

Simulation vorgemischter Flammen mittels integraler Reaktionszonenmodellierung

Zur Erlangung des akademischen Grades
Doktor der Ingenieurwissenschaften
der Fakultät für Maschinenbau
Karlsruher Institut für Technologie (KIT)

genehmigte
Dissertation
von

Dipl.-Ing. Christian Bruzzese

Tag der mündlichen Prüfung: 6. Dezember 2012

Hauptreferent:

Prof. Dr.-Ing. habil. Andreas G. Class

Korreferenten:

Prof. Dr. rer. nat. habil. Ulrich Maas

o. Prof. Prof. e.h. Dr.-Ing. habil. Herbert Oertel jr.

Vorwort und Danksagung

Die vorliegende Dissertation ist am Institut für Kern- und Energietechnik (IKET) des Karlsruher Institut für Technologie (KIT) unter der Leitung von Prof. Dr.-Ing. Thomas Schulenberg entstanden. Die Arbeit wurde im Rahmen des Sonderforschungsbereichs 606 (Instationäre Verbrennung) von der DFG (Deutsche Forschungsgemeinschaft) unter der Leitung von Prof. Dr.-Ing. Henning Bockhorn gefördert. Hiermit möchte ich bei einigen Personen bedanken:

An erster Stelle möchte ich meiner Familie (groß und klein) Danke sagen, die durch ihre langjährige Unterstützung, ihr Vertrauen und ihre Geduld zur Erstellung dieser Dissertation beigetragen hat.

Bei Herrn Prof. Dr.-Ing. habil. Andreas G. Class möchte ich mich herzlich für die Betreuung der Promotion bedanken. Seine Inspiration für die Kombination verschiedener mathematischer und numerischer Methoden sowie seine Offenheit für neue Lösungsansätze haben zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen.

Herrn Prof. Dr. rer. nat. habil. Ulrich Maas möchte ich für die Übernahme des Korreferats und die Bereitstellung des Codes INSFLA danken. Bei Herrn o. Prof. Prof. e.h. Dr.-Ing. habil. Herbert Oertel jr. möchte ich mich ebenfalls für die Übernahme des Korreferats bedanken. Herrn Prof. Dr.-Ing. Hans-Jörg Bauer danke ich für seine Bereitschaft den Prüfungsvorsitz zu übernehmen.

Herrn Prof. Dr.-Ing. Thomas Schulenberg möchte ich für die Möglichkeit der Promotion am IKET danken.

Den Kolleginnen und Kollegen am IKET danke ich für die freundliche Arbeitsatmosphäre (insbesondere in der Doktorandenkaffeerunde).

Zusammenfassung

In der vorliegenden Arbeit wird ein Ansatz zur Modellierung und Simulation vorge-mischter Flammen entwickelt. Die Modellierung basiert auf einer integralen Beschreibung der Reaktionszone der Flamme und kommt einer strömungsmechanischen Betrachtungsweise entgegen, bei der nur sekundäres Interesse an lokalen reaktionskinetischen Informationen besteht. Der physikalische Modellparameter ist der integrale Verbrauch der limitierenden Spezies.

Zur numerischen Simulation von Flammen basierend auf der integralen Reaktions-zonenmodellierung wird eine Beziehung zwischen dem chemisch definierten integralen Verbrauch der limitierenden Spezies und der hydrodynamischen Massenstromdichte in der Reaktionszone hergeleitet. Die Herleitung geht von der Transportgleichung der li-mitierenden Spezies in einem krummlinigen Koordinatensystem aus, das sich mit der Reaktionszone der Flamme bewegt. Eine Integration dieser Transportgleichung über die Reaktionszone liefert die Beziehung für die Massenstromdichte als Funktion des integra-len Verbrauchs der limitierenden Spezies, der Krümmung und Streckung der Reaktions-zone, der zeitlichen Akkumulation der limitierenden Spezies innerhalb der Reaktionszone und dem integralen diffusiven Transport quer zur Reaktionszone.

Für die Anwendung des integralen Modells wird eine modifizierte Level-Set-Methode verwendet, bei der die Level-Set-Funktion den physikalischen Charakter einer Phasen-feld-Funktion besitzt. Das Modell wird in OpenFOAM® implementiert. Hierbei wird eine Formulierung vorgestellt, die es erlaubt gängige Diskretisierungsverfahren aus Pro-grammen für numerische Strömungssimulation zu verwenden.

Ein erster Validierungsschritt der Beziehung zwischen integralem Verbrauch und Mas-senstromdichte erfolgt anhand der Analyse von Daten einer direkten numerischen Si-mulation einer turbulenten vorgemischten Methan/Luft-Flamme. Eindimensionale Si-mulationen von Methan/Luft-Flammen unter Berücksichtigung detaillierter Transport-prozesse und Chemie motivieren die Modellierung der Massenstromdichte in der Reak-tionszone anstatt an der unverbrannten Seite der Flammenstruktur. In einem weiteren Validierungsschritt wird eine akustisch angeregte Bunsenflamme simuliert und mit ex-perimentellen Ergebnissen aus der Literatur verglichen. Die numerische Umsetzung der Level-Set-Methode wird anhand einer kinematischen Analyse der Isoflächen des Level-Set-Felds verifiziert.

Eine Erweiterung des Modells zur qualitativen Beschreibung zellulärer Flammenstruk-turen, die aus einer thermisch-diffusiven Instabilität der Flammenfront resultieren, wird vorgestellt und anhand von Simulationsergebnissen einer Wasserstoff/Luft-Flamme eva-luiert.

Abstract

Simulation of premixed flames by integral modeling of the reaction zone

In the present work a modeling and simulation approach for premixed flames is developed. The modeling is based on an integral description of the reaction zone of the flame. It follows a fluid mechanical approach where interest in local information about reaction kinetics is secondary. The physical model parameter is the integral consumption of the deficient species.

For the numerical simulation of flames based on the integral reaction zone modeling, a relation between the chemically defined integral consumption of the deficient species and the hydrodynamic mass burning rate in the reaction zone is derived. The derivation starts from the transport equation of the deficient species in a curvilinear coordinate system moving with the reaction zone of the flame. An integration of this transport equation over the reaction zone yields the relation for the mass burning rate as a function of the integral consumption of the deficient species, the curvature and stretch of the reaction zone, the temporal accumulation of the deficient species within the reaction zone and the integral diffusive transport along the reaction zone.

For the application of the integral model, a modified level set method is used with the level set function having the physical character of a phase field function. The model is implemented in OpenFOAM®. Thereby, a formulation is presented that allows using discretization schemes commonly available in programs for computational fluid dynamics.

A first validation step of the relation between the integral consumption and the mass burning rate is performed by analyzing data of a direct numerical simulation of a turbulent premixed methane air flame. One-dimensional simulations accounting for detailed transport and chemical processes justify the modeling of the mass burning rate within the reaction zone instead at the unburnt side of the flame structure. In a further validation step, an acoustically perturbed Bunsen flame is simulated and compared to experimental results from literature. The numerical implementation of the level set method is verified by a kinematical analysis of the isosurfaces of the level set field.

An extension of the model for the qualitative description of cellular flame structures resulting from a thermo-diffusive instability of the flame front is presented and evaluated with simulation results of a hydrogen air flame.

Inhaltsverzeichnis

Symbolverzeichnis	xiii
1 Einleitung	1
1.1 Hintergrund und Motivation	1
1.2 Zielsetzung und Gliederung der Arbeit	5
2 Grundlagen zur Beschreibung vorgemischter Flammen	7
2.1 Physikalische Grundlagen	8
2.1.1 Eingrenzung des relevanten Strömungsregimes	8
2.1.2 Charakterisierung des Fluids	8
2.1.3 Erhaltungsgleichungen	9
2.2 Formulierung in krummlinigen, bewegten Koordinaten	13
2.2.1 Basisvektoren	13
2.2.2 Metrik im krummlinigen Koordinatensystem	14
2.2.3 Differentialoperatoren im krummlinigen Koordinatensystem	15
2.2.4 Generische skalare Transportgleichung	15
2.3 Relevante Aspekte für die Flammenmodellierung	16
2.3.1 Geschwindigkeiten, Längen und Zeiten	16
2.3.2 Aspekte der Kinematik und Geometrie einer Oberfläche	17
2.3.3 Streckung einer Flamme	19
2.3.4 Regimes turbulenter vorgemischter Verbrennung	22
3 Stand der Forschung im Gebiet der Flammenmodellierung	27
3.1 Flamme als gasdynamische Diskontinuität, Klassische G -Gleichung	28
3.1.1 Das Modell von Class et al.	29
3.2 Das Konzept der <i>High Activation Energy Asymptotics</i> und das Delta-Funktion Modell	32
3.3 Integrale Analyse von Chung & Law und von Sun et al.	32
3.4 Das Modell von Echekki	33
3.5 Flamelet-Modell von de Goey und ten Thije Boonkkamp	34
3.6 <i>Reaction-Diffusion Manifolds</i>	36
3.7 Modelle basierend auf einer Erweiterung der G -Gleichung	36
3.7.1 Der Ansatz von Aldredge	36
3.7.2 Der Ansatz von Peters	37
3.7.3 Der Ansatz von Schmidt und Klein	38
3.7.4 Die Modelle von Moureau et al. und Hartmann et al.	39
3.7.5 Das Modell von Duwig	40
4 Herleitung eines integralen Modells der Reaktionszone	43
4.1 Einleitung und Motivation	44
4.2 Herleitung	48

4.3	Bestimmung des Parameters I_Y	51
5	Implementierung des integralen Modells in OpenFOAM®	53
5.1	Phasen-Feld/Level-Set-Formulierung	54
5.1.1	Die Formulierung von Olsson et al.	54
5.1.2	Formulierung in dieser Arbeit	57
5.2	Formulierung der integralen Beziehung für die Massenstromdichte	59
5.2.1	Numerische Formulierung der δ -Funktion	59
5.2.2	Formulierung des Volumenelements \sqrt{g}	59
5.2.3	Formulierung des chemischen Integrals	60
5.2.4	Formulierung des normalen Diffusionsflusses von Y	61
5.2.5	Formulierung des Integrals über die Zeitableitung	61
5.2.6	Behandlung des Felds der Massenstromdichte m	63
5.2.7	Normale Erweiterung des Krümmungsfelds und der Parameter von I_Y	68
5.3	Die CFD-Software OpenFOAM®	70
5.4	Die Finite-Volumen-Methode	71
5.4.1	Integrale Erhaltungsformulierung	71
5.4.2	Numerische Formulierung der integralen Erhaltung	72
5.5	Strömungslöser	80
5.6	Implementierter Code in OpenFOAM®	80
5.6.1	Zusammenfassung der relevanten Gleichungen	80
5.6.2	Künstliche Verbreiterung der aufzulösenden Felder	82
5.6.3	Implementierung einzelner Terme und Gleichungen	82
5.6.4	Ablauf eines Zeitschritts, Kopplung der Erhaltungsgleichungen	85
5.6.5	Wahl des Diskretisierungsverfahrens	86
6	Diskussion des integralen Modells	87
6.1	Analyse einer Direkten Numerischen Simulation einer turbulenten Flamme	88
6.1.1	Setup der Simulation	88
6.1.2	Auswahl eines Auswertungszeitfensters	89
6.1.3	Durchführung der Analyse	93
6.1.4	Diskussion der Ergebnisse der Analyse	99
6.1.5	Zusammenfassung der DNS-Analyse	107
6.2	Eindimensionale Simulationen mit INSFLA	107
6.2.1	Einführung	107
6.2.2	Planare Flammen, Zylinder- und Kugelflammen	109
6.2.3	Vorgemischte Flamme in Gegenstromanordnung	111
6.2.4	Schlussfolgerung	113
6.3	Diskussion zur räumlichen Auflösung und Vergleich mit anderen Model- lierungsansätzen	113
7	Validierung und Verifikation	115
7.1	Periodische Wirbelablösung am beheizten Zylinder	116
7.1.1	Einleitung	116
7.1.2	Numerisches Setup	116
7.1.3	Strömungsregime und relevante Gleichungen	117
7.1.4	Stoffdaten	118

7.1.5	Ergebnisse	119
7.2	Planare Flammenausbreitung	122
7.2.1	Einleitung und numerisches Setup	122
7.2.2	Auswertung und Diskussion	123
7.3	Kinematische Analyse der Phasen-Feld/Level-Set-Formulierung	127
7.3.1	Einleitung und numerisches Setup	127
7.3.2	Analyse und Diskussion der Ergebnisse	128
7.4	Akustisch angeregte Bunsenflamme	132
7.4.1	Einleitung	132
7.4.2	Numerisches Modell und Parameter	132
7.4.3	Diskussion der Ergebnisse	134
8	Erweiterung des Modells zur Beschreibung thermisch-diffusiver Instabilitäten	137
8.1	Einführung	138
8.2	Numerisches Setup	139
8.3	Parametrisierung des Integrals I_Y	139
8.4	Simulationsergebnisse	141
9	Zusammenfassung und Ausblick	145
	Literaturverzeichnis	147

Symbolverzeichnis

Im Folgenden werden die wichtigsten Kennzahlen, Symbole, Indizes und Abkürzungen aufgelistet und beschrieben.

Dimensionslose Kennzahlen

Da_T	Turbulente Damköhler-Zahl
Ka_T	Turbulente Karlovitz-Zahl
Ka_δ	Karlovitz-Zahl basierend auf Reaktionszonendicke
Kn	Knudsen-Zahl
Le_k	Lewis-Zahl der Spezies k
Ma	Mach-Zahl oder Markstein-Zahl
Pe	Peclet-Zahl
Re_T	Turbulente Reynolds-Zahl
Ri	Richardson-Zahl
St	Strouhal-Zahl

Griechische Symbole

δ	Delta-Funktion
ε	Parameter in der Phasen-Feld/Level-Set-Gleichung der die Dicke des Übergangsbereichs steuert
γ	Zeitskalenfaktor in der Phasen-Feld/Level-Set-Gleichung
γ_{BD}	Überblendungsfaktor beim <i>Blended Differencing Scheme</i>
κ_T	Temperaturleitfähigkeit bzw. thermische Diffusivität des Gemischs
λ	Wärmeleitfähigkeit des Gemischs oder Wellenlänge eines Signals
μ	Dynamische Viskosität des Gemischs
ν	Kinematische Zähigkeit des Gemischs
ω_k	Volumetrischer Produktionsterm der Spezies k
ω_Y	Volumetrischer Produktionsterm der limitierenden Spezies Y
ω_T	Chemischer Quellterm in der Temperaturgleichung
ρ	Dichte des Gemischs
ρ_{red}	Reduzierte (zwischen 0 und 1) Dichte des Gemischs
ρ_k	Dichte der Spezies k
τ	Zeit nach Transformation in ein bewegtes Koordinatensystem
τ_m	Relaxationszeitkonstante beim Verfahren der normalen Erweiterung eines Felds
τ_χ	Zeitskala, definiert durch die Streckung χ
$\boldsymbol{\tau}$	Hydrodynamischer Spannungstensor
χ	Streckung einer Oberfläche
ψ	Phasen-Feld/Level-Set-Funktion

Δt	Zeitschrittweite in einer Simulation
Φ	Äquivalenzverhältnis
Ψ	Generische skalare Größe

Lateinische Symbole

a	Schallgeschwindigkeit
a_P^U, a_N^U	Einträge der Koeffizientenmatrix eines linearen Gleichungssystems
c	Mittlere Krümmung einer Oberfläche oder Reaktionsfortschrittsvariable
c_{ext}	In Normalenrichtung erweitertes Krümmungsfeld
c_p	Spezifische Wärmekapazität des Gemischs bei konstantem Druck
\mathbf{d}	Verbindungsvektor zweier Zellschwerpunkten
d_ψ	Dicke des Übergangsbereichs des Felds ψ von 0 auf 1
d_{zyl}	Durchmesser des umströmten Zylinders im Verifikationsbeispiel
f	Frequenz
f_i	Zellfläche
f_w	Wirbelablösefrequenz
f_x	Interpolationsfaktor
f_{ic}	Flächenschwerpunkt der Zellfläche f_i
\mathbf{g}	Gravitationsvektor
\mathbf{g}_i	Kovarianter Basisvektor
\mathbf{g}^i	Kontravarianter Basisvektor
g_{ij}	Kovariante Komponenten des Metriktensors
g^{ij}	Kontravariante Komponenten des Metriktensors
\sqrt{g}	Kontrollvolumen eines Koordinatensystems, hier verwendet für das Kontrollvolumen des bewegten krummlinigen Koordinatensystems mit den Koordinaten x^1, x^2, x^3
h_i	Skalierungsfaktoren eines krummlinigen <i>orthogonalen</i> Koordinatensystems
\mathbf{j}_k	Diffusiver Massenfluss der Spezies k
l	Charakteristische Längenskala des Strömungsfelds
l_δ	Dicke der Reaktionszone
l_F	Dicke einer vorgemischten Flamme
l_I	Integrales turbulentes Längenmaß
l_K	Kolmogorov-Längenskala
l_M	Markstein-Länge
m	Massenstromdichte (<i>mass burning rate</i>)
m_ψ	Korrigierte Massenstromdichte
m_{post}	Massenstromdichte aus Simulationsergebnissen (durch <i>post processing</i> ermittelt)
m_k	Masse der Spezies k
\dot{m}	Massenstrom
\dot{m}_Y	Massenstrom der limitierenden Spezies
\mathbf{n}	Normierter Normalenvektor
\mathbf{n}_i	Normierter Normalenvektor der Zellfläche f_i
n	Stoffmenge des Gemischs oder Koordinate in Normalenrichtung zum Rand des Rechengebiets
n_k	Stoffmenge der Spezies k

p (p^0)	Hydrostatischer Druck (konstant)
p_k	Partialdruck der Spezies k
p_1, p_2, p_3	Koeffizienten der Parametrisierung von I_Y
q	Reaktionswärme
r_c	Krümmungsradius
\mathbf{r}	Ortsvektor
\mathbf{r}_P bzw. \mathbf{r}_N	Ortsvektor des Zellmittelpunkts P bzw. N
s	Brenngeschwindigkeit
\mathbf{s}_i	Nicht normierter Normalenvektor der Zellfläche f_i
s_L	Laminare Flammengeschwindigkeit
s_d	Brenngeschwindigkeit einer Isofläche (<i>displacement speed</i>)
s_c	Verbrauchsgeschwindigkeit (<i>consumption speed</i>)
t_c	Chemisches Zeitmaß
t	Zeit
t^n	Diskreter Zeitpunkt in einer Simulation
t_{eddy}	Wirbelumlaufzeit (<i>eddy turnover time</i>)
t_F	Charakteristische Flammenzeit
t_δ	Charakteristische Zeitskala der Reaktionszone
\mathbf{u}	Absolute Ausbreitungsgeschwindigkeit von Isoflächen
u_n	Normalkomponente (in Richtung von \mathbf{n}) der Ausbreitungsgeschwindigkeit
	\mathbf{u}
v'	RMS-Wert der turbulenten Schwankungsgeschwindigkeit
v_r	Radiale Geschwindigkeitskomponente
\mathbf{v}	Strömungsgeschwindigkeit des Gemischs
\mathbf{v}_k	Geschwindigkeit der Spezies k
\mathbf{v}_Ψ	Geschwindigkeit der generischen skalaren Größe Ψ
\mathbf{v}_{ext}	Geschwindigkeitsfeld zum Transport in Normalenrichtung
x, y, z	Kartesische Koordinaten
x^1, x^2, x^3	Krummlinige und bewegte Koordinaten
C_{ref}, T_S bzw. C_a, C_b	Konstanten in der Sutherland-Formel für die dynamische Viskosität
C_k	Konzentration (partiale Molddichte) der Spezies k
D	Generischer Diffusionskoeffizient
$\underline{\underline{D}}$ bzw. $\underline{\underline{D}}^n$	Diffusionsmatrix
$\underline{\underline{D}}_k^M$	Diffusionskoeffizient der Spezies k im Gemisch
\mathcal{D}_Ψ	Diffusionskoeffizient der generischen skalaren Größe Ψ
$E_{a,i}$	Aktivierungsenergie der Reaktion i
F	Allgemeine Bezeichnung einer Geschwindigkeitsfunktion für die normale Bewegung der Isoflächen einer Level-Set-Funktion
F_i	Approximierter Massenstrom durch Zellfläche f_i
F_{ext}	In Normalenrichtung erweiterte Geschwindigkeitsfunktion F
F_{thick}	Faktor zur künstlichen Verdickung der Profile von Y und T
G	Level-Set-Funktion als vorzeichenbehaftete Abstandsfunktion
\mathcal{G}	Skalare Variable zur Definition von Flammenflächen in der <i>Flamelet</i> -Theorie von De Goeij und ten Thije Boonkkamp [40]
H	Durchmesser des Rechengebiets zur Simulation der Wirbelablösung am beheizten Zylinder oder Heaviside-Funktion

H_f	Molarer Heizwert des Brennstoffs
\mathbf{I}	Identitätsmatrix
I_1	Integral im chemischen Term, für eine planare Reaktionszone
I_c	Zusätzlicher integraler Beitrag im chemischen Term, für eine gekrümmte Reaktionszone
I_R	Konzentrierte Masse auf der Oberfläche einer Flamme die als gasdynamische Diskontinuität modelliert ist, <i>excess surface mass</i>
I_Y	Integraler Verbrauch der limitierenden Spezies Y
M	Molare Masse des Gemischs
M_k	Molare Masse der Spezies k
N	Gesamtanzahl der Spezies im Gemisch oder Schwerpunkt einer Nachbarzelle
N_f	Anzahl der Flächen einer Zelle
N_d	Durchmesser des Rechengebiets in der Simulation des beheizten Zylinders bezogen auf den Zylinderdurchmesser
P	Schwerpunkt einer Zelle
Q	Allgemeine Bezeichnung eines Quellterms oder Quellterm zur räumlichen Begrenzung der normalen Erweiterung eines Felds
Q_I, Q_E	Anteile der Linearisierung eines Quellterms
Q_S, Q_Z	Massenquellen bei eindimensionalen Simulationsmodellen in INSFLA
R	Anzahl chemischer Reaktionen in einem Reaktionsmechanismus oder Dichte im reaktiven Modell aus [30] oder Pearsonscher Korrelationskoeffizient
R_1, R_2	Hauptkrümmungskreisradien
\mathcal{R}	Universelle Gaskonstante
\mathcal{R}_k	Individuelle Gaskonstante der Spezies k
S	Oberfläche eines Kontrollvolumens V
S_i	Flächeninhalt der Zellfläche f_i
S_{corr}	Korrekturfaktor bei der vereinfachten Behandlung des integralen Streckungsterms
T	Temperatur
T^*	Temperaturverhältnis beim angeströmten beheizten Zylinder
T_u	Temperatur im unverbrannten Gemisch (Brenngas)
T_b	Temperatur im verbrannten Gemisch (Rauchgas)
T_{ext}	In Normalenrichtung erweitertes Temperaturfeld
V	Festes Kontrollvolumen
V_P	Volumen einer Zelle
V_m	Volumen des Gemischs
\mathbf{V}_k	Diffusionsgeschwindigkeit der Spezies k
\mathbf{V}_Ψ	Diffusionsgeschwindigkeit der generischen skalaren Größe Ψ
Y_k	Massenbruch der Spezies k im Gemisch
Y	Massenbruch der limitierenden Spezies im Gemisch
\mathcal{Y}_k	Molenbruch der Spezies k im Gemisch

Hochgestellte Symbole

A^i bzw. A^{ij}	Kontravariante Komponente von A
A_{ic}	A auf dem Schwerpunkt einer Zellfläche

A^*	A ausgewertet auf einer speziellen/ausgewählten Isofläche, z.B. $x^1 = 0$, $\psi = 0,5$ oder $G = 0$
A^n	Wert von A zum Zeitpunkt t^n
\bar{A}	Mittelwert von A
\hat{A}	Integrationsvariable A oder Amplitude von A

Tiefgestellte Symbole

\underline{A}	Spaltenvektor A
$\underline{\underline{A}}$	Matrix A
A_{fc}	Charakteristische Größe A an der Position in der Flammenstruktur, an der Brennstoff abgebaut wird (<i>fuel consumption layer</i>)
A_i bzw. A_{ij}	Kovariante Komponente von A
A_b	A im verbrannten Gemisch (<i>burnt</i>)
A_u	A im unverbrannten Gemisch (<i>unburnt</i>)
A_∞	Größe A in der freien Anströmung

Abkürzungen

BD	<i>Blended Differencing Scheme</i>
CD	<i>Central Differencing Scheme</i>
CFD	<i>Computational Fluid Dynamics</i>
CSP	<i>Computational Singular Perturbation</i>
DNS	Direkte Numerische Simulation
FGM	<i>Flamelet-Generated Manifolds</i>
FVM	Finite-Volumen-Methode
ILDM	<i>Intrinsic Low Dimensional Manifolds</i>
LDV	<i>Laser Doppler Velocimetry</i>
PISO	<i>Pressure-Implicit with Splitting of Operators</i>
REDIM	<i>Reaction-Diffusion Manifolds</i>

Sonstige Konventionen

Vektoren sind durch fettgedruckte Buchstaben dargestellt.

1 Einleitung

1.1 Hintergrund und Motivation

Die Versorgung mit mechanischer und elektrischer Energie wird in überschaubarer Zukunft weiterhin hauptsächlich durch Verbrennungsprozesse stattfinden [35]. Hierbei spielt die Optimierung von Verbrennungsprozessen in Hinsicht auf Effizienz und geringen Schadstoffausstoß eine wichtige Rolle. Ein essentieller Aspekt bei der Energieumwandlung durch Verbrennung ist die Ausbreitung von Flammenfronten in Verbrennungsräumen. Nach wie vor stellt die numerische Simulation von Flammenausbreitungsprozessen mit Computerprogrammen eine aufwendige und anspruchsvolle Aufgabe dar. Der Grund hierfür liegt in der Natur des Flammenausbreitungsprozesses selbst. Dieser resultiert in der Regel aus einer Wechselwirkung mehrerer einzelner Prozesse: Konvektion, molekulare Transportprozesse (Diffusion und Wärmeleitung) und insbesondere chemische Reaktionen. Zur Unterstützung des Entwicklungsprozesses verbrennungstechnischer Anlagen sind kurze Simulationszeiten wünschenswert. Dies gilt insbesondere für Optimierungsprobleme, bei denen möglichst viele Konfigurationen in einem überschaubaren Zeitraum simuliert werden sollen.

Diese Arbeit widmet sich der Simulation vorgemischter Flammenfronten mit Computerprogrammen für numerische Strömungsmechanik (CFD, *computational fluid dynamics*). Hierbei wird sich auf die deterministische Simulation von Flammenfronten beschränkt, ohne Verwendung von räumlichen und zeitlichen Mittelungen. Eine direkte vollständige Auflösung der für den Flammenausbreitungsprozess relevanten Längen- und Zeitskalen ist nur mit sehr hohem numerischen Aufwand möglich. In technischen Anlagen kann die Dicke der Flammenstruktur um bis zu einige Größenordnungen kleiner sein als die charakteristische Längenskalen der Strömung, die hauptsächlich durch die Geometrie der Anlage vorgegeben sind (z.B. in Haushaltsbrennern). Neben der räumlichen Auflösung muss bei der Simulation eines Flammenausbreitungsprozesses auch die zeitliche Auflösung hoch genug sein, um den instationären Charakter der Flammenausbreitung und die kleinsten Zeitskalen der beteiligten chemischen Reaktionen aufzulösen. Zusätzlich zu den hydrodynamischen Erhaltungsgleichungen muss in der Regel für jede Spezies eine Transportgleichung gelöst werden. Für eine genaue Beschreibung der Oxidation von Kohlenwasserstoffen (bis einschließlich Propan) müssen ca. 100 Elementarreaktionen zwischen ca. 30 chemischen Spezies berücksichtigt werden [107]. Der numerische Aufwand zur Lösung der Transportgleichungen der Spezies überwiegt dann gegenüber dem Aufwand zur Behandlung der hydrodynamischen Erhaltungsgleichungen. Zur Reduzierung des Simulationsaufwands wurden verschiedene Ansätze vorgeschlagen und umgesetzt. Im Folgenden wird eine kurze Übersicht hiervon gegeben.

Adaptive Verfeinerung

Eine Möglichkeit zur Reduzierung des Rechenaufwands besteht in der Minimierung der Gesamtanzahl an Gitterpunkten oder Zellen in der Simulation. Hierbei wird eine lokale Verfeinerung des Rechnernetzes in der Nähe der Flammenfront durchgeführt. In instationären Simulationen sind adaptive Verfeinerungsstrategien notwendig, weil sich die Position der Flammenfront in der Zeit ändert. Adaptive Verfahren benötigen in der Regel komplexe Programmierungskonzepte zur Verwaltung der unterschiedlichen Verfeinerungsstufen [9], [37], [67]. Nach wie vor bleibt die Notwendigkeit einer lokal hohen räumlichen und zeitlichen Auflösung bestehen. Um den Ausbreitungsprozess mit lokal geringerer Auflösung beschreiben zu können, sind Ansätze erforderlich, die die physikalischen und chemischen Prozesse geeignet modellieren.

Manuelle chemische Reduktionsverfahren

Eine Klasse von Ansätzen beinhaltet die Vereinfachung der chemischen Kinetik. Hierzu zählen Methoden bei denen Quasi-Stationarität einiger Spezies sowie partielles Gleichgewicht bestimmter Reaktionen angenommen wird. Aus diesen Annahmen lassen sich reduzierte globale Reaktionsmechanismen ableiten [107]. Die Verwendung solcher Reduktionsansätze in Simulationen erlaubt es quantitative Vorhersagen zu treffen, mit einer relativ (zum Ausgangsmechanismus) geringen Anzahl an chemischen Reaktionen. Ein Nachteil besteht darin, dass ein grundlegendes Verständnis der Kinetik eines Brennstoffs oder einer Brennstoffklasse sowie eine ausreichende Erfahrung notwendig sind, um sinnvolle und effektive reduzierte Mechanismen abzuleiten [109].

Automatische chemische Reduktionsverfahren

Ein automatisches Reduktionsverfahren ist das ILDM-Konzept von Maas und Pope [87] (1992) (*Intrinsic Low-Dimensional Manifolds* ILDM). Bei der ILDM-Methode wird mit Hilfe der mathematischen Theorie dynamischer Systeme eine Zeitskalenanalyse der chemischen Prozesse durchgeführt. Somit können Prozesse identifiziert werden, die schnell auf eine niedrig-dimensionale Mannigfaltigkeit im Zustandsraum relaxieren. Die Entwicklung des chemischen Zustands wird nach Ablauf dieser schnellen Prozesse durch die Bewegung entlang der niedrig-dimensionalen Mannigfaltigkeit beschrieben. Der Zustand auf der Mannigfaltigkeit wird dabei durch reduzierte Variablen definiert. In der Anwendung in einer Simulation müssen zur Beschreibung der Chemie nur Gleichungen für die reduzierten Variablen gelöst werden. Die restlichen thermokinetischen Zustandsgrößen sind als Funktion der reduzierten Variablen tabelliert und werden während der Laufzeit mit geeigneten Routinen und Interpolationsverfahren ausgelesen. Neben der ILDM-Methode wurden ähnliche Ansätze entwickelt, wie z.B. die CSP-Methode (für *Computational Singular Perturbation*) von Lam und Goussis [80] (1988). Die ILDM-Methode sowie die CSP-Methode werden mathematisch für Systeme gewöhnlicher Differentialgleichungen entwickelt, die nur den Einfluss chemischer Reaktionen auf den Zustand eines reaktiven Systems beschreiben, wie z.B. in der Modellvorstellung eines homogenen Reaktors. Eine Erweiterung der ILDM-Methode auf Systeme in denen chemische Prozesse und Transportprozesse gekoppelt sind, stellt die REDIM-Methode von Bykov und Maas [23] (2007) dar (*Reaction Diffusion Manifolds*). Alternative Ansätze zu REDIM sind die Verfahren der *Flamelet-Generated Manifolds* (FGM) von van Oijen [132] (2002) und der *Flame Prolongation of ILDM* (FPI) von Gicquel et al. [58]

(2000). Die Entwicklung des REDIM-Konzepts basiert auf der mathematischen Theorie singular gestörter Vektorfelder, während die FGM-Methode ihren Ursprung in der Flamelet-Theorie von De Goey und ten Thijs Boonkcamp [40] (1999) hat. Eine adaptive Tabellierung während einer Simulation wird mit dem Verfahren *in situ adaptive tabulation* (ISAT) von Pope [110] (1997) vorgeschlagen. Eine aktuelle Übersicht über den Stand chemischer Reduktionstrategien kann in Goussis und Maas [60] (2011) gefunden werden.

Eine weitere Möglichkeit zur Vereinfachung der chemischen Kinetik besteht in der Beschreibung eines Verbrennungsvorgangs mit einer globalen Einschritt- oder Zweischrittreaktion zwischen Brennstoff und Oxidationsmittel [140]. Die Reaktionsrate wird in Arrhenius-Form angesetzt und die Parameter werden an experimentell gemessenen oder numerisch ermittelten Flammeneigenschaften (wie z.B. die laminare Flammgeschwindigkeit oder die adiabatische Flammentemperatur) angepasst.

Hydrodynamische Flammenmodellierung

Eine andere Klasse von Ansätzen zur Beschreibung eines Flammenausbreitungsprozesses modelliert die Dynamik der Flammenfront aus strömungsmechanischer Sicht. Hierzu zählen Methoden, die von der Theorie der Gasdynamik inspiriert sind und die Flammenfront als eine gasdynamische Diskontinuität beschreiben, die das Frischgasgemisch von den Rauchgasen trennt. Die Bewegung der gasdynamischen Diskontinuität relativ zum Brenngas erfolgt mit der laminaren Flammgeschwindigkeit der modellierten Flammenfront. Die ersten Ansätze in diese Richtung von Darrieus [36] (1938, 1945) und Landau [81] (1944) waren phänomenologisch. Sie stützten sich auf die Beobachtung, dass eine laminare Flammenfront in der Regel viel dünner ist als die charakteristische Längenskala des Strömungsfelds. Der Einfluss des Strömungsfelds auf die innere Flammenstruktur wurde vernachlässigt und somit wurde eine konstante Ausbreitungsgeschwindigkeit der gasdynamischen Diskontinuität angenommen. Aus stabilitätstheoretischer Sicht resultierte eine inhärente Instabilität einer planaren Flammenfront. Diese Stabilitätsaussage war jedoch im Widerspruch zu experimentellen Beobachtungen planarer stabiler Flammenfronten. In späteren Arbeiten u.a. von Markstein [89] (1951), Eckhaus [50] (1961) und Markstein [90] (1964) wurde der Einfluss der Verformung der Flammenfront durch das Strömungsfeld auf die Flammgeschwindigkeit postuliert, um damit ein realistischeres Stabilitätsverhalten der planaren Flammenfront zu erhalten. In der Arbeit von Barenblatt et al. [6] (1962) wurde das sogenannte diffusive thermische Flammenmodell eingeführt, das die Flammenausbreitung durch chemische Reaktionen und Transportprozesse in der Flammenstruktur beschreibt, jedoch die thermische Expansion des Gases vernachlässigt. Die chemischen Reaktionen in der Flamme sind über das vereinfachte Konzept einer irreversiblen Einschrittreaktion zwischen Brennstoff und Oxidationsmittel beschrieben worden. Hierbei wird eine sehr hohe Aktivierungsenergie der Einschrittreaktion angenommen, so dass die Reaktionszone im Vergleich zur Flammendicke sehr dünn ist und am verbrannten Ende der Flammenstruktur liegt. Mathematisch wird diese Annahme beim Verfahren der *high activation energy asymptotics* ausgenutzt. Weitere Flammenmodelle, die wie das Modell von Barenblatt et al. [6] (1962) aus Erhaltungsprinzipien hergeleitet sind und auf dem Konzept der *high activation energy asymptotics* beruhen, stammen u.a. von Sivashinsky [120] (1976), Matkowsky und Sivashinsky [95] (1979) und Clavin und Williams [33] (1982).

In den Arbeiten von Matalon und Matkowsky [91] (1982) und Clavin und Joulin [32]

(1983) wird das Modell einer vorgemischten Flamme als gasdynamische Diskontinuität für beliebige Amplituden der Auslenkung der Flammenfront von der planaren Form hergeleitet (solange die Flammendicke dünn ist relativ zu den Längenskalen der Strömung). In Klimenko und Class [73] (2000) werden die Formalismen der Tensorrechnung verwendet, um in einer mathematisch übersichtlichen und eleganten Art und Weise die Ergebnisse aus [120] und [91] herzuleiten. In Class et al. [30] (2003) wird das Modell einer vorgemischten Flamme als gasdynamische Diskontinuität für beliebige Lewis-Zahlen (Verhältnis der thermischen Diffusivität des Gasgemischs zu Diffusivität der Spezies) der limitierenden Spezies erweitert und in der Stabilitätsanalyse in Class et al. [31] (2003) angewendet. In Matalon et al. [92] (2003) erfolgt die Beschreibung als gasdynamische Diskontinuität für eine Einschrittreaktion mit zwei Spezies als Edukte und beliebigen Reaktionsordnungen. Bei den Modellen, die mathematisch die hohe Aktivierungsenergie der angenommenen Einschrittreaktion ausnutzen, schrumpft auf der Längenskala der Flammendicke die Reaktionszone auf eine Reaktionsfläche und der Reaktionsquellterm wird über eine Delta-Funktion beschrieben. In Realität verlaufen die chemischen Reaktionen der Verbrennung in der Regel in mehreren Schritten. Die resultierende Flammenstruktur besteht aus verschiedenen reaktiven Schichten unterschiedlicher Dicke, in denen verschiedene Reaktionen in signifikantem Maße ablaufen. Das Konzept der *rate ratio asymptotics* basiert mathematisch auf der Größenordnung der Verhältnisse von Geschwindigkeitskonstanten der dominierenden Reaktionen in den einzelnen Schichten. Die Anwendung asymptotischer Methoden in Flammenstrukturen mit Mehrschrittchemie kann in Klimenko und Class [74] (2002) und Seshadri [116] (1996) nachgelesen werden.

Sonderforschungsbereich SFB 606: Instationäre Verbrennung

Die vorliegende Arbeit ist im Rahmen des Sonderforschungsbereichs SFB-606 (2002-2012) mit dem Titel: **Instationäre Verbrennung: Transportphänomene, Chemische Reaktion, Technische Systeme** am Karlsruher Institut für Technologie (KIT) entstanden. Die Forschungsaktivitäten im SFB-606 erfolgen sowohl im Bereich der Verbrennungsgrundlagen (Flammenmodellentwicklung, kinetische Untersuchung elementarer Reaktionen, ...) wie auch im Bereich technischer Verbrennungssysteme (Untersuchung von Gasturbinenbrenner oder Verbrennungsmotoren). Der Schwerpunkt liegt in der Erforschung und Beschreibung der komplexen Interaktion instationärer Verbrennungsprozesse auf einer großen Bandbreite von Zeitskalen. Aus den gewonnenen Erkenntnissen sollen physikalische Modelle abgeleitet werden, die in Computerprogrammen zur Simulation von Verbrennungsprozessen eingesetzt werden können [35].

Innerhalb des SFB-606 wird im Teilprojekt A5 mit dem Titel **Hierarchische Modellierung turbulenter, vorgemischter Verbrennung** ein mehrstufiges Flammenmodell vorgemischter Flammen entwickelt. Die einzelnen Modellstufen sind physikalisch motiviert und haben ein integrales Modellierungsprinzip gemeinsam. Eine Veranschaulichung der Stufen anhand des Temperaturprofils einer vorgemischten Flamme ist in Abb. 1.1 gezeigt. Dargestellt ist eine charakteristische Struktur einer Kohlenwasserstoffflamme mit einer inerten Vorheizzone, der Brennstoffabbauzone in der die brennstoffspezifischen chemischen Reaktionen ablaufen und die breite Oxidationszone. Die abstrakteste Hierarchiestufe H1 basiert auf dem Modell von Class et al. [30] (2003) und beschreibt die gesamte vorgemischte Flammenstruktur als gasdynamische Diskontinuität. In der Stufe H2 werden die Vorheizzone und die Brennstoffabbauzone als Diskontinuität modelliert,

während die langsame und in einer breiten Schicht ablaufende CO-Oxidation aufgelöst wird. Die Stufe H2 wurde im Rahmen der Dissertation von Bronner [13] (2006) entwickelt. Die Stufe H3 ist Gegenstand der vorliegenden Arbeit. Die integrale Modellierungsidee soll dabei auf die reaktive Brennstoffabbauzone angewendet werden. In der Stufe H4 werden chemische Prozesse sowie deren Kopplung mit Diffusionsprozessen mit Hilfe des Konzepts der Reaktions-Diffusions-Mannigfaltigkeiten (REDIM) [23] beschrieben.

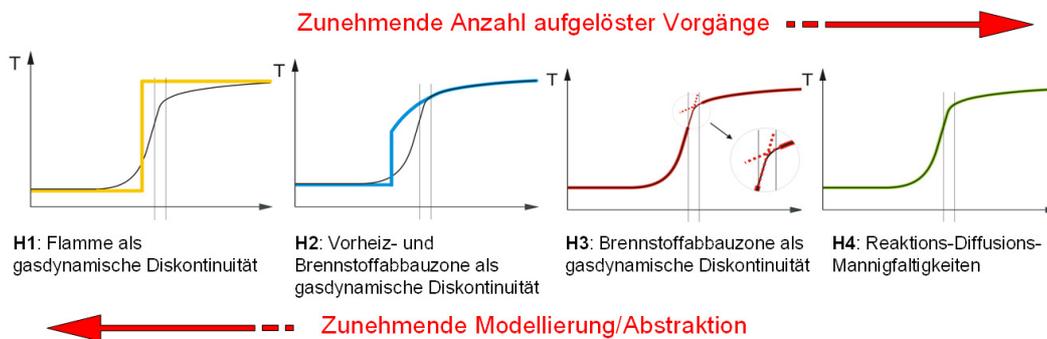


Abbildung 1.1: Stufen des hierarchischen Flammenmodells im SFB 606, nach Vorlage aus [35].

1.2 Zielsetzung und Gliederung der Arbeit

In der vorliegenden Arbeit wird das grundlegende integrale Modellierungskonzept, das in den Modellstufen H1-H2 Anwendung findet, auf die Reaktionszone einer vorgemischten Flamme übertragen. Die Vorgänge innerhalb der Reaktionszone sollen integral beschrieben werden. Hierbei ist eine Formulierung zu entwickeln, die es erlaubt das gewonnene integrale Reaktionszonenmodell in einen CFD-Code zu implementieren. Um eine universelle Einsetzbarkeit des Modells zu ermöglichen, soll auf Standarddiskretisierungsverfahren zurückgegriffen werden. Der hier verwendete CFD-Code ist das quelloffene Programm OpenFOAM® [144].

Der Inhalt der vorliegenden Arbeit gliedert sich folgendermaßen:

Kapitel 2: Die physikalischen und mathematischen Grundlagen, die zur Modellherleitung und Entwicklung der Implementierungsstrategie benötigt werden, werden eingeführt.

Kapitel 3: Der Stand der Forschung im Bereich der Modellierung vorgemischter Flammen wird vorgestellt. Dabei wird sich auf die deterministische Modellierung beschränkt, bei der keine räumlichen oder zeitlichen Mittelungen vorgenommen werden.

Kapitel 4: Die Motivation für eine integrale Modellierung der Reaktionszone einer vorgemischten Flamme wird formuliert. Das Modell wird aufgestellt und eine allgemeine Beziehung für die Massenstromdichte durch die Reaktionszone wird hergeleitet. Am Ende des Kapitels wird auf die Bestimmung des Modellparameters eingegangen.

Kapitel 5: Die Implementierung des Modells in OpenFOAM® unter Verwendung der Level-Set-Methode wird vorgestellt. Dabei wird auf Implementierungskonzepte eingegangen, welche die Anwendung des Modells mit Diskretisierungsverfahren ermöglichen, die in Programmen für numerische Strömungssimulation eine konservative Diskretisierung der Erhaltungsgleichungen ermöglichen.

Kapitel 6: Die integrale Modellierungsstrategie der Reaktionszone wird anhand der Analyse einer Direkten Numerischen Simulation untersucht und bewertet. Simulationen vorgemischter Flammen unter Berücksichtigung detaillierter Chemie werden mit dem Programm INSFLA durchgeführt. Die Ergebnisse werden hinsichtlich der Modellierung der Massenstromdichte ausgewertet. Das integrale Reaktionszonenmodell wird vorhandenen Modellen und Simulationsstrategien gegenübergestellt.

Kapitel 7: Das Kapitel umfasst die Validierung des Flammenmodells sowie die Verifikation der Implementierungsmethodik und des verwendeten Strömungslösers in OpenFOAM®.

Kapitel 8: Eine qualitative Erweiterung des Modells zur Beschreibung thermisch-diffusiv instabiler Flammenfronten wird vorgestellt und anhand der Simulation einer Flamme mit einer zellulären Struktur diskutiert.

Kapitel 9: Der Inhalt der Arbeit wird zusammengefasst und ein Ausblick für weiterführende Arbeiten und Untersuchungen formuliert.

2 Grundlagen zur Beschreibung vorgemischter Flammen

In diesem Kapitel werden die für diese Arbeit relevanten physikalischen Grundlagen zur Beschreibung und Modellierung vorgemischter Flammen vorgestellt. Außerdem werden die mathematischen Grundlagen zur Formulierung der Erhaltungsgleichungen in einem krummlinigen bewegten Koordinatensystem eingeführt.

2.1 Physikalische Grundlagen

2.1.1 Eingrenzung des relevanten Strömungsregimes

In dieser Arbeit werden ausschließlich Verbrennungsprozesse von Gemischen mehrerer chemischer Spezies in der Gasphase behandelt. Die Beschreibungsgrundlage bilden Erhaltungsprinzipien der einzelnen Teilchensorten, der Gesamtenergie sowie des Impulses. Diese werden nicht auf molekularer Basis formuliert, sondern es wird eine kontinuumsmechanische Betrachtungsweise herangezogen. Diese ist gültig wenn die Knudsen-Zahl Kn , welche als das Verhältnis zwischen der mittleren freien Weglänge der Moleküle und der kleinsten Längenskala der Strömung definiert ist, ausreichend klein ist [82]. Es wird sich hier auf Strömungen bei kleiner Mach-Zahl Ma beschränkt, welche als Verhältnis der charakteristischen Strömungsgeschwindigkeit zu der Schallgeschwindigkeit definiert ist. Da die relativen Druckänderungen in einem strömenden Fluid mit Ma^2 skalieren [143], [56], können bei Strömungen mit kleiner Mach-Zahl $Ma \ll 1$ die Auswirkungen der strömungsbedingten Druckänderungen auf die Thermodynamik und die chemische Kinetik vernachlässigt werden [56].

Weiterhin wird sich hier auf die Betrachtung von Flammen in einer offenen Umgebung beschränkt, bei der der thermodynamische Druck konstant und gleich dem Umgebungsdruck bleibt. Schallwellen werden vernachlässigt und Dichteänderungen werden nur aufgrund von Temperaturänderung und Konzentrationsänderung berücksichtigt (dynamisch inkompressibles Fluid [56], [145]).

2.1.2 Charakterisierung des Fluids

Betrachtet wird ein Gasgemisch N unterschiedlicher Spezies. Es wird angenommen, dass die einzelnen Spezies in der Gasphase sowie das Gasgemisch selbst als ideales Gas beschrieben werden können. Die Annahme eines idealen Gases ist in der Regel bei Verbrennungsprozessen erlaubt, solange der Druck wesentlich niedriger als der kritische Druck ist und die Temperatur höher als die kritische Temperatur [137]. Der Partialdruck einer Spezies k in der Mischung kann folgendermaßen definiert werden [5]:

$$p_k := \frac{n_k}{n} p = \mathcal{Y}_k p , \quad (2.1)$$

mit der Stoffmenge n_k der Spezies k , der Gesamtstoffmenge n und dem Druck p . Das Verhältnis n_k/n in (2.1) wird als Molenbruch \mathcal{Y}_k der k -ten Spezies im Gemisch bezeichnet. Nach dem Gesetz von Dalton gilt, dass der Partialdruck p_k der Spezies k gleich dem Druck des reinen Gases der Spezies k ist, wenn es das Volumen V_m des Gemischs annimmt und dessen Temperatur besitzt [5]. Mit der Zustandsgleichung idealer Gase gilt somit für den Partialdruck

$$p_k = \frac{n_k \mathcal{R} T}{V_m} , \quad (2.2)$$

mit der universellen Gaskonstante \mathcal{R} ($8,314 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$) und der Temperatur T [5]. Der Druck p des Gemischs ist die Summe der Partialdrücke der einzelnen Komponenten [5] und somit folgt mit (2.2):

$$p = \sum_{k=1}^N p_k = \sum_{k=1}^N \frac{n_k \mathcal{R} T}{V_m} = \sum_{k=1}^N \frac{m_k \mathcal{R} T}{M_k V_m} = \sum_{k=1}^N \frac{\rho_k \mathcal{R} T}{M_k} = \sum_{k=1}^N \rho_k \mathcal{R}_k T , \quad (2.3)$$

mit der Masse m_k , der molaren Masse M_k , der Dichte ρ_k und der individuellen Gaskonstante $\mathcal{R}_k = \mathcal{R}/M_k$ der Spezies k . Die Dichte ρ_k kann folgendermaßen ausgedrückt werden:

$$\rho_k = \frac{m_k}{V_m} = \frac{m_k \rho}{m} = Y_k \rho, \quad (2.4)$$

wobei die auf die Gesamtmasse bezogene Masse der Spezies k als Massenbruch Y_k bezeichnet wird. Für den Gesamtdruck folgt nach Einsetzen von (2.4) in (2.3):

$$p = \sum_{k=1}^N \frac{\rho Y_k \mathcal{R} T}{M_k} = \frac{\rho \mathcal{R} T}{M}, \quad (2.5)$$

mit der mittleren molaren Masse der Mischung [137]

$$M = \left(\sum_{k=1}^N \frac{Y_k}{M_k} \right)^{-1}. \quad (2.6)$$

Im Rahmen einer kontinuumsmechanischen Betrachtung der Gasmischung als ein einphasiges Fluid das jedoch aus mehreren Komponenten besteht, wird die Strömungsgeschwindigkeit \mathbf{v} der Gasmischung als massengemittelte Geschwindigkeit des Gemischs [10], [18] bzw. als mittlere Massengeschwindigkeit des Schwerpunkts [137] des Gemischs folgendermaßen definiert:

$$\mathbf{v} = \sum_{k=1}^N Y_k \mathbf{v}_k. \quad (2.7)$$

In (2.7) ist \mathbf{v}_k die Geschwindigkeit der k -ten Spezies, welche nicht die Geschwindigkeit eines einzelnen Moleküls der k -ten Spezies ist, sondern die Summe der Geschwindigkeiten der Moleküle der k -ten Spezies in einem kleinen Volumenelement bezogen auf deren Anzahl im Volumenelement [10]. Die Geschwindigkeit \mathbf{v}_k der k -ten Spezies kann so interpretiert werden, als läge nur ein einziges Kontinuum dieser Spezies vor [4].

In dieser Arbeit erfolgt die Charakterisierung des reaktiven Fluids im Rahmen der hier behandelten vorgemischten Verbrennung in der Gasphase mit Hilfe des Äquivalenzverhältnis [137] des Frischgases:

$$\Phi = \frac{Y_{\text{Br}}}{Y_{\text{Ox}}} \left(\frac{Y_{\text{Br}}}{Y_{\text{Ox}}} \right)_{\text{stöch}}^{-1}, \quad (2.8)$$

mit dem Massenbruch Y_{Br} des Brennstoffs und Y_{Ox} des Oxidationsmittels. In denen hier betrachteten Flammen dient Luft als Oxidationsmittel. Der Ausdruck $(Y_{\text{Br}}/Y_{\text{Ox}})_{\text{stöch}}$ bezeichnet das Massenbruchverhältnis (oder das direkte Verhältnis der Massen) von Brennstoff und Oxidationsmittel in einem Gemisch das stöchiometrisch brennen kann. Dabei reagieren Brennstoff und Oxidationsmittel vollständig miteinander und als Verbrennungsprodukte werden nur Kohlendioxid und Wasser gebildet [137].

2.1.3 Erhaltungsgleichungen

Die Erhaltungsgleichungen werden in diesem Abschnitt zunächst in einem ruhenden Bezugssystem in koordinatenunabhängiger Schreibweise formuliert.

Massenerhaltung

Die Erhaltung der Gesamtmasse wird differentiell durch die Kontinuitätsgleichung [106]

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0 \quad (2.9)$$

beschrieben, die hier in kompressibler Form formuliert ist um die Dichteänderung des Fluids zu berücksichtigen.

Impulserhaltung

Die Impulserhaltung wird hier nicht für jede einzelne Spezies getrennt formuliert, sondern für das Gemisch als ein einziges Kontinuum. Mit Ausnahme der Schwerkraft werden äußere Volumenkräfte vernachlässigt (z.B. elektrische Kräfte). Die differentielle Formulierung der Impulserhaltung lautet dann [106]

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{v})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \otimes \mathbf{v}) = -\nabla p + \rho \mathbf{g} + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} , \quad (2.10)$$

mit der Divergenz des viskosen Spannungstensors $\nabla \cdot \boldsymbol{\tau}$, dem dyadischen Produkt $\rho \mathbf{v} \otimes \mathbf{v}$ der Vektoren $\rho \mathbf{v}$ und \mathbf{v} , und dem Gravitationsvektor \mathbf{g} . Es wird angenommen, dass das Gemisch ein Newtonsches Medium ist, so dass der Tensor der viskosen Spannungen $\boldsymbol{\tau}$ lautet [106]:

$$\boldsymbol{\tau} = \mu \left(\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \mathbf{v}) \mathbf{I} \right) , \quad (2.11)$$

mit dem Gradienten des Geschwindigkeitsvektors $\nabla \mathbf{v}$, der dynamischen Viskosität μ und der Identitätsmatrix \mathbf{I} . In (2.11) ist die Volumenviskosität des Fluids vernachlässigt, eine Annahme die nur für monoatomische Gase exakt erfüllt ist, jedoch bei Verbrennungsprozessen üblicherweise getroffen wird [143], [79]. In [4] wird eine verschwindende Volumenviskosität bei kompressiblen Fluiden als eine Art Kompatibilitätsbedingung zwischen dem thermodynamischen Druck und dem Druck aus dem Mittelwert der Normalspannungen formuliert.

In dieser Arbeit werden ausschließlich vorgemischte Flammen in einem Gemisch aus Brennstoff und Luft behandelt. Die Viskosität des Gemischs wird durch die Viskosität von Luft angenähert. Dazu wird für die dynamische Viskosität ein empirischer Ansatz von Sutherland verwendet [129]:

$$\mu(T) = \mu_{\text{ref}} \frac{T_{\text{ref}} + T_{\text{S}}}{T + T_{\text{S}}} \left(\frac{T}{T_{\text{ref}}} \right)^{3/2} , \quad (2.12)$$

mit dem Wert μ_{ref} bei der Referenztemperatur T_{ref} . (2.12) kann auch in folgender Form angegeben werden

$$\mu(T) = \frac{C_{\text{ref}} T^{3/2}}{T + T_{\text{S}}} \quad (2.13)$$

mit $C_{\text{ref}} = \mu_{\text{ref}}(T_{\text{ref}} + T_{\text{S}}) (1/T_{\text{ref}})^{3/2}$. Parameterwerte für Luft aus [69] sind $C_{\text{ref}} = 1,458 \cdot 10^{-6} \text{ kg m}^{-1} \text{ s}^{-1} \text{ K}^{-1/2}$ und $T_{\text{S}} = 110,4 \text{ K}$ für μ in Pas.

Speziesmassenerhaltung

Die Erhaltungsgleichung für die Masse einer Spezies k wird in dieser Arbeit mit Hilfe des Massenbruchs Y_k formuliert und lautet [57]:

$$\frac{\partial(\rho Y_k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}_k Y_k) = \omega_k , \quad (2.14)$$

wobei ω_k der volumetrische Produktionsterm (positiv bei Produktion, negativ bei Verbrauch) aufgrund von chemischer Reaktion ist. Die Geschwindigkeit \mathbf{v}_k der Spezies k kann als Überlagerung der Strömungsgeschwindigkeit \mathbf{v} und einer zusätzlichen Diffusionsgeschwindigkeit \mathbf{V}_k beschrieben werden [57]. Mit dem diffusiven Massenfluss

$$\mathbf{j}_k = \rho Y_k \mathbf{V}_k \quad (2.15)$$

schreibt sich (2.14):

$$\frac{\partial(\rho Y_k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} Y_k) = -\nabla \cdot \mathbf{j}_k + \omega_k . \quad (2.16)$$

Zur numerischen Lösung der Spezieserhaltungsbedingung muss die diffusive Massendichte \mathbf{j}_k oder die Diffusionsgeschwindigkeit \mathbf{V}_k bekannt sein. Die grundlegenden Gleichungen zur Beschreibung der Diffusion von Spezies in einem Gasgemisch sind die Maxwell-Stefan Gleichungen, die in einem Gleichungssystem alle Diffusionsgeschwindigkeiten mit allen Massen- und Molenbrüchen, mit deren Gradienten sowie mit den Druckgradienten, den Temperaturgradienten und allen spezifischen Kräften koppeln [57]. Die Lösung der Maxwell-Stefan Gleichungen ist dadurch sehr rechenintensiv und für den Detaillierungsgrad der Beschreibung vorgemischter Flammen in dieser Arbeit zu aufwendig.

Für den hier vorgestellten Modellierungsansatz wird die einfachste Beschreibung der Diffusionsgeschwindigkeit gewählt. Dabei wird die Diffusion einer Spezies aufgrund des Temperaturgradienten (Soret-Effekt, Thermodiffusion), der Wärmetransport aufgrund von Konzentrationsgradienten (Dufour-Effekt) und die Diffusion aufgrund von Druckgradienten (Druckdiffusion) vernachlässigt. Diese Vereinfachungen sind bei Verbrennungsprozessen üblich [137]. Bei Flammen in Gemischen aus Brennstoff und Luft liegen alle Spezies mit Ausnahme von Stickstoff in der Regel in geringen Konzentrationen vor. Die Diffusion einer Spezies kann somit relativ zum Gemisch betrachtet werden, dessen Eigenschaften maßgeblich durch die Komponente Stickstoff festgelegt sind.

Mit den getroffenen Annahmen und Vereinfachungen resultiert für die Beschreibung des Diffusionsflusses das Ficksche Gesetz [57]:

$$\mathbf{j}_k = -\rho D_k^M \nabla Y_k , \quad (2.17)$$

mit dem Diffusionskoeffizient D_k^M der Spezies k im Gemisch. Mit (2.17) folgt aus (2.16):

$$\frac{\partial(\rho Y_k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} Y_k) = \nabla \cdot (\rho D_k^M \nabla Y_k) + \omega_k . \quad (2.18)$$

Die Berechnung des Diffusionskoeffizienten D_k^M für eine Spezies k kann über die Lewis-Zahl Le_k erfolgen, welche die Diffusivität D_k^M der Spezies mit der thermischen Diffusivität (Temperaturleitfähigkeit) κ_T verbindet [123]:

$$Le_k = \frac{\lambda}{\rho c_p D_k^M} = \frac{\kappa_T}{D_k^M} , \quad (2.19)$$

mit der Wärmeleitfähigkeit λ und der spezifischen Wärmekapazität bei konstantem Druck c_p . Mit der Definition (2.19) und der Annahme einer konstanten Lewis-Zahl folgt aus (2.18):

$$\frac{\partial(\rho Y_k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} Y_k) = \frac{1}{Le_k} \nabla \cdot \left(\frac{\lambda}{c_p} \nabla Y_k \right) + \omega_k . \quad (2.20)$$

Chemischer Quellterm

Der Quellterm ω_k in der Transportgleichung einer Spezies beschreibt die Produktion der Spezies (negativ bei Verbrauch) aufgrund chemischer Reaktionen. Die Gesamtmasse aller Spezies kann durch chemische Reaktionen nicht verändert werden, woraus die Bedingung [56]

$$\sum_{k=1}^N \omega_k = 0 \quad (2.21)$$

folgt. Der chemische Quellterm ω_k einer Spezies k setzt sich aus den Anteilen sämtlicher Reaktionen eines Reaktionsmechanismus zusammen, in denen die Spezies k eingeht. Allgemein kann der Quellterm folgendermaßen formuliert werden [56], [137]:

$$\omega_k = M_k \sum_{i=1}^R \left[(\nu''_{k,i} - \nu'_{k,i}) \left(k_i^f \prod_{j=1}^N C_j^{\nu'_{k,i}} - k_i^b \prod_{j=1}^N C_j^{\nu''_{k,i}} \right) \right] . \quad (2.22)$$

In (2.22) ist M_k die molare Masse der Spezies k , R die Anzahl an chemischen Reaktionen des gesamten Reaktionsmechanismus, $\nu'_{k,i}$ bzw. $\nu''_{k,i}$ sind die stöchiometrischen Koeffizienten der Spezies k als Edukt bzw. als Produkt der Reaktion i , k_i^f bzw. k_i^b sind die Geschwindigkeitskoeffizienten der Hin- bzw. Rückreaktion i und $C_j = \rho Y_j / M_j$ ist die Konzentration der Spezies j . Der Geschwindigkeitskoeffizient einer Reaktion wird im Allgemeinen mit einem Arrhenius-Ansatz mit temperaturabhängigem präexponentiellen Term ausgedrückt [137]:

$$k_i = A_i T^{\beta_i} \exp \left(\frac{-E_{a,i}}{RT} \right) , \quad (2.23)$$

mit den Koeffizienten A_i , β_i und der Aktivierungsenergie $E_{a,i}$.

Energieerhaltung

In dieser Arbeit werden Flammen in offenen Gebieten bei niedrigen Mach-Zahlen betrachtet. Es werden keine externen Energiequellen (z.B. Strahlung) berücksichtigt. Bei der in Kapitel 4 durchgeführten Modellierung wird keine detaillierte Zusammensetzung des Gemischs betrachtet werden, sondern lediglich eine Spezies. Mit diesen Vereinfachungen und Annahmen wird hier die Energieerhaltung in Form einer Transportgleichung für die Temperatur formuliert [106]:

$$c_p \left(\frac{\partial(\rho T)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} T) \right) = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) + \omega_T , \quad (2.24)$$

mit dem Quellterm der Wärmefreisetzung durch chemische Reaktion ω_T .

Zur Simulation von Methan/Luft-Flammen wird in dieser Arbeit eine von Smooke [123] vorgeschlagene Korrelation für den Ausdruck λ/c_p des Gemischs verwendet:

$$\frac{\lambda}{c_p} = 2,58 \cdot 10^{-5} \left(\frac{T}{298 \text{ K}} \right)^{0,7} , \quad (2.25)$$

mit der Temperatur T in K und dem Ergebnis λ/c_p in $\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-1}$. Für vorgemischte Flammen wurde (2.25) in [123] unter stöchiometrischen Bedingungen bei einem Druck von 1 atm und 30 atm sowie mit einem Äquivalenzverhältnis von $\Phi = 0,6$ bei einem Druck von 1 atm validiert.

Durch den Überschuss an Stickstoff bei den hier betrachteten Flammen in Gemischen von Brennstoff und Luft wird die spezifische Wärmekapazität c_p der Mischung durch Stickstoff dominiert [74]. In dieser Arbeit wird eine Temperaturabhängigkeit des c_p -Werts berücksichtigt.

2.2 Formulierung in krummlinigen, bewegten Koordinaten

Die in 2.1 angegebenen Transportgleichungen zur Beschreibung einer reaktiven gasförmigen Strömung sind durch Verwendung des Nabla-Operators ∇ in einer koordinatenunabhängigen Darstellung. Die Herleitung des Reaktionszonenmodells in dieser Arbeit wird in einem Koordinatensystem durchgeführt, das sich mit der Reaktionszone bewegt. In diesem Abschnitt wird dafür die Formulierung der Transportgleichungen in einem bewegten, krummlinigen Koordinatensystem vorgenommen.

Zunächst wird folgende Summationskonvention festgelegt: Es wird eine Summation über den Wertebereich eines Index durchgeführt, wenn dieser einmal in der oberen Position und einmal in der unteren Position innerhalb eines Terms oder innerhalb eines Produkts von Termen vorkommt. Dabei zählt ein oberer Index im Nenner als unterer Index im Zähler. Lateinische Indizes (i, j) besitzen einen Wertebereich von 1 bis 3 und griechische Indizes (α, β) einen Wertebereich von 2 bis 3 [4], [30].

Bevor auf die Formulierung von Differentialoperatoren in krummlinigen Koordinaten eingegangen wird, müssen noch einige Grundbegriffe eingeführt werden. Weitere ausführliche Erläuterungen und Herleitungen zur Tensorrechnung und zu krummlinigen Koordinaten können in den Referenzen [4], [76], [128] oder [138] nachgelesen werden. Grundlage für die Formulierungen in dieser Arbeit sind im Wesentlichen die Referenzen [4] und [128].

2.2.1 Basisvektoren

Als Koordinatenfläche wird eine Fläche im Raum bezeichnet, auf der eine Koordinate einen konstanten Wert besitzt. Die Schnittmenge zweier Koordinatenflächen ist eine Koordinatenlinie. Entlang einer Koordinatenlinie ändert sich der Wert nur einer Koordinate. Die hier verwendeten krummlinigen Koordinaten werden mit (x^1, x^2, x^3) bezeichnet. Die kartesischen Koordinaten eines ruhenden Bezugssystems werden mit (x, y, z) bezeichnet.

Es wird ein allgemeiner Punkt P im Raum betrachtet. Bezüglich der festen Basisvektoren $(\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z)$ besitzt P die kartesischen Koordinaten (x, y, z) , so dass sein Ortsvektor lautet:

$$\mathbf{r} = x(x^1, x^2, x^3)\mathbf{e}_x + y(x^1, x^2, x^3)\mathbf{e}_y + z(x^1, x^2, x^3)\mathbf{e}_z. \quad (2.26)$$

Im Punkt P schneiden sich drei Koordinatenlinien des krummlinigen Koordinatensystems. Die drei Vektoren

$$\mathbf{g}_i = \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial x^i}, \quad \text{für } i = 1, 2, 3 \quad (2.27)$$

sind tangential an den Koordinatenlinien der jeweiligen Koordinate x^i . \mathbf{g}_i sind die *kovarianten Basisvektoren* des krummlinigen Koordinatensystems im Punkt P . Es ist hier

wichtig zu erwähnen, dass die Basisvektoren \mathbf{g}_i nicht normiert sind und keine feste Richtung im Raum besitzen. Ihre Länge und Richtung hängt im Allgemeinen von der Lage des Punkts P ab.

Ein zweiter Satz von Basisvektoren ist durch Vektoren gegeben, die normal zu den drei Koordinatenflächen $x^i = \text{konst.}$ sind:

$$\mathbf{g}^i = \nabla x^i, \text{ für } i = 1, 2, 3. \quad (2.28)$$

\mathbf{g}^i sind die *kontravarianten Basisvektoren* des krummlinigen Koordinatensystems. Sie besitzen genauso wie die kovarianten Basisvektoren weder eine konstante Länge noch eine konstante Richtung im Raum. Die Richtungen beider Sätze von Basisvektoren stimmen im Allgemeinen auch nicht überein. Ein Vektor \mathbf{a} kann mit Hilfe beider Sätze von Basisvektoren dargestellt werden

$$\mathbf{a} = a^i \mathbf{g}_i = (\mathbf{a} \cdot \mathbf{g}^i) \mathbf{g}_i = a_i \mathbf{g}^i = (\mathbf{a} \cdot \mathbf{g}_i) \mathbf{g}^i, \quad (2.29)$$

wobei a^i die kontravarianten Komponenten und a_i die kovarianten Komponenten des Vektors \mathbf{a} sind.

2.2.2 Metrik im krummlinigen Koordinatensystem

Um räumliche Differentialoperatoren in den krummlinigen Koordinaten formulieren zu können, muss ein Maß eingeführt werden, das es erlaubt räumliche Distanzen mit Hilfe der krummlinigen Koordinaten auszudrücken. Hierzu wird das Differential eines allgemeinen Ortsvektors \mathbf{r} betrachtet:

$$d\mathbf{r} = \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial x^i} dx^i = \mathbf{g}_i dx^i, \quad (2.30)$$

wobei (2.27) eingesetzt wurde. Die Länge eines differentiellen Wegstreckeninkrements ds in Richtung von $d\mathbf{r}$ ist gegeben durch $ds^2 = d\mathbf{r} \cdot d\mathbf{r}$ und durch Einsetzen von (2.30) folgt daraus

$$ds^2 = \mathbf{g}_i \cdot \mathbf{g}_j dx^i dx^j = g_{ij} dx^i dx^j. \quad (2.31)$$

Die 9 Skalarprodukte der kovarianten Basisvektoren in (2.31) sind die kovarianten Komponenten eines symmetrischen Tensors $g_{ij} = g_{ji}$, welcher als Metriktensor bezeichnet wird [128]. Der Metriktensor stellt nach (2.31) die Beziehung zwischen infinitesimalen Inkrementen von Koordinaten zu der Distanz der dazugehörigen räumlichen Verschiebung her [4], [138]. Für ein orthogonales Koordinatensystem ist $g_{ij} = 0$ für $i \neq j$ und für die Terme auf der Diagonalen des Metriktensors können die Skalierungsfaktoren h_i eingeführt werden, wobei $g_{ii} = h_i^2$ [4]. Das Volumeninkrement des krummlinigen Koordinatensystems lautet

$$dV = \sqrt{g} dx^1 dx^2 dx^3, \quad (2.32)$$

mit dem Volumenelement $\sqrt{g} = \det(g_{ij})$, das der Determinante der Jacobi-Matrix der Koordinatentransformation von den kartesischen in die krummlinigen Koordinaten entspricht.

2.2.3 Differentialoperatoren im krummlinigen Koordinatensystem

Zeitliche Ableitung

Es wird die Zeitableitung $\partial\Psi/\partial t$ eines allgemeinen skalaren Felds Ψ betrachtet. Im bewegten System wird die Zeit mit τ bezeichnet. Es gibt in dieser Arbeit keinen Unterschied zwischen der Zeit im bewegten System und der Zeit in einem raumfesten kartesischen System, $\tau = t$. Die zeitliche Änderungsrate eines Skalarfelds aus der Sicht eines Beobachters der sich *fest* im bewegten System befindet (konstante Koordinaten x^i) ist jedoch im Allgemeinen verschieden von der Zeitableitung aus der Sicht eines ruhenden Beobachters im kartesischen Koordinatensystem. Im bewegten Koordinatensystem lautet die Zeitableitung [128]

$$\frac{\partial\Psi}{\partial\tau} = \frac{\partial\Psi}{\partial t} + \frac{\partial\mathbf{r}}{\partial\tau} \cdot \nabla\Psi . \quad (2.33)$$

Hierbei sind bei einer partiellen Ableitung nach τ die Koordinaten x^i konstant gehalten. $\partial\mathbf{r}/\partial\tau$ ist die Geschwindigkeit von Punkten mit konstanten Koordinaten x^i relativ zum ruhenden Bezugssystem und wird mit \mathbf{u} bezeichnet. Im Rahmen numerischer Simulationen auf bewegten Gittern wird \mathbf{u} auch Gittergeschwindigkeit genannt. Im bewegten Koordinatensystem wirkt sich die Geschwindigkeit \mathbf{u} wie ein zusätzlicher konvektiver Term aus. Die Beziehung (2.33) gilt nur für skalare Größen Ψ . Hier wird nicht näher auf die Zeitableitung von Tensorfeldern der Stufe höher als 0 eingegangen, da bei der Herleitung der integralen Formulierung der Reaktionszone nur eine skalare Transportgleichung verwendet wird.

Divergenz und Gradient in krummlinigen Koordinaten

In [128] werden Ausdrücke für räumliche Differentialoperatoren durch Anwendung des Gaußschen Integralsatzes hergeleitet. In [4] und [138] dagegen werden die Operatoren über das Konzept der kovarianten Ableitung eingeführt. Der Gradient eines Skalars lautet

$$\nabla\Psi = \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial(\sqrt{g} \mathbf{g}^i \Psi)}{\partial x^i} , \quad (2.34)$$

und für die Divergenz eines Vektors in kontravarianten Komponenten gilt

$$\nabla \cdot \mathbf{a} = \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial(\sqrt{g}(\mathbf{a} \cdot \mathbf{g}^i))}{\partial x^i} = \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial(\sqrt{g} a^i)}{\partial x^i} . \quad (2.35)$$

In den Ausdrücken in (2.34) und in (2.35) ist zu erkennen, dass neben der Variation (bezüglich der krummlinigen Koordinaten) des Skalarfelds und der Vektorkomponenten auch die Variation der lokalen *metrischen Gegebenheiten* (ausgedrückt über \sqrt{g}) eingeht.

2.2.4 Generische skalare Transportgleichung

Die generische Transportgleichung für das Skalarfeld Ψ :

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v}\Psi) + \nabla \cdot (D\nabla\Psi) + S = 0 , \quad (2.36)$$

kann jetzt in das bewegte krummlinige Koordinatensystem transformiert werden. Zunächst wird nur der konvektive Anteil

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v}\Psi) = 0 \quad (2.37)$$

berücksichtigt. Mit der Beziehung für die Zeitableitung (2.33) sowie (2.34) und (2.35) folgt aus (2.37) die Formulierung [128]

$$\frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial(\sqrt{g}\Psi)}{\partial \tau} + \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial(\sqrt{g}(v^i - u^i)\Psi)}{\partial x^i} = 0, \quad (2.38)$$

wobei u^i die kontravariante Komponente der Ausbreitungsgeschwindigkeit des bewegten Systems ist. In der konservativen Formulierung (2.38) taucht die Bewegung des Koordinatensystems somit in natürlicher Weise im Konvektionsterm auf, in Form einer Relativgeschwindigkeit $v^i - u^i$.

Für die gesamte generische Transportgleichung (2.36) folgt [128]:

$$\frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial(\sqrt{g}\Psi)}{\partial \tau} + \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial(\sqrt{g}(v^i - u^i)\Psi)}{\partial x^i} + \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial(\sqrt{g}Dg^{ij}(\partial\Psi/\partial x^j))}{\partial x^i} + S = 0. \quad (2.39)$$

Der Term $g^{ij}(\partial\Psi/\partial x^j)$ im Diffusionsterm in (2.39) ist bei nicht-orthogonalen Basisvektoren wichtig. Demnach können Ableitungen des Felds Ψ nach allen Koordinaten x^j zu einem diffusiven Fluss in Richtung von \mathbf{g}^i beitragen.

Eine elementare Beziehung bei der Formulierung mittels eines bewegten Koordinatensystems ist die sogenannte *geometric conservation law* [138], [73], [30]:

$$\frac{\partial\sqrt{g}}{\partial \tau} + \frac{\partial(-\sqrt{g}u^i)}{\partial x^i} = 0, \quad (2.40)$$

die mit $\Psi = 1$, $v^i = 0$, $D = 0$ und $S = 0$ aus (2.39) folgt.

2.3 Relevante Aspekte für die Flammenmodellierung

2.3.1 Geschwindigkeiten, Längen und Zeiten

Zur mathematischen Beschreibung eines Flammenausbreitungsprozesses wird eine Normalenrichtung durch den Normalenvektor \mathbf{n} definiert. Der Normalenvektor \mathbf{n} zeigt vom unverbrannten Gemisch aus in Richtung der Rauchgase. Diese Richtungskonvention wird in der gesamten vorliegenden Arbeit beibehalten. Die absolute Ausbreitungsgeschwindigkeit \mathbf{u} der Flammenfront bezeichnet die Geschwindigkeit, mit der sich Punkte innerhalb der Front relativ zu einem ruhenden Bezugssystem bewegen. Bei einer gleichmäßigen Flammenausbreitung breiten sich alle Punkte entlang der Normalenrichtung mit derselben Geschwindigkeit aus. Die Dicke der Flamme bleibt dann konstant.

Eine weitere Beschreibung der Geschwindigkeit, mit der sich eine Flammenfront ausbreitet, erfolgt über ihre Brenngeschwindigkeit s , die als Relativgeschwindigkeit zwischen der Flammenfront und der Strömung folgendermaßen definiert ist [109]:

$$s\mathbf{n} = \mathbf{v} - \mathbf{u}. \quad (2.41)$$

Die Brenngeschwindigkeit s ist ein Skalarfeld das im gesamten Raum definiert ist, der von der Flammenstruktur eingenommen wird. Dahingegen ist die laminare Flammengeschwindigkeit s_L der spezielle Wert der Brenngeschwindigkeit s an der unverbrannten Seite der Flammenstruktur.

Eine Möglichkeit zur Definition der Ausbreitungsgeschwindigkeit \mathbf{u} erfolgt über Isoflächen eines reaktiven Skalarfelds, z.B. der Temperatur T oder des Massenbruchs Y einer Spezies. In dem Fall stellt \mathbf{u} die Ausbreitungsgeschwindigkeit der Isoflächen dar. Über den Gradienten des Skalarfelds lässt sich auch die Normalenrichtung festlegen. Ein in Richtung der verbrannten Gase zeigender normierter Normalenvektor schreibt sich dann:

$$\mathbf{n} = \frac{\nabla T}{|\nabla T|} \quad \text{oder} \quad \mathbf{n} = -\frac{\nabla Y}{|\nabla Y|}, \quad (2.42)$$

wenn Y in der Flamme verbraucht wird.

Die Flammenstruktur einer vorgemischten Flamme besitzt eine bestimmte normale Ausdehnung im Raum, die als Flammendicke l_F bezeichnet wird. Eine mögliche Definition der Flammendicke basiert auf einer geometrischen Betrachtung des Temperaturprofils normal zur Flamme und schreibt sich [109]:

$$l_F = \frac{T_b - T_u}{\max(|\partial T/\partial n|)}, \quad (2.43)$$

wobei $\partial T/\partial n$ die Richtungsableitung des Temperaturfelds normal zur Flamme ist.

Eine andere Abschätzung der Flammendicke lautet [143]

$$l_F = \frac{\kappa_T}{s_L}, \quad (2.44)$$

mit der thermischen Diffusivität oder Temperaturleitfähigkeit κ_T . Die Abschätzung (2.44) gilt für die diffusive Längenskala eines Skalars bei einer gegebenen Geschwindigkeitsskala [106].

Aus der charakteristischen Flammendicke l_F und der laminaren Flammengeschwindigkeit s_L kann eine charakteristische Flammenzeit

$$t_F = \frac{l_F}{s_L} \quad (2.45)$$

gebildet werden, welche näherungsweise die Zeit darstellt, die ein Strömungspartikel benötigt um die Flamme zu durchströmen (aufgrund der thermischen Expansion nimmt in Realität die Brenngeschwindigkeit durch die Flamme hindurch zu). Aus (2.45) ist ersichtlich, dass die Flammenzeit t_F die Zeit ist, die die Flamme benötigt, um über eine Strecke zu brennen, die gleich ihrer Flammendicke ist [109]. Außerdem kann mit der Beziehung (2.44) die Flammenzeit

$$t_F = \frac{\kappa_T}{s_L^2}, \quad (2.46)$$

als eine diffusive Zeitskala interpretiert werden [109].

2.3.2 Aspekte der Kinematik und Geometrie einer Oberfläche

Eine Möglichkeit zur Beschreibung einer Oberfläche im Raum besteht darin, sie implizit als eine Isofläche eines Skalarfelds $\Psi(\mathbf{x}, t)$ zu definieren [117]. Hier wird eine Oberfläche zunächst durch die spezielle Wahl

$$\Psi = 0 \quad (2.47)$$

definiert. Der normierte Normalenvektor der Oberfläche ist dann gegeben durch

$$\mathbf{n}_{\Psi=0} = \left(\frac{\nabla\Psi}{|\nabla\Psi|} \right)_{\Psi=0}, \quad (2.48)$$

und zeigt in Richtung zunehmender Ψ -Werte [117]. Die kinematische Bedingung, dass sich ein Punkt der Oberfläche mit der Geschwindigkeit \mathbf{u} bewegt, kann anhand des Ψ -Felds durch folgende Beziehung ausgedrückt werden:

$$\frac{d\Psi}{dt} := \frac{\partial\Psi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla\Psi = 0. \quad (2.49)$$

Die Bedingung (2.49) besagt, dass ein Beobachter der sich mit der Geschwindigkeit \mathbf{u} auf einer Isofläche des Skalarfelds Ψ mitbewegt, keine zeitliche Änderung des Skalarfelds sieht. Die mit \mathbf{u} gebildete substantielle Ableitung von Ψ muss gleich Null sein. (2.49) ist eine rein kinematische Bedingung und gilt für ein beliebiges Geschwindigkeitsfeld $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ und für jede Isofläche von Ψ . Wenn sich die Isoflächen von Ψ nur mit der lokalen Strömungsgeschwindigkeit \mathbf{v} eines Strömungsfelds bewegen, dann gilt $\mathbf{u} = \mathbf{v}$ und die Isoflächen sind materielle Flächen der Strömung, da sie stets von denselben Fluidpartikeln gebildet werden [4]. Bei einer Flamme hingegen wirken Diffusionsvorgänge und chemische Quellterme auf das Skalarfeld Ψ , so dass Isoflächen $\Psi = \text{konst.}$ eine eigene Ausbreitungsgeschwindigkeit relativ zur lokalen Strömungsgeschwindigkeit \mathbf{v} besitzen. Die absolute Ausbreitungsgeschwindigkeit \mathbf{u} setzt sich dann aus einer Überlagerung der Bewegung durch die Strömung \mathbf{v} und der Relativbewegung $-\mathbf{sn}$ in Normalenrichtung zusammen [109]:

$$\mathbf{u} = \mathbf{v} - \mathbf{sn}, \quad (2.50)$$

wobei der normierte Normalenvektor

$$\mathbf{n} = \frac{\nabla\Psi}{|\nabla\Psi|} \quad (2.51)$$

für jede Isofläche von Ψ definiert ist. Die Festlegung der Richtung von \mathbf{n} und somit des Vorzeichens des Terms \mathbf{sn} in (2.50) ist willkürlich, muss jedoch konsistent beibehalten werden. In dieser Dissertation wird durchgehend die Definition (2.50) verwendet. Einsetzen von (2.50) mit (2.51) in (2.49) liefert die Beziehung

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla\Psi = s|\nabla\Psi|. \quad (2.52)$$

(2.52) ist die Level-Set-Formulierung der Bewegung einer Oberfläche $\Psi = \text{konst.}$, die durch die Strömung konvektiv transportiert wird und sich in Richtung von $-\mathbf{n}$ mit der Geschwindigkeit s relativ zur Strömung bewegt [101].

Eine wichtige geometrische Eigenschaft einer Oberfläche im Raum ist ihre lokale Krümmung $2c$. Der Faktor 2 ist hier konventionsbedingt eingeführt und wird in dieser Arbeit konsequent beibehalten. Demnach steht c für die mittlere Krümmung, die über die lokalen Hauptkrümmungskreisradien R_1 und R_2 definiert werden kann [4],[14]:

$$c = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right), \quad (2.53)$$

und sich auf natürliche Weise aus der Divergenz des Normalenvektorfelds bestimmen lässt:

$$c = -\frac{1}{2} \nabla \cdot \mathbf{n}, \quad (2.54)$$

wobei [93, 24, 109]:

$$\nabla \cdot \mathbf{n} = \frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} . \quad (2.55)$$

Das Vorzeichen in (2.54) ist auch als Konvention festgelegt und wird in dieser Form in der ganzen Arbeit verwendet. Für eine Zylinderfläche mit dem Radius r^* ist $\nabla \cdot \mathbf{n} = 1/r^*$ und für eine Kugelfläche mit dem Radius r^* ergibt sich $\nabla \cdot \mathbf{n} = 2/r^*$, wenn \mathbf{n} jeweils in Richtung des zunehmenden Radius zeigt und die Fläche über das Skalarfeld $\Psi = r - r^*$ definiert ist [109]. Mit der Definition (2.51) für \mathbf{n} wird (2.54) folgendermaßen ausgewertet:

$$2c = -\nabla \cdot \left(\frac{\nabla \Psi}{|\nabla \Psi|} \right) . \quad (2.56)$$

(2.56) liefert ein Skalarfeld von Krümmungswerten, die an jedem Ort die lokale Krümmung der sich dort befindlichen Isofläche von Ψ darstellen.

2.3.3 Streckung einer Flamme

Bei der Definition der Flammenstreckung gibt es zwei verschiedene Betrachtungsweisen. Einerseits kann die Flammenstreckung integral über die Flammenzone definiert werden, welche eine räumliche Zone endlicher Dicke ist. Andererseits kann bei einer rein geometrischen Beschreibung die Flammenstreckung anhand der Streckung einer mathematischen Oberfläche ausgedrückt werden, welche die Flamme bzw. eine ausgewählte Fläche innerhalb der Flammenstruktur darstellt.

Betrachtung einer Flammenfläche

Die Streckung χ einer Oberfläche ist definiert als die relative zeitliche Änderung der Fläche A eines Flächenelements [142, 93, 19, 27]:

$$\chi = \frac{1}{A} \frac{dA}{dt} . \quad (2.57)$$

Die Eckpunkte des Flächenelements bleiben für alle Zeiten auf der Oberfläche und bewegen sich dabei entlang der Oberfläche mit der lokalen tangentialen Geschwindigkeitskomponente der Strömung.

Wenn die Oberfläche durchströmt wird, was bei einer Flamme der Fall ist, dann wird sie stets von neuen Fluidpartikeln gebildet und A ist keine materielle Fläche der Strömung. Die Zeitableitung in (2.57) ist somit im Allgemeinen keine substantielle oder materielle Zeitableitung [19]. Nur bei einer passiven Oberfläche, bei der sich jeder Punkt der Oberfläche mit der lokalen Strömungsgeschwindigkeit bewegt, ist die Zeitableitung in (2.57) per Definition eine materielle Ableitung.

Die Streckung besitzt die physikalische Dimension des Kehrwerts einer Zeit. Der Kehrwert der Streckung definiert eine charakteristische Zeit

$$\tau_\chi = \frac{1}{\chi} . \quad (2.58)$$

Aus der Definition (2.57) folgt nach einer Integration durch Trennung der Veränderlichen, dass sich A für eine gegebene Streckung χ exponentiell in der Zeit verändert und dabei τ_χ die Zeitkonstante der exponentiellen Variation ist: $A(t) \propto \exp(t/\tau_\chi)$.

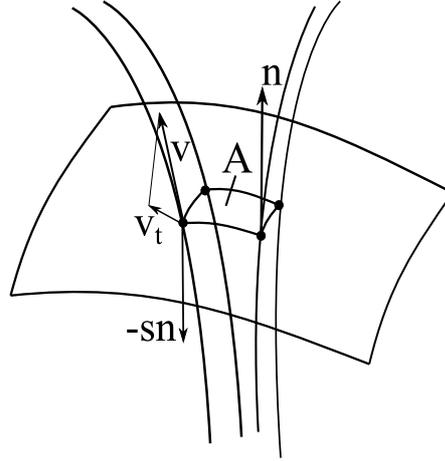


Abbildung 2.1: Prinzipbild zur Definition der Streckung einer Oberfläche: Das Flächenelement bleibt auf der Oberfläche und bewegt sich entlang der Oberfläche mit der lokalen tangentialen Geschwindigkeitskomponente \mathbf{v}_t . In Normalenrichtung \mathbf{n} bewegt es sich mit der Geschwindigkeit $\mathbf{v}_n \mathbf{n} - s \mathbf{n} = (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) \mathbf{n} - s \mathbf{n}$.

Die Definitionsformel (2.57) ist anschaulich, aber in der Praxis bei der Berechnung der Streckung von Flammen nicht einfach umzusetzen. Auf einer beliebig geformten Oberfläche in einem allgemeinen dreidimensionalen und instationären Strömungsfeld variiert die Streckung entlang der Oberfläche und in der Zeit. Aus diesem Grund wurden von mehreren Autoren, u.a. von Buckmaster [16] (1979), Matalon [93] (1983), Chung und Law [27] (1984), Candel und Poinso [24] (1990) und Class et al. [30] (2003) Formeln für die Streckung hergeleitet, die einfacher geometrisch interpretierbar sind und insbesondere die Berechnung der Flammenstreckung anhand von lokalen Größen (Strömungsgeschwindigkeit, Krümmung, Geschwindigkeit der Flammenfront) erlauben.

In der Arbeit von Candel und Poinso [24] wird eine Formel für die Streckung anhand eines Transporttheorems hergeleitet, welcher die Änderungsrate des Flusses eines Vektorfelds durch eine sich beliebig bewegende und beliebig geformte Oberfläche beschreibt¹. Wird die Geschwindigkeit der Punkte auf der Oberfläche mit \mathbf{u} bezeichnet, dann resultiert aus der Herleitung mit dem Transporttheorem für die Streckung [24]:

$$\chi = -\mathbf{n} \mathbf{n} : \nabla \mathbf{u} + \nabla \cdot \mathbf{u} . \quad (2.59)$$

Der Ausdruck $-\mathbf{n} \mathbf{n} : \nabla$ stellt den Gradientenoperator normal zur Oberfläche dar und der Term $-\mathbf{n} \mathbf{n} : \nabla \mathbf{u}$ kann in kartesischen Koordinaten folgendermaßen ausgedrückt werden [24], [109]:

$$-\mathbf{n} \mathbf{n} : \nabla \mathbf{u} = - \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 n_i n_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} . \quad (2.60)$$

¹Das in [24] benutzte Transporttheorem lautet:

$$\frac{d}{dt} \int_{A(t)} \mathbf{G} \cdot \mathbf{n} \, dA = \int_{A(t)} \left(\frac{\partial \mathbf{G}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{G} - \mathbf{G} \cdot \nabla \mathbf{u} + \mathbf{G} \nabla \cdot \mathbf{u} \right) \cdot \mathbf{n} \, dA ,$$

wobei $A(t)$ eine sich mit einer Geschwindigkeit \mathbf{u} bewegende Oberfläche ist und \mathbf{G} ein allgemeines Vektorfeld darstellt.

Nach einigen Zwischenrechnungen ergibt sich aus (2.59) die Beziehung

$$\chi = -\mathbf{n}\mathbf{n} : \nabla\mathbf{v} + \nabla \cdot \mathbf{v} - s\nabla \cdot \mathbf{n} . \quad (2.61)$$

Der letzte Term in (2.61) beinhaltet den Einfluss der räumlichen Form der Oberfläche und somit der Krümmung über den Ausdruck $\nabla \cdot \mathbf{n}$.

In Class et al. [30] (2003) wird eine Formel für die Streckung aus der Betrachtung der zeitlichen Änderung des Oberflächenelements einer Koordinatenfläche eines krummlinigen bewegten Koordinatensystems hergeleitet. Mit der absoluten Geschwindigkeit \mathbf{u} der Koordinatenfläche lautet dessen Streckung:

$$\chi = \nabla \cdot \mathbf{u} = \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial(\sqrt{g}u^j)}{\partial x^j} . \quad (2.62)$$

Bei der Bestimmung der Flammenstreckung mit den Formeln (2.59) oder (2.62) müssen die eingehenden Größen an der Oberfläche, deren Streckung ermittelt werden soll, bekannt sein. Werden die Formeln in einer Simulation mit Hilfe der lokalen Größen verwendet, dann liefern sie die Streckung der lokalen Isofläche von Ψ .

Integrale Definition der Streckung

De Goey und Ten Thijs Boonkcamp [39] (1997) führen eine integrale Definition der Flammenstreckung für Flammenstrukturen endlicher Dicke ein. Die Streckung K ist dabei definiert als die relative zeitliche Änderung

$$K = \frac{1}{M} \frac{dM}{dt} \quad (2.63)$$

der Masse

$$M = \int_{V(t)} \rho \, dV , \quad (2.64)$$

die sich in einem infinitesimalen Volumen $V(t)$ befindet, das sich mit der Geschwindigkeit \mathbf{u} von Flammenflächen bewegt. Die Formulierung von De Goey und Ten Thijs Boonkcamp [39] erweitert die klassische Streckungsformulierung über eine einzelne Flammenfläche, indem sie den Effekt einer variierenden Flammendicke (räumlich und zeitlich) sowie einer Variation der Dichte entlang der Flamme berücksichtigt. Eine Beschreibung des Konzepts der Streckung für Flammen endlicher Dicke und dessen Einfluss auf die Flammengeschwindigkeit wurde bereits von Buckmaster [16] (1979) veröffentlicht. Dabei wird die zeitliche Änderung des Volumens betrachtet, das einem Flächenelement der Flamme bei einer bestimmten Flammendicke zugeordnet werden kann.

In Class et al. [30] (2003) wird ebenfalls eine Definition der Streckung eingeführt, welche für Flammenstrukturen endlicher Dicke benutzt werden kann. Die Streckung ist als die relative zeitliche Änderung eines Flächenelements auf einer Flammenfläche definiert. Die Transversalgeschwindigkeit dieser Flammenfläche wird jedoch aus einer, über die Vorheizzone integrierten, Bedingung des Enthalpieflusses entlang der Flammenfläche definiert.

2.3.4 Regimes turbulenter vorgemischter Verbrennung

Die Interaktion einer vorgemischten Flamme mit einem Strömungsfeld kann in verschiedenen Regimes ablaufen. Zur Charakterisierung eines Regimes werden neben den Eigenschaften der Flamme selbst auch die charakteristischen Größen des instationären Strömungsfelds benötigt. Die verschiedenen Formen, die die Interaktion der Flamme mit dem Strömungsfeld annehmen kann, werden in einem Regime-Diagramm der turbulenten vorgemischten Verbrennung zusammengefasst. In dieser Arbeit wird sich auf das Regime-Diagramm aus Peters [104] (1986) und Peters [105] (1999) (bzw. aus [106]) bezogen. Die im Folgenden beschriebenen Konzepte stammen aus diesen Referenzen. Historisch bedingt wird ein solches Regime-Diagramm auch als Borghi-Diagramm bezeichnet [11].

Das instationäre Strömungsfeld wird über die Betrachtungsweise von Turbulenz als eine Vielzahl von Wirbeln (*eddies*) beschrieben. Es wird angenommen, dass das turbulente Strömungsfeld isotrop und homogen ist. Den Wirbeln, die den überwiegenden Teil der turbulenten kinetischen Energie beinhalten, wird die integrale Längenskala l_I zugeordnet. Diese kann aus der normierten Zwei-Punkt-Korrelation der Strömungsgeschwindigkeit ermittelt werden und hängt sehr stark von den Randbedingungen (z.B. Geometrie) des Strömungsproblems [137] sowie vom Mechanismus der die Turbulenz erzeugt ab [98]. Die Stärke der turbulenten Schwankungen kann bei isotroper homogener Turbulenz durch eine einzige Größe v' quantifiziert werden, die dem RMS-Wert (*root mean square*) der turbulenten Schwankungsgeschwindigkeit entspricht. Einem Wirbel der Größe l_I mit der turbulenten Fluktuationsgeschwindigkeit v' kann eine charakteristische Zeit

$$t_{\text{eddy}} = \frac{l_I}{v'} \quad (2.65)$$

zugeordnet werden, welche als *eddy time* oder *eddy turnover time* bezeichnet wird.

Das Regime-Diagramm turbulenter vorgemischter Verbrennung ist ein doppeltlogarithmisches Diagramm. Auf der Ordinate wird das Verhältnis der turbulenten Schwankungsgeschwindigkeit v' zu der laminaren Flammgeschwindigkeit s_L aufgetragen und auf der Abszisse das Längenskalenverhältnis aus integrelem Längenmaß l_I und Flammendicke l_F . Je größer die Ordinate v'/s_L , umso schneller wird eine Flammenfront gegenüber ihrer eigenen Ausbreitungsgeschwindigkeit gestört. Die einzelnen Verbrennungsregimes werden als Gebiete im Diagramm durch Geraden getrennt, die aufgrund spezifischer Werte charakteristischer dimensionsloser Kennzahlen definiert sind.

Eine Kennzahl ist die turbulente Reynolds-Zahl, die mit dem integralen Längemaß l_I und der turbulenten Schwankungsgeschwindigkeit v' gebildet wird [137], [109]:

$$\text{Re}_T = \frac{v' l_I}{\nu}, \quad (2.66)$$

mit einer charakteristischen kinematischen Viskosität ν . Eine physikalische Betrachtungsweise turbulenter Strömungen basiert auf dem Bild einer Energiekaskade, bei der eine Übertragung turbulenter kinetischer Energie von Wirbeln der Längenskala l_I bis hin zu den kleinsten Wirbeln der Kolmogorov-Längenskala l_K stattfindet. Auf der Kolmogorov-Längenskala sind Trägheitskräfte der turbulenten Wirbel und Reibungskräfte aufgrund der molekularen Viskosität von gleicher Größenordnung. Demzufolge ist auf dieser kleinsten Längenskala $\text{Re}_T = 1$ [109]. Die Kolmogorov-Längenskala stellt die kleinste Wirbelgröße dar, bei der ein Wirbel eine charakteristische *eddy turnover time* existieren kann, bevor er durch viskose Kräfte vollständig abgebremst wird und seine

kinetische Energie vollständig zu Wärmeenergie dissipiert wird. Für homogene isotrope Turbulenz ist die Kolmogorov-Längenskala gegeben durch [106]:

$$l_K = \left(\frac{\nu^3}{\epsilon} \right)^{1/4}, \quad (2.67)$$

mit der Dissipationsrate ϵ turbulenter kinetischer Energie. Mit der Annahme gleicher Diffusivitäten des Temperaturfelds (κ_T) und des Impulsfelds (ν) kann die turbulente Reynolds-Zahl (2.66) mit (2.44) folgendermaßen geschrieben werden [106]:

$$\text{Re}_T = \frac{v' l_I}{s_L l_F}. \quad (2.68)$$

Eine weitere Kennzahl ist die turbulente Damköhler-Zahl

$$\text{Da}_T = \frac{t_{\text{eddy}}}{t_c} = \frac{l_I s_L}{v' l_F}, \quad (2.69)$$

die das Verhältnis aus turbulentem Zeitmaß t_{eddy} zu einem charakteristischen chemischen Zeitmaß t_c angibt, für das die Flammenzeit (2.45) verwendet wird [109].

Eine weiteres Zeitskalenverhältnis ist durch die turbulente Karlovitz-Zahl

$$\text{Ka}_T = \frac{t_c}{t_K} \quad (2.70)$$

gegeben, mit dem chemischen Zeitmaß t_c , für das wiederum die Flammenzeit (2.45) verwendet werden kann und der Kolmogorov-Zeit t_K , die einer Wirbelumlaufzeit $t_K = l_K/v_K$ mit einer charakteristischen Geschwindigkeit v_K auf der Kolmogorov-Skala entspricht [109]. Die Kolmogorov-Zeit t_K entspricht der maximalen Lebensdauer eines turbulenten Wirbels. Diese kann als eine mit der kinematischen Zähigkeit gebildeten Diffusionszeit über eine Längenskala interpretiert werden, die der Wirbelabmessung und somit der Kolmogorov-Längenskala l_K entspricht [137]. Die turbulente Karlovitz-Zahl kann auch in folgende Formen umgeschrieben werden [109]:

$$\text{Ka}_T = \left(\frac{l_I}{l_F} \right)^{-1/2} \left(\frac{v'}{s_L} \right)^{3/2} = \left(\frac{l_F}{l_K} \right)^2. \quad (2.71)$$

Neben der Karlovitz-Zahl Ka_T , in der die Flammendicke l_F eingeht, kann eine Karlovitz-Zahl Ka_δ mit einer charakteristischen Reaktionszonendicke l_δ definiert werden [106]:

$$\text{Ka}_\delta = \left(\frac{l_\delta}{l_K} \right)^2. \quad (2.72)$$

In Abb. 2.2 ist das Regime-Diagramm dargestellt. Die Ordinate v'/s_L lässt sich nach (2.68), (2.69) und (2.71) anhand der eingeführten Kennzahlen als Funktion der Abszisse l_I/l_F ausdrücken:

$$\frac{v'}{s_L} = \text{Re}_T \left(\frac{l_I}{l_F} \right)^{-1} = \text{Da}_T^{-1} \left(\frac{l_I}{l_F} \right) = \text{Ka}_T^{2/3} \left(\frac{l_I}{l_F} \right)^{1/3}. \quad (2.73)$$

Mit den Beziehungen (2.73) können physikalisch unterschiedliche Verbrennungsregimes im Diagramm identifiziert und eingetragen werden. Durch die doppeltlogarithmische

Auftragung erscheinen die Grenzkurven als Geraden. Im Bereich $Re_T < 1$ (Bereich links unten im Regime-Diagramm) findet eine Verbrennung in einem laminaren Strömungsfeld statt. Im Bereich $Ka_T < 1$ (zwei Bereiche unten rechts im Regime-Diagramm) ist die chemische Zeitskala kleiner als die Kolmogorov-Zeitskala und die Flammendicke ist kleiner als die Kolmogorov-Längenskala. Die Struktur der vorgemischten Flamme bleibt intakt. Turbulenz stört die reaktiv-diffusiven Prozesse in der Flammenstruktur nur durch Streckung und Krümmung der Flammenfront. Dieses Regime wird als *flamelet*-Regime bezeichnet, nach der Beschreibung einer turbulenten Flammenfront als Aneinanderreihung *kleiner* laminarer Flammenstrukturen im Strömungsfeld entlang der turbulenten Flammenfront [109]. Das Flamelet-Regime wird abhängig vom Verhältnis v'/s_L in zwei weitere Regimes unterteilt. Für $v'/s_L < 1$ ist die Flammenausbreitung schneller als die Auffaltung der Flammenfront durch turbulente Wirbel [106]. In diesem Regime existieren gewellte Flammenfronten (*wrinkled flamelets*). Im Fall $v'/s_L > 1$ sind die turbulenten Geschwindigkeitsfluktuationen höher als die laminare Flammengeschwindigkeit. Die Auffaltung der Flammenfront kann demnach so stark ausgeprägt sein, dass eine Bildung von Inseln mit verbranntem oder unverbranntem Gas möglich ist (und demnach mehrfache verbundene Reaktionszonen während des Inselbildungsprozesses). Es kommt zu einer sogenannten kinematischen Interaktion zwischen den Wirbeln und der propagierenden Flammenfront [106]. Dieses Regime wird als Regime der gefalteten Flammenfronten (*corrugated flamelets*) bezeichnet.

In der Formulierung [104] (1986) des Regime-Diagramms hat Peters das Regime oberhalb der Linie $Ka_T = 1$ und unterhalb $Da_T = 1$ betrachtet. In diesem Gebiet gilt $Ka_T > 1$ und $Da_T > 1$. Die Kolmogorov-Zeitskala t_K ist nach (2.70) kürzer als die chemische Zeitskala t_c , die über die Flammenzeit t_F definiert ist. Turbulente Wirbel können die interne Flammenstruktur direkt beeinflussen. Dies ist auch aus (2.71) ersichtlich, wonach in diesem Regime die Kolmogorov-Längenskala l_K kleiner als die Flammendicke l_F ist. Die Grenze $Ka_T = 1$, bei der Kolmogorov-Skalen identisch mit Flammenskalen sind (auch die Geschwindigkeit) wird als Klimov-Williams Kriterium bezeichnet [106]. Die starke Streckung der Reaktionszone die durch Kolmogorov-Wirbel verursacht wird, kann in diesem Regime zu lokalen Löschvorgängen führen [109]. Das Regime wird als Regime der verteilten Reaktionszonen (*distributed reaction zones*) bezeichnet [104]. Im Gebiet oberhalb der Linie $Da_T = 1$ (in dem $Da_T < 1$ gilt) ist nach (2.69) die Wirbelumlaufzeit t_{eddy} kürzer als die chemische Zeitskala t_c . Turbulente Austauschprozesse sind somit schneller als chemische Prozesse. Dieser Bereich wird als idealer Rührreaktor (*well-stirred reactor*) bezeichnet.

In [105] (1999) hat Peters eine neue Regimedefinition eingeführt, bei der turbulente Wirbel der Kolmogorov-Längenskala in die Flammenstruktur (Vorheizzone) eindringen können, aber nicht in die Reaktionszone innerhalb der Flammenstruktur. Im Regime-Diagramm liegt dieses Regime der dünnen Reaktionszonen (mit $Ka_\delta < 1$) zwischen den Geraden $Ka_T = 1$ und $Ka_\delta = 1$. Durch die starke Wechselwirkung der Wirbel mit der Vorheizzone wird die Flamelet-Struktur der Flamme zerstört und es kann keine laminare Flammengeschwindigkeit mehr angegeben werden.

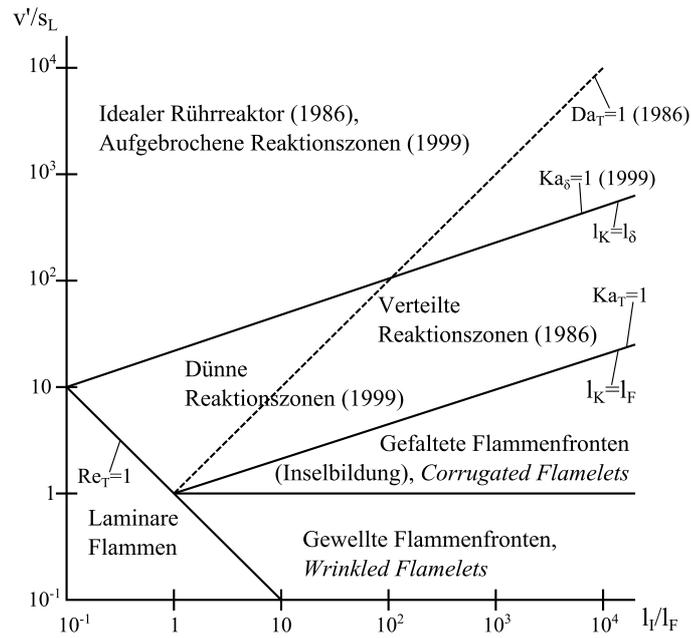


Abbildung 2.2: Regime-Diagramm turbulenter vorgemischter Verbrennung von Peters, nach Vorlage aus [104, 105, 106] und [137].

3 Stand der Forschung im Gebiet der Flammenmodellierung

In diesem Kapitel wird eine Übersicht der wichtigsten theoretischen und numerischen Ansätze zur Modellierung und Simulation vorgemischter Flammen gegeben, die für diese Arbeit relevant sind. Auf Modelle für turbulente Flammen wird nicht eingegangen.

3.1 Flamme als gasdynamische Diskontinuität, Klassische G -Gleichung

Die Beschreibung einer Flamme als gasdynamische Diskontinuität wurde erstmals von Darrieus (1938 & 1945) [36] und Landau (1944) [81] vorgenommen. Im Bereich nicht-vorgemischter Flammen wurden ähnliche Ansätze verfolgt, bei denen die Flamme als eine Oberfläche definiert wird, an der chemische Prozesse nach erfolgter Mischung von Oxidationsmittel und Brennstoff auf molekularer Ebene, unendlich schnell (instantan) ablaufen (Burke & Schumann 1928 [22]). Im Flammenmodell von Darrieus und Landau wird eine vorgemischte Flammenfront als eine Oberfläche beschrieben, die sich mit einer konstanten Brenngeschwindigkeit (der laminaren Flammgeschwindigkeit) relativ zum Frischgasgemisch bewegt. Das Strömungsfeld auf beiden Seite der Flammenfläche wird als inert, inkompressibel und reibungsfrei (ohne Viskosität des Fluids) angenommen. Die Sprungbedingungen an der Flammenfront sind die Rankine-Hugoniot Bedingungen, nach denen die normale Massenstromdichte und Impulsflussdichte kontinuierlich an der Front sind. Laut einer linearen Stabilitätsanalyse ist eine Flammenfront die sich mit konstanter Brenngeschwindigkeit ausbreitet für jede Wellenzahl der Störung der planaren Front instabil. Insbesondere ist die zeitliche Anfachungsrate der Störung direkt proportional zu ihrer Wellenzahl [31, 91]. Diese Stabilitätseigenschaften stehen im Widerspruch zu experimentellen Beobachtungen stabiler planarer Flammenfronten.

Erste Versuche diesen Widerspruch im Modell einer Flamme als gasdynamische Diskontinuität zu beheben stammen u.a. von Markstein [89, 90], der phänomenologisch eine lineare Abhängigkeit der Flammgeschwindigkeit von der Flammenkrümmung postuliert. Der Proportionalitätsfaktor ist die Markstein-Länge l_M , die von der Größenordnung der Flammendicke l_F ist. Die Markstein-Länge fasst den Einfluss der Krümmung auf die Transportprozesse in der Flammenfront und die daraus resultierende Änderung der Flammgeschwindigkeit zusammen. Bereits in Markstein [89] wird darauf hingewiesen, dass die Markstein-Länge auch den Effekt der differentiellen Diffusion berücksichtigt (in [90] als *selective-diffusion effect* bezeichnet).

Markstein hat die allgemeine kinematische Beziehung einer mathematischen Oberfläche hergeleitet, die eine vorgemischte Flamme als gasdynamische Diskontinuität beschreibt. Die Oberfläche wird implizit als Isofläche $f = 0$ des Skalarfelds f definiert. Mit Hilfe der Kinematik eines Punkts auf der Oberfläche, der sich mit der Strömungsgeschwindigkeit \mathbf{v} der Gasmischung und einer überlagerten Brenngeschwindigkeit s normal zur Oberfläche in Richtung des Frischgases bewegt, leitet Markstein folgende Gleichungen für durchströmte Oberflächen her:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v}_u \cdot \nabla f = s_u |\nabla f| , \quad (3.1)$$

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v}_b \cdot \nabla f = s_b |\nabla f| , \quad (3.2)$$

wobei (3.1) die Position im unverbrannten Gemisch vor der Flamme als Referenz benutzt während (3.2) die Position unmittelbar hinter der Flamme im verbrannten Gemisch verwendet. Laut der Angabe in [121] hat Markstein diese kinematischen Beziehungen (3.1) bzw. (3.2) bereits in [89] (1951) vorgestellt. Die Beziehung (3.1) ist eine Formulierung einer Flamme als gasdynamische Diskontinuität, die der von Williams [141] (1985) ein-

geführten G -Gleichung

$$\frac{\partial G}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla G = s_L |\nabla G| \quad (3.3)$$

entspricht. Physikalisch resultiert s_L aus der Interaktion des Strömungsfelds mit der inneren Flammenstruktur, welche in einer Simulation basierend auf der G -Gleichung jedoch nicht aufgelöst wird. Die Brenngeschwindigkeit kann nur als Funktion von Größen modelliert werden, die auf der aufgelösten Längenskala berechnet werden können, wie z.B. die Krümmung oder die Streckung der gasdynamischen Diskontinuität.

Die Herleitung eines Modells einer Flamme als gasdynamische Diskontinuität aus Erhaltungsprinzipien und unter Berücksichtigung von Transportprozessen, Chemie und thermischer Expansion wird u.a. von Sivashinsky [120] (1976), Clavin und Williams [33] (1982), Matalon und Matkowsky [91] (1982), Clavin und Joulin [32] (1983), Class et al. [30] (2003) und Matalon et al. [92] (2003) vorgenommen. Erst die Herleitungen von Matalon und Matkowsky [91], Clavin und Joulin [32], Class et al. [30] und Matalon et al. [92] gelten jedoch für Flammenfronten mit einer großen Amplitude der Auslenkung der Front in einem allgemeinen Strömungsfeld (unter der Voraussetzung, dass die Flamme dünn gegenüber den Längenskalen der Strömung ist). Ein wichtiges Ergebnis aus [91] und [92] ist die Beziehung der Brenngeschwindigkeit s_u der Diskontinuitätsfläche relativ zum unverbrannten Gemisch. Ihre Abweichung von der laminaren Flammengeschwindigkeit s_L einer planaren ungestreckten Flamme ist nur von der Streckung χ der Diskontinuitätsfläche abhängig. In dimensionsbehafteter Form lautet die Beziehung:

$$s_u = s_L(1 - \text{Ma} \chi) , \quad (3.4)$$

mit der Markstein-Zahl Ma , welche von den physikalisch-chemischen Eigenschaften des Brenngases abhängt (Wärmefreisetzung, Transportkoeffizienten). Die Herleitung in [92] erweitert die hydrodynamische Theorie vorgemischter Flammen um Transportkoeffizienten mit beliebiger Temperaturabhängigkeit sowie einer Beschreibung der Chemie (zur Herleitung des Modells) mit zwei reagierenden Spezies mit beliebigen Reaktionsordnungen.

3.1.1 Das Modell von Class et al.

Im Gegensatz zum Modell von Matalon und Matkowsky [91] (1982) sowie Matalon et al. [92] (2003) wird in Class et al. [30, 31] (2003) nur indirekt die Methode der *matched asymptotic expansion* verwendet. Die Grundidee der Herleitung besteht in der Einführung zweier getrennter Variablensätze. Der erste Satz beinhaltet Variablen eines physikalischen Modells, das alle zu modellierenden Effekte berücksichtigt, insbesondere chemische Quellterme und Transportvorgänge. Dieses Modell wird als das reaktive Modell bezeichnet und stellt die Grundlage zur Herleitung eines Modells einer Flamme als gasdynamische Diskontinuität dar. Im Rahmen der getroffenen Annahmen zur Beschreibung von Transportvorgängen, chemischen Reaktionen und Stoffeigenschaften, stellt das reaktive Modell die Realität dar, die es zu vereinfachen gilt. Demzufolge sind die Variablen des reaktiven Modells kontinuierlich im Raum. Sie werden mit großen Buchstaben dargestellt.

Der zweite Satz von Variablen gehört zum physikalischen Modell, das hergeleitet werden soll, hier ein hydrodynamisches Modell einer vorgemischten Flamme als gasdynamische Diskontinuität. Die Variablen des hydrodynamischen Modells springen an der

Diskontinuitätsfläche, welche die vorgemischte Flamme darstellt. Diese Variablen werden mit kleinen Buchstaben gekennzeichnet. Die Bezeichnung *hydrodynamisches Modell* soll verdeutlichen, dass die Flamme bei dieser Modellierung als Diskontinuität im Strömungsfeld angesehen wird und ihre Brenngeschwindigkeit modelliert wird.

Zur Herleitung der Sprungbedingungen des hydrodynamischen Modells wird die Differenz der entsprechenden Erhaltungsgleichungen des reaktiven und des hydrodynamischen Modells gebildet. Die Sprungbedingungen ergeben sich aus der Forderung, dass die Differenz der Erhaltungsgleichungen im integralen Mittel über die Flammenfront verschwindet. Bei der Herleitung wird somit zunächst keine lokale Übereinstimmung der Variablenverläufe beider Modelle gefordert. Das hydrodynamische Modell soll das reaktive Modell nur im integralen Mittel beschreiben.

Zur Vereinfachung der Herleitung werden die Erhaltungsgleichungen beider Modelle in einem krummlinigen bewegten Koordinatensystem formuliert, das bereits in Klimenko und Class [73] (2000) eingeführt wurde. Dabei definiert eine Koordinatenfläche $x^1 = 0$ die gasdynamische Diskontinuität des hydrodynamischen Modells. Die Anpassung (*matching*) des hydrodynamischen Modells an das reaktive Modell vor und hinter Flamme erfolgt durch einfaches Gleichsetzen der entsprechenden Variablen an diesen Positionen. An der gasdynamischen Diskontinuität sind die Variablen des reaktiven Modells kontinuierlich. Der Sprung einer hydrodynamischen Variable an der Diskontinuitätsfläche resultiert aus dem Integral der normalen Ableitung des normalen Flusses der Variable auf der Koordinatenlinie x^1 . Die resultierenden Sprungbedingungen sind für beliebige vorgemischte Flammenfronten gültig. Sie bestehen aus Integralen über der Flammenfront, die Effekte von transversalen Transportprozessen entlang der Diskontinuität sowie von chemischen Prozessen innerhalb der Flammenstruktur des reaktiven Modells beinhalten.

Um eine geschlossene Formulierung der Sprungbedingungen (zu denen insbesondere auch die Flammengeschwindigkeitsbeziehung gehört) herzuleiten, werden die Integrale mit Hilfe eines asymptotischen Näherungsverfahrens ausgewertet. Dazu wird eine Reihenentwicklung aller Variablen (des reaktiven und des hydrodynamischen Modells) in Potenzen des Längenskalenverhältnisses l_F/l durchgeführt, wobei l eine charakteristische hydrodynamische Längenskala der Strömung ist.

Eine Besonderheit des Modells von Class et al. ist die Definition der Position der Diskontinuitätsfläche der hydrodynamischen Variablen innerhalb der Flammenstruktur des reaktiven Modells. Im Modell von Matalon und Matkowsky [91] wird die Position der Diskontinuität in der Reaktionszone der Flamme gewählt und somit bei einer Temperatur, die nahe an der Rauchgastemperatur liegt. Beim Modellierungsansatz von Class resultiert die Position der Diskontinuität in natürlicher Weise als Ergebnis der Auswertung der Sprungbedingungen. In der ersten Korrekturordnung der Auswertung beinhaltet die Sprungbedingung der Massenstromdichte m das folgende Integral auf einem Pfad normal zu $x^1 = 0$:

$$I_R = \int_{-\infty}^{0^-} (R - \rho_u) dx^1 + \int_{0^+}^{+\infty} (R - \rho_b) dx^1, \quad (3.5)$$

mit der Dichte R des reaktiven Modells und der Dichte ρ_u des unverbrannten bzw. der Dichte ρ_b des verbrannten Gemischs. Das Integral I_R stellt physikalisch die sogenannte *excess surface mass* der Diskontinuitätsfläche dar, eine auf der Fläche konzentrierte Masse. Die Position der Diskontinuität wird implizit aus der Forderung $I_R = 0$ definiert.

Dadurch bleibt die Massenstromdichte m an der Flammenfläche kontinuierlich:

$$[m] = 0 . \quad (3.6)$$

Die eckigen Klammern in (3.6) stehen für den Sprung der Variable zwischen den Klammern.

Mit dieser Wahl der Position vereinfachen sich die Sprungbedingungen für die Impulsflussdichte durch die Diskontinuitätsfläche erheblich. Sie lauten für die Impulsflussdichte in normaler (Index n) und in tangentialer (Index \perp) Richtung:

$$\begin{aligned} [mv_n + p - \tau_{nn}] &= -2c^* m I_\sigma , \\ [mv_\perp - \tau_{n\perp}] &= -\nabla_\perp(m I_\sigma) , \end{aligned} \quad (3.7)$$

mit der mittleren Krümmung c^* der Diskontinuitätsfläche und einem Integral I_σ , das mit der thermischen Expansion des Fluids durch die Flammenfront wächst. Die erste Sprungbedingung in (3.7) kann analog zu der Bedingung

$$[mv_n + p - \tau_{nn}] = 2c^* \sigma_S \quad (3.8)$$

an der gekrümmten Grenzfläche zweier unmischbarer Fluide mit Massentransfer (z.B. durch Verdampfung) interpretiert werden. σ_S ist dabei die Oberflächenspannung der Grenzfläche. Aus der Betrachtung des Vorzeichens des Terms $-m I_\sigma$ in (3.7) kann der Diskontinuitätsfläche, die eine vorgemischte Flammenfront ersetzt, eine negative Oberflächenspannung zugeordnet werden ($-m I_\sigma < 0$), die als *surface compression* bezeichnet wird. Eine quantitative Auswertung der integralen Impulsbilanz in Normalenrichtung für gekrümmte Flammenfronten wurde in Dirks [44] (2009) und Bruzzese et al. [15] (2009) durchgeführt. Die zweite Sprungbedingung in (3.7) beschreibt die Existenz von tangential wirkenden Kräften auf der Diskontinuitätsfläche, die von der tangentialen Ableitung der Oberflächenspannung abhängig sind und somit analog zu Marangoni-Kräften wirken.

Neben den Sprungbedingungen ist die Flammengeschwindigkeitsbeziehung ein Hauptergebnis der Herleitung. Sie wird in Form einer Beziehung für die *mass burning rate* m , also der Massenstromdichte durch die Diskontinuitätsfläche angegeben. Die Beziehung ist eine nichtlineare partielle Differentialgleichung für m , die sich durch eine Kopplung benachbarter Punkte auf der Diskontinuitätsfläche über tangentiale räumliche Differentialoperatoren auszeichnet. Zusätzlich sorgt die zeitliche Ableitung in der Beziehung dafür, dass sich die Massenstromdichte m nicht instantan an neue Bedingungen anpasst, sondern mit einer gewissen Zeitkonstante. Durch die besondere Wahl der Referenzposition der Diskontinuität resultiert (im Gegensatz zu den Modellen von Matalon und Matkowsky [91] und Matalon et al. [92]) nicht nur eine Abhängigkeit der Massenstromdichte von der Flammenstreckung χ , in der die Krümmung der Diskontinuitätsfläche mit eingeht, sondern auch eine explizite Abhängigkeit von der mittleren Krümmung c^* selbst.

In Klimenko und Class [74] (2002) wird die Flammengeschwindigkeitsbeziehung einer dünnen Flamme in einem allgemeinen instationären Strömungsfeld hergeleitet. Die Reaktionszone wird dabei als eine dünne Zone innerhalb der Flammenstruktur angenommen, in der chemische Reaktionen in mehreren Schritten ablaufen können.

3.2 Das Konzept der *High Activation Energy Asymptotics* und das Delta-Funktion Modell

Beim klassischen Konzept der *High Activation Energy Asymptotics* werden die chemischen Reaktionen innerhalb der Flammenstruktur in der Regel durch eine einzige irreversible globale Einschritt-Reaktion mit einer Reaktionsrate vom Arrhenius-Typ und einer einzigen limitierenden Spezies Y beschrieben [19, 17]:

$$AY \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) = AY \exp\left(-\frac{T_a}{T}\right), \quad (3.9)$$

mit dem Frequenzfaktor A , der Aktivierungsenergie E_a und der Aktivierungstemperatur T_a . Die Grundidee der Methode besteht darin, einen hohen Wert für die Aktivierungsenergie bzw. Aktivierungstemperatur T_a anzunehmen. Dies bedeutet, dass die chemische Reaktionsrate eine sehr starke Temperaturabhängigkeit aufweist. Der räumliche Bereich in dem die chemische Reaktion in signifikantem Maße stattfindet, ist dann auf eine sehr dünne Zone beschränkt, bei einer Temperatur nahe an der Rauchgastemperatur. Durch die Beschränkung der Reaktion auf eine dünne Zone kann der Reaktionsterm in der restlichen Flammenstruktur vernachlässigt werden. Die Erhaltungsgleichungen können somit in diesem inerten Gebiet analytisch leicht gelöst werden. Zur mathematischen Lösung der Erhaltungsgleichungen innerhalb der dünnen Reaktionszone wird ausgenutzt, dass die Zone im Vergleich zu der Längenskala der Variablen in der inerten Vorheizzone (Streckung der normalen Koordinate) dünn ist und dass die Temperatur nur geringfügig von der Rauchgastemperatur abweicht (Störansatz durch Entwicklung der Temperatur um die Rauchgastemperatur). Die Integrationskonstanten, die bei der Lösung der Erhaltungsgleichungen auftreten, werden durch Anpassen der Lösungen (oder deren Ableitungen) zwischen der inerten Vorheizzone und der dünnen Reaktionszone gewonnen.

Für eine Aktivierungsenergie E_a (oder eine Aktivierungstemperatur T_a) die gegen unendlich strebt (dimensionslos nach entsprechender Skalierung) kann die chemische Reaktionsrate auf der Längenskala der Vorheizzone durch eine Diracsche Delta-Distribution ausgedrückt werden, die auf einer Reaktionsfläche konzentriert ist. In den Variablenprofilen (Temperatur T , Konzentration bzw. Massenbruch Y) bewirkt die Reaktionsfläche einen Sprung der normalen Ableitung. Das Delta-Funktion Modell stellt den asymptotischen Grenzfall der getrennten Behandlung von Vorheiz- und Reaktionszone mit anschließender Anpassung der Integrationskonstanten für eine unendlich hohe Aktivierungsenergie dar. Alternativ dazu kann das Delta-Funktion Modell als eigener Modellierungsansatz angesehen werden, bei dem der chemische Quellterm für eine endliche Aktivierungsenergie durch eine Delta-Funktion mit einer gegebenen Stärke modelliert wird, die u.a. von der Temperatur in der Reaktionszone und der Aktivierungsenergie abhängt [18, 20].

3.3 Integrale Analyse von Chung & Law und von Sun et al.

In der Arbeit von Chung und Law [28] (1988) und in verallgemeinerter Form in Sun et al. [126] (1999) werden gestreckte vorgemischte Flammen durch Anwendung einer integralen Analyse untersucht. Durch integrale quasi-eindimensionale Bilanzierungen über gekrümmte Flammenstrukturen bzw. über die Reaktionszone werden Ausdrücke für die

Rauchgastemperatur, sowie für die Brenngeschwindigkeiten und Massenstromdichten an verschiedenen Flächen in der Flammenstruktur hergeleitet. Insbesondere wird in [126] hierzu ein krummliniges Koordinatensystem verwendet, das sich mit der Flammenfront bewegt. Die Abweichungen der Brenngeschwindigkeiten und Massenstromdichten von den entsprechenden Werten einer planaren ungestreckten Flammenstruktur sind als Funktion physikalischer und chemischer Parameter hergeleitet.

3.4 Das Modell von Echekki

Echekki [47] (1997) stellt ein differentielles, quasi-eindimensionales Flammenmodell auf. Zur Herleitung des Flammenmodells wird eine Stromröhre durch eine gekrümmte Flammenfront betrachtet. Die Koordinate entlang der Stromröhre wird mit x bezeichnet. Ein in Strömungsrichtung von der Position x bis zur Position $x + \delta x$ infinitesimal ausgehnter Stromröhrenabschnitt dient als differentielles Kontrollvolumen, über das eine Erhaltungsbedingung für die Gesamtmasse, die Speziesmassen und die Energie formuliert wird. Der Stromröhrenquerschnitt ist über δx variabel und ändert sich dabei von A auf $A + \delta A$. Der diffusive Transport von Spezies und Energie über den seitlichen Rand (gebildet durch Stromlinien) des Stromröhrenabschnitts wird berücksichtigt und mit *cross-stream diffusion* bezeichnet. Die Ursache für diesen diffusiven Transport ist der Unterschied zwischen der Richtung des konvektiven Flusses und der des diffusiven Flusses der entsprechenden Größe an der Stromröhrengrenze. Die Richtung des diffusiven Flusses definiert eine Diffusionsröhre (*diffusion tube*). Der Unterschied der Querschnittsfläche der Diffusionsröhre und der Stromröhre an der Stelle $x + \delta x$ wird mit $\delta A'$ angegeben und als effektive Querdiffusionsfläche bezeichnet (*effective area of cross-stream diffusion*).

Durch Integration der differentiellen Erhaltungsbedingungen entlang der Stromröhre von einer Position auf der unverbrannten Seite der Flamme bis zu einer Position im verbrannten Gemisch können Ausdrücke für den Massenstrom \dot{m} innerhalb der Stromröhre angegeben werden, woraus die Brenngeschwindigkeit bestimmt werden kann. Die aus einer Erhaltungsbedingung der Spezies k resultierende Formel für die Brenngeschwindigkeit der Flamme im unverbrannten Gemisch lautet:

$$s_u = \frac{\int \omega_k A dx}{\rho_u A_u (Y_{k,b} - Y_{k,u})} - \frac{\int m_{k,\text{diff}} dA'}{\rho_u A_u (Y_{k,b} - Y_{k,u})}. \quad (3.10)$$

In (3.10) ist $\omega_k(x)$ der chemische Quellterm der Spezies k , A die Querschnittsfläche der Stromröhre an einer beliebigen Stelle x , $Y_{k,u}$ bzw. $Y_{k,b}$ die Massenbrüche der Spezies k im unverbrannten bzw. im verbrannten Gemisch und $m_{k,\text{diff}}$ der diffusive Fluss der Spezies k . Im zweiten Integral in (3.10) wird über die resultierende Querdiffusionsfläche zwischen dem unverbrannten und dem verbrannten Zustand integriert. Aus jeder Spezieserhaltungsgleichung sowie aus der Energieerhaltungsgleichung lässt sich ein entsprechender Ausdruck (wie (3.10)) für die Brenngeschwindigkeit herleiten.

Aus der integralen Bilanz (3.10) werden 3 Mechanismen identifiziert, die die Brenngeschwindigkeit beeinflussen und im Allgemeinen stark untereinander gekoppelt sind:

1. Ein chemischer Mechanismus, der sich über das Integral des Quelltermprofils $\omega_k(x)$ in (3.10) auswirkt. Bei einer Erhöhung des Werts des integralen Quellterms innerhalb der Stromröhre kann bei gegebenen Werten $Y_{k,u}$ und $Y_{k,b}$ ein größerer Strom

der Spezies k in das unverbrannte Ende der Stromröhre gelangen. Dies entspricht für ein gegebenes $Y_{k,u}$ einer höheren Brenngeschwindigkeit s_u . Eine Erhöhung des integralen chemischen Umsatzes kann einerseits durch einen stärkeren lokalen Umsatz verursacht werden, was größeren Werten von $\omega_k(x)$ entspricht. Andererseits führt auch eine Vergrößerung der Dicke der reaktiven Zone in x -Richtung zu einem höheren integralen Verbrauch.

2. Ein auf lateraler Expansion der Stromröhre basierender Mechanismus, der durch den Term A im Integranden des ersten Integrals in (3.10) beschrieben wird. Bei einer Veränderung von A in x -Richtung der Stromröhre verändert sich das Volumen in dem der integrale chemische Umsatz stattfindet. Bei einer Vergrößerung des Stromröhrenquerschnitts A in x -Richtung der Stromröhre verteilt sich der Strom der Spezies k auf eine größere Fläche. Demnach kann für gegebene Werte $Y_{k,u}$ und $Y_{k,b}$ ein größerer Strom der Spezies k in das unverbrannte Ende der Stromröhre gelangen. Ein höherer Strom der Spezies k am unverbrannten Ende der Stromröhre führt somit zu einer höheren Brenngeschwindigkeit s_u .
3. Ein Mechanismus der Querdiffusion über die Stromröhrengrenze, der durch das zweite Integral in (3.10) berücksichtigt wird. Dieser Mechanismus beschreibt den effektiven diffusiven Fluss der Spezies k über die Grenze des betrachteten Stromröhrenabschnitts. Die Brenngeschwindigkeit ändert sich, wenn die Änderungsraten der Querschnitte der Diffusionsröhre und der Stromröhre in x -Richtung verschieden sind.

In Poinot et al. [108] wird die Flammenspitze einer laminaren Bunsenflamme simuliert und dessen Brenngeschwindigkeit mit dem Modell von Echekki [47]¹ interpretiert. Eine ähnliche Beziehung wie (3.10) ist in [79] für eine planare Flamme vorgestellt.

3.5 Flamelet-Modell von de Goey und ten Thije Boonkkamp

De Goey und ten Thije Boonkkamp [40] (1999) leiten zum ersten Mal eine Beschreibung vorgemischter Flammen als *flamelets* systematisch aus den Erhaltungsgleichungen dreidimensionaler und instationärer Flammen her. Die Herleitung beinhaltet 3 Sätze von Gleichungen. Der erste Satz beschreibt die inerte Strömung mit Mischungsprozessen der einzelnen Komponenten in der Gasphase ohne chemische Reaktion. Der zweite Satz besteht aus der G -Gleichung und beschreibt die Kinematik der vorgemischten Flamme im Strömungsfeld. Der dritte und letzte Satz besteht in einer quasi-eindimensionalen Formulierung der Erhaltungsgleichungen innerhalb der reaktiven Flammenstruktur. Dieser Satz liefert die Massenstromdichte, welche die Kinematik der Flamme über die G -Gleichung vorgibt.

In der Herleitung wird das Skalarfeld \mathcal{G} eingeführt und eine vorgemischte Flamme wird als ein Gebiet im Raum definiert, in dem \mathcal{G} zwischen dem unverbrannten Wert

¹In [108] wird auf das Modell von Echekki verwiesen, dessen Veröffentlichung zu dem Zeitpunkt in Bearbeitung ist.

\mathcal{G}_u und dem verbrannten Wert \mathcal{G}_b liegt. \mathcal{G} kann somit als eine Art Fortschrittsvariable der Verbrennung angesehen werden. Isoflächen von \mathcal{G} werden als Flammenflächen bezeichnet (*flame surfaces*). Mit Hilfe der Flammenflächen wird ein orthogonales, krummliniges Koordinatensystem (ξ, ζ, η) definiert. Die Koordinate, die sich nur normal zu den Flammenflächen ändert, wird mit η bezeichnet. Die Erhaltungsgleichungen werden in dem krummlinigen Koordinatensystem formuliert, wobei nur Ableitungen in η verwendet werden. Die Abweichung von einer rein eindimensionalen Beschreibung (in η) beinhaltet Terme, die proportional zu einem Streckungsfeld K sind, sowie Terme die den Transport entlang der zwei anderen Koordinatenrichtungen des krummlinigen Systems und somit entlang der Flammenflächen beschreiben. Für Flammen, die dünn sind gegenüber den Längenskalen von transversalen räumlichen Störungen, kann der Transport entlang von Flammenflächen vernachlässigt werden. Die Definition und Herleitung des Skalarfelds der Streckung K stammt aus [39] (siehe (2.63)). Die quasi-eindimensionale Flamelet-Formulierung der Erhaltungsgleichung für \mathcal{G}

$$\frac{\partial(\rho\mathcal{G})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\mathbf{v}\mathcal{G}) - \nabla \cdot \left(\frac{\lambda}{\text{Le}_{\mathcal{G}}c_p} \nabla\mathcal{G} \right) - Q_{\mathcal{G}} = 0 \quad (3.11)$$

schreibt sich

$$\frac{\partial(\sigma m\mathcal{G})}{\partial s} - \frac{\partial}{\partial s} \left(\sigma \frac{\lambda}{\text{Le}_{\mathcal{G}}c_p} \frac{\partial\mathcal{G}}{\partial s} \right) - \sigma Q_{\mathcal{G}} = -\sigma\rho K\mathcal{G}, \quad (3.12)$$

wobei s die Bogenlänge der Koordinatenlinie von η normal zu Flammenflächen $\mathcal{G} = \text{konst.}$ σ ist ein Maß für die Fläche durch die der Transport von \mathcal{G} stattfindet.

(3.12) ist der Ausgangspunkt zur Herleitung von Beziehungen für die Massenstromdichte. Es wird zunächst der Fall einer ungestreckten Flamme mit $K = 0$ betrachtet. Dazu wird (3.12) mit verschwindender rechter Seite über die gesamte Flammendicke vom unverbrannten Zustand bei s_u bis zum verbrannten Zustand bei s_b integriert. Dabei wird ausgenutzt, dass der diffusive Fluss von \mathcal{G} an den Integrationsgrenzen verschwindet. Der chemische Term $Q_{\mathcal{G}}$ ist in der Vorheizzone gegenüber dem konvektiven Term $\partial(\sigma m\mathcal{G})/\partial s$ vernachlässigbar. In der Vorheizzone lässt sich somit der Diffusionsfluss über den konvektiven Fluss ausdrücken. Für die Massenstromdichte an der verbrannten Seite der Flamme folgt:

$$m_b^0 \approx \frac{1}{|\mathcal{G}_b^0 - \mathcal{G}_u|} \sqrt{2 \int_{\mathcal{G}_u}^{\mathcal{G}_b^0} \left(\frac{\sigma}{\sigma_b} \right)^2 \frac{\lambda}{\text{Le}_{\mathcal{G}}c_p} Q_{\mathcal{G}} d\mathcal{G}}. \quad (3.13)$$

Je dünner die Reaktionszone (in Form des Quelltermprofils $Q_{\mathcal{G}}$) im Raum ist, umso genauer ist die Formel (3.13). Für eine unendlich dünne Reaktionszone wird der Quellterm zu einer Delta-Funktion und (3.13) ist exakt. Da der chemische Quellterm explizit als Integrand in (3.13) vorkommt, ist das Integral effektiv nur über die Reaktionszone zu bilden, dort wo $Q_{\mathcal{G}} \neq 0$. Die Massenstromdichte nach (3.13) hängt einerseits vom unverbrannten Zustand (aufgrund des Terms \mathcal{G}_u) ab. Außerdem hängt die Massenstromdichte von der Enthalpie und Elementzusammensetzung des Gemischs im verbrannten Zustand ab, da bei einer dünnen Reaktionszone der Zustand im Rauchgas nahezu identisch mit dem Zustand in der Reaktionszone ist.

Zur Bestimmung der Massenstromdichte bei gestreckten Flammen wird eine ähnliche Integration wie im ungestreckten Fall durchgeführt, wobei der Term $\sigma\rho K\mathcal{G}$ berücksichtigt wird. In der Beziehung für die Massenstromdichte (3.13) kommt ein Korrekturterm

$-1/\sigma_b \int_{s_u}^{s_b} \sigma \rho K G ds$ aufgrund der Streckung hinzu. Zusätzlich gehen Variationen von Enthalpie und Gemischzusammensetzung ein, die durch differentielle Diffusion entstehen. In [41] wird der Flamelet-Ansatz mit der Methode der *Large Activation Energy Asymptotics* verglichen.

In [64] und [65] werden, basierend auf der Theorie von de Goeij und ten Thije Boonkamp, explizite Ausdrücke für die Markstein-Zahl bezüglich der Streckung sowie für die getrennten Markstein-Zahlen bezüglich Streckung und Krümmung hergeleitet. Die Markstein-Zahlen beziehen sich dabei auf die Massenstromdichte in der Brennstoffabbauzone der Flammenstruktur. Hierbei werden die Fälle einer unendlich dünnen sowie einer endlich dicken Reaktionszone getrennt behandelt. In die Ausdrücke für die Markstein-Zahlen gehen Werte aus der Flammenstruktur (Profile und integrale Werte wie Flammengeschwindigkeit oder Verbrennungstemperatur) einer ungestreckten planaren Flamme ein.

3.6 Reaction-Diffusion Manifolds

Es wird hier kurz erläutert, wie das Konzept der *Reaction-Diffusion Manifolds* (REDIM) in einer Simulation einer vorgemischten Flamme angewendet werden kann. Für die detaillierte theoretische Herleitung des Modells wird auf Bykov und Maas [23] (2007) verwiesen. Zur Anwendung des REDIM-Konzepts werden Transportgleichungen für die reduzierten Variablen gelöst, in denen die niedrig-dimensionale Mannigfaltigkeit parametrisiert ist. Im Regelfall dient eine reduzierte Variable als Fortschrittsvariable der Verbrennung. Hierfür kommt die Konzentration einer einzelnen Spezies oder einer Kombination mehrerer Spezies in Frage. Um einen eindeutigen Zusammenhang zwischen der reduzierten Variable und dem Reaktionsfortschritt zu gewährleisten ist es wichtig, dass die reduzierte Variable sich monoton mit dem Fortschritt des Verbrennungsprozesses ändert, z.B. die spezifische Molzahl von CO_2 [86]. Die zweite reduzierte Variable soll die lokale Zusammensetzung beschreiben. Die niedrig-dimensionale Mannigfaltigkeit wird aus detaillierten reaktiven Simulation berechnet und in Tabellenform abgelegt. Im Laufe einer Simulation die das REDIM-Konzept verwendet, lassen sich aus den Werten der reduzierten Variablen durch Interpolation in der Tabelle die restlichen Variablen des Verbrennungsvorgangs (thermodynamischer Zustand) sowie die Quellterme der reduzierten Variablen bestimmen. Gegebenfalls können auch vorintegrierte (in der Zeit) Quellterme mit in der Tabelle abgelegt werden.

3.7 Modelle basierend auf einer Erweiterung der G -Gleichung

3.7.1 Der Ansatz von Aldredge

In Aldredge [3] (1997) wird ein vereinfachtes analytisches Flammenmodell und dessen numerische Umsetzung anhand der G -Gleichung² formuliert. Die Flamme wird als eine dünne Zone betrachtet, in der sich die Dichte des Fluids durch thermische Expansion ändert. Es wird eine asymptotische Analyse durchgeführt, mit dem Verhältnis von Flammendicke zur Längenskala des Strömungsfelds als kleiner Parameter. Im Gegensatz zu Matalon und Matkowsky [91] oder Clavin und Joulin [32] wird die asymptotische

²Die G -Gleichung wird in [3] als Eikonal-Gleichung bezeichnet.

Analyse nur in der führenden Ordnung durchgeführt. Aus der Massenerhaltung folgt eine konstante Massenstromdichte normal zur Flamme. Mit diesem Ergebnis folgt aus der Analyse der Temperaturgleichung das Temperaturprofil führender Ordnung in der Vorheizzone. Über die Zustandsgleichung und der Annahme einer kleinen Mach-Zahl der Strömung lässt sich aus dem Temperaturprofil das Dichteprofil ausdrücken. Durch die Beschränkung auf die asymptotische Analyse führender Ordnung wird die Störung der Flammenstruktur durch das Strömungsfeld vernachlässigt. Die Isofläche $G = 0$ beschreibt in diesem Modell die Reaktionszone der Flamme und das Dichtefeld wird als Funktion von G ausgedrückt. Die Brenngeschwindigkeit s ist auf einer Isofläche von G konstant. Für die Variation der Brenngeschwindigkeit in Normalenrichtung zur Flamme aufgrund der thermischen Expansion wird die Krümmung und Streckung der Flammenfläche vernachlässigt. Die Flamme brennt somit überall unabhängig vom Strömungsfeld, so als wäre sie planar und ungestreckt. In der numerischen Umsetzung wird das Dichtefeld bei der Simulation des Strömungsfelds aufgelöst und das Brennverhalten wird mit Hilfe der G -Gleichung simuliert.

3.7.2 Der Ansatz von Peters

In Peters [105] (1999) sowie im Buch [106] geht Peters von der kinematischen G -Gleichung

$$\rho \frac{\partial G}{\partial t} + \rho \mathbf{v} \cdot \nabla G = \rho s_L |\nabla G| \quad (3.14)$$

für die Isofläche $G = G_0$ aus und leitet eine Formulierung der G -Gleichung her, die im Regime der dünnen Reaktionszonen gültig ist. Dazu wird die Spezies Y betrachtet, welche die chemische Reaktion in der Reaktionszone limitiert (in [106] wird das Temperaturfeld verwendet). Der Wert von Y unmittelbar vor der Reaktionszone wird mit Y_0 bezeichnet und für die Isofläche $Y = Y_0$ wird die kinematische Beziehung

$$\frac{\partial Y}{\partial t} + (\mathbf{v} - s_d \mathbf{n}) \cdot \nabla Y = 0 \quad (3.15)$$

betrachtet, mit der Brenngeschwindigkeit s_d (d für *displacement speed*) aus der Erhaltungsgleichung von Y [48] (siehe Erklärung in 6.1):

$$s_d = \frac{\nabla \cdot (\rho D \nabla Y) + \omega_Y}{\rho |\nabla Y|} . \quad (3.16)$$

Durch Einsetzen der Brenngeschwindigkeit (3.16) in die G -Gleichung (3.14) leitet Peters eine Formulierung her, bei der die Isofläche $Y = Y_0$ zu jedem Zeitpunkt mit der Isofläche $G = G_0$ zusammenfällt. Der Diffusionsterm in (3.16) kann in einen normalen und einen tangentialen Anteil aufgeteilt werden, wobei der tangentielle Anteil explizit mit der Krümmung $2c$ der Isofläche $Y = Y_0$ ausgedrückt werden kann [49, 61]. Durch Einsetzen des resultierenden Ausdrucks für die Brenngeschwindigkeit s_d in (3.14) folgt

$$\rho \frac{\partial G}{\partial t} + \rho \mathbf{v} \cdot \nabla G = -\rho D 2c |\nabla G| + \rho (s_n + s_r) |\nabla G| , \quad (3.17)$$

mit den Beiträgen zur Brenngeschwindigkeit aus normaler Diffusion

$$\rho s_n = - \frac{\mathbf{n} \cdot \nabla (\rho D \mathbf{n} \cdot \nabla Y)}{|\nabla Y|} \quad (3.18)$$

und chemischer Reaktion

$$\rho s_r = -\frac{\omega_Y}{|\nabla Y|}. \quad (3.19)$$

Die Brenngeschwindigkeiten s_n und s_r koppeln das G -Feld mit der Lösung der Erhaltungsgleichungen reaktiver Skalare. (3.17) ist im Regime der dünnen Reaktionszonen gültig und wird von Peters [105] als diffusive G -Gleichung bezeichnet.

Bei einer in [105] hergeleiteten G -Gleichung für Flammen im Flamelet-Regime wird die Brenngeschwindigkeit explizit als Funktion der Streckung der Fläche $G = G_0$ formuliert (klassisches Modell einer Flamme als gasdynamische Diskontinuität). In der daraus resultierenden G -Gleichung steht wie in (3.17) eine Korrektur der Brenngeschwindigkeit mit der Krümmung, wobei die Diffusivität aus der Markstein-Länge gebildet wird. Diese kinematische G -Gleichung kann im Gegensatz zu der diffusiven G -Gleichung (3.17) nicht zur Beschreibung thermisch-diffusiv instabiler Flammen verwendet werden, bei denen die Markstein-Länge negativ ist und somit die numerische Lösung der G -Gleichung zu Instabilitäten neigt [105, 106].

3.7.3 Der Ansatz von Schmidt und Klein

In Schmidt und Klein [114] (2003) wird ein numerisches Verfahren zur Simulation dünner reaktiver Fronten vorgestellt. Auf der Längenskala der Strömung (der äußeren Skala) wird die Front als eine mathematische Oberfläche mit Hilfe der G -Gleichung simuliert. In den Zellen, die von der reaktiven Front geschnitten werden, findet eine Rekonstruktion der diskontinuierlichen Front statt. Mit Hilfe der rekonstruierten Front werden die Flüsse über die Grenzfläche der Zellen ermittelt, die in dem jeweiligen Zeitschritt von der Front geschnitten werden.

Die in [114] gelöste G -Gleichung lautet (mit umgedrehter Richtung des Normalenvektors):

$$\frac{\partial G}{\partial t} + (\mathbf{v} - s\mathbf{n}) \cdot \nabla G = \frac{1}{\zeta} \text{sign}(G) (1 - |\nabla G|) |G|. \quad (3.20)$$

Der Term auf der rechten Seite von (3.20) ist ein Quellterm, der das G -Feld auf ein vorzeichenbehaftetes Abstandsfeld mit der Eigenschaft $|\nabla G| = 1$ reinitialisiert. Der Parameter ζ steuert die Dicke der Zone um die Isofläche $G = 0$, in der die G -Funktion zu einer Abstandsfunktion reinitialisiert wird (ζ wirkt wie eine Relaxationszeitskala).

Die Sprungbedingungen der äußeren Größen werden für eine instationäre innere Struktur der reaktiven (nicht aufgelösten) Front formuliert. Dafür werden die klassischen Rankine-Hugoniot Sprungbedingungen um einen Term erweitert, der aus einem räumlichen Integral über die Zeitableitung der jeweiligen Erhaltungsgröße besteht. Die Bestimmung des Integrals erfolgt mittels einer instationären eindimensionalen Simulation in einem sogenannten Modul. Ein Modul stellt dabei eine Simulation dar, die innerhalb eines Zeitschritts für jede Zelle durchgeführt wird, die von der Flammenfront geschnitten wird. Die Randbedingungen für die detaillierte Modul-Simulation stammen von der Simulation mit der G -Gleichung. Eine Modul-Simulation liefert als Ergebnis das Integral über den Zeitableitungsterm sowie eine Massenstromdichte. Das Integral wird in den erweiterten Rankine-Hugoniot Sprungbedingungen bei der lokalen Rekonstruktion innerhalb der Zelle verwendet, die von der Front geschnitten wird. Die Massenstromdichte geht in die Bewegung der Flammenfront mit der G -Gleichung ein.

3.7.4 Die Modelle von Moureau et al. und Hartmann et al.

In Moureau et al. [96] (2009) sowie in Hartmann [66] (2010) und Hartmann et al. [67] (2011) wird das Konzept der G -Gleichung um den Effekt der Wärmefreisetzung durch die Verbrennung erweitert. Die Kinematik der Flammenfront wird durch die G -Gleichung:

$$\frac{\partial G}{\partial t} + \left[\mathbf{v} + \frac{\rho_u}{\rho} (s_L - D2c^*) \mathbf{n} \right]_{G=G_0} \cdot \nabla G = 0 \quad (3.21)$$

beschrieben, mit einer Krümmungskorrektur der Brenngeschwindigkeit. Der Faktor ρ_u/ρ in (3.21) berücksichtigt die Variation der Brenngeschwindigkeit in Normalenrichtung der Flammenfront aufgrund der thermischen Expansion.

Zur Beschreibung der Wärmefreisetzung wird die Reaktionsrate einer globalen Einzschrittreaktion als Funktion des G -Felds und einer Reaktionsfortschrittsvariable c formuliert, die den Wert 0 im unverbrannten Bereich und den Wert 1 im verbrannten Bereich annimmt. Die Fortschrittsvariable c kann als reduzierte Temperatur interpretiert werden. Der speziellen Isofläche $G = G_0$ wird somit eine Reaktionszone *angehängt*. Ihre Reaktionsrate stammt aus dem Modell von Ferziger und Echekki [52] (1993). Sie besitzt die qualitativen Eigenschaften eines Arrhenius-Terms mit hoher Aktivierungsenergie. Sie nimmt erst ab einer Temperatur T_c nahe der Rauchgastemperatur einen signifikanten Wert an. Im Gegensatz zu einem Arrhenius-Ansatz besitzt die Reaktionsrate jedoch keine exponentielle Temperaturabhängigkeit sondern einen expliziten Schalter:

$$\dot{\omega}_c = \rho_u R_r (1 - c) H(c - c^0), \quad (3.22)$$

mit der Heaviside-Funktion $H(c - c^0)$, die die Reaktionsrate erst ab dem Wert c^0 (entspricht der Temperatur T_c) der Fortschrittsvariable anschaltet. R_r ist eine Modellkonstante. Diese wird aus der Betrachtung einer stationär brennenden planaren Flamme in einem mitbewegten Koordinatensystem (mit der normalen Koordinate x^n)

$$\rho_u s_u \frac{\partial c}{\partial x^n} = \frac{\partial}{\partial x^n} \left(\rho_u D \frac{\partial c}{\partial x^n} \right) + \dot{\omega}_c \quad (3.23)$$

gewonnen. Mit der Reaktionsrate (3.22) folgt aus der Lösung von (3.23) für die Modellkonstante:

$$R_r = \frac{1}{1 - c^0} \left(\frac{1}{1 - c^0} - 1 \right) \frac{s_u^2}{D}. \quad (3.24)$$

Mit dieser Modellkonstante bewegt sich das Profil von c mit der Brenngeschwindigkeit s_u in Normalenrichtung relativ zum Frischgasgemisch.

Eine Besonderheit in [66] und [67] liegt in der Verwendung von zwei getrennten, dynamisch adaptiven numerischen Gittern. Ein hoch aufgelöstes gleichmäßiges kartesisches Gitter wird für die Diskretisierung der G -Gleichung in einem schmalen Band um die Isofläche $G = G_0$ verwendet. Auf dem zweiten Gitter werden die restlichen Erhaltungsgleichungen (Strömung und Reaktionsfortschrittsvariable) gelöst. Beide Gitter können unabhängig voneinander dynamisch lokal verfeinert werden. In der numerischen Implementierung des Modells wird der Quellterm (3.22) durch eine Formulierung

$$\dot{\omega}_c = \rho \frac{\rho_u}{\rho_b} R_r (1 - c) \Psi(G, \sigma) \quad (3.25)$$

ersetzt, die es erlaubt die räumliche Ausdehnung des Profils des Quellterms zu variieren, ohne die Brenngeschwindigkeit zu verändern. Die Funktion $\Psi(G, \sigma)$ steuert das Quelltermprofil über den Parameter σ .

In Moureau et al. [96] (2009) wird die Formulierung des Quellterms in der Transportgleichung der Reaktionsfortschrittsvariable im Kontext der *Large Eddy Simulation* (LES) turbulenter vorgemischter Flammen verwendet. Dabei wird ein (im Sinne der LES) gefiltertes G -Feld betrachtet, das die Bewegung der turbulenten Flammenfront beschreibt. Das Feld der Reaktionsfortschrittsvariable wird ebenfalls als gefiltert angesehen. Das gefilterte Quelltermprofil und die Feinstrukturdiffusivität der Reaktionsfortschrittsvariable (und somit ihr resultierendes räumliches Profil) passen sich der gegebenen Netzauflösung an. Dadurch ist es möglich die Interaktion des Strömungsfelds mit der aufgelösten Flammenstruktur bei ausreichender Auflösung direkt durch die Simulation zu berücksichtigen (und nicht zu modellieren). Dies gilt insbesondere für die Vorheizzone im Regime der dünnen Reaktionszonen. Im Fall eines hochauflösenden Netzes geht das Model in eine deterministische Beschreibung einer laminaren Flamme mittels G -Gleichung und Reaktionsfortschrittsvariable wie in [66, 67] über.

In Paravento [103] (2010) wird ebenfalls ein Quellterm zur Wärmefreisetzung an die Bewegung einer Flammenfront gekoppelt, deren Kinematik über eine G -Gleichung beschrieben wird.

3.7.5 Das Modell von Duwig

In Duwig [46] (2009) wird ein Modellierungskonzept vorgemischter Flammen vorgestellt, das seinen Ursprung in LES hat. Das Flammenmodell wird zur Simulation auf numerischen Gittern verwendet, deren charakteristische Zellgröße oder Gitterabstand größer als die Flammendicke ist. Das ursprünglich für LES entwickelte Flammenmodell wird in [46] zur Simulation laminarer vorgemischter Flammen modifiziert und eingesetzt. Ausgangspunkt für die Modellierung sind die gefilterten Erhaltungsgleichungen einer reaktiven Strömung bei niedriger Mach-Zahl. Die Feinstrukturgrößen stellen nicht mehr Transportterme von Energie, Spezies und Impuls aufgrund nicht aufgelöster turbulenter Skalen dar, sondern sie stehen für molekulare Transportterme und chemische Quellterme die auf dem verwendeten Netz nicht aufgelöst werden.

Die Flammenausbreitung wird mittels einer Reaktionsfortschrittsvariable \tilde{c} beschrieben, für die folgende Transportgleichung angesetzt wird:

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{c})}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}\tilde{\mathbf{v}}\tilde{c}) = \nabla \cdot (\rho D \nabla \tilde{c}) + \pi(\tilde{c}) , \quad (3.26)$$

wobei der Querstrich für eine gefilterte Größe steht und die Tilde für eine mit der Dichte gewichtete Filterung. Das Ziel der Modellierung ist die Formulierung der beiden Terme auf der rechten Seite von (3.26) zur korrekten Beschreibung eines Flammenausbreitungsprozesses. Eine Bedingung für den Quellterm $\pi(\tilde{c})$ folgt aus der integralen Beziehung in Normalenrichtung x über die Flammenfront

$$\int \pi(\tilde{c}) \, dx = \int \bar{\omega}_c(x) \, dx , \quad (3.27)$$

mit dem gemittelten Quellterm $\bar{\omega}_c$ der Reaktionsfortschrittsvariable. Für $\pi(\tilde{c})$ wird eine Gauß-Funktion

$$\pi(\tilde{c}) = \alpha \exp\left(\frac{-6x^2}{\Delta^2}\right) \quad (3.28)$$

gewählt, mit der Konstante α und der Filterweite Δ . Die Konstante α und die Diffusivität ρD werden als Funktion der Filterweite und einer Markstein-Länge bezüglich Krümmung so gewählt, dass sich das Profil der Reaktionsfortschrittsvariable mit

einer gegebenen Brenngeschwindigkeit relativ zur Strömung bewegt. Dabei wird eine Krümmungsabhängigkeit der Flammengeschwindigkeit durch Vorgabe der entsprechenden Markstein-Länge berücksichtigt. Da durch das alleinige Lösen der Transportgleichung für die Reaktionsfortschrittsvariable die normale Koordinate x nicht bekannt ist, wird der Quellterm π als Funktion von \tilde{c} und α tabelliert. Das Modell von Duwig ermöglicht somit die Simulation von Flammenausbreitungsprozessen mit einer künstlichen Verdickung der Flammenfront.

4 Herleitung eines integralen Modells der Reaktionszone

Dieses Kapitel widmet sich der integralen Modellierung der Reaktionszone einer vorge-mischten Flamme. Die Motivation für das Modellierungskonzept wird vorgestellt. Anschließend wird im Detail auf die Herleitung der Beziehung für die Massenstromdichte durch die Reaktionszone eingegangen. Am Ende des Kapitels werden Möglichkeiten zur Bestimmung des Modellparameters diskutiert.

4.1 Einleitung und Motivation

In der vorliegenden Arbeit wird ein Ansatz entwickelt, der eine Kombination aus der klassischen G -Gleichung und einer reaktiven Simulation mit direkter Berücksichtigung (durch Simulation) von Transportprozessen und Chemie darstellt. Es wird bei der Herleitung davon ausgegangen, dass eine Spezies die chemischen Vorgänge innerhalb der Reaktionszone limitiert und somit die chemische Reaktion endet, wenn die Spezies verbraucht ist. In der weiteren Herleitung wird die limitierende Spezies allgemein mit Y bezeichnet. Bei einer mageren vorgemischten Flamme steht Y für den Massenbruch des Brennstoffs. Bei der Anwendung des hier vorgestellten Modells in einer Simulation wird zusätzlich zu der Level-Set-Gleichung eine Transportgleichung für die limitierende Spezies Y gelöst. Die Grundidee besteht darin, den Wert dieses Skalarfelds Y zu nutzen, um die Brenngeschwindigkeit oder die Massenstromdichte zu berechnen, die in die Level-Set-Gleichung eingeht.

In einer realen Flamme ist der lokale Verbrauch der limitierenden Spezies Y von den Konzentrationen mehrerer Spezies, der Temperatur und dem Druck abhängig [137]. Die Konzentrationen dieser Spezies resultieren ihrerseits aus Transportprozessen und aus weiteren chemischen Reaktionen. Die hohe Anzahl an beteiligten chemischen Reaktionen mit ihren in der Regel stark temperaturabhängigen Reaktionsraten macht die detaillierte realistische Beschreibung aller Vorgänge in der Reaktionszone numerisch sehr aufwendig. Insbesondere das breite Spektrum an Zeitskalen der chemischen Prozesse erschwert eine effiziente Simulation [137].

Bei dem vorgestellten Modellierungskonzept wird die lokale detaillierte Auflösung der chemischen Prozesse innerhalb der Reaktionszone vermieden. Der Quellterm, der die limitierende Spezies Y verbraucht, soll nur den integralen Verbrauch über die Reaktionszone hinweg beschreiben. Dazu wird für den Quellterm ω_Y folgender Ansatz gewählt:

$$\omega_Y = I_Y \delta(x^1), \quad (4.1)$$

wobei I_Y den integralen Verbrauch von Y in der Reaktionszone darstellt. I_Y berechnet sich aus dem Integral des realen Quellterms von Y auf einem Pfad senkrecht zur Reaktionszone durch die gesamte Zone hindurch. Wird die Reaktionszone als eine Oberfläche im Raum angesehen, dann gibt der Zahlenwert von I_Y die Menge von Y an, die pro Zeiteinheit und pro Flächeneinheit dieser Oberfläche durch chemische Reaktion verbraucht wird. Der Term $\delta(x^1)$ in (4.1) legt den räumlichen Verlauf des modellierten Quellterms fest und sollte folgende Eigenschaften besitzen:

- (i) $\delta(x^1)$ liefert nur in der Umgebung von $x^1 = 0$ (zwischen $x^1 = -l_\delta/2$ und $x^1 = +l_\delta/2$) einen Beitrag.
- (ii) Das Integral von $\delta(x^1)$ über die Reaktionszone ist bekannt. Hier wird der Wert 1 dafür gewählt.

x^1 bezeichnet die Koordinate normal zur Reaktionszone eines krummlinigen bewegten Koordinatensystems, das sich mit der Reaktionszone bewegt. Die Koordinatenfläche $x^1 = 0$ soll dabei zu jedem Zeitpunkt innerhalb der Reaktionszone liegen. In Abb. 4.1 ist eine Skizze einer Flammenstruktur mit der Lage der Koordinatenfläche $x^1 = 0$ angegeben. Die Flammenstruktur wird durch ein Strömungsfeld mit einer charakteristischen Längenskala l gestört. Die Wahl des krummlinigen Koordinatensystems in dieser Arbeit

ist analog zu der in Klimenko und Class [73] sowie in Class et al. [30]. Ähnliche Koordinatensysteme werden u.a. in den Arbeiten von De Goeij und ten Thije Boonkamp [40] sowie von Matalon et al. [92] verwendet. Die Metrik des Koordinatensystems wird hier wie in [73] und [30] gewählt: $g_{11} = g^{11} = 1$, $g_{1\alpha} = 0$ und $g^{1\alpha} = 0$. Die Koordinatenlinien von x^1 sind somit orthogonal zu den Koordinatenflächen $x^1 = \text{konst.}$ Außerdem entspricht der Wert von x^1 direkt dem normalen Abstand zu der Koordinatenfläche $x^1 = 0$. Die Eigenschaft (i) begrenzt die normale Ausdehnung der räumlichen Zone innerhalb

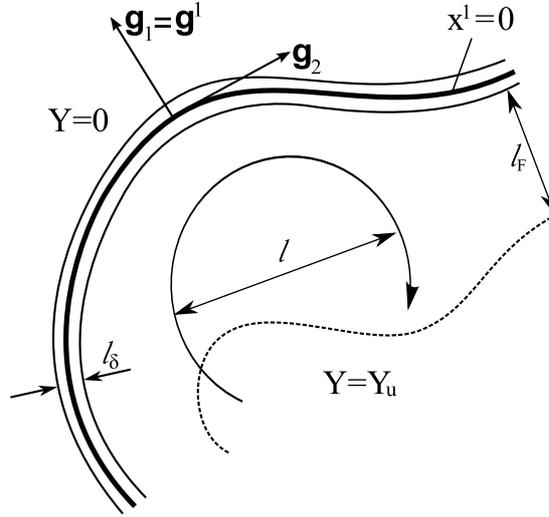


Abbildung 4.1: Illustration des bewegten Koordinatensystems in einer gestörten Flammenstruktur.

derer Y abgebaut wird auf l_δ . Die Eigenschaft (ii) ermöglicht es über den Ansatz (4.1) eine Entkopplung des integralen Beitrags des chemischen Quellterms von seinem räumlichen Verlauf zu erzielen. Die δ -Funktion dient somit nur als *Träger* der chemischen Wirkung mit integralem Wert I_Y .

Eine Möglichkeit der Umsetzung dieser Modellierungsstrategie besteht darin, die chemischen Vorgänge innerhalb der Reaktionszone als unendlich schnell zu betrachten. Die δ -Funktion ist dann überall Null außer auf der Oberfläche $x^1 = 0$. Die Profile der Variablen besitzen an der Stelle $x^1 = 0$ eine diskontinuierliche erste Ableitung normal zur Fläche $x^1 = 0$. An diesem Knick der Profile ist die Konzentration der limitierenden Spezies $Y = 0$. Die Bewegung der Oberfläche $x^1 = 0$ folgt implizit aus den Sprüngen der Steigung am Knick und den Werten der Steigungen unmittelbar vor und hinter dem Knick. Hinter dem Knick ist die Steigung des Y -Profils Null. Diese Betrachtungsweise ermöglicht es nicht, der Fläche $x^1 = 0$ explizit eine Brenngeschwindigkeit zuzuordnen. Für die Umsetzung des Modells in einem CFD-Programm ist es jedoch vorteilhaft, explizit eine Brenngeschwindigkeit ausrechnen zu können und damit die Bewegung der Oberfläche $x^1 = 0$ vorzugeben. Es wird hier deshalb ein Modell mit einer endlichen Dicke der Reaktionszone und somit der δ -Funktion formuliert, die in einer Simulation räumlich aufgelöst wird. Der integrale Abbau I_Y geht dabei als Parameter ein. Zur Implementierung in einen CFD-Code wird eine Formulierung für die Brenngeschwindigkeit bzw. Massenstromdichte durch die Reaktionszone benötigt. Diese wird in 4.2 hergeleitet.

Im Folgenden wird eine Motivation für die Modellierung der Brenngeschwindigkeit bzw. Massenstromdichte in der Reaktionszone vorgestellt. In Ansätzen die auf der klas-

sischen G -Gleichung basieren wird die laminare Flammgeschwindigkeit s_L , die der Brenngeschwindigkeit s_u an der unverbrannten Grenze der Flammenstruktur entspricht, modelliert. Bei der in dieser Arbeit vorgestellten Modellierungsstrategie geht jedoch das Integral I_Y und somit die Verbrauchsgeschwindigkeit s_c (*fuel consumption speed*) in die Modellierung ein. Die Verbrauchsgeschwindigkeit ist integral auf einer chemischen Basis definiert [109]:

$$s_c = -\frac{1}{\rho_u Y} \int_{-\infty}^{+\infty} \omega_Y dn, \quad (4.2)$$

wobei das Integral in Normalrichtung der Reaktionszone gebildet wird. Theoretische Untersuchungen vorgemischter Flammen mit Hilfe asymptotischer Näherungsverfahren zeigen, dass bei kleinen Krümmungen und Streckungen der Flammenfront die interne Flammenstruktur nur von der Streckung abhängt und die Variation von s_u und s_c kann durch folgende lineare Beziehungen ausgedrückt werden [109]:

$$\frac{s_u}{s_L} = 1 - \frac{l_M^d}{s_L} \chi, \quad (4.3)$$

$$\frac{s_c}{s_L} = 1 - \frac{l_M^c}{s_L} \chi, \quad (4.4)$$

mit der Markstein-Länge l_M^d für die Brenngeschwindigkeit s_u und der Markstein-Länge l_M^c für die Verbrauchsgeschwindigkeit s_c . Die auf die Flammendicke (2.44) bezogenen Markstein-Längen werden als Markstein-Zahlen bezeichnet:

$$\text{Ma}_d = \frac{l_M^d}{l_F}, \quad (4.5)$$

$$\text{Ma}_c = \frac{l_M^c}{l_F}. \quad (4.6)$$

Im Buch von Poinsoot und Veynante [109] (2005) werden für kleine Streckungsraten, bei denen $\chi l_F / s_L \ll 1$ gilt, folgende Ausdrücke aus der theoretischen Arbeit von Clavin und Joulin [32] (1983) für die Markstein-Zahlen angegeben (unter der Annahme von Einschrittchemie mit einer limitierenden Spezies und konstanter thermischer Diffusivität):

$$\text{Ma}_d = \frac{T_2}{T_2 - T_1} \ln\left(\frac{T_2}{T_1}\right) + \frac{1}{2}\beta(\text{Le}_Y - 1) \frac{T_1}{T_2 - T_1} \int_0^{\frac{T_2 - T_1}{T_1}} \frac{\ln(1+x)}{x} dx, \quad (4.7)$$

$$\text{Ma}_c = \frac{1}{2}\beta(\text{Le}_Y - 1) \frac{T_1}{T_2 - T_1} \int_0^{\frac{T_2 - T_1}{T_1}} \frac{\ln(1+x)}{x} dx, \quad (4.8)$$

mit der Frischgastemperatur T_1 , der Rauchgastemperatur T_2 , der Lewis-Zahl Le_Y der limitierenden Spezies Y und der skalierten Aktivierungsenergie $\beta = (T_2 - T_1)T_a / T_2^2$ mit der Aktivierungstemperatur T_a der Einschrittreaktion vom Arrhenius-Typ. Die Markstein-Zahlen unterscheiden sich nur im ersten Term in (4.7). Der gemeinsame Term, in den die Lewis-Zahl und die Aktivierungstemperatur eingehen, resultiert aus der Variation der Reaktionsrate durch die Änderung der Enthalpie in der Reaktionszone bei einer Streckung der Flammenfront. Die Herleitung in [32] basiert auf einer asymptotischen Entwicklung für $\beta \rightarrow +\infty$ und somit auf dem Konzept der *high activation energy*

asymptotics. Für diesen Grenzfall wird die Reaktionszone durch eine Reaktionsfläche am verbrannten Ende der Flammenstruktur beschrieben, bei einer Temperatur die nahe an der adiabatischen Flammentemperatur liegt. Bei einer Lewis-Zahl $Le_Y = 1$ ändert sich die Enthalpie in der Reaktionszone nicht aufgrund von Streckung und der gemeinsame Term verschwindet. In dem Fall ist die Verbrauchsgeschwindigkeit unabhängig von der Streckung. Bei gegebener thermischer Expansion des Gases durch die Flammenfront (bei festen Werten von T_1 und T_2) ist die Abhängigkeit beider Markstein-Zahlen von der skalierten Aktivierungstemperatur β und der Lewis-Zahl Le_Y identisch.

In Abb. 4.2 ist die Abhängigkeit der Markstein-Zahlen Ma_d und Ma_c nach (4.7) und (4.8) sowie deren Größenverhältnis $|Ma_c|/|Ma_d|$ von der Lewis-Zahl Le_Y dargestellt. Hierzu sind für die Parameter in den Beziehungen (4.7) und (4.8) realistische Werte typischer Kohlenwasserstoff-Flammen berücksichtigt [109]: $T_1 = 300$ K, $T_2 = 7 \cdot T_1 = 2100$ K und $T_a = 150 \cdot T_1 = 45000$ K. Der Wertebereich der Lewis-Zahl ist um den Wert 1 gewählt, weil in der Herleitung in [32] die Annahme $Le_Y - 1 = O(1/\beta)$ verwendet wird. Wie aus der Abb. 4.2 entnommen werden kann, ist für Lewis-Zahlen nahe 1

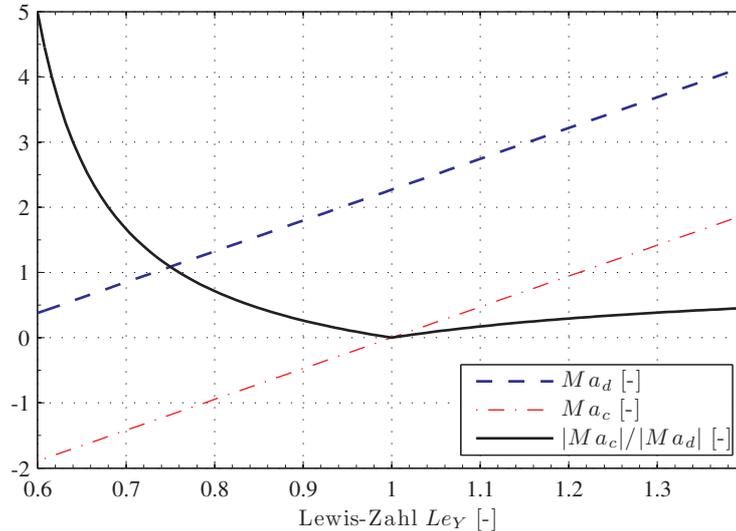


Abbildung 4.2: Variation der Markstein-Zahlen Ma_d und Ma_c mit der Lewis-Zahl Le_Y .

das Verhältnis $|Ma_c|/|Ma_d|$ sehr klein. Dementsprechend reagiert in diesem Bereich die Brenngeschwindigkeit s_u wesentlich stärker auf die Streckung der Flammenfront als die Verbrauchsgeschwindigkeit s_c . Dies liefert die Motivation ein Flammenmodell zu formulieren, bei dem die Verbrauchsgeschwindigkeit s_c als konstanter Parameter eingeht und als Ergebnis die Brenngeschwindigkeit berechnet wird. Die Ergebnisse detaillierter Simulationen von Methan/Luft-Flammen sowie der Analyse einer Direkten Numerischen Simulation in Kapitel 6 bekräftigen diese Motivation. Für Lewis-Zahlen deutlich kleiner als 1 kann jedoch die Änderung der Verbrauchsgeschwindigkeit nicht mehr vernachlässigt werden. Eine qualitative Erweiterung des Flammenmodells für Lewis-Zahlen kleiner als 1 wird in Kapitel 8 vorgestellt.

4.2 Herleitung

Der Ausbreitungsmechanismus einer vorgemischten Flamme beruht auf diffusiven Prozessen in der Vorheizzone. Kaltes Gemisch vor der Flamme wird innerhalb der Vorheizzone aufgeheizt und reagiert chemisch in der Reaktionszone zu den Produkten. In der Vorheizzone existiert ein diffusiver Wärmefluss vom Rauchgas zum Brenngas. Die Wärmefreisetzung in der Reaktionszone bewirkt, dass das Temperaturprofil am verbrannten Ende den Wert der Rauchgastemperatur erreicht. Das gesamte Temperaturprofil bewegt sich somit relativ zur Strömung in Richtung des unverbrannten Gemischs. Außerdem findet in der Vorheizzone ein diffusiver Fluss von Brennstoff in die Reaktionszone statt. Durch den Verbrauch des Brennstoffs in der Reaktionszone verschiebt sich das Brennstoffprofil analog zum Temperaturprofil in Richtung des unverbrannten Gemischs. Die Flammenausbreitung erfolgt somit durch diffusive Vorgänge, wofür die notwendigen räumlichen Gradienten durch Quellterme aufgrund chemischer Reaktionen (Wärmefreisetzung und Brennstoffverbrauch) aufrecht erhalten werden [137].

Um eine Flammenausbreitung beschreiben zu können, muss sich das Quelltermprofil von Y im Raum bewegen. Bei der Formulierung des Quellterms als eine feste Funktion der normalen Koordinaten x^1 eines bewegten krummlinigen Koordinatensystems sorgt die Bewegung des Koordinatensystems selbst für die Flammenausbreitung. Die Koordinatenflächen $x^1 = \text{konst.}$ müssen sich dabei mit einer bestimmten Geschwindigkeit im Raum bewegen, so dass $Y \rightarrow 0$ für $x^1 \rightarrow \infty$. Bei der Herleitung wird angenommen, dass sich das Koordinatensystem in der Richtung tangential zu den Koordinatenflächen $x^1 = \text{konst.}$ mit der lokalen tangentialen Komponente der Strömungsgeschwindigkeit bewegt. Aus [30] ist bekannt, dass für Flammen deren Dicke klein im Vergleich zu den kleinsten Längenskalen der Strömung ist, die tangentialen Geschwindigkeitskomponenten der Strömung in erster Näherung keine Änderung in Normalenrichtung durch die Flammenstruktur erfahren. Der einzige verbleibende Freiheitsgrad bei der Bewegung des Koordinatensystems ist somit die normale Ausbreitungsgeschwindigkeit u^1 der Koordinatenflächen, wobei mit dem Begriff Ausbreitungsgeschwindigkeit die absolute Geschwindigkeit relativ zu einem ruhenden Bezugssystem gemeint ist. Hier wird die formale Herleitung für die Bewegung von Koordinatenflächen $x^1 = \text{konst.}$ durchgeführt. Die Formulierung für eine Implementierung in einen CFD-Code wird in Kapitel 5 diskutiert.

Ausgangspunkt für die Herleitung der Geschwindigkeit u^1 mit der sich das krummlinige Koordinatensystem bewegen muss, ist die Transportgleichung für Y [137],[57]:

$$\frac{\partial(\rho Y)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho(\mathbf{v} + \mathbf{V}_Y) Y) = \omega_Y, \quad (4.9)$$

wobei die Diffusionsgeschwindigkeit \mathbf{V}_Y noch nicht näher spezifiziert ist. Ausgedrückt in bewegten krummlinigen Koordinaten lautet die Transportgleichung (4.9) [73],[30],[128]:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial(\sqrt{g}\rho Y)}{\partial \tau} + \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial(\sqrt{g}\rho(v^1 - u^1) Y)}{\partial x^1} + \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial(\sqrt{g}\rho(v^\alpha - u^\alpha) Y)}{\partial x^\alpha} \\ & + \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial(\sqrt{g}\rho V_Y^1 Y)}{\partial x^1} + \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial(\sqrt{g}\rho V_Y^\alpha Y)}{\partial x^\alpha} = \omega_Y. \end{aligned} \quad (4.10)$$

In (4.10) ist zu beachten, dass die kontravarianten Komponenten v^j , u^j und V_Y^j der Geschwindigkeiten \mathbf{v} , \mathbf{u} und \mathbf{V}_Y tensorielle Größen und im Allgemeinen nicht identisch mit den physikalischen Komponenten $v(j)$, $u(j)$ und $V_Y(j)$ sind. Aufgrund der

gleichmäßigen Skalierung der normalen Koordinate x^1 durch die Wahl $g_{11} = 1$ sind die physikalischen und die kontravarianten tensoriellen Komponenten in Richtung des Basisvektors \mathbf{g}_1 identisch [30].

Die Modellierungsidee spiegelt sich in der Formulierung des Quellterms in (4.10) wieder, der wie in (4.1) formuliert wird. Aufgrund der Bewegung des Koordinatensystems mit der Strömungsgeschwindigkeit in tangentialer Richtung der Reaktionszone ist der Term $v^\alpha - u^\alpha$ in (4.10) vernachlässigbar. In der folgenden Herleitung wird der Term weiterhin mitberücksichtigt. Sie ist somit auch für eine andere Definition der tangentialen Geschwindigkeit des Koordinatensystems gültig.

Da der Quellterm nur eine integrale Formulierung der realen Vorgänge innerhalb der Reaktionszone sein soll, braucht (4.10) nicht lokal, sondern nur integral über die Reaktionszone hinweg erfüllt zu sein. Dazu wird (4.10) über die normale Koordinate x^1 integriert. Die hintere Integrationsgrenze muss so gewählt werden, dass die Wirkung des Quellterms dort vernachlässigt werden kann. Bei der integralen Formulierung des Quellterms (4.1) wird der räumliche Bereich, in dem der Quellterm wirkt, allein durch die Funktion $\delta(x^1)$ bestimmt. Die untere Integrationsgrenze wird allgemein als x^1 formuliert um die Ausbreitungsgeschwindigkeit als Funktion von x^1 bestimmen zu können. Die Integration liefert (nach Multiplikation mit \sqrt{g}):

$$\begin{aligned} \int_{x^1}^{+\infty} \frac{\partial(\sqrt{g}\rho Y)}{\partial\tau} d\hat{x}^1 + \int_{x^1}^{+\infty} \frac{\partial(\sqrt{g}\rho(v^1 - u^1)Y)}{\partial\hat{x}^1} d\hat{x}^1 + \int_{x^1}^{+\infty} \frac{\partial(\sqrt{g}\rho(v^\alpha - u^\alpha)Y)}{\partial x^\alpha} d\hat{x}^1 \\ + \int_{x^1}^{+\infty} \frac{\partial(\sqrt{g}\rho V_Y^1 Y)}{\partial\hat{x}^1} d\hat{x}^1 + \int_{x^1}^{+\infty} \frac{\partial(\sqrt{g}\rho V_Y^\alpha Y)}{\partial x^\alpha} d\hat{x}^1 = I_Y \int_{x^1}^{+\infty} \sqrt{g} \delta(\hat{x}^1) d\hat{x}^1 \end{aligned} \quad (4.11)$$

In (4.11) bezeichnet \hat{x}^1 die Integrationsvariable. Diese wird formal eingeführt, weil die untere Integrationsgrenze bereits mit x^1 bezeichnet wird. Die hier angewendete Vorgehensweise ist analog zu der Integration der Erhaltungsgleichungen in Class et al. [30] über die ganze Flamme hinweg. Durch die Integration in Normalenrichtung (über x^1) liefern die Ableitungen der Flüsse nach x^1 direkte Beiträge der Flüsse.

Das Integral über den konvektiven Term in Normalenrichtung liefert

$$\begin{aligned} \int_{x^1}^{+\infty} \frac{\partial(\sqrt{g}\rho(v^1 - u^1)Y)}{\partial\hat{x}^1} d\hat{x}^1 &= \left(\sqrt{g}\rho(v^1 - u^1)Y \right) \Big|_{+\infty} - \sqrt{g}\rho(v^1 - u^1)Y \\ &= -\sqrt{g}\rho(v^1 - u^1)Y. \end{aligned} \quad (4.12)$$

In (4.12) verschwindet die Auswertung des normalen Flusses an der hinteren Integrationsgrenze $+\infty$, da hinter der Reaktionszone die limitierende Spezies verbraucht ist. Das Produkt

$$m = \rho(v^1 - u^1) \quad (4.13)$$

ist die Massenstromdichte durch Koordinatenflächen $x^1 = \text{konst.}$ und wird auch als *mass burning rate* bezeichnet [30].

Das Integral über die normale Ableitung des normalen diffusiven Flusses in (4.11)

liefert

$$\int_{x^1}^{+\infty} \frac{\partial(\sqrt{g}\rho V_Y^1 Y)}{\partial \hat{x}^1} d\hat{x}^1 = \sqrt{g}\rho V_Y^1 Y \Big|_{+\infty} - \sqrt{g}\rho V_Y^1 Y = -\sqrt{g}\rho V_Y^1 Y. \quad (4.14)$$

Die Auswertung des diffusiven Flusses an der hinteren Integrationsgrenze $+\infty$ verschwindet, da dort $Y = 0$. Dies gilt auch bei einer Modellierung des diffusiven Flusses über einen Gradientenansatz (z.B. Fickscher Ansatz).

Mit (4.12) und (4.14) folgt aus der integralen Formulierung (4.11) folgende Formel für die Massenstromdichte:

$$m = \frac{1}{(\sqrt{g}Y)} \left\{ -I_Y \int_{x^1}^{+\infty} \sqrt{g} \delta(\hat{x}^1) d\hat{x}^1 \right. \quad (4.15a)$$

$$\left. - \sqrt{g}\rho V_Y^1 Y \right. \quad (4.15b)$$

$$\left. + \int_{x^1}^{+\infty} \frac{\partial(\sqrt{g}\rho Y)}{\partial \tau} d\hat{x}^1 \right. \quad (4.15c)$$

$$\left. + \int_{x^1}^{+\infty} \frac{\partial(\sqrt{g}\rho(v^\alpha - u^\alpha)Y)}{\partial x^\alpha} d\hat{x}^1 \right. \quad (4.15d)$$

$$\left. + \int_{x^1}^{+\infty} \frac{\partial(\sqrt{g}\rho V_Y^\alpha Y)}{\partial x^\alpha} d\hat{x}^1 \right\}. \quad (4.15e)$$

Die Gleichung (4.15) ist eine allgemeine Beziehung für das Skalarfeld der Massenstromdichte m durch Flächen $x^1 = \text{konst.}$, wenn hinter der Reaktionszone die Bedingungen $Y = 0$ und $V_Y^1 = 0$ erfüllt sind. Das Produkt mY ist die Massenstromdichte der Spezies Y durch Koordinatenflächen $x^1 = \text{konst.}$ Durch Multiplikation von (4.15) mit Y und Umstellen des diffusiven Flusses lässt sich folgende Form anschreiben:

$$mY + \rho V_Y^1 Y = \frac{1}{\sqrt{g}} \left\{ -I_Y \int_{x^1}^{+\infty} \sqrt{g} \delta(\hat{x}^1) d\hat{x}^1 + \int_{x^1}^{+\infty} \frac{\partial(\sqrt{g}\rho Y)}{\partial \tau} d\hat{x}^1 \right. \quad (4.16)$$

$$\left. + \int_{x^1}^{+\infty} \frac{\partial(\sqrt{g}\rho(v^\alpha - u^\alpha)Y)}{\partial x^\alpha} d\hat{x}^1 + \int_{x^1}^{+\infty} \frac{\partial(\sqrt{g}\rho V_Y^\alpha Y)}{\partial x^\alpha} d\hat{x}^1 \right\}.$$

(4.16) beschreibt mathematisch folgenden physikalischen Zusammenhang: Der gesamte Massenfluss der limitierenden Spezies Y durch eine Koordinatenfläche $x^1 = \text{konst.}$ (linke Seite von (4.16)) wird innerhalb der restlichen (Integral von x^1 bis $+\infty$) räumlichen Ausdehnung der Reaktionszone verbraucht, akkumuliert sich dort oder wird quer zur Koordinatenfläche $x^1 = \text{konst.}$ transportiert (siehe Abb. 4.3). Die Terme (4.15a) und (4.15b) müssen zur Beschreibung der Flammenausbreitung berücksichtigt werden. Die restlichen Terme sind Korrekturterme, welche die Abweichung von einer sich stationär ausbreitenden, planaren und ungestreckten Reaktionszone beschreiben. Die hier vorgestellte integrale Formulierung ist ähnlich zu den Erhaltungsbedingungen an einer Grenzfläche, die in [143] hergeleitet werden.

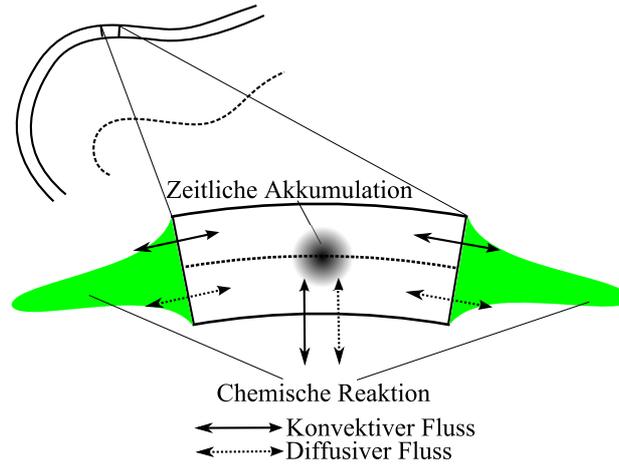


Abbildung 4.3: Illustration des integralen Erhaltungsprinzips in der Reaktionszone.

Die Formel (4.15) ist eine integral exakte Vorschrift, um eine auf chemischer Basis definierte Verbrauchsgeschwindigkeit (*fuel consumption speed*) in eine hydrodynamische Geschwindigkeit (*displacement speed*) umzuwandeln. Das Integral I_Y stellt den einzigen Modellparameter dar und muss zur Verwendung des integralen Modellansatzes bekannt sein. Der Modellierungsansatz geht von einer intakten dünnen Reaktionszone im Raum aus. Bei lokalen Löschvorgängen sowie beim Aufeinandertreffen mehrerer Reaktionszonen (z.B. beim Verschmelzen zweier Flammenfronten) verliert das Modell seine Gültigkeit. In Williams [143] (1985) wird argumentiert, dass der auf die Flammenfläche bezogene Verbrauch (oder die Wärmefreisetzung) in den meisten Fällen eine bessere Charakterisierung des Einflusses von Streckung (*strain*-Anteil) auf die Flamme ist, als die Brenngeschwindigkeit.

4.3 Bestimmung des Parameters I_Y

I_Y kann durch numerische Integration direkt aus den Daten einer reaktiven Simulation gewonnen werden [109]. Dazu muss der Quellterm ω_Y der limitierenden Spezies auf einem Schnitt normal zur Reaktionszone integriert werden. Die detaillierte Vorgehensweise wird für eine zweidimensionale Simulation in 6.1 vorgestellt und diskutiert. Bei dieser Methode der direkten Integration des simulierten Quellterms ω_Y kann I_Y instantan an jedem Punkt entlang der Reaktionszone bestimmt werden. Eine lokale Bestimmung der Verbrauchsgeschwindigkeit direkt über den lokalen Brennstoffverbrauch ist experimentell jedoch nicht möglich [8].

Eine experimentelle Bestimmung eines mittleren Werts von I_Y über die gesamte Flammenfläche ist bei einer stationären vorgemischten laminaren Bunsenflamme möglich. Der zugeführte Massenstrom des Frischgases kann dabei mittels Massendurchflussmesser gemessen werden. Bei bekannter Zusammensetzung des Frischgases lässt sich daraus der Massenstrom \dot{m}_Y der limitierenden Spezies berechnen. Unter der Annahme eines vollständigen Verbrauchs der limitierenden Spezies durch die Verbrennung in der Flamme ist der zugeführte Massenstrom der limitierenden Spezies gleich dem integralen Verbrauch über die gesamte Flammenfläche A_f :

$$\dot{m}_Y = A_f I_{Y,m} , \quad (4.17)$$

wobei $I_{Y,m}$ ein über die Flammenfläche gemittelter Wert ist. Die Flammenfläche A_f muss dabei eine Fläche innerhalb der Reaktionszone sein und kann mittels laser-diagnostischer Methoden ermittelt werden. Ein aufgefächerter Laserstrahl kann zentral durch die Mittelachse der Bunsenflamme positioniert werden. Durch die Wahl einer geeigneten Wellenlänge des Laserlichts lassen sich Moleküle von Reaktionszonenmarker elektronisch anregen. Dies sind Spezies die bei brennstoffspezifischen chemischen Reaktionen in der Reaktionszone entstehen [137]. Die elektromagnetische Strahlung, die bei Rückfall der angeregten Moleküle in ihren Grundzustand emittiert wird, kann gefiltert und mittels einer digitalen Kamera aufgenommen werden. Aus der Aufnahme lässt sich mit einer Auswertesoftware die Flammenfläche A_f berechnen. Die hier beschriebene Vorgehensweise mit der Flamme eines Bunsenbrenners wird in [145] und [72] zur Bestimmung der Flammengeschwindigkeit vorgeschlagen.

Eine andere Möglichkeit um I_Y zu bestimmen, ohne den detaillierten räumlichen Verlauf des Quellterms ω_Y zu kennen, liefert die integrierte Transportgleichung (4.16) von Y selbst. Es wird eine flache Flammenfront betrachtet, die sich in einem räumlich homogenen und stationären Geschwindigkeitsfeld ausbreitet. Aus der Sicht eines mit der Flammenfront mitbewegten Koordinatensystems verschwindet der Zeitableitungsterm sowie die Terme, welche räumliche Ableitungen in Querrichtung beinhalten. Aus der Bedingung, dass die Flammenfront flach ist, folgt $\sqrt{g} = 1$. Das bewegte Koordinatensystem ist in dem Fall identisch mit einem kartesischen Koordinatensystem, das sich translatorisch mit konstanter Geschwindigkeit entlang einer festen Richtung bewegt, die mit der Flammenausbreitungsrichtung übereinstimmt. Die allgemeine Integrationsgrenze x^1 wird so gewählt, dass sie weit vor der Flammenfront liegt, dort wo der diffusive Fluss von Y verschwindet und die Dichte und der Massenbruch Y die Werte im unverbrannten Gemisch annehmen. Aus der Beziehung (4.16) folgt mit der Normierung $\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x^1) = 1$:

$$m_u Y_u = \rho_u s_u Y_u = -I_Y . \quad (4.18)$$

Aus (4.18) lässt sich das Integral I_Y aus der Dichte ρ_u und der Brenngeschwindigkeit s_u im unverbrannten Gemisch bestimmen. Bei den getroffenen Annahmen entspricht s_u der laminaren Flammengeschwindigkeit s_L einer planaren, sich mit konstanter Geschwindigkeit ausbreitenden, ungestreckten Flamme. Eine integrale Beziehung über eine planare Flammenfront wie (4.18) wird auch in [109] formuliert, wobei daraus zusätzlich ein Ausdruck für die adiabatische Flammentemperatur hergeleitet wird. Zahlenwerte der laminaren Flammengeschwindigkeit für verschiedene Gemische können in der Literatur gefunden werden, z.B. in der Zusammenstellung in [83].

5 Implementierung des integralen Modells in OpenFOAM®

In Kapitel 4 wurde ein Modell für die Massenstromdichte durch die Reaktionszone aus integralen Erhaltungsprinzipien hergeleitet. In diesem Kapitel wird auf die Implementierung des Modells in einen CFD-Code eingegangen. Die hier verwendete Software OpenFOAM® wird vorgestellt und es werden numerische und für die Implementierung relevante physikalische Aspekte des Modells diskutiert.

5.1 Phasen-Feld/Level-Set-Formulierung

Die integrale Modellierung der Reaktionszone liefert die Massenstromdichte m durch Koordinatenflächen von x^1 in der Reaktionszone. Um das Modell in einer Software für numerische Strömungsmechanik einzusetzen, bedarf es einer Methode um die Bewegung der Koordinatenflächen von x^1 zu simulieren. Eine natürliche Methode, die sich hierfür anbietet ist die Level-Set-Methode, die von Osher und Sethian entwickelt wurde [101], [117]. Im Rahmen der Verbrennungsforschung wird die Level-Set-Methode als Methode der G -Gleichung bezeichnet. Die in der Verbrennung übliche Formulierung der G -Gleichung lautet [106]

$$\frac{\partial G}{\partial t} + \mathbf{v}^* \cdot \nabla G = s^* |\nabla G| . \quad (5.1)$$

Der Stern als Index an einer Größe bedeutet, dass die Größe auf der Fläche $G = 0$ und $x^1 = 0$ (bzw. später in der Arbeit auf der Fläche $\psi = 0,5$) ausgewertet wird. In der klassischen Formulierung einer vorgemischten Flamme als gasdynamische Diskontinuität haben die Größen \mathbf{v}^* und s^* in (5.1) nur auf der Fläche $G = 0$ eine physikalische Bedeutung. Wird der Zustand unmittelbar vor der Fläche $G = 0$ als Referenz benutzt, dann ist \mathbf{v}^* die Strömungsgeschwindigkeit des Fluids mit der Dichte ρ_u des unverbrannten Gemischs und s^* ist die laminare Flammgeschwindigkeit. Bei der Wahl des Zustands unmittelbar hinter $G = 0$ ist \mathbf{v}^* die Strömungsgeschwindigkeit des verbrannten Gemischs mit der Dichte ρ_b und s^* die entsprechende Brenngeschwindigkeit. Die Gleichung (5.1) entspricht den von Markstein angegebenen Gleichungen (3.1) und (3.2).

Die Gleichung (5.1) besitzt keinen Diffusionsterm und kann nicht in einem CFD-Code mit klassischen räumlichen und zeitlichen Diskretisierungsverfahren gelöst werden. Durch den Quellterm, der eine Bewegung der Isoflächen von G normal zu sich selbst und relativ zur Strömung beschreibt, können die Flächen $G = \text{konst.}$ im Laufe einer Simulation Knicke bilden. Dies kann anhand der lokalen Näherung der Isofläche durch eine Kugelfläche anschaulich erklärt werden. Wenn sich zwei benachbarte Punkte auf der gekrümmten Isofläche um eine Strecke normal zur Isofläche bewegen die gleich dem lokalen Krümmungsradius der Kugelfläche ist, dann treffen sie sich am Krümmungsmittelpunkt, an dem der Gradient ∇G diskontinuierlich ist. Zur Diskretisierung von (5.1) sind spezielle Diskretisierungsverfahren notwendig, welche die Diskontinuitäten von ∇G korrekt behandeln [101], [117]. Eine Übersicht zu Theorie und Anwendung der Level-Set-Methode findet sich in [102] und [118].

5.1.1 Die Formulierung von Olsson et al.

Eine konservative Level-Set-Formulierung zur numerischen Behandlung des Problems einer bewegten Oberfläche wurde von Olsson und Kreiss [99] (2005) vorgeschlagen. Ein Grund für die Entwicklungsarbeit in [99] ist die Verletzung der globalen Massenerhaltung bei der Anwendung der Level-Set-Methode zur Simulation von Mehrphasenströmungen. Wenn die Fläche $G = 0$ die Phasengrenzfläche darstellt, z.B. einer gasförmigen Blase in einer Flüssigkeit, dann garantiert die Lösung der Level-Set-Gleichung

$$\frac{\partial G}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla G = 0 \quad (5.2)$$

nicht die Erhaltung der Masse des Gases in der Blase. Zur Lösung dieses Problems kann wie in [99] eine Funktion

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{2} \left(1 + \tanh \left(\frac{G}{2\varepsilon} \right) \right) \quad (5.3)$$

eingeführt werden. Im Gegensatz zu der klassischen Level-Set-Funktion G , die üblicherweise den vorzeichenbehafteten Abstand zur Isofläche $G = 0$ darstellt, nimmt die Funktion ψ überall im Raum nur Werte zwischen 0 und 1 ein. Der Übergang von 0 auf 1 erfolgt in einem räumlichen Bereich dessen Dicke durch den Parameter ε gesteuert wird. Die Isofläche $G = 0$ wird zur Isofläche $\psi = 0,5$. Daher hat ψ den Charakter einer Phasen-Feld-Funktion. Hier wird für ψ der Begriff Phasen-Feld/Level-Set-Funktion verwendet um die Verknüpfung beider Modellierungsansätze zu unterstreichen [118]. Das ψ -Feld wird hier von seiner Kinematik her wie ein Level-Set-Feld behandelt.

In Abb. 5.1 sind Profile von ψ für 7 verschiedene skalierte Werte $\varepsilon/l_{\text{ref}}$ entsprechend der Beziehung

$$\psi = \frac{1}{2} \left(1 + \tanh \left(\frac{G/l_{\text{ref}}}{2\varepsilon/l_{\text{ref}}} \right) \right) \quad (5.4)$$

über der skalierten Variable G/l_{ref} gezeigt. Durch die Skalierung können die Verläufe unabhängig von der Größenordnung des normalen Abstands G diskutiert werden. Die Referenzlänge l_{ref} kann z.B. als charakteristische Zellgröße in der numerischen Simulation aufgefasst werden. Zusätzlich sind in Abb. 5.1 die Punkte eingezeichnet, an denen $\psi = \psi_{\text{lim}}$ und $\psi = 1 - \psi_{\text{lim}}$ gilt. In Abb. 5.2 sind für die 3 Werte von ψ_{lim} die Abstände $d_\psi/l_{\text{ref}} = (G/l_{\text{ref}})|_{\psi=1-\psi_{\text{lim}}} - (G/l_{\text{ref}})|_{\psi=\psi_{\text{lim}}}$ über $\varepsilon/l_{\text{ref}}$ aufgetragen. Die Dicke d_ψ/l_{ref} nimmt dabei mit steigendem Parameter ε linear zu. Dies ist ersichtlich, wenn erkannt wird, dass der Faktor $1/(2\varepsilon)$ eine Streckung der normalen Koordinate G darstellt, die als Argument der tanh-Funktion dient. Aus Abb. 5.2 ist zu erkennen, dass bei gegebenem $\varepsilon/l_{\text{ref}}$ die Dicke d_ψ umso größer ist, je kleiner ψ_{lim} gewählt wird. Für die folgende praktische Umsetzung des Ansatzes der Phasen-Feld Funktion in einem Code für numerische Strömungsmechanik wird für ψ_{lim} der Wert 0,01 gewählt. Aus den Daten der entsprechenden Gerade in Abb. 5.2 kann dafür folgender Zusammenhang entnommen werden:

$$d_\psi/l_{\text{ref}} \approx 9,19 \varepsilon/l_{\text{ref}}, \quad \text{bzw.} \quad d_\psi \approx 9,19 \varepsilon. \quad (5.5)$$

In [99] wird die Formulierung (5.3) zur Simulation von Zweiphasenströmungen inkompressibler Fluide ohne Durchströmung der Phasengrenzfläche verwendet. Die Bewegung der Isoflächen des Feldes ψ wird durch die kinematische Beziehung

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \psi = 0 \quad (5.6)$$

beschrieben, die im Gegensatz zur Beschreibung vorgemischter Flammen keinen Quellterm enthält. Aufgrund der Divergenzfreiheit des Strömungsfelds inkompressibler Fluide kann (5.6) in konservativer Formulierung angegeben werden:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v}\psi) = 0. \quad (5.7)$$

Im Laufe einer Simulation wird durch alleiniges Lösen von (5.7) das tanh-Profil von ψ nicht erhalten bleiben. Die Normalkomponente von \mathbf{v} ist im Allgemeinen nicht konstant über die Dicke des Übergangsbereichs von ψ . Dadurch bewegen sich die Isoflächen von

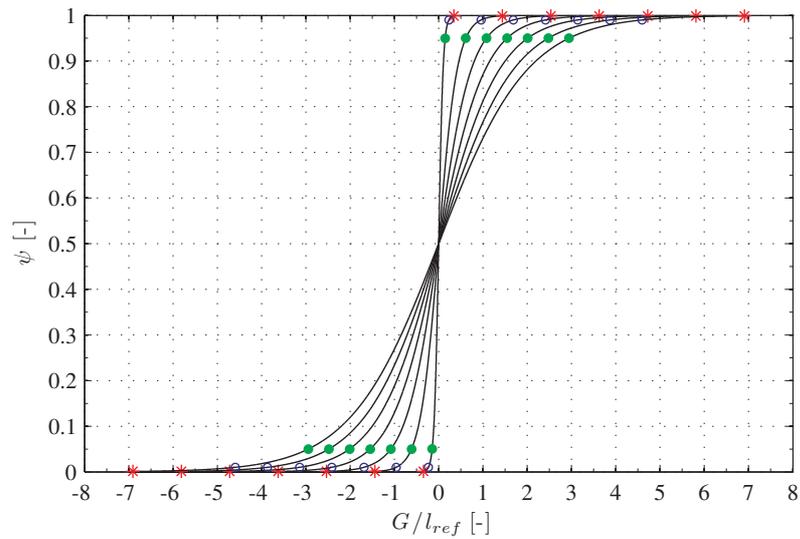


Abbildung 5.1: Übergangsbereich der Phasenfeld-Funktion ψ für $\epsilon/l_{ref} = 0,05 - 1,0$, $\psi_{lim} = 0,001$ (rote Kreuze), $\psi_{lim} = 0,01$ (blaue Kreise) und $\psi_{lim} = 0,05$ (grüne Punkte).

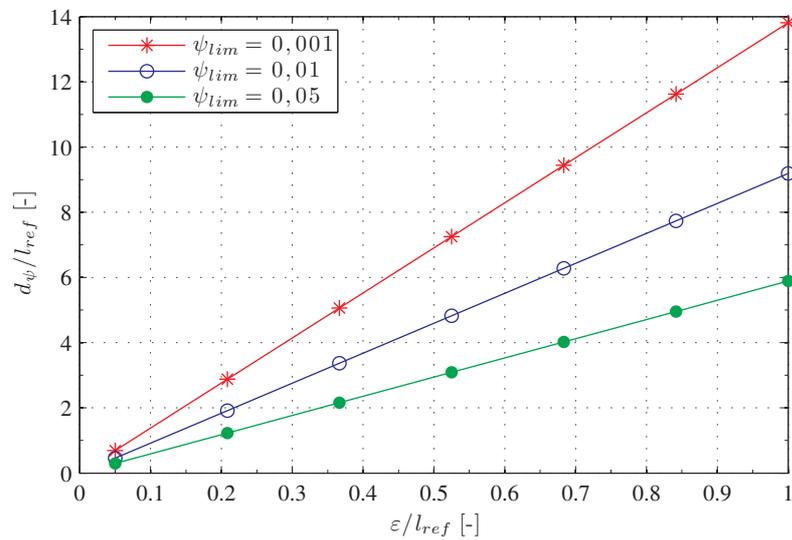


Abbildung 5.2: Skalierte Dicke d_{ψ}/l_{ref} des Übergangsbereichs von ψ als Funktion von ϵ/l_{ref} für verschiedene Werte ψ_{lim} .

ψ mit unterschiedlicher Geschwindigkeit in Normalenrichtung, was zu einer Verzerrung des tanh-Profiles führt. Zur Erhaltung der Dicke und Form des Profils (5.3) wird in [99] vorgeschlagen, folgende Gleichung in regelmäßigen Zeitabständen während einer Simulation zu lösen:

$$\frac{\partial \psi}{\partial \tau_P} + \nabla \cdot (\psi(1 - \psi)\mathbf{n}) = \varepsilon \Delta \psi . \quad (5.8)$$

Die Benutzung des Symbols τ_P für die Zeit weist darauf hin, dass (5.8) nicht in der realen Simulationszeit gelöst wird. Wenn eine Korrektur des Profils erforderlich ist, z.B. nachdem das ψ -Feld durch Lösen von (5.7) zum Zeitpunkt t^n bekannt ist, wird (5.8) bis zu einer festgesetzten Stationaritätsbedingung in der *Pseudo*-Zeit τ_P gelöst. Die stationäre Lösung von (5.8) ist ein ψ -Feld, dessen Verlauf in der durch den Normalenvektor $\mathbf{n} = \nabla \psi / |\nabla \psi|$ gegebenen Richtung, ein tanh-Profil exakt nach (5.3) besitzt. Dies lässt sich in einer eindimensionalen Formulierung leicht überprüfen. Die Funktion $\psi = 1/2 (1 + \tanh(G/(2\varepsilon)))$ ist nämlich eine Lösung der Gleichung

$$\frac{d(\psi(1 - \psi))}{dG} = \varepsilon \frac{d^2 \psi}{dG^2} . \quad (5.9)$$

In einer physikalischen Interpretation der Gleichung (5.8) wird das ψ -Feld durch einen diffusiven Fluss $-\varepsilon \nabla \psi$ transportiert und spürt einen Quellterm $-\nabla \cdot (\psi(1 - \psi)\mathbf{n})$. Im Bereich $\psi < 0,5$ ist der Quellterm negativ und für $\psi > 0,5$ ist er positiv. Der Quellterm allein würde somit eine Kompression des Übergangsbereichs von ψ bewirken. Dem entgegen wirkt der diffusive Fluss, der umso stärker ist, je höher der Gradient von ψ in Richtung von \mathbf{n} ist. Das Gleichgewicht beider Effekte liefert die stationäre Lösung mit dem tanh-Profil. Eine Kompression der Phasen-Feld-Funktion durch Einführung des kompressiv wirkenden Terms in der Transportgleichung (5.8) wird auch in Rusche [112] (2002) verwendet¹. Zusätzliche Untersuchungen und Entwicklungen zum Kompressionsverfahren werden von Olsson et al. in [100] weitergeführt.

5.1.2 Formulierung in dieser Arbeit

In der vorliegenden Arbeit wird eine Formulierung für die Phasen-Feld/Level-Set-Funktion verwendet, die für den Einbau in CFD-Software geeignet ist. Hierbei wird versucht die Implementierung des Flammenmodells durch eine geeignete Formulierung der zu lösenden Gleichungen mit einfachen Diskretisierungsverfahren umzusetzen, anstatt neue oder spezielle Diskretisierungsverfahren zu entwickeln. Ausgangspunkt für die Formulierung ist die kinematische Beziehung von durchströmten Isoflächen von ψ (2.52):

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \psi = s |\nabla \psi| . \quad (5.10)$$

In (5.10) wird die Brenngeschwindigkeit s modelliert und besitzt deshalb nicht den räumlichen Verlauf des Brenngeschwindigkeitsfelds einer realen vorgemischten Flamme. Das Profil von ψ wird somit im Laufe der Simulation vom Profil in (5.3) immer stärker abweichen. Um das tanh-Profil zu erhalten, wird das Konzept der Kompressionsgleichung (5.8) aus [99] und [100] verwendet. In der vorliegenden Arbeit wird die kinematische Beziehung (5.10) jedoch gleichzeitig mit der Kompressionsgleichung gelöst:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \psi = s |\nabla \psi| - \gamma \nabla \cdot (\psi(1 - \psi)\mathbf{n}) + \gamma \varepsilon \Delta \psi . \quad (5.11)$$

¹Der Ansatz wird in [112] als private Mitteilung von H. G. Weller referenziert.

Der Faktor γ in (5.11) ist ein Maß für den Kehrwert der Zeitskala der Relaxation eines ψ -Profils auf das tanh-Profil nach (5.3). Je höher sein Wert ist, umso schneller erfolgt die Relaxation auf das tanh-Profil. Die gleichzeitige Lösung der Kompression und des Transports von ψ in einer Gleichung verletzt streng genommen die kinematische Beziehung (5.10). Dieser Aspekt wird in dieser Arbeit noch behandelt und untersucht (siehe 7.3). Durch den vorhandenen Diffusionsterm kann (5.11) numerisch stabil mit Standarddiskretisierungsverfahren gelöst werden, da sich keine scharfen Knicke im ψ -Feld bilden können [117].

In der Implementierung der G -Gleichung (3.20) durch Schmidt und Klein (siehe 3.7.3) werden ebenfalls die Terme für die Bewegung der Isoflächen aufgrund der Strömung und der Verbrennung mit dem Reinitialisierungsterm in derselben Gleichung gelöst. Der Parameter ζ in (3.20) entspricht dem Faktor γ in der Formulierung (5.11). In Ganguli und Kenig [55] (2011) wird die Phasen-Feld/Level-Set-Formulierung zur Simulation von Gasblasen in einer Flüssigkeit verwendet, bei denen ein Massentransfer an der Grenzfläche zwischen gasförmiger und flüssiger Phase stattfindet. Die Behandlung des Übergangsbereichs von ψ wird dabei auch gleichzeitig mit dem Transport gelöst:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v}\psi) = \gamma \nabla \cdot \left(-\psi(1-\psi) \frac{\nabla \psi}{|\nabla \psi|} + \varepsilon \nabla \psi \right), \quad (5.12)$$

wobei nach [55] der Parameter γ den Wert der maximal zu erwartenden Strömungsgeschwindigkeit annehmen soll.

In (5.11) ist der Konvektionsterm in nicht-konservativer Form formuliert. In dieser Arbeit wird das Flammenmodell in OpenFOAM® eingebaut, der wie die meisten CFD-Codes die Finite-Volumen-Methode verwendet. Die Finite-Volumen-Diskretisierung besitzt die positive Eigenschaft, dass die Erhaltung von Größen in konservativer Formulierung, also deren Flüsse unter einem Divergenzoperator in den Erhaltungsgleichungen stehen, automatisch über eine Zelle (Kontrollvolumen) des Rechengebiets erfüllt ist. Bei konsistenter Behandlung der Flüsse an den Zellflächen zwischen benachbarten Zellen ist somit auch eine globale Erhaltung über das gesamte Rechengebiet automatisch erfüllt [53]. Aus diesem Grund ist es vorteilhaft eine konservative Formulierung für möglichst viele Terme in den zu diskretisierenden Gleichungen zu benutzen. Insbesondere bei der Verwendung relativ grober Netze mit großen Zellen ist die natürliche Erhaltungseigenschaft der Finite-Volumen-Methode von Vorteil, da sich mit gröber werdender Auflösung nur die Genauigkeit der Lösung verschlechtert, jedoch nicht ihre globale Erhaltung.

Der Kompressionsterm auf der rechten Seite von (5.11) besitzt bereits eine geeignete konservative Formulierung wenn $\psi(1-\psi)\mathbf{n}$ als Fluss interpretiert wird. Um den Konvektionsterm in eine konservative Formulierung zu überführen, wird (5.11) mit dem Dichtefeld ρ multipliziert und auf der linken Seite mit dem Produkt aus Kontinuitätsgleichung (2.9) und ψ erweitert. Unter Ausnutzung der Produktregel folgt daraus die Transportgleichung

$$\frac{\partial(\rho\psi)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\mathbf{v}\psi) = m|\nabla\psi| - \gamma\rho\nabla \cdot (\psi(1-\psi)\mathbf{n}) + \gamma\rho\varepsilon\Delta\psi, \quad (5.13)$$

welche in dieser Arbeit als Grundlage zur Implementierung verwendet wird. Eine konservative Behandlung des konvektiven Terms wird z.B. auch bei der Verwendung der G -Gleichung zur LES (*Large Eddy Simulation*) vorgemischter Verbrennung in [45] durchgeführt.

Eine alternative Formulierung der Phasen-Feld/Level-Set-Gleichung besteht darin, die Größe $m_Y = m \cdot Y$ zu verwenden. m_Y ist die Massenstromdichte der Spezies Y durch Isoflächen $\psi = \text{konst.}$ Der Wert von m_Y ist hinter der Reaktionszone im Rauchgasgebiet auf natürliche Weise gegeben: $m_Y = 0$. Das Feld m_Y würde in eine mit der Erhaltungsgleichung von Y erweiterte Phasen-Feld/Level-Set-Gleichung eingehen. Dieser Ansatz wird in der vorliegenden Arbeit jedoch nicht weiter verfolgt.

5.2 Formulierung der integralen Beziehung für die Massenstromdichte

5.2.1 Numerische Formulierung der δ -Funktion

In der Modellierung des Quellterms von Y wird die Funktion $\delta(x^1)$ verwendet. Eine mögliche Formulierung für die δ -Funktion ist $\delta(x^1) = \partial\psi/\partial x^1$, was mit der Definition (5.3) mit $G = x^1$ die Beziehung

$$\delta(x^1) = \frac{1}{4\varepsilon (\cosh(x^1/(2\varepsilon)))^2} \quad (5.14)$$

liefert, wofür die vorzeichenbehaftete Abstandsfunktion $x^1 = G$ als Argument benötigt wird. In einer Simulation ist jedoch aus der Lösung der Phasen-Feld/Level-Set-Gleichung nur das Feld ψ bekannt. Durch direkte Umkehrung der Beziehung (5.3) kann x^1 aus ψ im Übergangsbereich $0 < \psi < 1$ eindeutig berechnet werden:

$$x^1 = 2\varepsilon \operatorname{artanh}(2\psi - 1) . \quad (5.15)$$

Ein Nachteil der Formulierung (5.14) mit (5.15) besteht darin, dass sie nur gültig ist solange ψ exakt ein tanh-Profil besitzt.

Eine alternative Methode besteht darin, die δ -Funktion nicht über die theoretische Funktion der Normalableitung von ψ wie in (5.14) zu formulieren, sondern über die Beziehung

$$\delta(\psi) = |\nabla\psi| , \quad (5.16)$$

wobei $\nabla\psi$ numerisch im Simulationscode ermittelt wird. (5.16) liefert unabhängig vom Verlauf von ψ den korrekten integralen Wert von 1 in Normalenrichtung, solange ψ zwischen 0 und 1 variiert. Die Formulierung (5.16) ist ähnlich zu der Formulierung der Oberflächenspannung einer Grenzfläche durch Einführung einer *verschmierten* Oberflächenkraft nach Brackbill et al. [12] (1992). Numerische Experimente in [84] bestätigen die Wahl von (5.16) zur numerischen Beschreibung einer δ -Funktion.

5.2.2 Formulierung des Volumenelements \sqrt{g}

Das Volumenelement \sqrt{g} folgt aus der Transformation von kartesischen Koordinaten x, y, z in das bewegte, krummlinige Koordinatensystem mit den Koordinaten x^1, x^2, x^3 . In einer Simulation kann die x^1 -Koordinate über die Beziehung (5.15) aus ψ bestimmt werden. Um eine aufwendige Rekonstruktion der Felder x^2 und x^3 in jedem Zeitschritt der Simulation zu umgehen, wird hier eine vereinfachte Bestimmung von \sqrt{g} durchgeführt. Dazu wird die Koordinatenfläche x^1 lokal mittels einer Kugeloberfläche im dreidimensionalen Raum und mittels einer Zylinderfläche im zweidimensionalen Raum approximiert. Das Volumenelement wird somit folgendermaßen ausgedrückt:

$$\sqrt{g} = 1 - 2c^* x^1 , \quad (5.17)$$

mit der lokalen Krümmung $2c^* = -\nabla \cdot \mathbf{n}^*$ der Koordinatenfläche $x^1 = 0$. Im zweidimensionalen Fall ist (5.17) exakt. Im dreidimensionalen Raum stellt (5.17) eine Linearisierung um $x^1 = 0$ dar, für kleine Werte von x^1 bezogen auf den lokalen Krümmungsradius.

5.2.3 Formulierung des chemischen Integrals

Das in der integralen Beziehung (4.15) vorkommende Integral über die δ -Funktion wird mit der Formulierung (5.17) für \sqrt{g} folgendermaßen behandelt:

$$\begin{aligned} \int_{x^1}^{+\infty} \sqrt{g} \delta(\hat{x}^1) d\hat{x}^1 &= \int_{x^1}^{+\infty} (1 - 2c^* \hat{x}^1) \delta(\hat{x}^1) d\hat{x}^1 \\ &= \underbrace{\int_{x^1}^{+\infty} \delta(\hat{x}^1) d\hat{x}^1}_{I_1} + \underbrace{\int_{x^1}^{+\infty} (-2c^*) \hat{x}^1 \delta(\hat{x}^1) d\hat{x}^1}_{I_c} . \end{aligned} \quad (5.18)$$

Das Integral I_1 stellt für einen gegebenen Wert x^1 den *restlichen* Beitrag des Quellterms bis zum Ende einer als planar angenommenen Reaktionszone dar. Das zweite Integral I_c beschreibt die Korrektur von I_1 aufgrund der Krümmung der Reaktionszone. Der Term \sqrt{g} im Integral spielt eine ähnliche Rolle wie der Term σ/σ_b in der integralen Beziehung (3.13) von de Goeij und ten Thijs Boonkcamp. Für die numerische Berechnung von I_1 und I_c in einer Simulation wird angenommen, dass ψ den Tangenshyperbolicusverlauf nach (5.3) besitzt und die δ -Funktion demnach über die Beziehung (5.14) ausgedrückt werden kann. Es folgt hiermit (Berechnung mit der Software Wolfram Mathematica):

$$I_1 = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{x^1}{\varepsilon}\right)} , \quad (5.19)$$

woraus aufgrund der Eigenschaft [14]

$$\tanh(x) = \frac{\exp(x) - \exp(-x)}{\exp(x) + \exp(-x)} , \quad (5.20)$$

die einfache Beziehung

$$I_1 = 1 - \psi \quad (5.21)$$

resultiert. Für das Integral I_c folgt (Berechnung mit der Software Wolfram Mathematica):

$$I_c = 2c^* \left(x^1 - \frac{x^1}{1 + \exp\left(\frac{x^1}{\varepsilon}\right)} - \varepsilon \ln \left(1 + \exp\left(\frac{x^1}{\varepsilon}\right) \right) \right) , \quad (5.22)$$

woraus eindeutig erkennbar ist, dass I_c für eine planare Reaktionszone mit $c^* = 0$ verschwindet. In den Abbildungen 5.3 und 5.4 sind die Verläufe der chemischen Integrale über die skalierte Normalkoordinate G aufgetragen. Das Vorzeichen der Krümmung bestimmt auch das Vorzeichen des Beitrags I_c . Die gezeigten Verläufe sind bei einer relativ starken Krümmung der Reaktionszone berechnet, bei der der Krümmungsradius der Dicke der Reaktionszone entspricht. Selbst bei diesem hohen Krümmungswert ist der Beitrag von I_c klein im Vergleich zu I_1 . Bei einer negativ gekrümmten Reaktionszone ist das Integral $I_c > 0$. Ausgehend von einer Position in der Reaktionszone vergrößert

sich in Richtung des hinteren (verbrannten) Endes der Reaktionszone die Fläche, auf der der chemische Quellterm wirksam ist. Bei einer positiv gekrümmten Reaktionszone ist dieser Effekt umgekehrt.

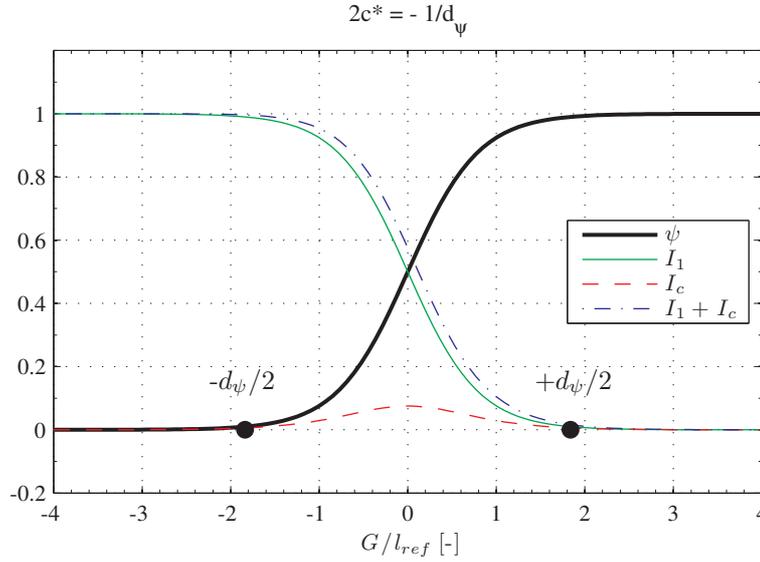


Abbildung 5.3: Illustration der Beiträge im chemischen Integral bei einer negativen mittleren Krümmung. Der Krümmungsradius entspricht der Dicke des Übergangsbereichs der Phasen-Feld/Level-Set-Funktion.

5.2.4 Formulierung des normalen Diffusionsflusses von Y

Der diffusive Fluss von Y wird in dieser Arbeit mit Hilfe eines Fickschen Ansatzes wie in (2.20) modelliert. Dementsprechend schreibt sich der Normaldiffusionsterm (4.15b) in der integralen Beziehung der Massenstromdichte:

$$-\sqrt{g}\rho V_Y^1 Y = \sqrt{g} \frac{1}{\text{Le}_Y} \left(\frac{\lambda}{c_p} \right) \frac{\partial Y}{\partial x^1}. \quad (5.23)$$

5.2.5 Formulierung des Integrals über die Zeitableitung

Hier wird die Formulierung des Zeitableitungsterms (4.15c) aus der integralen Beziehung (4.15) für die Isofläche $x^1 = 0$ dargestellt. Eine für die Implementierung des Modells geeignete Formulierung für allgemeine Positionen x^1 wird in 5.6.3 vorgestellt. Der Zeitableitungsterm kann durch Anwendung der Produktregel folgendermaßen aufgeteilt werden:

$$\int_{x^1=0}^{+\infty} \frac{\partial(\sqrt{g}\rho Y)}{\partial \tau} d\hat{x}^1 = \int_{x^1=0}^{+\infty} \sqrt{g} \frac{\partial(\rho Y)}{\partial \tau} d\hat{x}^1 + \int_{x^1=0}^{+\infty} \rho Y \frac{\partial \sqrt{g}}{\partial \tau} d\hat{x}^1. \quad (5.24)$$

Die partielle Ableitung $\partial(\rho Y)/\partial \tau$ im ersten Integral auf der rechten Seite von (5.24) wird vernachlässigt. Dies entspricht der physikalischen Vorstellung, dass turbulente Wirbel im Regime der dünnen Reaktionszonen nicht in die Reaktionszone eindringen können [106]. Somit werden die Profile in der Reaktionszone im Gegensatz zu der Vorheizzone nur sehr

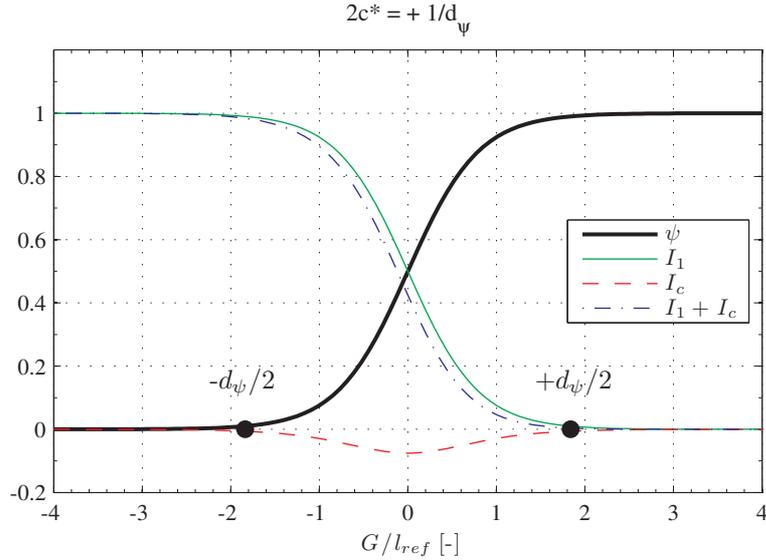


Abbildung 5.4: Illustration der Beiträge im chemischen Integral bei einer positiven mittleren Krümmung. Der Krümmungsradius entspricht der Dicke des Übergangsbereichs der Phasen-Feld/Level-Set-Funktion.

schwach gestört. Die Zeitableitung $\partial\sqrt{g}/\partial\tau$ im zweiten Integral auf der rechten Seite von (5.24) kann als Produkt von \sqrt{g} mit der Streckung χ von x^1 -Koordinatenflächen aufgefasst werden [30] ($\chi = 1/\sqrt{g} \partial\sqrt{g}/\partial\tau$). Das Integral wird dann folgendermaßen approximiert:

$$\int_{x^1=0}^{+\infty} \rho Y \sqrt{g} \chi \, d\hat{x}^1 = \frac{1}{2} \rho^* Y^* \sqrt{g}^* \chi^* S_{\text{corr}} \frac{l_\delta}{2}, \quad (5.25)$$

mit $\sqrt{g}^* = 1$ (siehe (5.17)). Dabei wird angenommen, dass der Integrand $\rho Y \sqrt{g} \chi$ einen Verlauf über x^1 mit konstanter Steigung besitzt (siehe Abb. 5.5). Das Integral ist die Fläche eines Dreiecks, mit einer Höhe gleich dem Wert des Integranden an der Stelle $x^1 = 0$ und einer Basis, die der räumlichen Ausdehnung $l_\delta/2$ der Reaktionszone von der Stelle $x^1 = 0$ bis zum Ende der Reaktionszone entspricht. Der Faktor S_{corr} wird eingeführt um das Integral unter der Dreiecksfläche zu korrigieren und stellt das Verhältnis zwischen dem Integral der realen Kurve zu dem Integral des angenäherten (linearen) Verlaufs dar. In der Anwendung des Modells in Simulationen wird ein konstanter Wert von 0,5 für den Korrekturfaktor S_{corr} verwendet. Die Wahl dieses Werts wird durch die Analyse von DNS-Daten in 6.1 bestätigt. Eine ähnliche Vereinfachungsstrategie, bei der lineare räumliche Profile innerhalb der Flammenstruktur angenommen werden, ist in der integralen Analyse von Chung und Law [28] zu finden. Bei kleinen Streckungsraten χ kann davon ausgegangen werden, dass das Feld χ näherungsweise konstant in Normalenrichtung der Flammenstruktur ist [65].

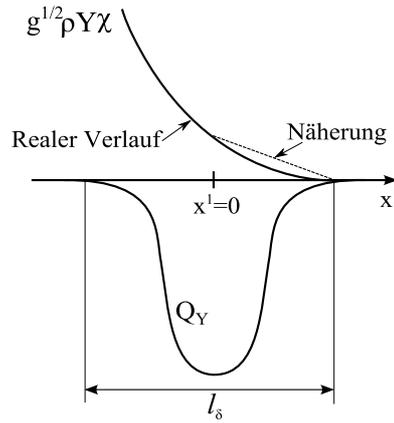


Abbildung 5.5: Darstellung der vereinfachten Beschreibung des Integranden in (5.25).

Aus der Beziehung (4.16) ist zu erkennen, dass für einen gegebenen Parameter I_Y sowie für gegebene Felder von Y und \sqrt{g} , die Stromdichte von Y (linke Seite von (4.16)) mit dem Wert des Integrals (5.24) und somit, bei der hier getroffenen Annahme für Flammen im Regime der dünnen Reaktionszonen, mit dem Integral (5.25) wächst. Bei einem positiven Streckungswert vergrößert sich die Fläche von x^1 -Koordinatenflächen auf denen Y abgebaut wird. Dadurch kann bei einer positiven Streckung und für einen gegebenen integralen Verbrauch I_Y eine höhere Stromdichte von Y durch x^1 -Koordinatenflächen innerhalb der Reaktionszone transportiert werden. Dieser Mechanismus stellt einen rein geometrischen Effekt von Flammenstreckung dar. Er entspricht dem zweiten Mechanismus in der Theorie von Echekki [47] (siehe 3.4). Zusätzlich dazu bewirkt die Streckung bei Flammen mit Lewis-Zahlen verschieden von 1 eine Variation der Enthalpie in der Reaktionszone, wodurch sich der integrale Verbrauch I_Y ändert [29]. Dieser zweite Streckungseffekt wirkt sich auf die Chemie innerhalb der Reaktionszone aus und entspricht dem ersten Mechanismus von Echekki [47]. Bei den hier vorgestellten Simulationen von Methan/Luft-Flammen wird dieser chemische Streckungseffekt vernachlässigt. Erst bei der Erweiterung des Modells in Kapitel 8 zur Simulation thermisch-diffusiv instabiler Wasserstoffflammen wird dieser Effekt durch eine Parametrisierung von I_Y berücksichtigt.

5.2.6 Behandlung des Felds der Massenstromdichte m

Einleitung und Hintergrund

Im Laufe der Entwicklung und Implementierung des integralen Reaktionszonenmodells in dieser Arbeit hat sich herausgestellt, dass das aus der integralen Beziehung (4.15) berechnete Feld der Massenstromdichte nicht direkt in der Phasen-Feld/Level-Set-Gleichung verwendet werden kann. Der Grund hierfür liegt im Nenner Y in der Beziehung (4.15), der am hinteren Ende der Reaktionszone beim Rauchgasgebiet Werte nahe 0 annimmt. Die Beziehung (4.15) verliert dort ihre physikalische Gültigkeit. Es gibt keine Bedingung mehr an die Kinematik der x^1 -Koordinatenflächen, da kein Brennstoff Y mehr vorhanden ist. In einer Simulation mit einer begrenzten räumlichen Auflösung der Reaktionszone liefert die Beziehung (4.15) nur in der vorderen Hälfte des Übergangsbereichs von ψ , dort wo Y noch groß genug ist, einen verwertbaren Wert für die Massenstromdichte m . Im hinteren Bereich in dem $Y \approx 0$ ist und auch, je nach

Auflösung und Krümmung der Reaktionszone, negativ werden kann, muss somit eine künstliche Erweiterung von m durchgeführt werden. Ein natürlicher Ansatz für das dort unbekannte m -Feld ist ein konstanter Verlauf in Normalenrichtung zur Reaktionszone. Bei einer ungestreckten und planaren Flamme entspricht ein konstanter Wert von m dem physikalischen exakten Verlauf [30]. Der konstante Wert von m im hinteren Teil der Reaktionszone sollte dabei dem Wert im vorderen Teil entsprechen.

Die Erweiterung des m -Felds in Normalenrichtung ins hintere Ende der Reaktionszone ist analog zu der Erweiterung des Geschwindigkeitsfelds F (*building extension velocity fields*) [117] einer Oberfläche $G = 0$ im Rahmen der klassischen Level-Set-Gleichung

$$\frac{\partial G}{\partial t} + F|\nabla G| = 0 , \quad (5.26)$$

wenn die Geschwindigkeit F nur auf der Oberfläche $G = 0$ physikalisch definiert ist. Zum Lösen der Level-Set-Gleichung (5.26) muss die Oberflächengeschwindigkeit auf die benachbarten Gitterpunkte oder Zellen übertragen werden. Dazu muss Information ausgehend von $G = 0$ in Normalenrichtung transportiert werden (*extrapolation in the normal direction* [101]). Das erweiterte Geschwindigkeitsfeld F_{ext} soll auf der Oberfläche $G = 0$ dem Wert der dort definierten Ausbreitungsgeschwindigkeit entsprechen und möglichst den Charakter einer vorzeichenbehafteten Abstandsfunktion des Level-Set-Felds bei der Lösung der Level-Set-Gleichung beibehalten [1]. In dieser Arbeit wird die Bezeichnung ext an eine Größe angehängt, die in Normalenrichtung erweitert wird (für *extended*). Ein Geschwindigkeitsfeld F_{ext} , das die Abstandsfunktion beibehält, erfüllt die Bedingung [1], [26], [118]:

$$\nabla F_{\text{ext}} \cdot \nabla G = 0 . \quad (5.27)$$

Eine Methode um Information normal zur modellierten Oberfläche zu transportieren besteht darin, nach einem bestimmten Algorithmus Information ausgehend von den Werten auf der Oberfläche auf benachbarte Zellen oder Gitterpunkte zu übertragen. Ein solches Verfahren ist die *fast marching method* [117], [101], welche in der Regel zur Reinitialisierung einer Level-Set-Funktion auf eine Abstandsfunktion eingesetzt wird. Die *fast marching method* kann jedoch auch zur Erweiterung eines Geschwindigkeitsfelds und somit zum Transport von Information in Normalenrichtung verwendet werden [1], [26]. Der Ansatz besteht in der Lösung einer stationären Form der Level-Set-Gleichung [117]

$$|\nabla \Psi| F = 1 , \quad (5.28)$$

für das Feld Ψ , mit der normalen Ausbreitungsgeschwindigkeit F . Wenn F nur eine Funktion des Ortes ist, wird eine Gleichung vom Typ (5.28) als Eikonal-Gleichung bezeichnet [117]. Mit der Bedingung $\Psi = 0$ auf $G = 0$ kann für jede Zelle oder für jeden Gitterpunkt der aus (5.28) resultierende Wert des Ψ -Feldes als die Ankunftszeit der Oberfläche $G = 0$ interpretiert werden, die sich mit der Geschwindigkeit F bewegt. Für die spezielle Wahl $F = 1$ entspricht der Zahlenwert dieser Ankunftszeit dem Abstand zur Anfangsposition von $G = 0$. Die Erweiterung eines Geschwindigkeitsfelds mittels der *fast marching method* und der Lösung einer Eikonal-Gleichung wird in [111] zur Simulation vorgemischter Flammen als gasdynamische Diskontinuität angewandt.

Eine Maßnahme zur Reduzierung des numerischen Aufwands bei der normalen Erweiterung eines Felds besteht in der Beschränkung der numerischen Operationen auf ein schmales Band in der Umgebung der Oberfläche (*narrow band method*) [2], [117]. Die

Umsetzung der *fast marching method* und der *narrow band method* bedarf einer speziellen Implementierung des verwendeten Algorithmus zur Übertragung von Information und zur Verwaltung der geometrischen Information des schmalen Bands.

Eine weitere Möglichkeit zur Erweiterung des m -Felds in Normalenrichtung ins hintere Ende der Reaktionszone besteht in der Lösung der Transportgleichung (angelehnt an die Transportgleichung in [101])

$$\frac{\partial m}{\partial \tau_S} + H(\psi - \psi^0) \mathbf{n} \cdot \nabla m = 0, \quad (5.29)$$

in der Pseudozeit τ_S zwischen zwei Zeitschritten. Die Heaviside-Funktion $H(\psi - \psi^0)$ in (5.29) schaltet das künstliche Geschwindigkeitsfeld \mathbf{n} erst ab dem Wert ψ^0 an. Die Werte des Felds m werden somit in Normalenrichtung von der Isofläche $\psi = \psi^0$ aus konvektiv mit \mathbf{n} transportiert. Das Lösen einer hyperbolischen Gleichung zum Transport von Information mit Hilfe des Normalenvektorfeldes wie in (5.29) wurde auch in [25] vorgeschlagen. Ein ähnlicher Ansatz zu (5.29) wird auch in der Dissertation von Terhoeven [127] zur Aufprägung der Flammengeschwindigkeit einer modellierten Flammenfront $G = 0$ auf benachbarte Rechenzellen verwendet. Diese Prozedur wird in [127] als *Sweeping*-Schritt bezeichnet. Dabei erfolgt der Transport im Gegensatz zu (5.29) in beide Richtungen normal zur Flammenfront. Ein zusätzlicher Diffusionsterm sorgt dabei für eine Glättung der Lösung und eine bessere Konditionierung der aus der Diskretisierung resultierenden Gleichungsmatrix.

Die Erweiterung der absoluten Ausbreitungsgeschwindigkeit F ist aus kinematischer Sicht universeller als die Erweiterung des Massenstromdichtefelds. Die Massenstromdichte ist nur für den speziellen Fall einer planaren, ungestreckten und sich stationär ausbreitenden Flammenfront (ohne zeitliche Änderung der Flammendicke) in Normalenrichtung konstant [30].

Erweiterung der absoluten Ausbreitungsgeschwindigkeit

In dieser Arbeit wird das Geschwindigkeitsfeld F vom Beginn des Übergangsbereichs bei $\psi \approx 0$ aus in den hinteren Bereich erweitert. Dabei stellt $F = \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}$ die Normalkomponente der absoluten Ausbreitungsgeschwindigkeit \mathbf{u} der Isoflächen von ψ dar. Mit der Definition der Ausbreitungsgeschwindigkeit $\mathbf{u} = \mathbf{v} - s\mathbf{n}$ als überlagerte Bewegung des advektiven Transports durch das Strömungsfeld \mathbf{v} und des Brennverhaltens relativ zur Strömung mit der Brenngeschwindigkeit s , resultiert wie in der klassischen Level-Set-Formulierung (5.26):

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} + F|\nabla \psi| = 0. \quad (5.30)$$

Die Erweiterung des Werts von F am Anfang des Transitionsbereichs von ψ in den hinteren Bereich liefert ein Geschwindigkeitsfeld F_{ext} , das sich näherungsweise nur in Querrichtung zu Isoflächen von ψ ändert und somit die Bedingung (5.27) erfüllt. In der Implementierung in dieser Arbeit ist ψ keine Abstandsfunktion, sondern über (5.3) mit der Abstandsfunktion G verknüpft. Ein in Normalenrichtung konstantes Geschwindigkeitsfeld F_{ext} bewirkt, dass sich die Isoflächen von ψ nicht relativ zueinander bewegen und das tanh-Profil von ψ in Normalenrichtung erhalten bleibt.

In der hier vorgestellten Implementierung wird in einer Simulation zunächst das Geschwindigkeitsfeld F aus dem Massenstromdichtefeld m berechnet, das die integrale

Beziehung der Reaktionszone liefert (Skalarprodukt von (2.50) mit $\mathbf{n} = \nabla\psi/|\nabla\psi|$):

$$F = \mathbf{v} \cdot \left(\frac{\nabla\psi}{|\nabla\psi|} \right) - \frac{m}{\rho}. \quad (5.31)$$

Für die Bewegung des ψ -Felds im nächsten Zeitschritt muss aus F ein neues Feld F_{ext} ermittelt werden. Dieses Feld soll für den Bereich $0 < \psi < \psi^0$ gleich dem F -Feld sein und für den hinteren Bereich $\psi^0 < \psi < 1$ soll F_{ext} der Verlängerung des F -Felds in Normalenrichtung, ausgehend von der Isofläche $\psi = \psi^0$ mit dem Wert $F_{\text{ext}} = F(\psi^0)$ entsprechen. Dazu wird folgende Transportgleichung gelöst:

$$\frac{\partial F_{\text{ext}}}{\partial t} + \mathbf{v}_{\text{ext}} \cdot \nabla F_{\text{ext}} = \nabla \cdot (\underline{\underline{D}}^m (1 - Q_m) \nabla F_{\text{ext}}) + Q_m \tau_m (F - F_{\text{ext}}), \quad (5.32)$$

mit

$$\mathbf{v}_{\text{ext}} = (1 - Q_m) \frac{\nabla\psi}{|\nabla\psi|} \frac{d_\psi}{\Delta t} \quad (5.33)$$

und

$$\tau_m = \frac{1}{\Delta t}. \quad (5.34)$$

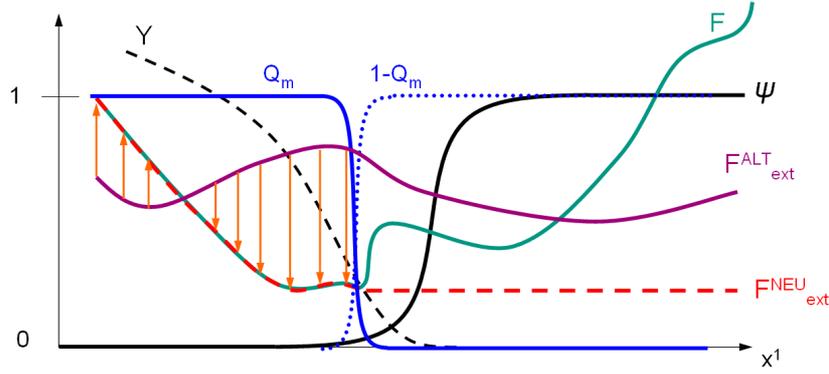
Das Geschwindigkeitsfeld \mathbf{v}_{ext} transportiert den Wert von F innerhalb der Zeit Δt eines Zeitschritts über eine Distanz von d_ψ in Richtung von $\nabla\psi/|\nabla\psi|$. Das Quelltermprofil Q_m wird als eine skalare Funktion formuliert, die Werte zwischen 0 und 1 annehmen kann. In dem Bereich $0 < \psi < \psi^0$ in dem das m -Feld und somit das entsprechende F -Feld aus der integralen Beziehung (4.15) verwendet wird, soll $Q_m = 1$ gelten. Im restlichen Bereich $\psi^0 < \psi < 1$ soll $Q_m = 0$ sein. In der numerischen Implementierung wird ein kontinuierlicher Übergang von Q_m gewählt. Eine mögliche Formulierung für Q_m ist die Funktion

$$Q_m = (1 - \psi)^n, \quad n \geq 2, \quad (5.35)$$

welche mit zunehmendem Abstand vom Anfang des Übergangsbereichs schneller auf 0 zugeht als die Funktion $1 - \psi$. Der Term $1 - Q_m$ wirkt als Schalter der die Konvektion und Diffusion in (5.32) erst im hinteren Teil des Übergangsbereichs von ψ anschaltet. Das Lösen von (5.32) bewirkt durch den zweiten Term auf der rechten Seite eine Relaxation des Feldes F_{ext} auf das Feld F mit der Zeitkonstante τ_m . Damit das Feld F_{ext} innerhalb der Zeitschrittweite Δt der Simulation vollständig bis an den Wert des F -Felds relaxiert, wird für die Zeitkonstante $\tau_m = 1/\Delta t$ gewählt. Der Faktor τ_m spielt eine ähnliche Rolle wie der Parameter ζ im Reinitialisierungsterm der G -Gleichung (3.20) im Ansatz von Schmidt und Klein (siehe 3.7.3). Der Diffusionsterm in (5.32) sorgt für eine zusätzliche Glättung der Lösung F_{ext} (ähnlich wie in [127]) im hinteren Bereich $\psi^0 < \psi < 1$. Das Prinzip der Erweiterung von F ist in Abb. 5.6 anhand der räumlichen Verläufe der verwendeten Felder dargestellt. Aus dem Feld $F_{\text{ext}}^{\text{ALT}}$ resultiert durch Lösen der Transportgleichung (5.32) das Feld $F_{\text{ext}}^{\text{NEU}}$. Für alle Felder die mit einer Gleichung vom Typ (5.32) in Normalenrichtung erweitert werden (auch Krümmungsfeld und Parameter von I_Y , siehe 5.2.7), wird bei der numerischen Formulierung des Modells eine verschwindende normale Ableitung an den Rändern des Rechengebiets gefordert.

Der Diffusionsterm in (5.32) beinhaltet eine Diffusionsmatrix $\underline{\underline{D}}^m$, die folgendermaßen formuliert wird:

$$\underline{\underline{D}}^m = D^m \underline{\underline{D}}^n, \quad (5.36)$$


 Abbildung 5.6: Veranschaulichung des Prinzips der normalen Erweiterung von F .

wobei der Skalar D^m die *Stärke* des Diffusionsterms bestimmt und die Matrix $\underline{\underline{D}}^{\mathbf{n}}$ die Richtung des diffusiven Transports. Damit durch die Diffusion kein Ausgleich von F_{ext} entlang der Reaktionszone stattfindet (in tangentialer Richtung), wird $\underline{\underline{D}}^{\mathbf{n}}$ so formuliert, dass diffusiver Transport von F_{ext} nur in Normalenrichtung $\mathbf{n} = \nabla\psi/|\nabla\psi|$ erfolgt. Dazu müssen die Einträge in der Diffusionsmatrix $\underline{\underline{D}}^{\mathbf{n}}$ geeignet gewählt werden. Hierzu wird folgende Überlegung für einen zweidimensionalen Fall in kartesischen Koordinaten durchgeführt.

Betrachtet wird der Diffusionsterm

$$\nabla \cdot \left(\begin{pmatrix} D_{11}^{\mathbf{n}} & D_{12}^{\mathbf{n}} \\ D_{21}^{\mathbf{n}} & D_{22}^{\mathbf{n}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F_{\text{ext},x} \\ F_{\text{ext},y} \end{pmatrix} \right) = \nabla \cdot \begin{pmatrix} D_{11}^{\mathbf{n}} F_{\text{ext},x} + D_{12}^{\mathbf{n}} F_{\text{ext},y} \\ D_{21}^{\mathbf{n}} F_{\text{ext},x} + D_{22}^{\mathbf{n}} F_{\text{ext},y} \end{pmatrix} \quad (5.37)$$

mit ausgeschriebenen Komponenten der Diffusionsmatrix und des Gradienten von F_{ext} . Damit diffusiver Transport nur in Normalenrichtung \mathbf{n} erfolgt, wird der Gradient von F_{ext} innerhalb der Divergenz auf die Normalenrichtung \mathbf{n} projiziert:

$$\begin{aligned} \nabla \cdot ((\nabla F_{\text{ext}} \cdot \mathbf{n}) \mathbf{n}) &= \nabla \cdot \left((F_{\text{ext},x} n_x + F_{\text{ext},y} n_y) \begin{pmatrix} n_x \\ n_y \end{pmatrix} \right) \\ &= \nabla \cdot \begin{pmatrix} n_x n_x F_{\text{ext},x} + n_x n_y F_{\text{ext},y} \\ n_x n_y F_{\text{ext},x} + n_y n_y F_{\text{ext},y} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (5.38)$$

Die Komponenten der Diffusionsmatrix können aus einem Vergleich zwischen (5.37) und (5.38) abgelesen werden:

$$\begin{pmatrix} D_{11}^{\mathbf{n}} & D_{12}^{\mathbf{n}} \\ D_{21}^{\mathbf{n}} & D_{22}^{\mathbf{n}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} n_x n_x & n_x n_y \\ n_x n_y & n_y n_y \end{pmatrix}. \quad (5.39)$$

Die rechte Seite von (5.39) ist in Komponentenform geschrieben und entspricht dem dyadischen Produkt von $\mathbf{n} = (n_x \ n_y)^T$ mit sich selbst. Die Diffusionsmatrix $\underline{\underline{D}}^{\mathbf{n}}$ wird somit folgendermaßen implementiert:

$$\underline{\underline{D}}^{\mathbf{n}} = \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}. \quad (5.40)$$

Aus dem erweiterten Geschwindigkeitsfeld F_{ext} kann nach (5.31) ein korrigiertes Massenstromdichtefeld m_ψ berechnet werden, das in die Phasen-Feld/Level-Set-Gleichung eingeht:

$$m_\psi = \rho \mathbf{v} \cdot \left(\frac{\nabla\psi}{|\nabla\psi|} \right) - \rho F_{\text{ext}}. \quad (5.41)$$

Mit diesem Feld m_ψ bewegen sich die Isoflächen von ψ nahezu nicht mehr relativ zueinander.

5.2.7 Normale Erweiterung des Krümmungsfelds und der Parameter von I_Y

Zur Berechnung des Integrals I_c nach (5.22) muss der Krümmungswert c^* der Isofläche $G = 0$ bzw. $\psi = 0,5$ in den Zellen innerhalb des Übergangsbereichs von ψ bekannt sein. Bei einer Parametrisierung des integralen Verbrauchs I_Y (in Kapitel 8) müssen die Werte des Arguments der Parametrisierung auf der Isofläche $\psi = 0,5$ (z.B. die Temperatur) ebenfalls in benachbarten Zellen im Übergangsbereich bekannt sein. In diesem Abschnitt wird die Erweiterung des Krümmungsfelds beschrieben. Der normale Transport des Arguments der Parametrisierung von I_Y erfolgt in analoger Weise.

Zur Erweiterung des Krümmungsfelds wird eine Gleichung gelöst, die analog zu (5.32) aufgebaut ist:

$$\frac{\partial c_{\text{ext}}}{\partial t} = \nabla \cdot (\underline{D}^c (1 - Q_c) \nabla c_{\text{ext}}) + Q_c \tau_c (c - c_{\text{ext}}) , \quad (5.42)$$

mit $\tau_c = 1/\Delta t$. Der Unterschied zu der Erweiterung von F liegt darin, dass in diesem Fall ein Feld ausgehend von der Fläche $\psi = 0,5$ normal in beide Richtungen transportiert werden muss. Dazu muss das Quelltermprofil Q_c eine Form besitzen, die in der Umgebung von $\psi = 0,5$ den Wert 1 besitzt und mit zunehmendem Abstand auf 0 abklingt. Eine mögliche Formulierung hierfür ist:

$$Q_c = 4^n \psi^n (1 - \psi)^n , n \geq 1 . \quad (5.43)$$

Der Transport von c erfolgt nur durch Diffusion in beide Richtung zur Fläche $\psi = 0,5$ und nicht mehr wie bei F hauptsächlich durch Konvektion mit der Geschwindigkeit \mathbf{v}_{ext} . Die Distanz, über die das Krümmungsfeld innerhalb eines Zeitschritts Δt transportiert werden muss, entspricht mindestens der halben Dicke d_ψ des Übergangsbereichs. Die Stärke D^c der Diffusionsmatrix $\underline{D}^c = D^c \underline{D}^n$ muss hierfür geeignet gewählt werden. Es muss somit untersucht werden, wie die Distanz, über die Information diffusiv transportiert wird, vom Diffusionskoeffizienten und von der Zeit abhängt.

Diese Untersuchung kann anhand eines instationären eindimensionalen Diffusionsproblems (mit konstantem Diffusionskoeffizienten D) auf dem Gebiet $0 \leq x < +\infty$ durchgeführt werden [113]:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} . \quad (5.44)$$

Für $t < t^0$ gilt $\Psi = 0$. Zum Zeitpunkt $t = t^0$ wird am Rand $x = 0$ die Randbedingung auf $\Psi = \Psi_R$ gesetzt. In [113] wird (5.44) zur Beschreibung der instationären Geschwindigkeitsverteilung an einer plötzlich in Gang gesetzten ebenen Wand verwendet (erstes Stokessches Problem). Dabei steht Ψ für die Strömungsgeschwindigkeit parallel zur Wand, der Diffusionskoeffizient D für die kinematische Zähigkeit ν des Fluids und y für die räumliche Koordinate normal zur Wand. Die getroffenen Aussagen gelten jedoch für jedes physikalische Problem, das mathematisch durch eine instationäre Diffusionsgleichung vom Typ (5.44) beschrieben werden kann (wie z.B. das 2. Ficksche Gesetz oder das 2. Fouriersche Gesetz [137]). Die partielle Differentialgleichung (5.44) kann mit der Variablentransformation

$$\eta = \frac{x}{2\sqrt{Dt}} \quad (5.45)$$

in die gewöhnliche Differentialgleichung für $\Psi(\eta)$:

$$\frac{d^2\Psi}{d\eta^2} + 2\eta \frac{d\Psi}{d\eta} = 0, \quad (5.46)$$

mit den Randbedingungen $\Psi(0) = \Psi_R$ und $\Psi(+\infty) = 0$ transformiert werden. Die Lösung von (5.46) lautet [113]:

$$\frac{\Psi}{\Psi_R} = \operatorname{erfc}(\eta), \quad (5.47)$$

mit der komplementären Fehlerfunktion (siehe Abb. 5.7) $\operatorname{erfc}(\eta) = 1 - \operatorname{erf}(\eta)$ und der Fehlerfunktion $\operatorname{erf}(\eta) = 2/\sqrt{\pi} \int_0^\eta \exp(-\hat{\eta}^2) d\hat{\eta}$. Die Eindringtiefe der Information der Randbedingung kann als die Distanz vom Rand interpretiert werden, in der ein gegebener Zustand $\Psi = \Psi^0$ nach einer bestimmten Zeit vorliegt. Ein Beobachter sieht nach (5.46) einen konstanten Zustand $\Psi = \Psi^0$, wenn die Variable η konstant gehalten wird (bei einem festen Wert der unabhängigen Variable besitzt die Lösung einer gewöhnlichen Differentialgleichung einen festen Wert). Für ein konstantes η folgt somit aus (5.45), dass die Position x des Beobachters proportional zu \sqrt{Dt} sein muss. Die *diffusive Eindringtiefe* wächst somit proportional zu \sqrt{Dt} . Je nachdem welcher Wert Ψ^0 verfolgt wird, variiert die genaue Angabe der Eindringtiefe.

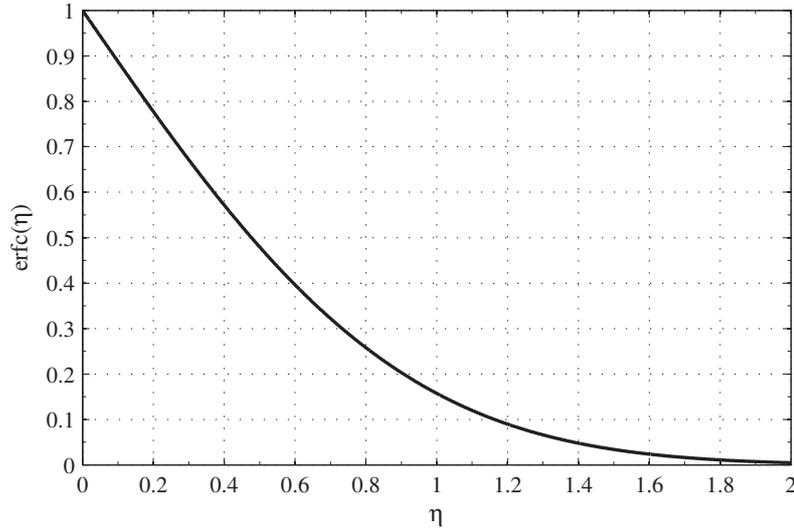


Abbildung 5.7: Verlauf der komplementären Fehlerfunktion.

Für den Wert $\Psi^0/\Psi_R = 0,1$ resultiert aus (5.47) ein Wert $\eta \approx 1,2$ (siehe Abb. 5.7) und aus (5.45) somit eine Eindringtiefe

$$x_{0,1} \approx 2,4 \sqrt{Dt} \approx \sqrt{5,76 Dt}. \quad (5.48)$$

Der Zustand $\Psi^0/\Psi_R = 0,9$ dringt wesentlich langsamer in das Gebiet ein:

$$x_{0,9} \approx 0,2 \sqrt{Dt} \approx \sqrt{0,04 Dt}. \quad (5.49)$$

In [137] wird die Eindringtiefe nach der Einsteinschen Gleichung mit $\sqrt{2Dt}$ angegeben, was einem Zustand $\Psi^0/\Psi_R \approx 0,3$ entspricht.

In dieser Arbeit resultiert aus der Formulierung des Quellterms (5.43) eine Distanz von etwa $d_\psi/2$, über die das Skalarfeld c innerhalb der zur Verfügung stehenden Zeit Δt transportiert werden muss. Es wird hier in der Implementierung ein Diffusionskoeffizient

$$D^c = \frac{(d_\psi/1,5)^2}{\Delta t} \quad (5.50)$$

gewählt, der nach (5.45) mit $x = d_\psi/2$ und $t = \Delta t$ einem Wert $\eta = 0,375$ entspricht und somit einem Zustand $\Psi^0/\Psi_R \approx 0,6$. Übertragen auf das Feld c_{ext} bei der Lösung der Gleichung (5.42) entspricht der durch die Randbedingung aufgeprägte Wert Ψ_R näherungsweise dem Unterschied $c - c_{\text{ext}}$ an der Stelle $\psi = 0,5$.

Eine direkte Übertragung des Krümmungswerts c^* auf benachbarte Zellen in Normalenrichtung ist prinzipiell auch ohne das Lösen einer Transportgleichung möglich. Dazu muss angenommen werden, dass die Geometrie der x^1 -Koordinatenflächen zwischen $x^1 = -d_\psi/2$ und $x^1 = +d_\psi/2$ lokal durch Kugelflächen mit gleichem Krümmungsmittelpunkt approximiert werden kann. Für diese Kugelflächen ist die normale Variation der Krümmung $2c = 2/r$ eindeutig als Funktion des Krümmungsradius r gegeben. Der Krümmungsradius der Kugelfläche $x^1 = 0$ sei r^* und der einer benachbarten allgemeinen kugelförmigen Koordinatenfläche von x^1 sei r . Der Krümmungsradius besitzt ein negatives Vorzeichen, wenn der Krümmungsmittelpunkt auf der Seite mit $x^1 < 0$ liegt, und ein positives Vorzeichen wenn sich der Krümmungsmittelpunkt auf der Seite mit $x^1 > 0$ befindet. Es gilt dann folgende geometrische Beziehung

$$r = r^* - x^1, \quad (5.51)$$

die mit $2c = 2/r$ und $2c^* = 2/r^*$ folgendermaßen umgeschrieben werden kann:

$$c^* = \frac{c}{1 + cx^1}. \quad (5.52)$$

Mit der Beziehung (5.52) kann aus dem lokalen Wert c , der in einer Zelle mit dem lokalen Vektor \mathbf{n} nach (2.54) berechnet wird, der Wert c^* der Koordinatenfläche $x^1 = 0$ rekonstruiert werden.

5.3 Die CFD-Software OpenFOAM®

OpenFOAM® (*Open Source Field Operation and Manipulation*) ist eine Bibliothek von C++ Klassen, die es erlaubt kontinuumsmechanische Probleme, die durch partielle Differentialgleichungen von Tensorfeldern beschrieben werden, numerisch zu lösen [139], [144]. Im Allgemeinen können Felder von Tensoren der Stufe 0 bis 2 benutzt werden, wobei die Tensoren Funktionen des Orts und der Zeit sein können. Alle Felder werden räumlich als dreidimensional behandelt. Der Raum wird diskretisiert indem er in dreidimensionale Zellen aufgeteilt wird. Jede Zelle wird von Zellflächen begrenzt, deren Anzahl beliebig ist. Der dreidimensionale Raum muss vollständig durch Zellen ausgefüllt sein, wobei sich die Zellen nicht überlappen dürfen. Mit der Aufteilung des Raums ist es möglich die räumlichen Differentialoperatoren in den partiellen Differentialgleichungen zu diskretisieren.

5.4 Die Finite-Volumen-Methode

In OpenFOAM® basiert die Diskretisierung der räumlichen Differentialoperatoren in den Erhaltungsgleichungen auf der Finite-Volumen-Methode. Im Folgenden werden die relevanten Aspekte dieser Methode und deren Umsetzung in OpenFOAM® erläutert. Als Grundlage hierzu und als Quelle für die verwendeten Konventionen und Bezeichnungen dienen die Dissertationen von Jasak [71] (1996) und Rusche [112] (2002), die Dokumentation von OpenFOAM® 1.5 (*User Guide* und *Programmer's Guide* [144]) sowie das Buch von Ferziger und Perić [53] (2002).

Alle in dieser Arbeit vorgestellten Simulationen wurden mit der Version 1.5 von OpenFOAM® durchgeführt. Dabei wurden lediglich die Bibliotheken zur Verwaltung der Eingabe und Ausgabe von Daten, zur Anwendung der zeitlichen und räumlichen Diskretisierungsoperatoren sowie zur Lösung der resultierenden linearen Gleichungssysteme verwendet. Es wurden keine vorimplementierten Bibliotheken zur Berechnung von Stoffwerten oder zur Integration chemischer Quellterme benutzt. Das Verfahren zur Kopplung des Geschwindigkeitsfelds mit dem Druckfeld bei inkompressiblen Strömungen wurde vom vorhandenen Löser für reaktive Strömungen (reactingFoam) übernommen.

5.4.1 Integrale Erhaltungformulierung

Betrachtet wird die allgemeine Formulierung der Transportgleichung einer skalaren Größe Ψ (in koordinatenfreier Form):

$$\frac{\partial(\rho\Psi)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\mathbf{v}_\Psi\Psi) = Q_\Psi, \quad (5.53)$$

wobei \mathbf{v}_Ψ die resultierende Geschwindigkeit aus Strömungsgeschwindigkeit \mathbf{v} und überlagerter Diffusionsgeschwindigkeit \mathbf{V}_Ψ darstellt. Q_Ψ ist der Quellterm von Ψ . (5.53) stellt die Erhaltung von Ψ in differentieller Form dar und muss an jedem Ort im Rechengebiet und für jeden Zeitpunkt erfüllt sein. Die Grundidee der Finite-Volumen-Methode besteht darin, dass (5.53) nicht lokal an jedem Punkt im Raum erfüllt sein soll, sondern nur integral über ein bestimmtes Kontrollvolumen V . Dazu wird (5.53) über das Kontrollvolumen V integriert:

$$\int_V \frac{\partial(\rho\Psi)}{\partial t} dV + \int_V \nabla \cdot (\rho\mathbf{v}_\Psi\Psi) dV = \int_V Q_\Psi dV. \quad (5.54)$$

Das Kontrollvolumen kann eine beliebige Größe und räumliche Form besitzen. In dieser Arbeit wird sich bei der Verwendung der Finite-Volumen-Methode in OpenFOAM® auf nicht-bewegte Rechenetze beschränkt. Die Zellen welche den Raum in einzelne finite Volumina unterteilen bewegen sich nicht.

Der zweite Term auf der linken Seite von (5.54) ist die über das Kontrollvolumen integrierte Divergenz des Flusses $\rho\mathbf{v}_\Psi\Psi$. Dieses Integral kann mit Hilfe des Gaußschen Integralsatzes (z.B. in [4], [14]) in ein Oberflächenintegral über die Oberfläche S formuliert werden, die das Volumen V umschließt:

$$\int_V \nabla \cdot (\rho\mathbf{v}_\Psi\Psi) dV = \int_S \rho\mathbf{v}_\Psi\Psi \cdot \mathbf{n} dS. \quad (5.55)$$

Aus (5.54) folgt somit mit (5.55) und nach Vertauschung von Zeitableitung und Integral (beides sind lineare Operationen):

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho \Psi dV + \int_S \rho \Psi \mathbf{v}_\Psi \cdot \mathbf{n} dS = \int_V Q_\Psi dV . \quad (5.56)$$

Die Diffusionsgeschwindigkeit \mathbf{V}_Ψ wird in dieser Arbeit mit einem Fickschen Ansatz $\rho \mathbf{V}_\Psi \Psi = -\rho \mathcal{D}_\Psi \nabla \Psi$ modelliert (siehe 2.1.3). Die Form der integralen Erhaltungsgleichungen, die in der numerischen Umsetzung des Reaktionszonenmodells diskretisiert werden, schreibt sich somit:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho \Psi dV + \int_S \rho \Psi \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dS = \int_S \rho \mathcal{D}_\Psi \nabla \Psi \cdot \mathbf{n} dS + \int_V Q_\Psi dV . \quad (5.57)$$

In einer numerischen Simulation wird die zeitliche Entwicklung der Lösung durch den Zustand der Lösung an diskreten aufeinanderfolgenden Zeitpunkten beschrieben. Die Zeitkoordinate wird in finite Zeitintervalle unterteilt. Die Lösung wird an den Anfangs- und Endzeitpunkten der finiten Zeitintervalle gesucht. Dazu wird (5.57) über das Zeitintervall Δt integriert:

$$\begin{aligned} \int_t^{t+\Delta t} \left(\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho \Psi dV \right) dt + \int_t^{t+\Delta t} \left(\int_S \rho \Psi \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dS \right) dt = \\ \int_t^{t+\Delta t} \left(\int_S \rho \mathcal{D}_\Psi \nabla \Psi \cdot \mathbf{n} dS \right) dt + \int_t^{t+\Delta t} \left(\int_V Q_\Psi dV \right) dt . \end{aligned} \quad (5.58)$$

(5.58) ist eine integrale Erhaltungsbedingung über das Kontrollvolumen V im Zeitintervall Δt und ist der Ausgangspunkt für die Diskretisierung der räumlichen und zeitlichen Ableitungen. Bis zu dieser Formulierung wurde noch keine Approximation eingeführt. Durch die Integration wurde lediglich die differentielle Bedingung (5.53) in eine integrale Bedingung oder schwache Formulierung [82] umgewandelt. Zu ihrer numerischen Lösung müssen die Flächenintegrale der Flüsse, die Volumenintegrale und die zeitliche Ableitung approximiert werden.

Die Umwandlung eines Volumenintegrals der Divergenz eines Flusses in ein Flächenintegral mit Hilfe des Gaußschen Integralsatzes ist ein Kernpunkt der Finite-Volumen Methode. Die integrale Bedingung (5.58) wird für jedes Kontrollvolumen im Strömungsfeld formuliert. Bei konsistenter Formulierung der Flüsse und deren Flächenintegrale auf der Zellfläche zwischen zwei benachbarten Zellen, ist eine globale Erhaltung über den gesamten diskretisierten Raum gegeben, unabhängig von der Größe der verwendeten Zellen. Eine konsistente Formulierung der Flüsse bedeutet hierbei, dass in den integralen Bilanzen benachbarter Zellen, derselbe Fluss auf der gemeinsamen Zellfläche mit jeweils nur entgegengesetztem Vorzeichen verwendet wird [53].

5.4.2 Numerische Formulierung der integralen Erhaltung

Es wird hier zunächst nur die numerische Behandlung von (5.58) zur Bestimmung des Felds Ψ als Lösung beschrieben. Dabei wird angenommen, dass das Strömungsfeld \mathbf{v} sowie die Stoffgrößen ρ und \mathcal{D}_Ψ bekannt sind. Die Bestimmung des Strömungsfelds sowie die Kopplung aller Erhaltungsgleichungen im implementierten Code wird in 5.5 bzw. 5.6 beschrieben.

Unterteilung des Raums und der Zeit

Die kontinuierliche Zeitkoordinate wird in finite Zeitintervalle $\Delta t = t^{n+1} - t^n$ unterteilt und die Lösung der diskretisierten Gleichungen wird an den Grenzen $\dots t^{n-1}, t^n, t^{n+1} \dots$ des Zeitintervalls bestimmt. Das Kontrollvolumen V in (5.58) steht für jeweils eine einzelne Zelle im Rechengebiet. Eine Zelle hat ein Volumen V_P und wird durch N_f Flächen umrandet. In der Zelle befindet sich der Punkt P an dem Ort, an dem

$$\int_{V_P} (\mathbf{r} - \mathbf{r}_P) dV = 0 \quad (5.59)$$

gilt, mit dem allgemeinen Ortsvektor \mathbf{r} und dem Ortsvektor \mathbf{r}_P des Punkts P . Der Punkt P ist somit der Schwerpunkt des Kontrollvolumens. Im Schwerpunkt jeder Fläche f_i der Zelle befindet sich ein Punkt f_{ic} , mit der Definition:

$$\int_{f_i} (\mathbf{r} - \mathbf{r}_{f_{ic}}) dS = 0. \quad (5.60)$$

In Abb. 5.8 sind die Bezeichnungen der Punkte, Flächen und Vektoren einer Zelle mit angrenzender Nachbarzelle dargestellt. Die Lösungsvariablen werden im Punkt P jeder Zelle berechnet. Die auf den Punkten f_{ic} definierten Größen werden mit dem Index ic gekennzeichnet. Der Schwerpunkt einer Nachbarzelle wird mit N bezeichnet. Der Verbindungsvektor beider Schwerpunkte ist $\mathbf{d} = \mathbf{r}_N - \mathbf{r}_P$. Der Normalenvektor der Zellfläche f_i wird mit \mathbf{s}_i bezeichnet. Sein Betrag ist gleich dem Flächeninhalt S_i der Zellfläche f_i . Der normierte Normalenvektor der Zellfläche f_i lautet somit $\mathbf{n}_i = \mathbf{s}_i / |\mathbf{s}_i| = \mathbf{s}_i / S_i$.

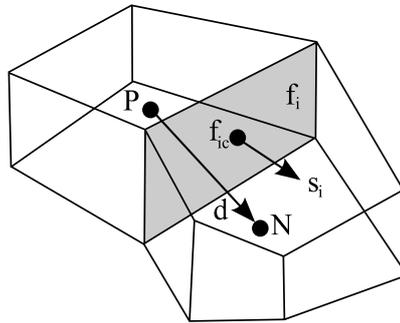


Abbildung 5.8: Bezeichnungen von Größen an einer Zelle und der angrenzenden Nachbarzelle, nach Vorlage aus [71], [112].

Approximation von Flächen- und Volumenintegralen

Nach der Unterteilung des Raums und der Zeit müssen die einzelnen Volumen- und Flächenintegrale in (5.58) approximiert werden. Das Flächenintegral des konvektiven Flusses über die gesamte Fläche einer Zelle wird als Summe von Flächenintegralen über die einzelnen Flächen der Zelle formuliert:

$$\int_S \rho \Psi \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dS = \sum_i^{N_f} \left(\int_{f_i} \rho \Psi \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_i dS \right). \quad (5.61)$$

Die Formulierung (5.61) ist exakt und beinhaltet noch keine Approximation. Der Integrand $\rho\Psi\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_i$ ist jedoch nicht überall auf der Zellfläche f_i bekannt. Zur Berechnung des Flächenintegrals über die Zellfläche f_i wird eine Approximation zur numerischen Berechnung des Integrals, eine sogenannte Quadraturformel benötigt. Eine Möglichkeit besteht darin, das Flächenintegral über das Produkt des Werts des Integranden am Flächenschwerpunkt f_{ic} mit dem Flächeninhalt S_i der Zellfläche f_i zu approximieren:

$$\int_{f_i} \rho\Psi\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_i \, dS \approx (\rho\Psi\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_i)_{ic} S_i . \quad (5.62)$$

Die Quadraturformel (5.62) besitzt eine Genauigkeit zweiter Ordnung [53]. Bei einem linearen oder konstanten Verlauf des Integranden über der Zellfläche entspricht der Wert des Integranden am Punkt f_{ic} dem exakten Mittelwert über der Zellfläche und (5.62) liefert das exakte Flächenintegral. Mit der Bezeichnung $F_i = (\rho\mathbf{v} \cdot \mathbf{s}_i)_{ic} = (\rho\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_i)_{ic} S_i$ für den approximierten Massenstrom durch die Zellfläche f_i lautet die diskrete Formulierung des Oberflächenintegrals des konvektiven Flusses:

$$\int_S \rho\Psi\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \, dS \approx \sum_i^{N_f} F_i \Psi_{ic} . \quad (5.63)$$

Die Bestimmung der Flächenmittelpunktwerte Ψ_{ic} aus Zellmittelpunktwerten kann durch Interpolation erfolgen.

Bei der Formulierung des Volumenintegrals über den Quellterm Q_Ψ wird zunächst eine Linearisierung $Q_\Psi = Q_I\Psi + Q_E$ durchgeführt. Der Grund hierfür wird bei der Behandlung der zeitlichen Diskretisierung beschrieben. Das Volumenintegral kann anschließend analog zur Näherung des Flächenintegrals über eine Zellfläche mit folgender Quadraturformel 2. Ordnung approximiert werden:

$$\int_V Q_\Psi \, dV \approx Q_I\Psi_P V_P + Q_E V_P . \quad (5.64)$$

Die in (5.64) verwendete Quadraturformel ist exakt, wenn der Integrand einen konstanten oder linearen Verlauf innerhalb des Volumens besitzt über das integriert wird.

Die Behandlung des Flächenintegrals des diffusiven Flusses erfolgt analog zur Approximation des Flächenintegrals des konvektiven Flusses:

$$\int_S (\rho\mathcal{D}_\Psi\nabla\Psi) \cdot \mathbf{n} \, dS \approx \sum_i^{N_f} (\rho\mathcal{D}_\Psi)_{ic} (\nabla\Psi)_{ic} \cdot \mathbf{s}_i \quad (5.65)$$

In (5.65) muss der Gradient $(\nabla\Psi)_{ic}$ bzw. seine Projektion auf \mathbf{n}_i auf der Zellfläche bestimmt werden. Eine Möglichkeit hierzu besteht darin, den Gradienten zunächst in den Zellmittelpunkten zu bestimmen und ihn anschließend auf die Zellflächen zu interpolieren. Dazu wird das Volumenintegral des Gradienten unter Verwendung einer Quadraturformel wie in (5.64) als Produkt des Gradienten im Zellmittelpunkt und dem Zellvolumen V_P approximiert. Dabei wird ausgenutzt, dass die Projektion $\nabla\Psi \cdot \mathbf{i}$ des Gradienten auf eine feste Richtung \mathbf{i} (konstantes Vektorfeld \mathbf{i}) der Divergenz des Vektorfelds $\Psi\mathbf{i}$ entspricht. Mit Hilfe des Gaußschen Integralsatzes folgt somit:

$$\int_V \nabla\Psi \cdot \mathbf{i} \, dV = \int_V \nabla \cdot (\Psi\mathbf{i}) \, dV = \int_S \Psi\mathbf{i} \cdot \mathbf{n} \, dS \approx \sum_i^{N_f} \Psi_{ic} (\mathbf{i} \cdot \mathbf{n})_{ic} S_i , \quad (5.66)$$

wobei die Bestimmung von Ψ_{ic} wie beim Konvektionsterm durch Interpolation erfolgt.

Eine andere Möglichkeit zur Bestimmung der normalen Projektion des Gradienten auf einer Zellfläche geht vom Mittelpunktswert von Ψ in der benachbarten Zelle aus:

$$(\nabla\Psi)_{ic} \cdot \mathbf{s}_i = S_i \frac{(\Psi_N - \Psi_P)}{|\mathbf{d}|} . \quad (5.67)$$

(5.67) kann nur in orthogonalen Netzen verwendet werden, bei denen die Vektoren \mathbf{s}_i und \mathbf{d} parallel sind. Bei nicht-orthogonalen Netzen müssen zusätzliche Korrekturen eingeführt werden [71].

Interpolationsverfahren

Bei der Approximation von Flächenintegralen werden die Werte von Variablen an den Zellflächenmittelpunkten benötigt. Die Lösungsvariablen sind jedoch nur in den Zellmittelpunkten bekannt und müssen somit durch geeignete Verfahren auf die Zellflächen interpoliert werden. Hierzu gibt es eine Vielzahl von Verfahren deren Wahl u.a. von der Physik des simulierten Problems und von der Geometrie und Topologie des verwendeten Netzes abhängt. Hier wird nur auf grundlegende Verfahren eingegangen. Für spezielle Verfahren wird auf weiterführende Literatur verwiesen [53], [135], [71].

Ein einfaches Verfahren verwendet nur die Zellmittelpunktswerte Ψ_P und Ψ_N . Zwischen Ψ_P und Ψ_N wird ein linearer Verlauf angenommen und der Zellflächenwert lässt sich somit leicht durch Interpolation ermitteln:

$$\Psi_{ic}(\text{CD}) = f_x \Psi_P + (1 - f_x) \Psi_N , \quad (5.68)$$

mit dem Interpolationsfaktor f_x der als Längenverhältnis aus der Netzgeometrie berechnet wird. Dieses Verfahren besitzt einen Fehler zweiter Ordnung (auch auf nicht-äquidistanten Gittern [53], [71]) und wird als *Central Differencing Scheme* (CD) oder lineares Interpolationsverfahren bezeichnet. Bei konvektionsdominierten Problemen (bei hoher Peclet-Zahl, die die relative Stärke von Konvektionsterm zu Diffusionsterm angibt) kann das CD-Verfahren zu Oszillationen der Lösung führen [71].

Das Auftreten von Oszillationen kann durch Verwendung des *Upwind*-Verfahrens (UD) verhindert werden. Bei diesem Verfahren wird der Zellflächenwert gleich dem Wert des Zellmittelpunkts gesetzt, aus dessen Richtung der Fluss durch die Zellfläche stattfindet:

$$\Psi_{ic}(\text{UD}) = \begin{cases} \Psi_P & \text{wenn } F_i > 0 \\ \Psi_N & \text{wenn } F_i < 0 . \end{cases} \quad (5.69)$$

Der Zellflächenwert wird aus dem *stromauf* liegenden Zellmittelpunktswert ermittelt. Das UD-Verfahren verursacht einen hohen Eintrag an numerischer Diffusion. Außerdem nimmt aufgrund seines Fehlers 1. Ordnung die Genauigkeit der Lösung nur langsam mit der Auflösung zu [53].

Ein Verfahren welches die Vorteile des CD- und des UD-Verfahrens kombiniert ist das sogenannte *Blended Differencing Scheme* (BD), das eine Linearkombination von CD und UD verwendet:

$$\Psi_{ic}(\text{BD}) = \gamma_{\text{BD}} \Psi_{ic}(\text{CD}) + (1 - \gamma_{\text{BD}}) \Psi_{ic}(\text{UD}) , \quad (5.70)$$

mit dem Überblendungsfaktor $0 \leq \gamma_{\text{BD}} \leq 1$ [71].

Approximation der Zeitableitung

Für ein Kontrollvolumen V das sich nicht in der Zeit ändert, kann der Zeitableitungsterm in (5.58) folgendermaßen approximiert werden [71]:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho \Psi dV \approx \left(\frac{\partial(\rho \Psi)}{\partial t} \right)_P V_P. \quad (5.71)$$

Die zeitliche Ableitung $\partial(\rho \Psi)/\partial t$ muss ebenfalls approximiert werden. Zur Vereinfachung der Schreibweise wird die Lösung zum diskreten Zeitpunkt $t = t^n$ mit Ψ^n bezeichnet. Die Lösung zum vorherigen diskreten Zeitpunkt $t^{n-1} = t^n - \Delta t$ schreibt sich Ψ^{n-1} und zum darauffolgenden Zeitpunkt $t^{n+1} = t^n + \Delta t$ lautet sie Ψ^{n+1} (konstantes Δt angenommen). Die einfachste Approximation für die Zeitableitung liefert das Euler-Verfahren [71], [53]:

$$\frac{\partial(\rho \Psi)}{\partial t} \approx \frac{\rho^{n+1} \Psi^{n+1} - \rho^n \Psi^n}{\Delta t} \quad (5.72)$$

welches ein Verfahren 1. Ordnung ist und aus einer Taylor-Entwicklung von $\Psi(t)$ hergeleitet werden kann.

Ein anderes Verfahren geht von einer Anpassung des zeitlichen Verlaufs von $\Psi(t)$ an den 3 Zeitpunkten t^{n+1} , t^n und t^{n-1} durch ein Polynom 2. Grades aus. Für die Zeitableitung folgt dann [71], [53]:

$$\frac{\partial(\rho \Psi)}{\partial t} \approx \frac{3\rho^{n+1} \Psi^{n+1} - 4\rho^n \Psi^n + \rho^{n-1} \Psi^{n-1}}{2\Delta t}. \quad (5.73)$$

Die Approximation (5.73) ist 2. Ordnung genau.

Behandlung des Zeitintegrals

Mit der Diskretisierung von Raum und Zeit, der numerischen Formulierung von Volumen- und Oberflächenintegralen sowie der Approximation der zeitlichen Ableitung folgt aus der allgemeinen integralen Transportgleichung (5.58) (mit den Beziehungen (5.63), (5.64), (5.65) und (5.71)) eine sogenannte *semi-diskrete* Formulierung [71], [112]:

$$\begin{aligned} & \int_t^{t+\Delta t} \left[\left(\frac{\partial(\rho \Psi)}{\partial t} \right)_P V_P + \sum_i^{N_f} F_i \Psi_{ic} \right] dt \\ &= \int_t^{t+\Delta t} \left[\sum_i^{N_f} (\rho \mathcal{D}_\Psi)_{ic} (\nabla \Psi)_{ic} \cdot \mathbf{s}_i + Q_I \Psi_P V_P + Q_E V_P \right] dt. \end{aligned} \quad (5.74)$$

Um eine vollständig diskretisierte Formulierung von (5.58) zu erhalten, muss die zeitliche Integration in (5.74) approximiert werden. Je nach getroffener Annahme über den zeitlichen Verlauf des Integranden im Zeitintegral, resultiert ein unterschiedliches Verfahren.

Wird der Integrand als konstant über das Zeitintervall Δt angenommen, dann resultiert ein Euler-Verfahren. Eine Approximation mit den Werten des Integranden zum alten Zeitpunkt t^n , was der Näherung

$$\int_{t^n}^{t^n+\Delta t} f(t) dt \approx f(t^n) \Delta t \quad (5.75)$$

entspricht, führt auf das explizite Euler-Verfahren [53]. Die Anwendung der Näherung (5.75) auf (5.74) führt mit der Approximation (5.72) der Zeitableitung und unter der Annahme einer zeitlich konstanten Dichte, Diffusivität und Linearisierung des Quellterms zu:

$$\rho_P \frac{(\Psi_P^{n+1} - \Psi_P^n)}{\Delta t} V_P + \sum_i^{N_f} F_i \Psi_{ic}^n = \sum_i^{N_f} (\rho D_\Psi)_{ic} (\nabla \Psi)_{ic}^n \cdot \mathbf{s}_i + Q_I \Psi_P^n V_P + Q_E V_P, \quad (5.76)$$

woraus sich für jede Zelle der unbekannte Wert Ψ_P^{n+1} zum neuen Zeitpunkt t^{n+1} *explizit* aus bekannten Zellmittelpunktwerten Ψ_P^n und daraus interpolierten Zellflächenwerten Ψ_{ic}^n und $(\nabla \Psi)_{ic}^n$ berechnen lässt.

Eine andere Variante ordnet dem Integranden den noch unbekanntem Wert zum neuen Zeitpunkt zu:

$$\int_{t^n}^{t^n + \Delta t} f(t) dt \approx f(t^n + \Delta t) \Delta t. \quad (5.77)$$

Aus (5.74) folgt somit mit (5.72) und (5.77):

$$\rho_P \frac{(\Psi_P^{n+1} - \Psi_P^n)}{\Delta t} V_P + \sum_i^{N_f} F_i \Psi_{ic}^{n+1} = \sum_i^{N_f} (\rho D_\Psi)_{ic} (\nabla \Psi)_{ic}^{n+1} \cdot \mathbf{s}_i + Q_I \Psi_P^{n+1} V_P + Q_E V_P. \quad (5.78)$$

Nach der Diskretisierung liegt für jede Zelle des Rechengebiets eine Gleichung für die gesuchte Größe Ψ_P^{n+1} der Form (5.78) vor. In diese Gleichung gehen über die interpolierten Zellflächenwerte auch die Werte Ψ_P^{n+1} der benachbarten Zellen ein. Die Gleichung für Ψ_P^{n+1} hat die allgemeine Struktur

$$a_P \Psi_P^{n+1} + \sum_N a_N \Psi_N^{n+1} = R_P, \quad (5.79)$$

welche einer Zeile des algebraischen Gleichungssystems

$$\underline{\underline{A}} \underline{\Psi}_P^{n+1} = \underline{b} \quad (5.80)$$

entspricht. Die Koeffizienten a_P stehen auf der Hauptdiagonale und die Koeffizienten a_N auf den Nebendiagonalen der Koeffizientenmatrix $\underline{\underline{A}}$. Der Spaltenvektor $\underline{\Psi}_P^{n+1}$ enthält die unbekanntem Zellmittelpunktwerte Ψ_P^{n+1} und die Terme R_P stehen im Spaltenvektor \underline{b} . Die Approximation des zeitlichen Verlaufs nach (5.77) führt auf das implizite Euler-Verfahren [53]. Sowohl das explizite als auch das implizite Euler-Verfahren sind Verfahren 1. Ordnung.

Ein Diskretisierungsverfahren das unbekanntem Werte zum neuen Zeitpunkt t^{n+1} in die Formulierung des zeitlichen Integrals einbezieht wird als implizites Verfahren bezeichnet und führt auf ein Gleichungssystem (5.80) für die gesuchte Größe zum Zeitpunkt t^{n+1} . Dadurch, dass in dem hier beschriebenen Fall das Strömungsfeld \mathbf{v} (und somit die Massenflüsse F_i) sowie die Dichte ρ und der Diffusionskoeffizient D_Ψ bekannt sind, hängen die Koeffizienten a_P und a_N nicht von Ψ_P^{n+1} ab. Das resultierende Gleichungssystem (5.80) für Ψ_P^{n+1} ist somit linear. Die Matrix $\underline{\underline{A}}$ ist bei der Diskretisierung von partiellen Differentialgleichungen mit der Finite-Volumen-Methode nur schwach besetzt, da die räumlichen Operatoren in der Regel nur über unmittelbar benachbarte Zellen approximiert werden. Zur Lösung großer Gleichungssysteme, wie sie bei CFD-Anwendungen

üblicherweise vorkommen, werden in der Regel iterative Lösungsverfahren verwendet. Über die Methoden zur iterativen Lösung von Gleichungssystemen wird hier nicht näher eingegangen sondern auf [53] und [135] verwiesen.

Ein implizites Verfahren mit einem zeitlichen Diskretisierungsfehler 2. Ordnung kann durch Verwendung der Approximation (5.73) für die Zeitableitung formuliert werden, trotz konstanter Behandlung des Integranden im Zeitintegral:

$$\begin{aligned} \rho_P \frac{(3\Psi_P^{n+1} - 4\Psi_P^n + \Psi_P^{n-1})}{2\Delta t} V_P + \sum_i^{N_f} F_i \Psi_{ic}^{n+1} = \\ \sum_i^{N_f} (\rho \mathcal{D}_\Psi)_{ic} (\nabla \Psi)_{ic}^{n+1} \cdot \mathbf{s}_i + Q_I \Psi_P^{n+1} V_P + Q_E V_P . \end{aligned} \quad (5.81)$$

Eine alternative Methode zur Approximation des Zeitintegrals geht von der Annahme eines linearen zeitlichen Verlaufs des Integranden aus und approximiert das Zeitintegral mit Hilfe der Trapezformel [14]:

$$\int_{t^n}^{t^n + \Delta t} f(t) dt \approx \frac{f(t^n + \Delta t) + f(t^n)}{2} \Delta t . \quad (5.82)$$

Die Anwendung der Approximation (5.82) auf (5.74) führt mit der Approximation (5.72) der Zeitableitung und unter der Annahme einer zeitlich konstanten Dichte, Diffusivität und Linearisierung des Quellterms zu [71]:

$$\begin{aligned} \rho_P \frac{(\Psi_P^{n+1} - \Psi_P^n)}{\Delta t} V_P + \frac{1}{2} \left(\sum_i^{N_f} F_i \Psi_{ic}^{n+1} + \sum_i^{N_f} F_i \Psi_{ic}^n \right) = \\ \frac{1}{2} \left(\sum_i^{N_f} (\rho \mathcal{D}_\Psi)_{ic} (\nabla \Psi)_{ic}^{n+1} \cdot \mathbf{s}_i + \sum_i^{N_f} (\rho \mathcal{D}_\Psi)_{ic} (\nabla \Psi)_{ic}^n \cdot \mathbf{s}_i \right) \\ + \frac{1}{2} \left(Q_I \Psi_P^{n+1} V_P + Q_I \Psi_P^n V_P \right) + Q_E V_P . \end{aligned} \quad (5.83)$$

Dies ist ein zeitliches Diskretisierungsverfahren 2. Ordnung und wird als Crank-Nicholson Verfahren bezeichnet [53], [71].

Numerische Stabilität

Neben dem unterschiedlichen numerischen Aufwand zur Ausführung eines Zeitschritts besitzen explizite und implizite Verfahren auch unterschiedliche numerische Stabilitätseigenschaften, die mit Hilfe der von Neumannschen Stabilitätstheorie [53], [82] untersucht werden können. Die Grundidee dabei besteht in der Analyse der zeitlichen Entwicklung der Amplitude einer numerischen Störung der Lösung der Differentialgleichung. Die von Neumannsche Stabilitätstheorie liefert Abschätzungen für den größten erlaubten Zeitschritt Δt , der die numerische Stabilität der Lösung gewährleistet. Sie wird meistens für einfache Gleichungen durchgeführt, z.B. eindimensionale partielle Differentialgleichungen mit konstanten Koeffizienten. Eine allgemeine Übertragung der Ergebnisse auf mehrdimensionale Transportgleichungen mit variablen Stoffgrößen (wie z.B. die Navier-Stokes Gleichungen) ist schwierig. Trotzdem kann die von Neumannsche Stabilitätstheorie eine allgemeine Einsicht in das Stabilitätsverhalten eines Verfahrens liefern [53].

Bei der Verwendung eines linearen Interpolationsverfahrens auf einem Netz mit konstanter Gitterweite Δx resultiert für eine instationäre Konvektions-Diffusions-Gleichung (ohne Quellterm, mit konstanter Dichte ρ , mit konstanter Strömungsgeschwindigkeit u und einem konstanten Diffusionskoeffizienten D_Ψ) für das explizite Euler-Verfahren ein Zeitschrittkriterium [53]

$$\Delta t < \frac{\rho \Delta x^2}{2D_\Psi}, \quad (5.84)$$

zusammen mit der Bedingung für die lokale, auf der Zellen- oder Gitterskala definierte Peclet-Zahl

$$\text{Pe}_{\text{Zelle}} = \frac{\rho u \Delta x}{D_\Psi} < 2. \quad (5.85)$$

Vereinfacht ausgedrückt besagt die Bedingung (5.84), dass innerhalb eines Zeitschritts Δt die Distanz $\sqrt{2D_\Psi \Delta t / \rho}$ über die Information durch Diffusion transportiert wird [53], kleiner als die Zellweite Δx sein muss. (5.84) ist somit ein Diffusionszeitschrittkriterium und stellt bei Problemen mit ausgeprägtem diffusiven Transport eine starke Restriktion der Zeitschrittweite dar. Dies gilt insbesondere bei feinen Gittern wegen der quadratischen Abhängigkeit von der Gitterweite Δx [135].

Bei der Verwendung des Upwind-Verfahrens resultiert als Bedingung für den Zeitschritt [53]:

$$\Delta t < \left(\frac{2D_\Psi}{\rho(\Delta x)^2} + \frac{u}{\Delta x} \right)^{-1}. \quad (5.86)$$

Ohne Konvektion ($u = 0$) entspricht (5.86) der Restriktion (5.84). Bei einem rein konvektiven Transport ohne Diffusion ($D_\Psi = 0$) geht (5.86) in das Courant-Kriterium:

$$\Delta t < \frac{\Delta x}{u}, \quad (5.87)$$

mit der Courant-Zahl $u\Delta t/\Delta x$ über [53].

Dahingegen existiert bei der Verwendung eines impliziten Euler-Zeitschrittverfahrens keine Zeitschrittrestriktion bezüglich der Stabilität der Lösung [53], [135]. Auf Gittern mit großen Zellen kann jedoch bei der Verwendung des linearen Interpolationsschemas in Gebieten starker Gradienten der Lösung und hoher lokaler Peclet-Zahl eine oszillierende Lösung entstehen [53].

Das implizite Verfahren (5.81) sowie das Crank-Nicholson Verfahren (5.83) sind wie das implizite Euler-Verfahren unabhängig vom gewählten Zeitschritt stabil. Beide Verfahren können oszillatorische Lösungen bei großen Zeitschritten produzieren, wobei das Verfahren (5.81) weniger stark dazu neigt als das Crank-Nicholson Verfahren [53].

Formulierung von Anfangsbedingungen

Die Anfangsbedingungen des Felds Ψ gehen direkt in die Zellmittelpunktwerte Ψ_P zum Anfangszeitpunkt $t = t^0$ der Simulation ein.

Einbau von Randbedingungen

Der Einbau von Randbedingungen betrifft nur die Terme in einer partiellen Differentialgleichung, die eine räumliche Kopplung benachbarter Punkte im Rechengebiet erzeugen. In dieser Arbeit sind dies nur Konvektionsterme und Diffusionsterme. Quellterme und Zeitableitungsterme wirken im Gegensatz dazu lokal. In diesem Abschnitt wird der

Einbau von Dirichlet- und Neumann-Randbedingungen des Skalarfeldes Ψ behandelt. Randbedingungen gehen bei der Finite-Volumen-Diskretisierung in die Formulierung der Flüsse über die Zellflächen ein, die auf dem Rand des Rechengebiets liegen [53].

Eine Dirichlet-Randbedingung setzt einen bestimmten Wert Ψ_b auf dem Rand fest. Bei der Diskretisierung des Konvektionsterms nach (5.63) wird dabei der Zellflächenmittelpunktswert Ψ_{ic} der Zellfläche auf dem Rand gleich Ψ_b gesetzt. Der Fluss $F_i = F_b$ auf dem Rand kann aus dem Strömungsfeld berechnet werden. In der Diskretisierung des Diffusionsterms nach (5.65) wird der Gradient $(\nabla\Psi)_{ic}$ auf der Randzellfläche mit Hilfe des Zellmittelpunktswerts der an den Rand angrenzenden Zelle, des Abstands des Mittelpunkts dieser Zelle zum Rand und des vorgeschriebenen Randwerts Ψ_b ausgedrückt [71].

Eine Neumann-Randbedingung setzt die Ableitung von Ψ normal zum Rand fest. Bei der Diskretisierung des Konvektionsterms wird hierzu in (5.63) der Zellflächenwert Ψ_b auf dem Rand mit Hilfe der vorgegebenen normalen Komponente des Gradienten von Ψ , des Zellmittelpunktswerts der angrenzenden Zelle und des Abstands des Mittelpunkts der Zelle zum Rand berechnet. In der Diskretisierung des Diffusionsterms kann auf der Randfläche einer Zelle die vorgegebene normale Komponente des Gradienten direkt in die Bilanzierung (5.65) eingehen [71].

5.5 Strömungslöser

Die in 5.4 vorgestellten numerischen Methoden eignen sich zur Lösung skalarer Transportgleichungen mit einem bekannten Strömungsfeld. In diesem Abschnitt wird die Behandlung der Impulserhaltungsgleichungen und der Kontinuitätsgleichung kurz erläutert. In inkompressiblen Strömungen ist die Kontinuitätsgleichung eher eine kinematische Bedingung für das Strömungsfeld als eine Transportgleichung für das Dichtefeld [53]. Dabei besteht das Problem, dass zunächst keine Gleichung für das Druckfeld existiert, das in die Impulserhaltungsgleichungen eingeht. Zur Behandlung der Geschwindigkeits-Druck-Kopplung wird in dieser Arbeit das in OpenFOAM® implementierte PISO-Algorithmus (*Pressure-Implicit with Splitting of Operators*) von Issa [70] (1985) verwendet. Die Grundidee der Methode besteht darin, zunächst die Impulserhaltungsgleichungen mit dem Druckgradienten des vorherigen Zeitschritts zu lösen. Daraus resultiert ein vorläufiges Geschwindigkeitsfeld das die Kontinuitätsgleichung nicht erfüllt. Aus der Kontinuitätsgleichung wird eine Gleichung für das Druckfeld hergeleitet. Dieses Druckfeld liefert ein korrigiertes Strömungsfeld welches die diskretisierte Kontinuitätsgleichung erfüllt. Die Kopplung zwischen Druck- und Geschwindigkeitsfeld erfolgt iterativ über mehrfache Lösung der Druckkorrekturgleichung mit anschließender Korrektur des Geschwindigkeitsfelds. Für eine ausführliche Beschreibungen des PISO-Verfahrens sowie weiterer Verfahren zur Geschwindigkeits-Druck-Kopplung wird auf [53] verwiesen.

5.6 Implementierter Code in OpenFOAM®

5.6.1 Zusammenfassung der relevanten Gleichungen

In diesem Abschnitt sind alle Transportgleichungen und Korrelationen zusammengefasst, die zur Anwendung des Flammenmodells in OpenFOAM® implementiert wurden:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0 , \quad (5.88)$$

$$\rho = \frac{p_0 M}{\mathcal{R} T} , \quad (5.89)$$

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{v})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \otimes \mathbf{v}) = -\nabla p + \rho \mathbf{g} + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} , \quad (5.90)$$

$$\boldsymbol{\tau} = \mu \left(\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \mathbf{v}) \mathbf{I} \right) , \quad (5.91)$$

$$\mu(T) = \frac{C_{\text{ref}} T^{3/2}}{T + T_S} , \quad C_{\text{ref}} = 1,458 \cdot 10^{-6} \text{ kg m}^{-1} \text{ s}^{-1} \text{ K}^{-1/2} , \quad T_S = 110,4 \text{ K} , \quad (5.92)$$

$$\frac{\partial(\rho Y)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} Y) = \frac{1}{\text{Le}_Y} \nabla \cdot \left(\frac{\lambda}{c_p} \nabla Y \right) + \omega_Y , \quad (5.93)$$

$$\frac{\lambda}{c_p} = F_{\text{thick}} \cdot 2,58 \cdot 10^{-5} \left(\frac{T}{298 \text{ K}} \right)^{0,7} , \quad (5.94)$$

$$c_p \left(\frac{\partial(\rho T)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} T) \right) = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) + \omega_T , \quad (5.95)$$

$$\lambda = c_p \cdot \left(\frac{\lambda}{c_p} \right) = c_p \cdot F_{\text{thick}} \cdot 2,58 \cdot 10^{-5} \left(\frac{T}{298 \text{ K}} \right)^{0,7} , \quad (5.96)$$

$$c_p [\text{J}/(\text{kg} \cdot \text{K})] = c_{p, \text{N}_2}(T) = -1,161822 \cdot 10^{-4} (T[\text{K}]/100)^3 - 4,598306 \cdot 10^{-1} (T[\text{K}]/100)^2 + 2,619825 \cdot 10 (T[\text{K}]/100) + 9,476402 \cdot 10^2 , \quad (5.97)$$

$$\frac{\partial(\rho \psi)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \psi) = m_\psi |\nabla \psi| - \gamma \rho \nabla \cdot (\psi(1 - \psi) \mathbf{n}) + \gamma \rho \varepsilon \Delta \psi , \quad (\text{siehe (5.104)}) \quad (5.98)$$

$$\frac{\partial F_{\text{ext}}}{\partial t} + \mathbf{v}_{\text{ext}} \cdot \nabla F_{\text{ext}} = \nabla \cdot (\underline{\underline{D}}^m (1 - Q_m) \nabla F_{\text{ext}}) + Q_m \tau_m (F - F_{\text{ext}}) , \quad (5.99)$$

$$\frac{\partial c_{\text{ext}}}{\partial t} = \nabla \cdot (\underline{\underline{D}}^c (1 - Q_c) \nabla c_{\text{ext}}) + Q_c \tau_c (c - c_{\text{ext}}) . \quad (5.100)$$

Für die molare Masse M der Mischung in (5.89) wird die molare Masse von Stickstoff eingesetzt. Der Faktor F_{thick} in (5.94) wird zur künstlichen Verbreiterung der normalen Profile von Y und T eingeführt (siehe 5.6.2). Mit $F_{\text{thick}} = 1$ erfolgt keine Verbreiterung. Die Korrelation in (5.97) resultiert aus einer Anpassung der Wärmekapazität als Funktion der Temperatur nach dem Prinzip der kleinsten Fehlerquadrate. Die Referenzwerte von $c_{p, \text{N}_2} = f(T)$ sind mit den Polynomkoeffizienten aus [21] berechnet. Hierbei wechseln die Koeffizientensätze bei einer Temperatur von 1000 K. Um eine einfache Programmierung in OpenFOAM® zu ermöglichen, wird der c_p -Wert in (5.97) im Temperaturbereich von 250 K bis 3000 K, der für diese Arbeit relevant ist, mit einem einzigen Polynom dritten Grades approximiert. Der Skalierungsfaktor 1/100 im Argument dient der Konditionierung der Korrelationskoeffizienten. Die maximale relative Abweichung der Wärmekapazität zwischen (5.97) und den Referenzwerten beträgt 2,8%.

5.6.2 Künstliche Verbreiterung der aufzulösenden Felder

Eine Strategie zur Reduzierung des Rechenaufwands bei der Anwendung des Modells besteht darin, die Profile der aufzulösenden Felder Y , T und ψ künstlich dicker zu wählen, als sie in einer entsprechenden vorgemischten Flamme sind. Diese Vorgehensweise ist analog zum *thickened flame model* von Colin et al. [34] (2000). Die Dicke des Übergangsbereichs der Phasen-Feld/Level-Set-Funktion wird direkt durch den Wert von ε bestimmt. Bei gegebenen Quelltermen sowie einem gegebenen Strömungsfeld hängt die Dicke der Profile von Y und T vom Betrag der Diffusivität in deren Diffusionstermen ab. Durch Multiplikation des Ausdrucks für λ/c_p mit einem Faktor $F_{\text{thick}} \geq 1$ können die Profile in der Simulation künstlich verbreitert werden. Der integrale Parameter I_Y und somit der integrale Verbrauch von Y durch die gesamte reaktive Front bleiben unverändert. Die modellierte Massenstromdichte m passt sich den gegebenen Feldern von Y und T (über das Dichtefeld) an.

5.6.3 Implementierung einzelner Terme und Gleichungen

Terme bei der normalen Erweiterung von F

Der konvektive Term in der Transportgleichung (5.32) wird im Code folgendermaßen formuliert:

$$\mathbf{v}_{\text{ext}} \cdot \nabla F_{\text{ext}} = \nabla \cdot (\mathbf{v}_{\text{ext}} F_{\text{ext}}) - F_{\text{ext}} \nabla \cdot \mathbf{v}_{\text{ext}} , \quad (5.101)$$

wobei der erste Term implizit und der zweite Term explizit diskretisiert wird. Das als Schalter dienende Quelltermprofil wird in der Form

$$Q_m = (1 - \psi)^4 \quad (5.102)$$

implementiert.

Quelltermprofil bei der normalen Erweiterung des Krümmungsfelds

Bei einer geringen räumlichen Auflösungen des Übergangsbereichs von ψ hat sich folgende, an (5.43) angelehnte Formulierung des Quelltermprofils bewährt:

$$Q = 16\psi^2(1 - \psi)^2 + 1,3 (1 - 16\psi^2(1 - \psi)^2) 16\psi^2(1 - \psi)^2 . \quad (5.103)$$

Formulierung der Diffusionskoeffizienten und der Diffusionsmatrizen

Dem diffusiven Transport in Richtung des Normalenvektorfelds \mathbf{n} durch die Diffusionsmatrix $\underline{D} = D \underline{D}^{\mathbf{n}} = D \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}$ wird ein geringer isotroper Anteil hinzugefügt, mit einem Diffusionskoeffizienten, der 5% des Werts von D entspricht. Für die Erweiterung des Temperaturfelds wird ein isotroper Anteil von nur 0,5% gewählt. Der isotrope Diffusionsterm in der Transportgleichung für F_{ext} wird nicht mit dem Faktor $1 - Q_m$ multipliziert. Für den Wert D^m in (5.36) wird $(d_\psi/4)^2/\Delta t$ gewählt. Das Produkt $\mathbf{n} \otimes \mathbf{n}$ wird mit Hilfe der in OpenFOAM® vorhandenen Implementierung des dyadischen Produkts behandelt (*outer product*) [144]. Der mögliche Fall eines resultierenden negativen Diffusionskoeffizienten wird abgefangen. Dies kann dann auftreten, wenn der Term $1 - Q$, mit dem die Diffusionsmatrix (oder der Diffusionskoeffizient) multipliziert wird, negativ wird. In diesem Fall werden mit dem Befehl $\max(1 - Q, 0)$ negative Werte zu 0 gesetzt.

Implementierung der Phasen-Feld/Level-Set-Gleichung

Die implementierte Transportgleichung für die Phasen-Feld/Level-Set-Funktion lautet:

$$\frac{\partial(\rho\psi)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\mathbf{v}\psi) = m_\psi |\nabla\psi| - \gamma\rho \nabla \cdot (\psi(1-\psi)\mathbf{n}) + \gamma\rho\varepsilon \Delta\psi + \rho^1 \nabla \cdot (S_\psi D_\psi \nabla\psi), \quad (5.104)$$

wobei zur Stabilisierung ein zusätzlicher Diffusionsterm (letzter Term auf der rechten Seite) eingeführt ist. Die Funktion S_ψ wird so formuliert, dass der Diffusionsterm nur in dem Bereich wirksam ist, in dem ψ nahe am Wert 0 oder am Wert 1 liegt. Innerhalb des Übergangs von 0 auf 1 soll S_ψ verschwinden und außerhalb den Wert 1 besitzen. Hierfür wird folgende Formulierung gewählt:

$$S_\psi = \frac{1}{2} \left(1 + \tanh(10^4(\psi - 0,999)) \right) + \left(1 - \frac{1}{2} \left(1 + \tanh(10^4(\psi - 0,001)) \right) \right). \quad (5.105)$$

Für den Diffusionskoeffizienten D_ψ wird der Wert $0,001 \text{ m}^2/\text{s}$ gewählt. Der Term ρ^1 in (5.104) wird aus Dimensionsgründen der Gleichung mit $1 \text{ kg}/\text{m}^3$ eingeführt. Der stabilisierende Diffusionsterm und der Konvektionsterm $\nabla \cdot (\rho\mathbf{v}\psi)$ werden implizit diskretisiert. Der Quellterm $m_\psi |\nabla\psi|$ sowie die zwei Terme $-\gamma\rho \nabla \cdot (\psi(1-\psi)\mathbf{n})$ und $\gamma\rho\varepsilon \Delta\psi$ werden explizit diskretisiert. Hierbei wird der kompressiv wirkende Term $\nabla \cdot (\psi(1-\psi)\mathbf{n})$ wie ein Flussterm mit der Geschwindigkeit $(1-\psi)\mathbf{n}$ diskretisiert, was eine konservative Diskretisierung bezüglich des ψ -Felds darstellt. Die Werte des Geschwindigkeitsfelds $(1-\psi)\mathbf{n}$ auf den Mittelpunkten der Zellflächen werden durch lineare Interpolation aus den Zellmittelpunktwerten bestimmt. Für den Parameter γ wird der feste Wert 2 verwendet.

Abfangen von unphysikalischen und numerisch ungünstigen Zuständen

Das vorgeschlagene Flammenmodell geht von einer gegebenen Verbrauchsgeschwindigkeit der limitierenden Spezies Y aus (I_Y) und bestimmt daraus die Bewegung der Flammenfront. Das lokale Verlöschen der Reaktionszone sowie das Verschmelzen mehrerer Reaktionszonen (Abweichung von der Topologie einer einzigen dünnen Reaktionsfläche) können nicht physikalisch korrekt beschrieben werden. Zur Erhöhung der Robustheit des implementierten Codes bei solchen Ereignissen sind einige Schalter bzw. Begrenzer im Code eingebaut.

Ein solcher Begrenzer, der direkt in das Feld der Phasen-Feld/Level-Set-Funktion eingreift, limitiert die Werte von ψ zwischen $-0,05$ und $1,05$ durch die Befehle $\max(\psi; -0,05)$ und $\min(\psi; 1,05)$. Außerdem werden die zulässigen Werte von m und m_ψ zwischen $0 \text{ kg}/(\text{m}^2\text{s})$ und $4 \text{ kg}/(\text{m}^2\text{s})$ sowie die Werte von F und F_{ext} zwischen -25 m/s und 25 m/s begrenzt. Die hier gewählten Grenzwerte für m , m_ψ , F und F_{ext} sind problemspezifisch und müssen gegebenenfalls angepasst werden (höhere Strömungsgeschwindigkeiten führen zu höheren Werten von F und F_{ext}).

Berechnung der Streckung und des Streckungsanteils in der Massenstromdichte

Die implementierten Formeln zur Berechnung der Flammenstreckung basieren auf der Beziehung (2.61) von Candel und Poinso [24]:

$$\chi = -\mathbf{n}\mathbf{n} : \nabla\mathbf{v} + \nabla \cdot \mathbf{v} - s\nabla \cdot \mathbf{n}. \quad (5.106)$$

Zur Berechnung des ersten Terms in (5.106) werden die Implementierungen elementarer Tensoroperationen in OpenFOAM® verwendet. Hierzu gehört das dyadische Produkt oder Tensorprodukt des Vektors \mathbf{n} mit sich selbst (*outer product*). Anschließend wird das Produkt der Tensoren 2. Stufe \mathbf{nn} und $\nabla\mathbf{v}$ durch die Summe ihrer 9 entsprechenden Komponentenprodukte ausgerechnet (*double inner product*) [144]. Der letzte Term in (5.106) wird mit dem erweiterten Krümmungsfeld c_{ext} berechnet:

$$-s\nabla \cdot \mathbf{n} \approx -s(-2c_{\text{ext}}) = -\left(\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} + \frac{1}{|\nabla\psi|} \frac{\partial\psi}{\partial t}\right) (-2c_{\text{ext}}) . \quad (5.107)$$

Die Verwendung des Krümmungsfeldes c_{ext} stellt eine leichte Inkonsistenz dar, weil zur Bestimmung der lokalen Streckungswerte auch die lokalen Krümmungswerte c verwendet werden sollten. Die Berechnung der Krümmung der Isoflächen von ψ beinhaltet die Bestimmung der zweiten räumlichen Ableitungen des ψ -Feldes durch explizite Diskretisierung der Operation $\nabla \cdot (\nabla\psi/|\nabla\psi|)$. In Bereichen niedriger Auflösung kann diese Berechnung stark oszillierende Werte des Krümmungsfeldes liefern. Bei stark verformten Reaktionszonen, die einen Krümmungsradius besitzen der in der Größenordnung ihrer Dicke liegt, kommt erschwerend hinzu, dass die Krümmung am Krümmungsmittelpunkt singulär wird. Das Feld c_{ext} ist das Ergebnis eines diffusiven Prozesses und sollte somit frei von räumlichen Oszillationen kleiner Wellenlänge (in der Größenordnung der Zellgröße oder Gitterweite) sein. In dieser Arbeit wird die Inkonsistenz der Verwendung von c_{ext} zur Streckungsberechnung in Kauf genommen. Aus der DNS-Analyse in 6.1 geht hervor, dass in der vorgeschlagenen Formulierung der Massenstromdichte der explizite Beitrag durch den Streckungsterm klein im Vergleich zu den Termen der Normaldiffusion und des chemischen Verbrauchs ist (siehe Abb. 6.14).

Der Ausdruck des Streckungsbeitrags zur Massenstromdichte in (5.25) ist für die Isofläche $x^1 = 0$ bzw. $\psi = 0,5$ formuliert. In der Implementierung in OpenFOAM® wird folgende Feldformulierung des gesamten Streckungsbeitrags für allgemeine Isoflächen von x^1 bzw. ψ gewählt:

$$\frac{1}{2}S_{\text{corr}}\rho\chi \left(\frac{d_\psi}{2} - x^1\right) , \quad (5.108)$$

mit $S_{\text{corr}} = 0,5$. Hierbei werden lokale Werte für ρ und χ eingesetzt. Die lokalen Werte von Y und \sqrt{g} kürzen sich heraus (vergleiche Formel (4.15) und (5.25)). Der Faktor $d_\psi/2 - x^1$ stellt die restliche normale räumliche Ausdehnung der modellierten Reaktionszone in Richtung der Rauchgase dar, ausgehend von einer allgemeinen Position x^1 bzw. ψ . Wie in 5.2.5 beschrieben ist, besteht die Annahme in der hier implementierten Formulierung darin, dass der Integrand des Streckungsintegrals von jeder Position x^1 aus in Richtung der Rauchgase als lineares und auf Null zugehendes Profil approximiert werden kann. Die Abweichung des realen Profils zum angenommenen linearen Verlauf wird durch den Faktor S_{corr} berücksichtigt, dessen Wert aus der DNS-Analyse in 6.1 stammt.

Volumenelement des krummlinigen Koordinatensystems

Das Volumenelement \sqrt{g} wird mit dem erweiterten Krümmungsfeld berechnet:

$$\sqrt{g} = 1 - 2c_{\text{ext}}x^1 , \quad (5.109)$$

mit x^1 aus (5.15).

Normaldiffusionsanteil der Massenstromdichte

Die normale Ableitung $\partial Y/\partial x^1$ in (5.23) wird über die Richtungsableitung

$$\partial Y/\partial x^1 = \nabla Y \cdot \mathbf{n} \quad (5.110)$$

implementiert, mit $\mathbf{n} = \nabla x^1/|\nabla x^1| = \nabla \psi/|\nabla \psi|$. Der Faktor \sqrt{g} hebt sich bei der Formulierung des Anteils der Normaldiffusion an der Massenstromdichte auf (siehe (4.15) und (5.23)).

Quellterme von Y und T

Der Quellterm in der Transportgleichung (5.93) der limitierenden Spezies wird folgendermaßen formuliert:

$$\omega_Y = \min \left(I_Y |\nabla \psi|, 0 \text{ kg m}^{-2} \text{ s}^{-1} \right), \quad (5.111)$$

wobei die min-Funktion verhindert, dass positive Werte des Quellterms aufgrund einer ungenauen Berechnung des Gradienten von ψ in die Transportgleichung eingehen. Der Quellterm in der Temperaturgleichung (5.95) wird anhand des Quellterms ω_Y formuliert:

$$\omega_T = -\frac{\omega_Y H_f}{M_Y \nu_Y}, \quad (5.112)$$

mit der molaren Masse M_Y der limitierenden Spezies, dem molaren Heizwert H_f des Brennstoffs (f steht für *fuel*) und dem Koeffizienten ν_Y der limitierenden Spezies. Der Koeffizient ν_Y gibt die Stoffmenge der limitierenden Spezies an, die bezogen auf die Stoffmenge des Brennstoffs verbraucht wird. Der molare Heizwert H_f von Methan beträgt 802,3 kJ/mol und der von Wasserstoff 241,83 kJ/mol [5].

5.6.4 Ablauf eines Zeitschritts, Kopplung der Erhaltungsgleichungen

Bei der Implementierung des Flammenmodells in OpenFOAM® ist das Strömungsfeld (Strömungsgeschwindigkeit \mathbf{v} und hydrodynamischer Druckanteil p in der Impulserhaltungsgleichung) über die Stoffgrößen Dichte ρ und dynamische Viskosität μ mit dem Temperaturfeld T und somit auch indirekt mit dem Massenbruchfeld Y der limitierenden Spezies und der Phasen-Feld/Level-Set-Funktion ψ gekoppelt. In dieser Arbeit werden die Transportgleichungen innerhalb eines Zeitschritts Δt sequentiell in der folgenden Reihenfolge gelöst: Impulserhaltung, Spezies- und Temperaturtransport, Druckgleichung (PISO) und Phasen-Feld/Level-Set-Gleichung. Die Lösung der Impulserhaltungsgleichung stellt ein *momentum predictor* Schritt dar. Bei der darauffolgenden Lösung der Spezies- und Temperaturtransportgleichung geht das aus der Impulserhaltungsgleichung neu ermittelte, nur die Impulsbilanz erfüllende Geschwindigkeitsfeld, nicht ein. Der Fluss der die Speziesfelder und das Temperaturfeld konvektiv transportiert, resultiert aus dem PISO-Verfahren des vorherigen Zeitschritts und erfüllt die Kontinuitätsbedingung.

In dieser Arbeit wird somit beim Lösen einer diskretisierten Gleichung einer Variable, für die restlichen Größen (z.B. die in Stoffgrößen oder Quellterme eingehen) deren jeweils aktuellster Zustand benutzt. Die Kopplung zwischen den Gleichungen ist somit nicht vollständig aufgelöst. Da jedoch instationäre Vorgänge zeitgenau simuliert werden, sind die gewählten Zeitschritte kleiner als die charakteristischen Zeitskalen der Änderung der einzelnen Felder. Aus diesem Grund stellt die Vernachlässigung der vollen Kopplung zwischen den einzelnen Gleichungen eine zulässige Vereinfachung dar. Die zeitgenauen Simulationen in Kapitel 7 bestätigen diese Annahme.

5.6.5 Wahl des Diskretisierungsverfahrens

Für alle durchgeführten Simulationen werden die Diskretisierungsverfahren verwendet, die in diesem Abschnitt angegeben sind. Falls davon abweichende Verfahren eingesetzt werden, wird bei der Diskussion der jeweiligen Ergebnisse darauf hingewiesen. Bei der räumlichen Diskretisierung mit der Finite-Volumen-Methode wird das lineare Interpolationsverfahren (5.68) zur Bestimmung der Zellflächengrößen verwendet. Es ist das einfachste Verfahren, das eine quadratische Fehlerordnung besitzt. Außerdem erzeugt es nicht die hohe numerische Diffusion des *Upwind*-Verfahrens (5.69). Aufgrund seiner einfachen und natürlichen Konstruktion wird das lineare Interpolationsverfahren oft verwendet [53]. Es kann somit davon ausgegangen werden, dass die in dieser Arbeit entwickelte und angewandte numerische Formulierung des integralen Flammenmodells in der Regel auch in eine Vielzahl anderer Codes oder Programmpakete implementiert werden kann².

Für die Approximation des instationären Terms in den Erhaltungsgleichungen wird die Rückwärts-Formulierung (5.73) mit 3 Zeitschichten verwendet. Zusammen mit einer impliziten zeitlichen Diskretisierung resultiert eine quadratische Fehlerordnung, die konsistent mit der Ordnung der räumlichen Diskretisierung ist.

Bei den hier durchgeführten instationären Simulationen wird der Zeitschritt klein genug gewählt, um den instationären Verlauf der Lösung zeitgenau simulieren zu können. Obwohl bei diesen kleinen Zeitschritten die lokalen Courant-Zahlen in der Regel unterhalb von 1 liegen, kann es lokal z.B. durch kurzzeitig erhöhte Strömungsgeschwindigkeiten, zu höheren Courant-Zahlen kommen. Um daraus resultierende numerische Instabilitäten zu vermeiden wird in dieser Arbeit für alle gelösten Transportgleichungen die implizite zeitliche Diskretisierung (5.81) verwendet. Bei den kleinen Zeitschrittweiten zur Auflösung der instationären Entwicklung der Lösung bleibt die Anzahl der erforderlichen Iterationen zur Lösung der Gleichungssysteme relativ gering. Die Lösung des Gleichungssystems für das Druckfeld im PISO-Verfahren erfordert die höchste Anzahl an Iterationen.

Beim Verfahren zur normalen Erweiterung des Krümmungsfelds (und gegebenenfalls des Arguments von I_Y) wird das Diffusionszeitschrittkriterium (5.84) zwangsläufig verletzt. Der diffusive Transport muss innerhalb eines Zeitschritts über eine Distanz erfolgen, die ein Vielfaches der Zellgröße oder Gitterweite ist. Für diese Transportgleichung ist somit eine implizite zeitliche Diskretisierung notwendig.

²Eine Implementierung der Phasen-Feld/Level-Set-Gleichung (in etwas abweichender Form als hier beschrieben) in den akademischen CFD-Code LESOCC2C (Prof. Jochen Fröhlich, Institut für Strömungsmechanik, Technische Universität Dresden) hat im Rahmen des Sonderforschungsbereichs SFB 606 in zwei betreuten Diplomarbeiten [54], [78] stattgefunden.

6 Diskussion des integralen Modells

In diesem Kapitel wird der integrale Modellierungsansatz sowohl von seiner physikalisch/theoretischen als auch von der numerischen Seite aus untersucht und diskutiert.

Dazu werden die Ergebnisse einer direkten numerischen Simulation einer vorgemischten Methan/Luft-Flamme in einem turbulenten Strömungsfeld analysiert. Die Verbrennung findet im Regime der dünnen Reaktionszonen statt. Diese Untersuchung soll die Genauigkeit der integralen Formel für die Massenstromdichte bewerten.

In einer nächsten Untersuchung werden eindimensionale Methan/Luft-Flammen unter Berücksichtigung eines detaillierten chemischen Mechanismus mit dem Programm INSFLA simuliert. Mit den Ergebnissen wird die Modellierung der Massenstromdichte in der Reaktionszone der Flamme motiviert.

Im letzten Abschnitt dieses Kapitels wird der hier vorgestellte Modellierungsansatz mit existierenden Modellen und Ansätzen verglichen.

6.1 Analyse einer Direkten Numerischen Simulation einer turbulenten Flamme

Die Gültigkeit und Genauigkeit der Formel (4.15) für die Massenstromdichte wird anhand der Analyse der Daten einer direkten numerischen Simulation untersucht. Dabei soll geklärt werden, welche Terme für eine ausreichend genaue Vorhersage der Massenstromdichte wichtig sind. Im Folgenden wird für Aussagen und Bezeichnungen, die sich auf die direkte numerische Simulation beziehen, der Begriff DNS verwendet. Aus den Daten der DNS werden die Größen, die in die Berechnung der Massenstromdichte mit der integralen Beziehung (4.15) eingehen, auf Linien (Schnitte) extrahiert, die normal zur Reaktionszone liegen. Die damit berechnete Massenstromdichte wird mit der kinematischen Massenstromdichte verglichen, die aus der Kinematik einer Fläche innerhalb der Reaktionszone der simulierten Flamme resultiert.

Die DNS-Daten stammen von der Abteilung und Forschungsgruppe Verbrennungstechnologie der technischen Universität Eindhoven unter der Leitung von Professor Dr. Philip de Goeij. Die Daten wurden von Dr. Jeroen van Oijen zur Verfügung gestellt. In [130] wird der Datensatz zur Untersuchung von Effekten präferentieller Diffusion in turbulenten vorgemischten Flammen verwendet. In der Dissertation von Delhaye [43] werden anhand der DNS-Daten die Größenordnungen der Beiträge aus Chemie, Transport in Normalenrichtung eines Flamelets, instationärer Term, Krümmung, Streckung und Diffusion in Tangentialrichtung untersucht. Insbesondere wird die Berücksichtigung des instationären Terms im Kontext der Flamelet-Generated Manifolds [132] untersucht.

6.1.1 Setup der Simulation

In der DNS wird die Interaktion einer vorgemischten mageren Methan/Luft-Flamme mit einem turbulenten Strömungsfeld simuliert. Die Simulation ist zweidimensional und erfolgt auf einem quadratischen Rechengebiet der Kantenlänge 12 mm. Als Anfangsbedingung liegt eine zylinderförmige Flamme vor, die das Rauchgasgebiet umschließt. Das Strömungsfeld ist ein homogenes und isotropes turbulentes Geschwindigkeitsfeld. Das Äquivalenzverhältnis Φ im unverbrannten Gemisch beträgt den Wert $\Phi = 0,7$ und die Frischgastemperatur beträgt $T = 300$ K. Im Laufe der Simulation interagiert die Flamme mit dem turbulenten Strömungsfeld. Der Turbulenzgrad des Strömungsfeldes wird während der Simulation nicht künstlich von außen beeinflusst. Flamme und Strömungsfeld entwickeln sich frei nach den zugrundeliegenden Erhaltungsgleichungen. Die Chemie der Methanverbrennung ist in der DNS detailliert berücksichtigt. Der verwendete Reaktionsmechanismus ist der GRI-Mech 3.0 Mechanismus [122] des *Gas Research Institute*, unter Vernachlässigung chemischer Reaktionen von Stickstoff [131], [43]. Die Speziesdiffusion wird über einen Fickschen Ansatz mit konstanten, aber voneinander unterschiedlichen Lewis-Zahlen für die einzelnen Spezies modelliert. Das Rechengitter der DNS ist ein kartesisches Gitter mit 449×449 Gitterpunkten. Details und weiterführende Referenzen zu den Diskretisierungsverfahren und der Implementierung der Randbedingungen können in [65], [7] und [43] gefunden werden.

Die Turbulenzintensität und das integrale Längenmaß sind gegeben durch $u'/s_L = 4$ und $l_I/l_F = 2$ [130], [43]. Die turbulente Reynolds-Zahl beträgt $Re_T = (u'l_I)/(s_L l_F) = 8$ und der expandierende Flammenkern brennt demzufolge im Regime der dünnen Reaktionszonen [130], [106]. Die simulierte physikalische Zeit, in der die Interaktion zwischen der Vormischflamme und dem turbulenten Strömungsfeld stattfindet, beträgt

$t_{\text{sim}} = 0,735 \text{ ms}$.

6.1.2 Auswahl eines Auswertungszeitfensters

Im Folgenden wird untersucht, ab welchem Zeitpunkt die Auswertung der DNS erfolgen kann. Dazu müssen charakteristische Größen der Flamme bestimmt werden. Als Referenz- und Skalierungsgrößen bei der Analyse werden die Eigenschaften einer planaren ungestreckten vorgemischten Flamme unter denselben Frischgasbedingungen wie in der DNS ausgewertet. Aus diesen Daten (Flammenprofile erhalten von Dr. Jeroen van Oijen [131]) folgt eine laminare Flammengeschwindigkeit $s_L = 0,19 \text{ m/s}$, eine Flammendicke $l_F = 0,66 \text{ mm}$ nach (2.43) und daraus eine charakteristische Flammenzeit $t_F = l_F/s_L = 3,5 \text{ ms}$. Die gesamte Simulationszeit $t_{\text{sim}} = 0,735 \text{ ms}$ ist somit deutlich kürzer als die charakteristische Flammenzeit t_F . Die aus dem Turbulenzgrad und der integralen Längenskala abgeschätzte Wirbelumlaufzeit (*eddy turnover time*) beträgt $t_{\text{eddy}} = l_I/u' = 1,7 \text{ ms}$. Die Zeit in der die Wechselwirkung der Flamme mit dem Strömungsfeld simuliert wird, ist somit kürzer als die charakteristische Zeit der Strömung welche mit der Bewegung der energietragenden Wirbel des integralen Längemaßes l_I verknüpft ist. Die DNS-Daten eignen sich somit nicht für eine von den Anfangsbedingungen unabhängige Untersuchung der Ausbreitung der gesamten Flammenfront in einem turbulenten Strömungsfeld. Die DNS-Daten sind auch nicht dazu geeignet, statistische Auswertungen der mittleren turbulenten Flammenfront durchzuführen (z.B. um eine turbulente Flammengeschwindigkeit zu ermitteln) oder um Schließungsterme bei der momentenbasierten Modellierung turbulenter vorgemischter Verbrennung zu untersuchen. Aufgrund der kurzen simulierten Zeitspanne hängt die Statistik noch von den gewählten Anfangsbedingungen der Simulation ab.

In der vorliegenden Arbeit wird jedoch eine deterministische Auswertung der Reaktionszone durchgeführt. Die Berechnung der Massenstromdichte erfolgt zu jedem Zeitpunkt anhand der vorliegenden Felder von Brennstoff, Dichte und Geschwindigkeit. Diese Felder entwickeln sich in der simulierten Zeitspanne als Lösung der differentiellen Erhaltungsgleichungen. Dementsprechend eignen sich die DNS-Daten prinzipiell für die hier vorgestellten Untersuchungen. Die Analyse darf jedoch erst dann begonnen werden, wenn die Felder in der Reaktionszone von den Anfangsbedingungen unabhängig sind.

Um ein geeignetes Auswertungszeitfenster zu bestimmen, wird die charakteristische Durchströmungszeit $t_\delta = l_\delta/s_{fc}$ mit der Dicke l_δ der Brennstoffabbauzone und der charakteristischen Brenngeschwindigkeit s_{fc} in der Brennstoffabbauzone abgeschätzt (fc steht für *fuel consumption layer*). Die Profile der planaren Referenzflamme [131] enthalten keine Quellterme. Deswegen wird die Dicke der Brennstoffabbauzone anhand der Zylinderflamme zum Anfangszeitpunkt der DNS bestimmt und beträgt $l_\delta = 0,447 \text{ mm}$. Der Wert l_δ wird als Basis eines gleichschenkligen Dreiecks ermittelt, der das radiale Profil des Quellterms ω_Y approximiert. Für die limitierende Spezies Y wird der Brennstoff Methan verwendet. Die Spitze des Dreiecks besitzt eine Höhe die dem maximalen Brennstoffabbau entspricht und sein Flächeninhalt ist gleich dem numerisch ermittelten Integral über ω_Y . Durch die Krümmung der Zylinderflamme (und der Reaktionszone) entspricht die somit ermittelte Dicke l_δ nicht genau der Dicke im Fall der planaren Flamme. Aufgrund des großen Krümmungsradius der Zylinderflamme (maximaler Brennstoffabbau bei einem Radius von 3 mm) relativ zur Dicke l_F der planaren Referenzflamme, ist diese Abweichung jedoch gering und für die hier vorgenommene Abschätzung nicht relevant. Der Massenbruch des Brennstoffs an der Stelle des stärksten Brennstoffver-

brauchs in der Zylinderflamme wird mit $Y_{fc} = Y_0$ bezeichnet. Die Brenngeschwindigkeit in der Brennstoffabbauzone wird aus den Größen s_L und ρ_u der planaren Referenzflamme über die integrale Formulierung der Massenerhaltung $s_{fc} = s_L \rho_u / \rho_{fc} = 0,957 \text{ m/s}$ bestimmt, wobei ρ_{fc} die Dichte der planaren Referenzflamme an der Stelle ist, an der $Y = Y_{fc}$ gilt. Für die charakteristische Durchströmungszeit der Brennstoffabbauzone folgt $t_\delta = 0,47 \text{ ms}$.

Eine andere charakteristische Zeit der Brennstoffabbauzone kann als Zeitskala $t_{\delta,\text{diff}}$ diffusiver Prozesse interpretiert werden. Bei gegebener Diffusivität D und Längenskala l_δ kann die Zeitskala durch die Beziehung (siehe Diskussion in 5.2.7)

$$t_{\delta,\text{diff}} = \frac{l_\delta^2}{D} \quad (6.1)$$

abgeschätzt werden. Als Diffusivität wird hier die Temperaturleitfähigkeit $\lambda/(\rho c_p)$ verwendet (berechnet wie in der DNS). Für die Temperatur und die Dichte werden die Werte an der Stelle der planaren Referenzflamme eingesetzt, an der $Y = Y_{fc}$ gilt. Es ergibt sich eine Zeitskala $t_{\delta,\text{diff}} = 0,58 \text{ ms}$. Für Spezies mit Lewis-Zahlen kleiner als 1 wird die abgeschätzte diffusive Zeitskala kleiner sein. Eine mit der kinematischen Zähigkeit $\nu = \mu/\rho$ (mit μ nach der Sutherland-Formel) und den Referenzwerten der planaren Flamme) abgeschätzte Zeitskala liefert ein längere Zeitspanne von $t_{\delta,\text{diff}} = 0,87 \text{ ms}$. Da in dieser Analyse jedoch die Effekte der Strömung auf die Vorgänge in der Brennstoffabbauzone untersucht werden sollen (und nicht der umgekehrte Fall), kann die Analyse vor Ablauf der mit der Zähigkeiten gebildeten Zeitskala beginnen. Aus der charakteristischen Durchströmungszeit der Brennstoffabbauzone und der diffusiven Zeitskala folgt somit, dass die Analyse erst ab $t = 0,58 \text{ ms}$ begonnen werden kann.

In den Abbildungen 6.1, 6.2 und 6.3 sind das Temperaturfeld, das Geschwindigkeitsfeld sowie das Quelltermfeld des Brennstoffs zum selben Zeitpunkt dargestellt. In den Abbildungen 6.1 und 6.3 ist in der oberen linken Ecke der Darstellungen eine starke Auffaltung der Flamme zu erkennen. Im weiteren Verlauf der Simulation kommt es in diesem Bereich zu einer Verschmelzung der zwei aufeinander brennenden Flammenfronten, wobei sich ein kleiner Ballen verbrannten Gemischs in Richtung der Frischgase ablöst. Bei diesem Vorgang tritt lokal ein Löschvorgang auf. Die Brennstoffabbauzone ist nicht mehr eine intakte dünne Zone im Raum und die Beschreibung im Rahmen des Regimes der dünnen Reaktionszonen verliert ihre Gültigkeit. Der Löschvorgang findet im Zeitraum $t \approx 0,495 \text{ ms}$ bis $t \approx 0,555 \text{ ms}$ statt. Nach dem Löschvorgang ist die Brennstoffabbauzone wieder geschlossen, wenn auch mit lokal geringerer Quelltermstärke.

Die Analyse der DNS-Daten wird ab dem Zeitpunkt $t = 0,585 \text{ ms}$ begonnen und bis zum Endzeitpunkt $t = 0,735 \text{ ms}$ durchgeführt. Zur numerischen Berechnung von Ableitungen werden die Finite-Differenzen-Formeln aus [85] für äquidistante Stützstellen verwendet. Für eine Funktion $y = f(x)$, die über Datenpunkte (x_k, y_k) mit $k = 1 \dots N$ gegeben ist, wird für die Datenpunkte von $k = 3$ bis $k = N - 2$ ein symmetrischer Stern (*stencil*) benutzt. Für die Datenpunkte neben den Rändern des Datensatzes (für $k = 2$ und $k = N - 1$) ist der Stern asymmetrisch und an den Rändern selbst (für $k = 1$ und $k = N$) ist er einseitig. In der Analyse werden nur die symmetrischen Differenzenformeln verwendet. Von den $k = 1 \dots N$ gewählten Zeitschichten der DNS werden nur die Schichten von $k = 3 \dots N - 2$ analysiert. Somit ist gewährleistet, dass alle numerisch berechneten Ableitungen mit demselben Stern gebildet werden. Die Randschichten $k = 1, 2, N - 1, N$ gehen nur in die Berechnung der Zeitableitung für $k = 3$ und $k = N - 2$ ein. Der Zeitpunkt, ab dem die Berechnung von Massenstromdichten

erfolgt, liegt also zwei Zeitschichten hinter dem Beginn des Analysefensters und beträgt $t = 0,615$ ms. Die Abbildungen 6.4, 6.5 und 6.6 zeigen das Quelltermfeld des Brennstoffs, das Brennstofffeld und das Temperaturfeld zu diesem Zeitpunkt.

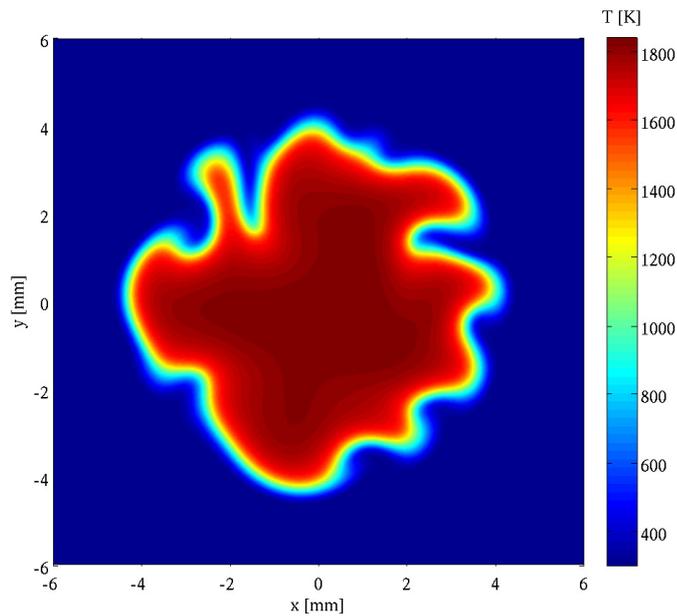


Abbildung 6.1: Temperaturfeld nach einer simulierten Zeitspanne $\Delta t_{\text{sim}} = 0,45$ ms = $0,26 t_{\text{eddy}}$.

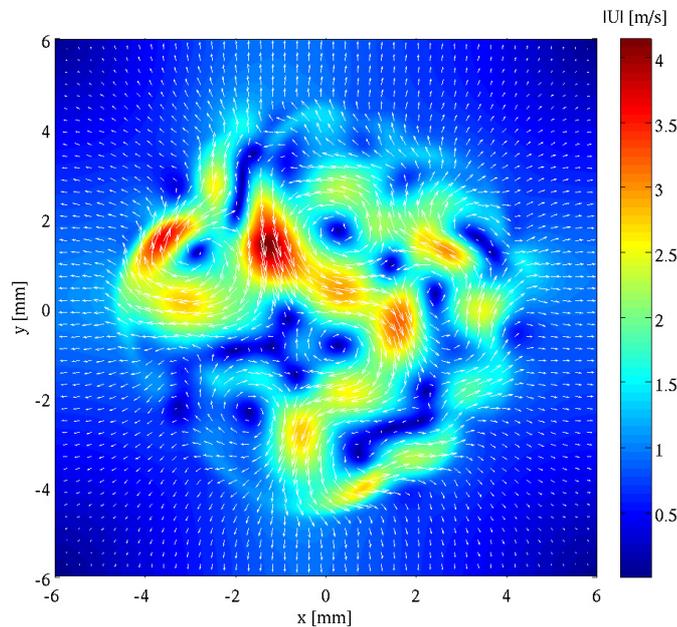


Abbildung 6.2: Betrag der Strömungsgeschwindigkeit mit überlagerten Geschwindigkeitsvektoren nach einer simulierten Zeitspanne $\Delta t_{\text{sim}} = 0,45$ ms = $0,26 t_{\text{eddy}}$ (Pfeile sind nur an jedem 10. Gitterpunkt dargestellt).

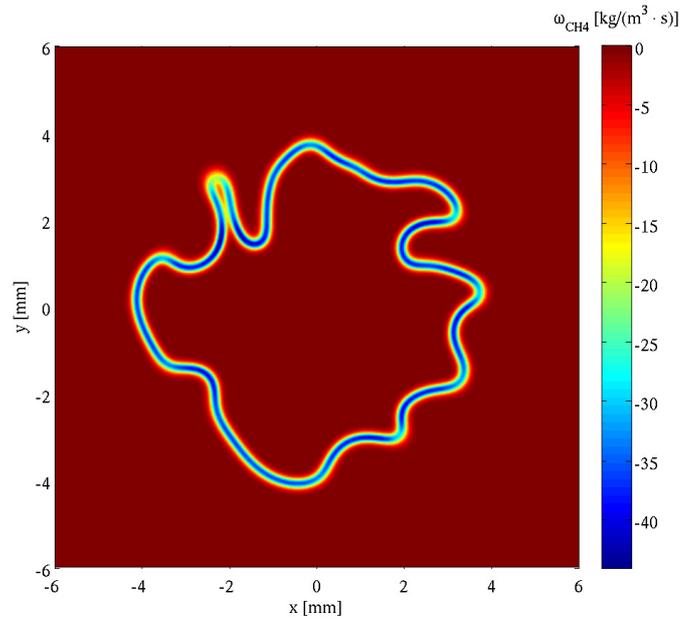


Abbildung 6.3: Feld des Quellterms ω_{CH_4} des Brennstoffs nach einer simulierten Zeitspanne $\Delta t_{\text{sim}} = 0,45 \text{ ms} = 0,26 t_{\text{eddy}}$.

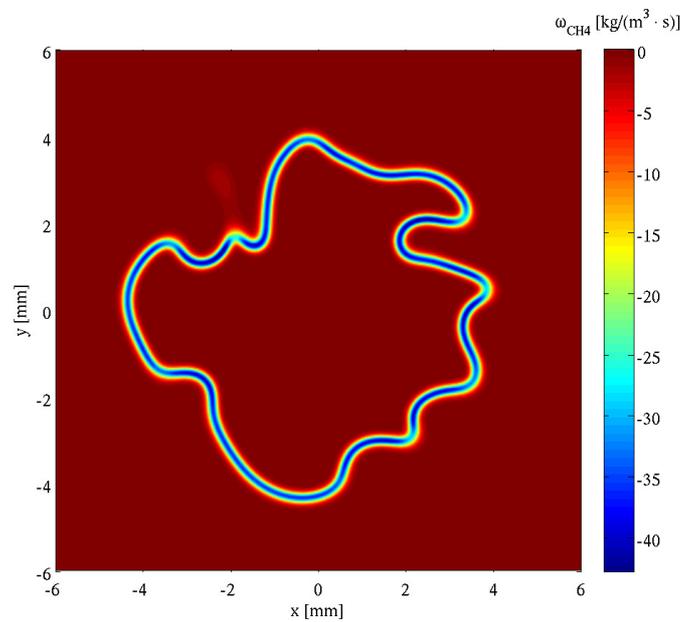


Abbildung 6.4: Feld des Quellterms ω_{CH_4} des Brennstoffs nach einer simulierten Zeitspanne $\Delta t_{\text{sim}} = 0,615 \text{ ms} = 0,36 t_{\text{eddy}}$.

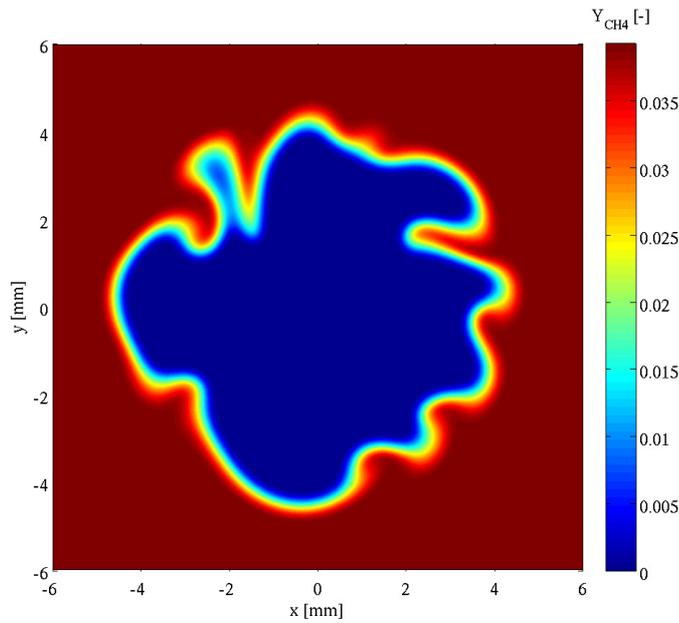


Abbildung 6.5: Feld des Massenbruchs Y_{CH_4} nach einer simulierten Zeitspanne $\Delta t_{\text{sim}} = 0,615 \text{ ms} = 0,36 t_{\text{eddy}}$.

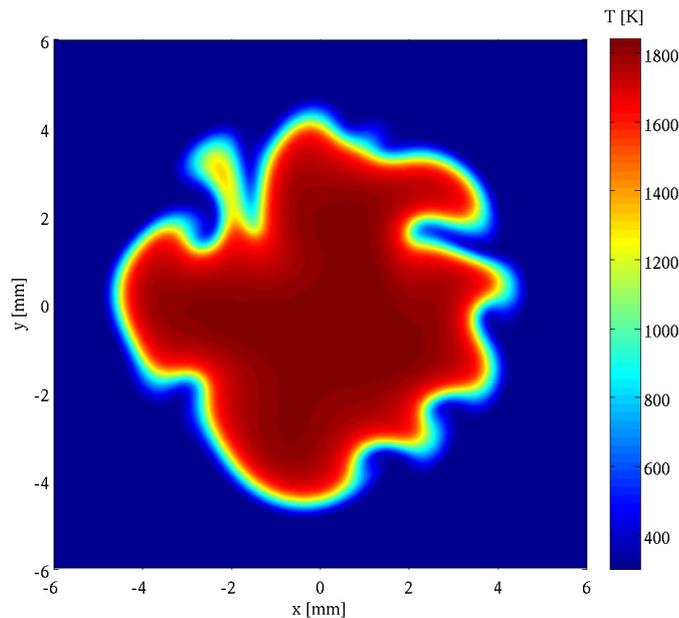


Abbildung 6.6: Temperaturfeld nach einer simulierten Zeitspanne $\Delta t_{\text{sim}} = 0,615 \text{ ms} = 0,36 t_{\text{eddy}}$.

6.1.3 Durchführung der Analyse

Die Analyse wird mit der Software Matlab® durchgeführt [94]. Die Massenstromdichten aus der Kinematik von Isoflächen $Y = Y_{\text{fc}}$ werden mit den Massenstromdichten aus einer integralen Formulierung der Brennstoffabbauzone verglichen. Die Massenstromdichte durch eine Isofläche $Y = Y_{\text{fc}}$ kann direkt aus den DNS-Daten zu jedem Zeitpunkt

ermittelt werden (aus dem Strömungsgeschwindigkeitsfeld und dem Skalarfeld Y). Aus der in 2.3.2 eingeführten Beziehung (2.52) folgt nach Multiplikation mit der Dichte ρ (wobei im Gegensatz zu (2.51) für Y gilt: $\mathbf{n} = -\nabla Y/|\nabla Y|$) das Massenstromdichtefeld:

$$m_a = -\frac{\rho \left(\frac{\partial Y}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla Y \right)}{|\nabla Y|}. \quad (6.2)$$

(6.2) ist eine Feldgleichung, mit der die Massenstromdichte durch Isoflächen des Skalarfelds Y auf dem gesamten Rechengebiet bestimmt werden kann. Hierzu müssen an jedem Gitterpunkt der Gradient ∇Y und die zeitliche Ableitung $\partial Y/\partial t$ berechnet werden. Eine andere Formel für die Massenstromdichte kann gewonnen werden, wenn $\partial Y/\partial t + \mathbf{v} \cdot \nabla Y$ in (6.2) mit Hilfe der Transportgleichung für Y ausgedrückt wird, die in der Simulation gelöst wird [48]:

$$m_b = -\frac{\frac{1}{Le_Y} \nabla \cdot \left(\frac{\lambda}{c_p} \nabla Y \right) + \omega_Y}{|\nabla Y|}. \quad (6.3)$$

Die Beziehung (6.3) wird in einer Form für die Brenngeschwindigkeit (mit Faktor $1/\rho$) in zahlreichen Analysen oder Herleitungen verwendet, z.B. in [48], [49] oder in [106] (anhand des Temperaturfelds).

Theoretisch liefern die Ausdrücke (6.2) und (6.3) dieselben Werte für die Massenstromdichte. Praktisch können sich die berechneten Werte jedoch unterscheiden. (6.2) bestimmt das Massenstromdichtefeld direkt aus der kinematischen Beziehung (2.52). (6.3) basiert hingegen darauf, dass die substantielle Ableitung von Y gleich den Beiträgen aus Diffusionsterm und Quellterm (mit dem Faktor $1/\rho$) in der gelösten Transportgleichung für Y ist. Dies hängt jedoch von der Genauigkeit des eingesetzten numerischen Verfahrens zur Lösung der Transportgleichungen ab. Bei einer DNS ist die räumliche und zeitliche Auflösung in der Regel sehr hoch. Es kann also davon ausgegangen werden, dass es von der Genauigkeit der DNS-Datenbasis her keinen Unterschied macht, ob das Massenstromdichtefeld mit (6.2) oder mit (6.3) berechnet wird.

Für die Genauigkeit der Auswertung kann es jedoch einen Unterschied geben zwischen (6.2) und (6.3). Die verwendeten Finite-Differenzen-Formeln der ersten und zweiten Ableitung besitzen auf einem äquidistanten Gitter einen Abbruchfehler 4. Ordnung bezüglich der Gitterweite (mit Ausnahme der 2 ersten und 2 letzten Stützpunkte am Gitterrand, an denen der Abbruchfehler für die zweite Ableitung 3. Ordnung ist). Für die Auswertung mit (6.3) müssen nur räumliche Ableitungen approximiert werden, dafür jedoch eine zweite Ableitung aufgrund des Diffusionsterms. Bei Verwendung der Formel (6.2) bestimmt die zeitliche Auflösung der Datenbasis die Genauigkeit der Approximation der Zeitableitung. Die Lösungsfelder liegen mit einer zeitlichen Auflösung von 0,015 ms vor. Diese Zeitspanne ist wesentlich kleiner als die abgeschätzten Zeitskalen t_δ (in 6.1.2) der Reaktionszone. In der folgenden Auswertung wird deshalb die Formel (6.2) verwendet.

Die Auswertung der Massenstromdichte erfolgt auf der Isofläche $Y = Y_0$, die in der Brennstoffabbauzone liegt. Der Wert $Y_0 = 0,003179$ wird so gewählt, dass er dem Massenbruch von CH_4 an der Position maximalen Brennstoffverbrauchs in der Zylinderflamme bei Simulationsbeginn der DNS entspricht. Die Massenstromdichten nach (6.2) und (6.3) werden auf jedem Gitterpunkt bestimmt. Anschließend werden die Werte auf die Koordinaten der Kontur $Y = Y_0$ interpoliert. Für einen festen Zeitpunkt liegen somit Werte für m_a und m_b an jedem Punkt im Raum vor, an dem die Kontur $Y = Y_0$ die

Gitterlinien des DNS-Rechennetzes schneidet. Die somit ermittelten Massenstromdichten stellen die Referenzdaten dar, mit denen die Auswertungen der Massenstromdichte in integraler Formulierung (4.15) verglichen werden.

Zur Auswertung der integralen Formeln müssen für jeden Zeitpunkt Schnitte normal zur Isofläche $Y = Y_0$ gelegt werden. Die Schnitte werden auf jedem Punkt (x_k, y_k) der Isofläche konstruiert, an dem auch die Massenstromdichten m_a und m_b ermittelt wurden. Auf dem jeweiligen Schnitt stellt der Punkt (x_k, y_k) den Ursprung $x^1 = 0$ der x^1 -Koordinate dar. Aufgrund der Festlegung $g_{11} = g^{11} = 1$ entspricht die x^1 -Koordinate auf dem Schnitt dem vorzeichenbehafteten Abstand (*signed distance*) zum Punkt (x_k, y_k) , wobei die x^1 -Werte positiv in Richtung des verbrannten Gemischs sind. Die Inkremente in x^1 auf einem Schnitt werden mit $\Delta x^1 = 0,02$ mm gewählt. Die Gitterweite des DNS-Rechengitters beträgt $\Delta x = \Delta y = 0,02679$ mm. Die numerische Integration auf den Schnitten erfolgt mit der Trapezformel. Auf den Punkten entlang eines Schnitts werden sämtliche benötigte Felddaten ausgehend vom DNS-Datensatz interpoliert. Hierzu gehören neben den Werten von Strömungsgeschwindigkeit \mathbf{v} , Massenbruch Y_{CH_4} , Temperatur T und Dichte ρ , auch die lokale Krümmung $2c$ und Streckung χ der Isofläche $Y = Y_0$.

Die Analyse der DNS soll repräsentativ für turbulente vorgemischte Flammen im Regime der dünnen Reaktionszonen sein. In diesem Regime bleibt die Reaktionszone der Flamme intakt und reagiert auf Störungen in der Vorheizzone und im Rauchgasgebiet. Das integrale Längenmaß l_I ist von der Größenordnung der Flammendicke l_F . Die Krümmungsradien der Kontur $Y = Y_0$ in der Brennstoffabbauzone sollten maximal in der Größenordnung von l_δ sein. Wird dieses physikalische Betrachtungsbild auf die Analyse mit den normalen Schnitten übertragen, dann bedeutet dies, dass die Schnitte, die das Profil des chemischen Quellterms vollständig enthalten, sich nicht schneiden dürfen. Um die integrale Beziehung (4.15) der Massenstromdichte anhand der DNS Daten überprüfen zu können, muss für jeden Schnitt die numerische Bestimmung von I_Y eindeutig durchführbar sein. Bei zu starker Auffaltung der Flammenfront kann das Ende eines Schnitts in der Vorheiz- oder Reaktionszone eines anderen Abschnitts der Flammenfront liegen. In dem Fall ist kein eindeutiger integraler Verbrauch I_Y mehr für den Schnitt definierbar. Solche Schnitte werden hier bei der Analyse ausgeschlossen. Folgende Kriterien werden zur Auswahl eines Schnitts für die Analyse festgelegt: 1) Abnahme der Quelltermstärke von ω_Y an den Rändern des Schnittes mit zunehmendem Abstand $|x^1|$, 2) der Betrag der Quelltermstärke von ω_Y an den Rändern des Schnitts muss kleiner sein als 1% des maximalen Betrags der Quelltermstärke der Zylinderflamme zu Beginn der DNS. In Abb. 6.7 sind die Schnitte für den letzten analysierten Zeitpunkt der DNS dargestellt.

Der Diffusionsfluss von Y in (4.15) wird wie im Diffusionsmodell der DNS folgendermaßen ausgedrückt:

$$\rho V_Y^1 Y = -\frac{1}{\text{Le}_Y} \frac{\lambda}{c_p} \frac{\partial Y}{\partial x^1}. \quad (6.4)$$

Aufgrund der Orthogonalität der Basisvektoren \mathbf{g}_α und \mathbf{g}^α bezüglich $\mathbf{g}_1 = \mathbf{g}^1$ trägt nur die Ableitung von Y nach x^1 zur Komponente des Gradienten von Y normal zu $x^1 = \text{konst.}$ bei. Außerdem ist durch die Festlegung $g_{11} = g^{11} = 1$ die partielle Ableitung nach x^1 in (6.4) gleich der Richtungsableitung $\nabla Y \cdot \mathbf{n}$ mit dem normierten Normalenvektor $\mathbf{n} = -\nabla Y / |\nabla Y|$, der die Rolle von $\mathbf{g}_1 = \mathbf{g}^1$ übernimmt. Die physikalische Komponente des diffusiven Flusses in Normalenrichtung stimmt mit der tensoriellen Komponente

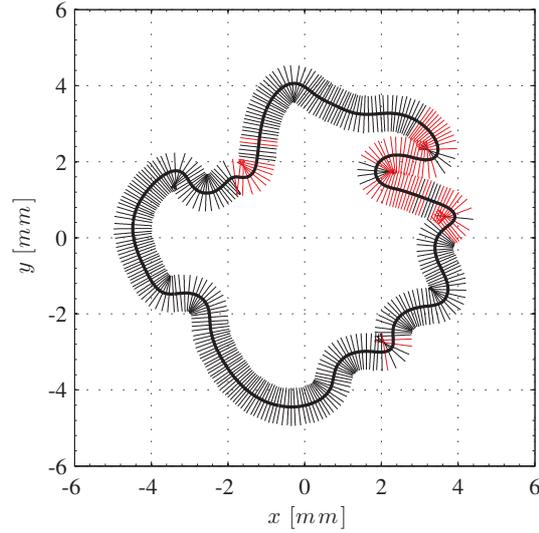


Abbildung 6.7: Darstellung der Schnitte normal zur Brennstoffabbauzone für den letzten analysierten Zeitpunkt der DNS (nur jeder 4. Schnitt ist eingezeichnet). Die Kontur $Y = Y_0$ ist durch die dicke schwarze Kurve dargestellt. Von der Analyse ausgeschlossene Schnitte sind rot markiert.

$\rho V_Y^1 Y$ überein.

Systematische Untersuchung verschiedener Varianten der integralen Beziehung für die Massenstromdichte

Zur Diskussion der unterschiedlichen Einflussgrößen wird die integrale Formulierung (4.15) mit verschiedenen Annahmen und Vereinfachungen ausgewertet:

1. In einer ersten Auswertung werden die stärksten Annahmen getroffen. Es wird angenommen, dass die Brennstoffabbauzone planar ist, was zu $\sqrt{g} = 1$ führt. Außerdem werden der zeitliche Akkumulationseffekt, die Streckung von Flächen $Y = \text{konst.}$ sowie der Quertransport (Terme in (4.15d) und (4.15e)) vernachlässigt. Das Integral I_Y wird als konstant angenommen, mit dem Wert $I_{Y,k} = -0,008512 \text{ kg}/(\text{m}^2\text{s})$ aus der integralen Beziehung (4.18) für eine planare Flamme mit den Frischgasbedingungen wie in der DNS (Daten von [131]). Der Wert des Integrals über $\delta(x^1)$ wird gleich $1/2$ gesetzt. Es wird somit angenommen, dass die gewählte Isofläche $Y = Y_0$ genau am Ort des maximalen Brennstoffverbrauchs liegt und das Quelltermprofil symmetrisch um $x^1 = 0$ ist. Aus den getroffenen Annahmen folgt die Beziehung:

$$m_1 = \frac{1}{Y^*} \left(-\frac{1}{2} I_{Y,k} + \frac{1}{\text{Le}} \left(\frac{\lambda}{c_p} \frac{\partial Y}{\partial x^1} \right)_{x^1=0} \right). \quad (6.5)$$

Im ersten Faktor $1/Y^*$ auf der rechten Seite von (6.5) wurde der Beitrag von $\sqrt{g}^* = 1$ (siehe (5.17)) weggelassen. Diese Vereinfachung der Schreibweise gilt auch für die restlichen Auswertevarianten.

2. In der zweiten Auswertung werden die Annahmen aus Punkt 1 übernommen, mit der einzigen Ausnahme, dass das Integral I_Y auf jedem Schnitt einzeln numerisch ausgerechnet wird:

$$m_2 = \frac{1}{Y^*} \left(-\frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \omega_Y d\hat{x}^1 + \frac{1}{\text{Le}} \left(\frac{\lambda}{c_p} \frac{\partial Y}{\partial x^1} \right)_{x^1=0} \right). \quad (6.6)$$

3. In der dritten Auswertung bleiben die Annahmen wie unter Punkt 1 & 2 bestehen, mit der Ausnahme, dass der integrale Verbrauch von Y in der restlichen Reaktionszone hinter $x^1 = 0$ numerisch für jeden Schnitt einzeln ermittelt wird:

$$m_3 = \frac{1}{Y^*} \left(- \int_{x^1=0}^{+\infty} \omega_Y d\hat{x}^1 + \frac{1}{\text{Le}} \left(\frac{\lambda}{c_p} \frac{\partial Y}{\partial x^1} \right)_{x^1=0} \right). \quad (6.7)$$

In dieser Auswertung wird die Chemie unter der Annahme einer planaren ungestreckten Reaktionszone und bei Vernachlässigung instationärer Effekte innerhalb der Reaktionszone integral exakt behandelt.

4. In der vierten Auswertung wird, zusätzlich zu der vorherigen dritten Auswertung, die Krümmung der Reaktionszone im chemischen Quellterm berücksichtigt:

$$m_4 = \frac{1}{Y^*} \left(- \int_{x^1=0}^{+\infty} \sqrt{g} \omega_Y d\hat{x}^1 + \frac{1}{\text{Le}} \left(\frac{\lambda}{c_p} \frac{\partial Y}{\partial x^1} \right)_{x^1=0} \right). \quad (6.8)$$

Das Volumenelement \sqrt{g} wird aus einer lokalen Approximation der Isofläche $x^1 = 0$ durch einen Kreisbogen bestimmt: $\sqrt{g} = 1 - 2c^* x^1$.

5. In der fünften Auswertung wird der Zeitableitungsterm (4.15c) entsprechend der Behandlung in 5.2.5 berücksichtigt. Bei der Bestimmung der Massenstromdichte der Isoflächen $Y = Y_0$ aus den Ergebnissen der DNS ist der Term $\partial Y / \partial \tau$ per Definition auf den Isoflächen gleich Null. Die Beziehung für die Massenstromdichte schreibt sich somit:

$$m_5 = \frac{1}{Y^*} \left(- \int_{x^1=0}^{+\infty} \sqrt{g} \omega_Y d\hat{x}^1 + \frac{1}{\text{Le}} \left(\frac{\lambda}{c_p} \frac{\partial Y}{\partial x^1} \right)_{x^1=0} + \int_{x^1=0}^{+\infty} \rho Y \sqrt{g} \chi d\hat{x}^1 \right). \quad (6.9)$$

Zur getrennten Untersuchung des Einflusses von Chemie, Normaldiffusion und Streckung in (6.9), werden die Beiträge einzeln ausgewertet:

$$m_{5,c} = \frac{1}{Y^*} \left(- \int_{x^1=0}^{+\infty} \sqrt{g} \omega_Y d\hat{x}^1 \right) \quad (\text{Chemie}), \quad (6.10a)$$

$$m_{5,d} = \frac{1}{Y^*} \left(\frac{1}{\text{Le}} \left(\frac{\lambda}{c_p} \frac{\partial Y}{\partial x^1} \right)_{x^1=0} \right) \quad (\text{Normaldiffusion}), \quad (6.10b)$$

$$m_{5,s} = \frac{1}{Y^*} \left(\int_{x^1=0}^{+\infty} \rho Y \sqrt{g} \chi d\hat{x}^1 \right) \quad (\text{Streckung}). \quad (6.10c)$$

6. In einer sechsten Auswertungsvariante wird das Integral über $\rho Y \sqrt{g} \chi$ in (6.9) vereinfacht ausgewertet. Dazu wird ein linearer Verlauf des Integranden über x^1 angenommen (siehe 5.2.5). Es folgt somit für die Massenstromdichte:

$$m_6 = \frac{1}{Y^*} \left(- \int_{x^1=0}^{+\infty} \sqrt{g} \omega_Y d\hat{x}^1 + \frac{1}{\text{Le}} \left(\frac{\lambda}{c_p} \frac{\partial Y}{\partial x^1} \right)_{x^1=0} + \frac{1}{2} \rho^* Y^* \sqrt{g^*} \chi^* S_{\text{corr}} \frac{l_\delta}{2} \right), \quad (6.11)$$

wobei $\sqrt{g^*} = 1$ (siehe 5.17).

7. In der siebten Auswertung wird die Streckung wie in der Auswertung Nr. 5 integral exakt behandelt. Der chemische Term wird jedoch vereinfacht. Es wird ein integraler Verbrauch I_Y verwendet, der für jeden Schnitt aus einer numerischen Integration des Quelltermprofils ω_Y gewonnen wird. Die Krümmung der Reaktionszone wird in einem Integral über ein vorgegebenes räumliches Profil des Quellterms berücksichtigt (siehe (4.1)), in dem auch das Volumenelement \sqrt{g} eingeht:

$$m_7 = \frac{1}{Y^*} \left(- \overbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} \omega_Y d\hat{x}^1}^{I_Y} \int_{x^1=0}^{+\infty} \sqrt{g} \delta(\hat{x}^1) d\hat{x}^1 + \frac{1}{\text{Le}} \left(\frac{\lambda}{c_p} \frac{\partial Y}{\partial x^1} \right)_{x^1=0} + \int_{x^1=0}^{+\infty} \rho Y \sqrt{g} \chi d\hat{x}^1 \right). \quad (6.12)$$

Mit der Wahl $x^1 = 0$ für die untere Integrationsgrenze des chemischen Integrals folgt (siehe 5.2.3):

$$\int_{x^1=0}^{+\infty} \sqrt{g} \delta(\hat{x}^1) d\hat{x}^1 = \frac{1}{2} - 2c^* \varepsilon \ln(2). \quad (6.13)$$

Der Wert für ε wird so gewählt, dass die normale Ausdehnung des modellierten Quellterms, einer mittleren Ausdehnung der Quellterme auf allen durchgeführten Schnitten entspricht.

8. In der achten Auswertung wird im Gegensatz zu (6.12) für jeden Schnitt derselbe integrale Verbrauch $I_{Y,k} = -0,008512 \text{ kg}/(\text{m}^2\text{s})$ der planaren Referenzflamme verwendet (wie in der ersten Auswertung (6.5)):

$$m_8 = \frac{1}{Y^*} \left(-I_{Y,k} \left(\frac{1}{2} - 2c^* \varepsilon \ln(2) \right) + \frac{1}{\text{Le}} \left(\frac{\lambda}{c_p} \frac{\partial Y}{\partial x^1} \right)_{x^1=0} + \int_{x^1=0}^{+\infty} \rho Y \sqrt{g} \chi d\hat{x}^1 \right). \quad (6.14)$$

9. In der neunten Auswertung wird die Krümmung vernachlässigt und die Streckung integral exakt behandelt:

$$m_9 = \frac{1}{Y^*} \left(- \int_{x^1=0}^{+\infty} \omega_Y d\hat{x}^1 + \frac{1}{\text{Le}} \left(\frac{\lambda}{c_p} \frac{\partial Y}{\partial x^1} \right)_{x^1=0} + \int_{x^1=0}^{+\infty} \rho Y \sqrt{g} \chi d\hat{x}^1 \right). \quad (6.15)$$

Hierbei ist jedoch zu beachten, dass die Krümmung von Isoflächen $Y = Y_0$ in die Berechnung der Streckung χ in (6.15) eingeht.

10. Die zehnte Auswertung wird wie die achte Auswertung durchgeführt, jedoch mit der vereinfachten Beschreibung des Streckungsterms:

$$m_{10} = \frac{1}{Y^*} \left(-I_{Y,k} \left(\frac{1}{2} - 2c^* \varepsilon \ln(2) \right) + \frac{1}{\text{Le}} \left(\frac{\lambda}{c_p} \frac{\partial Y}{\partial x^1} \right)_{x^1=0} + \frac{1}{2} \rho^* Y^* \sqrt{g^*} \chi^* S_{\text{corr}} \frac{l_\delta}{2} \right), \quad (6.16)$$

mit $\sqrt{g^*} = 1$.

6.1.4 Diskussion der Ergebnisse der Analyse

Die Auswertung wird für das Zeitfenster zwischen $t = 0,615$ ms und $t = 0,705$ ms vorgenommen (wobei jeweils 2 Zeitschichten davor und 2 danach in die Berechnung der zeitlichen Ableitung eingehen). Von den insgesamt durchgeführten 10171 Schnitten bleiben nach Aussortierung der Schnitte, welche die Kriterien für den Quellterm ω_Y nicht erfüllen, $N_Y = 8074$ Schnitte übrig. Auf diesen werden die Massenstromdichten berechnet und analysiert.

In Abb. 6.8 ist der integrale Brennstoffverbrauch I_Y über der Massenstromdichte m_a aufgetragen. Zusätzlich sind die Mittelwerte von I_Y und m_a aller N_Y Schnitte sowie die Referenzwerte der planaren Flamme eingetragen. Auch bei der relativ großen Streuung der Datenpunkte ist der physikalisch anschauliche Zusammenhang zu erkennen, dass die Massenstromdichte umso höher ist, je mehr Brennstoff verbraucht wird. In Abb. 6.9 sind die Abweichungen der Datenpunkte aus Abb. 6.8 relativ zu den Mittelwerten und zu den Referenzwerten der planaren Flamme aufgetragen. Hier ist zu erkennen, dass trotz einer Variationsbreite von I_Y die kleiner als $\pm 10\%$ ist, die Massenstromdichte um bis zu 220% variieren kann. Insbesondere kann die Massenstromdichte, wie in Abb. 6.8 zu erkennen ist, negativ werden. Die Isofläche $Y = Y_0$ wird in dem Fall aus der Richtung der Rauchgase aus durchströmt. Negative Brenngeschwindigkeiten wurden in der Analyse der DNS einer vorgemischten stöchiometrischen Methan/Luft-Flamme von Gran et al. [61] gefunden, wonach sie in Bereichen starker positiver Krümmung der Flamme (konvexe Kontur in Richtung der unverbrannten Seite) auftreten. In diesen Bereichen spielt nach [61] die Diffusion tangential zur Flammenfront eine dominante Rolle.

Im Folgenden werden die Ergebnisse der Auswertungsformeln m_1 bis m_{10} mit den Ergebnissen der kinematischen Beziehung (6.2) für die Massenstromdichte verglichen. Eine quantitative Bewertung der Vorhersagekraft der Varianten m_1 bis m_{10} mit Hilfe eines relativen Fehlers ist nicht praktikabel, da die Massenstromdichten auch kleine Werte um $0 \text{ kg}/(\text{m}^2\text{s})$ annehmen können und somit die relativen Abweichungen sehr groß werden können. Eine andere Bewertungsmöglichkeit folgt jedoch aus der Auftragung der Massenstromdichten m_1 bis m_{10} über der kinematisch exakten Massenstromdichte. Eine Variante m_k zur Berechnung von m ist umso genauer, je näher die Werte auf der Geraden $m = m_a$ liegen. Wenn für eine Variante m_k die Datenbasis aller ausgewerteten N_Y Schnitte $m_{k,i}$ und die dazugehörigen kinematischen Werte $m_{a,i}$ als Realisationen y_i und x_i von Zufallsvariablen \tilde{Y} und \tilde{X} betrachtet werden, dann kann für die Variante

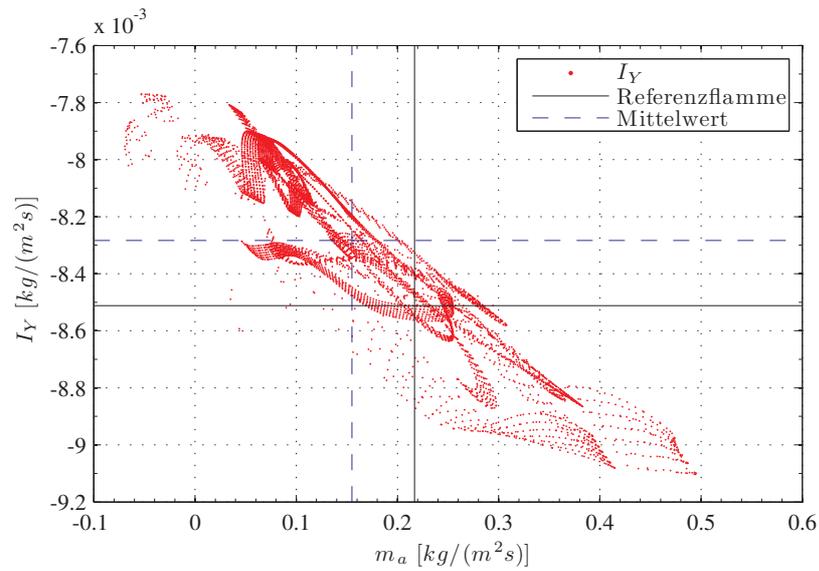


Abbildung 6.8: Integraler Verbrauch I_Y über Massenstromdichte m_a .

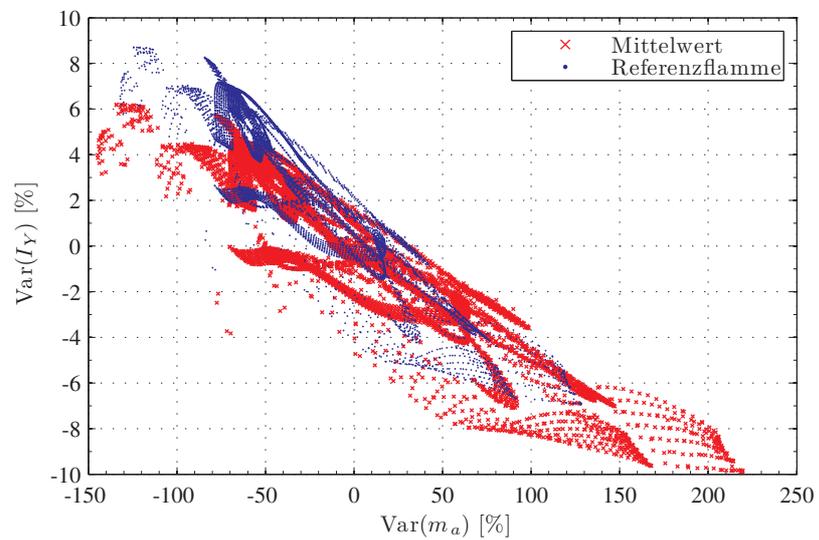


Abbildung 6.9: Variation des integralen Verbrauchs I_Y über Variation der Massenstromdichte m_a .

m_k der Pearsonsche Korrelationskoeffizient [68]

$$R_k = \frac{\sum_{i=1}^{N_Y} (x_i y_i) - N_Y \bar{x} \bar{y}}{\sqrt{\left(\sum_{i=1}^{N_Y} (x_i^2) - N_Y \bar{x}^2 \right) \left(\sum_{i=1}^{N_Y} (y_i^2) - N_Y \bar{y}^2 \right)}} \quad (6.17)$$

ausgerechnet werden, wobei \bar{x} und \bar{y} die Mittelwerte von x_i und y_i sind. Je näher R am Wert 1 liegt, desto stärker ist die Korrelation. Ein Koeffizient nach (6.17) ist streng genommen eine Schätzung für die Korrelation zweier normalverteilter Zufallsvariablen. Aus diesem Grund wird hier in der Auswertung ein einzelner Wert R_k nicht absolut betrachtet. Die Werte R_k werden miteinander verglichen und qualitativ bewertet. Die Korrelationskoeffizienten R_k aller Varianten sind in Tab. 6.1 eingetragen. Der Korrelationskoeffizient zwischen den Werten m_a und m_b beträgt 0,999988. Die Auswerteformeln (6.2) und (6.3) liefern nahezu identische Werte für die Massenstromdichte. Im Folgenden wird m_a als Referenz verwendet.

	m_1	m_2	m_3	m_4	m_5	m_6	m_7	m_8	m_9	m_{10}
$R_k [-]$	-0,27	0,45	0,07	0,99	0,98	0,98	0,98	0,95	-0,06	0,95

Tabelle 6.1: Pearsonsche Korrelationskoeffizienten der einzelnen Schätzungen m_1 bis m_{10} der kinematischen Massenstromdichte m_a (gerundet auf 10^{-2}).

In Abb. 6.10a sind die geschätzten Massenstromdichten m_1 und m_2 über der kinematischen Massenstromdichte m_a aufgetragen. Je näher die Datenpunkte auf der schwarzen Geraden $m = m_a$ liegen, desto besser sind die Schätzungen der Massenstromdichten. Als Referenz ist auch die Massenstromdichte m^0 der planaren Referenzflamme eingezeichnet. Es ist zu erkennen, dass m_1 und m_2 sehr schlechte Vorhersagen für m_a sind. Die Korrelationskoeffizienten R_1 und R_2 sind weit entfernt von 1. Es ist kein systematischer Zusammenhang zwischen den Abweichungen $m_1 - m_a$ bzw. $m_2 - m_a$ und der Massenstromdichte $m = m_a$ erkennbar. Lediglich eine schwache Tendenz ist erkennbar, dass die Formeln von m_1 und m_2 die exakte Massenstromdichte für große Werte unterschätzen und für kleine Werte überschätzen. In Abb. 6.10b werden m_3 und m_4 mit m_a verglichen. m_3 stellt eine unzureichende Näherung für m_a dar, obwohl der integrale Verbrauch in m_3 bei Vernachlässigung der Krümmung exakt berücksichtigt wird. Erst bei Berücksichtigung der Krümmung über das Volumenelement \sqrt{g} im Integral des chemischen Verbrauchsterms wird eine quantitative Vorhersage der Massenstromdichte möglich, wie die aufgetragenen Datenpunkte von m_4 zeigen. Mit Ausnahme der Massenstromdichten die negativ sind und in der Nähe von $0 \text{ kg}/(\text{m}^2\text{s})$ liegen, stellt m_4 eine sehr gute Approximation für m_a dar. Für kleine und negative Werte wird der Zahlenwert von m_a durch m_4 unterschätzt. Qualitativ liefert m_4 jedoch richtige Ergebnisse (negative Werte) in diesem Bereich. Aus Tab. 6.1 kann entnommen werden, dass sich der Korrelationskoeffizient mit Berücksichtigung der Krümmung in der Formel für m_4 stark gegenüber den Werten für m_1 bis m_3 verbessert.

In Abb. 6.11a sind m_4 und m_5 aufgetragen. Die Formel für m_5 berücksichtigt die Streckung integral exakt (bei Vernachlässigung instationärer Effekte in der Brennstoffabbauzone). Die Berücksichtigung der Streckung führt zu einer besseren Vorhersage

der Massenstromdichte, hauptsächlich im Bereich hoher Massenstromdichten. Die Diskrepanz im Bereich niedriger und negativer Massenstromdichten bleibt bestehen. Der Unterschied zwischen der integralen Formulierung und der kinematisch exakten Massenstromdichte im Bereich niedriger und negativer Massenstromdichten kann nur vom Mechanismus des diffusiven Quertransports stammen, der in dieser Analyse nicht berücksichtigt wird. Diese Schlussfolgerung ist konsistent mit den Ergebnissen in [61], bei denen diffusiver Transport tangential zur Flammenfront als Ursache für negative Brenngeschwindigkeiten identifiziert wurde. In Abb. 6.12 ist der Fehler der modellierten Massenstromdichten über der dimensionslosen Krümmung $2c^*l_F$ der Isofläche $x^1 = 0$ aufgetragen. Für die Varianten m_1 bis m_3 , bei denen die Krümmung vernachlässigt wird, korreliert der Fehler eindeutig mit der Krümmung. Der Fehler von m_4 und m_5 bleibt bei hohen positiven Krümmungswerten bestehen und ist im Mittel dabei negativ. Zusammen mit der Erkenntnis aus Abb. 6.11a resultiert daraus, dass diese Datenpunkte mit negativem Fehler $m - m_a$ im Bereich niedriger und negativer Massenstromdichten liegen.

Die vereinfachte Auswertung des Streckungsterms in der Formel für m_6 liefert ähnliche Ergebnisse wie bei der integral exakten Behandlung der Streckung in m_5 . Dies geht aus Abb. 6.11b sowie aus Tab. 6.1 hervor. In Abb. 6.13 ist der Streckungsbeitrag über die dimensionslose Streckung χ^*t_F der Isofläche $Y = Y_0$ aufgetragen. Der Streckungsbeitrag korreliert direkt mit χ^*t_F . Somit stellt die vereinfachte Auswertung m_6 des Streckungsintegrals nach (6.11) einen sinnvollen Ansatz dar. Die Datenpunkte von m_6 sind mit dem Korrekturfaktor $S_{\text{corr}} = 0,5$ ebenfalls in Abb. 6.13 eingetragen.

In Abbildung 6.14 sind die einzelnen Beiträge der Formel m_5 über der dimensionslosen Krümmung aufgetragen. Im Vergleich zum resultierenden Beitrag aus Chemie und normaler Diffusion ist der Beitrag des Streckungsterms relativ klein. Die Beiträge aus normaler Diffusion und Chemie sind von derselben Größenordnung, besitzen jedoch ein entgegengesetztes Vorzeichen. Die Variation der Massenstromdichte $m_{5,c} + m_{5,d}$ mit der Krümmung resultiert aus leicht unterschiedlich starken Korrelationen der einzelnen Beiträge $m_{5,c}$ und $m_{5,d}$ mit der Krümmung. Der Beitrag der Normaldiffusion ist in seiner Formulierung unabhängig von der Krümmung (die nicht explizit im Beitrag steht). Die Krümmung der Reaktionszone geht nur indirekt über die Steigung des Y -Profils in Normalenrichtung ein, welche sich für ein gegebenes Strömungsfeld lokal einstellt. Bei der Auswertung der DNS-Ergebnisse ist diese Steigung somit fest und der Beitrag des Normaldiffusionsterms ist unabhängig davon, ob in der modellierten Massenstromdichte die Krümmung berücksichtigt wird oder nicht. Daraus lässt sich erklären, warum nur mit den Formulierungen der Massenstromdichte, die die Krümmung im chemischen Verbrauchsterm berücksichtigen, eine quantitative Vorhersage der Massenstromdichte a posteriori aus gegebenen Simulationsergebnissen möglich ist. Bei Vernachlässigung der Krümmung im chemischen Term ist der Zusammenhang zwischen normaler Ableitung von Y und integralem chemischen Verbrauch nicht mehr konsistent. Eine quantitative Bestimmung des isolierten Einflusses der Krümmung auf die Massenstromdichte aus den DNS-Ergebnissen ist somit nicht möglich (im Rahmen der hier durchgeführten integralen Analyse). In Abb. 6.14 ist zusätzlich das Ergebnis der vereinfachten Auswertung des chemischen Terms $m_{8,c}$ mit Berücksichtigung der Krümmung aus (6.14) aufgetragen. Die Auswertung stimmt, mit Ausnahme von Bereichen starker positiver Krümmung, gut mit der detaillierten Berechnung überein. Zusammen mit der guten Übereinstimmung der Massenstromdichte m_8 mit m_a in 6.15a lässt sich die Folgerung ziehen, dass für die betrachtete Methan/Luft-Flamme, die Annahme eines konstanten integralen Verbrauchs

I_Y gerechtfertigt ist. Dies stimmt mit der Erkenntnis überein, dass für Flammen mit einer Lewis-Zahl der limitierenden Spezies nahe am Wert 1, der Streckungseffekt nur zu einer geringfügigen Änderung der Enthalpie und Zusammensetzung in der Brennstoffabbauzone führt und somit die Brennrates in der Reaktionszone nur leicht variiert [40], [42].

In Abb. 6.15b sind die Datenpunkte von m_3 und m_9 eingetragen, für die eine planare Flamme angenommen wird. Die Streckung wird in m_9 jedoch integral berücksichtigt. Beide Varianten liefern keine verwertbare Vorhersage der Massenstromdichte, wie auch aus den Korrelationskoeffizienten aus Tab. 6.1 zu sehen ist. Dies unterstreicht die starke Kopplung zwischen Krümmung und normaler Diffusion, die in beiden Varianten nicht korrekt beschrieben wird.

In Abb. 6.16 ist die Massenstromdichte m_{10} aufgetragen. Aufgrund der guten vereinfachten Approximation des Streckungsterms und des chemischen Integrals (mit Berücksichtigung der Krümmung) besitzt m_{10} eine ähnliche Genauigkeit wie die Formel m_8 , in der die Streckung integral exakt behandelt wird. Der Ausdruck für die Massenstromdichte m_{10} kann somit in dieser Arbeit als Grundlage zur Implementierung des Reaktionszonenmodells in OpenFOAM® verwendet werden.

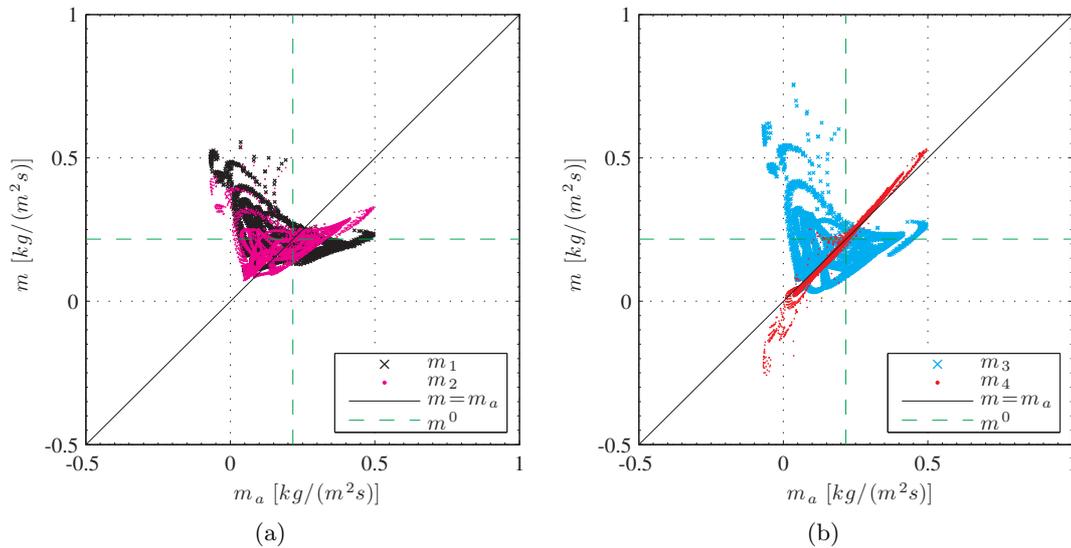


Abbildung 6.10: Massenstromdichten m_1 und m_2 (a) sowie m_3 und m_4 (b) über m_a .

Ein letzter Diskussionspunkt betrifft die Vorhersagekraft der integralen Modellierung für negative Massenstromdichten. In Abb. 6.17 sind die kinematische Massenstromdichte m_a sowie die modellierten Werte m_5 und m_{10} über der enddimensionierten Streckung aufgetragen. Für die untersuchte Flamme im Regime der dünnen Reaktionszonen ist ein einfacher linearer Zusammenhang zwischen Massenstromdichte und Streckung über eine Markstein-Länge nicht gültig. Eine lineare Abhängigkeit gilt nur für kleine Streckungen und für Flammen im Flamelet-Regime [109]. Außerdem ist die simulierte Interaktion zwischen Flammenstruktur und Strömungsfeld in der DNS zu kurz um unabhängig von den Anfangsbedingungen zu sein. Die Näherungen m_5 und m_{10} können jedoch die komplexe Abhängigkeit der Massenstromdichte von der Streckung prinzipiell beschreiben. Die Vorhersage ist für negative Massenstromdichten nur qualitativ korrekt. Dennoch

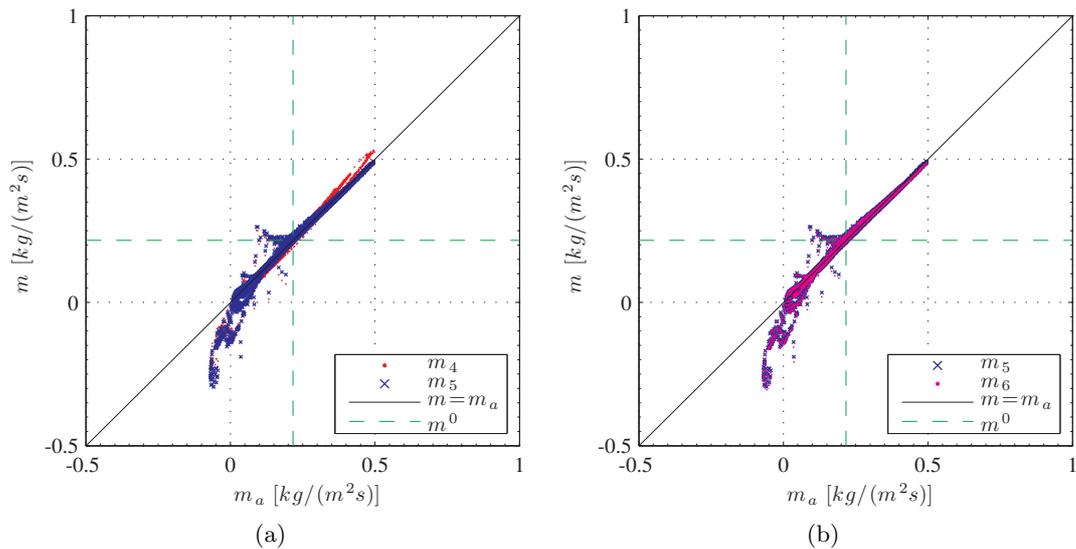


Abbildung 6.11: Massenstromdichten m_4 und m_5 (a) sowie m_5 und m_6 (b) über m_a .

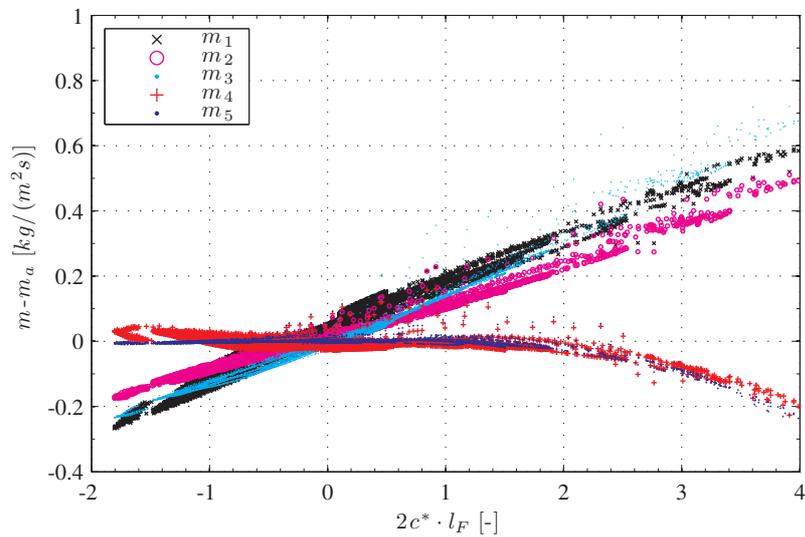


Abbildung 6.12: Fehler der modellierten Massenstromdichten m_1 bis m_5 über entdimensionierter Krümmung $2c^* \cdot l_F$ der Isofläche $x^1 = 0$.

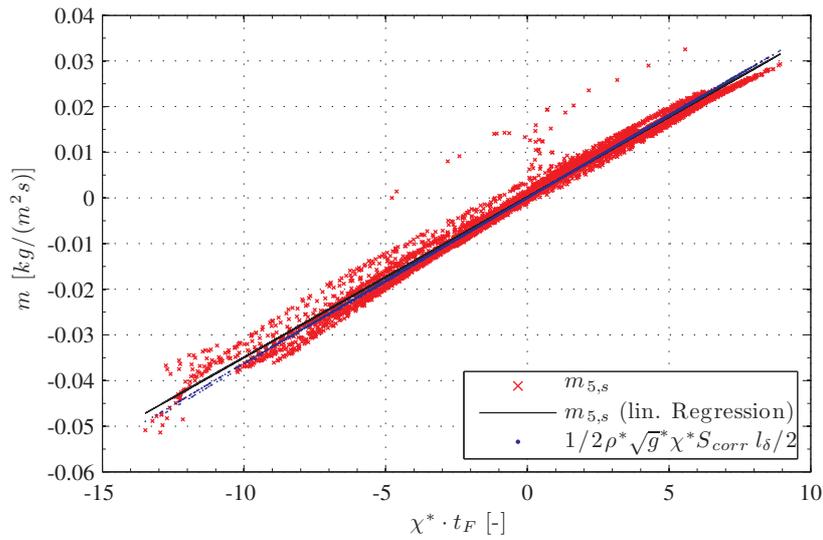


Abbildung 6.13: Detaillierter und vereinfachter integraler Streckungsterm ($S_{\text{corr}} = 0,5$) über entdimensionierter Streckung der Isofläche $x^1 = 0$. (Ausgleichsgerade nach dem Prinzip der kleinsten Fehlerquadrate)

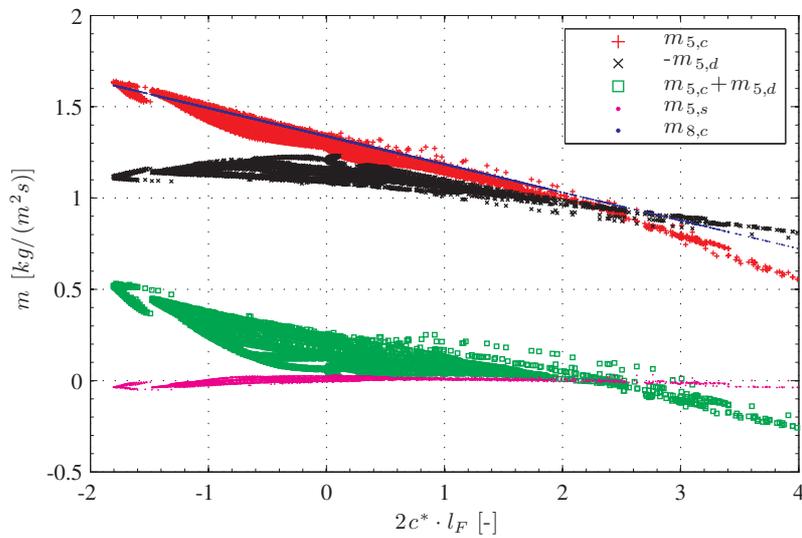


Abbildung 6.14: Beiträge von Chemie $m_{5,c}$, normaler Diffusion $m_{5,d}$ (mit Faktor (-1) multipliziert) und Streckung $m_{5,s}$ zur Massenstromdichte m_5 über entdimensionierter Krümmung $2c^* l_F$ der Isofläche $x^1 = 0$. Zusätzlich eingetragen sind der resultierende Beitrag von Chemie und normaler Diffusion sowie der modellierte Chemie-Anteil $m_{8,c}$.

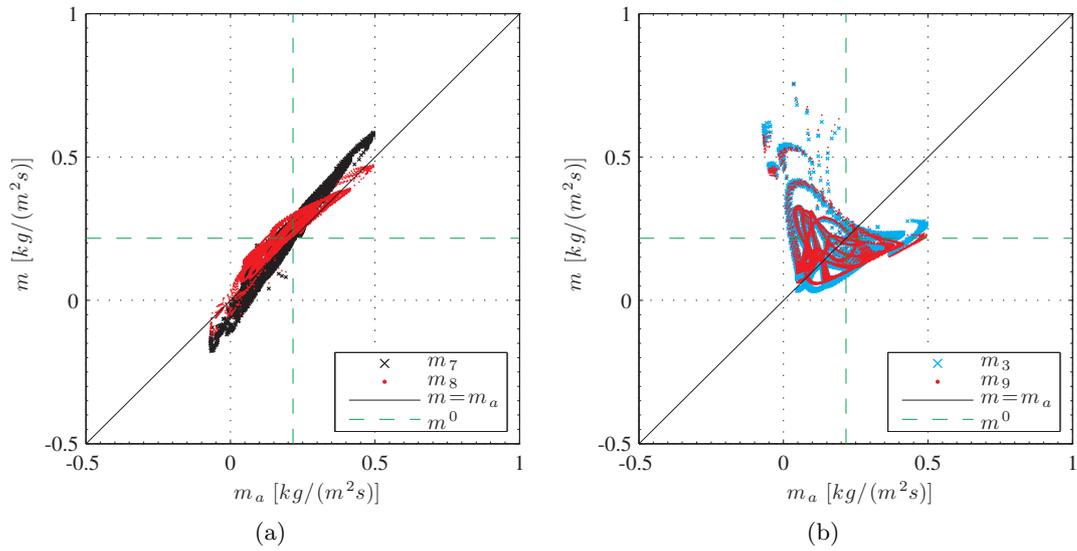


Abbildung 6.15: Massenstromdichten m_7 und m_8 (a) sowie m_3 und m_9 (b) über m_a .

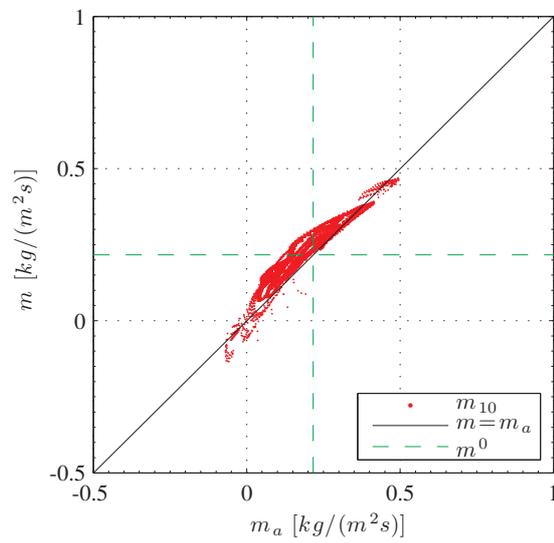


Abbildung 6.16: Massenstromdichte m_{10} über m_a .

stellt die vorgeschlagene integrale Formulierung eine physikalisch sinnvolle Erweiterung gegenüber der einfachen linearen Abhängigkeit von der Streckung dar.

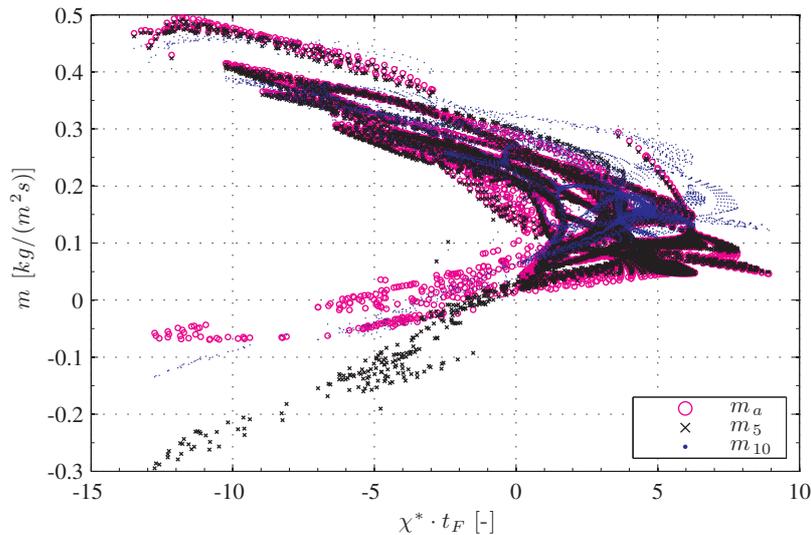


Abbildung 6.17: Abhängigkeit der kinematischen und modellierten Massenstromdichte von der entdimensionierten Streckung der Isofläche $x^1 = 0$.

6.1.5 Zusammenfassung der DNS-Analyse

Die Analyse der DNS hat gezeigt, dass für eine Flamme im Regime der dünnen Reaktionszonen (wenn auch hier bei einer kleinen turbulenten Reynolds-Zahl) eine Vorhersage der Massenstromdichte über die in Kapitel 4 hergeleitete integrale Beziehung möglich ist. Die vorgeschlagene vereinfachte Auswertung des Streckungsintegrals wurde für das betrachtete Regime validiert. Der Streckungsbeitrag zur gesamten Massenstromdichte ist im Allgemeinen kleiner als der resultierende Beitrag aus normaler Diffusion und Chemie. Die vereinfachte Behandlung des chemischen Quellterms mittels eines konstanten integralen Verbrauchs und unter Berücksichtigung der Krümmung der Reaktionszone wurde ebenfalls erfolgreich validiert.

6.2 Eindimensionale Simulationen mit INSFLA

6.2.1 Einführung

Mit Hilfe des Computerprogramms INSFLA werden gekrümmte und gestreckte stationäre Methan/Luft-Flammen unter Verwendung eines detaillierten Reaktionsmechanismus [137] simuliert. Die Variation der Massenstromdichte als Funktion der Krümmung und Streckung der Flammenfront wird an zwei verschiedenen Positionen innerhalb der Flammenstruktur untersucht. Die erste Position ist die Grenze der Flammenstruktur zum Frischgasgemisch. Die hier bestimmte Massenstromdichte entspricht dem Wert, der mit der laminaren Flammgeschwindigkeit und der Dichte des Frischgases gebildet wird. Die zweite Auswerteposition liegt an dem Ort innerhalb der Flammenstruktur an dem die Abbaurrate des Brennstoffs ihren höchsten Wert erreicht. Diese Position

liegt somit in der charakteristischen Zone, in der Brennstoff abgebaut wird (hier als Brennstoffabbauzone bezeichnet) und die als *fuel consumption layer* oder *inner layer* bezeichnet wird [106].

Ziel der Auswertung ist es, zu untersuchen, wie unterschiedlich stark die Massenstromdichte mit einer der Flammenstruktur aufgeprägten Störung variieren kann, je nachdem welche Referenzposition innerhalb der Flammenstruktur gewählt wird. Die Auswahl der Referenzposition ist auch für die Angabe von Krümmung und Streckung wichtig, da sich diese Größen in Normalenrichtung der Flammenfront ebenfalls ändern. Als Störung wird jede Abweichung der Flammenstruktur von der Struktur einer planaren, adiabatischen, ungestreckten und sich stationär ausbreitenden Flammenfront verstanden. Es wird eine magere Methan/Luft Flamme mit dem Äquivalenzverhältnis $\Phi = 0,8$ gewählt. Die Lewis-Zahl des Methans, das in diesem Fall die limitierende Spezies darstellt, liegt nahe am Wert 1 ($Le_{\text{CH}_4} = 0,97$ aus [123]). Dadurch ist eine geringe Abhängigkeit der Temperatur in der Reaktionszone und somit der Reaktionsrate von der Krümmung und Streckung der Flammenfront zu erwarten. Es kann somit untersucht werden, wie stark die Variation der Massenstromdichte hauptsächlich aufgrund von geometrischen und strömungsmechanischen Effekten sein kann. Bei Brenngasgemischen mit einer Lewis-Zahl der limitierenden Spezies die deutlich vom Wert 1 abweicht (siehe Diskussion in Kapitel 8), ist eine stärkere Variation der Reaktionsrate mit der Störung der Flammenstruktur zu erwarten.

INSFLA (**IN**stationary **FL**Ames) ist ein in Fortran programmiertes akademisches Computerprogramm zur Simulation instationärer, ein- und zweidimensionaler Verbrennungsprozesse. Die Ursprünge des Programms gehen auf die Dissertation von Maas [88] zurück, in der instationäre Verbrennungsprozesse unter Verwendung detaillierter Reaktionsmechanismen simuliert werden. Rezente Weiterentwicklungen und Anwendungen von INSFLA beinhalten die Erweiterung für zweidimensionale Probleme zur Simulation von Verbrennungsvorgängen in Mehrphasensystemen [125], die Verwendung hierarchischer Implementierungsstrategien für ILDMs und die Simulation periodisch gestörter Vormischflammen in einer Gegenstromanordnung [77].

Die in dieser Arbeit verwendete Version von INSFLA wurde von Dr.-Ing. Karin König aus dem Institut für Technische Thermodynamik am Karlsruher Institut für Technologie unter der Leitung von Prof. Dr. rer. nat. habil. Ulrich Maas übergeben. Mit Ausnahme einer Modifizierung des Programms zur Ausgabe von Quelltermprofilen wurde die übergebene Version unverändert übernommen.

In INSFLA werden die Erhaltungsgleichungen unter Verwendung der *Method of Lines* in ein System gewöhnlicher Differentialgleichungen umgewandelt. Dabei werden räumliche Ableitungen mittels finiter Differenzen diskretisiert. Das somit entstandene System gewöhnlicher Differentialgleichungen wird in der Zeit unter Verwendung des linearen Extrapolationsverfahrens LIMEX diskretisiert und gelöst. Die zeitliche Diskretisierung erfolgt dabei aufgrund der chemisch bedingten hohen Steifheit des Systems implizit. INSFLA beinhaltet eine Funktionalität zur Verfeinerung des räumlichen Gitters in Bereichen starker Gradienten, z.B. innerhalb der Flammenfront. Eine weitere Besonderheit von INSFLA ist die Transformation der unabhängigen Ortskoordinate auf eine Lagrange-Koordinate der Strömung. Dadurch entfällt die Behandlung der konvektiven Terme in den Erhaltungsgleichungen. Detaillierte Informationen über die verwendete Koordinatentransformation sowie über die angewandten numerischen Verfahren können in [88] und [125] nachgelesen werden. Im Folgenden werden die gelösten Erhaltungsgleichungen in einer Eulerschen Betrachtungsweise angegeben. Diese entspricht nicht

der exakten numerischen Formulierung in INSFLA, beinhaltet jedoch die relevanten physikalischen Terme.

In dieser Arbeit werden 3 verschiedene Flammenkonfigurationen untersucht: Zylinderflammen, Kugelflammen und planare gestreckte Flammen in einer Gegenstromanordnung. Zur Bestimmung von Referenzgrößen (Flammengeschwindigkeit, Flammenzeit und Flammendicke) wird eine ungestreckte planare Flammenfront simuliert. Bei den hier untersuchten Flammen handelt es sich um Deflagrationen bei niedrigen Mach-Zahlen. Die durch die Strömung bedingten Druckgradienten im Raum sind gegenüber dem thermodynamischen Druck vernachlässigbar. In die Zustandsgleichung geht ein konstanter Druck ein. Die Dichte hängt demzufolge nur von der Temperatur und der Gemischzusammensetzung ab. In allen hier durchgeführten Simulationen beträgt die Temperatur des Frischgases 298 K bei einem Druck von 1 bar.

6.2.2 Planare Flammen, Zylinder- und Kugelflammen

Planare Flammen sowie Zylinder- und Kugelflammen sind eindimensional als Funktion einer einzigen unabhängigen Raumkoordinate r beschreibbar. In einem solchen eindimensionalen Strömungsfeld kann die Strömungsgeschwindigkeit direkt aus dem Dichtefeld unter Berücksichtigung der Kontinuitätsgleichung berechnet werden. Die Lösung der Impulserhaltungsgleichung ist nicht erforderlich (sie kann jedoch für die Berechnung der kleinen räumlichen Variation des hydrodynamischen Druckfelds bei eingefrorenem Strömungs-, Dichte- und Viskositätsfeld integriert werden [143]).

Die zu lösenden Erhaltungsgleichungen für die planaren Flammen sowie für die Zylinder- und Kugelflammen unterscheiden sich lediglich in einem Geometriefaktor α . Dieser beschreibt den Einfluss der Geometrie des verwendeten krummlinigen Koordinatensystems auf die Formulierung der Divergenz und des Gradienten. Für planare Flammen ist $\alpha = 0$, für Zylinderflammen gilt $\alpha = 1$ und für Kugelflammen $\alpha = 2$. Die geltenden Erhaltungsgleichungen bei konstantem Druck p^0 und kleinen Strömungsgeschwindigkeiten (niedrige Mach-Zahl) sowie bei Vernachlässigung von Wärmequellen, Volumenkräften und Druckdiffusion schreiben sich folgendermaßen [88]:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{r^\alpha} \frac{\partial(r^\alpha \rho v_r)}{\partial r} = 0, \quad (6.18)$$

$$\frac{\partial Y_k}{\partial t} + v_r \frac{\partial Y_k}{\partial r} + \frac{1}{\rho r^\alpha} \frac{\partial(r^\alpha j_{k,r})}{\partial r} = \frac{\omega_k}{\rho}, \quad (6.19)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + v_r \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{1}{\rho c_p r^\alpha} \frac{\partial(r^\alpha j_q)}{\partial r} + \frac{1}{\rho c_p} \sum_{k=1}^N c_{p,k} j_{k,r} \frac{\partial T}{\partial r} = -\frac{1}{\rho c_p} \sum_{k=1}^N \omega_k h_k, \quad (6.20)$$

mit dem diffusiven Fluss $j_{k,r}$ der Spezies k und dem Wärmefluss j_q aufgrund von Wärmeleitung. Unter der Annahme eines idealen Gases für die Mischung sowie eines konstanten Drucks p^0 (Vernachlässigung von räumlichen Druckgradienten) schreibt sich die Zustandsgleichung:

$$\rho = \frac{p^0 M}{RT}. \quad (6.21)$$

Die Simulation vorgemischter Zylinderflammen in INSFLA erfolgt für ein zentrales Strömungsfeld. Die mathematische Modellierung des Strömungsfelds beinhaltet eine

Massenquelle von Frischgas auf einer Geraden. In einem Koordinatensystem mit Zylinderkoordinaten befindet sich die Quelle auf der z -Achse. Von der Quelle aus strömt Frischgas in radialer Richtung. Die Stärke Q_Z der Massenquelle gibt an wie viel Masse an Frischgas pro Zeiteinheit und pro Längeneinheit der Linienquelle produziert wird. Durch eine Kontinuitätsbetrachtung lässt sich bei Kenntnis von Q_Z das Strömungsfeld eindeutig rekonstruieren. Die Masse an Frischgas, die von der Quelle freigesetzt wird, muss durch Zylinderflächen $r = \text{konst.}$ strömen. Eine integrale Formulierung der Kontinuitätsgleichung in Zylinderkoordinaten über die azimuthale und die radiale Koordinate bei Berücksichtigung von Homogenität in Richtung der axialen Koordinate z liefert die Beziehung $Q_Z = 2\pi r \rho v_r$, woraus die radiale Geschwindigkeitskomponente eindeutig von der Stärke der Massenquelle und der Dichte bestimmt werden kann:

$$v_r = \frac{Q_Z}{2\pi r \rho} . \quad (6.22)$$

Bei der Simulation einer Kugelflamme befindet sich im Ursprung $r = 0$ eine Massenpunktquelle Q_S von Frischgas mit der Dimension Masse pro Zeiteinheit. Eine integrale Kontinuitätsbetrachtung für eine Kugel mit Radius r führt in analoger Weise auf die Beziehung $Q_S = 4\pi r^2 \rho v_r$, woraus für die radiale Geschwindigkeitskomponente folgt:

$$v_r = \frac{Q_S}{4\pi r^2 \rho} . \quad (6.23)$$

Bei beiden numerischen Konfigurationen bewegt sich eine nach innen brennende Flamme auf ein radiales Geschwindigkeitsgefälle zu. Eine stationäre Lösung der Erhaltungsgleichungen stellt sich dann ein, wenn die Flammengeschwindigkeit der radialen Strömungsgeschwindigkeitskomponente entspricht. Da die Strömungsgeschwindigkeit mit zunehmendem Radius abnimmt ist die stationäre Position der Flammenfront stabil. Die Flammenfront bewegt sich in dem Fall nicht mehr im Raum. Eine solche Flammenfront ist gekrümmt, wird jedoch nicht gestreckt [109]. Benachbarte Punkte auf Flammenflächen (z.B. Isoflächen der Temperatur) bewegen sich nicht voneinander weg oder aufeinander zu.

Aus den Ergebnissen der planaren Flamme werden als Referenzgrößen die Massenstromdichte an der unverbrannten Seite und in der Reaktionszone, die Flammendicke l_F und die Flammenzeit $t_F = l_F/s_L$ ermittelt. Die Flammendicke l_F wird hierbei als die Ausdehnung der räumlichen Zone definiert, in der das reduzierte Dichteprofil

$$\rho_{\text{red}} = \frac{\rho - \rho_b}{\rho_u - \rho_b} \quad (6.24)$$

zwischen den Werten 0,01 und 0,99 liegt. Die somit ermittelte Flammendicke ist um den Faktor 3,4 größer als die über den Temperaturgradienten nach (2.43) ermittelte Dicke. Sie gibt die Ausdehnung der räumlichen Zone an, in der die Dichteänderung stattfindet und somit das Strömungsfeld maßgeblich durch die Flammenfront beeinflusst wird. Die Zunahme der Viskosität des Gemischs durch die Flammenfront erfolgt hauptsächlich auf derselben Längenskala wie die Temperaturzunahme, welche in der Oxidationszone hinter der Brennstoffabbauzone nur langsam und somit über einer ausgedehnten räumlichen Zone stattfindet. Bei den betrachteten Methan/Luft-Flammen ist die Dichteabnahme in der Oxidationszone sehr gering. Die Dichte unmittelbar hinter der Brennstoffabbauzone ist nahezu gleich der Dichte des verbrannten Gemischs. Daher findet die Temperatur- und Viskositätsänderung über eine dickere Zone statt als

die Dichteänderung. Die Änderung der Viskosität wirkt sich bei den eindimensionalen Konfigurationen einer inkompressiblen Strömung jedoch nicht auf das Strömungsfeld aus.

In Abb. 6.18 ist die Variation der Massenstromdichte m_u an der unverbrannten Seite der Flamme und der Massenstromdichte m_{fc} in der Brennstoffabbauzone über den entdimensionierten Krümmungsradius r_c aufgetragen. Die prozentuale Variation ist relativ zum Wert von m_u bzw. m_{fc} der planaren Referenzflamme mit denselben Frischgasbedingungen angegeben. Die radiale Geschwindigkeitskomponente nimmt im Frischgasgemisch (konstante Dichte ρ_u) nach (6.22) bzw. (6.23) als Funktion von r^{-1} bzw. r^{-2} mit dem Radius ab. Durch die thermische Expansion in der Flamme wird das Gasgemisch beschleunigt. Der Krümmungsradius r_c wird als die radiale Koordinate am unverbrannten Rand der Flammenstruktur gewählt, an der die radiale Geschwindigkeitskomponente ein lokales Minimum aufweist. Je kleiner das Verhältnis r_c/l_F ist, umso stärker wird die Flammenstruktur relativ zu dem entsprechenden planaren Fall gestört. Die in die Abszisse eingehende Flammendicke l_F wird von der planaren Flamme über das reduzierte Dichteprofil ausgewertet. Die Position der Brennstoffabbauzone wird als die Stelle maximaler Abbaurate des Brennstoffs gewählt.

Aus den Kurvenverläufen in Abb. 6.18 ist erkennbar, dass die Variation für beide Flammengeometrien und für beide Auswertepositionen wie erwartet umso stärker ist, je kleiner das Verhältnis r_c/l_F ist. Bei der Kugelgeometrie ist die Flammenfront in zwei Hauptkrümmungsrichtungen gekrümmt während bei der Zylinderflamme nur eine Hauptkrümmungsrichtung existiert. Wie in 2.3.2 beschrieben ist, beträgt die mittlere Krümmung einer Kugelflamme den doppelten Wert der Krümmung einer entsprechenden Zylinderflamme mit demselben Flammenradius. In den Erhaltungsgleichungen in radialer Richtung geht bei der Kugel die radiale Koordinate quadratisch ein und bei der Zylindergeometrie linear. Die radiale Änderungsrate der Fläche, durch die konvektiver und diffusiver Transport stattfindet, ist bei der Kugelgeometrie stärker. Die Variation der Massenstromdichte ist daher bei den Kugelflammen und den Zylinderflammen qualitativ gleich, jedoch vom Betrag her aufgrund der stärkeren Krümmung bei den Kugelflammen größer als bei den Zylinderflammen. Für eine gegebene Flammengeometrie ändert sich die Massenstromdichte m_u deutlich stärker mit der Krümmung als die Massenstromdichte m_{fc} in der Brennstoffabbauzone. Das Vorzeichen der Variation ist hierbei sogar entgegengesetzt. Bei den betrachteten Flammen variiert der integrale Verbrauch I_Y und somit die Verbrauchsgeschwindigkeit nur sehr leicht mit der Krümmung. Bei den am stärksten gekrümmten Flammen beträgt die Variation des integralen Verbrauchs I_Y -1,2% für die Zylindergeometrie und -2,1% für die Kugelgeometrie.

In Groot und de Goey [63] sowie in der Dissertation von Groot [65] wird von einem ähnlichen Ergebnis einer nahezu konstanten Massenstromdichte in der Brennstoffabbauzone stationärer Zylinder- und Kugelflammen berichtet, die nach aussen brennen und bei denen sich das Rauchgasgebiet im Zentrum befindet. In diesen Arbeiten wird das Flamelet-Modell von De Goey und ten Thijs Boonkcamp [40] für die Zylinder- und Kugelgeometrie formuliert und in Simulationen verwendet.

6.2.3 Vorgemischte Flamme in Gegenstromanordnung

Bei der vorgemischten Flamme in Gegenstromanordnung handelt es sich um einen experimentellen Aufbau oder eine mathematische Formulierung zur Untersuchung planarer vorgemischter und gestreckter Flammen. Zwei Ströme von Frischgas treffen auf

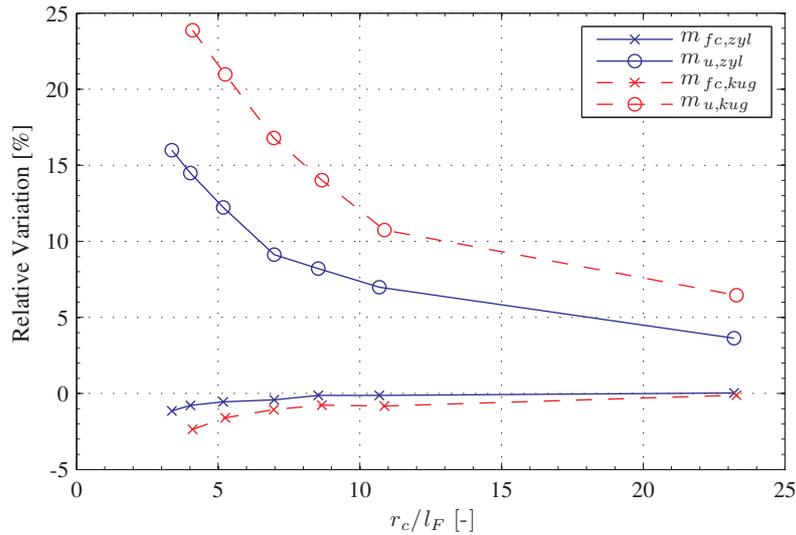


Abbildung 6.18: Variation der Massenstromdichte m_{fc} (*fuel consumption layer*) und m_u (an der unverbrannten Seite) bei stationären zylindrischen (zyl) und kugelförmigen (kug) Methan/Luft-Flammen.

einer Stauebene zusammen. Bei identischen Bedingungen der aufeinander strömenden Frischgasgemische bildet sich ein symmetrisches Strömungsfeld mit zwei identischen planaren Zwillingsflammen aus. Aufgrund der Symmetrie kann die Simulation auf eine Seite der Stauebene beschränkt werden. Eine weitere Reduzierung des Rechenaufwands wird durch Anwendung einer Grenzschichtnäherung im Bereich der Stauebene erreicht. Hierbei entfallen tangentielle Gradienten (entlang der Flamme) der Massenbrüche, der Temperatur und der Geschwindigkeitskomponente normal zur Flamme [124]. Außerdem wird, wie aus einer Größenordnungsabschätzung der Grenzschichtgleichungen bekannt ist [97], der Druckgradient normal zur Grenzschicht vernachlässigt. Durch die beschriebenen Vereinfachungen können die Erhaltungsgleichungen in eindimensionaler Form entlang der Staupunktstromlinie formuliert werden. Die Vereinfachungen können im Detail in [124] nachgelesen werden. Unter der Annahme einer reibungsfreien Strömung (Potentialströmung) ohne thermische Expansion ändert sich die Geschwindigkeitskomponente normal zur Flammenfront linear mit dem Abstand zur Stauebene [113] (ebene Staupunktströmung). Aus Kontinuitätsgründen muss die tangentielle Geschwindigkeitskomponente ebenfalls linear mit derselben Änderungsrate in tangentialer Richtung (entlang der Flammenfront) variieren. Diese Änderungsrate entspricht der Streckung von Flammenflächen [109]. Durch die thermische Expansion ändert sich die Streckung jedoch innerhalb der Flammenfront. Deswegen muss die Position definiert werden, an der der Streckungswert angegeben wird. Hier wird der Streckungswert χ am unverbrannten Ende des Rechengebiets verwendet, der auch dem Wert unmittelbar vor der Flammenfront entspricht. Der Kehrwert der Streckung ist eine charakteristische Zeit $\tau_\chi = 1/\chi$ (siehe 2.3.3).

In Abbildung 6.19 ist die Variation der Massenstromdichte m_u und m_{fc} über der mit der Flammenzeit t_F entdimensionierten charakteristischen Zeit τ_χ dargestellt. Je kleiner das Verhältnis τ_χ/t_F ist, umso stärker ist der Effekt der Streckung. Die Flammenzeit t_F ist über das reduzierte Dichteprofil der planaren Referenzflamme bestimmt. Wie bei

den gekrümmten Flammenfronten ist die Änderung der Massenstromdichte an der unverbrannten Seite stärker als in der Brennstoffabbauzone. Auch hier ist das Vorzeichen der Variation entgegengesetzt. Bei der am stärksten gestreckten Flamme beträgt die Variation des integralen Verbrauchs I_Y -4,7%. Hierbei ist jedoch zu beachten, dass mit zunehmender Streckung sich die stationäre Position der Flamme immer näher an der Staupunktebene befindet. Für die 3 am stärksten gestreckten Flammen (hier für $\tau_x/t_F < 2$) ragt die Oxidationszone der Flamme in die Staupunktebene hinein. Die Flammenstruktur wird daher von der numerischen Randbedingung an der Staupunktebene beeinflusst.

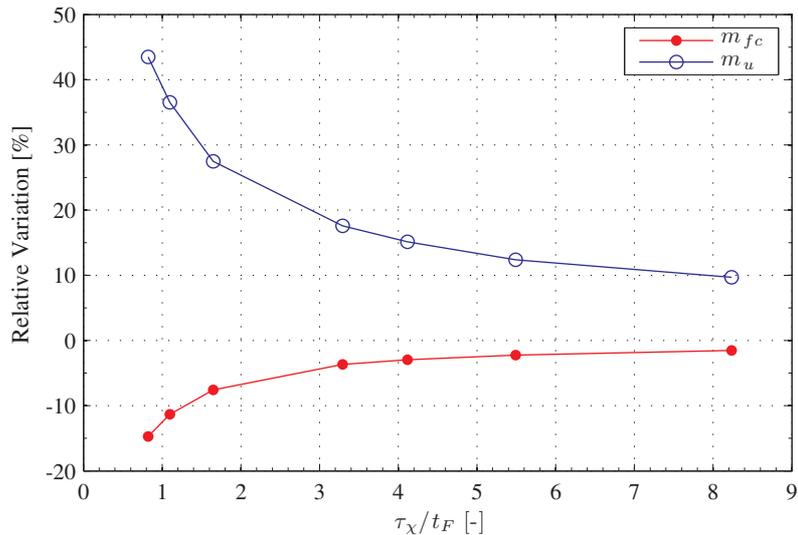


Abbildung 6.19: Variation der Massenstromdichte m_{fc} (*fuel consumption layer*) und m_u (an der unverbrannten Seite) bei stationären Methan/Luft-Flammen in Gegenstromanordnung.

6.2.4 Schlussfolgerung

Die Untersuchung der gekrümmten und gestreckten Methan/Luft-Flammen motiviert die in dieser Arbeit vorgestellte Modellierungsstrategie, bei der die Massenstromdichte in der Brennstoffabbauzone modelliert wird, anstatt auf der unverbrannten Seite der Flammenstruktur. Als Eingangsgröße zur Bestimmung der Massenstromdichte in der Brennstoffabbauzone wird der integrale Verbrauch I_Y benötigt, welcher als Verbrauchsgeschwindigkeit (*consumption speed*) integral auf einer chemischen Basis definiert ist und somit unabhängig von der Wahl einer Referenzposition innerhalb der Flammenstruktur ist.

6.3 Diskussion zur räumlichen Auflösung und Vergleich mit anderen Modellierungsansätzen

Bei der Anwendung des hier vorgestellten integralen Reaktionszonenmodells für laminaire Flammen, für Flammen im Regime der gewellten Flammenfronten (*wrinkled flamelets*) und im Regime der gefalteten Flammenfronten (*corrugated flamelets*) kann die

Dicke des Übergangsbereichs von ψ so eingestellt werden, dass sie in derselben Größenordnung liegt wie die normale Ausdehnung der Flammenstruktur. Die erforderliche räumliche Auflösung des Übergangsbereichs von ψ entspricht dann etwa der Auflösung, die zur Beschreibung der Prozesse in der konvektiv-diffusiven Vorheizzone erforderlich ist. Zusammen mit einer Verbreiterung der Vorheizzone über den Faktor F_{thick} besteht somit ein großes Potential zur Reduzierung der erforderlichen räumlichen Auflösung gegenüber einer reaktiven Simulation mit lokaler Beschreibung realistischer chemischer Quellterme. Dies gilt insbesondere für dreidimensionale Simulationen mit gleichmäßiger Vernetzung, bei denen die Gesamtanzahl an Gitterpunkten oder Zellen mit der dritten Potenz der Auflösung einer einzelnen räumlichen Richtung steigt. Für Flammen im Regime der dünnen Reaktionszonen sollte zur korrekten Beschreibung der Interaktion der Wirbel im Strömungsfeld mit der Flammenstruktur die Dicke des Übergangsbereichs von ψ kleiner als die Flammendicke gewählt werden. Die Flammenstruktur selbst sollte dabei nicht künstlich verbreitert werden.

Die in dieser Arbeit vorgestellte Vorgehensweise zur Herleitung des integralen Reaktionszonenmodells besitzt Gemeinsamkeiten mit den integralen Ansätzen von Chung und Law [28], Echekki [47], De Goey und ten Thije Boonkkamp [40] und Sun et al. [126]. In deren Arbeiten werden u.a. gestreckte bzw. gekrümmte Flammen analysiert und Ausdrücke für Markstein-Zahlen hergeleitet. In der vorliegenden Arbeit wird das integrale Konzept zur Herleitung der Massenstromdichte direkt in einer geeigneten Formulierung in einem CFD-Code zur Simulation von Flammen verwendet. Die aus der integralen Analyse resultierende Beziehung für die Massenstromdichte wird im Laufe der Simulation zu jedem Zeitschritt neu ausgewertet und als Input für die Level-Set-Methodik verwendet. Die Variation der Massenstromdichte mit der Krümmung und Streckung der Reaktionszone resultiert somit direkt aus den restlichen Feldern, die in der Simulation berücksichtigt werden.

In den Ansätzen von Moureau et al. [96], Duwig [46], Hartmann [66] und Hartmann et al. [67] erfolgt eine Korrektur der Massenstromdichte als Funktion der Krümmung. Dabei wird die Markstein-Länge wie in der sogenannten diffusiven G -Gleichung (3.17) von Peters direkt aus der Diffusivität eines zusätzlichen Skalarfelds formuliert. In der vorliegenden Arbeit geht die Krümmung der Reaktionszone indirekt über die normale Ableitung von Y und in direkter Weise durch die Formulierung des Volumenelements \sqrt{g} (insbesondere über den integralen chemischen Quellterm) in die Massenstromdichte ein.

Im Gegensatz zum klassischen Delta-Funktion Modell der Reaktionszone, bei dem mathematisch eine hohe Aktivierungsenergie ausgenutzt wird, lässt die hier vorgestellte Formulierung eine endliche Dicke der Reaktionszone zu. Effekte die aus der endlichen Dicke der Reaktionszone und ihrer Krümmung resultieren werden zum Teil berücksichtigt, wie auch in Klimenko et al. [75].

7 Validierung und Verifikation

Festlegung der Begriffe Validierung und Verifikation

Die Begriffe Validierung und Verifikation werden hier im Sinne der Definition aus dem Lehrbuch von Laurien und Oertel [82] (2011) verwendet. Demnach steht der Begriff Validierung für eine Prozedur die sicherstellt, dass das verwendete mathematisch-physikalische Modell mit seinen Gleichungen die Realität (oder in dem vorliegenden Fall den Ausgangsdetaillierungsgrad der Modellierung) richtig beschreibt. Bei der Verifikation dagegen wird sichergestellt, dass die Gleichungen des verwendeten Modells richtig gelöst werden.

In der vorliegenden Arbeit wird die integrale Modellierung der Reaktionszone und insbesondere die Beziehung für die Massenstromdichte validiert. Ein erster Validierungsschritt wurde bereits mit der Auswertung und Diskussion der DNS-Daten in 6.1 durchgeführt. Zur weiteren Validierung des integralen Modellierungskonzepts gehört die Verifikation der Implementierung in OpenFOAM®. Erst mit einem verifizierten Strömungslöser und einer verifizierten Implementierung der Modellgleichungen kann das integrale Modell anhand der Nachrechnung einer experimentell untersuchten Flamme validiert werden. Als Verifikationsbeispiel für den Strömungslöser wird die periodische Wirbelablösung einer Luftströmung an einem beheizten Zylinder verwendet. Anschließend wird die Implementierung des Flammenmodells in OpenFOAM® verifiziert. Hierzu gehört auch eine Validierung der Modellgleichungen (Erweiterung von Feldern in Normalenrichtung), in der überprüft wird, ob die gelösten Gleichungen die Kinematik der Isoflächen der Phasen-Feld/Level-Set-Funktion korrekt widerspiegeln. In einer letzten Untersuchung werden Simulationsergebnisse des Flammenmodells mit den Messungen einer instationären Flammenfront aus der Literatur verglichen.

7.1 Periodische Wirbelablösung am beheizten Zylinder

7.1.1 Einleitung

Die periodische Wirbelablösung an einem Zylinder gehört zu den klassischen Problemen der Strömungsmechanik. Ein Zylinder mit einer unendlichen Ausdehnung in seiner axialen Richtung und einem Durchmesser d_{zyl} wird von einer Strömung mit der konstanten Geschwindigkeit U_∞ , der Dichte ρ_∞ und der dynamischen Viskosität μ_∞ senkrecht zu seiner Längsachse angeströmt. Mit den strömungsmechanisch relevanten Größen kann die Reynolds-Zahl

$$\text{Re}_{\infty,d} = \frac{U_\infty \rho_\infty d_{\text{zyl}}}{\mu_\infty} \quad (7.1)$$

gebildet werden. Die Umströmung des Zylinders ist bis zu einer kritischen Reynolds-Zahl $\text{Re}_{\infty,d} \approx 40$ stationär und symmetrisch. Ab $\text{Re}_{\infty,d} \approx 40$ wird die Umströmung instationär und es kommt im Reynolds-Zahl-Bereich $\text{Re}_{\infty,d} \approx 40 - 200$ zu einer periodischen Ablösung von Wirbeln am Zylinder, die im Nachlauf eine Kármánsche Wirbelstraße bilden [97]. Diese periodisch instationäre und laminare Strömungsform wird im vorliegenden Verifikationsbeispiel mit OpenFOAM® simuliert. Als Referenz dient die experimentelle Untersuchung in Wang et al. [136], in der u.a. der Einfluss der Aufheizung des Zylinders auf die Wirbelablösefrequenz untersucht wird. In der hier durchgeführten Verifikation wird die Variation der Ablösefrequenz mit der Aufheizung des Zylinders bei einer festen Reynolds-Zahl simuliert.

Die Aufheizung des Zylinders wird durch den Parameter T^* quantifiziert, welcher als Verhältnis von Zylinderwandtemperatur T_{zyl} zu der Temperatur T_∞ der Strömung gebildet wird:

$$T^* = \frac{T_{\text{zyl}}}{T_\infty}, \quad (7.2)$$

wobei beide Temperaturen in der Einheit Kelvin einzusetzen sind. Die Wirbelablösefrequenz f_w wird in dimensionsloser Form durch die Strouhal-Zahl

$$\text{St} = \frac{f_w d_{\text{zyl}}}{U_\infty} \quad (7.3)$$

angegeben [97].

7.1.2 Numerisches Setup

In Abb. 7.1 ist die Blockstruktur des zweidimensionalen Rechengebiets mit relevanten geometrischen Größen und numerischen Randbedingungen dargestellt. Das Rechnetz besteht aus 4 Blöcken und bildet ein blockstrukturiertes *O-grid* um den Zylinderquerschnitt. Der Zylinderdurchmesser wird wie im Experiment [136] gewählt: $d_{\text{zyl}} = 1,07\text{mm}$. Jeder Block ist mit Hexaederzellen vernetzt. Die Auflösung der Zellen in Umfangsrichtung ist gleichmäßig. In radialer Richtung wird eine Verfeinerung des Netzes in der Nähe der Zylinderoberfläche vorgenommen. Die Zellschicht unmittelbar am Zylinder besitzt die kleinste radiale Ausdehnung, die mit r_1 bezeichnet wird. An der Zylinderwand gilt die Haftbedingung $\mathbf{v} = \mathbf{v}_{\text{zyl}} = \mathbf{0}$. Dem Temperaturfeld wird an der Zylinderwand eine konstante Temperatur T_{zyl} zugewiesen. Am Einlassrand (durchgezogene Kurve) wird eine parallele Strömung mit der konstanten Geschwindigkeit U_∞ und der Temperatur T_∞ vorgegeben. Am Auslassrand (gestrichelte Kurve) wird für den Druck die Bedingung

$p = 0 \text{ Pa}$ gewählt und für alle restlichen Variablen eine Neumannsche Randbedingung (verschwindende normale Ableitung) gesetzt. Am Einlassrand sowie auf der Zylinderwand wird ebenfalls eine verschwindende normale Ableitung des Drucks vorgegeben.

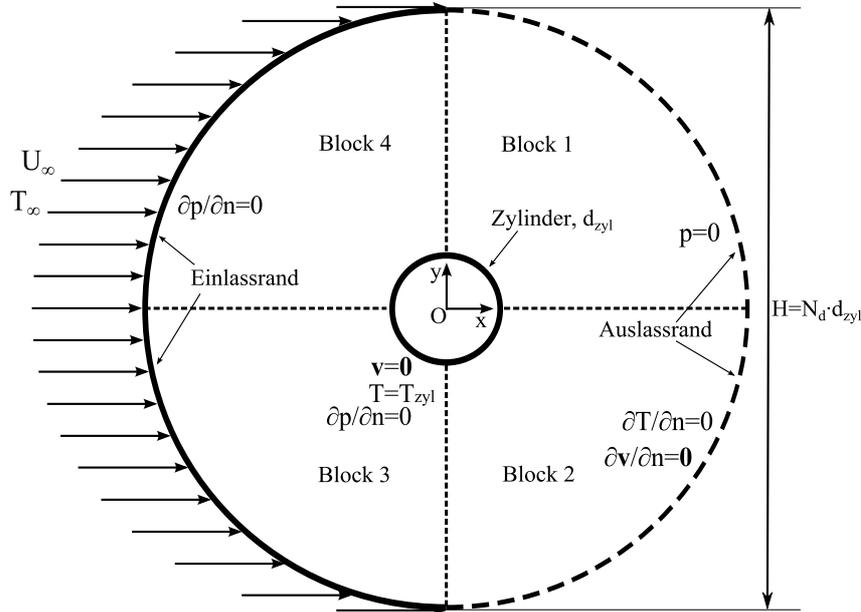


Abbildung 7.1: Geometrie, Blockstruktur und Randbedingungen bei der Simulation der zweidimensionalen Wirbelablösung am beheizten Zylinder.

7.1.3 Strömungsregime und relevante Gleichungen

Die experimentelle Untersuchung von [136] fand in einem Windkanal bei niedrigen Strömungsgeschwindigkeiten statt. Die maximale Turbulenzintensität in der Messstrecke beträgt 0,2%. Insofern kann die Simulation hier laminar (ohne Turbulenzmodell) erfolgen. In [136] ist keine direkte Angabe für die Temperatur T_∞ des anströmenden Fluids vorhanden. Es wird hier angenommen, dass die Versuche im Windkanal mit Luft bei Raumtemperatur stattfanden. Es wird somit für alle Simulationen der Wert $T_\infty = 20^\circ\text{C} = 293,15\text{K}$ gewählt. Die höchste Strömungsgeschwindigkeit im Experiment beträgt 2,4 m/s. Dieser Wert liegt deutlich unterhalb der Schallgeschwindigkeit in Luft, die bei Umgebungstemperatur $T_\infty = 293,15\text{K}$ den Wert $a = 343,20\text{m/s}$ [97] besitzt. Aufgrund der kleinen resultierenden Mach-Zahl $\text{Ma} = 0,007$ spielen Kompressibilitätseffekte eine untergeordnete Rolle und die Strömung kann als inkompressibel betrachtet werden kann. In [82] wird als Grenzwert zwischen inkompressibler und kompressibler Strömung der Wert 0,3 für die Mach-Zahl angegeben. Aus einer Abschätzung der Richardson-Zahl in [136] folgt, dass die experimentellen Untersuchungen im Regime erzwungener Konvektion durchgeführt wurden. In den hier vorgestellten Simulationen wird somit der Auftrieb vernachlässigt. Die für die Simulationen in OpenFOAM® implementierten und gelösten Gleichungen sind die Erhaltungsgleichungen für ein inertes einkomponentiges Fluid (Luft) mit variablen Stoffeigenschaften Dichte, Viskosität, Wärmeleitfähigkeit und spezifische Wärmekapazität bei konstantem Druck. Aufgrund der niedrigen Mach-Zahl sind Druckvariationen (dp/dt) und Dissipationseffekte in der Ener-

gieerhaltungsgleichung vernachlässigbar [109]. Die gelösten Gleichungen lauten:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0, \quad (7.4)$$

$$\frac{\partial (\rho \mathbf{v})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \otimes \mathbf{v}) = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}, \quad (7.5)$$

mit

$$\boldsymbol{\tau} = \mu \left(\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \mathbf{v}) \mathbf{I} \right), \quad (7.6)$$

und

$$c_p \left(\frac{\partial (\rho T)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} T) \right) = \nabla \cdot (\lambda \nabla T). \quad (7.7)$$

Der Wert für U_∞ der als Randbedingung vorgegeben wird, folgt aus der Definition (7.1) mit der Dichte und der dynamischen Viskosität bei $T = T_\infty$. Die simulierte Zeitspanne beträgt für alle berechneten Fälle 0,3s. In dieser Zeit stellt sich für alle betrachteten Fälle eine periodische Wirbelablösung ein.

7.1.4 Stoffdaten

Die Dichte ρ , die dynamische Viskosität μ , die Wärmeleitfähigkeit λ und die spezifische Wärmekapazität bei konstantem Druck c_p werden in den Simulationen anhand von quadratischen Polynomen als Funktion der Temperatur T vorgegeben:

$$f(T) = c_0 + c_1 T + c_2 T^2, \quad \text{mit } T \text{ in } ^\circ\text{C}. \quad (7.8)$$

Die Koeffizienten c_0, c_1, c_2 der Polynome sind aus Shi et al. [119] entnommen. Sie wurden aus tabellierten Daten von Luft aus dem VDI-Wärmeatlas [134] ermittelt. Laut der Angabe in [119] beschreiben die Polynomkoeffizienten die Stoffwerte im Temperaturbereich von 0°C bis 200°C . In der vorliegenden Arbeit wird eine Aufheizung bis zu $T^* = 1,8$ simuliert, was mit dem gewählten Wert für $T_\infty = 293,15\text{K}$ einer Temperatur des beheizten Zylinders von $T_{\text{Zyl}} = 527,67\text{K} = 254,52^\circ\text{C}$ entspricht. Diese liegt über dem in [119] angegebenen Gültigkeitsbereich, weswegen die Koeffizienten aus (7.8) überprüft werden.

Die Korrelationskoeffizienten für die Dichte müssen neu bestimmt werden. In Abb. 7.2 ist der Dichteverlauf über der Temperatur aufgetragen. Die schwarzen senkrechten Linien kennzeichnen den Temperaturbereich $293,15\text{K} - 527,67\text{K}$. Als Referenzwerte dienen die Datenpunkte aus dem VDI-Wärmeatlas [134] sowie aus dem Tabellenbuch von Vargaftik et al. [133]. Die Korrelation von Shi zeigt ab ca. 500K eine deutliche Abweichung von den Referenzdaten. Für $T = 527,67\text{K}$ beträgt die relative Abweichung zwischen der Korrelation von Shi und den VDI-Daten ca. $5,9\%$. Aus diesem Grund wird eine eigene Korrelation mit einer zusätzlichen dritten Potenz der Temperatur

$$\rho(T) = c_0 + c_1 T + c_2 T^2 + c_3 T^3 \quad (\text{mit } T \text{ in } ^\circ\text{C}), \quad (7.9)$$

anhand der VDI-Daten im Temperaturbereich $283,15\text{K} - 573,15\text{K}$ aufgestellt. Die Koeffizienten sind anhand der Methode der kleinsten Fehlerquadrate bestimmt. Die maximale relative Abweichung zwischen der eigenen Korrelation und den VDI-Daten im Temperaturbereich $283,15\text{K} - 573,15\text{K}$ beträgt ca. $0,34\%$ und liegt somit in derselben Größenordnung wie die Abweichungen der Korrelationen der restlichen Stoffwerte.

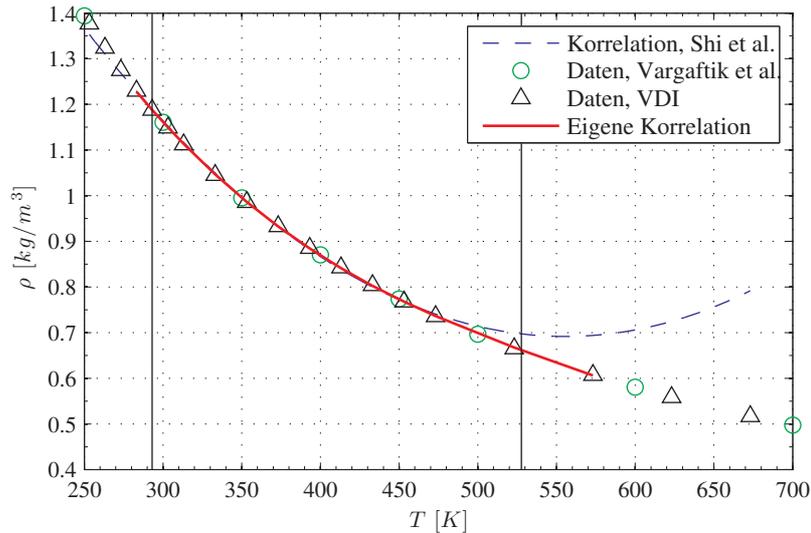


Abbildung 7.2: Dichteverlauf von Luft als Funktion der Temperatur (Referenzwerte und Korrelationen).

7.1.5 Ergebnisse

Für eine erfolgreiche Verifikation des Strömungslösers muss die in [136] gemessene Abnahme der Strouhal-Zahl mit der Aufheizung des Zylinders quantitativ in den Simulationen nachgerechnet werden. Bevor eine Variation der Aufheizung durchgeführt wird, muss jedoch die Abhängigkeit der Strouhal-Zahl von geometrischen und numerischen Faktoren der Simulation untersucht werden. Hierzu gehören neben der Auflösung des Netzes auch die Größe des Rechengebiets sowie numerische Parameter, wie z.B. die gewählten Abbruchresiduen bei der Lösung der linearen Gleichungssysteme.

Die Untersuchung der Netzabhängigkeit der Strouhal-Zahl ist für den Fall maximaler Aufheizung $T^* = 1,8$ bei $Re_{\infty,d} = 100$ durchgeführt. Die Auflösung des Netzes in Umfangsrichtung des Zylinders ist gleichmäßig mit N_u Zellen in jedem Block. In radialer Richtung ist das Netz in der Nähe der Zylinderwand verfeinert. Dazu wird in OpenFOAM® ein sogenanntes *grading* in radialer Richtung mit einem gegebenen *grading*-Faktor durchgeführt. Dieser Faktor gibt das Verhältnis der radialen Ausdehnung der letzten zu der ersten Zelle in radialer Richtung an, wobei das Wachstum der Zellgrößen in radialer Richtung einer geometrischen Reihe entspricht [144]. Neben der Anzahl N_r an Zellen in radialer Richtung wird die radiale Auflösung in der Nähe des Zylinders hauptsächlich durch die Wahl des *grading*-Faktors bestimmt. Die radiale Ausdehnung der ersten Zellschicht an der Zylinderwand wird mit r_1 bezeichnet. Die Anzahl an Zellen in einem Block wird mit $N_B = N_r \times N_u$ bezeichnet. Die Größe des Rechengebiets wird durch den Faktor N_d quantifiziert.

In Abb. 7.3 sind die Ergebnisse einer Sensitivitätsstudie zusammengefasst. Aufgetragen ist die Strouhal-Zahl St über den geometrischen Faktor N_d . Alle dargestellten Datenpunkte stammen aus Simulationen mit identischen Einstellungen des PISO-Algorithmus, der Residuen des linearen Gleichungslösers sowie der numerischen Verfahren für die räumliche (zentrale Differenzen bzw. lineare Interpolation) und zeitliche Diskretisierung (explizit 2. Ordnung). Die aufgetragenen Datenpunkte sind nach Zeitschrittweite Δt ,

relativer Ausdehnung r_1/d_{zyl} der ersten Zellschicht und Anzahl N_B an Zellen in einem Block markiert. Die Strouhal-Zahlen sind durch eine Auswertung von Zeitreihen (Bestimmung der Periodendauer zwischen Nulldurchgängen) der Temperatur T und der Geschwindigkeitskomponente U_y an 2 festen Orten im Nachlauf des Zylinders ermittelt. Die Position eines dieser fest gewählten Orte ist identisch mit dem Messpunkt im Experiment an dem Frequenzspektren mit einer Hitzdrahtsonde gemessen wurden.

Die Auftragung der Datenpunkte in Abb. 7.3 zeigt eindeutig eine starke Abhängigkeit der Strouhal-Zahl vom Faktor N_d und somit von der Größe des Rechengebiets. Die Variation der gewählten Zeitschrittweite von $\Delta t = 3,125 \mu\text{s}$ bis $5 \mu\text{s}$ spielt eine untergeordnete Rolle. Bei einer Strouhal-Zahl $St = 0,15$ und einer Reynolds-Zahl $Re_{\infty,d} = 100$ beträgt die Periodendauer der Wirbelablösung ca. 5 ms. Dieser Wert ist um etwa 3 Größenordnungen größer als die Zeitschrittweiten. Die instationäre Strömung um den Zylinder ist somit in den Simulationen ausreichend fein in der Zeit aufgelöst. Für die Simulationen bei denen die Aufheizung variiert wird, wird ein Faktor $N_d = 100$, ein Verhältnis $r_1/d_{\text{zyl}} = 0,0094$ und eine Zellenanzahl pro Block von $N_r \times N_u = 120 \times 60$ gewählt. Diese Auswahl entspricht den Einstellungen des Datenpunkts, durch den eine schwarze Gerade in Abb. 7.3 eingezeichnet ist (schwarzer Kreis bei $N_d = 100$). Aus dem Diagramm der Messwerte in [136] kann die Strouhal-Zahl bis auf die dritte Nachkommastelle genau abgelesen werden. Der entsprechende Bereich von $\pm 0,0005$ ist in Abb. 7.3 durch zwei gestrichelte schwarze Geraden angedeutet. Im Bereich des gewählten Faktors $N_d = 100$ ist die Ablesegenauigkeit größer als die Variation der Strouhal-Zahl mit N_d .

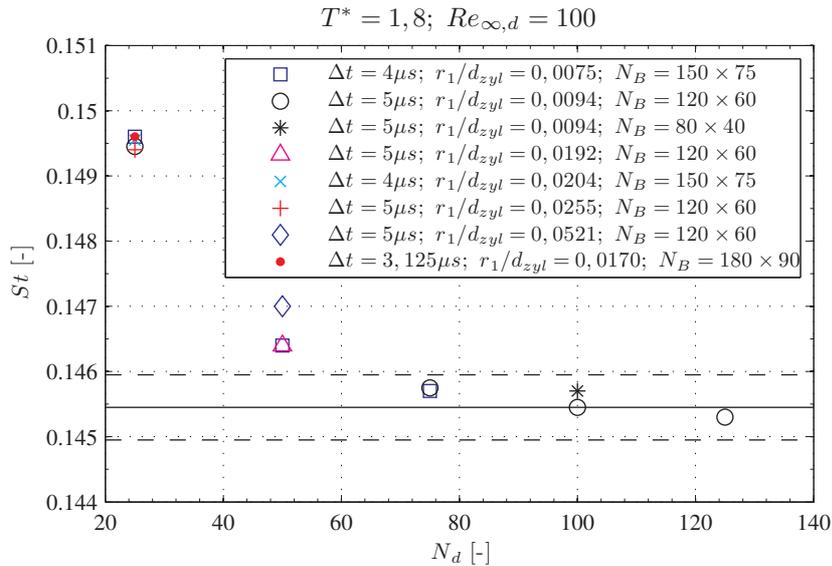


Abbildung 7.3: Sensitivitätsstudie der Strouhal-Zahl aus Simulationen der Umströmung des beheizten Zylinders.

Alle Simulationen deren Ergebnisse in Abb. 7.3 zusammengefasst sind, sind mit einem Abbruchresiduum des Gleichungssystemlösers von $5 \cdot 10^{-7}$ für alle Variablen und einer sehr hohen Anzahl von 7 PISO-Korrekturschritten durchgeführt. Um die Abhängigkeit der simulierten Strouhal-Zahl von diesen Einstellungen zu untersuchen, wurden drei zusätzliche Simulationen durchgeführt. Das dabei verwendete Rechenetz entspricht den

gewählten Einstellungen aus der Untersuchung in Abb. 7.3. Bei der ersten zusätzlichen Simulation wurde das Abbruchresiduum auf $2,5 \cdot 10^{-7}$ halbiert. Bei der zweiten Simulation wurde das Abbruchresiduum auf $1 \cdot 10^{-6}$ verdoppelt und die Anzahl der PISO-Korrekturschritte auf 2 reduziert. In der dritten Simulation wurde nur die Anzahl der PISO-Schritte von 7 auf 2 verändert. Die aus diesen Simulationen resultierenden Strouhal-Zahlen unterscheiden sich nur ab der 5. Nachkommastelle von der Referenz (schwarzer Kreis bei $N_d = 100$ in Abb. 7.3). Der Einfluss der variierten Parameter ist somit kleiner als die Ungenauigkeit beim Ablesen der Strouhal-Zahl aus der Arbeit von [136]. Die numerischen Einstellungen der Ergebnisse in Abb. 7.3 (Abbruchresiduum $5 \cdot 10^{-7}$ für alle Variablen) wurden somit für die Simulationen mit Variation der Aufheizung des Zylinders beibehalten.

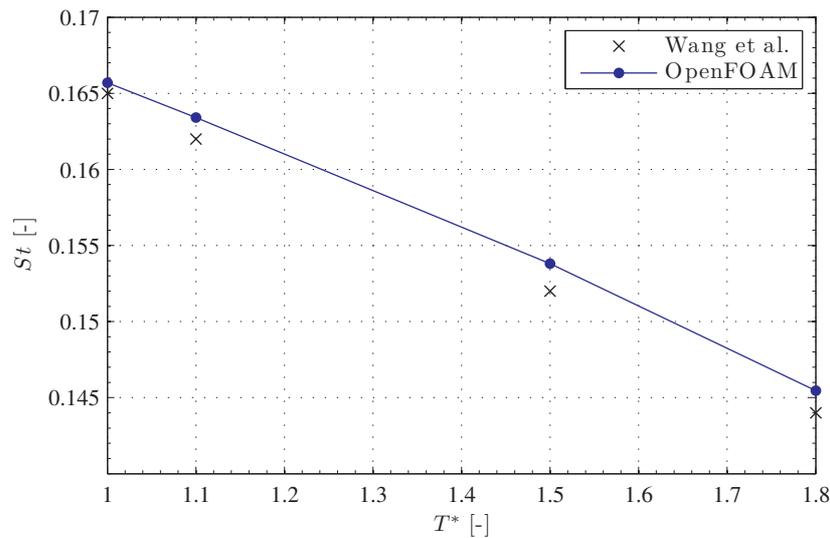


Abbildung 7.4: Abnahme der Strouhal-Zahl mit der Aufheizung des Zylinders. Die Datenpunkte bei $T^* = 1$, $T^* = 1,1$ und $T^* = 1,5$ sind für $Re_{\infty,d} = 101$ gegeben, während die Werte bei $T^* = 1,8$ für eine Reynolds-Zahl $Re_{\infty,d} = 100$ bestimmt sind.

In Abb. 7.4 ist der Vergleich zwischen dem experimentell ermittelten Verlauf der Strouhal-Zahlen aus [136] und den hier ermittelten Werten über T^* aufgetragen. Hierbei wurden für alle 4 Simulationen 7 Korrekturschritte des PISO-Algorithmus verwendet. Bei der bestmöglichen Ablesegenauigkeit aus dem Diagramm in [136] liegt der Datenpunkt für $T^* = 1,8$ bei einer Reynolds-Zahl $Re_{\infty,d} = 100$, während für die restlichen 3 Datenpunkte $Re_{\infty,d} = 101$ gilt. In den Simulationen sind diese unterschiedlichen Reynolds-Zahlen berücksichtigt. Wie in Abb. 7.4 zu erkennen ist, stimmen die Simulationsergebnisse gut mit den experimentell ermittelten Strouhal-Zahlen überein. Die maximale relative Abweichung liegt bei 1,18% für $T^* = 1,5$. Diese Abweichung ist deutlich kleiner als die gesamte prozentuale Variation der Strouhal-Zahl durch die Aufheizung im Experiment, welche ca. 12,7% beträgt. 4 weitere Simulationen unter Verwendung von nur 2 PISO-Korrekturschritten liefern, bis auf die vierte Nachkommastelle, dieselben Ergebnisse für die Strouhal-Zahlen wie in Abb. 7.4, mit Ausnahme des Falls $T^* = 1$ bei dem die Strouhal-Zahlen um einen Betrag von $1 \cdot 10^{-4}$ voneinander abweichen. Mit Hilfe dieser erfolgreichen quantitativen Vorhersage der Strouhal-Zahlen bei einer Ver-

änderung der Aufheizung des Zylinders ist ein Verifizierungsschritt des Strömungslösers erfolgreich abgeschlossen.

7.2 Planare Flammenausbreitung

7.2.1 Einleitung und numerisches Setup

Eine erste Validierung des integralen Reaktionszonenmodells erfolgt mit der Simulation einer planaren Methan/Luft-Flamme, die sich stationär ausbreitet. Das Problem kann eindimensional beschrieben werden, hier in Richtung der Koordinate x . Das Rechengebiet der Länge $L = 4\text{ cm}$ besteht aus N_x Zellen der Zellgröße Δx . Die Ausdehnung der Zellen in den zwei verbleibenden Raumrichtungen ist beliebig. Das dreidimensionale Netz wird zur Lösung eines eindimensionalen Problems verwendet. Dabei wird keine Bilanzierung der Flüsse über die Zellflächen durchgeführt, deren Normalenvektoren in y - oder z -Richtung zeigen.

Am Einlass des Rechengebiets werden die Einströmgeschwindigkeit U_{ein} und die Bedingungen des unverbrannten Gemischs vorgegeben. Außerdem wird am Einlassrand ein verschwindender Druckgradient gefordert. Am Auslassrand wird für jede Variable eine verschwindende normale Ableitung gesetzt, mit Ausnahme des Drucks, der mit $p = 0\text{ Pa}$ vorgegeben wird. Aus der resultierenden absoluten Ausbreitungsgeschwindigkeit der Flammenfront wird die Flammengeschwindigkeit ermittelt. Die Einströmgeschwindigkeit U_{ein} und die simulierte physikalische Zeit Δt_{sim} werden so gewählt, dass Δt_{sim} der doppelten mittleren Durchströmungszeit L/U_{ein} des Rechengebiets entspricht und sich die Flammenfront dabei um eine Distanz $L/2$ bewegt. Damit ist gewährleistet, dass die Flammenausbreitung bei der Auswertung am Ende der Simulationszeit nicht mehr von den Anfangsbedingungen abhängt.

Die simulierten Flammen sind Methan/Luft-Flammen bei einem Druck von $p^0 = 1,0132\text{ bar}$. Die Flammenausbreitung wird über einen Bereich des Äquivalenzverhältnisses des Frischgases von 0,6 bis 1,4 untersucht. Der Modellparameter I_Y wird aus der integralen Beziehung $I_Y = -\rho_u s_L Y_u$ berechnet (siehe Kapitel 4). Die Werte der laminaren Flammengeschwindigkeit s_L stammen aus der Sammlung experimentell ermittelter Flammengeschwindigkeiten von C. K. Law [83]. Für die Flammen mit einem Äquivalenzverhältnis $\Phi > 1$ wird der Sauerstoff O_2 als limitierende Spezies benutzt. Vor der Variation des Äquivalenzverhältnisses wird die Abhängigkeit der Simulationsergebnisse von numerischen und physikalischen Parametern bei einem festen Äquivalenzverhältnis von $\Phi = 0,8$ untersucht. Die Parameter und Ergebnisse dieser Untersuchung sind in Tab. 7.1 zusammengefasst. Hierin sind eingetragen: die räumliche Auflösung anhand der Zellenanzahl N_x , die Zeitschrittweite Δt , der Parameter ε in der Phasen-Feld/Level-Set-Gleichung, das Abbruchresiduum Res. des Lösers des linearen Gleichungssystems, der Faktor F_{thick} zur Verbreiterung des Y - und T -Profils, die resultierende laminare Flammengeschwindigkeit s_L , die Verbrennungstemperatur T_b sowie der prozentuale Restanteil von Y am Auslass des Rechengebiets (bezogen auf Y_u am Einlass). Das angegebene Residuum gilt für die diskretisierten Gleichungen aller Variablen, mit Ausnahme des Drucks p , für den im Fall A das Residuum den fünffachen Wert und für die restlichen Fälle den doppelten Wert des Eintrags in der Tabelle besitzt.

Zur Verifikation des Strömungslösers (zusätzlich zu 7.1) wird der Drucksprung über die Flammenfront (direkter Vergleich der Druckwerte aus der Simulation) mit dem theoretischen Wert verglichen, der aus einer integralen Impulsbilanz resultiert. Dabei wird

zunächst von den Impulserhaltungsgleichungen in einem krummlinigen bewegten Koordinatensystem aus [30] ausgegangen. Diese werden für den Spezialfall einer planaren ungestreckten, sich mit konstanter Geschwindigkeit ausbreitenden Flammenfront vereinfacht. In Richtung der Koordinatenlinie x^1 senkrecht zur Flammenfront resultiert:

$$\frac{\partial (\rho(v^1 - u^1)v^1 + p - \sigma^{11})}{\partial x^1} = 0, \quad (7.10)$$

mit der Normalkomponente $\sigma^{11} = 4/3 \mu \partial v^1 / \partial x^1$ des viskosen Spannungstensors. Eine Integration von (7.10) über die gesamte Flammenfront liefert die Sprungbedingung

$$[\rho(v^1 - u^1)v^1 + p] = 0, \quad (7.11)$$

aus der sich der Drucksprung

$$[p] = - [\rho(v^1 - u^1)v^1] = -m [v^1], \quad (7.12)$$

ergibt, mit der konstanten Massenstromdichte $m = \rho(v^1 - u^1)$. Aufgrund der verschwindenden Geschwindigkeitsgradienten vor und hinter der Flamme liefert der viskose Anteil in der Impulserhaltungsbedingung (7.10) keinen integralen Beitrag. Die Bedingung (7.11) ist die normale Rankine-Hugoniot Sprungbedingung des Impulsfelds [143]. Aus den Simulationsergebnissen wird der Sprung der Geschwindigkeitskomponente v^1 sowie die Massenstromdichte m ausgewertet. Mit der Beziehung (7.12) wird daraus der erwartete Druckabfall über die Flammenfront berechnet. Der Vergleich mit dem direkt ermittelten Druckabfall (Druckwerte aus der Simulation) trägt zur Verifikation des Strömungslösers bei, insbesondere des PISO-Verfahrens.

7.2.2 Auswertung und Diskussion

Fall	N_x	Δt (s)	ε (m ² /s)	Res.	F_{thick}	s_L (m/s)	T_b (K)	Y_{aus}/Y_u
A	1000	$2,0 \cdot 10^{-6}$	$5,0 \cdot 10^{-5}$	$1 \cdot 10^{-7}$	1	0,29	2167	0,8 %
B	500	$5,0 \cdot 10^{-6}$	$5,0 \cdot 10^{-5}$	$5 \cdot 10^{-7}$	1	0,29	2119	3,7 %
C	500	$5,0 \cdot 10^{-6}$	$5,0 \cdot 10^{-5}$	$5 \cdot 10^{-7}$	3	0,29	2124	3,3 %
D	100	$2,5 \cdot 10^{-5}$	$2,5 \cdot 10^{-4}$	$5 \cdot 10^{-7}$	3	0,30	2110	4,2 %

Tabelle 7.1: Parameter und Ergebnisse der Untersuchung planarer Flammenausbreitung bei einem festen Äquivalenzverhältnis $\Phi = 0,8$.

Aus den Einträgen in Tab. 7.1 ist zu erkennen, dass sich die globalen Kennwerte der Flammenausbreitung wie Flammengeschwindigkeit und Verbrennungstemperatur bei den durchgeführten Variationen nur geringfügig ändern. Die maximale Änderung der Verbrennungstemperatur beträgt 2,7 % (zwischen Fall A und D). Der Fall A ist der am höchsten aufgelöste Fall, mit dem kleinsten zulässigen Residuum bei der iterativen Lösung der Gleichungssysteme, die aus der impliziten Diskretisierung resultieren. Außerdem ist für den Fall A die Anzahl an Druckkorrekturschritten im PISO-Algorithmus auf 3 gesetzt. In den übrigen Fällen werden nur 2 Korrekturschritte durchgeführt. Der Abbau der limitierenden Spezies Y erfolgt für alle Fälle im Einklang mit der integralen Modellierungsstrategie der Reaktionszone. Die Restanteile von Y hinter der Flamme

sind gering. Sie nehmen mit abnehmender Auflösung der Flammenfront und somit mit zunehmendem Diskretisierungsfehler zu.

In den Fällen C und D ist die Diffusivität von Y und T um den Faktor F_{thick} erhöht, was zu einer Verbreiterung der Profile von Y und T führt. Die künstliche Verbreiterung der Profile beeinflusst nicht die resultierende Flammengeschwindigkeit (leichte Abweichung bei Fall D aufgrund der niedrigen Auflösung). Dies bestätigt die Modellvorstellung, dass bei einer stationär brennenden, planaren und ungestreckten Flamme, die Flammengeschwindigkeit durch die Vorgabe von I_Y (und somit der Verbrauchsgeschwindigkeit) eindeutig festgelegt ist. Der Fall D ist mit einer möglichst geringen räumlichen und zeitlichen Auflösung simuliert. Dazu ist die Dicke des Übergangsbereichs der Phasen-Feld/Level-Set-Funktion erhöht (siehe ε -Wert). Der Übergangsbereich wird in C und D mit derselben Anzahl von Zellen (ca. 5 – 6) aufgelöst. Die maximale Courant-Zahl liegt in beiden Simulationen bei ca. 0,25. Der Fall D stellt somit eine numerisch hoch effiziente Simulation dar.

Im Folgenden werden die Ergebnisse einer Serie eindimensionaler Simulationen mit variierender Frischgaszusammensetzung vorgestellt. Die Simulationen sind mit denselben Einstellungen wie beim Fall D in Tab. 7.1 durchgeführt. In Abb. 7.5 ist die resultierende laminare Flammengeschwindigkeit zusammen mit den Referenzwerten aufgetragen. Hierbei ist eine sehr gute Übereinstimmung zu erkennen. Die maximale relative Abweichung beträgt 5% für den Wert bei $\Phi = 0,8$. In Abbildung 7.6 ist die Rauchgastemperatur aus den Simulationen mit Referenzwerten verglichen. Die Referenzwerte der adiabatischen Flammentemperaturen wurden anhand der Online-Version CEARUN (<http://cearun.grc.nasa.gov/>) des NASA Computer Programms CEA (*Chemical Equilibrium with Applications*) [59] berechnet. In einer ersten Reihe von Simulationen wird ein konstanter molarer Heizwert $H_f = 802,4 \text{ kJ/mol}$ von Methan im Quellterm der Temperaturgleichung verwendet [51]. Hiermit resultieren sowohl für die mageren als auch für die fetten Gemische erhöhte Werte der Rauchgastemperatur im Vergleich zu den Referenzwerten. Der Unterschied wächst mit zunehmendem Äquivalenzverhältnis. Um die Ursache für diese Diskrepanz zu identifizieren, werden die einzelnen Einflussgrößen auf die adiabatische Verbrennungstemperatur untersucht. In den Simulationen und den Referenzberechnungen mit CEA sind der Brennstoffmassenbruch sowie die Temperatur und der Druck des Frischgasgemischs gleich. Der Unterschied in der Flammentemperatur kann daher nur von einer abweichenden spezifischen Wärmekapazität oder einer ungenauen Modellierung der Wärmefreisetzung stammen. In [51] wird bei der Beschreibung der Wärmefreisetzung im Rahmen einer Einschnittmodellierung von Kohlenwasserstoffverbrennung darauf hingewiesen, dass auch bei fetter Verbrennung ein nahezu vollständiger Abbau des Brennstoffs stattfindet. Im Rauchgas befindet sich neben Kohlendioxid CO_2 und Wasser H_2O auch ein signifikanter Anteil an Kohlenmonoxid CO und Wasserstoff H_2 . Unter Berücksichtigung dieser Tatsache wird in [51] folgender modifizierter Ausdruck der Reaktionswärme für $\Phi \geq 1$ vorgeschlagen:

$$q = q_0 (1 - \alpha(\Phi - 1)) , \quad (7.13)$$

mit der Reaktionswärme $q_0 = 802,4 \text{ kJ/mol}$ und der Konstante α , die für Methan den Wert 0,21 besitzt. Simulationsergebnisse unter Verwendung von (7.13) sind für den fetten Gemischbereich in Abbildung 7.6 eingetragen. Die Abweichung der resultierenden Flammentemperatur zu den Referenzwerten nimmt durch die Modifizierung leicht ab. Die Änderungsrate der Flammentemperatur mit dem Äquivalenzverhältnis verbessert

sich. Die verbleibende Abweichung zeigt jedoch, dass für eine genauere Vorhersage der Rauchgastemperatur die Formulierung der spezifischen Wärmekapazität im Modell modifiziert werden müsste. In der Implementierung des Modells wird die Wärmekapazität des Gemischs durch die temperaturabhängige Wärmekapazität des überschüssigen Stickstoffs approximiert. Diese Annahme unterschätzt die Wärmekapazität. Der Vergleich in Abb. 7.5 zeigt jedoch ein positives Merkmal der hier vorgeschlagenen Modellierungsstrategie. Auch wenn die Flammentemperatur durch das implementierte Flammenmodell überschätzt wird, resultiert eine genaue Vorhersage der Flammengeschwindigkeit. Dies ist eine logische Konsequenz des Modellierungskonzepts, bei dem ein integraler Verbrauch I_Y vorgegeben wird. Bei der hier betrachteten eindimensionalen Konfiguration muss somit für einen gegebenen Wert von Y im Frischgasgemisch und bei einer korrekten Implementierung der Modellgleichungen, die Flammgeschwindigkeit s_L resultieren, mit der I_Y berechnet wurde. Bei reaktiven Modellen in denen die Temperatur explizit als Argument der Reaktionsrate dient (z.B. bei einer globalen Einschrittmodellierung) würde eine überschätzte Flammentemperatur auch zu einer erhöhten Flammgeschwindigkeit führen.

In Abb. 7.7 ist der Druckabfall durch die Flammenfront aufgetragen. Die analytisch ermittelten Datenpunkte resultieren aus der Beziehung (7.12), ausgewertet mit den Simulationsergebnissen (Flammgeschwindigkeit und Strömungsgeschwindigkeit). Die zweite Datenpunktreihe stammt direkt aus dem verwendeten PISO-Verfahren. Beide Kurven stimmen sehr gut überein. Der Betrag des Drucksprungs liegt lediglich in der Größenordnung von einigen Pascal und nimmt mit der thermischen Expansion durch die Flammenfront zu (proportional zu $[v^1]$). In der vorliegenden planaren Konfiguration beeinflusst das hydrodynamische Druckfeld nicht das Strömungsfeld. Der analytische Druckabfall kann als Referenzwert zur Verifikation des PISO-Verfahrens (im eindimensionalen Fall) betrachtet werden.

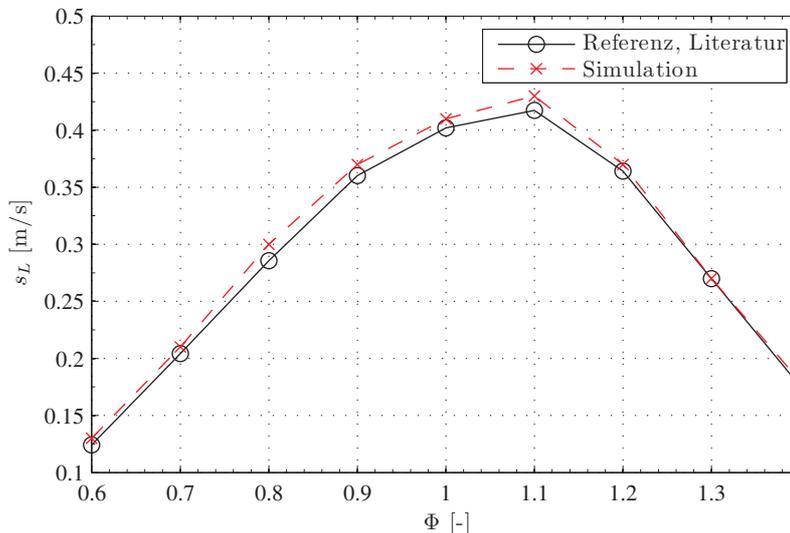


Abbildung 7.5: Laminare Flammgeschwindigkeit als Funktion des Äquivalenzverhältnisses. Referenzwerte aus [83].

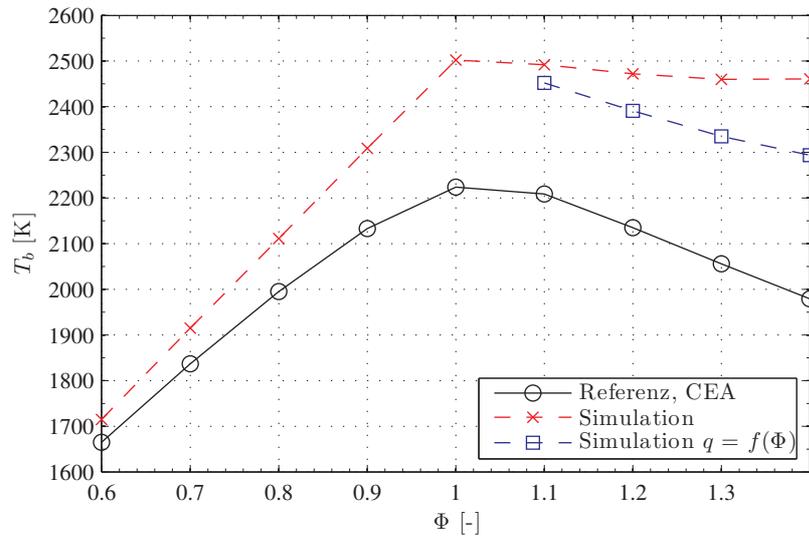


Abbildung 7.6: Rauchgastemperatur als Funktion des Äquivalenzverhältnisses. Referenzwerte mit CEARUN [59] berechnet.

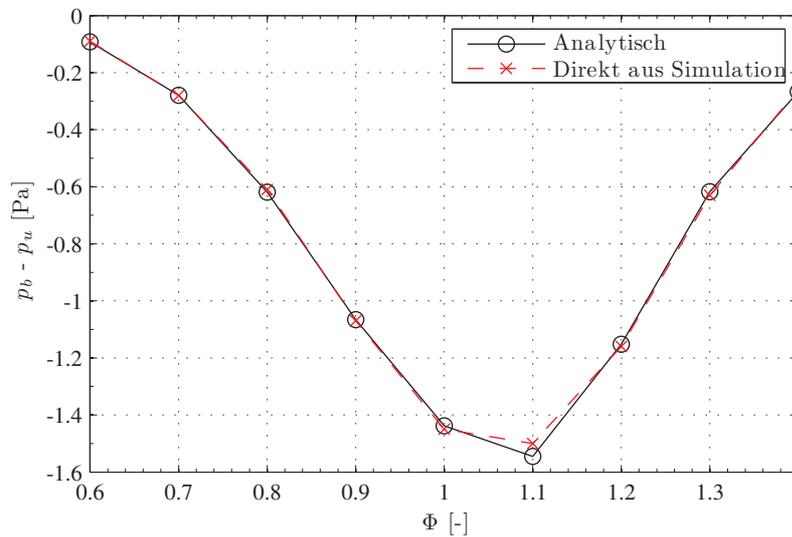


Abbildung 7.7: Druckabfall durch die Flammenfront als Funktion des Äquivalenzverhältnisses.

7.3 Kinematische Analyse der Phasen-Feld/Level-Set-Formulierung

7.3.1 Einleitung und numerisches Setup

In der implementierten Version des Modells mit einer Phasen-Feld/Level-Set-Formulierung werden die Bewegung der Isoflächen der Phasen-Feld/Level-Set-Funktion aufgrund von Strömung und Brenngeschwindigkeit sowie das Kompressionsverfahren von Olsson [99, 100] mit einer einzigen Transportgleichung realisiert. Außerdem muss das Massenstromdichtefeld m vor dem Einbau in die Phasen-Feld/Level-Set-Gleichung modifiziert werden (normale Erweiterung der absoluten Ausbreitungsgeschwindigkeit). Im Folgenden wird eine quantitative Untersuchung der Kinematik der Isoflächen der Phasen-Feld/Level-Set-Funktion durchgeführt. Dabei wird ermittelt, wie die Behandlung und Formulierung des Felds der Massenstromdichte m sowie die Terme des Kompressionsverfahrens die Kinematik beeinflussen.

Die Untersuchung erfolgt durch eine Analyse der Simulationsergebnisse einer instationären Flammenausbreitung in einem Strömungsfeld. Die aus den Simulationsergebnissen resultierende Massenstromdichte durch Isoflächen von ψ kann aus folgender kinematischer Beziehung ermittelt werden (siehe (5.10)):

$$m_{\text{post}} = \frac{\frac{\partial(\rho\psi)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\mathbf{v}\psi)}{|\nabla\psi|} . \quad (7.14)$$

Diese Massenstromdichte m_{post} (durch *post-processing* gewonnen) wird mit der Massenstromdichte m_ψ verglichen, die in die gelöste Transportgleichung

$$\frac{\partial(\rho\psi)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\mathbf{v}\psi) = m_\psi |\nabla\psi| - \gamma\rho\nabla \cdot (\psi(1-\psi)\mathbf{n}) + \gamma\rho\varepsilon\Delta\psi + \rho^1\nabla \cdot (S_\psi D_\psi \nabla\psi) \quad (7.15)$$

von ψ eingeht und somit als Soll-Wert für die Bewegung der Isoflächen der Phasen-Feld/Level-Set-Funktion dient.

Die simulierte Flamme ist eine Zylinderflamme in einem turbulenten Strömungsfeld, wie in der untersuchten DNS in 6.1. Aus der DNS werden nur die Anfangsbedingungen für das Strömungsfeld übernommen. Das quadratische Rechenggebiet ist gegenüber der DNS vergrößert. In der hinzugefügten Schicht um das DNS-Rechenggebiet ist ein ruhendes Geschwindigkeitsfeld als Anfangsbedingung gesetzt. Dadurch besitzt die Anfangsbedingung der Simulation einen Sprung in den Geschwindigkeitskomponenten, der jedoch im Laufe der Simulation aufgrund der Viskosität des Fluids schnell abgebaut wird. Am Rand des Rechengebiets wird ein konstanter Druck von $p = 0$ Pa vorgegeben. Außerdem werden am Rand verschwindende normale Ableitungen der Geschwindigkeitskomponenten und aller anderen Felder gefordert. Diese Formulierung der Randbedingungen für das Strömungsfeld und insbesondere für das Druckfeld entspricht nicht der Formulierung der DNS mit nichtreflektierenden Rändern (für Druckwellen). Im Gegensatz zur DNS wird in dieser Simulation das Fluid als inkompressibel betrachtet. Eine realistische Formulierung der Randbedingungen ist jedoch in der hier vorgestellten Simulation von untergeordneter Bedeutung. Aus den Ergebnissen werden keine physikalischen Aussagen getroffen (z.B. Auswertung der Flammengeschwindigkeit als Funktion von Krümmung und Streckung). Es wird eine rein kinematische Analyse der Phasen-Feld/Level-Set-Funktion bei einem gegebenen, möglichst sinnvollen Strömungsfeld durchgeführt.

Die Flamme wird zylinderförmig innerhalb des Rechengebiets initialisiert. Das Frischgasgemisch befindet sich im Innern der Zylinderflamme und besteht aus einer homogenen Methan/Luft-Mischung mit einem Äquivalenzverhältnis von $\Phi = 0,8$ und einer Temperatur von 300 K bei einem Druck von $p = 1,0132$ bar. Der räumliche Verlauf der Komponenten des Geschwindigkeitsfelds wird aus den Anfangsbedingungen der DNS übernommen. Das integrale Längenmaß beträgt demnach $l_I \approx 1,3$ mm. Die Komponenten werden mit einem Faktor 0,7 skaliert, um die Stärke der turbulenten Schwankungen für die Analyse zu reduzieren. Der Anfangsradius der Zylinderflamme wird mit ca. 5,5 mm initialisiert und ist somit größer als die radiale Ausdehnung des turbulenten Kerns des Strömungsfelds (siehe Abb. 6.2 in Abschnitt 6.1). Erst nach einer gewissen simulierten Zeit hat sich der Radius der Zylinderflamme so stark verkleinert, dass die Interaktion mit dem turbulenten Geschwindigkeitsfeld in bedeutendem Maße beginnt und somit die kinematische Analyse begonnen werden kann. Diese Zeitspanne bis zu Beginn der Auswertung soll eine Abhängigkeit der Ergebnisse von den Anfangsbedingungen verhindern. Ihre Mindestdauer wird aus der charakteristischen Durchströmungszeit des Übergangsbereichs der Phasen-Feld/Level-Set-Funktion bestimmt. Dazu wird eine eindimensionale Simulation mit dem Flammenmodell durchgeführt. Bei den gewählten Frischgasbedingungen beträgt die laminare Flammengeschwindigkeit $s_L = 0,28$ m/s und die Flammendicke nach (2.43) $l_F \approx 0,51$ mm. Die Brenngeschwindigkeit an der Stelle $\psi = 0,5$ beträgt ca. 1,8 m/s. Die Dicke des Übergangsbereichs wird durch die Wahl des Parameters ε (hier $7,5 \cdot 10^{-5}$ m²/s) bestimmt und beträgt nach (5.5) ca. 0,69 mm. Daraus folgt eine Durchströmungszeit des Übergangsbereichs von ca. 0,38 ms. Die Analyse beginnt ab einer Zeit von 1,5 ms, was ungefähr 4 Durchströmungszeiten des Übergangsbereichs entspricht. Zum Anfangszeitpunkt der Analyse beträgt die Schwankungsgröße des turbulenten Geschwindigkeitsfelds im Innern des von der Flammenfront umschlossenen Gebiets $v' \approx 1,20$ m/s. Es folgt demnach für die Skalenverhältnisse $v'/s_L \approx 4,3$ und $l_I/l_F \approx 2,5$. Daraus resultiert eine turbulente Reynolds-Zahl $Re_T \approx 11$. Die Verbrennung findet demnach am Anfang der Interaktion im Regime der dünnen Reaktionszonen statt. Die Analyse wird für einen Zeitraum von 1,75 ms durchgeführt, was ca. 4,6 Durchströmungszeiten des Übergangsbereichs von ψ entspricht.

Die Simulation wird mit einer räumlichen und zeitlichen Auflösung durchgeführt, die eine numerisch effiziente Anwendung des Flammenmodells ermöglicht. Die Dicke des Übergangsbereichs von ψ (von 0 auf 1) und somit der Reaktionszone wird in derselben Größenordnung gewählt, wie die Dicke des Profils der limitierenden Spezies Y . Der Übergangsbereich wird mit ca. 7 Zellen aufgelöst. Die Simulation wird auf einem äquidistanten kartesischen Gitter durchgeführt, unter Verwendung eines linearen Interpolationsschemas für die Flüsse und einer impliziten Zeitdiskretisierung 2. Ordnung. Es wird ein fester Zeitschritt von $\Delta t = 5 \cdot 10^{-6}$ s gewählt. Im Zeitfenster der Analyse resultiert eine gemittelte Courant-Zahl (über alle Zellen) von 0,06. Die maximale Courant-Zahl beträgt 0,42.

7.3.2 Analyse und Diskussion der Ergebnisse

In Abb. 7.8a ist die Massenstromdichte m_{post} nach (7.14) über der Massenstromdichte m_ψ nach (5.41) aufgetragen. Mit Ausnahme der Datenpunkte bei kleiner Massenstromdichte ist eine gute Übereinstimmung zwischen Ist-Wert m_{post} und Soll-Wert m_ψ zu erkennen. Der RMS-Wert der Abweichung $m_{\text{post}} - m_\psi$ für alle gesammelten Datenpunkte (insgesamt 20682) beträgt 0,0088 kg/(m²s). Bezogen auf den Mittelwert des Referenz-

werts (Soll-Wert) m_ψ beträgt der RMS-Wert der Abweichung 2,5%. Der Mittelwert und die Standardabweichung des relativen Fehlers $(m_{\text{post}} - m_\psi)/m_\psi$ betragen -0,16% und 3,4%. Der Mittelwert des relativen Fehlers ist zur Diskussion der Abweichung zwischen Ist-Wert und Soll-Wert jedoch ungeeignet, da sich positive und negative Abweichungen im Mittel aufheben können. Der Wert der Standardabweichung weist jedoch darauf hin, dass für die Mehrzahl der Datenpunkte der Betrag des relativen Fehlers gering sein sollte. Eine Auswertung der Fehlerverteilung zeigt, dass 95,8% der Datenpunkte einen relativen Fehler besitzen der im Betrag kleiner als 5% ist. Der Pearsonsche Korrelationskoeffizient nach (6.17) der Auftragung $m_{\text{post}} = f(m_\psi)$ beträgt 0,98.

Vergleichbare Aussagen gelten auch für die Datenpunkte in Abb. 7.8b, in der die Werte von m_{post} über der Massenstromdichte m aufgetragen sind, die aus der integralen Modellierung der Reaktionszone stammt. Der RMS-Wert der Abweichung $m_{\text{post}} - m$ beträgt 0,014 kg/(m²s). Bezogen auf den Mittelwert von m beträgt der RMS-Wert der Abweichung 3,9%. Der mittlere relative Fehler $(m_{\text{post}} - m)/m$ liegt bei 1,04% und seine Standardabweichung beträgt 4,39%. Für die Auftragung $m_{\text{post}} = f(m)$ resultiert ein Korrelationskoeffizient von 0,96. Ein Anteil von 88,5% der Datenpunkte besitzt einen relativen Fehler, der im Betrag kleiner als 5% ist. Einen relativen Fehler unter 7,5% weisen 94,9% der Datenpunkte auf. Erwartungsgemäß sind die Abweichungen zwischen m_{post} und m_ψ im Mittel geringer als die Abweichungen zwischen m_{post} und m . Letztere beinhalten noch zusätzliche Anteile, die aus der normalen Erweiterung von F resultieren.

Die Auswertung der Datenpunkte in Abb. 7.8a zeigt, dass die in dieser Arbeit implementierte Formulierung (5.104) die Kinematik der Isoflächen der Phasen-Feld/Level-Set-Funktion mit ausreichender Genauigkeit beschreibt. Zusammen mit dem Vergleich in Abb. 7.8b wird somit die vorgeschlagene Behandlung des Felds m (normale Erweiterung von F innerhalb eines Zeitschritts) validiert. Eine Verifikation des numerischen Lösungsverfahrens der Gleichungen ist durch die Simulation der instationären Strömung um einen beheizten Zylinder in 7.1 durchgeführt worden.

Die Abb. 7.9 zeigt die Auftragung des relativen Fehlers $(m_{\text{post}} - m_\psi)/m_\psi$ über der entdimensionierten Krümmung der Isofläche $\psi = 0,05$. Hierbei ist zu erkennen, dass der Fehler für positive dimensionslose Krümmungswerte ab etwa 0,5 signifikante Werte annimmt. Bei diesen Flammelementen mit einer hohen positiven Krümmung liegt der Krümmungsradius einer Oberfläche innerhalb der Reaktionszone in derselben Größenordnung wie die Dicke der Reaktionszone selbst. In diesem Fall nimmt die Genauigkeit der vorgeschlagenen integralen Modellierung der Reaktionszone erwartungsgemäß ab. Querdiffusionseffekte, die in dieser Arbeit nicht implementiert sind, werden bei zunehmend positiver Krümmung stärker (siehe Diskussion der DNS-Analyse in 6.1).

Die Abb. 7.10a und 7.10b zeigen den Vergleich der erweiterten normalen Ausbreitungsgeschwindigkeit F_{ext} an verschiedenen Positionen innerhalb des tanh-Profiles. Für diese Auswertungen werden Schnitte normal zur Kontur $\psi = 0,5$ gelegt, ähnlich wie bei der DNS-Analyse. Der jeweils auf der Abszisse dargestellte Wert von F_{ext} für $\psi = 0,05$ stellt den Referenzwert dar, der in Normalenrichtung nach (5.32) erweitert wird. Die Werte an der Stelle $\psi = 0,5$ stimmen sehr gut mit den Referenzwerten überein. Dies gilt auch für die Werte an der Stelle $\psi = 0,9$, wenn auch eine leicht höhere Abweichung einzelner Datenpunkte zu erkennen ist. Dies liegt an der größeren Distanz über die innerhalb eines Zeitschritts der Wert von F transportiert werden muss. Die gute Übereinstimmung der Werte von F_{ext} an verschiedenen Stellen innerhalb des tanh-Profiles wird durch die Korrelationskoeffizienten $R = 0,99979$ (a) bzw. $R = 0,99878$ (b) der Auftragung $y = f(x)$ in den Diagrammen in Abb. 7.10 bestätigt.

In Abb. 7.11a sind Datenpunkte des erweiterten Krümmungsfelds $2c_{\text{ext}}$ an der Kontur $\psi = 0,5$ über der Krümmung $2c^*$ (ebenfalls auf der Kontur $\psi = 0,5$) aufgetragen. Das Ziel der normalen Erweiterung des Krümmungsfelds ist es, an jeder Position entlang der Normalenrichtung des tanh-Profiles (insbesondere im vorderen Teil $\psi \rightarrow 0$), auf den Krümmungswert $2c^*$ der Stelle $\psi = 0,5$ zugreifen zu können. Auf der Isofläche $\psi = 0,5$ ist eine gute Übereinstimmung beider Werte $2c^*$ und $2c_{\text{ext}}$ zu erkennen, mit Ausnahme von Datenpunkten bei starker positiver Krümmung. Eine qualitativ ähnliche Aussage gilt für die Datenpunkte in Abb. 7.11b. Die Abweichungen $2c_{\text{ext}}(\psi = 0,05) - 2c^*$ sind für positive Krümmungswerte größer als beim Vergleich der Krümmungswerte an der Stelle $\psi = 0,5$. Sie weisen jedoch eine relativ geringe Streuung auf und somit eine Korrelation mit den Krümmungswerten selbst. Zur Korrektur des Fehlers könnte für positive Krümmungen die Abweichung $2c_{\text{ext}}(\psi = 0,05) - 2c^*$ als Funktion der Krümmung ($2c_{\text{ext}}$ oder $2c^*$) parametrisiert werden.

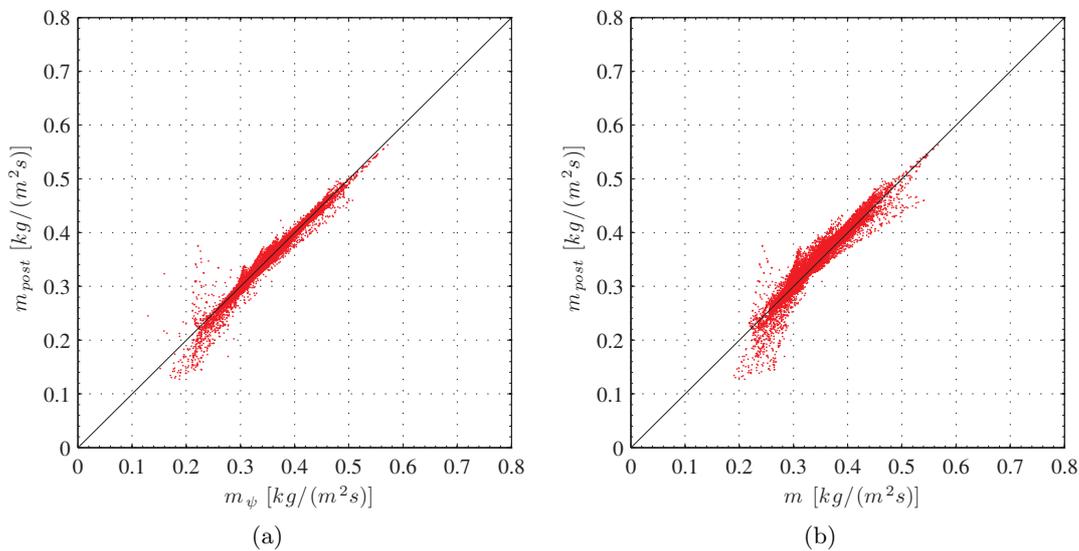


Abbildung 7.8: Aus Ergebnissen ermittelte kinematische Massenstromdichte über: (a) Massenstromdichte m_{ψ} , die in die Phasen-Feld/Level-Set-Gleichung eingeht, (b) modellierte Massenstromdichte m aus dem integralen Modell. Die Datenpunkte stammen von der Kontur $\psi = 0,05$.

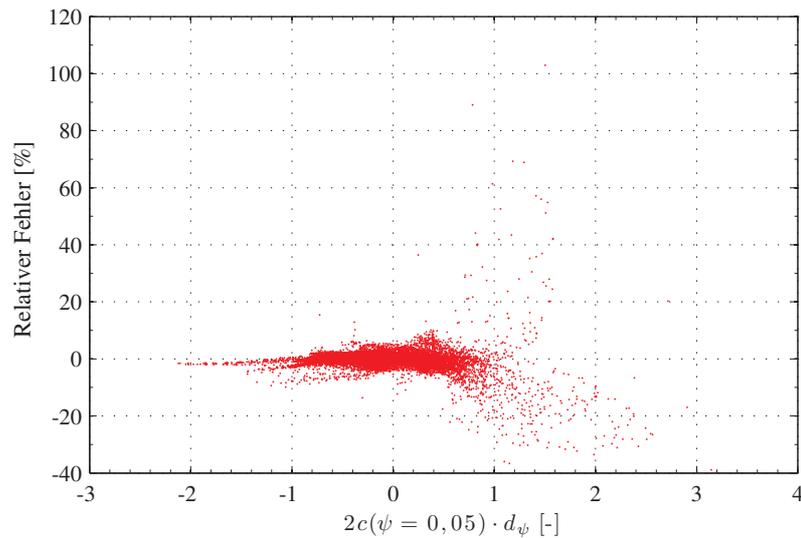


Abbildung 7.9: Relativer Fehler $(m_{\text{post}} - m_\psi)/m_\psi$ als Funktion der entdimensionierten Krümmung der Isofläche $\psi = 0,05$.

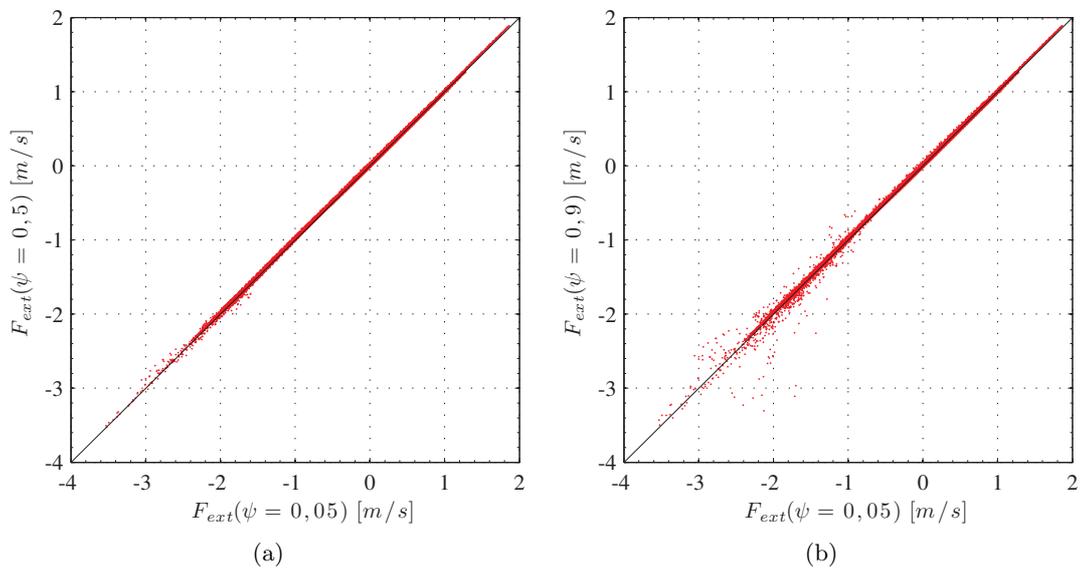


Abbildung 7.10: Auswertung der normalen Erweiterung der absoluten normalen Ausbreitungsgeschwindigkeit durch Vergleich der resultierenden Werte von F_{ext} : (a) zwischen der Mitte des tanh-Profiles ($\psi = 0,5$) und dem vorderen Teil ($\psi = 0,05$), (b) zwischen dem hinteren Ende des tanh-Profiles ($\psi = 0,9$) und dem vorderen Teil ($\psi = 0,05$).

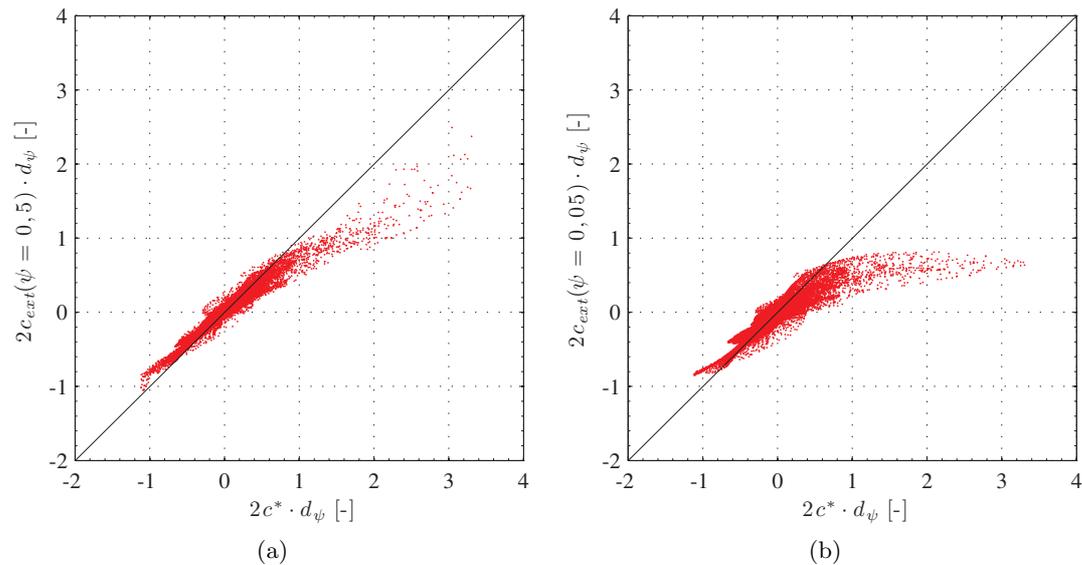


Abbildung 7.11: Auswertung der normalen Erweiterung des Krümmungsfelds der Isofläche $\psi = 0,5$ durch Vergleich der Werte: (a) an der Mitte des tanh-Profiles ($\psi = 0,5$), (b) zwischen dem vorderen Ende ($\psi = 0,05$) und der Mitte des tanh-Profiles ($\psi = 0,5$).

7.4 Akustisch angeregte Bunsenflamme

7.4.1 Einleitung

Zur Validierung des Flammenmodells wird eine Simulation einer vorgemischten Bunsenflamme durchgeführt, die einer periodisch variierenden Anströmgeschwindigkeit des Frischgasgemischs ausgesetzt ist. Die Simulationsergebnisse werden mit den experimentellen Untersuchungen von Schuller et al. [115] verglichen. In dem experimentellen Aufbau ist eine vorgemischte Bunsenflamme auf dem Rand eines zylindrischen Brenners stabilisiert. Die Ausströmgeschwindigkeit des Frischgases aus dem Brenner wird über eine akustische Anregung mittels eines Lautsprechers an der Basis des Brenners zeitlich moduliert. Bei der Flamme handelt es sich um eine vorgemischte Methan/Luft-Flamme mit einem Äquivalenzverhältnis von $\Phi = 1,05$. Als zeitliches Referenzsignal zur Triggerung der Bildaufnahmen dient die vertikale Geschwindigkeitskomponente der Strömung auf der Symmetrieachse in einer Höhe von 1,5 mm über dem Brennerand. Diese Geschwindigkeit wird mit Hilfe des Verfahrens der *Laser Doppler Velocimetry* (LDV) gemessen. Das Geschwindigkeitssignal erlaubt es einen zeitgenauen Vergleich der simulierten und der detektierten Flammenfront zu vorgegebenen Phasenwinkeln der Anregung durchzuführen.

7.4.2 Numerisches Modell und Parameter

In Abb. 7.12 ist eine Skizze der Geometrie des Rechengebiets mit Angaben zu den Randbedingungen gezeigt. Das physikalische Problem ist achsensymmetrisch. Dementsprechend ist das Rechengebiet zweidimensional, mit nur einer Zellschicht in azimuthaler Richtung. Am Einlass 1 wird eine instationäre vertikale Geschwindigkeitskomponente

$w(t) = \bar{w} + \hat{w} \sin(2\pi ft)$ vorgegeben. Die Geschwindigkeitsmodulation am Einlass erfolgt mit einer Frequenz von $f = 62,5$ Hz. Der RMS-Wert w' der vertikalen Geschwindigkeitskomponente am LDV-Messpunkt beträgt $0,19$ m/s. Für diese Bedingungen sind zeitlich aufgelöste Aufnahmen der Flammenfront in [115] vorhanden. Die Amplitude \hat{w} am Einlass 1 wird so gewählt, dass der simulierte RMS-Wert an der Messposition des LDV-Verfahrens mit dem experimentellen Wert übereinstimmt. Am Einlass/Auslass 2 wird der Massenbruch von Sauerstoff in Luft sowie die Umgebungstemperatur T_{amb} als Randbedingung vorgegeben. Die Flammenfront wird numerisch an der ersten Zelle (in Richtung Symmetrieachse) der Brennerkante durch die Dirichlet-Randbedingung $\psi = 0,5$ fixiert. Zur Berechnung des Parameters I_Y nach (4.18) wird der in [115] angegebene Wert $s_L = 0,39$ m/s verwendet. Die limitierende Spezies Y ist der Luftsauerstoff O_2 . Dessen Lewis-Zahl wird mit $Le_Y = 1,11$ vorgegeben [123]. Der Auftrieb wird in der Simulation berücksichtigt. Die Abmessungen der Geometrie des Rechengebiets sind: $r_B = 11$ mm, $t_B = 1$ mm, $r_2 = 2,2$ mm, $t_E = 1,8$ mm und $L_z = 36$ mm.

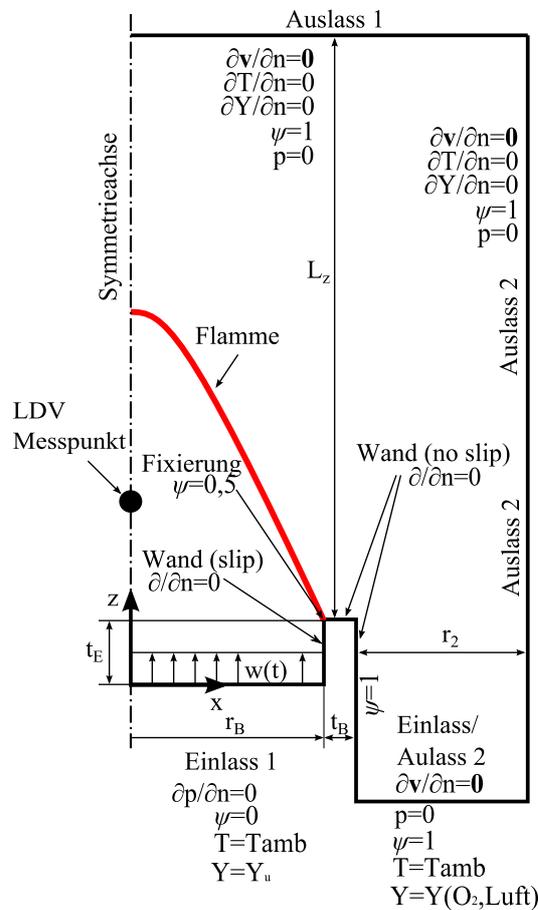


Abbildung 7.12: Geometrie und Randbedingungen für die Simulation der akustisch angeregten Bunsenflamme aus Schuller et al. [115].

Bei der Diskussion der eindimensionalen Simulationsergebnisse in 7.2 wird die Überschätzung der Rauchgastemperatur durch das Flammenmodell beschrieben. Zum Vergleich mit experimentellen Daten sollte die Wärmefreisetzung und somit die thermische Expansion durch die Flammenfront einen realistischen Wert besitzen. Hierfür wird

der Quellterm in der gelösten Transportgleichung (5.95) für die Temperatur mit einem Faktor 0,833 multipliziert. Mit dieser Korrektur resultiert in einer eindimensionalen Simulation eine realistische Rauchgastemperatur von 2214 K, die sehr gut mit dem Wert 2231 K aus Berechnungen mit CEA [59] übereinstimmt. Für die mittlere Geschwindigkeit \bar{w} am Einlass 1 wird der Wert 1,1 m/s verwendet. Dieser Wert wird auch in der begleitenden Simulation mit der G -Gleichung in [115] gewählt. Er liegt etwas höher als die mittlere Geschwindigkeit 0,97 m/s, die im Experiment durch Messung des Brenngasmassenstroms ermittelt wurde. In der Simulation in [115] wird der erhöhte Wert 1,1 m/s so gewählt, dass bei ausgeschalteter Anregung die Höhe des simulierten stationären Flammenkegels der realen Flammenkegelhöhe entspricht. Dadurch wird der in der Simulation vernachlässigte Effekt der Grenzschicht an der Innenseite des Brennerrohrs kompensiert (slip-Bedingung).

Im Folgenden wird eine Abschätzung des Verbrennungsregimes durchgeführt. Mit einer laminaren Flammengeschwindigkeit von $s_L = 0,39$ m/s resultiert ein Verhältnis $w'(LDV)/s_L \approx 0,49$. Die konvektive Wellenlänge der vertikalen Geschwindigkeitskomponente aufgrund der Anregung beträgt $\lambda = \bar{w}/f = 0,0176$ m. Aus einer mit INSFLA durchgeführten detaillierten eindimensionalen Flammensimulation resultiert eine Flammendicke nach (2.43) von $l_F = 0,38$ mm. Wenn die konvektive Wellenlänge λ zur Abschätzung des Verbrennungsregimes als integrales Längenmaß l_I interpretiert wird, dann resultiert ein Verhältnis $l_I/l_F \approx 46$. Es folgt somit für die turbulente Reynolds-Zahl nach (2.68) $Re_T \approx 23$. Die Verbrennung findet nach dieser Abschätzung im Regime der gewellten Flammenfronten (*wrinkled flamelets*) statt.

Zur effizienten Simulation der angeregten Flammenfront werden die normalen Profile von Y und T durch die Wahl des Faktors $F_{\text{thick}} = 2,5$ in (5.94) künstlich verbreitert. Für die Phasen-Feld/Level-Set-Funktion wird der Parameter $\varepsilon = 2,25 \cdot 10^{-4}$ m²/s gewählt. Das Netz ist äquidistant mit einer Gitterweite $\Delta r = \Delta z = 0,2$ mm. Der Übergangsbereich von ψ wird dabei durch ca. 8 Zellen aufgelöst. Seine Dicke ist nahezu gleich der Profildicke von Y und T . Der Zeitschritt beträgt $\Delta t = 1 \cdot 10^{-5}$ s. Damit resultiert (im eingeschwungenen Zustand der Lösung) eine maximale Courant-Zahl von ca. 0,19. Zur Vermeidung von Oszillationen im Y - und T -Feld wird als Interpolationsverfahren das *blended differencing scheme* (5.70) verwendet. In einer zusätzlichen Simulation mit größerem Rechengebiet ($r_2 = 13,8$ mm, $L_z = 75$ mm) hat sich in den Ergebnissen keine signifikante Änderung der entsprechenden Flammenfronten gezeigt.

7.4.3 Diskussion der Ergebnisse

In Abb. 7.13 werden die simulierten Flammenfronten für 4 verschiedene Phasenwinkel der Anregung mit den experimentell aufgenommenen Fronten aus [115] verglichen. Hierbei sind die Simulationsergebnisse an der Symmetrieachse gespiegelt worden. Die Phasenwinkel sind anhand des zeitlichen Verlaufs der vertikalen Geschwindigkeitskomponente am LDV-Messpunkt definiert. Der Phasenwinkel $\pi/2$ entspricht dabei dem Zeitpunkt maximaler Amplitude. Die Zeit zur Simulation einer Periode der Anregung (wall-clock time) beträgt ca. 11 Minuten auf einem Prozessor (Intel i7).

Die Simulation kann die zeitliche Änderung der Form und Position der Flammenfront gut wiedergeben, mit Ausnahme der Flammenfront bei $\varphi = \pi$. Kurz nach $\varphi = \pi/2$ liegt eine nahezu zylinderförmige Flamme in der Nähe der Symmetrieachse vor. Bei der Verbrennung des Frischgasgemischs nahe der Symmetrieachse unterhalb der Flammenspitze nimmt die Krümmung der Reaktionszone hohe Werte an. Die Modellierungsan-

nahme einer dünnen Reaktionszone relativ zum Krümmungsradius ist nicht mehr erfüllt. Zusammen mit dem physikalischen Modellierungsfehler kommt es in der Nähe der Symmetrieachse unter der Flammenspitze zu einem numerischen Fehler bei der Lösung der Phasen-Feld/Level-Set-Gleichung. Im Bild zu $\varphi = \pi/2$ ist bereits ein kleiner hellblauer Punkt (im dunkelblauen Bereich) unter der Flammenspitze zu erkennen. Dieser Punkt wächst im Laufe der Simulationszeit an und der Übergangsbereich der Phasen-Feld/Level-Set-Funktion bricht an der Flammenspitze kurzzeitig auf. Die Dynamik der Flammenspitze und der Abbau von Y werden dabei nicht mehr realistisch beschrieben. Die Flammenspitze bewegt sich aufgrund des beschriebenen physikalischen und numerischen Fehlers zu schnell nach unten in Richtung des Brenners. Auch in Simulationen mit höherer räumlicher und zeitlicher Auflösung bleibt dieser Fehler bestehen. In [115] wird von einem Flackern (*flickering*) der Flammenspitze berichtet, der zu der unscharfen Front an der Flammenspitze im experimentellen Bild zu $\varphi = \pi/2$ in Abb. 7.13 führt. Ob dieses physikalische Flackern der Grund für den numerischen Fehler bei der Lösung der Phasen-Feld/Level-Set-Gleichung an der Flammenspitze ist, konnte nicht geklärt werden. Die restlichen gezeigten Flammenfronten stimmen zeitlich gut mit dem Experiment überein, weil die Triggerung zur Bildaufnahme und somit zur Bildauswahl aus den Simulationsergebnissen durch das LDV-Signal erfolgt. Somit wird die Auswahl der Vergleichszeitpunkte zwischen Simulation und Experiment nicht durch den Fehler an der Spitze der zylinderförmigen Flamme beeinflusst.

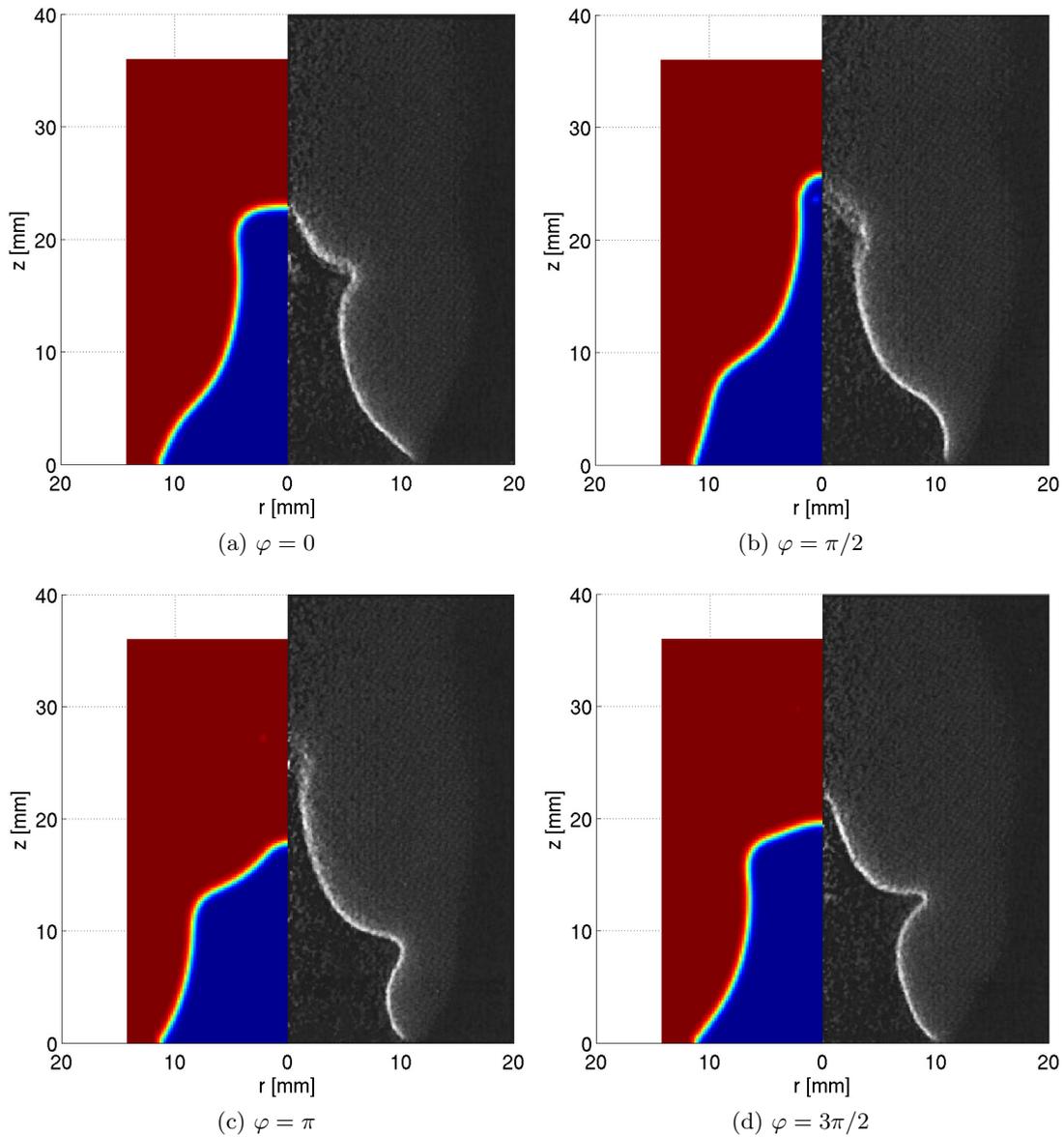


Abbildung 7.13: Vergleich zwischen der simulierten Flammenfront (linke Bildhälften, Blau: $\psi = 0$, Rot: $\psi = 1$) und der experimentell detektierten Flammenfront (rechte Bildhälften) aus [115] zu 4 verschiedenen Phasenwinkeln φ der Anregung.

8 Erweiterung des Modells zur Beschreibung thermisch-diffusiver Instabilitäten

In diesem Kapitel wird die Erweiterung des Modells zur Simulation von Flammen vorgestellt, bei denen der integrale Parameter I_γ nicht mehr als annähernd konstant betrachtet werden kann. Dies ist z.B. der Fall wenn die Lewis-Zahl der limitierenden Spezies deutlich kleiner als 1 ist. Solche Flammenfronten neigen zur Ausbildung zellulärer Strukturen aufgrund der thermisch-diffusiven Instabilität. Am Ende des Kapitels wird die Simulation einer vorgemischten mageren Wasserstoff/Luft-Flamme vorgestellt und diskutiert.

8.1 Einführung

Im Folgenden wird das integrale Reaktionszonenmodell zur Simulation einer Wasserstoff/Luft-Flamme verwendet, die eine zelluläre Struktur aufweist. Die Zellen bilden sich aufgrund der thermisch-diffusiven Instabilität der Flammenfront. Vorgemischte Flammen sind thermisch-diffusiv instabil, wenn die Lewis-Zahl der limitierenden Spezies unterhalb einer kritischen Lewis-Zahl liegt, die in der Regel kleiner als 1 ist [143, 29]. Der thermisch-diffusive Instabilitätsmechanismus kann erklärt werden, wenn eine starke Abhängigkeit der Flammengeschwindigkeit von der Reaktionsrate und der Temperatur in der Reaktionszone angenommen wird. Bei einer Flamme mit $Le < 1$ ist die charakteristische Dicke des Profils der limitierenden Spezies größer als die des Temperaturprofils. Bei einer Auslenkung einer planaren Flammenfront in Richtung des Frischgases (positive Krümmung) wird der diffusive Transport der limitierenden Spezies in Richtung der Reaktionszone wie auch der Wärmetransport durch Wärmeleitung vom Rauchgas in Richtung des Frischgases verstärkt. Dieser Verstärkungseffekt ist umso größer, je dicker die Schicht ist, über die diffusiver Transport stattfindet. Bei $Le < 1$ vergrößert sich der diffusive Fluss der limitierenden Spezies in die Reaktionszone in stärkerem Maße als die Wärmeleitung in Richtung des Frischgases. Letzter Einfluss würde zu einer Verringerung der Temperatur in der Reaktionszone führen. Die höhere Konzentration der limitierenden Spezies in der Reaktionszone erhöht jedoch die Reaktionsrate und Wärmefreisetzung, und somit die Temperatur. In der Summe überwiegt dieser Effekt und die Temperatur in der Reaktionszone ist höher als in einer entsprechenden planaren Flammenfront. Durch die resultierende höhere Flammengeschwindigkeit wächst die Auslenkung der Flammenfront weiterhin in Richtung des Frischgasgemischs an. Bei einer entsprechenden Auslenkung in Richtung des Rauchgases nimmt die Flammengeschwindigkeit ab und die Auslenkung wächst ebenfalls an.

Bei einer zellulären Flamme ist jedoch der dominante Instabilitätsmechanismus, der anfänglich an der planaren Flammenfront wirkt, in der Regel die hydrodynamische oder Darrieus-Landau Instabilität aufgrund der thermischen Expansion. Dieser Instabilitätsmechanismus ist immer vorhanden, wenn eine dünne räumliche Zone durchströmt wird, in der die Dichte abnimmt. Die Form und Größe der entstandenen Zellen in der Flammenfront resultiert jedoch hauptsächlich aus der thermisch-diffusiven Instabilität [143] und somit aus physikalischen und chemischen Eigenschaften des Brenngasgemischs [120].

Die hier vorgestellte Simulation soll in qualitativer Weise die Fähigkeit des Modells zur Beschreibung typischer zellulärer Strukturen bei thermisch-diffusiv instabilen Flammen zeigen. Hierzu gehört neben der Form der Zellen auch die charakteristische Temperaturverteilung mit kälteren Gebieten in den Zellrändern, die in Richtung der Rauchgase ausgelenkt sind. Die heißen Zellkerne oder Zellzentren sind zum Frischgas hin gekrümmt [29]. Simulationen mit detaillierten chemischen Mechanismen zeigen, dass an den Zellrändern eine lokale Verlöschung der Flammenfront stattfinden kann [38]. In dieser Arbeit wird eine magere Wasserstoff/Luft-Flamme bei einem Äquivalenzverhältnis von $\Phi = 0,37$, einem atmosphärischen Umgebungsdruck von $p = 1,0132$ bar und einer Frischgastemperatur von $T = 298$ K betrachtet. Die niedrige Lewis-Zahl der limitierenden Spezies H_2 in dieser Flamme resultiert aus der hohen Diffusivität des Wasserstoffs. Für die Lewis-Zahl wird der Wert $Le_Y = 0,3$ gewählt [123].

Um den thermisch-diffusiven Charakter mit dem Flammenmodell beschreiben zu können, muss das Integral I_Y als Funktion der Temperatur in der Reaktionszone parametrisiert werden. Da die Simulationsergebnisse nur qualitativ diskutiert und bewertet

werden, wird die Parametrisierung von I_Y vereinfacht durchgeführt. Die Modellierung der diffusiven Flüsse über konstante Lewis-Zahlen stellt ebenfalls eine Vereinfachung dar. Dies gilt insbesondere für das sehr mobile Wasserstoffmolekül, das auch maßgeblich durch Thermodiffusion beeinflusst werden kann [38], [62]. Dieser Effekt wird hier nicht im Modell berücksichtigt.

8.2 Numerisches Setup

Die Simulation findet auf einem zweidimensionalen quadratischen Gebiet mit einer Kantenlänge von 6 cm statt. Am unteren Rand des Rechengebiets werden als Randbedingung die Frischgaszusammensetzung, eine feste Einströmgeschwindigkeit von 0,25 m/s sowie ein verschwindender Druckgradient in Normalenrichtung zum Rand vorgegeben. Die Einströmgeschwindigkeit ist kleiner als die Flammengeschwindigkeit. Die Flammenfront wandert somit (auch in ihrer planaren Form) im Laufe der Simulation nach unten. Am oberen Rand werden für alle Variablen verschwindende normale Gradientenkomponenten gesetzt und der hydrodynamische Druck wird mit $p = 0$ Pa fest vorgegeben. An den seitlichen Rändern werden zyklische Randbedingungen für alle Variablen gewählt. Für die Variablen die in Normalenrichtung der Flamme erweitert werden (Krümmung und Temperaturfeld zur Parametrisierung von I_Y), werden am oberen und am unteren Rand verschwindende normale Ableitungen als Randbedingung gesetzt. Die Gravitation wird nicht berücksichtigt. Dadurch werden Auftriebseffekte vernachlässigt, die bei Flammen die nach unten brennen, eine stabilisierende Wirkung haben können [143].

8.3 Parametrisierung des Integrals I_Y

Zur Parametrisierung des Integrals I_Y wird hier vereinfachend angenommen, dass das Integral nur von der Temperatur in der Reaktionszone abhängt. Diese Temperaturabhängigkeit der Reaktionsrate ist notwendig, um den thermisch-diffusiv instabilen Charakter beschreiben zu können. In der Realität hängt die Reaktionsrate ω_Y , und somit auch das Integral I_Y , von der Temperatur, von der Konzentration beteiligter chemischer Spezies und vom thermodynamischen Druck ab [137].

Bei Wasserstoffflammen ist im Gegensatz zu Kohlenwasserstoffflammen keine CO-Oxidationszone in der Flammenstruktur vorhanden. Außerdem ist, wegen der starken Abhängigkeit der globalen Reaktionsrate von der Temperatur, die Reaktionszone in der Regel dünn. Daher liegt die Temperatur in der Reaktionszone nahe an der Rauchgastemperatur. Dies entspricht der Annahme beim Konzept der *high activation energy asymptotics* (siehe 3.2). Mit dieser Vereinfachung kann das Integral I_Y als Funktion der adiabatischen Verbrennungstemperatur T_b parametrisiert werden.

Für eine bestimmte Frischgaszusammensetzung kann I_Y über die integrale Beziehung (siehe (4.18))

$$I_Y = -s_L \rho_u Y_u \quad (8.1)$$

aus Literaturwerten der laminaren Flammengeschwindigkeit s_L berechnet werden. Einer bestimmten Frischgaszusammensetzung entspricht eine adiabatische Flammentemperatur, die als Parameter für das Integral $I_Y = f(T_b)$ dient. Hierbei wird angenommen, dass die Rauchgastemperatur einer gekrümmten und gestreckten Flamme der adiabatischen Flammentemperatur entspricht. Dies ist im Allgemeinen nicht erfüllt [28] und stellt ebenfalls eine Vereinfachung dar.

Die Parametrisierung des Integrals erfolgt mit einem Arrhenius-Ansatz:

$$I_Y = -p_1 \left(\frac{T_b}{1\text{K}} \right)^{p_2} \exp \left(\frac{-p_3}{T_b} \right). \quad (8.2)$$

Die Parameter werden mit Hilfe der *curve fitting toolbox* der Software MATLAB® ermittelt [94]. Die adiabatische Verbrennungstemperatur T_b wird für Wasserstoff/Luft Gemische bei atmosphärischem Druck $p = 1\text{ atm}$ und der Frischgastemperatur $T = 298\text{ K}$ anhand der Online-Version CEARUN (<http://cearun.grc.nasa.gov/>, Stand April 2012) des NASA Computer Codes CEA (*Chemical Equilibrium with Applications*) [59] berechnet. Die Werte der laminaren Flammgeschwindigkeit stammen aus [83]. In Abb. 8.1 sind die Werte des Integrals I_Y über der Rauchgastemperatur für 8 verschiedene Flammen mit dem Äquivalenzverhältnis $\Phi = 0,3$ bis $\Phi = 1,0$ aufgetragen. Die angepasste Korrelation besitzt die Parameter $p_1 = 0,2725\text{ kg m}^{-2}\text{ s}^{-1}$, $p_2 = 0,2702$ und $p_3 = 9070\text{ K}$.

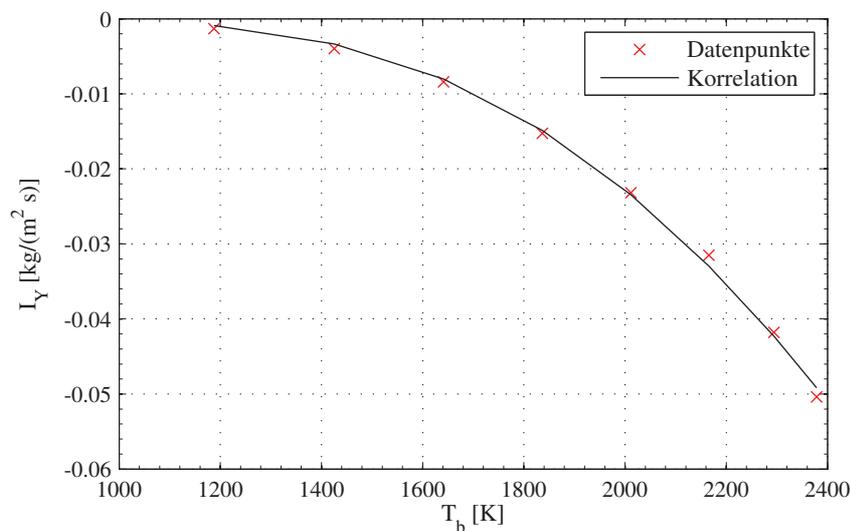


Abbildung 8.1: Abhängigkeit des integralen Verbrauchs I_Y von der adiabatischen Verbrennungstemperatur T_b .

In der Simulation sollte die Temperatur in der Reaktionszone, die als Parameter für I_Y dient, einen konstanten Verlauf in Normalenrichtung innerhalb des Übergangsbereichs von ψ besitzen. Dazu muss das Temperaturfeld in Normalenrichtung zu einem Temperaturfeld T_{ext} erweitert werden. Dies erfolgt analog zu der Erweiterung des Krümmungsfelds mit einer Gleichung vom Typ (5.42). Der Diffusionskoeffizient wird dabei zu $D = d_{\psi}^2 / \Delta t$ gesetzt. Aufgrund der endlichen Dicke der Reaktionszone in der numerischen Modellumsetzung (und auch in Realität) ist die charakteristische Temperatur innerhalb der Reaktionszone niedriger als die Rauchgastemperatur. Aus diesem Grund wird eine einfache Korrektur der Parametrisierung vorgenommen. Der Temperatur T_{ext} , die näherungsweise konstant innerhalb der Reaktionszone ist, wird ein konstanter Wert T_{korr} hinzuaddiert. Die Summe geht als Argument in die Korrelation (8.2) ein. Da hier nur eine qualitative Simulation einer zellulären Flamme durchgeführt wird, wird eine konstante Wärmeleitfähigkeit des Gemischs von $\lambda = 0,097\text{ W/(mK)}$ verwendet. Dieser Wert entspricht der Wärmeleitfähigkeit der Verbrennungsprodukte einer Wasserstoff/Luft-Flamme unter den hier vorhandenen Bedingungen (berechnet mit CEARUN [59]).

8.4 Simulationsergebnisse

Eindimensionale Simulationen mit der vorgeschlagenen Parametrisierung und den gewählten Stoffdaten zeigen, dass die resultierende laminare Flammgeschwindigkeit und die Rauchgastemperatur von der Wahl des Parameters ε abhängig sind. Dies ist zu erwarten, da sich mit der Dicke der Reaktionszone auch die charakteristische Temperatur T_{ext} ändert und somit der Wert des Integrals I_Y . Für $\varepsilon = 2 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}$ und $T_{\text{korrr}} = 200 \text{ K}$ resultiert ein laminare Flammgeschwindigkeit $s_L = 0,27 \text{ m/s}$ (zum Vergleich, $s_L = 0,29 \text{ m/s}$ aus Referenz [83]). Aufgrund der vereinfachten Beschreibung des Integrals I_Y und der spezifischen Wärmekapazität c_p (als die von Stickstoff) liegt die resultierende Rauchgastemperatur mit einem Wert von $T_b \approx 1820 \text{ K}$ allerdings höher als der Referenzwert $T_b = 1356 \text{ K}$ aus der Berechnung mit CEARUN.

In der zweidimensionalen Simulation wird eine relativ niedrige räumliche Auflösung verwendet, bei der der Übergangsbereich der Phasen-Feld/Level-Set-Funktion mit ca. 5 Zellen aufgelöst wird. In Abb. 8.2 ist das resultierende Temperaturfeld dargestellt. Die typische Zellenstruktur ist gut zu erkennen. Die wärmeren Zellkerne sind in Richtung des Frischgasgemischs ausgelenkt und die kälteren Ränder ragen ins Rauchgasgebiet hinein. In Abb. 8.3 ist das entsprechende Massenbruchfeld der limitierenden Spezies H_2 gezeigt. Aufgrund der kleinen Lewis-Zahl von Wasserstoff ist das Y -Profil durch die Flammenfront dicker als das Temperaturprofil. Da die vorgestellte Parametrisierung von I_Y und die eingeführte Korrektur der Temperatur nur eine qualitative Beschreibung der Flammenfront ermöglichen, wird auf eine Studie zur Untersuchung der Abhängigkeit der Lösung vom Rechenetz und von numerischen Parametern verzichtet.

In Abb. 8.4 ist das parametrisierte Integral I_Y auf der Isofläche $\phi = 0,05$ dargestellt. Diese Isofläche liegt am vorderen Ende der modellierten Reaktionszone. In den Zellrändern (ins Rauchgasgebiet ausgelenkt) ist der integrale Verbrauch I_Y wesentlich geringer als in den Zellkernen. Dies resultiert aus der Parametrisierung von I_Y anhand der Temperatur. Die Massenstromdichte m aus dem integralen Reaktionszonenmodell ist in Abb. 8.5 auf derselben Kontur gezeigt. Die Massenstromdichte ist in den gekrümmten wärmeren Zellkernen größer als in den flacheren Zellflanken (die Farbe der Kontur verläuft von Grün auf Blau). Dies entspricht einer negativen Markstein-Zahl, wenn eine Abhängigkeit der Massenstromdichte von der Krümmung angenommen wird [38]. Mit der klassischen G -Gleichung wäre diese Simulation numerisch nur schwer umsetzbar [105],[106]. In [62] werden detaillierte Simulationen magerer Wasserstoff/Luft-Flammen unter Berücksichtigung eines Multikomponentenansatzes für die Diffusion einschließlich des Soret- und Dufour-Effekts durchgeführt. Die Auswertungen zeigen, dass die lineare Beziehung zwischen Flammgeschwindigkeit und Streckung, die aus der asymptotischen Theorie stammt, bei der Beschreibung der zellulären Flammenstrukturen versagt. Von den Zellflanken zu den Zellspitzen hin nimmt die Massenstromdichte zu und besitzt in den stark gekrümmten Zellspitzen die höchsten Werte. Diese hohen Werte in den Zellspitzen stimmen nicht mit den Erkenntnissen aus detaillierten Simulationen [8, 38, 62] überein, nach denen eine geringere Brenngeschwindigkeit in den Zellspitzen vorliegt. Die Ursache dieses Unterschieds liegt in der Herleitung der Beziehung für die Massenstromdichte. Dabei wird angenommen, dass die limitierende Spezies hinter der Reaktionszone vollständig verbraucht ist. Eine lokale Verlöschung, bei der die limitierende Spezies hinter der Reaktionszone noch vorhanden ist, kann das Modell nicht vorhersagen und versagt demnach in den Zellspitzen. Aus der Sicht des Modells bleibt die Reaktionszone in den Zellspitzen intakt, jedoch sehr stark gekrümmt. Aus dieser starken Krümmung

resultiert der hohe Wert der Massenstromdichte.

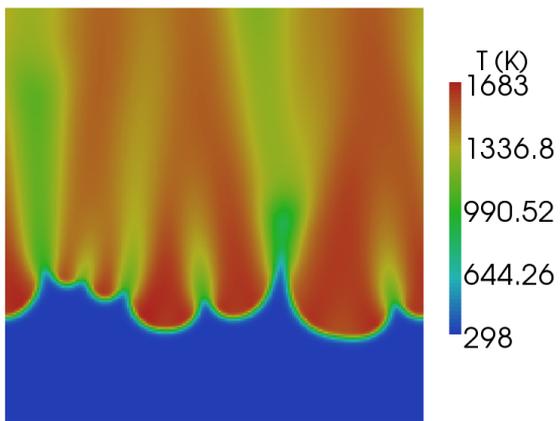


Abbildung 8.2: Temperaturfeld mit der charakteristischen zellulären Struktur.

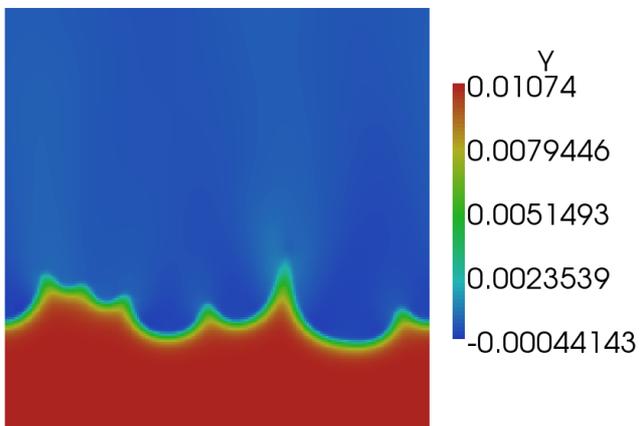
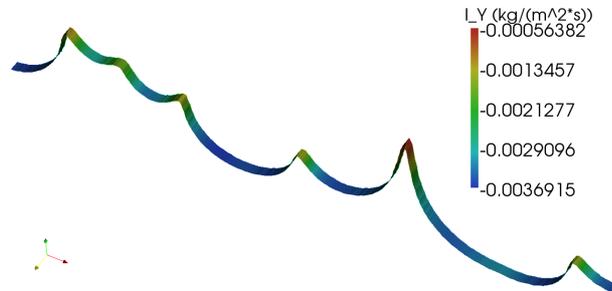
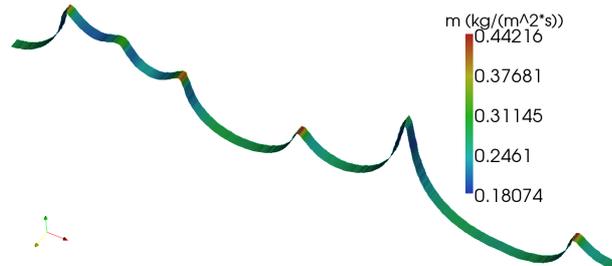


Abbildung 8.3: Massenbruchfeld von H_2 .

Abbildung 8.4: Integral I_Y auf der Kontur $\phi = 0,05$.Abbildung 8.5: Massenstromdichte m aus dem integralen Reaktionszonenmodell auf der Kontur $\phi = 0,05$.

9 Zusammenfassung und Ausblick

In der vorliegenden Arbeit wurde eine neuartige Strategie zur Modellierung und Simulation vorgemischter Flammen basierend auf der Level-Set-Methode vorgestellt. Die integrale Modellierungsweise von dünnen Flammen, die historisch aus der strömungsmechanischen Sichtweise der Flammenausbreitung stammt, wird hier auf die Reaktionszone innerhalb der Flammenstruktur übertragen. Dabei wird eine integrale Formulierung der chemischen Vorgänge innerhalb der Reaktionszone vorgenommen. Anstatt die gesamte Flammenbewegung mittels einer Level-Set-Gleichung zu beschreiben wird hier lediglich die Bewegung der reaktiven räumlichen Struktur simuliert.

Die normale Ausbreitungsgeschwindigkeit der modellierten Reaktionszone resultiert aus einer integralen Beziehung der Konzentration der limitierenden Spezies. Die Erhaltungsgleichung dieser Spezies wird in einem krummlinigen und bewegten Koordinatensystem formuliert, das sich mit der modellierten Reaktionszone bewegt. Insbesondere verlaufen die Koordinatenflächen einer Koordinate dieses Systems entlang der Reaktionszone. Die integrale Beziehung der Erhaltungsgleichung der limitierenden Spezies bilanziert ihre konvektiven und diffusiven Flüsse in Normal- und Tangentialrichtung, den integralen chemischen Abbau durch den modellierten Quellterm sowie die zeitliche Akkumulation innerhalb der reaktiven räumlichen Zone. Aus dem konvektiven Fluss (formuliert im bewegten System) in Normalenrichtung resultiert die Massenstromdichte durch die Koordinatenflächen entlang der Reaktionszone. Der physikalische Modellparameter ist der integrale Verbrauch der limitierenden Spezies, welcher für einen gegebenen Brennstoff aus der laminaren Flammengeschwindigkeit abgeschätzt werden kann. Für Brenngasgemische mit einer Lewis-Zahl der limitierenden Spezies nahe an 1 kann der Modellparameter als annähernd konstant angenommen werden. Bei einer Lewis-Zahl deutlich kleiner als 1 wird eine Parametrisierung des integralen Verbrauchs als Funktion der charakteristischen Temperatur in der Reaktionszone vorgeschlagen. Hiermit ist eine qualitative Simulation zellulärer Flammenstrukturen möglich.

Die aus der Modellierung resultierende Massenstromdichte geht in die numerische Umsetzung des Modells mittels einer Level-Set-Methode ein. Hier wird eine Formulierung der Level-Set-Methode gewählt, die auf klassische Diskretisierungsverfahren zurückgreifen kann. Die integrale Modellierung der Massenstromdichte wird durch Einführung physikalisch motivierter Vereinfachungen in eine Form überführt, die eine direkte Implementierung in OpenFOAM® ermöglicht. Die verwendete Level-Set-Funktion besitzt den Charakter einer Phasen-Feld-Funktion. Die Dicke des Übergangs der Phasen-Feld-Funktion zwischen ihren Werten 0 und 1 wird durch den Einbau zweier zusätzlicher Terme (1 Konvektions- und 1 Diffusionsterm) in die Phasen-Feld/Level-Set-Gleichung im Laufe einer Simulation konstant gehalten. Zur Erhöhung der numerischen Effizienz des Verfahrens können die aufzulösenden Felder künstlich verbreitert werden.

Die Implementierung des Modells wird durch eine Auswertung der Kinematik der Isoflächen der Phasen-Feld/Level-Set-Funktion verifiziert. Die physikalische Gültigkeit des Modells wird in einem ersten Schritt durch Auswertung von DNS-Daten validiert. In einem zweiten Schritt erfolgt eine Validierung anhand der Simulation einer periodisch

gestörten Bunsenflamme und dem Vergleich mit entsprechenden experimentellen Aufnahmen. Der Strömungslöser wird durch Simulation der periodischen Wirbelablösung an einem beheizten Zylinder verifiziert.

Zusammenfassend kann das vorgestellte Flammenmodell als ein auf der Level-Set-Methode basierendes Modell vorgemischter Flammen beschrieben werden, das bei Vorgabe des integralen Verbrauchs der limitierenden Spezies die Massenstromdichte durch die Reaktionszone als Funktion der Felder berechnet, die in der Simulation aufgelöst werden. Die Variation des Brennverhaltens der Flamme resultiert somit im Laufe der Simulation und wird nicht in Form einer Markstein-Zahl vorgegeben. Ein integrales Modellierungskonzept, auf das theoretische/analytische Untersuchungen zur Flammendynamik beruhen, ist mit der vorliegenden Arbeit in einer modernen Strömungssimulationsumgebung anwendbar.

Die hier vorgeschlagene Parametrisierung des integralen Verbrauchs als Funktion der Temperatur in der Reaktionszone erlaubt es, die zelluläre Struktur von thermisch-diffusiv instabilen Flammenfronten qualitativ zu simulieren. Diese Art von Flammenfronten können aus numerischen Stabilitätsgründen nur schwer mit der klassischen G -Gleichung simuliert werden.

Sowohl für das physikalisch motivierte integrale Flammenmodell wie auch für die Implementierungsmethodik mittels der Phasen-Feld/Level-Set-Funktion können weiterführende Arbeiten durchgeführt werden. Die vernachlässigten Terme des diffusiven Tangentialtransports sowie der zeitlichen Akkumulation innerhalb der Reaktionszone könnten nach geeigneter Formulierung für den verwendeten Code berücksichtigt werden. Der diffusive Tangentialtransport würde den Modellfehler in Bereichen starker positiver Krümmung der Reaktionszone reduzieren. Der zeitliche Akkumulationsterm ist für hochfrequent gestörte Flammenfronten relevant, bei denen die Zeitskalen der Störung direkt mit den charakteristischen Zeitskalen der Reaktionszone koppeln. Das Modell könnte mit dem REDIM-Verfahren gekoppelt werden, um eine universelle Formulierung des integralen Modellparameters zu ermöglichen. Die Parametrisierung des integralen Verbrauchs würde durch eine Tabellierung seines Werts im Rahmen des REDIM-Verfahrens ersetzt werden. Zur genaueren Vorhersage der Rauchgastemperatur mit dem Flammenmodell ist eine verbesserte Formulierung der Wärmekapazität des Gemischs nötig. Die Parametrisierung des Integrals I_Y könnte mit der Enthalpie in der Reaktionszone durchgeführt werden, anstatt mit der Temperatur.

Bezüglich der numerischen Implementierung des Modells besteht ein Verbesserungspotential bei der Berechnung des Krümmungsfelds (z.B. mit geeigneten Glättungsverfahren) sowie bei der normalen Erweiterung des Krümmungswerts und der charakteristischen Reaktionszonentemperatur. Das Verfahren der Erweiterung in Normalenrichtung könnte durch Lösen der entsprechenden Transportgleichungen innerhalb eines Zeitschritts in einer von der Simulationszeit entkoppelten Zeitvariable (künstliche Zeit [99]) verbessert werden.

Literaturverzeichnis

- [1] D. Adalsteinsson und J. A. Sethian. The Fast Construction of Extension Velocities in Level Set Methods. *Journal of Computational Physics*, 148:2–22, 1999.
- [2] David Adalsteinsson und James A. Sethian. A Fast Level Set Method for Propagating Interfaces. *Journal of Computational Physics*, 118:269–277, 1995.
- [3] R.C. Aldredge. An Analytical Model for Flame Propagation in Low-Mach-Number, Variable-Density Flow. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 24:1163–1169, 1997.
- [4] Rutherford Aris. *Vectors, Tensors, and the Basic Equations of Fluid Mechanics*. Dover Publications, 1962.
- [5] Hans Dieter Baehr und Stephan Kabelac. *Thermodynamik*. Springer, 2009.
- [6] G. I. Barenblatt, Y. B. Zeldovich und A. G. Istratov. On diffusional thermal instability of laminar flame. *Prikl. Mekh. Tekh. Fiz.*, 2:21–26, 1962.
- [7] R. J. M. Bastiaans, J. A. van Oijen, S. M. Martin, L. P. H. de Goey und H. Pitsch. DNS of lean premixed turbulent spherical flames with a Flamelet Generated Manifold. Annual Research Briefs, Center for Turbulence Research, 2004.
- [8] John B. Bell, Robert K. Cheng, Marcus S. Day und Ian G. Shepherd. Numerical simulation of Lewis number effects on lean premixed turbulent flames. *Proceedings of the Combustion Institute*, 31:1309–1317, 2007.
- [9] Beth Anne V Bennett und Mitchell D Smooke. Local rectangular refinement with application to axisymmetric laminar flames. *Combustion Theory and Modelling*, 2:221–258, 1998.
- [10] R. Byron Bird, Warren E. Stewart und Edwin N. Lightfoot. *Transport Phenomena*. John Wiley & Sons, 1960.
- [11] R. Borghi. On the structure and morphology of turbulent premixed flames. In: Recent advances in the aerospace sciences, Editor: Casci C., Plenum Press, 1985.
- [12] J. U. Brackbill, D. B. Kothe und C. Zemach. A Continuum Method for Modeling Surface Tension. *Journal of Computational Physics*, 100:335–354, 1992.
- [13] Yvan Bronner. Quantitative Modellierung und Simulation von Vormischflammen in inhomogenen Gemischen als gasdynamische Diskontinuität. Dissertation, Universität Karlsruhe (TH), 2006. In FZKA-Bericht 7287 (2007).
- [14] I.N. Bronstein, K.A. Semendjajew, G. Musiol und H. Mühlig. *Taschenbuch der Mathematik*. Verlag Harri Deutsch, 2001.

- [15] C. Bruzzese, H. Dirks und A.G. Class. Premixed Flames as Gasdynamic Discontinuities: Integral Momentum Analysis. Proceedings of the European Combustion Meeting 2009, Wien.
- [16] J. Buckmaster. The quenching of two-dimensional premixed flames. *Acta Astronautica*, 6:741–769, 1979.
- [17] J. Buckmaster. The contribution of asymptotics to combustion. *Physica*, 20D: 91–108, 1986.
- [18] J.D. Buckmaster und G.S.S. Ludford. *Theory of Laminar Flames*. Cambridge University Press, 1982.
- [19] J.D. Buckmaster und G.S.S. Ludford. *Lectures on Mathematical Combustion*. Society for Industrial and Applied Mathematics, 1983.
- [20] John D. (Editor) Buckmaster. *The Mathematics of Combustion*. SIAM, 1985.
- [21] Alexander Burcat und Branko Ruscic. Third Millennium Ideal Gas and Condensed Phase Thermochemical Database for Combustion with Updates from Active Thermochemical Tables, September 2005. URL <http://garfield.chem.elte.hu/Burcat/burcat.html>. Stand November 2011.
- [22] S.P. Burke und T.E.W. Schumann. Diffusion flames. *Industrial and Engineering Chemistry* 20 (998-1005), 1928.
- [23] V. Bykov und U. Maas. The extension of the ILDM concept to reaction-diffusion manifolds. *Combustion Theory and Modelling*, 11:839–862, 2007.
- [24] Sebastien M. Candel und Thierry J. Poinso. Flame Stretch and the Balance Equation for the Flame Area. *Combustion Science and Technology*, 70:1–15, 1990.
- [25] S. Chen, B. Merriman, S. Osher und P. Smereka. A Simple Level Set Method for Solving Stefan Problems. *Journal of Computational Physics*, 135:8–29, 1997.
- [26] David L. Chopp. Some Improvements of the Fast Marching Method. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 23:230–244, 2001.
- [27] S.H. Chung und C.K. Law. An Invariant Derivation of Flame Stretch. *Combustion and Flame*, 55:123–125, 1984.
- [28] S.H. Chung und C.K. Law. An Integral Analysis of the Structure and Propagation of Stretched Premixed Flames. *Combustion and Flame*, 72:325–336, 1988.
- [29] Andreas G. Class. Zellulare Strukturen laminarer Staupunktflammen. Dissertation Universität Karlsruhe (TH), FZKA Bericht 5655 Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, 1995.
- [30] Andreas G. Class, B. J. Matkowsky und A. Y. Klimenko. A unified model of flames as gasdynamic discontinuities. *Journal of Fluid Mechanics*, 491:11–49, 2003.
- [31] Andreas G. Class, B. J. Matkowsky und A. Y. Klimenko. Stability of planar flames as gasdynamic discontinuities. *Journal of Fluid Mechanics*, 491:51–63, 2003.

-
- [32] P. Clavin und G. Joulin. Premixed flames in large scale and high intensity turbulent flow. *Le Journal de Physique - Lettres*, 44:L1–L12, 1983.
- [33] P. Clavin und F. A. Williams. Effects of molecular diffusion and of thermal expansion on the structure and dynamics of premixed flames in turbulent flows of large scales and low intensity. *Journal of Fluid Mechanics*, 116:251–282, 1982.
- [34] O. Colin, F. Ducros, D. Veynante und T. Poinso. A thickened flame model for large eddy simulations of turbulent premixed combustion. *Physics of Fluids*, 12: 1843–1863, 2000.
- [35] Collaborative Research Centre 606. Non-stationary Combustion: Transport Phenomena, Chemical Reactions, Technical Systems. Funding Proposal 1.1.2009-31.12.2012, 2008. Universität Karlsruhe (TH).
- [36] G. Darrieus. Propagation d’un front de flamme. *La Technique Moderne & Le Congrès de Mécanique Appliquée*, 1938 & 1945.
- [37] M. S. Day und J. B. Bell. Numerical simulation of laminar reacting flows with complex chemistry. *Combustion Theory and Modelling*, 4:535–556, 2000.
- [38] Marc Day, John Bell, Peer-Timo Bremer, Valerio Pascucci, Vince Beckner und Michael Lijewski. Turbulence effects on cellular burning structures in lean premixed hydrogen flames. *Combustion and Flame*, 156:1035–1045, 2009.
- [39] L. P. H. De Goey und J. H. M. Ten Thijs Boonkkamp. A Mass-Based Definition of Flame Stretch for Flames with Finite Thickness. *Combustion Science and Technology*, 122:399–405, 1997.
- [40] L.P.H. De Goey und J.H.M. ten Thijs Boonkkamp. A Flamelet Description of Premixed Laminar Flames and the Relation with Flame Stretch. *Combustion and Flame*, 119:253–271, 1999.
- [41] L.P.H. de Goey und J.H.M. ten Thijs Boonkkamp. Mass burning rate of premixed stretched flames: integral analysis versus large activation energy asymptotics. Eindhoven University of Technology, CASA Report 06-43, 2006.
- [42] J.A.M. de Swart, G.R.A. Groot, J.A. van Oijen, J.H.M. ten Thijs Boonkkamp und L.P.H. de Goey. Detailed analysis of the mass burning rate of stretched flames including preferential diffusion effects. *Combustion and Flame*, 145:245–258, 2006.
- [43] Stanley Delhaye. Incorporating unsteady flow-field effects in Flamelet-Generated Manifolds. Dissertation, Technische Universiteit Eindhoven, 2009.
- [44] Hannes Dirks. Bestimmung der Oberflächenspannung vorgemischter Flammen als gasdynamische Diskontinuität mittels integraler Impulsbilanzierung. Diplomarbeit, Universität Karlsruhe (TH), 2009. Institut für Kern- und Energietechnik, Forschungszentrum Karlsruhe GmbH.
- [45] Laurent Duchamp de Lageneste und Heinz Pitsch. A numerical scheme for the large-eddy simulation of turbulent combustion using a level-set method. Annual Research Brief, Center for Turbulence Research, 2002.

- [46] C. Duwig. A filtered flame approach for simulation of unsteady laminar premixed flames. *Combustion Theory and Modelling*, 13:251–268, 2009.
- [47] Tarek Echekki. A Quasi-One-Dimensional Premixed Flame Model with Cross-Stream Diffusion. *Combustion and Flame*, 110:335 – 350, 1997.
- [48] Tarek Echekki und Jacqueline H. Chen. Unsteady Strain Rate and Curvature Effects in Turbulent Premixed Methane-Air Flames. *Combustion and Flame*, 106: 184 – 202, 1996.
- [49] Tarek Echekki und Jacqueline H. Chen. Analysis of the Contribution of Curvature to Premixed Flame Propagation. *Combustion and Flame*, 118:308 – 311, 1999.
- [50] W. Eckhaus. Theory of flame-front stability. *Journal of Fluid Mechanics*, 10: 80–100, 1961.
- [51] Eduardo Fernández-Tarrazo, Antonio L. Sánchez, Amable Liñán und Forman A. Williams. A simple one-step chemistry model for partially premixed hydrocarbon combustion. *Combustion and Flame*, 147:32–38, 2006.
- [52] J.H. Ferziger und T. Echekki. A Simplified Reaction Rate Model and its Application to the Analysis of Premixed Flames. *Combustion Science and Technology*, 89:293–315, 1993.
- [53] J.H. Ferziger und M. Perić. *Computational Methods for Fluid Dynamics*. Springer, 2002.
- [54] Jana R. Fetzer. A Novel Implementation of the Phase-Field/Level-Set Formulation for Modeling Flames as Gasdynamic Discontinuities in LESOCC2. Diplomarbeit, 2010. Karlsruher Institut für Technologie, Institut für Kern- und Energietechnik.
- [55] A.A. Ganguli und E.Y. Kenig. A CFD-based approach to the interfacial mass transfer at free gas-liquid interfaces. *Chemical Engineering Science*, 66:3301–3308, 2011.
- [56] Peter Gerlinger. *Numerische Verbrennungssimulation*. Springer, 2005.
- [57] E. Giacomazzi, F. R. Picchia und N. Arcidiacono. A review of chemical diffusion: Criticism and limits of simplified methods for diffusion coefficient calculation. *Combustion Theory and Modelling*, 12:135–158, 2008.
- [58] Olivier Gicquel, Nasser Darabiha und Dominique Thévenin. Laminar premixed hydrogen/air counterflow flame simulations using flame prolongation of ILDM with differential diffusion. *Proceedings of the Combustion Institute*, 28:1901–1908, 2000.
- [59] Sanford Gordon und Bonnie J. McBride. Computer Program for Calculation of Complex Chemical Equilibrium Compositions and Applications. NASA RP 1311 Part I (1994) und NASA RP 1311 Part II (1996).
- [60] Dimitris A. Goussis und Ulrich Maas. Model Reduction for Combustion Chemistry. In Buch: Turbulent Combustion Modeling, Ed.: T. Echekki und E. Mastorakos, Springer 2011.

-
- [61] Inge R. Gran, Tarek Echekki und Jacqueline H. Chen. Negative Flame Speed in an Unsteady 2-D Premixed Flame: A Computational Study. *Proceedings of the Combustion Institute*, 26:323–329, 1996.
- [62] Joseph F. Grcar, John B. Bell und Marcus S. Day. The Soret effect in naturally propagating, premixed, lean, hydrogen air flames. *Proceedings of the Combustion Institute*, 32:1173–1180, 2009.
- [63] G. R. A. Groot und L. P. H. de Goey. A Computational Study on Propagating Spherical and Cylindrical Premixed Flames. *Proceedings of the Combustion Institute*, 29:1445–1451, 2002.
- [64] G R A Groot, J A van Oijen, L P H de Goey, K Seshadri und N Peters. The effects of strain and curvature on the mass burning rate of premixed laminar flames. *Combustion Theory and Modelling*, 6:675–695, 2002.
- [65] G.R.A. Groot. Modelling of Propagating Spherical and Cylindrical Premixed Flames. Dissertation, Technische Universiteit Eindhoven, 2003.
- [66] Daniel Hartmann. A Level-Set Based Method for Premixed Combustion in Compressible Flow. Dissertation, RWTH Aachen, Shaker Verlag, 2010.
- [67] Daniel Hartmann, Matthias Meinke und Wolfgang Schröder. A level-set based adaptive-grid method for premixed combustion. *Combustion and Flame*, 158: 1318–1339, 2011.
- [68] Joachim Hartung, Bärbel Elpelt und Karl-Heinz Klösener. *Statistik*. R. Oldenbourg Verlag, 1982.
- [69] Joseph Hilsenrath, Harold J. Hoge, Charles W. Beckett, Joseph F. Masi, William S. Benedict, Ralph L. Nuttall, Lilla Fano, Yeram S. Touloukian und Harold W. Woolley. *Tables of Thermodynamic and Transport Properties*. Pergamon Press, 1960.
- [70] R. I. Issa. Solution of the Implicitly Discretised Fluid Flow Equations by Operator-Splitting. *Journal of Computational Physics*, 62:40–65, 1985.
- [71] Hrvoje Jasak. Error Analysis and Estimation for the Finite Volume Method with Applications to Fluid Flows. PhD thesis, Imperial College London, 1996.
- [72] Franz Joos. *Technische Verbrennung*. Springer, 2006.
- [73] A. Y. Klimenko und A. G. Class. On Premixed Flames as Gasdynamic Discontinuities: A Simple Approach to Derive their Propagation Speed. *Combustion Science and Technology*, 160:23–33, 2000.
- [74] A. Y. Klimenko und A. G. Class. Propagation of Nonstationary Curved and Stretched Premixed Flames with Multistep Reaction Mechanisms. *Combustion Science and Technology*, 174:1–43, 2002.
- [75] Alexander Y. Klimenko, Andreas G. Class und Sean O’Gorman. Near-Equidiffusion Disturbed Premixed Flames with Wider Reaction Zones. *Flow, Turbulence and Combustion*, 69:95–122, 2002.

- [76] Eberhard Klingbeil. *Tensorrechnung für Ingenieure*. Bibliographisches Institut Mannheim/Wien/Zürich, 1966.
- [77] Karin König. Hierarchische Implementierungsstrategien für reduzierte Reaktionsmechanismen basierend auf Intrinsischen Niedrigdimensionalen Mannigfaltigkeiten. Dissertation, Universität Karlsruhe (TH), Universitätsverlag Karlsruhe, 2008.
- [78] Jan Kopper. Implementierung eines integralen Reaktionszonenmodells vorgemischter Flammen in den CFD-Code LESOCC2C. Diplomarbeit, 2011. Karlsruher Institut für Technologie, Institut für Kern- und Energietechnik.
- [79] Kenneth K. Kuo. *Principles of Combustion*. Wiley-Interscience, 1986.
- [80] S. H. Lam und D. A. Goussis. Understanding Complex Chemical Kinetics with Computational Singular Perturbation. *Proceedings of the Combustion Institute*, 22:931–941, 1988.
- [81] L. D. Landau. On the theory of slow combustion. *Acta Physicochim. USSR*, 19: 77–85, 1944.
- [82] Eckart Laurien und Herbert Oertel, Jr. *Numerische Strömungsmechanik*. Vieweg & Teubner, 2011.
- [83] C. K. Law. A Compilation of Experimental Data on Laminar Burning Velocities. In: *Reduced Kinetic Mechanisms for Applications in Combustion Systems*, Norbert Peters, Bernd Rogg (Eds.), Springer, 1993.
- [84] Hyun Geun Lee und Junseok Kim. Regularized Dirac delta functions for phase field models. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 91: 269–288, 2012.
- [85] Jianping Li. General explicit difference formulas for numerical differentiation. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 183:29–52, 2005.
- [86] Stefan Lipp. Numerische Simulation turbulenter reaktiver Strömungen mit einem hybriden CFD/transported PDF Modell. Dissertation, Karlsruher Institut für Technologie, KIT Scientific Publishing, 2011.
- [87] U. Maas und S.B. Pope. Simplifying chemical kinetics: Intrinsic low-dimensional manifolds in composition space. *Combustion and Flame*, 88:239–264, 1992.
- [88] Ulrich Maas. Mathematische Modellierung instationärer Verbrennungsprozesse unter Verwendung detaillierter Reaktionsmechanismen. Dissertation, Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, 1988.
- [89] G. H. Markstein. Experimental and theoretical studies of flame-front stability. *Journal of the Aeronautical Sciences*, 18:199, 1951.
- [90] George H. Markstein. *Nonsteady Flame Propagation*. Pergamon Press, 1964.
- [91] M. Matalon und B. J. Matkowsky. Flames as gasdynamic discontinuities. *Journal of Fluid Mechanics*, 124:239–259, 1982.

-
- [92] M. Matalon, C. Cui und J. K. Bechtold. Hydrodynamic theory of premixed flames: effects of stoichiometry, variable transport coefficients and arbitrary reaction orders. *Journal of Fluid Mechanics*, 487:179–210, 2003.
- [93] Moshe Matalon. On Flame Stretch. *Combustion Science and Technology*, 31:169–181, 1983.
- [94] *MATLAB®7.10.0 (R2010a)*. MathWorks™.
- [95] B. J. Matkowsky und G. I. Sivashinsky. An Asymptotic Derivation of Two Models in Flame Theory Associated with the Constant Density Approximation. *SIAM Journal on Applied Mathematics*, 37:686–699, 1979.
- [96] V. Moureau, B. Fiorina und H. Pitsch. A level set formulation for premixed combustion LES considering the turbulent flame structure. *Combustion and Flame*, 156:801–812, 2009.
- [97] Herbert Oertel, jr. und Martin Böhle. *Strömungsmechanik*. Vieweg, 2004.
- [98] Herbert Oertel (Editor). *Prandtl's Essentials of Fluid Mechanics*. Springer, 2004.
- [99] Elin Olsson und Gunilla Kreiss. A conservative level set method for two phase flow. *Journal of Computational Physics*, 210:225–246, 2005.
- [100] Elin Olsson, Gunilla Kreiss und Sara Zahedi. A conservative level set method for two phase flow II. *Journal of Computational Physics*, 225:785–807, 2007.
- [101] Stanley Osher und Ronald Fedkiw. *Level Set Methods and Dynamic Implicit Surfaces*. Springer, 2003.
- [102] Stanley Osher und Ronald P. Fedkiw. Level Set Methods: An Overview and Some Recent Results. *Journal of Computational Physics*, 169:463–502, 2001.
- [103] F. Paravento. A robust numerical model for premixed flames with high density ratios based on new pressure correction and IMEX schemes. *Journal of Computational Physics*, 229:4613–4647, 2010.
- [104] N. Peters. Laminar Flamelet Concepts in Turbulent Combustion. *Proceedings of the Combustion Institute*, 21:1231–1250, 1986.
- [105] N. Peters. The turbulent burning velocity for large-scale and small-scale turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 384:107–132, 1999.
- [106] Norbert Peters. *Turbulent Combustion*. Cambridge University Press, 2000.
- [107] Norbert Peters und Bernd Rogg. *Reduced Kinetic Mechanisms for Applications in Combustion Systems*. Lecture Notes in Physics. Springer, 1993.
- [108] T. Poinso, T. Echekki und M. G. Mungal. A Study of the Laminar Flame Tip and Implications for Premixed Turbulent Combustion. *Combustion Science and Technology*, 81:45–73, 1992.
- [109] Thierry Poinso und Denis Veynante. *Theoretical and Numerical Combustion*. R.T. Edwards, 2005. Second Edition.

- [110] S. B. Pope. Computationally efficient implementation of combustion chemistry using in situ adaptive tabulation. *Combustion Theory and Modelling*, 1:41–63, 1997.
- [111] Yevgenii Rastigejev und Moshe Matalon. Numerical simulation of flames as gas-dynamic discontinuities. *Combustion Theory and Modelling*, 10:459–481, 2006.
- [112] Henrik Rusche. Computational fluid dynamics of dispersed two-phase flows at high phase fractions. PhD thesis, Imperial College London, 2002.
- [113] Hermann Schlichting und Klaus Gersten. *Grenzschicht-Theorie*. Springer, 2006.
- [114] Heiko Schmidt und Rupert Klein. A generalized level-set/in-cell-reconstruction approach for accelerating turbulent premixed flames. *Combustion Theory and Modelling*, 7:243–267, 2003.
- [115] Thierry Schuller, Sébastien Ducruix, Daniel Durox und Sébastien Candel. Modeling Tools for the Prediction of Premixed Flame Transfer Functions. *Proceedings of the Combustion Institute*, 29:107–113, 2002.
- [116] K. Seshadri. Multistep Asymptotic Analyses of Flame Structures. *Proceedings of the Combustion Institute*, 26:831–846, 1996.
- [117] J. A. Sethian. *Level Set Methods*. Cambridge University Press, 1996.
- [118] J. A. Sethian und Peter Smereka. Level Set Methods for Fluid Interfaces. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 35:341–372, 2003.
- [119] J.-M. Shi, D. Gerlach, M. Breuer, G. Biswas und F. Durst. Heating effect on steady and unsteady horizontal laminar flow of air past a circular cylinder. *Physics of Fluids*, 16:4331–4345, 2004.
- [120] G. I. Sivashinsky. On a distorted flame front as a hydrodynamic discontinuity. *Acta Astronautica*, 3:889–918, 1976.
- [121] V. Smiljanovsky, V. Moser und R. Klein. A capturing-tracking hybrid scheme for deflagration discontinuities. *Combustion Theory and Modelling*, 1:183–215, 1997.
- [122] Gregory P. Smith, David M. Golden, Michael Frenklach, Nigel W. Moriarty, Boris Eiteneer, Mikhail Goldenberg, C. Thomas Bowman, Ronald K. Hanson, Soonho Song, William C. Gardiner, Jr., Vitali V. Lissianski und Zhiwei Qin. URL http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/.
- [123] Mitchell D. Smooke. *Reduced Kinetic Mechanisms and Asymptotic Approximations for Methane-Air Flames*. Springer, 1991.
- [124] Georg Stahl. Rechnerische Simulation stationärer und instationärer gestreckter Methan- und Propan-Luft Flammen unter Verwendung detaillierter Reaktionsmechanismen. Dissertation, Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, 1989.
- [125] Rainer Stauch. Detaillierte Simulation von Verbrennungsprozessen in Mehrphasensystemen. Dissertation, Universität Karlsruhe (TH), dissertation.de - Verlag im Internet GmbH, 2007.

-
- [126] C. J. Sun, C. J. Sung, L. He und C. K. Law. Dynamics of Weakly Stretched Flames: Quantitative Description and Extraction of Global Flame Parameters. *Combustion and Flame*, 118:108–128, 1999.
- [127] Peter Terhoeven. Ein numerisches Verfahren zur Berechnung von Flammenfronten bei kleiner Mach-Zahl. Dissertation, RWTH Aachen, Cuvillier Verlag Göttingen, 1998.
- [128] Joe F. Thompson, Z. U. A. Warsi und C. Wayne Mastin. *Numerical Grid Generation*. North-Holland, 1985.
- [129] Erich Truckenbrodt. *Fluidmechanik*. Springer, 1980. Band 1: Grundlagen und elementare Strömungsvorgänge dichtebeständiger Fluide.
- [130] J.A. van Oijen, R.J.M. Bastiaans und L.P.H. de Goey. Preferential diffusion effects in direct numerical simulations of premixed turbulent flames with flamelet-generated manifolds. In *Proceedings of the European Combustion Meeting*, 2007.
- [131] Jeroen Van Oijen. TU Eindhoven NL, Private Mitteilung 2009.
- [132] Jeroen van Oijen. Flamelet-Generated Manifolds: Development and Application to Premixed Laminar Flames. PhD Thesis, Technische Universiteit Eindhoven, 2002.
- [133] Natan B. Vargaftik, Yurii K. Vinogradov und Vadim S. Yargin. *Handbook of Physical Properties of Liquids and Gases*. begell house, inc., 1996.
- [134] Verein Deutscher Ingenieure. *VDI-Wärmeatlas*. Springer, 1997.
- [135] H. K. Versteeg und W. Malalasekera. *An Introduction to Computational Fluid Dynamics, The Finite Volume Method*. Pearson, 2007.
- [136] An-Bang Wang, Zdenek Trávníček und Kai-Chien Chia. On the relationship of effective Reynolds number and Strouhal number for the laminar vortex shedding of a heated circular cylinder. *Physics of Fluids*, 12:1401–1410, 2000.
- [137] J. Warnatz, U. Maas und R.W. Dibble. *Verbrennung*. Springer, 2001. 3. Auflage.
- [138] Z. U. A. Warsi. *Fluid Dynamics: Theoretical and Computational Approaches*. CRC Press, second edition, 1999.
- [139] H. G. Weller, G. Tabor, H. Jasak und C. Fureby. A tensorial approach to computational continuum mechanics using object-orientated techniques. *Computers in Physics*, 12:620–631, 1998.
- [140] Charles K. Westbrook und Frederick L. Dryer. Simplified Reaction Mechanisms for the Oxidation of Hydrocarbon Fuels in Flames. *Combustion Science and Technology*, 27:31–43, 1981.
- [141] F. A. Williams. Turbulent Combustion. In: *The Mathematics of Combustion*, SIAM, 1985. Editor: John D. Buckmaster.
- [142] F.A. Williams. A Review of Some Theoretical Considerations of Turbulent Flame Structure. AGARD Conference Proceedings No. 164, 1975.

- [143] Forman A. Williams. *Combustion Theory*. Benjamin/Cummings, 1985.
- [144] www.openfoam.com. OpenFOAM 1.5: User Guide and Programmer's Guide.
- [145] Ya. B. Zeldovich, G. I. Barenblatt, V. B. Librovich und G. M. Makhviladze. *The Mathematical Theory of Combustion and Explosions*. Consultants Bureau (Plenum Publishing Corporation), 1985.

Lebenslauf

Nachname: Bruzzese
Vorname: Christian

Geburtsdatum: 22. Juni 1982
Geburtsort: Nieder Korn (Luxemburg)

Schulbildung, Studium und Beruf

1988-1994: Ecole primaire, Soleuvre (Luxemburg)

1994-2001: Lycée Technique Esch/Alzette (Luxemburg)

Studium (2001-2006): Maschinenbau, Universität Karlsruhe (TH)
Abschluss: Diplom-Ingenieur
Vertiefung: Theoretischer Maschinenbau

Promotion/Beruf (2006-2012): Institut für Kern- und Energietechnik
Forschungszentrum Karlsruhe (FZK) bzw.
Karlsruher Institut für Technologie (KIT)