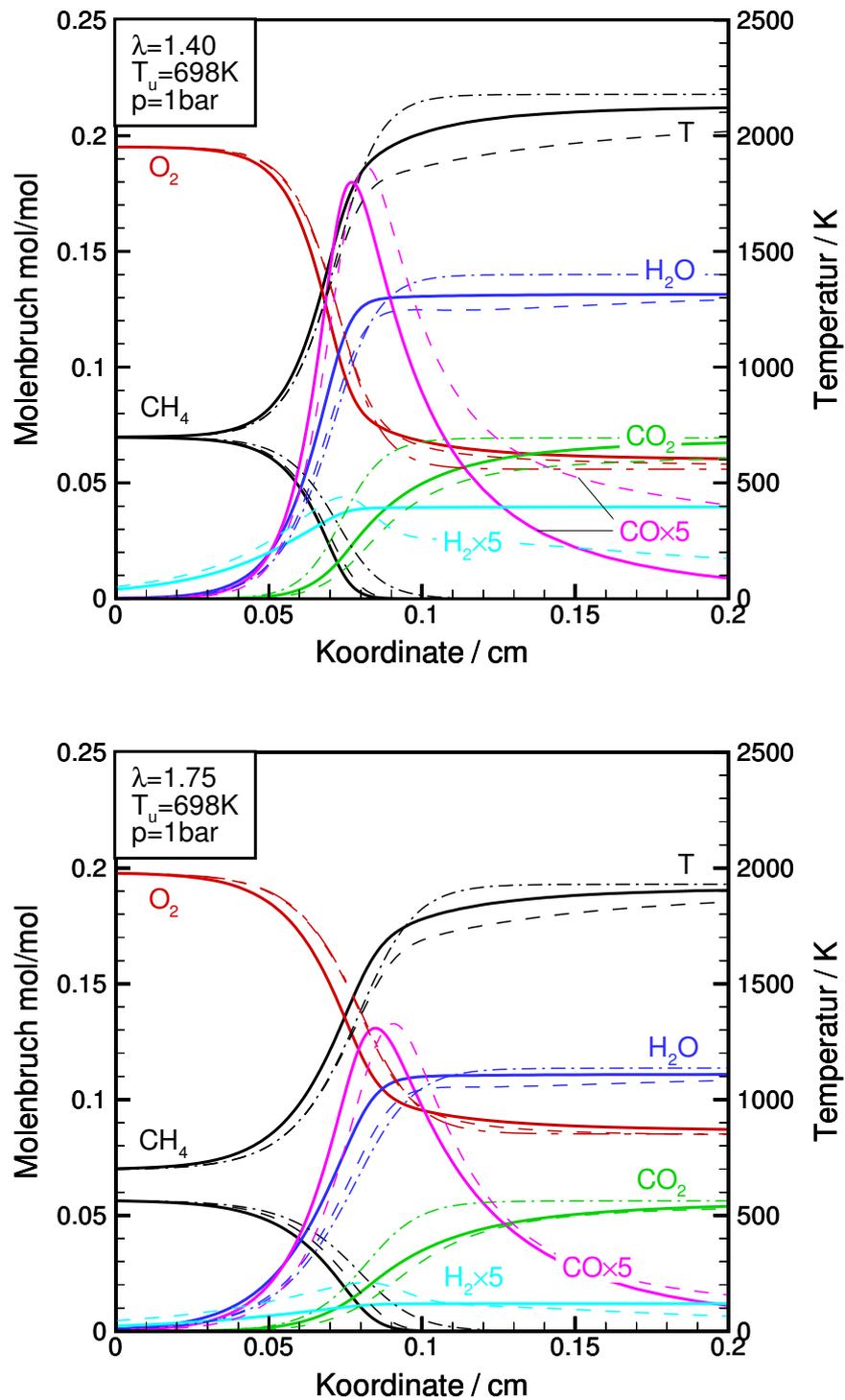


Abbildung 4.12: Vergleich berechneter Temperatur- und Konzentrationsverläufe zweier mageren Methan/Luft Vormischflammen für $T_u = 698\text{K}$ unter Annahme des Wassergasgleichgewichts. Dicke ausgezogene Linie: 2-Bereich-1-Schritt Kinetik, dünne gestrichelte Linie: detaillierter Mechanismus, dünne strichpunktete Linie: Einschrittkinetik.

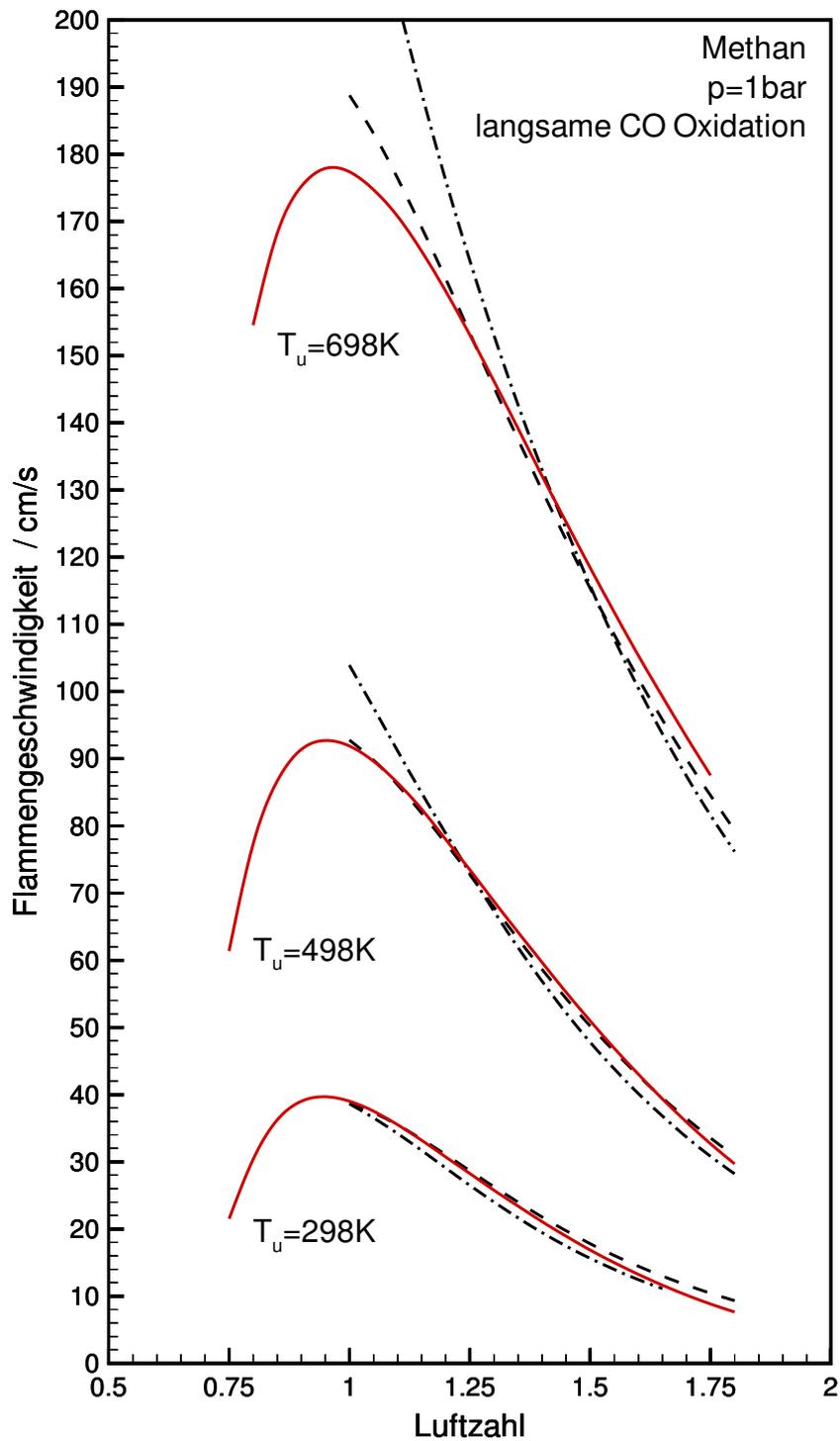


Abbildung 4.13: Vergleich berechneter Flammengeschwindigkeiten von Methan für Vorwärmtemperaturen von 298K, 498K und 698K unter der Annahme langsamer CO-Oxidation. Ausgezogene Linie: detaillierte Kinetik, gestrichelte Linie: 2-Bereich Kinetik mit ν_{O_2} nach Gl.(4.54) und B nach Gl.(4.46), strichpunktierte Linie: 2-Bereich-Kinetik, mit $\nu_{O_2} = -1.5$ und B nach Gl.(4.46).

4.4 Ergebnisse der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik für höhere Kohlenwasserstoffe

Die 2-Bereich-1-Schritt Kinetik wurde ursprünglich mit dem Ziel entwickelt, die Verbrennung komplexer Kohlenwasserstoffgemische wie z. B. Kerosin unter Berücksichtigung stabiler Zwischenprodukte mit Hilfe einer Einschrittkinetik beschreiben zu können. Da für solche Brennstoffe noch keine ausreichend validierten Reaktionsmechanismen wie im Fall des Methans existieren, bleibt als Validierungsgröße nur die Flammengeschwindigkeit, die sich im allgemeinen recht einfach bestimmen läßt. Zur Demonstration der Leistungsfähigkeit des Konzepts der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik wurde dieses daher auf die Brennstoffe Propan und Kerosin angewendet.

4.4.1 Ergebnisse der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik für Propan

Für Propanflammen existieren sowohl Messungen der Flammengeschwindigkeit als auch ein detaillierter Mechanismus von Warnatz [229]. Dieser diente als Referenzmechanismus, an den die Parameter ν_{O_2} , B° und n_1 der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik angepaßt wurden. Die Funktion ν_{O_2} wurde mit der in Abschnitt 4.3.1 beschriebenen Methodik durch homogene Reaktorrechnungen ermittelt:

$$\nu_{O_2} = -4.695 + 1.897 \cdot \exp \left[-\frac{0.0813}{\phi} \right]. \quad (4.56)$$

Die Werte der übrigen Parameter können der Tabelle A.5 im Anhang A.5 entnommen werden.

In Abbildung 4.14 sind die Ergebnisse der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik denen des detaillierten Mechanismus (ausgezogene Linie) und den Experimenten von LINDOW [133] (Symbole) gegenüber gestellt. Um die Flammengeschwindigkeit über den interessierenden Stöchiometriebereich wiedergeben zu können, wurden die Konzentrationen im Ausbrandbereich unter Annahme des Wassergasgleichgewichts berechnet. Die beste Übereinstimmung liefert erwartungsgemäß die 2-Bereich-1-Schritt Kinetik mit ν_{O_2} nach Gleichung (4.56) und B nach Gleichung (4.46), dargestellt durch die gestrichelte Linie. Wird hingegen ein stöchiometrieunabhängiger, konstanter Koeffizient $\nu_{O_2} = -3.5$ angesetzt, treten im Bereich hoher Luftzahlen mäßig große Abweichungen auf. Die vom Referenzmechanismus vorhergesagten magere Verlöschgrenze wird auch durch die 2-Bereich-1-Schritt Kinetik wiedergegeben.

Anzumerken ist, daß die mit dem Referenzmechanismus berechneten Flammengeschwindigkeiten mit ca. 5% von den experimentellen Werten abweichen. Diese Differenz kann daher als Toleranz der Vorhersagegenauigkeit der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik interpretiert werden, die diese sicher einhält.

4.4.2 Ergebnisse der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik für Kerosin

Im Gegensatz zu Propan existieren für Kerosin noch keine detaillierten Reaktionsmechanismen, da dieses ein komplexes Gemisch unterschiedlicher aliphatischer, zyklischer und aromatischer Kohlenwasserstoffe ist. Zudem gibt es für Kerosin keine exakt vorgeschriebene Zusammensetzung sondern nur Vorgaben hinsichtlich des Brennwertes. Aromatische Verbindungen können z. B. in dem Kerosin Jet-A zwischen 7% und 20% enthalten

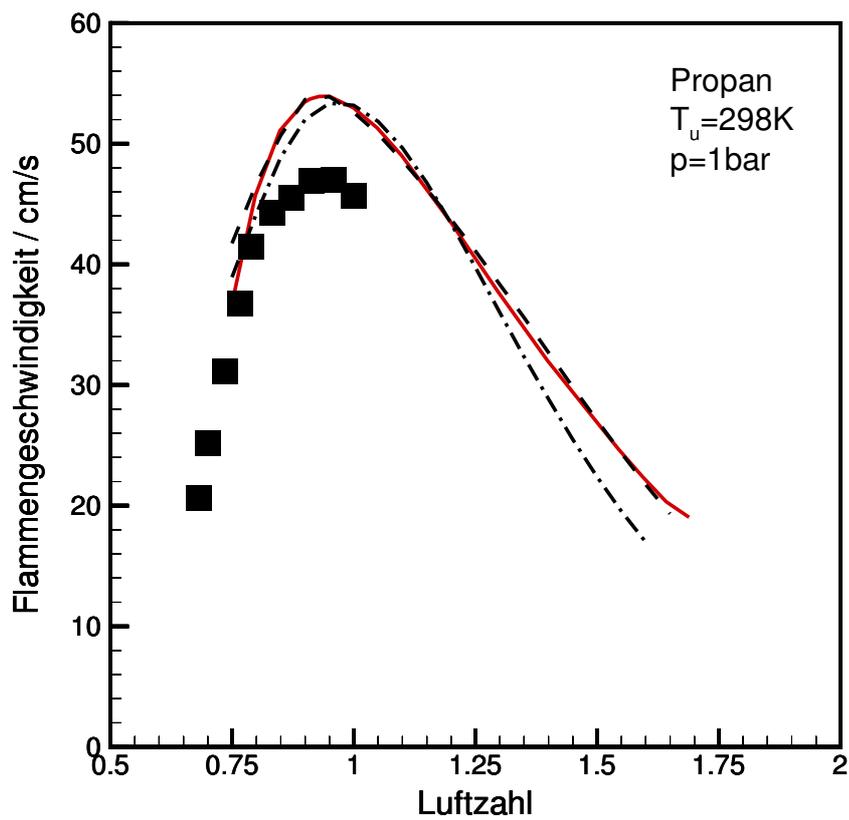


Abbildung 4.14: Vergleich gemessener und berechneter Flammengeschwindigkeiten von Propan für Vorwärmtemperaturen von 298K. Symbole: Experimente von LINDOW [133], ausgezogene Linie: detaillierte Kinetik nach WARNATZ [229], gestrichelte Linie: 2-Bereich Kinetik mit ν_{O_2} nach Gl.(4.56) und B nach Gl.(4.46), strichpunktierte Linie: 2-Bereich-Kinetik, mit $\nu_{\text{O}_2} = -3.5$ und B nach Gl.(4.46).

sein, was sich wiederum auf die innere Flammenstruktur auswirkt. Diese Unspezifiziertheit des Brennstoffs erschwert damit die Entwicklung und Validierung eines detaillierten Mechanismus erheblich. Die Flammengeschwindigkeit als globale Größe der Wärmefreisetzungsgeschwindigkeit ist aber relativ insensitive gegenüber den Zusammensetzungsschwankungen [102], weshalb sie als Validierungsgröße für die 2-Bereich-1-Schritt Kinetik herangezogen werden kann. Am Engler-Bunte-Institut wurden in der Vergangenheit von LAUER [129] die Flammengeschwindigkeiten von vorverdampftem Jet-A bei unterschiedlichen Vorwärmtemperaturen vermessen. Anhand dieser Flammengeschwindigkeiten wurde mit einem als konstant angenommenen stöchiometrischen Koeffizienten von

$$\nu_{\text{JetA}} = -11.5 \quad (4.57)$$

die Parameter B° und n_1 bestimmt. Die Aktivierungstemperatur wurde der einer Einzschrittreaktion von Dekan gleichgesetzt, während die Reaktionsordnungen des kinetischen Ansatzes von Propan übernommen wurden. In Tabelle A.5 im Anhang A.5 findet sich eine Zusammenstellung der kinetischen Parameter. Um den fetten Stöchiometriebereich abdecken zu können, wurde wie im Fall des Propans von der Gültigkeit des Wassergasgleichgewichts ausgegangen.

Abbildung 4.15 vergleicht die mit Hilfe der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik berechneten Flammengeschwindigkeiten mit den experimentell bestimmten für unterschiedliche Vorwärmtemperaturen. Die Übereinstimmung für die dargestellten Vorwärmtemperaturen von 469K, 498K und 534K über den interessierenden Stöchiometriebereich ist durchweg sehr gut. Die Ergebnisse für Kerosin verdeutlichen noch einmal anschaulich das Potential der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik hinsichtlich der Beschreibung des Verbrennungsverlaufs nicht exakt spezifizierter technischer Brennstoffe.

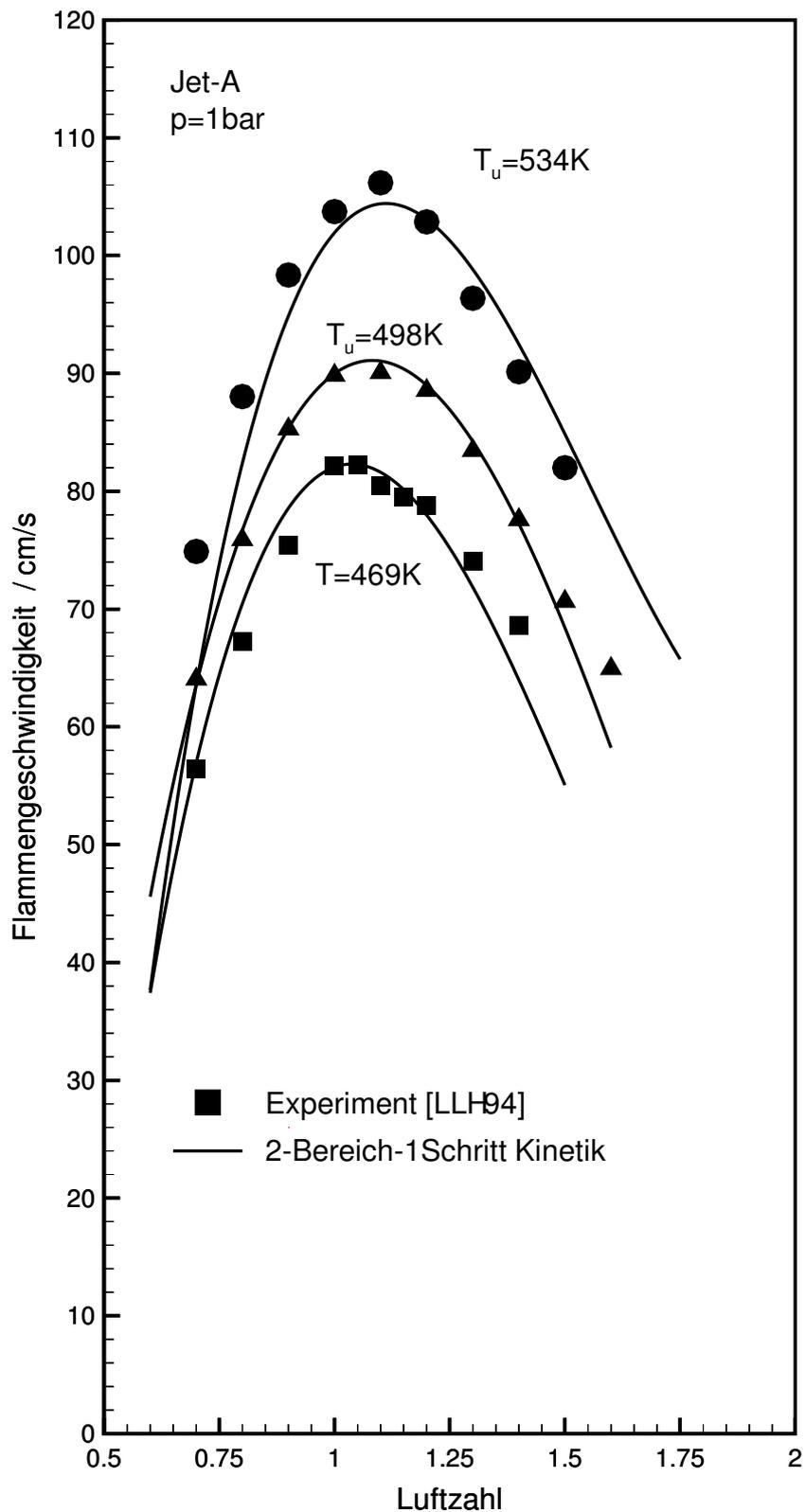


Abbildung 4.15: Vergleich gemessener und berechneter Flammengeschwindigkeiten von Jet-A für Vorwärmtemperaturen von 469K, 498K und 534K. Symbole bezeichnen Experimente von LAUER ET AL. [129], ausgezogene Linien Ergebnisse der 2-Bereich Kinetik.

4.5 Schlußfolgerungen

Im Rahmen dieser Arbeit wurde eine „2-Bereich-1-Schritt Kinetik“ entwickelt, mit deren Hilfe die Verbrennung von Kohlenwasserstoffen auf Basis einer einzigen Reaktionsfortschrittsvariablen beschrieben wird. Im Gegensatz zu gängigen Einschrittreaktionen ist die Kinetik aber auch in der Lage die Konzentrationen der stabilen Zwischenprodukte CO und H₂ wiederzugeben. Hierzu wird der Verbrennungsverlauf in zwei Abschnitte, die Brennstoffabbau- sowie die Ausbrandzone, unterteilt. In diesen beiden Bereichen wird die Kinetik der Verbrennung jeweils mittels einer Einschrittreaktion beschrieben, was somit auch den Namen des Konzepts erklärt. Die Konzentrationen im Ausbrandbereich können entweder über die Annahme des Wassergasgleichgewichts oder die Quasistationaritätsannahme für Wasserstoff berechnet werden. Damit sind auch die Konzentrationen der Radikale H, OH und O einer überschlägigen Berechnung zugänglich, und die Reaktionsgeschwindigkeit der CO/H₂-Oxidation kann mit Hilfe bekannter Elementarreaktionen beschrieben werden. In der Brennstoffabbauzone ist es hingegen nicht möglich, Aussagen über die Radikalkonzentrationen zu treffen, so daß der Verbrennungsverlauf über eine Bruttoreaktion dargestellt werden muß. Zur Beschreibung des Brennstoffabbaus sind daher Angaben hinsichtlich des Frequenzfaktors, der Aktivierungstemperatur und der Reaktionsordnungen erforderlich. Außerdem ist ein stöchiometrischer Koeffizient für den Brennstoffabbau zu bestimmen. Reaktionsordnung und Aktivierungstemperatur sind im Rahmen dieser Arbeit der Literatur entnommen worden, während der stöchiometrische Koeffizient und der Frequenzfaktor an Ergebnisse von Referenzmechanismen oder gemessene Flammgeschwindigkeiten angepaßt wurden.

Das Konzept der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik wurde anhand der Methanverbrennung sowohl in einem homogenen System als auch für eine Vormischflamme erfolgreich validiert. Hierbei zeigte sich, daß die Annahme einer langsamen CO-Oxidation zu einer sehr guten Übereinstimmung der Ergebnisse von detailliertem Referenzmechanismus und der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik für nahestöchiometrische und magere Gemische führt. Allerdings ist die Annahme einer langsamen CO-Oxidation nicht für fette Gemische anwendbar, weshalb in diesem Fall die Verbrennung auf Grundlage des Wassergasgleichgewichts in der Ausbrandzone berechnet werden muß. Auch wenn die Konzentrationsverläufe der Zwischenprodukte nicht so gut wiedergegeben werden, läßt sich die Flammgeschwindigkeit und somit die Wärmefreisetzungsgeschwindigkeit als globales Maß der Flammencharakteristik sehr gut vorhersagen. Im Rahmen dieser Arbeit wurden jedoch ausschließlich stöchiometrische und magere Vormischflammen betrachtet weshalb für die erforderlichen Verbrennungsrechnungen auf die Annahme einer langsamen CO-Oxidation zurückgegriffen werden konnte.

Die wesentliche Annahme der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik ist die scharfe Unterteilung des Reaktionsverlaufs in Brennstoffabbau und Ausbrand der Zwischenprodukte. Über die Annahme des Wassergasgleichgewichts bzw. der Quasistationarität des Wasserstoffs sind dann die Konzentrationen in der Ausbrandzone berechenbar. Wie eine erweiterte RRA Analyse zeigt [47, 203], existiert aber zwischen Brennstoffabbau- und Ausbrandzone ein Bereich, in dem das Wassergasgleichgewicht bzw. die Quasistationarität des Wasserstoffs nur ungenügend erfüllt wird. Diese Zone nimmt mit der Brennstoffkonzentration und steigender Vorwärmtemperatur zu, was eine fehlerhaften Vorhersage der Flammenstruktur und somit auch der Brenngeschwindigkeit durch die 2-Bereich-1-Schritt Kinetik zur Folge hat. Es konnte aber gezeigt werden, daß diese Problematik durch die Einführung eines funktionalen Zusammenhangs für den stöchiometrischen Koeffizienten teilweise korrigiert

werden kann, da durch ihn die Lage der Übergangszone und somit die Flammenstruktur bestimmt wird.

Um das Potential des Konzepts der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik zu demonstrieren, wurde sie neben Methan auch auf höhere Kohlenwasserstoffe, nämlich Propan und Kerosin angewendet. Die 2-Bereich-1-Schritt Kinetik ist insbesondere für technische Brennstoffe wie Kerosin attraktiv, da es für diese noch keine zuverlässigen Reaktionsmechanismen gibt. Der Frequenzfaktor sowie der stöchiometrische Koeffizient lassen sich ohne großen Aufwand anhand gemessener Flammengeschwindigkeiten anpassen. Ergebnis ist eine sehr gute Übereinstimmung zwischen berechneten und gemessenen Flammengeschwindigkeiten über einen weiten Stöchiometrie und Vorwärmtemperaturbereich, die das Konzept vor allem für technische Anwendungen attraktiv macht.

Da die 2-Bereich-1-Schritt Kinetik den vollständigen Reaktionsverlauf und somit auch alle thermodynamischen Größen auf Basis einer einzigen Reaktionsfortschrittsvariablen beschreibt, eignet sie sich hervorragend für das in Kapitel 5 vorgestellte Wahrscheinlichkeitsdichtemodell, welches die Interaktion von Chemie und Turbulenz gekoppelt beschreibt.

Kapitel 5

Verbrennungsmodell auf Basis angenommener Wahrscheinlichkeitsdichten

5.1 Mathematische Grundlagen

Die turbulente Verbrennung ist ebenso wie die turbulente Strömung ein stochastischer Prozess (siehe Kapitel 3.4.1). Deshalb können alle Feldgrößen als stochastische Variablen ϕ betrachtet werden, d. h. als Funktionen der kontinuierlichen Variablen des Ortes \mathbf{x} und der Zeit t . Eine vollständige Beschreibung einer Zufallsvariablen ϕ beinhaltet die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion $\mathcal{P}_\phi(\varphi; \mathbf{x}, t)$ ¹ (PDF, engl.: *Probability Density Function*), die als Ableitung der Verteilungsfunktion $\mathcal{D}_\phi(\varphi; \mathbf{x}, t)$ definiert ist (siehe z. B. [181]):

$$\mathcal{P}_\phi(\varphi) = \frac{d}{d\varphi} \mathcal{D}_\phi(\varphi) . \quad (5.1)$$

Der Zusammenhang zwischen diesen beiden Funktionalen an einem Ort \mathbf{x} ist in Abbildung 5.1 illustriert. Demnach ist die Wahrscheinlichkeit eine Zufallsgröße ϕ innerhalb eines Abstands $d\varphi$ um den Wert φ zu finden gegeben durch

$$\text{Prob}(\varphi \leq \phi \leq \varphi + d\varphi) = \mathcal{P}_\phi(\varphi) d\varphi . \quad (5.2)$$

Dies impliziert die Normalisierungsbedingung der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion, die besagt, daß die Wahrscheinlichkeit einen beliebigen Wert innerhalb des Wertebereichs der Variable ϕ anzutreffen gleich eins ist:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{P}_\phi(\varphi) d\varphi = 1 . \quad (5.3)$$

Der Mittelwert einer beliebigen Funktion der Zufallsgröße $\phi(\mathbf{x}, t)$, $\overline{Q(\phi; \mathbf{x}, t)}$, ist das so genannte Zentralmoment der Zufallsgröße um den Wert null, das auch als Erwartungswert bezeichnet wird:

$$\overline{Q(\phi)} = \int_{-\infty}^{\infty} Q(\varphi) \mathcal{P}_\phi(\varphi) d\varphi . \quad (5.4)$$

¹Die Wahrscheinlichkeitsdichte $\mathcal{P}(\varphi; \mathbf{x}, t)$ ist eine Feldgröße, die vom Ort \mathbf{x} und der Zeit t abhängt. Der Übersichtlichkeit wegen wird in den folgenden Gleichungen aber auf diese Kennzeichnung verzichtet.

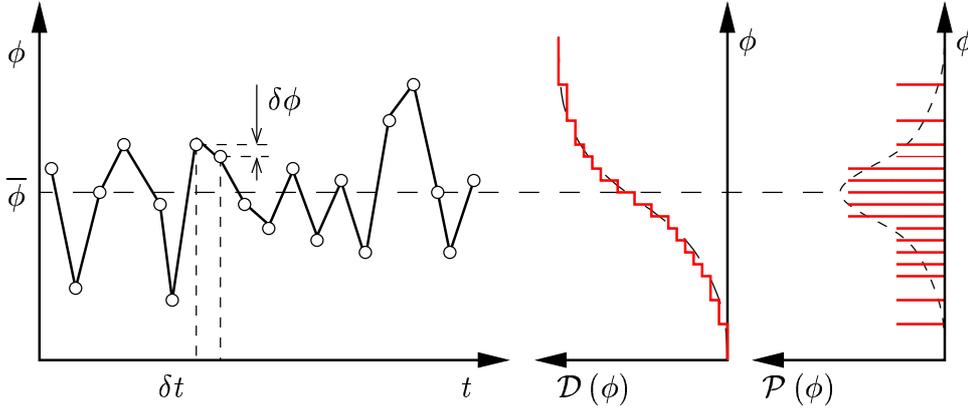


Abbildung 5.1: Zur Definition der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion.

Da für den zeitlichen Mittelwert der Fluktuation $\overline{\phi'} = 0$ gilt, kann dieser nicht zur Charakterisierung der in der Strömung auftretenden Schwankungen eingesetzt werden. Hierfür wird deshalb das zweite zentrale Moment, die so genannte Varianz eingeführt:

$$\begin{aligned} \overline{Q'^2(\phi)} &= \int_{-\infty}^{\infty} \left(Q(\varphi) - \overline{Q(\phi)} \right)^2 \mathcal{P}_{\phi}(\varphi) d\varphi \\ &= \overline{Q^2(\phi)} - \overline{Q(\phi)}^2. \end{aligned} \quad (5.5)$$

Die Quadratwurzel der Varianz wird als Standardabweichung

$$\overline{Q'^2(\phi)}^{1/2} = Q(\phi)_{\text{R.M.S.}} \quad (5.6)$$

oder auch als R.M.S-Wert (*engl.: Root Mean Square*) bezeichnet. Bei Kenntnis der PDF können Momente beliebiger Ordnung bestimmt werden. Es ist umgekehrt jedoch nicht möglich die PDF selbst bei Kenntnis aller Momente vollständig zu rekonstruieren [181].

Ist eine Funktion Q von mehreren stochastischen Variablen abhängig, kann eine multivariable PDF, eine so genannte Verbundwahrscheinlichkeitsdichte (JPDF, *engl.: Joint Probability Density Function*) eingeführt werden. Die JPDF von zwei Zufallsgrößen $\phi(\mathbf{x}, t)$ und $\chi(\mathbf{x}, t)$ ist definiert durch

$$\mathcal{P}_{\phi,\chi}(\varphi, \psi) = \frac{d}{d\varphi d\psi} \mathcal{D}_{\phi,\chi}(\varphi, \psi). \quad (5.7)$$

Sowohl die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion $\mathcal{P}_{\phi,\chi}(\varphi, \psi)$ als auch die Verteilungsfunktion $\mathcal{D}_{\phi,\chi}(\varphi, \psi)$ sind im zweidimensionalen Zustandsraum $\varphi - \psi$ definiert. Demnach ist die Wahrscheinlichkeit, ein Ereignis innerhalb des Bereiches $d\varphi d\psi$ um den Punkt (φ, ψ) zu finden, gegeben durch

$$\text{Prob}(\varphi \leq \phi \leq \varphi + d\varphi, \psi \leq \chi \leq \psi + d\psi) = \mathcal{P}_{\phi,\chi}(\varphi, \psi) d\varphi d\psi. \quad (5.8)$$

Der Mittelwert einer Feldgröße $Q(\phi, \psi, \mathbf{x}, t)$ berechnet sich analog zu Gleichung (5.4) gemäß

$$\overline{Q(\phi, \chi)} = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} Q(\varphi, \psi) \mathcal{P}_{\phi,\chi}(\varphi, \psi) d\varphi d\psi. \quad (5.9)$$

Für die Varianz gilt folglich

$$\overline{Q'^2(\phi, \chi)} = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \left(Q(\varphi, \psi) - \overline{Q(\phi, \chi)} \right)^2 \mathcal{P}_{\phi, \chi}(\varphi, \psi) d\varphi d\psi. \quad (5.10)$$

Falls die zwei Zufallsgrößen $\phi(\mathbf{x}, t)$ und $\chi(\mathbf{x}, t)$ nicht korreliert, d. h. statistisch voneinander unabhängig sind, kann die Verbundwahrscheinlichkeitsdichte als Produkt der Einzelwahrscheinlichkeitsdichten $\mathcal{P}_{\phi}(\varphi)$ und $\mathcal{P}_{\chi}(\psi)$ dargestellt werden:

$$\mathcal{P}_{\phi, \chi}(\varphi, \psi) = \mathcal{P}_{\phi}(\varphi) \cdot \mathcal{P}_{\chi}(\psi). \quad (5.11)$$

Die Annahme statistischer Unabhängigkeit bildet häufig die Grundlage für die Modellierung von turbulenten Verbrennungsvorgängen mit Hilfe angenommener Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen. Der Grund ist jedoch nicht die Gültigkeit der Annahme, deren experimentelle Verifizierung sehr aufwendig ist, sondern mangelhafte Informationen über die Form der Verbundwahrscheinlichkeitsdichtefunktion aufgrund fehlender Experimente. Im Gegensatz dazu sind Einzelwahrscheinlichkeitsdichten, insbesondere von passiven Skalaren, deutlich einfacher zu messen, weshalb PDF-Modelle häufig auf Gleichung (5.11) zurückgreifen.

Die Verbundwahrscheinlichkeitsdichte kann immer in ihre Einzelwahrscheinlichkeitsdichte zerlegt werden, indem der Einfluß von nur einer Zufallsgröße betrachtet wird

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{P}_{\phi, \chi}(\varphi, \psi) d\psi = \mathcal{P}_{\phi}(\varphi). \quad (5.12)$$

Da die obige Gleichung einer Projektion der JPDF auf einen Unterraum (Marginale), in diesem Fall die ψ -Achse, darstellt, wird $\mathcal{P}_{\phi}(\varphi)$ auch als marginale PDF bezeichnet.

Oftmals ist es ausreichend, anstelle des gesamten Zustandsraumes der JPDF nur einen Unterraum zu betrachten, in dem eine der Zufallsvariablen einen bestimmten Wert annimmt. Da die Wahrscheinlichkeit diese Randbedingung erfüllen muß, spricht man in diesem Zusammenhang auch von konditionierten Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen. Demnach beschreibt $\mathcal{P}(\phi|\psi^+)d\varphi$ die Wahrscheinlichkeit, daß sich $\phi(\mathbf{x}, t)$ innerhalb des Abstands $d\varphi$ vom Wert φ befindet, während $\chi(\mathbf{x}, t)$ den Wert ψ^+ annimmt. Konditionierte Mittelwerte bzw. Momente können in der gleichen Art und Weise ausgewertet werden wie unkonditionierte PDFs, da beide die gleichen Eigenschaften besitzen.

Die in turbulenten reagierenden Strömungen auftretenden Dichteänderungen erfordern eine Behandlung der Dichte als eine statistische Variable. Um ungeschlossene Terme, die Informationen über Dichtefluktuationen benötigen, zu vermeiden, wurde in Kapitel 2.3 die dichtegewichtete Mittelung nach FAVRE eingeführt. In der gleichen Art und Weise läßt sich nach einem Vorschlag von BILGER [14] unter Ausnutzung von Gleichung (5.12) eine dichtegewichtete Wahrscheinlichkeitsdichte $\tilde{\mathcal{P}}$ definieren

$$\tilde{\mathcal{P}}_{\phi}(\varphi) = \frac{1}{\bar{\rho}} \int_0^{\infty} \rho \mathcal{P}_{\rho, \phi}(\rho, \varphi) d\rho, \quad (5.13)$$

wobei die zeitlich mittlere Dichte aus der Favre-PDF zu

$$\frac{1}{\bar{\rho}} = \int_0^{\infty} \frac{1}{\rho} \tilde{\mathcal{P}}_{\phi}(\varphi) d\varphi \quad (5.14)$$

bestimmt werden kann. Die dichtegewichteten Mittelwerte und Varianzen lassen sich wie bei reiner zeitlicher Mittelung berechnen

$$\widetilde{Q}(\phi) = \int_{-\infty}^{\infty} Q(\varphi) \widetilde{\mathcal{P}}_{\phi}(\varphi) d\varphi \quad (5.15)$$

$$\widetilde{Q}''^2(\phi) = \int_{-\infty}^{\infty} (Q(\varphi) - \widetilde{Q}(\phi))^2 \widetilde{\mathcal{P}}_{\phi}(\varphi) d\varphi, \quad (5.16)$$

während reynoldsgemittelte Größen über

$$\overline{Q(\phi)} = \bar{\rho} \int_0^{\infty} \frac{Q(\varphi)}{\rho} \widetilde{\mathcal{P}}_{\phi}(\varphi) d\varphi \quad (5.17)$$

ausgewertet werden können. Ansonsten gelten für die dichtegewichteten PDFs die gleichen Rechenregeln wie für eine rein zeitgemittelte PDF. BILGER [15] postuliert, daß dichtegewichtete PDFs in dichtevariablen Strömungen in der gleichen Art und Weise modelliert werden können wie zeitgemittelte PDFs in dichtekonstanten Strömungen. Wie in Kapitel 2.3 bereits erläutert wurde, ist die Definition von dichtegewichteten Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen zur Beschreibung turbulenter reagierender Strömungen deshalb besonders vorteilhaft, da ihre Parameter durch favregemittelte Momente bestimmt werden.

5.2 Schließung des Reaktionsquellterms und Bestimmung der zeitlich mittleren Feldgrößen

Ist die Verbundwahrscheinlichkeitsdichte bekannt, kann der zeitlich mittlere Reaktionsquellterm durch die folgende allgemeingültige Rechenvorschrift bestimmt werden:

$$\bar{w}_k = \int_0^1 \dots \int_0^1 \frac{\dot{w}_k(p, T, \mathbf{Y})}{\rho(p, T, \mathbf{Y})} \tilde{\mathcal{P}}_{p, T, \mathbf{Y}}(p, T, \mathbf{Y}) dp dT dY_1 \dots dY_{N_k}. \quad (5.18)$$

Diese Schließbedingung ist zwar prinzipiell durchführbar, scheitert in der Praxis aber an dem erforderlichen Berechnungsaufwand zur Bestimmung der PDF. Deshalb kommen in allen zur Zeit verwendeten Verbrennungsmodellen, die auf Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen basieren, reduzierte Mechanismen zum Einsatz. Damit kann die Anzahl der Zustandsgrößen und damit die Dimensionalität der PDF drastisch reduziert werden. Ein Ziel dieser Arbeit war deshalb die Entwicklung des in Kapitel 4 vorgestellten Konzepts der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik, das den Reaktionsverlauf und den thermodynamischen Zustand mit Hilfe einer einzigen Reaktionsfortschrittsvariablen beschreiben kann. Damit vereinfacht sich Gleichung (5.18) erheblich, und der zeitlich mittlere Reaktionsquellterm kann mit Hilfe einer eindimensionalen PDF ermittelt werden (siehe auch Kapitel 3.4.1):

$$\bar{w}_c = \int_0^1 \frac{\dot{w}_c(c)}{\rho(c)} \tilde{\mathcal{P}}_c(c) dc. \quad (5.19)$$

Im Rahmen dieser Arbeit wird die gesuchte PDF nicht mit Hilfe einer Transportgleichung, sondern mittels einer angenommenen Verteilungsfunktion (engl.: *presumed pdf*) bestimmt, deren Parameter durch Momente der Reaktionsfortschrittsvariablen gegeben sind.

In der Literatur werden unterschiedliche generische Formen der PDF vorgeschlagen, unter denen die β -Funktion und die abgeschnittene Gaußverteilung zu den erfolgreichsten zählen. Die Form beider Funktionen ist durch je zwei Parameter festgelegt, für die die Gleichungen (5.15) und (5.16) ein geschlossenes Gleichungssystem darstellen. Dies erlaubt bei bekanntem Mittelwert \tilde{c} und bekannter Varianz \tilde{c}''^2 die Parameter der PDF aus

$$\tilde{c} = \int_{-\infty}^{\infty} c \tilde{\mathcal{P}}_c(c) dc \quad (5.20)$$

und

$$\tilde{c}''^2 = \int_{-\infty}^{\infty} (c - \tilde{c})^2 \tilde{\mathcal{P}}_c(c) dc \quad (5.21)$$

zu bestimmen. Für diese beiden Größen werden daher die beiden folgenden Transportgleichungen gelöst:

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{c})}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \tilde{c}) = \nabla \cdot \left(\bar{\rho} \frac{\nu_t}{S_{c_c}} \nabla \tilde{c} \right) + \bar{w}_c \quad (5.22)$$

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{c}''^2)}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \tilde{c}''^2) = \nabla \cdot \left(\bar{\rho} \frac{\nu_t}{S_{c_c''^2}} \nabla \tilde{c}''^2 \right) + 2\bar{\rho} \frac{\nu_t}{S_{c_P}} (\nabla \tilde{c})^2 - \frac{1}{t_x} \bar{\rho} \tilde{c}''^2 + 2\bar{w}_c c''^2. \quad (5.23)$$

Die Transportgleichung für die Varianz (5.23) beruht auf folgenden Annahmen: Der Einfluß der molekularen Diffusion ist gegenüber dem turbulenten Transport vernachlässigbar,

welcher ebenso wie der Produktionsterm $\overline{\rho \mathbf{u}'' c'' \cdot \nabla \tilde{c}}$ über einen Gradientenansatz modelliert wird. Die skalare Dissipationsrate $\overline{\rho \chi_c} = \overline{\rho D \nabla c'' \cdot \nabla c''}$ wird über eine lineare Relaxationsannahme mit dem turbulenten Mischungszeitmaß t_χ verknüpft (siehe Kapitel 3.4.2). Dieses Mischungszeitmaß kann über zwei Grenzfälle abgeschätzt werden: Der Zerfallszeit der großskaligen Wirbel

$$t_\chi = t_t = \frac{1}{C_{K_t}} \frac{\tilde{k}}{\tilde{\varepsilon}}, \quad (5.24)$$

welche eine obere Abschätzung darstellt, oder der Zerfallszeit der dissipativen Wirbelstrukturen

$$t_\chi = t_\eta = \frac{1}{C_{K_\eta}} \frac{1}{\sqrt{\tilde{\varepsilon} \nu}}, \quad (5.25)$$

welche den unteren Grenzfall beschreibt. Beide Modelle wurden im Rahmen dieser Arbeit untersucht und werden im Ergebnisteil ausführlich diskutiert.

Der Reaktionsquellterm in der Varianzgleichung (5.23)

$$\overline{\dot{w}_c c''} = \int_0^1 \frac{\dot{w}_c(c)}{\rho(c)} (c - \tilde{c}) \tilde{\mathcal{P}}_c(c) dc \quad (5.26)$$

spiegelt den Einfluß des chemischen Umsatzes auf die Varianz des Reaktionsfortschritts wieder. Auf der dem Frischgemisch zugewandten Seite wirkt $\overline{\dot{w}_c c''}$ als Quellterm, da die chemische Reaktion Gradienten erzeugt und somit die Varianz erhöht. Auf der dem Rauchgas zugewandten Seite hingegen kommt es zu einer Annäherung des Reaktionsfortschritts an seinem Gleichgewichtswert, was sich in einem Abbau der Varianz äußert. Einen Eindruck über die Abhängigkeit der beiden Reaktionsquellterme $\overline{\dot{w}_c}/\overline{\rho}$ und $\overline{\dot{w}_c c''}/\overline{\rho}$ vom Mittelwert \tilde{c} und der Varianz des \tilde{c}''^2 der Reaktionsfortschrittsvariable vermittelt Abbildung 5.2.

Die modellierte Gleichung (5.23) besitzt zwei zusätzliche Parameter in Form der turbulenten Schmidtzahl $Sc_{t,P}$ des Produktionsterms sowie der Modellkonstante C_D des Dissipationsterms. Wird die Schmidtzahl des Produktionsterms gleich der Schmidtzahl des turbulenten Transportterms gesetzt, d. h. $Sc_{t,P} = Sc_{t,\tilde{c}''^2}$, dann verbleibt der Parameter C_{K_t} bzw. C_{K_η} als einzige zu bestimmende Größe. Für diese werden in der Literatur Werte von $C_{K_t} = 1 - 11$ bzw. $C_{K_\eta} = 0.28$ vorgeschlagen (siehe z. B. [218, 107, 241]).

Um die FANS-Gleichungen sowie die Transportgleichungen für den Mittelwert und die Varianz des Reaktionsfortschritts lösen zu können, sind noch Informationen über die zeitlich mittlere Massendichte erforderlich. Außerdem werden zur Berechnung der molekularen Viskosität (2.35) Informationen über die Temperatur benötigt. Die mittlere Dichte ist nach Gleichung (5.14) über

$$\frac{1}{\overline{\rho}} = \int_0^1 \frac{1}{\rho(c)} \tilde{\mathcal{P}}_c(c) dc \quad (5.27)$$

berechenbar, während jede beliebige favregemittelte Feldgröße $\tilde{\phi}$, wie die Temperatur T oder der Massenbruch Y_k , gemäß Gleichung (5.15) über

$$\tilde{\phi} = \int_0^1 \phi(c) \tilde{\mathcal{P}}_c(c) dc \quad (5.28)$$

ausgewertet werden kann.

Das Gleichungssystem (5.19)–(5.28) konstituiert das Verbrennungsmodell auf Basis einer angenommenen Wahrscheinlichkeitsdichte $\tilde{\mathcal{P}}_c(c)$. Sie beinhaltet in diesem Modell alle

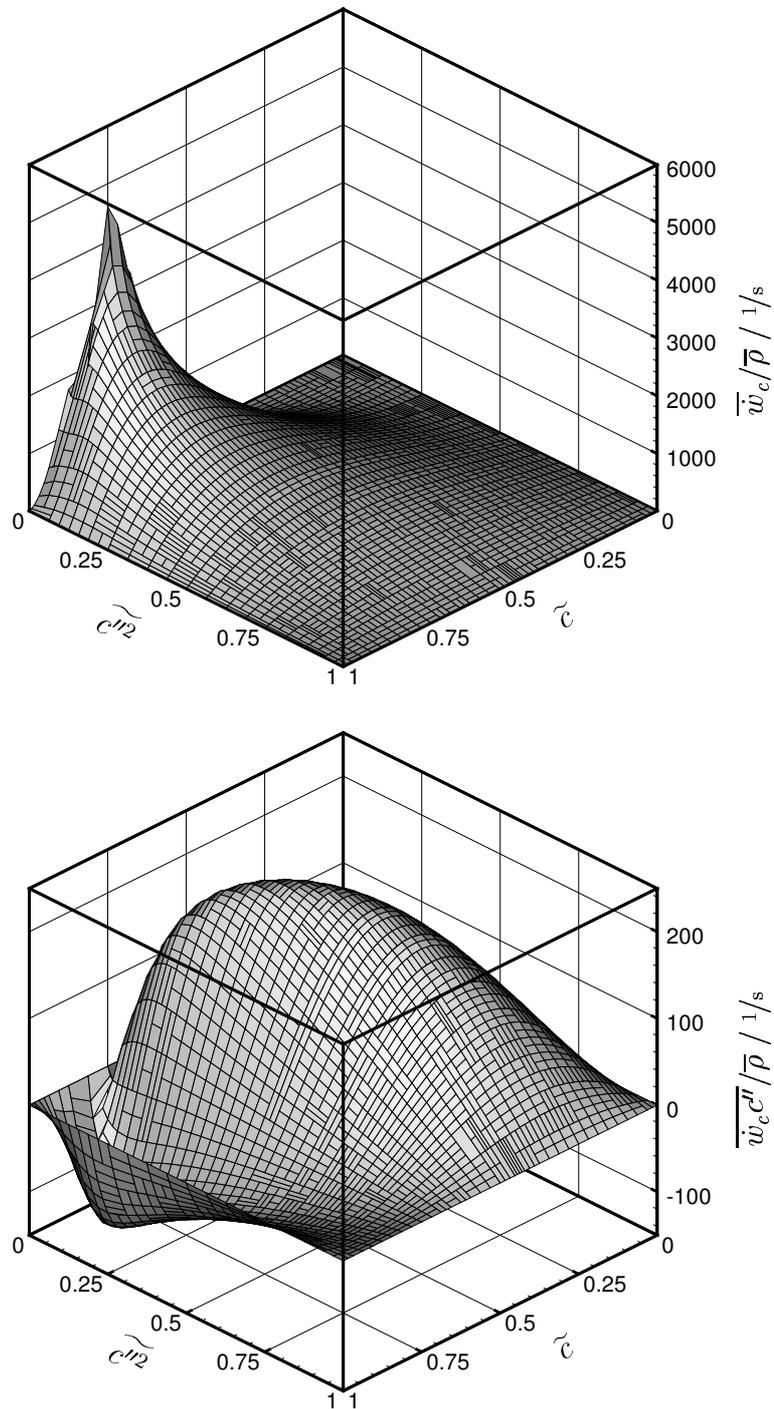


Abbildung 5.2: Abhängigkeit der Reaktionsquellterme $\overline{\dot{w}_c}/\bar{\rho}$ und $\overline{\dot{w}_c c''}/\bar{\rho}$ vom Mittelwert \tilde{c} und Varianz \tilde{c}'' der Reaktionsfortschrittsvariable. Dargestellt sind die zeitlich mittleren Quellterme für ein mageres Methan/Luft Gemisch ($\lambda = 1.25$, $T_0 = 298K$, $p = 1bar$). Für die Verteilung des Reaktionsfortschritts wurde eine β -Funktion angenommen.

Informationen über die Interaktion von Turbulenz und Chemie in Form ihrer Verteilung als Funktion zweier Parameter, dem Mittelwert und der Varianz des Reaktionsfortschritts. Die im Rahmen dieser Arbeit eingesetzten Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen werden im nächsten Abschnitt vorgestellt.

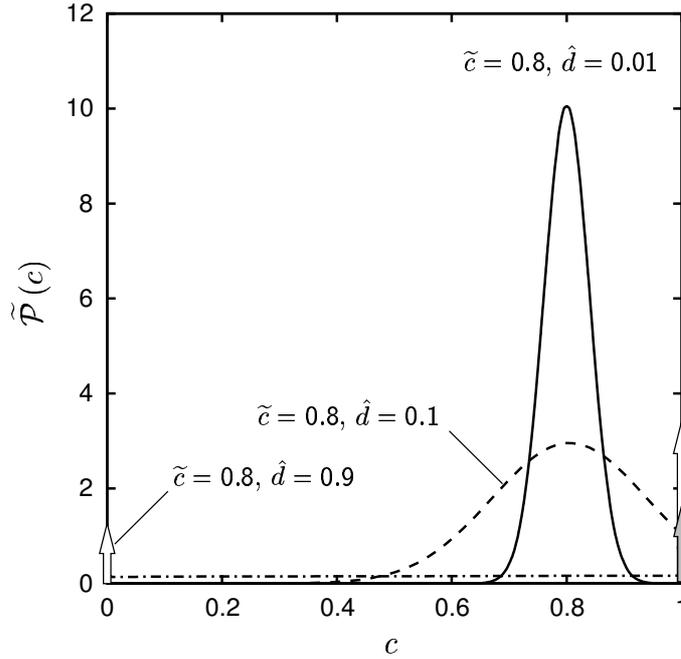


Abbildung 5.4: Beispiele für Verteilungen, die durch die abgeschnittene Gaußfunktion dargestellt werden können.

eines binären Suchalgorithmus berechnet, und die Ergebnisse einer Tabelle abgelegt. Die Auflösung der Tabelle wurde dabei so gewählt, daß der Fehler, der durch eine lineare Interpolation entsteht, kleiner als 1% ist. Die aus dem Verfahren resultierende Tabelle ist in Abbildung 5.5 dargestellt.

Die beiden Parameter \mathcal{A}_c und \mathcal{B}_c sind definiert durch [44]

$$\mathcal{A}_c = \int_{-\infty}^0 \mathcal{G}(c) dc = \frac{1}{2} \left[1 - \operatorname{erf} \left(\frac{c_\mu}{\sqrt{2}c_\sigma} \right) \right] \quad (5.31)$$

$$\mathcal{B}_c = \int_{-\infty}^0 \mathcal{G}(c) dc = \frac{1}{2} \left[1 - \operatorname{erf} \left(\frac{1 - c_\mu}{\sqrt{2}c_\sigma} \right) \right]. \quad (5.32)$$

Die Normalisierungskonstante \mathcal{C}_c ergibt sich damit zu

$$\mathcal{C}_c = \frac{2(1 - \mathcal{A}_c - \mathcal{B}_c)}{\operatorname{erf} [c_\mu/\sqrt{2}c_\sigma] + \operatorname{erf} [(1 - c_\mu)/\sqrt{2}c_\sigma]}. \quad (5.33)$$

Abbildung 5.4 zeigt Beispiele für Verteilungen der abgeschnittene Gaußfunktion, wobei der Parameter $\hat{d} \equiv \tilde{c}^{\prime 2}/(\tilde{c}(1 - \tilde{c}))$ die normierte Varianz bezeichnet.

5.3.2 β -Funktion

Eine weitere, oft angewendete Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion ist die β -Funktion. Sie besitzt wie die abgeschnittene Gaußverteilung zwei Parameter und ist durch

$$\mathcal{P}(c) = \frac{c^{c_a-1} (1-c)^{c_b-1}}{\int_0^1 c^{c_a-1} (1-c)^{c_b-1} dc} = c^{c_a-1} (1-c)^{c_b-1} \frac{\Gamma(c_a + c_b)}{\Gamma(c_a) \Gamma(c_b)} \quad (5.34)$$

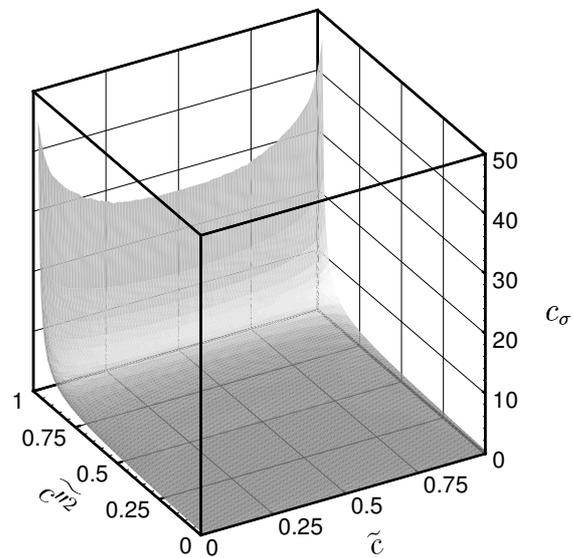
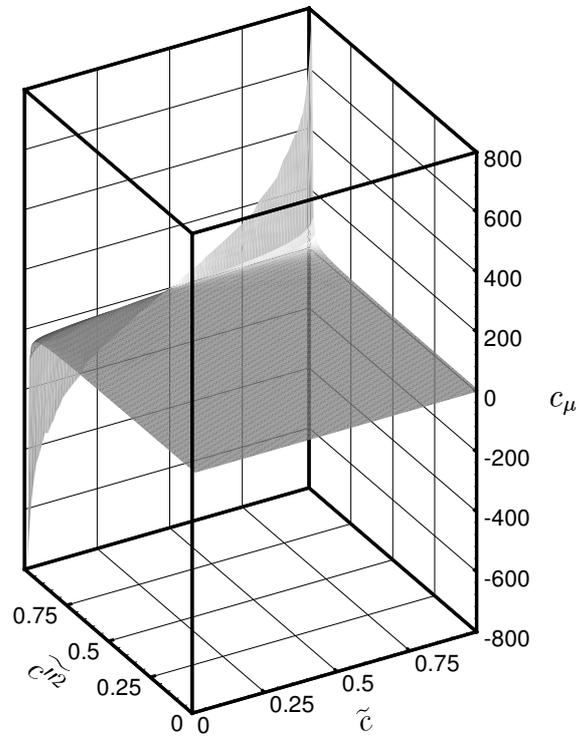


Abbildung 5.5: Funktionaler Zusammenhang zwischen Mittelwert \tilde{c} und Varianz \tilde{c}^2 sowie den Parametern der Gaußfunktion c_μ und c_σ .

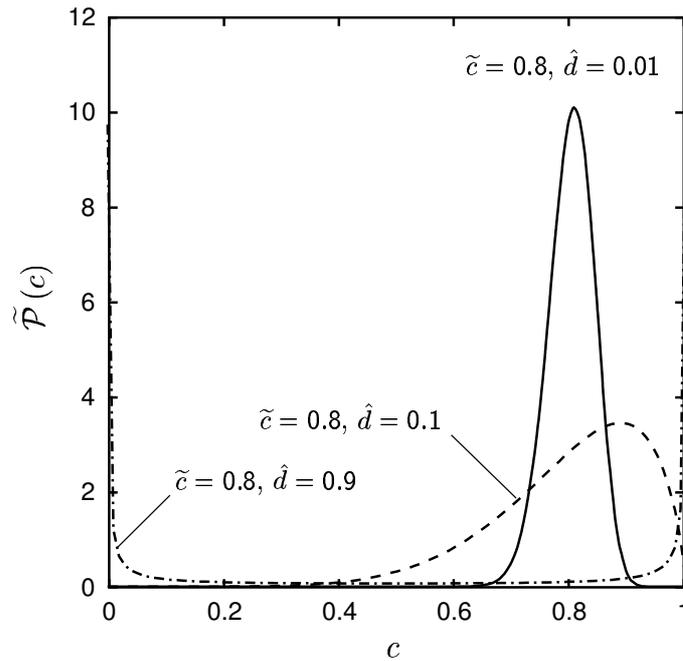


Abbildung 5.6: Beispiele für Verteilungen, die durch die β -Funktion dargestellt werden können.

definiert. Die beiden Parameter c_a und c_b sind mit dem Mittelwert \tilde{c} und der Varianz $\widetilde{c'^2}$ über

$$c_a = \tilde{c} \left(\frac{\tilde{c}(1 - \tilde{c})}{\widetilde{c'^2}} - 1 \right) \quad (5.35)$$

und

$$c_b = (1 - \tilde{c}) \left(\frac{\tilde{c}(1 - \tilde{c})}{\widetilde{c'^2}} - 1 \right) \quad (5.36)$$

verknüpft. Die β -Funktion hat den Definitionsbereich $[0 : 1]$ und ist in der Lage unterschiedlichste Verteilungsformen abzubilden. Sie ist im Gegensatz zur abgeschnittenen Gaußverteilung auch in der Lage asymmetrische sowie bimodale Verteilungen abzubilden. Die Abbildung 5.6 zeigt darstellbare Verteilungen der β -Funktion.

5.4 Mischungsmodell

Die Anwendung des in Kapitel 5.2 vorgestellten Wahrscheinlichkeitsdichtemodells setzt neben einer geeigneten 1-Schritt Kinetik ein adiabates System mit konstanter Elementzusammensetzung, d. h. einem konstanten Mischungsbruch voraus. Diese Bedingung wird nur von ideal vorgemischten Systemen erfüllt. Die in der vorliegenden Arbeit untersuchten Freistrahlfammen brennen aber in die freie Umgebung und saugen dabei kalte Luft an. Das Verbrennungsmodell muß daher um ein geeignetes Mischungsmodell erweitert werden, um diesen Mischungsvorgang beschreiben zu können.

In einem isobaren, adiabaten System, in dem keine Wärmeverluste aufgrund von Reibung, Wärmestrahlung oder Wärmeleitung an die Brennerdüse auftreten, besitzen die Erhaltungsgleichung der Enthalpie (2.7) und des Mischungsbruchs (2.11) unter Voraussetzung konstanter Lewiszahlen die gleiche Form. Die Enthalpie ist dann eine eindeutige Funktion des Mischungsbruchs, während die Temperatur eine Funktion der Enthalpie und der Zusammensetzung, d. h. des Mischungsbruchs f und der Reaktionsfortschrittsvariable c ist [34, 238]. Der Mittelwert einer beliebigen thermo-chemische Variable ϕ , der nach Gleichung (5.15) durch die allgemeine Beziehung

$$\tilde{\phi} = \int_0^1 \dots \int_0^1 \int_0^\infty \int_0^\infty \phi(p, T, \mathbf{Y}) \tilde{\mathcal{P}}_{p,T,\mathbf{Y}}(p, T, \mathbf{Y}) dpdTd\mathbf{Y} \quad (5.37)$$

gegeben ist, reduziert sich somit auf

$$\tilde{\phi} = \int_0^1 \int_0^1 \phi(c, f) \tilde{\mathcal{P}}_{c,f}(c, f) dcdf. \quad (5.38)$$

Kann weiterhin eine statistische Unabhängigkeit von Reaktionsfortschritt und Mischungsbruch angenommen werden, läßt sich die noch unbekannt Verbundwahrscheinlichkeitsdichte $\tilde{\mathcal{P}}_{c,f}$ in ihre marginalen Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen zerlegen:

$$\tilde{\mathcal{P}}_{c,f} = \tilde{\mathcal{P}}_c \cdot \tilde{\mathcal{P}}_f. \quad (5.39)$$

Damit Gleichung (5.38) ausgewertet werden kann, muß ϕ als Funktion von c und f ausgedrückt werden, und entweder die Verbundwahrscheinlichkeitsdichte $\tilde{\mathcal{P}}_{c,f}$ oder ihre marginalen Wahrscheinlichkeitsdichten bekannt sein. Da im Rahmen dieser Arbeit statistische Unabhängigkeit von c und f vorausgesetzt und von angenommen Verteilungen ausgegangen wird, ist der Mittelwert $\tilde{\phi}$ eine Funktion der Mittelwerte und Varianzen von Reaktionsfortschritt bzw. Mischungsbruch, d. h. \tilde{c} , \tilde{f} , \tilde{c}''^2 und \tilde{f}''^2 . Prinzipiell erlaubt diese Betrachtungsweise unter den getroffenen Annahmen die Simulation beliebiger Flammentypen. Anwendungen dieses Modellierungsansatzes unter Verwendung der in Kapitel 4 vorgestellten Kinetik auf technisch relevante Systeme, wie z. B. Fluggasturbinen, finden sich in den Arbeiten von HOFFMANN ET AL. [104, 103, 101]. Die Auswertung von Gleichung (5.38) kann entweder über Integration während der Strömungsberechnung oder Tabellierung von $\tilde{\phi}$ als Funktion von \tilde{c} , \tilde{f} , \tilde{c}''^2 und \tilde{f}''^2 erfolgen. Diese Vorgehensweise ist mit einem erheblichen numerischen Aufwand verbunden, der sich aber im Fall der im Rahmen dieser Arbeiten betrachteten Vormischflammen deutlich reduzieren läßt.

Eine Betrachtung der turbulenten Flammenfronten der untersuchten Freistrahlfammen ergibt, daß der Hauptumsatz beim Mischungszustand des Frischgemischs, d. h. $f = f_R = 1$ stattfindet. Die im Außenbereich zuströmende Umgebungsluft mischt somit fast

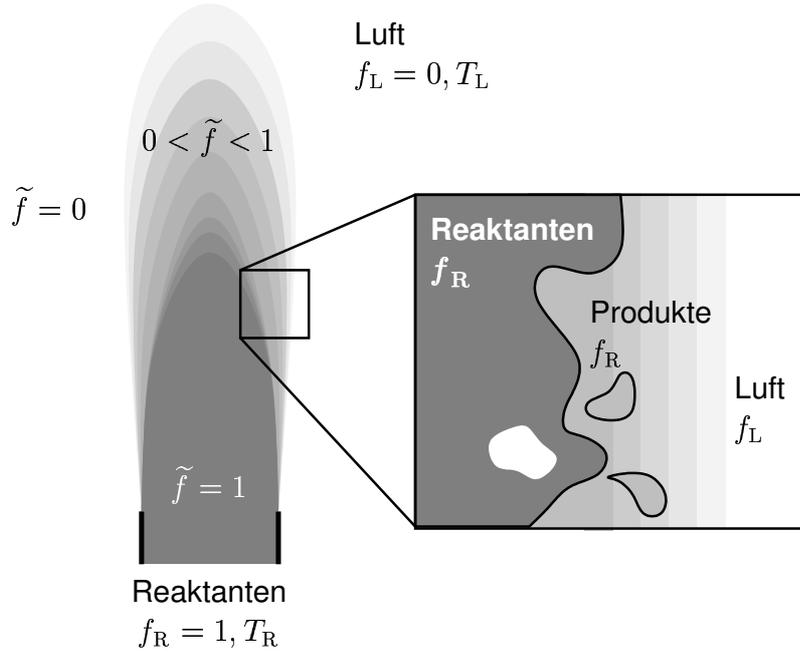


Abbildung 5.7: Schematische Darstellung des zeitlich mittleren Mischungsfelds sowie der momentanen Struktur einer turbulenten Vormischflamme.

ausschließlich mit den Rauchgasen bzw. nicht umgesetztem Frischgemisch. Das zeitlich mittlere Mischungsfeld sowie die momentane Struktur einer turbulenten vorgemischten Freistrahlfamme ist schematisch in Abbildung 5.7 dargestellt.

Die Verbundwahrscheinlichkeitsdichte, die dieses System abbildet, kann durch die folgende Gleichung beschrieben werden:

$$\tilde{\mathcal{P}}_{c,f}(c, f) = \tilde{\mathcal{P}}_c(c) \cdot \tilde{\mathcal{P}}_f(f) = \delta(c) \mathcal{A}_f \delta(f) + \tilde{\mathcal{P}}_c(c) \mathcal{B}_f \delta(1-f) = \delta(c) \left((1-\tilde{f}) \delta(f) + \tilde{\mathcal{P}}_c(c) \tilde{f} \delta(1-f) \right). \quad (5.40)$$

\mathcal{A}_f und \mathcal{B}_f beschreiben hierbei die Wahrscheinlichkeit Umgebungsluft bzw. unreakiertes, reagierendes oder ausgebranntes Gemisch vorzufinden. Mit Hilfe dieser Verbundwahrscheinlichkeitsdichte kann eine beliebige zeitlich mittlere thermo-chemische Variable im Strömungsfeld über

$$\begin{aligned} \tilde{\phi} &= \int_0^1 \int_0^1 \phi(c, f) \left[(1-\tilde{f}) \delta(c) \delta(f) + \tilde{\mathcal{P}}_c(c) \tilde{f} \delta(1-f) \right] df dc \\ &= (1-\tilde{f}) \phi(c=0, f=0) + \tilde{f} \int_0^1 \phi(c, f=1) \tilde{\mathcal{P}}_c(c) dc \end{aligned} \quad (5.41)$$

berechnet werden. Das Integral in Gleichung (5.41) ist tabelliert und somit $\tilde{\phi}$ als Funktion von \tilde{c} , \tilde{c}^{n_2} und \tilde{f} bekannt. Die zeitlich mittlere Dichte ist unter Berücksichtigung von Gleichung (5.14) durch

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tilde{\rho}} &= \int_0^1 \int_0^1 \frac{1}{\rho(c, f)} \left[(1-\tilde{f}) \delta(c) \delta(f) + \tilde{\mathcal{P}}_c(c) \tilde{f} \delta(1-f) \right] df dc \\ &= (1-\tilde{f}) \frac{1}{\rho(c=0, f=0)} + \tilde{f} \int_0^1 \frac{1}{\rho(c, f=1)} \tilde{\mathcal{P}}_c(c) dc \end{aligned} \quad (5.42)$$

bestimmt.

Die dynamische Viskosität μ der Mischung kann mit ausreichender Genauigkeit durch das Sutherland-Gesetz (2.35) beschrieben werden, und der Diffusionskoeffizient läßt sich über eine als konstant angenommene Schmidtzahl von 0.7 abschätzen.

Die Speziesmassenbrüche sind für die eigentliche Strömungsberechnung nicht erforderlich und werden in einem so genannten Nachbearbeitungsschritt (engl.: *postprocessing*) auf Basis von Gleichung (5.41) berechnet.

5.5 Stabilisierungsmodell

Turbulente Methan/Luft-Freistrahlfammen werden häufig mit Wasserstoffpilotflammen stabilisiert. Hierzu wird in Nähe des gewünschten Stabilisierungspunktes Wasserstoff eingedüst, der zusammen mit dem Frischgas ein zündfähiges Gemisch ausbildet. Dieses ist aufgrund seiner im Gegensatz zum Frischgemisch fünf mal höheren Umsatzgeschwindigkeit in der Lage eine stabil brennende Diffusionsflamme auszubilden. Die heißen Rauchgase dieser Pilotflamme zünden dann das Methan/Luft-Gemisch und stabilisieren auf diese Weise die turbulente Freistrahlfamme. Dieser Vorgang ist komplex und nur unter nicht vertretbarem Aufwand zu modellieren. Deshalb wurde im Rahmen dieser Arbeit das folgende Stabilisierungsverfahren für das Wahrscheinlichkeitsdichtemodell entwickelt und angewendet.

Grundlage des Modells ist die Beobachtung, daß der Stabilisierungsvorgang maßgeblich durch die lokale Umsatzgeschwindigkeit kontrolliert wird, deren Erhöhung wiederum im wesentlichen durch die lokale Konzentration des Wasserstoffs bestimmt ist. Berücksichtigt man zusätzlich die Zündwirkung der heißen Rauchgase der Pilotflamme, dann kann die Anhebung der Umsatzgeschwindigkeit und somit die Stabilisierung näherungsweise mit dem Mischungsbruch des Wasserstoffs korreliert werden. Aus diesem Grund wird für das Stabilisierungsmodell eine weitere Transportgleichung für eine Indikatorspezies gelöst, die die Verteilung des Wasserstoffmassenbruchs simuliert. Die tabellierte turbulente Reaktionsgeschwindigkeit wird dann mit der lokalen Konzentration dieses Indikators, multipliziert mit einem Faktor F_{stabi} , gewichtet. Dieser Faktor spiegelt den Unterschied der Umsatzgeschwindigkeit des Wasserstoffs im Vergleich zu der des Reaktionsgemischs wieder und wurde im Rahmen dieser Arbeit zu $F_{stabi} = 5$ gesetzt. Da das Mischungsfeld des Indikators überall stetig und differenzierbar ist, gilt dies auch für die Änderung der Reaktionsgeschwindigkeit. Sprunghafte Änderungen und damit verbundenen Diskontinuitäten der Dichte, die sich negativ auf das globale Konvergenzverhalten auswirken, werden auf diese Weise vermieden.

Kapitel 6

Verbrennungsmodell auf Basis der Flammenfrontoberflächendichte

6.1 Allgemeine Transportgleichung der Flammenfront- oberflächendichte

Modelle, die auf der Beschreibung der Flammenfrontoberflächendichte basieren, modellieren den zeitlich mittleren Reaktionsquellterm der Reaktionsfortschrittsvariable über $\bar{w}_c = \bar{\Omega}_c \bar{\Sigma}$ (siehe Abschnitt 3.4.3). Die grundlegende Idee des Konzepts besteht darin, die Eigenschaften der Flamme durch die Oberflächendichte Σ einer geeigneten Isokonzentrationsfläche auszudrücken. Die Lage dieser Fläche ist durch die Bedingung $c(\mathbf{x}, t) = c^*$ gekennzeichnet. Der Wert c^* kann z. B. das Maximum der Wärmefreisetzungsrate oder ein bestimmter Brennstoffumsatz sein. Die instantanen, dynamischen Eigenschaften dieser Isokonzentrationsfläche werden durch die Flammenfrontoberflächendichte $\Sigma(c^*; \mathbf{x}, t)$ ¹ beschrieben, die, wie in Abbildung 6.1 dargestellt, anschaulich als die in einem Volumen δV zur Verfügung stehende Flammenfrontoberfläche δA_{c^*} betrachtet werden kann:

$$\Sigma(c^*) = \lim_{\delta V \rightarrow 0} \frac{\delta A_{c^*}}{\delta V}. \quad (6.1)$$

Die Flammenfront ist eine propagierende Fläche, die sich mit der Relativgeschwindigkeit $S_F(c = c^*)$ in das Frischgemisch ausbreitet. S_F ist dabei, wie in Kapitel 3.1 ausführlich erläutert, eine komplexe Funktion lokaler Zustandsgrößen und des Geschwindigkeitsfeldes. Die lokale Ausbreitungsrichtung der Oberfläche lässt sich durch ihren Normalenvektor \mathbf{n} charakterisieren, der durch

$$\mathbf{n} = - \left(\frac{\nabla c}{|\nabla c|} \right)_{c=c^*} \quad (6.2)$$

definiert ist und nach dieser Definition in Richtung des unverbrannten Gemisches weist. Neben der Ausrichtung der Oberfläche ist zur Beschreibung ihrer Topologie noch die Krümmung

$$\kappa = \nabla \cdot \mathbf{n} \quad (6.3)$$

von Bedeutung. Flammenfrontabschnitte, die in Richtung des Frischgemischs gekrümmt sind, besitzen eine negative Krümmung, und solche, die in Richtung des Rauchgases gekrümmt sind eine positive.

¹Auf die Kennzeichnung der Flammenfrontoberflächendichte als orts- und zeitabhängige Feldgröße $\Sigma(c^*; \mathbf{x}, t)$ wird der Übersichtlichkeit wegen im folgenden verzichtet.

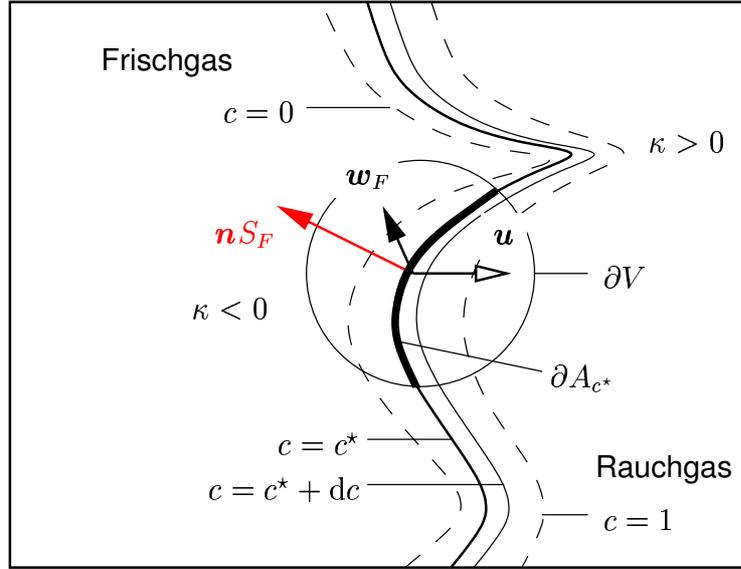


Abbildung 6.1: Zur Veranschaulichung der Definition der Flammenfrontdichte.

VERVISCH ET AL. [222] konnten auf Basis der Arbeiten von KOLLMANN ET AL. [116] zeigen, daß die Oberflächendichte auch als Produkt vom Betrag des Reaktionsfortschrittsgradienten und der momentanen Wahrscheinlichkeitsdichte geschrieben werden kann:

$$\Sigma(c^*) = |\nabla c| \delta[c^* - c]. \quad (6.4)$$

Eine Mittelung dieses Ausdrucks führt auf die sogenannte Oberflächendichtefunktion $\bar{\Sigma}(c^*, \mathbf{x}, t)$, die die zeitlich mittleren, dynamischen Eigenschaften einer beliebigen Isokonzentrationsfläche A_{c^*} beschreibt. Ferner konnten die Autoren die Oberflächendichtefunktion mit der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion eines reagierenden Skalars in Beziehung setzen:

$$\bar{\Sigma}(c^*) = \overline{|\nabla c| \delta[c^* - c]} = \left(\overline{|\nabla c|} \Big|_{c=c^*} \right) \mathcal{P}(c^*). \quad (6.5)$$

Die Wahrscheinlichkeitsdichte $\mathcal{P}(c^*, \mathbf{x}, t) = \delta(c^* - c(\mathbf{x}, t))$ bezeichnet hierbei die Wahrscheinlichkeit, daß sich ein Punkt \mathbf{x} zur Zeit t auf der betrachteten Isofläche $c = c^*$ befindet. Gleichung (6.5) ist von besonderer Bedeutung, da sie die Flamelet- und Wahrscheinlichkeitsdichteansätze mathematisch miteinander verknüpft.

Für die instantane Flammenfrontdichte $\Sigma(c^*; \mathbf{x}, t)$ läßt sich ausgehend von der Bilanzgleichung der Reaktionsfortschrittsvariablen mit Hilfe von Wahrscheinlichkeitstheorien eine exakte Transportgleichung ableiten [222]:

$$\frac{\partial \Sigma(c^*)}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \Sigma(c^*) = (-\mathbf{n}\mathbf{n} : \nabla \mathbf{u} - \mathbf{n} \cdot \nabla S_F(c^*)) \Sigma(c^*) \quad (6.6)$$

Die Herleitung von Gleichung (6.6) ist sehr aufwendig und würde dem Rahmen dieser Arbeit sprengen. Deshalb wird an dieser Stelle auf die entsprechende Arbeit von VERVISCH ET AL. [222] verwiesen. Diese Art der Ableitung besitzt den großen Vorteil, daß sie keinerlei Annahmen über die Flammenfrontstruktur erfordert. Gleichung (6.6) ist damit für jede propagierende Isokonzentrationsfläche, also auch für verdickte Flammenfronten gültig. Ihre Ausbreitungsgeschwindigkeit $S_F(c^*)$ ist aber unbekannt und muß auf eine geeignete Art und Weise bestimmt werden. Eine anschaulichere Ableitung der Transportgleichung auf

Basis geometrischer Überlegungen ist in Anhang C dargestellt. Sie unterliegt aber im Gegensatz zu den obigen Überlegungen der Einschränkung dünner Flammenfronten.

Durch Einführen von oberflächengemittelten Werten

$$\langle Q \rangle_S = \left[\overline{Q|_{A_{c=c^*}}} \right] = \frac{\overline{Q\Sigma(c^*)}}{\overline{\Sigma(c^*)}} \quad (6.7)$$

läßt sich die generische Form der ensemblegemittelten Oberflächendichte wie folgt schreiben:

$$\frac{\partial \overline{\Sigma}}{\partial t} + \nabla \cdot (\langle \mathbf{u} \rangle_S \overline{\Sigma}) = - \langle \mathbf{nn} : \nabla \mathbf{u} \rangle_S \overline{\Sigma} - \nabla \cdot [\langle \mathbf{n} S_F \rangle_S] \overline{\Sigma} + \langle S_F \nabla \cdot \mathbf{n} \rangle_S \overline{\Sigma} \quad (6.8)$$

Der erste und zweite Term auf der linken Seite von Gleichung (6.8) stehen für instationäre Änderungen bzw. den konvektiven Transport der Flammenfrontdichte. Der Einfluß der Flammenfrontdehnung wird durch den ersten Term der rechten Seite erfaßt, während die Flammenfrontausbreitung normal zur zeitlich mittleren Flammenfront und die Flammenfrontkrümmung durch den zweiten bzw. den dritten Term beschrieben werden. Die Terme in Gleichung (6.8) können in dieser Form nicht ausgewertet bzw. in einen finite Volumen basierten Strömungslöser implementiert werden. Mögliche Schließungsansätze auf Basis bekannter Größen werden im folgenden Kapitel ausführlich diskutiert und das im Rahmen dieser Arbeit entwickelte Flammenfrontdichtemodell vorgestellt.

Die auf Gleichung (6.8) beruhenden Flammenfrontdichtemodelle gehen implizit davon aus, daß die Reaktionszone durch die Isofläche $c = c^*$ eindeutig charakterisiert ist, d. h. daß alle thermochemischen Feldgrößen eindeutige Funktionen von c^* sind. Neuste direkt numerische Simulationen lassen aber vermuten, daß das Maximum der Reaktionsrate nicht immer mit einer Isofläche der Reaktionsfortschrittsvariablen zusammenfällt [55]. Dies gilt insbesondere für große Karlovitzzahlen, bei denen die turbulente Mischung zu einer Beeinflussung der Reaktionszone führt. Sollte sich in Zukunft herausstellen, daß dieser Effekt innerhalb der turbulenten Flammenfront dominiert, muß zur Beschreibung solcher hochturbulenten Vormischflammen auf die in Kapitel 5 beschriebenen PDF-Methoden zurückgegriffen werden. Einen Beitrag zur Klärung dieser Frage liefern die in Kapitel 8 untersuchten hochturbulenten Flammen.

6.2 Modellierung der $\bar{\Sigma}$ -Gleichung

Gleichung (6.8) ist im Rahmen der getroffenen Annahmen exakt. Sie besitzt aber eine Reihe ungeschlossener Terme, die modelliert werden müssen, da sie sonst nicht in einen kommerziellen Strömungslöser integriert werden kann. Die folgenden Abschnitte geben einen Überblick über die verwendeten Schließungsansätze und Modellannahmen, die zu dem in dieser Arbeit entwickelten und untersuchten Modellen geführt haben. Eine Zusammenstellung dieser Modelle ist in Abschnitt 6.6 zu finden.

6.2.1 Oberflächengemittelte Geschwindigkeit

In Gleichung (6.8) bezeichnet $\langle \mathbf{u} \rangle_S$ die oberflächengemittelte Geschwindigkeit des Fluids bezogen auf die Isofläche der Reaktionszone, d.h für $c = c^*$. Sie ist nicht mit der zeitlich gemittelten Strömungsgeschwindigkeit des Fluids identisch, sondern muß mit Hilfe konventioneller Mittelwerte der favregemittelten Navier-Stokes Gleichungen modelliert werden.

Der einfachste Ansatz besteht in der Annahme, daß die Fluktuationen der Oberflächeneigenschaften unkorreliert sind, und die oberflächengemittelten Werte durch konventionelle reynoldsgemittelte Größen beschrieben werden können. Diese von CHEN ET AL. [59] für dichtekontante Bedingungen entwickelte Formulierung ist aber nicht zwangsläufig auf reagierende Fälle, die sich durch starke Dichteänderungen auszeichnen, anwendbar. Dies läßt sich leicht anhand der in Abbildung 6.2 schematisch dargestellten Flamme zeigen. Die dem Frischgas zugewandte Seite der Flammenfront besitzt Bereiche großer Krümmung, in denen davon auszugehen ist, daß die Eigenschaften der Reaktionszone stark mit denen des ausgebrannten Gemisches korrelieren. Im Bereich niedriger Krümmungen sind diese Korrelationen jedoch weniger stark ausgeprägt. Gleiches gilt für die dem Abgas zugewandte Seite. Aufgrund dieser Überlegungen hat WELLER [232] eine umgekehrt proportionale Mittelung von Zuständen des Frischgasgemisches und Rauchgases vorgeschlagen:

$$\langle \mathbf{u} \rangle_S = (\bar{c} \bar{\rho}_u \tilde{\mathbf{u}}_u + (1 - \bar{c}) \bar{\rho}_b \tilde{\mathbf{u}}_b) / (\bar{c} \rho_u - (1 - \bar{c}) \rho_b) \quad (6.9)$$

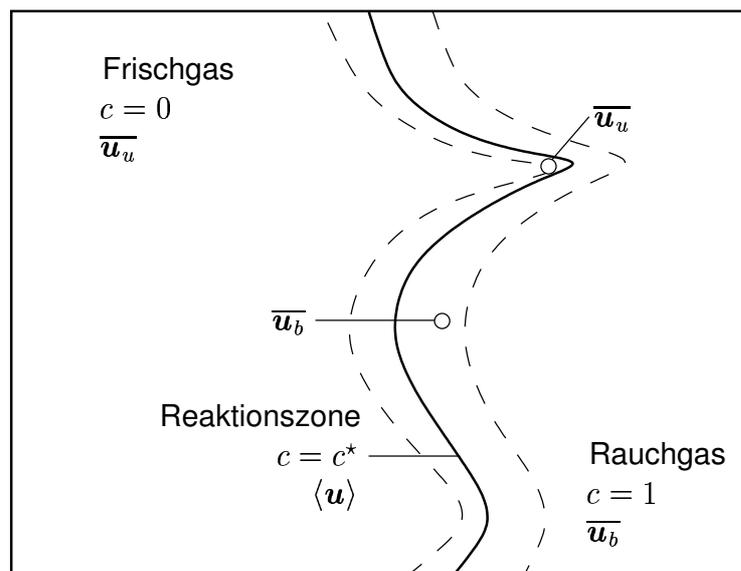


Abbildung 6.2: Zur Modellierung der oberflächengemittelten Strömungsgeschwindigkeit.

Anstelle von reynoldsgemittelten Werten betrachtet WELLER dichtegewichtete Größen, da diese über die Flammenfront kontinuierlich variieren. Zudem wichtet Gleichung (6.9) die Eigenschaften des Frischgemisches stärker als diejenigen des Rauchgases, was sich mit der Analyse direkter numerischer Simulationen deckt [226]. Eine Betrachtung von Gleichung (6.9) zeigt, daß in erster Näherung die Impulse von unverbranntem und verbranntem Gemisch gleich groß sind, so daß

$$\langle \bar{\mathbf{u}} \rangle_S \approx \tilde{\mathbf{u}} \quad (6.10)$$

angenommen werden kann. Die Beziehung (6.10) wird auch von POINSOT ET AL. [175] vorgeschlagen. Damit läßt sich die oberflächengemittelte Geschwindigkeit durch

$$\langle \mathbf{u} \rangle_S = \tilde{\mathbf{u}} + \langle \mathbf{u}'' \rangle_S \quad (6.11)$$

darstellen und Gleichung (6.8) lautet

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\Sigma}}{\partial t} + \nabla \cdot (\langle \mathbf{u} \rangle_S \bar{\Sigma}) + \nabla \cdot (\langle \mathbf{u}'' \rangle_S \bar{\Sigma}) = \\ - \langle \mathbf{n} \mathbf{n} : \nabla \mathbf{u} \rangle_S \bar{\Sigma} - \nabla \cdot [\langle \mathbf{n} S_F \rangle_S] \bar{\Sigma} + \langle S_F \nabla \cdot \mathbf{n} \rangle_S \bar{\Sigma}. \end{aligned} \quad (6.12)$$

6.2.2 Turbulenter Transport

Der turbulente Transportterm $\langle \mathbf{u}'' \rangle_S \bar{\Sigma}$ wird im Rahmen dieser Arbeit durch einen einfachen Gradientenansatz

$$\langle \mathbf{u}'' \rangle_S \bar{\Sigma} = - \frac{\nu_t}{Sc_\Sigma} \nabla \bar{\Sigma} \quad (6.13)$$

beschrieben. Dieser Ansatz wird in allen bisher veröffentlichten Arbeiten verwendet, obwohl davon ausgegangen werden muß, daß für manche Flammentypen Gegengradientendiffusion vorliegt. Dies läßt sich anschaulich anhand der BML-Theorie erklären. Diese besagt, daß für unendlich dünne Flammenfronten und unter der Voraussetzung mäßiger Turbulenz, die mit der Fortschrittsvariable gewichteten konditionierten mittleren Geschwindigkeiten des unverbrannten bzw. verbrannten Gemischs der favregemittelten Strömungsgeschwindigkeit entsprechen:

$$\tilde{\mathbf{u}} = (1 - \tilde{c}) \bar{\mathbf{u}}_u + \tilde{c} \bar{\mathbf{u}}_b. \quad (6.14)$$

Die oberflächengemittelte Geschwindigkeit kann unter diesen Voraussetzungen als lineare Funktion der konditionierten Geschwindigkeiten angenähert werden:

$$\langle \mathbf{u} \rangle_S \approx \bar{\mathbf{u}}_u + c^* (\bar{\mathbf{u}}_b - \bar{\mathbf{u}}_u). \quad (6.15)$$

Zusammen mit dem bekannten Ansatz der BML-Theorie für den turbulenten Transport eines Skalars

$$\overline{\rho \mathbf{u}'' c''} = \overline{\rho} \tilde{c} (1 - \tilde{c}) (\bar{\mathbf{u}}_b - \bar{\mathbf{u}}_u) \quad (6.16)$$

läßt sich die folgende Gleichung für den turbulenten Transport der Flammenfrontdichte ableiten:

$$\langle \mathbf{u}'' \rangle_S \bar{\Sigma} = \frac{(c^* - \tilde{c})}{\tilde{c}(1 - \tilde{c})} \overline{\rho \mathbf{u}'' c''} \bar{\Sigma} \quad (6.17)$$

Die Gleichung (6.17) wurde unter Bedingungen mäßiger Turbulenz von VEYNANTE ET AL. [225] anhand direkter numerischer Simulationen verifiziert. Ihre Anwendung erfordert

aber entweder ein Reynoldsspannungsmodell zur Berechnung des turbulenten Transportterms $\widetilde{\mathbf{u}''c''}$ oder, wie im Fall der angewendeten Zweigleichungsmodelle, einen entsprechenden Schließungsansatz. Da aber, wie bereits in Kapitel 3.5 erläutert, noch keine physikalisch sinnvolle und gleichzeitig handhabbaren Modelle existieren, wurde im Rahmen dieser Arbeit auf das obige Schließungsmodell erster Ordnung zurückgegriffen.

6.2.3 Flammenfrontdehnung

Der Einfluß der Flammenfrontdehnung wird in Gleichung (6.8) durch den ersten Term auf der rechten Seite beschrieben, der sich unter Einsatz von Gleichung (6.10) in zwei Anteile aufspalten läßt:

$$\langle \nabla \cdot \mathbf{u} - \mathbf{n}\mathbf{n} : \nabla \mathbf{u} \rangle_S \bar{\Sigma} = (\nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}} - \langle \mathbf{n}\mathbf{n} \rangle_S : \nabla \tilde{\mathbf{u}}) \bar{\Sigma} + \langle \nabla \cdot \mathbf{u}'' - \mathbf{n}\mathbf{n} : \nabla \mathbf{u}'' \rangle_S \bar{\Sigma} \quad (6.18)$$

Hierbei steht der erste Term für die Flammenfrontdehnung aufgrund der zeitlich mittleren Strömung, während der zweite Term die Einflüsse, die durch die Interaktion der Turbulenzelemente mit der Flammenfront hervorgerufen werden, zusammenfaßt.

Flammenfrontdehnung aufgrund der zeitlich mittleren Strömung

Änderungen der Strömungsgeschwindigkeit bewirken, wie in Abbildung 6.3 schematisch dargestellt, eine Dehnung der Flammenfront und damit eine Vergrößerung der zeitlich mittleren Flammenfrontoberflächendichte. Zur Schließung des unbekanntens Tensors $\langle \mathbf{n}\mathbf{n} \rangle_S$ im ersten Term auf der rechten Seite von Gleichung (6.18) werden in der Literatur zwei Ansätze diskutiert. Nach einem Vorschlag von CANT ET AL. [50] läßt sich der Normalenvektor \mathbf{n} in einen oberflächengemittelten Wert \mathbf{M} sowie einen fluktuierenden, auf die Oberfläche bezogenen Anteil \mathbf{m} darstellen

$$\mathbf{n} = \mathbf{M} + \mathbf{m}, \quad (6.19)$$

wobei die Vorschriften

$$\langle \mathbf{n} \rangle_S = \mathbf{M} \quad \text{und} \quad \langle \mathbf{m} \rangle_S = 0 \quad (6.20)$$

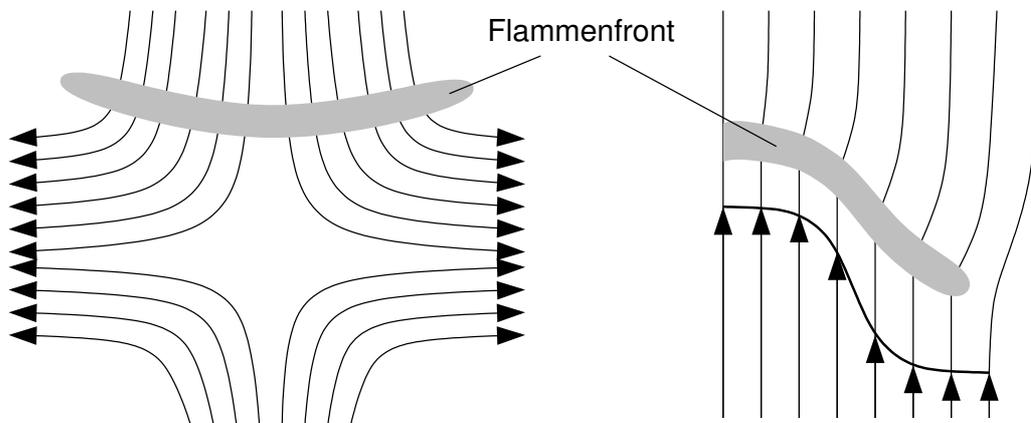


Abbildung 6.3: Schematische Darstellung der Flammendehnung aufgrund von Änderungen der mittleren Strömung. Links: Divergenzbehaftete Staupunktströmung, rechts: Scherströmung.

gelten. Damit folgt für die so genannten Orientierungsfaktoren

$$\langle \mathbf{nn} \rangle_S = \mathbf{MM} + \langle \mathbf{mm} \rangle_S . \quad (6.21)$$

Die oberflächengemittelten Orientierungsfaktoren \mathbf{MM} sind über die Beziehung

$$\mathbf{M} = -\frac{\nabla \bar{c}}{\bar{\Sigma}} \quad (6.22)$$

mit dem Gradienten der zeitlich mittleren Reaktionsfortschrittsvariablen und der Oberflächendichte verknüpft und somit einer direkten Berechnung zugänglich. Dem fluktuierenden Anteil wird von den Autoren isotrope Eigenschaften zugewiesen, was den folgenden Schließungsansatz ermöglicht:

$$\langle \mathbf{mm} \rangle_S = \frac{\mathbf{I}}{3} (1 - \mathbf{MM}) . \quad (6.23)$$

Die Gleichungen (6.22) und (6.23) wurde aber bisher in keinem veröffentlichten Verbrennungsmodell angewendet, da in der Literatur die Auffassung vertreten wird, daß die Dehnung, welche ein Flammenfrontelement aufgrund der mittleren Strömung erfährt, im Vergleich zur turbulenten Dehnungsrate vernachlässigbar ist.

Ein anderer Ansatz wurde von MANTEL und BORGHI [146] vorgeschlagen, der in einer neueren Arbeit von VEYNANTE ET AL. [224] aufgegriffen und modifiziert wurde. MANTEL und BORGHI postulieren, daß die Orientierungsfaktoren mit den Reynoldsspannungen und der turbulenten kinetischen Energie über

$$\langle \mathbf{nn} \rangle_S = \frac{\widetilde{\mathbf{u}''\mathbf{u}''}}{2\widetilde{k}} \quad (6.24)$$

miteinander verknüpft sind. Turbulenzmodelle, die auf Schließungsannahmen erster Ordnung basieren, beschreiben diese Abhängigkeit näherungsweise durch die zeitlich mittleren Geschwindigkeitsgradienten. Der Ansatz von MANTEL und BORGHI steht somit im Widerspruch zu dem von CANT ET AL. vorgeschlagenen Modell, da die Orientierungsfaktoren durch die turbulente Strömung und nicht durch die zeitlich mittlere Lage der Flammenfront bestimmt werden. Die grundsätzlichen Überlegungen von MANTEL und BORGHI konnten VEYNANTE ET AL. zwar anhand von Experimenten verifizieren, sie haben aber auch gezeigt, daß die lokale Isotropie der Orientierungsfaktoren nicht überall erfüllt ist. Auf Basis der experimentellen Daten schlagen die Autoren daher die folgende modifizierte Form der Gleichung (6.24) vor:

$$\mathbf{I} \langle \mathbf{nn} \rangle_S = \mathbf{I} \frac{\widetilde{\mathbf{u}''\mathbf{u}''}}{4\widetilde{k}} \quad \mathbf{E} \langle \mathbf{nn} \rangle_S = \mathbf{E} \frac{\widetilde{\mathbf{u}''\mathbf{u}''}}{2\widetilde{k}} . \quad (6.25)$$

Im Rahmen dieser Arbeit wurden die Reynoldsspannungen über die Gradienten der zeitlich mittleren Geschwindigkeiten ausgedrückt, um die Orientierungsfaktoren nach Gleichung (6.25) zu bestimmen. Die modellierte Form der zeitlich mittleren Dehnungsrate lautet damit

$$K_m \bar{\Sigma} = (\nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}} - \langle \mathbf{nn} \rangle_S : \nabla \tilde{\mathbf{u}}) \bar{\Sigma} = \left(\nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}} - \left(\mathbf{I} \frac{\widetilde{\rho \mathbf{u}'' \mathbf{u}''}}{4\widetilde{\rho k}} + \mathbf{E} \frac{\widetilde{\rho \mathbf{u}'' \mathbf{u}''}}{2\widetilde{\rho k}} \right) : \nabla \tilde{\mathbf{u}} \right) \bar{\Sigma} . \quad (6.26)$$

Die Reynoldsspannungen $\widetilde{\rho \mathbf{u}'' \mathbf{u}''}$ werden dabei mit Hilfe von Gleichung (2.88) berechnet.

Turbulente Flammenfrontdehnung

Der Anteil der turbulenten Flammenfrontdehnung an der Produktion von Flammenfrontoberflächendichte ist durch

$$\langle \nabla \cdot \mathbf{u}'' - \mathbf{n}\mathbf{n} : \nabla \mathbf{u}'' \rangle_S = K_t \bar{\Sigma} \quad (6.27)$$

gegeben. In Kapitel 3.4.3 wurden bereits unterschiedliche Ansätze zur Beschreibung der turbulenten Dehnungsrate K_t vorgestellt, die diese entweder über die integralen oder dissipativen Zeitmaße modellieren. Die Effektivitätsfunktion des ITNFS-Modells geht noch einen Schritt weiter und betrachtet die gewichtete Interaktion von Turbulenzelementen aller Wirbelklassen mit der Flammenfront. Allen Modellen ist aber gemein, daß sie die Dehnungsrate als isotrope Feldgröße betrachten, obwohl in Gleichung (6.27) die Orientierungsfaktoren vorkommen. Zum besseren Verständnis dieses Terms, bietet sich unter Zuhilfenahme von Gleichung (6.22) die folgende Zerlegung der turbulenten Dehnung an [175]:

$$K_t \bar{\Sigma} = \mathbf{I} \nabla \cdot \langle \mathbf{u}'' \rangle_S \bar{\Sigma} - \frac{1}{\bar{\Sigma}} \langle \nabla \cdot \mathbf{u}'' \rangle_S : (\nabla \bar{c} \nabla \bar{c}^T) + \langle \mathbf{m} \cdot \nabla \mathbf{u}'' \rangle_S \cdot \nabla \bar{c} + \langle \mathbf{m}^T \cdot \nabla \mathbf{u}'' \rangle_S \cdot \nabla \bar{c} - \langle \mathbf{m}\mathbf{m} : \mathbf{u}'' \rangle_S \bar{\Sigma} \quad (6.28)$$

Die Glieder auf der rechten Seite lassen sich wie folgt zusammenfassen: Die beiden ersten Terme können als isotrop betrachtet und modelliert werden, während der dritte bis fünfte Term über die fluktuierenden Anteile der Orientierungsfaktoren anisotrope Wechselwirkungen berücksichtigt. Interessanterweise sind der dritte sowie vierte Term keine Funktion der Flammenfrontoberflächendichte. Sie können daher als Zündterme aufgefaßt werden, die z. B. zur Beschreibung der Flammenstabilisierung herangezogen werden könnten². Aufgrund direkter numerischer Simulationen konnte die Annahme, daß die Schwankungen des Normalenvektors und der Geschwindigkeitskomponenten unkorreliert sind, bestätigt werden, so daß der dritte sowie vierte Term nicht weiter berücksichtigt werden müssen [226]:

$$\langle \mathbf{m} \nabla \mathbf{u}'' \rangle_S = \langle \mathbf{m} \rangle_S \langle \nabla \mathbf{u}'' \rangle_S = 0 \quad (6.29a)$$

bzw.

$$\langle \mathbf{m}^T \nabla \mathbf{u}'' \rangle_S = \langle \mathbf{m}^T \rangle_S \langle \nabla \mathbf{u}'' \rangle_S = 0. \quad (6.29b)$$

Damit kann die Produktion von Flammenfrontoberfläche aufgrund turbulenter Dehnung über die folgende Gleichung modelliert werden:

$$K_t \bar{\Sigma} = \mathbf{I} \langle \nabla \mathbf{u}'' \rangle_S \bar{\Sigma} - \langle \mathbf{m}\mathbf{m} : \nabla \mathbf{u}'' \rangle_S \bar{\Sigma} - \frac{1}{\bar{\Sigma}} \langle \nabla \mathbf{u}'' \rangle_S : \nabla \bar{c} \nabla \bar{c}^T. \quad (6.30)$$

Mit Hilfe eines Ansatzes für die turbulenten Transportterm $\langle \nabla \mathbf{u}'' \rangle_S$ läßt sich prinzipiell der anisotrope Anteil der Dehnung modellieren. MANTEL und BORCHI [146] haben in ihrem Modell der skalaren Dissipationsrate einen ähnlichen Term abgeleitet, dem sie die Bedeutung eines Zündterm zugewiesen haben. Sie konnten weiterhin zeigen, daß sein Anteil für den Fall isotroper, homogener Turbulenz vernachlässigbar ist. Diese Behauptung

²Die Beschreibung der Flammenfront als materielle Fläche schließt eine Neubildung von Flammenfronten aufgrund einer einsetzenden chemischen Reaktion ebenso aus, wie ein lokales Verlöschen. Diese Effekte können aber durch Modellierungsansätze in eine turbulente Transportgleichung implementiert werden, da dort nur zeitlich mittlere Größen betrachtet werden.

konnte im Rahmen der vorliegenden Arbeit bestätigt werden, bedarf aber weiterer Untersuchungen, da die Modellierung des turbulenten Transports auf einem Schließungsansatz erster Ordnung beruhte. Das untersuchte Verbrennungsmodell baut aber auf einer Reihe weiterer vereinfachender Annahmen auf, so daß nicht davon auszugehen ist, daß der Anisotropieterm dominiert. Dies ist für hochturbulente Flammen unmittelbar einsichtig, da hier die Interaktion von Turbulenzelementen mit der Flammenfront im Bereich der dissipativen Wirbel stattfindet, denen isotrope Eigenschaften zugewiesen werden können. Der isotrope Anteil der Dehnungsrate läßt sich nach den klassischen Ähnlichkeitsbetrachtungen der Turbulenztheorie über ein charakteristisches Zeitmaß abschätzen [218]. Hierbei ist zu berücksichtigen, daß dieses durch das das Zeitmaß der Flammenfront, d. h. der chemischen Reaktion, sowie der Vorwärmzone mitbestimmt wird. Der dort stattfindende Temperaturanstieg hat eine Erhöhung der kinematischen Viskosität zu Folge, der wiederum den dissipativen Bereich in Richtung größerer, energiereicherer Wirbelabmessungen verschiebt (siehe auch Kapitel 3.2). Wirbel mit integralen Abmessungen bzw. Geschwindigkeiten führen hingegen nicht zu der beobachteten Auffaltung der Flammenfront, die nur durch deutlich kleinere Wirbelelemente hervorgerufen werden kann. Bei der Betrachtung der Flammenfrontauffaltung ist weiterhin die Flammengeschwindigkeit zu berücksichtigen, die dieser entgegenwirkt. Abbildung 6.4 zeigt schematisch die Interaktion eines Wirbels mit langsamen sowie schnell brennenden Flammen. Die aus der Überlagerung all dieser Effekte resultierende charakteristische Wirbelabmessung läßt sich somit nicht anhand einfacher dimensionsanalytischer Betrachtungen bestimmen.

Es lassen sich aber anhand der integralen bzw. dissipativen Skalen zwei charakteristische Grenzfälle der skalaren Dissipationsrate identifizieren. Falls die Flammenfront als nicht propagierende materielle Fläche betrachtet werden kann, d. h. $u_\eta \gg S_l^0$ gilt, ist die turbulente Dehnungsrate durch das dissipative Zeitmaß kontrolliert [241]:

$$K_t = 0.28 (\tilde{\varepsilon}/\nu)^{1/2} . \quad (6.31)$$

Die Proportionalitätskonstante wurde dabei aus direkten numerischen Simulationen zu 0.28 bestimmt [241]. Da diese Betrachtung den Einfluß der Vorwärmzone vernachlässigt, können alle Wirbelklassen mit der Flammenfront interagieren. Die größten Flammenfrontkrümmungen bzw. -auffaltungen werden dabei durch die kleinsten Wirbelelemente hervorgerufen. Die weitere Annahme einer sehr kleinen Flammenfrontgeschwindigkeit hat zur Folge, daß selbst sehr kleinen Krümmungen von der Flammenfront auf der Rauchgasseite nicht entgegengewirkt wird. Die Abschätzung über die dissipativen Skalen stellt somit eine obere Schranke für die turbulente Dehnungsrate dar.

Die untere Schranke ist hingegen durch das Zeitmaß der integralen Skalen gegeben:

$$K_t = C_{K_t} \frac{\tilde{\varepsilon}}{k} . \quad (6.32)$$

Hierbei sollte die Proportionalitätskonstante C_{K_t} von der Größenordnung $\mathcal{O}(1)$ sein. Die Betrachtung vernachlässigt aber den Einfluß kleiner Wirbelklassen im Trägheitsbereich, die ebenfalls zur Flammenfrontauffaltung beitragen. Dieser Beitrag muß von der turbulenten Reynoldszahl abhängig sein, da diese die „Tiefe“ des Turbulenzspektrums bestimmt. In Modellen, die auf Gleichung (6.32) basieren, wird dieser Abhängigkeit i. a. durch Variation der Proportionalitätskonstante C_{K_t} Rechnung getragen. Um dieses Defizit zu beheben, haben MENEVEAU und POINSOT [149] das in Abschnitt 3.4.3 vorgestellte ITNFS-Modell entwickelt. Dieses beschreibt die turbulente Dehnungsrate als Funktion der charakteristischen Zeitskalen der Chemie und der Turbulenz und ist damit prinzipiell in der Lage die

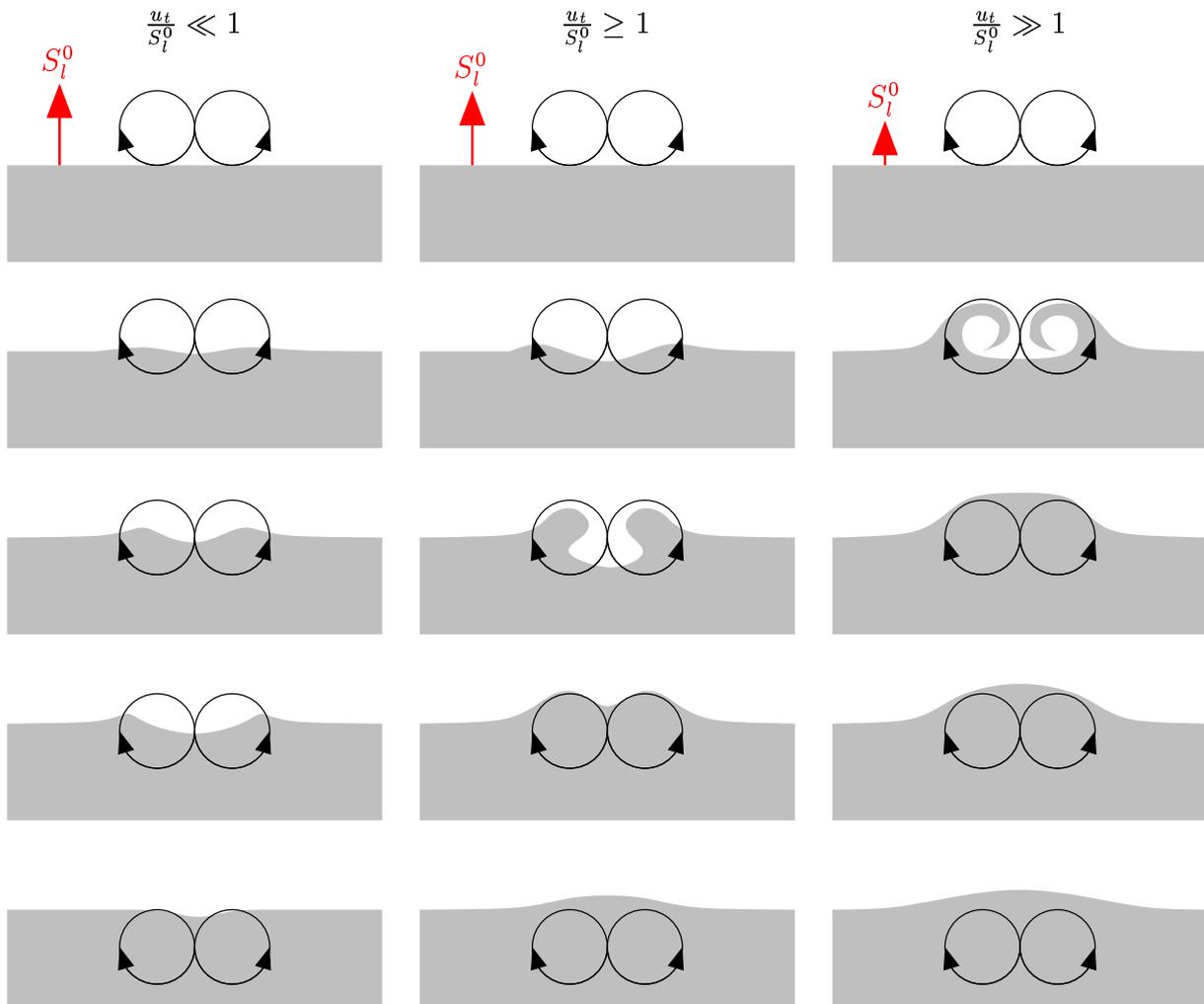


Abbildung 6.4: Schematische Darstellung der Flammenfrontauffaltung bei schnell und langsam brennenden Flammen durch ein Wirbelelement.

wesentlichen Phänomene der Interaktion von Flammenfront und turbulentem Strömungsfeld zu erfassen. Die turbulente Dehnungsrate wird dann über

$$K_t = C_{Kt} \frac{\tilde{\varepsilon}}{k} \bar{\Gamma}_k \left(\frac{u_t}{S_l^0}, \frac{l_t}{l_F^0} \right) \quad (6.33)$$

beschrieben, wobei $\bar{\Gamma}_k$ die Effizienzfunktion gemäß Gleichung (3.103) ist.

Eine theoretisch zugängliche Methode beruht in der Anwendung der Spektraltheorie auf das durch eine Flammenfront beeinflusste Turbulenzspektrum [54].

6.2.4 Propagationsterm

Der Propagationsterm beschreibt den Einfluß der Flammenausbreitung normal zur zeitlich mittleren Lage der Flammenfront, d. h. normal zu den zeitlich mittleren Isolinen der Reaktionsfortschrittsvariablen. Die Modellierung dieses Terms erfordert eine Beschreibung der oberflächengemittelten Flammenfortpflanzungsgeschwindigkeit $\langle S_F \rangle$. Diese ist wegen der Dehnungs- und Krümmungseffekte, die die Flammenfront erfährt, nicht mit der un-

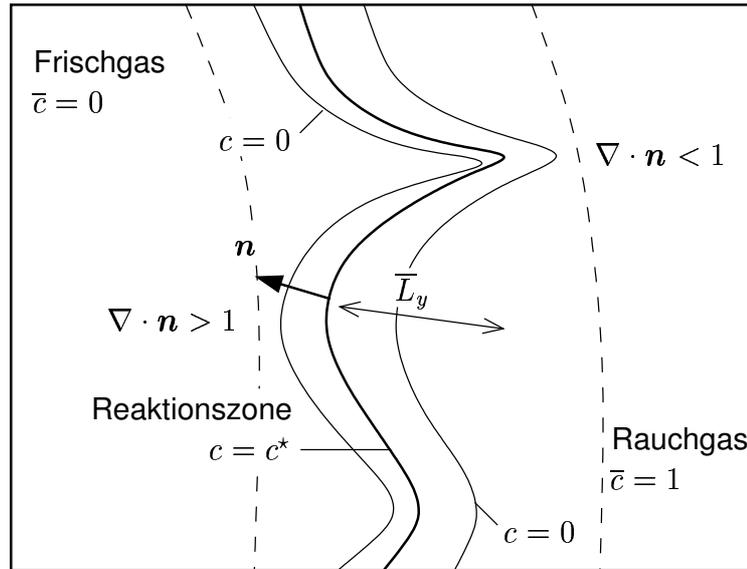


Abbildung 6.5: Zur Modellierung des Krümmungsterms.

gestreckten, laminaren, planaren Flammengeschwindigkeit S_f^0 identisch. Die korrekte Beschreibung der Flammenfrontgeschwindigkeit stellt somit ein wesentliches Problem der Flammenfrontdichtemodelle, die auf Gleichung (6.8) beruhen dar. POINSOT [173] sowie CHEN und IM [56] kommen aber auf Basis direkter numerischer Simulationen turbulenter Methanvormischflammen zu dem Schluß, daß sich positive und negative Einflüsse auf die Flammengeschwindigkeit die Waage halten, und der oberflächengewichtete Wert $\langle S_F \rangle$ sich nicht sehr deutlich von dem ungestreckten Wert S_f^0 unterscheidet. Unter dieser Voraussetzung kann die Flammenfrontausbreitungsgeschwindigkeit als konstant angesehen, und der Propagationsterm wie folgt geschlossen werden:

$$\nabla \cdot (\langle S_F \mathbf{n} \rangle_S \bar{\Sigma}) = S_f^0 \nabla \cdot (\langle \mathbf{n} \rangle_S \bar{\Sigma}) = -S_f^0 \nabla \bar{c}^2. \quad (6.34)$$

Im Gegensatz zu den einfachen FSD Modellen [144, 50, 146, 49] wurde dieser Term für das im Rahmen dieser Arbeit entwickelte Modell mit berücksichtigt. Es hat sich aber gezeigt, daß er für das untersuchte Spektrum turbulenter und hochturbulenter Flammen von untergeordneter Bedeutung ist.

6.2.5 Flammenfrontkrümmung

Der letzte Term in Gleichung (6.8) beschreibt den gekoppelten Einfluß von Flammenausbreitung und Flammenkrümmung über $\langle S_F \nabla \cdot \mathbf{n} \rangle_S \bar{\Sigma}$. Unter der bereits getroffenen Annahme einer näherungsweise konstanten Flammenfrontgeschwindigkeit gilt

$$\langle S_F \nabla \cdot \mathbf{n} \rangle_S \bar{\Sigma} = S_f^0 \langle \nabla \cdot \mathbf{n} \rangle_S \bar{\Sigma}. \quad (6.35)$$

Damit reduziert sich das Schließungsproblem auf die Bestimmung der oberflächengewichteten Flammenfrontkrümmung $\langle \nabla \cdot \mathbf{n} \rangle_S$. Wie in Abbildung 6.5 dargestellt, ist die Krümmung der momentanen Flammenfront auf der dem Frischgemisch zugewandten Seite der zeitlich mittleren Flammenfront immer positiv. Für den Grenzfall $\bar{c} \rightarrow 0$ ist die Krümmung der Flammenfront folglich proportional zum zeitlich mittleren Krümmungsmaßstab

\bar{L}_y :

$$\lim_{\bar{c} \rightarrow 0} \langle \nabla \cdot \mathbf{n} \rangle_S \propto \frac{1}{\bar{L}_y}. \quad (6.36)$$

Die momentane Krümmung der Flammenfront im Zusammenspiel mit der Flammenfrontgeschwindigkeit führt in diesem Bereich der turbulenten Flammenfront zu einer Vergrößerung der Oberfläche. Hierbei ist aber zu beachten, daß aufgrund der divergierenden Wärme- und Stoffströme für magere Flammen die lokale Flammengeschwindigkeit absinkt. Auf der dem Rauchgas zugewandten Seite der turbulenten Flammenfront ist die Krümmung hingegen immer negativ und führt folglich zu einer Verringerung der Flammenfrontoberfläche. Im Grenzfall gilt daher in Analogie zu Gleichung (6.36)

$$\lim_{\bar{c} \rightarrow 0} \langle \nabla \cdot \mathbf{n} \rangle_S \propto -\frac{1}{\bar{L}_y}. \quad (6.37)$$

Basierend auf diesen Überlegungen haben VEYNANTE und VERVISCH [226] ein lineares Modell zur Beschreibung der Flammenfrontkrümmung vorgeschlagen, welches die durch Gleichung (6.36) und (6.37) beschriebenen Grenzfälle wiedergibt:

$$\langle \nabla \cdot \mathbf{n} \rangle_S = \frac{c^{eq} - \bar{c}}{\bar{L}_y}. \quad (6.38)$$

Die Konstante c^{eq} steht für die zeitlich mittlere Reaktionsfortschrittsvariable, bei der für die betrachtete c^* -Isofläche im zeitlichen Mittel keine Krümmung vorliegt. Dieser Wert ist a priori nicht bekannt, und stellt damit eine weitere Modellkonstante dar.

Die charakteristische Krümmung ist in erster Näherung über den Ansatz des BML-Modells (3.93) beschreibbar, so daß der Krümmungsterm über die Beziehung

$$\langle S_F \nabla \cdot \mathbf{n} \rangle_S \bar{\Sigma} = C_D S_l^0 \frac{c^{eq} - \bar{c}}{\bar{c}(1 - \bar{c})} \bar{\Sigma}^2 \quad (6.39)$$

geschlossen werden kann. Die rechte Seite von Gleichung (6.39) läßt sich in einen Produktions- und einen Annihilierungsterm für die Flammenfrontoberflächendichte aufspalten:

$$\langle S_F \nabla \cdot \mathbf{n} \rangle_S \bar{\Sigma} = C_D S_l^0 \frac{c^{eq}}{\bar{c}(1 - \bar{c})} \bar{\Sigma}^2 - C_D S_l^0 \frac{1}{1 - \bar{c}} \bar{\Sigma}^2. \quad (6.40)$$

Die Existenz des Produktionsterms konnte mit Hilfe direkter numerischer Simulationen nachgewiesen werden [175], führt aber in der obigen Form für die Vorwärmzone der Flammenfront auf unbestimmte Werte der Flammenfrontflächendichte. Dies läßt sich vermeiden, wenn anstelle des BML- ein empirischer Ansatz für die charakteristische Flammenfrontkrümmung \bar{L}_y angewendet wird:

$$C_D S_l^0 \frac{c^{eq}}{\bar{c}(1 - \bar{c})} \bar{\Sigma}^2 = C_{S\kappa} \bar{\Gamma}_k \frac{\tilde{\varepsilon}}{k} \bar{\Sigma}. \quad (6.41)$$

Damit besitzt der positive Anteil des Krümmungsterms die gleiche Form wie der isotrope Anteil des Dehnungsterms und kann mit diesem zusammengefaßt werden.

6.2.6 Modellierte Form der $\bar{\Sigma}$ -Transportgleichung

Mit Hilfe der in den letzten Abschnitten vorgestellten Modellierungsansätze (6.13), (6.26), (6.33), (6.34), (6.40) und (6.41) läßt sich die allgemeine Transportgleichung der Flammenfrontoberflächendichte (6.12) auf eine Form bringen, die zusammen mit den favregemittelten Navier-Stokes Gleichungen und einem Zweigleichungsturbulenzmodell gelöst werden kann:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\Sigma}}{\partial t} + \nabla \cdot (\tilde{\mathbf{u}} \bar{\Sigma}) &= \nabla \cdot \left(\frac{\nu_t}{S c_\Sigma} \nabla \bar{\Sigma} \right) \\ &+ K_m \bar{\Sigma} + C_{K_t} \bar{\Gamma}_k \frac{\bar{\varepsilon}}{\tilde{k}} \bar{\Sigma} + S_l^0 \nabla^2 \bar{c} + C_{S_\kappa} \bar{\Gamma}_k \frac{\bar{\varepsilon}}{\tilde{k}} \bar{\Sigma} - C_D S_l^0 \frac{1}{1 - \bar{c}} \bar{\Sigma}^2. \end{aligned} \quad (6.42)$$

Im allgemeinen werden zur Beschreibung turbulenter reagierender Strömungen dichte-gemittelte Gleichungen verwendet. Damit also Gleichung (6.42) in einen allgemein gebräuchlichen bzw. kommerziellen Strömungslöser integriert werden kann, muß sie noch mit zeitlich mittleren Massendichte erweitert werden. Außerdem ist der reynoldsgemittelte Wert der Fortschrittsvariable durch seinen favregemittelten zu ersetzen. Resultat der Umformungen ist die folgende modellierte Transportgleichung für die Flammenfrontoberflächendichte:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho} \bar{\Sigma}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \bar{\Sigma}) &= \nabla \cdot \left(\frac{\mu_t}{S c_\Sigma} \nabla \bar{\Sigma} \right) \\ &- C_{K_m} \left(\left(\mathbf{I} \frac{\widetilde{\rho \mathbf{u}'' \mathbf{u}''}}{4 \bar{\rho} \tilde{k}} + \mathbf{E} \frac{\widetilde{\rho \mathbf{u}'' \mathbf{u}''}}{2 \bar{\rho} \tilde{k}} \right) : \nabla \tilde{\mathbf{u}} \right) \bar{\rho} \bar{\Sigma} + (C_{K_t} + C_{S_\kappa}) \bar{\Gamma}_k \frac{\bar{\varepsilon}}{\tilde{k}} \bar{\rho} \bar{\Sigma} \\ &- C_D \rho_u S_l^0 \frac{1}{1 - \bar{c}} (\bar{\rho} \bar{\Sigma})^2 \\ &+ \rho_u S_l^0 \left(\frac{\nabla^2 \bar{c}}{1 + \tau \bar{c}} - \frac{2 \tau \nabla \bar{c} \cdot \nabla \bar{c}}{(1 + \tau \bar{c})^2} \right) - \frac{\nu_t}{S c_\Sigma} \nabla \bar{\Sigma} \cdot \nabla \bar{\rho}. \end{aligned} \quad (6.43)$$

Hierbei bezeichnen der erste und zweite Term der linken Seite zeitliche Änderungen sowie konvektiven Transport von Flammenfrontoberflächendichte. Die Terme auf der rechten Seite von Gleichung (6.43) beschreiben turbulenten Transport, Produktion aufgrund von Flammenfrontdehnung durch die zeitlich mittlere Strömung bzw. Turbulenzelemente, Destruktion aufgrund von Flammenfrontkrümmung und Propagation normal zur turbulenten Flammenfront. Der letzte Term ist ein Korrekturterm, der durch die Erweiterung von Gleichung (6.42) mit der zeitlich mittleren Dichte entsteht. Die Konstanten in Gleichung (6.43) sind alle von der Größenordnung $\mathcal{O}(1)$ und sind in Tabelle 6.1 in Kapitel 6.6 zusammengestellt.

Zusammen mit der Transportgleichung für die zeitlich mittlere Reaktionsfortschrittsvariable (5.22) bildet Gleichung (6.43) ein Verbrennungsmodell auf Basis der Flammenfrontoberflächendichte. Dieses erweiterte Modell wird in Kapitel 8 zusammen mit den in Kapitel 3.4.3 vorgestellten einfachen Modellen anhand eines breiten Spektrums von turbulenten Vormischflammen validiert und verglichen.

6.3 Wandquenchmodell

Die Wand beeinflusst die Flamme durch mehrere Effekte, die in Abbildung 6.6 skizziert sind. Zum einen wird über die Wand Wärme aus der Flamme abgezogen. Dies führt zu einem temperaturbedingten Quench der Flamme im wandnahen Bereich aufgrund von Wärmeleitungsprozessen. Um diese zu beschreiben, ist ein Wärmeübertragungsmodell erforderlich, welches nicht adiabatische Randbedingungen voraussetzt. Da im Rahmen dieser Arbeit aber nur adiabate Systeme behandelt werden, blieb dieser Einfluß unberücksichtigt. Durch das verwendete Modell wird aber sichergestellt, daß in unmittelbarer Wandnähe keine Flamme brennen kann. Der entsprechende Wandabstand wird hierbei durch den Quenchabstand bestimmt. Die Abnahme der turbulenten Flammenfrontdicke in Wandnähe aufgrund der laminaren Wandgrenzschicht sowie der damit verbundenen abnehmenden Turbulenzintensität wird durch das Modell hingegen voll berücksichtigt.

Grundlage des in der Arbeit von LISCHER [136] vorgestellten Modells ist das von POINSOT ET AL. [174] entwickelte FIST-Modell (engl.: *Flame Interacting with Surface and Turbulence*). Das Modell basiert auf Auswertungen direkter numerischer Simulationen einer turbulenten Vormischflamme mit einer nicht adiabatischen Wand und kann in angepasster Form in Strömungslöser, die auf statistischen Turbulenzmodellen beruhen, implementiert werden.

Hierzu wird das Rechengebiet in der Nähe einer Wand, ähnlich einem Turbulenzmodell, in mehrere Bereiche unterteilt. Abbildung 6.7 zeigt schematisch die vier Regionen des Wandquenchmodells: Voll turbulenter Kernbereich, Inhibierungsbereich, wandnaher Bereich und Wandquenchbereich. In der voll turbulenten Kernströmung ist die Flamme von der Wand unbeeinflusst, und die Flammenfrontdicke wird mit einer der im Kapitel 6.6 vorgestellten Transportgleichungen berechnet. An diese Zone schließt sich die sogenannte Inhibierungsregion an, in der die Turbulenzstruktur bereits durch die Wand beeinflusst wird. Hier kommt es zu einer Abnahme der turbulenten Dehnungsrate und damit zu einer verminderten Flammenfrontproduktion. Der Einfluß der laminaren Strömung verschwindet bei einem dimensionslosen Wandabstand von

$$n_I^+ = \frac{n_I}{l_\nu} = 50. \quad (6.44)$$

Das Wandquenchmodell vernachlässigt in diesem Bereich die Produktionsterme und beschreibt den Abbau der Flammenfrontdicke durch

$$D_{n < n_I} = -C_D \sqrt{S_l^0 \tilde{k}^{1/4}} (\bar{\rho} \bar{\Sigma}) \quad (6.45)$$

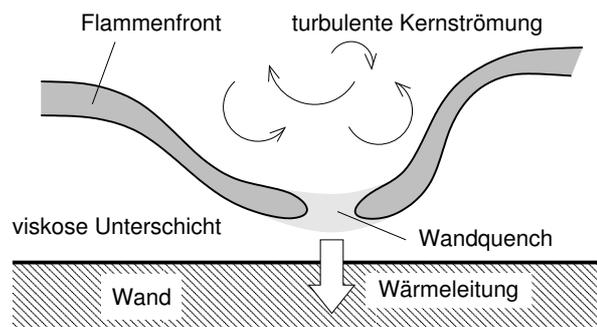


Abbildung 6.6: Schematische Darstellung des Flammenquenchs in Wandnähe.

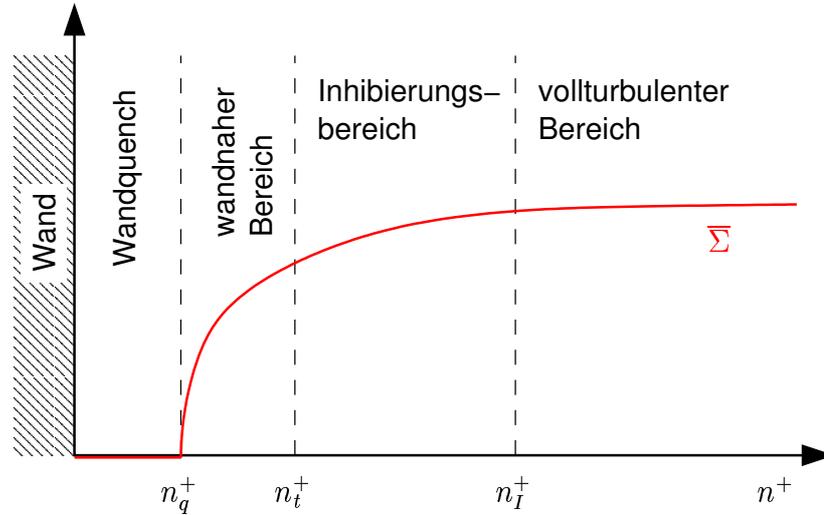


Abbildung 6.7: Schematische Darstellung der zonalen Unterteilung des wandnahen Bereichs durch das modifizierte FIST-Modell.

In Gleichung (6.44) bezeichnet l_ν die viskose Längenskala des wandnahen Bereichs, die durch $l_\nu = \nu \sqrt{Re/6}/u$ definiert ist. Der sich anschließende wandnahe Bereich liegt bereits in der laminaren Unterschicht, in welcher die laminaren Transporteffekte dominieren. Die turbulente Transportgleichung für die Flammenfrontoberflächendichte ist hier nicht mehr gültig und muß daher entsprechend modifiziert werden. Dieser wandnahe Bereich kann durch eine Pecletzahl gekennzeichnet werden, die als Verhältnis von Wandabstand zur laminaren Flammenfrontdicke definiert ist:

$$Pe_T = \frac{n_T}{l_F^0} = 8. \quad (6.46)$$

Da in dieser wandnahen Zone die Turbulenz keinen Einfluß auf die Flammenfrontdicke hat, wird hier der Destruktionsterm durch

$$D_{n < n_T} = \frac{S_l^0}{\nu} \bar{\rho} \bar{\Sigma} \quad (6.47)$$

modelliert. Der Wert von Pe_T wurde von POINSOT ET AL. [174] durch Auswertung direkter numerischer Simulationen ermittelt. Der dimensionslose Quenchabstand wird im FIST-Modell ebenfalls mittels einer Pecletzahl bestimmt, der von den Autoren ein Wert von

$$Pe_Q = \frac{n_Q}{l_F^0} = 3.4 \quad (6.48)$$

zugewiesen wird. Unterhalb dieses Quenchabstandes kann keine Flamme mehr brennen, und die Flammenfrontdicke muß die Randbedingung

$$\bar{\Sigma}_{n < n_Q} = 0 \quad (6.49)$$

erfüllen.

6.4 Berücksichtigung detaillierter Chemie

6.4.1 Beschreibung des Flamelets

Die bisher in diesem Kapitel beschriebenen Flammenfrontoberflächendichtemodelle verwenden Zustandsgrößen der ungestreckten, laminaren, planaren Flammenfront. Die Flammenfrontelemente werden in einem turbulenten Strömungsfeld aber aufgrund der Geschwindigkeitsfluktuationen sowohl gedehnt als auch gekrümmt. Diese beiden Einflüsse führen im Zusammenspiel mit den Effekten der bevorzugten Diffusion zu einer veränderten Flammenfrontstruktur. In Abschnitt 3.1.6 wurden Gleichungen vorgestellt, die diese Effekte beschreiben. Eine Lösung dieses Gleichungssystems ist aber aufwendig, weshalb der Einfluß des turbulenten Strömungsfeldes auf die Dynamik der quasi-laminaren Flammenstruktur nur durch ein idealisiertes Flamelet erfaßt werden kann.

Eine häufig eingesetzte idealisierte Konfiguration zur Beschreibung der kombinierten Effekte von Streckung und Krümmung ist die Staupunktflamme [81, 112, 189, 188, 68]. Hierbei strömt kaltes Frischgemisch gegen heißes Rauchgas. Die Temperatur des Rauchgases entspricht entweder der adiabaten Verbrennungstemperatur oder liegt aufgrund von Wärmeverlusten unterhalb derselben. Im Rahmen dieser Arbeit wurden nur adiabate Fälle betrachtet, so daß die in Abbildung 6.4.1 schematisch dargestellte rotationssymmetrische Gegenstromkonfiguration zur Beschreibung der quasi-laminaren Flammen zugrunde gelegt wird. Diese Konfiguration besitzt den Vorteil, daß das an sich zweidimensionale Problem mit Hilfe einer Ähnlichkeitstransformation in ein eindimensionales Problem überführt werden kann. Der zuerst von VAN KARMAN (vgl. [112]) vorgeschlagene Ansatz transformiert die Axialgeschwindigkeit u in eine Stromfunktion

$$F(x) = \frac{\rho u}{2}, \quad (6.50)$$

während die Radialgeschwindigkeit v durch die Ableitung der Stromfunktion

$$G(x) = -\frac{\rho v}{y} \quad (6.51)$$

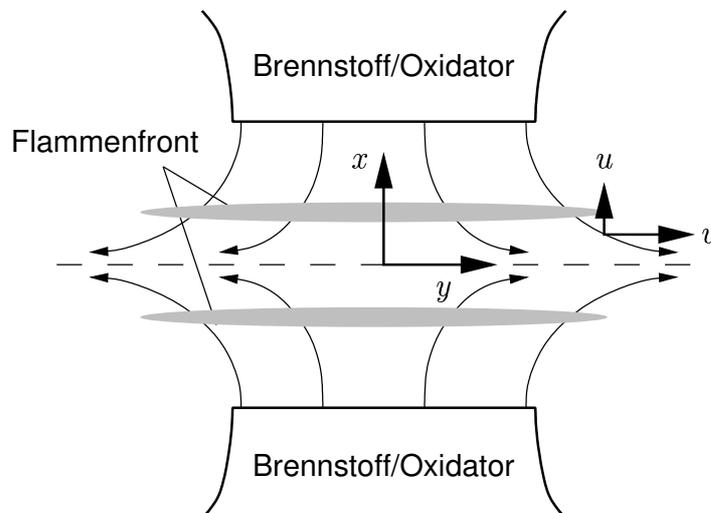


Abbildung 6.8: Schematische Darstellung der Gegenstromflammenkonfiguration zur Beschreibung der Dehnungseffekte auf die Flammenstruktur eines vorgemischten Flamelets.

dargestellt wird. Da F und G nur von der Koordinate x abhängen, können auch die restlichen Erhaltungsgrößen, wie T und Y_k sowie die Zustandsgrößen und Transportkoeffizienten als Funktion von x geschrieben werden. Die allgemeine Kontinuitätsgleichung 2.1 lautet somit im Fall der Gegenstromflamme

$$\frac{dF}{dx} - G = 0, \quad (6.52)$$

während für die Impulserhaltung

$$\frac{\partial G}{\partial t} + 2 \frac{d}{dx} \left(\frac{FG}{\rho} \right) - 3 \frac{G^2}{\rho} - H - \frac{d}{dx} \left[\mu \frac{d}{dx} \left(\frac{G}{\rho} \right) \right] = 0, \quad (6.53)$$

gilt. Hierbei bezeichnet H den radialen Druckgradienten

$$H = \frac{1}{y} \frac{\partial p}{\partial y} = \text{constant}, \quad (6.54)$$

welcher der Eigenwert des Problems ist. Die Transportgleichungen der chemischen Komponente k

$$\rho \frac{\partial Y_k}{\partial t} + 2F \frac{dY_k}{dx} + \frac{d}{dx} (\rho Y_k V_k) - \dot{w}_k = 0 \quad (6.55)$$

und der Temperatur T

$$\rho \frac{\partial T}{\partial t} + 2F \frac{dT}{dx} - \frac{1}{c_p} \frac{d}{dx} \left(\lambda \frac{dT}{dx} \right) + \frac{\rho}{c_p} \sum_k c_{p_k} Y_k V_k \frac{dT}{dx} + \frac{1}{c_p} \sum_k h_k \dot{w}_k = 0. \quad (6.56)$$

lassen sich ebenfalls auf homogene Differentialgleichungen reduzieren.

Da die Komplexität des Problems durch die Ähnlichkeitstransformation deutlich reduziert wird, können sowohl die chemische Kinetik als auch die molekularen Transportprozesse durch detaillierte Modelle beschrieben werden. Die Kinetik der Methanverbrennung, und somit die Produktionsgeschwindigkeiten \dot{w}_k , werden durch den in Anhang A.1 tabellierten detaillierten Reaktionsmechanismus abgebildet. Die Viskosität, Wärmeleitfähigkeit und die Diffusionsgeschwindigkeiten werden mit Hilfe der in Abschnitt 2.1.2 Ansätze beschrieben.

Die Flammendehnung ist in der durch das Gleichungssystem (6.52)–(6.56) beschriebenen Flammenkonfiguration implizit durch die Axialgeschwindigkeit u des Frischgemischs vorgegeben. Im allgemeinen wird die Streckungsrate über die Beziehung

$$K_A = -2 \left. \frac{du}{dx} \right|_{\max} \quad (6.57)$$

bestimmt [81]. Der Krümmungseinfluß hingegen läßt sich durch Vorgabe eines Gradienten der radialen Geschwindigkeit dv/dy abbilden. Die Einflüsse der Flammenfrontkrümmung wurde im Rahmen dieser Arbeit aber vernachlässigt, da eine Reihe von Untersuchungen (vgl. [175] für eine Übersicht) gezeigt haben, daß sich diese im zeitlichen Mittel gegenseitig aufheben.

Flamelet-Modelle, wie die Flammenfrontdichtemodelle, können nur Gleichgewichtszustände der Flamme berücksichtigen, da sie von einer unendlich dünnen Flammenfront und damit von einer bimodalen Verteilung des momentanen Reaktionsfortschritts ausgehen. Nichtgleichgewichtseffekte hingegen werden durch die Streckungsrate, die das Flamelet

erfährt, modelliert. Jede Zustandsgröße des Flamelets ist damit für den unverbrannten Zustand und den verbrannten Zustand als Funktion der lokalen Streckungsrate K_A charakterisiert.

Die Struktur der Flammenfront ist durch die Lösung der Gleichungen (6.52)–(6.56) beschrieben, und die Brenngeschwindigkeit kann mittels Gleichung (3.9) bestimmt werden. Damit läßt sich der Einfluß der Flammenfrontdehnung auf die momentane lokale Umsatzgeschwindigkeit pro Flammenfrontoberflächeneinheit über

$$\dot{\Omega}_c = \rho_u S_c(K_A) \quad (6.58)$$

berücksichtigen. Die Ausbreitungsgeschwindigkeit $S_F(c^*)$ der Isofläche $c = c^*$ ist durch Gleichung (3.6) definiert. Zur Modellierung der Geschwindigkeit S_F in der Transportgleichung für die Flammenfrontdichte (6.6) wird aber nicht diese Frontgeschwindigkeit, sondern die globale Ausbreitungsgeschwindigkeit einer als unendlich dünn angenommenen Flamme relativ zum anströmenden Frischgemisch benötigt. Diese Geschwindigkeit kann über die Beziehung $\rho_u S_F = \rho(c^*) S_F(c^*)$ modelliert werden [175].

6.4.2 Bestimmung der zeitlichen Mittelwerte

Zur Bestimmung der zeitlich mittleren Feldgrößen ist eine geeignete Ensemble-Mittelung der laminaren Flammenfrontstrukturen erforderlich. Die unabhängigen Variablen eines verallgemeinerten gedehnten und gekrümmten laminaren Flammenfrontelementes sind die Dehnungsrate, die Krümmung und die Reaktionsfortschrittsvariable. Mit den oben getroffenen Annahmen hinsichtlich Flammenkrümmung und Reaktionsfortschritt verbleibt jedoch die Streckungsrate als einzige unabhängige Größe. Die Wahrscheinlichkeitsdichte, mit deren Hilfe sich der zeitliche Mittelwert einer Feldgröße im verbrannten Zustand ermitteln läßt, ist demnach durch die Verteilung der Flammenfrontdehnung

$$\tilde{\mathcal{P}}_b = \tilde{\mathcal{P}}(K_A)$$

gegeben.

BRAY und CANT [33] schlagen basierend auf Überlegungen der Kolmogorov-Theorie sowie direkter numerischer Simulationen von RUTLAND [193], CANT ET AL. [52], HAWORTH und POINSOT [93], YEUNG ET AL. [241] eine Gaußsche Normalverteilung für die Flammenfrontdehnung vor. Diese Funktion kann den Verlauf der Dissipationsrate für kleine Karlovitzzahlen gut wiedergeben, überschätzt sie aber für große Karlovitzzahlen deutlich. Der Vorschlag von BRAY und CANT hat zudem die Eigenschaft, daß auch für sehr große Karlovitzzahlen die Wahrscheinlichkeit, einen brennenden Zustand vorzufinden, endlich ist. Dieses Modell kann daher kein vollständiges Verlöschen beschreiben und ist somit physikalisch inkonsistent. Um dieses Defizit auszugleichen, sollte die dritte Hypothese von Kolmogorov (Kapitel 2.4.1) herangezogen werden. Diese besagt implizit, daß die Wahrscheinlichkeitsdichte jeder turbulenten Feldgröße im Bereich der dissipativen Skalen durch eine logarithmische Normalverteilung dargestellt werden kann:

$$\tilde{\mathcal{P}}(K_t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} K_\sigma K_t} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{\ln K_t - \ln K_\mu}{K_\sigma} \right)^2 \right]. \quad (6.59)$$

Die zeitlich mittlere Dehnungsrate K_t , welche ein Flächenelement aufgrund der turbulenten Strömung erfährt, ist, wie bereits BATCHELOR 1952 [10] gezeigt hat, von der Größenordnung $\mathcal{O}(\tilde{\varepsilon}/\nu)^{0.5}$. Dieser Ansatz wurde seitdem durch eine Vielzahl von experimentellen

Messungen und direkt numerischen Arbeiten (siehe z. B. [3], [175] für eine Übersicht) untermauert. Ungeklärt sind aber noch die Proportionalitätskonstanten und der Zusammenhang zwischen der Dehnungsrate des Flamelets und K_t . Im Rahmen dieser Arbeit wurde auf die Untersuchungen von ABDEL-GAYED ET AL. [3] zurückgegriffen, in der der Median und die Standardabweichungen der Flammenfrontdehnung sowie der zeitliche Mittelwert zu

$$K_\mu = \frac{1}{2} \left(\ln \left(\frac{\tilde{\varepsilon}}{3\nu} \right) - 2K_\sigma^2 \right) - \ln 2 \quad (6.60a)$$

$$K_{\sigma^2} = 0.34 \quad (6.60b)$$

$$K_t = 0.422 \sqrt{\frac{\tilde{\varepsilon}}{3\nu}} \quad (6.60c)$$

bestimmt werden.

Die Flamelet-Gleichungen können in der verwendeten Form nur positive Streckungsraten darstellen, da negative Dehnungsraten zu instabilen Flammen führen. Eine Flammenfrontelement ist aber sowohl positiven als auch negativen Streckungsraten ausgesetzt. Aus diesem Grund wurde die von BRAY und CANT [33] formulierte Annahme übernommen, die davon ausgeht, daß sich eine negative Dehnungsrate genau wie eine positive Dehnungsrate auf die Gleichgewichtswerte der Flammenfront auswirkt. Damit gilt für eine beliebige favregemittelte Feldgröße die folgende Berechnungsvorschrift:

$$\tilde{\phi} = \int_0^\infty \phi(K_A) \tilde{\mathcal{P}}(K_A; K_t) dK_A. \quad (6.61)$$

Analog lassen sich die reynoldsgemittelten Größen wie Dichte

$$\frac{1}{\bar{\rho}} = \int_0^\infty \frac{1}{\rho(K_A)} \tilde{\mathcal{P}}(K_A; K_t) dK_A, \quad (6.62)$$

die zeitlich mittlere, flammenfrontgemittelte Flammengeschwindigkeit

$$\langle S_F \rangle_S \approx \bar{\rho} \int_0^\infty \frac{S_F(K_A)}{\rho(K_A)} \tilde{\mathcal{P}}(K_A; K_t) dK_A, \quad (6.63)$$

und die gemittelte Brenngeschwindigkeit

$$\langle S_c \rangle_S \approx \bar{\rho} \int_0^\infty \frac{S_c(K_A)}{\rho(K_A)} \tilde{\mathcal{P}}(K_A; K_t) dK_A \quad (6.64)$$

bestimmen.

6.5 Mischungsmodell

Um den Einfluß der einmischenden Umgebungsluft zu beschreiben, wird das in Abschnitt 5.4 vorgestellte Mischungsmodell verwendet. Da alle Flamelet-Modelle auf der Annahme basieren, daß die Reaktion schnell gegenüber dem turbulenten Mischungsvorgang verlaufen, läßt sich die Auswertung von Gleichung (5.41) noch weiter vereinfachen. In diesem Fall ist es zulässig, die Wahrscheinlichkeitsdichte $\tilde{\mathcal{P}}_c$ ebenfalls durch eine Doppeldeltafunktion anzunähern, d. h. es gilt die Approximation des BML-Modells (siehe Kapitel 3.4.1):

$$\tilde{\mathcal{P}}_c(c) \approx \mathcal{A}_c \delta(c) + \mathcal{B}_c \delta(1-c) = (1-\tilde{c}) \delta(c) + \tilde{c} \delta(1-c). \quad (6.65)$$

Eine beliebige favregemittelte skalare Feldgröße $\tilde{\phi}$ ist damit über

$$\tilde{\phi} = (1-\tilde{f}) \phi_L + \tilde{f} \left((1-\tilde{c}) \tilde{\phi}_R(c=0, f=1) + \tilde{c} \tilde{\phi}_R(c=1, f=1) \right) \quad (6.66)$$

berechenbar. Die mittlere Dichte läßt sich auf Basis von Gleichung (5.42) und unter Zuhilfenahme von Gleichung (6.65) zu

$$\frac{1}{\tilde{\rho}} = (1-\tilde{f}) \frac{1}{\rho_L} + \tilde{f} (1+\tau\tilde{c}) \frac{1}{\rho_{R,u}} \quad (6.67)$$

bestimmen. In Gleichung (6.67) bezeichnet $\tau = (T_{R,b} - T_{R,u})/T_{R,u}$ den Wärmefreisetzungsparameter bezüglich des unverdünnten Frischgemischs. Unter der Voraussetzung konstanter mittlerer Molmassen läßt sich mit Hilfe des idealen Gasgesetzes

$$\rho_R T_R = \rho_L T_L \quad (6.68)$$

die Dichte der Umgebungsluft (L) durch die Temperatur und die Dichte des unverbrannten Gemisches ausdrücken:

$$\frac{1}{\tilde{\rho}} = (1-\tilde{f}) \frac{1}{\rho_{R,u}} \frac{T_L}{T_{R,u}} + \tilde{f} (1+\tau\tilde{c}) \frac{1}{\rho_{R,u}}. \quad (6.69)$$

Anhand der Gleichungen (6.66)–(6.69) können alle erforderlichen Zustandsgrößen als Funktion des Wärmefreisetzungsparameters τ , der Dichte $\rho_{R,u}$ sowie der Temperaturen $T_{R,u}$ des Frischgemischs und der einmischenden Umgebungsluft T_L bestimmt werden.

Sollen Nichtgleichgewichtseffekte anhand der Flammenfrontdehnung berücksichtigt werden, muß zur Berechnung einer zeitlich mittleren Feldgröße auf die Gleichungen (5.41) bzw. (5.42) zurückgegriffen werden. Der reagierte Zustand einer favregemittelten Größe ist dann durch das Integral

$$\tilde{\phi}_{R,b}(c=1, f=1) = \int_0^\infty \phi_{R,b}(K) \tilde{\mathcal{P}}(K) dK \quad (6.70)$$

gegeben. Für den Wärmefreisetzungsparameter gilt somit

$$\tau = \int_0^\infty \frac{T_{R,b}(K)}{T_{R,u}} \tilde{\mathcal{P}}(K) dK - 1. \quad (6.71)$$

Damit kann die zeitlich mittlere Dichte über Gleichung (6.67) und die Temperatur sowie die Spezieskonzentrationen über Gleichung (6.66) berechnet werden.

6.6 Zusammenstellung der untersuchten Modelle

Im Rahmen dieser Arbeit wurden sieben unterschiedliche Modellansätze für die Transportgleichung der Flammenfrontdichte untersucht. Die folgenden Modelle wurden auf die in Kapitel 8 erläuterten turbulenten Vormischflammen angewendet und anhand detaillierter Feldmessungen validiert und untereinander verglichen.

CF-1 Modell Das CF-1 Modell modelliert die turbulente Flammendehnung auf Basis der integralen Turbulenzgrößen und vernachlässigt den Beitrag der Flammenfortpflanzung normal zur turbulenten Flammenfront. Im Gegensatz zu den von DUCLOS [73] und PRASAD [184] untersuchten Varianten des CF-1 Modells, verwendet diese Version die reynoldsgemittelte Reaktionsfortschrittsvariable im Destruktionsterm und berücksichtigt den Einfluß der mittleren Strömung auf den Flammenfrontdehnung.

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho} \bar{\Sigma}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \bar{\Sigma}) &= \nabla \cdot \left(\frac{\mu_t}{Sc_\Sigma} \nabla \bar{\Sigma} \right) \\ &- C_{K_m} \left(\left(\mathbf{I} \frac{\widetilde{\rho \mathbf{u}'' \mathbf{u}''}}{4 \bar{\rho} \tilde{k}} + \mathbf{E} \frac{\widetilde{\rho \mathbf{u}'' \mathbf{u}''}}{2 \bar{\rho} \tilde{k}} \right) : \nabla \tilde{\mathbf{u}} \right) \bar{\rho} \bar{\Sigma} + C_{K_t} \frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{k}} \bar{\rho} \bar{\Sigma} \\ &- C_{D1} \rho_u S_l^0 \frac{1}{1 - \tilde{c}} (\bar{\Sigma})^2 - \frac{\nu_t}{Sc_\Sigma} \nabla \bar{\Sigma} \cdot \nabla \bar{\rho} \quad (6.72) \end{aligned}$$

CF-2 Modell Das CF-2 Modell unterscheidet sich vom CF-1 Modell lediglich in der Formulierung der turbulenten Flammenfrontdehnung. Anstelle der integralen Turbulenzgrößen treten beim CF-2 Modell die dissipativen Skalen.

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho} \bar{\Sigma}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \bar{\Sigma}) &= \nabla \cdot \left(\frac{\mu_t}{Sc_\Sigma} \nabla \bar{\Sigma} \right) \\ &- C_{K_m} \left(\left(\mathbf{I} \frac{\widetilde{\rho \mathbf{u}'' \mathbf{u}''}}{4 \bar{\rho} \tilde{k}} + \mathbf{E} \frac{\widetilde{\rho \mathbf{u}'' \mathbf{u}''}}{2 \bar{\rho} \tilde{k}} \right) : \nabla \tilde{\mathbf{u}} \right) \bar{\rho} \bar{\Sigma} + C_{K_\eta} \sqrt{\frac{\tilde{\varepsilon}}{\nu}} \bar{\rho} \bar{\Sigma} \\ &- C_{D1} \rho_u S_l^0 \frac{1}{1 - \tilde{c}} (\bar{\Sigma})^2 - \frac{\nu_t}{Sc_\Sigma} \nabla \bar{\Sigma} \cdot \nabla \bar{\rho} \quad (6.73) \end{aligned}$$

CF-3 Modell Im Gegensatz zum CF-1 und CF-2 Modell, welches einen minimalen bzw. maximalen Grenzfallbetrachtung für den Turbulenzeinfluß auf die Flammenfrontdehnung darstellt, modelliert das CF-3 Modell die turbulente Flammenfrontdehnung mit Hilfe des ITNFS-Modells.

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho} \bar{\Sigma}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \bar{\Sigma}) &= \nabla \cdot \left(\frac{\mu_t}{Sc_\Sigma} \nabla \bar{\Sigma} \right) \\ &- C_{K_m} \left(\left(\mathbf{I} \frac{\widetilde{\rho \mathbf{u}'' \mathbf{u}''}}{4 \bar{\rho} \tilde{k}} + \mathbf{E} \frac{\widetilde{\rho \mathbf{u}'' \mathbf{u}''}}{2 \bar{\rho} \tilde{k}} \right) : \nabla \tilde{\mathbf{u}} \right) \bar{\rho} \bar{\Sigma} + C_{K_t} \bar{\Gamma}_k \left(\frac{u_t}{S_l^0}, \frac{l_t}{l_F^0} \right) \frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{k}} \bar{\rho} \bar{\Sigma} \\ &- C_{D1} \rho_u S_l^0 \frac{1}{1 - \tilde{c}} (\bar{\Sigma})^2 - \frac{\nu_t}{Sc_\Sigma} \nabla \bar{\Sigma} \cdot \nabla \bar{\rho} \quad (6.74) \end{aligned}$$

CPB Modell Das CPB Modell modelliert die turbulente Flammenfrontdehnung ebenso wie das CF-2 Modell auf Basis der dissipativen Wirbelabmessungen. Es verwendet jedoch einen anderen Ausdruck zur Beschreibung des Destruktionsterms.

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho} \bar{\Sigma}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \bar{\Sigma}) &= \nabla \cdot \left(\frac{\mu_t}{S_{c\Sigma}} \nabla \bar{\Sigma} \right) \\ &- C_{K_m} \left(\left(\mathbf{I} \frac{\widetilde{\rho \mathbf{u}'' \mathbf{u}''}}{4\bar{\rho}\tilde{k}} + \mathbf{E} \frac{\widetilde{\rho \mathbf{u}'' \mathbf{u}''}}{2\bar{\rho}\tilde{k}} \right) : \nabla \tilde{\mathbf{u}} \right) \bar{\rho} \bar{\Sigma} + C_{K_\eta} \sqrt{\frac{\tilde{\varepsilon}}{\nu}} \bar{\rho} \bar{\Sigma} \\ &- C_{D1} \rho S_l^0 \frac{\left(2 + \exp \left[-C_{D2} (1 - \tilde{c}) \tilde{\varepsilon} / (\tilde{k} \bar{\Sigma} S_l^0) \right] \right)}{1 - \tilde{c}} (\bar{\Sigma})^2 - \frac{\nu_t}{S_{c\Sigma}} \nabla \bar{\Sigma} \cdot \nabla \bar{\rho} \quad (6.75) \end{aligned}$$

MB Modell Das MB Modell basiert auf der Veröffentlichung von MANTEL und BORGHI [146]. Die Autoren leiten in ihrer Arbeit eine semi-empirische Modellgleichung für die skalare Dissipationsrate unter der Annahme konstanter Dichte ab. Mit Hilfe des Ähnlichkeitsansatzes $\rho_u S_l^0 \bar{\Sigma} = (\tilde{\varepsilon}/\tilde{k}) \tilde{c}''^2$ postulieren sie schließlich die folgende Transportgleichung für die Flammenfrontoberflächendichte.

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho} \bar{\Sigma}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \bar{\Sigma}) &= \nabla \cdot \left(\frac{\mu_t}{S_{c\Sigma}} \nabla \bar{\Sigma} \right) \\ &- C_{K_m} \left(\left(\mathbf{I} \frac{\widetilde{\rho \mathbf{u}'' \mathbf{u}''}}{4\bar{\rho}\tilde{k}} + \mathbf{E} \frac{\widetilde{\rho \mathbf{u}'' \mathbf{u}''}}{2\bar{\rho}\tilde{k}} \right) : \nabla \tilde{\mathbf{u}} \right) \bar{\rho} \bar{\Sigma} + C_{K_\eta} \sqrt{\frac{\tilde{\varepsilon}}{\nu}} \bar{\rho} \bar{\Sigma} \\ &- C_{D1} \frac{\tilde{k}}{\sqrt{\tilde{\varepsilon}} \tilde{c} (1 - \tilde{c})} \frac{\rho_u S_l^0}{(1 + C_{D2} S_l^0 / \sqrt{\tilde{k}})} (\bar{\Sigma})^2 - \frac{\nu_t}{S_{c\Sigma}} \nabla \bar{\Sigma} \cdot \nabla \bar{\rho} \quad (6.76) \end{aligned}$$

CF-4 Modell Das CF-4 Modell vereint die in Abschnitt 6.2 vorgestellten Modellierungsansätze und ist durch Gleichung (6.43) beschrieben.

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho} \bar{\Sigma}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \bar{\Sigma}) &= \nabla \cdot \left(\frac{\mu_t}{S_{c\Sigma}} \nabla \bar{\Sigma} \right) \\ &- C_{K_m} \left(\left(\mathbf{I} \frac{\widetilde{\rho \mathbf{u}'' \mathbf{u}''}}{4\bar{\rho}\tilde{k}} + \mathbf{E} \frac{\widetilde{\rho \mathbf{u}'' \mathbf{u}''}}{2\bar{\rho}\tilde{k}} \right) : \nabla \tilde{\mathbf{u}} \right) \bar{\rho} \bar{\Sigma} + (C_{K_t} + C_{S_\kappa}) \bar{\Gamma}_k \frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{k}} \bar{\rho} \bar{\Sigma} \\ &- C_{D1} \rho_u S_l^0 \frac{1}{1 - \tilde{c}} (\bar{\Sigma})^2 \\ &+ \rho_u S_l^0 \left(\frac{\nabla^2 \tilde{c}}{1 + \tau \tilde{c}} - \frac{2\tau \nabla \tilde{c} \cdot \nabla \tilde{c}}{(1 + \tau \tilde{c})^2} \right) - \frac{\nu_t}{S_{c\Sigma}} \nabla \bar{\Sigma} \cdot \nabla \bar{\rho} \quad (6.77) \end{aligned}$$

CF-5 Modell Das CF-5 Modell ist in der Formulierung seiner Terme mit dem CF-4 Modell identisch. Die Werte der zeitlich mittleren Dichte, der molekularen Transportgrößen sowie der zeitlich mittleren Flammengeschwindigkeit werden aber mit den in Abschnitt 6.4 vorgestellten Gleichungen berechnet.

Zusammenstellung der Modellkonstanten Die folgende Tabelle gibt einen Überblick über die verwendeten Modellkonstanten der untersuchten Flammenfrontdichtemodelle.

Model	Gleichung	Sc_Σ	C_{K_m}	$C_{K_{t/\eta}}$	C_{S_κ}	C_{D1}	C_{D2}
CF-1	(6.72)	0.7	0.44	3–11	-	1	-
CF-2	(6.73)	0.7	0.44	0.28	-	1	-
CF-3	(6.74)	0.7	0.44	2	-	1	-
CPB	(6.75)	0.7	0.44	0.28	-	1	-
MB	(6.76)	0.7	0.44	0.9	-	1	1
CF-4/5	(6.77)	0.7	0.44	1	1	1	-

Tabelle 6.1: Konstanten der untersuchten Flammenfrontdichtemodelle

Kapitel 7

Numerische Verfahren

7.1 Strömungslöser

Für die im Rahmen der vorliegenden Arbeit durchgeführten Simulationen wurde das kommerzielle CFD-Programmpaket CFX/TASCflow der Firma AEA Technology eingesetzt. Zwei Gründe führten zur Entscheidung ein kommerzielles Programm als Arbeitsplattform einzusetzen. Zum einen steht nicht die Weiterentwicklung von Turbulenzmodellen oder numerischer Verfahren im Mittelpunkt dieser Arbeit, sondern die Validierung und Verbesserung anwendungsnaher Verbrennungsmodelle. Diese konnten mit relativ bescheidenem Aufwand fast ausschließlich mit Hilfe von Benutzerschnittstellen implementiert werden. Zum anderen kann davon ausgegangen werden, daß das Programm hinsichtlich der Lösungsverfahren und Turbulenzmodelle ausreichend validiert ist, so daß zuverlässige und erprobte Verfahren die Basis für die vorliegende Arbeit bilden. Außerdem ermöglicht die weite Verbreitung des Programms in der Industrie ein rasches Einfließen der Forschungsergebnisse in die praktische Anwendung.

Dieser Abschnitt bietet keinen Überblick über die Funktionsweise des Programms oder einen detaillierten Einblick in die verwendeten numerischen Verfahren. Beide Aspekte waren nicht Bestandteil der Arbeit und sind in den Handbüchern ausführlich dokumentiert. Im folgenden sollen lediglich die Prinzipien, nach denen TASCflow die in Kapitel 2.1 vorgestellten Gleichungen löst, dargestellt werden.

TASCflow basiert auf einer Finiten Volumen Methode, bildet die Geometrie des Rechengebietes aber mit Hilfe eines Finite Elemente Verfahrens ab. Auf diese Weise werden die konservativen Eigenschaften der Finiten Volumen Verfahren mit der Flexibilität der Finite Elemente Verfahren hinsichtlich der Diskretisierung des Rechengebietes vereint. In Abbildung 7.1 ist das von TASCflow verwendete numerische Gitter beispielhaft dargestellt. Bei der Diskretisierungsmethode handelt sich um ein Zellknotenverfahren, bei dem zunächst die Mittelpunkte der finiten Kontrollvolumina definiert werden. Das sich so ergebende Gitter definiert für TASCflow die Fluß-Elemente. Die Kontrollvolumina selbst sind durch die Elementmittelebenen festgelegt. Ein Kontrollvolumen ist daher, wie in Abbildung 7.1 angedeutet, durch 24 Ebenensegmente begrenzt und besteht aus 8 Oktanten. Knotenpunkte, die auf den Rändern des Berechnungsgebietes liegen, sind hingegen nicht von einem Kontrollvolumen umgeben, sondern von vier, zwei oder einem Oktanten. Der Vorteil der Verwendung eines Kontrollvolumenmodells liegt darin, daß sich ein Verfahren ergibt, das konservativ ist. Die Erhaltungsgesetze der in Kapitel 2.1 vorgestellten physikalischen Prozesse werden somit automatisch für das gesamte Rechengebiet erfüllt.

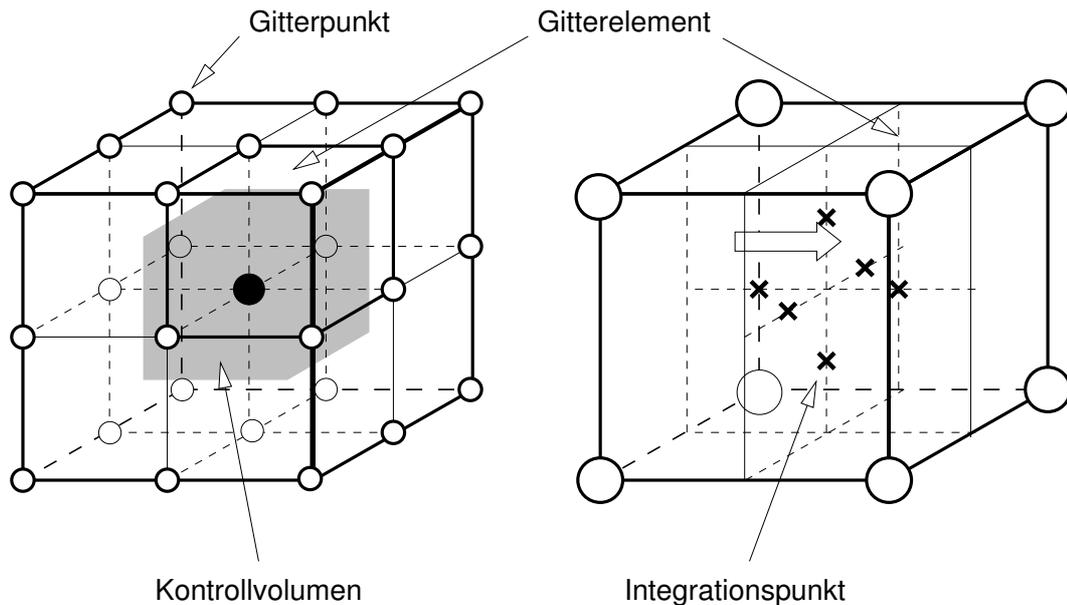


Abbildung 7.1: Schematische Darstellung des in TASCflow verwendeten Kontrollvolumens.

Alle Feldgrößen, also auch Druck und Geschwindigkeitskomponenten, werden ausschließlich an den Knotenpunkten der sogenannten Flukelemente gespeichert. Das damit verbundene Problem der Druck-Geschwindigkeits-Entkopplung wird durch eine Interpolation der Impulsgleichungen gelöst. Diese Vorgehensweise hat gegenüber derjenigen gestaffelter Gitter einige Vorteile, die im TASCflow-Handbuch eingehend erläutert werden. Die Volumenintegration der Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls, Energie und anderer skalarer Größen über die Kontrollvolumina führt auf ein System algebraischer Gleichungen, das in Form einer Matrixgleichung geschrieben werden kann.

TASCflow verwendet für die Lösung dieses Gleichungssystems ein robustes algebraisches Mehrgitterverfahren. Diese gehören zu den effizientesten Methoden zur Lösung großer, schwach besetzter Gleichungssysteme, da sie sich hinsichtlich des Rechenaufwandes zumindest theoretisch optimal verhalten. Während für klassische Eingitteriterationsverfahren wie z. B. Gauß-Seidel oder CG-basierte Strategien die Rechenzeit proportional zum Quadrat der Gitterpunktanzahl ansteigt, erreichen Mehrgitterverfahren eine lineare Abhängigkeit der Rechenzeit von der Anzahl der Gitterpunkte.

Die Idee der Mehrgitterverfahren besteht darin, die Lösung des diskretisierten Gleichungssystems durch die Lösung kleiner verwandter Systeme anzunähern. Klassische geometrische Mehrgitterverfahren (GMG) erzeugen diese Systeme durch Diskretisierung des Rechengebietes auf einem gröberen Gitter. Die Näherungslösung auf dem Grobgitter wird dann zur Verbesserung der Näherung auf dem feinen Gitter herangezogen. Die Grobgitterkorrektur für sich genommen stellt kein konvergentes Lösungsverfahren dar, sondern dient dazu, Fehler auf dem groben Gitter zu minimieren. Diese niederfrequenten Fehleranteile werden durch Eingitterverfahren nur sehr langsam gedämpft und führen zu einem schlechten Konvergenzverhalten.

Die während der iterativen Lösung ebenfalls auftretenden hochfrequenten Anteile werden durch das grobe Gitter jedoch nur schlecht erfasst, weshalb als zweite Komponente eines Mehrgitterverfahrens der Glätter für eine effektive Dämpfung dieser Fehler sorgt. GMG-basierte Verfahren arbeiten auf dem Gitter, auf dem das zu lösende Problem diskre-

tisiert wurde und orientieren sich bei der Vergrößerung an der Gittergeometrie. Da sich die Wahl des geeigneten Glättungsverfahrens nach dem Grad der Gitterauflösung und dem zugrundeliegenden kontinuierlichen Problem richtet, sind GMG-Methoden nur bedingt als „black box“-Löser geeignet. Algebraische Verfahren (AMG) umgehen dieses Problem, indem sie die Grobgittergleichung allein aus den Koeffizienten des linearen Gleichungssystems bestimmen, das durch Diskretisierung auf dem Feingitter entstanden ist. TASCflow verwendet als Algorithmus zur Konstruktion des Grobgitters ein additives Mehrgitterkorrekturverfahren (ACM, engl.: *Additive Correction Multigrid*), das die konservative Form der diskretisierten Bilanzgleichungen sicherstellt. Hierzu wird auf dem Grobgitter eine Korrektur bestimmt, die auf dem zugehörigen Feingitterblock zu einem verschwindenden Residuum führt. Auf dem so definierten Grobgitter wird dann ein lineares Gleichungssystem für die entsprechende Korrektur gelöst, das in seinem Aufbau dem des Feingitters entspricht.

Die Strategie der Grobgitterkorrektur besteht aus der Übertragung der Residuen des feinen Gitters (Restriktion) auf das grobe Gitter, der näherungsweise Berechnung der Residuumsleichung auf dem Grobgitter und der anschließenden Lösungskorrektur auf dem Feingitter (Prolongation). Dieses Verfahren wird im allgemeinen rekursiv angewendet, da die Grobgitterkorrektur iterativ bestimmt werden muß. Hierzu wird auf dem Grobgitter zunächst eine Näherungslösung bestimmt und diese nach dem gleichen Verfahren mit der Korrektur eines noch größeren Gitters verbessert. TASCflow verwendet eine zweimalige rekursive Anwendung dieses Beschleunigungsverfahrens, den sogenannten W-Zyklus.

Die erforderliche Druck-Geschwindigkeitskopplung erfolgt bei TASCflow nicht über das weit verbreitete SIMPLE-Verfahren bzw. dessen Derivate SIMPLER, SIMPLEC oder PISO, die iterativ Druckkorrekturgleichungen und Geschwindigkeitsgleichungen sequentiell lösen. Stattdessen löst TASCflow die Kontinuitäts- und Impulsgleichungen in einem vollständig gekoppelten Schritt. Dem Nachteil des höheren Speicheraufwandes steht dabei die geringere Anzahl benötigter Iterationen gegenüber. Da ein Gauss-Seidel Algorithmus die erforderliche strenge Kopplung zwischen der Impuls- und Kontinuitätsgleichung nicht gewährleistet, kommt als Glätter ein ILU-Verfahren (engl.: *Incomplete Lower Upper*) zum Einsatz.

7.2 Linearisierung der Quellterme

TASCflow löst für jeden zeitlich gemittelten Skalar eine allgemeine Transportgleichung der Form

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{\phi}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \tilde{\phi}) = \nabla \cdot \left(\bar{\rho} \left(D + \frac{\nu_t}{Sc_\phi} \right) \nabla \tilde{\phi} \right) + S_\phi. \quad (7.1)$$

Ziel des numerischen Verfahrens ist die Berechnung der Feldgröße $\tilde{\phi}$ an den diskreten Stützstellen im Rechengebiet. Dazu wird das Gebiet durch ein Netz unterteilt, dessen Kreuzungspunkte den Stützstellen des numerischen Verfahrens entsprechen. Die kontinuierliche Information, die die Differentialgleichung liefert, wird also durch diskrete Werte ersetzt. Damit ist es nun möglich, anstelle der Differentialgleichungen ein System von algebraischen Gleichungen herzuleiten, das die Strömungsgrößen an den Stützstellen miteinander verknüpft. Um eine effiziente Lösung zu ermöglichen, muß das resultierende System linear sein. Aufgabe des Verfahrens ist also auch die Linearisierung der Differentialgleichungen. Am Ende steht eine Gleichung für jeden Gitterpunkt P im Rechengebiet in der Form:

$$A_p \tilde{\phi}_p + \sum A_{nb} \tilde{\phi}_{nb} + S_\phi \Delta V = 0. \quad (7.2)$$

Hierbei bezeichnen $\tilde{\phi}_p$ und $\tilde{\phi}_{nb}$ den Wert des Skalars am betrachteten Knotenpunkt P bzw. den acht Nachbarknotenpunkten nb und A die finiten Volumenkoeffizienten, welche die Informationen über die zeitabhängigen, konvektiven sowie diffusiven Terme der Gleichung (7.2) beinhalten. Die von TASCflow verwendeten Diskretisierungsschemata erfordern positive Koeffizienten A_{nb} weshalb der Koeffizient A_p aufgrund der Regel der Summe der Nachbarkoeffizienten immer negativ sein muß. Eine Verletzung dieser Regel führt fast immer zu physikalisch unrealistischen Ergebnissen bzw. Konvergenzproblemen [158].

Der Quellterm S_ϕ wird auf das dem Gitterpunkt zugehörige Kontrollvolumen ΔV angewendet, und ist im allgemeinen eine nicht-lineare Funktion der Variablen $\tilde{\phi}$. Eine Berücksichtigung dieser Abhängigkeit in der diskretisierten Gleichung ist zwar wünschenswert, formal ist jedoch nur eine lineare Abhängigkeit der Form

$$S_\phi = S_A + S_B \tilde{\phi}_p \quad (7.3)$$

möglich. Hierbei beschreibt S_A den konstanten und S_B den linear mit $\tilde{\phi}_p$ variierenden Anteil des Quellterms, den so genannten aktiven Koeffizienten.

Der gesuchte Wert des Skalars am betrachteten Knotenpunkt $\tilde{\phi}_p$ ergibt sich durch Zusammenfassung der Gleichungen (7.2) und (7.3) zu

$$\phi_p = \frac{\sum A_{nb} \tilde{\phi}_{nb} + S_A \Delta V}{\sum A_{nb} - S_B \Delta V}. \quad (7.4)$$

Für die betrachteten Skalare ist der Wert einer Variablen an einem Gitterpunkt von den Werten der benachbarten Gitterpunkte abhängig. Daraus folgt, daß der Anstieg eines Wertes an einem Gitterpunkt auch zu einem Anstieg der Werte an den benachbarten Knoten führen muß. Deshalb ist es erforderlich, daß der Nenner in Gleichung (7.4) immer größer als oder gleich der Summe der Nachbarkoeffizienten $\sum A_{nb}$ ist. Andernfalls kann der Wert des Skalars $\tilde{\phi}_p$ trotz positiver Nachbarkoeffizienten und eines positiven Quellterms negativ werden. Deshalb dürfen nur negative Koeffizienten S_B berücksichtigt werden, die die Diagonaldominanz der Matrix sichern und verstärken [158].

Das System der linearen Gleichungen (7.4) stellt nur eine Näherungslösung für die Feldgröße $\tilde{\phi}$ dar, die fehlerbehaftet ist und iterativ korrigiert werden muß. Die korrekte Lösung läßt sich durch die Näherungslösung des letzten Iterationsschritts $\tilde{\phi}^0$ und einen Korrekturterm $\tilde{\phi}^+$ ausdrücken, der für eine konvergierende Lösung gegen null strebt:

$$\tilde{\phi} = \tilde{\phi}^0 + \tilde{\phi}^+. \quad (7.5)$$

Damit ergibt sich die sogenannte Residuen-Form der Gleichung (7.4)

$$A_p \tilde{\phi}_p^+ + \sum A_{nb} \tilde{\phi}_{nb}^+ + S_B \Delta V \tilde{\phi}_p^+ = -A_p \tilde{\phi}_p^0 - \sum A_{nb} \tilde{\phi}_{nb}^0 - (S_A + S_B \tilde{\phi}_p^0) \Delta V = R, \quad (7.6)$$

wobei R das Residuum am betrachteten Knotenpunkt zum jeweiligen Iterationsschritt bezeichnet. Diese Gleichung läßt sich nach der gesuchten Korrektur ϕ^+ auflösen, die für den Skalar ϕ an allen Gitterpunkten durch

$$\tilde{\phi}_p^+ = \frac{\sum A_{nb} \tilde{\phi}_{nb}^+ - R}{\sum A_{nb} - S_B \Delta V} \quad (7.7)$$

bestimmt wird. Daraus ist ersichtlich, daß die Art der Quelltermlinearisation auf das Lösungsverhalten der Gleichung (7.7) sowohl durch den aktiven Koeffizienten S_p als auch das Residuum in Form von $S_\phi^0 = S_A + S_B \tilde{\phi}_p^0$ Einfluß nimmt.

Um zu der von TASCflow verwendeten Linearisierungsvorschrift zu gelangen, müssen Gleichung (7.3) und (7.5) miteinander zu

$$S_\phi = S_A + S_B (\tilde{\phi}_p^0 + \tilde{\phi}_p^+) = S_\phi^0 + S_p \tilde{\phi}_p^+ \quad (7.8)$$

verknüpft werden. Hierbei bezeichnet $S_\phi^0 = S_A + S_B \tilde{\phi}_p^0$ den Quellterm im betrachteten Kontrollvolumen berechnet mit Werten des letzten Iterationsschritts.

Die Werte von S_ϕ^0 sowie des aktive Koeffizienten S_p sind von der betrachteten Transportgleichung abhängig und können mit Hilfe unterschiedlicher Verfahren bestimmt werden. Die im Rahmen dieser Arbeit angewendeten Methoden der Quelltermlinearisation für die Flammenfrontdichte sowie den Mittelwert und die Varianz des Reaktionsfortschritts sind Thema der nun folgenden Abschnitte.

7.2.1 Flammenfrontoberflächendichte

Die modellierte Transportgleichung der Flammenfrontdichte (6.43) läßt sich verallgemeinert wie folgt schreiben:

$$\mathcal{L}(\bar{\Sigma}) = (S_1 + S_2 - S_3 + S_4 + S_5) \bar{\Sigma} \quad \text{mit} \quad S_2 > 0, S_3 > 0. \quad (7.9)$$

Im Gegensatz zu dem Produktionsterm S_2 und dem Destruktionsterm S_3 können die Terme S_1 , S_4 und S_5 sowohl positive als auch negative Werte annehmen. Sie lassen sich aber folgt in einen positiven und negativen Anteil aufgespalten:

$$S_{1/4/5}^+ = \max(0, S_{1/4/5}) \quad (7.10a)$$

$$S_{1/4/5}^- = \max(0, |S_{1/4/5}|) . \quad (7.10b)$$

Somit läßt sich der Quellterm in Gleichung (7.9) durch positive und negative Anteile S^+ bzw. S^- darstellen:

$$\mathcal{L}(\bar{\Sigma}) = S^+ \bar{\Sigma} - S^- \bar{\Sigma} \quad (7.11)$$

Die Flammenfrontoberflächendichte ist immer positiv, ihre Transportgleichung besitzt aber sowohl Quell- als auch Senkenterme, so daß die Netto-Quelle häufig negativ wird. Um zu gewährleisten, daß keine negativen Werte der Flammenfrontoberflächendichte $\bar{\Sigma}$ auftreten, muß sichergestellt sein, daß der konstante Anteil S_{Σ}^0 des linearisierten Quellterms immer positiv ist. Dies kann durch folgende Quelltermlinearisierung

$$S_{\Sigma}^0 = S^+ \bar{\Sigma}^0 + S^- \bar{\Sigma}^0 \quad (7.12a)$$

$$S_p = -S^- \quad (7.12b)$$

sichergestellt werden. Mit Hilfe dieser Formulierung lassen sich alle in Kapitel 6.6 vorgestellten Flammenfrontdichtemodellen linearisieren, da nur die entsprechenden Koeffizienten der jeweiligen Quell- und Senkenterme in die obige Gleichung eingesetzt werden müssen.

Eine besondere Behandlung erfordert die Linearisierung des Krümmungsterms (siehe Kapitel 6.2.5), da die Funktion im Nenner $(1 - \tilde{c})$ bzw. $\tilde{c}(1 - \tilde{c})$ für den unverbrannten und ausgebrannten Zustand nicht definiert ist, und der Destruktionsterm bei Annäherung an diese Grenzen gegen unendlich streben würde:

$$\lim_{\tilde{c} \rightarrow 0,1} \frac{1}{\tilde{c}(1 - \tilde{c})} \rightarrow \infty. \quad (7.13)$$

Die Formulierung des Destruktionsterms ist semi-empirisch und soll sicherstellen, daß für die beiden Zustände verbrannt bzw. unverbrannt die Vernichtung von Flammenfrontoberfläche gegenüber der Produktion überwiegt, und dies unabhängig vom Turbulenzzustand. Daher kann für Werte von $\tilde{c} < c_0$ bzw. $\tilde{c} > c_1$ der Kurvenverlauf wie in Abbildung 7.2 dargestellt durch die Tangenten der Funktionen an $\tilde{c} = c_0$ bzw. $\tilde{c} = c_1$ ersetzt werden. Die Wahl der Parameter c_0 und c_1 richtet sich dabei nach der zu erwartenden Größe der Quellterme, da diese nicht vom Reaktionsfortschritt, sondern nur vom Turbulenzzustand abhängen. In den durchgeführten Simulationen wurde das in Kapitel 6.3 vorgestellte Wandmodell eingesetzt, welches unphysikalische Turbulenzgrößen in Wandnähe verhinderte. Werte von $c_0 = 10^{-4}$ sowie $c_1 = 0.9999$ erfüllen daher die Anforderungen ohne jedoch die Linearisierung zu beeinflussen und somit den Verlauf der Flammenfrontdichte zu verfälschen.

7.2.2 Reaktionsfortschrittsvariable

Da die Reaktionsfortschrittsvariable nur zwischen null und eins definiert, und der Quellterm immer positiv ist, bietet sich die folgenden Linearisierung nach einem Vorschlag von PATANKAR [158] an:

$$S_{\tilde{c}} = \frac{\bar{w}_c (1 - \tilde{c})}{\max(1 - \tilde{c}, c_{\delta})} \quad (7.14a)$$

$$S_p = -\frac{\bar{w}_c}{\max(1 - \tilde{c}, c_{\delta})} \quad (7.14b)$$

Diese Formulierung stellt sicher, daß ein Überschwingen der Lösung bei Annäherung an $\tilde{c} = 1$ vermieden wird, was das Konvergenzverhalten positiv beeinflusst. Der aktive Koeffizient (7.14b) ist in dieser Formulierung die Ableitung des Quellterms im c -Raum. Nähert

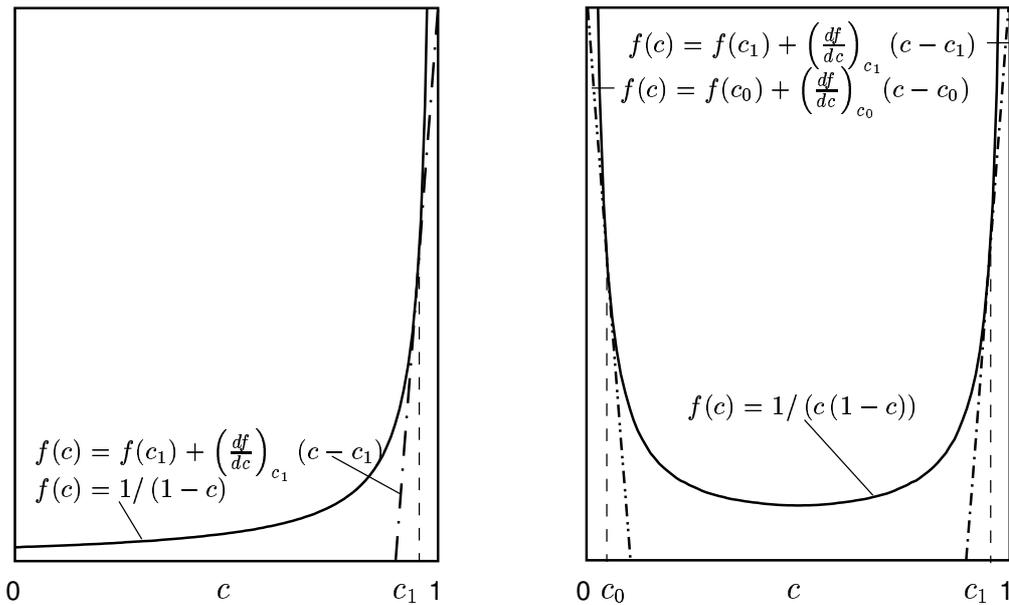


Abbildung 7.2: Zur Veranschaulichung der Linearisierung des Destruktionsterms

sich die Reaktionsfortschrittsvariable dem Wert eins, wird der aktive Koeffizient zunehmend größer und dämpft Änderungen des Quellterms \bar{w}_c . Auf diese Weise wird ein Überspringen der Lösung, d.h. Werte von c größer eins, verhindert. Die Formulierung des Nenners stellt sicher, daß der konstante Anteil der Quelltermlinearisierung immer endliche Werte annimmt und für $c \rightarrow 1$ gegen null strebt. Der Wert der kleinen Zahl c_δ ist mit 10^{-6} so gewählt, daß er kleiner als der angestrebte absolute Fehler mit $5 \cdot 10^{-5}$ ist. Der durch die Quelltermlinearisierung eingegangene Fehler hat daher keinen Einfluß auf die konvergierte Lösung.

7.2.3 Reaktionsfortschrittsvarianz

Die Varianz des Reaktionsfortschritts ist immer positiv. Ihre Transportgleichung besitzt aber sowohl Quell- als auch Senkenterme, so daß die Netto-Quelle häufig negativ wird. Die Quelltermlinearisierung muß daher so gewählt werden, daß keine negative Werte der Reaktionsfortschrittsvarianz \widetilde{c}''^2 auftreten können. Die Quellen der Reaktionsfortschrittsvarianz, bestehend aus Produktion aufgrund von Gradienten des zeitlich mittleren Reaktionsfortschritts, Dissipation und chemischer Reaktion (siehe Gl. (5.23)) lassen sich in ihre positiven und negativen Anteile wie folgt zerlegen:

$$S_{\widetilde{c}''^2} = S^+ - S^- \quad \text{mit} \quad S^+ > 0, S^- > 0. \quad (7.15)$$

Der aktive Koeffizient muß nach den Regeln der Quelltermlinearisierung immer negativ sein. Wird daher der Destruktionsterms mit der Reaktionsfortschrittsvarianz erweitert,

$$S = S^+ - \frac{S^-}{\widetilde{c}''^2}, \quad (7.16)$$

läßt sich die folgende Linearisierungsvorschrift ableiten:

$$S_{\widetilde{c}''^2}^0 = S_{\widetilde{c}''^2}^+ \quad (7.17a)$$

$$S_p = -\frac{S_{\tilde{c}^{n2}}^-}{\max(\tilde{c}^{n2}, c_\delta)} \quad (7.17b)$$

Diese Vorschrift erfüllt die Regeln der Quelltermlinearisierung und führt zu einem sehr guten Konvergenzverhalten.

7.3 Prä- und Postprozessor

Neben der Beschreibung der Verbrennungsreaktion sind bei der Modellierung technisch relevanter Systeme noch andere physikalische Prozesse zu berücksichtigen, wie Wärmeleitung, Wärmestrahlung oder Zerstäubung und Verdampfung. Um praxisnahe Probleme mit den heutigen Rechnerkapazitäten simulieren zu können, müssen daher alle Teilmodelle auf die unbedingt erforderliche Genauigkeit reduziert werden. Eine weitere wichtige Aufgabe stellt die effiziente Gestaltung des Berechnungsvorgangs dar. Häufig können Teilmodelle getrennt von der eigentlichen Strömungssimulation behandelt werden. In solchen Fällen läßt sich der Rechenzeitbedarf durch den Einsatz eines Präprozessors deutlich reduzieren. In einer so genannten Vorabberechnung (engl.: *Preprocessing*) werden Schritte, die während der Strömungssimulation immer wieder in der gleichen Art und Weise ablaufen, vor derselben durchgeführt, und die Ergebnisse in Form von Tabellen abgelegt. Hierbei ist der Zustandsraum aller Einflußparameter zu berücksichtigen, damit während der eigentlichen Strömungsberechnung die benötigten Werte aus der Tabelle mittels geeigneter Interpolation ermittelt werden können. Die Effizienz des Preprocessings hängt maßgeblich von dem gewählten Tabellieralgorithmus ab. Dieser sollte für den ingenieurmäßigen Einsatz die folgenden Kriterien erfüllen: Optimierter Speicherbedarf, optimierte Zugriffszeit, flexible Datenstruktur, um das Tabellierungsverfahren auf unterschiedliche Problemstellungen anwenden zu können, sowie Portabilität des Programms.

Um diese Randbedingungen zu erfüllen, wurde im Rahmen dieser Arbeit der Präprozessor PrePDF entwickelt. Das Programm PrePDF hat die Aufgabe, die Integrale des *c*-PDF Modells sowie des CF-5 Modells auszuwerten, und die Ergebnisse in einer Tabelle abzulegen. Diese Tabelle kann anschließend mit einem entsprechenden Schnittstellenmodul durch den Strömungslöser ausgelesen werden. Der Aufwand zum Auslesen der Tabelle wurde minimiert, indem ein adaptiver Tabellieralgorithmus von HABISREUTHER [87] verwendet wurde. Dieser Algorithmus wurde zuerst von MAAS und POPE [142] vorgeschlagen und u.a. in den Arbeiten von HABISREUTHER [88] sowie THEISSEN [219] angewendet. Eine ausführliche Beschreibung des Programms und der verwendeten Algorithmen würde den Rahmen dieser Arbeit sprengen, weshalb an dieser Stelle auf die Dokumentation des Präprozessors verwiesen wird [100]. Die Anwendbarkeit des Präprozessors auf technische Probleme finden sich in den Arbeiten von HOFFMANN und GROSSCHMIDT [101].

7.3.1 Tabellen des *c*-PDF Verbrennungsmodells

Im Hinblick auf das Wahrscheinlichkeitsdichtemodell wird sowohl die Berechnung der Chemie als auch die Integration in einem Preprocessing-Schritt durchgeführt. Der Chemielöser berechnet in einem homogenen System den Reaktionsverlauf eines reagierenden Brennstoff/Luft Gemisches. Das chemische System wird mit Hilfe der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik abgebildet und als Funktion der Reaktionsfortschrittsvariablen *c* tabelliert. Die Mittelwerte (Gl. (5.19), Gl. (5.26)–(5.28)) werden durch Wichtung mit der angenommenen PDF und adaptive Integration über den Zustandsraum der Reaktionsfortschrittsvariablen bestimmt. Die abgeschnittene Gaußfunktion und die β -Funktion sind durch \tilde{c} und \tilde{c}''^2 bestimmt. Daher werden die gemittelten Werte als Funktion dieser beiden Parameter in der eingangs erwähnten adaptiven Tabelle abgelegt. Während der Strömungsberechnung werden die erforderlichen Mittelwerte der Dichte, der mittleren Reaktionsrate und des Reaktionsquellterms der Fortschrittsvarianz aus der Tabelle gelesen. Nach Abschluß der Strömungsberechnung werden in einem Nachbearbeitungsschritt (engl.: *Postprocessing*)

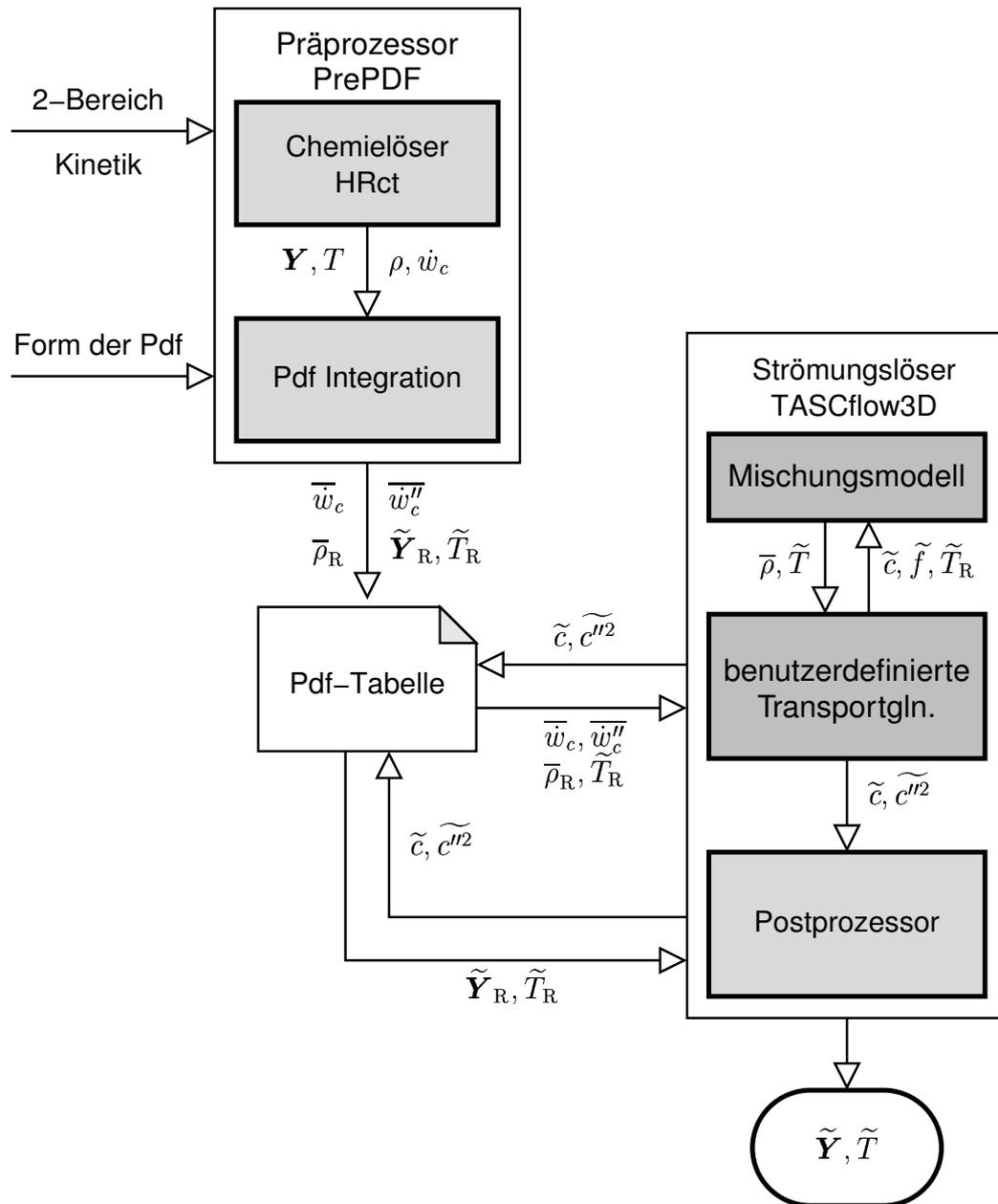


Abbildung 7.3: Schematische Darstellung einer Verbrennungsrechnung mit dem c -PDF Modell.

die Mittelwerte der Spezieskonzentrationen und die mittlere Temperatur bestimmt. Der grundsätzliche Ablauf einer Verbrennungsrechnung mit dem c -PDF Modell ist in Abbildung 7.3 schematisch dargestellt.

7.3.2 Tabellen des Flammenfrontdichtemodells

Die Abbildung (7.4) zeigt schematisch den Berechnungsverlauf bei der Verwendung detaillierter Chemie. Die Aufgabe des Chemielösers besteht in der Simulation der in Abschnitt 6.4.1 beschriebenen laminaren, gedehnten Vormischflammen. Das eindimensionale Gleichungssystem wird mit Hilfe des CHEMKIN-basierten FORTRAN77 Programms SPOF gelöst, welches im Rahmen dieser Arbeit entwickelt wurde. Für eine ausführlichere Beschreibung des Programms wird aus Platzgründen an dieser Stelle auf die Programmdokumentation verwiesen [99]. Zur Berechnung der Flamelets wurde der in Anhang A.1 aufgeführte Reaktionsmechanismus der Methanverbrennung verwendet. Im Rahmen dieser Arbeit wurden nur die Gleichgewichtszustände der Flamelets betrachtet, d. h. die Flammengeschwindigkeit, sowie die Temperaturen, Dichten und Konzentrationen des unverbrannten bzw. ausgebrannten Gemischs. Die zeitlich mittleren Größen (Gl. (6.61)–(6.64)) lassen sich dann mit Hilfe einer angenommenen Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen für die Dehnungsrate (Gl. (6.59)) bestimmen und in einer Tabelle als Funktion der zeitlich mittleren Streckungsrate K_t , die über Gleichung (6.60c) definiert ist, ablegen. Um den Speicherplatzbedarf und die Zugriffszeiten zu minimieren wird wie beim c -PDF Modell das adaptive Tabellierungsverfahren eingesetzt. Während der Berechnung der turbulenten Vormischflamme werden die Flammengeschwindigkeiten als Funktion der lokalen Streckungsrate aus der Tabelle ausgelesen. Alle anderen interessierenden Größen können nach erfolgter Strömungsberechnung in einem nachgelagerten Schritt mit Hilfe der Tabelle bestimmt werden.

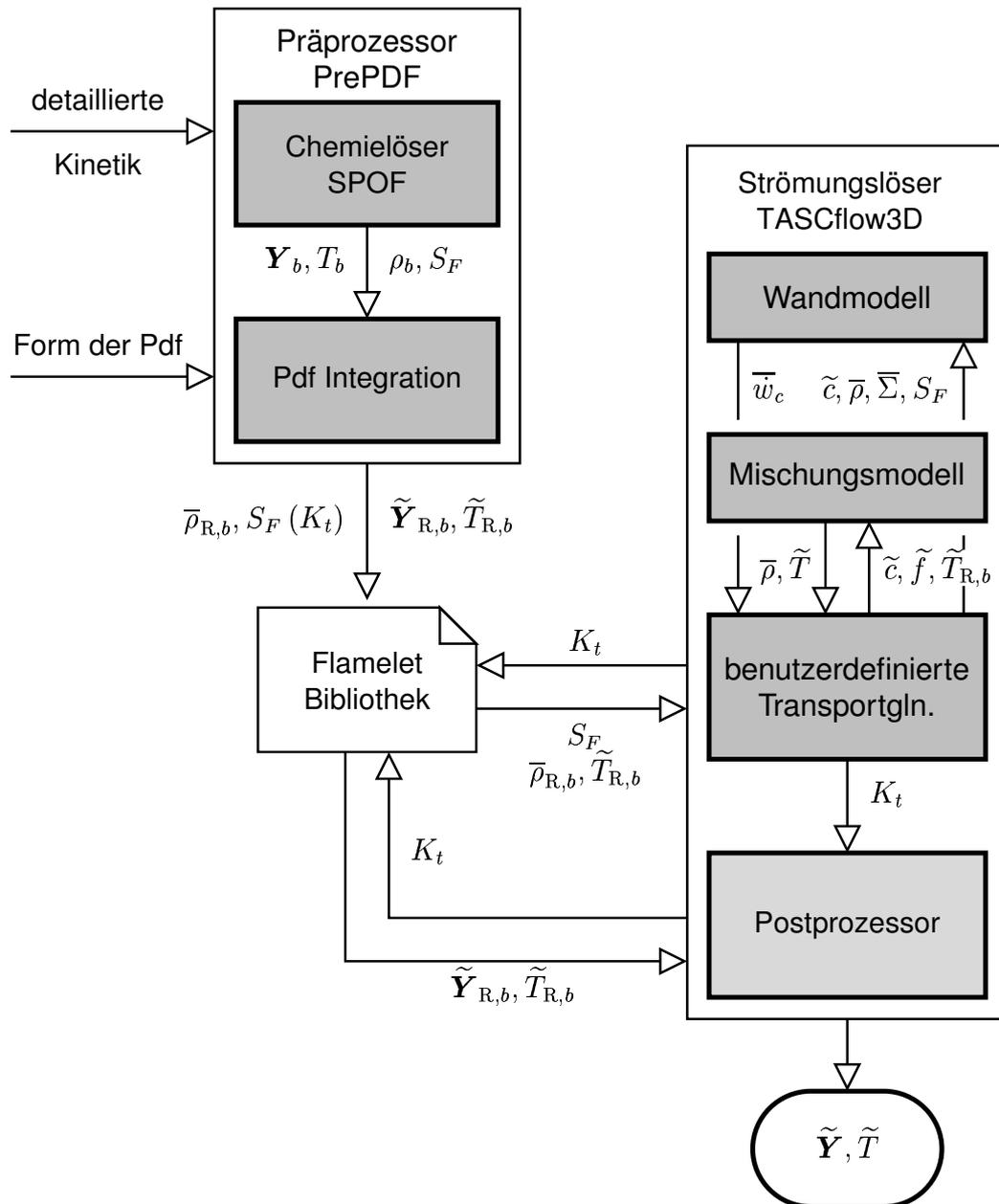


Abbildung 7.4: Schematische Darstellung einer Verbrennungsrechnung mit dem Flammenfrontdichtemodell (CF-5).

Kapitel 8

Ergebnisse und Diskussion

8.1 Einordnung der untersuchten Flammen in das Verbrennungsdiagramm

In den folgenden Abschnitten werden die in Kapitel 5 und 6 vorgestellten Modelle anhand von fünf unterschiedlichen, detailliert vermessenen Testflammen validiert und miteinander verglichen. Zur Lösung der FANS-Gleichungen wurden sowohl des $k-\varepsilon$ als auch das $k-\omega$ -Modell eingesetzt. Alle untersuchten Testflammen sind axialsymmetrische turbulente Bunsenflammen, die sich aber hinsichtlich ihrer turbulenten Reynolds- und Karlovitzzahlen unterscheiden. Die Flamme G26 ist eine nicht vorgewärmte, angemagerte turbulente Bunsenflamme mit einem kalten Co-Flow, die am Engler-Bunte-Institut im Rahmen des TECFLAM-Forschungsvorhabens vermessen wurde. R408, R403 und R309 bezeichnen unterschiedliche nicht-isenthalpische Freistrahlfammen. Sie wurden mit einem am Engler-Bunte-Institut entwickelten Matrixbrennersystems erzeugt, das gasturbinenspezifische Verbrennungszustände unter definierten Randbedingungen erzeugen kann. Aus diesem Grund zeichnen sich die ausgewählten Testflammen durch sehr hohe turbulente Reynoldszahlen, magere Methan/Luft-Gemische und Vorwärmtemperaturen bis 400°C aus. Der Testfall F3 wurde am Institut für Technische Mechanik in Aachen im Rahmen des JOULE-Projekts vermessen und ist eine stöchiometrische Freistrahlfamme, die durch einen Heißgas-Co-Flow gleicher Luftzahl stabilisiert wird. Auf diese Weise können größere Karlovitzzahlen realisiert werden als dies mit der Wasserstoffpilotstabilisierung der anderen untersuchten Flammen möglich ist.

Die Tabelle 8.1 gibt einen Überblick über die globalen, charakteristischen Betriebsbedingungen der fünf Flammen. Die angegebenen Größen sind Meßwerte, die den entspre-

Testfall	G26	R408	R403	R309	F3
D / mm	80	150	150	112.5	12
Luftzahl λ	1.25	1.45	1.75	2.2	1.0
T_0 / K	298	298	673	673	298
$u_0 / \text{m/s}$	10	14	22.5	23.5	30
$u_t / \text{m/s}$	1.7	2.7	3.3	3.1	1.6
l_t / mm	5	8.2	8.2	6.5	2.4

Tabelle 8.1: Globale charakteristische Betriebsbedingungen der untersuchten Flammen.

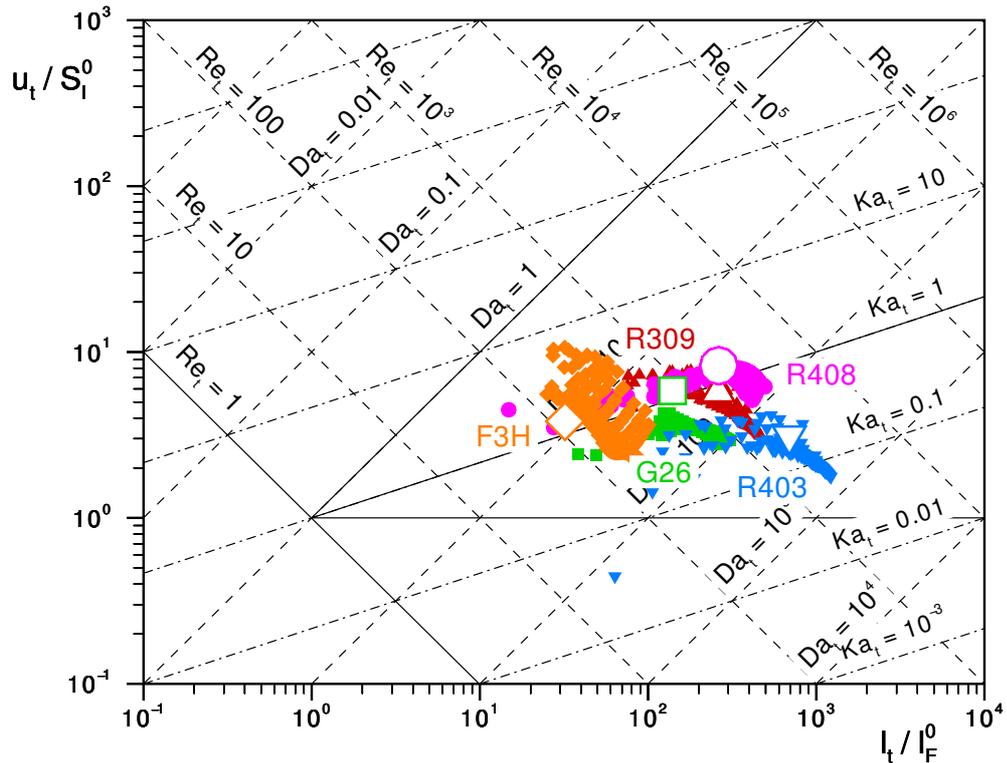


Abbildung 8.1: Einordnung der Testflammen in das Verbrennungsdiagramm. Testflamme G26: Grünes Quadrat, Testflamme R309: Rotes Dreieck, Testflamme R403: Blaues Gradientensymbol, Testflamme R408: Violetter Kreis, Testflamme F3: Orangener Diamant. Die großen leeren Symbole stehen für die experimentell ermittelten Kenngrößen, die kleinen gefüllten Symbole markieren die Zustände in der turbulenten Flammenfront.

chenden Veröffentlichungen entnommen wurden und beziehen sich auf die Zustände am Düsenaustritt. Die Lage der Testflammen im Verbrennungsdiagramm ist in Abbildung 8.1 dargestellt. Die großen leeren Symbole kennzeichnen die Zustände auf Basis der globalen charakteristischen Betriebswerte aus Tabelle 8.1. Zusätzlich sind in das Diagramm Zustände, wie sie innerhalb der turbulenten Flammenfront vorkommen, eingetragen. Sie werden durch kleine gefüllte Symbole repräsentiert und sind den Ergebnissen der Simulationsrechnungen entnommen worden. Anhand dieser Darstellung ist erkennbar, daß die untersuchten Testflammen einen Bereich der turbulenten Reynoldszahl von $100 < Re_t < 2000$ und Karlovitzzahlen von $0.1 < Ka_t < 10$ abdecken. Mit Ausnahme der Flamme R403 liegen alle Testfälle mit ihren Eintrittsbedingungen nahe bzw. oberhalb des Klimov-Williams-Kriteriums von $Ka_t = 1$, d. h. in den Bereichen der gefalteten und verdickt/gefalteten Flammen. Die Matrixflammen sind hinsichtlich ihrer turbulenten Reynoldszahl mit Gasturbinenflammen vergleichbar (vgl. Abb. 3.12), erreichen aber nicht die vermuteten hohen Karlovitzzahlen von $Ka_t > 10$ und damit den Bereich der zerrissenen Flammenfronten bzw. der verteilten Reaktion. Der Bereich der mäßig intensiven Verbrennung, wie sie z. B. in Verbrennungsmotoren stattfindet, wird durch die Bunsenflamme G26 abgedeckt. Die Flamme F3 zeichnet sich durch die niedrigsten turbulenten Reynolds- aber die höchsten Karlovitzzahlen aus und stellt damit, zusammen mit den Testfällen R309 und R408, eine besondere Herausforderung für Modelle, die auf dem Flamelet-Ansatz basieren, dar.

8.2 TECFLAM-Bunsenflamme

8.2.1 Experimenteller Aufbau

Bei der TECFLAM Bunsenflamme handelt es sich um eine vorgemischte Methan/Luft Freistrahlfamme, die im Rahmen der Arbeitsgemeinschaft TECFLAM entwickelt und als Standardflamme eingesetzt wurde. Die von SCHUNK [201] vermessene Flamme G26 bildet die Grundlage für die Validierung der untersuchten Verbrennungsmodelle im niederturbulenten Bereich.

Der Brennerkopf, dargestellt in Abbildung 8.2, besteht aus der Brennerdüse mit einer Stabilisierungseinrichtung und einem Luft Co-Flow. Dieser hat die Aufgabe, die Flamme von störenden Einflüssen der Umgebungsluft abzuschirmen und definierte Randbedingungen zu gewährleisten. Das Erdgas/Luft Gemisch wird zunächst in den Brennertopf und durch einen Strömungsgleichrichter geleitet, bevor es der Brennerdüse mit einem Innendurchmesser von 80mm zugeführt wird. In diesem befindet sich 80mm vor dem Düsenaustritt ein Turbulenzgitter, das eine näherungsweise homogene, isotrope Düsenströmung erzeugt. Das Turbulenzgitter besitzt kreisförmige Gitteröffnungen mit einem Durchmesser von $d = 9\text{mm}$ und einen Versperrungsfaktor von 0.65. Die Flammenstabilisierung wird durch eine Wasserstoffpilotflamme am Düsenrand sichergestellt. Hierzu wird Wasserstoff

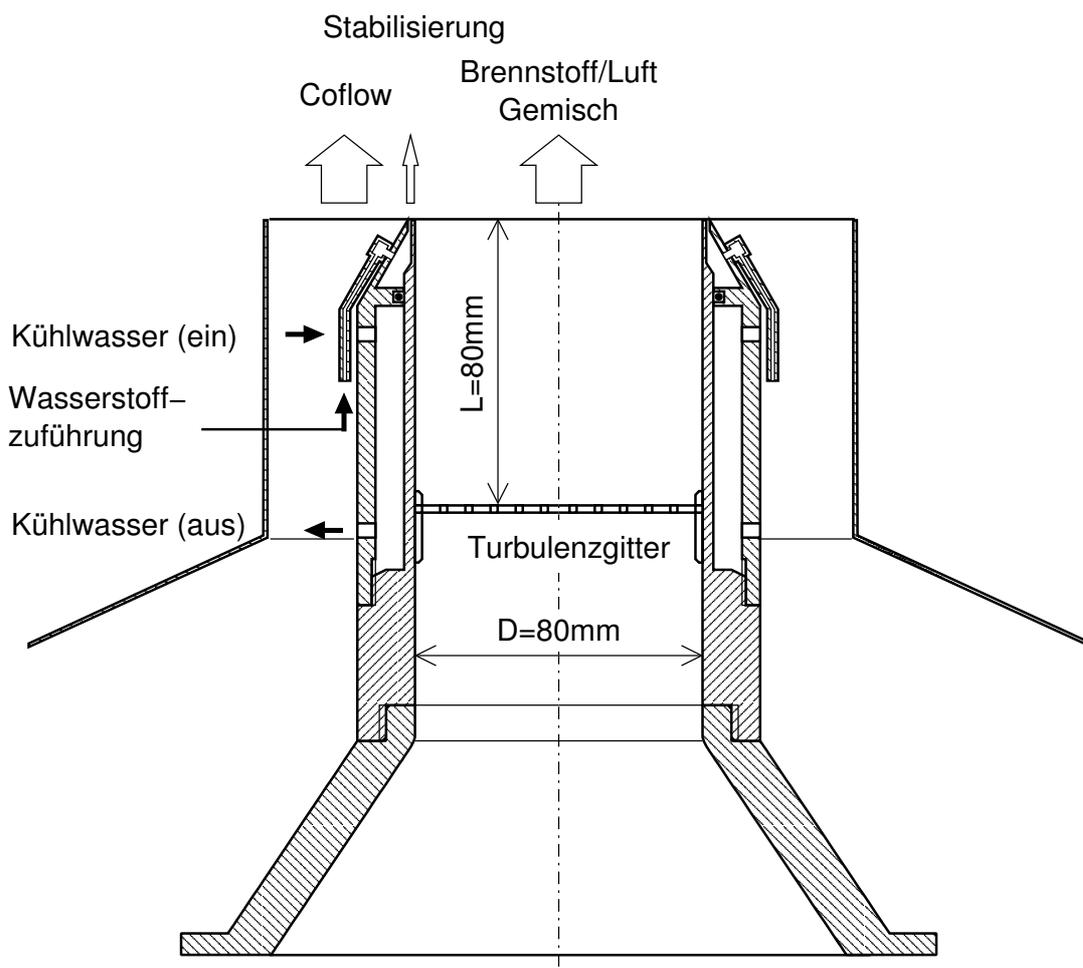


Abbildung 8.2: Brennerkopf des TECFLAM-Bunsenbrenners.

über einen konzentrischen Ringspalt am Düsenende in das Erdgas/Luft Gemisch eingedüst. Es bildet sich eine teilvorgemischte Ringflamme aus, die die Hauptflamme zündet und somit stabilisiert. Da sich das Brennerrohr durch die Flamme stark erwärmt, wird es durch einen Wassermantel gekühlt. Um eine möglichst gleichmäßige Geschwindigkeitsverteilung des Co-Flows zu gewährleisten, wird der notwendige Luftstrom über zwölf rotationssymmetrische Verteiler in ein Mantelrohr geführt, welches konzentrisch zur Brennerdüse angeordnet ist. Das Mantelrohr ist leicht abgeschrägt, um Störungen der Strömung zu minimieren. Das Methan/Luft Gemisch und der Co-Flow wurden für LDA-Messungen mit Magnesiumoxidpartikeln getracert. Außerdem liegen detaillierte Feldmessungen der zeitlich mittleren Konzentrationen von CH_4 , O_2 , CO_2 , CO sowie H_2O vor. Eine ausführlichere Beschreibung des Versuchsaufbaus, der Meßverfahren sowie der Versuchsdurchführung findet sich in der Arbeit von SCHUNK [201].

8.2.2 Randbedingungen

Die Struktur des turbulenten Strömungsfeldes hinter einem durchströmten Turbulenzgitter mit dem Lochdurchmesser d kann in zwei Zonen unterteilt werden: Die Produktions- und die Dissipationszone. Die Produktionszone erstreckt sich vom Turbulenzgitter bis zu einem dimensionslosen Abstand von etwa $x/d = 4$. In diesem Bereich überwiegt die Turbulenzproduktion aufgrund der Nachlaufeffekte hinter den Gitterstangen und den damit verbundenen Geschwindigkeitsgradienten. Die turbulente kinetische Energie erreicht daher am Ende dieser Zone ihr Maximum. An die Produktionszone schließt sich die Dissipationszone an, in der die Turbulenzproduktion wegen der zunehmenden Vergleichmäßigung des Strömungsprofils gegenüber den viskosen Effekten vernachlässigbar wird. Messungen von LIU [138] zeigen, daß die Turbulenzproduktion ab einem dimensionslosen Abstand von etwa $x/d = 10$ von untergeordneter Bedeutung ist, so daß der Verlauf der turbulenten kinetischen Energie durch die folgende Bilanzgleichung angenähert werden kann:

$$\tilde{u} \frac{d\tilde{k}}{dx} = -\tilde{\varepsilon} \propto \frac{u_t^3}{l_t}. \quad (8.1)$$

Anhand vermessener axialer Verläufe der turbulenten kinetischen Energie \tilde{k} lassen sich bei Annahme einer konstanten mittleren Axialgeschwindigkeit \tilde{u} Zusammenhänge der Form

$$\tilde{k} \propto c_1 \left(\frac{x}{D} \right)^{c_2} \quad (8.2)$$

bestimmen. Die gesuchte Dissipationsrate $\tilde{\varepsilon}$ ergibt sich schließlich durch Kombination von Gleichung (8.1) und (8.2) als Funktion des dimensionslosen Abstands x/D . Auf Basis der Messungen von LIU [138] wurden für das Gitter G26 die entsprechenden Konstanten und damit die Einlaßrandbedingungen für \tilde{k} und $\tilde{\varepsilon}$ festgelegt. Für den Co-Flow stehen nur Messungen der Geschwindigkeitsschwankungen und des integralen Längenmaßes in der Austrittsebene zur Verfügung. Die turbulente Dissipationsrate wurde daher über die Beziehung

$$\tilde{\varepsilon} = 0.37 \frac{u_t^3}{l_t} \quad (8.3)$$

bestimmt. Abbildung 8.3 zeigt die Verläufe der mittleren Geschwindigkeiten, der turbulenten kinetischen Energie und der Dissipationsrate, wie sie für die Berandung „Düse“ und

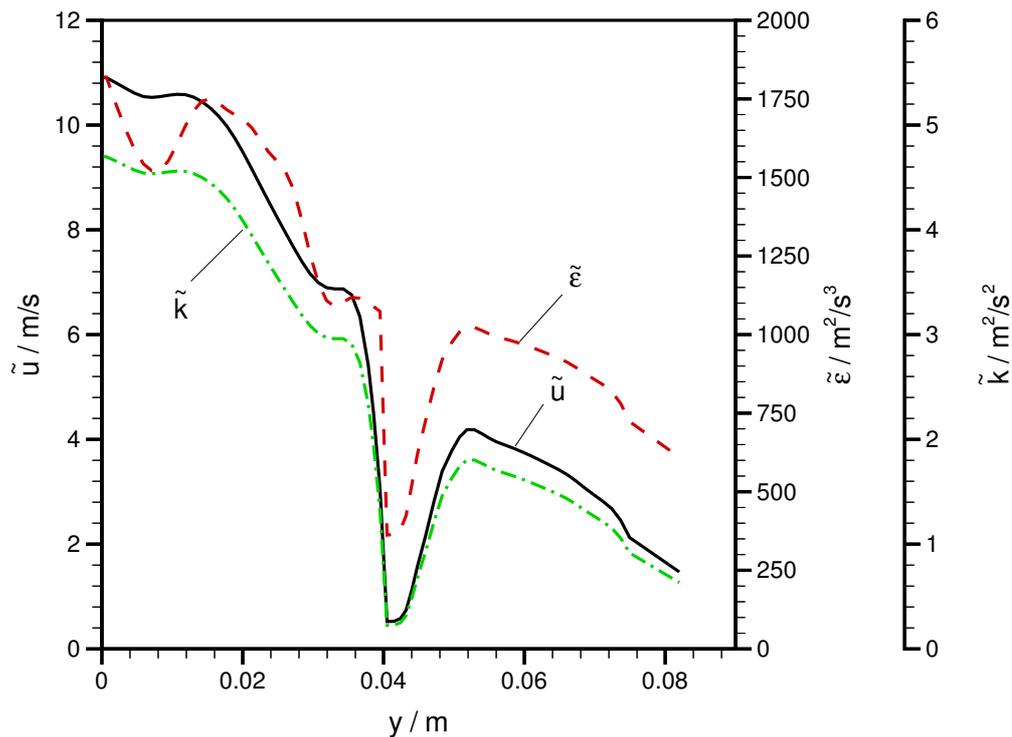


Abbildung 8.3: Strömungsrandbedingungen für Düse und Co-Flow der Testflamme G26.

„Co-Flow“ vorgegeben werden. Abbildung 8.4 zeigt das Rechengitter und die zugehörigen Randbedingungen.

Am Einströmrand wird eine konstante Geschwindigkeit von $\tilde{u}_0 = 5\text{ m/s}$ angenommen, während die Turbulenz über den Turbulenzgrad

$$Tu = \frac{u_t}{\tilde{u}} \quad (8.4)$$

mit $Tu = 0.2$ und einem integralen Längenmaß von $l_t = 10^{-4}\text{ m}$ abgeschätzt wird. Die seitliche Berandung „Umgebung“ wird als offener Rand spezifiziert. Diese Art der Randbedingung erfordert nur die Vorgabe eines Referenzdrucks p_{ref} an einem einzigen Randgitterpunkt, wohingegen die Geschwindigkeiten und der Druck über die gesamte Berandung Teil der Lösung sind. Die Fläche „Auslaß“ wird mit einer freien Druckrandbedingung belegt. Der Referenzdruck beträgt an der in Abbildung 8.4 gekennzeichneten Stelle 1bar.

Das Strömungsfeld ist rotationssymmetrisch, weshalb der Deck- und Bodenfläche des Rechengbietes Symmetrierandbedingungen zugewiesen werden¹. Die Wasserstoffpilotflammen werden durch Vorgabe eines ausgebrannten Gemischs an der Einlaßrandbedingung „Pilot“ vorgegeben. Der Einfluß der Wasserstoffstabilisierung auf die Flammencharakteristik wurde eingehend in der Arbeit von SCHUNK untersucht. Er konnte mit Hilfe der Konzentrationsmessungen und einer Elementbilanz zeigen, daß der Stabilisierungswasserstoff einen vernachlässigbaren Einfluß auf die Struktur der Flamme besitzt. Das gleiche insensitive Verhalten wurde in den Simulationsrechnungen festgestellt.

¹TASCflow3d kann nur dreidimensionale Gittergeometrien behandeln. Das Rechengbiet ist daher ein Kuchenstück des rotationssymmetrischen Problems mit einem Öffnungswinkel von 6° und drei Gitterebenen.

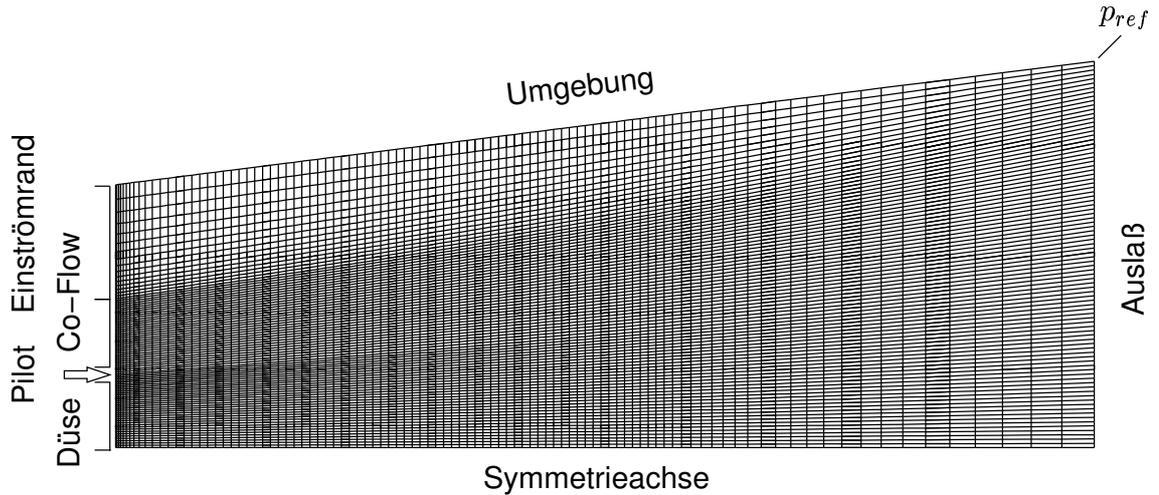


Abbildung 8.4: Gittergeometrie und Randbedingungen der Testflamme G26.

In Tabelle 8.2 sind alle relevanten Randbedingungen der Testflamme G26 zusammengefaßt.

Randbedingung	Düse	Co-Flow	Pilot	Einströmrand
Luftzahl λ	1.25	∞	1.25	∞
\tilde{T} / K	298	298	1600	298
\tilde{u} / m/s	siehe Abb. 8.3	siehe Abb. 8.3	5	0.1
\tilde{k} / m ² /s ²	siehe Abb. 8.3	siehe Abb. 8.3	1.5	3.75^{-5}
$\tilde{\varepsilon}$ / m ² /s ³	siehe Abb. 8.3	siehe Abb. 8.3	9186	118
\tilde{c}	0	1	0.4	1
$\tilde{\Sigma}$	0	0	500	0
\tilde{f}	1	0	1	0

Tabelle 8.2: Randbedingungen der Testflamme G26.

8.2.3 Ergebnisse

Die Abbildung 8.5 zeigt gemessene (links) und berechnete (rechts) Verteilungen der Axialgeschwindigkeit \tilde{u} und der turbulenten kinetischen Energie \tilde{k} für die Rechnung mit dem CF-4 Modell. Das Frischgas besitzt nach dem Austritt aus der Brennerdüse nur eine axiale Strömungskomponente. Die Flamme heizt das anströmende Gemisch auf, wodurch es expandiert, und eine radiale Geschwindigkeitskomponente hinzukommt. Diese nimmt mit fortschreitender Reaktion, d. h. steigender Temperatur, zu. Der in der Reaktionszone expandierende Gasstrom schirmt das nachströmende Frischgemisch gegenüber dem Co-Flow ab, so daß die Axialgeschwindigkeit innerhalb des Kegels nahezu konstant bleibt. Am Ende der Reaktionszone kommt es zu keinem weiteren Temperaturanstieg und somit zu keiner weiteren Volumendilatation, weshalb die Luft des Co-Flows in die Rauchgase der Flamme einmischen kann. Der damit verbundene Impulsaustausch führt zu einer Absenkung der Axial- und der Radialgeschwindigkeit ab $x/D = 3$. Die turbulente kinetische Energie nimmt im Potentialkern der Düsenströmung mit zunehmendem Abstand vom

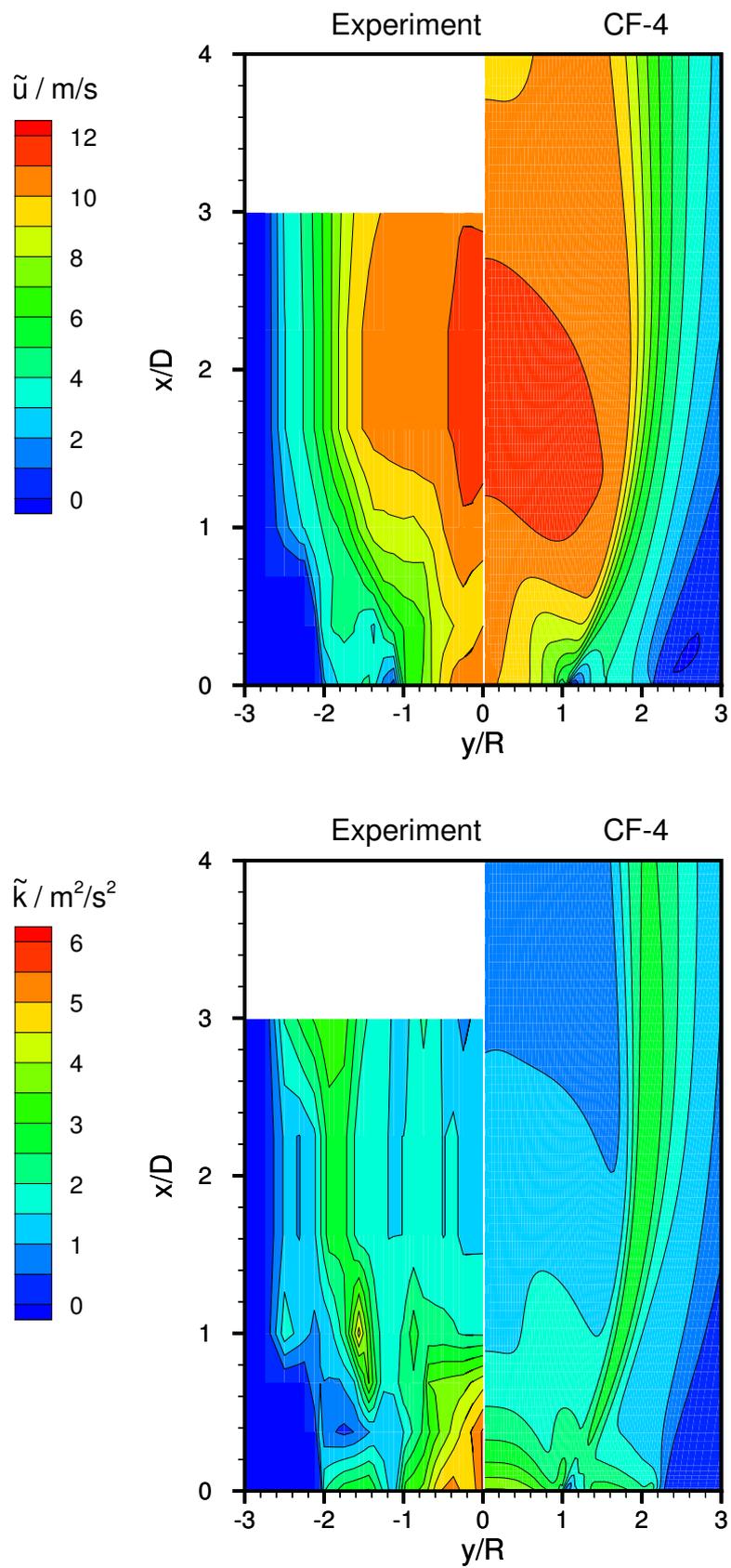


Abbildung 8.5: Testflamme G26. Vergleich gemessener und berechneter Axialgeschwindigkeiten sowie der turbulenten kinetischen Energie.

Turbulenzgitter bzw. des Düsenaustritts ab. In der Scherzone zwischen Düsenströmung und Co-Flow ist aufgrund des Geschwindigkeitsgradienten ein Anstieg der turbulenten kinetischen Energie zu beobachten. Für die Flamme ist dies aber nicht von Bedeutung, da sie sich weiter in Achsnähe ausbildet. Dort nimmt die turbulente kinetische Energie Werte zwischen 1.2 und $2.5 \text{ m}^2/\text{s}^2$ an. Der in Abbildung 8.5 dargestellte Vergleich von Feldmessung und Simulationsergebnissen des k - ε -Modells zeigt eine gute Übereinstimmung sowohl hinsichtlich der Axialgeschwindigkeit als auch der turbulenten kinetischen Energie. Defizite sind im Bereich des Düsenaustritts zu erkennen, wo die turbulente kinetische Energie als zu gering angenommen wird. Außerdem überschätzt das Modell die Geschwindigkeitserhöhung im Bereich der Flammenfront, was zu einer zu großen Strömungsdivergenz im Bereich der Scherzone führt. In Bereichen, in denen sich die Flamme ausbildet, wird die gemessene Verteilung der turbulenten kinetischen Energie durch die Simulation aber gut wiedergegeben.

Die Abbildungen 8.6–8.8 vergleichen gemessene (links) und berechnete (rechts) Verteilungen der Methankonzentration. Das CF-1 Modell erzielt eine sehr gute Übereinstimmung sowohl hinsichtlich der Flammenfrontlänge als auch der turbulenten Flammenfrontdicke. Der Proportionalitätskonstante der turbulenten Flammenfrontdehnung, welche die Länge der turbulenten Flammenfront und damit die turbulente Flammengeschwindigkeit bestimmt, wurde hierzu der Wert $C_{K_t} = 6$ zugewiesen.

Ein deutlich schlechteres Ergebnis wird hingegen mit dem CF-2 Modell erzielt. Abbildung 8.6 zeigt eine zu kurze und zu dicke Flamme, was auf eine überschätzte skalare Dissipationsrate schließen läßt. Da diese im Modellansatz maßgeblich durch die turbulente Dehnungsrate $\mathcal{O}(\tilde{\varepsilon}/\nu)$ bestimmt wird, folgt, daß die dissipativen Skalen als charakteristische Skalen zur Beschreibung der Interaktion Flamme-Turbulenz im Bereich mäßiger Turbulenzgrade ungeeignet sind.

Da das CPB Modell die Flammenfrontdehnung ebenfalls auf Basis der dissipativen Turbulenzskalen modelliert, ist es wie das CF-2 Modell nicht in der Lage die Flammenfrontkontur korrekt vorherzusagen. Ein Vergleich der beiden Modelle zeigt, daß die Lage der dem Frischgemisch zugewandten Seite, d. h. der Kegelwinkel der Flamme, maßgeblich durch die turbulente Flammenfrontdehnung Term $K_t \bar{\Sigma}$ bestimmt ist. Dies veranschaulicht die Annahmen, die dem KPP-Theorems zur Bestimmung der turbulente Flammengeschwindigkeit (vgl. Abschnitt 3.4 und Anhang B) zugrunde liegen. Die Dicke der turbulenten Flammenfront und damit die Verteilung der Flammenfrontdichte wird hingegen durch den Destruktionsterm bestimmt.

Das Modell von MANTEL und BORCHI (MB-Modell) beschreibt die turbulente Flammenfrontdehnung zwar ebenfalls über die Kolmogorovgrößen, skaliert aber, im Gegensatz zu den übrigen Modellen, auch den Destruktionsterm mit der turbulenten Reynoldszahl. Außerdem steht im Nenner des Destruktionsterms (6.76) der Ausdruck $\bar{c}(1 - \bar{c})$, womit der Abbau der Flammenfrontdichte bereits auf der dem Frischgas zugewandten Seite ($c \rightarrow 0$) stärker gewichtet wird, als dies bei dem CF-2 oder CPB Modell der Fall ist. Daher ist die Vorhersagegüte des MB-Modells besser als die der einfachen CF-2 bzw. CPB-Modelle.

Die kohärenten Flammenmodelle CF-3, CF-4 und CF-5, welche die turbulente Flammendehnung mit Hilfe der ITNFS-Funktion modellieren und in Abbildung 8.7 den Meßergebnissen gegenübergestellt sind, können hingegen die Flammenstruktur gut wiedergeben. Der Turbulenzgrad der Flamme G26 liegt mit $Re_t \approx 200$ nicht besonders hoch, weshalb auch der Einfluß der Streckungsrate auf die Flammenfrontstruktur gering ist. Daher unterscheiden sich die Ergebnisse des CF-4 und CF-5 Modells nur leicht.

Abbildung 8.8 zeigt Ergebnisse bei Verwendung der unterschiedlichen Wahrschein-

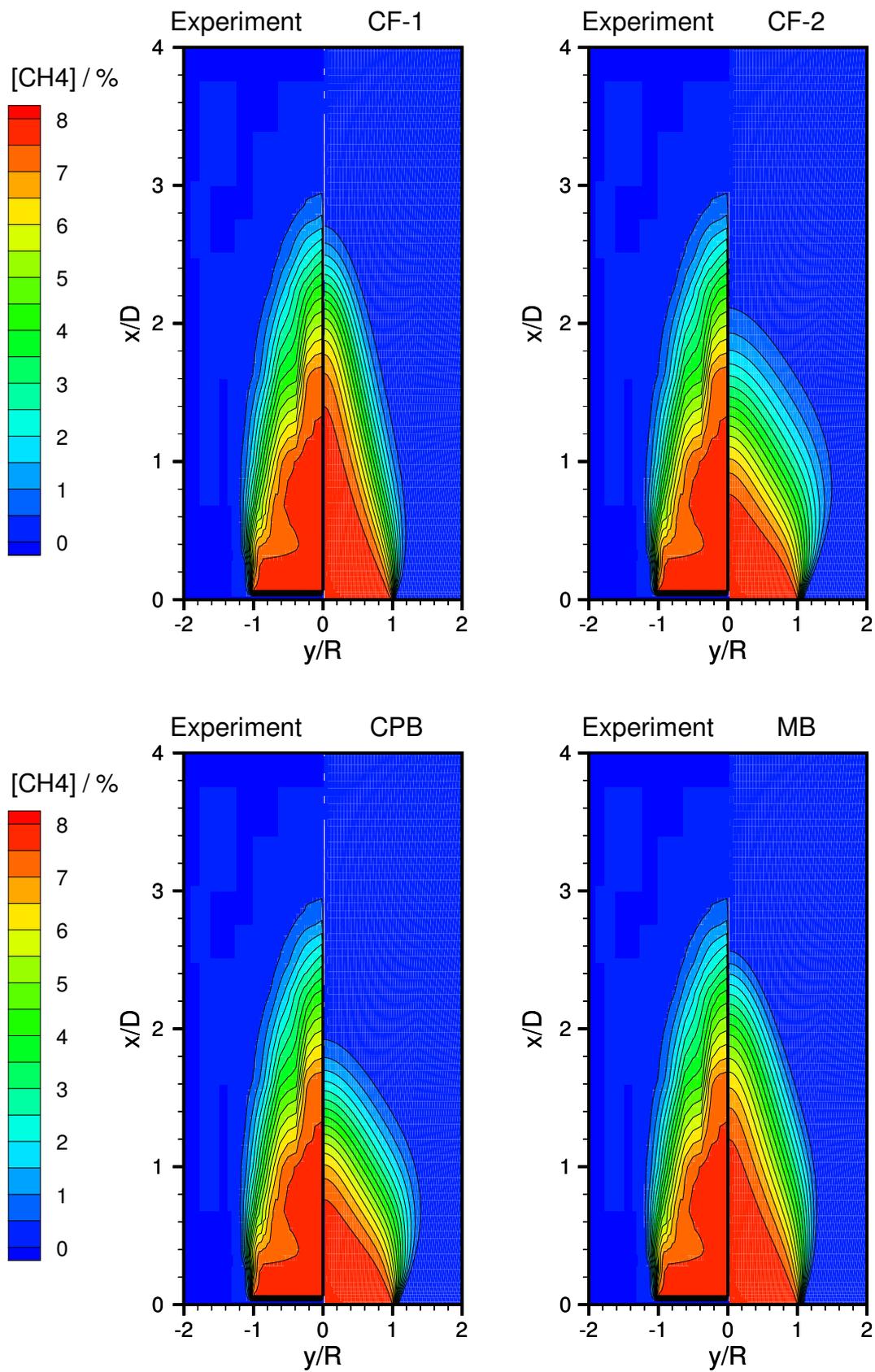


Abbildung 8.6: Testflamme G26. Vergleich gemessener und mit Hilfe des CF-1, CF-2, CPB und MB Modells berechneter Methankonzentrationen.

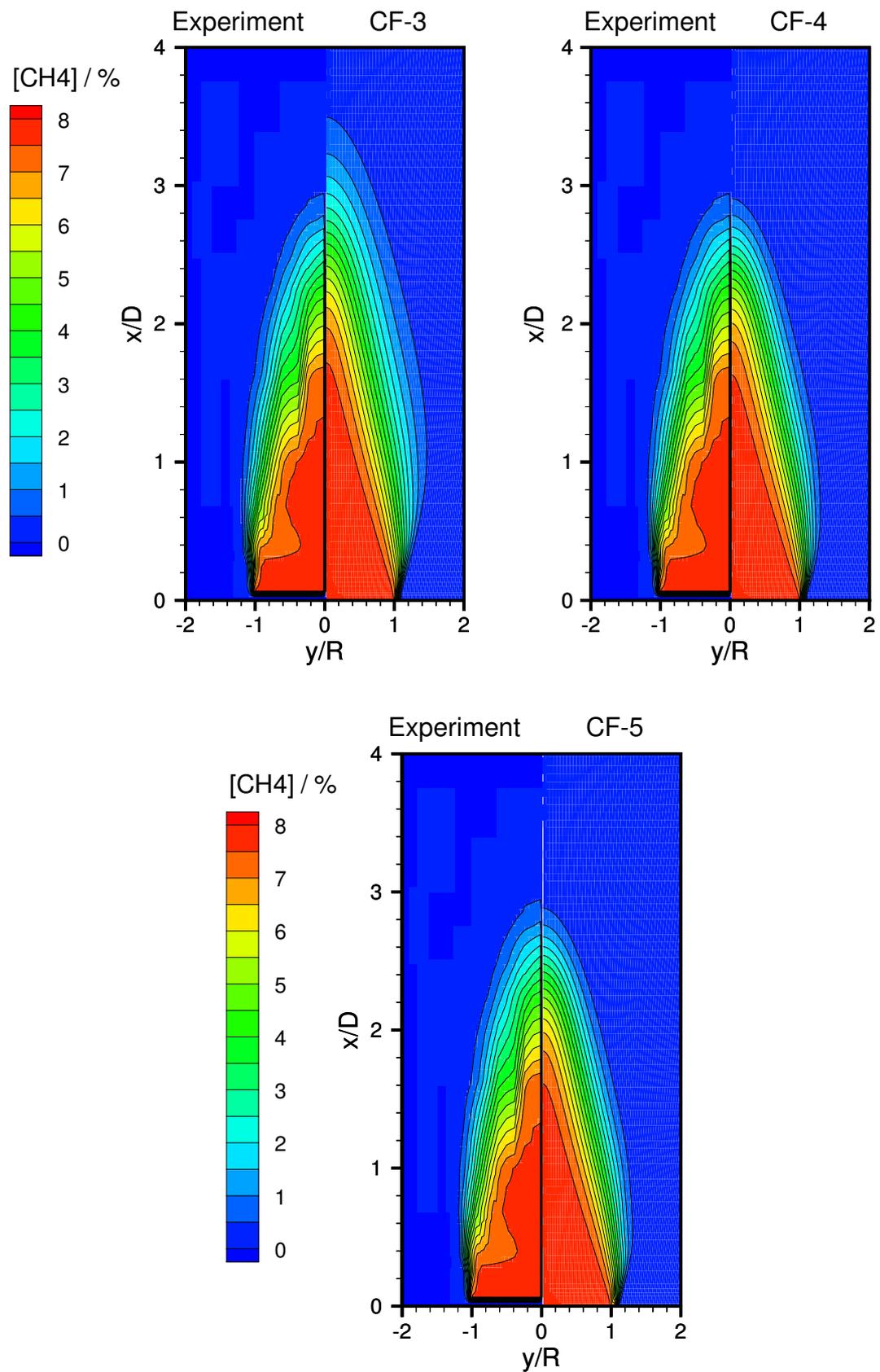


Abbildung 8.7: Testflamme G26. Vergleich gemessener und mit Hilfe des CF-3, CF-4 und CF-5 Modells berechneter Methankonzentrationen.

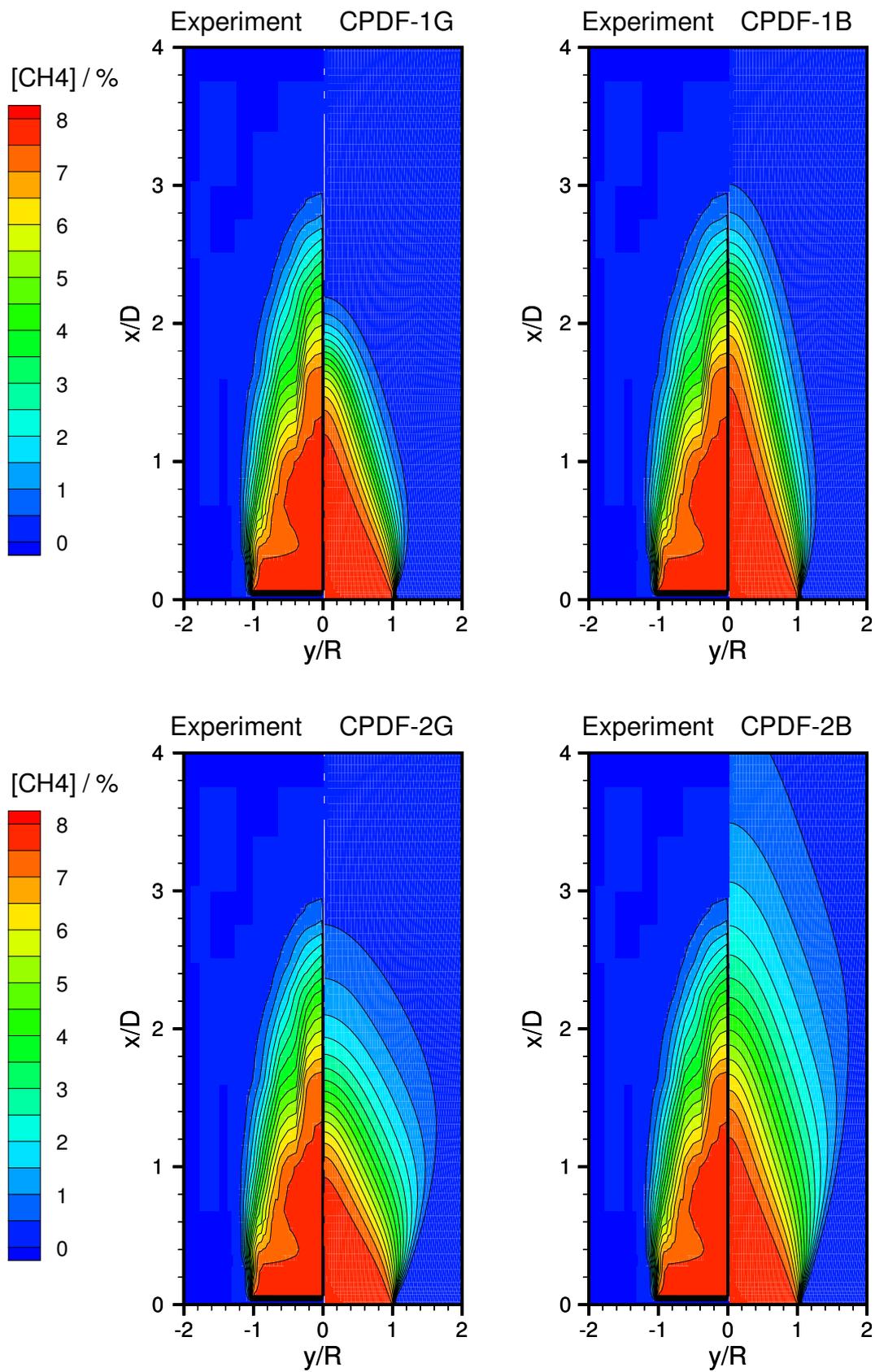


Abbildung 8.8: Testflamme G26. Vergleich gemessener und mit Hilfe der Wahrscheinlichkeitsdichtemodelle berechneter Methankonzentrationen.

lichkeitsdichtemodelle. Modelle, die die skalare Dissipationsrate auf Basis der integralen Skalen beschreiben (Gl. (5.24)), sind durch die Kennung CPDF-1 gekennzeichnet. Diejenigen die sie mit Hilfe der dissipativen Skalen (Gl. (5.25)) modellieren durch CPDF-2. Ein weiterer Buchstabe, G bzw. B, bezeichnet die abgeschnittene Gaußfunktion (Gl. (5.29)) bzw. die β -Funktion (Gl. (5.34)), mit der die Verteilungsfunktion $\tilde{\mathcal{P}}(c; \tilde{c}, \tilde{c}''^2)$ abgebildet wird. Die Ergebnisse, die mit diesen vier Modellvarianten erzielt werden, zeigen deutlich, daß sowohl der Einfluß der skalaren Dissipationsrate als auch die Form der Wahrscheinlichkeitsdichte großen Einfluß auf die Flammenform besitzt. Das CPDF-2G und CPDF-2B Modell berechnen beide die skalare Dissipationsrate auf Basis der dissipativen Skalen und überschätzen diese daher ebenso wie das CF-2 oder CPB Modell. Dies zeigt sich deutlich in der zu breit vorhergesagten turbulenten Flammenfront. Die abgeschnittene Gaußfunktion wichtet den „reagierenden“ Anteil $0 < c < 1$ der Verteilung stärker als die β -Funktion. Im Fall der Flamme G26, die sich durch eine mäßige Turbulenz und somit hohe Intermittenz auszeichnet, äußert sich dies in einer überschätzten Reaktionsgeschwindigkeit, d. h. einer zu hohen turbulenten Flammengeschwindigkeit und einer zu kurzen Flamme. Die β -Funktion führt daher zusammen mit der Modellierung der skalaren Dissipationsrate über die integralen Turbulenzgrößen auf die beste Übereinstimmung von Rechnung und Messung. Folglich kann das CPDF-1B Modell auch die in Abbildung 8.9 gezeigte CO-Konzentration richtig vorherzusagen. Die 2-Bereich-Kinetik überschätzt aber die Gleichgewichtskonzentration des Kohlenmonoxids leicht, was sich in zu hohen Werten im Ausbrandbereich äußert.

Anhand des in Abbildung 8.9 dargestellten Mischungsfeldes läßt sich erkennen, daß die Reaktion fast ausschließlich bei der Stöchiometrie des Frischgemischs stattfindet. Die einmischende Luft beeinflusst damit nicht die Stöchiometrie und somit die Reaktion sondern verdünnt nur die bereits ausgebrannten Rauchgasen. Dies gilt auch für die übrigen Testflammen. Daher sind die Annahmen, auf denen das in Kapitel 5.4 vorgestellte Mischungsmodell beruht, für die untersuchten Flammen gültig.

In Abbildung 8.10 sind charakteristischen Größen der turbulenten Flammenfront als Funktion der Reaktionsfortschrittsvariable \tilde{c} für verschiedene axiale Abstände x/D aufgetragen. Ein Abstand $x/D = 0.2$ entspricht einem Schnitt durch die Flammenwurzel, ein Abstand von $x/D=2.2$ einem Schnitt durch die Spitze der Flammenfront. Die Graphen auf der linken Seite zeigen Verläufe der normierten Flammenfrontdichte $\bar{\Sigma} \cdot l_F^0$ (ausgezogene Linie) sowie der Reaktionsfortschrittsvarianz (strichpunktierte Linie). Außerdem ist das Maximum der Reaktionsfortschrittsvarianz $\tilde{c}(1 - \tilde{c})$ (dünne gestrichelte Linie) eingetragen.

Der Verlauf der Flammenfrontdichte über den zeitlich mittleren Reaktionsfortschritt, d. h. die Flammenfront, ändert sich entlang der Flammenlänge sowohl hinsichtlich des Maximalwertes als auch in seiner Form. Im Bereich der Flammenwurzel ist die turbulente Reynoldszahl maximal. Die Flammenfrontdehnung nimmt daher hier ihre größten Werte an und ist gemäß $\tilde{c}(1 - \tilde{c})$ über die Flammenfront hinweg verteilt. Für größere Abstände von der Düse nimmt die Turbulenzintensität und damit auch die Flammenfrontdichte ab. Ihr Maximum wird zunehmend in Richtung $\tilde{c} \approx 0.6$ verschoben, wo die laminare Wärmefreisetzungs geschwindigkeit bzw. der Betrag des Gradienten der Reaktionsfortschrittsvariable $|\nabla c|$ ihr Maximum besitzen. Die Ursache hierfür liegt in der Abnahme des turbulenten Transports von Flammenfrontdichte für größere Werte von x/D . Dies läßt sich leicht anhand der Verläufe der verschiedenen Quellterme der $\bar{\Sigma}$ -Transportgleichung (6.43) erklären, die auf der rechten Seite von Abbildung 8.10 aufgetragen sind. Die kurz ge-

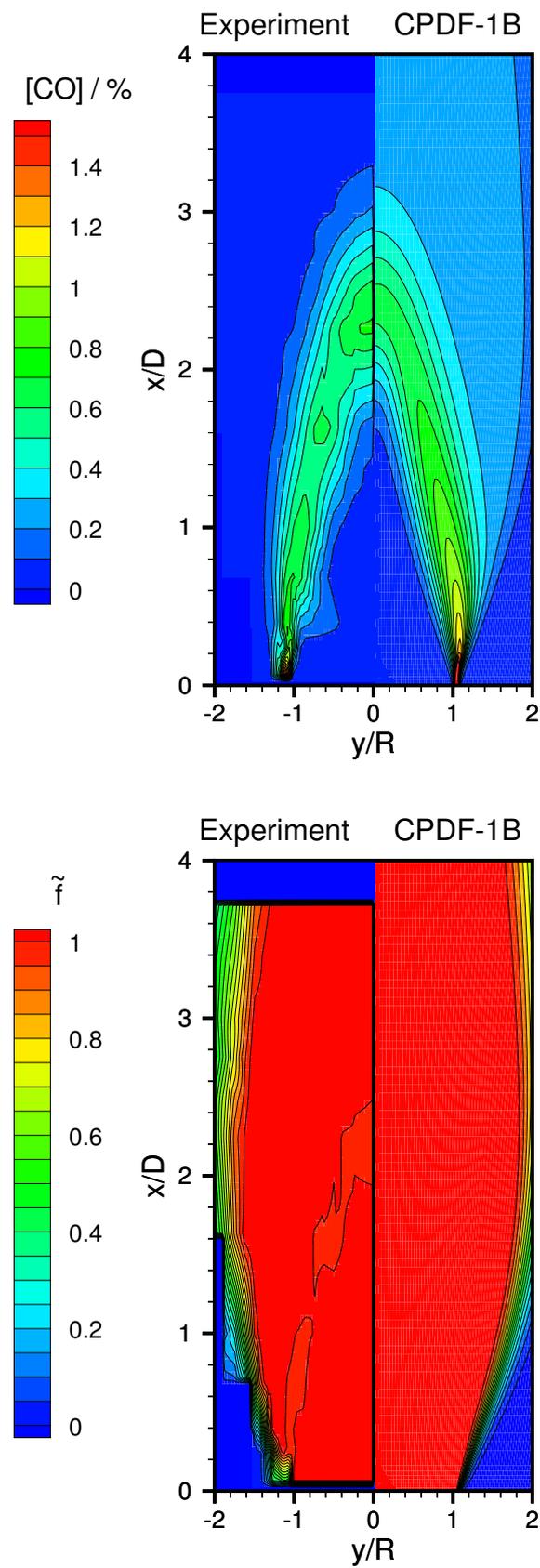


Abbildung 8.9: Testflamme G26. Vergleich gemessener und mit Hilfe des Wahrscheinlichkeitsdichtemodells berechneter CO-Konzentrationen.

strichelte Linie repräsentiert Flammenfrontproduktion aufgrund der turbulenten Flammenfrontdehnung $K_t \bar{\Sigma}$, die lang gestrichelte Linie Änderungen der Flammenfrontdichte aufgrund Gradienten der zeitlich mittleren Strömung $K_m \bar{\Sigma}$, die strichpunktierte Linie die Einflüsse der Flammenfrontpropagation $S_l^0 \nabla \cdot [\langle \mathbf{n} \rangle_s \bar{\Sigma}]$ und die punktierte Linie den Abbau von Flammenfrontdichte aufgrund der Flammenfrontdehnung $S_l^0 \langle \nabla \cdot \mathbf{n} \rangle_s \bar{\Sigma}$. Die Einflüsse der Flammenfrontpropagation sowie der zeitlich mittleren Strömungsgradienten auf die Flammenfrontdichte sind, unabhängig von der Position innerhalb der turbulenten Flammenfront, vernachlässigbar. Die Änderung der Flammenfrontdichte wird daher von der turbulenten Flammenfrontdehnung, der Flammenfrontkrümmung und dem (nicht dargestellten) turbulenten Transportterm kontrolliert. Letzterer führt auf der dem Frischgemisch ($\tilde{c} = 0$) zugewandten Seite der Flammenfront zu einer Abnahme, auf der dem Rauchgas zugewandten Seite hingegen zu einer Zunahme der Flammenfrontdichte. Dies bewirkt eine Verschiebung des Gleichgewichts von Produktion und Vernichtung von Flammenfrontdichte hin zu einem Wert des zeitlich mittleren Reaktionsfortschritts von $\tilde{c}^{eq} = 0.5$. Da mit abfallender Turbulenzintensität auch der turbulente Transport weniger intensiv verläuft, verschiebt sich der Gleichgewichtswert \tilde{c}^{eq} weiter in Richtung des ausgebrannten Zustandes ($\tilde{c}=1$) und der Verlauf der Flammenfrontdichte zeigt die beobachtete Schiefe.

Der Verlauf der Reaktionsfortschrittsvarianz \tilde{c}''^2 über die Flammenfront ist in den Graphen auf der linken Seite von Abbildung 8.10 dargestellt. Die Varianz liegt im Bereich der Flammenfrontwurzel ($x/D = 0.2$) um 30% unterhalb ihres Maximums von 0.25, das eine turbulente Flammenfront mit unendlich schneller Chemie charakterisiert. Mit zunehmendem Abstand x/D , d. h. abnehmender turbulenter kinetischer Energie und zunehmendem Längenmaß, nimmt die Varianz zu und nähert sich ihrem Maximalwert an. An der Spitze ($x/D = 2.2$) besitzt die turbulente Flammenfront daher Eigenschaften einer gefalteten Flamme, wie sie auch von LIU [138] mittels Lichtschnittphotographie beobachtet wurden. Eine Überbewertung der skalaren Dissipationsrate, wie sie durch das CPDF-2G bzw. CPDF-2B Modell erfolgt, bewirkt eine Zunahme der Varianz und damit die beobachtete übermäßige Aufweitung der turbulenten Flammenfront.

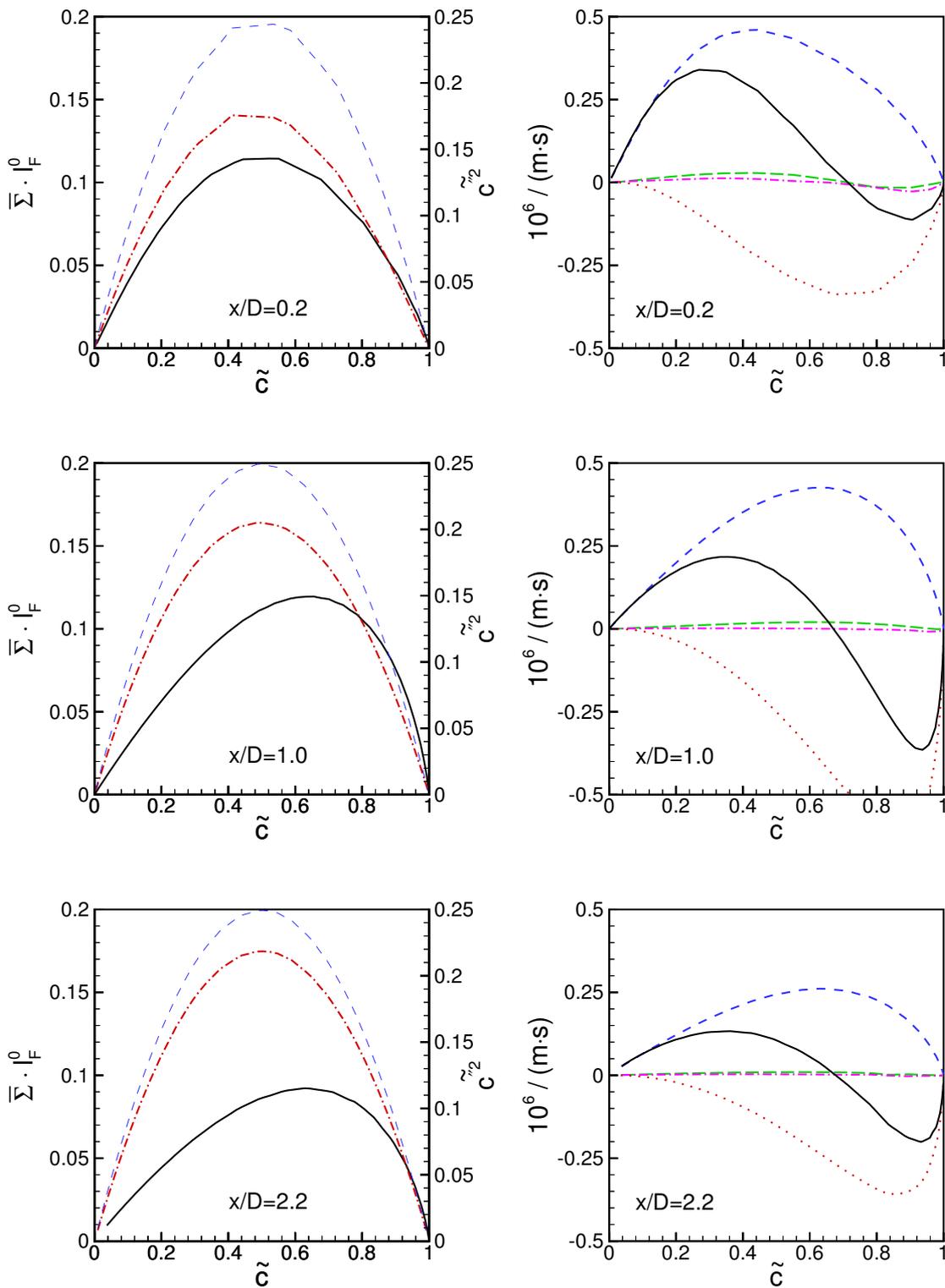


Abbildung 8.10: Testflamme G26: Berechnete Flammenfrontstruktur (CF-1 und CPDF-1B Modell). Links: Verläufe der normierten Flammenfrontoberflächendichte $\bar{\Sigma} \cdot l_F^0$ (ausgezogen), der Reaktionsfortschrittsvarianz \tilde{c}''^2 (strichpunktiert) und des Varianzmaximums $\tilde{c}(1 - \tilde{c})$ (dünn gestrichelt). Rechts: Quellterm der Flammenfrontdichte (ausgezogen), $K_t \bar{\Sigma}$ (kurz gestrichelt), $K_m \bar{\Sigma}$ (lang gestrichelte Linie), $\nabla \cdot [\langle \mathbf{n} \rangle_S \bar{\Sigma}]$ (strichpunktiert), $S_i^0 \langle \nabla \cdot \mathbf{n} \rangle_S \bar{\Sigma}$ (punktiert).

8.3 Matrixbrenner

8.3.1 Experimenteller Aufbau

Der Matrixbrenner ist ein Modellbrenner, der zur systematischen Untersuchung von stationären hochturbulenten vorgemischten Freistrahlfammen im Rahmen des Verbundprojekts AG Turbo entwickelt wurde [129]. Die erzeugten Testflammen besitzen Charakteristiken, wie sie auch in Gasturbinen zu finden sind, und bilden daher die Grundlage für die Validierung der Modelle im hochturbulenten Bereich. Abbildung 8.11 zeigt eine Skizze des Matrixbrenners bestehend aus Turbulenzerzeuger, Düse und Stabilisierungsvorrichtung. Der Turbulenzerzeuger ist ein Metallzylinder mit 32 versetzt angeordneten Bohrungen vom Durchmesser d , in denen Drallwendel montiert sind. Um eine integral drallfreie Strömung zu gewährleisten, besitzen benachbarte Wendel jeweils entgegengesetzte Drehrichtung. An den Turbulenzerzeuger schließt sich eine Düse mit dem Austrittsdurchmesser D an. Das Strömungsfeld kann in einem Abstand von ca. $1.5D$ als zweidimensional betrachtet werden, und der Turbulenzzustand im Kernbereich des Freistrahls entspricht dem abklingender Gitterturbulenz [129]. Die Schwankungsintensität als charakteristischer Geschwindigkeitsmaßstab der turbulenten Flamme ist somit durch die volumetrisch gemittelte Geschwindigkeit \tilde{u}_0 sowie den Bohrungsdurchmesser d bestimmt, während das turbulente Längenmaß maßgeblich vom Bohrungsdurchmesser abhängt. Dieses kann durch den Einsatz von vier geometrisch ähnlichen Brennern im Linearmaßstab 1 : 2 : 3 : 4 variiert werden, die Bohrungsdurchmesser von 5 bis 20mm und Düsendurchmesser von 37.5 bis 150mm besitzen.

Nahe des Düsenaustritts befindet sich an der Innenwand eine sägezahnförmige Ringkonstruktion, die in der Ausschnittsvergrößerung von Abbildung 8.11 dargestellt ist. Über Schlitze dieses Rings wird Wasserstoff eingedüst, der zusammen mit der Luft des Frischgemisch kleine Diffusionsflammen ausbildet, welche die Freistrahlfamme pilotieren. Die detaillierten Feldmessungen, die in den folgenden Abschnitten zur Validierung der Verbrennungsmodelle herangezogen werden, wurden im Rahmen der Dissertation von ZAJADATZ [242] durchgeführt und freundlicherweise für diese Arbeit zur Verfügung gestellt.

Aufgrund der hohen Turbulenzintensitäten und der damit verbundenen hohen turbulenten Reynoldszahlen befinden sich die Flammen nahe des Klimov-Williams Kriteriums, d. h. die turbulenten Karlovitzzahlen sind von der Größenordnung $\mathcal{O}(1)$.

8.3.2 Randbedingungen

Das Frischgas tritt über die Berandung „Düse“ in des Rechengebiet ein. Das Profil der axialen Geschwindigkeit am Einlaß des Rechengitters wird über die Funktion

$$\frac{\tilde{u}}{u_{0,max}} = 1 - \left(\frac{2r}{D}\right)^{1/6} \quad (8.5)$$

aufgeprägt. Gleichung (8.5) spiegelt die von von LAUER ET AL. [129] und MÖLLENSTEDT [152] gemessenen Geschwindigkeitsprofile wieder. Die Radial- und Tangentialgeschwindigkeiten werden gemäß den Messungen zu null gesetzt.

Da benachbarte Drehwendel gegensinnige Drehrichtung aufweisen, kann die Düsenströmung ab einem Abstand von etwa $2D$ hinter dem Turbulenzerzeuger als drallfrei betrachtet werden [129]. In Abbildung 8.12 ist der Verlauf der charakteristischen Geschwindigkeitsschwankung als Funktion des dimensionslosen axialen Abstands x/D für

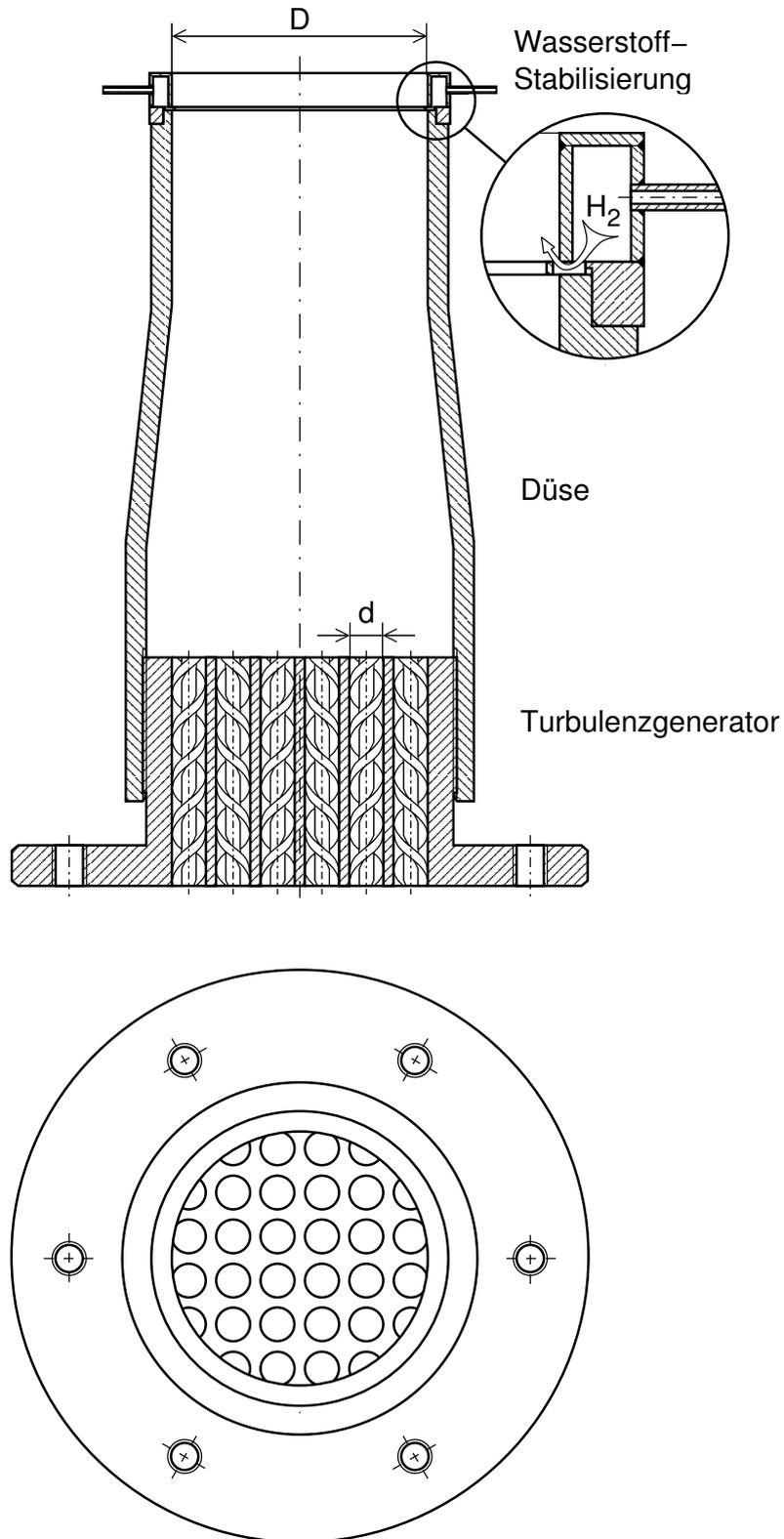


Abbildung 8.11: Skizze des Matrixbrenners bestehend aus Turbulenzerzeuger, Düse und Wasserstoffstabilisierung.

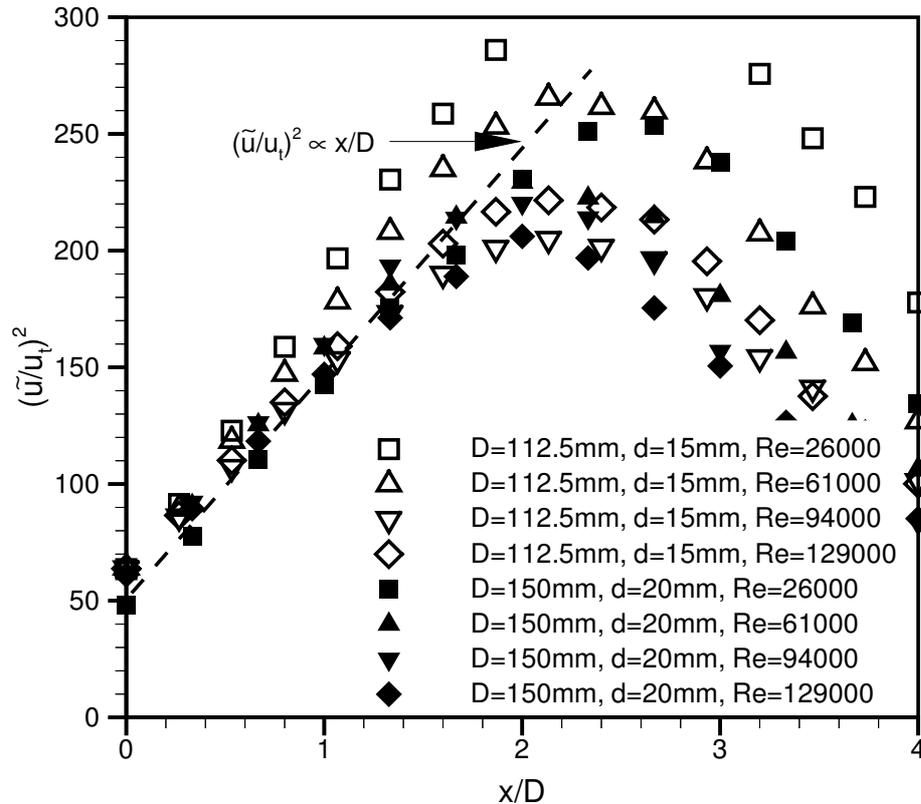


Abbildung 8.12: Verlauf der charakteristischen Geschwindigkeitsschwankung als Funktion des dimensionslosen axialen Abstandes x/D für unterschiedliche Reynoldszahlen und integrale Längenmaße, d.h. Brennergeometrien.

eine Vielzahl unterschiedlicher Reynoldszahlen und turbulenter Längenmaße, d. h. unterschiedlicher Brennergrößen, dargestellt. Die Messergebnisse zeigen, daß die Abnahme der Turbulenzintensität in guter Näherung unabhängig von der Reynoldszahl ist. Die Turbulenzstruktur innerhalb der Düse und im Kernbereich des Freistrahls ist daher mit homogener Gitterturbulenz identisch, und es gilt der bekannte Zusammenhang für den axialen Verlauf der Turbulenzintensität (vgl. HINZE [96]):

$$\left(\frac{u_t}{\tilde{u}}\right)_{y=0} = C_1 \left(\frac{x}{D}\right)^{C_2}. \quad (8.6)$$

Die unbekanntten Randwerte für den Turbulenzgrad Tu bei $x/D = -1.5$ können damit mittels Gleichung (8.6) für alle Testflammen bestimmt werden. Das turbulente Längenmaß l_t bzw. die Dissipationsrate $\tilde{\epsilon}$ ergibt sich schließlich durch Kombination der Gleichungen (2.90), (8.4), (8.5) und (8.6).

Die in Abbildung 8.13 als „Wand“ gekennzeichneten Rechenränder werden als impermeable, adiabate Wände definiert. Da das Strömungsfeld als rotationssymmetrisch angesehen wird, können den Deckflächen des Rechengebiets Symmetrierandbedingungen zugewiesen werden. Der Freistrahл saugt Luft aus der Umgebung an, weshalb der entsprechende Bereich „Umgebung“ als offene Berandung spezifiziert wird. Diese Randbedingung erlaubt sowohl ein Ein- als auch ein Ausströmen von Masse. Vorgegeben wird lediglich der

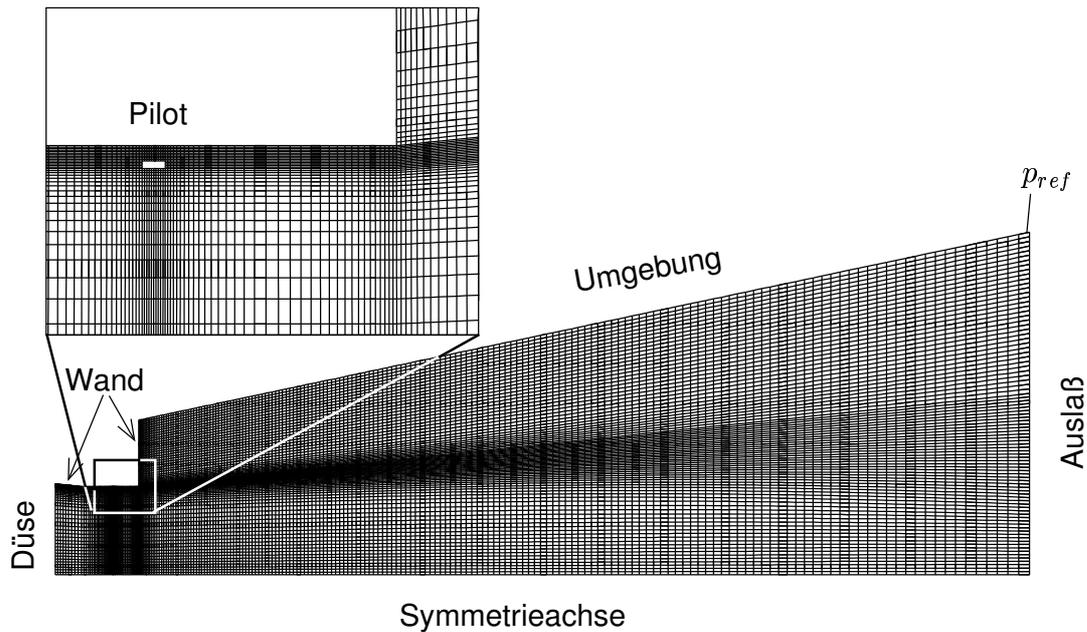


Abbildung 8.13: Gittergeometrie und Randbedingungen der Matrixflammen.

Druck am dargestellten Referenzflächenelement, während die Geschwindigkeiten und der Druck über die Berandung Teil der Lösung sind. Der Randfläche „Auslaß“ wird eine Auslaßrandbedingung mit einem Referenzdruck p_{ref} zugewiesen. Die Matrixflamme wird im Experiment mit Hilfe einer Wasserstoffpilotflamme stabilisiert, welche in der Simulation durch ein teilausgebranntes Gasmischmodelliert wird. Da sie die Wasserstoffstabilisierung innerhalb der turbulenten Grenzschicht der Düsenströmung befindet, kann das $k-\varepsilon$ -Modell nicht eingesetzt werden. Es wurde daher auf das in Kapitel 2.5.7 vorgestellte $k-\omega$ -Modell von MENTER zurückgegriffen. Damit kann die wandnahe Schicht mit einer ausreichenden Anzahl von Gitterpunkten diskretisiert, und die Stabilisierung mit ausreichender Genauigkeit erfaßt werden. Alle erforderlichen Größen werden über eine Einlaßrandbedingung über die Fläche „Pilot“ als Blockprofil vorgegeben und sind zusammen mit den übrigen Randbedingungen in Tabelle 8.3 zusammengestellt.

Randbedingungen	R403	R408	R309	Pilot
Luftzahl λ	1.75	1.45	2.25	wie Frischgas
\tilde{T}_R / K	673	305	673	wie Frischgas
$u_{0,max} / \text{m/s}$	21.5	12.3	23.5	5
Tu	0.145	0.195	0.13	0.01
l_t / m	0.0257	0.014	0.0182	0.001
\tilde{c}	0	0	0	1
$\tilde{\Sigma} / 1/\text{m}$	0	0	0	500
\tilde{f}	1	1	1	1

Tabelle 8.3: Randbedingungen der Matrixflammen R403, R408 und R309.

8.3.3 Ergebnisse für die Testflamme R403

Die Testflamme R403 ist durch eine Vorwärmtemperatur von 673K (400°C), einer Luftzahl von 1.75, einer turbulenten Reynoldszahl von 2160 und einer turbulenten Karlovitzzahl von 0.21 bei Anströmbedingungen gekennzeichnet. Dieser Testfall besitzt damit von den drei untersuchten Matrixflammen die niedrigste Karlovitzzahl.

Die Abbildung 8.14 vergleicht das gemessene und mit dem CF-4 Modell berechnete Strömungsfeld anhand der zeitlich mittleren Axialgeschwindigkeit (links) und der charakteristischen Geschwindigkeitsschwankung u_t (rechts). Das Strömungsfeld des Matrixbrenners zeichnet sich durch nahezu konstante Axialgeschwindigkeiten aus. Das Turbulenzfeld gehorcht im Potentialkern der Düsenströmung in guter Näherung dem Gesetz der homogenen Gitterturbulenz, während in der Scherschicht ein Anstieg der Turbulenzintensität aufgrund der Geschwindigkeitsgradienten beobachtet werden kann. Die Flamme bleibt davon aber unbeeinflusst, da sie weiter innen stabilisiert (siehe Abb. .8.15–8.17). Über das weiter außen liegende Geschwindigkeitsfeld ($y/R > 1.2$) können keine Aussagen getroffen werden, da hier die Strömung für die LDA-Messungen nicht getracert werden konnte.

Die Übereinstimmung zwischen Messung und Simulation ist gut, das Modell überschätzt aber leicht die Geschwindigkeitserhöhung aufgrund der Wärmefreisetzung der Flamme. Dies führt, wie schon bei der Testflamme G26, zu einer zu stark vorhergesagten Aufweitung der Düsenströmung, so daß in der Simulationsrechnung nicht der gemessene

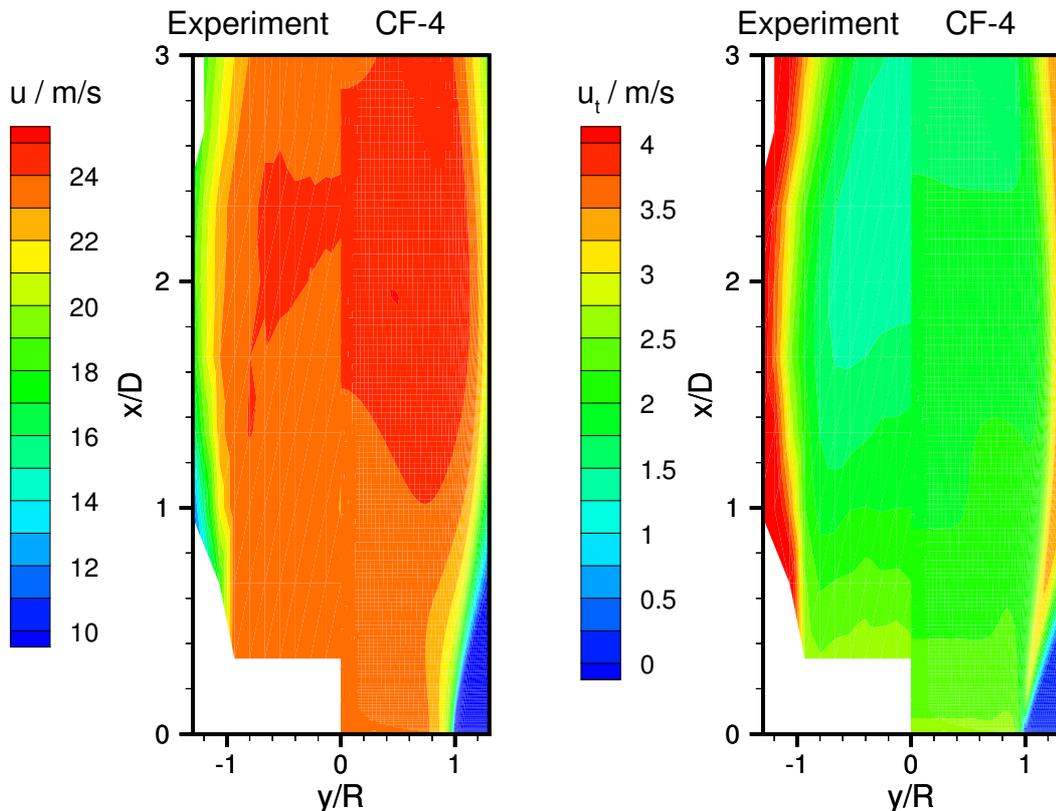


Abbildung 8.14: Testflamme R403. Vergleich gemessener und mit Hilfe des k - ω -Modells berechnetem Strömungsfeld. Links: Zeitlich gemittelte Axialgeschwindigkeit, rechts: charakteristische Geschwindigkeitsschwankung.

Abfall der turbulenten kinetischen Energie beobachtet wird. Insgesamt ist das Modell aber in der Lage, daß gemessene Strömungsfeld richtig wiederzugeben.

Abbildung 8.15 zeigt den Vergleich von gemessenem (links) und mit Hilfe des CF-1 Modell berechnetem (rechts) Temperaturfeld. Das CF-1 Modell kann sowohl die Länge als auch die Dicke der turbulenten Flammenfront richtig wiedergeben. Dies allerdings nur unter der Voraussetzung, daß die Proportionalitätskonstante der turbulenten Flammenfrontdehnung zu $C_{K_t} = 11$ gesetzt wird. Im Bereich der Flammenwurzel, dort wo sich die Flamme stabilisiert, weichen Messung und Simulation aber voneinander ab. Im Gegensatz zur Messung sagt hier das Modell einen vollständigen Umsatz voraus, was sich in einer adiabaten Flammentemperatur nahe des Düsenaustritts äußert. Die im Vergleich zur Messung erhöhte Umsatzgeschwindigkeit wird durch die turbulente Dehnungsrate $\tilde{\varepsilon}/\tilde{k}$ hervorgerufen, die im Bereich der Scherzone ihre größten Werte annimmt. Die Beobachtung, daß die Messungen in der Stabilisierungszone Temperaturen deutlich unterhalb der adiabaten Verbrennungstemperatur zeigen, läßt sich daher den Schluß zu, daß die Flammenfrontdehnung nicht allein mit Hilfe der integralen Turbulenzskalen modelliert werden kann. Zudem weist die Simulation im Bereich des Stabilisierungsrings eine deutliche Rückschlag tendenz auf. Ein Flammenrückschlag innerhalb der laminaren Grenzschicht wird jedoch durch das Wandquenchmodell verhindert. Das Bestreben der Flamme stromaufwärts in die Düse zu wandern, ist deutlich an dem zur Wand hin abflachenden Winkel der turbulenten Flammenfront erkennbar. Auch dieses Verhalten wird im Experiment nicht beobachtet, weshalb das CF-1 Modell als nicht vollständig betrachtet werden muß.

Das Ergebnis des CF-2 Modells, welches in Abbildung 8.15 mit der Messung verglichen wird, stellt demgegenüber eine deutliche Verbesserung dar. Es ist offensichtlich, daß aufgrund der hohen Turbulenzintensität die Interaktion von Flammenfront und turbulenter Strömung im wesentlichen durch Wirbelklassen im Kolmogorovbereich bestimmt ist. Die Flammengeschwindigkeit ist zu langsam, um den Geschwindigkeitsschwankungen zu folgen, so daß sich die Flammenfront eher wie eine materielle Fläche als eine propagierende Fläche verhält. Schwächen zeigt das Modell noch hinsichtlich der korrekten Beschreibung der leicht abgehoben brennenden Flamme.

Das CPB Modell unterscheidet sich vom CF-2 Modell nur hinsichtlich der Formulierung des Destruktionsterms. Für große Werte von $\tilde{\varepsilon}/\tilde{k}$ verliert der exponentielle Ausdruck im Destruktionsterm des CPB Modells (vgl. Gl. (6.75)) an Bedeutung. Daher liefern die beiden Modelle für die Flamme R403, die sich durch sehr große turbulente Reynoldszahlen auszeichnet, ein ähnliches Ergebnis. Der abgehobene Charakter der Flamme wird aber durch das CF-2 Modell besser getroffen, da das CPB Modell hier den Destruktionsterm unterschätzt.

Das MB Modell gibt zwar die turbulente Flammengeschwindigkeit in Form der Flammenlänge gut wieder. Die Flammenform und damit die Verteilung der Flammenfrontdichte stimmt aber weniger gut mit dem Experiment überein. Außerdem überschätzt das Modell den Umsatz im Bereich der Flammenwurzel, was auf eine Überbewertung des Destruktionsterms schließen läßt.

Die bisher aufgeführten Defizite der einfachen Modelle lassen sich jedoch durch den Einsatz des ITNFS-Modells zur Beschreibung der turbulenten Flammendehnung beheben. Wie Abbildung 8.16 zeigt, kann das CF-3 Modell nicht nur die Flammenlänge und die Flammenfrontdicke sehr genau wiedergeben, sondern ist auch in der Lage das Temperaturfeld in Düsennähe korrekt zu beschreiben.

Da das CF-4 Modell und das CF-5 Modell ebenso wie das CF-3 Modell die Flammenfrontdehnung mit Hilfe des ITNFS-Ansatzes modelliert, werden ähnlich gute Ergebnisse

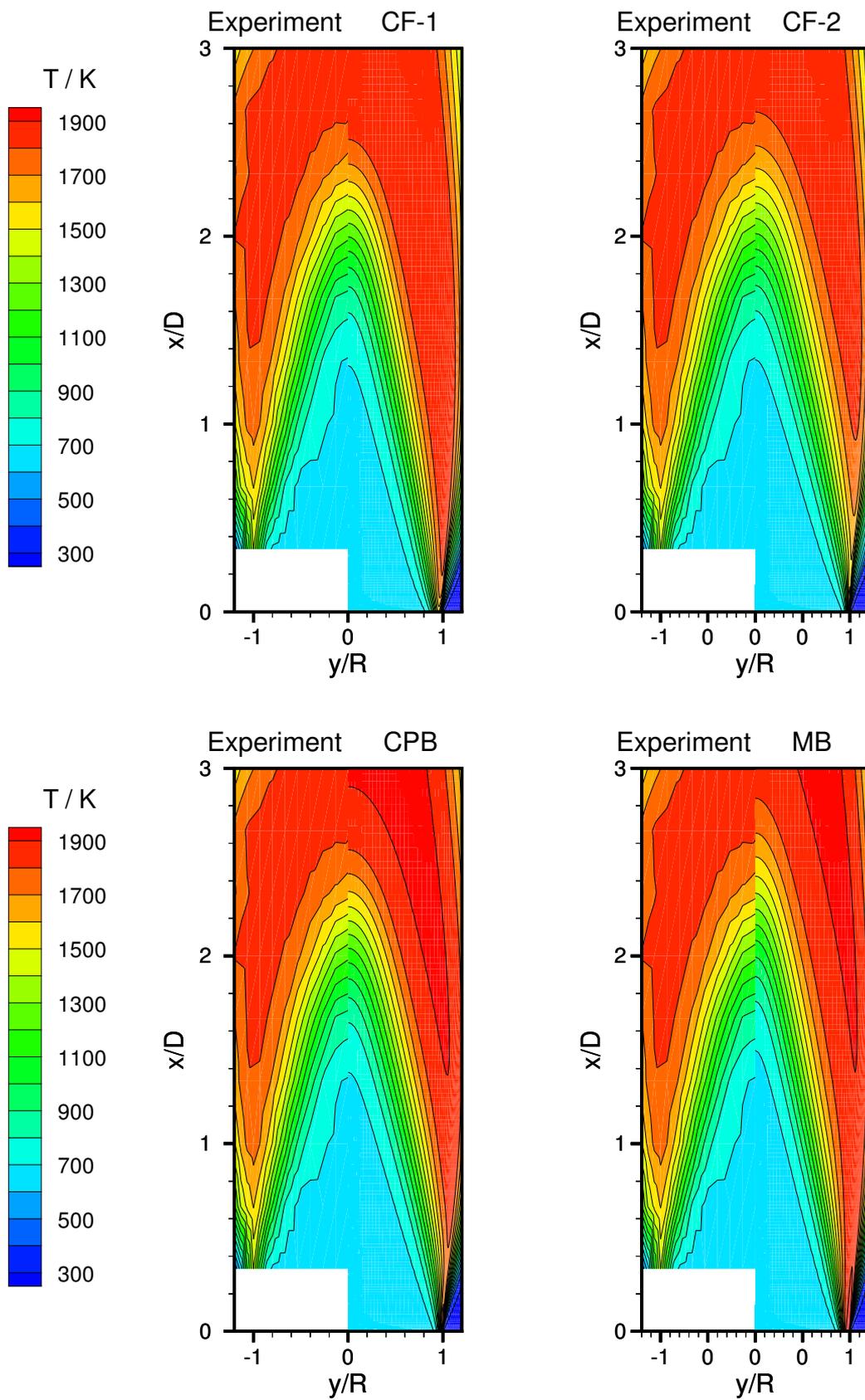


Abbildung 8.15: Testflamme R403. Vergleich gemessener und mit Hilfe des CF-1, CF-2, CPB bzw. MB Modells berechneter Temperaturfelder.

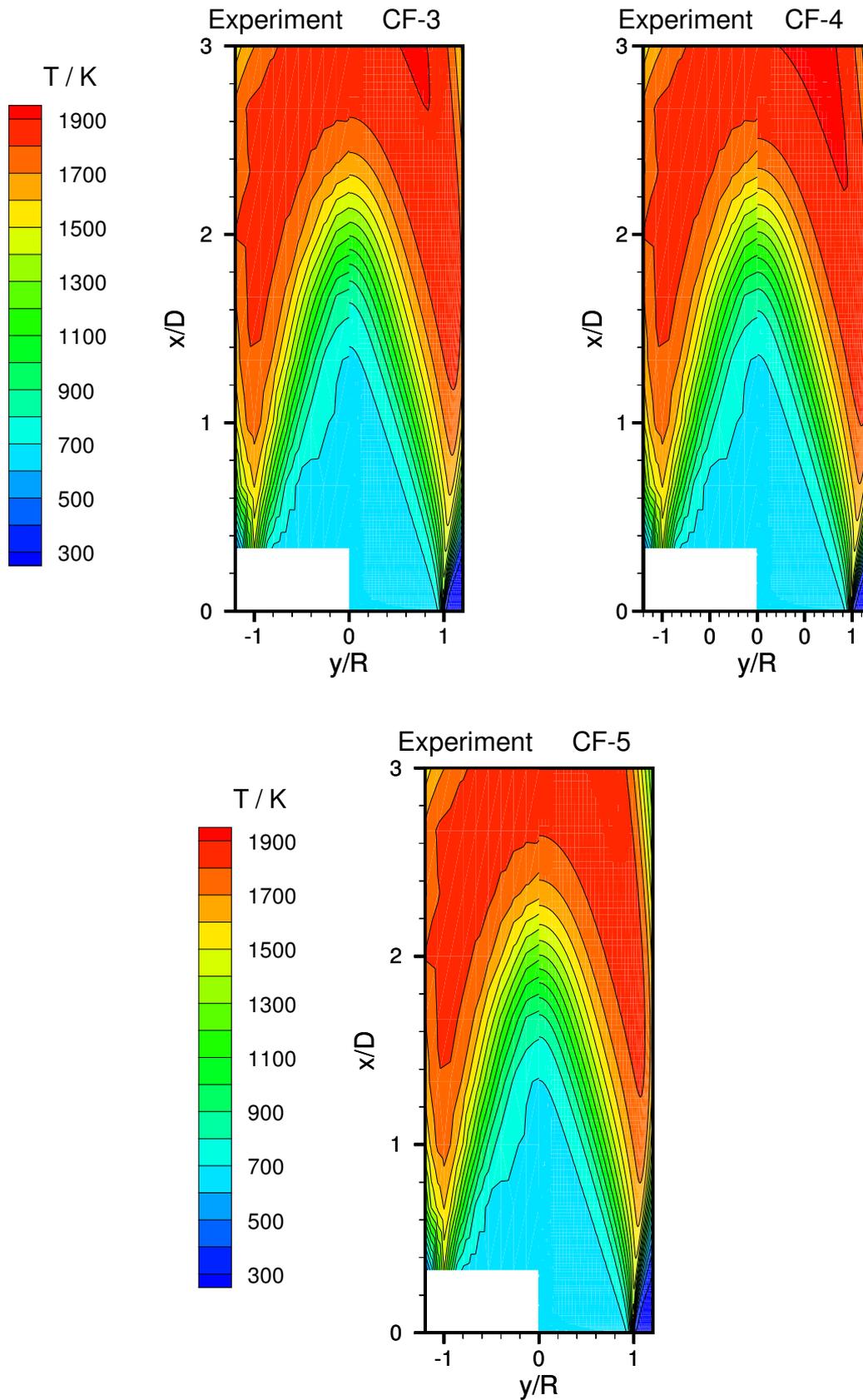


Abbildung 8.16: Testflamme R403. Vergleich gemessener und mit Hilfe des CF-3, CF-4 bzw. CF-5 Modells berechneter Temperaturfelder.

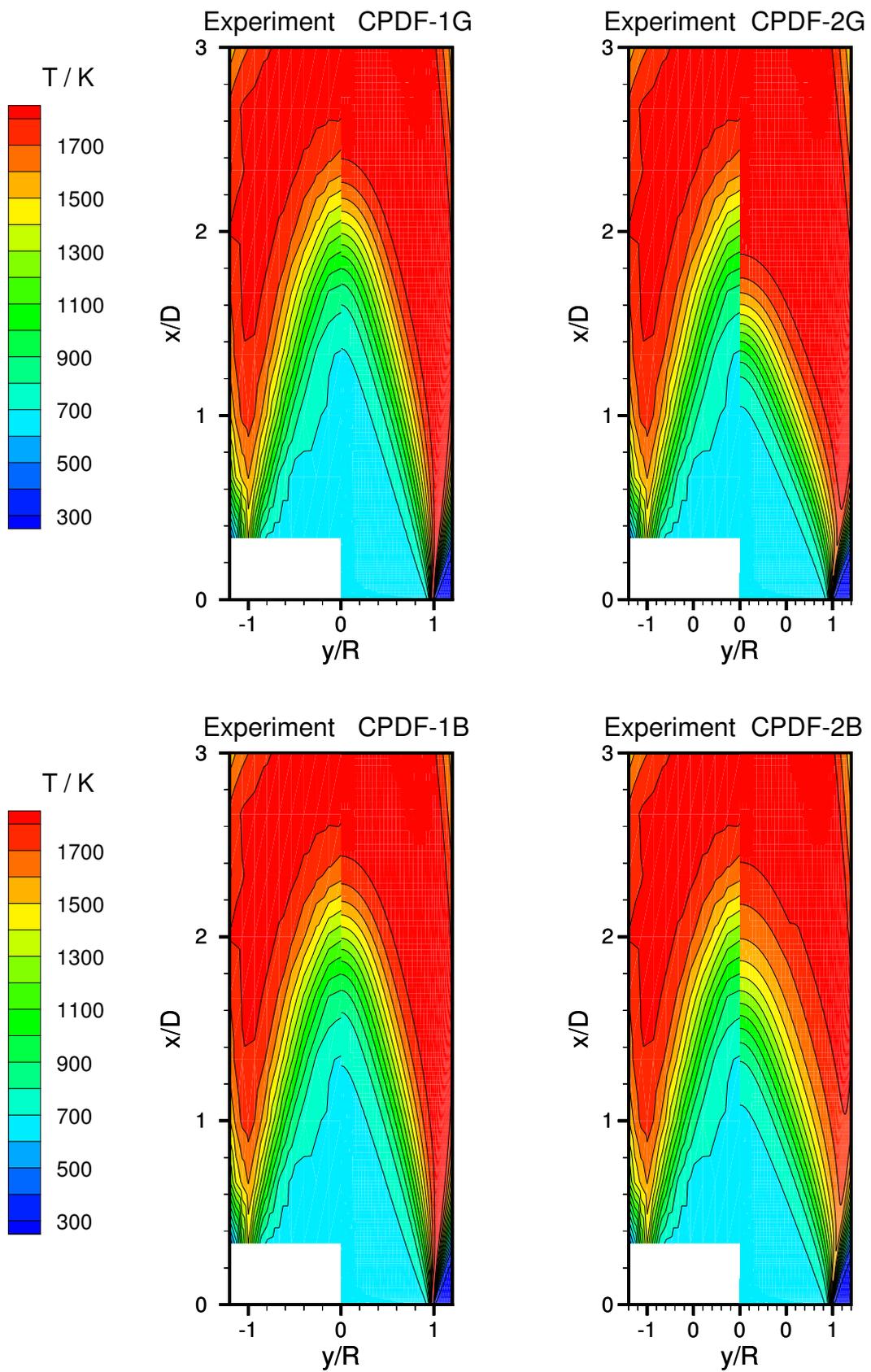


Abbildung 8.17: Testflamme R403. Vergleich gemessener und mit Hilfe der Wahrscheinlichkeitsdichtemodelle berechneter Temperaturfelder.

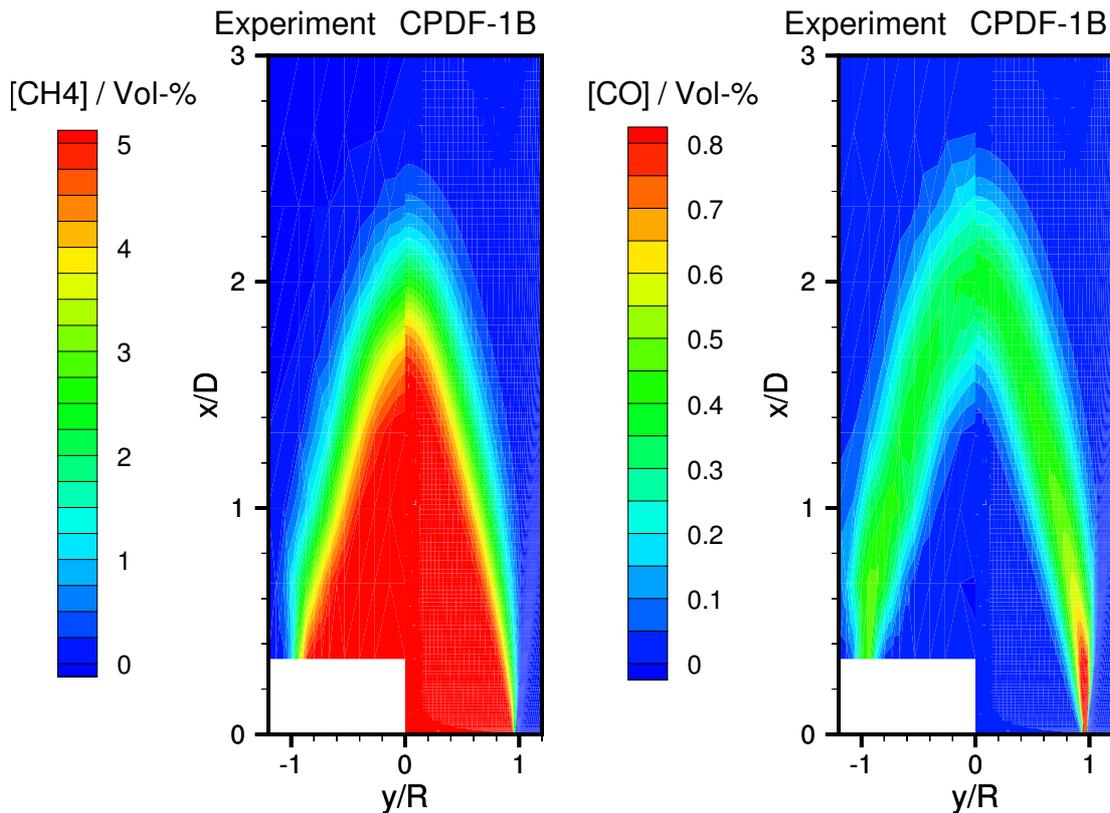


Abbildung 8.18: Testflamme R403. Vergleich gemessener und mit Hilfe des Wahrscheinlichkeitsdichtemodells berechneter CH_4 sowie CO -Konzentrationen.

erzielt. Die Übereinstimmung zeigt damit auch, daß der Anteil der Flammenfortpflanzung normal zur zeitlich mittleren Flammenfront gegenüber den anderen Termen vernachlässigbar ist.

Das CF-5 Modell berücksichtigt den Einfluß der Dehnungsrate auf die lokale Flammengeschwindigkeit und berechnet demzufolge eine etwas geringere Flammenlänge als das CF-4 Modell.

Die vier untersuchten Wahrscheinlichkeitsdichtemodelle führen wie schon bei der Testflamme G26 zu sehr unterschiedlichen Ergebnissen (Abb. 8.17). Das CPDF-1G und CPDF-1B Modell kommen hinsichtlich der Flammenform zu einem sehr ähnlichen Ergebnis, während sich das CPDF-2G und CPDF-2B Modell deutlich voneinander unterscheiden. Im Fall der CPDF-2 Modelle wird die Varianz des Reaktionsfortschritts überschätzt. Dies hat zur Folge, daß die Reaktionsgeschwindigkeit und damit die turbulente Flammengeschwindigkeit zu hoch vorhergesagt wird. Die abgeschnittene Gaußfunktion wichtet den reagierenden Anteil der PDF stärker als die β -Funktion und berechnet daher höhere Werte für die Reaktionsquellterme des zeitlich mittleren Reaktionsfortschritts sowie der Reaktionsfortschrittsvarianz. Dies äußert sich in der deutlich kürzeren Flamme des CPDF-1G Modells. Da die Flammenform vom CPDF-1B Modell richtig wiedergegeben wird, stimmen auch die in Abbildung 8.18 dargestellten zeitlichen mittleren Konzentrationen des Methans und Kohlenmonoxids mit den gemessenen Werten hervorragend überein.

Abbildung 8.19 zeigt Verläufe charakteristischer Größen der Flammenfrontdichte- und Wahrscheinlichkeitsdichtemodelle als Funktion der Reaktionsfortschrittsvariable \tilde{c} für un-

terschiedliche axiale Positionen x/D . Die dargestellten Graphen entsprechen somit einem Schnitt senkrecht zur turbulenten Flammenfront. Die mit der Dicke der laminaren, planaren Vormischflamme normierte Flammenfrontdichte $\bar{\Sigma} \cdot l_F^0$ weist im Gegensatz zur Testflamme G26 keine Schiefe auf. Sie besitzt, unabhängig von der axialen Position x/D , einen glockenförmigen Verlauf mit dem Maximum bei $\tilde{c} \approx 0.5$. Ein Vergleich der auf der rechten Seite von Abbildung 8.19 dargestellten Quellterme der $\bar{\Sigma}$ -Gleichung zeigt, daß im Bereich der Flammenwurzel neben der turbulenten Flammenfrontdehnung $K_t \bar{\Sigma}$ und dem Krümmungsterm $S_i^0 \langle \nabla \cdot \mathbf{n} \rangle_s \bar{\Sigma}$ der turbulente Transport von Flammenfrontdichte $\nabla \cdot (\bar{\rho} \nu_t / S c_\Sigma \nabla \bar{\Sigma})$ (nicht dargestellt) die bestimmende Größe ist. Der Propagationsterm $S_i^0 \nabla \cdot [\langle \mathbf{n} \rangle_s \bar{\Sigma}]$ sowie die Flammenfrontproduktion aufgrund der zeitlich mittleren Strömung $K_m \bar{\Sigma}$ spielt hingegen keine Rolle. Für die axiale Position $x/D = 0.2$ würde das Maximum der Flammenfrontdichte ohne Berücksichtigung des turbulenten Transports bei $\tilde{c}^{eq} \approx 0.72$ liegen. Die hohe Turbulenzintensität führt aber im Zusammenspiel mit großen Gradienten der Flammenfrontdichte zu einer Verschiebung des Maximums der Flammenfrontdichte hin zu einem Wert $\tilde{c}^{eq} \approx 0.5$ und zu dem berechneten glockenförmigen Verteilung. Dieses Gleichgewicht ändert sich für weiter stromab liegende Bereiche der Flammenfront, da die Turbulenzintensität sowie die Dissipationsrate der turbulenten kinetischen Energie mit zunehmendem axialen Abstand x/D abfallen. Der turbulente Transport tritt daher gegenüber der turbulenten Flammenfrontdehnung und -krümmung in den Hintergrund, die nun maßgeblich die Lage des Maximums von $\bar{\Sigma}$ bestimmen.

Die Struktur der Flammenfront kann anhand des Verlaufs der Reaktionsfortschrittsvarianz abgelesen werden, der durch die strichpunktierte Linie in den Graphen auf der linken Seite von Abbildung 8.19 dargestellt ist. Im Bereich der Flammenwurzel ($x/D = 0.2$) liegt die Varianz $\widetilde{c'^2}$ deutlich unterhalb ihres Maximums $\tilde{c}(1 - \tilde{c})$, dem sie sich aber mit steigendem x/D und somit abnehmender Turbulenzintensität zunehmend annähert. Bildlich gesprochen, ändert sich die Struktur der Testflamme R403 von einer verdickt/gefalteten hin zu einer gefalteten Flammenfront. Dies geht einher mit der beobachteten und berechneten Aufweitung der turbulenten Flammenfront.

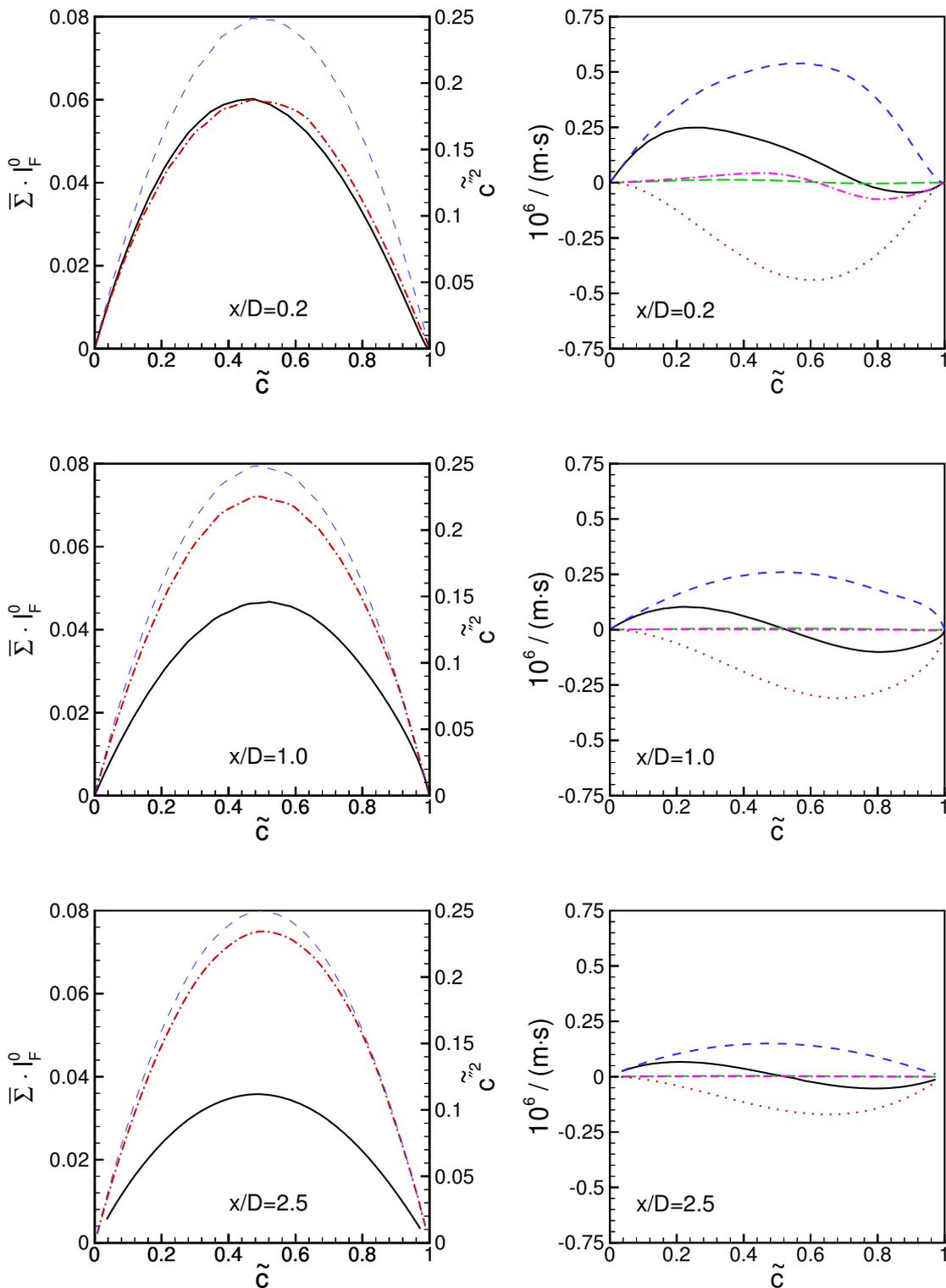


Abbildung 8.19: Testflamme R403: Berechnete Flammenfrontstruktur (CF-4 und CPDF-1B Modell). Links: Verläufe der normierten Flammenfrontoberflächendichte $\bar{\Sigma} \cdot l_F^0$ (ausgezogen), der Reaktionsfortschrittsvarianz \tilde{c}^2 (strichpunktiert) und des Varianzmaximums $\tilde{c}(1 - \tilde{c})$ (dünn gestrichelt). Rechts: Quellterm der Flammenfrontdichte (ausgezogen), $K_t \bar{\Sigma}$ (kurz gestrichelt), $K_m \bar{\Sigma}$ (lang gestrichelte Linie), $S_i^0 \nabla \cdot [\langle \mathbf{n} \rangle_S \bar{\Sigma}]$ (strichpunktiert), $S_i^0 \langle \nabla \cdot \mathbf{n} \rangle_S \bar{\Sigma}$ (punktiert).

8.3.4 Ergebnisse für die Testflamme R309

Die Flamme R309 ist durch eine Frischgemischtemperatur von 400°C und eine Luftzahl von 2.25 charakterisiert. Sie besitzt von den drei ausgewählten Matrixflammen mit $Re_t = 1490$ die kleinste turbulente Reynoldszahl. Die turbulente Karlovitzzahl liegt mit $Ka_t = 0.85$ zwischen denen der Testflammen R408 und R403. Für diese Flamme liegen keine Geschwindigkeitsmessungen vor, weshalb im folgenden nur die gemessenen und berechneten Temperaturverteilungen miteinander verglichen werden. Im Gegensatz zu der Testflamme G26 und den beiden anderen Matrixflammen zeichnet sich der Testfall R309 durch ein deutlich abgehobenen brennenden Flammenkegel aus, was eine besondere Herausforderung für die untersuchten Modelle darstellt.

Die Ergebnisse des CF-1 Modells zeigt Abbildung 8.20. Mit einer Modellkonstante $C_{Kt} = 11$ ist es möglich, sowohl die Flammenlänge als auch die Dicke der turbulenten Reaktionszone richtig vorherzusagen. Das Modell ist aber nicht in der Lage das abgehobene Brennverhalten der Flamme wiederzugeben.

Das CF-2 Modell berechnet zwar eine korrekten Flammenfrontkegel, überschätzt aber die skalare Dissipationsrate und damit die turbulente Flammenfrontdicke leicht. Im Gegensatz zum CF-1 Modell, welches das integrale Turbulenzzeitmaß $t_t = \tilde{k}/\tilde{\varepsilon}$ zur Modellierung der Flammenfrontdehnung heranzieht, gibt das CF-2 Modell zumindest ansatzweise den reduzierten Frischgemischumsatz im Bereich der Flammenwurzel wieder.

Der Krümmungsterm des CPB Modells (Gl. (6.75)) ist von den integralen Turbulenzskalen abhängig und nimmt mit zunehmender Turbulenz ab. Daher sagt das CPB Modell im Gegensatz zum CF-2 Modell eineleicht höhere turbulente Flammengeschwindigkeit und eine etwas höhere Temperatur im Bereich der Flammenwurzel voraus.

Von den Modellen, die die Flammenfrontdehnung auf Basis der dissipativen Skalen berechnen, liefert das MB Modell hinsichtlich der Flammenfrontlänge das beste Ergebnis. Es ist jedoch ebenso wie das CF-1 Modell nicht in der Lage das abgehobene Brennen der Flamme wiederzugeben. Der Destruktionsterm, welcher mit den integralen Turbulenzgrößen gewichtet wird, wird demnach deutlich unterschätzt. Der Vergleich zeigt, daß das Modell zwar die turbulente Flammengeschwindigkeit nicht aber Effekte lokaler Flammenlöschung wiedergeben kann.

Eine hervorragende Übereinstimmung von Experiment und Simulation gewährleistet wiederum das CF-3 Modell, das in Abbildung 8.21 der Messung gegenübergestellt ist. Dies betrifft die drei bereits diskutierten Aspekte Flammenfrontlänge, Flammenfrontdicke und Stabilisierungsverhalten. Grund für die Vorhersagegüte ist das ITNFS-Modell, welches die Interaktion des turbulenten Strömungsfeldes und der Flammenfront erfaßt. Damit können lokale Verlöscheffekte aufgrund von Flammenfrontdehnungen in Bereichen intensiver Turbulenz erfolgreich beschrieben werden.

Das CF-4 Modell unterscheidet sich nur unwesentlich von den Ergebnissen des CF-3 Modells. Es berechnet eine leicht kürzere Flammenfront, was auf den Einfluß des Propagationsterms zurückgeführt werden kann.

Der Einfluß der Flammenfrontdehnung auf die gemittelte Flammenfrontgeschwindigkeit $\langle S_F \rangle_S$ ist von untergeordneter Bedeutung. Die in Abbildung 8.21 verglichenen Ergebnisse des CF-4 und CF-5 Modells liefern daher nahezu identische Ergebnisse.

Die bereits bei den Abbildungen 8.20–8.21 beobachteten Unterschiede in der Temperaturverteilung, die bei der Modellierung der skalaren Dissipationsrate mit Hilfe der integralen bzw. dissipativen Größen auftreten, finden sich auch bei den in Abbildung 8.22 dargestellten Ergebnissen der untersuchten Wahrscheinlichkeitsdichtemodelle wieder. Das

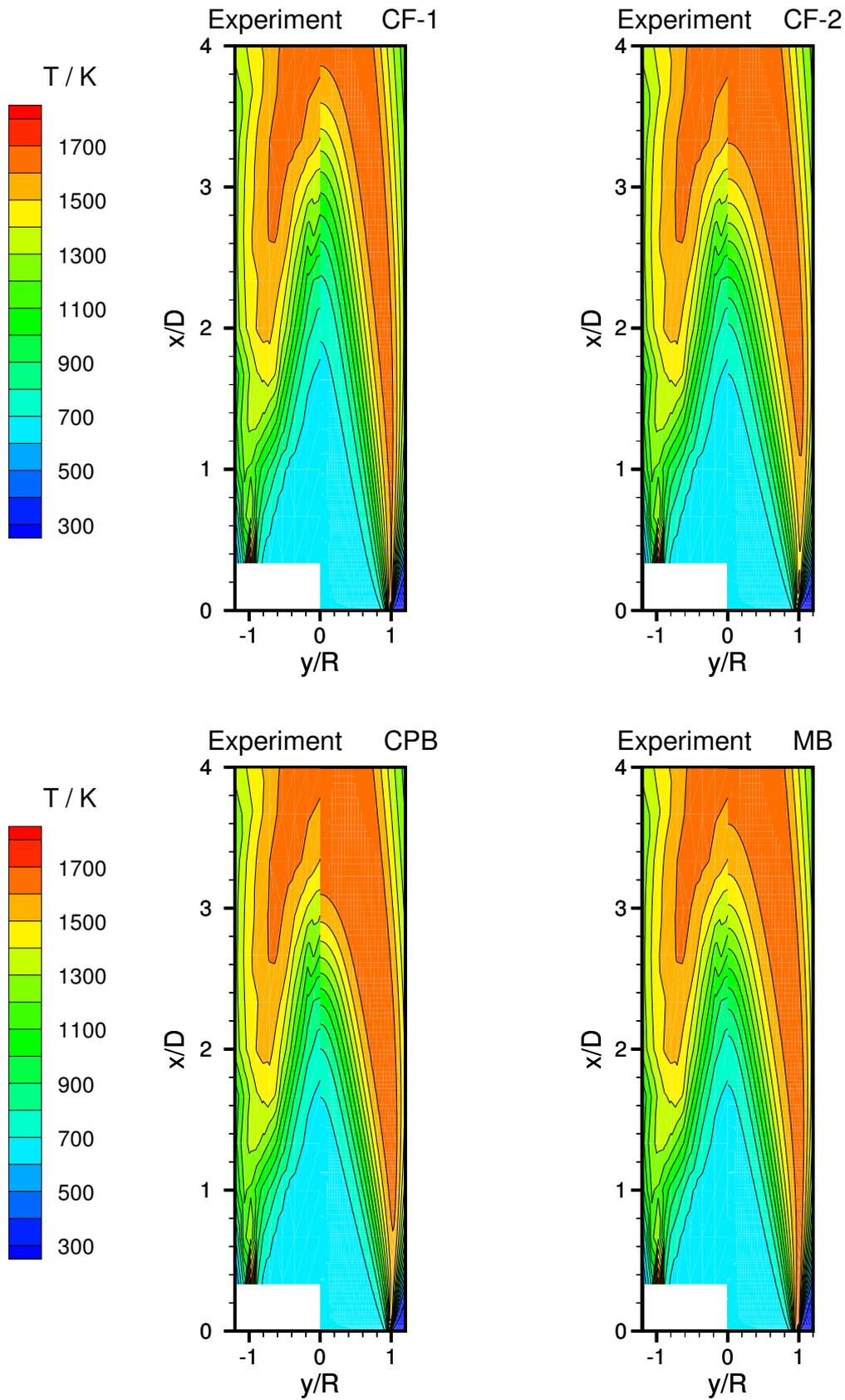


Abbildung 8.20: Testflamme R309. Vergleich gemessener und mit Hilfe des CF-1, CF-2, CPB bzw. MB Modells berechneter Temperaturfelder.

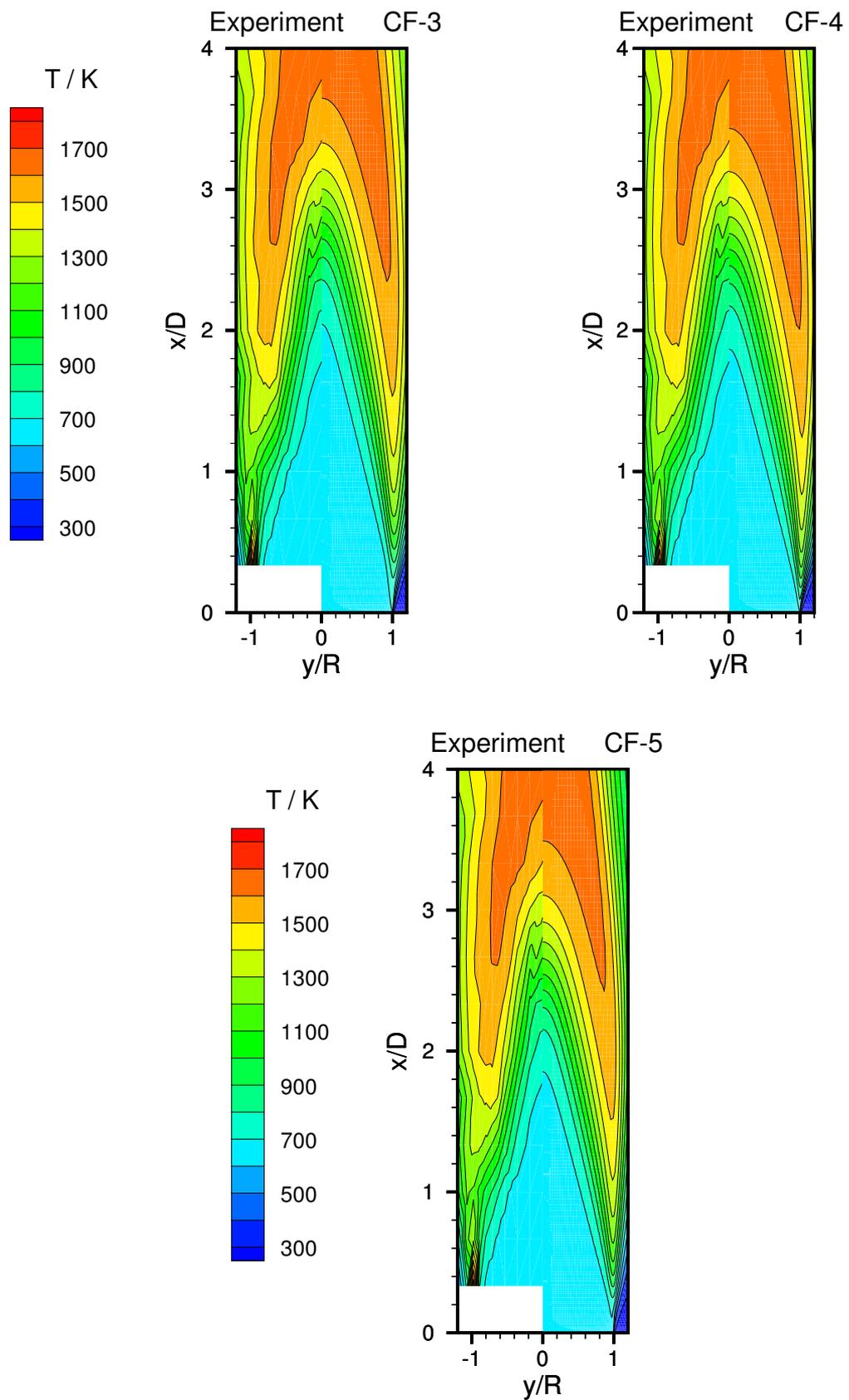


Abbildung 8.21: Testflamme R309. Vergleich gemessener und mit Hilfe des CF-3, CF-4 bzw. CF-5 Modells berechneter Temperaturfelder.

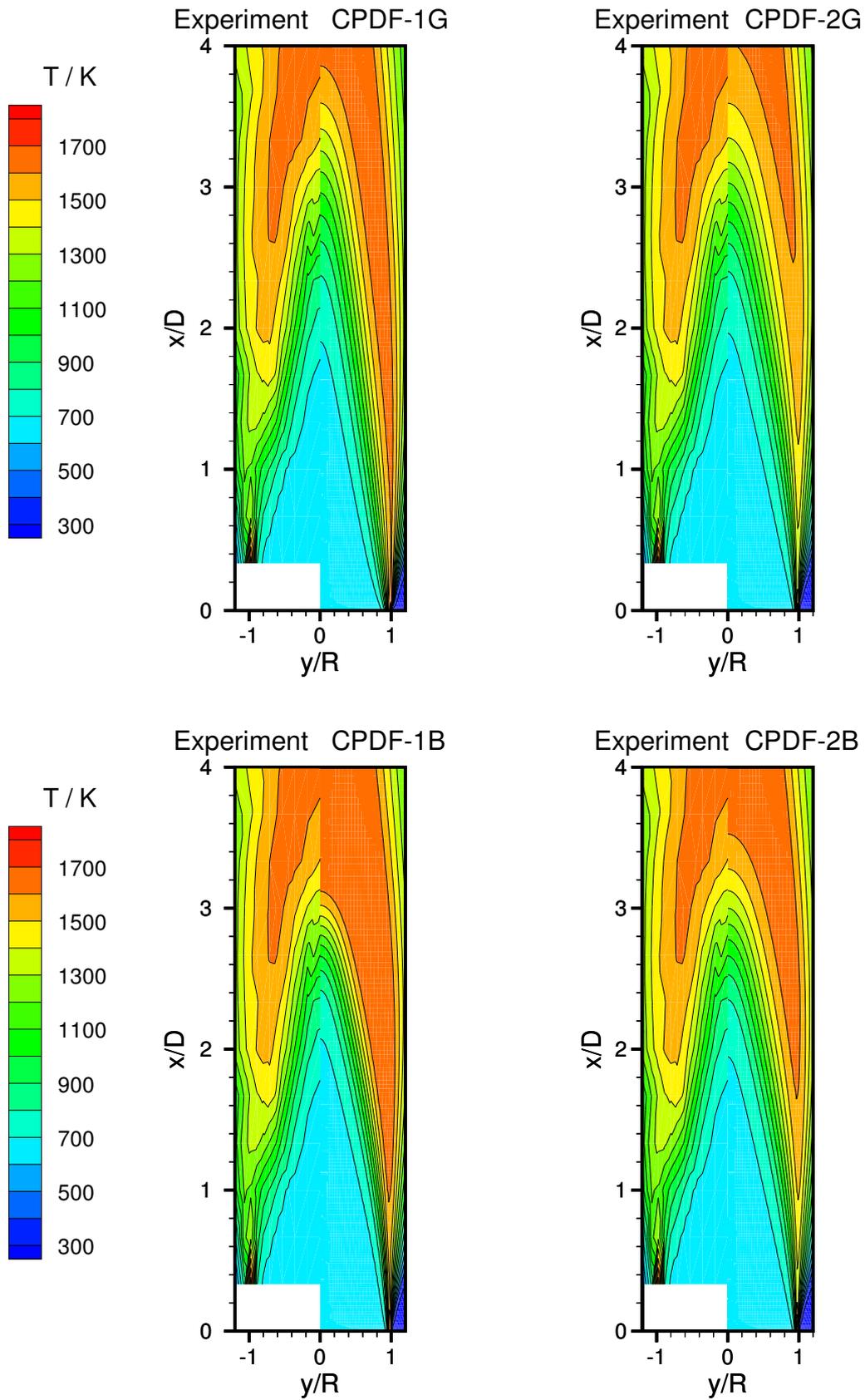


Abbildung 8.22: Testflamme R309. Vergleich gemessener und mit Hilfe der Wahrscheinlichkeitsdichtemodelle berechneter Temperaturfelder.

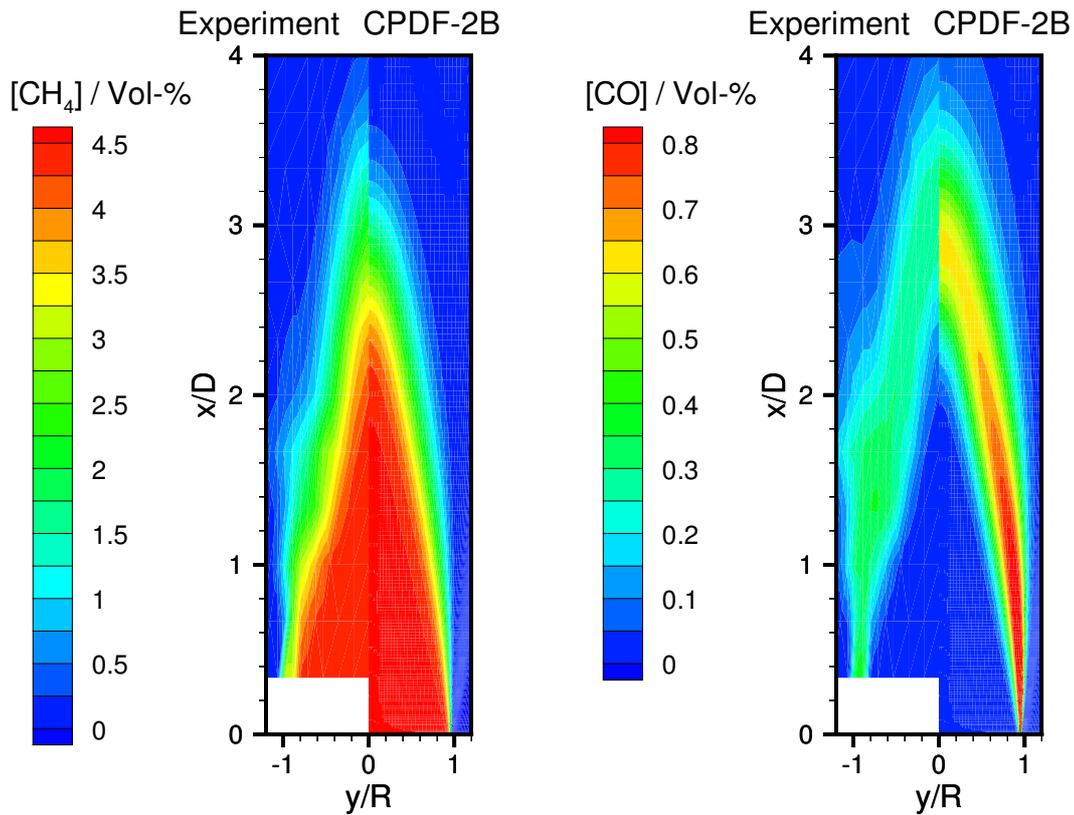


Abbildung 8.23: Testflamme R309. Vergleich gemessener und mit Hilfe des Wahrscheinlichkeitsdichtemodells berechneter CH_4 sowie CO -Konzentrationen.

CPDF-1G und CPDF-1B Modell, die ebenso wie das CF-1 Modell die skalare Dissipationsrate umgekehrt proportional zum integralen Zeitmaß setzen, sind nicht in der Lage das abgehobene Brennen der Testflamme wiederzugeben. Das CPDF-2G und CPDF-2B liefern hingegen Temperaturverteilungen ähnlich dem CF-2 Modell. Dieses Verhalten ist ein weiterer Hinweis auf die Reynoldszahlabhängigkeit der skalaren Dissipationsrate. Ein Vergleich mit Ergebnissen der Testflamme G26 zeigt, daß eine Abschätzung über die integralen oder dissipativen Skalen nicht ausreicht, um den für technische Anwendungen interessierenden Bereich Flamme-Turbulenz Wechselwirkungen abzudecken.

Während das Temperaturfeld und die Verteilung der Methankonzentration durch das CPDF-2B Modell gut wiedergegeben wird (Abb. 8.23), fällt der Vergleich der gemessenen und berechneten CO -Konzentrationen nicht zufriedenstellend aus. Sie werden durch das Modell deutlich zu hoch vorhergesagt, während sie im Experiment nahe am Gleichgewicht liegen. Da die Kohlenmonoxidkonzentration durch die 2-Bereich-Kinetik richtig beschrieben wird, muß das Wahrscheinlichkeitsdichtemodell den reagierenden Zustand und damit die Konzentration der Zwischenprodukte überbewerten. Andererseits wird die turbulente Flammengeschwindigkeit durch das Reaktionsmodell gut wiedergegeben.

Dies bedeutet, daß die Flammenfrontstruktur durch das *c*-PDF Modell nicht ausreichend genau beschrieben wird. Da sich der Testfall R309 durch eine hohe Karlovitzzahl auszeichnet, ist davon auszugehen, daß Flamme-Turbulenz Interaktionen eine große Rolle spielen. Diese werden durch das Wahrscheinlichkeitsdichtemodell im Gegensatz zum CF-4 Modell aber nur indirekt über die Varianz erfaßt.

Verläufe der normierten Flammenfrontdichte $\bar{\Sigma} \cdot l_F^0$, der Reaktionsfortschrittsvarianz \tilde{c}''^2 und ihres Maximums $\tilde{c}(1 - \tilde{c})$ sowie die Quellterme der $\bar{\Sigma}$ -Gleichung als Funktion der favregewichteten Reaktionsfortschrittsvariable zeigt Abbildung 8.24. Die Maxima der normierten Flammenfrontdichte liegen mit bis zu 0.23 deutlich höher als diejenigen der bisher diskutierten Testflammen (Abb. 8.10 und 8.19). Ebenso wie der Fall R403 zeigt der Verlauf der Flammenfrontdichte für alle drei Flammenfrontschnitte einen symmetrischen, glockenförmigen Verlauf.

Im Bereich der Flammenwurzel dominiert der Quellterm der Flammenfrontdehnung die Effekte der Flammenfrontkrümmung bis $c \approx 0.83$. Daneben wird der Verlauf der Flammenfrontdehnung durch den turbulenten Transport mitbestimmt, der das Maximum hin zu $c \approx 0.5$ verschiebt. Im Bereich des Flammenkegels ($x/D = 1$, $x/D = 2.8$) ändert sich diese Wichtung dahingehend, daß der turbulente Transport gegenüber der Flammenfrontdehnung bzw. -krümmung in den Hintergrund tritt. Diese beiden Quellterme sind so verteilt, daß sich Flammenfrontproduktion und -abbau bei $c^{eq} \approx 0.5$ im Gleichgewicht befinden.

Die Varianz des Reaktionsfortschritts, dargestellt durch die strichpunktierte Linie in den Graphen auf der linken Seite von Abbildung 8.24, liegt für die gesamte Flammenfront deutlich unterhalb ihres Maximums (dünn gestrichelte Linie). Eine niedrige Varianz bedeutet eine stärkere Wichtung der thermochemischen Variablen im Bereich $0 < c < 1$, was somit auch die zu hoch berechnete CO-Konzentration erklärt.

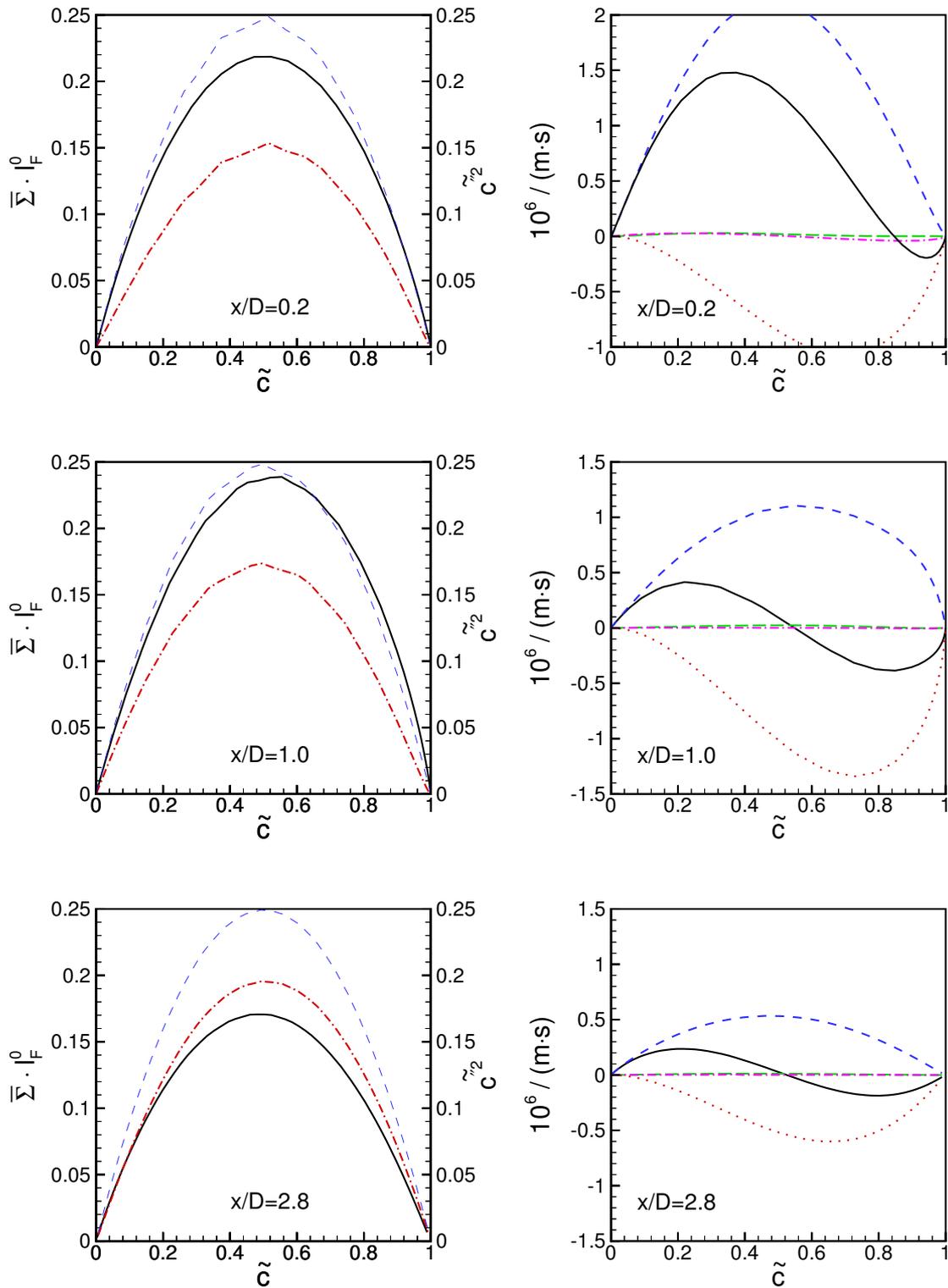


Abbildung 8.24: Testflamme R309: Berechnete Flammenfrontstruktur (CF-4 und CPDF-1B Modell). Links: Verläufe der normierten Flammenfrontoberflächendichte $\bar{\Sigma}/l_F^0$ (ausgezogen), der Reaktionsfortschrittsvarianz \tilde{c}^2 (strichpunktiert) und des Varianzmaximums $\tilde{c}(1 - \tilde{c})$ (dünn gestrichelt). Rechts: Quellterm der Flammenfrontdichte (ausgezogen), $K_t \bar{\Sigma}$ (kurz gestrichelt), $K_m \bar{\Sigma}$ (lang gestrichelte Linie), $S_l^0 \nabla \cdot [\langle \mathbf{n} \rangle_S \bar{\Sigma}]$ (strichpunktiert), $S_l^0 \langle \nabla \cdot \mathbf{n} \rangle_S \bar{\Sigma}$ (punktiert).

8.3.5 Ergebnisse für die Testflamme R408

Die Testflamme R408 ist nicht vorgewärmt und durch ein mageres Mischungsverhältnis von $\lambda = 1.5$, einer turbulenten Reynoldszahl von $Re_t = 2172$ sowie einer Karlovitzzahl von $Ka_t = 1.47$ bei Ausströmbedingung gekennzeichnet. Sie besitzt damit eine leicht niedrigere turbulente Reynoldszahl als die Flamme R403 dafür aber die höchste Karlovitzzahl der ausgewählten Matrixflammen.

Die Abbildung 8.25 zeigt Vergleiche der gemessenen (links) und mit dem CF-4 Modell berechneten (rechts) Axialgeschwindigkeiten sowie der charakteristischen Geschwindigkeitsschwankung u_t . Die Messung zeigt eine Düsenströmung, die bis zu einem axialen Abstand von $x/D = 2$ nahezu konstant ist. Erst danach wird eine Geschwindigkeitsabsenkung, die mit einer Strahlaufweitung verbunden ist, beobachtet. Im Vergleich zu den Testflammen G26 und R403 findet die Expansion aufgrund der Wärmefreisetzung erst im Ausbrandbereich der Flamme und nicht in der Reaktionszone statt. Die Simulation kann diese Beobachtung nicht wiedergeben und sagt eine Erhöhung der Axialgeschwindigkeit im Bereich der Reaktionszone (siehe Abb. 8.27) voraus. Der Impulsaustausch mit der einmischenden Umgebungsluft führt dann zu einer Abnahme der Axialgeschwindigkeit auf $\tilde{u} \approx 13\text{m/s}$ ab einem axialen Abstand von $x/D = 2.5$. Im Bereich des Brenneraustritts expandiert der Strahl aufgrund des abreagierenden Frischgemischs, was ebenfalls nicht im Experiment beobachtet wird.

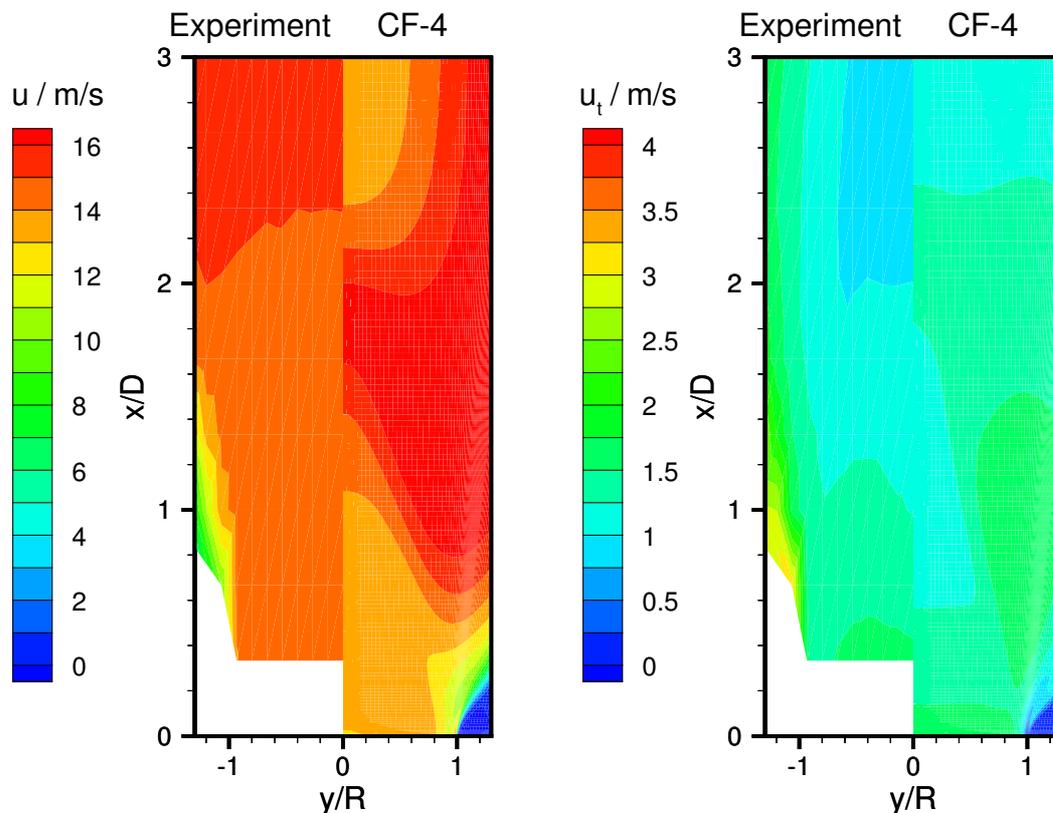


Abbildung 8.25: Testflamme R408. Vergleich gemessener und mit Hilfe des k - ω -Modells berechnetem Strömungsfeld. Links: Zeitlich gemittelte Axialgeschwindigkeit, rechts: charakteristische Geschwindigkeitsschwankung.

Auch die Verteilung der charakteristischen Geschwindigkeitsschwankung zeigt deutliche Abweichungen zwischen Messung und Simulation. So fällt die gemessene Abnahme von u_t auf der Strahlachse deutlicher aus als die berechnete. Im Bereich der turbulenten Flammenfront ist die Übereinstimmung aber befriedigend.

Abbildung 8.26 vergleicht die Ergebnisse der Simulation, durchgeführt mit dem CF-1 Modell, mit denen des Experiments anhand des Temperaturfelds. Das Modell kann für eine angepasste Modellkonstante $C_{K_t} = 11$ zwar die Flammenlänge nicht aber die Dicke der turbulenten Flammenfront wiedergeben. Dieser Testfall zeigt deutlich, daß die Flammenlänge und damit die turbulente Brenngeschwindigkeit maßgeblich durch die turbulente Flammenfrontdehnung bestimmt ist. Eine korrekte Wiedergabe der turbulenten Flammengeschwindigkeit bedeutet aber nicht zwangsläufig eine richtige Wiedergabe der Flammenfrontdicke und damit der gesamten Flammenstruktur. Diese erfordert die richtige Vorhersage der Verteilung der Flammenfrontdicke und damit der skalaren Dissipationsrate. Diese Tatsache erklärt auch die Vielzahl von Werten für die Modellkonstante C_{K_t} , die in der Literatur zu finden sind. Hinzu kommt die bereits beschriebene Unzulänglichkeit, die Stabilisierung in der Flammenwurzel richtig wiederzugeben.

Wie die Ergebnisse der Testflamme R403 erwarten ließen, liefert das CF-2 Modell eine bessere Übereinstimmung mit dem Experiment. Die Abbildung 8.27 zeigt, daß sowohl Flammenlänge als auch Flammenfrontdicke gut wiedergegeben werden. Zudem kann es zumindest teilweise den abgehobenen Charakter der Flamme beschreiben. Der verringerte Umsatz in Düsennähe führt aber dazu, daß die Flamme durch die expandierende Düsenströmung nach außen gedrückt wird. Dies wird jedoch nicht im Experiment beobachtet. Ursache kann die Stabilisierung der Flamme oder Defizite im verwendeten Turbulenzmodell sein. Eine belastbare Aussage läßt sich aber ohne Messungen im Düsenbereich nicht treffen.

Das Ergebnis des CPB Modells zeigt das bereits bei der Testflamme R309 beobachtete Verhalten. Die Abnahme des Destruktionsterms mit kleiner werdenden integralen Wirbelzerfallszeit $\tilde{k}/\tilde{\epsilon}$ führt dazu, daß die Flamme dünner wird, während der Kegelwinkel der Flamme durch das CF-2 bzw. CPB Modell nahezu identisch vorausberechnet wird.

Das MB Modell zeigt eine gute Übereinstimmung sowohl hinsichtlich der Flammenfrontlänge als auch der Flammenfrontdicke, die jedoch leicht unterschätzt wird. Der Bereich der Flammenfrontstabilisierung wird aber von allen Modellvarianten am besten wiedergegeben. Da der Ansatz im Gegensatz zu den kohärenten Flammenfrontmodellen eine größere Umsatzrate in der Scherzone vorhersagt, wird die Flamme durch die expandierenden Rauchgase nicht so stark nach außen gedrückt.

Das in Abbildung 8.27 dargestellte CFM-3 Modell liefert ein gutes Ergebnis, welches dem des CF-2 Modells sehr ähnelt. Grund hierfür ist das ITNFS-Modell, das für große Karlovitzzahlen die turbulente Dehnungsrate in den Bereich des dissipativen Zeitmaßes verschiebt.

Die Testflamme R408 befindet sich mit einer turbulenten Karlovitzzahl von $Ka = 1.47$ in einem Bereich, in dem der Einfluß der Dehnungsrate auf die lokale Flammengeschwindigkeit erkennbar sein sollte. Der Vergleich der Ergebnisse des CF-4 und CF-5 Modells läßt daher den Schluß zu, daß der Einfluß der Dehnungsrate berücksichtigt werden muß, um zu einer guten Übereinstimmung von Simulation und Experiment zu kommen.

Die Ergebnisse der Wahrscheinlichkeitsdichtemodell, dargestellt in Abbildung 8.28, zeigt noch einmal den Einfluß der skalaren Dissipationsrate $\tilde{\chi}_c$ auf die Struktur der turbulenten Vormischflamme. Während der Flammenkegel, d. h. die turbulente Flammengeschwindigkeit, dieser hochturbulenten Flammen von allen Modellvarianten nahezu

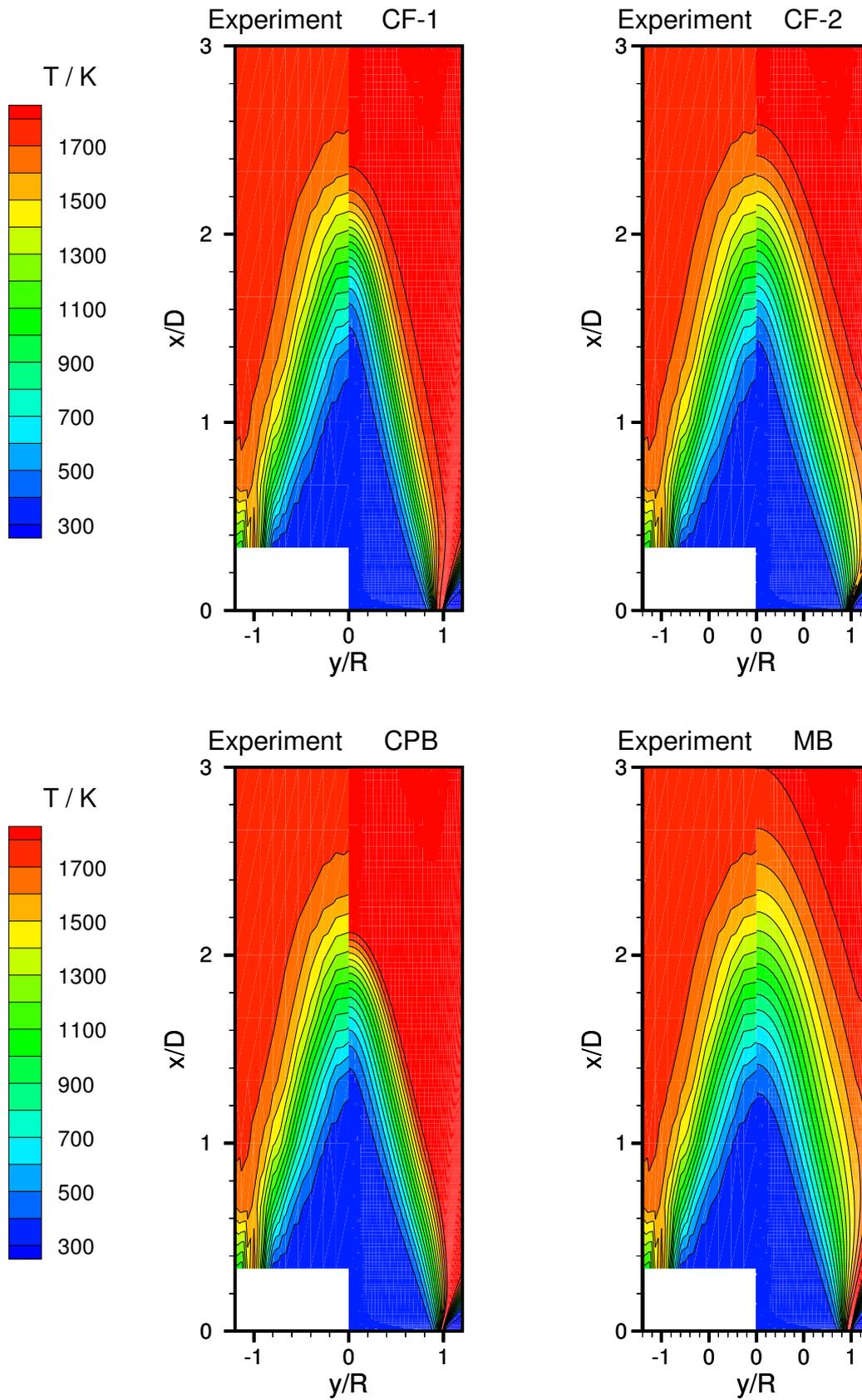


Abbildung 8.26: Testflamme R408. Vergleich gemessener und mit Hilfe des CF-1, CF-2, CPB bzw. MB Modells berechneter Temperaturfelder.

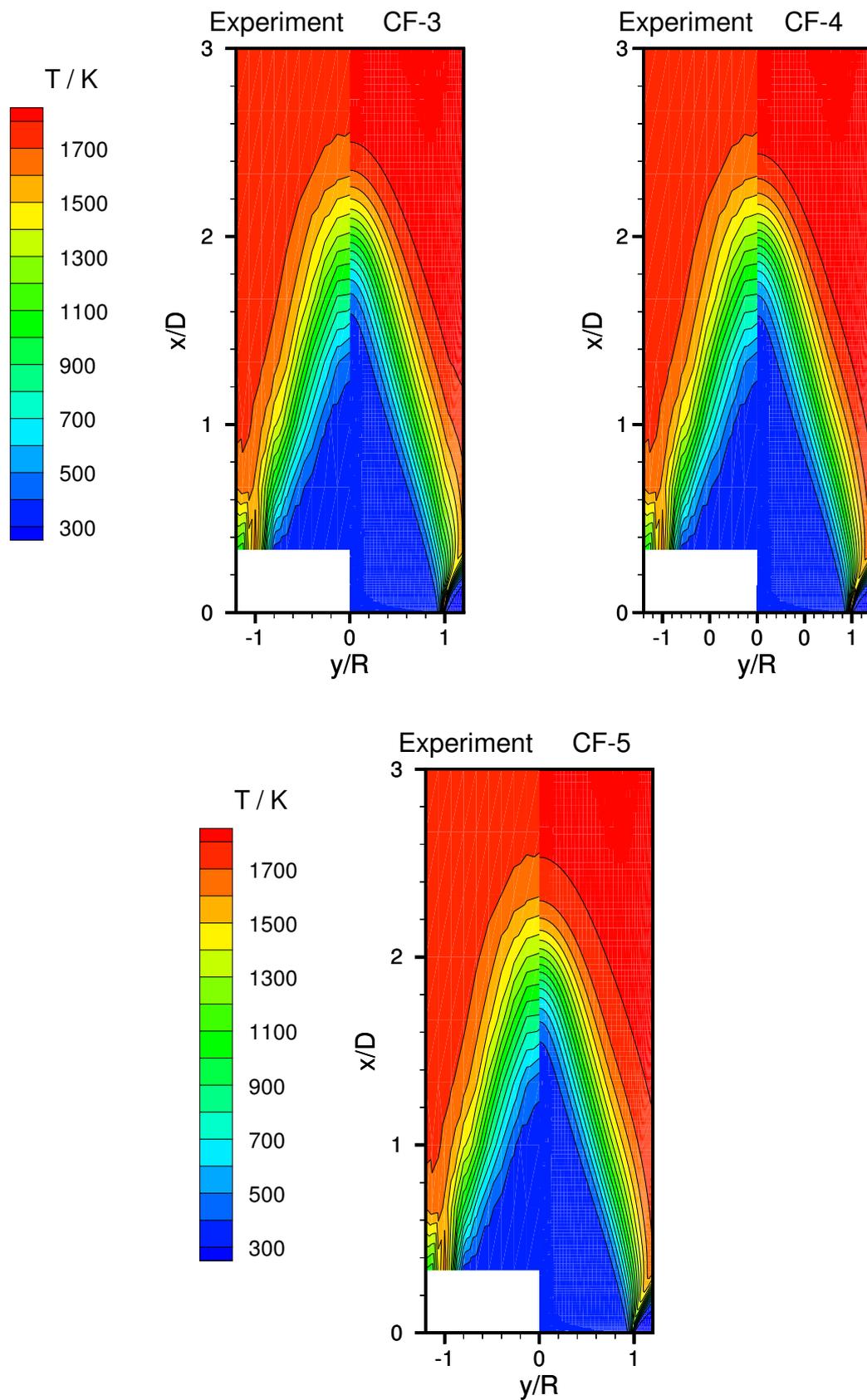


Abbildung 8.27: Testflamme R408. Vergleich gemessener und mit Hilfe des CF-3, CF-4 bzw. CF-5 Modells berechneter Temperaturfelder.

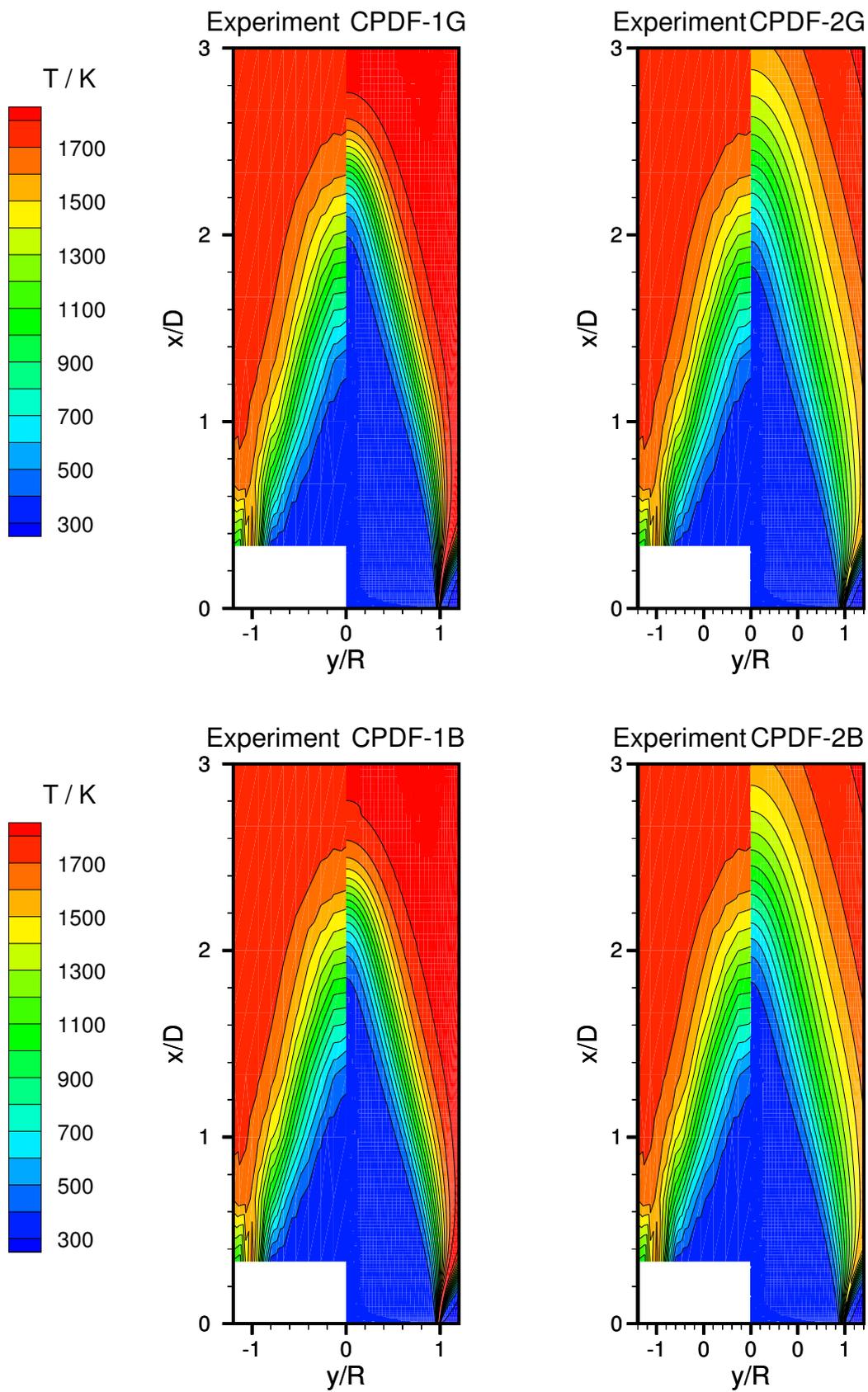


Abbildung 8.28: Testflamme R408. Vergleich gemessener und mit Hilfe der Wahrscheinlichkeitsdichtemodelle berechneter Temperaturfelder.

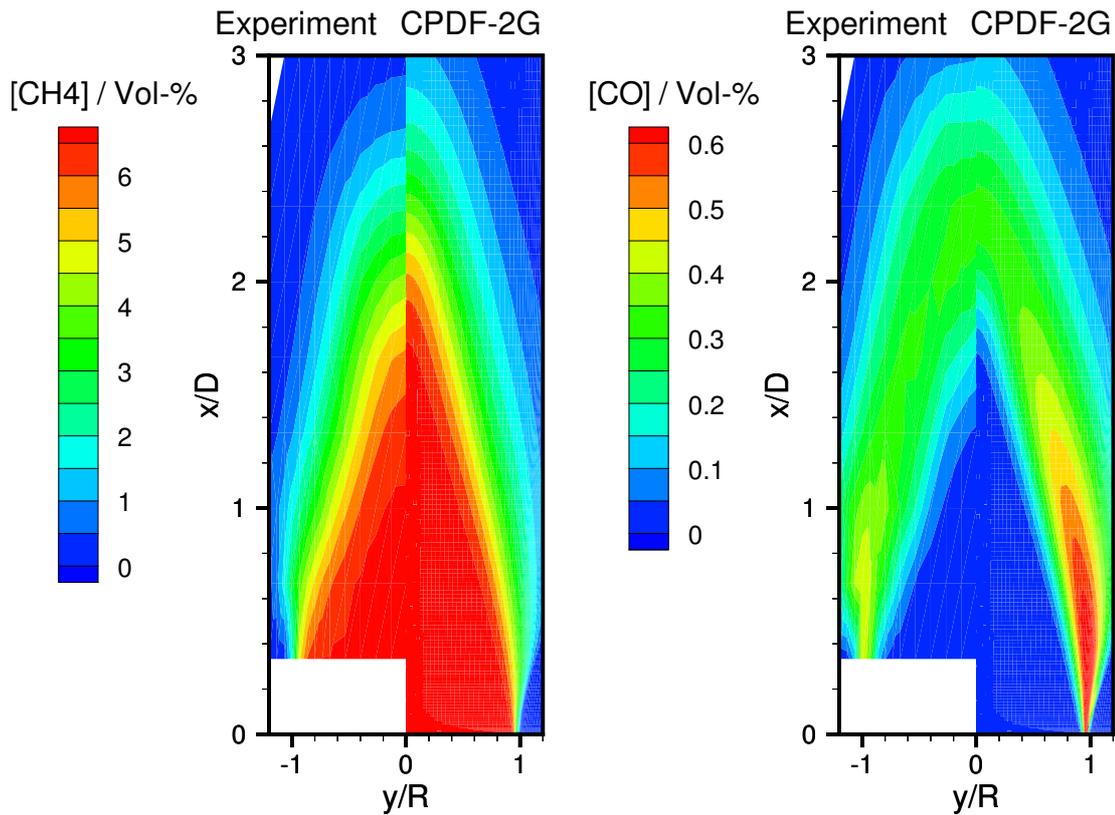


Abbildung 8.29: Testflamme R408. Vergleich gemessener und mit Hilfe des Wahrscheinlichkeitsdichtemodells berechneter CH_4 sowie CO -Konzentrationen.

identisch vorausberechnet wird, unterscheiden sich die CPDF-1G und CPDF-1B Modelle einerseits und die CPDF-2G und CPDF-2B Modelle andererseits deutlich hinsichtlich der Flammenfrontdicke. Die vernachlässigbaren Unterschiede hinsichtlich der Flammenfrontstruktur deuteten darauf hin, daß im hochturbulenten Bereich die Form der Wahrscheinlichkeitsdichte von untergeordneter Bedeutung ist. Keine der vier untersuchten Modellvarianten ist, im Gegensatz zu den bisher diskutierten Testflammen, in der Lage das Temperaturfeld mit zufriedenstellender Genauigkeit wiederzugeben. Die Abweichungen der Methan- und Kohlenmonoxidverteilungen fallen hingegen deutlich geringer aus. Ein Vergleich des Temperatur- und CO -Konzentrationsfelds zeigt ferner, daß die Isoflächen der Reaktionsfortschrittsvariablen und der Reaktionsgeschwindigkeit nicht mehr parallel zueinander verlaufen. Dies könnte ein Zeichen dafür sein, daß die Reaktion nicht mehr in Flamelets sondern in verdickten Flammenfront verläuft. Da die Temperatur- und Konzentrationsmessungen jedoch nicht simultan an der gleichen Flamme erfolgten, kann eine geringe Abweichungen der Randbedingung nicht ausgeschlossen werden, so daß diese Aussage eine Vermutung ist, die es noch experimentell zu bestätigen gilt.

Abbildung 8.30 visualisiert abschließend die Flammenfrontstruktur der Testflamme R408 anhand der normierten Flammenfrontdichte, der Varianz \tilde{c}''^2 , $\tilde{c}(1 - \tilde{c})$ sowie die unterschiedlichen Quellterme der $\overline{\Sigma}$ -Gleichung. Die Maxima der normierten Flammenfrontdichte liegen mit Werten bis zu 0.23 nahe denen der Testflamme R309 und deutlich oberhalb der Werte der Testfälle G26 und R403. Wie die beiden anderen Matrixbrenner-

flammen R403 und R309 weisen die Profile der Flammenfrontdichte einen glockenförmigen Verlauf über die zeitlich mittlere Reaktionsfortschrittsvariable auf. Die Quellterme der $\bar{\Sigma}$ -Transportgleichung im Düsennahbereich unterscheiden sich aber deutlich von den beiden anderen Testfällen (siehe Abb. 8.19 und 8.24). Das CF-4 Modell sagt hier einen deutlich schwächeren Einfluß des turbulenten Transports voraus, was in der beobachteten radialen Verdrängung der Flammenfront weg vom Düsenaustritt resultiert. Die Verläufe der Quellterme im Bereich größerer axialer Abstände x/D weisen hingegen keinen qualitativen Unterschied zu den beiden anderen Matrixbrennerflammen.

Der Einfluß der Damköhlerzahl auf den zeitlich mittleren Quellterm der Reaktionsfortschrittsvariable läßt sich anhand eines Vergleichs der Verläufe der Reaktionsfortschrittsvarianz der Testflammen R309 und R408 aufzeigen. Der Testfall R309 besitzt mit $Da_t = 45$ die größere Damköhlerzahl als die Flamme R408 mit $Da_t = 32$. Daher wird nach Gleichung (3.74) der zeitlich mittlere Quellterm weniger stark gewichtet, was sich wiederum in der vorhergesagten größeren Reaktionsfortschrittsvarianz des Testfalls R408 äußert.

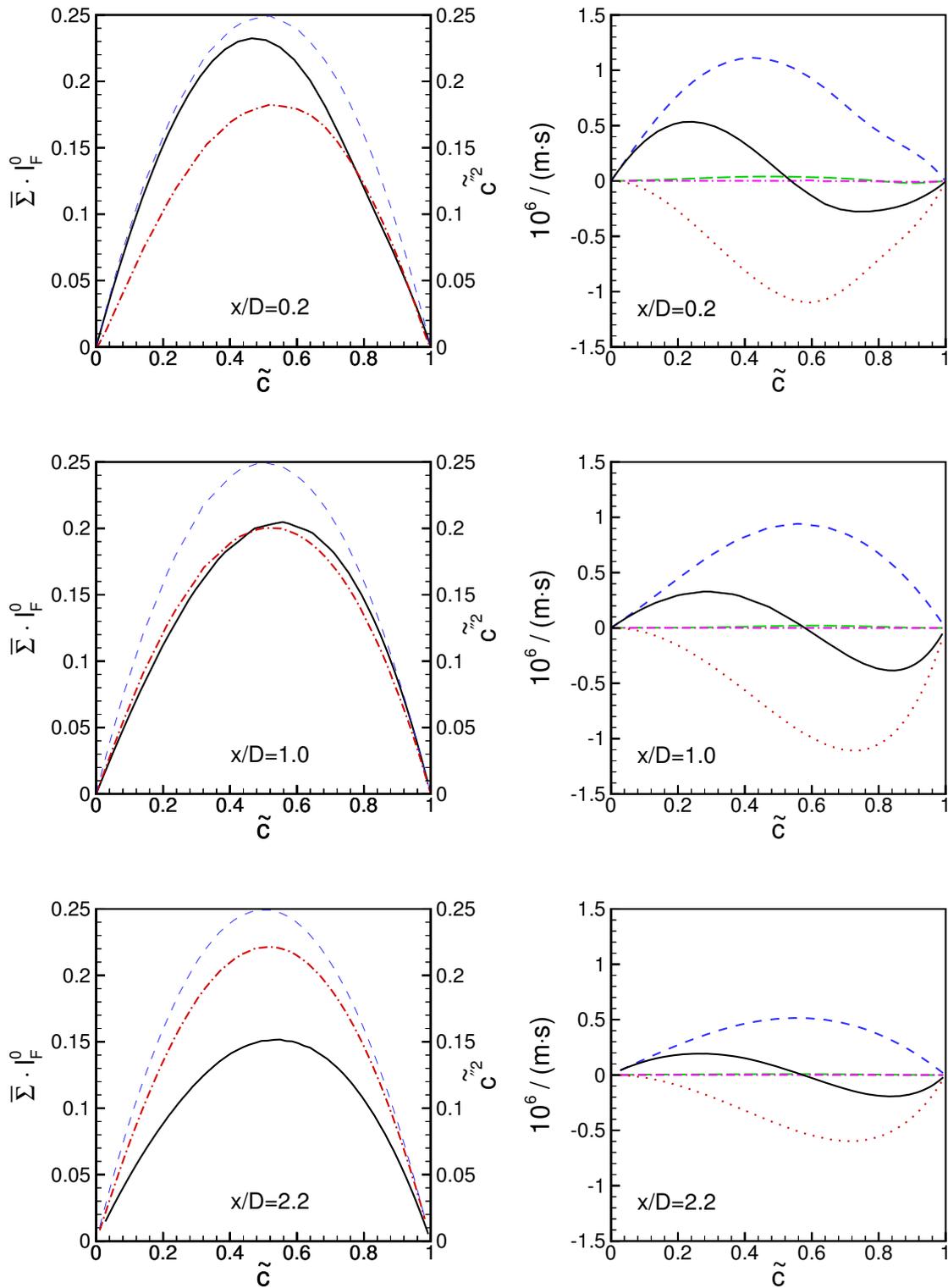


Abbildung 8.30: Testflamme R408: Berechnete Flammenfrontstruktur (CF-4 und CPDF-2B Modell). Links: Verläufe der normierten Flammenfrontoberflächendichte $\bar{\Sigma}/l_F^0$ (ausgezogen), der Reaktionsfortschrittsvarianz \tilde{c}''^2 (strichpunktiert) und des Varianzmaximums $\tilde{c}(1-\tilde{c})$ (dünn gestrichelt). Rechts: Quellterm der Flammenfrontdichte (ausgezogen), $K_t \bar{\Sigma}$ (kurz gestrichelt), $K_m \bar{\Sigma}$ (lang gestrichelte Linie), $S_l^0 \nabla \cdot [\langle \mathbf{n} \rangle_S \bar{\Sigma}]$ (strichpunktiert), $S_l^0 \langle \nabla \cdot \mathbf{n} \rangle_S \bar{\Sigma}$ (punktiert).

8.4 JOULE-Flamme

8.4.1 Experimenteller Aufbau

Die in diesem Abschnitt beschriebene Vormischflamme wurde innerhalb des JOULE-Projekts an der RWTH-Aachen am Institut für Technische Mechanik von Prof. Peters entwickelt. Ziel war die Gewinnung möglichst vollständige Datensätze zur Validierung von Modellen turbulenter Vormischverbrennung. Eine Beschreibung des Brenners sowie Meßdaten wurden in einem Artikel von CHEN ET AL. [61] veröffentlicht und werden zudem von Institut für Technische Mechanik auf ihrer Web-Seite zur Verfügung gestellt. In jüngerer Vergangenheit haben PRASAD [184] und HERRMANN [94] diese Daten zur Validierung von einfachen Flammenfrontdichtemodellen bzw. des G-Gleichungsmodells herangezogen.

Der Brenner, der in Abbildung 8.31 schematisch dargestellt ist, besteht aus einer runden Düse mit dem Durchmesser $D = 12\text{mm}$, welche sich im Zentrum einer Pilotbrennerplatte befindet. Innerhalb der Düse ist ein Turbulenzgitter eingebaut, das einen weitgehend homogenen, isotropen turbulenten Freistrah erzeugt. Die sich ausbildende Strahlflamme wird mit Hilfe eines heißen Co-Flows stabilisiert. Hierzu befinden sich eine Vielzahl von Bohrungen in der Pilotbrennerplatte, an denen sich ein Kranz kleiner Vormischflammen ausbildet. Die Anzahl der Bohrungen und der Durchmesser der Brennerplatte d_P sind so gewählt, daß die turbulente Freistrahflamme über eine Länge von ca. $10D$ gegenüber der angesaugten Umgebungsluft abgeschirmt wird.

8.4.2 Randbedingungen

Die Abbildung 8.32 zeigt das Rechengebiet der JOULE-Flamme. Die Randbedingungen des Freistrahls sind aufgrund detaillierte LDA-Messungen bekannt, so daß das Rechengebiet 2mm oberhalb des Düsenaustritts beginnt. Die mittleren Geschwindigkeiten sowie die charakteristischen Schwankungsgeschwindigkeiten lassen sich anhand von Meßdaten

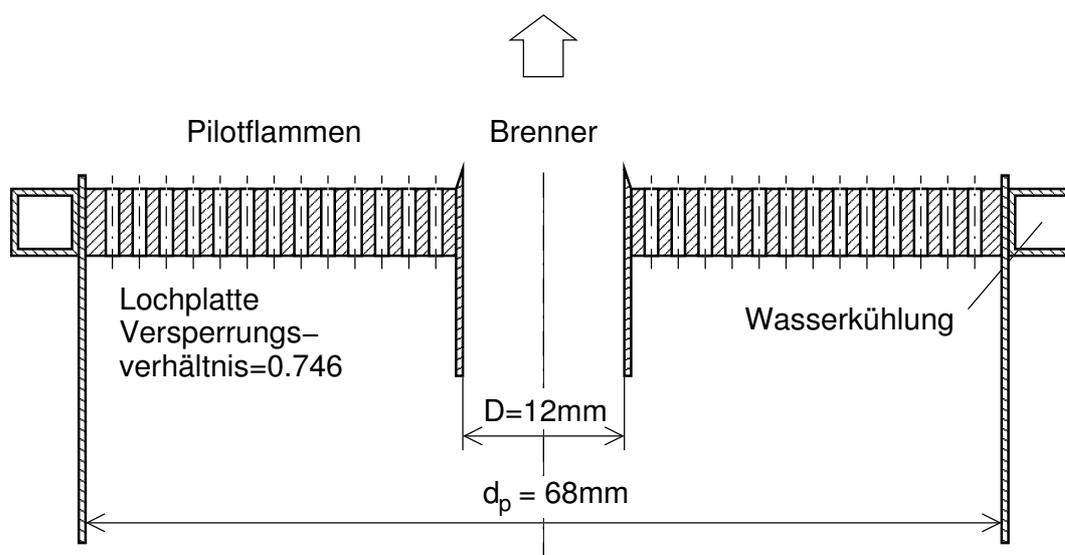


Abbildung 8.31: Skizze des JOULE-Bunsenbrenners bestehend aus Düse und Pilotbrennerplatte.

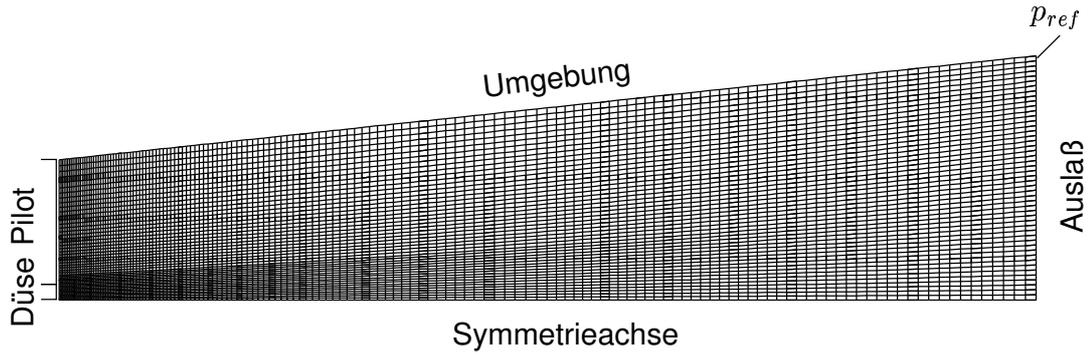


Abbildung 8.32: Gittergeometrie und Randbedingungen der JOULE-Flamme.

auf die Berandung „Düse“ interpolieren. Das Längenmaß wurde auf Basis homogener abklingender Gitterturbulenz als Funktion gemessener Geschwindigkeiten und Schwankungsintensitäten der ersten beiden Meßebenen bestimmt. Für den Bereich „Pilot“, der die Pilotbrennerplatte abbildet, existieren für den reagierenden Fall keine Messungen, da hier die Strömung nicht getracert werden konnte. In der Veröffentlichung von CHEN ET AL. [61] ist lediglich die mittlere Geschwindigkeit des Pilotstroms im nicht reagierenden Falls angegeben. Die Turbulenzrandbedingungen wurden daher so gewählt, daß das Geschwindigkeitsfeld sowie die Mischungsgrenzschicht wiedergegeben wird. Die Zusammensetzung von Freistrah und Pilotflammen werden von den Autoren als stöchiometrisches Methan/Luft Gemisch angegeben, das eine laminare Flammgeschwindigkeit von 40cm/s besitzt. Für die Symmetrieachse und die Deckflächen des Rechengebiets wurde wie im Fall der TECFLAM- bzw. Matrixflammen Symmetrierandbedingungen vorgegeben. Die Berandung „Umgebung“ wird wiederum als Einlaß- und die Berandung „Auslaß“ als Auslaßrandbedingung definiert. Die verwendeten Randbedingungen sind zur besseren Übersicht in Tabelle 8.4 zusammengefaßt.

Randbedingung	Düse	Pilotbrenner
Luftzahl λ	1	1
\tilde{T}_u / K	298	1850
\tilde{T}_b / K	2230	
$\tilde{u} / m/s$	siehe Abb. 8.33	siehe Abb. 8.33
$\tilde{k} / m^2/s^2$	siehe Abb. 8.33	siehe Abb. 8.33
$\tilde{\epsilon} / m^2/s^3$	siehe Abb. 8.33	siehe Abb. 8.33
$u_0 / m/s$	30	–
$k_0 / m^2/s^2$	3.82	–
\tilde{c}	siehe Abb. 8.33	siehe Abb. 8.33
$\tilde{\Sigma}$	0	1000
\tilde{f}	1	1

Tabelle 8.4: Randbedingungen der Testflamme F3.

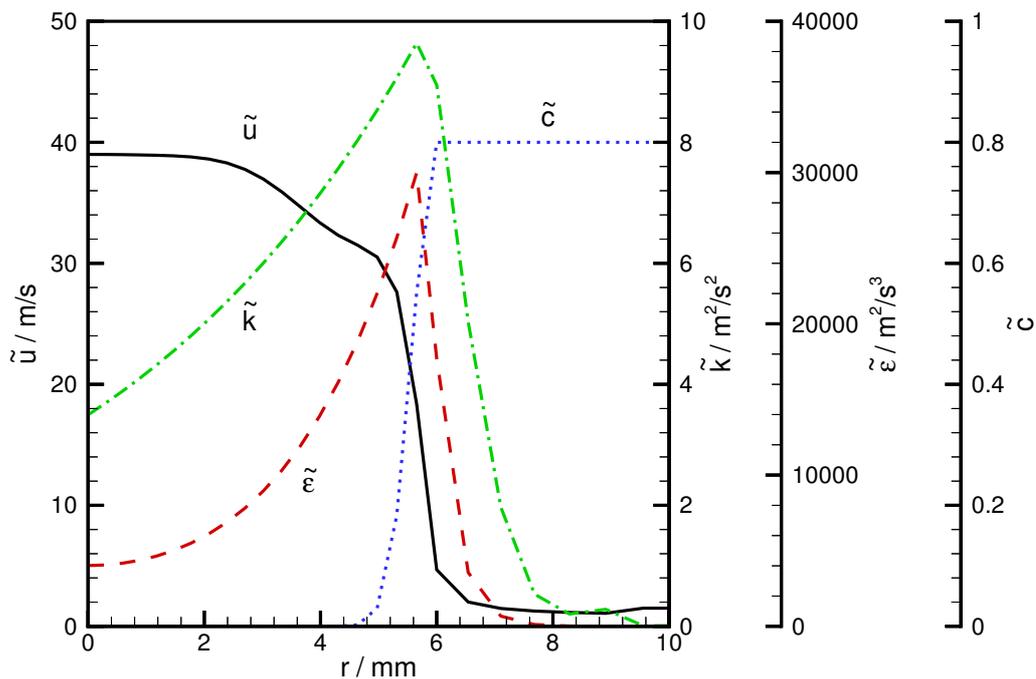


Abbildung 8.33: Strömungsrandbedingungen für Düse und Pilotbrennerplatte der Testflamme F3.

8.4.3 Ergebnisse

Die Abbildung 8.34 vergleicht die Simulationsergebnisse der kalten Strömung (durchgezogene Linie) mit den Messungen von CHEN ET AL. [61] (Symbole). Dargestellt sind die radialen Verteilungen der turbulenten kinetischen Energie (links) und der zeitlich mittleren Axialgeschwindigkeit (rechts) für verschiedene axiale Abstände, $x/D = 2.5, 4.5, 6.5, 8.5$ und 10.5 . Die Simulation kann die gemessene Strahlaufweitung und die Entwicklung der Scherschicht sehr gut nachvollziehen. Das Ende des Potentialkerns liegt bei ca. $x/D = 4.5$ und ist am beginnenden Abfall des Geschwindigkeitsmaximums erkennbar.

Der Verlauf des Maximums der turbulenten kinetischen Energie folgt der Aufweitung der turbulenten Scherschicht. Der radiale Impulsaustausch nimmt mit zunehmendem Abstand von der von der Düse sowohl in Achsrichtung als auch nach außen hin zu. Der Anstieg der turbulenten kinetischen Energie auf der Strahlachse markiert schließlich das Zusammenlaufen der Scherschichten und damit das Ende des Potentialkerns. Von da an ist eine Abnahme des Maximums der potentiellen kinetischen Energie feststellbar, die typisch für den Ähnlichkeitsbereich des Freistrahls ist.

Die Übereinstimmung zwischen Messung und Simulation ist für alle dargestellten axialen Abstände sehr gut und demonstriert damit die Anwendbarkeit von Zweigleichungsmodellen auf diese einfache isotherme Strömungskonfiguration.

Abbildung 8.35 zeigt die radialen Profile der zeitlich mittleren Geschwindigkeiten der Bunsenflamme für die normierten axialen Abstände von $x/D = 2.5, 4.5, 6.5, 8.5$ und 10.5 . Die Symbole repräsentieren Meßpunkte, die Linien Ergebnisse der Simulationen. Anhand der Meßergebnisse läßt sich erkennen, daß die freigesetzte Wärme und die da-

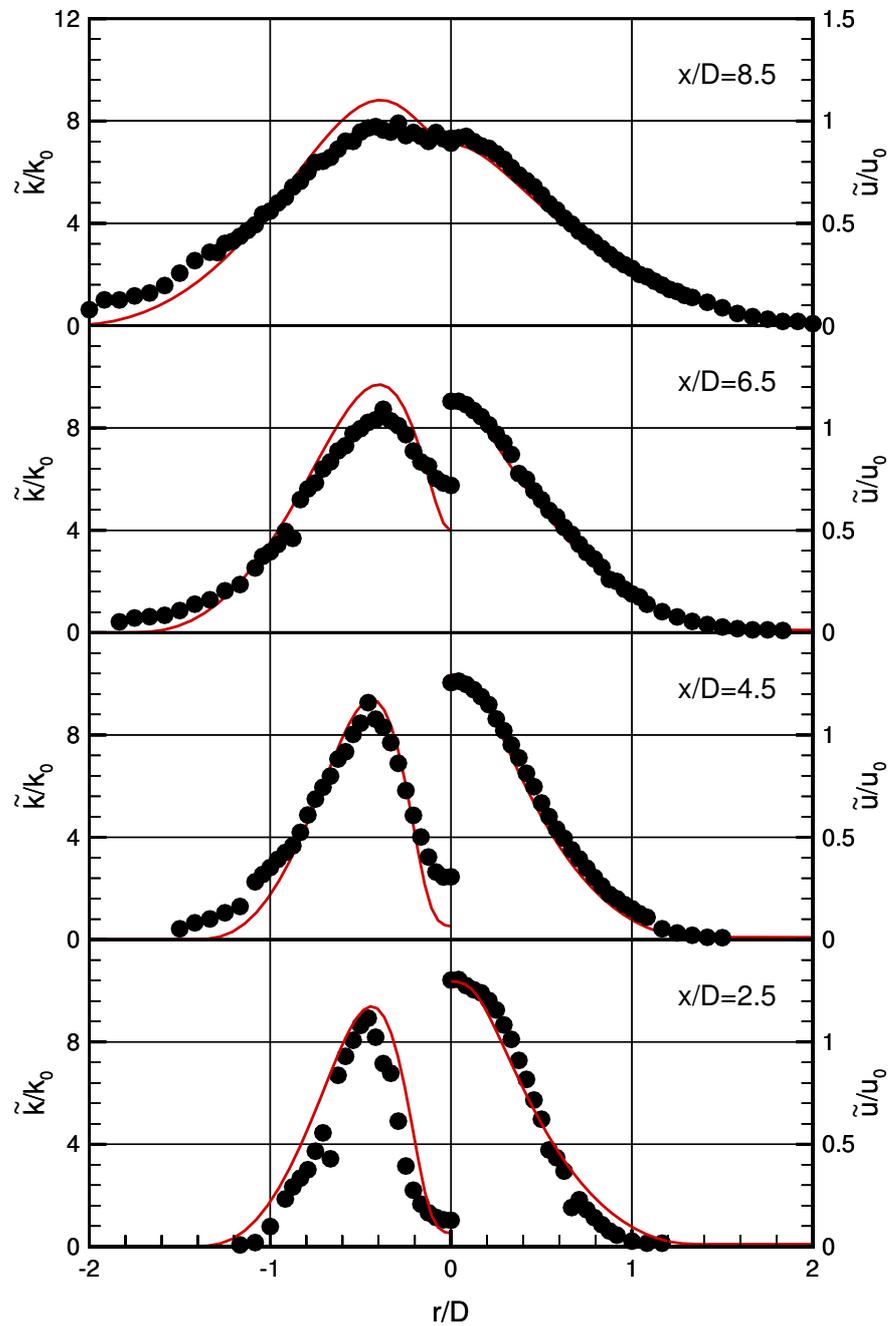


Abbildung 8.34: Testfeld F3. Vergleich von gemessenem (Symbole) und berechnetem (ausgezogene Linie) isothermen Strömungsfeld anhand der Axialgeschwindigkeit und der turbulenten kinetischen Energie.

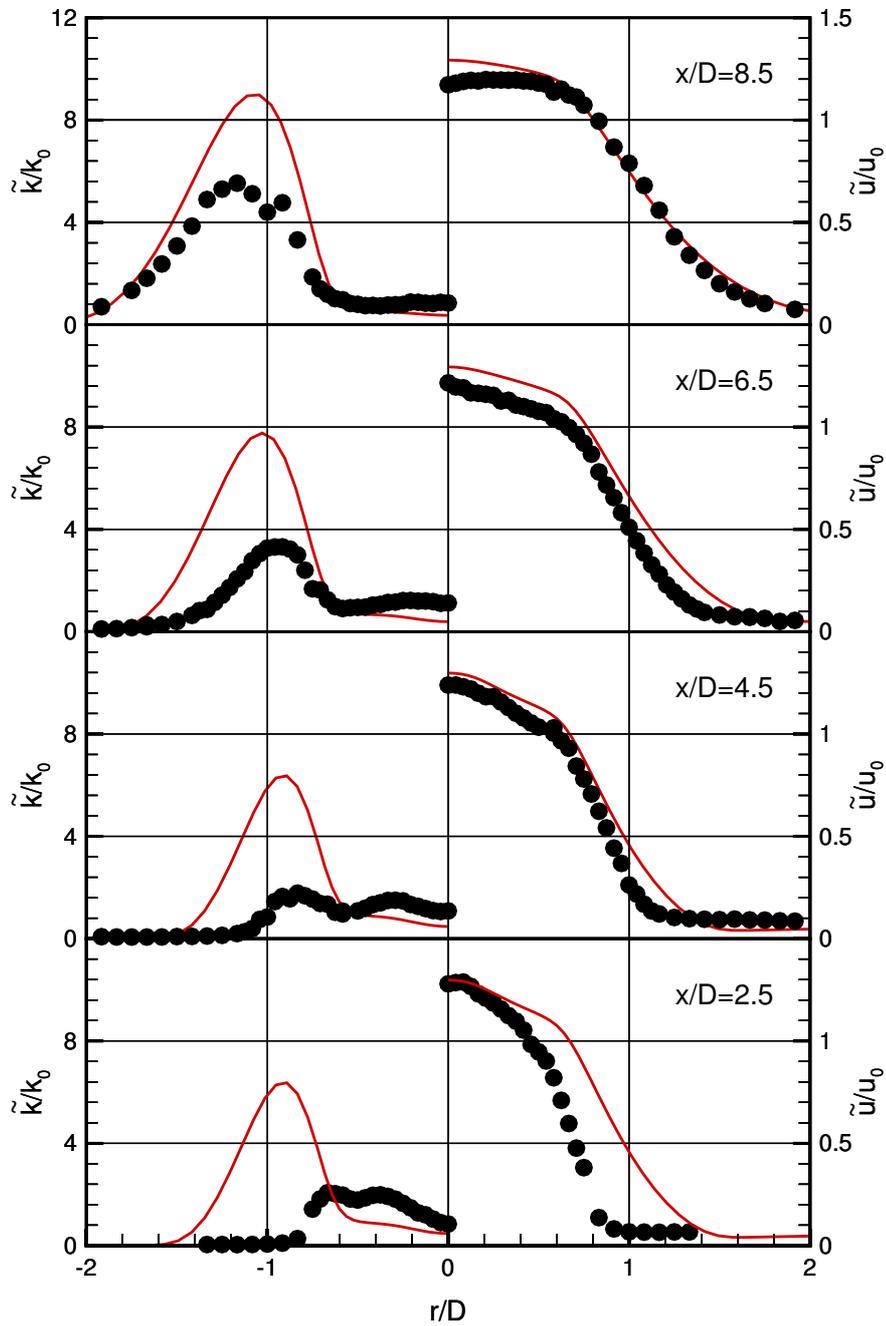


Abbildung 8.35: Testflamme F3. Vergleich von gemessenem (Symbole) und berechnetem (ausgezogene Linie) reagierendem Strömungsfeld anhand der turbulenten kinetischen Energie (links) und der Axialgeschwindigkeit (rechts).

mit verbundene Strömungsdivergenz zu einer Verbreiterung der Radialprofile führt. Im Vergleich zur isothermen Strömung fällt das Maximum der Axialgeschwindigkeit später ab. Der Potentialkern des reagierenden Freistrahls erstreckt sich daher über einen weiteren Bereich.

Im Gegensatz zu den Geschwindigkeitsprofilen unterscheiden sich die Verläufe der turbulenten kinetischen Energie des isothermen und reagierenden Freistrahls deutlich voneinander. Die turbulente kinetische Energie der reagierenden Strömung ist merklich geringer als die der isothermen. Ursache sind zum einen die erhöhte kinematische Viskosität zum anderen die Strömungsdilatation aufgrund der Wärmefreisetzung. Die Simulation ist in der Lage diesen Trend wiederzugeben, versagt aber im Brennernahbereich. Um die Ergebnisse korrekt beschreiben zu können, sind entweder gemessene Randbedingungen oder eine Simulation der Pilotbrennerbohrungen notwendig. Da die Simulation aber von einem homogenen Strömungsprofil der Heißgase direkt über der Brennerplatte ausgeht, kann sie die Totwassergebiete in unmittelbarer Nähe der Brennerplatte nicht erfassen. Hierzu wäre eine dreidimensionale Simulation eines Brennerausschnitts notwendig, welche aufgrund des damit verbundenen Rechenaufwands nicht betrachtet wurde. Weiterhin zeigt die Messung eine nahezu konstante turbulente kinetische Energie auf der Strahlachse und keine Zunahme, wie im kalten Fall beobachtet. Ursache ist die Strahlexpansion aufgrund der reagierenden Kernströmung. Sie drängt die Scherzone nach außen hin ab und vermindert somit eine radiale Vermischung in Richtung der Strahlachse. Ein weiterer Unterschied ist im Verlauf des Turbulenzenergiemaximums zu beobachten. Es fällt im Fall der reagierenden Strömung mit zunehmenden axialen Abstand ab, und bleibt nicht wie in Abbildung 8.35 nahezu konstant.

Auch wenn die Übereinstimmung zwischen Messung und Simulation im Fall der Bunsenflamme nicht so gut ist wie im Fall des isothermen Freistrahls, so kann das verwendete $k-\varepsilon$ Turbulenzmodell die wesentlichen Effekte sowohl des Geschwindigkeits- als des Turbulenzenergiefelds gut wiedergeben.

Vergleiche der mit Hilfe der untersuchten Flammenfrontoberflächendichtemodellen berechneten (durchgezogene Linien) und gemessenen (Symbole) normierten Temperaturen $\Theta = (T - T_u) / (T_b - T_u)$ zeigen die Abbildungen 8.36–8.38. Es fällt auf, daß in der Nähe des Brennermundes Temperaturen deutlich unterhalb der adiabaten Verbrennungstemperatur von $T_b = 2240\text{K}$ gemessen werden. Für diese Beobachtung können zwei Effekte verantwortlich gemacht werden: Lokales Verlöschen aufgrund starker Scherung und Wärmeabfuhr an die Brennerplatte. Der Einfluß der Scherung wird durch einen Teil der Modelle erfaßt. Einflüsse aufgrund von Wärmeabfuhr an die Brennerplatte können dagegen nicht berücksichtigt werden, da alle Modelle auf der Annahme eines adiabaten Systems beruhen. Eine Möglichkeit dieses Problem ohne eine Modellerweiterung zu umgehen, bestünde in der Vorgabe einer Enthalpie, d. h. eines Mischungsbruchs, der Pilotflammen, die die gemessene Temperaturverteilung wiedergibt. Da sich der Einfluß von Scherung und Wärmeverlust nicht voneinander trennen lassen, wurde auf eine Anpassung des Temperaturprofils verzichtet.

Das CF1-Modell (ausgezogene Linie), das auf der linken Seite in Abbildung 8.36 mit den Meßergebnissen (Symbole) verglichen ist, liefert für eine angepaßte Modellkonstante $C_{K_t} = 3$ eine gute Übereinstimmung hinsichtlich der Flammenlänge. Der Temperaturanstieg verläuft aber zu steil, was teilweise auf die bereits beschriebene Abweichung der maximalen Flammentemperatur zurückgeführt werden kann. Die Testfälle F3 und R408 besitzen beide Karlovitzzahlen größer eins. Die turbulenten Reynoldszahlen unterscheiden sich aber um über eine Größenordnung. Ein Vergleich der angepaßten Modellkonstanten

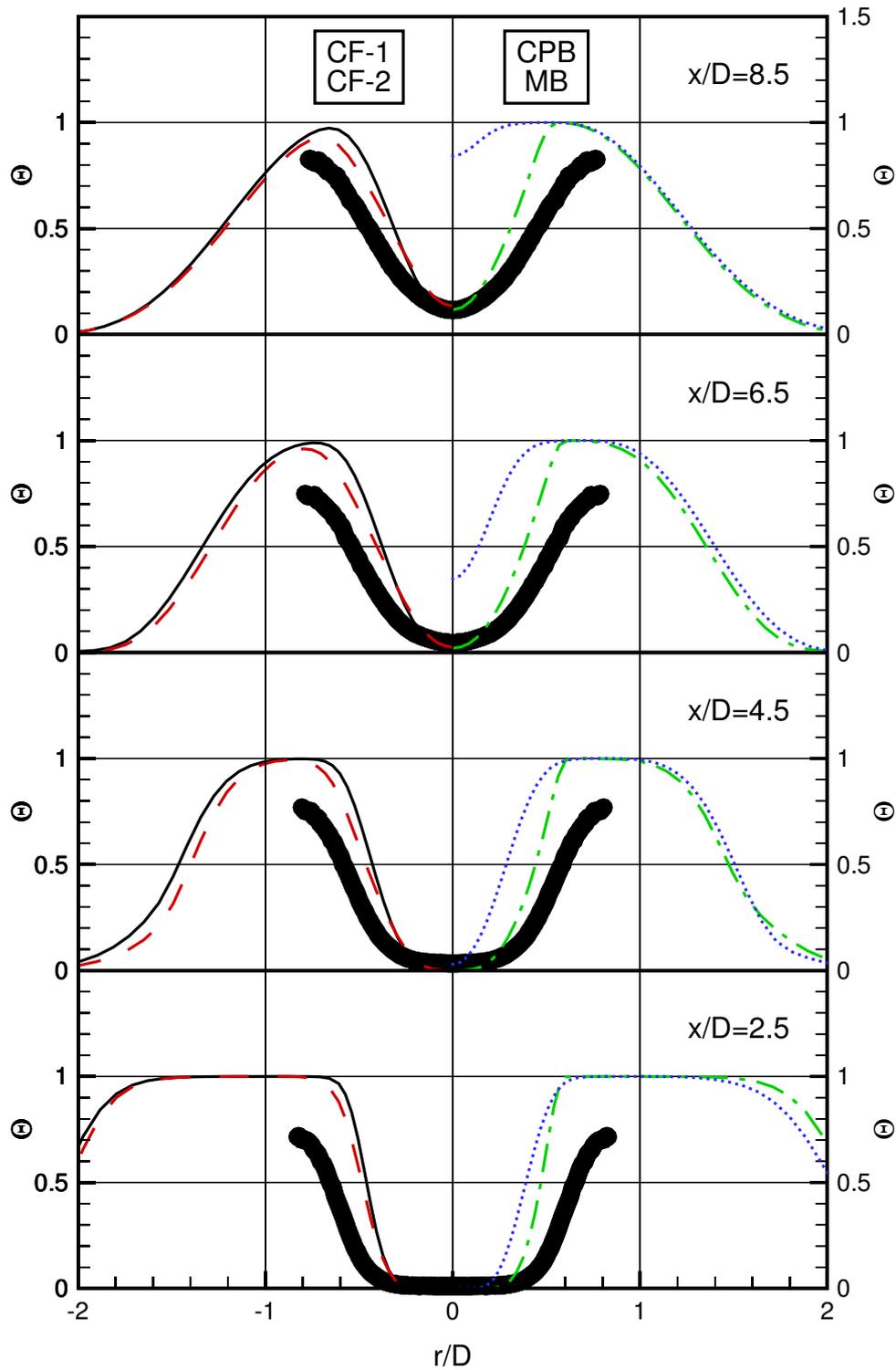


Abbildung 8.36: Testflamme F3. Vergleich gemessener und mit Hilfe des CF-1 (ausgezogene Linie), CF-2 (gestrichelte Linie), CPB (strichpunktuelle Linie) bzw. MB Modells (punktuelle Linie) berechneter Temperaturfelder. Dargestellt ist die normierte Temperatur $\Theta = (T - T_u) / (T_b - T_u)$.

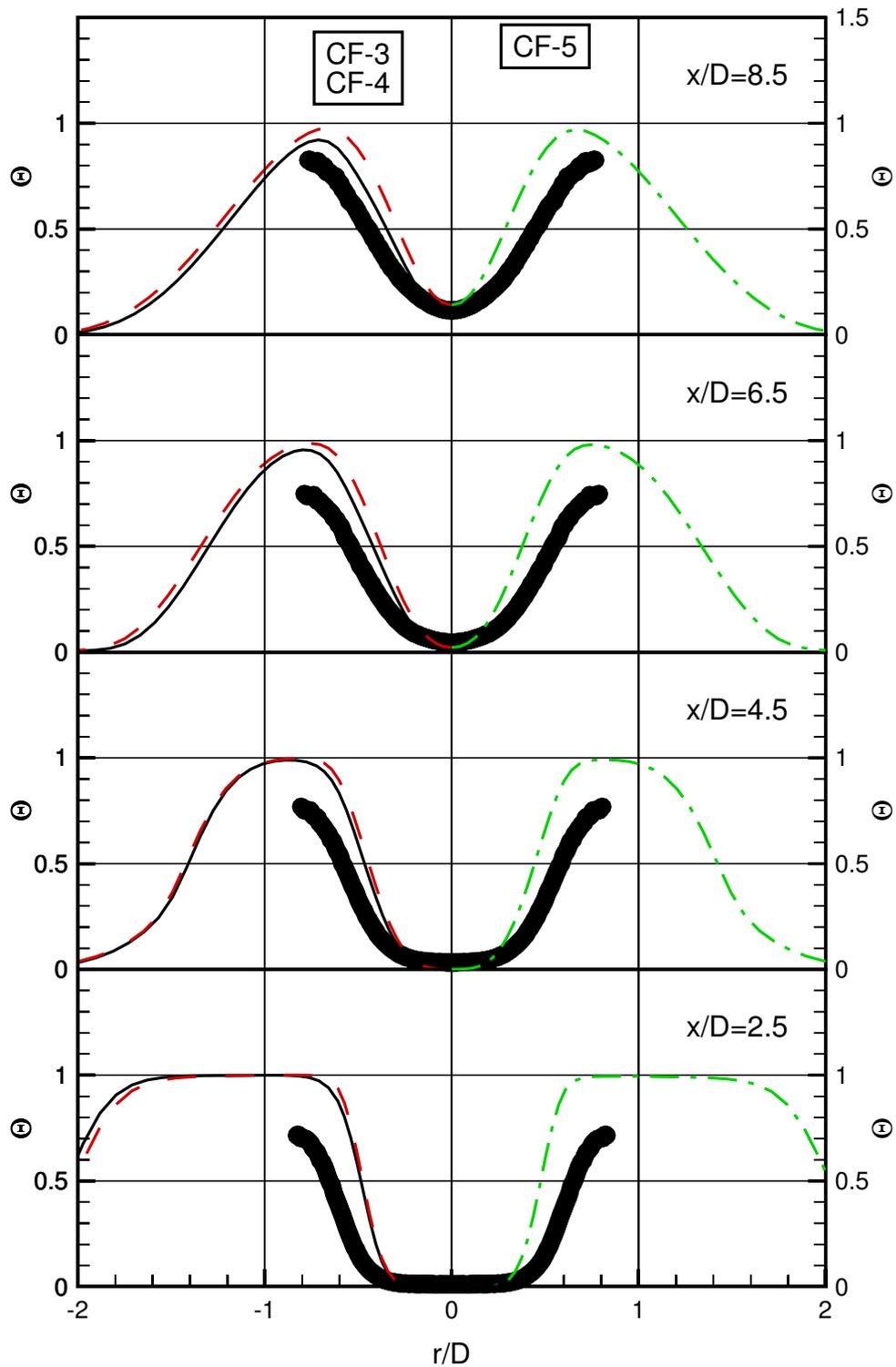


Abbildung 8.37: Testflamme F3. Vergleich gemessener und mit Hilfe des CF-3 ausgezogene Linie), CF-4 (gestrichelte Linie) bzw. CF-5 Modells (strichpunktigte Linie) berechneter Temperaturfelder. Dargestellt ist die normierte Temperatur $\Theta = (T - T_u) / (T_b - T_u)$.

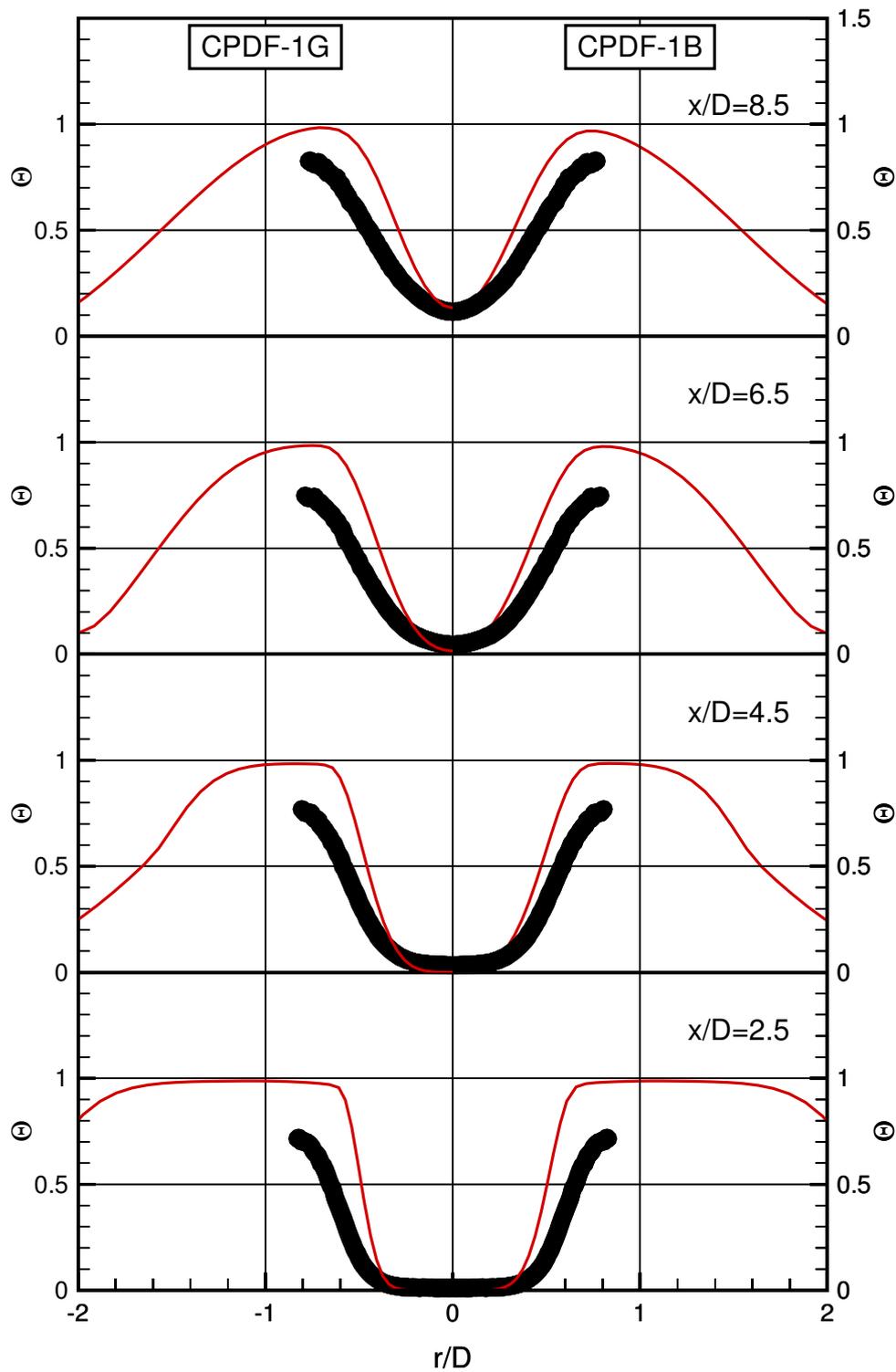


Abbildung 8.38: Testflamme F3. Vergleich gemessener und mit Hilfe der Wahrscheinlichkeitsdichtemodelle berechneter Temperaturfelder. Dargestellt ist die normierte Temperatur $\Theta = (T - T_u) / (T_b - T_u)$

C_{K_t} zeigt somit deutlich, daß die Flammenfrontdehnung eine Funktion der turbulenten Reynoldszahl sein muß. Da sich diese durch das Produkt von Geschwindigkeitsverhältnis u_t/S_l^0 und l_t/l_F^0 darstellen läßt, muß auch die Flammenfrontdehnung eine Funktion dieser beiden dimensionslosen Kennzahlen sein.

Ein sehr ähnliches Ergebnis wird mit dem CF-2 Modell (gestrichelte Linie) erzielt, welches ebenfalls auf der linken Seite von Abbildung 8.36 dargestellt ist. Die gute Übereinstimmung von Experiment und Simulation zeigt, daß die Anwendbarkeit des CF-2 Modells nicht allein durch die turbulente Reynoldszahl gegeben ist, sondern durch das Geschwindigkeitsverhältnis u_t/S_l^0 . Dies läßt sich aus einem Vergleich mit den Ergebnissen des Testfalls G26 schließen. Die Flamme G26 besitzt zwar eine höhere turbulente Reynoldszahl, aber ein deutlich niedrigeres Geschwindigkeitsverhältnis u_t/S_l^0 . Der Modellierungsansatz des CF-2 Modells geht davon aus, daß sich die instantanen Flammenfronten wie eine materielle Fläche verhalten. Wie in Abschnitt 6.2.3 erläutert wurde, setzt dies voraus, daß die Flammengeschwindigkeit deutlich langsamer ist als die Geschwindigkeitsschwankungen, welche die Flammenfront auffalten, d. h. $u_t/S_l^0 > 1$.

Das CPB Modell, dargestellt durch die strichpunktierte Linie in Abbildung 8.36 (rechte Seite), berechnet die gleiche Flammenlänge wie das CF-2 Modell, überschätzt aber erwartungsgemäß den Temperaturanstieg nahe der adiabaten Verbrennungstemperatur.

Im Gegensatz zu den übrigen Testfällen versagt das MB Modell (strichpunktierte Linie) beim Testfall F3 und berechnet eine deutlich zu kurze Flamme. Die Ursache für dieses Fehlverhalten ist im Destruktionsterm zu suchen, der offensichtlich unterschätzt wird. Dieses Ergebnis zeigt somit, daß das MB Modell für Flammen, die sich durch große Karlovitzzahlen bei gleichzeitig niedrigen Reynoldszahlen auszeichnen, nicht geeignet ist.

Wie nach den bereits vorgestellten Simulationsergebnissen zu erwarten, erzielen das CF-3 und CF-4 Modell die beste Übereinstimmung zwischen Experiment und Simulation. Die Unterschiede der in Abbildung 8.37 dargestellten Ergebnisse des CF-3 (ausgezogene Linie) und CF-4 Modells (gestrichelte Linie) sind vernachlässigbar. Der etwas steilere Temperaturanstieg des CF-4 Modells liegt im Propagationsterm begründet, der über den Gradienten des Reaktionsfortschritts zu einer Beschleunigung des Umsatzes beiträgt.

Abbildung 8.38 vergleicht schließlich die Temperaturverläufe, die mit dem CPDF-1G (links) und CPDF-1B Modell (rechts) vorausgesagt werden. Die Ergebnisse sind nahezu identisch. Der Grund hierfür liegt im Verlauf der Reaktionsfortschrittsvarianz, die in Abbildung 8.39 als Funktion des zeitlich mittleren Reaktionsfortschritts \tilde{c} für verschiedene axiale Schnitte x/D dargestellt ist. Die Varianz (strichpunktierte Linie) liegt für die gesamte Flammenfront deutlich unterhalb ihres Maximums $\tilde{c}(1 - \tilde{c})$ (dünn gestrichelte Linie), da die Damköhlerzahl der Testflamme mit $Da_t \approx 0.01$ klein ist. In diesem Fall wichten die abgeschnittene Gaußfunktion und die β -Funktion den reagierenden Zustand sehr ähnlich und sagen daher nahezu identische Reaktionsgeschwindigkeiten voraus.

Der Verlauf der Flammenfrontoberflächendichte, markiert durch die ausgezogene Linie auf der linken Seite von Abbildung 8.39, zeigt eine deutliche Schiefe. Sie wurde bereits beim Testfall G26 beobachtet und ist ein Kennzeichen für die niedrige turbulente Reynoldszahl von $Re_t = 122$. Das Maximum der normierten Flammenfrontdichte liegt mit $\overline{\Sigma} \cdot l_F^0 = 0.5$ deutlich oberhalb der Werte, die in den Matrixflammen gefunden wurden. Weiter stromab fallen sie aber auf vergleichbare Werte ab. Entsprechend groß sind die Quellterme der Flammenfrontdichte, die auf der rechten Seite von Abbildung 8.39 aufgetragen sind. Grund hierfür sind die extrem großen Gradienten, die zu einer sehr starken Flammendehnung K_t und einem entsprechend großen Destruktionsterm $S_l^0 \langle \nabla \cdot \mathbf{n} \rangle_S \overline{\Sigma}$ führen. Obwohl die Gradienten der zeitlich mittleren Strömung im Vergleich zu den an-

deren Flammen groß sind, ist der Quellterm der zeitlich mittleren Flammenfrontdehnung gegenüber der turbulenten Dehnung vernachlässigbar.

Neben dem Geschwindigkeits- und Temperaturfeld wurden von CHEN ET AL. auch die Konzentrationen der wichtigsten Komponenten gemessen. Diese sind in den Abbildungen 8.40 und 8.41 mit den Ergebnissen des CPDF-1B und CF-5 Modells verglichen. Das Wahrscheinlichkeitsdichtemodell kann die Konzentrationsverläufe der Edukte Methan und O_2 und der Produkte CO_2 und H_2O gut wiedergeben. Bei den stabilen Zwischenprodukten CO und H_2 sind jedoch größere Abweichungen festzustellen. Die Konzentration des Kohlenmonoxids wird durchgehend um den Faktor 1.8 überschätzt, während diejenige des Wasserstoffs zu niedrig vorhergesagt wird. Das gleiche Bild zeigt sich beim Betrachten der Ergebnisse des CF-5 Modells. Da dem Modell eine detaillierte Kinetik zu Grunde liegt, kommt die 2-Bereich-1-Schritt Kinetik als Ursache für die beobachteten Abweichungen nicht in Frage. Daher liegt der Schluß nahe, daß die Struktur der Reaktionszone durch die Turbulenzelemente modifiziert wird. In diesem Fall kann der Reaktionsverlauf nicht mehr durch eine einzige Reaktionsfortschrittsvariable abgebildet werden. Dies gilt sowohl für das Wahrscheinlichkeitsdichte- als auch das Flammenfrontdichtemodell. Eine abschließende Bewertung kann jedoch nicht auf Basis dieses eine Testfalls erfolgen, sondern erfordert weitere Untersuchungen.

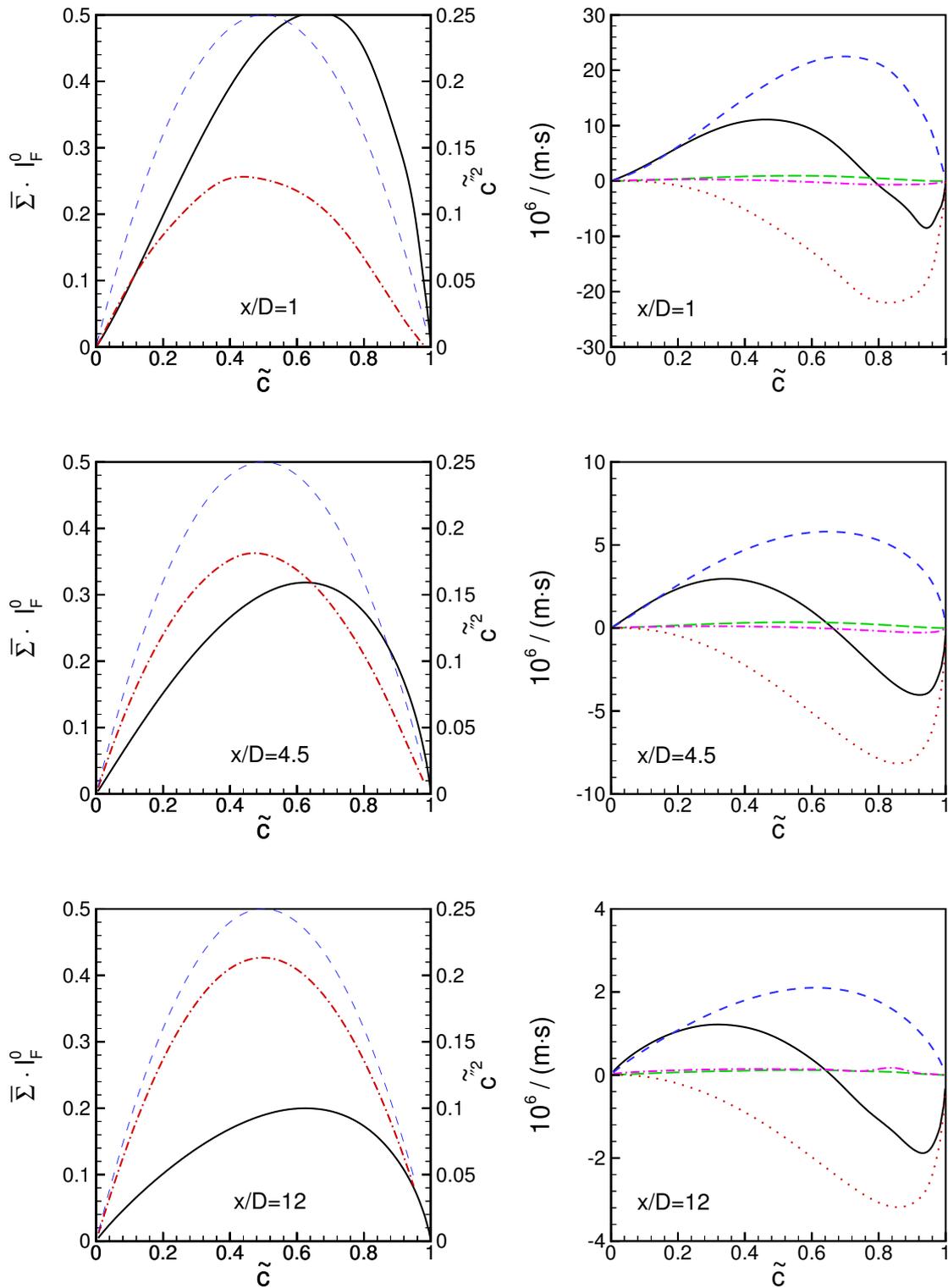


Abbildung 8.39: Testflamme F3: Berechnete Flammenfrontstruktur (CF-4 und CPDF-1B Modell). Links: Verläufe der normierten Flammenfrontoberflächendichte $\bar{\Sigma}/l_F^0$ (ausgezogen), der Reaktionsfortschrittsvarianz \tilde{c}''^2 (strichpunktiert) und des Varianzmaximums $\tilde{c}(1-\tilde{c})$ (dünn gestrichelt). Rechts: Quellterm der Flammenfrontdichte (ausgezogen), $K_t \bar{\Sigma}$ (kurz gestrichelt), $K_m \bar{\Sigma}$ (lang gestrichelte Linie), $S_i^0 \nabla \cdot [\langle \mathbf{n} \rangle_S \bar{\Sigma}]$ (strichpunktiert), $S_i^0 \langle \nabla \cdot \mathbf{n} \rangle_S \bar{\Sigma}$ (punktiert).

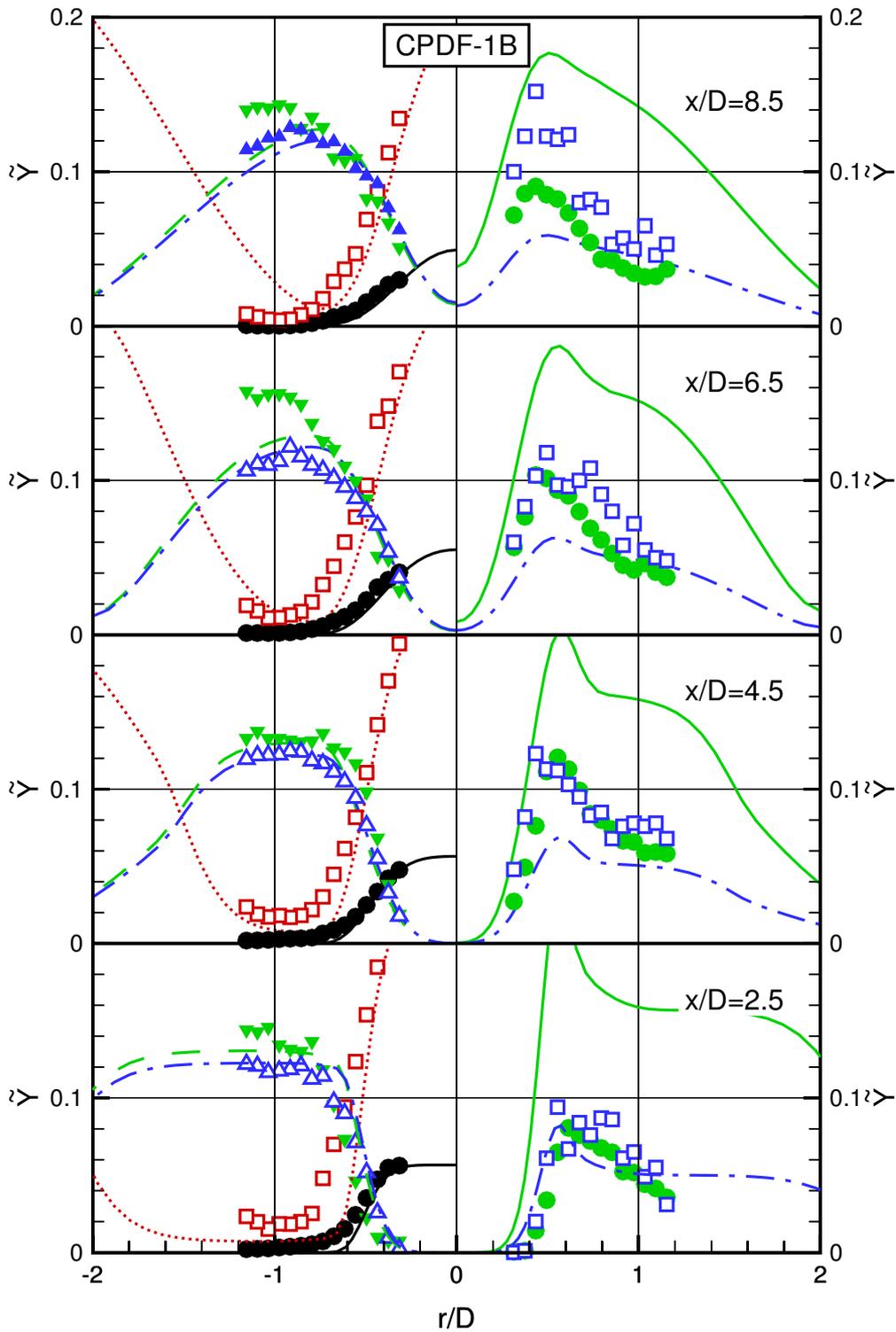


Abbildung 8.40: Testflamme F3H. Vergleich gemessener (Symbole) und mit Hilfe des CPDF-1B Modells (Linien) berechneter Konzentrationsverläufe. Links: Methan: gefüllter Kreis bzw. ausgezogene Linie, O_2 : Quadrat bzw. gepunktete Linie, CO_2 : gefüllte Triangel bzw. gestrichelte Linie, H_2O : Delta bzw. strichpunktete Linie; Rechts: CO: gefüllter Kreis bzw. ausgezogene Linie, H_2 : Quadrat bzw. strichpunktete Linie.

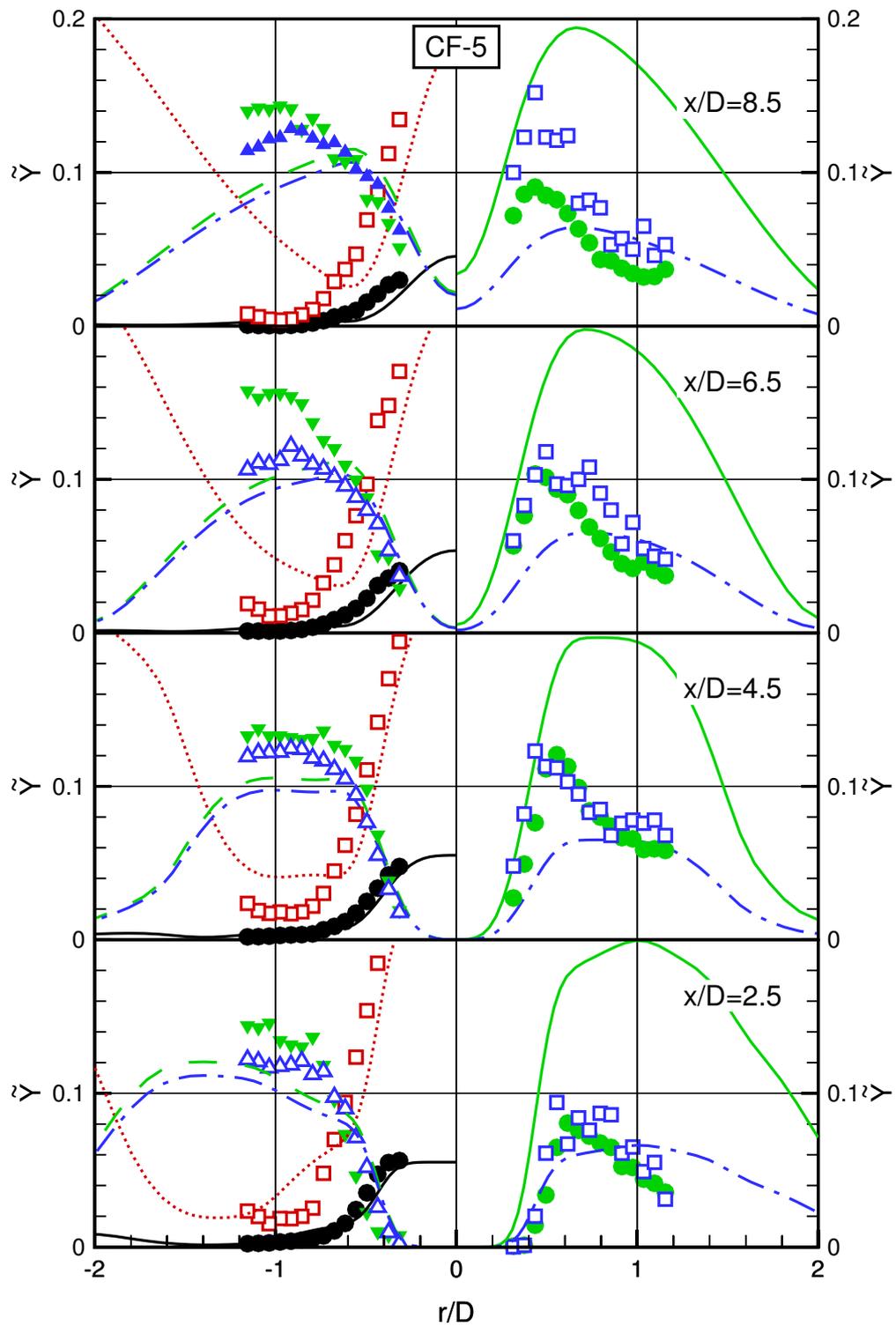


Abbildung 8.41: Testflamme F3. Vergleich gemessener (Symbole) und mit Hilfe des CF-5 Modells (Linien) berechneter Konzentrationsverläufe. Links: Methan: gefüllter Kreis bzw. ausgezogene Linie, O_2 : Quadrat bzw. gepunktete Linie, CO_2 : gefüllte Triangel bzw. gestrichelte Linie, H_2O : Delta bzw. strichpunktierte Linie; Rechts: CO: gefüllter Kreis bzw. ausgezogene Linie, H_2 : Quadrat bzw. strichpunktierte Linie.

8.5 Schlußfolgerungen

Die in diesem Kapitel vorgestellten Testflammen erlauben aufgrund ihrer unterschiedlichen Betriebsbedingungen eine belastbare Evaluierung der untersuchten Flammenfrontdichte- und Wahrscheinlichkeitsdichtemodelle. Globale charakteristische Größen dieser Flammen, sind ihr Kegelwinkel, d. h. die turbulente Flammengeschwindigkeit, und ihre Breite, die ein Maß für die Verteilung des Gradienten der Reaktionsfortschrittsvariablen, d. h. der skalaren Dissipationsrate ist. Die verwendeten Ansätze zur Schließung des turbulenten Reaktionsquellterms basieren auf zeitlichen mittleren Größen der Strömung und der Chemie. Dies sind einerseits die Geschwindigkeit \tilde{u} , die turbulente kinetische Energie \tilde{k} und die Dissipationsrate der turbulenten kinetischen Energie $\tilde{\varepsilon}$, und andererseits der Reaktionsfortschritt \tilde{c} , seine Schwankungsintensität, dargestellt durch die Varianz \tilde{c}''^2 und die skalare Dissipationsrate $\tilde{\chi}_c$. Die „kohärenten Flamme“-Modelle basieren auf der Annahme schneller Chemie und verwenden daher neben dem zeitlich mittleren Reaktionsfortschritt die Dissipationsrate in Form der Flammenfrontdichte, um die unbekanntenen Terme zu schließen. Die Wahrscheinlichkeitsdichtemodelle hingegen gehen von einem linearen Zusammenhang von turbulentem Zeitmaß und skalarer Dissipationsrate aus. Das Schließungsproblem wird hingegen über einen Wahrscheinlichkeitsansatz gelöst, wobei die Verteilungsfunktion durch den Reaktionsfortschritt und seine Varianz parametrisiert wird.

Die wesentlichen Eigenschaften der untersuchten Flammenfrontdichte- und c -PDF Modelle sind in den folgenden Abschnitten zusammengefaßt.

8.5.1 Bewertung der Flammenfrontdichtemodelle

Um die experimentellen Ergebnisse mit dem CF-1 Modells (6.72) wiedergeben zu können, ist es erforderlich, die Werte des Parameters C_{K_t} über einen weiten Bereich zu variieren. Die Ergebnisse dieser Arbeit zeigen, daß die Werte der Modellkonstanten mit steigender turbulenter Reynoldszahl zunehmen. Die Testflamme F3 besitzt mit $C_{K_t} = 3$ bzw. $Re_t = 122$ die niedrigste, die Flamme R408 mit $C_{K_t} = 11$ bzw. $Re_t = 2172$ die höchste Modellkonstante bzw. turbulente Reynoldszahl. Dies bedeutet, daß die Flammenfrontdehnung nicht allein durch die Interaktion von Flammenfront mit den energietragenden Wirbeln, d. h. u_t/l_t , beschrieben werden kann, sondern weitere Informationen über die Turbulenzstruktur z. B. in Form der turbulenten Reynoldszahl benötigt.

Das CF-2 Modell (6.73) erfüllt diese Forderung indem es die turbulente Flammenfrontdehnung mit Hilfe der dissipativen Skalen modelliert, welche implizit die turbulente Reynoldszahl über die Beziehung $u_\eta/l_\eta = \sqrt{Re_t} u_t/l_t$ enthalten. Während dieser Modellansatz für die hochturbulenten Matrixflammen sehr erfolgreich ist, versagt er im Fall der Testflamme G26. Die Annahme, daß sich die Flammenfront wie eine materielle Fläche verhält, resultiert in einer zu hohen Flammenfrontoberflächendichte, was sich in einer zu kurzen und zu breiten turbulenten Flammenkontur äußert. Ein ähnliches Verhalten zeigt das CPB Modell (6.75), das die turbulente Flammenfrontdehnung ebenfalls mit Hilfe des Kolmogorovzeitmaßes bestimmt, und somit nahezu gleiche turbulente Flammengeschwindigkeiten liefert. Der Krümmungsterm wird jedoch um einen exponentiellen Ausdruck erweitert, der sicherstellt, daß sich die Reaktionsfortschrittsvariable schneller als exponentiell dem Wert eins nähert. Diese Formulierung führt aber dazu, daß sich der zeitlich mittlere Reaktionsfortschritt dem Wert eins schneller annähert, als dies im Experiment beobachtet wird. Damit wird eine zu dünne turbulente Flammenfront vorhergesagt.

Die Untersuchungen haben gezeigt, daß die einfachen „kohärenten Flamme“-Modelle

wie das CF-1, CF-2 und CPB Modell nur in begrenztem Umfang die Struktur und Eigenschaften turbulenter Vormischflammen vorhersagen können. Grund sind die Ansätze zur Formulierung der turbulenten Flammenfrontdehnung über das integrale bzw. dissipative Zeitmaß, die Grenzfälle der Interaktion von Turbulenz und Flammenfront darstellen. Daher sind auch die Modellansätze nur für begrenzte Bereiche des Verbrennungsdiagramms gültig.

Das CF-1 Modell besagt, daß die normierte turbulente Flammengeschwindigkeit S_t/S_l^0 nur vom Geschwindigkeitsmaßstab u_t/S_l^0 abhängt. Wie in Abschnitt 3.4 gezeigt wurde, gilt dies aber nur für kleine Geschwindigkeitsverhältnisse u_t/S_l^0 und große turbulente Reynoldszahlen. Diese Voraussetzung wird aber von keiner der untersuchten Testflammen erfüllt, da sie alle Geschwindigkeitsverhältnisse größer als eins besitzen. Das Modell ist daher auf technisch relevante Flammen ohne Parameteranpassung nicht anwendbar. Flammen, die durch das CF-1 Modell beschrieben werden können, finden sich z. B. bei vorgemischten Explosionen, die sich durch große turbulente Längenmaße auszeichnen (siehe Abbildung 3.12).

Das CF-2 Modell hingegen beschreibt die turbulente Flammengeschwindigkeit als Funktion sowohl des Geschwindigkeits- als auch des Längenverhältnisses. Da im Bereich hochturbulenter Vormischverbrennung alle komplexeren Modelle diese Abhängigkeit voraussagen, ist es sehr erfolgreich in der Beschreibung der untersuchten Matrixflammen. Der Bereich der mäßig intensiven Turbulenz, in dem vorwiegend die motorische Verbrennung stattfindet, repräsentiert durch den Testfall G26, kann durch das Modell jedoch nicht erfaßt werden.

Abschließend sei bemerkt, daß alle drei Modellvarianten nicht nur eine Transportgleichung für die Flammenfrontdichte, sondern auch für die skalare Dissipationsrate lösen. Da die Flammengeschwindigkeit S_l^0 als konstant angenommen wird, und die Dichte des Frischgemischs ρ_u in vorgemischten Systemen eine Konstante ist, lassen sich die Transportgleichungen der Flammenfrontdichte entsprechend erweitern, so daß sie eine Bilanzgleichung für $\bar{\chi}_c \approx \rho_u S_l^0 \bar{\Sigma}$ darstellen.

Das MB Modell basiert im Gegensatz zu den „kohärente Flamme“-Modelle auf einer Bilanzgleichung für die skalare Dissipationsrate und überführt diese mit $\bar{\Sigma} \propto \bar{\chi}_c / (\rho_u S_l^0)$ in eine Transportgleichung für die Flammenfrontdichte. Es kann zwar, mit Ausnahme der Flamme F3, die Flammencharakteristika hinsichtlich turbulenter Flammengeschwindigkeit und Flammenfrontdicke gut wiederzugeben, weist aber deutliche Defizite hinsichtlich der Flammenstabilisierung in freien Scherströmungen auf. Daher kann es die Testflammen G26 sowie die Matrixflammen R403, R309 und R408 gut wiedergeben, versagt aber bei der Beschreibung des Testfalls F3. Hier stabilisiert die Flamme im Bereich hoher Scherraten der zeitlich mittleren Strömung, was jedoch durch das Modell überschätzt wird. Dies wird auch beim Betrachten der Ergebnisse für die anderen Testfälle deutlich, wo das Modell im Bereich des Flammenfußes durchweg einen zu hohen Umsatz vorhersagt.

Die Defizite der einfachen „kohärenten Flamme“ und des MB Modells können durch das CF-3 bzw. das ITNFS-Modell behoben werden. Es berücksichtigt die Interaktion aller Wirbelklassen mit der Flammenfront und kann auch Flammenverlöschungen vorhersagen. Das Modell liefert daher durchweg eine sehr gute Übereinstimmung zwischen Experiment und Simulation. Dies macht deutlich, daß die Formulierung der turbulenten Flammenfrontdehnung für den Erfolg der „kohärente Flamme“-Modelle von zentraler Bedeutung ist. Die Flammendehnung aufgrund der zeitlich mittleren Strömung ist dagegen von untergeordneter Bedeutung. Die vorliegenden Ergebnisse zeigen, daß dies, entgegen den in der Literatur geäußerten Vermutungen, auch in Bereichen großer zeitlich mittlerer Scherraten

gilt.

DUCLOS ET AL. [73] ergänzen in ihrer Arbeit den Destruktionsterm um das Geschwindigkeitsverhältnis u_t/S_l^0 . Die Autoren geben für diese Formulierung keine Begründung, weshalb Simulationen mit diesem Ansatz durchgeführt wurden. Die Ergebnisse zeigen (nicht dargestellt), daß dieser Ansatz gute Ergebnisse liefert, wenn die favregemittelten Fortschrittsvariable \tilde{c} im Nenner des Destruktionsterms verwendet wird, d. h. $\langle S_F \nabla \cdot \mathbf{n} \rangle_S \propto S_l^0 (1 + u_t/S_l^0) / (1 - \tilde{c}) \bar{\Sigma}$. Dieser Ansatz liefert jedoch keine konsistenten Ergebnisse. Dies gilt insbesondere insbesondere für Flammen mit erhöhter Vorwärmtemperatur. Die Erweiterung des Destruktionsterms um u_t/S_l^0 ist jedoch nicht erforderlich, falls die reynoldsgemittelte Fortschrittsvariable \bar{c} und damit das in dieser Arbeit vorgestellte Modell verwendet wird. Der Einfluß der Vorwärmtemperatur spiegelt sich dann in der Dichte des Frischgemisch ρ_u wieder.

Die sehr guten Ergebnisse des CF-3 Modells zeigen, daß die oberflächengemittelte Flammenfrontgeschwindigkeit $\langle S_F \rangle$ durch die entsprechende laminare, planare Flammengeschwindigkeit S_l^0 approximiert werden kann. Die Effekte der Flammenfrontdehnung und -krümmung heben sich im zeitlichen Mittel offensichtlich gegeneinander auf. Somit bestätigen die Ergebnisse dieser Arbeit den Vorschlag von POINSOT ET AL. [176] die Flammenfrontgeschwindigkeit über die laminare Flammengeschwindigkeit zu modellieren. In diesem Zusammenhang ist es erwähnenswert, daß die untersuchten Flammen aufgrund ihrer mageren Stöchiometrie Marksteinzahlen nahe null besitzen (siehe Abb. 3.9). Dehnungseffekte sind unter diesen Voraussetzungen, wie in Abschnitt 3.1.6 erläutert, von untergeordneter Bedeutung. Weitere Untersuchungen zur Modellierung der Flammenfrontgeschwindigkeit sollten daher Flammen mit stark positiven Marksteinzahlen, wie z. B. Propan, mit einschließen.

Um den Einfluß der Streckungsrate zu erfassen, wurde im CF-5 Modell die oberflächengemittelte Flammenfrontgeschwindigkeit $\langle S_F \rangle$ mit Hilfe einer angenommenen Verteilungsfunktion der lokalen Streckungsrate $K_A \propto K_t$ modelliert. Hierzu wurden laminare gedehnte Flammen als Funktion von K_A berechnet. Mit diesem Modellansatz werden gleichzeitig Nichtgleichgewichtseffekte und somit Einflüsse finiter Chemie berücksichtigt. Die Ergebnisse des CF-5 Modells zeigen jedoch gegenüber dem CF-4 Modell keine nennenswerten Verbesserungen. Das größte Problem dieses Schließungsansatzes besteht in der Verknüpfung der lokalen turbulenten Flammenfrontdehnung K_t mit der Dehnungsrate der laminaren Modellflamme K_A , da ein exakt ableitbarer Zusammenhang bisher noch nicht gefunden werden konnte [175]. Außerdem werden durch den Wahrscheinlichkeitsdichteanatz zwei neue Modellparameter eingeführt, die in einem gewissen Bereich variieren können. Eine erfolgreiche Anwendung des Modells scheint auf Basis der vorliegenden Ergebnisse nur durch ein neues Modell, welches K_A und K_t verknüpft, möglich. Basis eines solchen Ansatzes können nur Ergebnisse direkter numerischer Simulationen sein, ähnlich dem ITNFS-Modell.

Die in Abschnitt 5.4 und 6.5 abgeleiteten einfachen Mischungsmodelle können die nicht-isenthalpen Einflüsse einmischender Umgebungsluft mit ausreichender Genauigkeit beschreiben. Die Ergebnisse dieser Untersuchungen haben gezeigt, daß die Verbrennung unter Bedingungen des Frischgases abläuft und Umgebungsmedium vorwiegend mit bereits ausgebrannten heißen Rauchgasen mischt. Mischungseffekte auf die lokalen Eigenschaften der Flamme können daher vernachlässigt werden.

Mit dem in Abschnitt 6.3 erläuterten modifizierten FIST-Ansatz von POINSOT ET AL. [174] wurde ein Wandmodell entwickelt, welches die wesentlichen Wand-Flamme Interaktionen erfaßt. Zusammen mit dem k - ω -Turbulenzmodell lassen sich damit Flam-

men, die in der Nähe von Wänden stabilisieren oder brennen, erfolgreich beschreiben. Nicht-adiabate Effekte, wie z. B. Wärmeleitung, wurden im Rahmen dieser Arbeit nicht behandelt, können aber in die vorhandenen Modellansätze über eine vorwärmterperaturabhängige Flammengeschwindigkeit leicht implementiert werden.

8.5.2 Bewertung der Wahrscheinlichkeitsdichtemodelle

Die angenommenen Verteilungsdichte für den Reaktionsfortschritt $\tilde{P}_c(c)$ des c -PDF Modells wurde im Rahmen dieser Arbeit durch die abgeschnittene Gaußfunktion und die β -Funktion angenähert. Die Form der beiden Funktionale wird jeweils durch zwei Parameter beschrieben, die mit dem zeitlich mittleren Reaktionsfortschritt und seiner Varianz verknüpft sind und für die zwei zusätzliche Transportgleichungen gelöst werden. Die skalare Dissipationsrate erscheint bei diesem Modellansatz als Quellterm für die Reaktionsfortschrittsvarianz und wird im allgemeinen proportional zum turbulenten Zeitmaß modelliert. In der Literatur wird hierzu das integrale Zeitmaß $t_t \propto \tilde{k}/\tilde{\varepsilon}$ herangezogen. Die Ergebnisse der Flammenfrontdichtemodelle legen aber die Verwendung des Kolmogorovzeitmaßes $t_\eta = 1/\sqrt{\tilde{\varepsilon}/\nu}$ nahe. Daher wurden in dieser Arbeit beide Schließungsannahmen untersucht.

Die besten Ergebnisse liefert das CPDF-1B Modell, das auf dem integralen Zeitmaß und der β -Funktion basiert. Nur der hochturbulente Testfall R408 erfordert die Beschreibung der skalaren Dissipationsrate über das dissipative Zeitmaß, d. h. das CPDF-2B Modell. Die Proportionalitätskonstante C_{K_t} muß aber wie im Fall des CF-1 Modells an den jeweiligen Testfall angepaßt werden. Gute Ergebnisse wurden mit Werten für C_{K_t} erzielt, die dem jeweiligen CF-1 Model entnommen wurden. Eine Modellverbesserung erfordert daher eine allgemeingültigere Beschreibung der skalaren Dissipationsrate. Es wird aber auch dann nur auf hochturbulente Flammen anwendbar sein, deren Damköhlerzahl ausreichend niedrig ist, um den PDF-Schließungsansatz zu ermöglichen.

Der Vergleich der Ergebnisse von Flammenfrontdichte- und Wahrscheinlichkeitsdichtemodellen zeigt, daß letztere keine wesentlichen Vorteile hinsichtlich der Beschreibung der globalen Wärmefreisetzung besitzen. Ausnahme ist die Möglichkeit, Aussagen über die Konzentrationen von CO und eventuell NO_x zu treffen. Für technisch relevante Simulationsprobleme ist dies aber von untergeordneter Bedeutung, da die meistens vorliegenden hohen Luftzahlen einen vollständigen Ausbrand sicherstellen. Im Fokus steht vielmehr die erforderliche Rechenzeit zur verlässlichen Wiedergabe des Temperaturfeldes. Hier besitzen aber die Flammenfrontdichtemodelle aber einen Vorteil, da sie im allgemeinen schneller konvergieren. Aus diesem Grund sind Flammenfrontdichtemodelle den angenommenen Wahrscheinlichkeitsdichtemodellen vorzuziehen.

8.6 Ausblick auf weiterführende Arbeiten

Das in der vorliegenden Arbeit entwickelte CF-4 Modell kann technische Verbrennungssysteme, die sich im allgemeinen durch hohe turbulente Reynoldszahlen und große Geschwindigkeitsverhältnisse auszeichnen, zuverlässig vorausberechnen. Für schwach turbulente Flammen ist jedoch mit dem Auftreten von Gegengradientendiffusion zu rechnen (siehe Kap. 3.5). Aus diesem Grund sollte das Modell um einen entsprechenden Modellansatz erweitert werden. Ansatzpunkt könnte das in Abschnitt 3.5 erwähnte Modell von POINSOT ET AL. [225] sein. Erforderlich sind in diesem Zusammenhang aber simultane Messungen von turbulenten und skalaren Längen- und Zeitmaßen. Dies würde neben dem turbulenten Transport $\overline{\rho \mathbf{u}'' c''}$ auch die Bestimmung der skalaren Dissipationsrate und damit eine verbesserte Modellierung ermöglichen. Erste zeitaufgelöste mehrdimensionale Messungen von OH-Konzentrationen wurden kürzlich von CHEN und BILGER [60] an turbulenten Bunsenflammen durchgeführt und ermöglichen die Analyse des Reaktionsfortschritts.

Im Kontext der Flammenfrontdichtemodelle wurde der Einfluß detaillierter Chemie nur über Gleichgewichtszustände, die als eine Funktion der lokalen Streckungsrate K_A formuliert wurden, berücksichtigt. Aussagen über die innere Struktur der Flamelets und somit über Konzentrationen von Zwischenprodukten können mit dem in Kapitel 6.4 beschriebenen Ansatz jedoch nicht getroffen werden. Hierzu muß die Verteilungsfunktion des Reaktionsfortschritts in das Modell integriert werden. Eine mögliche Vorgehensweise soll im folgenden skizziert werden.

Die ersten theoretischen Überlegungen zur Beschreibung der Flammenfrontstruktur als Funktion des Reaktionsfortschritts wurden von BRAY ET AL. [31] im Rahmen ihres generalisierten PDF-Modells formuliert. Ausgangspunkt ist die allgemeine Form einer Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (3.71). Die Verteilung des reagierenden Zustandes ist im Fall schneller Chemie durch

$$\mathcal{F}(c, K_A) = l_F^c \frac{1}{\nabla_n c(K_A)} \quad (8.7)$$

gegeben. Der Gradient $\nabla_n c$ ist hierbei für eine laminares Flamelet mit der aufgeprägten Flammenfrontdehnung K_A normal zur Flammenfront zu berechnen. Die Dicke der Flamme in Gleichung (8.7) ist durch $l_F^c = n(c = 1 - c_\delta) - n(c = c_\delta)$ definiert, wobei c_δ eine kleine Zahl ist. Die Wahrscheinlichkeit einen reagierenden Zustand vorzufinden, beschreibt das BML-Modell [31] über

$$\mathcal{C}(\mathbf{x}) = \frac{\overline{\rho} \tilde{\chi}_c}{(2c_m - 1) \int_0^1 \dot{w}_c \mathcal{F}(c) dc}, \quad (8.8)$$

wobei der Parameter $c_m = \int_0^1 c \dot{w}_c \mathcal{F}(c) dc / \int_0^1 \dot{w}_c \mathcal{F}(c) dc$ Informationen über die chemische Kinetik enthält. Die skalare Dissipationsrate $\tilde{\chi}_c$ in Gleichung (8.8) kann durch die bekannte Flammenfrontdichte substituiert werden

$$\mathcal{C}(\mathbf{x}) = \frac{\rho_u S_l^0 \overline{\Sigma}}{\int_0^1 \left[\mathcal{P}(K) \int_0^1 \dot{w}_c(c, K_A) \mathcal{F}(c, K_A) dc \right] dK_A}. \quad (8.9)$$

Gleichung (8.9) erfaßt mit dieser Formulierung nicht nur den Einfluß der Flammenfrontstruktur über die Verteilungsfunktion $\mathcal{F}(c)$ sondern über $\mathcal{P}(K_A)$ auch den Einfluß der lokalen Streckungsrate auf die Flammenfrontstruktur.

Da die Summe der Wahrscheinlichkeiten \mathcal{A} , \mathcal{B} und \mathcal{C} definitionsgemäß eins ergeben muß, sind die Wahrscheinlichkeiten \mathcal{A} und \mathcal{B} über $\mathcal{A} = (1 - \bar{c}) / (1 + \mathcal{C})$ und $\mathcal{B} = \bar{c} / (1 + \mathcal{C})$ zu normieren.

Die Konzentration einer Komponente k in Abhängigkeit der Streckungsrate kann dann über

$$\begin{aligned} \bar{Y}_k = \mathcal{A} Y_k(c = 0) + \mathcal{B} \int_0^\infty \mathcal{P} Y_k(c = 1, K_A) dK_A \\ + \mathcal{C} \int_0^\infty \left[\mathcal{P}(K_A) \int_0^1 Y_k(c, K) \mathcal{F}(c, K) dc \right] dK_A \quad (8.10) \end{aligned}$$

bestimmt werden.

Die Gleichungen (8.7)–(8.10) konstituieren ein Modell, mit dem sich nicht nur Nicht-Gleichgewichtseffekte aufgrund lokaler Flammenstreckung, sondern auch die vollständige Flammenstruktur beschreiben läßt. Dies eröffnet auch die Möglichkeit in Zukunft detaillierte Chemie und damit Konzentrationen von Zwischenprodukten sowie Schadstoffemissionen zu berücksichtigen. Hierzu muß jedoch die Verteilungsfunktion der Flammenstreckung K_A bekannt sein. Die in den vorherigen Abschnitten diskutierten Ergebnisse zeigen aber, daß diese Voraussetzung noch nicht erfüllt ist, weshalb das obige Modell nicht weiter untersucht wurde.

Die Allgemeingültigkeit des c -PDF Modells im Bereich hochturbulenter Flammen läßt sich durch eine verbesserte Modellierung der skalaren Dissipationsrate erreichen. Der Einsatz des ITNFS-Modells wäre zwar eine einfache und effektive Möglichkeit, widerspricht aber dem verwendeten Wahrscheinlichkeitsdichteanatz. Dieser setzt kleine Damköhlerzahlen voraus, und schließt daher Flamelet-Annahmen, auf denen das ITNFS-Modell beruht, aus. Eine andere Möglichkeit besteht in der Lösung einer zusätzlichen Transportgleichung für die skalare Dissipationsrate. Hier könnte auf das MB Modell in seiner ursprünglichen Formulierung zurückgegriffen werden [146]. Die guten Ergebnisse hinsichtlich der Verteilung der Flammenfrontdichte lassen auch eine gute Wiedergabe der skalaren Dissipationsrate erwarten.

Kapitel 9

Zusammenfassung

Für die Entwicklung innovativer Verbrennungskonzepte ist das Verständnis der Interaktion von der zumeist turbulenten Strömung und der chemischen Kinetik von entscheidender Bedeutung. Mit ihrer Hilfe können wichtige globale Größen wie Flammenstabilität, Zündverhalten, Schadstoffemission und thermoakustische Phänomene bestimmt werden. Die Leistung moderner Rechenanlagen einerseits und robuste, effiziente numerische Methoden andererseits ermöglichen es heute, reagierende Strömungen zu simulieren und somit den Entwicklungsaufwand deutlich zu reduzieren. Voraussetzung sind allerdings Verbrennungsmodelle, die komplexe technische Problemstellungen und die notwendigen Parameterstudien mit der erforderlichen Genauigkeit und gleichzeitig minimalen Aufwand bewältigen können. Zielsetzung dieser Arbeit ist daher die Entwicklung und Validierung effizienter Modelle, die hochturbulente Vormischverbrennung nicht nur nach- sondern auch vorausberechnen können.

Die in Kapitel 3 vorgestellten und diskutierten Ansätze zur Beschreibung turbulenter Vormischverbrennung lassen sich in zwei große Klassen unterteilen. Zum einen die Wahrscheinlichkeitsdichtemodelle, welche die chemische Kinetik und turbulente Strömung mit Hilfe von Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen geschlossen beschreiben. Zum anderen sogenannte Flameletmodelle, welche diese beiden Prozesse voneinander entkoppeln und die Eigenschaften der turbulenten Flamme über die für die Verbrennung zur Verfügung stehende Flammenfrontoberfläche modellieren. Im Rahmen dieser Arbeit wurden beide Modellansätze herangezogen und anhand von Meßergebnissen validiert sowie miteinander verglichen.

Das eingesetzte Wahrscheinlichkeitsdichtemodell beruht auf angenommenen Verteilungen des Reaktionsfortschritts und kann daher streng genommen nur globale Einschrittkinetiken berücksichtigen. Um die Struktur der Reaktionszone besser erfassen und Aussagen über die Konzentrationen von Zwischenprodukten der Verbrennung treffen zu können, wurde das Konzept der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik entwickelt. Es unterteilt den Reaktionsverlauf in eine Brennstoffabbau- und eine Ausbrandzone. Der Brennstoffabbau wird durch eine semi-empirische Bruttoreaktion modelliert, während der Ausbrand durch Elementarreaktionen und unter Einsatz von Quasistationaritäts- und partiellen Gleichgewichtsannahmen beschrieben wird. Die Ordnung und Aktivierungstemperatur des Brennstoffabbaus können in guter Näherung der Literatur entnommen werden, so daß die Kinetik nur zwei Parameter in Form eines stöchiometrischen Koeffizienten und des Frequenzfaktor besitzt. Diese können leicht an gemessene oder berechnete Flammgeschwindigkeiten angepaßt werden.

Die Kinetik wurde erfolgreich anhand der Verbrennung von Methan in einem homo-

genen System sowie einer laminaren Vormischflamme validiert. Die Ergebnisse zeigen, daß die Flammengeschwindigkeit über einen weiten Stöchiometrie- ($0.7 < \lambda < 2.5$) und Vorwärmtemperaturbereich (298K–673K) mit einem einzigen Parametersatz erfolgreich beschrieben werden kann. Allerdings brechen die Annahmen, die zur Berechnung des Ausbrands getroffen werden unter fetten Stöchiometriebedingungen zusammen, weshalb die 2-Bereich-1-Schritt Kinetik nur auf nahestöchiometrische und magere Verbrennung angewendet werden sollte. Da die 2-Bereich-1-Schritt Kinetik den Brennstoffabbau über eine Bruttoreaktion beschreibt, kann sie für alle Kohlenwasserstoffe eingesetzt werden. Dies gilt insbesondere für technische Brennstoffe, für die noch keine zuverlässigen detaillierten Reaktionsmechanismen existieren, deren Flammengeschwindigkeit aber mit relativ geringem Aufwand bestimmt werden kann. Das Potential der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik zeigen die sehr guten Ergebnisse für die Brennstoffe Propan und Kerosin.

Die 2-Bereich-1-Schritt Kinetik bildet zusammen mit der angenommenen Verteilungsfunktion des Reaktionsfortschritts ein neues Wahrscheinlichkeitsdichtemodell. Die Verteilungsfunktion wird mit Hilfe von Mittelwert und Varianz des Reaktionsfortschritts beschrieben, für die Transportgleichungen gelöst werden. Aufgrund der 2-Bereich-1-Schritt-Kinetik ist das Modell, im Gegensatz zu den bisher gebräuchlichen Verbrennungsmodellen auf Basis angenommener Verteilungen, in der Lage, Zwischenprodukte wie CO und H₂ zu beschreiben. Der Erfolg des Modells hängt maßgeblich von der gewählten Verteilungsfunktion des Reaktionsfortschritts ab. In der Literatur werden sowohl die abgeschnittene Gaußfunktion als auch die β -Funktion diskutiert, ohne daß bisher ein direkter Vergleich durchgeführt wurde. Aus diesem Grund wurden beide Möglichkeiten mit dem Ziel angewendet, die Funktionen hinsichtlich ihrer Eignung für die Verbrennungsmodellierung zu bewerten.

Die in der vorliegenden Arbeit untersuchten Flammenfrontdichtemodelle basieren auf dem Konzept der „kohärenten Flammenfronten“. Sie gehen davon aus, daß die mittlere Reaktionsrate durch die Flammenfrontgeschwindigkeit und die lokal zur Verfügung stehende Flammenfrontdichte bestimmt ist. Die exakte Form der Transportgleichung für die Flammenfrontdichte ist nicht geschlossen und erfordern zusätzliche Modellannahmen. Die bekanntesten Schließungsansätze wurden diskutiert und ein neuer Ansatz zur Modellierung des Destruktionsterms vorgestellt. Außerdem wird in der vorliegenden Arbeit der Versuch unternommen, den Einfluß detaillierter Chemie auf die instantanen Flammenstruktur mit Hilfe gestreckter Flamelets zu berücksichtigen. Diese werden getrennt von der eigentlichen Strömungsberechnung unter Einbeziehung detaillierter Chemie als Funktion der Streckungsrate berechnet. Die Kopplung mit dem Strömungsfeld erfolgt dann über Ensemblemittelung der Zustandsgrößen mit Hilfe einer angenommenen Wahrscheinlichkeitsdichte für die lokale Streckungsrate. Diese wird nach der dritten Hypothese von Kolmogorov durch eine logarithmische Normalverteilung approximiert.

Die angewendeten Verbrennungsmodelle besitzen Schließungsansätze die eine rechenzeitintensive Mittlungsvorschrift enthalten. Eine effiziente Berechnung dieser Terme, die Voraussetzung für die Anwendung der Modelle auf praktische Systeme ist, wurde durch ein eigens entwickeltes Prä- und Postprozessormodul sichergestellt. Es löst die entsprechenden idealisierten chemischen Systeme und führt die erforderlichen Integrationen vor der eigentlichen Verbrennungssimulation durch. Die Ergebnisse werden in einem adaptiven Tabellensystem abgelegt, womit eine optimale Reduktion hinsichtlich Zugriffszeit und Speicherbedarf erreicht wird.

Bei der Programmierung der Verbrennungsmodelle sowie des Prä- und Postprozessors wurde besonderer Wert auf eine übersichtliche, modulare Struktur gelegt. Damit ist zum

einen das einfache Einbinden neuer Modelle gewährleistet, zum anderen kann das komplette Modul problemlos in andere Strömungslöser integriert werden. Dies ist besonders für neue Anwender aus dem industriellen Umfeld attraktiv, da die meisten veröffentlichten Verbrennungsmodelle an einen speziellen Strömungslöser gebunden sind. Im Rahmen dieser Arbeit wurden die in Kapitel 5 und 6 vorgestellten Verbrennungsmodelle sowie die Teilmodelle zur Berücksichtigung von Mischungs-, Stabilisierungs- und Wandeffekten in den kommerziell verfügbaren Strömungslöser TASCflow3d implementiert. Zur Optimierung des Konvergenzverhaltens wurden geeignete Linearisierungsvorschriften für die unterschiedlichen Quellterme entwickelt.

Die umfassende Bewertung der Modelle wurde anhand von fünf detailliert vermessenen Vormischflammen durchgeführt, die aufgrund der weiten Parametervariationen belastbare Aussagen hinsichtlich der Möglichkeiten der untersuchten Modelle erlaubten. Die Testflammen sowie eine zusammenfassende Bewertung der untersuchten Modellansätze sind in Tabelle 9.1 zusammengestellt.

Die Ergebnisse mit den vier unterschiedlichen Flammenfrontdichtemodellen haben gezeigt, daß der Beschreibung der turbulenten Flammenfrontdehnung eine zentrale Rolle zukommt. Die Modellierung über die integralen Turbulenzskalen erforderte eine Parameteranpassung für die meisten Testflammen und muß daher als unvollständig angesehen werden. Die beobachtete Abhängigkeit von der turbulenten Reynoldszahl wird durch Einführen der dissipativen Turbulenzskalen erfüllt. Diese Modelle liefern daher für alle Flammen, die ein Geschwindigkeitsverhältnis $u_t/S_l^0 \gg 1$ besitzen, gute Ergebnisse, ohne daß eine Parameteranpassung erforderlich gewesen wäre. Das Modell versagt aber im Bereich kleiner Geschwindigkeitsverhältnisse. Eine umfassendere Beschreibung der Flamme-Turbulenz Interaktionen wird durch das ITNFS Modell gewährleistet. Die Simulationen mit diesem Modell zeigten durchweg sehr gute Ergebnisse. Das neu entwickelte Modell berücksichtigt neben Effekten der Flammenfrontdehnung und -krümmung zusätzlich die Flammenpropagation. Diese Studie hat aber gezeigt, daß ihr Einfluß von untergeordneter Bedeutung ist. Die vorgeschlagene Formulierung des Destruktionsterms wirkt sich zwar nicht auf das Ergebnis aus, erklärt aber die durch direkt numerische Simulationen gefundene Proportionalitätskonstante im Term der Flammenfrontdehnung.

Die Einflüsse der Flammenfrontdehnung auf die instantane Flammenstruktur bzw. die Flammenfrontgeschwindigkeit waren von untergeordneter Bedeutung. Da die untersuchten Flammen Marksteinzahlen nahe eins aufweisen, konnte die mittlere Flammenfrontgeschwindigkeit über die laminare, planare Flammengeschwindigkeit approximiert werden.

Diese Studie konnte ferner zeigen, daß ein einfaches Mischungsmodell ausreicht, um die nicht-isenthalpen Effekte freibrennender Vormischflammen zu erfassen. Ein Stöchiometrieinfluß auf die Flammengeschwindigkeit muß bei dieser Konfiguration nicht berücksichtigt werden.

Das in der Praxis häufig auftretende Problem von in Wandnähe stabilisierender Flammen wurde mit Hilfe eines neuen Wandmodells gelöst. Es beruht Erkenntnissen direkt numerischer Simulationen und kann die wesentlichen Wand-Flamme Interaktionen erfassen. Zusammen mit dem $k-\omega$ Modell konnten damit Flammen, die in der Nähe von Wänden stabilisieren, erfolgreich beschrieben werden.

Von den untersuchten Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen hat die β -Funktion die besten Ergebnisse geliefert. Die Unterschiede zur abgeschnittenen Gaußfunktion nehmen dabei mit steigender Damköhlerzahl zu. Die stärkere Wichtung der reagierenden Anteile der PDF durch die Gaußfunktion muß somit als negativ angesehen werden. Die Untersuchung der Wahrscheinlichkeitsdichtemodelle hat außerdem gezeigt, daß das Ergebnis der

Tabelle 9.1: Zusammenstellung und Bewertung der untersuchten Modellansätze. Gute Wiedergabe des Experiments: (+), Schlechte Wiedergabe des Experiments: (-), Bedingt gute Wiedergabe (0).

	G26	R403	R309	R408	F3	
Re_t	94–900	28–3000	4–2300	70–3100	45–500	Modellierungsansätze für die Flammenfrontdehnung K_t und die skalare Dissipationsrate $\tilde{\chi}_c$
Ka_t	0.05–1.26	0.02–16.3	0.001–10	0.022–6.7	0.017–0.6	
λ	1.25	1.75	2.2	1.45	1.0	
$T_u / ^\circ\text{C}$	25	400	400	25	25	
Flammenfrontdichtemodelle						
CF-1	+	+	+	-	+	$K_t \propto \tilde{\varepsilon}/k$
CF-2	-	+	+	+	+	$K_t \propto \sqrt{\tilde{\varepsilon}/\nu}$
CPB	-	+	-	-	+	$K_t \propto \sqrt{\tilde{\varepsilon}/\nu}$
MB	-	+	+	-	-	$K_t \propto \sqrt{\tilde{\varepsilon}/\nu}$
CF-3	+	+	+	+	+	$K_t \propto \Gamma_k(u_t/S_l^0, l_t/l_F^0) \tilde{\varepsilon}/k$
CF-4	+	+	+	+	+	$K_t \propto \Gamma_k(u_t/S_l^0, l_t/l_F^0) \tilde{\varepsilon}/k$
CF-5	+	+	+	+	+	$K_t \propto \Gamma_k(u_t/S_l^0, l_t/l_F^0) \tilde{\varepsilon}/k, S_F = f(K_t)$
Wahrscheinlichkeitsdichtemodelle						
CPDF-1G	-	+	-	-	+	abgeschn. Gaußfunktion, $\tilde{\chi}_c \propto \tilde{\varepsilon}/k$
CPDF-1B	+	+	-	-	+	β -Funktion, $\tilde{\chi}_c \propto \tilde{\varepsilon}/k$
CPDF-2G	-	-	0	0	-	abgeschn. Gaußfunktion, $\tilde{\chi}_c \propto \sqrt{\tilde{\varepsilon}/\nu}$
CPDF-2B	-	-	+	0	-	β -Funktion, $\tilde{\chi}_c \propto \sqrt{\tilde{\varepsilon}/\nu}$

Anmerkungen

- Das CF-1 sowie die CPDF-1 Modelle erfordern eine Anpassung der Modellkonstante für die Flammenfrontdehnung, um die Flammenkontur korrekt wiederzugeben.
- Die Funktion $\Gamma_k(u_t/S_l^0, l_t/l_F^0)$ steht für das ITNFS-Modell von POINSOT ET AL. und beschreibt die Interaktion der Flammenfront mit dem gesamten Turbulenzspektrum. Basis des Modells sind Ergebnisse direkter numerischer Simulationen.

Simulation stärker von der Beschreibung der skalaren Dissipationsrate abhängt als von der gewählten Form der Reaktionsfortschrittsverteilung. Ein Wahrscheinlichkeitsdichtemodell, das die skalare Dissipationsrate lediglich über die integralen bzw. dissipativen Turbulenzskalen modelliert, ist daher in seinem Gültigkeitsbereich eingeschränkt. Erst für sehr große turbulente Reynoldszahlen und kleine Damköhlerzahlen tritt dieser Effekt in den Hintergrund. Aus diesem Grund lieferten die komplexeren Flammenfrontdichtemodelle die besseren Ergebnisse und sollten daher den einfachen PDF-Modellen vorgezogen werden. Ausnahmen bilden Problemstellungen, bei denen die Konzentrationen von Zwischenprodukten der Verbrennung von besonderem Interesse sind. In solchen Fällen stellt das Wahrscheinlichkeitsdichtemodell zusammen mit der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik einen guten Kompromiß hinsichtlich Genauigkeit und Rechenaufwand dar.

Eine wesentliche Aufgabe dieser Arbeit war die Entwicklung eines möglichst einfachen Modells, um praxisrelevante Verbrennungsprobleme mit ausreichender Genauigkeit beschreiben zu können. Diese Zielsetzung wurde durch die Kombination des neu entwickelten Flammenfrontdichtemodells CF-4/5 mit den Mischungs- und Wandmodellen erreicht. Das Modell hebt sich von vielen anderen Modellen ab, da für die untersuchten Flammen keine Anpassung der Modellparameter erforderlich war. Mit seiner Hilfe läßt sich daher turbulente und hochturbulente Vormischverbrennung nicht nur simulativ modellieren sondern wirklich vorausberechnen. Außerdem wurde durch das implementierte Tabellierungsverfahren die Berechnung von Nichtgleichgewichtseffekten für praxisrelevante Fälle verfügbar gemacht. Mit dieser Studie wurde daher ein Verbrennungsmodul entwickelt, das zusammen mit einem kommerziellen Strömungslöser ein wertvolles Werkzeug zur Auslegung technischer Verbrennungsprozesse bildet.

Literaturverzeichnis

- [1] ABDEL-GAYED, R. G., K. J. AL-KHISHALI und D. BRADLEY: *Turbulent Burning Velocities and Flame Straining in Explosions*. Proceedings of the Royal Society of London, 391:393–414, 1984.
- [2] ABDEL-GAYED, R. G. und D. BRADLEY: *Dependence of Turbulent Burning Velocity on Turbulent Reynolds Number and Ratio of Laminar Burning Velocity to R.M.S. Turbulent Velocity*. In: *Sixteenth Symposium (International) on Combustion*, Seiten 1725–1735, Massachusetts Institute of Technology, USA, 1976. The Combustion Institute, Pittsburgh, PA.
- [3] ABDEL-GAYED, R. G., D. BRADLEY und A. K. C. LAU: *The Straining of Premixed Turbulent Flames*. In: *Twenty-Second Symposium (International) on Combustion*, University of Washington, Seattle, USA, 1988. The Combustion Institute, Pittsburgh, PA.
- [4] ABDEL-GAYED, R. G., D. BRADLEY und M. LAWES: *Turbulent Burning Velocities: A General Correlation in Terms of Straining Rates*. Proceedings of the Royal Society of London, 414:398–413, 1987.
- [5] ABDEL-GAYED, R. G., D. BRADLEY und F. K. K. LUNG: *Combustion Regimes and the Straining of Turbulent Premixed Flames*. *Combustion and Flame*, 76:213–218, 1989.
- [6] AEA TECHNOLOGY ENGINEERING SOFTWARE LIMITED: *CFX-TASCflow Theory Documentation Version 2.8*. AEA Technology Engineering Software Limited, Waterloo, Ontario, Canada, 1999.
- [7] ANDREWS, G. E., D. BRADLEY und S. B. LWAKABAMBA: *Measurement of Turbulent Burning Velocity for Large Turbulent Reynolds Numbers*. In: *Fifteenth Symposium (International) on Combustion*, Seiten 655–663, Tokyo, Japan, 1975. The Combustion Institute, Pittsburgh, PA.
- [8] BAEHR, H. D. und K. STEPHAN: *Wärme- und Stoffübertragung*. Springer Verlag, Berlin/Heidelberg, 1994.
- [9] BAILLY, P., O. GARRÉTON, D. SIMONIN, M. CHAMPION, B. DESHAIES, S. DUPONTIER und S. SANQUER: *Experimental and Numerical Study of a Premixed Flame Stabilized by a Rectangular Section Cylinder*. In: *Twenty-Sixth Symposium (International) on Combustion*, Seiten 923–930, University of Naples, Italy, 1996. The Combustion Institute, Pittsburgh, PA.

- [10] BATCHELOR, G. K.: *The Effect of Homogeneous Turbulence on Material Lines and Surfaces*. Proceedings of the Royal Society of London, 213:349–366, 1952.
- [11] BAULCH, D. L., C. COBOS, P. FRANK, G. HAYMAN, TH. JUST, J. A. KERR, T. MURRELLS, M. J. PILLING und J. TROE: *Evaluated kinetic data for combustion modeling: Supplement I*. Journal of Physical Chemistry Reference Data, 23(6):847–1033, 1994.
- [12] BAULCH, D. L., C. J. COBOS, R. A. COX, C. ESSER, P. FRANK, TH. JUST, J. A. KERR, M. J. PILLING, J. TROE und R. W. WALKER: *Evaluated kinetic data for combustion modeling*. Journal of Physical Chemistry Reference Data, 21(3):411–736, 1992.
- [13] BECHTHOLD, J. K. und C. K. LAW: *The Structure of Premixed Methane-Air Flames with Large Activation Energy*. Combustion and Flame, 97:317–338, 1997.
- [14] BILGER, R. W.: *A Note on Favre Averaging in Variable Density Flows*. Combustion Science and Technology, 11:15–17, 1975.
- [15] BILGER, R. W.: *Turbulent Flows with Nonpremixed Reactants*. In: LIBBY, P. A. und F. A. WILLIAMS (Herausgeber): *Turbulent Reacting Flows*, Band 44 der Reihe *Topics in Applied Physics*, Seiten 65–113. Springer Verlag, Berlin/Heidelberg, 1980.
- [16] BILGER, R. W., M. B. ESLER und S. H. STARNER: *On Reduced Mechanisms for Methane-Air Combustion*. In: SMOOKE, M. D. (Herausgeber): *Reduced Kinetic Mechanisms and Asymptotic Approximations for Methane-Air Flames*, Band 384 der Reihe *Lecture Notes in Physics*, Seiten 86–110. Springer Verlag, Berlin/Heidelberg, 1991.
- [17] BILGER, R. W., N. SWAMINATHAN, G. R. RUETSCH und N. S. A. SMITH: *Dynamics and structure of turbulent premixed flames*. In: *Annual Research Briefs*, Seiten 335–345, Stanford, USA, 1995. Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ.
- [18] BIRD, R. B., W. E. STEWART und E. N. LIGHTFOOD: *Transport Phenomena*. John Wiley and Sons, New York, 1960.
- [19] BLINT, R. J.: *The Relationship of the Laminar Flame Width to Flame Speed*. Combustion Science and Technology, 49:79–82, 1986.
- [20] BORGHI, R.: *Réactions chimiques en milieu turbulentes*. Doktorarbeit, Université Pierre et Marie Curie, Paris, 1978.
- [21] BORGHI, R.: *On the Structure and Morphology of Turbulent Premixed Flames*. Recent Advances in Aerospace Science, Seiten 117–138, 1984.
- [22] BORGHI, R.: *Turbulent Combustion Modelling*. Progress in Energy and Combustion Science, 14:245–292, 1988.
- [23] BORGHI, R.: *Turbulent Premixed Combustion: Further Discussions on the Scales of Fluctuations*. Combustion and Flame, 80:304–312, 1990.

- [24] BORGHI, R., B. ARGUEYROLLES, S. GAUFFIE und P. SOUHAITE: *Application of a "Presumed P.D.F." Model of Turbulent Combustion to Reciprocating Engines*. In: *Twenty-First Symposium (International) on Combustion*, Seiten 1591–1599, University of Munich, Germany, 1986. The Combustion Institute, Pittsburgh, PA.
- [25] BORGHI, R. und D. DUTOYA: *On the Scales of the Fluctuations in Turbulent Combustion*. In: *Seventeenth Symposium (International) on Combustion*, Seiten 235–244, The University of Leeds, U.K., 1979. The Combustion Institute, Pittsburgh, PA.
- [26] BOS, F. VAN DER, B. TAO, C. MENEVEAU und J. KATZ: *Effects of Small-Scale Turbulent Motions on the Filtered Velocity Gradient Tensor as Deduced from Holographic Particle Image Velocimetry Measurements*. *Physics of Fluids*, 14(6):1–19, 2002.
- [27] BOUNACEUR, R., V. WARTH, P. A. GLAUDE, F. BATTIN-LECLERC, G. SCACCHI, G. M. CÔME, T. FARAVELLI und E. RANZI: *Chemical lumping of mechanisms generated by computer. Application to the modelling of normal butane oxidation*. *Journal de Chimie Physique*, 93:1472–1491, 1996.
- [28] BOUSSINESQ, J.: *Théorie de l'Écoulement Tourbillant*. Présentés par Divers Savants Acad. Sci. Inst. Fr., 23:46–50, 1877.
- [29] BRADSHAW, P., B. E. LAUNDER und J. L. LUMLEY: *Collaborative Testing of Turbulence Models*. *ASME Journal of Fluids Engineering*, 118(2):243–247, 1996.
- [30] BRAY, K. N. C.: *The Interaction between Turbulence and Combustion*. In: *Seventeenth Symposium (International) on Combustion*, Seiten 223–233, The University of Leeds, U.K., 1979. The Combustion Institute, Pittsburgh, PA.
- [31] BRAY, K. N. C.: *Turbulent Flows with Premixed Reactants*. In: LIBBY, P. A. und F. A. WILLIAMS (Herausgeber): *Turbulent Reacting Flows*, Band 44 der Reihe *Topics in Applied Physics*, Seiten 115–183. Springer Verlag, Berlin/Heidelberg, 1980.
- [32] BRAY, K. N. C.: *The Challenge of Turbulent Combustion*. In: *Twenty-Sixth Symposium (International) on Combustion*, Seiten 1–26, University of Michigan, USA, 1996. The Combustion Institute, Pittsburgh, PA.
- [33] BRAY, K. N. C. und R. S. CANT: *Some Applications of Kolmogorov's Turbulence Research in the Field of Combustion*. *Proceedings of the Royal Society of London*, 434:217–240, 1991. First published in Russian *Dokl. Akad. NaukSSSR* (1941), Vol 30(4). Translation by V. Levin.
- [34] BRAY, K. N. C., M. CHAMPION, N. DAVE und P. A. LIBBY: *On the Thermochemistry of Premixed Turbulent Combustion in Variable Enthalpy Systems*. *Combustion Science and Technology*, 46:31–43, 1986.
- [35] BRAY, K. N. C., M. CHAMPION und P. A. LIBBY: *Mean Reaction Rates in Premixed Turbulent Flames*. In: *Twenty-Second Symposium (International) on Combustion*, Seiten 763–769, University of Colorado, Boulder, USA, 1988. The Combustion Institute, Pittsburgh, PA.

- [36] BRAY, K. N. C., M. CHAMPION und P. A. LIBBY: *The Interaction between Turbulence and Chemistry in Premixed Turbulent Flames*. In: LIBBY, P. A. und F. A. WILLIAMS (Herausgeber): *Turbulent Reacting Flows*, Band 44 der Reihe *Topics in Applied Physics*, Seiten 541–563. Springer Verlag, Berlin/Heidelberg, 1989.
- [37] BRAY, K. N. C. und P. LIBBY: *Passage times and Flamelet Crossing Frequencies in Premixed Turbulent Combustion*. *Combustion Science and Technology*, 47:253–274, 1986.
- [38] BRAY, K. N. C., P. A. LIBBY, G. MASUYA und J. B. MOSS: *Turbulence Production in Premixed Turbulent Flames*. *Combustion Science and Technology*, 25:127–140, 1981.
- [39] BRAY, K. N. C., P. A. LIBBY und J. B. MOSS: *Flamelet Crossing Frequencies and Mean Reaction Rates in Premixed Turbulent Combustion*. *Combustion Science and Technology*, 41:143–172, 1984.
- [40] BRAY, K. N. C., P. A. LIBBY und J. B. MOSS: *Scalar Length Scale Variations in Premixed Turbulent Flames*. In: *Twentieth Symposium (International) on Combustion*, Seiten 421–427, University of Michigan, USA, 1984. The Combustion Institute, Pittsburgh, PA.
- [41] BRAY, K. N. C. und J. B. MOSS: *A Closure Model for the Turbulent Premixed Flame with Sequential Chemistry*. *Combustion and Flame*, 30:125–131, 1977.
- [42] BRAY, K. N. C. und J. B. MOSS: *A unified statistical model of the premixed turbulent flame*. *Acta Astronautica*, 4:291–319, 1977.
- [43] BRAY, K. N. C., J. B. MOSS und M. CHAMPION: *The turbulent combustion of propane-air mixture*. *Acta Astronautica*, 5:1063–1077, 1978.
- [44] BRONSTEIN, I. N. und K. A. SEMENDJAJEW: *Taschenbuch der Mathematik*. Teubner-Verlag, Stuttgart/Leipzig, 1990.
- [45] BRUTSCHER, T.: *Experimentelle und theoretische Untersuchungen zur Entflammung und Flammenausbreitung bei funkengezündeten Brenngas/Luft-Gemischen unter besonderer Berücksichtigung bevorzugter Diffusion*. Doktorarbeit, Engler-Bunte-Institut, Bereich Verbrennungstechnik, Universität Karlsruhe (TH), Karlsruhe, Germany, 2002.
- [46] BUGGISCH, H.: *Grundzüge der Kontinuumsmechanik*. Vorlesung am Institut für Angewandte Mechanik, Universität Karlsruhe.
- [47] BUI-PHAM, M., K. SESHADRI und F. A. WILLIAMS: *The Asymptotic Structure of Premixed Methane-Air Flames with Slow CO Oxidation*. *Combustion and Flame*, 89:343–362, 1992.
- [48] CANDEL, S. und T. POINSOT: *Flame Stretch and the Balance Equation for the Flame Area*. *Combustion Science and Technology*, 70:1–15, 1990.
- [49] CANDEL, S., D. VEYNANTE, F. LACAS, A. DARABIHA und C. ROLON: *Current Progress and Future Trends in Turbulent Combustion*. *Combustion Science and Technology*, 98:245–264, 1994.

- [50] CANT, R. S., S. B. POPE und K. N. C. BRAY: *Modelling of Flamelet Surface-To-Volume Ratio in Turbulent Premixed Combustion*. In: *Twenty-Third Symposium (International) on Combustion*, Seiten 809–815, University of Orleans, France, 1990. The Combustion Institute, Pittsburgh, PA.
- [51] CANT, R. S., B. ROGG und K. N. C. BRAY: *On Laminar Flamelet Modelling of the Mean Reaction Rate in a Premixed Turbulent Flame*. *Combustion Science and Technology*, 69:53–61, 1990.
- [52] CANT, R. S., C. J. RUTLAND und A. TROUVÉ: *Statistics for Laminar Flamelet Modelling*. In: *Proceedings of the Sommer Program*, Seiten 1–21, Stanford, USA, 1990. Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ.
- [53] CARACOTSIOS, M. und W. E. STEWART: *Sensitivity Analysis of Initial Value Problems with Mixed ODEs and Algebraic Equations*. *Computers and Chemical Engineering*, 9(4):359–365, 1986.
- [54] CHARLETTE, F., C. MENEVEAU und D. VEYNANTE: *A Power-Law Flame Wrinkling Model for LES of Premixed Turbulent combustion. Part I: Non-Dynamic Formulation and Initial Tests*. submitted to *Combustion and Flame*, 2001.
- [55] CHENG, R. K., I. G. SHEPHERD, B. BÉDAT und L. TALBOT: *Premixed Turbulent Flame Structures in Moderate and Intense Isotropic Turbulence*. *Combustion Science and Technology*, 174:29–59, 2002.
- [56] CHEN, J. H und H. G. IM: *Correlation of Flame Speed with Stretch in Turbulent Premixed Methane/Air Flames*. In: *Twenty-Seventh Symposium (International) on Combustion*, Seiten 819–826, University of Colorado, Boulder, USA, 1998. The Combustion Institute, Pittsburgh, PA.
- [57] CHEN, J.-Y.: *A General Procedure for Constructing Reduced Reaction Mechanisms with Given Independent Relations*. *Combustion Science and Technology*, 57:89–94, 1988.
- [58] CHEN, J.-Y.: *Development of Reduced Mechanisms for Numerical Modelling of Turbulent Combustion*. In: *Workshop on "Numerical Aspects of Reduction in Chemical Kinetics*, Seiten 1–25, CERMICS-ENPC Cite Descartes - Champs sur Marne, France, 1997.
- [59] CHEN, J.-Y., J. L. LUMLEY und F. C. GOULDIN: *Modeling of Wrinkled Laminar Flames with Intermittency and Conditional Statistics*. In: *Twenty-First Symposium (International) on Combustion*, Seiten 1483–1491, University of Munich, Germany, 1986. The Combustion Institute, Pittsburgh, PA.
- [60] CHEN, Y.-C. und R. W. BILGER: *Experimental Investigation of Three-Dimensional Flamefront Structure in Premixed Turbulent Combustion — I: Hydrocarbon/Air Bunsen Flames*. *Combustion and Flame*, 131:400–435, 2002.
- [61] CHEN, Y.-C., N. PETERS, G. A. SCHNEEMANN, N. WRUCK, U. RENZ und M. S. MANSOUR: *The Detailed Flame Structure of Highly Stretched Turbulent Premixed Methane-Air Flames*. *Combustion and Flame*, 107:223–244, 1996.

- [62] CHOMIAK, J.: *Basic Considerations in the Turbulent Flame Propagation in Premixed Gases*. Progress in Energy and Combustion Science, 5:207–221, 1979.
- [63] CLAVIN, P.: *Dynamic Behavior of Premixed Flame Fronts in Laminar and Turbulent Flows*. Progress in Energy and Combustion Science, 11:1–59, 1985.
- [64] CLAVIN, P. und F. A. WILLIAMS: *Effects of Molecular Diffusion and Thermal Expansion on the Structure and Dynamics of Premixed Flames in Turbulent Flows*. Journal of Fluid Mechanics, 116:251–282, 1982.
- [65] COFFEE, T. P. und J. M. HEIMERL: *Transport Algorithms for Methane Flames*. Combustion Science and Technology, 50:323–340, 1983.
- [66] DAMKÖHLER, G.: *Der Einfluss der Turbulenz auf die Flammengeschwindigkeit in Gasgemischen*. Zeitschrift für Elektrochemie und Angewandte Physikalische Chemie, 46:601–652, 1940.
- [67] DAOU, J. und A. LIÑÁN: *Ignition and Extinction Fronts in Counterflowing Premixed Reactive Gases*. Combustion and Flame, 118:479–488, 1999.
- [68] DARABIHA, N., V. GIOVANGIGLI, A. TROUVÉ, S. M. CANDEL und E. ESPOSITO: *Coherent Flame Description of Turbulent Premixed Ducted Flames*. In: BORGHI, R. und S. N. B. MURTHY (Herausgeber): *Turbulent Reactive Flows*, Band 40 der Reihe *Lecture Notes in Engineering*, Seiten 591–637. Springer Verlag, Berlin/Heidelberg, 1989.
- [69] DIXON-LEWIS, G.: *Computer Modeling of Combustion Reactions in Flowing Systems with Transport*. In: GARDINER, JR., W. C. (Herausgeber): *Combustion Chemistry*, Lecture Notes in Physics, Seiten 21–126. Springer Verlag, Berlin/Heidelberg, 1984.
- [70] DIXON-LEWIS, G., F. A. GOLDSWORTHY und J. B. GREENBERG: *Flame Structure and Flame Reaction Kinetics. IX: Calculation of Multi-Radical Premixed Flames*. Proceedings of the Royal Society of London, 346:261, 1975.
- [71] DOPAZO, C.: *Recent Developments in Pdf Methods*. In: LIBBY, P. A. und F. A. WILLIAMS (Herausgeber): *Turbulent Reacting Flows*, Seiten 375–474. Academic Press, London, 1994.
- [72] DOPAZO, C. und E. E. O'BRIEN: *Functional Formulation of Nonisothermal Turbulent Reactive Flows*. Physics of Fluids, 17:1968–1981, 1974.
- [73] DUCLOS, J. M., D. VEYNANTE und T. POINSOT: *A Comparison of Flamelet Models for Premixed Turbulent Combustion*. Combustion and Flame, 95:101–117, 1993.
- [74] FAVRE, A.: *Statistical Equations of Turbulent Gases*. SIAM Problems of Hydrodynamics and Continuum Mechanics, Seiten 231–266, 1969.
- [75] FAVRE, A.: *Formulation of the Statistical Equations of Turbulent Flows with Variable Density*. In: GATSKI, T. B., S. SARKAR und C. G. SPEZIALE (Herausgeber): *Studies in Turbulence*, Seiten 324–341. Springer Verlag, Berlin/Heidelberg, 1989.

- [76] FRENKLACH, M. und H. WANG: *Detailed Mechanism und Modeling of Soot Particle Formation*. In: BOCKHORN, H. (Herausgeber): *Soot Formation in Combustion*, Band 59 der Reihe *Chemical Physics*, Seiten 163–192. Springer Verlag, Berlin/Heidelberg, 1994.
- [77] FUKUTANI, S. und H. JINNO: *Mechanism of Flame Propagation in Hydrogen-Air and Methane-Air Flames*. In: PETERS, N. und J. WARNATZ (Herausgeber): *Numerical Methods in Laminar Flame Propagation*, Band 6 der Reihe *Notes on Numerical Fluid Mechanics*, Seiten 167–181. Vieweg, Braunschweig/Wiesbaden, 1982.
- [78] FU, S., B. E. LAUNDER und M. A. LESCHZINER: *Modelling Strongly Swirling Recirculating Jet Flows with Reynolds-Stress Transport Closures*. In: *Proc. of the 6th Symp. on Turbulent Shear Flows*, Seiten 17–61, Toulouse, France, 1987.
- [79] GIBSON, C. H.: *Fine Structure of Scalar Fields Mixed by Turbulences I: Zero-Gradient Points and Minimal Gradient Surfaces*. *Physics of Fluids*, 11:2305–2315, 1968.
- [80] GIBSON, C. H.: *Fine Structure of Scalar Fields Mixed by Turbulences II: Spectral Theory*. *Physics of Fluids*, 11:2316–2327, 1968.
- [81] GIOVANGIGLI, V. und M. D. SMOOKE: *Calculation of Extinction Limit for Premixed Laminar Flames in a Stagnation Point Flow*. *Journal of Computational Physics*, 68:327–345, 1987.
- [82] GOEY, L. P. H. DE: *Coherent Flame Modelling of Chemical Reactions in a Turbulent Mixing Layer*. In: SCHREEL, K. R. A. M (Herausgeber): *Course on Combustion*, Seiten 386–398. J.M. Burgerscentrum, Research School for Fluid Mechanics, Technische Universiteit Eindhoven, 2001.
- [83] GOEY, L. P. H. DE und J. H. M. TEN THIJE BOONKKAMP: *A Mass-Based Definition of Flame Stretch for Flames with Finite Thickness*. *Combustion Science and Technology*, 122:399–405, 1997.
- [84] GOULDIN, F. C., K. N. C. BRAY und J. Y. CHEN CHEN: *Chemical Closure Model for Fractal Flamelets*. *Combustion and Flame*, 77:241–259, 1989.
- [85] GOULDIN, F. C. und P. C. MILES: *Chemical Closure and Burning Rates in Premixed Turbulent Flames*. *Combustion and Flame*, 100:202–202, 1995.
- [86] GRIFFITHS, J. F.: *Reduced Kinetic Models and their Application to Practical Combustion Systems*. *Progress in Energy and Combustion Science*, 21:25–107, 1995.
- [87] HABISREUTHER, P.: *ADAPTAB: Tabulation of Scalar Variables with Adaptive Grid Generation*. private Kommunikation, 1993.
- [88] HABISREUTHER, P.: *Titel fehlt*. Doktorarbeit, Engler-Bunte-Institut, Bereich Verbrennungstechnik, Universität Karlsruhe (TH), Karlsruhe, Germany, 2002.
- [89] HANJALIĆ, K.: *Advanced Turbulence Closure Models: A View of Current Status and Future Prospects*. *Journal of Heat and Fluid Flows*, 15:178–203, 1994.

- [90] HANJALIĆ, K. und B. E. LAUNDER: *Sensitizing the Dissipation Equation to Irrational Strains*. J. Fluids Eng. Trans. ASME, 102:34–40, 1980.
- [91] HASSEL, E. P., W. MEIER, R. BARLOW, S. B. POPE, M. MASRI, J. P. GORE und P. LINDSTEDT: *Proceedings of the International Workshop on Measurement and Computation of Turbulent Nonpremixed Flames: Summary of Workshop Accomplishments*, 1996.
- [92] HAUTMAN, D. J., F. L. DRYER, K. P. SCHUG und I. GLASSMAN: *A Multiple-step Overall Kinetic Mechanism for the Oxidation of Hydrocarbons*. Combustion Science and Technology, 25:219–235, 1981.
- [93] HAWORTH, D. und T. POINSOT: *The Influence of Lewis Number and non homogeneous Mixture on Premixed Turbulent Flame Structure*. In: *Proceedings of the Sommer Program*, Seiten 1–17, Stanford, USA, 1990. Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ.
- [94] HERMANN, M. G.: *Numerical Simulation of Premixed Turbulent Combustion Based on a Level Set Flamelet Model*. Doktorarbeit, Institut für Technische Mechanik, RWTH-Aachen, Aachen, Germany, 2001.
- [95] HEWSON, J. C.: *Pollutant Emissions from Nonpremixed Hydrocarbon Flames*. Doktorarbeit, University of California, San Diego, 1997.
- [96] HINZE, J. O.: *Turbulence*. McGraw-Hill, 1959.
- [97] HIRSCHFELDER, J. O., C. F. CURTISS und R. B. BIRD: *Molecular Theory of Gases and Liquids*. John Wiley and Sons, 1954.
- [98] HOFFMANN, A.: *Mathematische Modellierung laminarer und turbulenter Vormischverbrennung*. Internes Seminar, 1998.
- [99] HOFFMANN, A.: *SPOF: Ein Programm zur Berechnung von Staupunkt- und Gegenstromvormischflammen*. Engler-Bunte-Institut, Bereich Verbrennungstechnik, Universität Karlsruhe (TH), 2001.
- [100] HOFFMANN, A.: *PrePDF: A FORTRAN Program for the Generation of Adaptive Chemistry and Pdf Look-Up Tables*. Engler-Bunte-Institut, Bereich Verbrennungstechnik, Universität Karlsruhe (TH), 2002.
- [101] HOFFMANN, A., D. GROSSCHMIDT, M. ZAJADATZ, W. LEUCKEL und H. BOCKHORN: *Validierung eines JPDF-Modells sowie einer semi-globalen Reaktionskinetik anhand detaillierter Feldmessungen hochturbulenter vorgemischter Freistrahlfammen*. In: *VDI-GET-Fachtagung "Verbrennung und Feuerungen" — 20. Deutscher Flammentag*, Essen, 2001. VDI-GET, VDI.
- [102] HOFFMANN, A. und W. LEUCKEL: *Task 2: Reduced Reaction Mechanism for Kerosene*. Final Report Brite-EuRam BRPR, CT95-0122, Karlsruhe, Germany, 1999.
- [103] HOFFMANN, A. und W. LEUCKEL: *Task 5: Modelling CO Production*. Final Report Brite-EuRam BRPR, CT95-0122, Karlsruhe, Germany, 2000.

- [104] HOFFMANN, A., W. LEUCKEL, S. HOHMANN und N. ZARZALIS: *Mathematische Modellierung der Gasturbinenverbrennung unter Verwendung eines PDF-Modelles*. In: *VDI-GET-Fachtagung "Verbrennung und Feuerungen"* — 19. Deutscher Flammentag, Dresden, 1999. VDI-GET, VDI.
- [105] HUGHES, K. J., T. TURÁNYI, A. CLAGUE und M. J. PILLING: *Development and Testing of a Comprehensive Chemical Mechanism for the Oxidation of Methane*. *International Journal of Chemical Kinetics*, 33:513–538, 2001.
- [106] JONES, W. P. und B. E. LAUNDER: *The Prediction of Laminarization with a Two-Equation Model of Turbulence*. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 15:301–347, 1972.
- [107] JONES, W. P. und P. MUSONGE: *Closure of Reynolds Stress and Scalar Flux Equations*. *Physics of Fluids*, 31(12):3589–3604, 1988.
- [108] KARLOVITZ, B., D. W. DENNISTON, D. H. KNAPSCHAEFER und F. H. WELLS: *Studies on Turbulent Flames*. In: *Forth Symposium (International) on Combustion*, Seiten 613–620, Massachusetts Institute of Technology, USA, 1953. The Combustion Institute, Pittsburgh, PA.
- [109] KÁRMÁN, T. VON: *The Present Status of the Theory of Laminar Flame Propagation*. In: *Sixth Symposium (International) on Combustion*, Seiten 1–11, Yale University, USA, 1956. The Combustion Institute, Pittsburgh, PA.
- [110] KEE, J., G. DIXON-LEWIS, J. WARNATZ, M. E. COLTRIN und J. A. MILLER: *A Fortran Computer Code Package for the Evaluation of Gas-Phase Multicomponent Transport Properties*. Sandia National Laboratories Report SAND86-8246, SANDIA National Laboratories, Livermore, CA, 1986.
- [111] KEE, J., F. M. RUPLEY und J. A. MILLER: *CHEMKIN-II: A Fortran Chemical Kinetics Package for the Analysis of Gas-Phase Chemical Kinetics*. Sandia National Laboratories Report SAND89-8009B, SANDIA National Laboratories, Livermore, CA, 1991.
- [112] KEE, R., J. A. MILLER, G. H. EVANS und G. DIXON-LEWIS: *A Computational Model of the Structure and Extinction of Strained, Opposed Flow, Premixed Methane-Air Flames*. In: *Twenty-Second Symposium (International) on Combustion*, Seiten 1479–1494, University of Washington, Seattle, USA, 1988. The Combustion Institute, Pittsburgh, PA.
- [113] KERSTEIN, A. R., W. T. ASHURST und F. A. WILLIAMS: *Field Equation for Interface Propagation in an Unsteady Homogenous Flow Field*. *Physical Review A*, 37(7):2728–2731, 1988.
- [114] KLEIN, R.: *Numerics in Combustion*. In: VEYNANTE, D. und L. VERVISCH (Herausgeber): *Numerical Methods in Laminar Flame Propagation*, Lecture Series „Introduction to Turbulent Combustion“. von Karman Institute for Fluid Dynamics, Brussels, Belgium, 1999.
- [115] KLIMOV, A. M.: *Laminar Flame in a Turbulent Flow*. Übersetzung aus: *Zhur. Prikl. Mekh. Tekhn. Fiz.*, 3:49–58, 1963.

- [116] KOLLMANN, W. und J. H. CHEN: *Dynamics of the Flame Surface Area in Turbulent Premixed Combustion*. In: *Twenty-Fifth Symposium (International) on Combustion*, Seiten 1193–2002, University of California, Irvine, USA, 1994. The Combustion Institute, Pittsburgh, PA.
- [117] KOLMOGOROFF, A.: *The Local Structure of Turbulence in Incompressible Viscous Fluid for Very Large Reynolds' Numbers*. Comptes Rendus (Doklady) de l'Académie des Sciences de l'URSS, XXX(4):301–305, 1941.
- [118] KOLMOGOROFF, A.: *Equation of Turbulent Motion of an Incompressible Fluid*. In: *Physics*, Band 6, Seiten 56–58. Izvestia Academy of Sciences, USSR, 1942.
- [119] KOLMOGOROV, A. N., I. G. PETROVSKII und N. S. PISKUNOV: *Étude de l'équation de la chaleur de matière et son application à un problème biologique*. Bull. Moskov. Gos. Univ. Mat. Mekh., 1:1–25, 1937.
- [120] KONNOV, A.: *Detailed Reaction Mechanism for Small Hydrocarbons Combustion*. published at <http://c/homepages.vub.ac.be/~akonov/science/mechanism/main.html>, 2000.
- [121] KUO, K. K.: *Principles of Combustion*. John Wiley and Sons, New York, 1996.
- [122] LACAS, F., D. VEYNANTE und S. M. CANDEL: *A numerical study of propagating premixed turbulent flames*. In: DERVIEUX, A. und B. LARROUTOUROU (Herausgeber): *Numerical combustion*, Band 351 der Reihe *Lecture Notes in Physics*. Springer Verlag, Berlin/Heidelberg, 1989.
- [123] LAHJAILY, H., M. CHAMPION, D. KARMED und P. BRUEL: *Introduction of Dilution in the BML Model: Application to a Stagnating Turbulent Flame*. Combustion Science and Technology, 135:153–173, 1998.
- [124] LAM, S. H. und D. A. GOUSSIS: *Understanding Complex Chemical Kinetics with Computational Singular Perturbation*. In: *Twenty-Second Symposium (International) on Combustion*, Seiten 931–941, University of Washington, Seattle, USA, 1988. The Combustion Institute, Pittsburgh, PA.
- [125] LAUNDER, B. E., G. REECE und W. RODI: *Progress in the Development of a Reynolds Stress Turbulence Closure*. Journal of Fluid Mechanics, 15:429–459, 1975.
- [126] LAW, C. K.: *Dynamics of Stretched Flames*. In: *Twenty-Second Symposium (International) on Combustion*, Seiten 1381–1402, University of Washington, Seattle, USA, 1988. The Combustion Institute, Pittsburgh, PA.
- [127] LAW, C. K. und C. J. SUNG: *Structure, Aerodynamics, and Geometry of Premixed Flamelets*. Progress in Energy and Combustion Science, 26:459–505, 2000.
- [128] LEISENHEIMER, B.: *Zum Ausbreitungsverhalten von Deflagrationsfronten in laminaren und turbulenten Brenngas/Luft-Gemischen innerhalb geschlossener Behälter*. Doktorarbeit, Engler-Bunte-Institut, Bereich Verbrennungstechnik, Universität Karlsruhe (TH), Karlsruhe, Germany, 1997.

- [129] LEUCKEL, W., G. LAUER, C. HIRSCH und P. HABISREUTHER: *Mathematische Modellierung der Wechselwirkung von Turbulenz und Reaktion unter den in Gasturbinenbrennkammern vorliegenden Bedingungen*. Technischer Bericht 3.1.3.4, AG Hochtemperatur Gasturbine, Turboflam, 1994.
- [130] LEWIS, B. und G. VON ELBE: *Combustion Flames and Explosion of Gases*. Academic Press, London, 1987.
- [131] LIBBY, P. A. und K. N. C. BRAY: *Countergradient Diffusion in Premixed Turbulent Flames*. AIAA Journal, 19:205–213, 1981.
- [132] LIBBY, P. A. und F. A. WILLIAMS (Herausgeber): *Turbulent Reacting Flows*, Band 44 der Reihe *Topics in Applied Physics*. Springer Verlag, Berlin/Heidelberg, 1980.
- [133] LINDOW, R.: *Zur Bestimmung der laminaren Flammengeschwindigkeit*. Doktorarbeit, Engler-Bunte-Institut, Bereich Verbrennungstechnik, Universität Karlsruhe (TH), Karlsruhe, Germany, 1966.
- [134] LIPATNIKOV, A. N. und J. CHOMIAK: *Transient and Geometrical Effects in Expanding Turbulent Flames*. Combustion Science and Technology, 154:75–117, 2000.
- [135] LIPATNIKOV, A. N. und J. CHOMIAK: *Turbulent Flame Speed and Thickness: Phenomenology, Evaluation, and Application in Multi-dimensional Simulations*. Progress in Energy and Combustion Science, 28(1):1–74, 2001.
- [136] LISCHER, T.: *Mathematische Modellierung hochturbulenter, vorgemischter Freistrahlfammen*. Diplomarbeit, Engler-Bunte-Institut, Bereich Verbrennungstechnik, Universität Karlsruhe (TH), Karlsruhe, Germany, 2001.
- [137] LISSANSKI, V. V. und W. C. GARDINER, JR.: *A Generalized Intermediate Approach to Combustion Chemistry: Application to Methane Ignition and Flame Propagation*. Combustion Science and Technology, 110–111:169–183, 1995.
- [138] LIU, Y.: *Untersuchungen zur stationären Ausbreitung turbulenter Vormischflammen*. Doktorarbeit, Engler-Bunte-Institut, Bereich Verbrennungstechnik, Universität Karlsruhe (TH), Karlsruhe, Germany, 1991.
- [139] LOCKWOOD, F. C. und A. S. NAGUIB: *The Prediction of the Fluctuations in the Properties of Free, Round Jet, Turbulent, Diffusion Flames*. Combustion and Flame, 24:109–124, 1975.
- [140] LUTZ, A. E., J. KEE und J. A. MILLER: *SENKIN: A FORTRAN Program for predicting homogenous Gas Phase Chemical Kinetics with Sensitivity Analysis*. Sandia National Laboratories Report SAND87-8248, SANDIA National Laboratories, Livermore, CA, 1988.
- [141] MAAS, U. und S. B. POPE: *Implementation of Simplified Chemical Kinetics Based on Intrinsic Low-Dimensional Manifolds*. In: *Twenty-Forth Symposium (International) on Combustion*, University of Sydney, Australia, 1992. The Combustion Institute, Pittsburgh, PA.

- [142] MAAS, U. und S. B. POPE: *Simplifying Chemical Kinetics: Intrinsic Low-Dimensional Manifolds in Composition Space*. *Combustion and Flame*, 88:239–264, 1992.
- [143] MAAS, U. und S. B. POPE: *Laminar Flame Calculations Using Simplified Chemical Kinetics Based on Intrinsic Low-Dimensional Manifolds*. In: *Twenty-Fifth Symposium (International) on Combustion*, University of California, Irvine, USA, 1994. The Combustion Institute, Pittsburgh, PA.
- [144] MAISTRET, E., D. NASSER, T. POINSOT, D. VEYNANTE, F. LACAS, S. M. CANDEL und E. ESPOSITO: *Recent Developments in the Coherent Flamelet Description of Turbulent Combustion*. In: DERVIEUX, A. und B. LARROUTUROU (Herausgeber): *Numerical combustion*, Band 351 der Reihe *Lecture Notes in Physics*. Springer Verlag, Berlin/Heidelberg, 1989.
- [145] MALLARD, F. E. und H. L. LE CHATELIER: *Recherches Experimentelles et Théoriques sur la Combustion des Mélanges Gazeux Explosifs*. *Ann. Mines*, 8(4):274, 1883.
- [146] MANTEL, T. und R. BORGHİ: *A New Model of Premixed Wrinkled Flame Propagation Based on Scalar Dissipation Equation*. *Combustion and Flame*, 96:443–457, 1994.
- [147] MARBLE, F. E. und J. E. BROADWELL: *The Coherent Flame Model for Turbulent Chemical Reactions*. Project SQUID Technical Report TRW-9-PU, Project SQUID Headquarters, Chaffee Hall, Purdue University, 1977.
- [148] MARKSTEIN, G. H.: *Experimental and Theoretical Studies of Flamefront Stability*. *Journal of Aeronautical Sciences*, 18:199–209, 1951.
- [149] MENEVEAU, C. und T. POINSOT: *Stretching and Quenching of Flamelets in Premixed Turbulent Combustion*. *Combustion and Flame*, 86:311–332, 1991.
- [150] MENTER, F. R.: *Zonal Two Equation $k-\omega$ Turbulence Models for Aerodynamic Flows*. AIAA Paper, 93(2906), 1993.
- [151] MENTER, F. R.: *Two-Equation Eddy-Viscosity Turbulence Models for Engineering Applications*. *AIAA Journal*, 32(8):1598–1605, 1994.
- [152] MÖLLENSTEDT, T.: *Untersuchung des Makrolängenmaßes und der turbulenten Brenngeschwindigkeit an geometrisch ähnlichen Modellbrennern*. Diplomarbeit, Engler-Bunte-Institut, Bereich Verbrennungstechnik, Universität Karlsruhe (TH), Karlsruhe, Germany, 1999.
- [153] MÜLLER, U. C., M. BOLLIG und N. PETERS: *Approximations for Burning Velocities and Markstein Numbers for Lean Hydrocarbon and Methanol Flames*. *Combustion and Flame*, 108:349–356, 1997.
- [154] MÜLLER, U. C., N. PETERS und A. LINÄN: *Global Kinetics for n -Heptane Ignition at High Pressures*. In: *Twenty-Forth Symposium (International) on Combustion*, Seiten 777–784, University of Sydney, Australia, 1992. The Combustion Institute, Pittsburgh, PA.

- [155] NASTOLL, W.: *Untersuchungen zur instationären turbulenten Flammenausbreitung in geschlossenen Behältern*. Doktorarbeit, Engler-Bunte-Institut, Bereich Verbrennungstechnik, Universität Karlsruhe (TH), Karlsruhe, Germany, 1989.
- [156] NOVAK, U. und J. WARNATZ: *Sensitivity Analysis in Aliphatic Hydrocarbon Combustion*. In: KUHL, A. L., J. R. BOWEN, C.-J. LEYER und A. BORISOV (Herausgeber): *Dynamics of Reactive Systems*, Seiten 87–104. AIAA, 1988.
- [157] OSHER, S. und R. P. FEDKIW: *Level Set Methods: An Overview and Some Recent Results*. IPAM GBM Tutorials, 2001.
- [158] PATANKAR, S. V.: *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. Series in Computational Methods in Mechanics and Thermal Science. McGraw-Hill, 1990.
- [159] PETERS, N.: *Numerical and Asymptotic Analysis of Systematically Reduced Reaction Schemes for Hydrocarbons*. In: R. GLOWINSKI ET AL. (Herausgeber): *Numerical Simulation of Combustion Phenomena*, Band 241 der Reihe *Lecture Notes in Physics*, Seiten 90–109. Springer Verlag, Berlin/Heidelberg, 1985.
- [160] PETERS, N.: *Laminar Flamelet Concepts in Turbulent Combustion*. In: *Twenty-First Symposium (International) on Combustion*, Seiten 1231–1250, University of Munich, Germany, 1986. The Combustion Institute, Pittsburgh, PA.
- [161] PETERS, N.: *Reducing Mechanisms*. In: SMOOKE, M. D. (Herausgeber): *Reduced Kinetic Mechanisms and Asymptotic Approximations for Methane-Air Flames*, Band 384 der Reihe *Lecture Notes in Physics*, Seiten 48–67. Springer Verlag, Berlin/Heidelberg, 1991.
- [162] PETERS, N.: *Forteen Lectures on Laminar and Turbulent Combustion*. Institut für Technische Mechanik, RWTH Aachen, 1992.
- [163] PETERS, N.: *A Spectral Closure for Premixed Turbulent Combustion in the Flamelet Regime*. *Journal of Fluid Mechanics*, 242:611–629, 1992.
- [164] PETERS, N.: *Turbulente Brenngeschwindigkeit*. Abschlußbericht für DFG-Forschungsvorhaben Pe 241/9-2, Institut für Technische Mechanik, RWTH-Aachen, 1994.
- [165] PETERS, N.: *Four Lectures on Turbulent Combustion*. Institut für Technische Mechanik, RWTH Aachen, 1997.
- [166] PETERS, N.: *The Turbulent Burning Velocity for Large-Scale and Small-Scale Turbulence*. *Journal of Fluid Mechanics*, 384:107–132, 1999.
- [167] PETERS, N.: *Turbulent Combustion*. Cambridge University Press, London, 2000.
- [168] PETERS, N. und B. ROGG (Herausgeber): *Reduced Kinetic Mechanisms for Applications in Combustion Systems*, Band m15 der Reihe *Lecture Notes in Physics*. Springer Verlag, Berlin/Heidelberg, 1993.
- [169] PETERS, N. und F. A. WILLIAMS: *The Asymptotic Structure of Stoichiometric Methane-Air Flames*. *Combustion and Flame*, 68:185–207, 1987.

- [170] PETZOLD, L. R.: *A Description of DASSL: A Differential/Algebraic System Solver*. Sandia National Laboratories Report SAND82-8637, SANDIA National Laboratories, Livermore, CA, 1982.
- [171] PITSCH, H., N. PETERS und K. SESHADRI: *Numerical and Asymptotic Studies of the Structure of Premixed iso-Octane Flames*. In: *Twenty-Sixth Symposium (International) on Combustion*, Seiten 763–771, University of Naples, Italy, 1996. The Combustion Institute, Pittsburgh, PA.
- [172] POCHEAU, A.: *Scale Invariance in Turbulent Front Propagation*. *Physical Review E*, 49(3):1109–1122, 1994.
- [173] POINSOT, T., S. CANDEL und A. TROUVÉ: *Applications of Direct Numerical Simulation to Premixed Turbulent Combustion*. *Progress in Energy and Combustion Science*, 21:531–576, 1996.
- [174] POINSOT, T., D. C. HAWORTH und G. BRUNEAUX: *Direct Simulation and Modeling of Flame-Wall Interaction for Premixed Turbulent Combustion*. *Combustion and Flame*, 95(1/2):118–133, 1993.
- [175] POINSOT, T. und D. VEYNANTE: *Theoretical and Numerical Combustion*. R. T. Edwards, Inc., Philadelphia, PA, 2001.
- [176] POINSOT, T., D. VEYNANTE und S. CANDEL: *Quenching Processes and Premixed Turbulent Combustion Diagrams*. *Journal of Fluid Mechanics*, 228:561–606, 1991.
- [177] POLIFKE, W., W. GENG und K. DÖBBELING: *Optimization of Rate Coefficients for Simplified Reaction Mechanisms with Genetic Algorithms*. *Combustion and Flame*, 113:119–135, 1998.
- [178] POPE, S. B.: *An Explanation of the Turbulent Round-Jet/Plane-Jet Anomaly*. American Institute of Aeronautics and Astronautics, Seiten 279–281, 1977.
- [179] POPE, S. B.: *A Monte Carlo Method for the Pdf Equations of Turbulent Reacting Flows*. *Combustion Science and Technology*, 27:299–314, 1981.
- [180] POPE, S. B.: *Consistent Modelling of Scalars in Turbulent Flows*. *Physics of Fluids*, 26(2):404–408, 1983.
- [181] POPE, S. B.: *PDF Methods for Turbulent Reactive Flows*. *Progress in Energy and Combustion Science*, 11:119–192, 1985.
- [182] POPE, S. B.: *Turbulent Flows*. Cambridge University Press, London, 2000.
- [183] POPE, S. B. und W. K. CHENG: *The Stochastic Flamelet Model of Turbulent Premixed Combustion*. In: *Twenty-Second Symposium (International) on Combustion*, Seiten 781–789, Massachusetts Institute of Technology, USA, 1988. The Combustion Institute, Pittsburgh, PA.
- [184] PRASAD, R. O. S.: *A Computational Study of Turbulent Premixed Flames Including Direct Numerical and Large Eddy Simulations*. Doktorarbeit, Purdue University, 1998.

- [185] REYNOLDS, O.: *On the Experimental Investigation of the Circumstances which determine whether the Motion of Water shall be Direct or Sinuous, and the Law of Resistance in Parallel Channels*. Philosophical Transactions of the Royal Society, 174:935–982, 1883.
- [186] REYNOLDS, O.: *On the Dynamical Theory of Incompressible Viscous Fluids and the Determination of the Criterion*. Philosophical Transactions of the Royal Society, A186-I:123–164, 1895.
- [187] RICHARDSON, L. F.: *Weather prediction by numerical process*. Cambridge University Press, London, 1922.
- [188] ROGG, B.: *Numerical Analysis of Strained Premixed CH₄-Air Flames with Detailed Chemistry*. CUED/A-THERMO TR22, Cambridge University, Cambridge, 1988.
- [189] ROGG, B.: *Response and Flamelet Structure of Stretched Premixed Methane-Air Flames*. Combustion and Flame, 73:45–65, 1988.
- [190] ROGG, B. und N. PETERS: *The Asymptotic Structure of Weakly Strained Stoichiometric Methane-Air Flames*. Combustion and Flame, 79:402–420, 1990.
- [191] ROTTA, J. C.: *Statistische Theorie nichthomogener Turbulenz I*. Zeitschrift für Physik, 129:547–572, 1951.
- [192] RUNG, TH.: *Statistische Turbulenzmodellierung*. Vorlesung am Hermann-Föttinger-Institut für Strömungsmechanik, Technische Universität Berlin, 2002.
- [193] RUTLAND, C. J.: *Effects of Flame Strain, Vorticity and Turbulence on Premixed Flames*. Doktorarbeit, Stanford University, U.S.A., 1989.
- [194] RUTLAND, C. J. und S. CANT: *Turbulent Transport in Premixed Flames*. In: *Proceedings of the Sommer Program*, Seiten 75–94, Stanford, USA, 1994. Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ.
- [195] SAID, R. und R. BORGHİ: *A Simulation with a "Cellular Automaton" for Turbulent Combustion Modelling*. In: *Twenty-Second Symposium (International) on Combustion*, Seiten 569–577, University of Washington, Seattle, USA, 1988. The Combustion Institute, Pittsburgh, PA.
- [196] SÁNCHEZ, A. L., A. LÉPINETTE, M. BOLLIG, A. LINÑAN und B. LÁZARO: *The Reduced Kinetic Description of Lean Premixed Combustion*. Combustion and Flame, 123(4):436–464, 2000.
- [197] SCHADE, H. und E. KUNZ: *Strömungslehre*. Walter de Gruyter, Berlin/New York, 1989.
- [198] SCHMID, H. P.: *Ein Verbrennungsmodell zur Beschreibung der Wärmefreisetzung von vorgemischten turbulenten Flammen*. Doktorarbeit, Engler-Bunte-Institut, Bereich Verbrennungstechnik, Universität Karlsruhe (TH), Karlsruhe, Germany, 1995.
- [199] SCHMIDT, D.: *Modellierung reaktiver Strömungen unter Verwendung automatisch reduzierter Reaktionsmechanismen*. Doktorarbeit, Institut für wissenschaftliches Rechnen, Universität Heidelberg, 1996.

- [200] SCHREIBER, M., A. SADAT SAKAK, A. LINGENS und J. F. GRIFFITHS: *A Reduced Thermokinetic Model for the Autoignition of Fuels with Variable Octane Ratings*. In: *Twenty-Fifth Symposium (International) on Combustion*, Seiten 933–940, University of California, Irvine, USA, 1994. The Combustion Institute, Pittsburgh, PA.
- [201] SCHUNK, C.: *Experimentelle Untersuchungen zum Strömungs-, Konzentrations und Temperaturfeld von turbulenten Bunsenflammen*. Diplomarbeit, Engler-Bunte-Institut, Bereich Verbrennungstechnik, Universität Karlsruhe (TH), Karlsruhe, Germany, 1996.
- [202] SEMENOV, N. N.: *Thermal Theory of Combustion and Explosion III. Theory of Normal Flame Propagation*. NACA Technical Memorandum 1026, National Advisory Committee for Aeronautics, Langley Field, Va., 1942. English Translation from Progress of Physical Science (U.S.S.R.), Vol. 25, No. 4, 1940.
- [203] SESHADRI, K.: *Multistep Asymptotic Analyses of Flame Structures*. In: *Twenty-Sixth Symposium (International) on Combustion*, Seiten 831–846, University of Naples, Italy, 1996. The Combustion Institute, Pittsburgh, PA.
- [204] SESHADRI, K. und N. PETERS: *The Inner Structure of Methane-Air Flames*. *Combustion and Flame*, 81:96–118, 1990.
- [205] SHCHELKIN, K. I.: *Combustion in Turbulent Flow*. NACA Technical Memorandum 1112, National Advisory Committee for Aeronautics, Langley Field, Va., 1947. English Translation from Zhurnal Tekhnicheskoi Fiziki Vol. 13, 1940.
- [206] SHEPHERD, I. G., J. B. MOSS und K. N. C. BRAY: *Turbulent Transport in Confined Premixed Flame*. In: *Nineteenth Symposium (International) on Combustion*, Seiten 423–431, Technion-Israel Institute of Technology, Haifa, Israel, 1982. The Combustion Institute, Pittsburgh, PA.
- [207] SMITH, G., D. GOLDEN, M. FRENKLACH, N. MORIARTY, B. EITENEER, M. GOLDENBERG, C. T. BOWMAN, R. H. HANSON, S. SONG, W. C. GARDINER, JR., V. LISSIANSKI und Z. QIN: *GRI-Mech 3.0*. Berkeley University, 2000.
- [208] SMOOKE, M. D. (Herausgeber): *Reduced Kinetic Mechanisms and Asymptotic Approximations for Methane-Air Flames*, Band 384 der Reihe *Lecture Notes in Physics*. Springer Verlag, Berlin/Heidelberg, 1991.
- [209] SPALDING, D. B.: *Mixing and Chemical Reaction in Steady Confined Turbulent Flames*. In: *Thirteenth Symposium (International) on Combustion*, Seiten 649–657, University of Utah, USA, 1971. The Combustion Institute, Pittsburgh, PA.
- [210] SPALDING, D. B.: *Development of the Eddy-break-Up Model of Turbulent Combustion*. In: *Sixteenth Symposium (International) on Combustion*, Seiten 1657–1663, Massachusetts Institute of Technology, USA, 1976. The Combustion Institute, Pittsburgh, PA.
- [211] SPEZIALE, C. G.: *A Review of Reynolds Stress Turbulence Closures for Turbulent Shear Flows*. ICASE Report 95-15, Institute for Computer Application in Science and Engineering, NASA Langley Research Center, 1995.

- [212] SPEZIALE, C. G., S. SARKAR und T. B. GATSKI: *Modelling the Pressure-Strain Correlation of Turbulence*. Journal of Fluid Mechanics, 227:245–272, 1991.
- [213] STEPHAN, K. und F. MAYINGER: *Thermodynamik, Band 1: Einstoffsysteme*. Springer Verlag, Berlin/Heidelberg, 1992.
- [214] STEPHAN, K. und F. MAYINGER: *Thermodynamik, Band 2: Mehrstoffsysteme und chemische Reaktion*. Springer Verlag, Berlin/Heidelberg, 1992.
- [215] SULL, D. R. und H. PROPHET: *JANAF Thermochemical Tables, 2nd edition*. National Bureau of Standards, Washington, D.C., 1971.
- [216] SUNG, C. J. und C. K. LAW: *On the Nonlinear Response of Stretched Premixed Flames*. Combustion and Flame, 121:236–248, 2000.
- [217] TAYLOR, G. I.: *The Spectrum of Turbulence*. Proceedings of the Royal Society of London, A151:421–454, 1935.
- [218] TENNEKES, H. und J. L. LUMLEY: *A First Course in Turbulence*. The MIT Press, Cambridge, Massachusetts, 1972.
- [219] THEISEN, J.: *Modellierung der Turbulenz-Chemie-Interaktion in technischen Brennkammern*. Doktorarbeit, Fakultät für Luft- und Raumfahrttechnik, Universität Stuttgart, 2000.
- [220] TOMLIN, A., T. TURANYI und M. PILLING: *Mathematical Tools for the Construction, Investigation and Reduction of Combustion Mechanisms*. In: PILLING, M. J. und G. HANCOCK (Herausgeber): *Low Temperature Combustion and Autoignition*, Seiten 293–437, Amsterdam, 1997. Elsevier Science B.V.
- [221] TROUVÉ, A. und T. POINSOT: *The Evolution Equation for the Flame Surface Density in Turbulent Premixed Combustion*. Journal of Fluid Mechanics, 287:1–31, 1994.
- [222] VERVISCH, L., E. BIDAUX, K. N. C. BRAY und W. KOLLMANN: *Surface density function in premixed turbulent combustion modeling, similarities between probability density function and flame surface approaches*. Physics of Fluids, 7:2496–2503, 1995.
- [223] VEYNANTE, D., F. LACAS, E. MAISTRET und S. M. CANDEL: *Coherent Flame Model for Non-Uniformly Premixed Turbulent Flames*. In: *Turbulent Shear Flows 7*, Seiten 367–378, Berlin/Heidelberg, 1991. Springer Verlag.
- [224] VEYNANTE, D., J. PIANA, J. M. DUCLOS und C. MARTEL: *Experimental Analysis of Surface Density Models for Premixed Turbulent Combustion*. In: *Twenty-Sixth Symposium (International) on Combustion*, Seiten 413–420, University of Naples, Italy, 1996. The Combustion Institute, Pittsburgh, PA.
- [225] VEYNANTE, D., A. TROUVÉ, K. N. C. BRAY und T. MANTEL: *Gradient and Counter-Gradient Scalar Transport in Turbulent Premixed Flames*. Journal of Fluid Mechanics, 332:263–293, 1997.
- [226] VEYNANTE, D. und L. VERVISCH: *Turbulent Combustion Modeling*. Progress in Energy and Combustion Science, 00:000–000, 2001.

- [227] WALLESTEN, J., A. N. LIPATNIKOV und J. NISBET: *Turbulent Flame Speed Closure Model: Further Development and Implementation for 3-D Simulation of Combustion in SI Engine*. Society of Automotive Engineers, Inc.; 98FL-404, 1998.
- [228] WARNATZ, J.: *The Mechanism of High Temperature Combustion of Propane and Butane*. Combustion Science and Technology, 34:177–200, 1983.
- [229] WARNATZ, J.: *Chemistry of High Temperature Combustion of Alkanes up to Octane*. In: *Twentieth Symposium (International) on Combustion*, Seiten 845–856, University of Michigan, USA, 1984. The Combustion Institute, Pittsburgh, PA.
- [230] WARNATZ, J.: *Rate coefficients in the C/H/O system*. In: GARDINER, JR., W. C. (Herausgeber): *Combustion Chemistry*, Lecture Notes in Physics, Seiten 197–360. Springer Verlag, Berlin/Heidelberg, 1984.
- [231] WARNATZ, J. und U. MAAS: *Technische Verbrennung*. Springer Verlag, Berlin/Heidelberg, 1993.
- [232] WELLER, H. G.: *The Development of a New Flame Area Combustion Model Using Conditional Averaging*. Thermo-Fluids Section Report TF/9307, Department of Mechanical Engineering, Imperial College of Science Technology and Medicine, 1993.
- [233] WELLER, H. G., C. J. MAROONEY und A. D. GOSMAN: *A New Spectral Method for Calculation of the Time-Varying Area of a Laminar Flame in Homogenous Turbulence*. In: *Twenty-Third Symposium (International) on Combustion*, University of Orleans, France, 1990. The Combustion Institute, Pittsburgh, PA.
- [234] WESTBROOK, C. K. und F. L. DRYER: *Simplified Reaction Mechanism for the Oxidation of Hydrocarbon Fuels in Flames*. Combustion Science and Technology, 27:31–43, 1981.
- [235] WESTBROOK, C. K. und F. L. DRYER: *Chemical Kinetic Modeling of Hydrocarbon Combustion*. Progress in Energy and Combustion Science, 10:1–57, 1984.
- [236] WILCOX, D. C.: *Turbulence Modeling for CFD (2nd Edition)*. DCW Industries, 1998.
- [237] WILLIAMS, F. A.: *A Review of Some Theoretical Considerations of Turbulent Flame Structure*. In: BARRÈRE, M. (Herausgeber): *Analytical and Numerical Methods for Investigations of Flow Fields with Chemical Reactions, Especially Related to Combustion*, Band 164 der Reihe AGARD Conference Proceedings, Seiten III–III–25, Paris, 1975. AGARD.
- [238] WILLIAMS, F. A.: *Combustion Theory*. Addison-Wesley Publishing Company, 1988.
- [239] WILLIAMS, F. A.: *Progress in Knowledge of Flamelet Structure and Extinction*. Progress in Energy and Combustion Science, 26:657–682, 2000.
- [240] YAKHOT, V.: *Propagation Velocity of Premixed Turbulent Flames*. Combustion Science and Technology, 60:191–214, 1989.

- [241] YEUNG, P. K., S. S. GIRIMAJI und S. B. POPE: *Straining and Scalar Dissipation on Material Surfaces in Turbulence: Implications on Flamelets*. Combustion and Flame, 79:340–365, 1990.
- [242] ZAJADATZ, M.: *N. N. Doktorarbeit*, Engler-Bunte-Institut, Bereich Verbrennungstechnik, Universität Karlsruhe (TH), Karlsruhe, Germany, 2003 (eingereicht).
- [243] ZEMAN, O. und J. L. LUMLEY: *Modeling Bouyancy-Driven Mixed Layers*. J-JATS, 33:1974–1988, 1976.
- [244] ZIEGLER, M.: *Untersuchungen zur Ausbreitung stationärer, turbulenter Vormischverbrennung unter besonderer Berücksichtigung bevorzugter Diffusion*. Doktorarbeit, Engler-Bunte-Institut, Bereich Verbrennungstechnik, Universität Karlsruhe (TH), Karlsruhe, Germany, 1998.
- [245] ZIMONT, V., W. POLIFKE, M. BETTELINI und W. WEISENSTEIN: *An Efficient Computational Model for Premixed Turbulent Combustion at High Reynolds Numbers Based on a Turbulent Flame Speed Closure (97-GT-395)*. Journal of Engineering for Gas Turbines and Power, 120:526–532, 1998.

Anhang A

Reaktionsmechanismen

A.1 Detaillierter Reaktionsmechanismus

Nr.	Reaktion	A [mol-cm-s-K]	b	T_A [K]
1.	H+O2 \rightleftharpoons OH+O	2.000E+014	0.	8.45E+003
2.	O+H2 \rightleftharpoons OH+H	1.800E+010	1.0	4.44E+003
3.	OH+H2 \rightleftharpoons H2O+H	1.170E+009	1.3	1.82E+003
4.	2OH \rightleftharpoons O+H2O	6.000E+008	1.3	0.
5.	H+O2+M \rightleftharpoons HO2+M	2.300E+018	-0.80	0.
	CH4 -6.500, O2 -0.400, H2O -6.500, CO2 -1.500, H2 -1.000, CO -0.750, N2 -0.400			
6.	H+HO2 \rightleftharpoons 2OH	1.500E+014	0.	5.05E+002
7.	H+HO2 \rightleftharpoons H2+O2	2.500E+013	0.	3.52E+002
8.	OH+HO2 \rightleftharpoons H2O+O2	2.000E+013	0.	5.03E+002
9.	CO+OH \rightleftharpoons CO2+H	1.510E+007	1.3	-3.81E+002
10.	H+CH3(+M) \rightleftharpoons CH4(+M)	6.300E+014	0.	5.23E+004
		1.350E+024	-2.57	7.17E+002
	$\alpha=0.7824, T^{***}=271.0000, T^*=2755.0000, T^{**}=6570.0000$			
11.	CH4+H \rightleftharpoons CH3+H2	2.200E+004	3.0	4.40E+003
12.	CH4+OH \rightleftharpoons CH3+H2O	1.600E+006	2.1	1.24E+003
13.	CH3+O \rightleftharpoons CH2O+H	6.800E+013	0.	0.
14.	CH2O+H \rightleftharpoons HCO+H2	2.500E+013	0.	2.01E+003
15.	CH2O+OH \rightleftharpoons HCO+H2O	3.000E+013	0.	6.01E+002
16.	HCO+H \rightleftharpoons CO+H2	4.000E+013	0.	0.
17.	HCO+M \rightleftharpoons H+CO+M	1.600E+014	0.	7.40E+003
18.	CH3+O2 \rightleftharpoons CH3O+O	7.000E+012	0.	1.29E+004
19.	CH3O+H \rightleftharpoons CH2O+H2	2.000E+013	0.	0.
20.	CH3O+M \rightleftharpoons CH2O+H+M	2.400E+013	0.	1.45E+004
21.	2HO2 \rightleftharpoons H2O2+O2	2.000E+012	0.	0.
22.	H2O2+M \rightleftharpoons 2OH+M	1.300E+017	0.	2.29E+004
23.	H2O2+OH \rightleftharpoons H2O+HO2	1.000E+013	0.	9.06E+002
24.	H+OH+M \rightleftharpoons H2O+M	2.200E+022	-2.0	0.
	CH4 -6.500, O2 -0.400, H2O -6.500, CO2 -1.500, H2 -1.000, CO -0.750, N2 -0.400			
25.	2H+M \rightleftharpoons H2+M	1.000E+018	-1.0	0.
	CH4 -6.500, O2 -0.400, H2O -6.500, CO2 -1.500, H2 -1.000, CO -0.750, N2 -0.400			

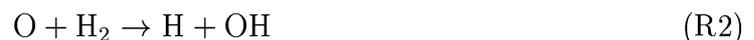
A.2 Reduzierte Kinetiken der Methanverbrennung

A.2.1 Der 4-Schritt Mechanismus

Grundlage der reduzierten Kinetiken, die in diesem und den folgenden Unterkapiteln vorgestellt werden, ist der sequentielle Ablauf der Kohlenwasserstoffoxidation [235, 228, 229]. Insbesondere für den Bereich der mageren Verbrennung läßt sich der Reaktionsablauf auf einen Hauptreaktionspfad reduzieren (siehe Abbildung 2.5). Der umfassende detaillierte Mechanismus kann daher auf einen so genannten „Rumpfmechanismus“ reduziert werden. Grundlage hierfür sind Sensitivitätsanalysen des detaillierten Mechanismus, um die Relevanz der einzelnen Elementarreaktionen beurteilen zu können. Der Rumpfmechanismus beinhaltet nur noch diejenigen Reaktionen, die die charakteristischen Eigenschaften wie Flammengeschwindigkeit oder Zündverzugszeit maßgeblich bestimmen. Außerdem können mit Hilfe dieser Sensitivitätsanalysen die chemischen Zeitskalen bestimmt, und somit die geschwindigkeitsbestimmenden Reaktionen identifiziert werden. Untersuchungen verschiedener Autoren [16, 161] haben gezeigt, daß zur korrekten Wiedergabe der Flammengeschwindigkeit über den relevanten Mischungsbruchraum und für Drücke bis zu 40bar etwa 50 Elementarreaktionen benötigt werden. Für magere Vormischflammen konnte ein Rumpfmechanismus bestehend aus 25 Reaktionen identifiziert werden, mit dem sich der Verlauf der Flammengeschwindigkeit hinreichend genau beschreiben läßt. Die Reaktionen, die maßgeblich den Abbau von Methan beschreiben sind [169]:



Die bedeutendsten Kettenreaktionen können zu



bestimmt werden, wobei der Reaktion (1) aufgrund ihrer großen Sensitivität für Flammenrechnungen besondere Bedeutung zukommt [230].

Die folgenden Reaktionen reichen in erster Näherung aus, um den Kettenabbruch wiederzugeben:

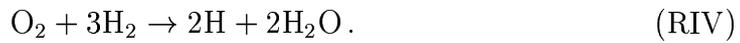
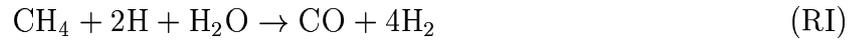


Der abschließende Schritt der CO-Oxidation läßt sich mit Hilfe der beiden Kettenverzweigungsreaktionen beschreiben:



Mit Hilfe von Quasistationaritätsannahmen für die Zwischenprodukte CH_3 , CH_2O und HCO sowie HO_2 , O und OH lassen sich durch Addition der einzelnen Reaktionsketten

die folgenden vier Globalreaktionen gewinnen:



Dieser Reaktionsmechanismus vermittelt das folgende Bild vom Ablauf der Methanverbrennung: Der Brennstoff reagiert in einem ersten Schritt (I) zu Kohlenmonoxid und Wasserstoff, wobei in der Summe gesehen auch zwei Wasserstoffatome rekombinieren. Das dadurch gebildete CO wird gemäß Reaktion (II) zu Kohlendioxid umgesetzt, während der durch die Reaktionen (I), (II) und (III) gebildete Wasserstoff gemäß der Bruttoreaktion (IV) oxidiert wird. Die Radikale werden in diesem Reaktionsschema nur noch durch das Wasserstoffatom repräsentiert, da für alle anderen Radikale bzw. Atome ein stationärer Zustand angenommen wird. Die geschwindigkeitsbestimmenden Reaktionen jeder Kette sind die jeweils langsamsten Reaktionen, d.h. (11), (10), (5) und (1). Die bisher nicht berücksichtigten Reaktionen sind vornehmlich Parallelreaktionen. Ihre Bedeutung für die globalen Reaktionsraten $q_{\text{I}}-q_{\text{IV}}$ kann entweder auf der Basis von Sensitivitätsanalysen oder durch direkten Vergleich der jeweiligen Elementarreaktionen festgestellt werden [162]. Diese Analysen führen auf die folgenden globalen Reaktionsraten:

$$\begin{aligned} q_{\text{I}} &= q_{11} + q_{12} + q_{13} \\ q_{\text{II}} &= q_{10} \\ q_{\text{III}} &= q_5 - q_{10} + q_{16} - q_{18} + q_{19} - q_{21} + q_{23} + q_{24} + q_{25} \\ q_{\text{IV}} &= q_1 + q_6 + q_{18} + q_{21} - q_{23} . \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

Das Gleichungssystem, welches die Änderung der Spezieskonzentrationen beschreibt, lautet somit:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{\text{CH}_4}(Y_{\text{CH}_4}) &= -q_{\text{I}} \\ \mathcal{L}_{\text{O}_2}(Y_{\text{O}_2}) &= -q_{\text{IV}} \\ \mathcal{L}_{\text{H}_2}(Y_{\text{H}_2}) &= 4q_{\text{I}} + q_{\text{II}} + q_{\text{III}} + 3q_{\text{IV}} \\ \mathcal{L}_{\text{CO}}(Y_{\text{CO}}) &= q_{\text{I}} - q_{\text{II}} \\ \mathcal{L}_{\text{H}_2\text{O}}(Y_{\text{H}_2\text{O}}) &= -q_{\text{I}} - q_{\text{II}} + 2q_{\text{III}} \\ \mathcal{L}_{\text{CO}_2}(Y_{\text{CO}_2}) &= q_{\text{II}} \\ \mathcal{L}_{\text{H}}(Y_{\text{H}}) &= -2q_{\text{I}} - 2q_{\text{III}} + 2q_{\text{IV}} , \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

wobei \mathcal{L}_i den Transportoperator für das betrachtete System darstellt. Während die stöchiometrischen Koeffizienten durch die Bruttoreaktionen (RI)–(RIV) bzw. durch das Gleichungssystem (A.2) gegeben sind, werden die globalen Raten $q_{\text{I}}-q_{\text{IV}}$ durch die Reaktionsgeschwindigkeiten der Elementarreaktionen gemäß Gleichung (A.1) beschrieben. Die Konzentrationen der hierfür notwendigen, als stationär angesetzten Radikale müssen mit Hilfe algebraischer Gleichungen bestimmt werden.

A.2.2 Der 3-Schritt Mechanismus

Unter der Annahme, daß sich die Wasserstoffatome in einem quasistationären Zustand befinden, läßt sich die Reaktion (IV) aus dem obigen Gleichungssystem eliminieren:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{L}_{\text{CH}_4}(Y_{\text{CH}_4}) &= -q_{\text{I}} \\
 \mathcal{L}_{\text{O}_2}(Y_{\text{O}_2}) &= -q_{\text{I}} - 2q_{\text{III}} \\
 \mathcal{L}_{\text{H}_2}(Y_{\text{H}_2}) &= q_{\text{I}} + q_{\text{II}} - 2q_{\text{III}} \\
 \mathcal{L}_{\text{CO}}(Y_{\text{CO}}) &= q_{\text{I}} - q_{\text{II}} \\
 \mathcal{L}_{\text{H}_2\text{O}}(Y_{\text{H}_2\text{O}}) &= -q_{\text{I}} - q_{\text{II}} + 2q_{\text{III}} \\
 \mathcal{L}_{\text{CO}_2}(Y_{\text{CO}_2}) &= q_{\text{II}} \\
 \mathcal{L}_{\text{H}}(Y_{\text{H}}) &= -2q_{\text{I}} - 2q_{\text{II}} + 2q_{\text{IV}}.
 \end{aligned} \tag{A.3}$$

Unter Verwendung der sich daraus ableitenden stöchiometrischen Koeffizienten läßt sich der folgende 3-Schritt Mechanismus aufstellen:



Wenn der Brennstoff vollständig abgebaut ist, gilt $q_{\text{I}} = 0$, und die Konzentration der Wasserstoffatome läßt sich aus

$$q_{\text{III}} = q_{\text{IV}}, \tag{A.4}$$

berechnen. Da nun auch die Elementarreaktionen der C₁-Kette (R11–R20) keine Rolle spielen, gilt:

$$q_5 = q_1 + q_6. \tag{A.5}$$

Unter Ausnutzung der analytischen Ausdrücke für die Konzentrationen der quasistationären Spezies

$$C_{\text{OH},eq} = \frac{C_{\text{H}_2\text{O}}C_{\text{H}}}{K_3C_{\text{H}_2}} = \gamma C_{\text{H}} \tag{A.6}$$

$$C_{\text{O},eq} = \frac{C_{\text{H}_2\text{O}}C_{\text{H}}^2}{K_2K_3C_{\text{H}_2}^2} = \frac{1}{K_2}\gamma \frac{C_{\text{H}}^2}{C_{\text{H}_2}} \tag{A.7}$$

$$C_{\text{HO}_2} = \frac{k_{5f}C_{\text{M}}C_{\text{O}_2}}{k_6 + k_7 + k_8 + k_9\gamma}, \tag{A.8}$$

läßt sich eine Gleichung dritten Grades für die Konzentration der Wasserstoffatome ableiten:

$$C_{\text{H}}^3 \left(k'_{1b} \frac{C_{\text{H}_2\text{O}}^2}{C_{\text{H}_2}^3} \right) + C_{\text{H}} (k_{5f}C_{\text{M}}C_{\text{O}_2} - k'_{5b}C_{\text{M}}^2C_{\text{O}_2} - k_{1f}C_{\text{O}_2}) - k'_{5b}C_{\text{M}}^2C_{\text{O}_2} = 0. \tag{A.9}$$

Für die modifizierten Geschwindigkeitskoeffizienten in Gleichung (A.9) gilt:

$$k'_{1b} = \frac{k_{1b}}{K_2K_3^2} \tag{A.10a}$$

$$k'_{5b} = \frac{k_{5f}k_{5b}}{k_6 + k_7 + k_8 + k_9\gamma} \tag{A.10b}$$

$$k'_{6f} = \frac{k_{5f}k_{6f}}{k_6 + k_7 + k_8 + k_9\gamma}. \tag{A.10c}$$

Die Gleichungen (A.6) und (A.7) basieren auf der Annahme, daß sich die Reaktionen (2) und (3) im partiellen Gleichgewicht befinden. Verbesserte Ausdrücke für die Konzentrationen des Hydroxylradikals und des Sauerstoffatoms lassen sich auf Basis von Quasistationaritätsannahmen ableiten, wobei nur die Reaktionen (1)–(4) berücksichtigt werden.

$$C_{\text{OH}} = \frac{k_{3b}C_{\text{H}_2\text{O}}C_{\text{H}} + k_{1f}C_{\text{H}}C_{\text{O}_2}}{k_{3f}C_{\text{H}_2} + k_{1b}K_4\gamma^2C_{\text{H}}^2/C_{\text{H}_2\text{O}}} \quad (\text{A.11})$$

$$C_{\text{O}} = \frac{k_{1f}C_{\text{O}_2}C_{\text{H}} + (k_{2b}\gamma + k_{4f}\gamma^2)C_{\text{H}}^2}{k_{2f}C_{\text{H}_2} + k_{4b}C_{\text{H}_2\text{O}} + k_{1b}\gamma C_{\text{H}}} \quad (\text{A.12})$$

Für die gesuchte Wasserstoffkonzentration ergibt sich damit eine Gleichung dritter Ordnung, die iterativ gelöst werden kann:

$$C_{\text{H}}^3(AB) + C_{\text{H}}^2(AC) + C_{\text{H}}(D[C - E] - AF) - CF = 0. \quad (\text{A.13})$$

Die Koeffizienten A – F aus Gleichung(A.13) berechnen sich wie folgt:

$$A = k_{1b}\gamma \quad (\text{A.14a})$$

$$B = k_{2b}\gamma + k_{4f}\gamma^2 \quad (\text{A.14b})$$

$$C = (k_{5f} - k'_{6f})C_{\text{M}}C_{\text{O}_2} \quad (\text{A.14c})$$

$$D = k_{2f}C_{\text{H}_2} + k_{4b}C_{\text{H}_2\text{O}} \quad (\text{A.14d})$$

$$E = k_{1f}C_{\text{O}_2} \quad (\text{A.14e})$$

$$F = k'_{5b}C_{\text{O}_2}C_{\text{M}}^2. \quad (\text{A.14f})$$

A.2.3 2-Schritt Mechanismen für die magere Verbrennung

Der obige 3-Schritt Mechanismus läßt sich auf einen 2-Schritt Mechanismus reduzieren, indem entweder von der Quasistationarität des Wasserstoffs ausgegangen oder eine Beziehung zwischen den beiden Zwischenprodukten CO und H₂ angenommen wird. Eine Aussage über diese beiden Fälle läßt sich treffen, indem man die Produktionsraten der beiden Zwischenprodukte betrachtet:

$$\dot{\omega}_{\text{CO}} = -q_{\text{II}} \quad (\text{A.15})$$

$$\dot{\omega}_{\text{H}_2} = q_{\text{II}} - 2q_{\text{III}}. \quad (\text{A.16})$$

Die beiden globalen Reaktionsraten q_{II} und q_{III} lassen sich auch wie folgt schreiben:

$$\begin{aligned} q_{\text{II}} &= k_{10f}C_{\text{CO}}C_{\text{OH}} - k_{10b}C_{\text{CO}_2}C_{\text{H}} \\ &= \frac{k_{10f}}{K_3} \frac{C_{\text{H}}}{C_{\text{H}_2}} \left(C_{\text{CO}}C_{\text{H}_2\text{O}} - \frac{1}{K_{\text{II}}}C_{\text{CO}_2}C_{\text{H}_2} \right) \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

$$\begin{aligned} q_{\text{III}} &= k_{5f}C_{\text{H}}C_{\text{O}_2}C_{\text{M}} - 2k_{5b}C_{\text{HO}_2}C_{\text{M}} \\ &= k_{5f}C_{\text{M}} \frac{C_{\text{H}}}{C_{\text{H}_2}^3} \left(C_{\text{H}_2}^2C_{\text{O}_2} - \frac{1}{K_{\text{IV}}}C_{\text{H}}^2C_{\text{H}_2\text{O}}^2 \right). \end{aligned} \quad (\text{A.18})$$

Hierbei bezeichnen K_{II} und K_{IV} die Gleichgewichtskonstanten der globalen Reaktionen (II) und (IV).

Fall 1: Partielles Gleichgewicht der Wassergasreaktion

Nähert sich die Wassergasreaktion (II) dem partiellen Gleichgewicht, gilt

$$\left| C_{\text{CO}}C_{\text{H}_2\text{O}} - \frac{1}{K_{\text{II}}}C_{\text{CO}_2}C_{\text{H}_2} \right| \ll 1. \quad (\text{A.19})$$

Da die Rate q_{II} jedoch endlich bleibt, muß der Ausdruck vor der Klammer gegen sehr große Werte streben. Die Rate q_{II} ist somit indefinit und muß aus dem Gleichungssystem eliminiert werden. Die partielle Gleichgewichtsannahme der Reaktion (II) führt auf die gesuchte Kopplungsbedingung der beiden Zwischenprodukte CO und H₂:

$$\alpha = \frac{C_{\text{CO}}}{C_{\text{H}_2}} = \frac{C_{\text{CO}_2}}{C_{\text{H}_2\text{O}}K_{\text{II}}}. \quad (\text{A.20})$$

Mit Hilfe des Parameters α , der das Verhältnis von CO zu H₂ als eine reine Funktion der Temperatur beschreibt, läßt sich das Gleichungssystem (A.3) wie folgt vereinfachen:

$$\mathcal{L}_{\text{H}_2}(Y_{\text{H}_2}) + \mathcal{L}_{\text{CO}}(Y_{\text{CO}}) = 2q_{\text{I}} - 2q_{\text{III}} = \mathcal{L}_{\text{H}_2}(Y_{\text{H}_2} + \beta Y_{\text{H}_2}) \quad (\text{A.21})$$

bzw.

$$\mathcal{L}_{\text{H}_2}(Y_{\text{H}_2}) = \frac{2}{1 + \beta}(q_{\text{I}} - q_{\text{III}}) = q_{\text{I}} + q_{\text{II}} - 2q_{\text{III}}. \quad (\text{A.22})$$

Für die zu eliminierende Reaktionsrate q_{II} gilt damit:

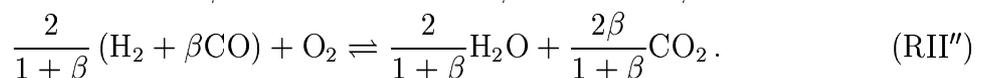
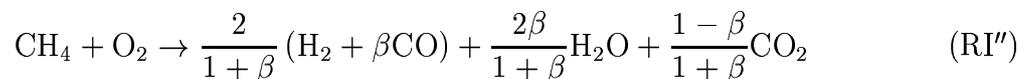
$$q_{\text{II}} = \frac{1 - \beta}{1 + \beta}q_{\text{I}} + \frac{2\beta}{1 + \beta}q_{\text{III}}. \quad (\text{A.23})$$

Die Funktion β beinhaltet dabei neben der Funktion α Informationen über die Transportoperatoren von CO und H₂ (siehe Kapitel 4.2.3).

Unter Verwendung der Beziehung (A.17) läßt sich das Gleichungssystem (A.3) wie folgt anschreiben:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{\text{CH}_4}(Y_{\text{CH}_4}) &= - & q_{\text{I}} \\ \mathcal{L}_{\text{O}_2}(Y_{\text{O}_2}) &= - & q_{\text{I}} & - & q_{\text{III}} \\ \mathcal{L}_{\text{H}_2}(Y_{\text{H}_2}) &= & \frac{2}{1 + \beta}q_{\text{I}} & - & \frac{2}{1 + \beta}q_{\text{III}} \\ \mathcal{L}_{\text{CO}}(Y_{\text{CO}}) &= & \frac{2\beta}{1 + \beta}q_{\text{I}} & - & \frac{2\beta}{1 + \beta}q_{\text{III}} \\ \mathcal{L}_{\text{H}_2\text{O}}(Y_{\text{H}_2\text{O}}) &= & \frac{2\beta}{1 + \beta}q_{\text{I}} & + & \frac{2}{1 + \beta}q_{\text{III}} \\ \mathcal{L}_{\text{CO}_2}(Y_{\text{CO}_2}) &= & \frac{1 - \beta}{1 + \beta}q_{\text{I}} & + & \frac{2\beta}{1 + \beta}q_{\text{III}}, \end{aligned} \quad (\text{A.24})$$

und der folgende 2-Schritt Mechanismus aufstellen:



Mit Hilfe zweier Fortschrittsvariablen, z.B. der Brennstoff- und der Wasserstoffkonzentration sowie bekanntem Mischungsbruch, lassen sich die übrigen fünf Komponenten O_2 , CO , H_2O , CO_2 sowie N_2 bestimmen, und das System ist geschlossen.

Wie Untersuchungen von PETERS, WILLIAMS und SESHADRI [169, 204] gezeigt haben, gilt die Annahme des Wassergasgleichgewichts in der gesamten Ausbrandzone mit Ausnahme einer dünnen Übergangszone. Die Dicke dieser Zone nimmt mit sinkender Luftzahl und steigendem Druck zu, weshalb diese Kinetik nur für magere Flammen anwendbar ist.

Fall 2: Wasserstoff im quasistationären Zustand

Für den Fall, daß die Reaktionsraten q_{II} und q_{III} von der gleichen Größenordnung sind, befindet sich der Wasserstoff in der Ausbrandzone im quasistationären Zustand, da der Term auf der rechten Seite verschwindet, d.h. $\dot{\omega}_{H_2} \approx 0$ gilt. Mit Hilfe dieser Annahme läßt sich die Reaktionsrate q_{III} aus dem Gleichungssystem (A.3) eliminieren, und der 3-Schritt Mechanismus auf einen 2-Schritt Mechanismus reduzieren.

$$\begin{aligned}
 \mathcal{L}_{CH_4}(Y_{CH_4}) &= - q_I \\
 \mathcal{L}_{O_2}(Y_{O_2}) &= \frac{3}{2}q_I - \frac{1}{2}q_{II} \\
 \mathcal{L}_{H_2}(Y_{H_2}) &= q_I + q_{II} + 2q_{III} \\
 \mathcal{L}_{CO}(Y_{CO}) &= q_I - q_{II} \\
 \mathcal{L}_{H_2O}(Y_{H_2O}) &= 2q_I + \\
 \mathcal{L}_{CO_2}(Y_{CO_2}) &= -q_{II}
 \end{aligned} \tag{A.25}$$



Die Konzentration des Wasserstoffs läßt sich, unter Vernachlässigung des Brennstoffabbaus in der Ausbrandzone, mit Hilfe der folgenden Beziehung berechnen:

$$\begin{aligned}
 q_{II} &= 2q_{III} \\
 &= k_{10f}C_{CO}C_{OH} - k_{10b}C_{CO_2}C_H \\
 &= 2k_{5f}C_{O_2}C_H C_M.
 \end{aligned} \tag{A.26}$$

Unter Vernachlässigung der Reaktion (5b) und Ausnutzung der Beziehung für die OH-Radikale folgt aus Gleichung (A.26) die Wasserstoffkonzentration zu

$$C_{H_2} = \frac{k_{10f}C_{CO}C_{H_2O}}{K_3(k_{10b}C_{CO_2} + 2k_{5f})}. \tag{A.27}$$

Diese Ergebnisse bilden die Basis zur analytischen Beschreibung der Flammgeschwindigkeit von PETERS, WILLIAMS, SESHADRI und Mitarbeitern [169, 204, 47, 203]. Aufgrund der Steifheit des Systems läßt es sich dieser Mechanismus jedoch nur bedingt innerhalb herkömmlicher Programme zur Berechnung laminarer Flammen verwenden.

A.3 Einschrittkinetik der Methanverbrennung

Der folgende kinetische Ansatz beschreibt die Verbrennung von Methan gemäß $\text{CH}_4 + 2\text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2 + 2\text{H}_2\text{O}$. Die Konstanten wurden so gewählt, daß die Flammgeschwindigkeit bei einer Luftzahl von $\lambda = 1.45$ wiedergegeben werden.

$$q = 1.1 \cdot 10^{11} \text{cm}^{1.5} / \text{mol}^{0.5} \cdot \text{s} \exp \left[\frac{15000\text{K}}{T} \right] C_{\text{CH}_4} C_{\text{O}_2}^{0.5} \quad (\text{A.28})$$

A.4 Abbildung der adiabaten Verbrennungstemperatur

Die adiabaten Verbrennungstemperaturen sind im Rahmen dieser Arbeit als Funktion der Luftzahl für die jeweilige Vorwärmtemperatur gegeben. Die besten Ergebnisse wurden mit einer logistischen Potenzfunktion erzielt. Diese besitzt die Form

$$T_b(\lambda) = a + \frac{b(1+n)^{-(e+1)/e} n(e+1)^{(e+1)/e}}{e} \quad (\text{A.29})$$

mit dem Funktional n

$$n = \exp((x + d \ln e - c) / d) \quad (\text{A.30})$$

Die fünf Parameter der Funktion können den folgenden Tabellen für die verschiedenen Brennstoffe bzw. Vorwärmtemperaturen entnommen werden.

T_u/K	a/K	b/K	c	d	e
298.15	1336.22	893.17	0.956040	0.13971	3.95831
498.15	1357.57	971.69	0.946932	0.14645	5.13734
698.15	1235.88	1192.67	0.932627	0.14205	8.65922

Tabelle A.2: Parameter der Gleichung (A.29) zur Beschreibung der adiabaten Verbrennungstemperatur von Methan.

T_u/K	a/K	b/K	c	d	e
298.15	1430.58	841.98	0.95212	0.16295	2.92972

Tabelle A.3: Parameter der Gleichung (A.29) zur Beschreibung der adiabaten Verbrennungstemperatur von Propan.

T_u/K	a/K	b/K	c	d	e
469	1185.56	1183.61	0.93075	0.17644	5.30878
496	1197.04	1187.38	0.92897	0.17637	5.46586
534	1209.97	1193.12	0.92659	0.17630	5.68035

Tabelle A.4: Parameter der Gleichung (A.29) zur Beschreibung der adiabaten Verbrennungstemperatur von Jet-A.

A.5 Konstanten der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik

Die folgenden Tabellen geben einen Überblick über die Konstanten der Globalreaktion und den stöchiometrischen Koeffizienten in der Brennstoffabbauzone für die untersuchten Brennstoffe Methan, Propan und Kerosin (Jet-A).

Brennstoff	$B^\circ / \text{cm}^3 \cdot \text{K} / \text{mol} \cdot \text{s}$	T_A / K	n_F	n_{O_2}	n_1
Methan	$1.0 \cdot 10^9$	22850	1	2	0.5
Methan (langsame CO-Ox.)	$1.3 \cdot 10^9$	22850	1	2	0.5
Propan	$1.7 \cdot 10^7$	17220	1	2	1.5
Jet-A	$1.25 \cdot 10^6$	17500	1	2	0.1

Tabelle A.5: Konstanten der Brennstoffabbaureaktion der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik für Methan, Propan und Jet-A.

Brennstoff	ν_{O_2} (konstant)	ν_{O_2} (Funktion)
Methan	-1.5	$-1.5 - 2.536 (1/\phi - 0.5)^{0.074} + 2.246 (T_u/T^\circ)^{0.070}$
Propan	-3.5	$-4.6945 + 1.8966 \cdot \exp[-0.0813/\phi]$
Jet-A	-11.5	

Tabelle A.6: Stöchiometrische Koeffizienten der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik für Methan, Propan und Jet-A. Angegeben sind sowohl der konstante Wert als auch das Funktional.

Anhang B

KPP-Theorem

Im folgenden Abschnitt wird ein einfaches Verfahren vorgestellt, mit dessen Hilfe es möglich ist, Verbrennungsmodelle für die turbulente Vormischverbrennung zu analysieren. Die mathematische Analyse wird nach ihren Autoren KOLMOGOROV, PETROVSKI und PISKUNOV [119] in der Literatur als KPP-Theorem bezeichnet.

Betrachtet wird eine stationäre, eindimensionale, turbulente Flammenfront unter der Voraussetzung eingefrorener Turbulenz, d.h. die turbulente kinetische Energie und die Dissipationsrate ist über die gesamte Flammenfront hinweg konstant. Unter der Annahme, daß der turbulente Transport durch die Flammenfront mit Hilfe eines Gradientenansatzes beschrieben werden kann, gilt für die idealisierte turbulente Vormischflamme:

$$\rho_u S_t \nabla \cdot \tilde{c} = \bar{\rho} \frac{\nu_t}{Sc_c} \nabla^2 \tilde{c} + \bar{w}_c. \quad (\text{B.1})$$

Die Idee des KPP-Theorems besteht in der Suche nach einer exponentiellen Lösung von Gleichung (B.1) für die dem Frischgas zugewandten Flammenfront, d.h für $\tilde{c} \rightarrow 0$. Hierzu wird der Reaktionsquellterm in eine Exponentialreihe entwickelt, und nur Terme erster Ordnung berücksichtigt. Für Modelle, deren turbulente Reaktionsgeschwindigkeit proportional zu $\tilde{c}(1 - \tilde{c})$ ist, führt eine Reihenentwicklung auf

$$\rho_u S_t \nabla \cdot \tilde{c} = \rho_u \frac{\nu_t}{Sc_c} \nabla^2 \tilde{c} + C(\tilde{c} = 0) \rho_u \tilde{c} + \mathcal{O}(\tilde{c}^2) + \dots \quad (\text{B.2})$$

Die Funktion $C(c = 0)$ ist hierbei im Fall des EBU- und BML-Modells proportional zum inversen turbulentem Zeitmaß $1/t_t = \tilde{\varepsilon}/\tilde{k}$. Es läßt sich zeigen [119], daß eine Gleichung der Form (B.2) nur dann eine physikalisch sinnvolle Lösung besitzt, wenn ihre Diskriminante Δ größer oder gleich Null ist:

$$\Delta = S_t^2 - 4C(\tilde{c} = 0) \frac{\nu_t}{Sc_c} \geq 0. \quad (\text{B.3})$$

Das KPP-Theorem zeigt weiterhin, daß die Lösung der Gleichung (B.1) durch die niedrigste der möglichen turbulenten Flammengeschwindigkeiten gegeben ist:

$$S_t = 2 \left(C(\tilde{c} = 0) \frac{\nu_t}{Sc_c} \right)^{1/2}. \quad (\text{B.4})$$

Im Fall der Flammenfrontdichtemodelle muß neben der Transportgleichung für die Reaktionsfortschrittvariable noch die Bilanzgleichung für die Flammenfrontdichte (3.95) berücksichtigt werden:

$$S_t \nabla \cdot \bar{\Sigma} = \frac{\nu_t}{S c_\sigma} \nabla^2 \bar{\Sigma} + K_t \bar{\Sigma} - D \bar{\Sigma}^2 . \quad (\text{B.5})$$

Eine Reihenentwicklung führt dann auf:

$$S_t \nabla \cdot \tilde{c} = \frac{\nu_t}{S c_c} \nabla^2 \tilde{c} + S_l \bar{\Sigma} \quad (\text{B.6})$$

$$S_t \nabla \cdot \bar{\Sigma} = \frac{\nu_t}{S c_\sigma} \nabla^2 \bar{\Sigma} + K_t \bar{\Sigma} - D(c=0) \bar{\Sigma}^2 . \quad (\text{B.7})$$

Die beiden Gleichungen (B.6) und (B.7) müssen nur dann gekoppelt gelöst werden, wenn der Destruktionsterm D , wie im Fall des MB-Modells, proportional zu $1/(\tilde{c}(1-\tilde{c}))$ ist. Für die anderen Modelle ist der Destruktionsterm wegen der Randbedingung $\tilde{c} = 0$ unabhängig von der Reaktionsfortschrittsvariablen, und die turbulente Flammengeschwindigkeit kann mit Hilfe des KPP-Theorems aus Gleichung (B.7) bestimmt werden:

$$S_t = 2 \left(K_t \frac{\nu_t}{S c_c} \right)^{1/2} . \quad (\text{B.8})$$

Für das MB Modell wird für die Flammenfrontoberflächendichte der Ansatz

$$\bar{\Sigma} = A \exp(ax) \quad (\text{B.9})$$

gewählt, und die partikuläre Lösung des Reaktionsfortschritts aus Gleichung (B.6) zu

$$\tilde{c} = \frac{S_l}{a(S_t - \nu_t/S c_c)} A \exp(ax) \quad (\text{B.10})$$

bestimmt. Diese Lösung kann nun zusammen mit dem Ansatz für die Flammenfrontoberflächendichte (B.9) in Gleichung (B.7) eingesetzt werden, und man erhält eine quadratische Gleichung für die Unbekannte a . Daraus läßt sich mit Hilfe des KPP-Theorems die turbulente Flammengeschwindigkeit für das MB-Modell aus der Forderung $\Delta = 0$ bestimmen.

Anhang C

Ableitung der kinematischen Transportgleichung für die Flammenfrontdichte

Das allgemeine Transporttheorem für eine vektorielle Größe bzw. den Fluß $\phi(\mathbf{x}, t)$ über eine materielle Oberfläche $A(\mathbf{x}, t)$ lautet

$$\frac{D}{Dt} \oint_{A(t)} \phi \cdot \mathbf{n} dA = \oint_{A(t)} \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{w} \cdot \nabla \phi - \phi \cdot \nabla \mathbf{w} + \phi \nabla \cdot \mathbf{w} \right) \cdot \mathbf{n} dA \quad (\text{C.1})$$

wobei \mathbf{w} die Geschwindigkeit ist, mit der sich die materielle Fläche fortbewegt. Identifiziert man ϕ mit dem Normalenvektor der Oberfläche \mathbf{n} , folgt

$$\frac{D}{Dt} \oint_{A(t)} dA = \oint_{A(t)} (-\mathbf{n}\mathbf{n} : \nabla \mathbf{w} + \nabla \cdot \mathbf{w}) dA. \quad (\text{C.2})$$

Für ein differentielles Flächenelement δA gilt somit

$$\frac{1}{\delta A} \frac{D(\delta A)}{Dt} = -\mathbf{n}\mathbf{n} : \nabla \mathbf{w} + \nabla \cdot \mathbf{w} \quad (\text{C.3})$$

Der Normalenvektor weist definitionsgemäß in Richtung des unverbrannten Gemischs

$$\mathbf{n} = -\frac{\nabla c}{|\nabla c|} = -\frac{\nabla c}{(\nabla c \cdot \nabla c)^{1/2}}, \quad (\text{C.4})$$

so daß sich das Flächenelement mit der Absolutgeschwindigkeit

$$\mathbf{w} = \mathbf{u} + \mathbf{n} S_F \quad (\text{C.5})$$

in das mit der Geschwindigkeit \mathbf{u} anströmende Frischgemisch ausbreitet. Der Betrag der Relativgeschwindigkeit S_F des Flächenelements ist dabei im allgemeinen nicht mit der Flammengeschwindigkeit S_t^0 identisch. Einsetzen von Gleichung (C.5) in Gleichung (C.3) führt auf den Ausdruck

$$K_A \equiv \frac{1}{\delta A} \frac{D(\delta A)}{Dt} = -\mathbf{n}\mathbf{n} : \nabla \mathbf{u} + \nabla \cdot \mathbf{u} + S_F \nabla \cdot \mathbf{n}, \quad (\text{C.6})$$

der mit der flächenbezogenen Dehnungsrate K_A identisch ist. Der erste Term auf der rechten Seite repräsentiert den normalen Anteil der Dehnungsrate, der zweite den Einfluß der Volumendilatation und der dritte den der Flammenfrontkrümmung

$$\kappa = \nabla \cdot \mathbf{n} = \nabla \cdot \left(\frac{\nabla c}{|\nabla c|} \right). \quad (\text{C.7})$$

Das Reynoldssche Transporttheorem für eine skalare Größe $\phi(\mathbf{x}, t)$ lautet

$$\frac{D}{Dt} \int_{V(t)} \phi dV = \int_{V(t)} \frac{\partial \phi}{\partial t} dV + \oint_{A(t)} \phi \mathbf{w} \cdot \mathbf{n} dA. \quad (\text{C.8})$$

Für $\phi = 1$ erhält man das Transporttheorem für ein materielles Volumen $V(t)$

$$\frac{D}{Dt} \int_{V(t)} dV = \oint_{A(t)} \mathbf{w} \cdot \mathbf{n} dA \quad (\text{C.9})$$

bzw. für ein differentielles Volumenelement δV

$$\frac{1}{\delta V} \frac{D(\delta V)}{Dt} = \nabla \cdot \mathbf{w} = \nabla \cdot \mathbf{w} + S_F \nabla \cdot \mathbf{n} + \mathbf{n} \cdot \nabla S_F. \quad (\text{C.10})$$

Für die Flammenfrontoberfläche gilt definitionsgemäß (Gl. (6.1))

$$\Sigma \equiv \frac{\delta A}{\delta V} \quad (\text{C.11})$$

und somit

$$\frac{1}{\Sigma} \frac{D\Sigma}{Dt} = \frac{\delta V}{\delta A} \frac{\delta V}{(\delta V)^2} \frac{D(\delta A)}{Dt} - \frac{\delta V}{\delta A} \frac{\delta A}{(\delta V)^2} \frac{D(\delta V)}{Dt} = \frac{1}{\delta A} \frac{D(\delta A)}{Dt} - \frac{1}{\delta V} \frac{D(\delta V)}{Dt}. \quad (\text{C.12})$$

Mit den Transportgleichungen für δA und δV folgt schließlich:

$$\frac{1}{\Sigma} \frac{D\Sigma}{Dt} = -\mathbf{n}\mathbf{n} : \nabla \mathbf{u} - \mathbf{n} \cdot \nabla S_F. \quad (\text{C.13})$$

Das vollständige Differential D/Dt beinhaltet die lokale Geschwindigkeit \mathbf{w} der Flammenfront. Unter Berücksichtigung von Gleichung (C.5) läßt sich Transportgleichung der Flammenfrontoberflächendichte Σ auch in Eulerscher Schreibweise darstellen:

$$\frac{\partial \Sigma}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \Sigma = (-\mathbf{n}\mathbf{n} : \nabla \mathbf{u} \Sigma - \mathbf{n} \cdot \nabla S_F) \Sigma. \quad (\text{C.14})$$

Diese Transportgleichung ist unter Annahme einer unendlich dünnen Flammenfront exakt und mit der verallgemeinerten Transportgleichung der Flammenflächendichte (6.6) identisch.

Anhang D

Schlüsselwörter zur Steuerung der Verbrennungsmodelle in TASCflow

Definition des Verbrennungsmodells

Parameter	Vorgabe	Beschreibung
COMBUSTION_FSD		<i>Logischer</i> Wert. Wählt ein Flammenfrontoberflächendichtemodell. Das Modell erfordert die Definition von zwei Transportgleichungen für Skalare mit der Bezeichnung CMEAN bzw. FSD. Außerdem müssen die Regionen COMBUSTION und FSD-SOURCE definiert sein. Der Reaktionsquellterm wird nur innerhalb der Region COMBUSTION auf die Transportgleichung der Reaktionsfortschrittsvariablen angewendet. Die Quell- und Destruktionsterme werden nur für die Region FSD_SOURCE berechnet. Im allgemeinen sollten diese beiden Regionen identisch sein und den gesamte Berechnungsbereich abdecken. Die weiter benötigten Parameter sind weiter unten aufgeführt.
COMBUSTION_CPDF		<i>Logischer</i> Wert. Wählt ein <i>c</i> -Pdf Verbrennungsmodell. Das Modell erfordert die Definition von zwei Transportgleichungen für Skalare mit der Bezeichnungen für Skalare CMEAN und CVAR. Außerdem muß die Region COMBUSTION definiert sein. Der Reaktionsquellterm wird nur innerhalb der Region COMBUSTION auf die Transportgleichung der Reaktionsfortschrittsvariablen angewendet. Die weiter benötigten Parameter sind weiter unten aufgeführt.

Problemdefinition

Parameter	Vorgabe	Beschreibung
ADIABATIC	true	<i>Logischer</i> Wert. Wählt zwischen adiabater und nicht-adiabater Berechnung. Zur Zeit ist kein adiabates Modell implementiert.
DILUTION		<i>Logischer</i> Wert. Wählt zwischen vorgemischt und teilvorgemischter Verbrennung. Die dem Mischungsmodell zugrunde liegenden Gleichungen sind in den Abschnitten 5.4 und 6.5 erläutert. Dieses Modell erwartet weitere Schlüsselwörter, die weiter unten aufgeführt sind.

Parameter der Flammenfrontoberflächendichtemodelle

Parameter	Vorgabe	Beschreibung
NPHI_CMEAN		<i>Integer</i> -Wert. Setzt den Transportgleichungsindex der Reaktionsfortschrittsvariablen.
NPHI_FSD		<i>Integer</i> -Wert. Setzt den Transportgleichungsindex der Flammenfrontoberflächendichte.
MIXT_R		<i>Real</i> -Wert. Setzt den Brennstoffmassenbruch $Y_{F,u} = (Z_C + Z_H)_R$ des Frischgemischs. Die Mischungsbruchvariable f wird mit MIXT_R normiert. Deshalb muß MIXT_R den maximal auftretenden Wert des Elementmassenbruchs $(Z_C + Z_H)$ im Rechenfeld besitzen.
DENS_R		<i>Real</i> -Wert. Dichte des Frischgemischs. Einheit: kg/m^3 .
TEMP_R		<i>Real</i> -Wert. Temperatur des Frischgemischs. Einheit: K.
TEMP_B		<i>Real</i> -Wert. Adiabate Verbrennungstemperatur des Frischgemischs. Einheit: K.

FSD_MODEL	1	<p><i>Integer</i>-Wert. Wählt die Variante des FSD Verbrennungsmodells aus.</p> <p>1 CF-1 Modell; siehe Gleichung (6.72). Erfordert die Modellkonstanten FSD_S1, FSD_S2, FSD_D1 und FSD_D2.</p> <p>2 CF-2 Modell; siehe Gleichung (6.72). Erfordert die Modellkonstanten FSD_S1, FSD_S2, FSD_D1 und FSD_D2.</p> <p>3 CF-3 Modell; siehe Gleichung (6.72). Erfordert die Modellkonstanten FSD_S1, FSD_S2, FSD_D1, FSD_D2 und LF_REF.</p> <p>4 CPB Modell; siehe Gleichung (6.72). Erfordert die Modellkonstanten FSD_S1, FSD_S2, FSD_D1 und FSD_D2.</p> <p>5 MB Modell; siehe Gleichung (6.72). Erfordert die Modellkonstanten FSD_S1, FSD_S2, FSD_D1 und FSD_D2.</p> <p>6 CF-4/5 Modell; siehe Gleichung (6.72). Erfordert die Modellkonstanten FSD_S1, FSD_S2, FSD_S3 , FSD_D1, FSD_D2 und LF_REF.</p>
FSD_CS1	0.44	<i>Real</i> -Wert. Modellkonstante der Dehnungsrate aufgrund der zeitlich mittleren Strömung.
FSD_CS2		<i>Real</i> -Wert. Modellkonstante der turbulenten Dehnungsrate. Für das CF-1 Modell liegen die Werte zwischen 2 und 11. Für das CF-2 und CPB bzw. das MB Modell werden Werte von 0.28 bzw. 0.9 angegeben. Das CF-3 Modell liefert mit einem Wert von 2 gute Ergebnisse. Das CF-4 und CF-5 Modell sollten einen Wert von 1 verwenden.
FSD_CS3		<i>Real</i> -Wert. Modellkonstante für die FSD-Produktion durch des mittleren Konzentrationsgradienten. Das MB-Model berechnet den Wert gemäß Gleichung (6.76). Für das CF-4 sowie CF-5 Modell sollte ein Wert von 1 gewählt werden.
FSD_CD1	1.0	<i>Real</i> -Wert. Modellkonstante des Destruktionsterms. Alle Modelle sollten den Wert zu 1 setzen. Das MB Modell ist eine Ausnahme. Grundlage ist hier die Gleichung ().
FSD_CD2	0.0	<i>Real</i> -Wert. Modellkonstante zur Berücksichtigung der turbulenten Fluktuation im Destruktionsterm. Sollte nur im Fall des MB Modells auf einen von null verschiedenen Wert gesetzt werden.

FSD_CD3	0.5	<i>Real</i> -Wert. Modellkonstante des MB-Modells zur Beschreibung des Einflusses des Geschwindigkeitsverhältnisses u_t/S_l bei der Destruktionsrate. Nach den Autoren des MB Modells ist ein Wert von 0.5 zu wählen.
FLAMESPEED_MODEL	1	<i>Integer</i> -Wert. Wählt das entsprechende Modell zur Beschreibung der laminaren Flammengeschwindigkeit. Der Wert 0 wählt eine konstante Flammgeschwindigkeit, die durch den Parameter SL_REF zu definieren ist. Bei einem Wert 1 wird die Flammgeschwindigkeit auf Basis der Approximation von MÜLLER ET AL. als Funktion der (zeitlich mittleren) lokalen Stöchiometrie, Temperatur und Druck berechnet. Das Modell erfordert einen zusätzlichen Parameter SL_QUEENCH, der die Flammgeschwindigkeit an der mageren Verlöschgrenze beschreibt. Ein Wert von 2 verwendet die gleiche Methodik zur Berechnung der Flammgeschwindigkeit von Propan. Der Wert 100 verwendet die als Funktion der Flammdehnungsrate tabellierten Flammgeschwindigkeiten. Dieses Modell erfordert eine mit dem Präprozessor PrePDF erstellte Tabelle mit dem Dateinamen kpdf.lut und die Definition des Parameters NPHI_STRAIN.
WALLQUENCH	false	<i>Logischer</i> Wert. Wählt das modifizierte FIST-Modell zur Berücksichtigung von wandnahen Effekten auf die Flammenfrontoberflächendichte aus. Wird diese Option auf true gesetzt, so wird die Grenzschicht FSD_INHIBITION und die wandnahe Region FSD_INFLUENCE benötigt. Die Region COMBUSTION muß derart modifiziert werden, daß sie die Regionen FSD_SOURCE und FSD_INHIBITION aber NICHT die Region FSD_INHIBITION enthält. Für weitere Informationen siehe Abschnitt 6.3.
REYNOLDS_AVG	true	<i>Logischer</i> Wert. Wählt zwischen reynolds- und favgemittelter Reaktionsgeschwindigkeit zur Beschreibung der Quell- und Senkenterme der Flammenfrontdichtemodell. Für die kohärenten Flammenfrontmodelle sollte dieser Wert immer auf true gesetzt werden.
C_SMALL	10^{-6}	<i>Real</i> Wert. Entspricht dem kleinen Wert c_δ in Abschnitt 7.2 zur Linearisierung des Quellterms der Reaktionsfortschrittsvariable. Sollte den Wert 10^{-6} besitzen.

Parameter der Flammengeschwindigkeitsmodelle

Parameter	Vorgabe	Beschreibung
SL_REF		<i>Real</i> -Wert. Setzt den Referenzwert der laminaren Flammengeschwindigkeit. Falls der Parameter FLAMESPEED_MODEL auf 0 gesetzt ist, wird eine konstante Flammengeschwindigkeit S_l^0 vorausgesetzt. Einheit: m/s
SL_QUENCH	0.0	<i>Real</i> -Wert. Setzt die Flammengeschwindigkeit an der mageren Verlöschgrenze. Für Kohlenwasserstoff/Luft Gemische liegt dieser Wert bei ca. 0.05m/s. Einheit: m/s.
NPHI_STRAIN		<i>Integer</i> -Wert. Setzt den Transportgleichungsindex der turbulenten Dehnungsrate K_t . Die Transportgleichung für den Skalar mit dem Namen STRAIN muß nur definiert sein, darf aber NICHT gelöst werden, d.h. STRAIN=f.

Parameter des *c*-PDF Modells

Parameter	Vorgabe	Beschreibung
NPHI_CMEAN		<i>Integer</i> -Wert. Setzt den Transportgleichungsindex der Reaktionsfortschrittsvariablen.
NPHI_CVAR		<i>Integer</i> -Wert. Setzt den Transportgleichungsindex der Varianz des Reaktionsfortschritts.
SCHMIDT_CVAR	0.9	<i>Real</i> -Wert. Setzt die Schmidtzahl der Reaktionsfortschrittsvarianz.
MIXT_R		<i>Real</i> -Wert. Setzt den Brennstoffmassenbruch $Y_{F,u} = (Z_C + Z_H)_R$ des Frischgemischs. Die Mischungsbruchvariable f wird mit MIXT_R normiert. Deshalb muß MIXT_R den maximal auftretenden Wert des Elementmassenbruchs $(Z_C + Z_H)$ im Rechenfeld besitzen.
CPDF_MODEL		<i>Integer</i> -Wert. Wählt die Variante des <i>c</i> -PDF Modells aus. 1 CPDF-1 Modell. Berechnet die skalare Dissipationsrate auf Basis der integralen Skalen. 2 CF-2 Modell. Berechnet die skalare Dissipationsrate auf Basis der dissipativen Skalen.
C_CVAR1	2.2	<i>Real</i> -Wert. Modellkonstante des Dissipationsterms der Varianzgleichung.

<code>C_CVAR2</code>		<i>Real</i> -Wert. Modellkonstante der turbulenten Dehnungsrate. Für das CPDF-1 Modell liegen die Werte zwischen 2 und 11. Für das CPDF-2 Modell sollte ein Wert von 0.28 verwendet werden.
<code>STABILIZATION</code>		<i>Logischer</i> Wert. Aktiviert das Stabilisierungsmodell. Erfordert die Definition einer Zone <code>STABILIZATION</code> . Außerdem muß ein passiver Skalar <code>STABIND</code> definiert und gelöst werden. Der Reaktionsquellterm wird mit dem Faktor <code>FSTABI</code> und dem Konzentrationsfeld des Skalars gewichtet und damit entsprechend erhöht.
<code>FSTABI</code>		<i>Real</i> -Wert. Setzt den Wert, um den der Reaktionsquellterm gewichtet mit der Konzentration des Skalars <code>STABIND</code> multipliziert wird.
<code>WALLQUENCH</code>	<code>false</code>	<i>Logischer</i> Wert. Wählt ein simples Quenchmodell zur Beschreibung des Flammenquenchs in Wandnähe. Erfordert die Definition einer wandnahen Zone <code>WALLQUENCH</code> .
<code>FREEZE_REACTION</code>	<code>false</code>	<i>Logischer</i> Wert. Falls gesetzt, wird der Reaktionsquellterm der Reaktionsfortschrittsvariablen nicht berechnet. Kann zum Anrechnen der Varianzgleichung auf <code>true</code> gesetzt werden.
<code>APPLY_CVAR_RATE</code>	<code>true</code>	<i>Logischer</i> Wert. Falls gesetzt wird der Reaktionsquellterm der Varianzgleichung berücksichtigt. Sollte immer auf <code>true</code> gesetzt sein. Falls es beim Anrechnen zu Konvergenzproblemen kommt, diesen Schalter auf <code>false</code> setzen.
<code>DAMP_CVAR_RATE</code>	1.0	<i>Real</i> Wert. Werte kleiner 1 führen zu einer Dämpfung des Reaktionsquellterms der Varianzgleichung. Sollte nur bei Konvergenzproblemen auf Werte kleiner als 1 gesetzt werden.
<code>C_SMALL</code>	10^{-6}	<i>Real</i> Wert. Entspricht dem kleinen Wert c_δ in Abschnitt 7.2 zur Linearisierung des Quellterms der Reaktionsfortschrittsvariable. Sollte den Wert 10^{-6} besitzen.

Parameter des Mischungsmodells

Parameter	Vorgabe	Beschreibung
NPHI_FMEAN		<i>Integer</i> -Wert. Setzt den Transportgleichungsindex der Mischungsbruchvariablen. Dieser Parameter wird nur benötigt, wenn der Parameter DILUTION auf <code>true</code> gesetzt ist. Das Modell erfordert die Lösung eines weiteren Skalars mit dem Namen FMEAN.
MIXT_OX		<i>Real</i> -Wert. Setzt den Elementmassenbruch ($Z_C + Z_H$) des Oxidatorstroms. Dieser Parameter wird nur benötigt, wenn DILUTION auf <code>true</code> gesetzt ist. Die Mischungsbruchvariable f wird mit MIXT_OX normiert, weshalb MIXT_OX den minimalen Wert des Elementmassenbruchs ($Z_C + Z_H$) im Rechenfeld besitzen muß.
NPHI_STRAIN		<i>Real</i> -Wert. Temperatur des einmischenden Stroms. Einheit: K.

Parameter zur Berechnung der Spezieskonzentrationen

Mit Hilfe der folgenden Parameter lassen sich die Massenkonzentrationen während der Strömungssimulation berechnen. Damit ist es prinzipiell möglich, nicht-adiabatische Verbrennungsmodelle zu realisieren, indem die Enthalpiegleichung mit gelöst wird. Von dieser Möglichkeit wurde aber im Rahmen dieser Arbeit kein Gebrauch gemacht. Die Schlüsselwörter sind aber der Vollständigkeit wegen dokumentiert.

Parameter	Vorgabe	Beschreibung
SPECIES_UPDATE	<code>false</code>	<i>Logischer</i> Wert. Kontrolliert die Berechnung der Spezies. Wird dieser Wert auf <code>true</code> gesetzt, werden die Fluideigenschaften auf Basis von Druck, der Temperatur und der Speziesmassenbrüche berechnet. Diese Auswahl setzt voraus, das <code>TMPRE=true</code> und <code>LIBRARY_PROPERTIES=true</code> gesetzt sind. Außerdem müssen alle Felder der zu berechnenden Spezies im <code>bcf</code> -File definiert werden. Sie dürfen aber NICHT gelöst werden, da sie auf Basis des Mischungsbruchs und der Reaktionsfortschrittvariablen z.B. anhand einer 1-Schritt Reaktion berechnet werden.
NPHI_FUEL		<i>Integer</i> -Wert. Setzt den Transportgleichungsindex des Brennstoffs. Wird nur benötigt, wenn <code>SPECIES_UPDATE=true</code> gesetzt ist.
NPHI_OXIDANT		<i>Integer</i> -Wert. Setzt den Transportgleichungsindex des Oxidators. Wird nur benötigt, wenn <code>SPECIES_UPDATE=true</code> gesetzt ist.

NPHI_PRODUCT1		<i>Integer</i> -Wert. Setzt den Transportgleichungsindex des ersten Verbrennungsprodukts. Wird nur benötigt, wenn SPECIES_UPDATE=true gesetzt ist.
NPHI_PRODUCT2		<i>Integer</i> -Wert. Setzt den Transportgleichungsindex des zweiten Verbrennungsprodukts. Wird nur benötigt, wenn SPECIES_UPDATE=true gesetzt ist.
NPHI_INERT		<i>Integer</i> -Wert. Setzt den Transportgleichungsindex des inerten Anteil. Wird nur benötigt, wenn SPECIES_UPDATE=true gesetzt ist.
STOI_FUEL	1.0	<i>Real</i> -Wert. Setzt den molaren stöchiometrischen Koeffizienten des Brennstoff in der Verbrennungsreaktion. Wird nur benötigt, wenn SPECIES_UPDATE=true gesetzt ist.
STOI_OXIDANT		<i>Real</i> -Wert. Setzt den molaren stöchiometrischen Koeffizientendes Oxidators in der VerbrennungsreaktionWird nur benötigt, wenn SPECIES_UPDATE=true gesetzt ist.
STOI_PRODUCT1		<i>Real</i> -Wert. Setzt den molaren stöchiometrischen Koeffizienten des ersten Verbrennungsprodukts in der Verbrennungsreaktion. Wird nur benötigt, wenn SPECIES_UPDATE=true gesetzt ist.
STOI_PRODUCT2		<i>Real</i> -Wert. Setzt den molaren stöchiometrischen Koeffizienten des zweiten Verbrennungsprodukts in der Verbrennungsreaktion. Wird nur benötigt, wenn SPECIES_UPDATE=true gesetzt ist.
FRAC_OXIDANT	0.21	<i>Real</i> -Wert. Setzt den Molenbruch des Oxidators im Verhältnis zum inerten Anteil. Bei den meisten Problemen ist dies der Anteil des Sauerstoffs in der Luft. Wird nur benötigt, wenn SPECIES_UPDATE=true gesetzt ist.

Lebenslauf

Persönliche Daten

Name: Arne B. Hoffmann
Geburtsdatum: 23. 11. 1970
Geburtsort: Karlsruhe

Schulbildung

08/1977–05/1981 Grundschule in Frankenthal/Pfalz.
08/1980–05/1984 Karolinengymnasium in Frankenthal/Pfalz.
08/1984–05/1988 Wilhelmgymnasium in Kassel.
08/1988–05/1990 Karolinengymnasium in Frankenthal/Pfalz.
23.05.1990 Abiturprüfung.

Studium

10/1990–02/1996 Studium des Chemieingenieurwesens an der Universität Karlsruhe (TH).
07/1995–02/1996 Diplomarbeit am Massachusetts Institute of Technology in Boston
als Stipendiat der Ernest-Solvay Stiftung
Thema: "‘Untersuchungen zum Einfluß polyzyklischer aromatischer
Kohlenwasserstoffe (PAK) auf das Rußwachstum in einem Kolben-
strömungsreaktor"'.
19.02.1996 Abschluß als Diplomingenieur.

Tätigkeiten während des Studiums

04/1991–04/1992 Wissenschaftliche Hilfskraft an der DVGW-Forschungsstelle am Engler-
Bunte-Institut, Bereich Wasserchemie.
04/1993–01/1995 Wissenschaftliche Hilfskraft am Lehrstuhl für Feuerungstechnik.
04/1994–07/1994 Wissenschaftliche Hilfskraft am Lehrstuhl Thermische Verfahrenstech-
nik.

Berufstätigkeiten

03/1996-09/2002 Wissenschaftlicher Mitarbeiter am Lehrstuhl für Verbrennungstechnik
des Engler-Bunte-Institutes an der Univeristät Karlsruhe.
seit 09/2002 Entwicklungsingenieur bei der BASF AG in Ludwigshafen.

Mannheim, 28. Dezember 2004