

Adaptive Generierung von Reaktions-Diffusions- Mannigfaltigkeiten für die reduzierte Beschreibung chemisch reagierender Strömungen

INSTITUT FÜR TECHNISCHE THERMODYNAMIK

Zur Erlangung des akademischen Grades eines Doktors der
Ingenieurwissenschaften von der Fakultät für Maschinenbau des Karlsruher
Instituts für Technologie (KIT) genehmigte Dissertation von
Dipl.-Ing. Alexander Neagos

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

Korreferent: Prof. Dr.-Ing. habil. Andreas Class

Tag der mündlichen Prüfung: 24.05.2017

KIT – Universität des Landes Baden-Württemberg und
nationales Forschungszentrum in der Helmholtz-Gemeinschaft



Dieses Werk ist lizenziert unter einer Creative Commons Namensnennung -
Weitergabe unter gleichen Bedingungen 4.0 International Lizenz (CC BY-SA 4.0):
<https://creativecommons.org/licenses/by-sa/4.0/deed.de>

“No idea is original,
there’s nothing new under the sun,
it’s never what you do,
but how it’s done.”
- *Nasir Jones*

Danksagung

Diese Dissertation ist das Ergebnis meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Technische Thermodynamik des Karlsruher Instituts für Technologie. Nur durch die Unterstützung anderer Personen konnte sie in dieser Form erscheinen.

Für die Möglichkeit, die vorliegende Arbeit an seinem Institut durchführen zu können, möchte ich mich ganz herzlich bei Herrn Prof. Dr. rer. nat. habil. Ulrich Maas bedanken. Seine Denkanstöße und seine ständige Bereitschaft zur Diskussion bildeten die Basis für ein hervorragendes Betreuungsverhältnis. Herrn Prof. Dr.-Ing. habil. Andreas Class danke ich für die Übernahme des Koreferats und das damit verbundene Interesse an meiner Arbeit. Herrn Prof. Dr.-Ing. habil. Thomas Böhlke danke ich für die Übernahme des Prüfungsvorsitzes.

Bei meinen ehemaligen Kollegen des Instituts für Technische Thermodynamik möchte ich mich für die angenehme und freundschaftliche Arbeitsatmosphäre sowie die immerwährende Hilfsbereitschaft bedanken. Meine ganz besondere Dankbarkeit gebührt dabei Herrn PD. Dr. Viatcheslav Bykov. Er war in dieser Zeit ein ausgezeichnete Lehrer und Mentor, sowohl in fachlicher als auch in persönlicher Hinsicht. Dr.-Ing. Gerd Steinhilber danke ich für die Einführung in die Thematik und die anregenden Diskussionen während und außerhalb der Arbeitszeit. Bei meinem langjährigen Weggefährten Simon Fischer möchte ich mich ganz herzlich für die gemeinsame Zeit im Studium sowie am Institut bedanken. Diese werde ich für immer in besonderer Erinnerung behalten. Ein Dank geht darüber hinaus an meine ehemaligen Studenten Philipp Golda, Andreas Blattmann und Erik Hansen für ihren großen Einsatz und den damit verbundenen Beitrag zum Gelingen dieser Arbeit.

Zum Abschluss möchte ich mich bei meinen Freunden und bei meiner Familie bedanken. Meinen Eltern Mia und Hans danke ich für die immerwährende Unterstützung und die Ermöglichung meiner Ausbildung. Meinem Bruder Radu danke ich dafür, dass er in allen Lebenssituationen für mich da ist. Ganz besonders bedanken möchte ich mich schließlich bei meiner Frau Tanja sowie bei meinem Sohn Nils. Ohne ihre Fürsprache, Geduld und ihre bedingungslose Liebe wäre es mir nicht möglich gewesen, diese Arbeit erfolgreich abzuschließen.

Reutlingen, im Mai 2017

Alexander Neagos

Inhaltsverzeichnis

Symbolverzeichnis	ix
Abkürzungsverzeichnis	xiv
1. Einleitung	1
2. Mathematische Beschreibung chemisch reagierender Strömungen	7
3. Struktur und Dynamik chemisch reagierender Strömungen	10
3.1. Lokale Strukturen vorgemischter und nicht-vorgemischter Verbrennungsprozesse	10
3.2. Zustandsraumbetrachtung	13
3.3. Mannigfaltigkeiten in chemisch reagierenden Strömungen . . .	15
4. Reduktionsmethoden in der Verbrennung	20
4.1. Methoden zur Reduktion der chemischen Kinetik	22
4.1.1. Quasistationarität und partielle Gleichgewichte	22
4.1.2. Automatische Methoden	23
4.1.3. Anwendung in chemisch reagierenden Strömungen . . .	27
4.2. Methoden zur Reduktion gekoppelter Reaktion-Diffusions-Systeme	28
5. Mathematisches Modell der REDIM-Methode	31
5.1. Verfahren zur Bestimmung der REDIM	32
5.1.1. Die REDIM-Entwicklungsgleichung	32
5.1.2. Abschätzung der lokalen Gradienten	38
5.1.3. Transformation physikalischer Randbedingungen und Behandlung der REDIM-Ränder	42
5.1.4. Anfangsmannigfaltigkeit	47
5.2. REDIM Domäne	49
5.3. Hierarchische Struktur von REDIMs	50
5.4. Reduziertes PDE-System	51
5.5. Zusammenfassende Beschreibung des mathematischen Modells	53

6. Implementierung der REDIM-Methode	55
6.1. Numerische Lösung der REDIM-Entwicklungsgleichung	56
6.1.1. REDIM-Parametrisierungsstrategien	58
6.1.2. Verfahren für die Approximation der Ableitungen und des Diffusionsterms	61
6.1.3. Semi-implizites zeitliches Lösungsverfahren	70
6.1.4. Praktische Methoden für die Schätzung der Zustandsgra- dienten	74
6.1.5. Behandlung der Randpunkte	79
6.2. Auf Vorwissen basierende REDIM-Konstruktionsmethode	82
6.3. Adaptive REDIM-Konstruktionsmethode	87
6.3.1. Hierarchiebasierte Konstruktion der Anfangsmannigfal- tigkeit	90
6.3.2. Sequentielles Expansions-Relaxations-Verfahren	96
6.4. Anwendung der REDIM für die numerische Lösung des reduzier- ten PDE-Systems	104
6.5. Zusammenfassung der REDIM-Implementierungsstrategien	110
7. Anwendung und Validierung der REDIM-Methode	112
7.1. (In)-Sensitivität der REDIM bezüglich der Gradientenschätzung	113
7.2. Untersuchung des transienten Verhaltens einer gestörten vorge- mischten Synthesegas-Luft-Flamme	126
7.2.1. Störung der Flammenfront durch Triplet Maps	127
7.2.2. Lokale Eigenschaften der REDIMs	131
7.2.3. Diskussion der Simulationsergebnisse	134
7.3. Untersuchung der kritischen Streckungsrate einer stark verdün- nten H_2 - N_2 -Luft Gegenstromflamme	138
7.3.1. Konstruktion und lokale Analyse der REDIM	144
7.3.2. Diskussion der Simulationsergebnisse	147
7.4. Zusammenfassende Diskussion der Ergebnisse	152
8. Zusammenfassung und Ausblick	155
A. Anhang	159
A.1. Projektion	159
A.2. Invarianz der REDIM in Bezug auf die Parametrisierung	159
Literatur	161

Symbolverzeichnis

Lateinische Zeichen

a	: Parameter zur Steuerung der REDIM-Expansion
a_{krit}	: Kritische Streckungsrate
Bild	: Bild des Projektionsoperators
c	: Vektor der Koeffizienten verwendeter Ansatzfunktionen
c_p	: Spezifische Wärmekapazität
B	: Zielfunktion des Optimierungsproblems
D	: Matrix der Transportkoeffizienten
D_e	: Vektor der Koeffizienten zu Berechnung des Wärmetransports
D_p	: Vektor der Koeffizienten zu Berechnung der Druckdiffusion
D_s	: Matrix der Diffusionskoeffizienten des Speziestransports
D_{se}	: Matrix der Diffusionskoeffizienten des Speziestransports durch Temperaturgradienten
D_{sp}	: Matrix der Diffusionskoeffizienten des Speziestransports durch Druckgradienten
D_{ss}	: Matrix der Diffusionskoeffizienten des Speziestransports durch Speziesgradienten
d_f	: Flammendicke
diag	: Diagonalmatrix
dim	: Dimension eines Vektorraums
div	: Divergenz
d_p	: Dimension des physikalischen Randes
F	: n -dimensionaler thermochemischer Quelltermvektor
F_ψ	: Jacobi-Matrix von F
\hat{F}_f	: schneller Anteil von F in CSP-Darstellung
\hat{F}_s	: langsamer Anteil von F in CSP-Darstellung
f	: Vektor der Ansatzfunktionen
G	: Gewichtungsfunktion
g	: Vektor der Erdbeschleunigung
grad	: Gradient
H	: Zeitschrittweite

h	: Spezifische Enthalpie
\mathbf{I}	: Einheitsmatrix
\mathbf{j}_i	: Vektor der Diffusionsstromdichte der i -ten Spezies
\mathbf{j}_q	: Vektor der Wärmestromdichte
\mathbf{K}	: Matrix der Singulärwerte von $\mathbf{\Gamma}$
Kern	: Kern des Projektionsoperators
L	: Abstand zwischen den Zuströmrändern der Gegenstromflamme
l	: Länge des Triplet-Map-Wirbels
Le	: Lewis-Zahl
\mathcal{M}	: Mannigfaltigkeit
m	: Anzahl langsamer Prozesse, Dimension der Mannigfaltigkeit
\mathcal{M}_a	: Anfangsmannigfaltigkeit
\mathcal{M}_d^m	: m -dimensionale langsame invariante Mannigfaltigkeit des detaillierten PDE-Systems
\mathcal{M}_{gr}	: Mannigfaltigkeit der Gradienten
M_i	: Molare Masse der i -ten Spezies
\mathcal{M}^m	: m -dimensionale Mannigfaltigkeit
\mathcal{M}_{pb}	: Mannigfaltigkeit der physikalischen Ränder
\mathcal{M}_{RD}^m	: m -dimensionale REDIM
$\mathcal{M}_{RD,v}$: REDIM veränderter Zustandsgradienten
$\partial\mathcal{M}$: Rand der Mannigfaltigkeit
$\mathcal{N}_\psi\mathcal{M}$: Zum Tangentialraum komplementärer Unterraum einer Mannigfaltigkeit am Zustand ψ
\mathbf{n}	: Nach außen zeigender Normalenvektor zum physikalischen Rand
n	: Anzahl thermochemischer Zustandsgrößen
n_{nei}^b	: Anzahl Nachbarrandpunkte am REDIM-Rand
n_e	: Anzahl an Stützstellen zur Bestimmung des relativen Fehlers r_{rel}
n_f	: Anzahl schneller chemischer Prozesse
n_{gr}	: Anzahl Punkte auf Mannigfaltigkeit der Gradienten
n_o	: Anzahl an Gitterpunkten für die Optimierung der Interpolationsfunktion
n_p	: Anzahl an REDIM-Gitterpunkten
n_{pb}	: Anzahl physikalischer Ränder
n_r	: Anzahl an Elementarreaktionen
n_s	: Anzahl chemischer Spezies
n_{θ_i}	: Anzahl an Gitterpunkten in θ_i -Richtung
p	: Druck
\mathbf{P}	: Projektionsoperator
\mathbf{P}_\perp	: Orthogonaler Projektionsoperator
\mathbf{p}	: Vektor der Parameter der Interpolationsfunktion

$\bar{\bar{p}}$: Drucktensor
q_r	: Strahlungsenergiedichte
\mathbf{R}	: Matrix der stöchiometrischen Koeffizienten
\mathbf{r}	: Vektor der kinetischen Reaktionsgeschwindigkeiten
Re	: Realteil des Eigenwerts
R_g	: spezifische Gaskonstante des Gemisches
r_{rel}	: Relativer Fehler
\mathbf{S}	: Skalierungsmatrix
s	: Bogenlänge
span	: Spann einer Matrix
T	: Temperatur
t	: Zeit
$\mathcal{T}_\psi \mathcal{M}$: Tangentialraum einer Mannigfaltigkeit am Zustand ψ
$\mathcal{T}(\partial \mathcal{M})$: Tangentialraum des Mannigfaltigkeitsrandes
\mathbf{U}	: Matrix der linken Singulärvektoren von $\mathbf{\Gamma}$
\mathbf{u}_i	: Linke Singulärvektoren von $\mathbf{\Gamma}$
\mathbf{V}	: Matrix der rechten Singulärvektoren von $\mathbf{\Gamma}$
\mathbf{v}	: Geschwindigkeitsvektor
\mathbf{W}	: Matrix aus linken Eigenvektoren von \mathbf{F}_ψ
w_i	: Massenbruch der i -ten Spezies
\mathbf{x}	: Ortsvektor
z	: Funktionenraum
\mathbf{Y}	: Vektor der in der REDIM-Tabelle gespeicherten Größen
\mathcal{Z}	: Thermochemischer Zustandsraum
$\tilde{\mathbf{Z}}_f$: Matrix der schnellen rechten Eigenvektoren von \mathbf{F}_ψ

Griechische Zeichen

α	: Analytische Funktion zur Steuerung der Expansionsweite
β	: Vektor der lokalen Parameter des Mannigfaltigkeitsrandes
Φ	: Interpolationsfunktion
$\mathbf{\Gamma}$: Matrix der Differenzvektoren $\Delta \theta_i$ am REDIM-Rand
Δ	: Differenz zwischen Vektoren
δ_{inv}	: Verhältnis zwischen euklidischer Norm von $\mathbf{P}\tilde{\phi}$ und euklidischer Norm von $\tilde{\phi}$
δ_T	: Globale Veränderung der Temperatur
δ_ρ	: Globale Veränderung der Dichte
ϵ	: charakteristischer Parameter eines Multiskalensystems
θ	: Vektor der lokalen Parameter

$\tilde{\boldsymbol{\theta}}$: Parametrisierung der Mannigfaltigkeit der Gradienten
$\boldsymbol{\theta}^b$: Parametervektor am Rand der REDIM
κ_i	: Singulärwerte von $\boldsymbol{\Gamma}$
$\boldsymbol{\Lambda}$: Matrix der Eigenwerte von \mathbf{F}_{ψ}
λ	: Eigenwerte von \mathbf{F}_{ψ}
λ_W	: Wärmeleitfähigkeit
$\boldsymbol{\nu}$: Vektor der Lagrange-Multiplikatoren
$\boldsymbol{\Xi}$: Diffusionsvektor
$\tilde{\boldsymbol{\xi}}$: Abschätzung der Zustandsgradienten $\text{grad}(\boldsymbol{\psi})$
$\boldsymbol{\xi}$: Auf den REDIM-Rand projizierte Abschätzung $\boldsymbol{\xi}$
ρ	: Dichte
σ	: Standardabweichung der Gauss-Ansatzfunktionen
$\boldsymbol{\phi}$: rechte Seite des detaillierten PDE-Systems
$\tilde{\boldsymbol{\phi}}$: Vektorfeld entlang der REDIM
$\hat{\boldsymbol{\phi}}$: rechte Seite des reduzierten PDE-Systems
φ_i	: spezifische Molzahl der i -ten Spezies
$\boldsymbol{\chi}$: Abschätzung der Gradienten der lokalen Parameter $\text{grad}(\boldsymbol{\theta})$
$\tilde{\boldsymbol{\chi}}$: Abschätzung der Gradienten der lokalen Parameter am REDIM-Rand
$\boldsymbol{\psi}$: Thermochemischer Zustandsvektor
$\boldsymbol{\psi}^{1D}$: Zustand auf 1D-REDIM
$\boldsymbol{\psi}^{2D}$: Zustand auf 2D-REDIM
$\boldsymbol{\psi}^m$: Zustand auf m -dimensionaler REDIM
$\boldsymbol{\psi}^b$: Zustand am Rand der REDIM
$\boldsymbol{\psi}^{pb}$: Zustand des physikalischen Randes
$\boldsymbol{\psi}^{gr}$: Zustand auf Mannigfaltigkeit der Gradienten
$\boldsymbol{\psi}_{\eta}$: Nach außen zeigender Normalenvektor zu $\partial\mathcal{M}$
$\boldsymbol{\psi}_{\boldsymbol{\theta}}$: Matrix der partiellen Ableitungen $\boldsymbol{\psi}$ nach $\boldsymbol{\theta}$
$\boldsymbol{\psi}_{\boldsymbol{\beta}}$: Matrix der partiellen Ableitungen $\boldsymbol{\psi}$ nach $\boldsymbol{\beta}$ am REDIM-Rand
$\boldsymbol{\psi}^{eq}$: Zustand im chemischen Gleichgewicht
$\boldsymbol{\psi}^0$: Zustand der unverbrannten Mischung
$\boldsymbol{\psi}^{korr}$: Korrektur zur Einhaltung der Elementzusammensetzung
$\boldsymbol{\psi}^v$: Zustände veränderter Zustandsgradienten
$\boldsymbol{\psi}_{\eta}^{in}$: Zum REDIM-Rand orthogonaler, nach innen zeigender Vektor
$\boldsymbol{\psi}_{\boldsymbol{\theta}}^{\dagger}$: Moore-Penrose-Pseudoinverse
Ω	: Physikalischer Raum
$\partial\Omega$: Rand des physikalischen Raums
ω_i	: Bildungsgeschwindigkeit der i -ten Spezies

Indizes

<i>1D</i>	:	1D-REDIM
<i>2D</i>	:	2D-REDIM
<i>b</i>	:	Den REDIM-Rand beschreibend
<i>d</i>	:	Das detaillierte System beschreibend
<i>exp</i>	:	Expansion
<i>f</i>	:	schnelle Prozesse
<i>gr</i>	:	Gradienten
<i>in</i>	:	nach innen
<i>korr</i>	:	Korrektur
<i>nei</i>	:	Nachbarpunkte
<i>pb</i>	:	Den physikalischen Rand beschreibend
<i>RD</i>	:	REDIM
<i>s</i>	:	chemische Spezies
<i>v</i>	:	verändert
<i>Z</i>	:	Zentraldifferenz

Abkürzungsverzeichnis

ASIM	:	Approximate Slow Invariant Manifold
CFD	:	Computational Fluid Dynamics
CSP	:	Computational Singular Perturbation
DAE	:	Differential Algebraic Equation
DNS	:	Direkte Numerische Simulation
FGM	:	Flamelets Generated Manifolds
GSP	:	Geometrical Singular Perturbation
ICE	:	Invariant Constrained Equilibrium
ILDm	:	Intrinsic Low Dimensional Manifolds
MEPT	:	Minimal Entropy Production Trajectories
ODE	:	Ordinary Differential Equation
PEA	:	Partial Equilibrium Approximation
PDE	:	Partial Differential Equation
QSSA	:	Quasi Steady-State Approximation
REDIM	:	Reaktions-Diffusions-Mannigfaltigkeit
RCCE	:	Rate Controlled Chemical Equilibrium
SPS	:	Singularly Perturbed Systems
TGLDM	:	Trajectory-Generated Low-Dimensional Manifolds

1. Einleitung

Die Verbrennung stellt die Grundlage vieler technischer Anwendungen dar, die unser Leben heutzutage prägen. Sie liefert thermische Energie, welche zum Beispiel in Kraftwerken und Fahrzeugen in mechanische Energie umgewandelt oder in Gebäuden direkt zum Heizen verwendet wird. Auf Grund dieser tiefen Verankerung wird die Verbrennung auch in absehbarer Zukunft einen hohen Stellenwert in unserer Gesellschaft beibehalten.

In Industrie und Forschung wird das Hauptaugenmerk insbesondere auf die Effizienzsteigerung bei gleichzeitiger Verringerung umweltschädlicher Emissionen gelegt [1]. Vor allem die immer strenger werdenden Emissionsrichtlinien im Zuge der Energiewende erfordern ein sehr genaues Verständnis der ablaufenden Vorgänge innerhalb chemisch reagierender Strömungen. Es werden deshalb Werkzeuge und Maßnahmen benötigt, mit deren Hilfe diese Vorgänge möglichst genau verstanden und wiedergegeben werden können. In den letzten Jahrzehnten hat sich die numerische Strömungssimulation als wichtiges Instrument in der Erforschung von Verbrennungsphänomenen etabliert.

Die mathematische Beschreibung reagierender Strömungen resultiert in einem System aus partiellen Differentialgleichungen (Partial Differential Equations, PDE). Dieses umfasst die Erhaltungsgleichungen für Gesamtmasse, Impuls, Energie und Speziesmassen und beschreibt die komplexe Wechselwirkung zwischen chemischer Reaktion, molekularem Transport sowie Konvektion [2–4]. Inzwischen gibt es eine große Zahl von Computational Fluid Dynamics (CFD) Codes, mit deren Hilfe das die reagierende Strömung beschreibende PDE-System numerisch gelöst bzw. integriert werden kann. In den meisten CFD-Methoden werden dabei örtliche Diskretisierungsschemata verwendet [3, 5], wodurch das PDE-System in ein System aus gewöhnlichen Differentialgleichungen (Ordinary Differential Equations, ODE) überführt wird, um anschließend die zeitliche Integration basierend auf unterschiedlichen Methoden durchzuführen [1].

Eine sehr genaue Wiedergabe der chemisch-physikalischen Vorgänge mit Hilfe von CFD bedarf der Auflösung aller im System vorkommenden Längen- und Zeitskalen. Dies stellt eine große Herausforderung dar, denn die in typischen technischen und industriellen Verbrennungsprozessen vorkommenden Zeitskalen erstrecken sich von $\mathcal{O}(10^{-10} \text{ s})$ bis $\mathcal{O}(1 \text{ s})$, während die Längenskalen turbulenter Strömungen eine Bandbreite von $\mathcal{O}(10^{-6} \text{ m})$ bis $\mathcal{O}(1 \text{ m})$ überdecken [6]. Zur

Darstellung der kleinsten Längenskalen werden daher sehr viele Gitterpunkte benötigt, an denen das PDE-System örtlich diskretisiert wird [7]. Da Reaktionssysteme zur Beschreibung der chemischen Reaktion tausende Elementarreaktionen und hunderte verschiedener Spezies beinhalten [7, 8], resultieren daraus hoch dimensionale PDE-Systeme an den jeweiligen Gitterpunkten. Das Vorkommen stark unterschiedlicher Zeitskalen sorgt zusätzlich für eine große Steifheit des PDE-Systems [9], sodass aus Stabilitätsgründen implizite Methoden für die zeitliche Integration des ODE Systems verwendet werden müssen [1]. Die Anzahl an algebraischen Manipulationen ist hierbei enorm, denn es müssen Matrizen zerlegt werden, die in ihrer Dimension der Anzahl chemischer Spezies multipliziert mit der Anzahl an Gitterpunkten entsprechen. Aus diesem Grund ist es trotz der heutzutage zur Verfügung stehenden Rechnerkapazitäten nicht möglich, chemisch reagierende Strömungen in komplizierten Geometrien in vollem Detaillierungsgrad innerhalb eines akzeptablen Zeitrahmens zu simulieren [1, 3, 7].

Um CFD-Simulationen komplizierter Verbrennungsprozesse dennoch praktikabel zu machen, stehen zwei Maßnahmen zur Verringerung des Detaillierungsgrads zur Verfügung [7]

1. Die Modellierung des turbulenten Strömungsfeldes wird vereinfacht, indem größere Wirbelstrukturen direkt berechnet und kleine Strukturen modelliert werden.
2. Die Komplexität des Reaktionssystems wird reduziert. Chemische Prozesse sind maßgeblich für das Zustandekommen stark unterschiedlicher Zeitskalen in der Verbrennung verantwortlich. Reduktionsmethoden zur vereinfachten Beschreibung der chemischen Reaktion haben das Ziel sowohl die Dimension als auch die Steifigkeit des PDE-Systems zu verringern.

In den letzten Jahrzehnten fand die Entwicklung einer großen Zahl an Reduktionsmethoden statt [10–14], die prinzipiell in zwei Gruppen aufgeteilt werden können [15]. Die erste setzt Vorwissen über das Reaktionssystem voraus, woraus dann z.B. Quasistationaritätsannahmen (Quasi Steady-State approximation, QSSA) oder partielle Gleichgewichte (Partial Equilibrium approximation, PEA) abgeleitet werden können [16, 17]. Die zweite Gruppe basiert auf mathematischen Methoden, mit deren Hilfe eine automatische Reduktion des Reaktionssystems stattfinden kann [8, 15].

Die meisten Methoden zur automatischen Reduktion machen sich das große Zeitskalenspektrum des chemischen Reaktionssystems zu nutze und basieren auf einer Entkopplung von schnellen und langsamen chemischen Prozessen [18]. Eine Betrachtung des Trajektorienverlaufs homogener chemischer Reaktionen

im Zustandsraum der chemischen Spezies lässt demnach darauf schließen, dass die schnellen Bewegungen nach sehr kurzer Zeit abgeschlossen sind und die Systemdynamik allein durch die langsamen Prozesse bestimmt wird [1, 15]. Darüber hinaus entfalten sich die langsamen Bewegungen nicht willkürlich im gesamten Zustandsraum, sondern beschränken sich auf niedrigdimensionale Unterräume, die in ihrer Dimension sehr viel kleiner sind als der Zustandsraum selbst. Diese Unterräume werden als langsame invariante Mannigfaltigkeiten bezeichnet, deren Lage und Form durch die schnellen Prozesse festgelegt wird. Zur Beschreibung der Mannigfaltigkeit wird eine ihrer Dimension entsprechende Anzahl an unabhängigen Parametern benötigt. Die detaillierte Systemdynamik kann daher nach sehr kurzer Zeit mit Hilfe weniger, langsamer Parameter anstatt aller, den Zustandsraum bildender, Spezies charakterisiert werden [13, 18, 19].

Eine sehr wichtige Anforderung an mannigfaltigkeitsbasierte Reduktionsmethoden bei der Implementierung zur Simulation chemisch reagierender Strömungen ist die möglichst genaue Darstellung instationärer bzw. transienter Prozesse basierend auf einer korrekten Abbildung der Kopplung von chemischer Reaktion, Diffusion und Konvektion [7, 8]. In klassischen Reduktionsmethoden erfolgt die Identifikation der Mannigfaltigkeit basierend auf der isolierten Betrachtung des homogenen chemischen Reaktionssystems [10, 11]. Dieser Ansatz führt zu genauen Ergebnissen, wenn die Zeitskalen der entkoppelten bzw. schnellen chemischen Prozesse sehr viel kleiner sind als diejenigen des molekularen Transports [20]. Vor allem in turbulenten Flammen kann dies jedoch eine unzutreffende Annahme sein, sodass die hier stattfindenden transienten Prozesse nicht genau genug dargestellt werden können. Darüber hinaus kann die Existenz rein chemischer Mannigfaltigkeiten nicht in allen Regimen chemisch reagierender Strömungen gewährleistet werden. Dies ist vor allem in Bereichen der Fall, in denen der Einfluss des chemischen Quellterms verschwindet oder eine Entkopplung der Zeitskalen nicht möglich ist [21].

Eine Möglichkeit zur Lösung der Kopplungsproblematik in reduzierten Berechnungen stellt die Verwendung langsamer Mannigfaltigkeiten basierend auf das gesamte, die reagierende Strömung beschreibende, PDE-System dar. Diese Methoden sehen sich jedoch mit der Schwierigkeit konfrontiert, dass die Zeitskalen der physikalischen Prozesse nicht allein vom thermochemischen Zustand, sondern direkt von den im Vorfeld der Methode unbekanntem Zustandsgradienten abhängen. Dadurch ist ein Großteil solcher Methoden durch die gekoppelte Lösung des PDE-Systems und der impliziten Mannigfaltigkeitsgleichungen charakterisiert, was in ein schwer zu lösendes Differential-Algebraisches-System (Differential Algebraic Equations, DAE) resultiert und eine Anwendung auf komplizierte Verbrennungssysteme nicht zulässt [18].

Eine Ausnahme hiervon stellt die Methode der Reaktions-Diffusions-Mannigfaltigkeiten (REDIM) dar [22, 23]. Das Verfahren verwendet eine Abschätzung der im Verbrennungsprozess vorkommenden Gradienten und erlaubt die Berechnung der Mannigfaltigkeit in expliziter Form durch die Anwendung einer Entwicklungsgleichung. Die charakteristischen Eigenschaften des Verbrennungsprozesses werden somit bereits durch die REDIM selbst abgebildet, wodurch die Implementierung in den reduzierten Berechnungen vereinfacht wird. Gleichzeitig vergrößern sich die Grenzen der Anwendbarkeit reduzierter Rechnungen im Vergleich zu den klassischen, rein chemisch basierten Reduktionsmethoden drastisch. Die REDIM-Methode vereint daher die Vorteile expliziter, rein chemischer Mannigfaltigkeitsmethoden mit der verbesserten Darstellung gekoppelter chemisch-diffusiver Prozesse mittels PDE-basierter Mannigfaltigkeitsmethoden.

Diese Arbeit befasst sich mit der REDIM-Methode und baut auf einen vorhandenen Kenntnisstand auf, der sich durch die bisherige Anwendung der REDIM zur reduzierten Beschreibung chemisch reagierender Strömungen ergibt. So konnte das Potenzial der REDIM-Methode bereits bei der Implementierung in turbulenten Flammensimulationen [24, 25] oder der Berücksichtigung detaillierter molekularer Transportprozesse [26] unter Beweis gestellt werden. Gleichzeitig traten hierbei jedoch einige Schwächen der Methode zu Tage, die sich insbesondere in der Vorgehensweise zur Konstruktion der REDIM feststellen lassen. Zu diesen Schwächen zählen vor allem die Vorgehensweise zur Konstruktion der für die REDIM-Bestimmungsgleichung notwendigen Anfangsmannigfaltigkeit, für die ein relativ hohes problemspezifisches Vorwissen benötigt wurde. Hieraus resultieren starke Restriktionen hinsichtlich einer flexiblen Dimensionserhöhung zum Zwecke einer verbesserten Genauigkeit der reduzierten Rechnungen sowie einer generischen Anpassung der Ausdehnung der REDIM an die jeweilige Problemstellung. Weiteres Optimierungspotenzial bietet zudem das numerische Verfahren zur Bestimmung der REDIM sowie das Verfahren zur Anwendung der REDIM als Tabelle in der reduzierten Berechnung.

Aus den genannten Einschränkungen leiten sich die hauptsächlichen Zielsetzungen der vorliegenden Arbeit ab, die wie folgt zusammengefasst werden können

- Die Implementierung des mathematischen Modells sollte möglichst wenig Vorwissen über das Systemverhalten voraussetzen.
- Die Dimension der REDIM bzw. der Freiheitsgrad des Systems sollte beliebig veränderbar sein, um bei Bedarf die Genauigkeit der reduzierten Berechnungen zu erhöhen.

-
- Die Domäne bzw. das Gebiet der REDIM sollte das abzubildende System beinhalten, d.h. die Ränder der REDIM dürfen infolge dynamischer Vorgänge nicht überschritten werden.
 - Der Zugriff auf die REDIM im Zuge ihrer Anwendung in reduzierten Berechnungen sollte effizient und genau sein.

Um die formulierten Ziele zu erreichen, erfolgt im Rahmen dieser Arbeit eine Weiterentwicklung des bestehenden theoretischen und technischen Rahmens der REDIM-Methode. Die Neuerungen aus theoretischer Sicht betreffen dabei insbesondere die Herausarbeitung der intrinsischen hierarchischen Struktur der REDIMs, welche die Einbettung niedrigdimensionaler REDIMs in höherdimensionale REDIMs beschreibt [27]. Ein weiterer neuer theoretischer Aspekt ergibt sich aus einer detaillierten Analyse der Eigenschaften der REDIM-Ränder, durch welche die REDIM und damit die darauf ablaufende Dynamik beschränkt werden [28].

Die neu gewonnenen theoretischen Erkenntnisse dienen als Basis für die Entwicklung einer neuen Vorgehensweise zur technischen Konstruktion von REDIMs, die eine adaptive Anpassung der Dimension und Ausdehnung ermöglichen soll. Im Zuge dessen wird eine alternative Parametrisierungsstrategie untersucht, die im Vergleich zur bestehenden eine erhöhte Flexibilität aufweist und daher besser für einen Einsatz in der neu entwickelten Methode geeignet ist. Aus numerischer Sicht wird das Potenzial der Verwendung von Interpolationsfunktionen zur Approximation der Differentiale bei der Integration der REDIM-Entwicklungsgleichung analysiert. Weitere technische Weiterentwicklungen ergeben sich aus der neu implementierten Behandlung der Randpunkte sowie aus der Optimierung des Verfahrens zur Verwendung der REDIM als Tabelle in reduzierten Berechnungen.

Zum Zwecke der Validierung werden eine eindimensionale vorgemischte freie Synthesegas-Luft-Flamme und eine stark verdünnte nicht-vorgemischte H_2 - N_2 -Luft-Gegenstromflamme herangezogen, für welche das transiente Verhalten in kritischen Szenarien mit Hilfe der REDIM-Methode untersucht wird. Als Vergleichsbasis dienen dabei eindimensionale Berechnungen auf Basis detaillierter Reaktionskinetik sowie einschlägige Daten aus der Literatur. Die betrachteten Testfälle sind dabei derart konzipiert, dass dadurch das charakteristische Verhalten turbulenter Flammen nachgebildet werden soll. Die Validierung sieht darüber hinaus die Überprüfung einer wichtigen Eigenschaft der REDIM vor, die durch ihre zunehmende Unabhängigkeit von der Gradientenschätzung mit ansteigender Dimension beschrieben wird. Hierfür wird der Einsatz einer Methode getestet, durch welche der Einfluss unterschiedlicher Gradientenschätzungen quantitativ ermittelt werden kann. Dies ebnet den Weg für die Verwendung vereinfachter

Verfahren zur Bestimmung der Schätzungen und reduziert damit das notwendige Maß an Vorwissen für die Anwendung der REDIM-Methode.

Die vorliegende Arbeit gliedert sich wie folgt. Ausgehend von der mathematischen Beschreibung chemisch reagierender Strömungen (Kapitel 2) erfolgt in Kapitel 3 zunächst eine phänomenologische Interpretation der charakteristischen Eigenschaften chemisch reagierender Strömungen im Orts- und Zustandsraum, durch welche das Zustandekommen niedrigdimensionaler Mannigfaltigkeiten anschaulich erklärt werden kann. Dies bildet den Ausgangspunkt für die Vorstellung der für diese Arbeit wichtigsten Reduktionsmethoden in Kapitel 4, wodurch die Einordnung der REDIM-Methode in das einschlägige wissenschaftliche Feld ermöglicht werden soll. In Kapitel 5 wird dann das mathematische Modell der REDIM-Modellreduktionsmethode präsentiert, worin auch die wichtigen Eigenschaften der Hierarchie und der REDIM-Ränder behandelt werden. Im Anschluss daran erfolgt in Kapitel 6 die Vorstellung der numerischen Verfahren zur Bestimmung der REDIM und zur Lösung des reduzierten PDE-Systems sowie die Gegenüberstellung der bisherigen und der neu entwickelte Konstruktionsmethode. In Kapitel 7 wird die REDIM-Methode zur Untersuchung des transienten Verhaltens eindimensionaler Verbrennungsprozesse angewendet. Kapitel 8 fasst die vorliegende Arbeit schließlich zusammen und gibt einen Ausblick auf zukünftige Entwicklungsmöglichkeiten.

2. Mathematische Beschreibung chemisch reagierender Strömungen

Die mathematische Beschreibung chemisch reagierender Strömungen erfolgt durch die Formulierung der Erhaltungsgleichungen für die Gesamtmasse, die Speziesmassen, des Impulses sowie der Energie. Diese ergeben sich aus der Bilanzierung der jeweiligen Größen für ein gedachtes Kontrollvolumen innerhalb der chemisch reagierenden Strömung. Es resultiert ein System aus partiellen Differentialgleichungen, mit dem die zeitliche und örtliche Veränderung der Zustandsgrößen beschrieben wird [1, 29–31]

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{v}) = 0, \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial \rho w_i}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho w_i \mathbf{v}) + \operatorname{div}(\mathbf{j}_i) = M_i \omega_i, \quad i = 1, \dots, n_s \quad (2.2)$$

$$\frac{\partial \rho \mathbf{v}}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{v} \otimes \mathbf{v}) + \operatorname{div}(\overline{\mathbf{p}}) = \rho \mathbf{g}, \quad (2.3)$$

$$\frac{\partial \rho h}{\partial t} - \frac{\partial p}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho h \mathbf{v}) + \operatorname{div}(\mathbf{j}_q) + \overline{\mathbf{p}} : \operatorname{grad}(\mathbf{v}) - \operatorname{div}(p \mathbf{v}) = q_r. \quad (2.4)$$

Hierbei bezeichnen n_s die Anzahl unterschiedlicher Spezies, ρ die Dichte der Mischung, w_i die Massenbrüche der einzelnen Spezies, ω_i ihre Bildungsgeschwindigkeit, M_i ihre molare Masse, \mathbf{j}_i die Diffusionsstromdichte der jeweiligen Spezies, $\overline{\mathbf{p}}$ den Drucktensor, \otimes das dyadische Produkt zweier Vektoren, \mathbf{g} die Erdbeschleunigung, \mathbf{j}_q die Wärmestromdichte, q_r die Strahlungsenergiedichte, h die spezifische Enthalpie der Mischung, p den Druck und t die Zeit.

Zur Schließung des obigen Gleichungssystems kommt die Zustandsgleichung idealer Gase zum Einsatz [1, 32]

$$p = \rho R_g T, \quad (2.5)$$

mit der spezifischen Gaskonstanten R_g des Gemisches.

2. Mathematische Beschreibung chemisch reagierender Strömungen

Die oben dargestellte Form der Erhaltungsgleichungen beinhaltet die Dichte der Erhaltungsgrößen als abhängige Variablen. Durch die Anwendung der Produktregel sowie der Kontinuitätsgleichung kann das ursprüngliche partielle Differentialgleichungssystem (PDE) in ein PDE-System für die Variablen ρ , w_i , h und \mathbf{v} umgeformt werden [29]. So ergibt sich z.B. für die Erhaltungsgleichung der Speziesmassen ausgehend von Gleichung 2.2

$$\frac{\partial w_i}{\partial t} + \mathbf{v} \operatorname{grad}(w_i) + \frac{1}{\rho} \operatorname{div}(\mathbf{j}_i) = \frac{M_i \omega_i}{\rho}. \quad (2.6)$$

In dieser Arbeit werden anstatt der Massenbrüche w_i spezifische Molzahlen φ_i verwendet, um die chemische Zusammensetzung zu quantifizieren. Es gilt der Zusammenhang $\varphi_i = \frac{w_i}{M_i}$, womit sich Gleichung 2.6 zur folgenden Erhaltungsgleichung für die spezifischen Molzahlen umformt

$$\frac{\partial \varphi_i}{\partial t} + \mathbf{v} \operatorname{grad}(\varphi_i) + \frac{1}{\rho M_i} \operatorname{div}(\mathbf{j}_i) = \frac{\omega_i}{\rho}. \quad (2.7)$$

Unter Verwendung von Gleichung 2.7 kann das die chemisch reagierende Strömung beschreibende PDE-System in vektorieller Form geschrieben werden [22]

$$\frac{\partial \boldsymbol{\psi}}{\partial t} = \mathbf{F}(\boldsymbol{\psi}) - \mathbf{v} \operatorname{grad}(\boldsymbol{\psi}) + \frac{1}{\rho} \operatorname{div}(\mathbf{D} \operatorname{grad}(\boldsymbol{\psi})) \equiv \boldsymbol{\phi}(\boldsymbol{\psi}). \quad (2.8)$$

Hierbei repräsentiert $\mathbf{F}(\boldsymbol{\psi})$ den n -dimensionalen thermochemischen Quelltermvektor und \mathbf{D} die $(n \times n)$ -dimensionale quadratische Matrix der Transportkoeffizienten [1, 33]. $\boldsymbol{\psi}$ ist dabei der $(n = 2 + n_s)$ -dimensionale Zustandsvektor

$$\boldsymbol{\psi} = (h, p, \varphi_1, \dots, \varphi_{n_s})^T, \quad (2.9)$$

mit n_s als der Anzahl verschiedener Spezies im Reaktionssystem.

Die Diffusionsmatrix \mathbf{D} setzt sich zusammen aus den n -dimensionalen Vektoren \mathbf{D}_e und \mathbf{D}_p , welche die Koeffizienten zur Berechnung des Wärmetransports bzw. der Druckdiffusion enthalten sowie der $(n_s \times n_s)$ -dimensionalen Matrix \mathbf{D}_s , die die Diffusionskoeffizienten des Speziestransports beinhaltet [34]

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} \mathbf{D}_e \\ \mathbf{D}_p \\ \mathbf{D}_s \end{pmatrix}. \quad (2.10)$$

\mathbf{D}_s setzt sich wiederum aus den drei Anteilen \mathbf{D}_{ss} , \mathbf{D}_{se} und \mathbf{D}_{sp} zusammen, mit denen der Stofftransport bedingt durch Spezies-, Temperatur- und Druckgradienten berechnet werden kann [34]. Für die Berechnung der Einträge von \mathbf{D}_{ss} wird

in dieser Arbeit die *Curtiss-Hirschfelder*-Approximation angewendet [1, 29, 30]. Hierbei wird angenommen, dass bei der Diffusion einer Spezies sich alle anderen Spezies mit der selben Geschwindigkeit bewegen [1, 29, 30].

Für die vereinfachte Annahme gleicher Diffusivitäten und einer Lewiszahl $Le = 1$ vereinfacht sich \mathbf{D} in Gleichung 2.8 zu einer Diagonalmatrix mit identischen Einträgen $D_{ii} = \frac{\lambda_W}{\rho c_p}$, wobei λ_W der Wärmeleitfähigkeit und c_p der spezifischen Wärmekapazität entspricht [1].

Unter der Vernachlässigung von Strahlungseinflüssen und der Annahme eines konstanten Drucks gilt für die Quellterme der Enthalpie und des Drucks $\mathbf{F}^{h,p} = \mathbf{0}$. Damit lässt sich der n_s -dimensionale Quelltermvektor \mathbf{F}^φ der Spezies als Produkt der $(n_s \times n_r)$ -dimensionalen Matrix \mathbf{R} der stöchiometrischen Koeffizienten und dem n_r -dimensionalen Vektor \mathbf{r} der kinetischen Reaktionsgeschwindigkeiten schreiben [15, 18]

$$\mathbf{F}^\varphi = \mathbf{R} \cdot \mathbf{r}, \quad (2.11)$$

wobei n_r der Anzahl an Elementarreaktionen im chemischen Reaktionssystem entspricht [15].

Heutzutage verwendete Reaktionsmechanismen zur Beschreibung der chemischen Kinetik sind durch eine sehr große Anzahl an Spezies und Elementarreaktionen charakterisiert, sodass die Berechnung des chemischen Quellterms sehr aufwändig und daher zeitintensiv wird [1]. Zudem können sich die Reaktionsgeschwindigkeiten einzelner Elementarreaktion sehr stark unterscheiden, wodurch sich stark unterschiedliche Zeitskalen ergeben, mit denen chemische Prozesse ablaufen [1, 15]. Dies führt zu einer sehr hohen Steifigkeit des PDE-Systems 2.8, was in Kombination mit der hohen Anzahl an Spezies die numerische Lösung erheblich erschwert [35] (siehe Kapitel 1). Gleichzeitig ist die Existenz stark unterschiedlicher Zeitskalen aber auch dafür verantwortlich, dass chemisch reagierende Strömungen ein charakteristisches dynamisches Verhalten aufweisen [7, 18]. Dieses bildet die Grundlage für die Entwicklung von Reduktionsmethoden, welche die auf Grund des Quellterms verursachten Schwierigkeiten bei der numerischen Lösung der PDE-Systems beheben sollen [18].

3. Struktur und Dynamik chemisch reagierender Strömungen

Bevor im nächsten Kapitel ein Überblick über die wichtigsten Modellreduktionsmethoden gegeben wird, soll an dieser Stelle zunächst eine phänomenologische Erläuterung der charakteristischen Merkmale chemisch reagierender Strömungen erfolgen. Zunächst wird dabei auf die lokale örtliche Struktur vorgemischter und nicht-vorgemischter Verbrennungsprozesse eingegangen, die oftmals mit Hilfe eindimensionaler Flammenmodelle approximiert werden können. Davon ausgehend erfolgt eine Beschreibung des Übergangs vom Orts- in den thermochemischen Zustandsraum, der den Schauplatz für die Entfaltung der Systemdynamik und somit vieler Modellreduktionsmethoden darstellt. Schließlich wird auf Basis physikalisch-chemischer Beobachtungen und Überlegungen eine Erklärung für das Zustandekommen und die Eigenschaften niedrigdimensionaler Mannigfaltigkeiten innerhalb chemisch reagierender Strömungen gegeben, die im Zentrum dieser Arbeit und der im folgenden Kapitel beschriebenen Methoden stehen.

3.1. Lokale Strukturen vorgemischter und nicht-vorgemischter Verbrennungsprozesse

Vorgemischte und nicht-vorgemischte Verbrennungsprozesse haben eine sehr hohe technische Relevanz. So sind z.B. Ottomotoren durch eine vorgemischte Verbrennung gekennzeichnet, bei der Brennstoff und Oxidationsmittel bereits vor Eintritt in den Brennraum vermischt und anschließend im Brennraum gezündet werden [36]. In Dieselmotoren dagegen findet eine nicht-vorgemischte Verbrennung statt, bei der der Brennstoff sich erst im Brennraum mit dem Oxidationsmittel vermischt und verbrennt [1, 36].

Anwendungsrelevante vorgemischte und nicht-vorgemischte Verbrennungsprozesse sind in den meisten Fällen durch ein turbulentes Strömungsfeld und der damit einhergehenden starken Interaktion zwischen Konvektion, molekula-

3.1. Lokale Strukturen vorgemischter und nicht-vorgemischter Verbrennungsprozesse

ren Transportprozessen und chemischer Reaktion charakterisiert [3, 4]. Obwohl diese Interaktion zu gestreckten und gekrümmten Reaktionszonen führt [1], weisen turbulente Flammen lokal oftmals eine große Ähnlichkeit zum Verhalten eindimensionaler Flammen auf [12]. In den Abbildungen 3.1a und 3.1b sind

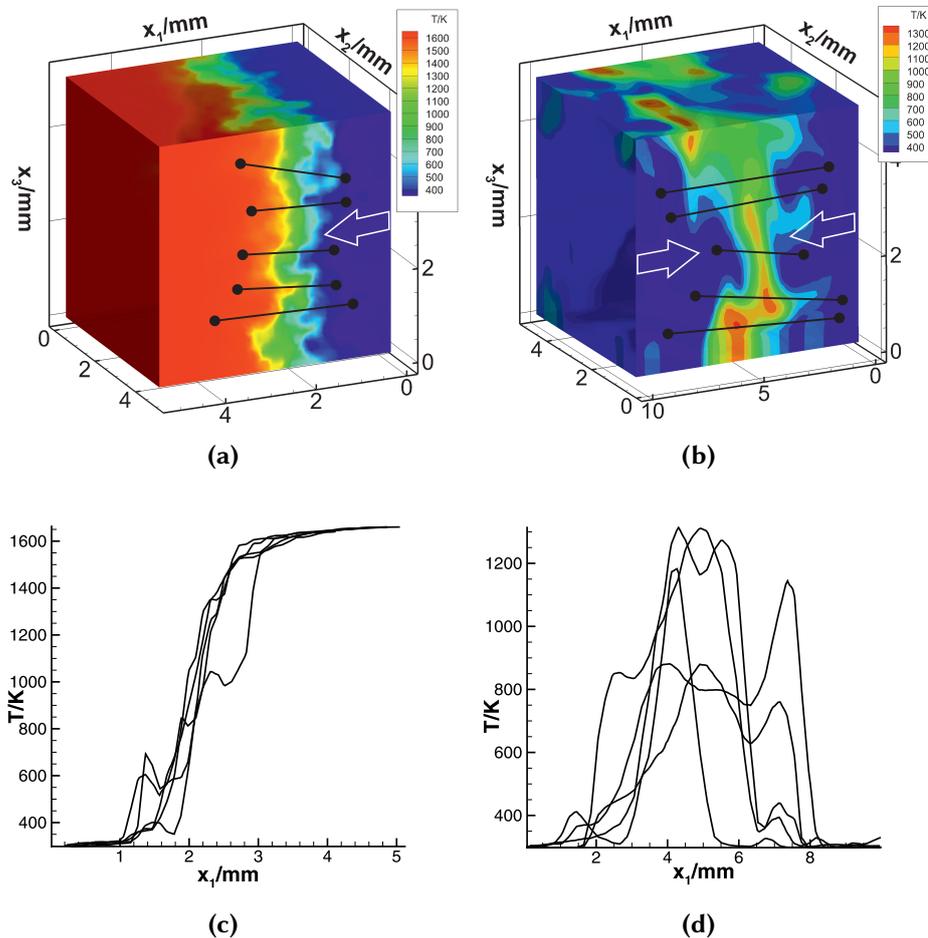


Abbildung 3.1.: Örtliche Temperaturverteilungen als Ergebnis dreidimensionaler direkter numerischer Simulationen. 3.1a und 3.1c: Vorgemischte CH₄-Luft-Flamme mit einem Äquivalenzverhältnis von 0,6 [37]. 3.1b und 3.1d: Nicht-vorgemischte H₂-Luft-Gegenstromflamme [38]. Die weißen Pfeile zeigen die Richtung der Strömung an. Die schwarzen eindimensionalen Temperaturprofile ergeben sich an den mit schwarzen Linien gekennzeichneten Stellen entlang der Flammenfront.

die Ergebnisse dreidimensionaler direkter numerischer Simulationen (DNS) einer vorgemischten Methan-Luft-Flamme [37] sowie einer nicht-vorgemischten Wasserstoff-Luft-Gegenstromflamme [38] zu sehen. DNS basieren auf der direk-

ten Lösung des PDE-Systems 2.8 ohne vereinfachende Annahmen und erlauben daher eine detaillierte Analyse turbulenter Verbrennungsprozesse [8]. Es ist jeweils die örtliche Verteilung der Temperatur dargestellt, wodurch die Lage der Flammenfront im dreidimensionalen Raum in beiden Fällen sichtbar wird.

Wie die Abbildungen 3.1c und 3.1d verdeutlichen, können die Flammenstrukturen durch korrespondierende eindimensionale Flammenkonfigurationen repräsentiert werden. Hierdurch wird eine geeignete Hilfsvorstellung geschaffen, mit der die lokalen Charakteristika der dreidimensionalen Flammen wiedergegeben werden können [12]. Bei der vorgemischten CH_4 -Luft-Flamme geben die eindimensionalen Profile die gestörte Flammenfront wieder, die sich durch den Eingriff turbulenter Wirbel einstellt und daher durch eine wellige Struktur gekennzeichnet ist. Die nicht-vorgemischte H_2 -Luft-Gegenstromflamme weist aufgrund der Turbulenz starke Unterschiede in der lokalen Verbrennungstemperatur auf. Ein analoges Verhalten ergibt sich bei eindimensionalen Gegenstromflammen durch die Variation der Streckungsrate bzw. des tangentialen Druckgradienten [1].

Die beschriebenen Zusammenhänge zeigen, dass eine Analyse des dynamischen Verhaltens eindimensionaler Flammen wertvolle Rückschlüsse auf die Dynamik dreidimensionaler Flammen ermöglicht, wenn diese entsprechende lokale Strukturen aufweisen [39]. Dieser Sachverhalt ist insbesondere bei der Entwicklung zuverlässiger Modellreduktionsmethoden von Bedeutung, da eindimensionale Flammen eine besonders anschauliche Interpretation der Flammendynamik und damit eine einfachere Ableitung wichtiger mathematisch-physikalischer Zusammenhänge erlauben.

Die Evaluierung der in dieser Arbeit vorgestellten REDIM-Modellreduktionsmethode erfolgt auf Basis der Untersuchung eindimensionaler vorgemischter freier Flammen und nicht-vorgemischter Gegenstromflammen. Der Fokus wird dabei auf die in Abbildung 3.2 dargestellten Konfigurationen gelegt, von denen aus eine Übertragung charakteristischer Eigenschaften auf andere Systeme gewährleistet ist [40, 41]. Beim vorgemischten System handelt es sich hierbei um eine Synthesegas-Luft-Flamme, die in Abbildung 3.2a dargestellt ist. Die Untersuchungen zum dynamischen Verhalten von nicht-vorgemischten Gegenstromflammen werden für das in Abbildung 3.2b dargestellte Wasserstoff-Luft-System durchgeführt.

Anhand dieser beiden Konfigurationen werden einerseits die wichtigsten Merkmale der in dieser Arbeit vorgestellten REDIM Modellreduktionsmethode diskutiert (Kapitel 5 und 6). Außerdem wird das vorgestellte Modell validiert, indem es für die Berechnung kritischer dynamischer Szenarien implementiert wird und die Ergebnisse mit detaillierten Simulationen verglichen werden (Kapitel 7). Die analysierten eindimensionalen Szenarien korrespondieren dabei mit dem charakteristischen lokalen Verhalten turbulenter dreidimensionaler Flammen, das

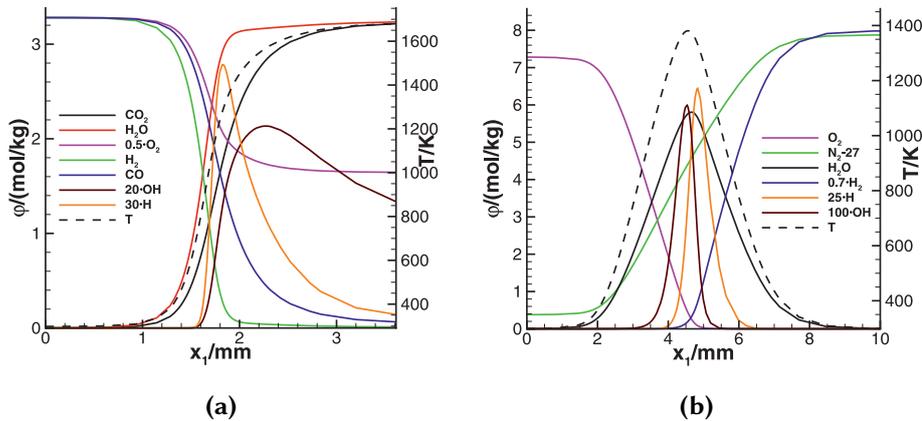


Abbildung 3.2.: Örtliche Verteilung der Spezies und Temperatur eindimensionaler Flammen. (a): Vorgemischte Synthesegas-Luft-Flamme. (b): Nichtvorgemischte Wasserstoff-Luft-Gegenstromflamme. Einheiten der spezifischen Molzahlen φ in mol kg^{-1} .

in Abbildung 3.1 dargestellt wird. Die Untersuchungen werden mit Hilfe des Programmpakets INSFLA [29] durchgeführt, das sowohl die detaillierte als auch die reduzierte Berechnung eindimensionaler Flammen ermöglicht (Abschnitt 6.4).

3.2. Zustandsraumbetrachtung

Durch die numerische Integration des die reagierende Strömung beschreibenden PDE-Systems 2.8 ergibt sich die orts- und zeitabhängige Lösung $\psi(\boldsymbol{x}, t)$ [1]. Die naheliegendste Repräsentation dieser Lösung ist diejenige in Ortskoordinaten (Abbildung 3.1), wodurch die örtliche Verteilung einzelner Variablen ψ_i zu verschiedenen Zeitpunkten visualisiert werden kann.

Zur Beurteilung der Systemdynamik, welche durch die rechte Seite $\phi(\psi)$ des PDE-Systems 2.8 beschrieben wird, eignet sich allerdings vielmehr eine Darstellung der Systemzustände im thermochemischen Zustandsraum \mathcal{Z} . Dieser wird durch die Einträge des Zustandsvektors ψ aufgespannt, sodass der durch ψ beschriebene thermochemische Zustand an einem bestimmten Ort und zu einer bestimmten Zeit einen Punkt in \mathcal{Z} repräsentiert [1, 15]. Die Dimension des Zustandsraums entspricht dabei gemäß Gleichung 2.9 der Anzahl $2 + n_s$ an Skalaren im thermochemischen Zustandsvektor ψ [42]. Die rechte Seite ϕ des PDE-Systems stellt im Zustandsraum einen Vektor dar, der die Richtung der zeitlichen Veränderung jedes einzelnen Zustands anzeigt [18]. Dies ermöglicht eine gesamtheitliche Beobachtung und geometrische Interpretation der Systemdy-

3. Struktur und Dynamik chemisch reagierender Strömungen

namik, was einen großen Vorteil darstellt und die Basis für Reduktionsmethoden wie die REDIM-Methode bildet [18].

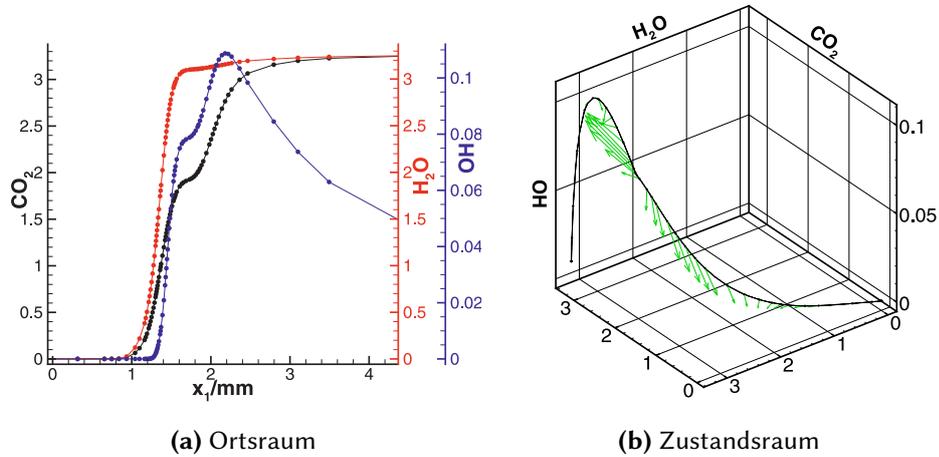


Abbildung 3.3.: Übergang vom Orts- in den Zustandsraum. Die örtliche Verteilung von CO_2 , H_2O und OH innerhalb einer eindimensionalen vorgemischten Synthesegas-Luft-Flamme führt zu einem eindimensionalen Profil im Zustandsraum, von dem eine dreidimensionale Projektion in den drei genannten Spezies gezeigt ist. An jedem Zustandspunkt zeigt das mit grünen Pfeilen dargestellte Vektorfeld die Richtung der Systemdynamik an. Einheiten der spezifischen Molzahlen φ in mol kg^{-1} .

Abbildung 3.3 verdeutlicht den Zusammenhang zwischen Orts- und Zustandsraum anhand einer eindimensionalen laminaren vorgemischten Synthesegas-Luft-Flamme. In Abbildung 3.3a werden die Ortsprofile von CO_2 , H_2O und OH zu einem bestimmten Zeitpunkt innerhalb eines transienten Vorgangs gezeigt. Die spezifischen Molzahlen der drei Spezies an einem bestimmten Ort ergeben in der dreidimensionalen Zustandsraumdarstellung (Abbildung 3.3b) einen Punkt. Insgesamt ergibt sich daraus ein eindimensionales Profil im Zustandsraum. Die Richtung der transienten Bewegung im Zustandsraum wird an jedem Zustandspunkt und zu jedem Zeitpunkt durch den Vektor der rechten Seite ϕ angegeben (grüne Pfeile).

Die transiente Bewegung im Zustandsraum ist beschränkt durch physikalische Grenzen, deren Einhaltung durch die korrekte mathematische Formulierung des PDE-Systems gewährleistet ist [2]. Diese sind z.B. die Positivheit von Temperatur, Druck, Dichte und Speziesmassenbrüche sowie die Normierungsbedingung der Massenbrüche [15]. Zusätzliche Beschränkungen der Systemdynamik ergeben sich durch vereinfachende Annahmen wie der Konstanzheit des Drucks ($p = \text{const.}$) oder der Annahme adiabatischer Bedingungen ($h = \text{const.}$) [15].

Bei der Beobachtung der transienten Bewegung von Verbrennungssystemen im Zustandsraum fällt zudem auf, dass diese sich nicht willkürlich im Zustandsraum entfaltet, sondern auf einen gewissen Teilbereich dessen beschränkt ist [8]. Es stellt sich heraus, dass es sich hierbei um niedrigdimensionale Unterräume des Zustandsraums handelt, die als Mannigfaltigkeiten bezeichnet werden [8]. Diese Mannigfaltigkeiten haben besondere Eigenschaften und stehen im Zentrum vieler Reduktionsmethoden. Das nächste Kapitel beschreibt die Zusammenhänge, die zur Existenz von Mannigfaltigkeiten in chemisch reagierenden Strömungen führen.

3.3. Mannigfaltigkeiten in chemisch reagierenden Strömungen

Das Zustandekommen niedrigdimensionaler Mannigfaltigkeiten im Zustandsraum infolge der Dynamik chemisch reagierender Strömungen kann ohne mathematische Begründung bereits anhand der Analyse instationärer Simulationsergebnisse im thermochemischen Zustandsraum verdeutlicht werden. Abbildung 3.4 stellt die in Abbildung 3.1 gezeigten DNS-Ergebnisse einer vorgemischten turbulenten Methan-Luft-Flamme [37] und einer nicht-vorgemischten Wasserstoff-Luft-Gegenstromflamme [38] in dreidimensionalen Projektionen des Zustandsraums dar. Die Zustandspunkte entstammen dabei gemäß Abbildung 3.3 entsprechenden Ortspunkten und sind in Abhängigkeit der Temperatur farblich gekennzeichnet.

Es ist in beiden Fällen deutlich eine niedrigdimensionale Struktur zu erkennen, entlang derer sich die Zustandspunkte verteilen. Diese Strukturen entsprechen Mannigfaltigkeiten im Zustandsraum, die besondere Eigenschaften haben. Diese ergeben sich auf Grund der charakteristischen Zeitskalen, mit denen chemische und physikalische Prozesse im Verbrennungssystem ablaufen und die in Abbildung 3.5 einander gegenüber gestellt werden.

Wie die Abbildung veranschaulicht, erstreckt sich der Bereich chemischer und physikalischer Zeitskalen über mehrere Größenordnungen, wodurch sich gemäß Kapitel 2 eine hohe Steifigkeit des zu lösenden PDE-Systems ergibt und dessen numerische Lösung erschwert [1, 7, 15]. Gleichzeitig fällt jedoch auf, dass ein großer Teil der chemischen Prozesse durch Zeitskalen charakterisiert ist, die sehr viel schneller sind als diejenigen der physikalischen Prozesse. Diese schnellen chemischen Prozesse führen zu partiellen Gleichgewichten oder quasistationären Zuständen, sodass sie als relaxiert bzw. abgeschlossen betrachtet und daher entkoppelt werden können [1, 8, 10, 43]. Infolge dessen verringert sich die Anzahl an Freiheitsgraden, die der Systemdynamik zur Verfügung stehen [44].

3. Struktur und Dynamik chemisch reagierender Strömungen

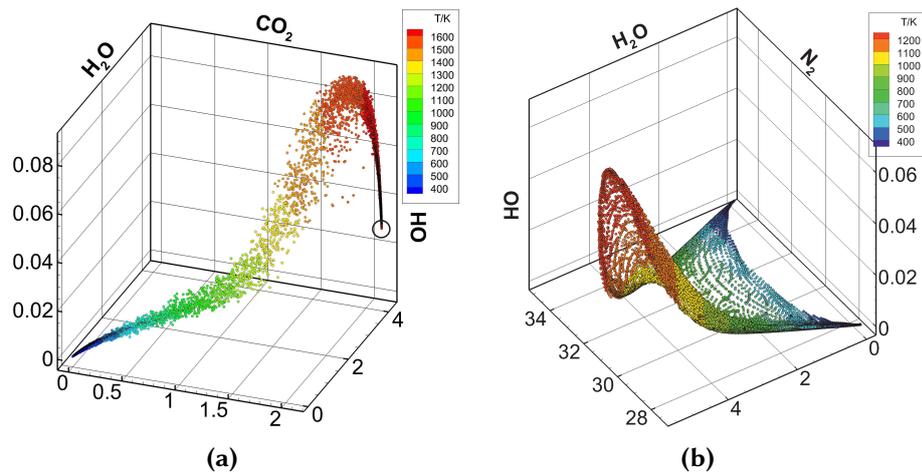


Abbildung 3.4.: Verteilung der Zustandspunkte der DNS aus Abbildung 3.1 in dreidimensionalen Projektionen des Zustandsraums [37, 38]. Die Zustandspunkte sind in Abhängigkeit der Temperatur farblich gekennzeichnet und verteilen sich entlang niedrigdimensionaler Hyperflächen. Der Kreis in (a) kennzeichnet das chemische Gleichgewicht. Einheiten der spezifischen Molzahlen φ in mol kg^{-1} .

Es existiert darüber hinaus ein Zeitskalenbereich, der sowohl von chemischen als auch von physikalischen Prozessen abgedeckt wird. Zwischen diesen Prozessen findet eine Kopplung bzw. gegenseitige Beeinflussung statt, die sich nach Abschluss der schnellen chemischen Prozesse entlang niedrigdimensionaler Mannigfaltigkeiten entfaltet [22]. Die in Abbildung 3.4 sichtbaren Zustände kennzeichnen genau diese Kopplung und geben gleichzeitig die niedrigdimensionale Struktur wieder, die sich auf Grund der schnellen und langsamen chemischen Prozesse ergeben.

Besonders gut sichtbar wird diese in der Nähe des chemischen Gleichgewichts, das in Abbildung 3.4a durch einen Kreis gekennzeichnet ist. Auf Grund der hohen Verbrennungstemperatur sind die Reaktionsgeschwindigkeiten hier sehr groß [1], sodass die Anzahl entkoppelter schneller chemischer Prozesse ebenfalls groß ist [45]. In der Umgebung des chemischen Gleichgewichts lässt sich die Dynamik mit Hilfe einer eindimensionalen Mannigfaltigkeit beschreiben, da hier bis auf den langsamsten chemischen Prozess alle anderen entkoppelt werden können. Mit zunehmender Entfernung vom chemischen Gleichgewicht sinkt die Anzahl entkoppelter chemischer Prozesse auf Grund der abnehmenden Temperatur und die Anzahl koppelnder physikalisch-chemischer Prozesse nimmt zu. Dadurch steigt auch die Dimension der Mannigfaltigkeiten, entlang derer sich die System-

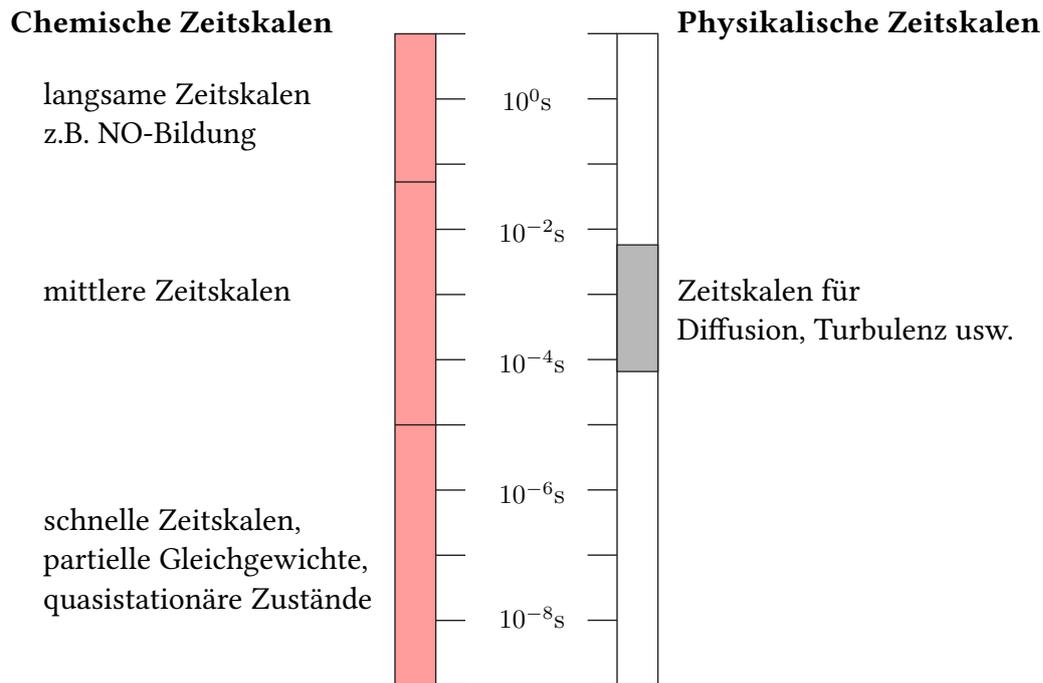


Abbildung 3.5.: Typische chemische und physikalische Zeitskalen chemisch reagierender Strömungen [1].

dynamik entfaltet, mit zunehmendem Abstand vom chemischen Gleichgewicht [45].

Während in der Nähe des chemischen Gleichgewichts die schnellen chemischen Prozesse dominieren, ist die Vorheizzone in der Nähe der unverbrannten Mischung auf Grund der geringen Temperatur vorwiegend durch sehr langsame chemische Prozesse charakterisiert [21]. Dieser Bereich wird deshalb von den physikalischen Prozessen dominiert, was ebenfalls auf die Existenz niedrigdimensionaler Mannigfaltigkeiten führt [21]. Dieser Sachverhalt geht aus der einfachen geometrischen Überlegung hervor, dass Diffusionsprozesse im Zustandsraum stets zu einer Minimalfläche führen [22, 46]. Im Falle der in Abbildung 3.4 gezeigten Flamme stellt sich diese Minimalfläche zwischen dem Rand des Bereichs chemisch-diffusiver Kopplung und dem Punkt unverbrannter Mischungszusammensetzung ein [34, 45, 47].

Die bisherigen Ausführungen zeigen, dass die gleichzeitige Existenz schneller und langsamer physikalisch-chemischer Prozesse das Zustandekommen niedrigdimensionaler Mannigfaltigkeiten im thermochemischen Zustandsraum bedingt. Niedrigdimensionale Mannigfaltigkeiten in chemisch reagierenden Strömungen haben folgende wichtige Eigenschaften, welche durch die obigen Beobachtungen bestätigt werden [7, 13, 15, 43]

3. Struktur und Dynamik chemisch reagierender Strömungen

- Die n_f schnellen chemischen Prozesse führen zur Mannigfaltigkeit hin und sorgen dafür, dass Zustände, die auf Grund von Störungen die Mannigfaltigkeit verlassen, schnell wieder relaxiert werden. Dies wird als attraktive Eigenschaft bezeichnet.
- Die m langsamen Prozesse entfalten sich entlang der bzw. tangential zur Mannigfaltigkeit. Es gilt $m = n - n_f$.
- Die Anzahl an langamen Prozessen ist weitaus kleiner als die Dimension des Zustandsraums \mathcal{Z} , d.h. $m \ll n$.
- Nach Abschluss der schnellen Prozesse entfaltet sich die detaillierte Systemdynamik entlang der Mannigfaltigkeit und verlässt diese im weiteren Verlauf nicht mehr. Diese Eigenschaft wird als Invarianz und die damit versehenen Mannigfaltigkeiten als langsame invariante Mannigfaltigkeiten bezeichnet.
- Die Dimension m der Mannigfaltigkeit entspricht der Anzahl an langsamen Prozessen, die tangential ablaufen. Für die explizite Beschreibung der Mannigfaltigkeit wird daher die entsprechende Anzahl m an unabhängigen Variablen benötigt.

Anhand Abbildung 3.6 können die beschriebenen Eigenschaften veranschaulicht werden. Die Abbildung zeigt Trajektorien (grüne Kurven) eines homogenen Synthesegas-Luft-Systems in einer zweidimensionalen CO_2 - H_2O -Projektion und einer dreidimensionalen CO_2 - H_2O - OH -Projektion des Zustandsraums, die sich ausgehend von unterschiedlichen Zusammensetzungen ins chemische Gleichgewicht bewegen (schwarzer Kreis). Es ist zu sehen, dass zu Beginn der Reaktion die schnellen chemischen Prozesse auf eine zweidimensionale Mannigfaltigkeit (schwarzes Gitter) führen, auf der sich im Anschluss die langsame Systemdynamik entfaltet. Beim Auftreffen auf die zweidimensionale Mannigfaltigkeit sind nur noch die zwei langsamsten chemischen Prozesse aktiv. Im weiteren Verlauf vergrößert sich sukzessive die Anzahl entkoppelter schneller Prozesse, sodass zunächst eine eindimensionale Mannigfaltigkeit (rote Kurve) und schließlich das chemische Gleichgewicht als nulldimensionale Mannigfaltigkeit erreicht werden.

Niedrigdimensionale Mannigfaltigkeiten stehen im Zentrum vieler Modellreduktionsmethoden. Nach Abschluss der vorangegangenen Erläuterungen kann die Grundidee hinter der Verwendung von Mannigfaltigkeiten zur reduzierten Beschreibung chemisch reagierender Strömungen folgendermaßen zusammengefasst werden

1. Bestimme die m -dimensionale langsame Mannigfaltigkeit des Systems.

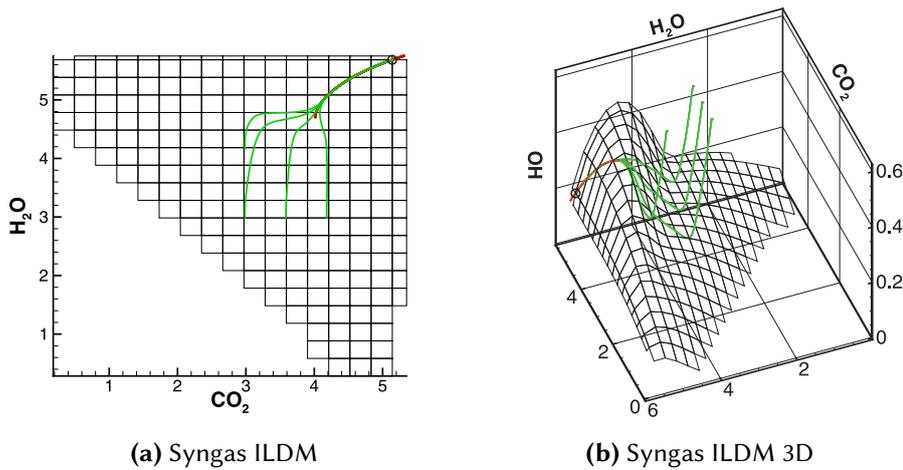


Abbildung 3.6.: Eindimensionale (rot) und zweidimensionale (schwarzes Gitter) niedrigdimensionale Mannigfaltigkeiten eines homogenen Synthesegas-Luft-Systems zusammen mit vier unterschiedlichen Trajektorien (grüne Kurven). Die schnellen Prozesse führen zu den Mannigfaltigkeiten hin, die langsamen entfalten sich tangential dazu und sind beim Erreichen des chemischen Gleichgewichts (schwarzer Kreis) abgeschlossen. (a): CO_2 - H_2O -Projektion des Zustandsraums. (b): CO_2 - H_2O - OH -Projektion. Einheiten der spezifischen Molzahlen φ in mol kg^{-1} .

2. Beschreibe die Systemdynamik mit Hilfe von m anstatt von n Parametern.

Dieses Konzept ermöglicht die von den schnellen Prozessen entkoppelte Behandlung der langsamen Systemdynamik, wodurch sowohl die Steifigkeit als auch die Dimension des zu lösenden PDE-Systems reduziert werden. Hierdurch kann die numerische Simulation chemisch reagierender Strömungen zeiteffizienter erfolgen, ohne große Einbußen bei der Genauigkeit der Berechnungen in Kauf nehmen zu müssen [7, 8].

4. Reduktionsmethoden in der Verbrennung

Das vorangegangene Kapitel beschrieb auf Basis physikalisch-chemischer Beobachtungen und Überlegungen das Zustandekommen niedrigdimensionaler Mannigfaltigkeiten in detaillierten chemisch reagierenden Strömungen. Auf Grund ihrer charakteristischen Eigenschaften handelt es sich hierbei um langsame invariante Mannigfaltigkeiten, die selbst Teil der detaillierten Lösung sind und das detaillierte Systemverhalten nach Abschluss der schnellen chemischen Prozesse somit korrekt wiedergeben [18]. Die Entwicklung konsistenter Reduktionsmethoden ist deshalb sehr eng mit der Entwicklung geeigneter Verfahren zur Identifikation oder Approximation niedrigdimensionaler langsamer invarianter Mannigfaltigkeiten verknüpft [48].

Aktuell existieren hierfür zwei unterschiedliche Ansätze, die innerhalb der Methoden für die reduzierte Beschreibung chemisch reagierender Strömungen verfolgt werden [20]. Der erste Ansatz beruht auf der von physikalischen Prozessen getrennten Analyse des chemischen Quellterms $F(\psi)$ (Gleichung 2.11) [20, 43]. Diese Methoden ermitteln oder approximieren langsame invariante Mannigfaltigkeiten, die sich rein aus der Dynamik des homogenen Reaktionssystems $\dot{\psi} = F(\psi)$ ergeben, das durch ein System aus gewöhnlichen Differentialgleichungen (ordinary differential equations, ODE) beschrieben wird. Die Kopplung zwischen physikalischen und chemischen Prozessen erfolgt dann innerhalb der reduzierten Beschreibung der chemisch reagierenden Strömung, indem die physikalischen Prozesse auf die chemische Mannigfaltigkeit projiziert oder komplett vernachlässigt werden [20]. Der Vorteil dieser Methoden ist es, dass für die Analyse homogener Systeme bereits eine Vielzahl an Methoden und Algorithmen existieren, die aus der fundierten Theorie gewöhnlicher Differentialgleichungen hervorgehen und auf die zurückgegriffen werden kann [20].

Der zweite Ansatz basiert auf der Approximation langsamer invarianter Mannigfaltigkeiten für das gesamte PDE-System 2.8 und berücksichtigt die Kopplung zwischen physikalischen und chemischen Prozessen bereits innerhalb des Konstruktionsprozesses der langsamen Mannigfaltigkeit [7]. Die Problematik bei diesen Methoden ist allerdings die Tatsache, dass die physikalischen Zeitskalen (Abbildung 3.5) nicht nur vom thermochemischen Zustand, sondern auch vom

Ort bzw. von den Ortsgradienten der Spezies abhängen [49]. Die Zerlegung des PDE-Systems in schnelle und langsame Prozesse, welche für die Existenz und Identifikation langsamer invarianter Mannigfaltigkeiten notwendig ist, ist im Gegensatz zum ODE-System des homogenen Reaktionssystems daher weitaus aufwändiger [20].

Ein wichtiges Unterscheidungsmerkmal mannigfaltigkeitsbasierter Reduktionsmethoden ergibt sich aus der Art der Anwendung der Mannigfaltigkeit im Zuge der reduzierten Beschreibung reagierender Strömungen. Implizite Methoden beruhen dabei auf der parallelen Lösung von n_f impliziten Definitionsgleichungen für die Mannigfaltigkeit und einer reduzierten Anzahl ($m = n - n_f$) an partiellen Differentialgleichungen [50, 51]. Dadurch entsteht ein n -dimensionales Differential-Algebraisches-Gleichungssystem (Differential Algebraic Equations, DAE), das jedoch potenziell schwerer zu lösen ist als das ursprüngliche n -dimensionale PDE-System, sodass der eigentliche Zweck der Reduktionsmethode nicht bzw. nur bedingt erfüllt werden kann [8, 15]. Im Gegensatz dazu verfolgen explizite Methoden eine effizientere Strategie, die sich in zwei Etappen aufgliedert. Die erste besteht in der Identifikation bzw. der Konstruktion der m -dimensionalen langsamen Mannigfaltigkeit und ihrer expliziten Darstellung in Abhängigkeit von m lokalen Koordinaten (siehe Abschnitt 3.3). In der zweiten Etappe erfolgt die Transformation des detaillierten PDE-Systems in die lokalen Koordinaten der Mannigfaltigkeit, wodurch sich die Anzahl der zu lösenden PDEs auf die Dimension m der Mannigfaltigkeit verringert. Dies wird gemeinhin als reduziertes Modell bezeichnet. Zur Umsetzung des reduzierten Modells müssen somit die für die Lösung des reduzierten PDE-Systems notwendigen Informationen auf der Mannigfaltigkeit zur Verfügung stehen. Dies wird durch die Speicherung der Mannigfaltigkeitszustände und der zugehörigen physikalisch-chemischen Größen in tabellarischer Form realisiert [7, 8].

Die nächsten Kapitel verfolgen das Ziel, einen Überblick über wichtige Methoden zur reduzierten Beschreibung chemisch reagierender Strömungen zu geben. Hierfür werden in Abschnitt 4.1 zunächst diejenigen Methoden vorgestellt, die auf der Analyse der Dynamik homogener Reaktionssysteme beruhen. Es werden dabei die Schwierigkeiten diskutiert, die sich aus der Verwendung rein chemischer Mannigfaltigkeiten in reagierenden Strömungen ergeben. Im Anschluss daran werden in Abschnitt 4.2 PDE-basierte Reduktionsmethoden präsentiert, zu denen auch die in dieser Arbeit behandelte REDIM-Methode gehört. Letztendlich soll dadurch die Einordnung der REDIM-Methode in das wissenschaftliche Feld der Reduktionsmethoden ermöglicht werden. Die nachfolgende Diskussion beschränkt sich auf die für den Kontext dieser Arbeit wichtigen Methoden. Ein umfangreicher Überblick über viele weitere Methoden wird beispielsweise in [7] gegeben.

Die Grundlage für die im Folgenden verwendeten Begriffe und sprachlichen Formulierungen bildet die singuläre Störungstheorie [18, 52–54]. Singulär Gestörte Systeme (singularly perturbed system, SPS) repräsentieren die einfachste Ausführung eines Multiskalensystems und werden durch den Parameter $0 < \epsilon \ll 1$ charakterisiert

$$\begin{aligned}\dot{\mathbf{y}} &= \mathbf{f}(\mathbf{y}, \mathbf{z}) \\ \epsilon \dot{\mathbf{z}} &= \mathbf{g}(\mathbf{y}, \mathbf{z}).\end{aligned}$$

ϵ beschreibt dabei die Zerlegung in schnell und langsam [18]. Mit Hilfe der Geometrischen Singulär Gestörten (Geometrical Singular Perturbation, GSP) Theorie [11, 52, 53] wird eine formale Begründung für die Existenz und die charakteristischen Eigenschaften langsamer invarianter Mannigfaltigkeiten in Systemen mit SPS-Form als Folge in schnell und langsam zerlegbarer Systemdynamik geliefert. Die GSP-Theorie beinhaltet darüber hinaus die mathematische Grundlage für die explizite Darstellung der langsamen invarianten Mannigfaltigkeit als Funktion der langsamen Systemparameter und bildet damit die theoretische Basis für die Anwendung bzw. Benutzung langsamer invarianter Mannigfaltigkeiten in reduzierten Berechnungen [18, 52]. Die prinzipiellen Ideen der GSP-Theorie können sowohl auf die im Folgenden vorgestellten homogenen als auch inhomogenen Mannigfaltigkeitsmethoden übertragen werden. Die GSP-Theorie stellt deshalb ein sehr nützliches Werkzeug zur Überprüfung und zum Vergleich der Methodologien innerhalb der vorgestellten Reduktionsmethoden dar [18].

4.1. Methoden zur Reduktion der chemischen Kinetik

4.1.1. Quasistationarität und partielle Gleichgewichte

Die Quasistationaritätsannahme (quasi steady state assumption, QSSA) und die Annahme partieller Gleichgewichte (partial equilibrium assumption, PEA) [1, 4] waren die ersten Methoden, die zur Reduktion homogener Reaktionssysteme eingesetzt wurden. Bereits vor über 100 Jahren beobachtete *Bodenstein*, dass manche chemischen Reaktionen mit einer derart hohen Geschwindigkeit ablaufen, dass sich einige Spezies im Reaktionssystem dadurch im Zustand der Quasistationarität oder Reaktionen in partiellem Gleichgewicht befinden [8, 16, 17].

QSSA und PEA ergeben sich aus der Beobachtung des typischen Verhaltens von Speziestrajektorien und den Reaktionsgeschwindigkeiten einiger Elementarreaktionen des chemischen Reaktionssystems [8]. Die Formulierung der QSSA geht dabei aus der Annahme hervor, dass Verbrauchs- und Bildungsgeschwindigkeit einer Spezies φ_i gleich groß sind, sodass $\dot{\varphi}_i = F_i^\varphi(\boldsymbol{\psi}) \approx 0$. Es ergibt

sich daraus ein System aus n_f impliziten algebraischen Gleichungen, die eine $(m = n - n_f)$ -dimensionale Mannigfaltigkeit mit zugehörigem reduzierten System charakterisieren [15, 18].

Die PEA führt ebenso auf ein System aus impliziten algebraischen Gleichungen, die jedoch auf der Annahme beruhen, dass Vorwärts- und Rückwärtsreaktion in einer chemischen Elementarreaktion gleich schnell sind. Folglich ergibt sich für die Reaktionsgeschwindigkeit der i -ten von n_r Elementarreaktionen $r_i \approx 0$ (Gleichung 2.11). Auch hier wird eine $(m = n - n_f)$ -dimensionale Mannigfaltigkeit bestimmt, wobei n_f hier der Anzahl an PEAs entspricht [15, 18].

Einen Grenzfall der QSSA und PEA stellt die Annahme "gemischt gleich verbrannt" dar [1, 8, 15]. Diese ergibt sich, wenn die QSSA für alle Spezies bzw. die PEA für alle chemischen Reaktionen angenommen wird. Dies führt dazu, dass die chemische Reaktion allein durch den erreichten Gleichgewichtswert beschrieben wird [15]. Diese Annahme führt jedoch zu einer zu starken Vereinfachung der Reaktionskinetik, wodurch von der Kinetik kontrollierte Prozesse der Zündung und Schadstoffbildung nur unzureichend abgebildet werden können [15].

Sowohl QSSA als auch PEA erlauben eine einfache Reduktion des vorhandenen Reaktionssystems. Ein weiterer Vorteil ist, dass beide Methoden eine globale Reduktion des gesamten Systems ermöglichen. Beide Annahmen setzen jedoch ein gewisses Maß an Vorwissen über das Systemverhalten voraus, sodass ihrer Anwendung zunächst eine Analyse des Reaktionssystems in Form einer Sensitivitätsanalyse zuvorkommen muss [8]. Zudem wird in [18] gezeigt, dass QSSA und PEA in vielen Fällen nur eine unzureichende Approximation langsamer invarianter Mannigfaltigkeiten darstellen, sodass die charakteristische Dynamik des homogenen Systems nicht konsistent wiedergegeben wird.

4.1.2. Automatische Methoden

Mit Hilfe mathematischer Methoden, die eine automatische Aufspaltung in schnelle und langsame Prozesse anstreben, wird das Maß an benötigtem Vorwissen im Vergleich zu QSSA und PEA stark verringert [15]. Automatische Methoden werden in der Regel speziell zum Zweck entwickelt, langsame invariante Mannigfaltigkeiten in chemischen Reaktionssystemen bestmöglich zu approximieren [18] und erlauben deshalb eine besonders gute Wiedergabe des langsamen Verhaltens homogener Systeme.

Die lokale Systemdynamik homogener Systeme wird durch das Vektorfeld $\mathbf{F}(\boldsymbol{\psi}^0)$ an einer Stelle $\boldsymbol{\psi}^0$ des Zustandsraumes beschrieben. Mit Hilfe einer Eigenwertanalyse der Jacobi-Matrix $\mathbf{F}_{\boldsymbol{\psi}}(\boldsymbol{\psi}^0) = \left[\frac{\partial F_i}{\partial \psi_j} \right]_{i,j=1}^n$ lassen sich charakteristische

Geschwindigkeiten und Richtungen identifizieren, die eine Aufspaltung der lokalen Systemdynamik in schnelle und langsame Prozesse erlauben [10, 15, 43]

$$\mathbf{F}_\psi(\psi^0) = \mathbf{W} \mathbf{\Lambda} \mathbf{W}^{-1}. \quad (4.1)$$

\mathbf{W} ist dabei die Matrix aus linken Eigenvektoren und $\mathbf{\Lambda}$ die Eigenwertematrix, die im allgemeinen Fall einer Blockdiagonalmatrix entspricht [15]. Die Eigenvektoren bzw. Moden von \mathbf{F}_ψ geben dabei die charakteristischen Richtungen an, in welche sich die Systemdynamik entfaltet. Die zugehörigen Eigenwerte, bzw. deren Kehrwerte, geben die Zeitskalen an, mit denen sich das System in Richtung der Eigenvektoren bewegt [15]. Eine Analyse des Eigenwertspektrums chemischer Reaktionssysteme zeigt, dass die meisten Eigenwerte betragsmäßig große, negative Realteile besitzen [15]. Die Beträge unterscheiden sich dabei oftmals um mehr als eine Größenordnung, wodurch die Aufspaltung der lokalen Systemdynamik in schnelle und langsame Prozesse beschrieben wird [7, 10, 15, 43]

$$\frac{|\operatorname{Re}(\lambda_m)|}{|\operatorname{Re}(\lambda_{m+1})|} = \epsilon; \quad 0 < \epsilon \ll 1. \quad (4.2)$$

λ_m stellt dabei den betragsmäßig größten Eigenwert der langsamen Prozesse und λ_{m+1} den betragsmäßig kleinsten Eigenwert der schnellen Prozesse dar. Gleichung 4.2 wird in der Literatur auch als "spectral gap" bezeichnet [7] (vgl. Abschnitt 3.3). Diese bildet die Voraussetzung für die Existenz langsamer invarianter Mannigfaltigkeiten in homogenen Reaktionssystemen.

Eine der wichtigsten Methoden zur automatischen Reduktion homogener Reaktionssysteme ist die Methode der intrinsisch niedrigdimensionalen Mannigfaltigkeiten (intrinsic low dimensional manifolds, ILDM) [10, 15, 43, 55]. Unter Verwendung der Zerlegung der Jacobi-Matrix in schnelle und langsame Unterräume [15] ergibt sich die ILDM-Gleichung in impliziter Form zu [10, 43]

$$\tilde{\mathbf{Z}}_f \cdot \mathbf{F}(\Psi) = \mathbf{0}. \quad (4.3)$$

Dabei ist $\tilde{\mathbf{Z}}_f$ eine $(n_f \times n)$ -dimensionale Matrix, deren Zeilenvektoren die zu den n_f betragsmäßig größten Eigenwerten gehörenden schnellen rechten Eigenvektoren darstellen [10, 15, 43, 55]. Durch Gleichung 4.3 wird eine $(m = n - n_f)$ -dimensionale ILDM definiert [10, 15, 43, 55], die eine Approximation der Ordnung $\mathcal{O}(\epsilon)$ für die m -dimensionale langsame invariante Mannigfaltigkeit darstellt [56]. Die Approximation ist demnach umso besser, je größer die in Gleichung 4.2 beschriebene "spectral gap" ist [57].

Die Implementierung der ILDM in reduzierten Rechnungen beruht auf ihrer expliziten Formulierung in Abhängigkeit lokaler Koordinaten $(\theta_1, \dots, \theta_m)$. Dies

wird durch das gleichzeitige Lösen von Gleichung 4.3 und m Parametergleichungen realisiert [47, 55, 58]. Die ILDM-Zustände werden dann in Abhängigkeit der Parameter in einer Tabelle gespeichert, auf die im Rahmen der Umsetzung des reduzierten Systems zugegriffen wird. Dies erlaubt eine besonders effiziente Anwendung von ILDMs in reduzierten Berechnungen [59].

Die Computational Singular Perturbation (CSP) Methode ist eine weitere automatische Reduktionsmethode, die häufig Anwendung findet [11, 49, 50, 60]. Sie basiert auf der Darstellung des Vektorfeldes homogener chemischer Reaktionen als die Summe aus schnellen und langsamen Anteilen

$$\mathbf{F}(\Psi) = \hat{\mathbf{F}}_f + \hat{\mathbf{F}}_s, \quad (4.4)$$

wobei $\hat{\mathbf{F}}_f$ dem schnellen Anteil und $\hat{\mathbf{F}}_s$ dem langsamen Anteil entspricht [8]. $\hat{\mathbf{F}}_f$ und $\hat{\mathbf{F}}_s$ ergeben sich dabei als Amplituden des ursprünglichen Vektorfeldes $\mathbf{F}(\psi)$ in Bezug auf die Basisvektoren, die den schnellen und langsamen Unterraum aufspannen [11]. Die Basisvektoren werden wiederum ähnlich zur ILDM-Methode aus einer Analyse der Jacobi-Matrix \mathbf{F}_Ψ ermittelt [18]. In Analogie zur SPS-Theorie werden durch die Aufspaltung die schnelle und langsame Mannigfaltigkeit des Systems definiert [18]. Mittels einer iterativen Prozedur kann die Genauigkeitsordnung der Approximation der langsamen invarianten Mannigfaltigkeit sukzessive verbessert werden, sodass die CSP-Methode nach und nach die Terme der asymptotischen Expansion der langsamen invarianten Mannigfaltigkeit generiert [48].

Die Anwendung der CSP-Methode ist allerdings mit einem hohen rechnerischen Aufwand verbunden [7]. Im Gegensatz zur ILDM-Methode wird keine explizite Form der Mannigfaltigkeit gesucht, sondern es werden die impliziten Mannigfaltigkeitgleichungen und das reduzierte System parallel gelöst, was auf ein schwer zu lösendes DAE-System führt. Hierfür muss zur Bestimmung der schnellen und langsamen Unterräume die Zerlegung der Jacobi-Matrix zu jedem Zeitpunkt der numerischen Berechnung durchgeführt werden, was einen zusätzlichen zeitlichen Aufwand bedeutet [50, 51, 60]. Somit führt die CSP-Methode zwar auf sehr genaue Ergebnisse, ihr Einsatz ist jedoch oftmals auf die Untersuchung der charakteristischen Eigenschaften chemischer Reaktionssysteme beschränkt [18].

Ein weiterer Ansatz im Vergleich zu ILDM oder CSP wird durch eine Gruppe von Methoden gegeben, die Approximationen langsamer invarianter Mannigfaltigkeiten auf Basis thermodynamischer Funktionen ermöglichen. Hierzu gehören die RCCE- (Rate Controlled Chemical Equilibrium) [61] und die MEPT- (Minimal Entropy Production Trajectories) Methode [62]. Die RCCE-Methode definiert die Mannigfaltigkeit durch die Identifikation einzelner "schneller" Spezies, die

ein Minimum der freien Gibbs-Energie [32] aufweisen und sich damit in einem durch die “langsamen“ Spezies beschränkten chemischen Gleichgewicht befinden. Die “langsamen“ Spezies werden mit Hilfe der chemischen Reaktionskinetik berechnet. Es ergibt sich ein System aus differential-algebraischen Gleichungen, in dem die impliziten algebraischen Gleichungen die Mannigfaltigkeit und die ODEs das reduzierte System definieren [8]. Die MEPT-Methode führt zur Identifizierung einer Trajektorie, entlang derer die Entropieproduktion des chemischen Reaktionssystems minimal wird. Auch die MEPT-Methode resultiert in einem DAE-System, da die Gleichungen zur Beschreibung der Entropieproduktionsrate parallel zum ODE-System gelöst werden [8].

Wiederum eine andere Strategie zur automatischen Approximation langsamer invarianter Mannigfaltigkeiten in homogenen Reaktionssystemen verfolgen trajektorienbasierte Reduktionsmethoden, sogenannte Trajectory-Generated Low-Dimensional Manifolds (TGLDM) Methoden [63]. Eine bekannte Variante dieser Klasse ist die Invariant Constrained Equilibrium (ICE) Methode [64, 65]. Die Idee dahinter ist, dass m -dimensionale Mannigfaltigen gebildet werden, indem ausgehend von einer $(m - 1)$ -dimensionalen Menge aus Anfangsbedingungen Trajektorien des ODE-Systems im thermochemischen Zustandsraum verfolgt werden. Zur Implementierung der Mannigfaltigkeit wird diese parametrisiert und gespeichert, sodass wie bei der ILDM-Methode eine explizite Form vorliegt.

Die letzte Methode, die hier beschrieben werden soll, geht auf die Arbeiten von *Fraser* [66] und *Roussel* [67, 68] zurück. Die Methode wurde ursprünglich für ein planares SPS entwickelt, dessen rechte Seite linear in der schnellen Variablen y ist, d.h. $(\dot{x} = f_1(x)y + f_2(x), \epsilon \dot{y} = g_1(x)y + g_2(x))^T$. Im Mittelpunkt der Methode steht in Analogie zur GSP-Theorie die Verwendung der Invarianzbedingung, sodass für das betrachtete lineare SPS folgender Ausdruck für die schnelle Variable y gefunden werden kann

$$y = \frac{\epsilon \frac{\partial y}{\partial x} f_2(x) - g_2(x)}{g_1(x) - \epsilon \frac{\partial y}{\partial x} f_1(x)}. \quad (4.5)$$

In Anlehnung an die GSP-Theorie wird eine Funktion $y = \tilde{h}(x)$ gesucht, die Gleichung 4.5 erfüllt und deren Graph somit die langsame invariante Mannigfaltigkeit des Systems repräsentiert. $\tilde{h}(x)$ ergibt sich in der Methode von *Fraser* und *Roussel* ausgehend von einer Anfangslösung $\tilde{h}(x)^{(0)}$ aus der funktionalen Iteration der modifizierten Invarianzbedingung

$$\tilde{h}(x)^{(l)} = \frac{\epsilon \frac{\partial \tilde{h}(x)^{(l-1)}}{\partial x} f_2(x) - g_2(x)}{g_1(x) - \epsilon \frac{\partial \tilde{h}(x)^{(l-1)}}{\partial x} f_1(x)}; \quad l = 1, 2, \dots \quad (4.6)$$

Mit Hilfe dieses Algorithmus wird die Genauigkeit der Approximation der langsamen invarianten Mannigfaltigkeit sukzessive erhöht, d.h. es werden mit jedem Iterationsschritt die Terme der asymptotischen Expansion $h_\epsilon(x)$ der langsamen invarianten Mannigfaltigkeit generiert [56, 66–68], wobei

$$h_\epsilon(x) = h(x)^0 + \epsilon h(x)^1 + \epsilon^2 h(x)^2 + \dots \quad (4.7)$$

Die Konvergenz des iterativen Verfahrens ist gewährleistet, wenn ϵ sehr kleine Werte annimmt. Im Gegensatz zur ILDM-Methode erfolgt die Approximation der langsamen Mannigfaltigkeit mit dem *Fraser*-Algorithmus nicht durch die explizite Identifikation schneller und langsamer Unterräume. Das Verfahren macht sich die attraktiven Eigenschaften langsamer invarianter Mannigfaltigkeiten zu nutze, die sich aus der in schnell und langsam aufspaltbaren Systemdynamik ergeben.

Eine wichtige Weiterentwicklung der Methode wurde von *Davis* und *Skodje* [69] präsentiert, die die Konvergenz des Algorithmus für größere ϵ -Werte verbesserten. In abgewandelter Form bildet der *Fraser*-Algorithmus die Grundlage der MIG (Method of Invariant Grids) [70, 71], welche die Mannigfaltigkeit als Gitter im thermochemischen Zustandsraum darstellt und diese unter Verwendung eines thermodynamischen Projektionsoperators und iterativer Methoden sukzessive der langsamen invarianten Mannigfaltigkeit annähert [7].

Für die Anwendung des *Fraser*-Algorithmus muss die Mannigfaltigkeit in expliziter Form vorliegen, d.h. es wird eine Parametrisierung für die Mannigfaltigkeit benötigt. Ihre Implementierung in reduzierten Berechnungen erfolgt durch die Abbildung des Vektorfeldes $F(\psi)$ in den Parameterraum [13].

Da die hier beschriebenen Methoden speziell zu diesem Zweck entwickelt wurden, führt ihre Anwendung zur reduzierten Beschreibung der Dynamik homogener Reaktionssysteme zu recht genauen Ergebnissen. Ihre Anwendung in inhomogenen Strömungen ist allerdings ebenso sehr verbreitet, kann jedoch unter Umständen zu ungenauen Ergebnissen führen [20]. Das nächste Kapitel geht näher auf diesen Sachverhalt ein.

4.1.3. Anwendung in chemisch reagierenden Strömungen

Die Implementierung von Mannigfaltigkeiten, die sich aus der alleinigen Analyse des chemischen Quellterms ergeben, zur reduzierten Beschreibung der chemischen Reaktionskinetik in inhomogenen Strömungen ist eine gängige Prozedur in Forschung und Technik [7, 13, 20, 72]. Die größte Herausforderung, die bei dieser Vorgehensweise gemeistert werden muss, ist die korrekte Beschreibung der Kopplung zwischen reduzierter chemischer Reaktionskinetik und dem Strömungsfeld, das durch Diffusion und Konvektion charakterisiert wird (Gleichung 2.2) [20].

Eine starke Kopplung findet immer dann statt, wenn die Zeitskalen chemischer und physikalischer Prozesse die selbe Größenordnung haben (Abbildung 3.5).

In Bereichen starker Kopplung sorgen physikalische Transportprozesse dafür, dass die jeweiligen Zustände von den chemischen Mannigfaltigkeiten weggezogen werden [1]. Die wichtigste Annahme bei der Implementierung chemischer Mannigfaltigkeiten besagt, dass die Abweichungen beim Auftreten solcher physikalischen Störungen auf Grund der entkoppelten schnellsten chemischen Prozesse gering sind. Diese Annahme wird in der Literatur als “close parallel assumption“ bezeichnet [65]. Das reduzierte PDE-System ergibt sich demnach aus der Projektion der chemischen und physikalischen Prozesse entlang der schnellen auf die langsamen chemischen Unterräume [10, 20, 43, 57].

Obwohl diese Vorgehensweise für den Fall moderater physikalischer Prozesse gute Ergebnisse liefert, insbesondere in der Nähe des chemischen Gleichgewichtes (Abbildung 3.4a), kann die Implementierung rein chemischer Mannigfaltigkeiten zur Beschreibung inhomogener Strömungen problematisch werden. Die Gründe hierfür sind die folgenden [7, 20]

- Die konstruierte Mannigfaltigkeit ist nicht invariant. Dies ist z.B. bei der Verwendung von QSSA und PEA der Fall.
- Die Existenz rein chemischer langsamer Mannigfaltigkeiten kann nicht für alle Zustände innerhalb des die Strömung beschreibenden PDE-Systems gewährleistet werden.
- Die Zeitskalen des physikalischen Transports können die selbe Größenordnung wie die schnellen chemischen Zeitskalen einnehmen, wodurch die chemischen Mannigfaltigkeiten das Systemverhalten nicht mehr ausreichend genau beschreibt.
- Die Diffusivitäten der chemischen Spezies unterscheiden sich, wodurch sich lokal die Elementzusammensetzung ändert und die vorliegende chemische Mannigfaltigkeit ihre Gültigkeit verliert.

4.2. Methoden zur Reduktion gekoppelter Reaktion-Diffusions-Systeme

Im vorherigen Kapitel wurde beschrieben, dass die Anwendung chemischer Mannigfaltigkeiten in inhomogenen Reaktionssystemen zu Problemen führen kann, da physikalische Prozesse nicht durch die rein chemischen Mannigfaltigkeiten beschrieben werden. Methoden, welche die Identifikation langsamer invarianter

Mannigfaltigkeiten für PDE-Systeme anstreben, können eine Lösung für diese Probleme darstellen. Die größte Schwierigkeit hierbei ist die Tatsache, dass PDE-Systeme im Gegensatz zu ODE Systemen ein unendliches Spektrum unterschiedlicher Zeitskalen aufweisen können [20].

In [73, 74] führt *Davis* eine geometrischen Interpretation der Dynamik von kleinen, analytisch darstellbaren Reaktions-Diffusion-Systemen in der Nähe des Gleichgewichts durch und leitet daraus ein Verfahren zur Identifikation langsamer invarianter Mannigfaltigkeiten in solchen Systemen ab. Es wird zunächst gezeigt, dass die Mannigfaltigkeiten endlich-dimensionale Unterräume des unendlich-dimensionalen Funktionenraums der jeweiligen PDE-Systeme darstellen. Die Methode zur Identifikation der Mannigfaltigkeit beruht auf einer Analyse der Jacobi-Matrix des gesamten PDE-Systems, die sich aus der örtlichen Diskretisierung des Diffusionsterms und der Linearisierung des chemischen Quellterms ergibt. In Analogie zur ILDM-Methode werden die schnellen und langsamen Unterräume des gekoppelten Reaktions-Diffusions-Systems ermittelt und die Mannigfaltigkeit nach Abschluss der schnellen Prozesse bestimmt.

Die von *Singh et al.* in [57] vorgestellte Methode führt auf die sogenannte ASIM (Approximate Slow Invariant Manifold), die als eine modifizierte Form der ILDM- oder CSP-Methode für reaktive inhomogene Strömungen angesehen werden kann [18]. Der Ansatz basiert auf der Identifikation der schnellen Eigenwerte der Jacobi-Matrix des gesamten PDE-Systems, wobei die physikalischen Zeitskalen im Vorfeld abgeschätzt werden. Es ergibt sich ein DAE-System, das sich aus den impliziten Gleichungen für die Mannigfaltigkeit und dem reduzierten PDE-System zusammensetzt und das langsame Systemverhalten nach Abschluss der schnellen chemischen und gekoppelten Prozesse beschreibt.

In [49] wird die CSP-Methode erweitert und für einfache, analytische PDE-Systeme angewendet. Die lokale Unterteilung in schnelle und langsame Unterräume erfolgt hierbei unter Mitberücksichtigung des Diffusionsterms, wodurch sich eine Abhängigkeit der schnellen und langsamen Basisvektoren von Ort und Zeit ergibt. Auch bei dieser Methode ergibt sich ein DAE-System, das die langsame Mannigfaltigkeit definiert und die reduzierte Systemdynamik beschreibt.

Die ASIM- und die modifizierte CSP-Methode basieren beide auf einer lokalen Analyse der Zeitskalen des PDE-Systems und erlauben daher eine variable Anpassung der Mannigfaltigkeitsdimension in Abhängigkeit des Ortes und der Zeit. Allerdings ist die gekoppelte Lösung des reduzierten PDE-Systems und der impliziten Mannigfaltigkeitgleichungen mit sehr hohem Aufwand verbunden [20], was eine Anwendung auf komplizierte Verbrennungssysteme kaum zulässt [75].

Einen einfacheren Ansatz zur Konstruktion von Mannigfaltigkeiten für PDE-Systeme verfolgt die Flamelets Generated Manifolds (FGM) Methode [76–79].

Dieses empirische Verfahren basiert komplett auf der Speicherung einzelner stationärer Lösungen detaillierter eindimensionaler vorgemischter und nicht-vorgemischter Flammen, aus denen sich die Mannigfaltigkeit später zusammensetzt. Die Mannigfaltigkeit liegt für die reduzierten Berechnungen in expliziter, tabellarischer Form vor und wird typischerweise durch Fortschrittsvariablen oder den Mischungsbruch parametrisiert. Obwohl die Berechnung eindimensionaler detaillierter Flamelets sehr einfach und schnell erfolgt, ist die Anwendung der FGM-Methode auf diejenigen Szenarien beschränkt, welche durch die eindimensionalen Flammen abgebildet werden [18].

Die REDIM- (Reaktions-Diffusions-Mannigfaltigkeit) Methode wurde erstmals 2007 vorgestellt und entstand als Weiterentwicklung der ILDM-Methode für chemisch reagierende Strömungen [22]. Der Vorteil der REDIM-Methode ist, dass im Gegensatz zur ASIM-Methode und der modifizierten CSP-Methode keine Abhängigkeit der Mannigfaltigkeit von den örtlichen Koordinaten besteht, sodass unendlichdimensionale Mannigfaltigkeitsstrukturen vermieden werden [44]. Die Methode verwendet eine im Vorfeld der Mannigfaltigkeitskonstruktion bestimmte Abschätzung der Zustandsgradienten und berücksichtigt auf diese Weise explizit die Kopplung zwischen physikalischen und chemischen Prozessen. Die Bestimmung der REDIM erfolgt unter Anwendung einer modifizierten Form des *Fraser*-Algorithmus 4.6 und basiert auf dem in [70, 71] beschriebenen Konzept invarianter Mannigfaltigkeiten. In Analogie zur FGM-Methode liegt die REDIM in expliziter Form vor und erlaubt somit eine effiziente Implementierung in tabellarischer Form. Eine ausführliche Diskussion des Verfahrens erfolgt in den nächsten Kapiteln.

5. Mathematisches Modell der REDIM-Methode

Nachdem in Kapitel 3 die Charakterisierung der Dynamik chemisch reagierender Strömungen mit Hilfe niedrigdimensionaler Mannigfaltigkeiten beschrieben wurde, gab Kapitel 4 einen Überblick über die wichtigsten Methoden, welche eine Identifikation dieser Mannigfaltigkeiten für die reduzierte Beschreibung der Reaktionskinetik ermöglichen. Die REDIM-Methode ist demnach die einzige Modellreduktionsmethode, welche die Identifikation der Mannigfaltigkeit für gekoppelte Reaktions-Diffusions-Prozesse in expliziter Form ermöglicht, was zu einer besonders effizienten Implementierung in reduzierten Berechnungen führt. In den nachfolgenden Abschnitten werden die mathematisch-physikalischen Grundlagen der REDIM Modellreduktionsmethode beschrieben. Es werden dabei folgende, für die Entwicklung von mannigfaltigkeitsbasierten Modellreduktionsmethoden wichtigen, theoretischen Fragestellungen beantwortet:

- Auf welche Art können die schnellen Prozesse entkoppelt und die REDIM als Approximation der langsamen Systemdynamik in expliziter Form gefunden werden?
- Wie werden molekulare Transportprozesse auf der REDIM berücksichtigt?
- Welche Bedingungen gelten an REDIM-Rändern und wie werden diese im Findungsprozess berücksichtigt?
- Welche Ausdehnung der REDIM wird benötigt, um eine Beschreibung der kompletten langsamen Systemdynamik zu ermöglichen?
- Wie stehen REDIMs verschiedener Dimension in Verbindung zu einander und können daraus nützliche Zusammenhänge für eine effiziente Konstruktion höherdimensionaler REDIMs abgeleitet werden?
- Auf welche Art wird die REDIM angewendet bzw. wie werden die langsamen, entlang der REDIM ablaufenden Prozesse im Zuge des reduzierten Modells abgebildet?

Die ersten fünf Fragen werden in den Abschnitten 5.1-5.3 beantwortet. Die Beantwortung der letzten Frage ist Gegenstand des Abschnitts 5.4.

5.1. Verfahren zur Bestimmung der REDIM

Die Identifikation der REDIM als Approximation der langsamen Systemdynamik gekoppelter Reaktions-Diffusions-Prozesse beruht auf der Formulierung einer Entwicklungsgleichung, die sich aus einer geometrischen Analyse des Vektorfeldes im thermochemischen Zustandsraum ergibt [67, 68]. Ein wichtiges charakteristisches Merkmal des REDIM Verfahrens ist hierbei, dass die molekularen Transportprozesse auf der REDIM abgeschätzt werden, um die Kopplung zwischen chemischer Reaktion und Diffusion auf der REDIM zu berücksichtigen. Am REDIM-Rand müssen dabei besondere Bedingungen eingehalten werden, um eine korrekte Abbildung der auf der REDIM ablaufenden langsamen Systemdynamik zu gewährleisten. Da es sich bei der REDIM-Entwicklungsgleichung um ein partielles Differentialgleichungssystem handelt, wird zudem die Angabe einer geeigneten Anfangsmannigfaltigkeit benötigt, von der aus der Approximationsprozess startet.

5.1.1. Die REDIM-Entwicklungsgleichung

Wie in Abschnitt 4.1 bereits beschrieben wurde, führt die ursprünglich für homogene Systeme entwickelte iterative Methode von *Fraser* und *Roussel* auf die langsame invariante Mannigfaltigkeit in expliziter Form, wenn es sich dabei um dissipative entkoppelbare Systeme handelt [67, 68]. Der Ausgangspunkt ist dabei die geeignete Wahl einer Anfangsmannigfaltigkeit, von der aus der iterative Prozess startet. In [58, 80] verwendet *Nafe* eine modifizierte Form des *Fraser*-Algorithmus, um die Genauigkeit von ILDMs hinsichtlich der Approximation der langsamen invarianten Mannigfaltigkeit homogener Reaktionssysteme zu verbessern. Die Methode basiert dabei auf dem Konzept invarianter Mannigfaltigkeiten, das in [13, 70, 71] beschrieben wird. Im Rahmen der REDIM-Methode wird dieser Ansatz zur Identifikation der langsamen invarianten Mannigfaltigkeit für Reaktions-Diffusions-Systeme verwendet [80]. Das zugrundeliegende PDE-System muss dabei für eine erfolgreiche Anwendung des Algorithmus folgende Voraussetzungen erfüllen [18, 66]

- Das System muss durch von einander entkoppelbare schnelle und langsame Prozesse charakterisiert sein. n_f entspricht dabei der Anzahl an schnellen, m der Anzahl an langsamen Prozessen. Zusammen ergeben sie die Dimension des Zustandsraums $n = n_f + m$.

- Die zu ermittelnde langsame Mannigfaltigkeit darf ausschließlich attraktiven Charakter besitzen. Es wird dann von einer positiv invarianten Mannigfaltigkeit gesprochen.

Wie die Ausführungen in den Kapiteln 3 und 4 zeigen, erfüllen Verbrennungssysteme diese Voraussetzungen auf Grund des negativen Eigenwertspektrums chemischer Prozesse [15] und des dissipativen Verhaltens diffusiver Prozesse [73, 74].

Im Zentrum der REDIM-Entwicklungsgleichung steht eine geometrische Bedingung, die von der langsamen invarianten Mannigfaltigkeit im Hinblick auf die Systemdynamik erfüllt werden muss. Sei \mathcal{M}_d^m die m -dimensionale langsame invariante Mannigfaltigkeit des detaillierten PDE-Systems $\dot{\psi} = \phi$ (Gleichung 2.8). Dann gilt auf Grund der positiven Invarianz für jedes $t > t_0$, dass $\psi(\mathbf{x}, t) \in \mathcal{M}_d^m$, wenn $\psi(\mathbf{x}, t_0) \in \mathcal{M}_d^m$ [13, 19, 22]. In Konsequenz gilt nach Abschluss der $n_f = n - m$ schnellen Prozesse für das Vektorfeld ϕ , dass dieses an jedem Zustand tangential zur REDIM verlaufen muss [13, 19, 22]. Hieraus folgt für ϕ

$$\phi \in \mathcal{T}_\psi \mathcal{M}_d^m, \quad (5.1)$$

wobei $\mathcal{T}_\psi \mathcal{M}_d^m$ dem m -dimensionalen Tangentialraum von \mathcal{M}_d^m an der Stelle $\psi \in \mathcal{M}_d^m$ entspricht [13, 19, 22]. Gleichung 5.1 wird als Invarianzbedingung bezeichnet in der \mathcal{M}_d^m eine noch unbekannt Funktion darstellt [19].

Da eine explizite Form von \mathcal{M}_d^m bzw. seiner Approximation gesucht wird, wird eine geeignete Parametrisierung benötigt, die jedem Punkt θ aus dem m -dimensionalen Parameterbereich einen Punkt $\psi(\theta) \in \mathcal{M}_d^m$ zuordnet, d.h.

$$\mathcal{M}_d^m = \{\psi = \psi(\theta), \theta \in \mathbb{R}^m, \psi \in \mathbb{R}^n\}, m \ll n. \quad (5.2)$$

Der Tangentialraum $\mathcal{T}_\psi \mathcal{M}_d^m$ an einer Stelle $\psi(\theta)$ wird dann durch die Vektoren der partiellen Ableitungen $\left(\frac{\partial \psi}{\partial \theta_1}, \dots, \frac{\partial \psi}{\partial \theta_m}\right)$ aufgespannt [13, 19, 81, 82].

Unter Verwendung der Parametrisierung kann das Vektorfeld ϕ (Gleichung 2.8) entlang von \mathcal{M}_d^m in folgender Form geschrieben werden [22]

$$\begin{aligned} \phi &= \mathbf{F} - \mathbf{v}\psi_{\theta} \text{grad}(\theta) + \frac{1}{\rho} \text{div}(\mathbf{D}\psi_{\theta} \text{grad}(\theta)) \\ &= \mathbf{F} - \mathbf{v}\psi_{\theta} \text{grad}(\theta) + \frac{1}{\rho} (\mathbf{D}\psi_{\theta} \text{grad}(\theta))_{\theta} \text{grad}(\theta) \end{aligned} \quad (5.3)$$

mit

$$\text{grad}(\theta) = \begin{pmatrix} \frac{\partial \theta_1}{\partial x_1} & \frac{\partial \theta_1}{\partial x_2} & \frac{\partial \theta_1}{\partial x_3} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ \frac{\partial \theta_m}{\partial x_1} & \frac{\partial \theta_m}{\partial x_2} & \frac{\partial \theta_m}{\partial x_3} \end{pmatrix} \quad (5.4)$$

als den Gradienten der lokalen Parameter, wobei x_1 , x_2 und x_3 den Ortskoordinaten entsprechen.

Unter Anwendung der Einstein'schen Summenkonvention [83] ergibt sich für jede i -te Komponente des Diffusionsvektors [22, 84]

$$((\mathbf{D}\psi_{\theta}\text{grad}(\boldsymbol{\theta}))_{\theta}\text{grad}(\boldsymbol{\theta}))_i = \frac{\partial G_{im}}{\partial \theta_j} \frac{\partial \theta_j}{\partial x_m}, \quad (5.5)$$

$$G_{im} = D_{ik} \frac{\partial \psi_k}{\partial \theta_l} \frac{\partial \theta_l}{\partial x_m}. \quad (5.6)$$

Gleichung 5.1 stellt eine implizite Formulierung für \mathcal{M}_d^m dar, aus der eine explizite Form der Zustände $\psi \in \mathcal{M}_d^m$ nicht direkt berechnet werden kann. Darüber hinaus beinhaltet Gleichung 5.1 die an dieser Stelle noch unbekanntenen Werte für die lokalen Gradienten $\text{grad}(\boldsymbol{\theta})$. Da \mathcal{M}_d^m die Gesamtheit aller transienten Prozesse des detaillierten PDE-Systems beschreibt, kann $\text{grad}(\boldsymbol{\theta})$ theoretisch beliebige Werte annehmen, sodass es sich bei Gleichung 5.1 um ein nicht geschlossenes Problem handelt.

Unter Verwendung einer geeigneten Abschätzung χ für die lokalen Gradienten $\text{grad}(\boldsymbol{\theta})$ kann jedoch gemäß [80] eine Entwicklungsgleichung formuliert werden, welche die sukzessive Approximation von \mathcal{M}_d^m ermöglicht. Diese Approximation wird als Reaktions-Diffusions-Mannigfaltigkeit (REDIM) bezeichnet und im Folgenden mit \mathcal{M}_{RD}^m beschrieben. Die Abschätzungen χ geben dabei die molekularen Transportprozesse auf der REDIM wieder [22].

Die REDIM-Entwicklungsgleichung, die die Bewegung aller Zustände $\psi(\boldsymbol{\theta}) \in \mathcal{M}_{RD}^m$ in Richtung \mathcal{M}_d^m beschreibt, lautet [22, 84, 85]

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \mathbf{P} \left(\mathbf{F} - v\psi_{\theta}\chi + \frac{1}{\rho} (\mathbf{D}\psi_{\theta}\chi)_{\theta} \chi \right) \quad (5.7)$$

wobei \mathbf{P} ein Projektionsoperator ist, für den gemäß Abschnitt A.1 gilt

$$\begin{aligned} \text{Kern}(\mathbf{P}) &= \mathcal{T}_{\psi}\mathcal{M}_{RD}^m, \\ \text{Bild}(\mathbf{P}) &= \mathcal{N}_{\psi}\mathcal{M}_{RD}^m. \end{aligned} \quad (5.8)$$

Hierbei ist $\mathcal{T}_{\psi}\mathcal{M}_{RD}^m$ der Tangentialraum der REDIM an der Stelle ψ und $\mathcal{N}_{\psi}\mathcal{M}_{RD}^m$ ein zu $\mathcal{T}_{\psi}\mathcal{M}_{RD}^m$ komplementärer Unterraum. Es gilt entsprechend Abschnitt A.1 und [86]

$$\mathcal{T}_{\psi}\mathcal{M}_d^m \oplus \mathcal{N}_{\psi}\mathcal{M}_d^m = \mathcal{Z} \quad (5.9)$$

$$\dim(\mathcal{T}_{\psi}\mathcal{M}_d^m) + \dim(\mathcal{N}_{\psi}\mathcal{M}_d^m) = m + n_f = n, \quad (5.10)$$

wobei \oplus hier die Addition zweier Vektorräume beschreibt.

Aufgrund von Gleichung 5.8 gilt $\mathbf{P}(\mathbf{v}\psi_{\theta}\boldsymbol{\chi}) = \mathbf{0}$. Dies bedeutet, dass Konvektionsprozesse keinen Einfluss auf Lage und Form der Mannigfaltigkeit nehmen, denn sie sorgen lediglich für eine tangential zur Mannigfaltigkeit ablaufende Bewegung. Damit lässt sich die REDIM-Entwicklungsgleichung 5.7 wie folgt vereinfachen

$$\begin{aligned} \frac{\partial\psi}{\partial t} &= \mathbf{P} \left(\mathbf{F} + \frac{1}{\rho} (\mathbf{D}\psi_{\theta}\boldsymbol{\chi})_{\theta} \boldsymbol{\chi} \right) \\ &= \mathbf{P} \tilde{\boldsymbol{\phi}}. \end{aligned} \quad (5.11)$$

In Analogie zu den Gleichungen 5.5 und 5.6 ergibt sich für jede i -te Komponente des Diffusionsterms in Gleichung 5.11 [22, 84, 85]

$$((\mathbf{D}\psi_{\theta}\boldsymbol{\chi})_{\theta} \boldsymbol{\chi})_i = \frac{\partial\tilde{G}_{im}}{\partial\theta_j} \chi_{jm}, \quad (5.12)$$

$$\tilde{G}_{im} = D_{ik} \frac{\partial\psi_k}{\partial\theta_l} \chi_{lm}. \quad (5.13)$$

Gleichung 5.11 stellt ein partielles Differentialgleichungssystem dar, mit dem die sukzessive Approximation der langsamen invarianten Mannigfaltigkeit \mathcal{M}_d^m des Reaktions-Diffusions-Systems durch die REDIM \mathcal{M}_{RD}^m in Abhängigkeit von $\boldsymbol{\chi}$ beschrieben wird. Den Ausgangspunkt des Entwicklungsprozesses bildet dabei eine geeignete Anfangsmannigfaltigkeit \mathcal{M}_a , wie Abbildung 5.1 darstellt. Durch die Projektion des Vektorfeldes $\tilde{\boldsymbol{\phi}}$ entlang des Tangentialraums $\mathcal{T}_{\psi}\mathcal{M}_{RD}^m$ auf $\mathcal{N}_{\psi}\mathcal{M}_{RD}^m$ wird der vektorielle Anteil von $\tilde{\boldsymbol{\phi}}$ in Richtung $\mathcal{T}_{\psi}\mathcal{M}_{RD}^m$ entfernt. Es bleibt der Anteil von $\tilde{\boldsymbol{\phi}}$ übrig, der in Richtung $\mathcal{N}_{\psi}\mathcal{M}_{RD}^m$ zeigt und durch den die Bewegungsrichtung von \mathcal{M}_{RD}^m im Zustandsraum beschrieben wird. Die Idee dahinter ist, den Anteil der langsamen Prozesse in $\tilde{\boldsymbol{\phi}}$ auszublenden, sodass die Bewegung nur noch durch die entlang von $\mathcal{N}_{\psi}\mathcal{M}_{RD}^m$ stattfindenden schnellen Prozesse beherrscht wird. Für $t \rightarrow \infty$ können die schnellen Prozesse als abgeschlossen angesehen werden, d.h.

$$\mathbf{P} \tilde{\boldsymbol{\phi}} = \mathbf{0}. \quad (5.14)$$

Dies bedeutet, dass die Integration der REDIM-Entwicklungsgleichung für $t \rightarrow \infty$ automatisch zur Erfüllung der Invarianzbedingung durch die REDIM führt. $\tilde{\boldsymbol{\phi}}$ ist somit an jeder Stelle tangential zur REDIM und damit Element des Tangentialraums $\mathcal{T}_{\psi}\mathcal{M}_{RD}^m$. Für den Fall, dass $\boldsymbol{\chi}$ exakt den sich durch das detaillierte Systemverhalten ergebenden lokalen Gradienten $\text{grad}(\boldsymbol{\theta})$ entspricht, geht \mathcal{M}_{RD}^m in \mathcal{M}_d^m über [19, 22].

Bei der Integration der REDIM-Entwicklungsgleichung erfüllt der Projektionsoperator zwei elementare Aufgaben: Zum einen sorgt er für die letztendliche

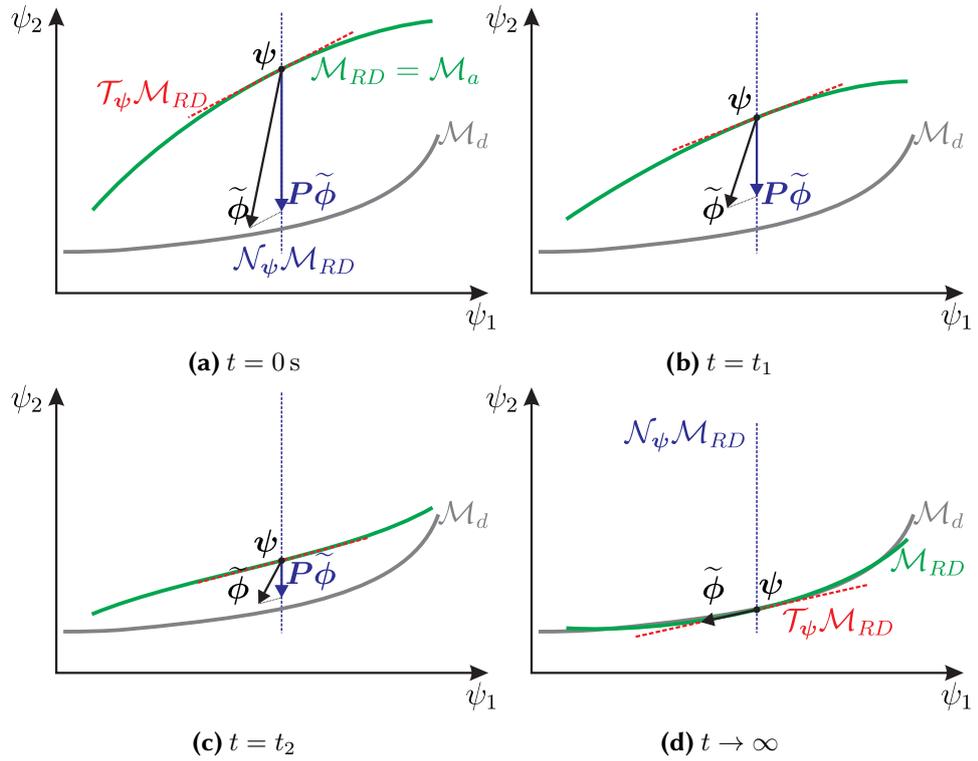


Abbildung 5.1.: Entwicklung der REDIM im Zustandsraum zu verschiedenen Zeitpunkten. Der Entwicklungsprozess startet ausgehend von einer geeigneten Anfangsmannigfaltigkeit \mathcal{M}_a^m bei $t = 0$ s und ist beendet, wenn das Vektorfeld $\tilde{\phi}$ tangential zur REDIM ist und somit die Invarianzbedingung erfüllt ($t \rightarrow \infty$). Die Entwicklung verläuft entlang von $\mathcal{N}_\psi \mathcal{M}_{RD}^m$, was durch den Projektionsoperator P vorgegeben wird.

Erfüllung der Invarianzbedingung und zum anderen wird durch ihn die Relaxationsrichtung der REDIM im Zustandsraum vorgegeben. Es stellt sich die Frage, was eine geeignete Wahl für $\mathcal{N}_\psi \mathcal{M}_{RD}^m$ im Hinblick auf eine effiziente Umsetzung und das Konvergenzverhalten von Gleichung 5.11 darstellt. Eine sehr effiziente Möglichkeit besteht hierbei darin, den zu $\mathcal{T}_\psi \mathcal{M}_{RD}^m$ orthogonalen Unterraum von \mathcal{Z} als Bild des Projektionsoperators P zu definieren [22], d.h. $\mathcal{T}_\psi \mathcal{M}_{RD}^m \perp \mathcal{N}_\psi \mathcal{M}_{RD}^m$. Dies stellt eine natürliche und sinnvolle Wahl dar, da $\mathcal{N}_\psi \mathcal{M}_{RD}^m$ und somit P direkt aus ψ_θ hervorgehen [86] (Abschnitt A.1)

$$P_\perp = (I - \psi_\theta \psi_\theta^+). \quad (5.15)$$

ψ_θ^+ ist dabei die generalisierte Moore-Penrose Pseudoinverse [26]

$$\psi_\theta^+ = (\psi_\theta^T S \psi_\theta)^{-1} \psi_\theta^T S, \quad (5.16)$$

wobei \mathbf{S} eine reguläre Matrix darstellt, welche die Orthogonalität im Zustandsraum definiert [26]. Es gilt der Zusammenhang [86]

$$\psi_\theta^\dagger \psi_\theta = \mathbf{I}. \quad (5.17)$$

In Verbrennungssystemen unterscheiden sich die Werte von Enthalpie und Druck um mehrere Größenordnungen im Vergleich zu den spezifischen Molzahlen. Dies kann bei der Integration der REDIM-Entwicklungsgleichung zu Problemen führen [42]. Mit Hilfe der Matrix \mathbf{S} kann jedoch eine Skalierung vorgenommen werden, durch welche die Größenordnung der Veränderung von Enthalpie und Druck derjenigen der spezifischen Molzahlen angepasst wird [26]. Für die in dieser Arbeit behandelten Systeme wird \mathbf{S} als Diagonalmatrix mit

$$\mathbf{S} = \text{diag}(10^{-12}, 10^{-12}, 1, \dots, 1) \quad (5.18)$$

gewählt.

Abbildung 5.2 veranschaulicht den Einfluss des durch Gleichung 5.15 definierten Projektionsoperators \mathbf{P}_\perp auf die Bewegung der REDIM im Zustandsraum. Hierbei ist es wichtig zu erwähnen, dass die letztendliche Lage der REDIM unabhängig von der Wahl des Projektionsoperators ist, so lange dieser die in Gleichung 5.10 angegebenen Bedingungen erfüllt. Auf Grund seiner Vorteile hinsichtlich der Implementierung wird in dieser Arbeit hauptsächlich der in Gleichung 5.15 definierte orthogonale Projektionsoperator zur Integration der REDIM-Entwicklungsgleichung verwendet. Im weiteren Verlauf soll daher mit \mathbf{P} immer der in Gleichung 5.15 definierte Projektionsoperator beschrieben werden, so lange eine Unterscheidung nicht notwendig ist.

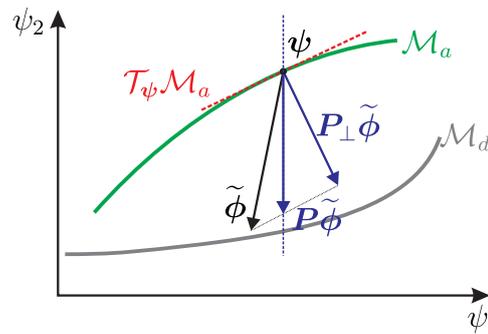


Abbildung 5.2.: Anwendung der orthogonalen Projektion innerhalb der REDIM-Entwicklungsgleichung. $\mathcal{N}_\psi\mathcal{M}_{RD}^m$ ist orthogonal zu $\mathcal{T}_\psi\mathcal{M}_{RD}^m$.

Ein sehr wichtiges Merkmal der REDIM-Entwicklungsgleichung ist ihre Unabhängigkeit von der Wahl der Parametrisierung θ [27]. Wie die Ausführungen

in Abschnitt A.2 zeigen, wird dies dadurch begründet, dass sowohl der Projektionsoperator als auch der Diffusionsvektor $\frac{1}{\rho} (\mathbf{D}\psi_{\theta}\chi)_{\theta} \chi$ unabhängig von θ sind. Hierdurch ist es möglich, sowohl lokal gültige als auch globale Parametrisierungen zu definieren, ohne die Eigenschaften der REDIM bzw. die stationäre Lösung der REDIM-Entwicklungsgleichung zu beeinflussen.

Da die REDIM-Entwicklungsgleichung ein PDE-System darstellt, müssen für dessen Integration geeignete Anfangs- und Randbedingungen definiert werden. Darüber hinaus bleibt zu klären, welche Bedeutung die lokalen Gradienten χ bei der Integration der REDIM-Entwicklungsgleichung haben. In den nächsten Abschnitten werden diese Punkte ausführlich beschrieben.

5.1.2. Abschätzung der lokalen Gradienten

Die stationäre Lösung der REDIM-Entwicklungsgleichung ist dadurch charakterisiert, dass die Projektionen des Reaktionsterms und Diffusionsterms in jeweils entgegengesetzte Richtungen im Zustandsraum zeigen und sich daher entlang der gesamten Mannigfaltigkeit aufheben. Da χ ein Teil des Diffusionsvektors ist, wird dadurch auch dessen Größe und damit die Zeitskalen physikalischer Prozesse abgeschätzt. In Konsequenz beeinflusst die Abschätzung χ die Kopplung zwischen chemischer Reaktion und Diffusion und damit die endgültige Lage der REDIM im Zustandsraum bei der Erfüllung der Stationarität.

Die Sensitivität der REDIM in Bezug auf die Abschätzung χ hängt maßgeblich von der REDIM-Dimension ab [22]. Eine Erklärung hierfür liefern die Beschreibungen aus Abschnitt 3.3 in Verbindung mit Abbildung 3.4. Die Anzahl entkoppelter schneller chemischer Moden steht demnach in Zusammenhang mit der Entfernung des jeweiligen Mannigfaltigkeitsbereichs vom chemischen Gleichgewicht im Zustandsraum. Im einfachsten Fall einer eindimensionalen REDIM reicht in unmittelbarer Nähe zum chemischen Gleichgewicht eine relativ grobe Abschätzung für χ aus, da hier bis auf den langsamsten alle chemischen Prozesse als entkoppelt bzw. relaxiert angesehen werden können. Grob bedeutet in diesem Fall, dass die durch χ bestimmte Größenordnung der Zeitskala physikalischer Prozesse nicht größer sein darf als diejenige des schnellsten koppelnden chemischen Prozesses. Mit zunehmendem Abstand vom Gleichgewicht steigt allerdings die Anzahl koppelnder chemischer Prozesse, sodass sich die Freiheitsgrade für die Lage der eindimensionalen REDIM stetig erhöhen. Dies spiegelt sich in einer größer werdenden Sensitivität der 1D-REDIM in Bezug auf die Abschätzung χ in diesen Bereichen wieder. Durch die Verwendung einer zwei- oder dreidimensionalen REDIM verringert sich die Anzahl an Freiheitsgraden in den jeweiligen Bereichen, sodass damit die Sensitivität der REDIMs in Bezug auf die Abschätzung χ mit zunehmender Dimension abnimmt.

In anderen Worten ausgedrückt bedeutet dies, dass mit zunehmender REDIM-Dimension die Anforderung an die Genauigkeit der Abschätzung abnimmt. Der Grund hierfür ist, dass mit der REDIM-Dimension auch die Zeitskala des langsamsten entkoppelten schnellen chemischen Prozesses ansteigt und daher die Größenordnung der Abschätzung χ stärker variieren kann, ohne Form und Lage der REDIM stark zu verändern. Dies ist eine sehr wichtige Eigenschaft der REDIM, da dadurch die Anwendung vereinfachter Verfahren zur praktischen Bestimmung von χ ermöglicht wird. In Abschnitt 7.1 werden die hier beschriebenen Zusammenhänge validiert, indem der Einfluss unterschiedlicher Schätzungen χ für REDIMs unterschiedlicher Dimension im Falle einer vorgemischten Synthesegas-Luft-Flamme untersucht wird. Es zeigt sich, dass bereits ab drei Dimensionen kaum noch ein Einfluss von χ auf die REDIM zu verzeichnen ist.

Zur Ableitung geeigneter Verfahren für die Bestimmung der Abschätzung χ ist es nützlich, die geometrische Bedeutung der abzuschätzenden lokalen Gradienten $\text{grad}(\boldsymbol{\theta})$ des detaillierten PDE-Systems zu betrachten. Diese lässt sich anschaulich erläutern, wenn die Bewegung eines detaillierten eindimensionalen Flammenprofils $\psi(x, t)$ entlang der zweidimensionalen REDIM \mathcal{M}_{RD}^2 verfolgt wird. Auf Grund der Invarianz gilt, dass die Zustandsgradienten tangential zur REDIM sind [27], sodass

$$\text{grad}(\psi) \in \mathcal{T}_\psi \mathcal{M}_{RD}. \quad (5.19)$$

Somit kann jeder Vektor $\text{grad}(\psi)$ als Linearkombination der Vektoren ψ_θ geschrieben werden, die den Tangentialraum lokal aufspannen [81]

$$\text{grad}(\psi) = \psi_\theta \text{grad}(\boldsymbol{\theta}). \quad (5.20)$$

Daraus folgt für $\text{grad}(\boldsymbol{\theta})$

$$\text{grad}(\boldsymbol{\theta}) = \psi_\theta^+ \text{grad}(\psi). \quad (5.21)$$

Durch die Anwendung von ψ_θ^+ werden dabei zwei Operationen bewerkstelligt. Zunächst bewirkt ψ_θ^+ eine orthogonale Projektion von $\text{grad}(\psi)$ auf den durch ψ_θ aufgespannten Tangentialraum. Anschließend wird der projizierte Vektor in eine Darstellung in lokalen Koordinaten $\boldsymbol{\theta}$ umgewandelt [87]. Die beschriebene Wirkung von ψ_θ^+ wird in Abbildung 5.3 dargestellt.

Entsprechend Gleichung 5.4 stellt $\text{grad}(\boldsymbol{\theta})$ im Falle eindimensionaler Gradienten $\text{grad}(\psi)$ einen m -dimensionalen Vektor dar. Für den Fall zwei- oder dreidimensionaler Flammen, ergibt sich die entsprechende Anzahl an Gradientenvektoren, sodass $\text{grad}(\boldsymbol{\theta})$ zu einer $(m \times 2)$ - bzw. $(m \times 3)$ -dimensionalen Matrix wird.

Den obigen Ausführungen folgend, werden für die Bestimmung der Abschätzung χ Abschätzungen für die Gradienten der Zustandsgrößen $\text{grad}(\psi)$ entlang

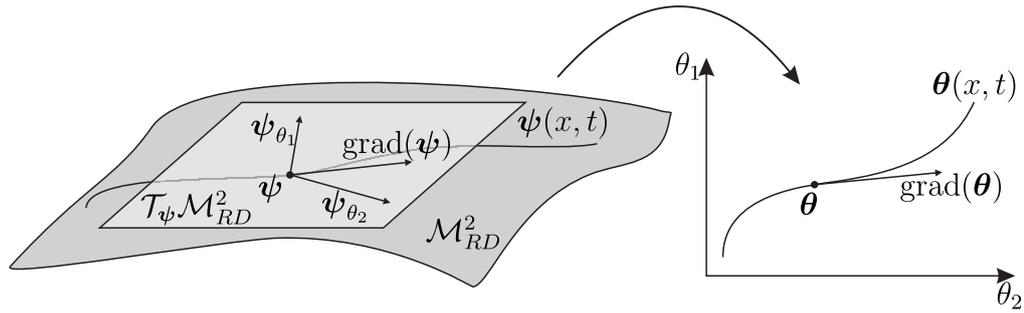


Abbildung 5.3.: Links: Eindimensionales Profil des detaillierten Systems $\psi(x, t)$ bewegt sich entlang einer zweidimensionalen REDIM \mathcal{M}_{RD}^2 , deren Tangentialraum $\mathcal{T}_\psi \mathcal{M}_{RD}^2$ lokal durch die Vektoren ψ_θ aufgespannt wird. Der Gradientenvektor $\text{grad}(\psi)$ ist tangential zu $\psi(x, t)$ und zu ψ_θ . Rechts: Abbildung von $\psi(x, t)$ in die lokalen Koordinaten ergibt das Koordinatenprofil $\theta(x, t)$ und am zu ψ korrespondierenden Koordinatenpunkt den m -dimensionalen Vektor $\text{grad}(\theta)$ als Gradienten der lokalen Koordinaten.

der REDIM \mathcal{M}_{RD} benötigt. Diese Abschätzungen werden mit ξ bezeichnet und stehen repräsentativ für die im detaillierten PDE-System 2.8 vorkommenden Zustandsgradienten $\text{grad}(\psi)$. Für χ ergibt sich dann entsprechend Gleichung 5.21 [22]

$$\chi = \psi_\theta^+ \xi. \quad (5.22)$$

Es bleibt zu klären, wie ξ während der Integration der REDIM-Entwicklungsgleichung am geeignetsten abgeschätzt werden kann. Das hierbei angewendete Prinzip wird in Abbildung 5.4 dargestellt. Vor der Integration der REDIM-Entwicklungsgleichung wird eine Mannigfaltigkeit \mathcal{M}_{gr} definiert, an deren Zuständen ψ^{gr} die Abschätzungen $\xi(\psi^{gr})$ vorliegen. Während der Integration werden den REDIM-Zuständen ψ^{RD} korrespondierende Zustände ψ^{gr} zugeordnet, von denen die jeweiligen Schätzungen der Zustandsgradienten entnommen werden. Es ergeben sich dann zu jedem Zeitpunkt der Integration die zur Bestimmung der Abschätzungen χ notwendigen Abschätzungen ξ . Wie Abbildung 5.4 zeigt, sind die von \mathcal{M}_{gr} erhaltenen Abschätzungen ξ zunächst nicht tangential zur REDIM. Durch die Anwendung der Moore-Penrose Pseudoinversen ψ_θ^+ werden diese jedoch auf ψ_θ projiziert, sodass die Bedingung 5.19 erfüllt wird. Auf die Verfahren zur Identifikation korrespondierender Zustände ψ^{gr} wird in Abschnitt 6.1.4 eingegangen.

In der Anwendung können Mannigfaltigkeiten \mathcal{M}_{gr} auf verschiedene Arten konstruiert werden. Eine einfache Möglichkeit besteht darin, stationäre eindimensionale Flammenprofile bzw. Flamelets [12] zu verwenden und diese zu einer zweidimensionalen Mannigfaltigkeit \mathcal{M}_{gr} zusammenzuführen [85]. Die Abschät-

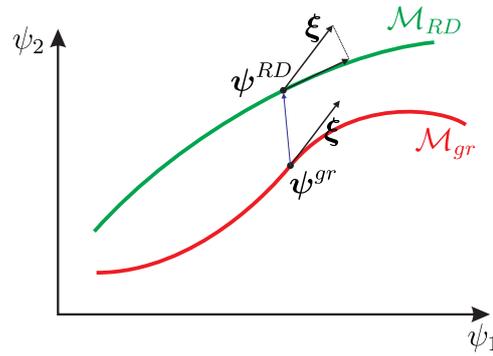


Abbildung 5.4.: Verfahren zur Abschätzung der Zustandsgradienten entlang von \mathcal{M}_{RD} ausgehend von einer Mannigfaltigkeit \mathcal{M}_{gr} , an deren Zuständen ψ^{gr} die Abschätzungen $\xi(\psi^{gr})$ vorliegen. ξ ist zunächst nicht parallel zu \mathcal{M}_{RD} , wird jedoch mit Hilfe von ψ_θ^+ auf \mathcal{M}_{RD} projiziert und in die lokalen Koordinaten umgewandelt (Gleichung 5.22).

zungen ξ entsprechen dann Gradienten der eindimensionalen Flamelets an den entsprechenden Zuständen der zweidimensionalen Mannigfaltigkeit \mathcal{M}_{gr} [22, 42].

Des Weiteren können Versuchsdaten realer Flammen oder dreidimensionale turbulente DNS-Rechnungen herangezogen werden (Abbildung 3.4), welche dreidimensionale Mannigfaltigkeiten \mathcal{M}_{gr} im Zustandsraum darstellen und somit als Basis für die Abschätzung der Gradienten ξ auf der REDIM dienen können [39]. Im Gegensatz zur Verwendung von Flamelets ergeben sich hierbei an jedem Zustandspunkt ψ^{gr} drei Gradientenvektoren $\text{grad}_{x_1}(\psi^{DNS})$, $\text{grad}_{x_2}(\psi^{DNS})$ und $\text{grad}_{x_3}(\psi^{DNS})$. Anhand einer Singulärwertzerlegung [86] kann allerdings gezeigt werden [39], dass die Ortsgradienten durch einen hierarchischen Aufbau charakterisiert sind, in dem eine dominierende Hauptrichtung sowie zwei Nebenrichtungen identifiziert werden können. Zur Abschätzung geeigneter Gradienten aus DNS-Rechnungen reicht es somit oftmals aus, nur die ermittelte Hauptrichtung zu verwenden [39].

Neben der in Gleichung 5.22 verwendeten orthogonalen Projektion zur Bestimmung von χ kann eine Abschätzung auch auf Basis einzelner Zustandsgrößen bzw. Spezies erfolgen. Die Idee hierbei ist es, dass die Koordinaten einzelner Spezies in ξ durch die Projektion nicht verändert werden sollen. Diese Vorgehensweise ist dann sinnvoll, wenn die Abschätzung χ hauptsächlich durch einzelne Spezies bzw. Zustandsgrößen dominiert wird. Hierbei handelt es sich zumeist um Hauptspezies wie CO_2 und H_2O , die besonders für die Beschreibung des Reaktionsfortschritts geeignet sind.

Einer alternative Darstellung von Gleichung 5.22 führt auf [28, 42]

$$\chi = (\mathbf{C}^T \boldsymbol{\psi}_\theta)^{-1} \mathbf{C}^T \boldsymbol{\xi}, \quad (5.23)$$

mit der $(n \times m)$ -dimensionalen Matrix \mathbf{C} . Die Spaltenvektoren in \mathbf{C} können hierbei derart definiert werden, dass nur der Einfluss bestimmter Zustandsgrößen bzw. Spezies bei der Bestimmung von χ eingehen. Für die m Spaltenvektoren $(\mathbf{c}_1, \dots, \mathbf{c}_m)$ ergibt sich dann

$$\mathbf{c}_i = \mathbf{e}_{a_i}, \quad i = 1, \dots, m, \quad (5.24)$$

wobei \mathbf{e}_{a_i} den zu den Zustandsgrößen ψ_{a_i} gehörenden Einheitsvektoren entsprechen. a_i bezeichnet dabei die Stelle der jeweiligen Zustandsgröße ψ_{a_i} im Zustandsvektor $\boldsymbol{\psi}$. Sollen im Falle einer $(m = 2)$ -dimensionalen REDIM beispielsweise nur die Anteile von $\psi_{a_1=3}$ und $\psi_{a_2=4}$ aus der Abschätzung $\boldsymbol{\xi}$ bei der Berechnung von χ eingehen, ergibt sich für \mathbf{C}

$$\mathbf{C}^T = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & \dots & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.25)$$

Durch die Verwendung von Gleichung 5.23 wird ein geringeres Maß an Information über die im System vorkommenden Gradienten vorausgesetzt. So reichen z.B. vereinfachte Abschätzungen von $\boldsymbol{\xi}_{\text{CO}_2}$ und $\boldsymbol{\xi}_{\text{H}_2\text{O}}$ für die Bestimmung von χ aus, die sich aus dem Verhältnis der maximalen spezifischen Molzahlen beider Spezies und der Flammendicke ergeben [28] (Abschnitt 6.1.4).

Die in diesem Abschnitt gegebenen Erläuterungen zur Schätzung χ für die lokalen Gradienten $\text{grad}(\boldsymbol{\theta})$ basieren auf der Betrachtung dynamischer Vorgänge im Innern der Mannigfaltigkeit. Für die Mannigfaltigkeitsränder und physikalische Randpunkte gelten besondere Bedingungen, woraus sich Konsequenzen für die Gradientenschätzung und das Vektorfeld ergeben. Der nächste Abschnitt geht auf diesen Sachverhalt ein.

5.1.3. Transformation physikalischer Randbedingungen und Behandlung der REDIM-Ränder

Die Integration der REDIM-Entwicklungsgleichung 5.11 geht mit der gesonderten Behandlung einzelner Punkte und Bereiche auf der Mannigfaltigkeit einher, die bestimmte Eigenschaften besitzen. Dies sind zum einen Punkte, die Randpunkten im physikalischen Raum entsprechen und daher mit entsprechenden Randbedingungen versehen sind, die auf die Mannigfaltigkeit transformiert werden müssen.

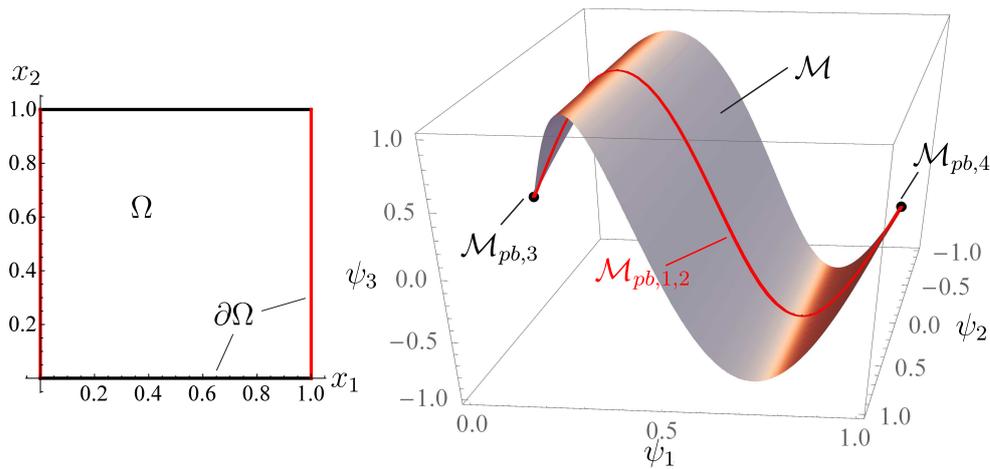


Abbildung 5.5.: Physikalische Randbedingungen eines im Ort zweidimensionalen Systems bestehend aus drei Variablen $\psi = (\sin(2\pi x_1) \cdot \sin(\pi x_2), x_2, \sin(2\pi x_2))^T$, mit $0 \leq x_1 \leq 1$ und $0 \leq x_2 \leq 1$. Links: Ränder $\partial\Omega$ im physikalischen Raum Ω . Rechts: Das System führt zu einer zweidimensionalen Mannigfaltigkeit im dreidimensionalen Zustandsraum, auf der die schwarzen physikalischen Ränder $\mathcal{M}_{pb,3}$ und $\mathcal{M}_{pb,4}$ zu einem Punkt zusammen schrumpfen und die roten physikalischen Ränder $\mathcal{M}_{pb,1}$ und $\mathcal{M}_{pb,2}$ sich im Innern der Mannigfaltigkeit befinden.

Des Weiteren ergeben sich für die Mannigfaltigkeitsränder spezielle Bedingungen, die aus der Dynamik des Vektorfeldes resultieren. Die genaue Rolle beider Punktarten wird im Folgenden erläutert.

Zur Lösung des detaillierten PDE-Systems 2.8 werden Randbedingungen benötigt, die an den Rändern der physikalischen Domäne formuliert werden. Unter der Annahme, dass die detaillierte dynamische Systembewegung komplett durch die REDIM abgebildet wird, lassen sich die physikalischen Ränder auf die REDIM im Zustandsraum transformieren [28]. Dies ist beispielhaft in Abbildung 5.5 anhand eines im Ort zweidimensionalen Systems dargestellt, das aus drei Zustandsgrößen besteht. Das System führt zu einer zweidimensionalen Mannigfaltigkeit im dreidimensionalen Zustandsraum, auf der die physikalischen Randpunkte abgebildet werden können. Bei der Betrachtung von Abbildung 5.5 fallen folgende wichtige Zusammenhänge auf, die ohne Einschränkung der Allgemeinheit auch auf höherdimensionale Systeme übertragen werden können.

- Sei d_p die Dimension des physikalischen Raums Ω . Die Ränder $\partial\Omega$ der physikalischen Domäne haben dann die Dimension $d_p - 1$.
- Die Transformation der physikalischen Ränder auf die Mannigfaltigkeit \mathcal{M} führt auf die Mannigfaltigkeiten $\mathcal{M}_{pb,i} \in \mathcal{M}$. $\mathcal{M}_{pb,i}$ sind somit Un-

termannigfaltigkeiten von \mathcal{M} , wobei $i = 1, \dots, n_{pb}$ und n_{pb} der Anzahl unterschiedlicher physikalischer Ränder entspricht.

- $\dim(\mathcal{M}_{pb,i}) \leq d_p - 1$, sodass z.B. ein eindimensionaler physikalischer Rand zu einem Punkt auf der Mannigfaltigkeit \mathcal{M} schrumpfen kann.
- $\mathcal{M}_{pb,i}$ müssen nicht mit dem Rand der Mannigfaltigkeit \mathcal{M} übereinstimmen, sondern können im Innern der Mannigfaltigkeit liegen.

An jedem Zustandspunkt auf den Mannigfaltigkeiten $\mathcal{M}_{pb,i}$ gilt es, die ursprünglich im physikalischen Raum definierten Randbedingungen umzuformulieren, um sie bei der Integration der REDIM-Entwicklungsgleichung zu berücksichtigen. Sei $\boldsymbol{\psi}^{pb} \in \mathcal{M}_{pb,i}$ ein Zustand auf einer Mannigfaltigkeit eines physikalischen Randes. Dann gilt für die transformierte Dirichlet Randbedingung [28]

$$\boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{\theta} = \boldsymbol{\theta}^{pb}) = \boldsymbol{\psi}^{pb}, \quad (5.26)$$

wobei $\boldsymbol{\theta}^{pb}$ den Parameterkoordinaten an der Stelle $\boldsymbol{\psi}^{pb}$ entspricht. In Analogie zur Formulierung im physikalischen Raum führt die transformierte Dirichlet Randbedingung dazu, dass die Zustände $\boldsymbol{\psi}^{pb}$ während der Integration der REDIM-Entwicklungsgleichung beibehalten werden.

Die allgemeine Form einer von Neumann Randbedingung lautet für alle Zustände $\boldsymbol{\psi}$ entlang des physikalischen Randes [1]

$$\frac{\partial \boldsymbol{\psi}}{\partial \boldsymbol{n}}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}), \quad \boldsymbol{x} \in \partial\Omega \quad (5.27)$$

wobei \boldsymbol{n} der nach außen zeigende Normalenvektor zum Rand im physikalischen Raum und $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})$ eine vektorwertige Funktion ist. Ein in der numerischen Simulation von Verbrennungsvorgängen sehr wichtiger Spezialfall führt auf $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}) = \mathbf{0}$, sodass alle örtlichen Änderungen in normaler Richtung zur physikalischen Domäne verschwinden. Es folgt daraus, dass die d_p Gradientenvektoren $\text{grad}_i(\boldsymbol{\psi})$ parallel zum physikalischen Rand sein müssen. Auf Grund der um eins geringeren Dimension der physikalischen Ränder führt dies dazu, dass $\text{grad}_i(\boldsymbol{\psi})$ linear abhängig werden. Für die in dieser Arbeit untersuchten eindimensionalen Flammen stellen die physikalischen Ränder Punkte dar, an denen sich die von Neumann Bedingung zu $\text{grad}(\boldsymbol{\psi})|_{\boldsymbol{\theta}^{pb}} = \mathbf{0}$ vereinfacht. Die Transformation dieser Bedingung auf die REDIM führt auf $\boldsymbol{\xi}(\boldsymbol{\theta}^{pb}) = \mathbf{0}$, wodurch die an der Stelle eines von Neumann Randpunktes benötigte Gradientenschätzung festgelegt wird. Dies führt schließlich auf folgende veränderte Form der REDIM-Entwicklungsgleichung bei der Anwendung eindimensionaler Gradientenschätzungen [28]

$$\frac{\partial \boldsymbol{\psi}}{\partial t} = \boldsymbol{P}\boldsymbol{F}. \quad (5.28)$$

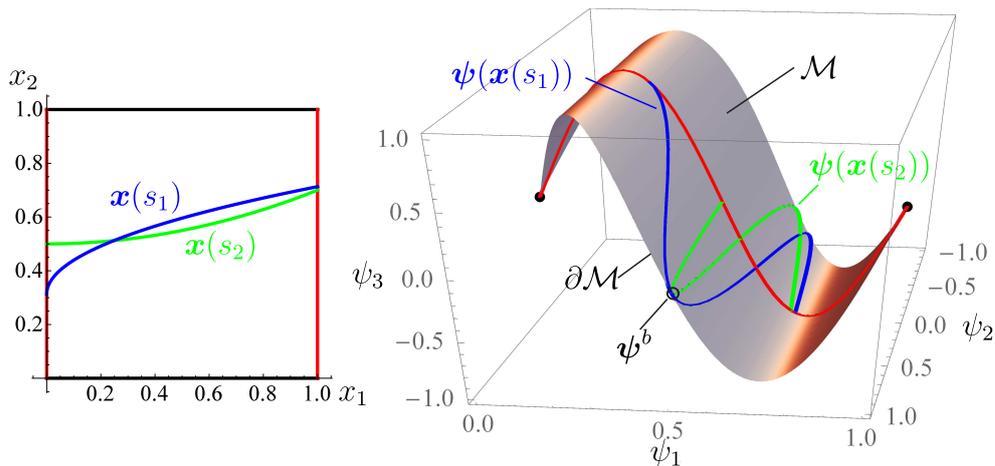


Abbildung 5.6.: Darstellung des Verlaufs zweier Ortskurven s_1 und s_2 auf der zweidimensionalen Mannigfaltigkeit aus Abbildung 5.5. Die Kurven tangieren sich und den Rand $\partial\mathcal{M}$ der Mannigfaltigkeit im Punkt ψ^b .

Neben den auf die REDIM transformierten physikalischen Rändern existieren weitere Punkte bzw. Zustände auf der REDIM, die einer besonderen Behandlung bei der Integration der REDIM-Entwicklungsgleichung bedürfen. Diese Zustände befinden sich an den Rändern $\partial\mathcal{M}$ der REDIM und stellen somit die Begrenzung der REDIM im Zustandsraum dar. Daraus folgt, dass die innerhalb der physikalischen Ränder stattfindende Systemdynamik $\psi(\mathbf{x}, t)$ die Ränder der REDIM nicht überschreiten darf, so lange die REDIM-Ränder keiner physikalischen Mannigfaltigkeit $\mathcal{M}_{pb,i}$ entsprechen. Abbildung 5.6 veranschaulicht diese Eigenschaft anhand des oben verwendeten Spielbeispiels. Die Mannigfaltigkeit \mathcal{M} ist durch den Rand $\partial\mathcal{M}$ begrenzt. Die Dimension des Randes ist dabei um mindestens eins geringer als die Dimension der Mannigfaltigkeit selbst, d.h. $\dim(\partial\mathcal{M}) \leq \dim(\mathcal{M}) - 1$ [81]. Für jeden Punkt $\psi^b \in \partial\mathcal{M}$ gilt, dass alle Kurven, die durch ψ^b verlaufen und nicht in ψ^b starten oder enden, tangential zu einander und zum Rand $\partial\mathcal{M}$ werden. Dies ist in Abbildung 5.6 stellvertretend für zwei Ortskurven $\mathbf{x}(s_1)$ und $\mathbf{x}(s_2)$ dargestellt, welche durch die Parameter s_1 bzw. s_2 parametrisiert sind [87].

Die Kurven beginnen am linken Rand der physikalischen Domäne und enden an ihrem rechten Rand ohne zwischendurch die Domäne zu verlassen. In der Darstellung im Zustandsraum wird deutlich, dass die entsprechenden Zustandskurven $\psi(\mathbf{x}(s_1))$ und $\psi(\mathbf{x}(s_2))$ sich und den Rand $\partial\mathcal{M}$ der Mannigfaltigkeit

am Punkt $\boldsymbol{\psi}^b \in \partial\mathcal{M}$ tangieren. Aus der Parallelität von $\boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{x}(s_1))$ und $\boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{x}(s_2))$ ergibt sich für das hier behandelte Beispiel

$$\frac{d}{ds_1}(\boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{x}(s_1))) = c_1 \frac{d}{ds_2}(\boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{x}(s_2))), \quad (5.29)$$

mit einer Konstanten c_1 . Daraus folgt

$$\frac{\partial\boldsymbol{\psi}}{\partial x_1} \frac{dx_1}{ds_1} + \frac{\partial\boldsymbol{\psi}}{\partial x_2} \frac{dx_2}{ds_1} = c_1 \left(\frac{\partial\boldsymbol{\psi}}{\partial x_1} \frac{dx_1}{ds_2} + \frac{\partial\boldsymbol{\psi}}{\partial x_2} \frac{dx_2}{ds_2} \right) \quad (5.30)$$

$$\frac{\partial\boldsymbol{\psi}}{\partial x_1} = c_1 \frac{\partial\boldsymbol{\psi}}{\partial x_2} \begin{pmatrix} \frac{dx_2}{ds_2} - \frac{dx_2}{ds_1} \\ \frac{dx_1}{ds_1} - \frac{dx_1}{ds_2} \end{pmatrix}. \quad (5.31)$$

Die Gradientenvektoren $\frac{d\boldsymbol{\psi}}{dx_1}$ und $\frac{d\boldsymbol{\psi}}{dx_2}$ sind somit in $\boldsymbol{\psi}^b$ linear abhängig. Unter Verwendung des Tangentialraums $\mathcal{T}(\partial\mathcal{M})$ des Mannigfaltigkeitsrandes $\partial\mathcal{M}$ lässt sich daraus folgender wichtiger Zusammenhang ableiten [28]

$$\frac{d}{ds_i}(\boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{x}(s_i)))|_{\boldsymbol{\psi}^b} \parallel \text{grad}_{x_i}(\boldsymbol{\psi})|_{\boldsymbol{\psi}^b} \parallel \mathcal{T}_{\boldsymbol{\psi}^b}(\partial\mathcal{M}). \quad (5.32)$$

Gleichung 5.32 sagt aus, dass an jeder Stelle des Randes $\partial\mathcal{M}$ die Gradienten $\text{grad}_{x_i}(\boldsymbol{\psi})$ tangential zu $\partial\mathcal{M}$ sein müssen. Dieser Sachverhalt muss bei der Integration der REDIM-Entwicklungsgleichung berücksichtigt werden. Hierfür ist es nützlich, anstatt von $\boldsymbol{\psi}_\theta$ eine neue Basis für den Tangentialraum $\mathcal{T}_{\boldsymbol{\psi}^b}\mathcal{M}$ zu definieren, wie Abbildung 5.7 darstellt.

Sei $\boldsymbol{\beta}$ die Parametrisierung des Mannigfaltigkeitsrandes $\partial\mathcal{M}$ in $\boldsymbol{\psi}^b$. Dann bilden $\boldsymbol{\psi}_\beta$ und $\boldsymbol{\psi}_\eta$ eine neue Basis für den Tangentialraum $\mathcal{T}_{\boldsymbol{\psi}^b}\mathcal{M}$, d.h. $\text{span}(\boldsymbol{\psi}_\beta, \boldsymbol{\psi}_\eta) = \text{span}(\boldsymbol{\psi}_\theta)$. $\boldsymbol{\psi}_\eta$ ist dabei der nach außen zeigende Normalenvektor zum Rand $\partial\mathcal{M}$ und $\boldsymbol{\psi}_\beta$ bildet die Basis für den Tangentialraum $\mathcal{T}_{\boldsymbol{\psi}^b}(\partial\mathcal{M})$, wobei $\boldsymbol{\psi}_\beta \perp \boldsymbol{\psi}_\eta$. Aus Gleichung 5.32 ergibt sich, dass der Anteil von $\text{grad}_{x_i}(\boldsymbol{\psi})|_{\boldsymbol{\psi}^b}$ in Richtung $\boldsymbol{\psi}_\eta$ verschwindet. Dieser Sachverhalt wird für die Implementierung der Schätzung $\boldsymbol{\xi}(\boldsymbol{\theta}^b)$ der Zustandsgradienten $\text{grad}_{x_i}(\boldsymbol{\psi})|_{\boldsymbol{\psi}^b}$ am REDIM-Rand folgendermaßen umgesetzt [28]

$$\tilde{\boldsymbol{\xi}}(\boldsymbol{\theta}^b) = \boldsymbol{\psi}_\beta \boldsymbol{\psi}_\beta^+ \boldsymbol{\xi}(\boldsymbol{\theta}^b), \quad (5.33)$$

wodurch eine orthogonale Projektion von $\boldsymbol{\xi}(\boldsymbol{\theta}^b)$ auf $\boldsymbol{\psi}_\beta$ realisiert wird (Abschnitt A.1). $\tilde{\boldsymbol{\xi}}(\boldsymbol{\theta}^b)$ entspricht dabei der modifizierten Schätzung der Gradienten $\text{grad}_{x_i}(\boldsymbol{\psi})|_{\boldsymbol{\psi}^b}$ am Rand der REDIM. Für den Vektor der Diffusion an der Stelle $\boldsymbol{\psi}^b$

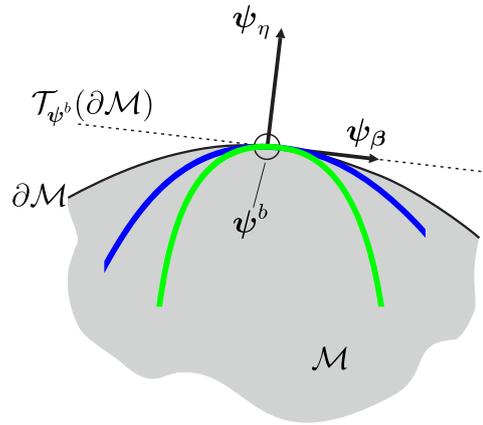


Abbildung 5.7.: Schematische lokale Darstellung des Randes $\partial\mathcal{M}$ der Mannigfaltigkeit und der beiden Kurven s_1 und s_2 [28]. Die lokale Basis ψ_θ der Mannigfaltigkeit \mathcal{M} kann durch die neue Basis (ψ_β, ψ_η) ersetzt werden, wobei ψ_η der orthogonal zum Rand nach außen zeigende Vektor ist und ψ_β den Tangentialraum $\mathcal{T}_{\psi^b}(\partial\mathcal{M})$ des Randes an der Stelle $\psi^b \in \partial\mathcal{M}$ aufspannt.

ergibt sich daraus unter Ausnutzung seiner Unabhängigkeit von der Parametrisierung (Abschnitt A.2)

$$\begin{aligned} \frac{1}{\rho} \left(\mathbf{D}\psi_{(\beta,\eta)} \psi_{(\beta,\eta)}^+ \tilde{\xi} \right)_{(\beta,\eta)} \psi_{(\beta,\eta)}^+ \tilde{\xi} &= \frac{1}{\rho} \left(\mathbf{D}\psi_{(\beta,\eta)} \begin{pmatrix} \tilde{\chi} \\ 0 \end{pmatrix} \right)_{(\beta,\eta)} \begin{pmatrix} \tilde{\chi} \\ 0 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{\rho} (\mathbf{D}\psi_\beta \tilde{\chi})_\beta \tilde{\chi}, \end{aligned} \quad (5.34)$$

mit $\tilde{\chi} = \psi_\beta^+ \tilde{\xi}(\theta^b)$. Hierbei wurde die Orthogonalität zwischen ψ_β und ψ_η ausgenutzt. Der Diffusionsvektor am Rand kann somit alleine mit Hilfe der Randkoordinaten β dargestellt werden.

5.1.4. Anfangsmannigfaltigkeit

Die Vorgabe einer geeigneten Anfangsmannigfaltigkeit ist der erste Schritt bei der Integration der REDIM-Entwicklungsgleichung. Durch die Anwendung der Invarianzbedingung in der REDIM-Entwicklungsgleichung ergibt sich eine wichtige Anforderung an die Anfangsmannigfaltigkeit, die zur Sicherstellung eines erfolgreichen Integrationsprozesses erfüllt werden muss. In Abschnitt 5.1.1 wurde bereits erwähnt, dass die Invarianzbedingung 5.1 lediglich eine notwendige Bedingung für die gesuchte langsame invariante Mannigfaltigkeit darstellt. So würde z.B. jede Trajektorie eines homogenen chemischen Systems die Invarianzbedingung erfüllen. Dennoch entsprechen diese Trajektorien nicht langsa-

men invarianten Mannigfaltigkeiten des homogenen chemischen Systems, da sie sowohl durch schnelle als auch durch langsame chemische Prozesse zustande kommen. Die Anfangsmannigfaltigkeit muss somit derart gewählt werden, dass die Berechnung der langsamen invarianten Mannigfaltigkeit unter Verwendung des Projektionsoperators P ermöglicht wird.

Für die erfolgreiche Anwendung der REDIM in reduzierten Berechnungen (Abschnitt 5.4) macht es Sinn, dass sich die dem Anwendungsfall entsprechenden physikalischen Randbedingungen auf der REDIM befinden (siehe vorherigen Abschnitt). Dies gilt insbesondere im Falle von Dirichlet-Randbedingungen, an denen dynamische Vorgänge eines Systems zum Erliegen kommen. Eine weitere sinnvolle Anforderung an die Anfangsmannigfaltigkeit lautet daher, dass die physikalischen Ränder des betrachteten Systems bereits darauf abgebildet sein sollten, da diese sonst durch keine Vorgänge entlang der REDIM erreicht werden können.

Des Weiteren spielt die Wahl der Anfangsmannigfaltigkeit für die Konvergenz des Integrationsprozesses eine wichtige Rolle. Dabei kann eine sehr schnelle Konvergenz erreicht werden, wenn die Anfangsmannigfaltigkeit bereits sehr nahe an der REDIM liegt [42]. Für homogene Systeme dient z.B. die ILDM als eine sehr gute Anfangsmannigfaltigkeit, da sie mit relativ hoher Genauigkeit der langsamen invarianten Mannigfaltigkeit des homogenen Systems entspricht [40].

Aus den beschriebenen Anforderungen geht hervor, dass die Wahl der Anfangsmannigfaltigkeit sehr stark vom jeweiligen Anwendungsfall abhängt. In den Abschnitten 6.2 und 6.3 werden unterschiedliche Vorgehensweisen beschrieben, mit denen geeignete Anfangsmannigfaltigkeiten für die REDIM-Entwicklungsgleichung generiert werden können. Eine im Rahmen dieser Arbeit entwickelte Methode bedient sich dabei der hierarchischen Struktur von REDIMs, die in Abschnitt 5.3 beschrieben wird. Hierdurch lassen sich höherdimensionale Anfangsmannigfaltigkeiten auf Basis niedrigdimensionaler REDIMs konstruieren, sodass die Anfangsmannigfaltigkeit bereits sehr nahe an der gesuchten REDIM liegt und die Konvergenz hierdurch verbessert wird. In Kombination mit einer ebenfalls neu entwickelten Methode zur tangentialen Expansion der konstruierten Anfangsmannigfaltigkeit wird hierdurch das Problem gelöst, die Domäne der REDIM bereits durch die Anfangsmannigfaltigkeit festlegen zu müssen (Abschnitt 6.3). Die theoretische Grundlage für die Festlegung der REDIM Domäne wird im nächsten Abschnitt präsentiert.

5.2. REDIM Domäne

Eine sehr wichtige Anforderung an die REDIM bei ihrer Anwendung zur reduzierten Berechnung von Verbrennungsvorgängen (Abschnitt 5.4) ist die Abbildung aller Zustände, die durch die dynamische Systembewegung zustande kommen. In anderen Worten bedeutet dies, dass die tangential zur REDIM ablaufenden Prozesse den Rand der REDIM nicht überschreiten dürfen. Eine zur Erfüllung dieser Anforderung hinreichende Bedingung lautet

$$\boldsymbol{\psi}_\eta^+ \mathbf{F}(\boldsymbol{\psi}^b) \leq 0 \wedge \mathcal{M}_{RD} \text{ ist konvex,} \quad (5.35)$$

wobei $\boldsymbol{\psi}_\eta^+$ die Moore-Penrose-Pseudoinverse [86], die durch den nach außen zeigenden Normalenvektor $\boldsymbol{\psi}_\eta$ gebildet wird und $\boldsymbol{\psi}^b \in \partial\mathcal{M}_{RD}$ ein Zustand auf dem REDIM-Rand sind (Abbildung 5.7). Aus Gleichung 5.35 geht hervor, dass sowohl der chemische Reaktionsvektor als auch der Diffusionsvektor entlang des Randes ins Innere der Mannigfaltigkeit zeigen müssen. Letzteres geht aus der Tatsache hervor, dass der Diffusionsvektor im Zustandsraum stets in Richtung des Krümmungsvektors zeigt [47].

Eine strengere Bedingung für das Vektorfeld am Mannigfaltigkeitsrand lässt sich ableiten, wenn die im System vorkommenden Gradienten $\tilde{\chi}$ am REDIM-Rand explizit mit berücksichtigt werden (Abbildung 5.7) [28]. Dann gilt für das gesamte Vektorfeld am Rand der Mannigfaltigkeit

$$\boldsymbol{\psi}_\eta^+ \left(\mathbf{F}(\boldsymbol{\psi}^b) + \frac{1}{\rho} (\mathbf{D}\boldsymbol{\psi}_\theta \tilde{\chi})_\theta \tilde{\chi} \right) \leq 0. \quad (5.36)$$

Die Anwendung des Kriteriums 5.36 erlaubt im Vergleich zu Gleichung 5.35 die Definition einer kleineren REDIM Domäne, die allerdings unter der Voraussetzung bekannter lokaler Gradienten $\tilde{\chi}$ am REDIM-Rand immer noch die gesamte Systemdynamik des jeweiligen Anwendungsfalls abbildet. Abbildung 5.8 illustriert schematisch den Unterschied zwischen den durch die Gleichungen 5.35 und 5.36 definierten Domänen. Es fällt auf, dass die durch Gleichung 5.36 definierte Domäne eine Teilmenge der mittels Gleichung 5.35 definierte Domäne ist.

In Analogie zur REDIM-Entwicklungsgleichung 5.11 kann aus Gleichung 5.36 eine Bewegungsgleichung für den Rand abgeleitet werden, welche die Anpassung der REDIM Domäne ausgehend von einer Anfangsdomäne ermöglicht. Es sollen damit diejenigen Randgebiete expandiert werden, in denen Gleichung 5.36 zunächst nicht erfüllt wird. Die Expansion des Randes soll dabei tangential zur REDIM erfolgen. Die Entwicklungsgleichung, welche die Expansion des Randes tangential zur REDIM beschreibt, ergibt sich zu

$$\frac{\partial \boldsymbol{\psi}}{\partial t} = (\boldsymbol{\psi}_\eta \boldsymbol{\psi}_\eta^+) \left(\mathbf{F}(\boldsymbol{\psi}^b) + \frac{1}{\rho} (\mathbf{D}\boldsymbol{\psi}_\theta \tilde{\chi})_\theta \tilde{\chi} \right). \quad (5.37)$$

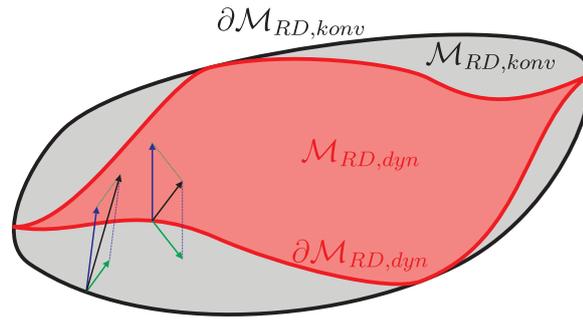


Abbildung 5.8.: Schematische Darstellung zweier REDIM-Domänen, die beide die komplette Systemdynamik abbilden. Grau: Konvexe Domäne $\mathcal{M}_{RD,konv}$, an deren Rand $\partial\mathcal{M}_{RD,konv}$ der chemische Quelltermvektor (blauer Pfeil) und der Diffusionsvektor (grüner Pfeil) und somit das gesamte Vektorfeld (schwarzer Pfeil) nach innen zeigen (Bedingung 5.35). Rot: Dynamische REDIM-Domäne $\mathcal{M}_{RD,dyn}$, welche sich aus Bedingung 5.36 unter Berücksichtigung der Gradientenschätzung ergibt. Obwohl der Diffusionsvektor nach außen zeigt, zeigt das gesamte Vektorfeld am Rand nach innen, weil der Einfluss des chemischen Quelltermvektors überwiegt. $\mathcal{M}_{RD,dyn}$ ist einer Teilmenge von $\mathcal{M}_{RD,konv}$.

Hierbei ist $(\psi_\eta \psi_\eta^+)$ ein Projektionsoperator, der das Vektorfeld am Rand orthogonal auf den nach außen zeigenden Normalenvektor ψ_η projiziert (vgl. Abbildung 5.7). Die stationäre Lösung von Gleichung 5.37 führt in Analogie zu REDIM-Entwicklungsgleichung zur Erfüllung der durch Gleichung 5.36 beschriebenen Bedingung für den REDIM-Rand. In diesem Sinne kann Gleichung 5.36 als eine tangentielle Invarianzbedingung des Randes angesehen werden, da mit Gleichung 5.37 auf Grund von $\psi_\eta \in \psi_\theta$ eine zum Innern der Mannigfaltigkeit tangentielle Bewegung des Randes beschrieben wird.

Die beschriebene Expansion der REDIM-Domäne mit Hilfe von Gleichung 5.37 bildet einen wichtigen Teil der in Abschnitt 6.3 beschriebenen automatischen REDIM-Konstruktionsmethode. Eine ebenso wichtige Rolle spielt dabei die hierarchische REDIM-Struktur, die im nächsten Abschnitt erläutert wird.

5.3. Hierarchische Struktur von REDIMs

Die Unabhängigkeit des Projektionsoperators und des Diffusionsvektors von der Parametrisierung werden in Abschnitt A.2 beschrieben und in Gleichung 5.34 zur Beschreibung des Diffusionsvektors am REDIM-Rand verwendet. In diesem Abschnitt bildet sie die Basis für die Beschreibung der hierarchischen Struktur von REDIMs unterschiedlicher Dimension. Die hierarchische Struktur von

Mannigfaltigkeiten stellt einen wichtigen Aspekt dar, der die Generierung höherdimensionaler Mannigfaltigkeiten ausgehend von Mannigfaltigkeiten niedriger Dimension ermöglicht. Das Konzept wurde bereits für die Erstellung von ILDMs erfolgreich angewendet [40, 58] und kann gemäß [27] auf den REDIM Kontext erweitert werden.

Die hierarchische Struktur von REDIMs kann im Allgemeinen dadurch beschrieben werden, dass m -dimensionale REDIMs in $(m + p)$ -dimensionale REDIMs eingebettet sind. Die mathematische Begründung für die hierarchische Struktur von REDIMs wird in [27] geliefert. Die Grundvoraussetzung für die Hierarchie ist demnach zum einen die Invarianz des Projektionsoperators und des Diffusionsterms von der Parametrisierung der REDIM (Abschnitt A.2). Zudem kann gezeigt werden, dass sowohl Projektionsoperator als auch Diffusionsterm einer m -dimensionalen REDIM invariant sind bezüglich der Entwicklung einer $(m + p)$ -dimensionalen REDIM. Es folgt damit [27]

$$\mathcal{M}_{RD}^1 \subseteq \mathcal{M}_{RD}^2 \subseteq \dots \subseteq \mathcal{M}_{RD}^n, \quad (5.38)$$

wobei \mathcal{M}_{RD}^n der Dimension des n -dimensionalen Zustandsraum entspricht.

Die hierarchische Struktur von REDIMs stellt in vielerlei Hinsicht eine sehr nützliche Eigenschaft dar. Sie kann z.B. dafür verwendet werden, um eine Erklärung für das charakteristische dynamische Verhalten detaillierter Systeme zu ermöglichen. So ist die Relaxation einer Störung des Verbrennungssystems durch das sukzessive Durchschreiten von REDIMs abnehmender Dimension gekennzeichnet, die ineinander eingebettet sind. In Abschnitt 6.3 wird die hierarchische REDIM-Struktur verwendet, um im Rahmen der in dieser Arbeit entwickelten automatischen Konstruktionsmethode die Erstellung von REDIMs beliebiger Dimension zu ermöglichen.

5.4. Reduziertes PDE-System

In den Abschnitten 5.1-5.3 wurden die mathematischen Grundlagen präsentiert, welche die Basis für die Erstellung der REDIM bilden. Dieser Abschnitt beschäftigt sich mit dem zweiten wichtigen Schritt innerhalb der REDIM Modellreduktionsmethode, nämlich der Anwendung der REDIM zur reduzierten Berechnung von Verbrennungsprozessen.

Die stationäre Lösung der REDIM-Entwicklungsgleichung führt zur Erfüllung der Invarianzbedingung 5.1 durch das Vektorfeld $\tilde{\phi}$ auf der REDIM. In Abhängigkeit der Abschätzung der lokalen Gradienten χ stellt die REDIM somit eine Approximation der langsamen invarianten Mannigfaltigkeit des detaillierten PDE-Systems 2.8 dar, welche die Systemdynamik nach Abschluss der $n_f = n - m$

schnellen Prozesse vollständig beschreibt (Abschnitt 5.1.1). Die Dynamik wird durch die rechte Seite des PDE-Systems beschrieben, die gemäß Gleichung 5.3 in Abhängigkeit der Parametrisierung der REDIM dargestellt werden kann [22]

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \mathbf{F} - \mathbf{v}\psi_{\theta}\text{grad}(\boldsymbol{\theta}) + \frac{1}{\rho}\text{div}(\mathbf{D}\psi_{\theta}\text{grad}(\boldsymbol{\theta})) = \boldsymbol{\phi}.$$

Auf Grund der Invarianz kann jeder zur REDIM tangentialer Vektor als Linearkombination aus den Basisvektoren ψ_{θ} des Tangentialraums $\mathcal{T}_{\psi}\mathcal{M}_{RD}$ dargestellt werden. Darüber hinaus ist jeder Zustand ψ auf der REDIM eindeutig durch die zugehörige Parametrisierung $\boldsymbol{\theta}$ beschrieben. Somit kann Gleichung 5.3 in folgende Form gebracht werden

$$\psi_{\theta}\frac{\partial \boldsymbol{\theta}}{\partial t} = \mathbf{F} - \mathbf{v}\psi_{\theta}\text{grad}(\boldsymbol{\theta}) + \frac{1}{\rho}\text{div}(\mathbf{D}\psi_{\theta}\text{grad}(\boldsymbol{\theta})). \quad (5.39)$$

Durch die Anwendung der Moore-Penrose-Pseudoinversen wird eine orthogonale Projektion auf ψ_{θ} mit einer anschließenden Abbildung in den Parameterraum realisiert [86, 87], woraus das reduzierte PDE-System bzw. das reduzierte Modell mit einer verringerten Anzahl $m \ll n$ an partiellen Differentialgleichungen resultiert

$$\begin{aligned} \frac{\partial \boldsymbol{\theta}}{\partial t} &= \psi_{\theta}^+ \left(\mathbf{F} - \mathbf{v}\psi_{\theta}\text{grad}(\boldsymbol{\theta}) + \frac{1}{\rho}\text{div}(\mathbf{D}\psi_{\theta}\text{grad}(\boldsymbol{\theta})) \right) \\ &= \psi_{\theta}^+ \left(\mathbf{F} + \frac{1}{\rho}\text{div}(\mathbf{D}\psi_{\theta}\text{grad}(\boldsymbol{\theta})) \right) - \mathbf{v}\text{grad}(\boldsymbol{\theta}) \\ &= \hat{\boldsymbol{\phi}}. \end{aligned} \quad (5.40)$$

Abbildung 5.9 veranschaulicht die Vorgehensweise bei der Herleitung von Gleichung 5.40 anhand eines eindimensionalen Profils $\psi(x, t)$, das sich entlang einer zweidimensionalen REDIM \mathcal{M}_{RD}^2 bewegt. Zu einem bestimmten Zeitpunkt t_0 kann der Zustand ψ^* , der sich an einer bestimmten Stelle x^* im Ortsraum befindet, eindeutig durch die zugehörigen REDIM-Parameter $\boldsymbol{\theta}^*$ beschrieben werden.

Die Dynamik an der Stelle ψ^* wird durch den Vektor $\boldsymbol{\phi}$ beschrieben, welcher der rechten Seite des detaillierten PDE-Systems entspricht (Gleichung 2.8). $\boldsymbol{\phi}$ lässt sich als Linearkombination aus den Vektoren ψ_{θ}^* am Zustand ψ^* darstellen. Durch die Projektion in den Parameterraum $\boldsymbol{\theta}$ wird $\boldsymbol{\phi}$ auf den entsprechenden Vektor $\hat{\boldsymbol{\phi}}$ abgebildet, der an der Stelle $\boldsymbol{\theta}^*$ die entsprechende Bewegung in $\boldsymbol{\theta}$ beschreibt. Diese Abbildung kann zu jedem Zeitpunkt und an jedem Zustand entlang des Profils $\psi(x, t)$ erfolgen. Hierdurch ergibt sich ein reduziertes PDE-System, das die Dynamik des detaillierten PDE-Systems mit Hilfe der Parameter $\boldsymbol{\theta}$ beschreibt. Die

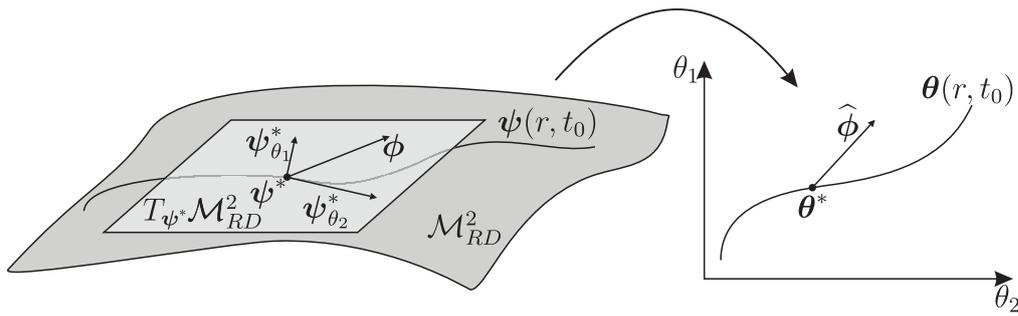


Abbildung 5.9.: Links: Eindimensionales Profil $\psi(x, t)$ bewegt sich entlang der zweidimensionalen REDIM \mathcal{M}_{RD}^2 . Das Vektorfeld $\phi \in \mathcal{T}_{\psi^*}\mathcal{M}$ an der Stelle $\psi^* = \psi(x^*, t_0)$ ist tangential zu ψ_θ . Rechts: Abbildung von ϕ in die lokalen Koordinaten ergibt das reduzierte Vektorfeld $\hat{\phi}$, das am zu ψ^* korrespondierenden Koordinatenpunkt θ^* die dynamische Bewegung des reduzierten Profils $\theta(x, t_0)$ beschreibt.

Dimension des reduzierten PDE-Systems ist dabei äquivalent zur Dimension der REDIM. Auf Grund des eindeutigen funktionalen Zusammenhangs $\psi(\theta)$ ergibt sich durch die Rückabbildung von $\theta(x, t)$ auf die REDIM die reduzierte Lösung der Zustände $\psi(\theta(x, t))$. Gleichzeitig ermöglicht dies, die im reduzierten System auftretende Größen ψ_θ^+ , $\psi_\theta^+ F$ und $D\psi_\theta$ aus der im Vorfeld berechneten REDIM zu entnehmen. Hierdurch wird eine besonders effiziente numerische Lösung des reduzierten Systems realisiert (Abschnitt 6.4). An dieser Stelle ist es noch wichtig zu erwähnen, dass die im reduzierten System auftretenden Gradienten $\text{grad}(\theta)$ nicht den Schätzungen χ entsprechen, sondern sich aus dem örtlichen Verlauf von $\theta(x, t)$ ergeben. Im Zuge eines iterativen Verfahrens können die Gradienten $\text{grad}(\theta)$ allerdings dazu verwendet werden, um verbesserte Schätzungen χ für die REDIM-Integration zu erhalten [22].

5.5. Zusammenfassende Beschreibung des mathematischen Modells

Das mathematische Modell der REDIM Modellreduktionsmethode besteht aus zwei Hauptteilen, die aufeinander aufbauen:

1. Der REDIM-Entwicklungsgleichung 5.11 zur Ermittlung der REDIM als Approximation der langsamen Mannigfaltigkeit im Zustandsraum

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = P \left(F + \frac{1}{\rho} (D\psi_\theta \chi)_\theta \chi \right).$$

2. Dem reduzierten Modell 5.40, das die langsame Systembewegung entlang der REDIM beschreibt

$$\frac{\partial \boldsymbol{\theta}}{\partial t} = \boldsymbol{\psi}_{\boldsymbol{\theta}}^+ \left(\mathbf{F} + \frac{1}{\rho} \operatorname{div} (\mathbf{D} \boldsymbol{\psi}_{\boldsymbol{\theta}} \operatorname{grad}(\boldsymbol{\theta})) \right) - \mathbf{v} \operatorname{grad}(\boldsymbol{\theta}).$$

Die REDIM-Entwicklungsgleichung beschreibt die Bewegung der REDIM \mathcal{M}_{RD} im Zustandsraum ausgehend von einer geeigneten Anfangsmannigfaltigkeit (Abschnitt 5.1.4) und unter Verwendung des Projektionsoperators \mathbf{P} (Abschnitt 5.1.1). Auf Grund der Existenz entkoppelbarer schneller Prozesse in chemisch reagierenden Strömungen, führt die stationäre Lösung der REDIM-Entwicklungsgleichung zur Erfüllung der Invarianzbedingung und beschreibt dadurch die langsame Systemdynamik nach Abschluss der schnellen Prozesse. Die Zustände $\boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{\theta})$ der REDIM werden dabei eindeutig durch die Parameter $\boldsymbol{\theta}$ beschrieben, deren Anzahl m sehr viel geringer ist als die Dimension n des Zustandsraums, d.h. $m \ll n$. Ein zentraler Punkt in der REDIM-Entwicklungsgleichung ist die Abschätzung des molekularen Transports mit Hilfe der lokalen Gradientenschätzung $\boldsymbol{\chi}$, die aus einer Schätzung $\boldsymbol{\xi}$ der Zustandsgradienten $\operatorname{grad}(\boldsymbol{\psi})$ hervorgeht (Abschnitt 5.1.2). Weitere wichtige Aspekte, die besonders bei der Entwicklung geeigneter Konstruktionsmethoden zum Tragen kommen, sind die hierarchische Struktur der REDIMs (Abschnitt 5.3) sowie die Parallelität zwischen den Schätzungen $\boldsymbol{\xi}$ und den Rändern der REDIM (Abschnitt 5.1.3 und Abschnitt 5.2).

Das reduzierte Modell beschreibt die eigentliche Reduzierung des ursprünglichen n -dimensionalen PDE-Systems. Durch die Abbildung der detaillierten Systembewegung in den Parameterraum $\boldsymbol{\theta}$ unter Anwendung von $\boldsymbol{\psi}_{\boldsymbol{\theta}}^+$ ergibt sich eine reduzierte Anzahl m zu integrierender partieller Differentialgleichungen für die lokalen Parameter $\boldsymbol{\theta}(\mathbf{x}, t)$ (Abschnitt 5.4). Durch den expliziten funktionalen Zusammenhang $\boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{\theta})$ folgt daraus die zeitliche und örtliche Lösung der auf der REDIM ablaufenden reduzierten Dynamik $\boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{\theta}(\mathbf{x}, t))$, wodurch die REDIM-Modellreduktionsmethode komplettiert wird.

Um eine Anwendung der REDIM-Methode zur reduzierten numerischen Berechnung von Verbrennungsvorgängen zu ermöglichen, wird ein geeignetes Verfahren zur technischen Umsetzung des mathematischen Modells benötigt. Das nächste Kapitel stellt die Strategie vor, mit der die REDIM-Methode implementiert wird. Dies beinhaltet die numerischen Verfahren zur Lösung der REDIM-Entwicklungsgleichung und des reduzierten Modells sowie geeignete Methoden zur Konstruktion der REDIM in Form eines m -dimensionalen Gitters im Zustandsraum.

6. Implementierung der REDIM-Methode

Nachdem im vorangegangenen Kapitel die theoretischen Grundlagen der REDIM-Methode erläutert wurden, erfolgt in diesem Abschnitt die Beschreibung ihrer technischen bzw. praktischen Umsetzung. Die Problemstellung gliedert sich dabei in einen rein technischen Teil sowie einen konzeptionellen Teil. Die technischen Aspekte betreffen die vom Verbrennungssystem unabhängige numerische Lösung der REDIM-Entwicklungsgleichung 5.11 sowie des reduzierten Systems 5.4. Aus konzeptioneller Sicht gilt es die Frage nach geeigneten Verfahren zu beantworten, mit denen REDIMs für eine möglichst große Bandbreite an Systemen konstruiert werden können.

In den folgenden Abschnitten wird zunächst in allgemeiner Weise das numerische Verfahren beschrieben, das die Bestimmung der REDIM in Form eines m -dimensionalen Gitters im Zustandsraum ermöglicht. Dieses bildet die Basis für zwei im Anschluss vorgestellte REDIM-Konstruktionsstrategien. Bei der ersten handelt es sich dabei um die bisher verfolgte Strategie zur Erzeugung von REDIMs. Die zweite Methode wurde im Zuge dieser Arbeit entwickelt und verwendet die in Abschnitt 5.3 und diskutierten wichtigen Eigenschaften der Hierarchie sowie der charakteristischen Bedingungen am REDIM-Rand (Abschnitt 5.2). Hierdurch soll die ursprünglich verfolgte Strategie hinsichtlich der Erfüllung folgender Anforderungen erweitert werden

- Das Verfahren sollte ein möglichst geringes Maß an Vorwissen des Anwenders voraussetzen.
- Es sollte sich um ein vom betrachteten Verbrennungssystem weitgehend unabhängiges Verfahren handeln, das die adaptive Einstellung der REDIM-Domäne und -dimension ermöglicht.

In Abschnitt 6.4 erfolgt schließlich die Vorstellung des Verfahrens zur numerischen Lösung des reduzierten Modells. Im Fokus steht dabei besonders die Prozedur, die im Rahmen der numerischen Lösung den effizienten Zugriff auf die tabellierte REDIM ermöglicht. Die folgenden Erläuterungen werden exemplarisch für die in Abschnitt 3.1 beschriebene vorgemischte Synthesegas-Luft-Flamme

und nicht-vorgemischte Wasserstoff-Luft-Flamme durchgeführt. Die erarbeiteten Neuerungen wurden in die bestehenden Programmpakete HOMREA [15] und INSFLA [29] eingebaut.

6.1. Numerische Lösung der REDIM-Entwicklungsgleichung

Die REDIM-Entwicklungsgleichung stellt ein n -dimensionales partielles Differentialgleichungssystem dar [22, 28, 84], das numerisch gelöst werden muss. In Analogie zur numerischen Berechnung chemisch reagierender Strömungen im physikalischen Raum [29] wird das Gleichungssystem 5.11 hierfür sowohl im Parameterbereich, als auch zeitlich diskretisiert. Die Diskretisierung im Parameterbereich erfolgt dabei durch die Einführung eines Gitters, an dessen diskreten Punkten die REDIM-Zustände $\psi(\theta)$ vorliegen und die in der Entwicklungsgleichung vorkommenden Differentialoperatoren durch Approximationen ersetzt werden. Die Dimension des Gitters entspricht dabei der Dimension der Mannigfaltigkeit, wie Abbildung 6.1 anhand eines vorgemischten Synthesegas-Luft-Systems verdeutlicht. Die in Abbildung 6.1 dargestellten Gitter entsprechen regelmäßigen rechteckigen Gittern, die in dieser Arbeit vorwiegend zum Einsatz kamen. Auf Grund der Unabhängigkeit der REDIM-Entwicklungsgleichung von der Parametrisierung (Abschnitt A.2) bietet es sich an, das besonders einfach zu implementierende Konzept generalisierter Koordinaten [34, 47, 59] zu verwenden, bei dem die Gitterkoordinaten der Indizierung der jeweiligen Gitterpunkte entsprechen. Der Abstand zwischen zwei benachbarten Gitterpunkten im Parameterbereich in der jeweiligen Dimension entspricht bei dieser Vorgehensweise dem Wert 1 (siehe Abbildung 6.1).

Die Festlegung der Gitterpunkte geht aus der verwendeten Parametrisierungsstrategie hervor. Im nächsten Abschnitt werden zwei verschiedene Methoden zur Parametrisierung vorgestellt, von denen die zweite Methode auf der Verwendung der Bogenlänge als Parametrisierungsvariable basiert. Die Vorteile dieses Konzepts werden beschrieben und die Methode der ursprünglichen verwendeten Parametrisierung in Abhängigkeit langsamer Spezies gegenübergestellt. In den darauf folgenden Abschnitten wird dann das numerische Verfahren präsentiert, das aus der numerischen Approximation der Differentialterme auf dem REDIM-Gitter und dem zeitlichen Integrationsverfahren zusammensetzt. Im Anschluss daran werden praktische Methoden für die Bestimmung der Gradientenschätzung in laminaren Vormischflammen und Gegenstromflammen (Abschnitt 5.1.2) sowie die diskrete Behandlung der Randgitterpunkte (Abschnitt 5.1.3) diskutiert.

6.1. Numerische Lösung der REDIM-Entwicklungsgleichung

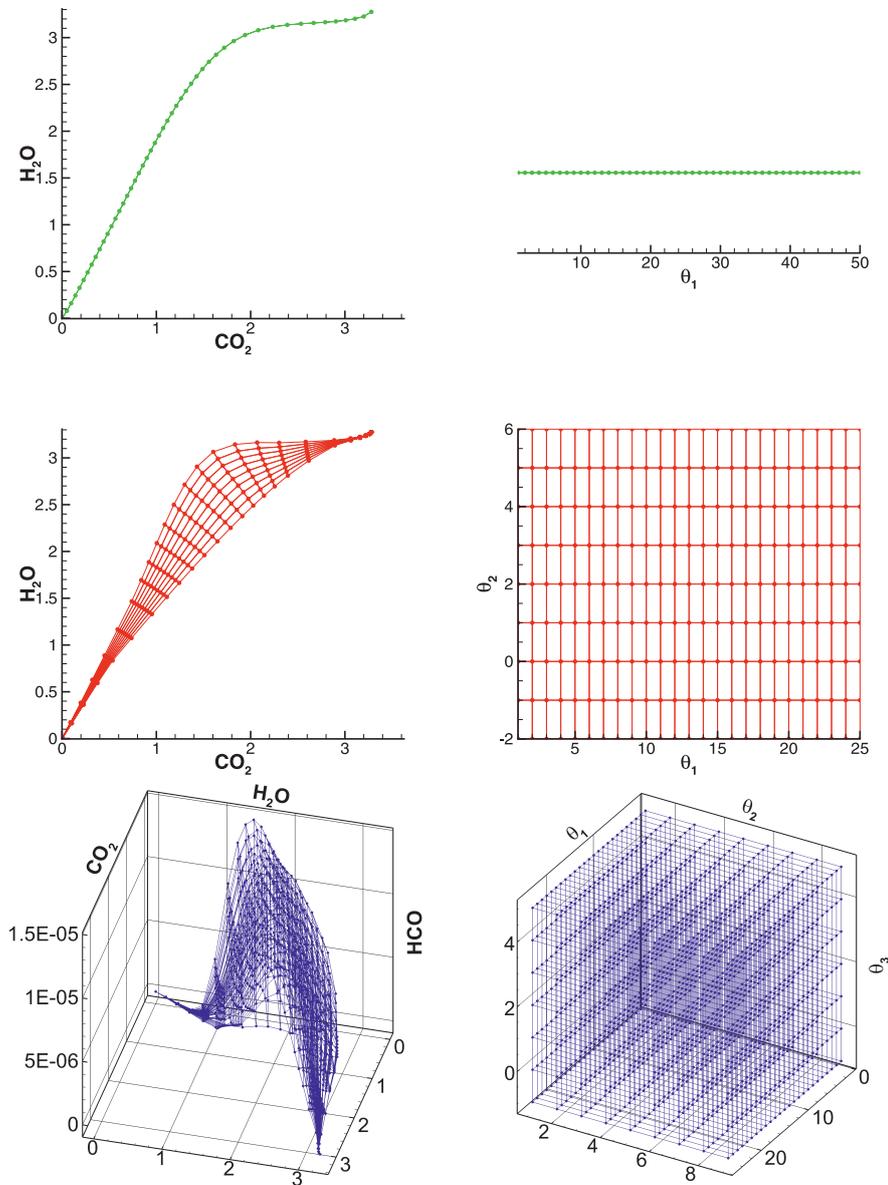


Abbildung 6.1.: 1D- (grün), 2D- (rot) und 3D-REDIM (blau) mit zugehörigem Gitter im Parameterbereich. Links: REDIMs im Zustandsraum, Einheiten der spezifischen Molzahlen φ in mol kg^{-1} . Rechts: Regelmäßiges Rechteckgitter im Parameterbereich.

6.1.1. REDIM-Parametrisierungsstrategien

Für die numerische Lösung der REDIM-Entwicklungsgleichung wird der explizite funktionale Zusammenhang zwischen den abhängigen Zustandsvariablen ψ und den generalisierten Koordinaten θ als unabhängige Variablen an jedem Gitterpunkt benötigt. Da die Lösung der REDIM-Entwicklungsgleichung nicht von der Art der Parametrisierung abhängig ist (Abschnitt 5.1.1), können hierfür unterschiedliche Verfahren angewendet werden. Die Voraussetzung für die Festlegung von $\psi(\theta)$ ist dabei stets, dass die Parametrisierungsvariablen θ eine eindeutige Beschreibung der Mannigfaltigkeitszustände ψ erlauben.

Eine sehr gängige Methode ist es, die Mannigfaltigkeit mit Hilfe physikalischer Variablen zu parametrisieren, die selbst Teil des Zustandsvektors ψ sind [7]. Hierfür kommen diejenigen Größen infrage, die sich im betrachteten Verbrennungssystem streng monoton verändern und daher eine eindeutige Beschreibung der restlichen Zustandsgrößen erlauben. Bei der Verbrennung von Kohlenwasserstoffen erfüllen CO_2 und H_2O diese Anforderung, wobei für nicht-vorgemischte Systeme auch N_2 und die Enthalpie sowie der Mischungsbruch [1] als Parametrisierungsvariablen herangezogen werden können. Weiterhin ist es möglich, Linearkombinationen der genannten Größen zur Parametrisierung zu verwenden. Die Parameter θ berechnen sich demnach unter Verwendung der $(m \times n)$ -dimensionalen Matrix C zu [42]

$$\theta = C\psi. \quad (6.1)$$

Abbildung 6.2a veranschaulicht den Einsatz von CO_2 als Parametrisierungsvariable am Beispiel einer eindimensionalen REDIM eines vorgemischten Synthesegas-Luft-Systems in einer zweidimensionalen CO_2 -OH-Projektion des Zustandsraums. Die rote Kurve entspricht dabei dem stationären detaillierten Flammenprofil, während die schwarze Kurve die mit Hilfe von CO_2 parametrisierten REDIM repräsentiert. Es sind die in CO_2 -Richtung äquidistanten Gitterpunktabstände klar zu erkennen, die sich aus der Wahl von 16 Gitterpunkten ergeben.

Die Verwendung physikalischer Variablen zur Parametrisierung der REDIM lässt sich zwar besonders einfach implementieren, ist jedoch mit dem Nachteil verbunden, dass Vorwissen über die infrage kommenden Spezies des jeweiligen Verbrennungssystems benötigt wird. Darüber hinaus kann eine auf Gleichung 6.1 basierende Parametrisierung dazu führen, dass sich insbesondere für intermediäre Spezies wie z.B. OH im Bereich großer Krümmung oder Steigung eine sehr geringe Punktedichte einstellt. In Abbildung 6.2a tritt dieser Sachverhalt besonders im Bereich $\text{CO}_2 > 3 \text{ mol kg}^{-1}$ auf. Durch eine zu geringe Punktedichte sinkt die Genauigkeit, mit der die REDIM durch das verwendete Gitter dargestellt wird. Dies kann sowohl bei der Integration der REDIM-Entwicklungsgleichung, als

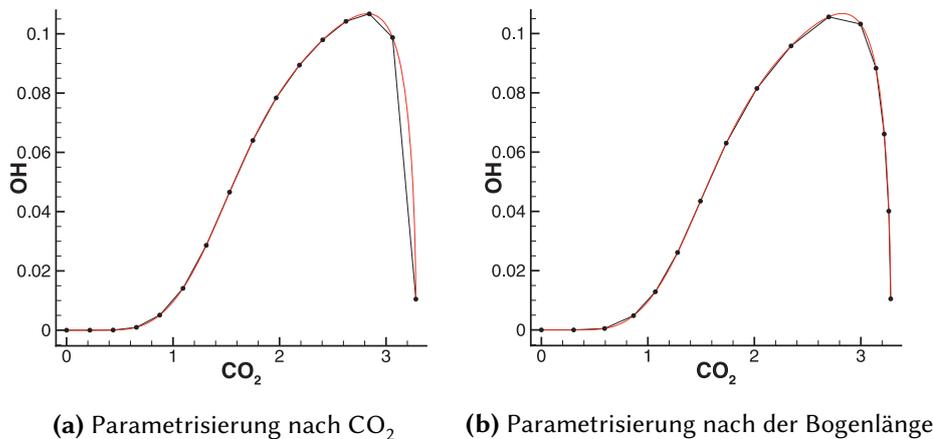


Abbildung 6.2.: Implementierte REDIM-Parametrisierungsstrategien am Beispiel einer vorgemischte Synthesegas-Luft-Flamme. Bei der Parametrisierung nach CO_2 ergibt sich eine entsprechende äquidistante Verteilung der Gitterpunkte in CO_2 -Richtung. Die Parametrisierung nach der Bogenlänge führt zu einer gleichmäßigeren Verteilung der Gitterpunkte in Bereichen großer Steigung bzw. Krümmung.

auch bei der späteren Implementierung der REDIM in reduzierten Berechnungen zu numerischen Problemen führen.

Ein im Vergleich zum oben beschriebenen Verfahren flexibleres Konzept basiert auf der Verwendung der Bogenlänge als Parametrisierungsvariable [87] und wird im Folgenden näher erläutert. Die präsentierten Ergebnisse gehen dabei aus einer im Rahmen dieser Arbeit betreuten Bachelor-Abschlussarbeit hervor [88]. Es wird zunächst auf die Parametrisierung eindimensionaler REDIMs eingegangen, bevor die Anwendung der Methode für die Parametrisierung höherdimensionaler REDIMs beschrieben wird.

Bei der Parametrisierung einer eindimensionalen REDIM nach der Bogenlänge werden die Gitterpunkte eines bestehenden eindimensionalen REDIM-Gitters, das beispielsweise zunächst nach CO_2 parametrisiert wurde, in Abhängigkeit der Bogenlänge s im Zustandsraum neu angeordnet. Hierfür wird zunächst die Gesamtbogenlänge der REDIM im Zustandsraum bestimmt, indem die Längen der linearen Teilstücke zwischen den ursprünglichen Gitterpunkten aufaddiert werden. Die spezifischen Molzahlen einzelner Zustandsgrößen in typischen Verbrennungssystemen können sich jedoch um bis zu zehn Größenordnungen unterscheiden, sodass Hauptspezies einen weitaus stärkeren Einfluss auf die Berechnung der Bogenlänge hätten und eine Neuordnung der Gitterpunkt daher

dominieren würden. Daher wird für die Berechnung der Bogenlänge zunächst eine Normierung der einzelnen Zustandsgrößen durchgeführt

$$\hat{\psi}_j^i = \frac{\psi_j^i}{\max(|\psi_j^i|)} \leq 1; \quad i = 1, \dots, n_s + 2; \quad j = 1, \dots, n_p, \quad (6.2)$$

wobei n_p der Anzahl an Gitterpunkten im ursprünglichen Gitter und ψ_j^i dem Wert der i -ten Zustandsgröße am j -ten Gitterpunkt entspricht. Für die Gesamtbogenlänge s_{ges} ergibt sich damit

$$s_{ges} = \sum_{j=1}^{n_p-1} \sqrt{\sum_{i=1}^{n_s+2} (\hat{\psi}_{j+1}^i - \hat{\psi}_j^i)^2}. \quad (6.3)$$

Da es sich bei der Bogenlänge gemäß Gleichung 6.3 um eine streng monoton steigende Größe handelt, ist eine eindeutige Parametrisierung der REDIM mit Sicherheit gewährleistet. Zudem wird für die Berechnung der Bogenlänge kein spezifisches Vorwissen über das vorliegende Verbrennungssystem benötigt. Es muss lediglich die Reihenfolge der Zustandspunkte des REDIM-Gitters bekannt sein. Dies ist durch die Verwendung des detaillierten Flammenprofils als Ausgangspunkt für die Neuordnung sichergestellt [88].

Die Neuordnung der Gitterpunkte in Abhängigkeit der Bogenlänge kann auf verschiedene Arten erfolgen. Am einfachsten ist dabei eine äquidistante Verteilung der neuen Gitterpunkte entlang der Bogenlänge zu realisieren, indem die Gesamtbogenlänge s_{ges} in gleichgroße Teilstücke aufgeteilt wird und die dazugehörigen Zustandswerte mittels linearer Interpolation auf das alte Gitter gefunden werden. Darauf aufbauend lässt sich zusätzlich durch das Bilden einer integralen Gitterfunktion $G(s)$ die Gitterpunktdichte in denjenigen Bereichen erhöhen, die durch eine starke Steigung oder Krümmung charakterisiert sind. Die modifizierten Gitterpunkte ergeben sich dann aus der inversen Interpolation von $G(s)$ [29, 89]

$$G(s) = \sum_{i=1}^{n_s+2} a_i \frac{\int_{s_0}^s \left| \frac{\partial \psi^i}{\partial s} \right| ds}{\int_{s_0}^{s_{ges}} \left| \frac{\partial \psi^i}{\partial s} \right| ds} + b_i \frac{\int_{s_0}^s \left| \frac{\partial^2 \psi^i}{\partial s^2} \right| ds}{\int_{s_0}^{s_{ges}} \left| \frac{\partial^2 \psi^i}{\partial s^2} \right| ds}. \quad (6.4)$$

Die Gewichtungsfaktoren a_i und b_i können angepasst werden, um in Abhängigkeit der Problemstellung den Einfluss einzelner Spezies bei der Gitterpunktverteilung zu vergrößern oder zu vermindern. Die ersten und zweiten Ableitungen in Gleichung 6.4 können mit Hilfe zentraler Differenzenquotienten gebildet werden, während für das Bilden der Integrale die Trapezregel herangezogen werden kann [90].

Abbildung 6.2b stellt das mit Hilfe von Gleichung 6.4 gebildete Gitter der eindimensionalen REDIM dar, das analog zu Abbildung 6.2a das detaillierte Flammenprofil als Grundlage verwendet. Hierbei wurden für die spezifischen Molzahlen von OH die Gewichtungsfaktoren aus Gleichung 6.4 zu $a_{\text{OH}} = 10$ und $b_{\text{OH}} = 10$ gesetzt, während die Faktoren der anderen Spezies den Wert 1 erhalten. Es ist zu sehen, dass sich im ursprünglich dünn besetzten Bereich für $\text{CO}_2 > 3 \text{ mol kg}^{-1}$ nun mehr Punkte befinden, wodurch das detaillierte Profil besser abgebildet und eine verbesserte numerische Integration der REDIM-Entwicklungsgleichung ermöglicht wird. Durch die verbesserte Verteilung der Gitterpunkte wird somit die Verwendung einer geringeren Anzahl an Gitterpunkten ermöglicht, wobei eine hohe Genauigkeit bei der Integration der REDIM-Entwicklungsgleichung aufrecht erhalten werden kann.

Die Anwendung des auf die Bogenlänge basierenden Verfahrens kann auf höherdimensionale REDIM-Gitter ausgeweitet werden, wenn die Gitter als Zusammensetzung vieler einzelner eindimensionaler Kurven angesehen werden. Die Kurven ergeben sich, indem bis auf ein Parameter θ_i alle anderen Parameter des ursprünglichen Gitters konstant gehalten werden. Diese Vorgehensweise ist bei der Anwendung der im Rahmen dieser Arbeit entwickelten adaptiven Konstruktionsmethode von Bedeutung, die in Abschnitt 6.3 genau beschrieben wird.

An dieser Stelle soll jedoch erwähnt werden, dass die Verteilung nach der Bogenlänge zwar eine erhöhte Flexibilität bei der Verteilung der Gitterpunkte ermöglicht. Dennoch wird auch hier ein gewisses Maß an Erfahrung oder Vorwissen über das System vorausgesetzt, um eine angemessene Verteilung der Punkte zu erreichen. Dies schlägt sich insbesondere im Falle höherer REDIM-Dimensionen nieder.

6.1.2. Verfahren für die Approximation der Ableitungen und des Diffusionsterms

Für die numerische Lösung der REDIM-Entwicklungsgleichung auf dem oben beschriebenen REDIM Gitter werden Verfahren benötigt, die eine Approximation der Ableitungen ψ_θ sowie des Diffusionsterms an den einzelnen Gitterpunkten ermöglichen. Hierfür kommt das klassische Finite Differenzen Verfahren zum Einsatz, mit dem eine lokale Approximation der Differentialterme durchgeführt wird [1, 5]. Zusätzlich dazu wurde in dieser Arbeit das Potenzial einer Anwendung von Interpolationsfunktionen untersucht, die eine globale Approximation der Mannigfaltigkeit auf Basis der an den Gitterpunkten vorliegenden Stützstellen mit

Hilfe differenzierbarer Ansatzfunktionen ermöglichen. Beide Methoden werden im Folgenden näher vorgestellt.

Die Differenzenapproximation von ψ_θ an einer Stelle $\theta^* = (\theta_1^*, \dots, \theta_m^*)$ ergibt sich unter Berücksichtigung der generalisierten Koordinaten und der Verwendung von Zentralfdifferenzen zu [1]

$$\psi_{\theta_i}(\theta^*) \approx \psi_{\theta_i}^Z(\theta^*) = \frac{1}{2} \left[\psi \begin{pmatrix} \theta_1^* \\ \vdots \\ \theta_i^* + 1 \\ \vdots \\ \theta_m^* \end{pmatrix} - \psi \begin{pmatrix} \theta_1^* \\ \vdots \\ \theta_i^* - 1 \\ \vdots \\ \theta_m^* \end{pmatrix} \right]. \quad (6.5)$$

Für Randpunkte ergeben sich die entsprechenden Ausdrücke für Vorwärts- bzw. Rückwärtsdifferenz [1], da in den entsprechenden Parameterrichtungen keine weiteren Nachbarpunkte mehr vorhanden sind. $\psi_{\theta_i}^Z(\theta^*)$ wird zur Bestimmung von ψ_θ^+ (Gleichung 5.16) angewendet und geht damit ebenso in die Berechnung des Projektionsoperators (Gleichung 5.15) und von χ (Gleichung 5.22) ein.

Für die effiziente Implementierung des Diffusionsterms mit Hilfe Finiter Differenzen bietet es sich an, diesen unter Verwendung der Kettenregel in zwei Teilterme aufzuspalten [22, 84]

$$(\mathbf{D}\psi_\theta\chi)_\theta \chi = \mathbf{D}\psi_\theta\chi_\theta\chi + \chi \circ (\mathbf{D}\psi_\theta)_\theta \circ \chi. \quad (6.6)$$

Für die jeweiligen i -ten Komponenten ergibt sich dann unter Verwendung der Einstein'schen Summenkonvention [83]

$$(\mathbf{D}\psi_\theta\chi_\theta\chi)_i = D_{ik} \frac{\partial \psi_k}{\partial \theta_l} \frac{\partial \chi_{lm}}{\partial \theta_j} \chi_{jm}, \quad (6.7)$$

$$(\chi \circ (\mathbf{D}\psi_\theta)_\theta \circ \chi)_i = \frac{\partial H_{il}}{\partial \theta_k} \chi^{kj} \chi_{lj}, \quad (6.8)$$

$$H_{il} = D_{ik} \frac{\partial \psi_k}{\partial \theta_l}. \quad (6.9)$$

Die Annahme gleicher Diffusivitäten und $Le = 1$ ist in vielen Anwendungen hinreichend genau und stellt deshalb eine wichtige Vereinfachung dar [91]. Der Term $\mathbf{D}\psi_\theta\chi_\theta\chi$ verschwindet unter der Annahme gleicher Diffusivitäten und $Le = 1$ durch die Anwendung des Projektionsoperators 5.15 in der REDIM-Entwicklungsgleichung 5.11, da $\mathbf{D} = d \cdot \mathbf{I}$ mit $d = \frac{\lambda_W}{\rho c_p}$ und somit $d(\mathbf{I} - \psi_\theta\psi_\theta^+)\psi_\theta\chi_\theta\chi = \mathbf{0}$. Darüber hinaus vereinfacht sich der zweite Term $\chi \circ (\mathbf{D}\psi_\theta)_\theta \circ \chi$ zu $d\chi \circ \psi_{\theta\theta} \circ \chi$, sodass für die REDIM-Entwicklungsgleichung im Falle gleicher Diffusivitäten und $Le = 1$ folgt [22]

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = (\mathbf{I} - \psi_\theta\psi_\theta^+) \left(\mathbf{F} + \frac{d}{\rho} \chi \circ \psi_{\theta\theta} \circ \chi \right). \quad (6.10)$$

Die Diskretisierung des Terms $\mathbf{D}\psi_\theta\chi_\theta\chi$ in Gleichung 6.6 beruht auf der Verwendung von Zentralfdifferenzen für ψ_θ und χ_θ gemäß Gleichung 6.5, während für \mathbf{D} und χ die Terme an den jeweiligen Gitterpunkten verwendet werden. Im zweiten Term $\chi \circ (\mathbf{D}\psi_\theta)_\theta \circ \chi$ werden die Vektoren χ ebenso an den jeweiligen Gitterpunkten bestimmt. Für $(\mathbf{D}\psi_\theta)_\theta$ wird das folgende Diskretisierungsschema implementiert, das sich in numerischen Experimenten als besonders stabil erwies.

$$(\mathbf{D}\psi_{\theta_i})_{\theta_j}(\boldsymbol{\theta}^*) \approx (\tilde{\mathbf{D}}_i \tilde{\boldsymbol{\psi}}_{\theta_i}) \begin{pmatrix} \theta_1^* \\ \vdots \\ \theta_j^* \\ \vdots \\ \theta_m^* \end{pmatrix} - (\tilde{\mathbf{D}}_i \tilde{\boldsymbol{\psi}}_{\theta_i}) \begin{pmatrix} \theta_1^* \\ \vdots \\ \theta_j^* - 1 \\ \vdots \\ \theta_m^* \end{pmatrix}, \quad (6.11)$$

mit

$$\tilde{\mathbf{D}}_i = \frac{1}{2} \left[\mathbf{D} \begin{pmatrix} \theta_1^* \\ \vdots \\ \theta_i^* \\ \vdots \\ \theta_m^* \end{pmatrix} + \mathbf{D} \begin{pmatrix} \theta_1^* \\ \vdots \\ \theta_i^* + 1 \\ \vdots \\ \theta_m^* \end{pmatrix} \right] \quad (6.12)$$

und

$$\tilde{\boldsymbol{\psi}}_{\theta_i} = \begin{cases} \boldsymbol{\psi} \begin{pmatrix} \theta_1^* \\ \vdots \\ \theta_{i+1}^* \\ \vdots \\ \theta_m^* \end{pmatrix} - \boldsymbol{\psi} \begin{pmatrix} \theta_1^* \\ \vdots \\ \theta_i^* \\ \vdots \\ \theta_m^* \end{pmatrix} & \text{für } i = j \\ \frac{1}{2} \left[\boldsymbol{\psi}_{\theta_i}^Z \begin{pmatrix} \theta_1^* \\ \vdots \\ \theta_i^* \\ \vdots \\ \theta_m^* \end{pmatrix} + \boldsymbol{\psi}_{\theta_i}^Z \begin{pmatrix} \theta_1^* \\ \vdots \\ \theta_i^* + 1 \\ \vdots \\ \theta_m^* \end{pmatrix} \right] & \text{für } i \neq j \end{cases} \quad (6.13)$$

Nach der Beschreibung des implementierten Finite Differenzen Verfahrens soll nun auf das Interpolationsverfahren eingegangen werden, dessen Potenzial im Zuge dieser Arbeit untersucht wurde. Die Idee beruht darauf, die an den Stützstellen θ_i vorliegenden Werte einzelner Zustandsgrößen $\psi^j(\theta_i)$ durch glatte, differenzierbare Interpolationsfunktionen Φ^j anzunähern, die sich aus der Summe gewichteter Ansatzfunktionen f^j zusammensetzen [92]. Hierdurch wird eine

komplette analytische Darstellung der REDIM-Zustände $\psi(\boldsymbol{\theta})$ ermöglicht, was vorteilhaft gegenüber der zuvor diskutierten Gitter-Diskretisierung einer REDIM ist. Aus der Differenzierung von $\Phi = (\Phi^1, \dots, \Phi^n)^T$ ergeben sich dann die Approximationen für ψ_θ und den Diffusionsterm, welche für die numerische Lösung der REDIM-Entwicklungsgleichung verwendet werden.

Die Motivation für die Verwendung von Interpolationsfunktionen für die Approximation der REDIM-Entwicklungsgleichung geht aus der Tatsache hervor, dass REDIMs typischerweise durch eine glatte Struktur und eine charakteristische Form im Zustandsraum gekennzeichnet sind, die keine Diskontinuitäten oder extreme Krümmungen aufweist (siehe Abbildung 6.2). Zudem zeigen numerische Experimente, dass während der Integration der REDIM-Entwicklungsgleichung diese Charakteristik erhalten bleibt und keine starken Veränderungen innerhalb der lokalen Struktur zu erwarten sind. Das Ziel ist es daher, durch die Wahl geeigneter Ansatzfunktionen eine sehr genaue Beschreibung der REDIM auf Basis einer möglichst geringen Anzahl an Gitterpunkten bzw. Ansatzfunktionen zu erhalten [93]. Hierdurch wird sowohl die Verwendung größerer Zeitschrittweiten bei der zeitlichen Integration [94] als auch eine besonders effiziente Implementierung der REDIM in das reduzierte Modell ermöglicht (Abschnitt 6.4).

Für die Bestimmung der Interpolationsfunktionen Φ^j muss folgende Interpolationsaufgabe gelöst werden [92]

$$\Phi^j(\boldsymbol{\theta}_i) = \psi^j(\boldsymbol{\theta}_i); \quad i = 1, \dots, n_p; \quad j = 1, \dots, n, \quad (6.14)$$

$$\Phi^j(\boldsymbol{\theta}) = \sum_{k=1}^{n_p} c_k^j f_k(\boldsymbol{\theta}), \quad (6.15)$$

mit den zu bestimmenden Gewichtungskoeffizienten c_k^j für jede zu approximierende Zustandsgröße ψ^j und den für alle Zustandsgrößen gültigen Ansatzfunktionen f_k . Aus Gleichung 6.14 und 6.15 ergibt sich in Matrix-Schreibweise [92]

$$\mathbf{f} \mathbf{c}^j = \begin{pmatrix} \psi^j(\boldsymbol{\theta}_1) \\ \vdots \\ \psi^j(\boldsymbol{\theta}_{n_p}) \end{pmatrix}; \quad j = 1, \dots, n \quad (6.16)$$

mit der quadratischen Matrix \mathbf{f} der Ansatzfunktionen [92]

$$\mathbf{f} = \begin{pmatrix} f_1(\boldsymbol{\theta}_1) & \dots & f_{n_p}(\boldsymbol{\theta}_1) \\ \vdots & & \vdots \\ f_1(\boldsymbol{\theta}_{n_p}) & \dots & f_{n_p}(\boldsymbol{\theta}_{n_p}) \end{pmatrix} \quad (6.17)$$

und $\mathbf{c}^j = (c_1^j, \dots, c_{n_p}^j)^T$ als dem Vektor der Koeffizienten. Dieser lässt sich durch die Multiplikation von Gleichung 6.16 mit der Inversen \mathbf{f}^{-1} von links berechnen [92]

$$\mathbf{c}^j = \mathbf{f}^{-1} \begin{pmatrix} \psi^j(\boldsymbol{\theta}_1) \\ \vdots \\ \psi^j(\boldsymbol{\theta}_{n_p}) \end{pmatrix}; \quad j = 1, \dots, n. \quad (6.18)$$

Auf Basis der an den Gitterpunkten $(\theta_1, \dots, \theta_{n_p})$ vorliegenden Zustandswerte ψ^j der j -ten Zustandsgröße wird mit Hilfe von Gleichung 6.18 und Gleichung 6.15 die Interpolationsfunktion $\Phi^j(\boldsymbol{\theta})$ gebildet. Damit können Werte von $\psi^j(\boldsymbol{\theta})$ auch zwischen den diskreten Gitterpunkten bestimmt werden.

Im Falle einer eindimensionalen REDIM hängen die Ansatzfunktionen nur von einer Parametrisierungsvariablen θ_1 ab, sodass $f_i = f_i(\theta_1)$ mit $i = 1, \dots, n_p$. Für den m -dimensionalen Fall werden zunächst entsprechend der eindimensionalen REDIM Ansatzfunktionen gebildet, die nur von den jeweiligen Koordinatenrichtungen θ_i abhängen. Anschließend ergeben sich die globalen Ansatzfunktionen aus dem dyadischen Produkt [86] der für die jeweilige Koordinatenrichtung aufgestellten Ansatzfunktionen. Diese Vorgehensweise leitet sich aus dem Sachverhalt ab, dass die Gesamtanzahl an Gitterpunkten n_p für die verwendeten Rechteckgitter aus dem Produkt der Gitterpunktanzahl in die jeweiligen Koordinatenrichtungen resultiert.

Für eine zweidimensionale REDIM ergibt sich beispielsweise unter Verwendung der Ansatzfunktionen f_{k_1} für die erste Koordinatenrichtung θ_1 und f_{k_2} für die zweite Koordinatenrichtung θ_2

$$f_i = f_{k_1} \cdot f_{k_2}; \quad k_1 = 1, \dots, n_{\theta_1}; \quad k_2 = 1, \dots, n_{\theta_2}, \quad (6.19)$$

mit n_{θ_1} als der Anzahl an Gitterpunkten in θ_1 -Richtung und n_{θ_2} als der Anzahl an Gitterpunkten in θ_2 -Richtung. Für den allgemeinen Fall folgt daraus

$$f_i = f_{k_1} \cdot f_{k_2} \cdot \dots \cdot f_{k_m}, \quad (6.20)$$

wobei für die einzelnen Ansatzfunktionen $f_{k_l} = f_{k_l}(\theta_l)$ gilt.

Die Approximation mit Hilfe gewichteter Ansatzfunktionen muss zum Zwecke der Implementierung in der REDIM-Entwicklungsgleichung für alle zu differenzierenden Terme durchgeführt werden. Dazu gehören neben den Zustandsgrößen $\boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{\theta})$ auch die im Diffusionsvektor 6.6 auftretenden Ausdrücke $(\mathbf{D}\boldsymbol{\psi}_\theta)$ und $\boldsymbol{\chi}$. Die Ableitungen ergeben sich demnach aus der Differenzierung der Interpolationsfunktion 6.15. So folgt z.B. für $\boldsymbol{\psi}_\theta$

$$\psi_{\theta_i}^j = \frac{\partial}{\partial \theta_i} \sum_{k=1}^{n_p} c_k^j f_k(\boldsymbol{\theta}) = \sum_{k=1}^{n_p} c_k^j \frac{\partial f_k(\boldsymbol{\theta})}{\partial \theta_i}; \quad i = 1, \dots, m; \quad j = 1, \dots, n. \quad (6.21)$$

Die größte Herausforderung bei der Verwendung von Interpolationsverfahren ist die Identifizierung geeigneter Ansatzfunktionen f , die eine möglichst genaue Approximation der REDIM basierend auf den zur Verfügung stehenden Gitterpunkten erlauben. So besitzen z.B. Interpolationspolynome die Eigenschaft, dass sie an den Rändern des zu interpolierenden Gebietes zum Aufschwingen neigen und daher für die Berechnung der Differentiale oftmals ungeeignet sind [93]. Um die Eignung verschiedener Ansatzfunktionen zu untersuchen, wurde im Rahmen dieser Arbeit eine objektorientierte Bibliothek in das bestehende Programmpaket implementiert, die den Zugriff auf unterschiedliche Ansatzfunktionen ermöglicht. Hierzu gehören neben den bereits genannten Polynomfunktionen auch Gauss-Funktionen, normierte Gauss-Funktionen sowie Tschebischew-Polynome [93]. Die implementierte Prozedur ermöglicht unabhängig von der Ansatzfunktionen die Bildung der ersten und zweiten Ableitungen sowie der darauf aufbauenden Approximationen des Diffusionsterms und des Projektionsoperators auf Basis von Gleichung 6.21. In Abschnitt 6.1.5 findet sie zudem Anwendung bei der Bildung der Ableitungen am REDIM-Rand, wofür Polynomfunktionen eingesetzt werden.

Im Rahmen einer studentischen Masterarbeit [95] wurde das Potenzial der beschriebenen Ansatzfunktionen für die Anwendung in der REDIM-Entwicklungsgleichung untersucht. Dabei erwiesen sich normierte Gauss-Funktionen [93] als besonders geeignet, weshalb diese im Folgenden näher vorgestellt werden sollen.

Für ein eindimensionales REDIM-Gitter mit n_p Gitterpunkten lautet die Gleichung für die n_p normierten Gauss-Ansatzfunktionen

$$f_i(\theta_1) = \frac{\exp\left(-\frac{(z(\theta_1)-z_i^*)^2}{\sigma^2}\right)}{\sum_{l=1}^{n_p} \exp\left(-\frac{(z(\theta_1)-z_l^*)^2}{\sigma^2}\right)}; \quad i = 1, \dots, n_p, \quad (6.22)$$

wobei z_i^* den Mittelwerten und σ der Standardabweichung entspricht [96], die hier für alle Ansatzfunktionen zu 1 gesetzt wird. Die Mittelwerte z_i^* legen die Lage der jeweiligen normierten Gauss-Funktion im Funktionenraum $z(\theta_1)$ fest und berechnen sich zu

$$z_i^* = (i - 1) \cdot (\ln(2))^{\frac{1}{2}}; \quad i = 1, \dots, n_p. \quad (6.23)$$

Hierdurch wird eine gleichmäßige Verteilung der normierten Gauss-Funktionen im Funktionenraum $z(\theta_1)$ gewährleistet, für den der lineare Zusammenhang

$$z(\theta_1) = \frac{\theta_{1,max} - \theta_{1,min}}{z_{max} - z_{min}} \theta_1 \quad (6.24)$$

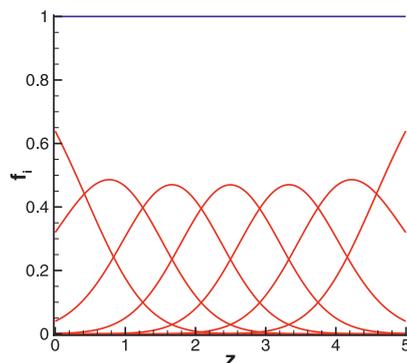


Abbildung 6.3.: Normierte Gauss-Funktionen nach Gleichung 6.22 verteilt im Funktionenraum z . Die Summe der Funktionen ergibt an jeder Stelle den Wert 1, was durch die blaue Linie wiedergegeben wird.

mit $z_{min} = 0$ und $z_{max} = (n_p - 1) \cdot (\ln(2))^{\frac{1}{2}}$ existiert. Durch die Anwendung der Transformation 6.24 wird die Implementierung der Ansatzfunktionen erleichtert, da hierdurch eine Skalierung der unabhängigen Variablen z im Falle einer veränderten Parametrisierung der REDIM verhindert wird. Zudem sorgt die Verteilung der Ansatzfunktionen auf Basis von Gleichung 6.23 in Verbindung mit den generalisierten Koordinaten dafür, dass die Maxima der Ansatzfunktionen stets an den Stützstellen der REDIM-Gitters lokalisiert sind. In Abbildung 6.3 ist die Verteilung von sieben normierten Gauss-Funktionen im Funktionenraum z dargestellt. Es ist zum einen die gleichmäßige Verteilung der Funktionen durch die Anwendung von Gleichung 6.23 zu erkennen. Zum anderen wird durch die schwarze Kurve die Summe aller Funktionen repräsentiert, die sich an jeder Stelle zu 1 ergibt. Dies ist eine direkte Folge der Normierung, woraus folgt

$$\sum_{i=1}^{n_p} f_i(\theta_1) = 1. \quad (6.25)$$

Abbildung 6.4 demonstriert die Anwendung normierter Gauss-Funktionen zur Darstellung einer eindimensionalen REDIM eines vorgemischten Synthesegas-Luft-Systems auf Basis von 17 Gitterpunkten. Dabei wird jede Zustandsgröße ψ^j separat mit Hilfe gewichteter normierter Gauss-Funktionen approximiert, sodass sich jeweils unterschiedliche Werte für die Koeffizienten ergeben. Die Abbildungen 6.4a zeigen repräsentativ die Approximationen von CO_2 , H_2O und HO_2 im Parameterraum. In Abbildung 6.4b ist die daraus resultierende approximierten eindimensionale REDIM in der dreidimensionalen CO_2 - H_2O - HO_2 -Projektion des Zustandsraums dargestellt. Es zeigt sich eine sehr genaue Approximation des in

6. Implementierung der REDIM-Methode

rot dargestellten eindimensionalen detaillierten Profils des vorgemischten Synthesegas-Luft-Systems. Eine wichtige Rolle bei der Approximation spielt dabei die Verteilung der Gitterpunkte. Im gezeigten Beispiel erfolgte die Parametrisierung der REDIM unter Anwendung des im letzten Abschnitt vorgestellten Verfahrens in Abhängigkeit der Bogenlänge. Dieses Parametrisierungsverfahren stellt sich im Hinblick auf eine Anwendung normierter Gauss-Funktionen in der REDIM-Entwicklungsgleichung als besonders zielführend heraus, wie das nachfolgende Beispiel veranschaulicht.

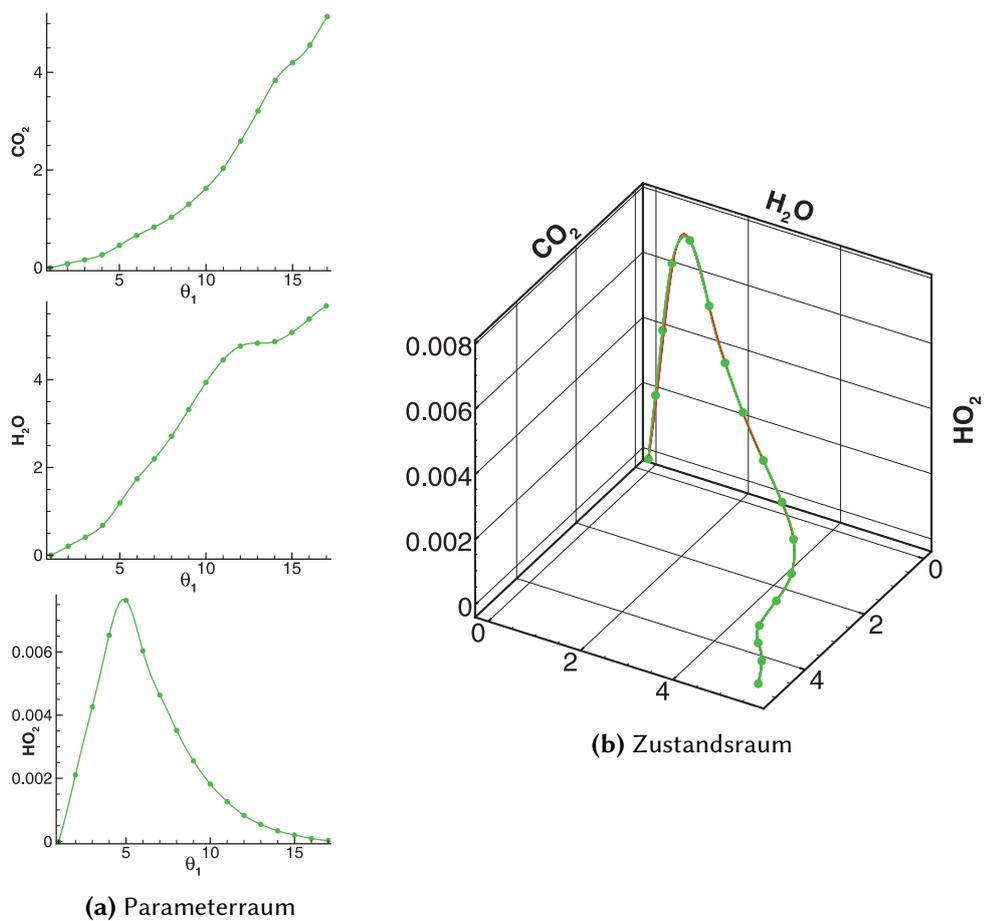


Abbildung 6.4.: Approximation eines eindimensionalen detaillierten Flammenprofils einer vorgemischten Synthesegas-Luft-Flamme mit Hilfe von 17 Interpolationsfunktionen. Die einzelnen Zustandsgrößen, hier stellvertretend durch CO_2 , H_2O und HO_2 dargestellt, werden im Parameterraum approximiert. Die Darstellung im Zustandsraum zeigt eine sehr gute Übereinstimmung mit dem detaillierten Flammenprofil (rot).

Unter der Anwendung normierter Gauss-Funktionen wird die Integration einer eindimensionalen REDIM-Entwicklungsgleichung ausgehend von der sogenannten Mischungslinie des vorgemischten Synthesegas-Luft-Systems betrachtet. Die Mischungslinie stellt dabei die lineare Verbindung zwischen dem unverbrannten Mischungszustand und dem chemischen Gleichgewicht im Zustandsraum dar [27] (siehe Abbildung 6.6). Die zeitliche Integration erfolgt mit dem im nächsten Abschnitt vorgestellten semi-impliziten Euler Verfahren, wobei die Schätzungen der Zustandsgradienten dem detaillierten stationären Flammenprofil des vorgemischten Systems entnommen werden (siehe Abbildung 6.4 oben, rotes Profil). In Folge dessen muss die stationäre Lösung der eindimensionalen REDIM-Entwicklungsgleichung dem stationären Profil des detaillierten Systems entsprechen, sodass ein Vergleich zwischen den REDIM-Zuständen und den detaillierten Zuständen eine Aussage über die Genauigkeit der numerischen REDIM-Integration ermöglicht.

Als Größe zur Bewertung der Genauigkeit der Integration wird der in Gleichung 6.26 definierte relative Fehler r_{rel}^j verwendet, der für jede Zustandsgröße ψ^1, \dots, ψ^n bestimmt werden kann

$$r_{rel}^j = \frac{\sum_{k=1}^{n_e} \sqrt{(\psi_k^{j,RD} - \psi_k^{j,det})^2}}{\sum_{k=1}^{n_e} \sqrt{(\psi_k^{j,det})^2}}; \quad j = 1, \dots, n. \quad (6.26)$$

Hierbei ist n_e die Anzahl an Punkten, an denen die Fehlerberechnung stattfindet,

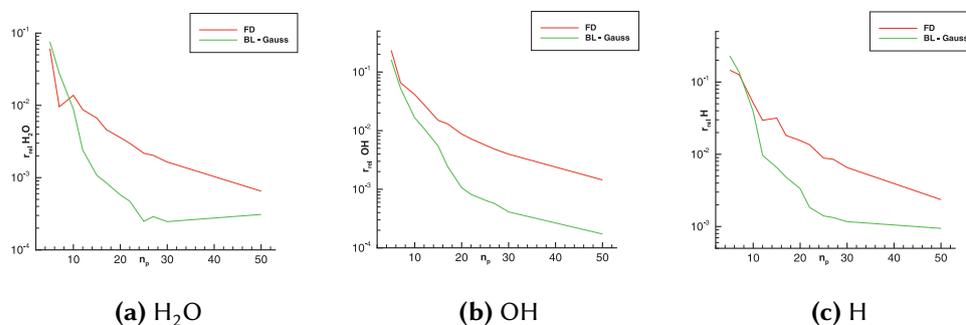


Abbildung 6.5.: Relativer Fehler (Gleichung 6.26) der stationären eindimensionalen REDIM eines vorgemischten Synthesegas-Luft-Systems bei der Verwendung Finiter Differenzen und des Gauss-basierten Interpolationsverfahrens. Die Parametrisierung erfolgt unter Anwendung des in Abschnitt 6.1.1 vorgestellten Verfahrens in Abhängigkeit der Bogenlänge.

$\psi^{j,RD}$ die Zustände der stationären REDIM und $\psi^{j,det}$ die als Referenz dienenden Zustände des detaillierten eindimensionalen Flammenprofils. Abbildung 6.5 stellt

die Abhängigkeit von r_{rel} von der Anzahl an REDIM-Gitterpunkten für das Finite-Differenzen-Verfahren sowie das Interpolationsverfahren für H_2O , OH und H dar. Die Fehlerberechnung basiert dabei auf in CO_2 -Richtung 400 äquidistant verteilten Zustandspunkten, sodass $n_e = 400$. Es ist zu sehen, dass die Verwendung des Gauss-basierten Interpolationsverfahrens bereits für 15 Gitterpunkte sehr genaue Ergebnisse sowohl bei der Approximation der Hauptspezies H_2O , als auch der Nebenspezies OH und H liefert. Die Genauigkeit kann durch die Verwendung zusätzlicher Gitterpunkte zwar für beide Methoden erhöht werden. Im Vergleich zur Finiten Differenzen Methode führt das Gauss-basierte Interpolationsverfahren allerdings ab einer Verwendung von 20 Stützpunkten zu einem um eine Größenordnung geringeren Fehlerterm. Ein wichtige Grundlage für die hohe Genauigkeit des Interpolationsverfahrens ist die Parametrisierung der REDIM nach der Bogenlänge mit Hilfe des im vorherigen Abschnitt vorgestellten Verfahrens. Hierdurch wird eine besonders gleichmäßige Punkteverteilung entlang der REDIM erreicht, die der Approximation mit Hilfe normierter Gauss-Funktionen zu Gute kommt.

Das hier vorgestellte eindimensionale Beispiel demonstriert das Potenzial der Anwendung von Interpolationsverfahren für die Integration der REDIM-Entwicklungsgleichung. Bei der Anwendung für die Integration von REDIMs höherer Dimension steigen jedoch die Anforderungen an das Interpolationsverfahren auf Grund der zusätzlich zu behandelnden Mannigfaltigkeitsränder und der schwieriger umzusetzenden Parametrisierung im Hinblick auf eine möglichst genaue Approximation. Hier gilt es im Rahmen zukünftiger Forschung die Anwendung weiter verbesserter Parametrisierungsstrategien sowie weiterer Funktionsarten für die Integration m -dimensionaler REDIMs zu untersuchen [93].

6.1.3. Semi-implizites zeitliches Lösungsverfahren

Auf Grund der Existenz des Diffusionsterms stellt die REDIM-Entwicklungsgleichung ein steifes parabolisches Gleichungssystem dar, für dessen Lösung idealerweise ein voll-implizites numerisches Verfahren verwendet werden sollte. Der Grund hierfür ist die hohe Steifigkeit des chemischen Quellterms sowie die Beschränkung der Zeitschrittweite expliziter Methoden bedingt durch die Diskretisierung des Diffusionsterms und ψ_θ [22]. Allerdings gehen voll-implizite Verfahren stets mit der Zerlegung sehr großer Matrizen einher [1], sodass aufwändige Methoden für die lineare Algebra benötigt werden [22]. Erschwerend kommt hinzu, dass Routinen für die Invertierung dünn besetzter Iterationsmatrizen in voll-impliziten Methoden für beliebige Dimensionen der REDIM ausgelegt sein müssten.

Aus diesen Gründen wird für die zeitliche Integration der REDIM-Entwicklungsgleichung ein semi-implizites Verfahren angewendet, das den chemischen Quellterm semi-implizit und den Diffusionsterm explizit behandelt [22, 23, 26, 84, 85]. Es handelt sich hierbei um ein semi-implizites Euler Verfahren erster Ordnung, das durch folgendes Schema beschrieben wird [22]

$$\psi^{i+1} - \psi^i = HP(\psi^i) (\mathbf{F}(\psi^i) + \mathbf{F}_\psi(\psi^i)(\psi^{i+1} - \psi^i) + \Xi(\psi^i)). \quad (6.27)$$

Hierbei entsprechen ψ^i und ψ^{i+1} den $(n \cdot n_p)$ -dimensionalen Zustandsvektoren zum aktuellen bzw. nächstfolgenden Zeitpunkt und n_p der Anzahl an Gitterpunkten. Weiterhin sind H die Zeitschrittweite, \mathbf{F}_ψ die Jacobi-Matrix des chemischen Quellterms und $\Xi(\psi^i) = (\mathbf{D}\psi_\theta\chi)_\theta \chi$ der Diffusionsvektor. Eine Umformung nach ψ^{i+1} liefert

$$\psi^{i+1} = \psi^i + H (\mathbf{I} - HP(\psi^i)\mathbf{F}_\psi(\psi^i))^{-1} \mathbf{P} (\mathbf{F}(\psi^i) + \Xi(\psi^i)). \quad (6.28)$$

Bei der numerischen Integration mit Hilfe von Gleichung 6.28 kann es bei der Wahl zu großer Zeitschrittweiten zu Instabilitäten und damit zur Divergenz des Verfahrens kommen [94, 97]. Die maximale Zeitschrittweite ist daher begrenzt und muss in Abhängigkeit des Anwendungsfalls angepasst werden. Eine Begründung hierfür liefert die *Courant-Friedrichs-Lewy-Bedingung* (CFL), die das Verhältnis von Zeitschrittweite und Gitterweite bei der numerischen Integration partieller Differentialgleichungen beschreibt [94]. Die CFL-Zahl darf dabei einen maximalen Wert nicht überschreiten, um ein Divergieren des numerischen Verfahrens zu verhindern. In den im Rahmen dieser Arbeit betrachteten Anwendungsfällen und implementierten Gitterweiten haben sich Zeitschrittweiten von 10^{-10} s bis 10^{-6} s als geeignet herausgestellt, um eine Verletzung der CFL-Bedingung zu vermeiden.

In Abschnitt 5.1.1 wird erläutert, dass die Integration der REDIM-Entwicklungsgleichung für $t \rightarrow \infty$ die in Abhängigkeit der Gradientenschätzung χ bestmögliche Approximation der langsamen invarianten Mannigfaltigkeit des detaillierten PDE-Systems 2.8 liefert. Die praktische Umsetzung einer Integration bis $t \rightarrow \infty$ mit dem in Gleichung 6.28 beschriebenen semi-impliziten Verfahren konstanter Zeitschrittweite ist allerdings aus zweierlei Gründen nicht erstrebenswert. Zunächst würde dies einer unendlichen Anzahl an Integrationsschritten mit der Zeitschrittweite H entsprechen und wäre folglich nicht im Sinne einer effizienten Implementierung der REDIM in reduzierten numerischen Berechnungen. Es gilt daher, die Integrationsdauer sinnvoll zu beschränken, ohne jedoch die Genauigkeit der REDIM-baiserten reduzierten Berechnungen herabzusetzen. Man ist somit an einer approximativen Lösung interessiert, die ein optimales Verhältnis zwischen Integrationszeit und Genauigkeit darstellt. Darüber hinaus kann es bei zu lang gewählter Integrationszeit dazu kommen, dass die für die

charakteristische Systemdynamik nicht relevanten langsamsten Prozesse durch die REDIM-Entwicklungsgleichung identifiziert werden. Abbildung 3.5 gibt Aufschluss über die Zeitskalen chemisch-physikalischer Prozesse in reagierenden Strömungen und erlaubt die anschauliche Erläuterung dieses Sachverhalts.

Die gekoppelte Dynamik chemisch reagierender Strömungen, deren genaue Beschreibung das Ziel der REDIM-Methode ist, entfaltet sich gemäß Abbildung 3.5 in einem Zeitskalenbereich von 10^{-5} s bis 10^{-2} s. Hier koppeln chemische und physikalische Prozesse stark miteinander, während die schnellsten chemischen Prozesse der Zündung bereits abgeschlossen sind. Der Zeitskalenbereich von 10^{-2} s bis 1 s beschreibt dagegen die Geschwindigkeit, mit der sich z.B. chemische Elemente auf Grund detaillierter Diffusionsprozesse verändern. Diese langsamen Prozesse haben keinen Einfluss auf die charakteristische Dynamik koppelnder chemisch-physikalischer Vorgänge und können in diesem Kontext als quasi-konstant angesehen werden. Dies gilt insbesondere im Bereich des chemischen Gleichgewichts, in dem chemische Prozesse auf Grund verschwindender Zustandsgradienten dominieren. Eine zu lange Integrationszeitdauer würde jedoch im Falle detaillierter Transportprozesse dazu führen, dass die REDIM sich in Richtung der langsamsten Mannigfaltigkeit bewegt. Diese wird durch mehrere chemische Gleichgewichte beschrieben, die den entsprechenden unterschiedlichen Elementarzusammensetzungen als Folge der detaillierten Diffusion entsprechen. Dieses Szenario ist ein natürliches Ergebnis der REDIM-Entwicklungsgleichung, ist jedoch für die Anwendung der REDIM uninteressant. Aus diesem Grund ist es sinnvoll, insbesondere bei der Berücksichtigung detaillierter Diffusionsprozesse, die Integrationszeit auf unter 10^{-2} s zu beschränken.

Eine Analyse des Konvergenzverhaltens bei der Integration der REDIM-Entwicklungsgleichung zeigt, dass bereits nach einer kürzeren Integrationszeit als 10^{-2} s von davon ausgegangen werden kann, dass die schnellen Zeitskalen abgeklungen sind. Hierfür werden drei geeignete Kenngrößen definiert, die die globale dynamische Entwicklung der REDIM in Richtung ihrer stationären Lösung abbilden.

- Das Verhältnis δ_{inv} zwischen der euklidischen Norm [87] von $P\tilde{\phi}$ und der euklidischen Norm von $\tilde{\phi}$ gibt an, welcher Anteil des Vektorfeldes ϕ für die Entwicklung der REDIM in Richtung des Normalraums ψ_{θ}^{\perp} verantwortlich ist

$$\delta_{inv} = \frac{\|P\tilde{\phi}\|}{\|\tilde{\phi}\|}. \quad (6.29)$$

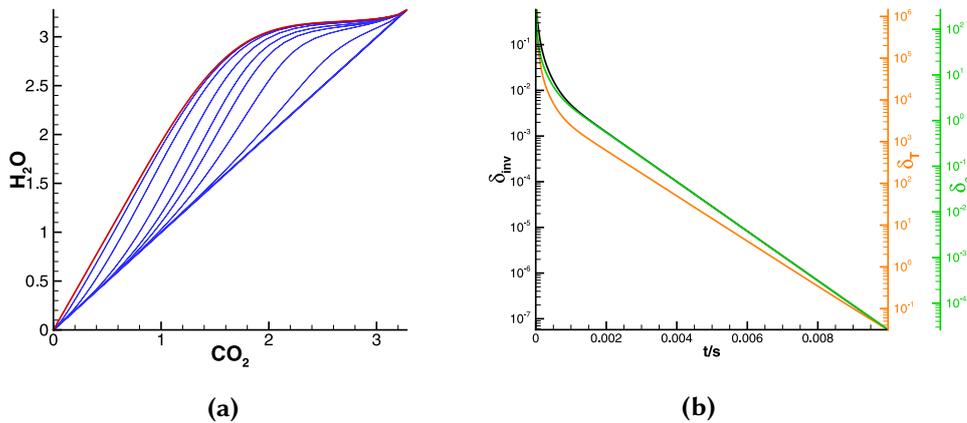


Abbildung 6.6.: Integration der REDIM-Entwicklungsgleichung für eine eindimensionale REDIM eines vorgemischten Synthesegas-Luft-Systems unter Anwendung des semi-impliziten Eulerverfahrens, Gleichung 6.28. Die Integration startet von der Mischungslinie (fette blaue Linie in 6.6a), die die lineare Verbindung zwischen chemischem Gleichgewicht und unverbrannter Mischungszusammensetzung darstellt. (a): Bewegung der REDIM (blaue Profile) dargestellt in einer CO_2 - H_2O -Projektion des Zustandsraums. Das rote Profil entspricht der stationären Lösung bzw. dem detaillierten Flammenprofil. Das letzte blaue Profil stellt die REDIM Position nach 10^{-3} s dar. (b): Logarithmischer Verlauf der Größen δ_{inv} , δ_T und δ_ρ in Abhängigkeit der Integrationszeit.

Dies entspricht dem Kosinus des Winkels zwischen $\mathbf{P}\tilde{\phi}$ und $\tilde{\phi}$, der zu Null wird, wenn der Winkel 90° beträgt bzw. wenn $\mathbf{P}\tilde{\phi} = \mathbf{0}$ ist und somit die Invarianzbedingung erfüllt wird.

- Die globale Veränderung der Temperatur δ_T wird definiert als

$$\delta_T = \frac{\overline{\Delta T}}{H}, \quad (6.30)$$

wobei $\overline{\Delta T} = \frac{1}{n_p} \sum_{j=1}^{n_p} |T_j^{i+1} - T_j^i|$, mit n_p als der Anzahl an REDIM-Gitterpunkten.

- Analog dazu wird die globale Veränderung der Dichte δ_ρ definiert als

$$\delta_\rho = \frac{\overline{\Delta \rho}}{H}. \quad (6.31)$$

Abbildung 6.6a zeigt die Entwicklung einer eindimensionalen REDIM einer vorgemischten Synthesegas-Luft-Flamme in der CO_2 - H_2O -Projektion des Zustandsraums während der Integration. Um den Einfluss einer unterschiedlichen

Elementzusammensetzung auf die Integration zu vermeiden, wird das vereinfachte Diffusionsmodell auf Basis gleicher Diffusivitäten und $Le = 1$ angewendet. Als Anfangsmannigfaltigkeit wird die Mischungslinie gewählt, welche die lineare Verbindung zwischen der Zusammensetzung im chemischen Gleichgewicht und in der unverbrannten Mischung darstellt (dicke blaue Linie). Das letzte blaue Profil zeigt die Position der eindimensionalen REDIM während der Entwicklung nach 10^{-3} s. In der gewählten zweidimensionalen Darstellung der Hauptspezies CO_2 und H_2O ist dabei nur noch eine geringe Abweichung im Vergleich zum roten Profil zu erkennen, das die Position der REDIM nach 10^{-2} s kennzeichnet. In Abbildung 6.6b sind die Verläufe von δ_{inv} , δ_T und δ_ρ in logarithmischer Darstellung wiedergegeben.

Es ist zu erkennen, dass alle drei Kenngrößen innerhalb von 10^{-3} s um ca. zwei Größenordnungen abnehmen, sodass von einer konvergierten Rechnung ausgegangen werden kann. δ_{inv} erlaubt dabei eine quantitative Beurteilung des Konvergenzverhaltens, da es den Anteil des Vektorfeldes $\tilde{\phi}$, der für die Entwicklung der REDIM in Zustandsraum verantwortlich ist, mit dem gesamten Vektorfeld in Verhältnis setzt. Der Wert von δ_{inv} sinkt nach 10^{-3} s auf unter 0,5%, sodass eine genügend genaue Approximation der langsamen Systemdynamik durch die REDIM angenommen werden kann.

An dieser Stelle ist es wichtig zu erwähnen, dass das in Abbildung 6.6 dargestellte Beispiel einen besonders kritischen Fall einer Anfangslösung repräsentiert, da diese durch einen großen Abstand zur eindimensionalen REDIM gekennzeichnet ist. Durch die Wahl einer geeigneteren Anfangslösung kann die Integrationszeit demnach signifikant verkürzt werden. Darüber hinaus sinkt die notwendige Integrationszeit mit steigender Dimension der REDIM. Dies lässt sich dadurch erklären, dass die Zeitskalen der für die Relaxation der REDIM im Zustandsraum verantwortlichen schnellen chemischen Prozesse mit zunehmender REDIM-Dimension kleiner werden. Hierdurch erhöht sich die Geschwindigkeit, mit der die REDIM sich in Richtung ihrer stationären Lösung bewegt. In Abschnitt 7.1 wird dieser Sachverhalt anhand REDIMs unterschiedlicher Dimension untersucht und bestätigt.

6.1.4. Praktische Methoden für die Schätzung der Zustandsgradienten

Die Schätzung der lokalen Gradienten χ ergibt sich gemäß Abschnitt 5.1.2 aus der Projektion $\psi_\theta^+ \xi$ der Abschätzung der Zustandsgradienten ξ auf die REDIM. Als Basis für die Abschätzungen ξ wird eine Mannigfaltigkeit \mathcal{M}_{gr} definiert, an deren Zuständen ψ^{gr} die Vektoren $\xi(\psi^{gr})$ vorliegen, die während der Integration der

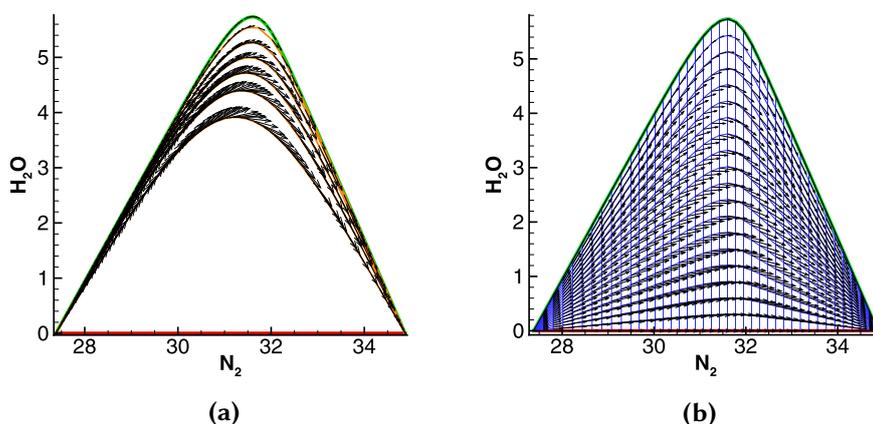


Abbildung 6.7.: Vorgehen bei der Erstellung einer zweidimensionalen Mannigfaltigkeit \mathcal{M}_{gr} für eine Wasserstoff-Luft-Gegenstromflamme, dargestellt in einer N_2 - H_2O -Projektion des Zustandsraums. (a): Stationäre Flamelets bei unterschiedlichen Streckungsraten. Das grüne Profil ergibt sich durch die geringste Streckungsrate, das rote Profil entspricht der verlöschten Flamme. Die Vektorpfeile stellen die zweidimensionale Projektion $(\text{grad}(\varphi_{N_2}), \text{grad}(\varphi_{H_2O}))^T$ des Gradientenvektors $\text{grad}(\psi)$ dar. (b): Interpolation der Zustände und des Gradientenfeldes auf ein zweidimensionales Gitter (blau), das durch die kritischen Profile umrandet wird. Einheiten der spezifischen Molzahlen φ in mol kg^{-1} .

REDIM-Entwicklungsgleichung entsprechenden REDIM-Zuständen zugeordnet werden.

Obwohl die Sensitivität der REDIM in Bezug auf die Schätzung der Zustandsgradienten mit steigender Dimension abnimmt (siehe Abschnitt 5.1.2) [22], ist es für die Genauigkeit reduzierter Berechnungen stets vorteilhaft, wenn die auf \mathcal{M}_{gr} zur Verfügung gestellten Schätzungen das Gradientenspektrum der jeweiligen Anwendung möglichst genau wiedergeben. Hierfür bietet es sich an, \mathcal{M}_{gr} auf Basis detaillierter eindimensionaler Flammenprofile bzw. Flamelets [25, 42, 85] zu konstruieren, wofür in dieser Arbeit das Programm INSFLA [29] eingesetzt wurde.

Für vorgemischte eindimensionale Flammen existiert systembedingt nur eine stationäre Lösung, die als eindimensionale Mannigfaltigkeit \mathcal{M}_{gr} bei der Integration der REDIM-Entwicklungsgleichung verwendet werden kann. Im Falle nicht-vorgemischter Gegenstromflammen können durch die Variation der Streckungsrate bzw. des tangentialen Druckgradienten [1] mehrere stationäre 1D-Profilen erstellt werden, die sich durch anschließende Interpolation zu einer zweidimensionalen Mannigfaltigkeit \mathcal{M}_{gr} zusammenfassen lassen [42, 85]. Abbildung 6.7

demonstriert das beschriebene Vorgehen anhand einer nicht-vorgemischten H_2 - N_2 -Luft Gegenstromflamme in einer zweidimensionalen N_2 - H_2O -Projektion des Zustandsraums. Die in Abbildung 6.7a gezeigten Flamelets ergeben sich ausgehend vom grünen Profil durch die sukzessive Erhöhung der Streckungsrate. Das rote Profil stellt die verlöschte Flamme dar. Die Vektorpfeile repräsentieren die zweidimensionale Projektion $(\text{grad}(\varphi_{\text{N}_2}), \text{grad}(\varphi_{\text{H}_2\text{O}}))^T$ des gesamten Gradientenvektors $\text{grad}(\psi)$. Es ist zu erkennen, dass die Gradientenvektoren tangential zu den eindimensionalen Profilen sind. Darüber hinaus spiegelt sich der Einfluss der erhöhten Streckungsrate in der größer werdenden Länge der Vektorpfeile wieder, wodurch der stärker werdende Einfluss von Diffusionsprozessen dokumentiert wird. In Abbildung 6.7b ist das Gitter dargestellt, das sich aus der linearen Interpolation der einzelnen Flamelets ergibt. Die Vektoren zeigen dabei die interpolierten Gradienten an, die nun an den jeweiligen Punkten des erzeugten Gitters vorliegen. Es ist zu sehen, dass das Gitter die charakteristische Verteilung der Flamelet-Gradienten auf Grund der Interpolation korrekt wiedergibt.

In Analogie zur REDIM liegt \mathcal{M}_{gr} gemäß Abbildung 6.7 in diskreter Form vor. Es muss daher ein geeignetes Verfahren abgeleitet werden, mit dem $\xi(\psi^{gr})$ den zugehörigen Gitter- bzw. Zustandspunkten der REDIM zugeordnet werden können. Die naheliegendste Vorgehensweise besteht hierbei darin, den zu einem REDIM-Punkt $\psi^* = \psi(\theta^*)$ nächsten Punkt ψ^{gr*} auf \mathcal{M}_{gr} zu finden, um den dort vorliegenden Zustandsgradienten $\text{grad}(\psi^{gr*})$ als Schätzung $\xi(\theta^*)$ zu verwenden [28, 42].

Seien ψ_i^{gr} die Zustände an den $i = 1, \dots, n_{gr}$ diskreten Punkten auf \mathcal{M}_{gr} . Für die Schätzung der Zustandsgradienten $\xi(\theta^*)$ an einem REDIM-Punkt $\psi(\theta^*)$ ergibt sich

$$\xi(\theta^*) = \text{grad}(\psi^{gr*}) \quad (6.32)$$

mit

$$\psi^{gr*} = \min(\|\psi(\theta^*) - \psi_i^{gr}\|); i = 1, \dots, n_{gr}. \quad (6.33)$$

Dabei entspricht $\|\psi(\theta^*) - \psi_i^{gr}\|$ der Norm des Abstandes zwischen dem REDIM-Zustand $\psi(\theta^*)$ und den \mathcal{M}_{gr} -Zuständen ψ_i^{gr} und n_{gr} der Anzahl an Punkten auf \mathcal{M}_{gr} .

Zur Bestimmung korrespondierender Zustände auf \mathcal{M}_{gr} kann eine abgewandelte Form von Gleichung 6.33 verwendet werden, die bei der Berechnung des Abstandes nur einzelne Spezies berücksichtigt. In der Regel handelt es sich hierbei um Hauptspezies, die auf Grund ihrer höheren Konzentration ohnehin schon einen größeren Einfluss auf die Berechnung von $\|\psi(\theta^*) - \psi^{gr*}\|$ im Vergleich zu Minoritätenspezies aufweisen [42]. Seien z.B. ψ_3 und ψ_4 zwei relevante Haupt-

spezies, auf Basis derer korrespondierende Zustände bestimmt werden sollen. Dann ergibt sich

$$\psi^{gr*} = \min (\|\text{diag}(\mathbf{m})(\psi(\boldsymbol{\theta}^*) - \psi_i^{gr})\|); i = 1, \dots, n_{gr}. \quad (6.34)$$

mit dem Vektor $\mathbf{m} = (0, 0, 1, 1, 0, \dots, 0)$ [42].

Eine Weiterentwicklung der Suchalgorithmen 6.33 und 6.34 ergibt sich durch die Anwendung eines Interpolationsverfahrens, mit dem die Gradienten $\text{grad}(\psi_{gr})$ zwischen den Gitterpunkten von \mathcal{M}_{gr} linear interpoliert werden. Die dabei verfolgte Vorgehensweise wird in Abbildung 6.8 dokumentiert. Zunächst wird mit Hilfe von Gleichung 6.33 oder Gleichung 6.34 der auf \mathcal{M}_{gr} liegende nächste Punkt zum REDIM-Zustand $\psi(\boldsymbol{\theta}^*)$ ermittelt. Durch die Einführung generalisierter Koordinaten $\tilde{\boldsymbol{\theta}}$ für \mathcal{M}_{gr} lässt sich am zu $\psi(\boldsymbol{\theta}^*)$ korrespondierenden Punkt $\psi^{gr*} = \psi^{gr}(\tilde{\boldsymbol{\theta}}^*)$ die Ableitung $\psi_{\tilde{\boldsymbol{\theta}}}^{gr}$ bilden. Hierfür können zum einen Zentralfdifferenzen (Abbildung 6.8a) und zum anderen Vorwärts- bzw. Rückwärtsdifferenzen (Abbildung 6.8b) verwendet werden. Durch die Anwendung von $(\psi_{\tilde{\boldsymbol{\theta}}}^{gr})^+$ wird der Verbindungsvektor zwischen $\psi(\boldsymbol{\theta}^*)$ und $\psi^{gr}(\tilde{\boldsymbol{\theta}}^*)$ auf $\psi_{\tilde{\boldsymbol{\theta}}}^{gr}$ projiziert und der dadurch entstandene Vektor in den lokalen Parameterraum abgebildet. Es ergibt sich dadurch der Parametervektor $\Delta\tilde{\boldsymbol{\theta}}$ an der Stelle $\tilde{\boldsymbol{\theta}}^*$. Die Verwendung von Vorwärts- bzw. Rückwärtsdifferenzen ermöglicht dabei die Bestimmung des kleinsten Abstandes zwischen den beiden Mannigfaltigkeiten. Allerdings muss hierbei zunächst überprüft werden, welches der beiden Differenzenschemata verwendet werden soll, um den gewünschten minimalen Abstand zu erhalten. Eine mögliche Vorgehensweise hierfür resultiert aus der Analyse der Vorzeichen der Koordinaten $\Delta\tilde{\theta}_i$. Sind diese z.B. im Falle von Vorwärtsdifferenzen positiv, so kann die Berechnung von $\psi_{\tilde{\boldsymbol{\theta}}}^{gr}$ auf Basis von Vorwärtsdifferenzen erfolgen. Bei negativem Vorzeichen müssen die Ableitungen dagegen mit Hilfe von Rückwärtsdifferenzen bestimmt werden. Die hier beschriebene Unterscheidung kann für Zentralfdifferenzen entfallen.

Nach der Bestimmung von $\Delta\tilde{\boldsymbol{\theta}}$ kann der Gradientenvektor an der Stelle $\tilde{\boldsymbol{\theta}}^* + \Delta\tilde{\boldsymbol{\theta}}$ mit Hilfe von Gleichung 6.35 berechnet werden, der dann als Schätzung der Zustandsgradienten am REDIM-Zustand $\psi(\boldsymbol{\theta}^*)$ verwendet wird.

$$\boldsymbol{\xi}(\boldsymbol{\theta}^*) = \text{grad}(\psi^{gr})(\tilde{\boldsymbol{\theta}}^*) + \Delta\tilde{\boldsymbol{\theta}} \cdot \frac{\partial(\text{grad}(\psi^{gr})(\tilde{\boldsymbol{\theta}}^*))}{\partial\tilde{\boldsymbol{\theta}}}. \quad (6.35)$$

Bei der Anwendung der oben beschriebenen Zuordnungsverfahren müssen die Dimensionen von \mathcal{M}_{gr} und der REDIM nicht übereinstimmen. Hierdurch lassen sich z.B. für laminare Vormischflammen, für die es nur eine mögliche

6. Implementierung der REDIM-Methode

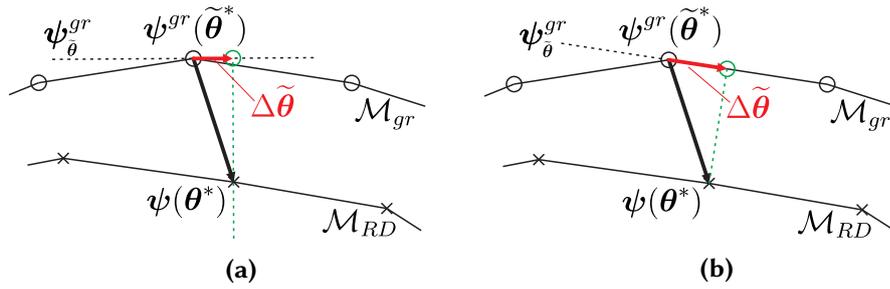


Abbildung 6.8.: Interpolationsverfahren zur verbesserten Berechnung der Schätzung für die Zustandsgradienten ξ , die an den Gitterpunkten von \mathcal{M}_{gr} vorliegen. $\tilde{\theta}$ ist die Parametrisierung von \mathcal{M}_{gr} . $\psi^{gr}(\tilde{\theta}^*)$ ist der zu $\psi(\theta^*)$ korrespondierende Zustand auf \mathcal{M}_{gr} . Der Verbindungsvektor wird auf ψ_{θ}^{gr} projiziert und ξ unter Anwendung von Gleichung 6.35 zwischen den Gitterpunkten von \mathcal{M}_{gr} bestimmt. (a): Verwendung von Zentralfdifferenzen. (b): Verwendung von Vorwärtsdifferenzen führt auf den minimalen Abstand.

stationäre Lösung des eindimensionalen Profils gibt, ebendieses als Grundlage für die Schätzung der Zustandsgradienten in einer zwei- oder gar dreidimensionalen REDIM verwenden.

Die Verwendung detaillierter eindimensionaler Flammenprofile besitzt zwar Vorteile im Hinblick auf eine genaue Schätzung für die Zustandsgradienten, ist allerdings gleichzeitig mit zusätzlichem Berechnungsaufwand im Vorfeld der REDIM-Integration verbunden. Eine vereinfachte Vorgehensweise lässt sich durch die Anwendung von Gleichung 5.23 verfolgen. Hierdurch gehen nur die Gradienten einzelner Hauptspezies in die Berechnung von χ ein, sodass auch nur diese bei der Integration der REDIM-Entwicklungsgleichung bereitgestellt werden müssen.

So lassen sich z.B. im Falle einer vorgemischten laminaren Syngasflamme die Gradienten von CO_2 und H_2O unter der Annahme vollständiger Brennstoffumsetzung mit Hilfe der Bruttoreaktion für die Synthesegas-Luft-Verbrennung und der Flammendicke [98] bestimmen. Für die maximalen Gradienten von CO_2 und H_2O folgt demnach [28]

$$\text{grad}(\psi^{gr})_{max} = \frac{\psi^{eq} - \psi^0}{d_f}, \quad (6.36)$$

wobei ψ^{eq} und ψ^0 den spezifischen Molzahlen von CO_2 oder H_2O im chemischen Gleichgewicht bzw. in der unverbrannten Mischung und d_f der Flammendicke entsprechen [98, 99]. Weiterhin gilt sowohl in der unverbrannten Mischung, als auch im chemischen Gleichgewicht $\text{grad}(\psi_{gr}) = 0$. In Kombination mit $\text{grad}(\psi_{gr})_{max}$ lässt sich damit die Gradientenverteilung in Form eines funktio-

nalen Zusammenhangs in Abhängigkeit von CO_2 oder H_2O ableiten und unter Anwendung von Gleichung 6.34 für die Bestimmung von χ verwenden [28].

Unter Anwendung der in diesem Abschnitt vorgestellten Methoden werden die Schätzungen ξ sowohl für das Innere, als auch für den Rand der REDIM ermittelt. Gemäß Abschnitt 5.1.3 gelten am Rand jedoch besondere Bedingungen, die sich auf die Berechnung der Schätzung der lokalen Gradienten χ aus ξ auswirken. Im nächsten Abschnitt wird erläutert, wie diese speziellen REDIM-Randbedingungen für das REDIM-Gitter implementiert werden.

6.1.5. Behandlung der Randpunkte

Den Erläuterungen aus Abschnitt 5.1.3 folgend, müssen für die Integration der REDIM-Entwicklungsgleichung spezielle Bedingungen für diejenigen Gitterpunkte implementiert werden, die physikalischen Rändern oder REDIM-Rändern entsprechen.

Abbildung 6.9 zeigt stationäre eindimensionale Profile der im Rahmen dieser Arbeit untersuchten vorgemischten Synthesegas-Luft-Flamme (a) sowie der nicht-vorgemischten Wasserstoff-Luft-Gegenstromflamme (b) in zweidimensionalen Projektionen des Zustandsraums. Es sind jeweils diejenigen Punkte gekennzeichnet, die gemäß Abschnitt 5.1.3 physikalischen Rändern entsprechen. Das vorgemischte System ist dabei durch eine Dirchlet-Randbedingung am Zustand der unverbrannten Mischung (Quadrat) und eine von-Neumann-Randbedingung am Zustand des chemischen Gleichgewichtes charakterisiert (Kreis). Dagegen müssen für das Gegenstromsystem zwei Dirchlet-Randbedingungen berücksichtigt werden, die sich jeweils an den Zuständen befinden, welche die beiden Einstromränder abbilden. Während der Integration müssen die durch Gleichung 5.26 und Gleichung 5.28 beschriebenen Bedingungen an den jeweiligen physikalischen Rändern implementiert werden. Die hier untersuchten Systeme weisen dabei die Eigenschaft auf, dass die physikalischen Randpunkte gleichzeitig auch Randpunkten der Mannigfaltigkeit entsprechen (siehe Abbildung 6.1).

Für die Punkte des REDIM-Randes, die nicht physikalischen Rändern entsprechen, gilt gemäß Abschnitt 5.1.3 die Bedingung, dass die Schätzungen $\xi(\theta^b)$ tangential zum Rand selbst sein müssen. Dies wird nach Gleichung 5.33 durch die orthogonale Projektion von $\xi(\theta^b)$ auf den durch ψ_β aufgespannten Tangentialraum des REDIM-Randes realisiert (siehe Abbildung 5.7)

$$\tilde{\xi}(\theta^b) = \psi_\beta \psi_\beta^+ \xi(\theta^b).$$

Im Zuge der numerischen Integration der REDIM-Entwicklungsgleichung muss diese Bedingung an jedem diskreten Randpunkt des REDIM-Gitters (siehe Abbildung 6.1) erfüllt werden. Zunächst werden hierfür die REDIM-Randpunkte

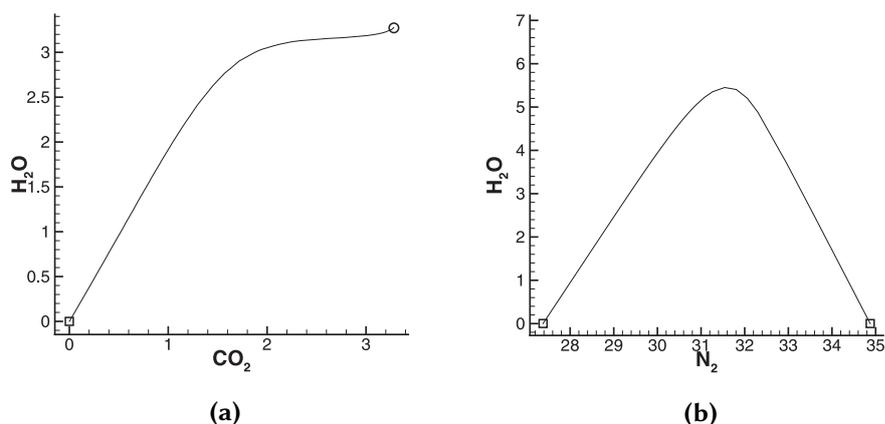


Abbildung 6.9.: Eindimensionale Flammenprofile einer vorgemischten Synthesegas-Luft-Flamme (a) und einer nicht-vorgemischten Wasserstoff-Luft-Gegenstromflamme (b) in zweidimensionalen Projektionen des Zustandsraums, Einheiten der spezifischen Molzahlen φ in mol kg^{-1} . Quadrate kennzeichnen Dirichlet-Randbedingungen an den Zuständen der unverbrannten Mischungen, der Kreis kennzeichnet das chemische Gleichgewicht, an dem eine von-Neumann-Randbedingung implementiert werden muss.

identifiziert, die im Vergleich zu Punkten im Inneren der REDIM weniger direkte Nachbarpunkte aufweisen.

Im Gegensatz zu den im Inneren liegenden Gitterpunkten wird zur Berechnung von ψ_β keine globale Parametrisierung für den REDIM Rand erstellt, sondern es wird auf Basis in der Umgebung liegender Nachbarrandpunkte ein lokales Koordinatensystem gebildet. Hierbei gilt es eine geeignete Methode zu entwickeln, mit der ψ_β unabhängig von der Art der Gitters möglichst effizient und genau bestimmt werden kann.

Die in dieser Arbeit verfolgte Vorgehensweise zur Bestimmung von ψ_β lässt sich folgendermaßen aufgliedern

- Definiere ein lokales $(m-1)$ -dimensionales Koordinatensystem am REDIM-Rand basierend auf $\psi(\theta^b)$ und in der Umgebung liegenden Randpunkten der Anzahl n_{nei}^b
- Bestimme die lokalen Koordinaten β der $(n_{nei}^b + 1)$ Randpunkte
- Approximiere $\psi(\beta)$ in der Umgebung von $\psi(\theta^b)$ durch Bildung geeigneter Interpolationsfunktionen auf Basis der Stützstellen $(\beta_1, \dots, \beta_{n_{nei}^b})$ sowie der zugehörigen Zustandswerte $(\psi(\beta_1), \dots, \psi(\beta_{n_{nei}^b}))$

- Bestimme $\psi_\beta(\beta^b)$ durch Differentiation der Interpolationsfunktion

Die Definition eines lokalen $(m - 1)$ -dimensionalen Koordinatensystems erfolgt mit Hilfe einer Singulärwertzerlegung [86] der $(m \times n_{nei}^b)$ -dimensionalen Matrix Γ . Γ setzt sich dabei aus den Vektoren $(\Delta\theta_1, \dots, \Delta\theta_{n_{nei}^b})$ zusammen, wobei $\Delta\theta_i = \theta_i - \theta^b$ und θ_i den generalisierten REDIM-Koordinaten der n_{nei}^b Nachbarrandpunkte von θ^b entsprechen. Für die Singulärwertzerlegung von Γ folgt [86]

$$\Gamma = \mathbf{U} \mathbf{K} \mathbf{V}^T. \quad (6.37)$$

Hierbei sind \mathbf{U} und \mathbf{V} $(n_{nei}^b \times n_{nei})$ -dimensionale bzw. $(n_{nei}^b \times n_{nei})$ -dimensionale orthogonale Matrizen und \mathbf{K} eine $(m \times n_{nei}^b)$ -dimensionale Matrix mit der Struktur

$$\mathbf{K} = \begin{pmatrix} \kappa_1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \ddots & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \kappa_m & \dots & 0 \end{pmatrix}, \quad (6.38)$$

wobei κ_i als Singulärwerte von Γ bezeichnet werden, für die $\kappa_1 > \kappa_2 > \dots > \kappa_m$ gilt. Die Spaltenvektoren von \mathbf{U} werden als linke Singulärvektoren und die Spaltenvektoren von \mathbf{V} als rechte Singulärvektoren bezeichnet [86].

Die linken Singulärvektoren $(\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_m)$ entsprechen den Hauptkomponenten der durch $(\Delta\theta_1, \dots, \Delta\theta_{n_{nei}^b})$ und θ^b gebildeten m -dimensionalen Punktwolke. Die ersten $(m - 1)$ linken Singulärvektoren spannen daher einen $(m - 1)$ -dimensionalen Raum auf, der als lokaler Parameterraum des REDIM-Randes an der Stelle θ^b interpretiert werden kann (Abbildung 6.10). Während für $\beta^b = \mathbf{0}$ gesetzt wird, ergeben sich die lokalen Koordinaten β der n_{nei}^b Nachbarrandpunkte durch die orthogonale Projektion von $(\Delta\theta_1, \dots, \Delta\theta_{n_{nei}^b})$ auf $(\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_{m-1})$ zu

$$\beta_i = (\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_{m-1})^T \Delta\theta_i; i = 1, \dots, n_{nei}^b. \quad (6.39)$$

In Abbildung 6.10 wird die beschriebene Vorgehensweise zur Bestimmung eines lokalen Koordinatensystems anhand eines dreidimensionalen REDIM-Gitters schematisch dargestellt. Es wird ein Ausschnitt des zweidimensionalen Randgitters an der Stelle θ^b gezeigt. Die mit Hilfe der Singulärwertzerlegung bestimmten linken Singulärvektoren \mathbf{u}_1 und \mathbf{u}_2 spannen eine Ebene auf, auf die unter Verwendung von Gleichung 6.39 die Verbindungsvektoren $\Delta\theta_i$ projiziert werden. Hieraus ergeben sich die lokalen Koordinaten β_i des zweidimensionalen Randes.

Zur Bestimmung von ψ_β werden zunächst die Zustände $\psi(\theta_i)$ den zugehörigen Randkoordinaten β_i zugeordnet. Anschließend wird auf Basis der Zustandspunkte $(\psi(\beta_1), \dots, \psi(\beta_{n_{nei}^b+1}))$ eine Approximation für $\psi(\beta)$ unter Verwendung

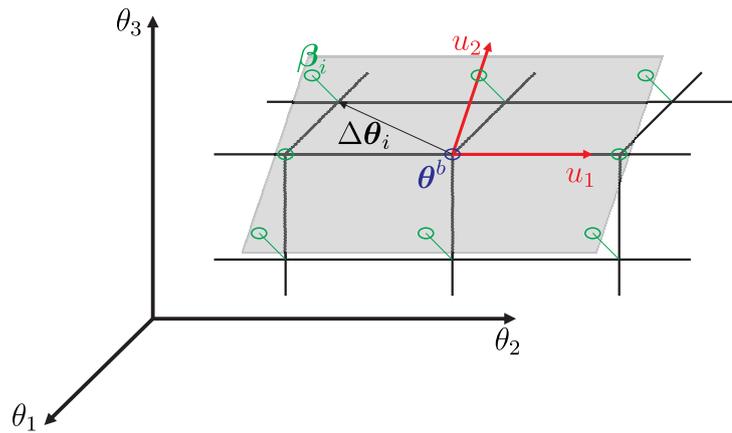


Abbildung 6.10.: Konstruktion eines zweidimensionalen lokalen Gitters am Rand einer dreidimensionalen REDIM (schwarzes Gitter) an der Stelle θ^b . Die Anzahl an Nachbarrandpunkten entspricht $n_{nei}^b = 8$. Die linken Singulärvektoren u_1 und u_2 spannen eine Ebene auf (Gleichung 6.37), auf die die Verbindungsvektoren $\Delta\theta_i$ projiziert werden. Es entstehen dadurch die zweidimensionalen Koordinaten β_i (grün) in der Umgebung des Randpunktes θ^b (blau).

der in Abschnitt 6.1.2 beschriebenen Interpolationsverfahren gebildet, die gemäß Gleichung 6.21 anschließend abgeleitet wird. Neben den in Abschnitt 6.1.2 beschriebenen normierten Gauss-Funktionen bieten sich dabei insbesondere Polynome als Ansatzfunktionen an, da diese besonders einfach differenziert werden können und bei der Verwendung weniger Stützstellen eine genaue Approximation der Ableitung erlauben [1, 92]. Die Verwendung anderer Funktionsarten kann mit Hilfe der implementierten Bibliothek (Abschnitt 6.1.2) jedoch ebenfalls effizient umgesetzt werden.

6.2. Auf Vorwissen basierende REDIM-Konstruktionsmethode

Die in diesem Abschnitt vorgestellte Strategie zur Erstellung von REDIMs entspricht der Vorgehensweise, die in zahlreichen bisherigen Arbeiten [22, 23, 25, 27, 28, 84, 85] für verschiedene Verbrennungsszenarien verfolgt wurde. Diese lässt sich wie folgt aufgliedern

- Konstruktion einer Anfangsmannigfaltigkeit der Dimension m .
- Integration der REDIM-Entwicklungsgleichung zur Erstellung einer m -dimensionalen REDIM.

- Verwendung der m -dimensionalen REDIM in reduzierten Berechnungen.

Bei diesem Vorgehen wird die Ausdehnung bzw. die Domäne der REDIM (Abschnitt 5.2), die zur reduzierten Berechnungen implementiert wird, bereits durch die Anfangsmannigfaltigkeit festgelegt und während der Integration der REDIM-Entwicklungsgleichung nicht mehr verändert [28]. Die Dimension der letztendlich implementierten REDIM entspricht zudem derjenigen der Anfangsmannigfaltigkeit, sodass für die Erstellung einer REDIM höherer Dimension zunächst eine entsprechende Anfangsmannigfaltigkeit benötigt wird [28]. Diese Strategie setzt daher voraus, dass systemspezifische Informationen und Eigenschaften bereits vor der REDIM-Integration vorliegen, die dann insbesondere zur Konstruktion der Anfangsmannigfaltigkeit verwendet werden. Eine Möglichkeit zur Bereitstellung dieser Informationen beruht auf der Durchführung detaillierter eindimensionaler Simulationen im Vorfeld der REDIM-Konstruktion.

In Abschnitt 6.1.4 wird beschrieben, dass aus detaillierten Simulationen stammende stationäre oder transiente eindimensionale Flammenprofile als Basis für die Schätzung der Zustandsgradienten herangezogen werden können. Die aus den Profilen interpolierten Mannigfaltigkeiten, an deren Zuständen die Gradienteninformationen vorliegen, stellen gleichzeitig eine gute Wahl für die Anfangsmannigfaltigkeit dar. Der Grund hierfür ist, dass die mit Hilfe detaillierter Simulationen erstellten Anfangsmannigfaltigkeiten bereits sehr nahe an der REDIM liegen und somit eine besonders schnelle Konvergenz bei der Integration der REDIM-Entwicklungsgleichung erreicht werden kann.

Abbildung 6.11a zeigt die aus mehreren stationären Profilen erstellte zweidimensionale Anfangsmannigfaltigkeit einer nicht-vorgemischten $\text{H}_2\text{-N}_2$ -Luft Gegenstromflamme aus Abschnitt 6.1.4 in einer dreidimensionalen $\text{N}_2\text{-H}_2\text{O-OH}$ -Projektion des Zustandsraums. Die zur Konstruktion der Anfangsmannigfaltigkeit verwendeten Profile werden gemäß Abschnitt 6.1.4 anhand der Variation der Streckungsrate bzw. des tangentialen Druckgradienten [1] erstellt. Die Domäne der Anfangsmannigfaltigkeit wird dabei durch zwei Profile begrenzt, die der geringsten (grün) bzw. der größten (rot) implementierten Streckungsrate entsprechen. Die Anwendung der größten Streckungsrate führt hierbei zur Verlöschung, sodass sich die spezifischen Molzahlen von OH zu Null ergeben (vgl. Abbildung 6.7). Bei der Erstellung des zweidimensionalen Gitters der Anfangsmannigfaltigkeit werden gemäß Abbildung 6.11a die beiden Hauptspezies N_2 und H_2O als Parametrisierungsvariablen verwendet. Das Gitter ergibt sich dann aus der linearen

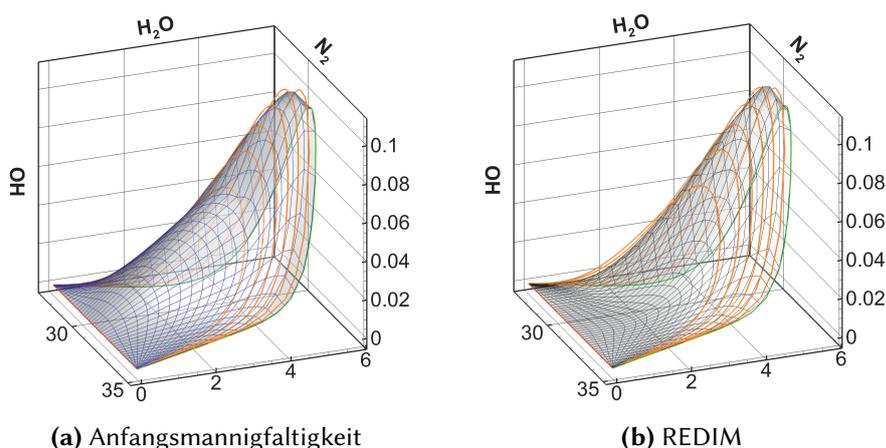


Abbildung 6.11.: Durch die Interpolation aus mehreren stationären Profilen (grün, orange und rot) konstruierte zweidimensionale Anfangsmannigfaltigkeit und zugehörige REDIM für eine nicht vorgemischte H_2 -Luft-Gegenstromflamme in der N_2 - H_2O - OH -Projektion des Zustandsraums, Einheiten der spezifischen Molzahlen φ in mol kg^{-1} [27]. Die Domänen der Anfangsmannigfaltigkeit und der REDIM werden durch die Profile mit der geringsten (grün) bzw. der größten (rot) implementierten Streckungsrate begrenzt.

Interpolation der eindimensionalen Profile in Richtung N_2 und H_2O und für die generalisierten Koordinaten θ_1 und θ_2 folgt der Zusammenhang

$$\theta_1 = c_1 \cdot \psi_{\text{N}_2}, \quad (6.40)$$

$$\theta_2 = c_2 \cdot \psi_{\text{H}_2\text{O}}, \quad (6.41)$$

mit den Konstanten c_1 und c_2 . Diese lineare Verknüpfung geht allerdings während der Integration der REDIM-Entwicklungsgleichung verloren, da sich im Zuge dessen auch die spezifischen Molzahlen von N_2 und H_2O verändern können.

Abbildung 6.11b zeigt die sich nach Abschluss der Integration ergebende zweidimensionale REDIM. Auf Grund der aus den detaillierten Profilen entnommenen Schätzungen der Zustandsgradienten weicht die REDIM während der Integration der Entwicklungsgleichung nur leicht von der Anfangsmannigfaltigkeit ab, sodass nur eine kurze Integrationszeit für eine konvergierte Rechnung benötigt wird. An den Rändern sind darüber hinaus gar keine Abweichungen festzustellen, da diese durch detaillierte stationäre Profile mit den entsprechenden Schätzungen der Zustandsgradienten festgelegt werden.

In Abschnitt 7.3 wird eine auf diese Art erstellte zweidimensionale REDIM angewendet, um transiente Verlöschungsvorgänge in nicht vorgemischten eindimensionalen Gegenstromflammen zu untersuchen. Die reduzierten Berechnungen zeigen, dass zwei REDIM-Dimensionen bereits für eine genaue Wiedergabe des

detaillierten Systemverhaltens ausreichen. Durch die niedrige Dimension kann dabei eine besonders effiziente Implementierung der REDIM erreicht werden, da das reduzierte System ebenfalls nur aus zwei Gleichungen besteht (siehe Abschnitt 5.4).

Die Anwendung des vorgestellten Verfahrens ist somit immer dann anzustreben, wenn detaillierte Systeminformationen zur Erstellung der REDIM vorhanden sind, sodass die transiente Systemdynamik bereits mit wenigen Dimensionen ausreichend genau beschrieben werden kann. Im Gegenzug sind dieser Vorgehensweise Grenzen gesetzt, wenn die Genauigkeit der reduzierten Rechnungen durch die Implementierung von REDIMs höherer Dimension vergrößert werden soll. Die Schwierigkeit besteht hierbei vor allem in der Konstruktion entsprechender Anfangsmannigfaltigkeiten auf Basis detaillierter eindimensionaler Profile.

So müssten im Falle einer Gegenstromflamme für die Erstellung einer dreidimensionalen Anfangsmannigfaltigkeit neben den stationären auch instationäre Profile hinzugezogen werden. Dabei ist allerdings nicht klar, auf welche Weise passende Profile zu identifizieren sind und unter Verwendung welcher zusätzlichen Zustandsvariablen die dritte Dimension parametrisiert werden kann.

Diese Problematik besteht bei vorgemischten Flammen bereits bei der Konstruktion zweidimensionaler Anfangsmannigfaltigkeiten, da hier auf Grund der charakteristischen Systemeigenschaften nur eine stationäre Lösung existiert. Hier können zwei- oder höherdimensionale ILDMs als Anfangsmannigfaltigkeit verwendet werden, die sich mit Hilfe eines linearen Fortsetzungsverfahrens bis in der Bereich langsamer chemischer Prozesse erweitern lassen [34]. Abbildung 6.12 zeigt eine erweiterte zweidimensionale ILDM sowie das stationäre eindimensionale Flammenprofil einer vorgemischten Synthesegas-Luft-Flamme in einer $\text{CO}_2\text{-H}_2\text{O-H}_2\text{O}_2$ -Projektion und einer $\text{CO}_2\text{-H}_2\text{O-CH}_2\text{O}$ -Projektion des Zustandsraums.

Es ist zu sehen, dass die ILDM in der Umgebung des chemischen Gleichgewichts auf Grund dominierender chemischer Prozesse eine sehr gute Approximation des Flammenprofils repräsentiert, während sich im Bereich dominierender Transportprozesse in der Umgebung des unverbrannten Mischungszustandes deutliche Unterschiede ergeben. Bei der Integration der auf Basis erweiterter ILDMs erstellter Anfangsmannigfaltigkeiten ergeben sich auf Grund dieser Unterschiede längere Integrationszeiten, die sich in der Größenordnung der Zeitskalen physikalischer Prozesse befinden. Dies macht sich insbesondere bei höherdimensionalen Anfangsmannigfaltigkeiten bemerkbar. Die beschriebenen Abweichungen verstärken sich im Falle detaillierter Transportmodelle und treten zudem auch im Bereich schneller chemischer Prozesse auf. Der Grund hierfür ist, dass die ILDM Konstruktion auf der Betrachtung homogener Reaktionssysteme basiert und der Einfluss detaillierter Transportprozesse daher nicht berücksichtigt wird. Eine

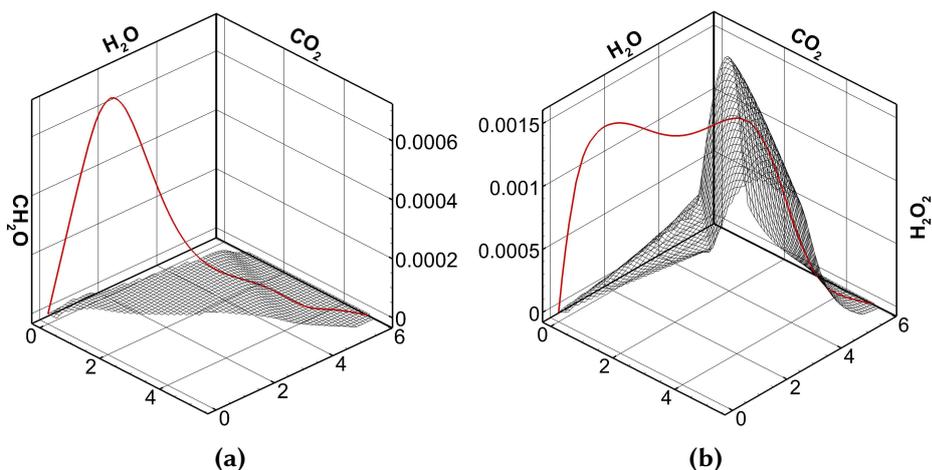


Abbildung 6.12.: Verwendung einer erweiterten ILDM als Anfangsmannigfaltigkeit für die Bestimmung einer zweidimensionalen REDIM eines vorgemischten Synthesegas-Luft-Systems, Darstellung in dreidimensionalen Projektionen des Zustandsraums. In Bereichen langsamer chemischer Prozesse entstehen signifikante Unterschiede zwischen Anfangsmannigfaltigkeit und detailliertem eindimensionalem Profil (rote Kurve). Einheiten der spezifischen Molzahlen φ in mol kg^{-1} .

weitere Schwierigkeit bei der Verwendung erweiterter ILDMs als Anfangsmannigfaltigkeit geht daraus hervor, dass die Domäne der ILDM durch das angewendete Fortsetzungsverfahren definiert wird. Dieses wird beendet, sobald vom Anwender im Vorfeld definierte Grenzen bzw. Hyperflächen im Zustandsraum überschritten werden [55]. Dadurch muss zur Sicherstellung einer Beschreibung des gesamten transienten Systemverhaltens die Ausdehnung der erweiterten ILDM-Domäne bereits von der Erstellung bekannt sein, was nur mit Hilfe im Vorfeld durchgeführter detaillierter Simulationen erfolgen kann.

Aus den beschriebenen Sachverhalten geht hervor, dass sich die bisher verfolgte Strategie zur Erstellung und Implementierung von REDIMs einigen Limitationen ausgesetzt sieht. Diese werden insbesondere im Falle einer gewünschten Dimensionserhöhung und bei der Festlegung der REDIM-Domäne mit Hilfe der Anfangsmannigfaltigkeit sichtbar. Es besteht daher der Wunsch nach einem flexibleren Verfahren, das eine adaptive Erstellung von REDIMs beliebiger Dimension und Ausdehnung ermöglicht. Im nächsten Abschnitt wird die in dieser Arbeit entwickelte adaptive REDIM-Konstruktionsmethode vorgestellt.

6.3. Adaptive REDIM-Konstruktionsmethode

In der Einleitung zu Kapitel 6 werden die Anforderungen an die REDIM-Konstruktionsmethode im Hinblick auf eine effiziente und flexible Implementierung in reduzierten Berechnungen umrissen. Gerade im Falle stark instationärer bzw. turbulenter Flammen besteht die Notwendigkeit, die REDIM-Dimension in Bereichen starker physikalisch-chemischer Kopplung und damit die Genauigkeit der reduzierten Rechnungen zu erhöhen. Gleichzeitig reicht in Bereichen Nahe des chemischen Gleichgewichts eine geringere REDIM-Dimension aus, da hier die schnellen chemischen Prozesse dominieren und ein- oder zwei Dimensionen für eine genaue Beschreibung der Systemdynamik ausreichen.

Abbildung 6.13 visualisiert den beschriebenen Zusammenhang am Beispiel einer zweidimensionalen REDIM, die sich ausgehend von der in Abbildung 6.12 dargestellten erweiterten ILDM als Anfangsmannigfaltigkeit ergibt. Die rote Kurve repräsentiert die zugehörige eindimensionale REDIM, welche in die zweidimensionale REDIM eingebettet ist. Die Vektorpfeile zeigen Richtung und Stärke des chemischen Quellterms an, der sich an den Zuständen der 2D-REDIM ergibt, während der Konturplot die Verteilung der Temperatur auf der 2D-REDIM wiedergibt. Es ist zu sehen, dass die Quelltermvektoren für $T > 1800$ K in Richtung der 1D-REDIM zeigen, wobei ihre Länge in der Umgebung der 1D-REDIM stark abnimmt. Dies führt dazu, dass Störungen sehr schnell relaxiert werden, sodass in diesen Regionen eine eindimensionale REDIM oder eine weitaus schmalere zweidimensionale REDIM für eine genaue Beschreibung der Systemdynamik ausreichen würde. Dahingegen zeigen die Vektoren für geringere Temperaturen nicht in Richtung der 1D-REDIM, wodurch der Einfluss physikalischer Prozesse verdeutlicht wird und die Notwendigkeit einer höheren REDIM-Dimension in diesen Regimen. Bei der Erweiterung der REDIM-Dimension muss stets sichergestellt sein, dass die Domäne der implementierten REDIM die gesamte tangential ablaufende Systemdynamik beschreiben kann.

In diesem Abschnitt wird eine Methode vorgestellt, mit der sowohl die REDIM-Dimension, als auch die Domäne problemspezifisch angepasst werden können. Die Grundlage für diese adaptive Methode bilden die in den Abschnitten 5.3 und 5.2 beschriebenen Zusammenhänge über den hierarchischen Aufbau von REDIMs unterschiedlicher Dimension sowie über die Eigenschaften des Vektorfeldes am REDIM-Rand (Gleichung 5.37).

Das sequentielle Diagramm in Abbildung 6.14 beschreibt schematisch die Vorgehensweise, durch welche die adaptive REDIM-Konstruktionsmethode gekennzeichnet ist. Ausgehend von einer m -dimensionalen REDIM \mathcal{M}_{RD}^m , welche die Invarianzbedingung erfüllt, wird zunächst eine Approximation des tangentialen Unterraums ψ_ζ einer $(m + p)$ -dimensionalen REDIM $\mathcal{M}_{RD}^{(m+p)}$ definiert.

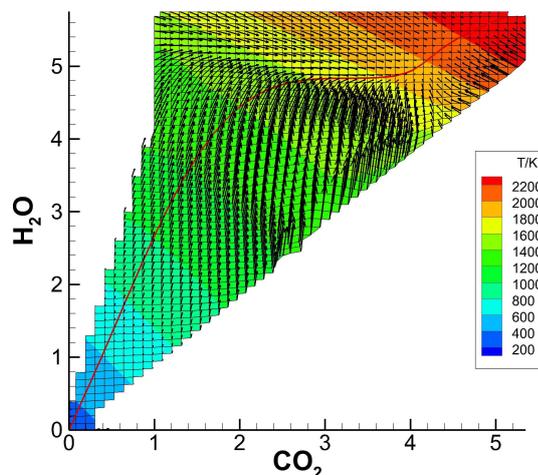


Abbildung 6.13.: Darstellung des Temperaturverlaufs (Konturplot) und der Vektoren des chemischen Quellterms an den Gitterpunkten einer mittels erweiterter ILDM erstellten 2D-REDIM in einer CO₂-H₂O Projektion des Zustandsraums, Einheiten der spezifischen Molzahlen φ in mol kg⁻¹. Die rote Kurve zeigt die 1D-REDIM [27].

Im Anschluss wird unter Anwendung von Gleichung 5.37 ein Expansionsverfahren gestartet, mit dem die REDIM-Domäne tangential zu ψ_ζ erweitert wird. Die erweiterten Bereiche werden im nächsten Schritt durch die Anwendung der REDIM-Entwicklungsgleichung 5.11 relaxiert, sodass die gesamte erweiterte REDIM-Domäne die Invarianzbedingung erfüllt. Unter Anwendung von Gleichung 5.36 wird überprüft, ob das Vektorfeld am Rand der erweiterten REDIM ins Innere der REDIM zeigt, sodass eine sichere Implementierung in reduzierten Berechnungen gewährleistet ist. Ist dies nicht der Fall, wird die Expansions-Relaxations-Prozedur so lange wiederholt, bis Gleichung 5.36 überall am REDIM-Rand erfüllt wird und die REDIM in reduzierten Berechnungen implementiert werden kann. Auf diese Weise erlaubt das beschriebene Verfahren die Konstruktion von REDIMs beliebiger Dimension.

Den Ausgangspunkt für das beschriebene Verfahren bilden im Falle vorgemischter Flammen eine eindimensionale und im Falle von Gegenstromflammen eine zweidimensionale Mannigfaltigkeit. Die Verwendung eindimensionaler Anfangsmannigfaltigkeiten für nicht vorgemischte Gegenstromflammen ist zwar prinzipiell möglich. Die Expansion in Richtung des verlöschten Flammenprofils kann jedoch zu Problemen führen, wenn die Schätzung der Zustandsgradienten nicht groß genug ist, um während der Expansion des REDIM-Randes zu einer Ver-

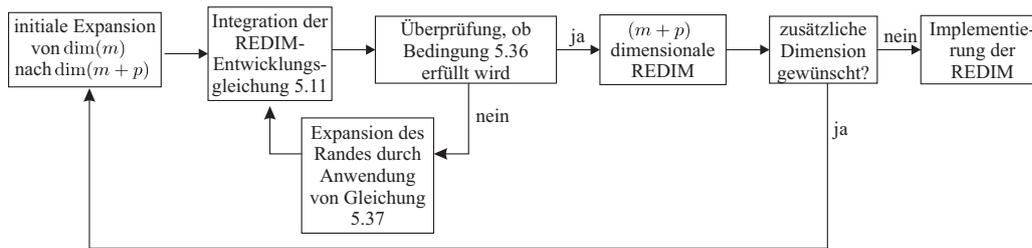


Abbildung 6.14.: Vorgehensweise zur adaptiven Konstruktion $(m + p)$ -dimensionaler REDIMs ausgehend von m -dimensionalen REDIMs und zur Anpassung der REDIM-Domäne [28].

löschung zu führen. Für nicht-vorgemischte Gegenstromflammen ist es deshalb sinnvoller, eine zweidimensionale Anfangsmannigfaltigkeit unter Verwendung der im vorherigen Abschnitt beschriebenen Methoden zu erstellen.

Im Folgenden wird anhand einer vorgemischten Synthesegas-Luft-Flamme die praktische Anwendung des adaptiven Verfahrens vorgestellt. Die eindimensionale REDIM, von der aus das Verfahren gestartet wird, entspricht dabei derjenigen aus Abbildung 6.6 aus Abschnitt 6.1.3. Als Anfangsmannigfaltigkeit für die Bestimmung der eindimensionalen REDIM wird demnach die Mischungslinie gewählt, die sich aus der linearen Verbindung zwischen dem chemischen Gleichgewicht und dem unverbrannten Mischungs Zustand ergibt. Hierdurch entfällt die Durchführung detaillierter Simulationen zur Erstellung der Anfangsmannigfaltigkeit, sodass sich das Maß an benötigten Vorinformationen auf die Schätzung der Zustandsgradienten beschränkt. Durch die Anwendung der in Abschnitt 6.1.4 beschriebenen vereinfachten Vorgehensweise zur Bestimmung geeigneter Schätzungen für die Zustandsgradienten verringert sich die Menge benötigter Vorinformationen zusätzlich, wodurch die Konstruktion höherdimensionaler REDIMs mit einem Mindestmaß an Vorinformationen über das Systemverhalten erfolgen kann.

Der nächste Abschnitt beschreibt zunächst praktische Methoden, mit denen ausgehend von einer eindimensionalen REDIM zweidimensionale bzw. ausgehend von zweidimensionalen REDIMs dreidimensionale Anfangsmannigfaltigkeiten für den Expansions-Relaxationsprozess generiert werden können. Abschnitt 6.3.2 beschäftigt sich im Anschluss daran mit der Beschreibung der praktischen Umsetzung der sequentiellen Expansion-Relaxations-Methode. Im Fokus steht hierbei besonders die Erweiterung des REDIM-Gitters durch das Hinzufügen neuer Punkte.

6.3.1. Hierarchiebasierte Konstruktion der Anfangsmannigfaltigkeit

Die Grundlage für die im Folgenden beschriebenen Verfahren bilden die Ausführungen aus Abschnitt 5.3 über die hierarchische Struktur von REDIMs. Demnach sind m -dimensionale Mannigfaltigkeiten invariant in Bezug zur Entwicklungsgleichung $(m + p)$ -dimensionaler Mannigfaltigkeiten, sodass m -dimensionale Mannigfaltigkeiten in $(m + p)$ -dimensionale Mannigfaltigkeiten eingebettet sind [27, 28].

Die hierarchiebasierte Konstruktion von Anfangsmannigfaltigkeiten beruht auf der Approximation des tangentialen Unterraums $(m + 1)$ -dimensionaler REDIMs ausgehend von m -dimensionalen REDIMs, welche die Invarianzbedingung erfüllen. Gemäß Abschnitt 5.1.1 repräsentiert der tangentielle Unterraum m -dimensionaler REDIMs die m langsamsten Prozesse des detaillierten Systems und wird von den Vektoren $(\psi_{\theta_1}, \dots, \psi_{\theta_m})$ aufgespannt. In der Umgebung der m -dimensionalen REDIM lässt sich der tangentielle Unterraum einer $(m + 1)$ -dimensionalen REDIM mit Hilfe von ψ_{θ} und eines zusätzlichen Vektors $\psi_{\theta_{m+1}}$ aufspannen, in dessen Richtung sich der langsamste der $(n - m)$ schnellsten Systemprozesse entfaltet. Abbildung 6.15 stellt die beschriebenen Zusammenhänge anhand einer eindimensionalen REDIM dar, die in eine zweidimensionalen REDIM eingebettet ist, sodass $m = 1$ und $m + 1 = 2$ ist.

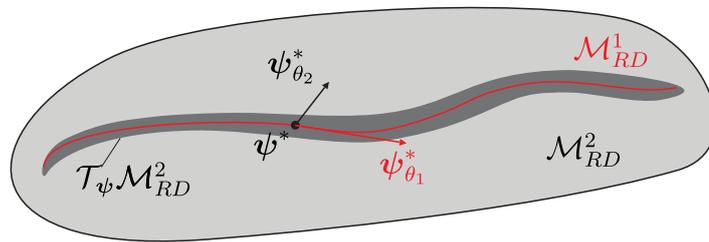


Abbildung 6.15.: Schematische Darstellung der Grundidee hinter der hierarchischen Erstellung von Anfangsmannigfaltigkeiten am Beispiel einer eindimensionalen REDIM \mathcal{M}_{RD}^1 , die in eine zweidimensionale REDIM \mathcal{M}_{RD}^2 eingebettet ist. In der Umgebung von \mathcal{M}_{RD}^1 wird der tangentielle Unterraum $\mathcal{T}_{\psi} \mathcal{M}_{RD}^2$ der 2D-REDIM Approximiert, indem in Richtung ψ_{θ_2} erweitert wird.

Im Folgenden werden zwei Prozeduren vorgestellt, mit denen die lokale Approximation $m + 1$ -dimensionaler Anfangsmannigfaltigkeiten ausgehend von m -dimensionalen REDIMs konstruiert werden kann. Die Methoden werden angewendet, um für das in Abschnitt 6.1.3 präsentierte vorgemischte Sysgas-Luft-Systems zweidimensionale Anfangsmannigfaltigkeiten ausgehend von eindimensionalen REDIMs zu erzeugen. Ihre prinzipielle Anwendung ist allerdings nicht

auf die Erzeugung zweidimensionaler Anfangsmannigfaltigkeiten beschränkt, sondern kann auch für die Konstruktion von Anfangsmannigfaltigkeiten höherer Dimension herangezogen werden. An dieser Stelle sei zudem erwähnt, dass die Vorgehensweise zur Ermittlung der Anfangsmannigfaltigkeit prinzipiell keinen Einfluss auf Lage und Form der REDIM hat. Diese sind unabhängig von der Anfangslösung, sodass auch rein empirisch motivierte Expansionsprozeduren zum Erfolg führen können.

Der ersten Prozedur liegt die Annahme zugrunde, dass sich die langsamen Systemprozesse in Richtung langsamer reaktiver Spezies entfalten. In diesem Fall lässt sich der für die lokale Approximation der Anfangsmannigfaltigkeit benötigte Vektor $\psi_{\theta_{m+1}}$ als Linearkombination dieser langsamen Spezies darstellen. Für die Approximation einer 2D-Anfangsmannigfaltigkeit kommen beim Synthesegas-Luft-System insbesondere CO_2 und H_2O als langsame reaktive Spezies infrage [28, 84]. Eine reine Veränderung von CO_2 und H_2O würde jedoch zunächst zu einer Veränderung der Elementzusammensetzung führen. Deshalb muss zusätzlich eine Korrektur berücksichtigt werden, welche die elementare Zusammensetzung nach der Expansion auf die diejenige der m -dimensionalen REDIM zurücksetzt. Ausgehend von Zuständen ψ^{1D} auf der eindimensionalen REDIM ergeben sich damit die Zustände der lokalen zweidimensionalen Approximation ψ^{2D} zu [28]

$$\psi^{2D} = \psi^{1D} \pm \alpha(\theta_1) \Delta\psi^{exp}, \quad (6.42)$$

wobei

$$\Delta\psi^{exp} = \Delta\psi^{\text{CO}_2-\text{H}_2\text{O}} + \psi^{korr}. \quad (6.43)$$

Hierbei entspricht $\Delta\psi^{\text{CO}_2-\text{H}_2\text{O}}$ einem konstanten Vektor, der parallel zur $\text{CO}_2 - \text{H}_2\text{O}$ -Ebene des thermochemischen Zustandsraums ist und in dessen Richtung die Erweiterung erfolgt. ψ^{korr} ist ein Korrekturvektor, der die oben beschriebene Korrektur der elementaren Zusammensetzung bewirkt [88]. $\alpha(\theta_1)$ entspricht schließlich einer skalaren Funktion, mit der die Expansionsweite in Abhängigkeit der Parametrisierung θ_1 der eindimensionalen REDIM angepasst werden kann [28, 88].

Abbildung 6.16 dokumentiert den Expansionsprozess ausgehend von der 1D-REDIM des vorgemischten Synthesegas-Luft-Systems in einer zwei- und dreidimensionalen Projektion des Zustandsraums. Mit Hilfe von Gleichung 6.42 werden neue Gitterpunkte ψ^{2D} gefunden, die ein zweidimensionales Gitter in der Umgebung der 1D-REDIM aufspannen. Für die spätere numerische Integration der REDIM-Entwicklungsgleichung werden mindestens drei Gitterpunkte in θ_2 -Richtung benötigt, sodass der Expansionsvektor an jeder Stelle ψ^{1D} sowohl addiert, als auch subtrahiert wird. $\alpha(\theta_1)$ ist im Falle einer 1D-REDIM von nur

6. Implementierung der REDIM-Methode

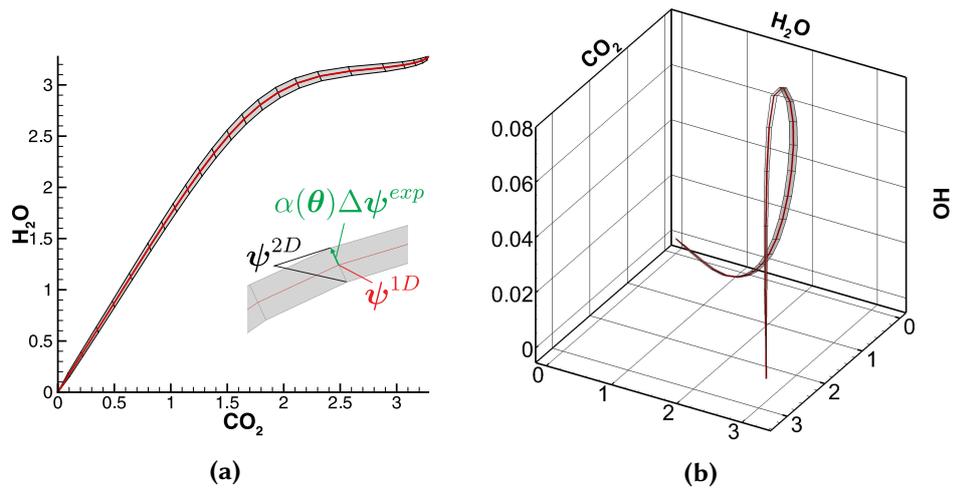


Abbildung 6.16.: Darstellung der unter Verwendung von Gleichung 6.42 erstellten Anfangsmannigfaltigkeit einer 2D-REDIM eines vorgemischten Synthesegas-Luft-Systems in einer CO_2 - H_2O -Projektion (a) und einer CO_2 - H_2O - H -Projektion (b) des Zustandsraums, Einheiten der spezifischen Molzahlen φ in mol kg^{-1} . Die Punkte des zweidimensionalen Gitters ergeben sich durch eine zur CO_2 - H_2O -Ebene parallele Erweiterung ausgehend von der 1D-REDIM.

einer Variablen θ_1 abhängig und wird in diesem Beispiel als parabolische Funktion definiert

$$\alpha(\theta_1) = \alpha_{max} \cdot \left(1 - \frac{(2\theta - \theta_{1,max})^2}{(\theta_{1,max} - \theta_{1,min} + 1)^2} \right), \quad \theta_1 \in [\theta_{1,min}, \theta_{1,max}]. \quad (6.44)$$

Hierbei entsprechen $\theta_{1,min}$ und $\theta_{1,max}$ dem minimalen bzw. maximalen Wert der generalisierten Koordinaten der 1D-REDIM. α_{max} bezeichnet den Maximalwert von $\alpha(\theta_1)$, mit dem die Expansionsweite der lokalen Approximation der 2D-Anfangsmannigfaltigkeit gesteuert wird [88]. Die Festlegung von $\alpha(\theta_{1,min}) = \alpha(\theta_{1,max}) = 0$ und die damit verbundene verschwindende Expansionsweite an den physikalischen Rändern wird durch die Annahme motiviert, dass sich die Zusammensetzung im Mischungspunkt sowie im chemischen Gleichgewicht nicht ändert. Während diese Annahme für den Mischungspunkt immer erfüllt ist, gilt sie für den chemischen Gleichgewichtspunkt immer dann, wenn es im betrachteten System nicht zu Verlöschungsvorgängen kommt.

Die Erstellung zweidimensionaler Anfangsmannigfaltigkeiten für vorgemischte Systeme erfolgt mit dieser einfachen Methode sehr effizient. Der Nachteil dieser Prozedur ist allerdings, dass ein gewisses Maß an Vorwissen über das chemische Reaktionssystem und die in Frage kommenden langsamen reaktiven Spezies

benötigt wird. Dies wirkt sich insbesondere bei der Konstruktion drei- oder höherdimensionaler Anfangsmannigfaltigkeiten aus. Zudem muss die Funktion α in Abhängigkeit mehrerer Variablen $(\theta_1, \dots, \theta_m)$ angegeben werden, wodurch die Anwendung der Methode zusätzlich erschwert wird. Ein weiterer Nachteil ergibt sich dadurch, dass der gewählte Expansionsvektor und der tangentielle Unterraum der REDIM linear abhängig sein können. Dies würde an der Stelle des Auftretens zu Singularitäten führen, welche die numerische Integration der konstruierten Anfangsmannigfaltigkeit verhindern.

Eine allgemeinere Vorgehensweise zur Erstellung von Anfangsmannigfaltigkeiten basiert auf der Störung des Vektorfeldes $\tilde{\phi}$ der stationären eindimensionalen REDIM. Es wird dabei angenommen, dass eine Störung des Vektorfeldes zu einer Bewegung der eindimensionalen REDIM in Richtung des tangentialen Unterraums der zweidimensionalen REDIM führt. Eine Störung wird herbeigeführt, indem die Schätzungen der Zustandsgradienten der invarianten eindimensionalen REDIM leicht verändert werden, was unmittelbaren Einfluss auf den lokalen Diffusionsvektor und seine Kopplung mit dem chemischen Reaktionsvektor hat. Es stellt sich nach Anwendung der REDIM-Entwicklungsgleichung ein neues Gleichgewicht und damit eine neue eindimensionale REDIM ein, die zusammen mit der ursprünglichen eindimensionalen REDIM den tangentialen Unterraum der zweidimensionalen REDIM aufspannen. Für die veränderte Schätzung der lokalen Zustandsgradienten $\hat{\xi}$ wird der einfache Zusammenhang

$$\hat{\xi} = a \cdot \xi \quad (6.45)$$

verwendet, wobei a einem Skalar entspricht, mit dem die ursprüngliche Abschätzung der Zustandsgradienten verändert wird. Die beschriebene Prozedur entspricht derjenigen zur Erstellung von zweidimensionalen Anfangsmannigfaltigkeiten für nicht-vorgemischte Gegenstromflammen durch die Variation der Streckungsrate (Abschnitt 6.2). Das Ziel ist es demnach, mit Hilfe der beiden eindimensionalen Profile eine lokale Approximation der zweidimensionalen REDIM in Form eines zweidimensionalen Gitters zu generieren.

Abbildung 6.17 zeigt die ursprüngliche (rot) und die mit $a = 1, 2$ gestörte 1D-REDIM (blau) in einer zwei- und dreidimensionalen Projektion des Zustandsraums. Es ist zu sehen, dass die implementierte Störung im Bereich $\text{CO}_2 < 2,5 \frac{\text{mol}}{\text{kg}}$ zu signifikanten Abweichungen zwischen beiden Profilen führt. Der Grund hierfür ist die verstärkte Diffusion, durch welche die durch die chemische Reaktion verursachte Krümmung des gestörten Profils verringert wird. Hier erfolgt die Erstellung des lokalen zweidimensionalen Gitters durch die einfache Verknüpfung der Gitterpunkte beider eindimensionaler Profile und das Hinzufügen eines weiteren Gitterpunktes, der sich aus der linearen Erweiterung des Verbindungsvektors ergibt. Für $\text{CO}_2 > 2,5 \frac{\text{mol}}{\text{kg}}$ sorgen die implementierten Störungen auf

6. Implementierung der REDIM-Methode

Grund dominierender chemischer Prozesse allerdings nur für eine sehr geringe Abweichung der gestörten von der ursprünglichen 1D-REDIM. Der vergrößerte Ausschnitt in Abbildung 6.17a zeigt zudem eine Überkreuzung beider Profile in der Nähe des chemischen Gleichgewichts. Beides sorgt dafür, dass ein geeignetes zweidimensionales Gitter in diesem Bereich nicht durch die Verknüpfung beider Profile erzeugt werden kann [28].

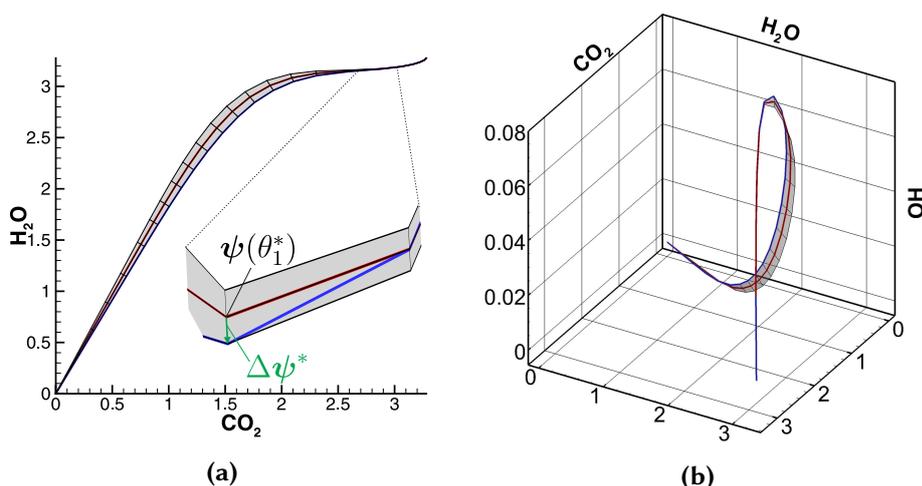


Abbildung 6.17.: Darstellung der unter Verwendung von Gleichung 6.46 erstellten Anfangsmannigfaltigkeit einer 2D-REDIM eines vorgemischten Synthesegas-Luft-Systems in einer CO_2 - H_2O -Projektion (a) und einer CO_2 - H_2O - H -Projektion (b) des Zustandsraums, Einheiten der spezifischen Molzahlen φ in mol kg^{-1} . Die Punkte des zweidimensionalen Gitters ergeben sich durch die Veränderung der Schätzung der Zustandsgradienten. Im Bereich schneller chemischer Prozesse erfolgt die Erweiterung mittels Gleichung 6.49.

Um trotz dieser Problematik ein zweidimensionales Gitter im Bereich schneller chemischer Prozesse zu erhalten, werden zwei unterschiedliche Vorgehensweisen vorgeschlagen [28].

1. Im Bereich dominierender chemischer Prozesse korrespondiert die 1D-REDIM mit der 1D-ILDM. Es kann daher die hierarchische ILDM-Struktur [40] dazu verwendet werden, um ausgehend von der 1D-REDIM eine 2D-ILDM zu konstruieren, die wiederum sehr nahe an der 2D-REDIM in diesem Bereich liegt.
2. Es wird derjenige Zustand $\psi^* = \psi(\theta_1^*)$ auf dem ungestörten 1D-REDIM-Gitter identifiziert, an dem die letzte signifikante Abweichung zwischen dem gestörten und ungestörten Profil vorliegt (Abbildung 6.17a). Im behandelten Beispiel entspricht dies dem Gitterpunkt bei $\text{CO}_2 \approx 2,6 \frac{\text{mol}}{\text{kg}}$.

Der hier vorliegende Verbindungsvektor $\Delta\psi^*$ zwischen gestörtem und ungestörtem REDIM-Profil wird dann zur Erstellung des zweidimensionalen Gitters verwendet, indem er auf den lokalen orthogonalen Unterraum der ungestörten REDIM projiziert wird. Für die hinzugefügten Punkte des zweidimensionalen Gitters im Bereich schneller chemischer Prozesse gilt somit

$$\psi^{2D} = \psi^{1D} \pm \alpha(\theta_1)(\mathbf{I} - \psi_\theta \psi_\theta^+) \Delta\psi^*, \quad (6.46)$$

wobei ψ_θ dem lokalen Ableitungsvektor auf der ungestörten 1D-REDIM-Entspricht. $\alpha(\theta_1)$ ergibt sich für das in Abbildung 6.17 dargestellte Gitter zu

$$\alpha(\theta_1) = 1 - \frac{\theta_1 - \theta_1^*}{\theta_{1,max} - \theta_1^*}, \quad \theta_1 \in [\theta^*, \theta_{1,max}], \quad (6.47)$$

wodurch wiederum sichergestellt wird, dass die Expansion am physikalischen Rand des chemischen Gleichgewichtspunkts zu Null wird. Anstatt dieses linearen Ansatzes kann für $\alpha(\theta_1)$ eine weitere analytische Form verwendet werden, welche die Norm des lokalen Verbindungsvektors $\|\Delta\psi(\theta_1)\|$ berücksichtigt und daher die durch die Störung zustande gekommenen Abweichungen widerspiegelt

$$\alpha(\theta_1) = \frac{\|\Delta\psi(\theta_1)\|}{\|\Delta\psi^*\|}, \quad \theta_1 \in [\theta^*, \theta_{1,max}]. \quad (6.48)$$

Gleichung 6.48 ist insbesondere bei der Konstruktion von Anfangsmannigfaltigkeiten höherer Dimension nützlich, da für α somit kein im Vorfeld definierter analytischer Ausdruck gefunden werden muss, der von mehr als einer Variablen abhängig ist. Dies führt auf eine allgemeine Form von Gleichung 6.46, welche die Generierung $m + 1$ -dimensionaler Anfangsmannigfaltigkeiten ausgehend von m -dimensionalen REDIMs zu beschreibt

$$\psi^{m+1} = \psi^m \pm \frac{\|\Delta\psi(\theta)\|}{\|\Delta\psi^*\|} (\mathbf{I} - \psi_\theta \psi_\theta^+) \Delta\psi^*, \quad (6.49)$$

wobei $(\mathbf{I} - \psi_\theta \psi_\theta^+)$ ein Projektionsoperator ist, mit dem $\Delta\psi^*$ auf den orthogonalen Unterraum der m -dimensionalen REDIM projiziert wird. Obwohl Gleichung 6.49 im obigen Beispiel allein für Erzeugung des Gitters der Anfangsmannigfaltigkeit im Bereich schneller chemischer verwendet wurde, ist eine Anwendung im Allgemeinen nicht auf diesen Bereich beschränkt. Das Verfahren kann auf die gesamte m -dimensionale REDIM-Domäne ausgeweitet werden, was zu einer besonders einfachen und daher effizienten Expansion führt.

Gemäß Abbildung 6.14 erfolgt ausgehend von den auf Basis der vorgestellten Methoden konstruierten Anfangsmannigfaltigkeiten als nächstes die sequentielle

Expansion und Relaxation der REDIM. Der folgende Abschnitt beschreibt das Verfahren für das behandelte vorgemischte Synthesegas-Luft-System.

6.3.2. Sequentielles Expansions-Relaxations-Verfahren

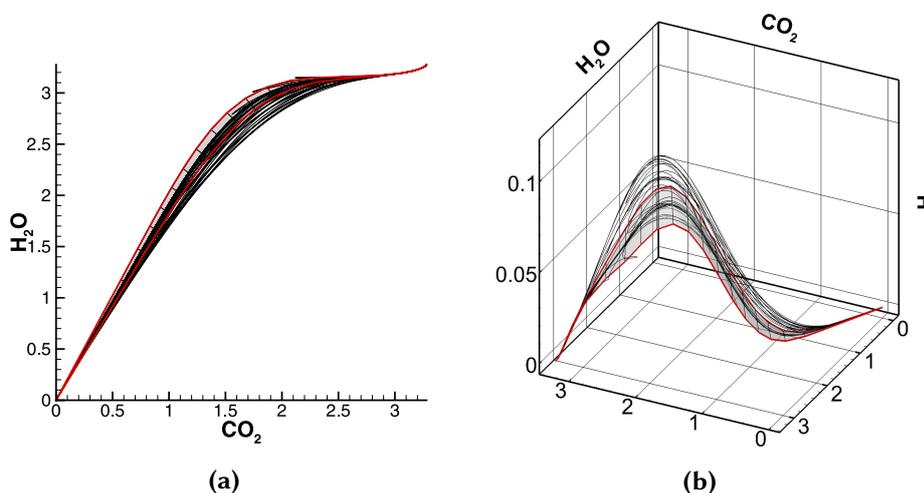


Abbildung 6.18.: Zweidimensionale Anfangsmannigfaltigkeit aus Abbildung 6.17 und gestörtes eindimensionales Profil einer vorgemischten Synthesegas-Luft-Flamme in einer CO_2 - H_2O -Projektion (a) und einer CO_2 - H_2O - H -Projektion (b) des Zustandsraums, Einheiten der spezifischen Molzahlen φ in mol kg^{-1} . Die anfängliche Domäne reicht nicht aus, um die komplette Systemdynamik abzubilden, sodass erweitert werden muss.

Wie Abbildung 6.15 des letzten Abschnitts zeigt, erfolgt die Konstruktion einer $m + 1$ -dimensionalen Anfangsmannigfaltigkeit in der nahen Umgebung der darin eingebetteten m -dimensionalen REDIM. Um das transiente Verhalten eines Verbrennungssystems adäquat mit der zugehörigen $m + 1$ -dimensionalen REDIM beschreiben zu können, muss die Domäne der Anfangsmannigfaltigkeit erweitert werden. In Abbildung 6.18 wird die Notwendigkeit einer Expansion verdeutlicht.

Die Abbildung zeigt zum einen die im vorherigen Abschnitt konstruierte zweidimensionale Anfangsmannigfaltigkeit (Abbildung 6.17) des betrachteten vorgemischten Synthesegas-Luft-Systems in einer zwei- und dreidimensionalen Projektion des Zustandsraums. Zudem ist die transiente Bewegung eindimensionaler Flammenprofile des Synthesegas-Luft-Systems dargestellt, welche durch die Implementierung einer Störung in Form einer Triplet-Map (siehe Abschnitt 7.2.1) zustande kommt. Es ist zu erkennen, dass die Profile den Rand der Anfangsmannigfaltigkeit überkreuzen, sodass eine Expansion der Ränder erfolgen muss, um die komplette transiente Systemdynamik abbilden zu können (Abbildung 6.18a).

Zudem verursacht die Störung auch eine signifikante Abweichung in transversaler Richtung zur REDIM (Abbildung 6.18b), wodurch die Notwendigkeit einer weiteren Dimensionserhöhung zu einer dreidimensionalen REDIM motiviert wird. Beides soll im Folgenden anhand des betrachteten vorgemischten Synthesegas-Luft-Systems erläutert werden.

In Abschnitt 5.2 wird beschrieben, dass $\tilde{\phi}$ entlang des gesamten REDIM-Randes ins Innere der REDIM zeigen muss (Gleichung 5.36), um ein tangenciales Überkreuzen des Randes bei der Implementierung der REDIM in reduzierten Berechnungen auszuschließen. Durch die Anwendung von Gleichung 5.37 wird der REDIM-Rand tangential zur REDIM expandiert, um die Erfüllung von Bedingung 5.36 zu gewährleisten. Dabei spielt der nach außen zeigende Vektor ψ_η eine wichtige Rolle, da er die Richtung der Expansion vorgibt.

Für die praktische Umsetzung des Expansionsverfahrens muss der Vektor ψ_η an den Randpunkten des REDIM Gitters bestimmt werden (siehe Abbildung 5.7). Abbildung 6.19 veranschaulicht die dabei verfolgte Vorgehensweise. Zunächst wird an jedem Randpunkt ψ^b ein im Innern der REDIM liegender Nachbarpunkt ψ^{in} gefunden und der entsprechende Verbindungsvektor $\Delta\psi^{in}$ gebildet. Dieser wird unter Verwendung der Basisvektoren ψ_β des Tangentialraums $\mathcal{T}_{\psi^b}(\partial\mathcal{M})$ des REDIM-Randes auf den orthogonalen Unterraum von ψ_β projiziert (siehe Abbildung 5.7), wodurch sich der zum Rand orthogonale, nach innen zeigende Vektor ψ_η^{in} ergibt

$$\psi_\eta^{in} = (\mathbf{I} - \psi_\beta \psi_\beta^+) \Delta\psi^{in}. \quad (6.50)$$

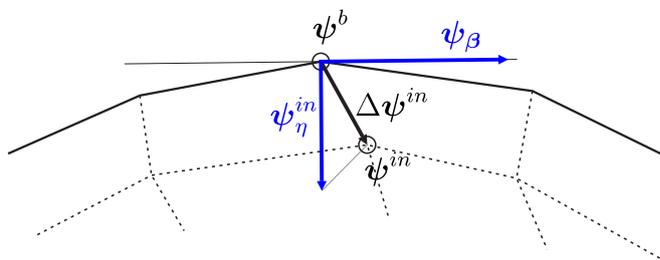


Abbildung 6.19.: Schematische Darstellung des Randes eines zweidimensionalen REDIM-Gitters, vgl. Abbildung 5.7. Der in Gleichung 6.50 verwendete Vektor ψ_η^{in} ergibt sich aus der Projektion des Verbindungsvektors $\Delta\psi$ zwischen dem Randpunkt ψ^b und einem im Innern liegenden Punkt ψ^{in} auf ψ_β .

Aus ψ_η^{in} ergibt sich der nach außen zeigende Vektor zu $\psi_\eta = -\psi_\eta^{in}$. Eine Expansion des Randes ist gemäß Abschnitt 5.2 nur an denjenigen Randgitterpunkten notwendig, an denen das Vektorfeld $\tilde{\phi}$ nach außen zeigt, was ebenso mit Hilfe ψ_η überprüft werden kann (Gleichung 5.36).

Die tangential Expansion des REDIM Randes mit Hilfe von Gleichung 5.37 hat zur Folge, dass in den expandierten Bereichen die Invarianzbedingung nicht erfüllt wird. Der Expansion muss deshalb eine Relaxation durch die Anwendung der REDIM-Entwicklungsgleichung folgen, wie Abbildung 6.20 veranschaulicht. Darin steht der Kreis stellvertretend für die REDIM, die durch das sequentielle Expansions-Relaxations-Verfahren angenähert werden soll. Die tangential expandierten Gebiete (grün) entsprechen zunächst nicht der REDIM, durch die Anwendung der REDIM-Entwicklungsgleichung werden diese Gebiete jedoch auf die REDIM relaxiert. Der Vorteil dieser Vorgehensweise ist, dass die tangential expandierten Gebiete sehr nahe an der REDIM liegen, wodurch eine sehr schnelle Konvergenz bei der anschließenden Integration der REDIM-Entwicklungsgleichung erreicht wird.

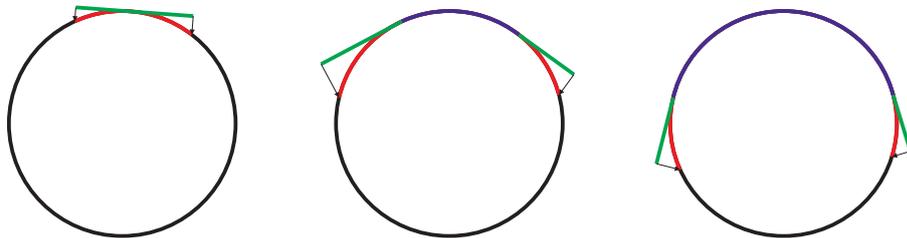


Abbildung 6.20.: Schematische Darstellung des sequentiellen Expansions-Relaxations-Verfahrens. Die REDIM ist hier als Kreis dargestellt, der sukzessive durch neu hinzukommende Stücke abgebildet wird. Die roten Bereiche ergeben sich aus der Relaxation der tangential erweiterten grünen Teilstücke.

Die Anwendung des Expansions-Relaxations-Verfahrens für die in Abbildung 6.17 dargestellte zweidimensionale Anfangsmannigfaltigkeit des vorgemischten Synthesegas-Luft-Systems kann anhand Abbildung 6.21 nachverfolgt werden. Dabei ist in den Abbildungen 6.21a und 6.21b eine Zwischenetappe innerhalb des Verfahrens dargestellt, in der die Integration der REDIM-Entwicklungsgleichung bereits abgeschlossen wurde. Durch die Anwendung der Expansionsgleichung 5.37 wird die in 6.21a und 6.21b dargestellte Domäne als nächstes tangential ausgedehnt.

In den Abbildungen 6.21c und 6.21d ist die Situation zum Ende der Expansion dargestellt. Dies ist anhand der vergrößerten Randzellen zu erkennen, die durch das tangential Expandieren der äußeren Randpunkte zustande kommen. Um eine zu starke Verzerrung der Randgitterzellen bei der Expansion zu vermeiden, wurde in diesem Beispiel der Vektor ψ_η in Gleichung 5.37 durch den Vektor $\Delta\psi^{in}$ ersetzt. Die Expansion erfolgt damit entlang der zweiten Parametrisierungsrichtung der REDIM, die bereits aus der hierarchischen Erstellung der Anfangsmannigfaltigkeit hervorgeht (siehe Abschnitt 6.3.1).

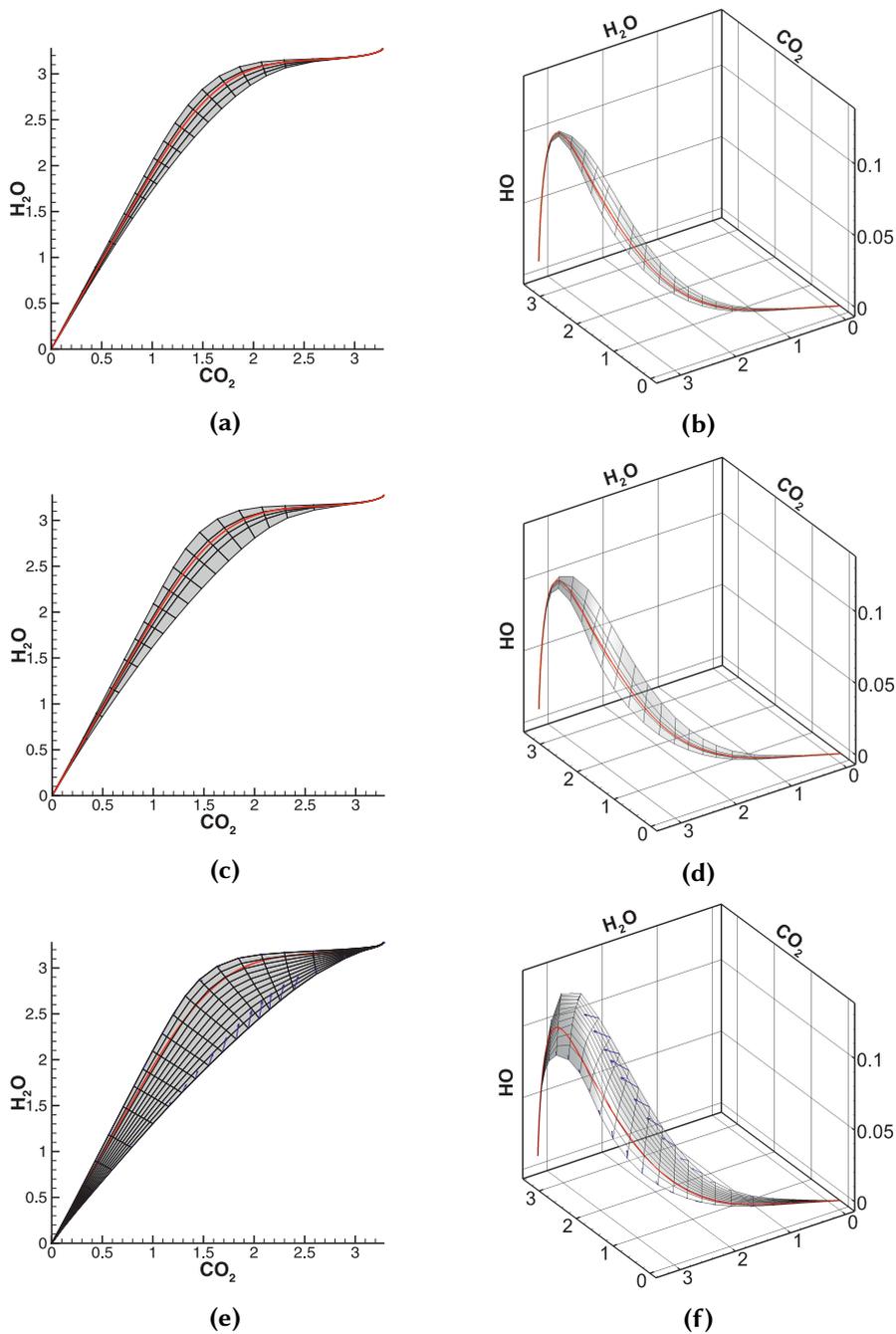


Abbildung 6.21.: Drei Teilschritte des Expansions-Relaxations-Verfahrens für die in Abbildung 6.17 dargestellte zweidimensionale Anfangsmannigfaltigkeit des vorgemischten Synthesegas-Luft-Systems in CO_2 - H_2O -Projektionen (a,c,e) und CO_2 - H_2O -OH-Projektionen (b,d,f) des Zustandsraums, Einheiten der spezifischen Molzahlen φ in mol kg^{-1} . Die rote Kurve entspricht der 1D-REDIM, die während der Expansion in die 2D-REDIM eingebettet ist. Die blauen Vektorpfeile in (e) und (f) zeigen die Richtung des Vektorfeldes am Rand der REDIM an.

Für die im Anschluss an die tangentielle Expansion erfolgende Relaxation durch die Anwendung der REDIM-Entwicklungsgleichung sind möglichst gleichmäßige Gitterpunktabstände wünschenswert. Da sich die Expansion lediglich auf die Gitterpunktabstände in θ_2 -Richtung auswirkt, reicht eine Neuordnung der Gitterpunkte für die zweite Parametrisierungsrichtung, um ein gleichmäßiges Gitter wiederherzustellen (vgl. Abbildungen 6.21a und 6.21b). Die Neuverteilung basiert dabei auf der Bildung eindimensionaler Kurven, die sich für $\theta_1 = \text{const.}$ ergeben und deshalb nur noch von der zweiten Parametrisierungsvariablen θ_2 abhängen. Unter dem Einsatz des in Abschnitt 6.1.2 vorgestellten Reparametrisierungsverfahrens werden die Gitterpunkte dieser eindimensionalen Kurven äquidistant nach der Bogenlänge angeordnet (Gleichung 6.3), wodurch sich wieder ein gleichmäßiges Gitter einstellt. Durch die Verwendung der Bogenlänge als Parametrisierungsvariable ist zudem sichergestellt, dass ein Vertauschen der Punktereihenfolge verhindert und der expandierte REDIM-Bereich eindeutig beschrieben ist. Neben der Reverteilerung der Gitterpunkte in Expansionsrichtung ist das Expansions-Relaxations-Verfahren durch das Hinzufügen neuer Punkte gekennzeichnet. Dies wird notwendig, da mit zunehmender Expansion der Abstand zwischen den Gitterpunkten in θ_2 -Richtung ansteigt und dadurch eine ausreichend genaue Darstellung des transienten Systemverhaltens mit Hilfe der REDIM nicht mehr gewährleistet werden kann. Im hier behandelten Beispiel werden ausgehend von der Anfangsmannigfaltigkeit, die drei Gitterpunkte in θ_2 -Richtung beinhaltet (Abbildung 6.21a), insgesamt acht Gitterpunkte entlang der zweiten Parametrisierungsrichtung bis zum Abschluss des Expansions-Relaxations-Verfahrens hinzugefügt (Abbildungen 6.21e und 6.21f). Die Schätzungen der Zustandsgradienten ξ , die für die Anwendung der Expansions- und Entwicklungsgleichung angegeben werden müssen, werden im gezeigten Synthesegas-Luft-System aus der stationären Lösung des detaillierten eindimensionalen Flammenprofils entnommen (siehe Abschnitt 6.1.4). Dieses ist in Abbildung 6.21 rot dargestellt und entspricht gleichzeitig der eindimensionalen REDIM, für welche die selben Schätzungen der Zustandsgradienten verwendet wurden. Wie Abbildung 6.21 zeigt, ist das Profil während des gesamten Expansions-Relaxations-Verfahrens in die zweidimensionale REDIM eingebettet, wodurch der hierarchische REDIM-Aufbau dokumentiert wird. Die aus dem detaillierten eindimensionalen Profil stammenden Schätzungen der Zustandsgradienten beeinflussen gemäß Abschnitt 5.2 maßgeblich die Ausdehnung der REDIM-Domäne, die sich durch die Erfüllung von Gleichung 5.36 einstellt. In der praktischen Anwendung der Expansionsgleichung kann es jedoch notwendig sein, die REDIM-Ränder über das tangentielle Gleichgewicht hinaus zu erweitern, das sich zwischen chemischer Reaktion und Diffusion am Rand ergibt und in Abschnitt 5.2 als tangentielle Invarianzbedingung des Randes bezeichnet wird. Hierfür werden modifizierte

Formen der Gleichungen 5.36 und 5.37 eingeführt, in denen eine Verstärkung oder Abschwächung der Diffusion am REDIM-Rand ermöglicht wird, um so eine zusätzliche Expansion herbeiführen zu können.

$$\psi_\eta^+ \left(\mathbf{F}(\psi^b) + a \cdot \frac{1}{\rho} (\mathbf{D}\psi_\theta \tilde{\chi})_\theta \tilde{\chi} \right) \leq 0 \quad (6.51)$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \psi_\eta^+ \left(\mathbf{F}(\psi^b) + a \cdot \frac{1}{\rho} (\mathbf{D}\psi_\theta \tilde{\chi})_\theta \tilde{\chi} \right), \quad (6.52)$$

wobei

$$a \begin{cases} < 1 & \text{für } \psi_\eta^+ \mathbf{F} > 0 \\ > 1 & \text{für } \frac{1}{\rho} (\mathbf{D}\psi_\theta \tilde{\chi})_\theta \tilde{\chi} > 0 \end{cases}. \quad (6.53)$$

Gemäß Gleichung 6.53 wird die Diffusion mit Hilfe des Faktors a an denjenigen Randzuständen abgeschwächt, an denen der chemische Reaktionsvektor nach außen zeigt und eine Abschwächung der Diffusion daher zu einer zusätzlichen Erweiterung der REDIM-Domäne führt. Im Gegenzug wird die Diffusion mit Hilfe von a überall dort verstärkt, wo die Diffusion selbst nach außen zeigt. Im Falle von $a = 0$ für $\psi_\eta^+ \mathbf{F} > 0$ bzw. $a \rightarrow \infty$ für $\frac{1}{\rho} (\mathbf{D}\psi_\theta \tilde{\chi})_\theta \tilde{\chi} > 0$ führt das modifizierte Verfahren zu einer konvexen REDIM-Domäne, an deren Ränder der chemische Reaktionsvektor überall ins Innere der REDIM zeigt (siehe Abschnitt 5.2).

Die Auswirkung der Anwendung der modifizierten Expansionsgleichung 6.52 für die hier betrachtete zweidimensionale REDIM des Synthesegas-Luft-Systems wird in den Abbildungen 6.21e und 6.21f dargestellt. Die Vektorpfeile symbolisieren dabei die Richtung des nicht modifizierten Vektorfeldes am REDIM Rand. Wie zu erkennen ist, zeigt das Vektorfeld überall ins Innere der REDIM. Zudem ist anhand der Form der REDIM zu erkennen, dass durch das Expansionsverfahren die charakteristischen Eigenschaften der detaillierten Systemdynamik des in Abbildung 6.18 dargestellten gestörten Profils bereits im Entstehungsprozess der REDIM abgebildet werden können. So ist die finale REDIM im Bereich schneller chemischer Prozesse in der Nähe des chemischen Gleichgewichts durch eine besonders schmale, fast eindimensionale Domäne gekennzeichnet. Insgesamt ist in Abbildung 6.21e eine fast vollständig konvexe REDIM-Domäne zu erkennen, sodass von einer sicheren Anwendung der REDIM in reduzierten Berechnungen ausgegangen werden kann. Die zweidimensionalen REDIM aus den Abbildungen 6.21e und 6.21f wird im Folgenden verwendet, um mit Hilfe von Gleichung 6.49 aus Abschnitt 6.3.1 eine dreidimensionale Anfangsmannigfaltigkeit zu erstellen, die wiederum den Ausgangspunkt für ein dreidimensionales Expansions-Relaxations-Verfahren repräsentiert. Abbildung 6.22 stellt drei Teilschritte bei

6. Implementierung der REDIM-Methode

der Konstruktion einer dreidimensionalen REDIM für das beschriebene vorge-mischte Synthesegas-Luft-System dar. Analog zur zweidimensionalen REDIM erfolgt das Wachstum hierbei in die dritte Parametrisierungsrichtung, bis in den Abbildungen 6.22e und 6.22e die finale 3D-REDIM erreicht wird. Diese ist in Abbildung 6.23 nochmals zusammen mit der zweidimensionalen REDIM sowie den gestörten eindimensionalen Flammenprofilen aus Abbildung 6.18 dargestellt. Es ist zu sehen, dass die 3D-REDIM sowohl die 2D-REDIM beinhaltet, als das komplette transiente Verhalten der gestörten Flammenprofile abdeckt.

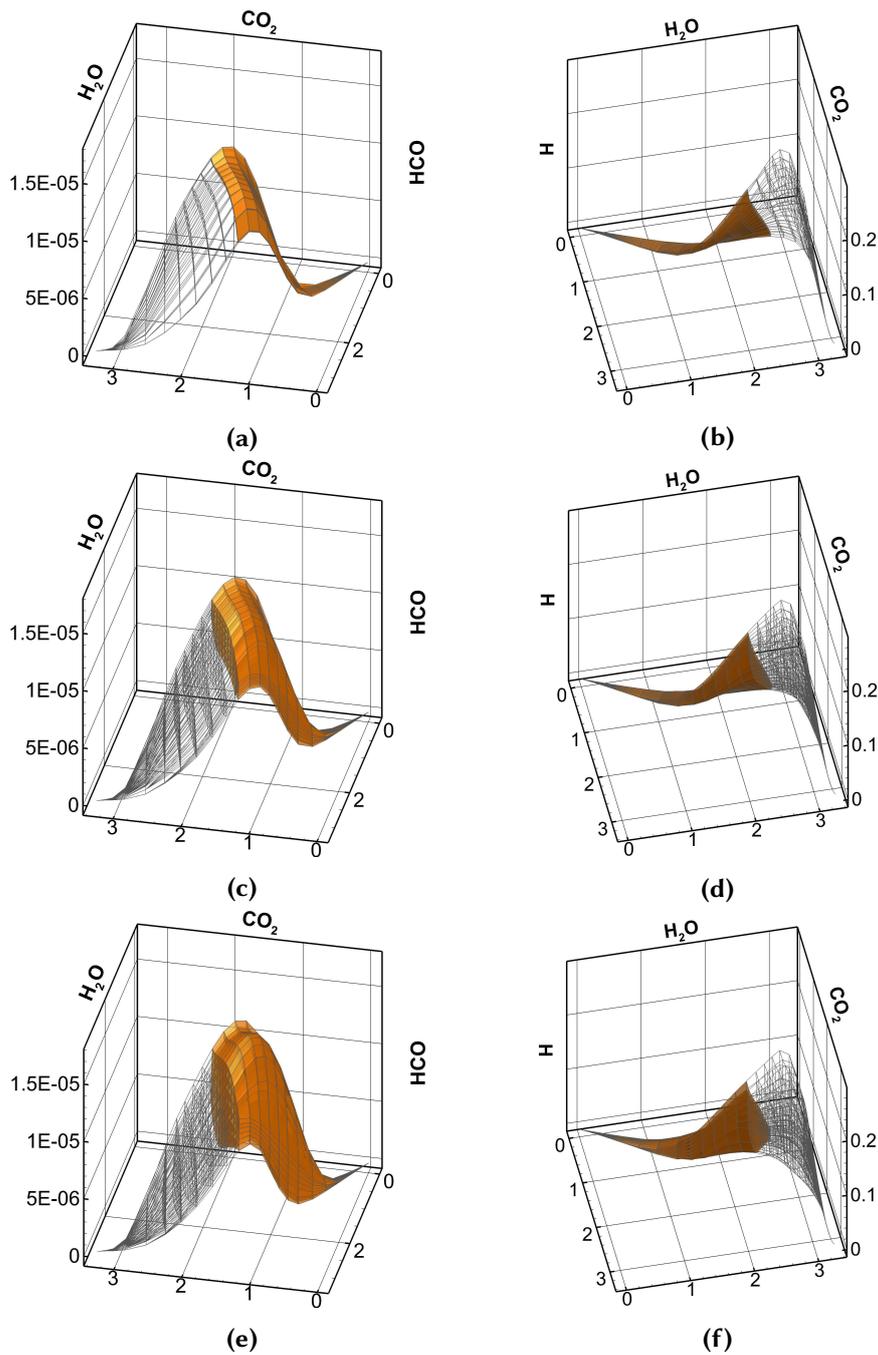


Abbildung 6.22.: Drei Teilschritte des Expansions-Relaxations-Verfahren für die dreidimensionale REDIM eines vorgemischten Synthesegas-Luft-Systems in CO_2 - H_2O - HCO -Projektionen (a,c,e) und CO_2 - H_2O - H -Projektionen (b,d,f) des Zustandsraums, Einheiten der spezifischen Molzahlen φ in mol kg^{-1} .

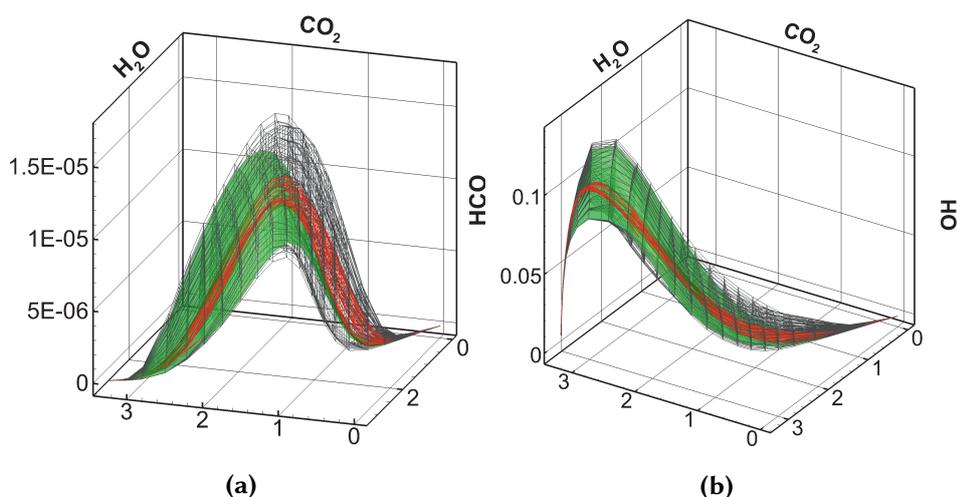


Abbildung 6.23.: Dreidimensionale REDIM (graues Gitter), zweidimensionale REDIM (grüne Fläche) und das in Abbildung 6.18 dargestellte gestörte Profile (rote Kurven) eines vorgemischten Synthesegas-Luft-Systems in einer CO_2 - H_2O - HCO -Projektion (a) und einer CO_2 - H_2O - OH -Projektion (b) des Zustandsraums, Einheiten der spezifischen Molzahlen φ in mol kg^{-1} . Die 2D-REDIM ist in die 3D-REDIM eingebettet, die nach der Expansion die komplette Dynamik des gestörten Profils beinhaltet.

6.4. Anwendung der REDIM für die numerische Lösung des reduzierten PDE-Systems

Gemäß Abschnitt 5.4 werden für die numerische Lösung des reduzierten PDE-Systems 5.40 die auf der REDIM vorliegenden Größen ψ_θ^+ , $\psi_\theta^+ F$ und $D\psi_\theta$ verwendet. Nach der numerischen Integration der REDIM-Entwicklungsgleichung liegen diese Größen an den jeweiligen REDIM-Gitterpunkten vor und werden für die Implementierung in reduzierten Simulationen in tabellarischer Form zur Verfügung gestellt. Abbildung 6.24 demonstriert die Prozedur, mit der auf die REDIM-Tabelle zugegriffen wird. Neben den für die numerische Lösung des reduzierten Systems notwendigen Größen beinhaltet die Tabelle darüber hinaus die REDIM Zustände $\psi(\theta)$. Aus der orts- und zeitabhängigen Lösung des reduzierten PDE-Systems $\theta(x, t)$ ergeben sich durch einen erneuten Zugriff auf die REDIM-Tabelle die auf der REDIM liegenden reduzierten Zustände $\psi(\theta(x, t))$, die die reduzierte Dynamik des Systems kennzeichnen [84].

Die numerische Lösung des reduzierten PDE-Systems 5.40 erfolgt in dieser Arbeit mit dem Programmpaket INSFLA [29], das die instationäre Simulation eindimensionaler Flammen unter Verwendung detaillierter und reduzierter kinetischer Modelle ermöglicht. In Analogie zum detaillierten PDE-System wird

6.4. Anwendung der REDIM für die numerische Lösung des reduzierten PDE-Systems

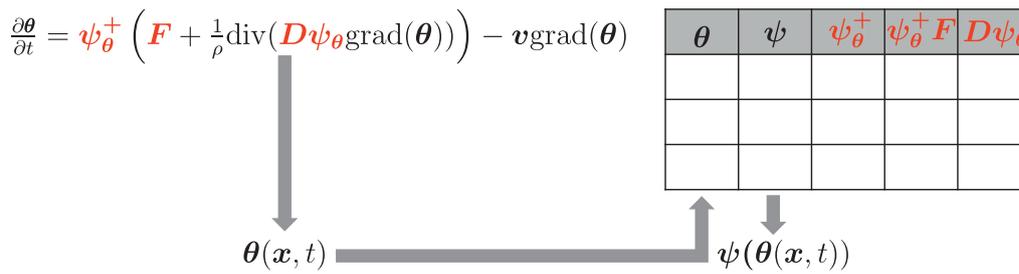


Abbildung 6.24.: Anwendung der REDIM Tabelle für die numerische Lösung des reduzierten Systems, Abbildung entnommen aus [84].

das reduzierte PDE-System entlang der eindimensionalen Ortsvariablen x diskretisiert, um anschließend die zeitliche Integration mit Hilfe des Lösers LIMEX [100, 101] durchzuführen. In Abbildung 6.25a ist der schematische Verlauf der eindimensionalen Ortsprofile eines zweidimensionalen reduzierten Systems dargestellt. Diese ergeben das in Abbildung 6.25b gezeigte eindimensionale Profil im Parameterraum, der durch die generalisierten Koordinaten des REDIM-Gitters aufgespannt wird.

Um die numerische Lösung des reduzierten PDE-Systems zu ermöglichen, müssen folgende zwei Voraussetzungen erfüllt werden

1. Es wird eine diskrete Anfangslösung $\theta(x, t_0)$ benötigt, wobei für die jeweiligen Ortsprofile $\theta_i(x, t_0)$ die Bedingung $\theta_{i,min} \leq \theta_i(x, t_0) \leq \theta_{i,max}$ erfüllt werden muss. Hierbei entsprechen $\theta_{i,min}$ und $\theta_{i,max}$ den minimalen bzw. maximalen Werten der generalisierten Koordinaten rechteckigen des REDIM-Gitters.
2. Die an den REDIM-Gitterpunkten vorliegenden Größen (Abbildungen 6.24 und 6.25b) müssen für die Berechnung des reduzierten Vektorfeldes $\hat{\phi}$ an jedem diskreten Punkt des eindimensionalen Ortsgitters $\theta(x, t)$ bereitgestellt werden.

Im Allgemeinen kann eine Anfangslösung auf beliebige Art und Weise generiert werden, so lange das reduzierte Anfangsprofil die Grenzen des REDIM-Gitters nicht überschreitet. Im Hinblick auf eine Vergleichbarkeit reduzierter und detaillierter Simulationen zum Zwecke der Validierung der REDIM-Methode bietet sich eine physikalisch motivierte Prozedur zur Erstellung von Anfangslösungen $\theta(x, t_0)$ an [84, 85]. Dabei wird zunächst eine detaillierte Anfangslösung $\psi(x, t_0)$ konstruiert, die durch eine anschließende Projektion auf die REDIM in $\theta(x, t_0)$ überführt wird. Dies ermöglicht die Verwendung stationärer detaillierter Flammenprofile als Grundlage für die Konstruktion von $\theta(x, t_0)$ und damit eine

6. Implementierung der REDIM-Methode

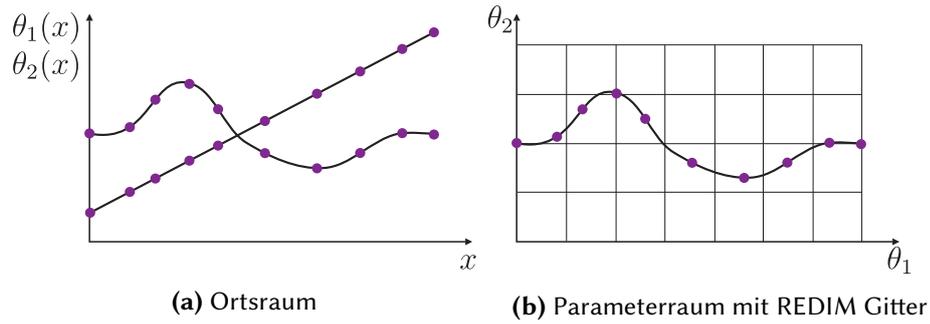


Abbildung 6.25.: Schematische Darstellung eines zweidimensionalen reduzierten Systems.

geeignete Ausgangsbasis für den Vergleich reduzierter und detaillierter Simulationen. Die technische Umsetzung des Projektionsverfahrens beruht auf der in Abschnitt 6.1.4, Abbildung 6.8, beschriebenen Methode zur Ermittlung korrespondierender Schätzungen der Zustandsgradienten ξ für die REDIM-Entwicklungsgleichung. Demnach wird zunächst mit Hilfe von Gleichung 6.33 jedem Punkt $\psi(x_j, t_0)$ des detaillierten Anfangsgitters ein korrespondierender REDIM-Zustandspunkt $\psi(\theta^*)$ zugeordnet. Für die Koordinaten des Anfangsprofils $\theta(x_j, t_0)$ an den diskreten Ortspunkten x_j folgt dann

$$\theta(x_j, t_0) = \theta^* + \psi_{\theta}^+(\theta^*)(\psi(\theta^*) - \psi(x_j, t_0)); \quad j = 1, \dots, n_{det}, \quad (6.54)$$

mit der Moore-Pensrose-Pseudoinversen $\psi_{\theta}^+(\theta^*)$ an der korrespondierenden Stelle θ^* und n_{det} als die Anzahl der Gitterpunkte des detaillierten Anfangsprofils.

Zur Bereitstellung der für die Integration des reduzierten PDE-Systems notwendigen Größen, die im Folgenden stellvertretend mit $\mathbf{Y} = (\psi_{\theta}^+, \psi_{\theta}^+ \mathbf{F}, \mathbf{D}\psi_{\theta})$ bezeichnet werden sollen, werden in dieser Arbeit zwei unterschiedliche Methoden angewendet. Beim ersten Verfahren werden die an den diskreten Ortspunkten des reduzierten Systems benötigten Größen $\mathbf{Y}(\theta(x_j, t))$ mittels linearer Interpolation der an korrespondierenden REDIM-Gitterpunkten vorliegenden Größen $\mathbf{Y}(\theta^*)$ berechnet

$$\mathbf{Y}(\theta(x_j, t)) = \mathbf{Y}(\theta^*) + \frac{\partial \mathbf{Y}}{\partial \theta} \cdot (\theta(x_j, t) - \theta^*); \quad j = 1, \dots, n_{det}. \quad (6.55)$$

θ^* entspricht dabei demjenigen REDIM-Gitterpunkt, der $\theta(x_j, t)$ in Sinne der euklidischen Norm $\|(\theta^* - \theta(x_j, t))\|$ am nächsten liegt. Die Approximation von $\frac{\partial \mathbf{Y}}{\partial \theta}$ erfolgt dabei durch die Bildung von Differenzenquotienten.

Die Vorteile dieses Verfahrens liegen in seiner einfachen Implementierung und im geringen Speicherbedarf bei der Integration des reduzierten PDE-Systems.

Gleichzeitig kann das beschriebene lineare Interpolationsverfahren allerdings zu Schwierigkeiten bei der numerischen Integration mit Hilfe von LIMEX [100, 101] führen, was sich insbesondere bei einer hohen Anzahl an diskreten Ortsgitterpunkten in $\boldsymbol{\theta}(x, t)$ bemerkbar macht. Der Grund hierfür ist die Zeitschrittweitensteuerung bei der zeitlichen Integration mit dem in LIMEX verwendeten Extrapolationsverfahren [100, 101], die auf der numerisch berechneten Jacobi-Matrix der rechten Seite $\hat{\phi}$ des reduzierten PDE-Systems basiert. Durch die Anwendung von Gleichung 6.55 kann es zu starken Unterschieden in $\hat{\phi}$ zwischen zwei benachbarten Punkten des reduzierten Ortsprofils kommen, wodurch sich große Differenzenquotienten bei der numerischen Berechnung der Jacobi-Matrix ergeben und in Folge dessen eine geringe Zeitschrittweite resultiert. Dies tritt insbesondere dann auf, wenn sich entsprechend Abbildung 6.25b mehrere Gitterpunkte des $\boldsymbol{\theta}(x, t)$ -Profils innerhalb einer Zelle des REDIM-Gitters befinden und jeweils unterschiedliche nächste Nachbarn $\boldsymbol{\theta}^*$ für die jeweiligen $\boldsymbol{\theta}(x, t)$ -Punkte identifiziert werden.

Eine Möglichkeit zur Behebung dieser Problematik besteht darin, anstatt einer lokalen linearen Approximation der benötigten Größen \mathbf{Y} eine globale Approximation von \mathbf{Y} über das gesamte Gitter durchzuführen. Das Ziel ist es dabei, die bei der linearen Approximation auftretenden Diskontinuitäten zu vermeiden und damit eine verbesserte zeitliche Integration unter Verwendung von LIMEX zu erreichen. Für eine globale Approximation können die in Abschnitt 6.1.2 beschriebenen Interpolationsfunktionen genutzt werden. Hierfür stehen unterschiedliche Funktionsarten zur Verfügung, die gemäß Abschnitt 6.1.2 im Rahmen dieser Arbeit in einer Bibliothek zusammengefasst wurden. Für die Approximation der einzelnen Größen Y^j ergibt sich damit

$$Y^j(\boldsymbol{\theta}) = \sum_{k=1}^{n_p} c_k^j f_k(\boldsymbol{\theta}); \quad j = 1, \dots, 2 \cdot m \cdot n + m, \quad (6.56)$$

mit den Ansatzfunktionen f_k und den Koeffizienten c_k^j (Abschnitt 6.1.2). Die Koeffizienten c_k^j werden gemäß Abschnitt 6.1.2 durch das Lösen der Interpolationsaufgabe 6.14 und 6.15 erhalten. Die Anzahl an Koeffizienten entspricht dabei der Anzahl an REDIM-Gitterpunkten n_p . Für den Zugriff auf $Y^j(\boldsymbol{\theta})$ während der zeitlichen Integration müssen somit für jede Größe die jeweiligen Koeffizienten gespeichert werden. Dies führt jedoch besonders bei REDIM-Gittern höherer Dimension zu einem großen Zeitbedarf bei der Verwendung von Interpolationsfunktionen, was dem Vorteil einer kontinuierlichen Darstellung von $Y^j(\boldsymbol{\theta})$ kritisch gegenüber steht.

Um den Zeitbedarf bei der Verwendung von Interpolationsfunktionen zu reduzieren, wird das Interpolationsverfahren an dieser Stelle in einer modifizierten

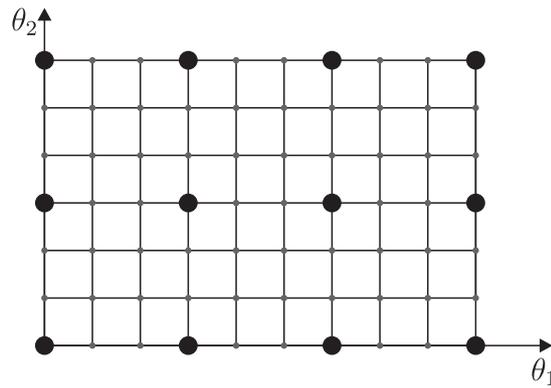


Abbildung 6.26.: Schematische Darstellung eines zweidimensionalen REDIM-Gitters im Parameterraum. Die fetten schwarzen Punkte dienen als Stützstellen für die Bestimmung der Interpolationsfunktion. Die kleinen grauen Punkte werden für die Optimierung des Parametersatzes (Gleichung 6.59) verwendet.

Form angewendet, die im Rahmen studentischer Arbeiten implementiert wurde [95, 102]. Die Modifizierung beruht hierbei auf der Anwendung eines Optimierungsverfahrens, das im Folgenden näher beschrieben werden soll.

Anstelle aller n_p -REDIM-Gitterpunkte wird für die Approximation der Größen \mathbf{Y} gemäß Gleichung 6.56 zunächst eine geringere Anzahl an Gitterpunkten n_o verwendet, wie Abbildung 6.26 verdeutlicht. Hierbei stellen die großen schwarzen Punkte die n_o Stützstellen des REDIM-Gitters dar, auf Basis derer eine Summe aus n_o gewichteten Interpolationsfunktionen gefunden wird, welche die Interpolationsaufgabe für diese n_o Gitterpunkte lösen. Die damit erstellte Approximation bildet zunächst nicht die Größen an den restlichen, in Abbildung 6.26 grau dargestellten, Gitterpunkten ab. Durch die anschließende Anwendung eines Optimierungsverfahrens können die Parameter der n_o Interpolationsfunktionen allerdings so verändert werden, dass eine bestmögliche Approximation aller n_p Größen erreicht wird.

Der Optimierung liegt die Bildung der kleinsten Fehlerquadrate zwischen den Funktionswerten der Interpolationsfunktionen Φ^j , die auf Basis der n_o Gitterpunkte gebildet werden, und den Werten der jeweiligen Größen Y^j an den n_p REDIM-Gitterpunkten zugrunde. Hierdurch werden die sogenannten Zielfunktionen des Optimierungsproblems definiert

$$B^j(\mathbf{p}^j) = \sum_{i=1}^{n_p} (\Phi^j(\boldsymbol{\theta}_i, \mathbf{p}^j) - (Y^j(\boldsymbol{\theta}_i)))^2; \quad j = 1, \dots, 2 \cdot m \cdot n + m, \quad (6.57)$$

mit den Parametervektoren \mathbf{p}^j . Werden wie in Abschnitt 6.1.2 normierte Gauss-Funktionen als Ansatzfunktionen verwendet, ergibt sich für die Parametervektoren $\mathbf{p}^j = (c_1^j, \dots, c_{n_o}^j, z_1^*, \dots, z_{n_o}^*, \sigma_1^*, \dots, \sigma_{n_o}^*)$ (siehe Gleichung 6.22). Das Ziel der Optimierung ist es, einen veränderten Parametersatz $\tilde{\mathbf{p}}^j$ zu finden, für den die Funktionen B^j und damit der quadratische Abstand zwischen Φ^j und Y^j an jedem REDIM-Gitterpunkt minimiert werden. Hierbei ist es sinnvoll, die durch Gleichung 6.57 beschriebenen Zielfunktionen durch die Nebenbedingung zu erweitern, dass die Funktionswerte an den n_o Hauptstützstellen erhalten bleiben müssen. Es ergibt sich daraus die Lagrange-Funktion [87] zum beschriebenen Optimierungsproblem zu

$$L^j(\mathbf{p}^j, \boldsymbol{\nu}^j) = B^j(\mathbf{p}^j) + \sum_{k=1}^{n_o} \nu_k^j g_k^j(\boldsymbol{\theta}_i, \mathbf{p}^j); \quad j = 1, \dots, 2 \cdot m \cdot n + m. \quad (6.58)$$

mit den Lagrange-Multiplikatoren $\boldsymbol{\nu}^j = (\nu_1^j, \dots, \nu_{n_o}^j)^T$ [87] und den algebraischen Nebenbedingungen $g^j(\boldsymbol{\theta}_i, \mathbf{p}^j) = 0$. Für das Optimierungsproblem folgt somit

$$\begin{aligned} \frac{\partial L^j(\tilde{\mathbf{p}}^j, \tilde{\boldsymbol{\nu}}^j)}{\partial p_l^j} &= 0; \quad l = 1, \dots, 3 \cdot n_o; \quad j = 1, \dots, 2 \cdot m \cdot n + m \\ \frac{\partial L^j(\tilde{\mathbf{p}}^j, \tilde{\boldsymbol{\nu}}^j)}{\partial \nu_l^j} &= 0; \quad l = 1, \dots, n_o; \quad j = 1, \dots, 2 \cdot m \cdot n + m \end{aligned} \quad (6.59)$$

mit dem optimierten Parametersatz $\tilde{\mathbf{p}}^j$ und den zugehörigen Lagrange-Multiplikatoren $\tilde{\boldsymbol{\nu}}^j$ [87]. Gleichung 6.59 stellt ein nichtlineares Gleichungssystem mit $4 \cdot n_o$ Gleichungen dar, das ausgehend von den durch die Interpolationsaufgabe gefundenen Parametern iterativ gelöst werden muss.

Die Anwendung der beschriebenen Optimierung erlaubt es, anstatt n_p die weitaus geringere Anzahl von n_o Interpolationsfunktionen für die Approximation der benötigten Größen \mathbf{Y} zu verwenden und gleichzeitig eine hohe Genauigkeit der Approximation aufrecht zu erhalten. Hierdurch werden sowohl die durch die lineare Interpolation auftretenden Probleme bei der Integration des reduzierten Systems gelöst, als auch eine beschleunigte Verwendung der REDIM-Tabelle in reduzierten Simulationen ermöglicht. Dies wurde anhand kritischer Problemstellungen im Zuge zweier studentischer Arbeiten überprüft und bestätigt [95, 102].

6.5. Zusammenfassung der REDIM-Implementierungsstrategien

Die Implementierung der REDIM-Methode setzt sich zusammen aus den Verfahren zur numerischen Lösung der REDIM-Entwicklungsgleichung 5.11 und des reduzierten Systems 5.40 auf der einen Seite, sowie den Verfahren zur Konstruktion der REDIMs auf der anderen Seite.

Für die numerische Lösung der REDIM-Entwicklungsgleichung wird die REDIM in Form eines m -dimensionalen Gitters dargestellt (Abschnitt 6.1), an dessen Gitterpunkten die Differentiale durch die Anwendung des Finiten-Differenzen-Verfahrens [5] oder von analytisch ableitbaren Interpolationsfunktionen (Abschnitt 6.1.2) approximiert werden. Hierfür wurde im Rahmen dieser Arbeit eine Bibliothek unterschiedlicher Ansatzfunktionen objektorientiert implementiert. Die zeitliche Integration der diskretisierten REDIM-Entwicklungsgleichung erfolgt mit Hilfe eines semi-impliziten Eulerverfahrens [22] (Abschnitt 6.1.3). Die Parallelitätsbedingung am REDIM-Rand (Gleichung 5.33) wird durch die Konstruktion eines lokalen Koordinatensystems am Rand realisiert, wobei die Bildung der Ableitung wiederum mit Hilfe von Interpolationsfunktionen erfolgt (Abschnitt 6.1.5). Als Tabelle gespeichert findet die REDIM anschließend in der numerischen Lösung des reduzierten Systems Anwendung (Abschnitt 6.4). Mit Hilfe eines Optimierungsverfahrens kann dabei der Zugriff auf die Tabelle und damit die numerische Lösung auf Basis des Lösers LIMEX [101] effizienter gestaltet werden (Abschnitt 6.4).

Für die Konstruktion der REDIM werden zwei unterschiedliche Methoden vorgestellt. Bei der ersten handelt es sich dabei um die bisher verfolgte Vorgehensweise zur Erstellung von REDIMs, die ein relativ hohes Maß an problemspezifischem Vorwissen voraussetzt (Abschnitt 6.2) und gewisse Einschränkungen hinsichtlich der Dimensionserweiterung und Einstellung der Domäne aufweist. Die zweite Vorgehensweise wurde im Zuge dieser Arbeit entwickelt und macht sich die in Abschnitt 5.3 vorgestellte hierarchische Natur von REDIMs sowie die charakteristische Eigenschaft der REDIM-Ränder (Abschnitt 5.1.3) zu Nutze. Es ergibt sich daraus eine Methode, die die adaptive Konstruktion von REDIMs beliebiger Dimension und Ausdehnung ermöglicht und daher eine Erweiterung bzw. Verbesserung zu der bisher verfolgten Prozedur darstellt (Abschnitt 6.3).

Die beiden vorgestellten Konstruktionsmethoden werden im folgenden Kapitel für die Konstruktion von REDIMs für die in dieser Arbeit als Benchmarksysteme herangezogene vorgemischte laminare Synthesegas-Luft-Flamme sowie die nicht-vorgemischte H_2 - N_2 -Luft-Gegenstromflamme verwendet. Diese werden

hinsichtlich ihrer Fähigkeit überprüft, das dynamische Verhalten des detaillierten Systems in kritischen Szenarien abzubilden.

7. Anwendung und Validierung der REDIM-Methode

Nachdem in den beiden vorherigen Kapiteln die mathematischen Grundlagen zur REDIM-Methode sowie ihre technische Umsetzung erläutert wurde, soll die Methode im Zuge dieses Kapitels anhand konkreter verbrennungstechnischer Anwendungsfälle validiert werden. Die Inhalte der nachfolgenden Abschnitte können dabei in zwei Hauptteile gegliedert werden, von denen Abschnitt 7.1 den ersten und Abschnitt 7.2 sowie Abschnitt 7.3 den zweiten darstellen.

Die Untersuchungen in Abschnitt 7.1 haben zum Ziel, die bereits in Abschnitt 5.1.2 beschriebene Eigenschaft der REDIM nachzuweisen, dass mit zunehmender Dimension die Sensitivität der REDIM hinsichtlich der Schätzung der Gradienten der lokalen Parameter χ abnimmt. Diese besonders wichtige Eigenschaft der REDIM bildet die Voraussetzung für die Verwendung vereinfachter Verfahren zur Bestimmung von χ , wodurch der Beitrag an benötigtem Vorwissen für die Anwendung der REDIM-Methode auf ein geringes Maß gesenkt werden kann.

Der Fokus im zweiten Teil dieses Kapitels liegt auf der Untersuchung transien-ter Phänomene in eindimensionalen Verbrennungssystemen unter Anwendung des reduzierten Modells. Dieses beschreibt gemäß Abschnitt 5.4 und Abschnitt 6.4 die örtliche und zeitliche Veränderung der lokalen Parameter $\theta(x, t)$, woraus sich durch den Zugriff auf die REDIM-Zustände $\psi(\theta)$ die reduzierten Zustand-profile $\psi(\theta(x, t))$ ergeben (siehe Abbildung 6.24). Als Vergleichs- bzw. Validierungsgrundlage für die reduzierten Lösungen $\psi(\theta(x, t))$ dienen im Folgenden hauptsächlich die Lösungen des nicht reduzierten, detaillierten Systems $\psi(x, t)$ (Kapitel 2). Das Ziel ist es festzustellen, inwieweit die entlang der REDIM ablaufende reduzierte Dynamik die charakteristischen Eigenschaften des detaillierten Systems korrekt wiedergibt.

Bei den eindimensionalen Verbrennungssystemen, deren dynamisches Verhalten untersucht werden soll, handelt es sich zum einen um eine vorgemischte Synthesegas-Luft-Flamme (Abschnitt 7.2) und zum anderen um eine stark verdünnte nicht-vorgemischte H_2 - N_2 -Luft Gegenstromflamme (Abschnitt 7.3). Diese Flammenarten dienen in dieser Arbeit als Benchmarkmodelle und erlauben eine anschauliche Interpretation der Ergebnisse sowie eine Übertragung der Zusammenhänge auf andere Zusammensetzungen bzw. Reaktionssysteme. So wird z.B.

in [41] gezeigt, dass sich die reduzierte Reaktionskinetik der Methanverbrennung aus der reduzierten Kinetik der Synthesegasoxidation aufbauen lässt.

Zum Zwecke der Validierung der REDIM-Methode werden für die genannten eindimensionalen Verbrennungssysteme kritische Testfälle generiert, mit denen turbulente Strukturen und Phänomene in dreidimensionalen Flammen sinnvoll nachgebildet werden sollen (vgl. Kapitel 3). Während für die vorge-mischte Synthesegas-Luft-Flamme REDIMs unterschiedlicher Dimension zum Einsatz kommen (1D, 2D, 3D), beruhen die reduzierten Rechnungen der nicht-vorgemischten H_2 - N_2 -Luft Gegenstromflamme auf einer 2D-REDIM.

Die Analysen zum Verhalten des detaillierten und reduzierten Modells werden für beide Anwendungsfälle durch eine lokale Stabilitätsanalyse auf den REDIMs gestützt. Das Verhalten des reduzierten und detaillierten Systems wird damit im Kontext der in schnell und langsam aufspaltbaren Systemdynamik betrachtet. Dies bildet zum einen eine wichtige Grundlage für die Erklärung charakteristischer Systemeigenschaften. Zum anderen wird dadurch die Bestätigung geliefert, dass die REDIM attraktive Eigenschaften hat und die Anwendung der REDIM-Entwicklungsgleichung somit sicher erfolgen kann.

Die Inhalte und Ziele folgender Abschnitte sollen hier nochmals kurz zusammengefasst werden. Es soll gezeigt werden, dass

- der Einfluss der Gradientenschätzung χ mit steigender REDIM-Dimension abnimmt (Abschnitt 7.1)
- die REDIM attraktive Eigenschaften hat, wodurch eine sichere Anwendung des reduzierten Modells gewährleistet ist (Abschnitt 7.2 und Abschnitt 7.3)
- die REDIM die dynamischen Eigenschaften des detaillierten Systems in Form des reduzierten Systems abbildet (Abschnitt 7.2 und Abschnitt 7.3)

Die reduzierten und detaillierten Berechnungen erfolgen unter Anwendung des Programms INSFLA [29]. Im Zuge der Simulationen werden folgende vereinfachende Annahmen getroffen

- Es wird von idealen Gasen und einem konstanten Druck ausgegangen.
- Der Fernwirkung durch Wärmestrahlung wird nicht berücksichtigt.

7.1. (In)-Sensitivität der REDIM bezüglich der Gradientenschätzung

Die Abschätzung physikalischer Prozesse entlang der REDIM durch die Schätzung der lokalen Gradienten χ ist ein zentraler Punkt in der REDIM Modellredukti-

onsmethode. Gemäß Abschnitt 5.1.2 wird durch die Angabe von χ die Kopplung zwischen den durch $\frac{1}{\rho}(\mathbf{D}\psi_{\theta}\chi)_{\theta}$ χ beschriebenen Diffusionsprozessen und den chemischen Prozessen $\mathbf{F}(\psi)$ auf der REDIM gesteuert. Demnach nehmen die Schätzungen χ Einfluss auf die letztendliche Lage und Form der REDIM, die sich aus der Anwendung der REDIM-Entwicklungsgleichung ergeben (Abschnitt 5.1.1). Während in Abschnitt 5.1.2 die theoretischen Hintergründe zu dieser Vorgehensweise beschrieben werden, stellt Abschnitt 6.1.4 praktische Methoden für die Bestimmung von χ auf Basis von Schätzungen der Zustandsgradienten ξ auf der REDIM vor. χ ergibt sich demnach aus einer Projektion von ξ auf den Tangentialraum der REDIM unter Anwendung der Moore-Penrose-Pseudoinversen zu $\chi = \psi_{\theta}^{+}\xi$. Eine sehr wichtige Eigenschaft der REDIM, die in Abschnitt 5.1.2 beschrieben wird, ist ihre zunehmend geringer werdende Abhängigkeit von der Schätzung der lokalen Gradienten mit zunehmender Dimension m [22]. Die Erhöhung der Dimension ermöglicht demnach die Verwendung einer immer größeren Schätzung, ohne Lage und Form der REDIM gravierend zu beeinflussen. Dies erlaubt die Anwendung vereinfachter Verfahren für die Ermittlung der Schätzung der lokalen Gradienten (Abschnitt 6.1.4) und verringert damit das notwendige Vorwissen des Anwenders bei der Erstellung von REDIMs. Im Folgenden wird der Einfluss unterschiedlicher Schätzungen für die lokalen Gradienten auf REDIMs verschiedener Dimension für eine freie vorgemischte Synthesegas-Luft-Flamme untersucht. Die Veränderungen in χ werden dabei durch die Veränderung der Schätzungen der Zustandsgradienten ξ herbeigeführt. Es wird ein geeignetes Verfahren vorgestellt, mit dem dieser Einfluss quantitativ ermittelt werden kann und damit ein Vergleich zwischen REDIMs unterschiedlicher Dimension ermöglicht wird. Hierdurch soll gezeigt werden, dass durch eine Erhöhung der Dimension die Sensitivität der REDIM hinsichtlich der Schätzungen der lokalen Gradienten verringert wird.

Die untersuchte Synthesegas-Luft-Flamme ist durch eine unverbrannte Mischungszusammensetzung von 65,3 mol-% N_2 , 17,4 mol-% O_2 und jeweils 8,65 mol-% H_2 und CO charakterisiert. Die Temperatur des unverbrannten Gases beträgt 298 K. Für die Modellierung der chemischen Reaktionskinetik wird der in [103] beschriebene Mechanismus für H_2 - CO - C_1 - O_2 Systeme verwendet. Das Reaktionssystem besteht aus insgesamt 13 Spezies, sodass sich die Dimension des Zustandsraums durch die Hinzunahme von Druck und Enthalpie zu 15 ergibt. Abbildung 7.1a zeigt die örtliche Verteilung der spezifischen Molzahlen mehrerer Spezies für die betrachtete Synthesegas-Luft-Flamme. Molekulare Transportprozesse werden an dieser Stelle durch die Verwendung gleicher Diffusivitäten und $\text{Le} = 1$ beschrieben. Hierdurch wird gemäß Abschnitt 6.1.2 eine vereinfachte Beschreibung des Diffusionsterms in der REDIM-Entwicklungsgleichung

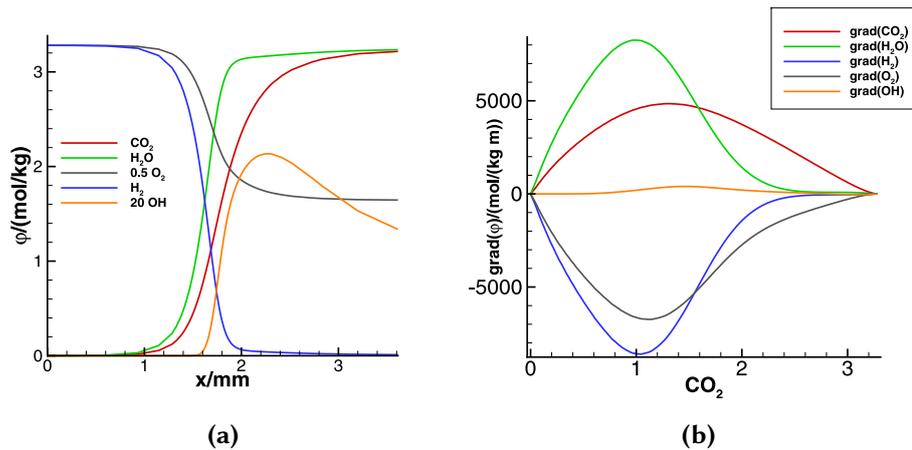


Abbildung 7.1.: (a): Örtliche Verteilung der spezifischen Molzahlen einiger Spezies der behandelten eindimensionalen vorgemischten Synthesegas-Luft-Flamme. (b): Verteilung der Gradienten der spezifischen Molzahlen der Spezies aus (a).

ermöglicht. Die Anwendung detaillierter Diffusionsmodelle ist allerdings analog möglich, wie die Untersuchungen zum transienten Verhalten nicht-vorgemischter Gegenstromflammen in Abschnitt 7.3 zeigen.

Für das beschriebene Synthesegas-Luft-System werden unter Anwendung der in Abschnitt 6.3 beschriebenen adaptiven Konstruktionsmethode eine 1D-, eine 2D- sowie eine 3D-REDIM erstellt. Für die Abschätzung der lokalen Gradienten χ werden die Zustandsgradienten ξ des stationären eindimensionalen Flammenprofils verwendet, die mit Hilfe der in Abschnitt 6.1.4 beschriebenen Vorgehensweise korrespondierenden Gitterpunkten auf der REDIM zugeweiht werden. In Abbildung 7.1b sind die Gradienten der spezifischen Molzahlen der in Abbildung 7.1a dargestellten Spezies in Abhängigkeit von CO_2 abgebildet. Es zeigt sich ein für vorgemischte Flammen charakteristischer Verlauf. Demnach besitzen die Gradienten im Bereich starker physikalisch-chemischer Kopplung ein Maximum- bzw. Minimum. Gemäß Gleichung 6.34 werden zu den REDIM-Punkten korrespondierende Punkte auf dem detaillierten Flammenprofil durch die Bestimmung des minimalen Abstandes in Richtung der spezifischen Molzahlen von H_2O ermittelt. Die damit erhaltenen REDIMs werden in Abbildung 7.2 in einer CO_2 - H_2O -H-Projektion und einer CO_2 - H_2O -HCO-Projektion des Zustandsraums dargestellt. Der hierarchische Aufbau der REDIMs ist dabei gut zu erkennen, d.h. die eindimensionale REDIM ist in die 2D-REDIM eingebettet, die wiederum in die 3D-REDIM eingebettet ist.

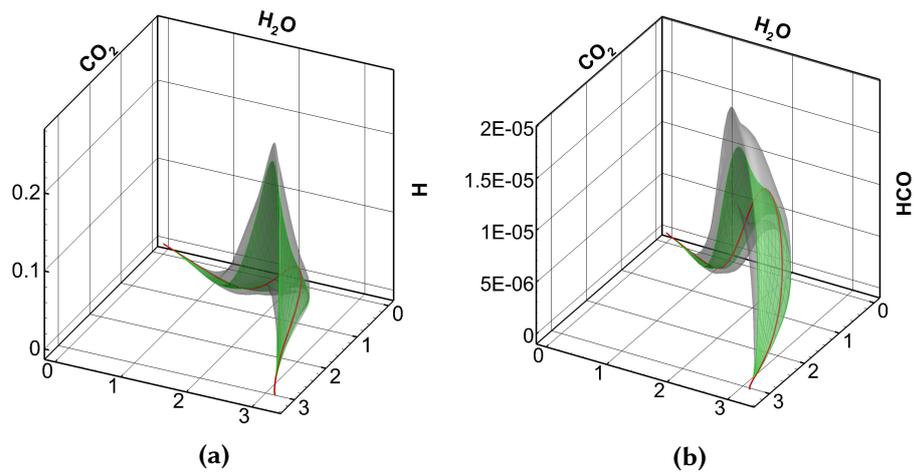


Abbildung 7.2.: 1D-REDIM (rot), 2D-REDIM (grün) und 3D-REDIM (grau) des behandelten Synthesegas-Luft-Systems. (a): CO_2 - H_2O - H -Projektion des Zustandsraums. (b): CO_2 - H_2O - HCO -Projektion des Zustandsraums. Einheiten der spezifischen Molzahlen φ in mol kg^{-1} .

Die in Abbildung 7.2 gezeigten REDIMs ergeben sich nach Integration der REDIM-Entwicklungsgleichung und bilden den Ausgangspunkt für die nachfolgende Untersuchung zum Einfluss unterschiedlicher Gradientenschätzungen. Die jeweiligen stationären REDIMs werden dabei als Anfangsmannigfaltigkeiten für jeweils zwei neue REDIM-Berechnungen verwendet. Im Vergleich zur ursprünglichen REDIM-Berechnung werden die Schätzungen der Zustandsgradienten ξ darin für den ersten Fall verdoppelt und für den zweiten Fall halbiert. Es ergeben sich somit für jede Dimension jeweils zwei zusätzliche REDIMs, die mit den ursprünglichen REDIMs aus Abbildung 7.2 hinsichtlich des Einflusses der veränderten Gradientenschätzung verglichen werden können.

Bei der Integration der REDIM-Entwicklungsgleichung nach der Verdopplung bzw. Halbierung der Zustandsgradienten wird für die ein-, zwei- und dreidimensionale REDIM der zeitliche Konvergenzverlauf anhand der in Abschnitt 6.1.3 vorgestellten Größe $\delta_{inv} = \frac{\|P\tilde{\phi}\|}{\|\tilde{\phi}\|}$ nachverfolgt. Die Integration wird demnach beendet, sobald δ_{inv} einen Schwellenwert von 0,5% unterschreitet. Dies bedeutet gemäß Abschnitt 6.1.3, dass die Norm des projizierten Anteils des Vektorfeldes $P\tilde{\phi}$ auf der REDIM weniger als 0,5% der Norm des nicht projizierten Vektorfeldes entspricht und eine weitere Integration nur noch sehr geringe Auswirkungen auf Lage und Form der REDIM hätte. Es kann somit davon ausgegangen werden, dass eine genügend genaue Approximation der langsamen Mannigfaltigkeit gefunden ist, die sich in Abhängigkeit der veränderten Gradientenschätzung ergibt. Durch

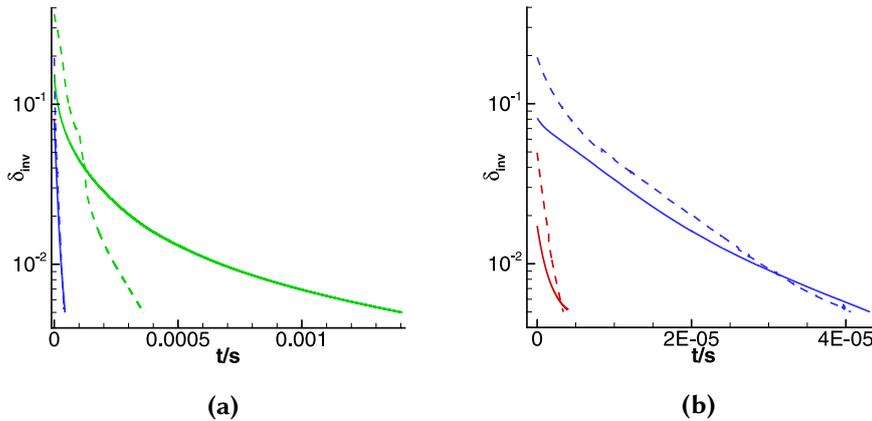


Abbildung 7.3.: Verlauf von δ_{inv} während der Integration der REDIM-Entwicklungsgleichung nach einer Verdopplung (gestrichelte Kurven) und einer Halbierung (durchgezogene Kurven) der Schätzung der Zustandsgradienten ξ . Grün: 1D-REDIM. Blau: 2D-REDIM. Rot: 3D-REDIM.

die Wahl des selben Schwellenwertes von $\delta_{inv} = 0,005$ für die ein-, zwei- und dreidimensionale REDIM wird eine sinnvolle Vergleichsbasis geschaffen, auf der eine Gegenüberstellung von REDIMs sowohl gleicher als auch unterschiedlicher Dimension erfolgen kann.

Abbildung 7.3 stellt den Verlauf von δ_{inv} für alle drei REDIM-Dimensionen während der Integration nach der Verdopplung bzw. Halbierung der Gradienten in logarithmischer Darstellung einander gegenüber. Die Veränderung der Gradientenschätzung bewirkt zu Beginn eine instantane Erhöhung der Kenngröße, die dann während der Integration stetig kleiner wird. Die Steigungen der Kurven in logarithmischer Darstellung geben Aufschluss über die Zeitskala, mit der die REDIMs nach Implementierung der veränderten Schätzung der Zustandsgradienten im Zustandsraum relaxieren. Ein Vergleich zwischen den drei REDIM-Dimensionen zeigt, dass die Zeitskala der Relaxation mit zunehmender Dimension kleiner wird. Dies liegt in der Natur der REDIM-Entwicklungsgleichung, da durch die Anwendung des Projektionsoperators die Relaxation mit zunehmender REDIM-Dimension mehr und mehr von den schnellen chemischen Prozessen bestimmt wird. Diese steuern die Bewegung in Richtung der langsamen invarianten Mannigfaltigkeit (siehe Abschnitt 5.1.1) [44].

Mit Hilfe von Abbildung 7.4 kann die Eigenschaft der REDIM erläutert werden, dass mit zunehmender Dimension die Zeitskala der Relaxation abnimmt. Es wird die Verteilung der Realteile der Eigenwerte der Jacobi-Matrix des chemi-

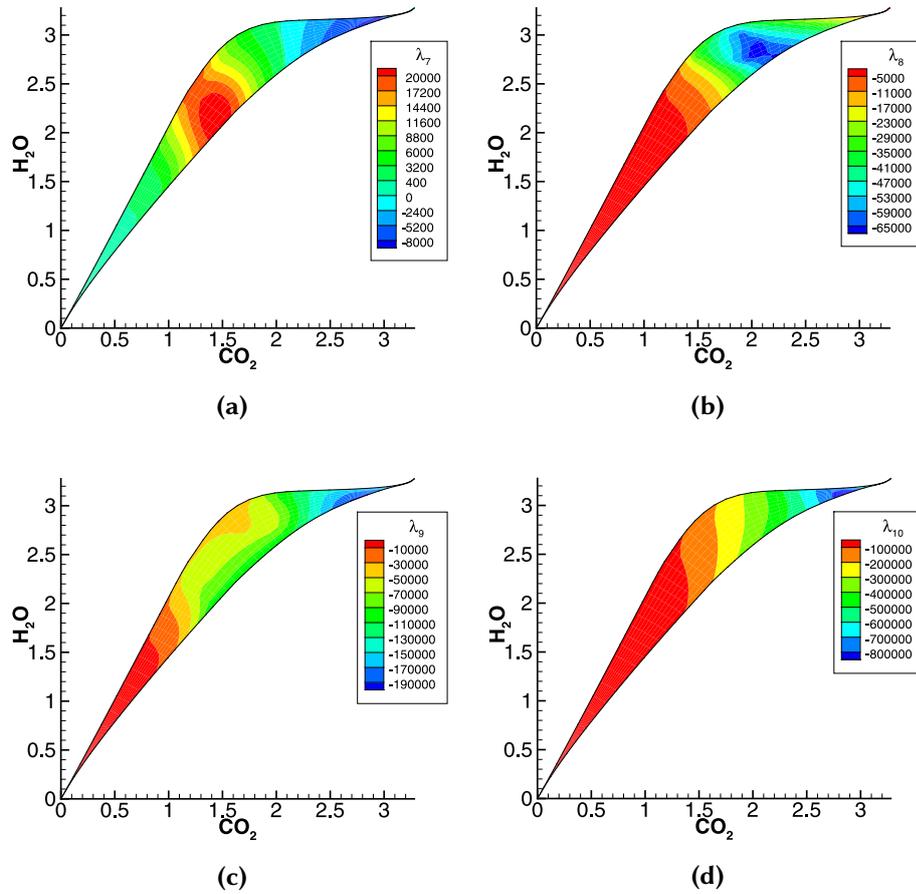


Abbildung 7.4.: Verteilung der Realteile der Eigenwerte der Jacobi-Matrix des chemischen Quellterms entlang der 2D-REDIM des vorgemischten Synthesegas-Luft-Systems in CO_2 - H_2O -Projektionen des Zustandsraums. Die Eigenwerte sind gemäß der Beträge ihrer Realteile von klein nach groß geordnet. Einheiten der spezifischen Molzahlen φ in mol kg^{-1} und der Eigenwerte λ_i in s^{-1} .

schen Quellterms $\mathbf{F}_\psi = \left[\frac{\partial F_i}{\partial \psi_j} \right]_{i,j=1}^n$ entlang der ungestörten 2D-REDIM in einer CO_2 - H_2O -Projektion des Zustandsraums dargestellt. Wie bereits weiter oben beschrieben, besteht das untersuchte Reaktionssystem aus insgesamt $n_s = 13$ Spezies, wodurch sich die Dimension des Zustandsraums auf Grund der Hinzunahme von Druck und Enthalpie auf $n = 15$ ergibt. Die Eigenwertanalyse ergibt für die ersten sechs Eigenwerte der Jacobimatrix von $\mathbf{F}(\psi)$ ($\lambda_1, \dots, \lambda_6$) $= 0$, wodurch die im System vorkommenden Elemente C, O, H und N sowie Druck und Enthalpie charakterisiert werden [44]. Abbildung 7.4a stellt die Verteilung des Re-

alteils des siebten Eigenwertes λ_7 dar, der den geringsten, von Null verschiedenen, Betrag des Realteils aufweist. Im Bereich dominierender chemischer Prozesse für $\text{CO}_2 > 2 \text{ mol kg}^{-1}$ besitzt λ_7 negative Werte, ist für $\text{CO}_2 < 2 \text{ mol kg}^{-1}$ jedoch komplett positiv. Der achte, neunte und zehnte Eigenwert weisen hingegen gemäß Abbildung 7.4b, Abbildung 7.4c und Abbildung 7.4d entlang der gesamten 2D-REDIM negative Realteile auf, wobei die Größenordnung der jeweiligen Eigenwerte sukzessive zunimmt. Da die chemische Zeitskala dem Kehrwert der Eigenwerte der Jacobi-Matrix entspricht, steigt mit der REDIM-Dimension ebenso die Geschwindigkeit, mit der Veränderungen in der Gradientenschätzung bei der Integration der REDIM-Entwicklungsgleichung relaxieren. Im Falle der 1D-REDIM wird die Relaxation dabei näherungsweise durch den zweitlangsamsten, von Null verschiedenen, bzw. achten Eigenwert, für die 2D- und 3D-REDIM durch den neunten bzw. zehnten Eigenwert gelenkt.

Als Folge der oben beschriebenen Zusammenhänge ergibt sich eine geringer werdende notwendige Integrationszeitdauer nach Veränderung der Gradientenschätzung mit zunehmender REDIM-Dimension. So wird im Falle der eindimensionalen REDIM gemäß Abbildung 7.3a bei einer Halbierung der Gradientenschätzung eine Integrationszeitdauer von $1,4 \cdot 10^{-3} \text{ s}$ benötigt, während eine Verdopplung zu einer notwendigen Integrationszeitdauer von $4 \cdot 10^{-4} \text{ s}$ führt. Die Integrationszeitdauer im Falle der zweidimensionalen REDIM ist mit ca. $4 \cdot 10^{-5} \text{ s}$ bereits um eine Größenordnung geringer als diejenige der 1D-REDIM. Und für die 3D-REDIM werden für die Relaxation der implementierten Veränderungen der Gradientenschätzungen gar nur ca. $5 \cdot 10^{-6} \text{ s}$ benötigt und damit wiederum eine Größenordnung weniger als im Falle der 2D-REDIM.

Nach Abschluss der Integration werden die REDIMs der jeweiligen Dimensionen im Zustandsraum miteinander verglichen, um den Einfluss der veränderten Gradientenschätzung zu ermitteln. Abbildung 7.5 zeigt exemplarisch für die 1D-REDIM und die 2D-REDIM, welche Auswirkung eine Verdopplung bzw. Halbierung der Gradientenschätzung auf die Form und Lage der REDIMs hat. Für die 3D-REDIM treten zwar auch Abweichungen auf, diese sind jedoch sehr viel kleiner und ermöglichen daher keine anschauliche Interpretation des Einflusses veränderter Zustandsgradientenschätzungen in Abbildung 7.5.

Wie die Abbildung zeigt, verstärkt die Verdopplung der Schätzung ξ die physikalischen Transportprozesse auf den REDIMs und verringert in Folge dessen die lokale Krümmung im Vergleich zur Verwendung der nicht veränderten Schätzung. Dieser Sachverhalt manifestiert sich insbesondere im Bereich starker physikalisch-chemischer Kopplung, der für das hier behandelte vorgemischte Synthesegas-Luft-System approximativ durch die spezifischen Molzahlen von CO_2 $\varphi_{\text{CO}_2} = 1 \text{ mol kg}^{-1}$ und $\varphi_{\text{CO}_2} = 2,5 \text{ mol kg}^{-1}$ begrenzt wird. Im Falle der 1D-REDIM, die in Abbildung 7.5a in einer CO_2 - H_2O -Projektion des Zustands-

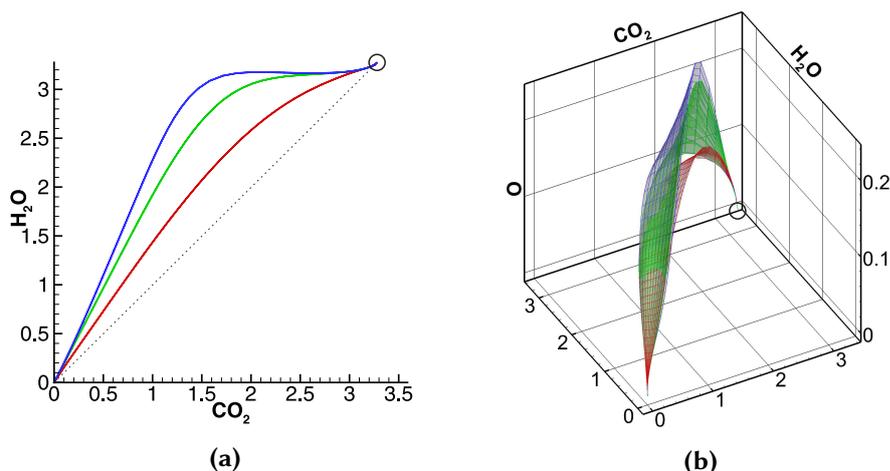


Abbildung 7.5.: Auswirkungen einer Verdopplung (rot) und einer Halbierung (blau) der ursprünglichen Schätzung (grün) der Zustandsgradienten ξ auf Lage und Form der REDIM. (a): 1D-REDIMs in einer CO_2 - H_2O -Projektion des Zustandsraums. (b): 2D-REDIMs in einer CO_2 - H_2O - O -Projektion des Zustandsraums. Einheiten der spezifischen Molzahlen φ in mol kg^{-1} . Einheit von ξ_{CO_2} $\text{mol kg}^{-1} \text{m}^{-1}$.

raums dargestellt ist, führt die Erhöhung der Schätzung ξ zu einer Verringerung der spezifischen Molzahlen der langsamen Majoritätenspezies H_2O und einer damit einhergehenden Bewegung in Richtung der Mischungslinie. Diese stellt den Grenzfall unendlich starker physikalischer Prozesse dar, wodurch sich eine lineare Verbindung zwischen dem Zustand des chemischen Gleichgewichts und der unverbrannten Mischungszusammensetzung ergibt. Trotz der erhöhten Werte für die Schätzung der Zustandsgradienten ändert sich Lage und Form der 1D-REDIM in der Nähe des chemischen Gleichgewichts kaum. Hier dominieren die schnellen chemischen Prozesse, deren Zeitskala selbst bei einer Verdopplung der Gradientenschätzung immer noch größer ist als diejenige der physikalischen Prozesse. Der im Vergleich zur Erhöhung der Gradientenschätzung gegenteilige Effekt stellt sich bei einer Halbierung der Gradientenschätzung ξ ein. Hierdurch erhöht sich die Krümmung entlang der 1D-REDIM auf Grund der Abschwächung der physikalischen Transportprozesse und der damit einhergehenden erhöhten Dominanz chemischer Prozesse. Dies bewirkt demnach eine Zunahme der langsamen Majoritätenspezies H_2O im Vergleich zur ursprünglichen 1D-REDIM.

Ein sehr ähnliches Verhalten weist die in Abbildung 7.5b in einer CO_2 - H_2O - O -Projektion dargestellte 2D-REDIM auf. Die Verdopplung der Gradientenschätzung führt wiederum zu einer Abnahme der Krümmung, was in kleineren spezifischen Molzahlen für O im Bereich starker physikalisch-chemischer Kopplung resultiert.

Gleichermaßen bewirkt die Halbierung der Gradientenschätzung eine Zunahme der Krümmung, wodurch die spezifischen Molzahlen von O zunehmen. Im Gegensatz zur 1D-REDIM ergeben sich bei der 2D-REDIM jedoch sowohl bei einer Verdopplung als auch bei einer Halbierung der Schätzung ξ nahezu keine Veränderungen in Richtung der langsamen Majoritätenspezies CO_2 und H_2O . Die Bewegung während der Relaxation der 2D-REDIM verläuft demnach beinahe orthogonal zur CO_2 - H_2O -Ebene des Zustandsraums. Dies ist eine Folge der zusätzlichen REDIM-Dimension, wodurch neben dem langsamsten physikalisch-chemischen Prozess auch der zweitlangsamste Prozess durch die REDIM abgebildet wird (siehe Abschnitt 5.1.1). Gleichzeitig nimmt mit der REDIM-Dimension ebenso die Zeitskala der schnellen entkoppelten chemischen Prozesse zu, die den Relaxationsprozess steuern (siehe Abbildung 7.4). In Folge dessen reduziert sich die Sensitivität der REDIM im Hinblick auf eine Veränderung langsamer reaktiver Spezies wie CO_2 oder H_2O , aber auch H_2 , O_2 und CO bereits durch die Erhöhung der Dimension von $m = 1$ auf $m = 2$ signifikant. Die Erhöhung der Dimension auf $m = 3$ erweitert diesen Effekt auch auf schnellere Minoritätenspezies wie OH , H , O und HCO , da hierdurch die Zeitskala des schnellsten entkoppelten chemischen Prozesses gemäß Abbildung 7.4 nochmals ansteigt.

Um eine quantitative Bestimmung der auftretenden Unterschiede zwischen veränderten und unveränderten REDIMs zu ermöglichen, wird ein Verfahren benötigt, das in geeigneter Weise die Abstände zwischen den jeweiligen REDIMs im Zustandsraum erfasst. Die einfachste Möglichkeit zur Ermittlung des Abstandes besteht darin, zu jedem Zustandspunkt $\psi^v(\theta_j)$ auf dem veränderten REDIM-Gitter $\mathcal{M}_{RD,v}$ den zugehörigen nächsten Zustandspunkt $\psi(\theta_i)$ auf dem unveränderten REDIM-Gitter \mathcal{M}_{RD} zu ermitteln und den Abstand als euklidische Norm des Verbindungsvektors $\Delta\psi$ zwischen beiden Punkten zu definieren (siehe Abbildung 7.6). Die Anwendung dieser einfachen Prozedur ist dann sinnvoll, wenn die verglichenen REDIMs die gleiche Gitterstruktur aufweisen und starke Veränderungen des Gitters infolge der Integration der Entwicklungsgleichung nicht zu erwarten sind. Im Falle unterschiedlicher Parametrisierungen oder grober REDIM-Gitter ist diese Methode jedoch mit einem systematischen Fehler behaftet, der die Interpretation der sich ergebenden Abstände erschwert. Um diesen Fehler zu minimieren, wird ein verbessertes Verfahren vorgeschlagen, dessen Prinzip in Abbildung 7.6 schematisch dargestellt wird. Demnach wird der Verbindungsvektor $\Delta\psi$ zwischen den beiden nächsten Punkten durch die Anwendung des Projektionsoperators \mathbf{P} auf den Normalraum der unveränderten REDIM an der Stelle $\psi(\theta_i)$ projiziert. Der Abstand an jedem Zustandspunkt $\psi^v(\theta_j)$ des veränderten REDIM-Gitters ergibt sich demnach aus der Norm $\|\mathbf{P}\Delta\psi\|$. Im Gegensatz zur euklidischen Norm von $\Delta\psi$ repräsentiert $\|\mathbf{P}\Delta\psi\|$ eine von der Parametrisierung und der Gitterweite unabhängige Größe, da sie den ortho-

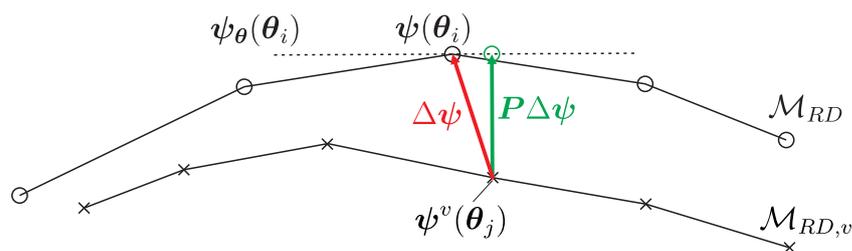


Abbildung 7.6.: Vorgehen bei der Ermittlung des Abstandes zwischen der REDIM \mathcal{M}_{RD} , die sich aus der Verwendung der unveränderten Schätzung der Zustandsgradienten ergibt, und der veränderten REDIM $\mathcal{M}_{RD,v}$. Zu einem Zustandspunkt $\psi^v(\theta_j)$ auf $\mathcal{M}_{RD,v}$ wird der auf \mathcal{M}_{RD} liegende nächste Punkt $\psi(\theta_i)$ gesucht. Der Abstandsvektor $\Delta\psi$ wird anschließend mit Hilfe des Projektionsoperators P auf den Normalraum von \mathcal{M}_{RD} projiziert.

gonalen Abstand zwischen den Gitterpunkt $\psi^v(\theta_j)$ und dem Tangentialraum von \mathcal{M}_{RD} an der Stelle $\psi(\theta_i)$ wiedergibt. Der Tangentialraum kann wiederum als lineare Approximation der unveränderten REDIM \mathcal{M}_{RD} angesehen werden. Auf diese Weise ermöglicht das vorgestellte Verfahren auch die Bestimmung der Abstände zwischen REDIMs unterschiedlicher Dimension. In Abschnitt 7.2.2 wird die Methode verwendet, um die Abweichungen zwischen gestörten eindimensionalen Flammen und den REDIMs im Zustandsraum zu ermitteln. Die Anwendung des in Abbildung 7.6 beschriebenen Verfahrens ist in Abbildung 7.7 am Beispiel der 1D-REDIM dargestellt. Die Vektorpfeile entsprechen dabei der $\text{CO}_2\text{-H}_2\text{O}$ -Projektion bzw. $\text{CO}_2\text{-H}_2\text{O-HCO}$ -Projektion des Vektors $P\Delta\psi$.

Abbildung 7.8a und Abbildung 7.8b zeigen die Komponenten von CO bzw. HCO von $P\Delta\psi$ an den jeweiligen Gitterpunkten der veränderten REDIMs in Abhängigkeit von CO_2 . CO steht dabei stellvertretend für alle anderen Majoritätenspezies, die ein analoges Verhalten aufweisen. Im Gegenzug repräsentiert HCO die schnellen intermediären Spezies. Bei Betrachtung von Abbildung 7.8a zeigen sich die bereits anhand von Abbildung 7.5 erläuterten starken Unterschiede zwischen veränderter und unveränderter REDIM im Bereich starker physikalisch-chemischer Kopplung im Falle der 1D-REDIM. Verglichen mit dem Maximalwert der spezifischen Molzahlen von CO von $3,28 \text{ mol kg}^{-1}$ betragen die Abweichungen für die 1D-REDIM bis zu ca. 10%. Durch die Erhöhung der REDIM-Dimension auf $m = 2$ erfolgt bereits eine starke Abnahme der Abweichungen in Richtung dieser langsamen Majoritätenspezies. Eine zusätzliche Erhöhung auf $m = 3$ führt zu kaum noch feststellbaren Unterschieden in CO-Richtung, die sich aus einer Verdopplung oder Halbierung der Gradientenschätzungen ergeben. Im Vergleich dazu unterscheiden sich die 1D- und 2D-REDIM hinsichtlich der Abweichungen in HCO-Richtung kaum. Die Veränderungen in den Gradienten bewirken für

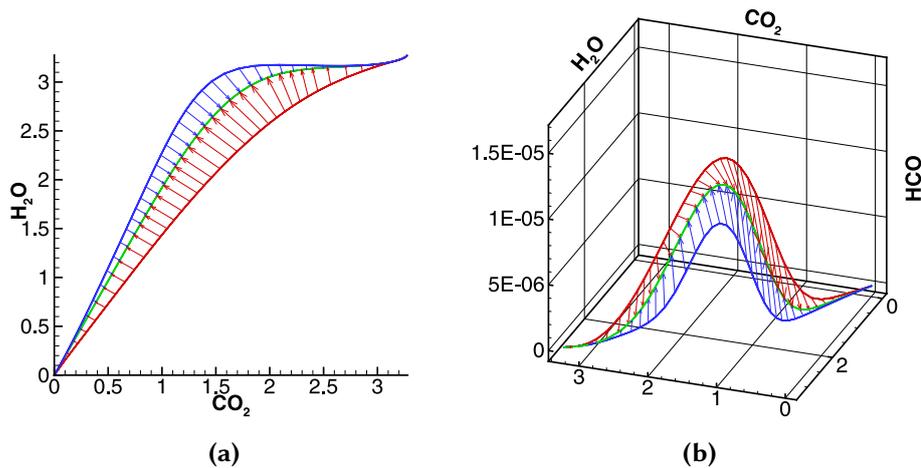


Abbildung 7.7.: Anwendung des in Abbildung 7.6 dargestellten Verfahrens zur Messung der euklidischen Abstände (Vektorpfeile) zwischen den 1D-REDIMs in einer CO_2 - H_2O -Projektion (a) und einer CO_2 - H_2O - HCO -Projektion (b) des Zustandsraums. Die rote REDIM ergibt sich durch eine Verdopplung, die blaue durch eine Halbierung der Schätzung ξ . Die grüne REDIM entspricht der unveränderten Schätzung der Zustandsgradienten. Einheiten der spezifischen Molzahlen φ in mol kg^{-1} .

beide Dimensionen ähnlich große Abweichungen von der ursprünglichen REDIM, die verglichen mit dem Maximalwert von HCO bei 30% liegen. Die 3D-REDIM bewirkt dagegen eine deutliche Abnahme der Abweichungen auf ca. 5% des Maximalwerts von HCO und ist daher weniger sensitiv hinsichtlich der implementierten Gradientenänderungen. Wie bereits weiter oben erläutert, bewirken die veränderten Gradientenschätzungen im Bereich schneller chemischer Prozesse sowohl für CO als auch für HCO keine Abweichung. Gleiches gilt für den Zustand der unverbrannten Mischung, der einen physikalischen Dirichlet-Rand darstellt (siehe Abschnitt 6.1.5).

Abbildung 7.8c stellt die euklidische Norm von $\mathbf{P}\Delta\psi$ in Abhängigkeit von CO_2 dar. Es zeigt sich ein zum Abstand in CO-Richtung analoges Verhalten, das sich auf Grund des starken Einflusses der Majoritätenspezies bei der Berechnung von $\|\mathbf{P}\Delta\psi\|$ ergibt. Wiederum führen die veränderten Gradientenschätzungen zu kaum merklichen Abweichungen im Vergleich zur unveränderten REDIM im Falle der 3D-REDIM. Bei Betrachtung des entlang der jeweiligen REDIM ermittelten Mittelwertes $\overline{\|\mathbf{P}\Delta\psi\|}$ von $\|\mathbf{P}\Delta\psi\|$ wird der Einfluss der REDIM-Dimension besonders deutlich. In Abbildung 7.8d ist $\overline{\|\mathbf{P}\Delta\psi\|}$ in logarithmischer Darstellung in Abhängigkeit der spezifischen Molzahlen von CO_2 dargestellt. Es ist zu erkennen, dass mit jeder REDIM-Dimension der Wert von $\overline{\|\mathbf{P}\Delta\psi\|}$ und

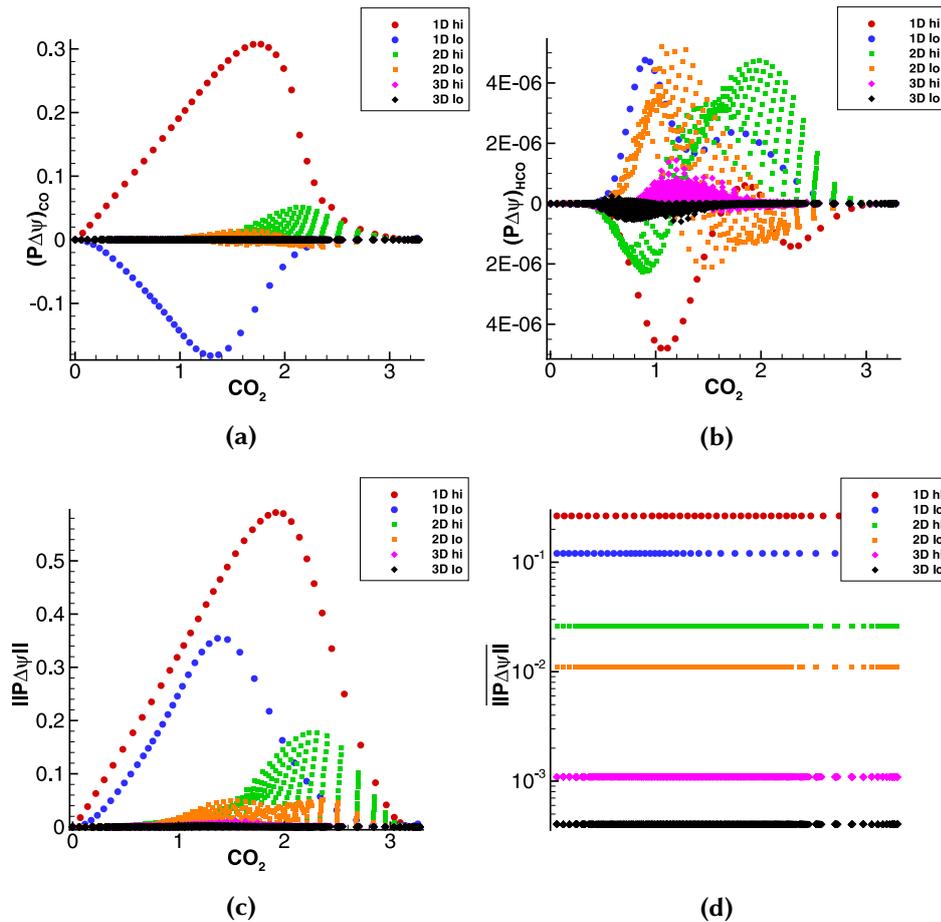


Abbildung 7.8.: Mit Hilfe der in Abbildung 7.6 beschriebenen Methode bestimmte Abstände zwischen den REDIMs verdoppelter (hi) bzw. halbiertes (lo) und unveränderter Schätzungen ξ in Abhängigkeit der spezifischen Molzahlen von CO_2 . (a): Komponente $(\mathbf{P}\Delta\psi)_{\text{CO}}$ der bestimmten projizierten Abstandsvektoren $\mathbf{P}\Delta\psi$. (b): Komponente $(\mathbf{P}\Delta\psi)_{\text{HCO}}$. (c): Euklidische Norm $\|\mathbf{P}\Delta\psi\|$. (d): Entlang der REDIMs gemittelter Wert der euklidischen Norm $\|\mathbf{P}\Delta\psi\|$. Einheiten der spezifischen Molzahlen φ und der Abstände $(\mathbf{P}\Delta\psi)_{\text{CO}}$, $(\mathbf{P}\Delta\psi)_{\text{HCO}}$, $\|\mathbf{P}\Delta\psi\|$ und $\|\mathbf{P}\Delta\psi\|$ in mol kg^{-1} .

damit der mittlere Abstand zwischen veränderter und unveränderter REDIM um eine Größenordnung abnimmt. Hierdurch wird die zunehmende Insensitivität der REDIM in Bezug auf eine Veränderung der Schätzung der Zustandsgradienten ξ und damit in Bezug auf die Schätzung der lokalen Gradienten χ nochmals bestätigt.

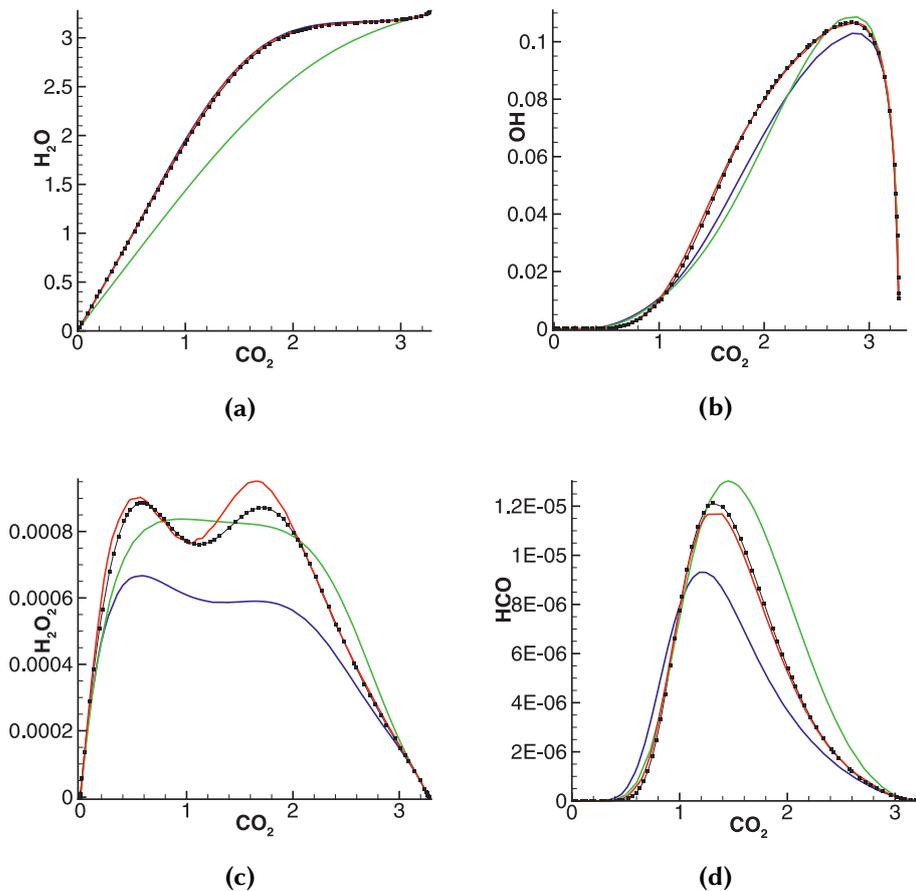


Abbildung 7.9.: Stationäre Lösungen der eindimensionalen vorgemischten Sythesegas-Luft-Flamme in mehreren Projektionen des Zustandsraums. Schwarz mit Symbolen: Detaillierte Lösung. Grün: Reduziertes 1D-Modell. Blau: reduziertes 2D-Modell. Rot: Reduziertes 3D-Modell. Die reduzierten Lösungen ergeben sich aus der Verwendung der REDIMs basierend auf einer Verdopplung der Schätzungen ξ . Einheiten der spezifischen Molzahlen φ in mol kg^{-1} .

Die beschriebenen Zusammenhänge sollen abschließend nochmals verifiziert werden, indem die REDIMs verschiedener Dimensionen, die durch die Verdopplung der Schätzung der Zustandsgradienten ξ zustande kommen, in der reduzierten Berechnung der vorgemischten Sythesegas-Luft-Flamme eingesetzt werden. In Abbildung 7.9 werden die eindimensionalen stationären reduzierten Flammenprofile mit dem detaillierten Flammenprofil in mehreren zweidimensionalen Projektionen des Zustandsraums in Abhängigkeit von CO_2 verglichen. Während

die 1D-REDIM auf Grund der erhöhten Schätzungen ξ selbst die Hauptspezies H_2O nur unzureichend abbildet, führt die 2D-REDIM hier bereits zu sehr genauen Ergebnissen. Sowohl 1D- als auch 2D-REDIM führen allerdings auf Grund der veränderten Gradienten für die Minoritätenspezies OH , H_2O_2 sowie HCO zu signifikanten Abweichungen im Bereich starker physikalisch-chemischer Kopplung. Hier liefert die 3D-REDIM sehr gute Approximationen des detaillierten stationären Profils, wodurch die Insensitivität der 3D-REDIM hinsichtlich der veränderten Gradientenschätzung nochmals dokumentiert werden kann.

Die genaue Abbildung des detaillierten stationären Flammenprofils ist ein wichtiges Kriterium zur Validierung des reduzierten Modells. Besonders für die Anwendung in turbulenten vorgemischten Flammen ist die genaue Wiedergabe transienter Prozesse von ebenso wichtiger Bedeutung. Im nächsten Abschnitt soll deshalb für das hier behandelte vorgemischte Synthesegas-Luft-System die Eignung der REDIMs unterschiedlicher Dimensionen für die Darstellung des charakteristischen Verhaltens gestörter eindimensionaler vorgemischter Flammen untersucht werden.

7.2. Untersuchung des transienten Verhaltens einer gestörten vorgemischten Synthesegas-Luft-Flamme

In Kapitel 3 wurde die charakteristische Struktur turbulenter vorgemischter Flammen anhand der Ergebnisse einer DNS beschrieben (Abbildung 3.1c). Die Flammenfront ist demnach durch einen welligen Verlauf gekennzeichnet, der durch den Eingriff turbulenter Wirbel zustande kommt. Dieses charakteristische Verhalten turbulenter Vormischflammen dient als Vorbild für die in diesem Abschnitt durchgeführte Analyse.

Am Beispiel des im vorherigen Abschnitt präsentierten vorgemischten Synthesegas-Luft-Systems wird das Verhalten einer eindimensionalen vorgemischten Flamme nach Einbringung eines eindimensionalen Wirbels in die Flammenfront untersucht. Die Wirbelimplementierung erfolgt dabei durch die Anwendung einer sogenannten Triplet Map [104–109], die zu einer Neuordnung der örtlichen Verteilung in der Flammenfront führt und damit turbulente Effekte in der eindimensionalen Flamme nachbildet.

Durch das Mapping wird ein charakteristischer Relaxationsprozess innerhalb der Flamme initiiert, anhand dessen auf besonders geeignete Weise ein Vergleich zwischen reduzierten und detaillierten Berechnungen und damit eine Validierung der REDIM-Methode erfolgen kann. Die reduzierten Berechnungen basieren da-

bei auf der Verwendung von ein-, zwei- sowie dreidimensionalen REDIMs, die denjenigen aus Abschnitt 7.1 entsprechen. Durch den Vergleich mit detaillierten Rechnungen sollen die Vorteile der in Abschnitt 6.3 vorgestellten adaptiven REDIM-Konstruktionsmethode hinsichtlich einer generischen Dimensionserweiterung zum Zwecke der Genauigkeitserhöhung hervorgehoben werden.

Im Folgenden wird zunächst das Verfahren des Triplet Mappings genauer anhand der detaillierten vorgemischten Synthesegas-Luft-Flamme vorgestellt (Abschnitt 7.2.1). Dabei wird auch auf die Charakteristik des transienten Relaxationsprozesses eingegangen, die im weiteren Verlauf eine wichtige Rolle für die Validierung des reduzierten Modells spielt. Mit Hilfe einer lokalen Stabilitätsanalyse in Abschnitt 7.2.2 wird anschließend gezeigt, dass die lokalen Eigenschaften der REDIM eine schlüssige Erklärung für das detaillierte Systemverhalten während der Relaxation ermöglichen. Gleichzeitig wird hierdurch ein Beweis für die Attraktivität der REDIM geliefert, die anhand einer Analyse der detaillierten Systembewegung im Zustandsraum zusätzlich untermauert wird. Hierfür kommt die im vorherigen Abschnitt vorgeschlagenen Methode zur Ermittlung von Abständen im Zustandsraum zum Einsatz. Dies bildet den Ausgangspunkt für den in Abschnitt 7.2.3 durchgeführten Vergleich zwischen detaillierten und reduzierten Berechnungen, der sowohl im Zustandsraum als auch im Ortsraum durchgeführt wird.

Insgesamt sollen durch die durchgeführte Analyse folgende wichtige Eigenschaften der REDIM-Methode unter Beweis gestellt werden, die aus dem relevanten Anwendungsfall einer vorgemischten Flamme hervorgehen.

- Durch die Erhöhung der REDIM-Dimension kann die Genauigkeit der reduzierten Berechnungen im Hinblick auf die Abbildung der detaillierten Systemdynamik signifikant gesteigert werden.
- Drei Dimensionen sind ausreichend, um ein größtenteils identisches Verhalten im Vergleich zum detaillierten System zu erhalten.

7.2.1. Störung der Flammenfront durch Triplet Maps

Der Einfluss turbulenter Strukturen auf die Flammenfront vorgemischter Flammen wird durch die Implementierung eindimensionaler Wirbel abgebildet, welche die eindimensionale laminare Synthesegas-Luft-Flamme stören. Die Wirkung der Wirbel auf die eindimensionale Flammenfront kann dabei als Umverteilung der Zustände innerhalb des Flammenprofils interpretiert werden, die in effizienter Art in Form einer Triplet Map [105–109] umgesetzt werden kann. Triplet Maps approximieren dreidimensionale turbulente Effekte durch eine Erhöhung der Gradienten in der Flammenfront, die aus der Neuordnung des eindimensionalen

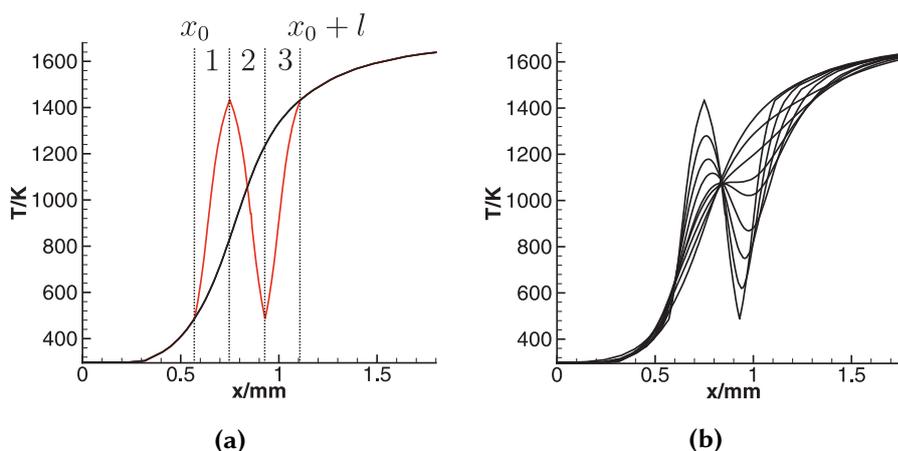


Abbildung 7.10.: (a): Instantane Anwendung des Triplet Mappings (rot) auf die stationäre Flammenfront (schwarz) des detaillierten Synthesegas-Luft-Systems. (b): Relaxationsprozess nach Implementierung des Wirbels. Dargestellt ist der örtliche Verlauf der Temperatur.

Profils hervorgeht. Die Prozedur wird in Abbildung 7.10a anhand des Temperaturprofils der behandelten vorgemischten freien Synthesegas-Luft-Flamme präsentiert, wirkt sich jedoch gleichermaßen auch auf alle im System vorkommenden Spezies aus.

An einer Stelle x_0 innerhalb der stationären Flammenfront wird entsprechend Abbildung 7.10a ein eindimensionaler Wirbel der Größe l implementiert. Durch das Triplet Mapping wird das Segment zwischen x_0 und $x_0 + l$ zunächst auf ein Drittel seiner ursprünglichen örtlichen Ausdehnung verkleinert. Daraus ergibt sich der in Sektor 1 dargestellte Verlauf des Flammenprofils. Der Verlauf in Sektor 2 entsteht durch das Spiegeln des ersten Sektors, während der dritte Sektor wiederum mit dem ersten Sektor identisch ist. Die drei Sektoren werden miteinander verknüpft und ersetzen den ursprünglichen Verlauf in der Flammenfront zwischen x_0 und $x_0 + l$.

Die Anwendung von Triplet Maps in dreidimensionalen Simulationen turbulenter Flammen [104, 108, 109] wird durch die Frequenz, die Größe sowie den Ort der auftretenden Wirbel gesteuert. Daraus folgt eine gegenseitige Beeinflussung der implementierten Wirbelereignisse, wodurch der Charakter realer turbulenter Verbrennungsprozesse bestmöglich abgebildet werden soll [106]. In der nachfolgend vorgestellten Untersuchung wird zum Zwecke einer anschaulichen und transparenten Interpretation der Systemdynamik auf die Implementierung mehrerer Wirbelereignisse verzichtet. Stattdessen soll das Relaxationsverhalten infolge eines einzelnen Wirbelereignisses untersucht werden, das instantan auf die sta-

tionäre Flammenfront appliziert wird (siehe Abbildung 7.10a). Hieraus ergeben sich jedoch keine Einschränkungen für die Gültigkeit der nachfolgenden Analyse, da die abgeleiteten Zusammenhänge ohne weiteres auf die Implementierung mehrerer Wirbel übertragen werden können.

In Abbildung 7.10b ist die zeitliche Relaxation des in Abbildung 7.10a implementierten Wirbels mit Hilfe einer Triplet Map für das detaillierte System dargestellt. Infolge des Mappings erfolgt zunächst eine instantane Verdreifachung der Gradienten innerhalb der Flammenfront in der betroffenen Domäne. Dies führt zu einer schlagartigen Verstärkung der Diffusionsprozesse, die zu Beginn den Relaxationsprozess initiieren. Im weiteren Verlauf wird die Relaxation durch die Interaktion sich verändernder physikalisch-chemischer Prozesse gesteuert, bis die Flammenfront ihre ursprüngliche Form und Position wieder eingenommen hat und der Relaxationsprozess beendet ist. Der gesamte Vorgang beträgt für den gezeigten Wirbel ca. 450 μs .

Im Allgemeinen hängt die gesamte Zeitdauer des Relaxationsprozesses von der Größe des Wirbels sowie dem Ort des Auftretens ab. Wie numerische Untersuchungen zeigen [110], ändert sich der charakteristische Ablauf bei der Entknotung des Wirbels hierdurch jedoch nicht. Die nachfolgende Analyse soll daher auf einen einzelnen Wirbel beschränkt werden, der in Abbildung 7.10a dargestellt ist. Dieser Wirbel wird so gewählt, dass seine Größe und der Ort seines Auftretens den Großteil der Flammenfront beeinflusst. Die Wirbelgröße liegt dabei mit 0,54 mm in der Größenordnung der Flammendicke, während das Zentrum des Wirbels am Ort der größten Steigung in der Flammenfront platziert wird. Hierdurch wird eine besonders effektive Störung der stationären Flammenfront erreicht.

Eine besonders positive Eigenschaft von Triplet Maps ist, dass durch die Neuordnung keine Veränderung der Erhaltungsgrößen Masse, Energie und Impuls erfolgt [108]. Zudem ändert sich durch das Mapping zwar die lokale örtliche Spezieszusammensetzung, die Neuordnung des Profils verändert jedoch nicht die Zusammensetzung selbst. Dies führt dazu, dass die Zustände des gestörten Flammenprofils im Zustandsraum mit denjenigen des ungestörten Profils übereinstimmen, im Bereich des Mappings jedoch mehrfach vertreten sind. Diese Eigenschaft wird durch Abbildung 7.11a anhand einer CO_2 - H_2O -Projektion des Zustandsraums verdeutlicht. Der Bereich des Mappings ist dabei rot markiert. Das untere und obere Ende des roten Bereich entsprechen den in Abbildung 7.10a dargestellten Grenzen zwischen den drei Mapping-Sektoren. Da bei der Erstellung der REDIMs auf die Gradienten der stationären detaillierten Flamme zurückgegriffen wird (siehe Abschnitt 7.1), bewirkt die maßerhaltende Eigenschaft des Mappings zusammen mit der hierarchischen Struktur der REDIMs, dass das gestörte Profil sowohl in die 1D-REDIM als auch in die 2D- und 3D-REDIM eingebettet ist. Dies

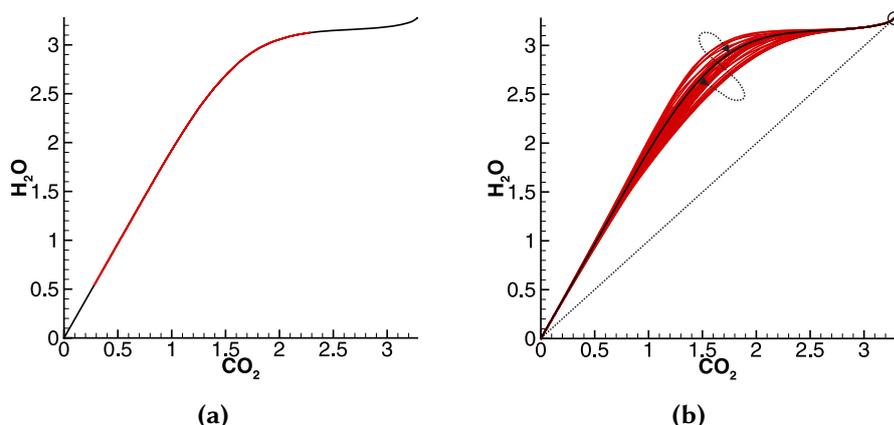


Abbildung 7.11.: Auswirkungen des Triplet Mappings in einer CO₂-H₂O-Projektion des Zustandsraums. (a): Instantane Implementierung des Wirbels (rot) auf das stationäre Profil (schwarz) des detaillierten Systems. Auf Grund der maßerhaltenden Eigenschaft liegen die Zustände des gestörten und ungestörten Profils direkt aufeinander. (b): Darstellung des transienten Relaxationsprozesses (rot) infolge des Mappings. Das stationäre Profil (schwarz) bildet sowohl den Ausgangs- als auch den Endpunkt des Vorgangs. Einheiten der spezifischen Molzahlen φ in mol kg⁻¹.

schaft eine wichtige Basis für einen Vergleich zwischen dem detaillierten und reduzierten Systemverhalten bei der Relaxation, da der Prozess in allen vier Fällen vom selben Anfangsprofil ausgeht (siehe Abschnitt 7.2.3).

In Abbildung 7.11b ist der Relaxationsprozess des detaillierten Flammenprofils aus Abbildung 7.10b in einer CO₂-H₂O-Projektion des Zustandsraums dargestellt. Das schwarze Profil repräsentiert dabei die stationäre eindimensionale Flamme. Die Relaxation wird schematisch mit Hilfe der gestrichelten Kurve dargestellt. Durch die instantane Erhöhung der Diffusion infolge des Triplet Mappings wird das gestörte Profil demnach zunächst in Richtung der Mischungslinie ausgelenkt, die gemäß Abschnitt 7.1 durch die Einwirkung unendlich starker Diffusionsprozesse zustande kommt. Diese Bewegung kehrt sich nach kurzer Zeit wieder um, da die im System auftretenden Gradienten sukzessive abgebaut werden und der Einfluss der chemischen Reaktionsprozesse überwiegt. Der weitere Verlauf der transienten Bewegung ist durch ein Überschwingen gekennzeichnet, das sich zum Ende der Relaxation hin wieder umkehrt, sodass letztendlich wieder das ursprüngliche stationäre Profil erreicht wird. Verglichen mit der DNS-Rechnung einer turbulenten vorgemischten Methan-Luft-Flamme in Abbildung 3.4a aus Abschnitt 3.3 weist die durch das Triplet Mapping gestörte Synthesegas-Luft-Flamme eine analoge Charakteristik auf. Dies lässt den Schluss zu, dass das

Triplet Mapping physikalisch sinnvolle Störungen hervorruft, die das Verhalten turbulenter Flammen qualitativ nachbilden können.

7.2.2. Lokale Eigenschaften der REDIMs

Nach der Beschreibung des transienten Bewegung des gestörten detaillierten Systems soll in diesem Abschnitt auf die intrinsischen Eigenschaften der REDIMs eingegangen werden. Es wird dabei überprüft, ob diese eine Erklärung für das charakteristische detaillierte Systemverhalten während der Relaxation ermöglichen. Diese Analyse bildet den Grundstein für den in Abschnitt 7.2.3 durchgeführten Vergleich zwischen reduzierten und detaillierten Berechnungen zur Relaxation der gestörten vorgemischten Synthesegas-Luft-Flamme.

Bei der Anwendung der REDIMs in reduzierten Berechnungen spielen ihre intrinsischen Stabilitätseigenschaften eine sehr wichtige Rolle bei der korrekten Abbildung sowohl stationärer als auch transients Vorgänge. Bereits bei der Herleitung der REDIM-Entwicklungsgleichung in Abschnitt 5.1.1 werden die notwendigen Eigenschaften beschrieben, welche die REDIM als Approximation der langsamen invarianten Mannigfaltigkeiten erfüllen muss. Dies ist zum einen die Attraktivität der REDIM, die sich für die schnelle Relaxation des Systems in Richtung der REDIM verantwortlich zeigt, wenn dieses die REDIM durch das Auftreten physikalischer Störungen verlassen hat. Zum anderen spielen die tangentialen Stabilitätseigenschaften der REDIM eine wichtige Rolle bei der genauen Abbildung der entlang der REDIM ablaufenden langsamen Systemdynamik.

Eine Beurteilung beider Eigenschaften ermöglicht gemäß [18, 44, 85] eine lokale Analyse der auf den Tangentialraum bzw. Normalraum der REDIM projizierten Jacobi-Matrix des chemischen Quellterms $\mathbf{F}_\psi = \frac{\partial F_i}{\partial \psi_j}$

$$\begin{aligned} & \psi_\theta^+ \mathbf{F}_\psi \psi_\theta, \\ & (\psi_\theta^\perp)^+ \mathbf{F}_\psi \psi_\theta^\perp. \end{aligned} \tag{7.1}$$

Wie *Bykov et al.* in [85] beschreiben, geben die Eigenwerte von $\psi_\theta^+ \mathbf{F}_\psi \psi_\theta$ Aufschluss über die tangential zur REDIM ablaufende langsame Dynamik, während die Eigenwerte von $(\psi_\theta^\perp)^+ \mathbf{F}_\psi \psi_\theta^\perp$ Informationen über die Attraktivität der REDIM liefern. ψ_θ^\perp beinhaltet dabei die Basisvektoren des Normalenraums der REDIM, welche orthogonal zu ψ_θ sind. Für $\psi_\theta^+ \mathbf{F}_\psi \psi_\theta$ finden sich m Eigenwerte $\lambda_{s_1}, \dots, \lambda_{s_m}$. Abbildung 7.12a zeigt die Verteilung des Realteils des ersten Eigenwerts λ_{s_1} entlang der zweidimensionalen REDIM in einer $\text{CO}_2\text{-H}_2\text{O}$ -Projektion des Zustandsraums. Es zeigt sich, dass λ_{s_1} lokal positive Realteile aufweist. Die charakteristische Verteilung von λ_{s_1} entlang der REDIM hat dabei große Ähnlichkeit zu dem in Abbildung 7.4a dargestellten langsamsten Eigenwert λ_7 der

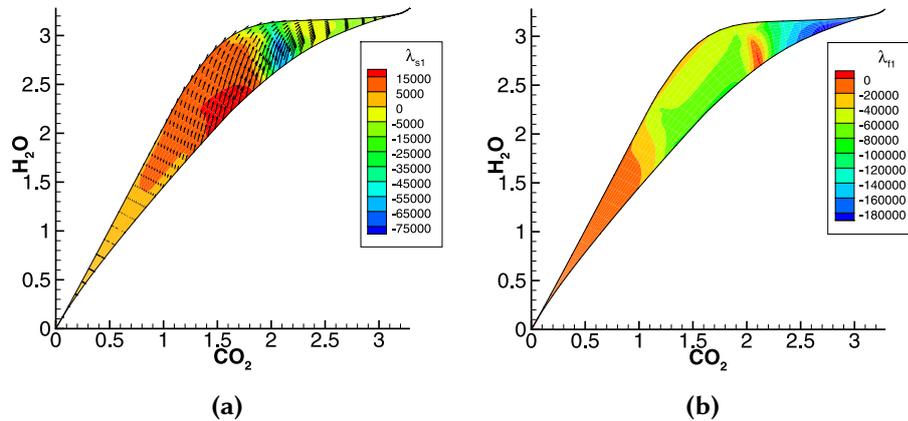


Abbildung 7.12.: Verteilung der Eigenwerte der gemäß Gleichung 7.1 projizierten Jacobi-Matrix (siehe Text) in einer CO_2 - H_2O -Projektion des Zustandsraums. (a): Langsamster Eigenwert der auf den Tangentialraum projizierten Jacobi-Matrix $\psi_{\theta}^+ \mathbf{F}_{\psi} \psi_{\theta}$. Die Vektorpfeile zeigen die CO_2 - H_2O -Komponenten des chemischen Quelltermvektors $\mathbf{F}(\psi)$. (b): Langsamster Eigenwert der auf den Normalraum projizierten Jacobi-Matrix $(\psi_{\theta}^{\perp})^+ \mathbf{F}_{\psi} \psi_{\theta}^{\perp}$. Einheiten der spezifischen Molzahlen φ in mol kg^{-1} und der Eigenwerte λ_i in s^{-1} .

nicht projizierten Jacobi-Matrix \mathbf{F}_{ψ} . Dies deutet darauf hin, dass sich das instabile detaillierte Systemverhalten in der Nähe des Tangentialraums der 2D-REDIM abspielt. Eine Gegenüberstellung von Abbildung 7.12a und Abbildung 7.11b bestätigt diesen Sachverhalt. Es zeigt sich, dass die transiente Bewegung des durch die Triplet Map gestörten detaillierten Profils den Bereich positiver Eigenwerte λ_{s_1} entlang der 2D-REDIM abdeckt. Die ebenfalls in Abbildung 7.12a abgebildeten Vektorpfeile stellen eine CO_2 - H_2O -Projektion des chemischen Quelltermvektors $\mathbf{F}(\psi)$ entlang der 2D-REDIM dar. Es fällt auf, dass die Größe der Vektoren bei einer Bewegung in Richtung der Mischungslinie (vgl. Abbildung 7.11a) zunehmen. Diese Eigenschaft zeigt, dass die 2D-REDIM den zunehmenden Einfluss chemischer Prozesse in der ersten Phase der transienten Relaxation aus Abbildung 7.11b korrekt wiedergibt. Insgesamt lässt sich damit feststellen, dass die intrinsischen tangentialen Eigenschaften der REDIM eine schlüssige Erklärung für die charakteristische Dynamik des detaillierten Systems liefern. Während $\psi_{\theta}^+ \mathbf{F}_{\psi} \psi_{\theta}$ die tangential zur REDIM ablaufenden langsamen Prozesse charakterisiert, beschreibt $(\psi_{\theta}^{\perp})^+ \mathbf{F}_{\psi} \psi_{\theta}^{\perp}$ die orthogonal zur REDIM ablaufende schnelle Dynamik des detaillierten Systems. Abbildung 7.12b zeigt die Verteilung des langsamsten der schnellen Eigenwerte λ_{f_1} von $(\psi_{\theta}^{\perp})^+ \mathbf{F}_{\psi} \psi_{\theta}^{\perp}$ entlang der zweidimensionalen REDIM des vorgemischten Synthesegas-Luft-Systems. Im Gegensatz zum Eigenwertspektrum von $\psi_{\theta}^+ \mathbf{F}_{\psi} \psi_{\theta}$ weisen die Eigenwerte von $(\psi_{\theta}^{\perp})^+ \mathbf{F}_{\psi} \psi_{\theta}^{\perp}$

7.2. Untersuchung des transienten Verhaltens einer gestörten vorgemischten Synthesegas-Luft-Flamme

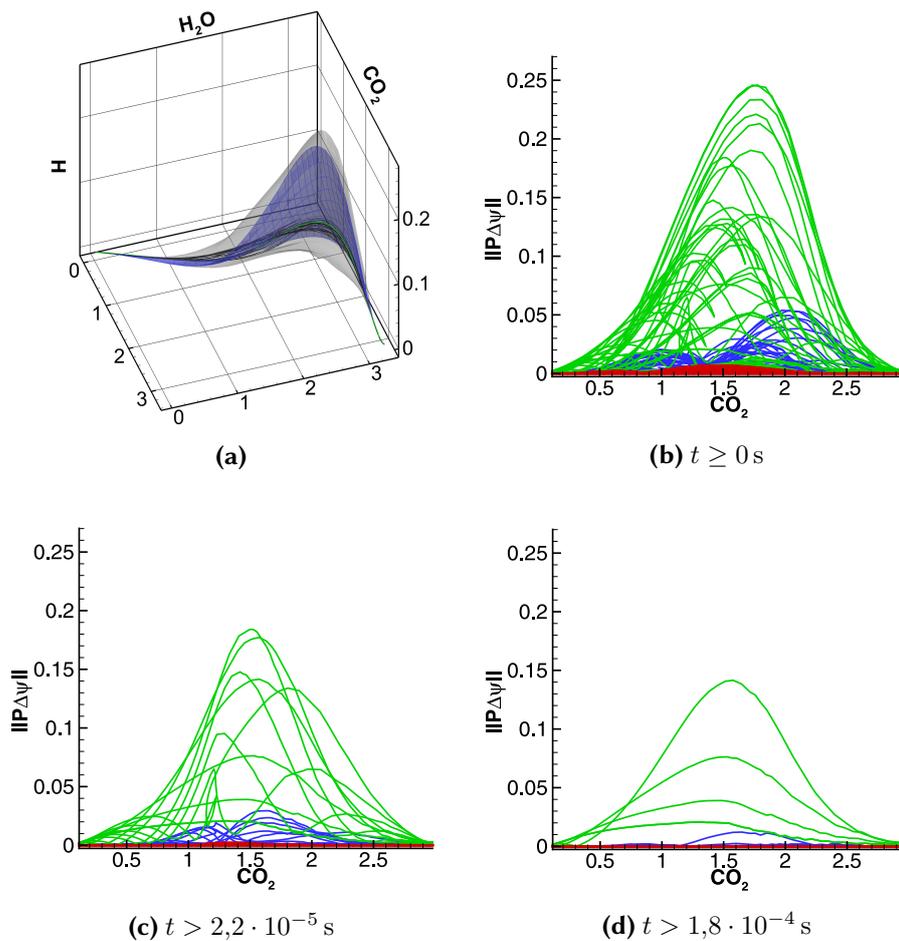


Abbildung 7.13.: (a): Gegenüberstellung des Relaxationsprozesses des detaillierten Systems (schwarze Kurven) und der 1D- (grün), 2D- (blau) sowie der 3D-REDIM (grau) in einer CO_2 - H_2O - H -Projektion des Zustandsraums. (b-d): Abstände $\|\mathbf{P}\Delta\psi\|$ zwischen detaillierten Profilen und 1D- (grün), 2D- (blau) sowie 3D-REDIM (grau) ab unterschiedlichen Zeitpunkten innerhalb des Relaxationsprozesses. Einheiten der spezifischen Molzahlen φ und des Abstands $\|\mathbf{P}\Delta\psi\|$ in mol kg^{-1} .

ausschließlich negative Realteile auf. Daraus lässt sich ableiten, dass die REDIM überall attraktiv ist und Zustände, die sich auf Grund auftretender Störungen außerhalb der REDIM befinden, schnell wieder zu ihr hin relaxieren. Durch die Erhöhung der Dimension steigert sich diese Attraktivität zusätzlich, da der Realteil des langsamsten Eigenwertes von $(\psi_\theta^\perp)^\dagger \mathbf{F}_\psi \psi_\theta^\perp$ nochmals größere negative Werte annimmt.

Abbildung 7.13 gibt Aufschluss über die Attraktivität der hier betrachteten REDIMs unterschiedlicher Dimension. Dabei stellt Abbildung 7.13a den gesamten Relaxationsprozess des detaillierten Systems aus Abbildung 7.11 in einer CO_2 - H_2O - H -Projektion des Zustandsraums dar. Abgebildet sind darin zudem die 1D-, 2D- sowie die 3D-REDIM. Es ist deutlich zu erkennen, dass die Dynamik des gestörten detaillierten Systems die Profile zunächst von den Mannigfaltigkeiten wegführt. Unter Anwendung des im vorherigen Abschnitt vorgestellten Verfahrens zur Bestimmung des Abstands im Zustandsraum (Abbildung 7.6), können die Abweichungen zwischen den diskreten Zuständen der detaillierten Profile und den jeweiligen REDIMs zu verschiedenen Zeitpunkten quantifiziert werden. Abbildung 7.13b stellt die Norm der projizierten Verbindungsvektoren $\|P\Delta\psi\|$ (siehe Abbildung 7.6) während der gesamten Relaxation in Abhängigkeit von CO_2 dar. Es ist zu beobachten, dass die maximalen Abstände mit der Erhöhung der REDIM-Dimension abnehmen. In Abbildung 7.13c sind Werte von $\|P\Delta\psi\|$ für $t > 2,2 \cdot 10^{-5} \text{ s}$ abgebildet. Die Abstände zur 3D-REDIM sind nach dieser kurzen Zeitdauer bereits verschwunden, sodass sich die Dynamik des gestörten detaillierten Systems ab hier entlang des Tangentialraums der 3D-REDIM entfaltet. Ab einer Zeit von $t > 1 \cdot 10^{-4} \text{ s}$ verschwinden auch die Abstände zur 2D-REDIM (Abbildung 7.13d) und die Bewegung kann durch den Tangentialraum der 2D-REDIM abgebildet werden. Das Auftreffen des detaillierten Systems auf die 1D-REDIM erfolgt nach Abschluss des Relaxationsprozesses ab ca. $4,5 \cdot 10^{-4} \text{ s}$ (siehe Abschnitt 7.2.1).

Wie aus obigen Ausführungen hervorgeht, ist die Dynamik des gestörten detaillierten Systems durch das Durchschreiten einer Kaskade von REDIMs geringer werdender Dimension gekennzeichnet. Hierdurch wird nicht nur die Gültigkeit der hierarchischen Struktur von REDIMs bestätigt, sondern auch die Existenz unterschiedlich schneller Prozesse innerhalb des detaillierten Systems. Dieses charakteristische Verhalten wird durch die REDIMs wiedergegeben. Es bleibt abschließend zu klären, inwieweit das reduzierte System das transiente Verhalten des gestörten detaillierten Systems wiedergeben kann. Dies ist Gegenstand des nächsten Abschnitts.

7.2.3. Diskussion der Simulationsergebnisse

In diesem Abschnitt soll die Eignung der reduzierten Modelle der 1D-, 2D- und 3D-REDIM untersucht werden, das transiente Verhalten des detaillierten Systems nach der Implementierung der in Abschnitt 7.2.1 beschriebenen Störung in Form einer Triplet Map wiederzugeben. Hierfür werden die Lösungen der reduzierten Berechnungen mit den detaillierten Lösungen sowohl im Zustandsraum als auch im Ortsraum miteinander verglichen.

In Abbildung 7.14 sind die detaillierten und reduzierten Flammenprofile zu zwei unterschiedlichen Zeitpunkten innerhalb des Relaxationsprozesses im Zustandsraum dargestellt. Wie Abbildung 7.14a anhand einer $\text{CO}_2\text{-H}_2\text{O}$ -Projektion der Zustandsraums zeigt, handelt es sich dabei um die Profile mit der jeweils größten Abweichung von der stationären Lösung. Diese ist identisch mit der 1D-REDIM, die durch die grüne Linie gekennzeichnet ist. Es ist zu erkennen, dass die reduzierten Modelle der 2D- und 3D-REDIM das Verhalten des detaillierten Systems hinsichtlich der transienten Veränderung von CO_2 und H_2O sehr gut abbilden. Die Bewegung des reduzierten Modells der 1D-REDIM ist auf die eindimensionale Mannigfaltigkeit beschränkt, sodass die beiden Profile nicht voneinander unterschieden werden können. Das reduzierte 1D-Modell ist daher nicht in der Lage der detaillierten Systembewegung im Zustandsraum zu folgen. Eine entsprechende Beobachtung kann auch bei einer Betrachtung der $\text{CO}_2\text{-H}_2\text{O-H}$ -Projektion in Abbildung 7.14b gemacht werden. In dieser Projektion fällt jedoch auf, dass die Profile des reduzierten 2D-Modells signifikante Abweichungen hinsichtlich der spezifischen Molzahlen der Minoritätenspezies H aufweisen. Diese Abweichungen treten insbesondere im Bereich starker physikalisch-chemischer Kopplung auf, in denen die implementierte Störung die größte Auswirkung entfaltet. Im Gegensatz zum 2D-Modell liefert das reduzierte 3D-Modell in dieser Projektion beinahe identische Ergebnisse verglichen mit dem detaillierten System. Hier macht sich in Analogie zu den Ausführungen in Abschnitt 7.1 die zusätzliche REDIM-Dimension bemerkbar. Hierdurch erhöht sich die Fähigkeit der REDIM auch schneller ablaufende physikalisch-chemische Prozesse darzustellen, da sich diese in der Nähe des Tangentialraums der 3D-REDIM bewegen. Wird die Relaxation der gestörten Flamme jedoch in einer $\text{CO}_2\text{-H}_2\text{O-H}_2\text{O}_2$ -Projektion des Zustandsraums betrachtet (Abbildung 7.14c), ergeben sich auch für das 3D-Modell merkbare Abweichungen. Dies ist ein Indiz dafür, dass die detaillierte Systemdynamik infolge der Störung nicht komplett durch drei Dimensionen abgebildet werden kann und es einer zusätzlichen Dimension bedarf, um geringere Abweichungen in Richtung H_2O_2 zu erhalten.

Um die Validierung der reduzierten Rechnungen zu vervollständigen, soll der Relaxationsprozess abschließend anhand zweier Spezies im Ortsraum analysiert werden. Abbildung 7.15 und Abbildung 7.16 zeigen das Verhalten der Systeme nach Implementierung der Störung für die spezifischen Molzahlen von CO bzw. HCO. CO steht dabei erneut für alle anderen langsamen Hauptspezies wie CO_2 , H_2O oder H_2 , die allesamt durch ein analoges Verhalten gekennzeichnet sind. HCO spiegelt dagegen das Verhalten der Minoritätenspezies wie OH, H oder O wieder. Die Abbildung zeigen sechs Zeitpunkte innerhalb der $4,5 \cdot 10^{-4}$ s dauernden Relaxation. Die in Abbildung 7.15f und Abbildung 7.16f dargestellten Lösungen zum Ende der Relaxation entsprechen dabei gleichzeitig den Profilen, auf die

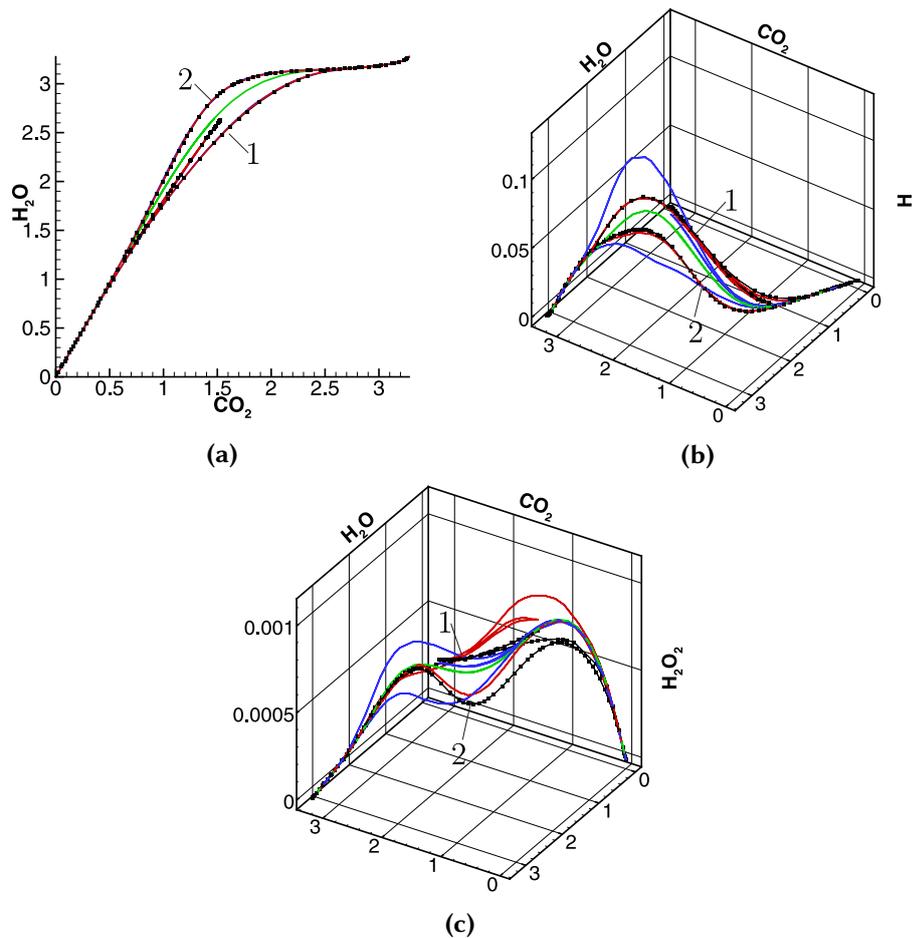


Abbildung 7.14.: Relaxationsprozess infolge des implementierten Wirbels für das detaillierte System (schwarz mit Symbolen), das reduzierte 1D-Modell (grün), das reduzierte 2D-Modell (blau) sowie das reduzierte 3D-Modell (rot) bei $t = 1,6 \cdot 10^{-5} \text{ s}$ (1) und $t = 1,1 \cdot 10^{-4} \text{ s}$ (2) in mehreren Projektionen des Zustandsraums. Einheiten der spezifischen Molzahlen φ in mol kg^{-1} .

das Triplet Mapping angewendet wurde. Zu Beginn des Prozesses ist für beide Spezies die Wirkung des implementierten Wirbels zu erkennen. Beim Vergleich der örtlichen Verläufe der spezifischen Molzahlen von CO fällt auf, dass das 2D- und 3D-Modell das detaillierte Modell während des gesamten Vorgangs sehr genau abbilden. Das 1D-Modell liefert jedoch auch recht genaue Ergebnisse für die Majoritätenspezies CO. Auf den ersten Blick mögen diese Ergebnisse nach Betrachtung von Abbildung 7.14a überraschend erscheinen. Hierdurch wird jedoch eine sehr wichtige, natürliche Eigenschaft der REDIM offenbart, die aus der Formulierung des reduzierten Modells hervorgeht (siehe Abschnitt 5.4 und

7.2. Untersuchung des transienten Verhaltens einer gestörten vorgemischten Synthesegas-Luft-Flamme

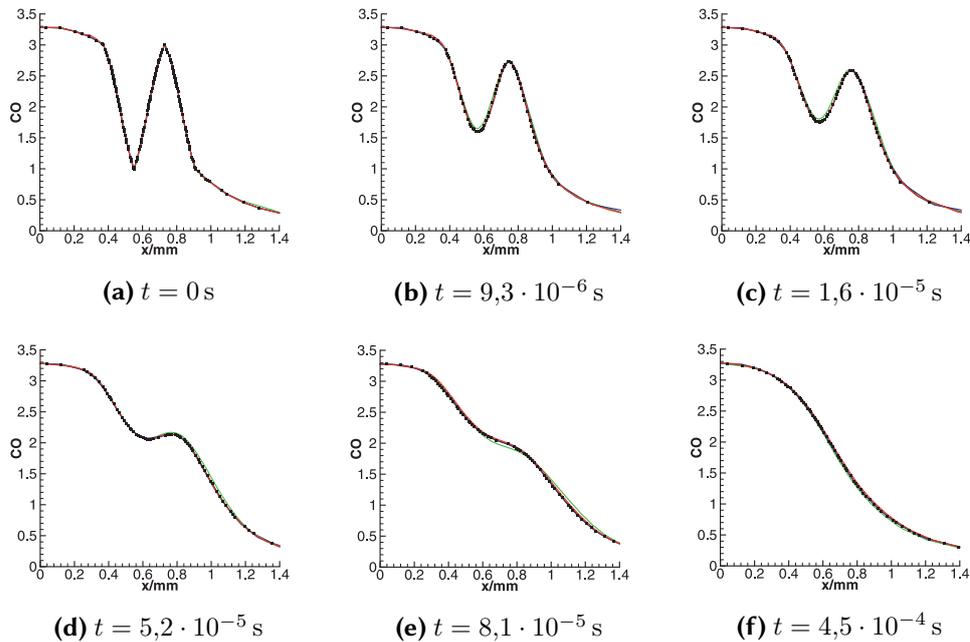


Abbildung 7.15.: Relaxationsprozess für CO infolge des implementierten Wirbels für das detaillierte System (schwarz mit Symbolen), das reduzierte 1D-Modell (grün), das 2D-Modell (blau) sowie das 3D-Modell (rot) zu verschiedenen Zeitpunkten. Einheiten der spezifischen Molzahlen φ in mol kg^{-1} .

Abschnitt 6.4). Obwohl die transiente Bewegung des reduzierten 1D-Modells auf die 1D-REDIM beschränkt ist, führt das reduzierte Modell infolge der intrinsischen Eigenschaften der REDIM dazu, dass die örtliche Verteilung der wichtigsten Systemgrößen dennoch genau wiedergegeben werden kann [22]. In anderen Worten ausgedrückt, ahmt die Bewegung des reduzierten Profils entlang der REDIM die detaillierte Systembewegung bestmöglich nach.

Im Gegensatz zum Relaxationsverhalten von CO lassen sich bei der Betrachtung der Minoritätenspezies HCO deutlichere Unterschiede zwischen den verschiedenen reduzierten Berechnungen und dem detaillierten Modell feststellen. Hier liefert das 3D-Modell während des gesamten Prozesses eine sehr gute Approximation der detaillierten Dynamik. Es ist zu sehen, dass selbst sehr kleinskalige Strukturen innerhalb des detaillierten Systems sehr genau durch das 3D-Modell wiedergegeben werden können. Das 1D- sowie das 2D-Modell bilden das detaillierte Verhalten zwar qualitativ ab, führen allerdings zu deutlichen Abweichungen vom detaillierten Modell und dem reduzierten 3D-Modell. Dieser Zusammenhang würde sich bei der Implementierung zusätzlicher Störungen weiter verschärfen, sodass bei einem Einsatz in der Simulation turbulenter Verbrennungsprozesse

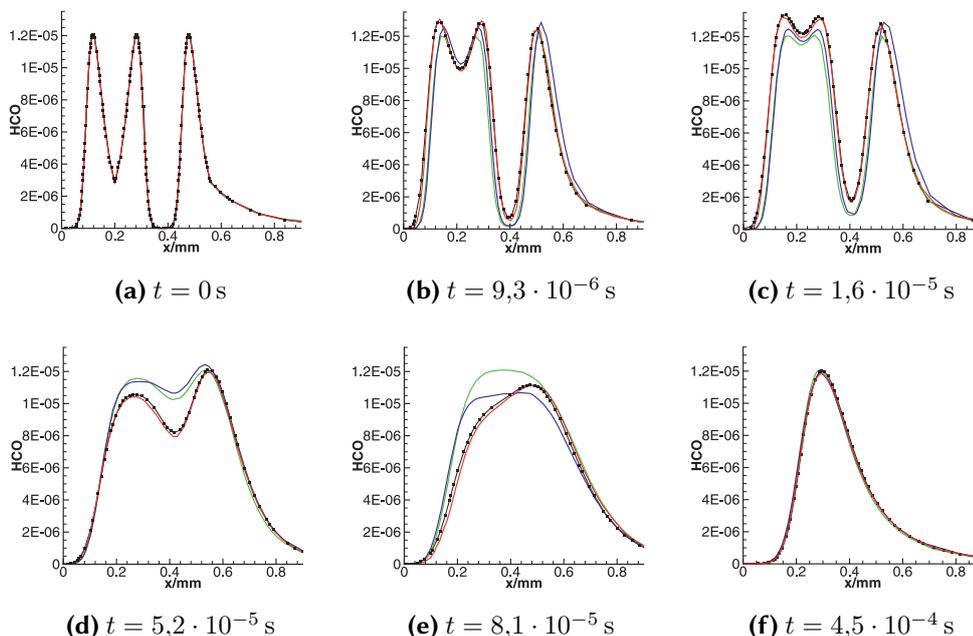


Abbildung 7.16.: Relaxationsprozess für HCO infolge des implementierten Wirbels für das detaillierte System (schwarz mit Symbolen), das reduzierte 1D-Modell (grün), das 2D-Modell (blau) sowie das 3D-Modell (rot) zu verschiedenen Zeitpunkten. Einheiten der spezifischen Molzahlen φ in mol kg^{-1} .

von ebenso großen Unterschieden auszugehen ist. Im Gegensatz dazu lassen die Ergebnisse des 3D-Modell den Schluss zu, dass dieses im Falle ähnlicher Turbulenzintensität zu ebenso genauen Resultaten bei der Anwendung in turbulenten Simulationen führen wird.

7.3. Untersuchung der kritischen Streckungsrate einer stark verdünnten $\text{H}_2\text{-N}_2$ -Luft Gegenstromflamme

In Anlehnung an die in [84, 85] präsentierten Ergebnisse wird im Folgenden die Anwendung einer zweidimensionalen REDIM zur Untersuchung transien- ter Verlöschungsvorgänge in einer stark verdünnten eindimensionalen nicht- vorgemischten $\text{H}_2\text{-N}_2$ -Luft-Gegenstromflamme [1, 111] bei unterschiedlichen Systemdrücken diskutiert. Die stofflichen Zusammensetzungen am linken und rechten Einströmrand werden in Tabelle 7.1 zusammengefasst und entsprechen

7.3. Untersuchung der kritischen Streckungsrate einer stark verdünnten H₂-N₂-Luft Gegenstromflamme

	linker Rand, Oxidationsm.	rechter Rand, Brennst.
Zusammens.	21 mol-% O ₂ , 79 mol-% N ₂	14 mol-% H ₂ , 86 mol-% N ₂
Temperatur	$T_o = 298 \text{ K}$	$T_b = 298 \text{ K}$
Geschw.	v_o , variabel	v_f , variabel
Drücke	1 bar, 2 bar, 4 bar und 8 bar	

Tabelle 7.1.: Zusammensetzung der untersuchten eindimensionalen nicht-vorgemischten H₂-N₂-Luft-Gegenstromflamme gemäß [84].

der Konfiguration, die von *Niemann et al.* in [112] in zweidimensionalen numerischen Simulationen und experimentellen Untersuchungen zur Flammenverlöschung berücksichtigt wird. Die in [112] vorgestellten Ergebnisse dienen in dieser Studie als Vergleichsgrundlage für die eindimensionalen detaillierten und reduzierten Simulationen mit INSFLA [29] und damit als wichtiges Mittel zur Validierung der REDIM-Methode.

Im Rahmen der Untersuchung wird der Einfluss zweier Parameter analysiert, deren Variation zu einer Verlöschung der Flamme führen kann. Dies ist zum einen die Streckungsrate a [1, 112], deren Erhöhung eine zunehmende Störung der chemischen Reaktionskinetik und schließlich die Verlöschung der Flamme bewirkt. Die Streckungsrate ergibt sich gemäß [112] zu $a = \frac{4v_o}{L}$, mit $L = 0,01 \text{ m}$ als dem Abstand zwischen den beiden Zuströmrändern des analysierten Systems und v_o als der Einströmgeschwindigkeit des Oxidationsmittels (siehe Tabelle 7.1). Diese Definition der Streckungsrate ist gemäß [113] zulässig, wenn die Massendichten an den jeweiligen Einströmrändern annähernd gleich sind. Dies wird im Rahmen der hier präsentierten Untersuchung sichergestellt, indem am Rand des Oxidationsmittels die Massendichte und am Rand des Brennstoffs der tangentielle Druckgradient [1] derart vorgegeben werden, dass die Flammenfront sich stets im Zentrum der betrachteten örtlichen Domäne befindet [84]. Die kritische Streckungsrate a_{krit} bezeichnet diejenige Streckungsrate, ab der eine zusätzliche Erhöhung zu einer Verlöschung der Flamme führen würde. Abbildung 7.17a zeigt eine zweidimensionale N₂-H₂O-Projektion des Zustandsraums der betrachteten Gegenstromflamme bei 2 bar Systemdruck unter Verwendung des *San-Diego*-Reaktionsmechanismus [114]. Die grüne Kurve entspricht dem Flammenprofil bei einer geringen Streckungsrate von $a = 200 \text{ s}^{-1}$. Die schwarzen Kurven ergeben sich durch die sukzessive Erhöhung der Streckungsrate, bis mit der roten Kurve bei $a_{krit} = 660 \text{ s}^{-1}$ die kritische Streckungsrate erreicht ist. Eine weitere Erhöhung der Streckungsrate führt zur Verlöschung der Flamme. Dieser Vorgang wird durch die blauen Profile abgebildet und endet mit dem verlöschten Flammenprofil (dicke blaue Kurve) [84].

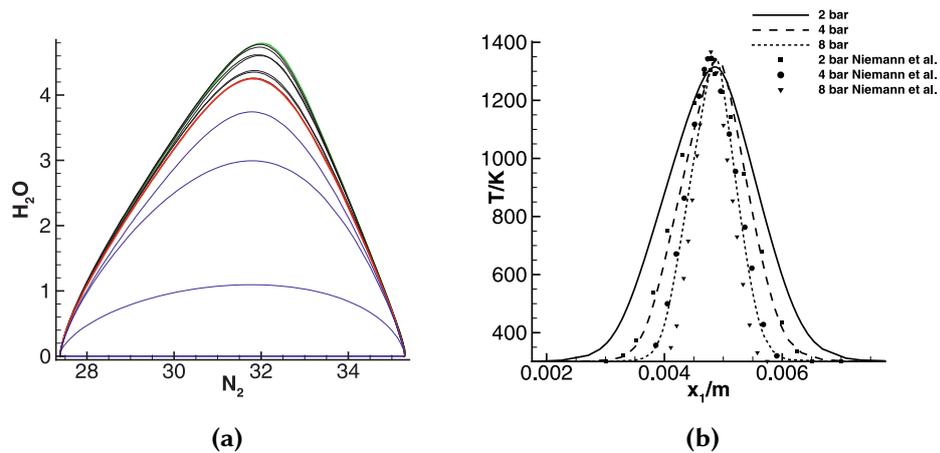


Abbildung 7.17.: (a): Stationäre Lösungen der stark verdünnten $\text{H}_2\text{-N}_2\text{-Luft}$ -Gegenstromflamme bei unterschiedlichen Streckungsraten a in einer $\text{N}_2\text{-H}_2\text{O}$ -Projektion des Zustandsraums. Die grüne Kurve ergibt sich für $a = 200 \text{ s}^{-1}$, die schwarzen Kurven durch sukzessive Erhöhung von a , bis mit der roten Kurve bei $a_{krit} = 660 \text{ s}^{-1}$ die kritische Streckungsrate erreicht ist, ab der Verlöschung eintritt. Der Verlöschungsvorgang wird durch die blauen Kurven repräsentiert, von denen die dicke Kurve die verlöschte Flamme darstellt. Einheiten der spezifischen Molzahlen φ in mol kg^{-1} . (b): Einfluss des Drucks p auf die Flammenzone. Kurven entsprechen eindimensionalen detaillierten INSFLA-Simulationen [29], Symbole geben die Ergebnisse zweidimensionaler Simulationen aus [112] wieder. Abbildungen teilweise entnommen aus [84].

Die zweite charakteristische Größe, die entscheidenden Einfluss auf die Flammenstabilität hat, ist der Systemdruck p . Dieser beeinflusst wichtige Kettenverzweigungs- und -rekombinationsreaktionen [1] innerhalb des Reaktionsmechanismus, was zu einer nicht-monotonen Abhängigkeit der kritischen Streckungsrate a_{krit} von p führt [112]. Die Nichtmonotonität ist eine Folge der Konkurrenz bimolekularer Kettenverzweigungsreaktionen und trimolekularer Rekombinationsreaktionen innerhalb des Wasserstoffmechanismus, die durch den Druck gesteuert wird [112, 115]. Für geringe Drücke unterhalb von ca. 1,5 bar dominieren Kettenverzweigungsreaktionen, die für die Bildung von Radikalen verantwortlich sind. Eine Druckerhöhung in diesem Bereich führt demnach zu einer Erhöhung der Flammenstabilität und damit der kritischen Streckungsrate a_{krit} . Für höher werdende Drücke nimmt der Einfluss trimolekularer Rekombinationsreaktionen zu. Diese sorgen für die Rekombination freier Radikale, sodass die kritische Streckungsrate a_{krit} bei einer Druckerhöhung über 1,5 bar wieder abnimmt [112, 115].

Abbildung 7.17b zeigt die Wirkung des Systemdrucks auf die Reaktionszone anhand der über der Ortskoordinaten x_1 aufgetragenen Flammentemperatur bei Verwendung des *San-Diego*- Reaktionsmechanismus [114]. Die Abbildung beinhaltet dabei Daten aus [112], die aus zweidimensionalen Simulationen hervorgehen und durch Symbole wiedergegeben werden. Die Kurven in Abbildung 7.17b entsprechen den Ergebnissen detaillierter eindimensionaler Simulationen unter Verwendung von INSFLA [29]. Es ist zu erkennen, dass mit zunehmendem Druck die Flammenzone zunehmend ausgedünnt wird. Die eindimensionalen Simulationen geben dabei die Ergebnisse der zweidimensionalen Simulationen aus [112] qualitativ wieder. Die auftretenden Unterschiede lassen sich durch die Mitberücksichtigung von Wärmeverlusten in den Berechnungen von *Niemann et al.* erklären [112], die im Zuge der durchgeführten eindimensionalen INSFLA-Rechnungen außer acht gelassen werden [84].

Die analysierte stark verdünnte eindimensionale H₂-N₂-Luft Gegenstromflamme ist auf Grund der geringen Brennstoffkonzentration durch eine besonders niedrige Verbrennungstemperatur und eine damit einhergehende geringe Flammenstabilität gekennzeichnet. Molekulare Transportprozesse spielen in dieser Konfiguration eine weitaus wichtigere Rolle für die Flammenstabilität als in stöchiometrischen Flammen. Auf Grund ihrer unterschiedlich schnellen Diffusionsgeschwindigkeit werden Spezies wie das H-Radikal oder der Brennstoff H₂ schneller in die Reaktionszone transportiert als z.B. das in diesem Fall als inert betrachtete N₂ [112, 115]. Diese Prozesse sind dafür verantwortlich, dass trotz der sehr geringen Brennstoffkonzentration eine stabil brennende Flamme aufrecht erhalten werden kann. Der starke Einfluss detaillierter Diffusionsprozesse spiegelt sich besonders in der Tatsache wieder, dass bei der Verwendung gleicher Diffusivitäten und einer Lewiszahl $Le = 1$ keine stabil brennende Flamme in numerischen Experimenten ermittelt werden konnte. Die Verwendung detaillierter Transportmodelle (Kapitel 2) ist deshalb für die Durchführung der angestrebten numerischen Untersuchungen zwingend notwendig [84].

Abbildung 7.18 veranschaulicht die Auswirkung der Implementierung des in dieser Arbeit verwendeten detaillierten Diffusionsmodells auf Basis der *Curtiss-Hirschfelder*-Approximation [1, 30] für eine eindimensionale nicht-vorgemischte H₂-N₂-Luft-Gegenstromflamme mit einer leicht höheren Brennstoffkonzentration. In diesem Fall reicht die Brennstoffmenge aus, um auch bei Verwendung gleicher Diffusivitäten und einer Lewiszahl $Le = 1$ eine stabile Flammenzone zu erhalten. Anhand der zweidimensionalen N₂-H₂O-Projektion des Zustandsraums in Abbildung 7.18a lässt sich feststellen, dass das detaillierte Diffusionsmodell zu merklich höheren spezifischen Molzahlen für H₂O führt. Im Vergleich zur Verwendung gleicher Diffusivitäten und $Le = 1$ berücksichtigt das detaillierte Diffusionsmodell die in realen Prozessen existierenden unterschiedlichen Diffusi-

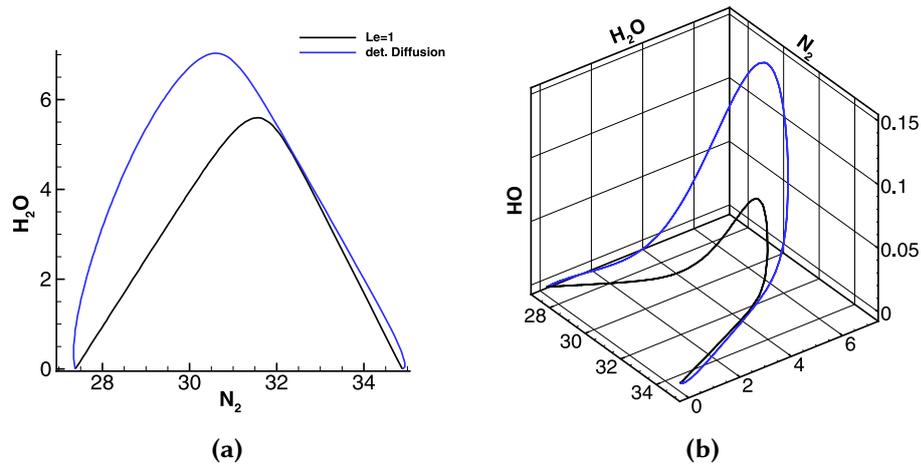


Abbildung 7.18.: Einfluss detaillierter Transportprozesse unter Verwendung der *Curtiss-Hirschfelder*-Approximation im Vergleich zur Verwendung gleicher Diffusivitäten und $Le = 1$ für eine nicht-vorgemischte H_2 - N_2 -Luft Gegenstromflamme mit einer leicht höheren Brennstoffkonzentration als in Tabelle 7.1. (a): Zweidimensionale N_2 - H_2O -Projektion des Zustandsraums. (b): Dreidimensionale N_2 - H_2O - OH -Projektion des Zustandsraums. Einheiten der spezifischen Molzahlen φ in mol kg^{-1} . Abbildungen teilweise entnommen aus [84].

ongeschwindigkeiten einzelner Spezies, was sich insbesondere in der Induktionszone für $N_2 < 30 \text{ mol kg}^{-1}$ und $N_2 < 32 \text{ mol kg}^{-1}$ bemerkbar macht. Hier ergibt sich für $Le = 1$ ein linearer Profilverlauf auf Grund des linearen Zusammenhangs zwischen den Diffusionsgeschwindigkeiten einzelner Spezies, während das detaillierte Diffusionsmodell einen nicht-linearen Verlauf und gleichzeitig ein Verschieben der Reaktionszone bewirkt [84]. Die beiden Flammenprofile sind in Abbildung 7.18b in einer dreidimensionalen N_2 - H_2O - OH -Projektion des Zustandsraums dargestellt. Der Einfluss des detaillierten Diffusionsmodells auf die Reaktionszone wird hier nochmals deutlich. Im Vergleich zur Verwendung von gleichen Diffusivitäten und einer Lewiszahl $Le = 1$ führt das detaillierte Transportmodell zu dreifach höheren spezifischen Molzahlen für das OH -Radikal [84].

Aus den obigen Ausführungen geht hervor, dass das betrachtete System einen sehr kritischen Anwendungsfall darstellt, der sich sehr gut für die Validierung der REDIM-Methode eignet. Für die vorgestellte stark verdünnte nicht-vorgemischte H_2 - N_2 -Luft-Gegenstromflamme sollen im Folgenden mit Hilfe reduzierter Berechnungen die kritischen Streckungsraten a_{krit} bei unterschiedlichen Drücken von 1 bar, 2 bar, 4 bar und 8 bar ermittelt werden (siehe Tabelle 7.1). Hierdurch soll überprüft werden, ob die REDIM-Methode die beschriebene nicht-monotone

7.3. Untersuchung der kritischen Streckungsrate einer stark verdünnten H_2-N_2 -Luft Gegenstromflamme

Abhängigkeit zwischen der kritischen Streckungsrate a_{krit} und dem Systemdruck p korrekt wiedergeben kann. Die Ergebnisse werden mit detaillierten eindimensionalen Berechnungen und den Literaturdaten aus [112] verglichen. Um die Gültigkeit der Validierung auszudehnen, werden die reduzierten und detaillierten Berechnungen unter Anwendung von drei verschiedenen Reaktionsmechanismen für die Wasserstoffverbrennung durchgeführt. Dies ist zum einen der *Miller*-Mechanismus [116], der *San-Diego*-Mechanismus [114] sowie der *GRI*-Mechanismus [117]. Die Charakteristika der Reaktionsmechanismen sind in Tabelle 7.2 zusammengefasst. Danach beinhaltet jeder untersuchte Mechanismus 9 unterschiedliche Spezies. Die Dimension des Zustandsraums ergibt sich daher in allen drei Fällen zu $9 + 2 = 11$.

Mechanismus	<i>Miller</i>	<i>San Diego</i>	<i>GRI</i>
Anzahl an Spezies	9	9	9
Anzahl an Reaktionen	38	42	56

Tabelle 7.2.: Eigenschaften der verwendeten Reaktionsmechanismen für die Wasserstoffverbrennung. Entommen aus [84].

Das Ziel der Studie ist es zu zeigen, dass die REDIM-Modellreduktionsmethode folgende wichtige Kriterien erfüllt, die im Allgemeinen für Modellreduktionsmethoden eine große Herausforderung darstellen [84]

- Die Berücksichtigung detaillierter Transportprozesse im Kontext eines besonders kritischen Anwendungsfalls.
- Die korrekte Abbildung der Druckabhängigkeit charakteristischer Reaktionskanäle innerhalb unterschiedlicher Reaktionsmechanismen für die Wasserstoffverbrennung.

Für die Durchführung der numerischen Experimente werden für jeden Reaktionsmechanismus und für jeden Druck zweidimensionale REDIMs erstellt. Das nächste Kapitel beschreibt die Vorgehensweise zur Konstruktion der REDIMs, die in Anlehnung an die in Abschnitt 6.2 gemachten Ausführungen erfolgt. Darüber hinaus werden wichtige intrinsischen Eigenschaften der REDIM beschrieben, die eine Beurteilung der reduzierten Systemdynamik ermöglichen. Im Anschluss daran werden die numerischen Ergebnisse vorgestellt. Es wird gezeigt, dass die zweidimensionale REDIM ausreicht, um sowohl das stationäre Verhalten als auch die transiente Dynamik bei der Verlöschung detaillierter Rechnungen wiederzugeben und zudem die Abhängigkeit der kritischen Streckungsrate vom Systemdruck abzubilden.

7.3.1. Konstruktion und lokale Analyse der REDIM

Wie im obigen Abschnitt erwähnt, werden die Untersuchungen zur kritischen Streckungsrate für drei verschiedene Reaktionsmechanismen durchgeführt. Die Erläuterungen dieses Abschnitts werden stellvertretend für den *Miller*-Reaktionsmechanismus [116] formuliert. Die anderen beiden Mechanismen weisen ein analoges Verhalten auf.

Die Bestimmung der zweidimensionalen REDIMs erfolgt gemäß Abschnitt 6.2 ausgehend von einer Anfangsmannigfaltigkeit, die aus unterschiedlichen stationären Flamelets der behandelten nicht-vorgemischten Gegenstromflamme interpoliert wird. Für die aktuelle Analyse werden für die Konstruktion der Anfangsmannigfaltigkeit drei unterschiedliche Flamelets herangezogen, wie Abbildung 7.19a in einer N_2 - H_2O -OH-Projektion und Abbildung 7.19c in einer N_2 - H_2O - H_2O_2 -Projektion des Zustandsraums veranschaulichen. Das erste Flamelet ergibt sich dabei durch die Anwendung einer sehr geringen Streckungsrate, was im Vergleich zu den anderen beiden Flamelets zu den größten Werten für die spezifischen Molzahlen für H_2O führt. Das zweite Flamelet entspricht demjenigen, das sich bei der kritischen Streckungsrate a_{krit} einstellt. Dieses Flammenprofil stellt damit die Grenze zur Zone transienter Verlöschung dar, die bei einer zusätzlichen Erhöhung der Streckungsrate erfolgen würde. Das letzte Flamelet wird durch das verlöschte Flammenprofil gebildet und ergibt sich somit aus der linearen Verbindung zwischen den Zusammensetzungen an den beiden Einströmrändern der Gegenstromflamme.

Die in Abbildung 7.19a und Abbildung 7.19c dargestellte Anfangsmannigfaltigkeit liefert gemäß Abschnitt 6.1.4 gleichzeitig die Abschätzungen für die Zustandsgradienten ξ . Es wird während der Integration der REDIM-Entwicklungsgleichung daher fortwährend auf die Anfangsmannigfaltigkeit zugegriffen, an deren Gitterpunkten die Schätzungen für die Zustandsgradienten vorliegen (vgl. Abbildung 6.8). Abbildung 7.19b und Abbildung 7.19d stellen die ausgehend von der Anfangsmannigfaltigkeit erstellten zweidimensionalen REDIM dar. Es ist zu erkennen, dass die eindimensionalen Flamelets in die 2D-REDIM eingebettet sind, was durch die Verwendung der entsprechenden Zustandsgradienten bei der Integration der REDIM-Entwicklungsgleichung begründet werden kann. Dies repräsentiert gleichzeitig die in Abschnitt 5.3 beschriebene hierarchische Struktur der REDIM, da die einzelnen Flamelets selbst als eindimensionale REDIMs angesehen werden können.

Abbildung 7.20 zeigt die unter Verwendung des *Miller*-Reaktionsmechanismus [116] erstellten 2D-REDIMs für die Drücke von 1 bar, 2 bar, 4 bar und 8 bar in einer N_2 - H_2O -OH-Projektion. Es ist zu erkennen, dass der maximale Wert der spezifischen Molzahlen von OH in Abbildung 7.20 durch die Erhöhung des Drucks

7.3. Untersuchung der kritischen Streckungsrate einer stark verdünnten $\text{H}_2\text{-N}_2\text{-Luft}$ Gegenstromflamme

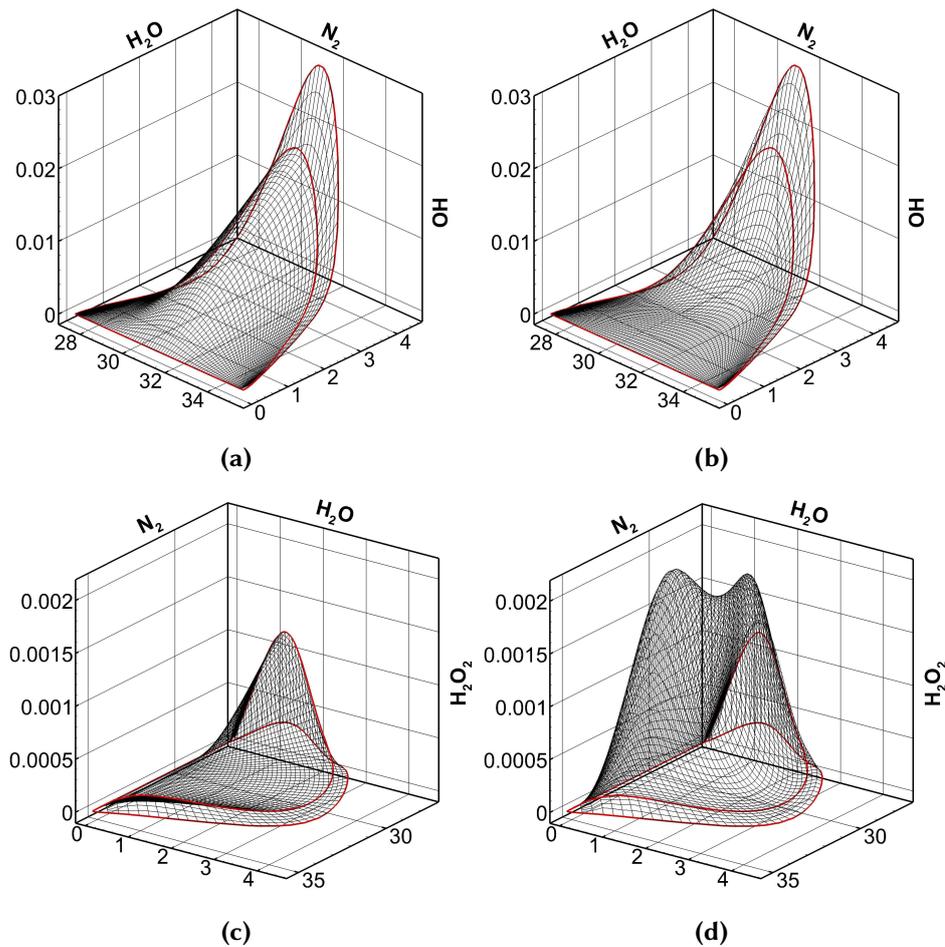


Abbildung 7.19.: (a) und (b): Interpolation der zweidimensionalen Anfangsmannigfaltigkeit aus drei verschiedenen Flamellets (rote Kurven) bei einer geringen Streckungsrate, der kritischen Streckungsrate a_{krit} sowie dem verlöschten Flammenprofil in einer $\text{N}_2\text{-H}_2\text{O-OH}$ -Projektion (a) und einer $\text{N}_2\text{-H}_2\text{O-H}_2\text{O}_2$ -Projektion (b) des Zustandsraums. (c) und (d): Zweidimensionale REDIMs. Einheiten der spezifischen Molzahlen φ in mol kg^{-1} . Der Systemdruck beträgt 1 bar. Abbildungen teilweise entnommen aus [84].

sukzessive abnimmt. Dieses charakteristische Verhalten ist ein Ergebnis der Konkurrenz zwischen der Kettenverzweigungsreaktion $\text{H} + \text{O}_2 \rightarrow \text{OH} + \text{O}$ und der Rekombinationsreaktion $\text{H} + \text{O}_2 + \text{M} \rightarrow \text{HO}_2 + \text{M}$ [115]. Beide Reaktionsschritte besitzen dabei die selben Reaktanden, allerdings wird für den Rekombinationsschritt zusätzlich der Stoßpartner M benötigt. Bei höherem Druck überwiegt der Einfluss der Rekombinationsreaktion, da es sich hierbei um eine trimolekulare Reaktion handelt. Mit zunehmendem Druck wird daher immer weniger OH

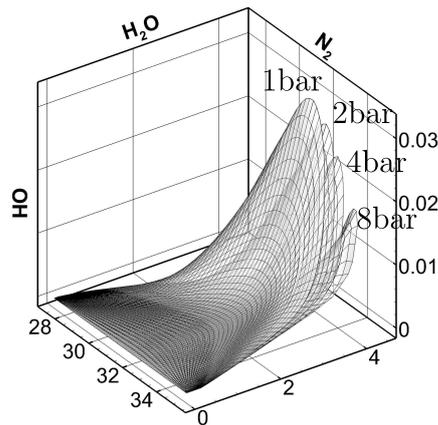


Abbildung 7.20.: Zweidimensionale REDIMs für die Drücke von 1 bar, 2 bar, 4 bar und 8 bar in einer N_2 - H_2O -OH-Projektion des Zustandsraums. Abbildung entnommen aus [84].

gebildet. Dies wird durch die REDIMs korrekt wiedergegeben. In Analogie zu Abschnitt 7.2.2 werden zum Zwecke der lokalen Stabilitätsanalyse wiederum die Eigenwerte der projizierten Jacobi-Matrix des chemischen Quellterms analysiert (Gleichung 7.1). Für $\psi_\theta^+ \mathbf{F}_\psi \psi_\theta$ finden sich $m = 2$ Eigenwerte, von denen einer einen positiven Realteil aufweist. Abbildung 7.21a zeigt die Verteilung des Realteils des ersten Eigenwerts λ_{s_1} entlang der zweidimensionalen REDIM in einer N_2 - H_2O -Projektion des Zustandsraums. Es zeigt sich, dass sich der Bereich positiver Werte unterhalb des kritischen Flamelets liegt, ab dem eine zusätzliche Erhöhung der Streckungsrate zur Verlöschung führt. In diesem Bereich können daher keine stationären Flamelets gefunden werden. Der positive Eigenwert spiegelt die repulsive Eigenschaft der REDIM in diesem Bereich wieder und ermöglicht somit eine Begründung für das charakteristische Verhalten detaillierter Verlöschungsvorgänge [85].

Abbildung 7.21b zeigt die Verteilung des langsamsten der schnellen Eigenwerte λ_{f_1} von $(\psi_\theta^\perp)^+ \mathbf{F}_\psi \psi_\theta^\perp$. Es ist zu sehen, dass der Eigenwert im Bereich existierender stationärer Flamelets relativ große Werte annimmt, da chemische Prozesse hier einen besonders starken Einfluss auf die Systemdynamik haben. Dies weist auf eine starke Attraktivität der REDIM in diesem Bereich hin. Dagegen weist λ_{f_1} im Bereich dominierender physikalischer Prozesse für $\varphi_{H_2O} < 2,5 \text{ mol kg}^{-1}$ geringere Werte auf, wodurch eine geringere, jedoch immer noch vorhandene Attraktivität auftritt.

7.3. Untersuchung der kritischen Streckungsrate einer stark verdünnten $\text{H}_2\text{-N}_2\text{-Luft}$ Gegenstromflamme

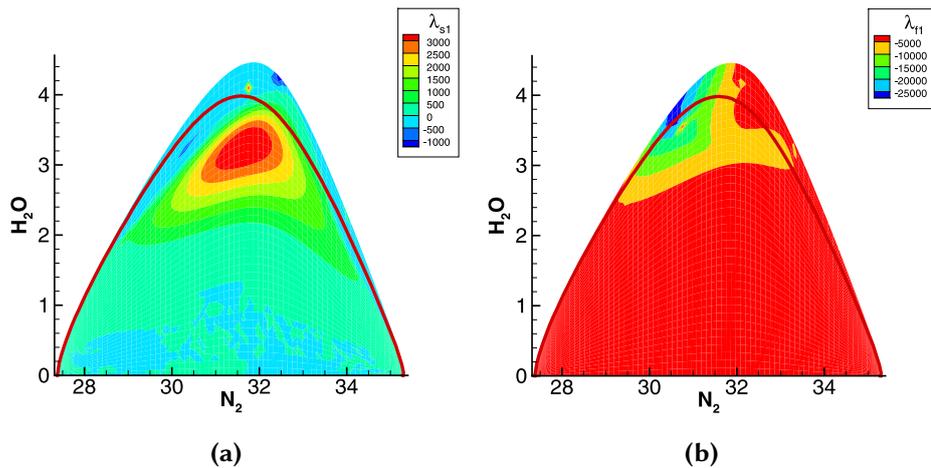


Abbildung 7.21.: Verteilung der Eigenwerte der gemäß Gleichung 7.1 projizierten Jacobi-Matrix entlang der 2D-REDIM in einer $\text{N}_2\text{-H}_2\text{O}$ -Projektion des Zustandsraums. Die rote Kurve entspricht dem kritischen Flammenprofil. (a): Langsamster Eigenwert der auf den Tangentialraum projizierten Jacobi-Matrix $\psi_\theta^+ F_\psi \psi_\theta$. (b): Langsamster Eigenwert der auf den Normalraum projizierten Jacobi-Matrix $(\psi_\theta^\perp)^+ F_\psi \psi_\theta^\perp$. Einheiten der spezifischen Molzahlen φ in mol kg^{-1} und der Eigenwerte λ_i in s^{-1} . Abbildungen teilweise entnommen aus [84].

7.3.2. Diskussion der Simulationsergebnisse

Die Durchführung der numerischen Experimente zur Ermittlung der kritischen Streckungsrate a_{krit} werden gemäß des einleitenden Kapitels für die in Tabelle 7.2 zusammengefassten Mechanismen und bei den Drücken von 1 bar, 2 bar, 4 bar und 8 bar durchgeführt. Die Ermittlung der kritischen Streckungsrate erfolgt dabei durch die schrittweise Erhöhung der Streckungsrate a ausgehend von einem stationären Flamelet, das durch eine sehr geringe Streckungsrate charakterisiert ist. Die Erhöhung beträgt dabei stets $\Delta a = 20 \text{ s}^{-1}$, sodass sich bis zum Erreichen des kritischen Flamelets mehrere stationäre Lösungen ergeben.

Abbildung 7.22 stellt drei verschiedene stationäre Lösungen in dreidimensionalen Projektionen des Zustandsraums dar, die sich aus detaillierten und reduzierten Berechnungen ergeben. In der $\text{N}_2\text{-H}_2\text{O-OH}$ -Projektion in Abbildung 7.22a findet sich eine sehr gute Übereinstimmung zwischen den reduzierten und detaillierten Profilen. Es fällt auf, dass die detaillierten Profile sehr nahe bei der REDIM liegen, wodurch die im vorherigen Abschnitt beschriebene Attraktivität der REDIM bestätigt wird. Die Profile mit der größten Streckungsrate von $a = 560 \text{ s}^{-1}$ befinden sich dabei in der Nähe der Löschgrenze, die den Beginn der instabilen Region mit positiven Eigenwerten der projizierten Jacobi-Matrix $\psi_\theta^+ F_\psi \psi_\theta$ darstellt. Das

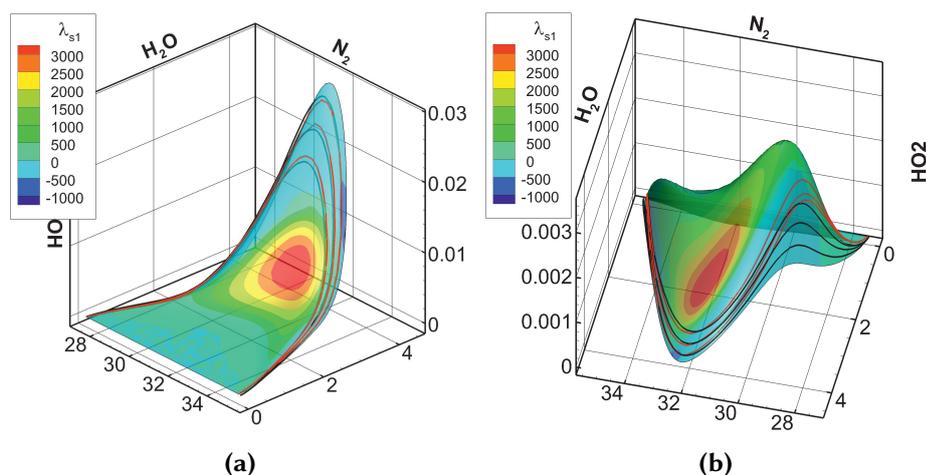


Abbildung 7.22.: 2D-REDIM sowie detaillierte (schwarz) und reduzierte (rot) stationäre Flammenprofile bei drei unterschiedlichen Streckungsraten von 400 s^{-1} , 500 s^{-1} und 580 s^{-1} für den *Miller*-Reaktionsmechanismus [116] bei einem Druck von 1 bar. (a): N_2 - H_2O -OH-Projektion des Zustandsraums. (b): N_2 - H_2O - HO_2 -Projektion. Einheiten der spezifischen Molzahlen φ in mol kg^{-1} . Für Informationen zum Konturplot siehe Abbildung 7.21. Abbildungen teilweise entnommen aus [84].

reduzierte System, das sich entlang der REDIM bewegt, ist somit in der Lage, diese kritische Position des detaillierten Profils im Zustandsraum wiederzugeben. Obwohl die spezifischen Molzahlen von HO_2 sehr viel geringere Werte im Vergleich zu H_2O oder OH einnehmen, findet sich auch für die in Abbildung 7.22b dargestellte N_2 - H_2O - HO_2 -Projektion eine gute Übereinstimmung zwischen reduzierten und detaillierten Berechnungen. Abweichungen sind bei der Betrachtung von HO_2 im Bereich langsamer chemischer Prozesse in der Nähe der unverbrannten Mischungszusammensetzungen zu identifizieren. Dies ist auf die Verwendung von lediglich drei stationären Profilen für die Schätzung der Zustandsgradienten zurückzuführen. Dennoch wird nicht nur der qualitative Verlauf der detaillierten Profile durch das reduzierte System korrekt wiedergegeben. Auch in dieser Projektion ist deutlich zu erkennen, dass die detaillierten Profile sehr nahe an der REDIM gelegen sind [84].

Neben der genauen Abbildung stationärer Profile ist die Wiedergabe des transienten detaillierten Systemverhaltens eine wichtige Anforderung an die REDIM. Abbildung 7.23 stellt den instationären Verlöschungsprozess des detaillierten und reduzierten Systems in einer N_2 - H_2O -OH-Projektion des Zustandsraums dar bei Verwendung des *Miller*-Reaktionsmechanismus [116] bei einem Druck von 1 bar. Es ist die Position der jeweiligen Profile zu verschiedenen Zeitpunkten

7.3. Untersuchung der kritischen Streckungsrate einer stark verdünnten $\text{H}_2\text{-N}_2\text{-Luft}$ Gegenstromflamme

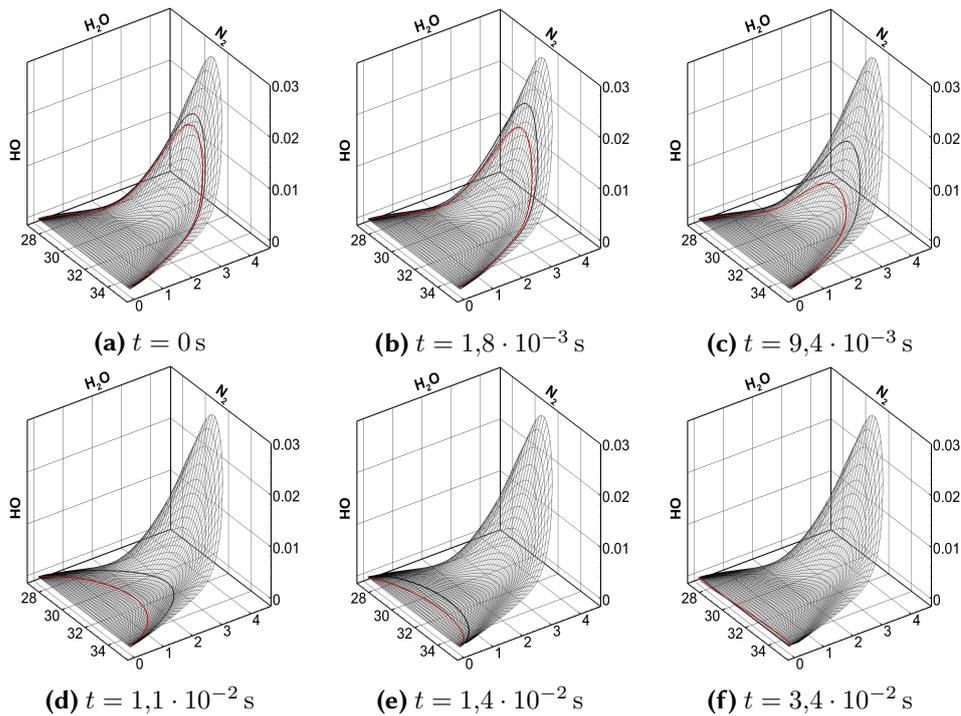


Abbildung 7.23.: Transienter Verlöschungsprozess infolge der Erhöhung der Streckungsrate zu verschiedenen Zeitpunkten in einer $\text{N}_2\text{-H}_2\text{-OH}$ -Projektion des Zustandsraums. Rote Kurven: Reduziertes Modell. Schwarze Kurven: Detailliertes Modell. Abbildungen teilweise entnommen aus [84].

innerhalb des Verlöschungsvorgangs dargestellt. Die kritische Streckungsrate, ab der eine weitere Erhöhung um $\Delta a = 20 \text{ s}^{-1}$ zur Verlöschung führt, beträgt für das reduzierte System 560 s^{-1} und für das detaillierte System 580 s^{-1} . Daraus ergibt sich der geringe Unterschied zwischen den beiden kritischen Profilen in Abbildung 7.23a bei $t = 0 \text{ s}$ [84]. Beim Vergleich beider Verlöschungs Vorgänge fällt zunächst auf, dass das reduzierte System die Mischungslinie schneller erreicht als das detaillierte Profil. Der Grund hierfür ist, dass die transiente Verlöschung des detaillierten Profils zu Beginn durch eine kurzzeitige Zunahme von OH charakterisiert ist. Dies ist eine Folge der instantanen Erhöhung der Einströmgeschwindigkeiten des Oxidationsmittels und des Brennstoffs auf Grund der Erhöhung der Streckungsrate. Das reduzierte System ist zwar nicht in der Lage diesen anfänglichen Prozess abzubilden, führt jedoch im weiteren Verlöschungsverlauf zu qualitativ vergleichbaren Positionen des Flammenprofils zu den gezeigten Zeitpunkten. Die Bewegung des reduzierten Profils ist per Definition auf den tangentialen Unterraum der REDIM beschränkt (siehe Abschnitt 5.4). Bei Betrachtung von Abbildung 7.23 fällt allerdings auf, dass auch der Verlö-

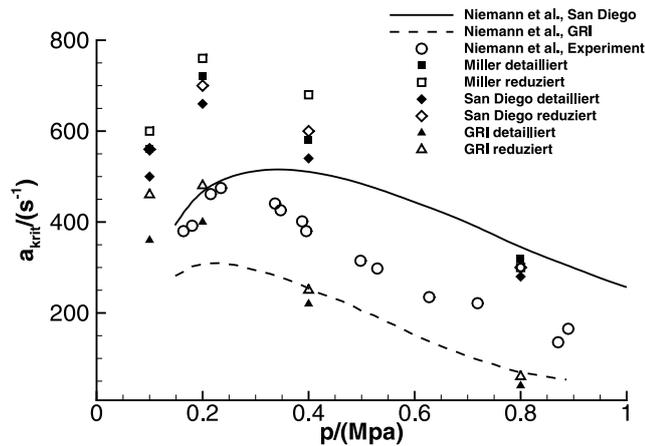


Abbildung 7.24.: Nicht-monotone Abhängigkeit der kritischen Streckungsrate a_{krit} vom Systemdruck p . Vergleich der Ergebnisse detaillierter und reduzierter Berechnungen mit den Literaturdaten aus [112] für die Reaktionsmechanismen aus Tabelle 7.2. Abbildung entnommen aus [84].

schungsvorgang des detaillierten Systems entlang der REDIM abläuft. Dies ist wiederum eine Bestätigung des attraktiven Charakters der REDIM, wodurch nicht nur stationäre Lösungen, sondern auch transiente Vorgänge durch das reduzierte System wiedergegeben werden können [84, 85].

Die kritischen Streckungsraten, die aus den detaillierten und reduzierten Berechnungen für jeden Druck und Reaktionsmechanismus resultieren, sind in Abbildung 7.24 zusammengefasst. Die Abbildung enthält zudem als Vergleichsbasis die aus [112] hervorgehenden Ergebnisse zweidimensionaler numerischer Simulationen und experimentelle Messergebnisse. Obwohl die reduzierten Berechnungen zu leicht höheren kritischen Streckungsraten führen, lässt sich insgesamt eine gute Übereinstimmung mit den detaillierten eindimensionalen Simulationsergebnissen feststellen. In Analogie zu den numerischen und experimentellen Daten aus [112] bilden sowohl das detaillierte als auch das reduzierte System die nicht-monotone Abhängigkeit zwischen der kritischen Streckungsrate a_{krit} und dem Druck p ab. Beide eindimensionalen Modelle führen demnach bei einer Druckerhöhung von 1 bar auf 2 bar zu einer vergrößerten kritischen Streckungsrate. Eine weitere Druckerhöhung führt in beiden Fällen zu einer Abnahme der kritischen Streckungsrate. Anhand der numerischen Ergebnisse aus [112] lässt sich erkennen, dass die Verwendung unterschiedlicher Reaktionsmechanismen einen großen Einfluss auf die kritische Streckungsrate hat. So führt der *GRI*-Mechanismus zu vergleichsweise größeren kritischen Streckungsraten bei gleichen Drücken im Vergleich zum *San-Diego*-Mechanismus. Auch diese Eigen-

7.3. Untersuchung der kritischen Streckungsrate einer stark verdünnten H_2-N_2 -Luft Gegenstromflamme

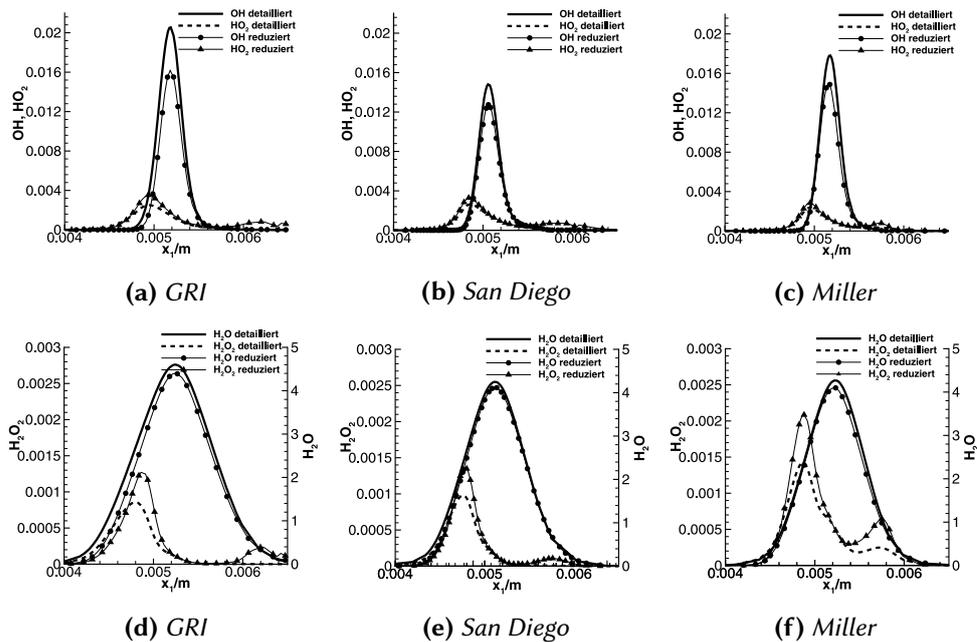


Abbildung 7.25.: Örtliche Verteilung der spezifischen Molzahlen mehrerer Spezies für die kritische Streckungsrate bei 2 bar Systemdruck dargestellt für die Reaktionsmechanismen aus Tabelle 7.2. Abbildungen entnommen aus [84].

schaft wird sowohl vom detaillierten als auch vom reduzierten eindimensionalen Modell abgebildet. Daraus geht hervor, dass die REDIM die wichtigen Charakteristika unterschiedlicher Reaktionsmechanismen darstellen und diese im Zuge des reduzierten Modells durch ihre intrinsischen Eigenschaften wiedergeben kann [84].

Verglichen mit den numerischen und experimentellen Daten aus [112] ergeben sich quantitative Unterschiede insbesondere im Bereich geringerer Drücke. Hier führen die eindimensionalen detaillierten und reduzierten Berechnungen zu größeren Werten für die kritische Streckungsrate. Eine Erklärung für diese Unterschiede könnte darin bestehen, dass bei den hier durchgeführten numerischen Berechnungen mit INSFLA [29] der Einfluss von Wärmestrahlung nicht berücksichtigt wurde. Eine zusätzliche Wärmeabgabe würde demnach zu einer Verringerung der kritischen Streckungsrate führen. Zudem erfolgten die Simulationen in [112] auf Basis eines zweidimensionalen Strömungsfeldes, was ebenfalls zu einer Verringerung der kritischen Streckungsrate im Vergleich zu den hier verwendeten eindimensionalen Modellen führt [84].

Abbildung 7.25 zeigt die zu Abbildung 7.24 gehörenden eindimensionalen kritischen Flammenprofile des detaillierten und reduzierten Systems in Abhängigkeit der Ortskoordinaten x_1 . Es sind die örtlichen Verteilungen der spezifischen Molzahlen von H_2O , H_2O_2 , OH und HO_2 für jeden der drei Reaktionsmechanismen bei einem Druck von 2 bar dargestellt. Für die anderen Drücke ergeben sich analoge Ergebnisse. Wie die Abbildung zeigt, ergibt sich besonders für die Hauptspezies H_2O eine sehr gute Übereinstimmung zwischen detaillierten und reduzierten Simulationen. Leichte Unterschiede ergeben sich auf Grund der leicht größeren kritischen Streckungsrate für die reduzierten Berechnungen gemäß Abbildung 7.24. Dies führt bei den reduzierten Profilen zu geringfügig kleineren spezifischen Molzahlen für H_2O und OH im Vergleich zu den detaillierten Profilen. Die Verteilung von H_2O ist dabei analog zur Temperaturverteilung, sodass die kritische Flammentemperatur auf Grund der höheren kritischen Streckungsrate bei den reduzierten Rechnungen ebenfalls leicht geringer ausfällt. Im Gegensatz dazu ergeben sich für H_2O_2 und HO_2 leicht größere Werte im Vergleich zu den detaillierten Berechnungen. Dies kann unter Zuhilfenahme von Abbildung 7.22b anhand der Form der zweidimensionalen REDIM erläutert werden. Eine Erhöhung der Streckungsrate führt demnach zu einer Erhöhung der spezifischen Molzahlen von HO_2 . Da H_2O_2 eine vergleichbare Charakteristik entlang der REDIM aufweist, spiegelt sich dies in den vergrößerten spezifischen Molzahlen beider Spezies für die kritischen Profile wieder.

Aus den bisherigen Erläuterungen kann geschlossen werden, dass das reduzierte Modell in der Lage ist, sowohl das stationäre Verhalten des detaillierten Systems abzubilden als auch kritische transiente Verlöschungsvorgänge. Die obigen Ausführungen zeigen, dass zwei REDIM-Dimensionen hierfür ausreichend sind. Der zu Validierungszwecken durchgeführte Vergleich mit experimentellen und numerischen Daten aus der Literatur [112] bestätigt darüber hinaus, dass mit Hilfe der durchgeführten eindimensionalen Simulationen der reale Charakter der stark verdünnten H_2 - N_2 -Luft-Gegenstromflamme realistisch wiedergegeben werden kann.

7.4. Zusammenfassende Diskussion der Ergebnisse

Die vorangegangenen Abschnitte befassen sich mit der Anwendung und Validierung der REDIM-Methode. Das Hauptaugenmerk in Abschnitt 7.1 liegt dabei auf der Bestätigung der wichtigen Eigenschaft der REDIM, dass ihre Abhängigkeit von der Gradientenschätzung χ mit zunehmender Dimension abnimmt. Hierdurch

können vereinfachte Verfahren zur Bestimmung von χ verwendet werden (Abschnitt 6.1.4), für die ein geringes problemspezifisches Vorwissen benötigt wird. Zur Bestätigung des beschriebenen Zusammenhangs wird die Auswirkung stark unterschiedlicher Schätzungen χ auf REDIMs unterschiedlicher Dimension (1D, 2D, 3D) am Beispiel einer vorgemischten Synthesegas-Luft-Flamme interpretiert. Die Konstruktion der REDIMs erfolgt dabei auf Basis der in Abschnitt 6.3 vorgestellten adaptiven Methode, die auf der hierarchischen REDIM-Struktur aufbaut. Im Zuge der Untersuchung wird eine geeignete Methode vorgestellt, mit der eine quantitative Analyse der auftretenden Abstände zwischen REDIMs erfolgen kann, die sich infolge der unterschiedlichen Schätzungen χ ergeben. Dies ermöglicht einen genauen Vergleich zwischen den REDIMs unterschiedlicher Dimension hinsichtlich des Einflusses unterschiedlicher Schätzungen χ . Die Analyse der zustande gekommenen Abstände bestätigt, dass die Sensitivität der REDIM bezüglich veränderter χ -Werte durch die Erhöhung der REDIM-Dimension sukzessive abnimmt. Dieses Resultat wird durch den Vergleich der reduzierten Modelle der 1D-, 2D- und 3D-REDIM mit dem detaillierten System gestützt. Es zeigt sich, dass die 3D-REDIM trotz einer Verdopplung der Gradientenschätzung zu beinahe dem selben stationären Flammenprofil im Zustandsraum führt wie das detaillierte System (Abbildung 7.9).

In Abschnitt 7.2 und Abschnitt 7.3 wird die REDIM-Methode für die Untersuchung kritischer transienter Verbrennungsprozesse in eindimensionalen Flammen angewendet, durch welche das lokale Verhalten turbulenter Flammen nachgebildet werden soll (Abbildung 3.1). Die Studien in Abschnitt 7.2 basieren dabei auf der Störung der laminaren Flammenfront einer vorgemischten Synthesegas-Luft-Flamme durch die Implementierung eines eindimensionalen Wirbels (Abschnitt 7.2.1) und der anschließenden Analyse des Relaxationsverhaltens im Orts- und im Zustandsraum. Es wird ein Vergleich zwischen den reduzierten 1D-, 2D- und 3D-Modellen (Abschnitt 5.4, Abschnitt 6.4) sowie dem detaillierten Modell (Kapitel 2) durchgeführt, um so die steigende Genauigkeit der Berechnungsergebnisse mit zunehmender REDIM-Dimension zu überprüfen. Es zeigt sich, dass mit zunehmender REDIM-Dimension das charakteristische dynamische Verhalten des detaillierten Systems immer besser abgebildet werden kann (Abbildung 7.14, Abbildung 7.16). Das reduzierte 3D-Modell gibt das detaillierte Systemverhalten dabei sehr genau wieder, sodass eine zusätzliche Dimensionserhöhung für nicht notwendig erachtet werden kann. Durch die präsentierten Ergebnisse können die Vorteile der in Abschnitt 6.3 beschriebenen adaptiven REDIM-Konstruktionsmethode hinsichtlich einer generischen Dimensionserweiterung hervorgehoben werden.

In Abschnitt 7.3 werden Verlöschungsvorgänge in einer stark verdünnten nicht-vorgemischten H_2 - N_2 -Luft Gegenstromflamme betrachtet. Auf Grund der

geringen Brennstoffkonzentration spielen detaillierte Transportprozesse eine wichtige Rolle für die Stabilität der untersuchten Flamme, was sie zu einem besonders kritischen Anwendungsfall für die REDIM-Methode macht. Durch die Variation der Streckungsrate [1] wird der Einfluss molekularer Transportprozesse auf die Reaktionszone verstärkt, bis die Verlöschung der Flamme eintritt. Die so bestimmte kritische Streckungsrate stellt einen wichtigen Parameter dar, der das System charakterisiert und einen Vergleich zwischen reduzierten und detaillierten Berechnungen ermöglicht [85]. Die Ermittlung der kritischen Streckungsrate erfolgt bei unterschiedlichen Systemdrücken, um die in der Literatur [112, 115] beschriebene nicht-monotone Abhängigkeit zwischen der kritischen Streckungsrate und dem Druck mit Hilfe des reduzierten Modells zu überprüfen. Die Untersuchungen werden für drei unterschiedliche Reaktionsmechanismen für die Wasserstoffverbrennung durchgeführt (Tabelle 7.2), die hinsichtlich der kritischen Streckungsrate zu unterschiedlichen Ergebnissen führen [112, 115]. Die reduzierten Berechnungen basieren auf der Verwendung von 2D-REDIMs, die mit Hilfe der in Abschnitt 6.2 beschriebenen Methode aus einzelnen stationären Flamelets konstruiert werden. Der Vergleich mit Literaturdaten und detaillierten Berechnungen zeigt, dass die reduzierten Modelle die charakteristische nicht-monotone Abhängigkeit der kritischen Streckungsrate vom Systemdruck korrekt wiedergeben (Abbildung 7.24). Auch die sich zwischen den Reaktionsmechanismen ergebenden Unterschiede hinsichtlich der kritischen Streckungsrate werden durch das reduzierte Modell abgebildet. Hierdurch wird gezeigt, dass bei vorhandenem Vorwissen über die vorherrschende Systemdynamik zwei Dimensionen ausreichen, um wichtige Systemeigenschaften genau wiederzugeben.

Die in Abschnitt 7.2 und Abschnitt 7.3 diskutierten Vergleiche zwischen reduzierten und detaillierten Modellen werden durch eine Analyse der lokalen Eigenschaften der REDIMs gestützt (Abschnitt 7.2.2, Abschnitt 7.3.1). Es kann gezeigt werden, dass die lokalen Stabilitätseigenschaften der REDIMs sowohl eine schlüssige Erklärung für das detaillierte Systemverhalten liefern als auch die Attraktivität der REDIM bestätigen. Dadurch wird eine wichtige Voraussetzung für die Anwendung des reduzierten Modells und der REDIM-Entwicklungsgleichung geschaffen.

8. Zusammenfassung und Ausblick

Um die Simulation komplexer Verbrennungsprozesse innerhalb eines akzeptablen Zeitrahmens zu realisieren, werden Modellreduktionsmethoden für die vereinfachte Beschreibung der chemischen Reaktionskinetik angewendet. Im Zentrum vieler Reduktionsmethoden steht dabei die Identifikation niedrigdimensionaler Mannigfaltigkeiten im Zustandsraum, welche die Systemdynamik ausreichend genau beschreiben. Bei der REDIM-Methode (Reaktions-Diffusions-Mannigfaltigkeit) wird im Gegensatz zu vielen anderen Modellreduktionsmethoden die Kopplung zwischen molekularen Transportprozessen und chemischer Reaktionskinetik bereits im Zuge der Mannigfaltigkeitskonstruktion berücksichtigt. Hierdurch wird eine sehr genaue reduzierte Beschreibung sowohl stationärer als auch transientser Verbrennungsprozesse realisiert.

Im Rahmen dieser Arbeit wurde ein neuartiges Konzept für die Konstruktion und Implementierung von REDIMs zur reduzierten Beschreibung chemisch reagierender Strömungen entwickelt. Das Verfahren ermöglicht die problemspezifische Adaption der Dimension und Ausdehnung der Mannigfaltigkeit durch die Ausnutzung der hierarchischen Struktur der REDIMs sowie einer neu entwickelten Expansionsgleichung für den REDIM-Rand. Die Prozedur setzt dabei kein tiefgreifendes Expertenwissen voraus. Die erarbeiteten Neuerungen wurden in bestehende Programmcodes implementiert und die Methodik anhand kritischer transientser Verbrennungsszenarien validiert.

Das mathematische Modell des REDIM-Verfahrens gliedert sich in zwei Hauptteile: Der REDIM-Entwicklungsgleichung, welche die Bestimmung der REDIM im Zustandsraum ermöglicht sowie dem reduzierten PDE-System, das sich durch die Anwendung der REDIM ergibt. Ein zentraler Punkt bei der Bestimmung der REDIM ist die Abschätzung der im System vorkommenden Zustandsgradienten, wodurch der Einfluss molekularer Transportprozesse auf die chemische Reaktionskinetik entlang der REDIM beschrieben wird. Das reduzierte PDE-System beschreibt die Dynamik des Verbrennungssystems anhand weniger Parameter.

Das numerische Verfahren zur Lösung der REDIM-Entwicklungsgleichung wurde in dieser Arbeit am Beispiel vorgemischter Synthesegas-Luft-Flammen und nicht-vorgemischter Wasserstoff-Luft-Flammen diskutiert. Es basiert auf

der Darstellung der REDIM in Form eines mehrdimensionalen Gitters und startet ausgehend von einer geeigneten Anfangsmannigfaltigkeit im Zustandsraum. Unterschiedliche Parametrisierungs- und Diskretisierungsmethoden wurden angewendet und ihre Eignung anhand einer Fehleranalyse diskutiert. Für die REDIM-Ränder müssen besondere geometrische Bedingungen berücksichtigt werden. Hierfür wurden geeignete Schemata in bestehende Programmcodes implementiert. Die Prozedur zur Implementierung der REDIM als Tabelle in der numerischen Lösung des reduzierten Systems konnte durch die Anwendung optimierter Interpolationsfunktionen verbessert werden.

Die Umsetzung des neu entwickelten adaptiven Konstruktionsverfahrens erfolgt in zwei Teilschritten, die anhand eines vorgemischten Synthesegas-Luft-Systems vorgestellt werden. Der erste Schritt besteht aus der hierarchischen Konstruktion höherdimensionaler REDIMs ausgehend von REDIMs niedriger Dimension. Im zweiten Schritt wird die Ausdehnung der REDIM an das betrachtete Verbrennungsszenario durch die Expansion der REDIM-Ränder angepasst. Hiermit konnte eine dreidimensionale REDIM für das betrachtete vorgemischte System ausgehend von einer stark vereinfachten eindimensionalen Anfangsmannigfaltigkeit erfolgreich erzeugt werden. Anhand des vorgestellten Verbrennungssystems konnte gezeigt werden, dass für die Anwendung des Verfahrens kein hohes Maß an Vorinformationen über das Systemverhalten vorausgesetzt wird. Zudem wird durch die neue Prozedur die Flexibilität der REDIM-Methode hinsichtlich einer Anpassung ihrer Dimension und Ausdehnung im Vergleich zu bisherigen Anwendungen gesteigert.

Die Validierung der REDIM-Methode erfolgte wiederum in zwei Etappen. Zunächst wurde die wichtige Eigenschaft der REDIMs bestätigt, dass ihre Abhängigkeit von der Schätzung der Zustandsgradienten mit zunehmender Dimension abnimmt. Dies ermöglicht vereinfachte Verfahren zur Bestimmung der Gradientenschätzung und reduziert somit das benötigte Vorwissen des Anwenders. Die vorgestellte Methode zur Bestimmung der Abstände im Zustandsraum erwies sich als geeignet, um die Einflüsse stark veränderter Gradientenschätzungen auf Lage und Form der REDIMs zu quantifizieren. Die für das vorgemischte Synthesegas-Luft-System erzeugte 3D-REDIM ist demnach insensitive gegenüber stark unterschiedlicher Gradientenschätzungen. Zusätzlich ist sie dazu in der Lage, trotz einer Verdopplung der Gradientenschätzung die stationäre Lösung der detaillierten eindimensionalen Flamme im Zustandsraum sehr genau wiederzugeben.

Im Folgenden wurde die REDIM für die Untersuchung transienter Vorgänge in eindimensionalen Verbrennungssystemen implementiert. Die Validierung der reduzierten Simulationsergebnisse erfolgte dabei mit Hilfe detaillierter Berechnungen oder vorhandener Literaturdaten. Zunächst wurde eine gestörte

vorgemischte freie Synthesegas-Luft-Flamme untersucht. Die Störung erfolgte dabei durch Implementierung eindimensionaler Wirbel, wodurch das lokale Verhalten turbulenter Flammen adäquat nachgebildet werden konnte. Anhand der Untersuchungen konnte die zunehmende Genauigkeit der reduzierten Berechnungen mit steigender REDIM-Dimension bestätigt werden. Eine mit Hilfe des neuen Verfahrens erstellte 3D-REDIM war demnach in der Lage die charakteristische Dynamik des detaillierten Systems bei der Relaxation eines implementierten Wirbels selbst für Minoritätenspezies sehr genau im Orts- und Zustandsraum abzubilden. Dies zeigte die Vorteile der implementierten adaptiven Konstruktionsmethode hinsichtlich einer generischen Genauigkeitserhöhung nochmals auf. Die hierarchische Natur der REDIMs wurde durch den Vergleich der detaillierten Systemdynamik mit den REDIMs unterschiedlicher Dimension nachgewiesen. Hierbei hat sich erneut die implementierte Methode zur Messung der Abstände im Zustandsraum bewährt.

Für die Untersuchung transientser Verlöschungsvorgänge in einer nicht-vorgemischten stark verdünnten H_2-N_2 -Luft-Gegenstromflamme kam eine 2D-REDIM zum Einsatz, die auf Basis der bisherigen Konstruktionsmethode erzeugt wurde. Die analysierte Flamme stellt dabei einen besonders kritischen Anwendungsfall dar, da detaillierte Transportprozesse eine bedeutende Rolle spielen und daher berücksichtigt werden müssen. Die reduzierten Berechnungen konnten den in der Literatur [112, 115] beschriebenen nicht-monotonen Zusammenhang zwischen kritischer Streckungsrate und dem Systemdruck für drei unterschiedliche Reaktionsmechanismen abbilden. Hierdurch konnte gezeigt werden, dass bei vorhandenem Vorwissen über die vorherrschende Systemdynamik zwei Dimensionen ausreichen, um wichtige Systemgrößen wie die kritische Streckungsrate abzubilden.

Die präsentierten Ergebnisse zeigen, dass durch die neu implementierte Methode die Variabilität der REDIM-Methode erweitert werden konnte. Aus den gewonnenen Erkenntnissen erschließen sich weitere Aufgabenfelder, deren Bearbeitung zu einer weiteren Verbesserung führen. Anknüpfende Arbeiten könnten den Fokus dabei insbesondere auf die Implementierung eines voll-impliziten numerischen Verfahrens zur Integration der REDIM-Entwicklungsgleichung legen, welches mit einer Zeitschrittweitensteuerung und Fehlerkontrolle ausgestattet ist. Dies würde die Robustheit der Methode stark vergrößern und ihre Anwendung damit erleichtern. Hierbei ist zu beachten, dass die wünschenswerte Variabilität in der Dimensionserweiterung mit größer werdenden linear-algebraischen Herausforderungen bei der Implementierung voll-impliziter Solver einhergeht. Weitere Verbesserungen können darüber hinaus hinsichtlich einer automatischen Gitteranpassung erfolgen, welche die Eigenschaften des Vektorfeldes auf der REDIM berücksichtigt und die Gitterpunktdichte in kritischen Bereichen erhöht. Dies ist

insbesondere bei der Verwendung detaillierter Diffusionsmodelle wünschenswert, da hier die lokalen Änderungen des molekularen Transports starken Schwankungen unterworfen sind. Die lokale Gitteranpassung könnte dabei in geeigneter Weise mit der implementierten Interpolationsmethode kombiniert werden. Die Effizienz bei der Anwendung der REDIM in reduzierten Berechnungen könnte durch eine problemabhängige Anpassung der lokalen REDIM-Dimension gesteigert werden. Hier wäre eine on-demand Erweiterung der Dimension denkbar, welche die Dimension der REDIM und damit die Genauigkeit der Berechnungen bedarfsgerecht erhöht.

A. Anhang

A.1. Projektion

Seien \mathcal{X} und \mathcal{Y} komplementäre Untervektorräume des \mathbb{R}^n , sodass für jeden Vektor $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^n$ die Vektoren $\mathbf{x} \in \mathcal{X}$ und $\mathbf{y} \in \mathcal{Y}$ existieren mit $\mathbf{v} = \mathbf{x} + \mathbf{y}$. Dann heißen der Vektor \mathbf{x} die Projektion des Vektors \mathbf{v} entlang von \mathcal{Y} auf \mathcal{X} und der Vektor \mathbf{y} die Projektion des Vektors \mathbf{v} entlang von \mathcal{X} auf \mathcal{Y} [86].

Der lineare Operator \mathbf{Q} , der definiert ist durch $\mathbf{Q}\mathbf{v} = \mathbf{x}$, wird als Projektionsoperator entlang von \mathcal{Y} auf \mathcal{X} bezeichnet. \mathbf{Q} hat folgende Eigenschaften

$$\mathbf{I} - \mathbf{Q} \text{ ist der komplementäre Projektionsoperator entlang von } \mathcal{Y} \text{ auf } \mathcal{X} \quad (\text{A.1})$$

$$\text{Bild}(\mathbf{Q}) = \text{Kern}(\mathbf{I} - \mathbf{Q}) = \mathcal{X} \quad (\text{A.2})$$

$$\text{Kern}(\mathbf{Q}) = \text{Bild}(\mathbf{I} - \mathbf{Q}) = \mathcal{Y} \quad (\text{A.3})$$

$$\mathbf{Q} = [\mathbf{X}|\mathbf{0}][\mathbf{X}|\mathbf{Y}]^{-1} = [\mathbf{X}|\mathbf{Y}]\begin{pmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{pmatrix}[\mathbf{X}|\mathbf{Y}]^{-1}, \quad (\text{A.4})$$

wobei \mathbf{X} und \mathbf{Y} Matrizen sind, welche die Basisvektoren von \mathcal{X} bzw. \mathcal{Y} enthalten. Der Beweis für die aufgeführten Zusammenhänge kann [86] entnommen werden.

Sei nun zusätzlich $\mathcal{X} \perp \mathcal{Y}$. Der orthogonale Projektionsoperator \mathbf{Q}_\perp entlang von \mathcal{Y} auf \mathcal{X} ergibt sich dann zu [86]

$$\mathbf{Q}_\perp = \mathbf{X}(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T, \quad (\text{A.5})$$

während für den komplementären Projektionsoperator gilt [86]

$$\mathbf{I} - \mathbf{Q}_\perp = \mathbf{I} - \mathbf{X}(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T = \mathbf{Y}(\mathbf{Y}^T \mathbf{Y})^{-1} \mathbf{Y}^T. \quad (\text{A.6})$$

A.2. Invarianz der REDIM in Bezug auf die Parametrisierung

Sei die Änderung der Mannigfaltigkeitsparametrisierung von $\boldsymbol{\theta}$ nach $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ gegeben durch die $(m \times m)$ -dimensionale reguläre Transformationsmatrix [27]

$$\mathbf{X} = \hat{\boldsymbol{\theta}}, \quad (\text{A.7})$$

sodass ψ_θ transformiert wird zu

$$\psi_{\hat{\theta}} = \psi_\theta \theta_{\hat{\theta}} \quad (\text{A.8})$$

und $\chi(\theta)$ transformiert wird zu

$$\hat{\chi}(\hat{\theta}) = \psi_{\hat{\theta}}^+ \xi(\psi) = (\psi_\theta \theta_{\hat{\theta}})^+ \xi(\psi) = \theta_{\hat{\theta}}^{-1} \psi_\theta^+ \xi(\psi) = \theta_{\hat{\theta}}^{-1} \chi(\theta) \quad (\text{A.9})$$

und

$$\hat{\theta}_\theta \theta_{\hat{\theta}} = \mathbf{I}, \quad \theta_{\hat{\theta}} = \hat{\theta}_\theta^{-1}. \quad (\text{A.10})$$

Die Projektionsmatrix ergibt sich zu [27]

$$\mathbf{P} = (\mathbf{I} - \psi_\theta \psi_\theta^+), \quad (\text{A.11})$$

während für die Projektionsmatrix $\hat{\mathbf{P}}$ in der neuen Parametrisierung $\hat{\theta}$ folgt

$$\hat{\mathbf{P}} = (\mathbf{I} - \psi_{\hat{\theta}} \psi_{\hat{\theta}}^+). \quad (\text{A.12})$$

Unter Verwendung von $\psi_{\hat{\theta}} = \psi_\theta \theta_{\hat{\theta}}$ ergibt sich [27]

$$\psi_{\hat{\theta}}^+ = (\psi_\theta \theta_{\hat{\theta}})^+, \quad (\text{A.13})$$

woraus

$$\psi_{\hat{\theta}}^+ = \theta_{\hat{\theta}}^{-1} \psi_\theta^+ \quad (\text{A.14})$$

folgt und

$$\hat{\mathbf{P}} = (\mathbf{I} - \psi_{\hat{\theta}} \psi_{\hat{\theta}}^+) = (\mathbf{I} - \psi_\theta \theta_{\hat{\theta}} \theta_{\hat{\theta}}^{-1} \psi_\theta^+) = (\mathbf{I} - \psi_\theta \psi_\theta^+) = \mathbf{P}. \quad (\text{A.15})$$

Somit ist die Projektionsmatrix invariant in Bezug auf die Parametrisierung der Mannigfaltigkeit [27]. Der Diffusionsterm $\Xi = (D\psi_\theta \chi)_\theta \chi$ in der veränderten Parametrisierung ergibt sich zu [27]

$$\begin{aligned} \hat{\Xi} &= (D\psi_{\hat{\theta}} \hat{\chi})_{\hat{\theta}} \hat{\chi} = (D\psi_\theta \theta_{\hat{\theta}} \hat{\theta}_\theta \chi)_{\hat{\theta}} \hat{\chi} \\ &= (D\psi_\theta \theta_{\hat{\theta}} \hat{\theta}_\theta \chi)_\theta \theta_{\hat{\theta}} \hat{\theta}_\theta \chi = (D\psi_\theta \chi)_\theta \chi = \Xi \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

Somit ist auch der Diffusionsterm invariant in Bezug auf die Parametrisierung der Mannigfaltigkeit [27].

Literatur

- [1] J. WARNATZ, U. MAAS und R.W. DIBBLE. *Verbrennung: physikalisch-chemische Grundlagen, Modellierung und Simulation, Experimente, Schadstoffentstehung*. 3. aktualisierte und erw. Aufl. Berlin: Springer, 2001.
- [2] J. HIRSCHFELDER, C.F. CURTISS und R.B. BIRD. *Molecular theory of gases and liquids*. Corrected printing with notes added. New York: Wiley, 1965.
- [3] T. ECHEKKI und E. MASTORAKOS, Hrsg. *Turbulent combustion modeling*. Springer Netherlands, 2011.
- [4] F.T. WILLIAMS. *Combustion Theory*. 2. Aufl. California: Benjamin/Cummings Publishing, 1985.
- [5] J. H. FERZIGER und M. PERIC. *Numerische Strömungsmechanik*. 3. Aufl. Berlin, Heidelberg, New York: Springer, 2002.
- [6] D. K. MANLEY, A. MCILROY und C. A. TAATJES. »Research needs for future internal combustion engines«. In: *Physics Today* 62.11 (2008), S. 47–52.
- [7] T. TURÁNYI und A. S. TOMLIN. *Analysis of Kinetic Reaction Mechanisms*. Heidelberg: Springer, 2014.
- [8] D. A. GOUSSIS und U. MAAS. »Model reduction for combustion chemistry«. In: *Turbulent combustion modeling*. Hrsg. von T. ECHEKKI und E. MASTORAKOS. Bd. 95. Fluid mechanics and its applications. Springer Netherlands, 2011, S. 193–220.
- [9] J. SIMMIE. »Detailed Chemical Kinetic Models for the Combustion of Hydrocarbon Fuels«. In: *Progress in Energy and Combustion Science* 29.6 (2003), S. 599–634.
- [10] U. MAAS und S.B. POPE. »Simplifying chemical kinetics: Intrinsic low-dimensional manifolds in composition space«. In: *Combustion and Flame* 88 (1992), S. 239–264.
- [11] S.H. LAM und D.M. GOUSSIS. »The CSP Method for Simplifying Kinetics«. In: *International Journal of chemical kinetics* 26 (1994), S. 461–486.
- [12] N. PETERS. »Laminar flamelet concepts in turbulent combustion«. In: *Proceedings of the Combustion Institute*. Bd. 21. 1988, S. 1231–1250.

- [13] A. N. GORBAN und I. V. KARLIN. »Invariant Manifolds for Physical and Chemical Kinetics«. In: *Lecture Notes in Physics*. Bd. 660. Berlin, Heidelberg: Springer, 2004.
- [14] T. LOVAS, D. NILSSON und F. MAUSS. »Automatic Reduction Procedure for Chemical Mechanisms Applied to Premixed Methane-Air Flame«. In: *Proceedings of the Combustion Institute*. Bd. 28. 2000, S. 1809–1815.
- [15] U. MAAS. »Automatische Reduktion von Reaktionsmechanismen zur Simulation reaktiver Strömungen«. Habil. Universität Stuttgart, 1993.
- [16] M. BODENSTEIN. »Geschwindigkeit der Bildung des Bromwasserstoffs aus seinen Elementen«. In: *Zeitschrift für Physikalische Chemie* 57 (1906), S. 168.
- [17] M. BODENSTEIN. »Zur Kinetik des Chlorknallgases«. In: *Zeitschrift für Physikalische Chemie* 85 (1913), S. 329.
- [18] V. BYKOV. »Manifolds Based Model Reduction for Reacting Flows«. Habil. Karlsruher Institut für Technologie, 2013.
- [19] E. CHIAVAZZO, A. N. GORBAN und I. V. KARLIN. »Comparison of Invariant Manifolds for Model Reduction in Chemical Kinetics«. In: *Communications in Computational Physics* 2 (2007), S. 964–992.
- [20] Z. REN und S.B. POPE. »The use of slow manifolds in reactive flows«. In: *Combustion and Flame* 147 (2006), S. 243–261.
- [21] V. BYKOV und U. MAAS. »Extension of the ILDM method to the domain of slow chemistry«. In: *Proceedings of the Combustion Institute*. Bd. 31. 2007, S. 465–472.
- [22] V. BYKOV und U. MAAS. »The extension of the ILDM concept to reaction-diffusion manifolds«. In: *Combustion Theory and Modelling* 11 (2007), S. 839–862.
- [23] V. BYKOV und U. MAAS. »Problem adapted reduced models based on reaction-diffusion manifolds (REDIMs)«. In: *Proceedings of the Combustion Institute*. Bd. 32. 2009, S. 561–568.
- [24] S. LIPP. »Numerische Simulation turbulenter reaktiver Strömungen mit einem hybriden CFD/transported PDF Modell«. Diss. Karlsruher Institut für Technologie, 2011.
- [25] G. STEINHILBER und U. MAAS. »Reaction-diffusion manifolds for unconfined, lean premixed, piloted, turbulent methane/air systems«. In: *Proceedings of the Combustion Institute*. Bd. 34. 2013, S. 217–224.

- [26] U. MAAS und V. BYKOV. »The extension of the reaction/diffusion manifold concept to systems with detailed transport models«. In: *Proceedings of the Combustion Institute*. Bd. 33. 2011, S. 1253–1259.
- [27] V. BYKOV u. a. »Hierarchical Structure of Slow Manifolds of Reacting Flows«. In: *Zeitschrift für Physikalische Chemie* 229.6 (2014), S. 833–856.
- [28] A. NEAGOS, V. BYKOV und U. MAAS. »Adaptive hierarchical construction of Reaction Diffusion Manifolds for simplified chemical kinetics«. In: *Proceedings of the Combustion Institute*. Bd. 36. 2016, S. 663–672.
- [29] U. MAAS. »Mathematische Modellierung instationärer Verbrennungsprozesse unter Verwendung detaillierter Reaktionsmechanismen«. Diss. Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, 1988.
- [30] M.J. HENKEL, W.P. SPAULDING und J.O. HIRSCHFELDER. »Theory of propagation of flames. Part II: Approximate solutions«. In: *Symposium on Combustion and Flame, and Explosion Phenomena*. Bd. 3. 1949, S. 127–135.
- [31] R.B. BIRD, W.E. STEWART und E.N. LIGHTFOOT. *Transport Phenomena*. New York: Wiley, 2007.
- [32] H.D. BAEHR und S. KABELAC. *Thermodynamik*. 12. Aufl. Heidelberg, London, New York: Springer, 2009.
- [33] V. GIOVANGIGLI. »Convergent Iterative Methods for Multicomponent Diffusion«. In: *Impact of Computing in Science and Engineering* 3 (1991), S. 244–276.
- [34] J. BAUER. »Effiziente Implementierung reduzierter Reaktionsmechanismen basierend auf intrinsischen niedrig-dimensionalen Mannigfaltigkeiten«. Diss. Universität Karlsruhe, 2006.
- [35] P. GERLINGER. *Numerische Verbrennungssimulation: effiziente numerische Simulation turbulenter Verbrennung*. Berlin: Springer, 2005.
- [36] G. P. MERKER und R. TEICHMANN, Hrsg. *Grundlagen Verbrennungsmotoren*. 7. Aufl. Wiesbaden: Springer Vieweg, 2014.
- [37] H. CARLSSON, R. YU und X.-S. BAI. »Direct numerical simulation of lean premixed CH₄/air and H₂/air flames at high Karlovitz numbers«. In: *International Journal of Hydrogen Energy* 39 (2014), S. 20216–20232.
- [38] R. SCHIESSL u. a. »Coupling of Detailed and ILDM-Reduced Chemistry with Turbulent Mixing«. In: *Proceedings of the Combustion Institute*. 2016.

- [39] R. SCHIESSL u. a. »The (mis)alignment of diffusive fluxes in turbulent combustion: DNS analysis and treatment in the Reaction-Diffusion Manifold (REDIM) model«. In: *Proceedings of the 7th European Combustion Meeting*. 2015, P4–63.
- [40] J. NAFE und U. MAAS. »Hierarchical generation of ILDMs of higher hydrocarbons«. In: *Combustion and Flame* 135 (2003), S. 17–26.
- [41] T. BLASENBREY. »Entwicklung und Implementierung automatisch reduzierter Reaktionsmechanismen für die Verbrennung von Kohlenwasserstoffen«. Diss. Universität Stuttgart, 2000.
- [42] G. STEINHILBER. »Numerische Simulation turbulenter Verbrennungsprozesse mittels statistischer Verfahren und REDIM reduzierter Kinetik«. Diss. Karlsruher Institut für Technologie, 2015.
- [43] U. MAAS und S.B. POPE. »Implementation of simplified chemical kinetics based on intrinsic low-dimensional manifolds«. In: *Symposium (International) on Combustion*. Bd. 24. 1992, S. 103–112.
- [44] V. BYKOV, V. GOL'DSHTEIN und U. MAAS. »On a number of degrees of freedom of a homogeneous combustion system«. In: *5th International Workshop on Model Reduction in Reacting Flows*. 2015.
- [45] D. SCHMIDT, T. BLASENBREY und U. MAAS. »Intrinsic low-dimensional Manifolds of strained and unstrained flames«. In: *Combustion Theory and Modelling* 2 (2006), S. 135–152.
- [46] K. BRAKKE. »The Motion of a Surface by its Mean Curvature«. In: *Mathematical Notes*. Bd. 20. Princeton: Princeton University Press, 1978.
- [47] K. KÖNIG. »Hierarchische Implementierungsstrategien für reduzierte Reaktionsmechanismen basierend auf Intrinsischen Niedrigdimensionalen Mannigfaltigkeiten«. Diss. Universität Karlsruhe, 2008.
- [48] A. ZAGARIS, H. KAPER und T. KAPER. »Analysis of the CSP reduction method for chemical kinetics«. In: *SIAM Conference on Applications of Dynamical Systems*. 2003.
- [49] M. HADJINICOLAOU und D.A. GOUSSIS. »Asymptotic Solutions of Stiff PDEs with the CSP Method: the Reaction Diffusion Equation«. In: *SIAM journal of Scientific Computing* 20 (1999), S. 781–910.
- [50] M. VALORANI u. a. »Higher order corrections in the approximation of lowdimensional manifolds and the construction of simplified problems with the CSP method«. In: *Journal of Computational Physics* 209 (2005), S. 754–786.

- [51] M. VALORANI u. a. »An Automatic Procedure for the Simplification of Chemical Kinetic Mechanisms Based on CSP«. In: *Combustion and Flame* 146 (2006), S. 29–51.
- [52] N. FENICHEL. »Geometric Singular Perturbation Theory for Ordinary Differential Equations«. In: *Journal of differential equations* 31 (1979), S. 53–98.
- [53] C.K.R.T. JONES. »Geometric Singular Perturbation Theory«. In: *Lecture Notes in Mathematics*. Bd. 1609. Heidelberg: Springer, 1995.
- [54] N. BERGLUND und B. GENTZ. *Noise-Induced Phenomena in Slow-Fast Dynamical Systems*. London: Springer, 2006.
- [55] U. MAAS. »Efficient calculation of intrinsic low-dimensional manifolds for the simplification of chemical kinetics«. In: *Computing and Visualization in Science* 1 (1998), S. 69–81.
- [56] H. J. KAPER und T. J. KAPER. »Asymptotic analysis of two reduction methods for systems of chemical reactions«. In: *Physica D* 165 (2002), S. 66–93.
- [57] S. SINGH, J.M. POWERS und S. PAOLUCCI. »On slow manifolds of chemical reaction flows«. In: *Journal of Physical Chemistry* 117.4 (2001), S. 1482–1496.
- [58] J. NAFE. »Effiziente Generierung reduzierter Reaktionsmechanismen basierend auf intrinsischen niedrig-dimensionalen Mannigfaltigkeiten«. Diss. Universität Stuttgart, 2003.
- [59] J. BAUER, V. BYKOV und U. MAAS. »Implementation of ILDMs based on a representation in generalized coordinates«. In: *European Conference on Computational Fluid Dynamics*. The Netherlands, 2006.
- [60] D.A. GOUSSIS u. a. »Reactive and Reactive-Diffusive Time Scales in Stiff Reaction-Diffusion Systems«. In: *Progress in Computational Fluid Dynamics* 5 (2005), S. 316–326.
- [61] W. P. JONES und S. RIGOPOULOS. »Rate-Controlled Constrained Equilibrium: Formulation and Application to Nonpremixed Laminar Flames«. In: *Combustion and Flame* 142 (2004), S. 223–234.
- [62] D. LEBIEDZ. »Computing Minimal Entropy Production Trajectories: an Approach to Model Reduction in Chemical Kinetics«. In: *Journal of Chemical Physics* 5 (2004), S. 6890–6897.

- [63] U. MAAS und S.B. POPE. »Simplifying Chemical Kinetics: Trajectory-Generated Low-Dimensional Manifolds.« In: *FDA 93-11, Cornell University*. 1993.
- [64] Z. REN u. a. »The Invariant Constrained Equilibrium Edge Preimage Curve Method for the Dimension Reduction of Chemical Kinetics«. In: *Journal of Chemical Physics* 124 (2006), S. 114111.
- [65] Z. REN u. a. »Application of the ICE-PIC Method for the Dimension Reduction of Chemical Kinetics Coupled with Transport«. In: *Proceedings of the Combustion Institute*. Bd. 31. 2006, S. 473–481.
- [66] S. J. FRASER. »The steady state and equilibrium approximations: A geometrical picture«. In: *Journal of Chemical Physics* 88 (1988), S. 4732–4738.
- [67] M. R. ROUSSEL und S. J. FRASER. »On the geometry of transient relaxation«. In: *Journal of Chemical Physics* 94 (1991), S. 7106–7113.
- [68] M. R. ROUSSEL und S. J. FRASER. »Accurate Steady-State Approximations: Implications for Kinetics Experiments and Mechanism«. In: *The Journal of Physical Chemistry* 95 (1991), S. 8762–8770.
- [69] M. J. DAVIS und R.T. SKODJE. »Geometric investigation of low-dimensional manifolds in systems approaching equilibrium«. In: *Journal of Chemical Physics* 111.3 (1999), S. 859–874.
- [70] A.N. GORBAN, I.V. KARLIN und A.Yu. ZINOVYEV. »Invariant Grids for Reaction Kinetics«. In: *Physica A* 333 (2006), S. 106–154.
- [71] A.N. GORBAN, I.V. KARLIN und A.Yu. ZINOVYEV. »Constructive Methods of Invariant Manifolds for Kinetic Problems«. In: *Physics Reports* 396.4-6 (2006), S. 197–403.
- [72] R. BENDER, T. BLASENBREY und U. MAAS. »Coupling of Detailed and ILDM-Reduced Chemistry with Turbulent Mixing«. In: *Proceedings of the Combustion Institute*. Bd. 28. 2000, S. 101–106.
- [73] M. J. DAVIS. »Low-Dimensional Manifolds in Reaction-Diffusion Equations. 1. Fundamental Aspects«. In: *Journal of Physical Chemistry* 110 (2006), S. 5235–5256.
- [74] M. J. DAVIS. »Low-Dimensional Manifolds in Reaction-Diffusion Equations. 2. Numerical Analysis and Method Development«. In: *Journal of Physical Chemistry* 110 (2006), S. 5257–5272.
- [75] S.H. LAM. »Reduced Chemistry-Diffusion Coupling«. In: *Combustion Science and Technology* 179 (2007), S. 767–786.

-
- [76] N. PETERS und B. ROGG. *Reduced Kinetic Mechanisms for Applications in Combustion Systems*. Berlin: Springer, 1993.
- [77] J.A. van OIJEN und L.P.H. de GOEY. »Modelling of Premixed Laminar Flames using Flamelet-Generated Manifolds«. In: *Combustion Science and Technology* 161 (2000), S. 113–137.
- [78] J.A. van OIJEN und L.P.H. de GOEY. »Modelling of Premixed Counterflow Flames using the Flamelet Generated Manifold Method«. In: *Combustion Theory and Modelling* 6 (2002), S. 463–478.
- [79] L.P.H. De GOEY und J.H.M. Ten Thije BOONKKAMP. »A Flamelet Description of Premixed Laminar Flames and the Relation with Flame Stretch«. In: *Combustion and Flame* 119.3 (1999), S. 253–271.
- [80] J. NAFE und U. MAAS. »A general algorithm for improving ILDMs«. In: *Combustion Theory and Modelling* 6.4 (2002), S. 697–709.
- [81] J. M. LEE. *Introduction to Smooth Manifolds*. 2. Aufl. New York, Heidelberg, Dordrecht, London: Springer, 2013.
- [82] T. LAMM. *Analysis auf Mannigfaltigkeiten*. Vorlesungsskript, Karlsruher Institut für Technologie. 2013.
- [83] A. EINSTEIN. »Die Grundlage der allgemeinen Relativitätstheorie«. In: *Annalen der Physik* 49.4 (1916), S. 770–822.
- [84] A. NEAGOS, V. BYKOV und U. MAAS. »Study of Extinction Limits of Diluted Hydrogen-Air Counter-Flow Diffusion Flames with the REDIM Method«. In: *Combustion Science and Technology* 186.10–11 (2014), S. 1502–1516.
- [85] V. BYKOV, A. NEAGOS und U. MAAS. »On transient behavior of non-premixed counter-flow diffusion flames within the REDIM based model reduction concept«. In: *Proceedings of the Combustion Institute*. Bd. 34. 2013, S. 197–203.
- [86] C. D. MEYER. *Matrix Analysis and Applied Linear Algebra*. Philadelphia: Society of Industrial und Applied Mathematics, 2000.
- [87] T. ARENS u. a. *Mathematik*. Heidelberg: Spektrum Akademischer Verlag, 2008.
- [88] A. BLATTMANN. »Generische Erstellung und Implementierung von höherdimensionalen Anfangslösungen der REDIM-Gleichung und Reparametrisierungsstrategien für Mannigfaltigkeiten im Zustandsraum«. Bachelorarbeit. Karlsruher Institut für Technologie, 2016.

- [89] H.A. DWYER, B.R. SANDERS und F. RAISZADEK. »Ignition and flame propagation studies with adaptive numerical grids«. In: *Combustion and Flame* 52 (1983), S. 11–23.
- [90] H. SCHWARZ und N. KLÖCKNER. *Numerische Mathematik*. Vieweg + Teubner, 2011.
- [91] R. S. BARLOW u. a. »Piloted methane/air jet flames: Transport effects and aspects of scalar structure«. In: *Combustion and Flame* 14 (2005), S. 433–449.
- [92] G. ENGELN-MÜLLGES, R. WODICKA und K. NIEDERDRENK. *Numerik-Algorithmen*. 10. Aufl. Heidelberg: Springer, 2011.
- [93] J.P. BOYD. *Chebyshev and Fourier Spectral Methods*. 2. Aufl. New York: Dover Publications, Inc., 2000.
- [94] R. COURANT, K. FRIEDRICHS und H. LEWY. »On the partial difference equations of mathematical physics«. In: *IBM Journal of Research and Development* 11.2 (1967), S. 215–234.
- [95] P. GOLDA. »Integration der REDIM-Gleichung zur numerischen Simulation von Verbrennungsprozessen durch Anwendung von Kollokationsmethoden sowie verschiedener Parametrisierungs- und Optimierungsstrategien«. Masterarbeit. Karlsruher Institut für Technologie, 2016.
- [96] E.LARSSON und B.FORNBERG. »A Numerical Study of Some Radial Basis Function Based Solution Methods for Elliptic PDEs«. In: *Computers and Mathematics with Applications* 45 (2003), S. 891–902.
- [97] F. JOHN. *Partial Differential Equations*. 4. Aufl. New York: Springer, 1991.
- [98] H.M. HERAVI u. a. »Determination of laminar flame thickness and burning velocity of methane-air mixture«. In: *Proceedings of the 3rd European Combustion Meeting*. 2007.
- [99] J. GÖTTGENS, F. MAUSS und N. PETERS. »Analytic approximations of burning velocities and flame thicknesses of lean hydrogen, methane, ethylene, ethane, acetylene, and propane flames«. In: *Symposium (International) on Combustion*. Bd. 24. 1992, S. 129–135.
- [100] P. DEUFLHARD. »Recent Progress in Extrapolation Methods for Ordinary Differential Equations«. In: *SIAM Review* 27.4 (1985), S. 505–535.
- [101] P. DEUFLHARD, E. HAIRER und J. ZUGCK. »One-step and extrapolation methods for differential-algebraic systems«. English. In: *Numerische Mathematik* 51.5 (1987), S. 501–516.

- [102] E. HANSEN. »Approximationsstrategien für Reaktions-Diffusions-Mannigfaltigkeiten zur reduzierten Berechnung von 1D Flammen«. Bachelorarbeit. Karlsruher Institut für Technologie, 2016.
- [103] U. MAAS und J. WARNATZ. »Ignition processes in carbon-monoxide-hydrogen-oxygen mixtures«. In: *Proceedings of the Combustion Institute*. Bd. 22. 1989, S. 1695–1704.
- [104] A. R. KERSTEIN. »One-dimensional turbulence: Model formulation and application to homogeneous turbulence, shear flows, and buoyant stratified flows«. In: *Journal of Fluid Mechanics* 392 (1999), S. 277–334.
- [105] J.C. HEWSON und A. R. KERSTEIN. »Stochastic simulation of transport and chemical kinetics in turbulent CO/H₂/N₂ flames«. In: *Combustion Theory and Modelling* 5 (2001), S. 669–697.
- [106] A. R. KERSTEIN. »One-Dimensional Turbulence: A new approach to high-fidelity subgrid closure of turbulent flow simulations«. In: *Computer Physics Communications* 148 (2002), S. 1–16.
- [107] E. GONZALEZ-JUEZ, A. R. KERSTEIN und D. O. LIGNELL. »Fluxes across double-diffusive interfaces: a one-dimensional-turbulence study«. In: *Journal of Fluid Mechanics* 677 (2011), S. 218–254.
- [108] S. MENON und A. R. KERSTEIN. »The Linear-Eddy Model«. In: *Turbulent combustion modeling*. Hrsg. von T. ECHEKKI und E. MASTORAKOS. Bd. 95. Fluid mechanics and its applications. Springer Netherlands, 2011, S. 221–248.
- [109] T. ECHEKKI, A. R. KERSTEIN und J. C. SUTHERLAND. »The One-Dimensional-Turbulence Model«. In: *Turbulent combustion modeling*. Hrsg. von T. ECHEKKI und E. MASTORAKOS. Bd. 95. Fluid mechanics and its applications. Springer Netherlands, 2011, S. 249–276.
- [110] A. NEAGOS, V. BYKOV und U. MAAS. »Investigation of perturbed premixed flame structure using REDIM model reduction concept«. In: *Proceedings of the 7th European Combustion Meeting*. 2015.
- [111] G. STAHL und J. WARNATZ. »Numerical investigation of time-dependent properties and extinction of strained methane and propane-air flamelets«. In: *Combustion and Flame* 85 (1991), S. 285–299.
- [112] U. NIEMANN, K. SESHADRI und F. WILLIAMS. »Effect of pressure on structure and extinction of near-limit hydrogen counterflow diffusion flames«. In: *Proceedings of the Combustion Institute*. Bd. 34. 2013, S. 881–886.

- [113] K. SESHADRI und F.A. WILLIAMS. »Laminar flow between parallel plates with injection of a reactant at high Reynolds number«. In: *International Journal of Heat and Mass Transfer* 21 (1978), S. 251–253.
- [114] F.A. WILLIAMS, K. SESHADRI und R. CATTOLICA. *The San Diego Mechanism*. 2012. URL: <http://web.eng.ucsd.edu/mae/groups/combustion/mechanism.html>.
- [115] C.H SOHN und S.H CHUNG. »Effect of pressure on the extinction, acoustic pressure response, and NO formation in diluted hydrogen–air diffusion flames«. In: *Combustion and Flame* 121.1-2 (2000), S. 288–300.
- [116] J. A. MILLER und C. T. BOWMAN. »Mechanism and Modeling of Nitrogen Chemistry in Combustion«. In: *Progress In Energy and Combustion Science* 15 (1989), S. 287.
- [117] G.P. SMITH u. a. *The GRI 3.0 mechanism*. 1999. URL: <http://www.me.berkeley.edu/gri%5Ctextunderscore%20mech/releases.html>.