

Reaktions-Diffusions- Mannigfaltigkeiten für Verbrennungsprozesse in Wandnähe

INSTITUT FÜR TECHNISCHE THERMODYNAMIK

Zur Erlangung des akademischen Grades einer Doktorin der Ingenieurwissenschaften (Dr.-Ing.) von der KIT-Fakultät für Maschinenbau des Karlsruher Instituts für Technologie (KIT) angenommene Dissertation von

M.Sc. Christina Straßacker

Tag der mündlichen Prüfung: 24.07.2020

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

Korreferent: Prof. Dr.-Ing. Johannes Janicka

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

Vorwort

Während meiner Tätigkeit als wissenschaftliche Mitarbeiterin am Institut für Technische Thermodynamik (ITT) des Karlsruher Instituts für Technologie (KIT) bekam ich die Möglichkeit die vorliegende Arbeit zu verfassen. Ich danke den zahlreichen Personen, die zu ihrem Gelingen beigetragen haben und möchte einige davon besonders hervorheben.

Mein besonderer Dank gilt meinem wissenschaftlichen Betreuer und Hauptreferenten Prof. Dr. rer. nat. habil. Ulrich Maas für die Möglichkeit diese Arbeit anfertigen zu können. Er stand mir mit seiner hilfsbereiten Art stets geduldig für Gespräche und Diskussionen zur Seite und gab mir die richtigen Impulse und Denkanstöße. Gleichzeitig brachte er mir genug Vertrauen entgegen und gab mir den Freiraum, meinen eigenen Weg bei der Umsetzung zu gehen. Durch die enge Zusammenarbeit im SFB TRR 150 begleitete Prof. Dr.-Ing. Johannes Janicka mich während des größten Teils meiner Arbeit und übernahm schließlich das Korreferat. Dafür danke ich auch ihm sehr herzlich. Auch Prof. Dr.-Ing. Bettina Frohnäpfel begleitete mich durch den SFB TRR 150 während des gesamten Zeitraums, in dem ich die vorliegende Arbeit angefertigt habe. Ihr möchte ich für die Übernahme des Prüfungsvorsitzes danken.

Außerdem möchte ich mich bei Herrn PD. Dr. Viatcheslav Bykov herzlich für die unterstützenden Anregungen und Gespräche bedanken. Durch die gemeinsamen Diskussionen bekam ich die Möglichkeit, viele Dinge aus einem anderen Blickwinkel zu sehen und das wesentliche nicht aus den Augen zu verlieren. Meinen aktuellen und ehemaligen Arbeitskollegen und vor allem Martin danke ich ebenfalls für die Zusammenarbeit und die angenehme Atmosphäre. Durch den hilfsbereiten und freundschaftlichen Umgang werde ich die Zeit am ITT in sehr guter Erinnerung behalten.

Bei der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) bedanke ich mich für die finanzielle Unterstützung im Rahmen des SFB TRR 150, ohne welche die Anfertigung dieser Arbeit nicht möglich gewesen wäre.

Ein großer Dank gebührt auch Verena, die mich während der gesamten Promotion stets mit den Ponys unterstützte.

Von ganzem Herzen möchte ich mich außerdem bei meiner Familie bedanken. Meinen Eltern Iris und Peter danke ich für die bedingungslose Unterstützung, die ich stets von ihnen erfahren habe. Sie ermöglichten mir durch ihre liebevolle Erziehung meinen bisherigen Lebensweg. Meiner Schwester Milena danke ich dafür, dass ich mich grundsätzlich in allen Lebenssituationen auf sie verlassen kann. Auch meinen Großeltern danke ich für die immerwährende Hilfe. Leider erleben meine Großväter die Fertigstellung der Arbeit nicht mehr, allerdings weiß ich, dass sie sicherlich sehr stolz auf mich gewesen wären.

Abschließend möchte ich mich noch bei Erich und Karin und ganz besonders bei meinem Simon bedanken. Er baute mich auf und motivierte mich, wenn ich es am meisten brauchte, lässt mich über mich hinauswachsen und unterstützt mich bei all meinen Vorhaben. Ich bin sehr glücklich, ihn als Partner an meiner Seite zu haben.

Kurzfassung

Der anhaltende Trend zum *Downsizing* bei modernen Verbrennungsmotoren und Gasturbinen führt zu einem erhöhten Verhältnis von Oberfläche zu Volumen in Brennkammern und Brennräumen. Aus diesem Grund steigt der Einfluss der Wand auf Verbrennungsprozesse welche in Wandnähe stark durch die Wechselwirkung zwischen Flamme und Wand beeinflusst werden können. Um diese Prozesse vollständig zu verstehen, konzentriert sich die heutige Forschung vermehrt auf die Untersuchung von Flamme-Wand-Interaktionen (FWI). Neben experimentellen Untersuchungen haben sich Simulationen reagierender Strömungssysteme zu einem wichtigen Werkzeug zur Untersuchung und Verbesserung von Verbrennungsprozessen entwickelt. Allerdings ist die detaillierte Simulation komplexer Verbrennungsvorgänge auch mit modernen Computern sehr zeitaufwendig. Um Simulationen dennoch in vertretbarer Zeit durchführen zu können, werden reduzierte kinetische Modelle entwickelt. Eines dieser Modelle ist die Reaktions-Diffusions-Mannigfaltigkeit (REDIM), die sowohl die chemische Kinetik als auch Transportprozesse berücksichtigt. Diese Methode wurde ursprünglich für Verbrennungsprozesse in der Gasphase entwickelt und wird im Rahmen dieser Arbeit für Verbrennungsprozesse in Wandnähe erweitert.

Im Zuge dessen wird die REDIM dahingehend angepasst, dass sie FWI wiedergeben kann. Durch die FWI kommt es unter anderem zu einem Wärmeverlust an die Wand welcher essentiell für die korrekte reduzierte Beschreibung der wandnahen Verbrennung ist. In der vorliegenden Arbeit werden neben reduzierten kinetischen Modellen für eindimensionale Modellsysteme auch reduzierte Modelle für zweidimensionale Modellsysteme entwickelt und demonstriert. Außerdem wird die Herleitung sowie Implementierung der Randbedingung für heterogene Wandreaktionen im Kontext der REDIM und die Implementierung der REDIM für FWI mit Gemischinhomogenitäten beschrieben und reduzierte Modelle werden erstellt.

Neben der Erstellung der reduzierten Modelle für FWI wird in dieser Arbeit die Implementierung mannigfaltigkeitsbasierter kinetischer Modelle detailliert untersucht und beschrieben. Anschließend werden die erstellten REDIMs validiert und es wird gezeigt, dass sie die jeweilige Systemdynamik der unterschiedlichen Verbrennungssysteme sehr gut wiedergeben.

Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis	ix
1 Lateinische Zeichen	xxi
2 Griechische Zeichen	xxiii
3 Indices	xxiv
4 Akronyme	xxiv
1 Einleitung	1
2 Mathematische Beschreibung chemisch reagierender Strömungen	5
2.1 Modellierung der chemischen Reaktion	7
2.2 Modellierung von Transportprozessen	8
3 Grundlagen der Flamme-Wand Interaktion	11
3.1 Generische Konfigurationen zur Untersuchung der FWI	12
3.1.1 Head-On Quenching	12
3.1.2 Side-Wall Quenching	12
3.2 Forschungsstand zur Berechnung von Flamme-Wand-Interaktionen	13
3.3 Modellierung von Flamme-Wand-Interaktionen	15
4 Grundlagen der REDIM Methode	17
4.1 REDIM-Entwicklungsgleichung	19
4.2 Abschätzung der Gradienten zur Berücksichtigung von Trans- portprozessen	23
4.3 Randbedingungen der REDIM	27
4.4 Anfangslösung der REDIM	31
4.5 Numerische Lösung der REDIM-Gleichung	32
4.6 Tabellierung der REDIM	34
5 REDIM für Flamme-Wand-Interaktionen	35
5.1 Modellierung des Wärmeverlusts an die Wand	35
5.2 Gradientenabschätzung für die Flamme-Wand-Interaktion ho- mogener Gemische	39
5.2.1 Implementierung der eindimensionalen Gradientenab- schätzung	43

5.2.2	Implementierung der zweidimensionalen Gradientenabschätzung	45
5.3	Optimale Dimension der REDIM für Flamme-Wand-Interaktionen homogener Systeme	48
5.3.1	Optimale Dimension der REDIM für Head-on Quenching Systeme	49
5.3.2	Optimale Dimension der REDIM für Side-Wall Quenching Systeme	51
5.4	Implementierung heterogener Wandreaktionen in die REDIM .	53
5.5	REDIM für FWI mit Gemischinhomogenitäten	56
6	Implementierung mannigfaltigkeitsbasierter reduzierter kinetischer Modelle	61
6.1	Grundlagen der Implementierung	61
6.2	Rechnung in generalisierten Koordinaten	63
6.3	Rechnung in physikalischen Koordinaten ohne Projektion . . .	63
6.4	Rechnung in physikalischen Koordinaten mit Projektion	65
7	Anwendung und Validierung der reduzierten Modelle	67
7.1	REDIM für vorgemischte Methan/Luft Systeme mit FWI	70
7.1.1	Einfluss des Diffusionsmodells	70
7.1.2	Einfluss des Mechanismus	72
7.1.3	Einfluss der heterogenen Wandreaktion	76
7.1.4	Einfluss mehrdimensionaler Gradienten	79
7.1.5	Implementierung nicht perfekt invarianter REDIMs . . .	81
7.2	REDIM für geschichtete Methan/Luft Systeme mit FWI	84
7.3	REDIM für vorgemischte Isooktan/Luft Systeme mit FWI . . .	93
8	Zusammenfassung und Ausblick	97
	Literatur	99

Abbildungsverzeichnis

3.1	Schematische Darstellung der Wechselwirkungen der FWI. . .	11
3.2	Schematische Darstellung des <i>Head-On Quenchings</i>	12
3.3	Schematische Darstellung des <i>Side-Wall Quenchings</i>	13
3.4	Schematische Darstellung der heterogenen Wandreaktion. . . .	16
4.1	Schematische Darstellung der Zeitskalen in chemisch reagierenden Strömungen [101].	18
4.2	Schematische Darstellung unterschiedlicher Möglichkeiten zur Berechnung der Gradientenabschätzung χ (blau), wenn die Schätzung der Gradienten der Zustandsvariablen ξ (rot) nicht im tangentialen Unterraum der REDIM liegt.	25
4.3	Interpolation der Gradientenabschätzung ξ der Zustandsvariablen unter Verwendung der Zentralfdifferenzen; der Verbindungsvektor zwischen $\psi(\theta^*)$ und $\psi_a(\tilde{\theta}^*)$ ist grün, der Parametervektor $\Delta\tilde{\theta}$ an der Stelle $\tilde{\theta}^*$ ist blau dargestellt [69].	26
4.4	Schematische Darstellungen zum besseren Verständnis der zum Rand der Mannigfaltigkeit tangential verlaufenden Gradienten und der lokal neu aufgespannten Basis $\psi_\beta \perp \psi_\eta$	29
4.5	Schematische Darstellung zur Veranschaulichung von Bedingung 4.33. Die Bedingung ist in der linken Darstellung nicht erfüllt wohingegen sie in der rechten Abbildung erfüllt ist. . .	30
5.1	Zeitlicher Verlauf des HOQ-Verlöschungsprozesses (wobei $t_{i+1} > t_i$) sowie Anfangslösung der REDIM (d) [89] für die stöchiometrische, vorgemischte Methan/Luft-Verbrennung, die mit dem GRI 3.0 Mechanismus [85] und vereinfachtem Transportmodell mit $Le = 1$ berechnet wurde.	37
5.2	Zeitlicher Verlauf des Verlöschungsprozesses im Zustandsraum sowie Anfangslösung der REDIM [95] für die stöchiometrische, vorgemischte Methan/Luft-Verbrennung mit dem GRI 3.0 Mechanismus [85] und detailliertem Transportmodell mit Thermo-Diffusion.	39

5.3	Gradientenabschätzung der spezifischen Enthalpie (in $\frac{\text{J}}{\text{kg m}}$) als Funktion der spezifischen Molzahl von CO_2 (in $\frac{\text{mol}}{\text{kg}}$) und der spezifischen Enthalpie h (in $\frac{\text{J}}{\text{kg}}$).	40
5.4	Schematische Darstellung des SWQ Brenners sowie Farb-Kontur des Massenbruchs von OH (in (-)). Die Flammenfront ist durch die rote Linie schematisch dargestellt.	41
5.5	Zustände, welche während der HOQ- und SWQ-Konfiguration durchlaufen werden.	42
5.6	Komponenten der räumlichen Gradienten der spezifischen Molzahl von CO_2 (in $\frac{\text{mol}}{\text{kg m}}$) und der spezifischen Enthalpie h (in $\frac{\text{J}}{\text{kg m}}$) in x - (schwarz) und y -Richtung (rot) [93]. Dargestellt sind die Gradienten im Ortsraum in Abhängigkeit der x - und y -Koordinate (in m) sowie im Zustandsraum in Abhängigkeit der spezifischen Enthalpie h (in $\frac{\text{J}}{\text{kg}}$) und der spezifischen Molzahl von CO_2 (in $\frac{\text{mol}}{\text{kg}}$).	43
5.7	Höhenlinien einiger Zustandsvariablen zur Visualisierung der Streuung der zweidimensionalen Gradientenvektoren in Abhängigkeit der Ortskoordinaten x und y (in m). Die Zahlenwerte sind der besseren Übersichtlichkeit wegen nicht angegeben. . .	44
5.8	Spezifische Molzahl von CO_2 (in $\frac{\text{mol}}{\text{kg}}$) sowie der örtliche Gradienten der Spezies CO_2 (in $\frac{\text{mol}}{\text{kg m}}$) einer flachen Flamme in Abhängigkeit der Ortskoordinate r (in m).	45
5.9	Kontur des Massenbruchs von OH (in (-)) und Richtungen der Basisvektoren \mathbf{a} (Pfeile) in Abhängigkeit der Ortskoordinaten x und y (in m) [93].	47
5.10	Komponenten der räumlichen Gradienten der spezifischen Molzahl von CO_2 (in $\frac{\text{mol}}{\text{kg m}}$) und der spezifischen Enthalpie h (in $\frac{\text{J}}{\text{kg m}}$) in \mathbf{a} - (schwarz) und \mathbf{b} -Richtung (blau) in Abhängigkeit der spezifischen Enthalpie h (in $\frac{\text{J}}{\text{kg}}$) und der spezifischen Molzahl von CO_2 (in $\frac{\text{mol}}{\text{kg}}$) [93].	48
5.11	Schematische Darstellung des tangentialen Unterraums \mathbf{Z}_{\parallel} und des normalen Unterraums \mathbf{Z}_{\perp} im Zustandsraum, welcher durch die spezifische Enthalpie h (in $\frac{\text{J}}{\text{kg}}$) und die spezifische Molzahl einiger Spezies (in $\frac{\text{mol}}{\text{kg}}$) aufgespannt ist.	50

5.12	Realteile der Eigenwerte $\lambda_8, \lambda_9, \lambda_{10}$ und λ_{40} der Jacobi-Matrix des chemischen Quellterms auf der zweidimensionalen REDIM der HOQ-Konfiguration in Abhängigkeit der spezifische Enthalpie h (in $\frac{\text{J}}{\text{kg}}$) und der spezifischen Molzahl von $\text{CO}_2 + \text{H}_2\text{O} + 10 \cdot \text{NO}$ (in $\frac{\text{mol}}{\text{kg}}$).	51
5.13	Realteile der Eigenwerte $\lambda_8, \lambda_9, \lambda_{10}$ und λ_{40} der Jacobi-Matrix des chemischen Quellterms auf der zweidimensionalen REDIM der SWQ-Konfiguration in Abhängigkeit der spezifische Enthalpie h (in $\frac{\text{J}}{\text{kg}}$) und der spezifischen Molzahl von CO_2 (in $\frac{\text{mol}}{\text{kg}}$).	52
5.14	Schematische Darstellung von Verbrennungsmotoren mit homogener und inhomogener Gemischzusammensetzung.	57
5.15	Analyse der Flammenlöschung mit den Äquivalenzverhältnissen $\phi = 0,5$ (rot), $\phi = 1,0$ (schwarz) und $\phi = 2,0$ (blau) (in (-)) im Zustandsraum welcher durch die spezifische Enthalpie (in $\frac{\text{J}}{\text{kg}}$) und die spezifischen Molzahlen von CO_2 und H_2O (in $\frac{\text{mol}}{\text{kg}}$) aufgespannt wird.	58
5.16	Zwei- bzw. dreidimensionale Anfangsmannigfaltigkeiten im Zustandsraum; dargestellt sind die spezifische Molzahl von N_2 (in $\frac{\text{mol}}{\text{kg}}$) als Funktion der spezifischen Molzahl von CO_2 (in $\frac{\text{mol}}{\text{kg}}$) und der spezifischen Enthalpie (in $\frac{\text{J}}{\text{kg}}$) [92].	59
6.1	Schematische Darstellung verschiedener Arten von reduzierten kinetischen Modellen; \mathcal{M} : Mannigfaltigkeit, $\mathcal{T}_{\mathcal{M}}$: Tangente der Mannigfaltigkeit [94].	62
7.1	Beispielhafter Verlauf der spezifischen Molzahl von CO (in $\frac{\text{mol}}{\text{kg}}$) als Funktion der Temperatur T (in K) für den Wandabstand $r_W = 0,5$ mm (Abb. 7.1a), in welchem die Temperatur T (rote Linie, in K) und die spezifischen Molzahl von CO (blau, in $\frac{\text{mol}}{\text{kg}}$) der unterschiedlichen Zeitpunkte $t_1 - t_5$ aus den Abb. 7.1b - 7.1f gekennzeichnet sind.	68
7.2	Beispielhafter Wärmestrom q_W zur Wand (in $\frac{\text{W}}{\text{m}^2}$) in Abhängigkeit der Zeit t (in s) während des Löschungsvorgangs. . . .	69

7.3 Werte des Massenbruchs von CO (in (-)) als Funktion der Temperatur T (in K), welche an unterschiedlichen Wandabständen auftreten. Dargestellt sind Rechnungen mit $Le = 1$ (blau) sowie detailliertem Diffusionsmodell (rot). Reduzierte (gestrichelte Linie) und detaillierte (durchgezogene Linie) Kinetik [95]. Außerdem dargestellt sind die experimentellen Ergebnisse von Mann et al. [65] (graue Punkte). 72

7.4 Wärmestrom q_W zur Wand (in $\frac{W}{m^2}$) in Abhängigkeit der Zeit t (in s) während des Löschvorgangs. Dargestellt sind Rechnungen mit $Le = 1$ (blau) sowie detailliertem Diffusionsmodell (rot) mit reduzierter (gestrichelte Linie) und detaillierter (durchgezogene Linie) Kinetik [95]. 73

7.5 REDIMs der unterschiedlichen Mechanismen im Zustandsraum. Gezeigt sind die spezifischen Molzahlen von H_2O_2 und OH (in $\frac{mol}{kg}$) in Abhängigkeit der spezifischen Molzahl von CO_2 (in $\frac{mol}{kg}$) und der spezifischen Enthalpie h (in $\frac{J}{kg}$) [95] für den GRI 3.0 Mechanismus [85] (rot), den Warnatz Mechanismus [87] (blau), den SanDiego Mechanismus [82] (grün) und den Smooke Mechanismus [86] (grau). 74

7.6 Werte des Massenbruchs von CO bzw. HO_2 (in (-)) als Funktion der Temperatur T (in K), welche an dem Wandabstand $r_W = 0,2$ mm auftreten [95]. Dargestellt sind die Rechnungen mit dem GRI 3.0 Mechanismus [85] (rot), dem Warnatz Mechanismus [87] (blau), dem SanDiego Mechanismus [82] (grün) und dem Smooke Mechanismus [86] (grau) mit reduzierter (gestrichelte Linie) und detaillierter (durchgezogene Linie) Kinetik. Die experimentellen Ergebnisse von Mann et al. [65] sind ebenfalls dargestellt (graue Punkte). 75

7.7 Wärmestrom q_W (in $\frac{W}{m^2}$) zur Wand als Funktion der Zeit t (in s) während des Verlöschungsvorgangs [95]. Dargestellt sind die Rechnungen, welche mit dem GRI 3.0 Mechanismus [85] (rot), dem Warnatz Mechanismus [87] (blau), dem SanDiego Mechanismus [82] (grün) und dem Smooke Mechanismus [86] (grau) mit reduzierter (gestrichelte Linie) und detaillierter (durchgezogene Linie) Kinetik erstellt wurden. 76

7.8	Werte des Massenbruchs von H_2O_2 bzw. HO_2 (in $(-)$) als Funktion der Temperatur T (in K), welche an unterschiedlichen Wandabständen für die unterschiedlichen Modellsysteme auftreten [96]. Dargestellt sind Rechnungen mit (rot) und ohne (blau) Wandreaktion mit detaillierter (durchgezogene Linie) und reduzierter Kinetik (gestrichelte Linie).	78
7.9	Normierter Abstand δ zwischen den REDIMs in Abhängigkeit der spezifischen Enthalpie h (in $\frac{\text{J}}{\text{kg}}$) und der spezifischen Molzahl von CO_2 (in $\frac{\text{mol}}{\text{kg}}$).	81
7.10	Werte der spezifischen Molzahl von CO bzw. OH (in $\frac{\text{mol}}{\text{kg}}$) als Funktion der Temperatur T (in K), welche an unterschiedlichen Wandabständen für die perfekt invariante REDIM auftreten [94]. Dargestellt sind Rechnungen der Modellgleichung 6.5 in generalisierte Koordinaten (rot), der Modellgleichung 6.8 in physikalischen Variablen mit konstanter Parametrisierungsmatrix (grün) und die Rechnung mit detaillierter Kinetik (schwarz).	83
7.11	Werte der spezifischen Molzahl von CO bzw. OH (in $\frac{\text{mol}}{\text{kg}}$) als Funktion der Temperatur T (in K), welche an unterschiedlichen Wandabständen für die REDIM mit $\alpha = 0,9$ auftreten [94]. Dargestellt sind Rechnungen der Modellgleichung 6.5 in generalisierte Koordinaten (rot), der Modellgleichung 6.8 in physikalischen Variablen mit konstanter Parametrisierungsmatrix (grün) und der Modellgleichung in physikalischen Variablen mit Projektion auf den tangentialen Unterraum (blau gestrichelt).	84
7.12	Flammgeschwindigkeiten (in $\frac{\text{m}}{\text{s}}$) als Funktion des Faktors α welche mit den verschiedenen Modellgleichungen für die unterschiedlichen REDIMs berechnet wurden [94]. Dargestellt sind Rechnungen der Modellgleichung 6.5 in generalisierte Koordinaten (rot), der Modellgleichung 6.8 in physikalischen Variablen mit konstanter Parametrisierungsmatrix (grün) und der Modellgleichung in physikalischen Variablen mit Berechnung im tangentialen Unterraum (blau gestrichelt).	85
7.13	Anfangsprofile bezogen auf das Äquivalenzverhältnis ϕ (in $(-)$) und die Temperatur T (in K) in Abhängigkeit des Wandabstandes r (in m) für Fall I (\bullet), Fall II (\square), Fall III (\circ), Fall IV (\triangleright), Fall V (\diamond) und Fall VI (\triangleleft) [92].	86

7.14	Wärmestromdichte q_W zur Wand (in $\frac{W}{m^2}$) in Abhängigkeit der Zeit t (in s) für Fall I (●), Fall II (□) und Fall III (○) für die detaillierte (durchgezogene Linie) und reduzierte Kinetik (gestrichelte Linie) [92].	88
7.15	Spezifische Molzahl unterschiedlicher Spezies (in $\frac{mol}{kg}$) an den Wandabständen $r_W = 0$ m und $r_W = 0,001$ m als Funktion der Zeit t (in s) [92]. Dargestellt sind die Rechnungen mit detaillierter (durchgezogene Linie) und reduzierter Kinetik (gestrichelte Linie) von Fall I (●), Fall II (□) und Fall III (○).	89
7.16	Temperatur (in K) am Wandabstand $r_W = 0,001$ m als Funktion der Zeit t (in s). Dargestellt sind die Rechnungen mit detaillierter (durchgezogene Linie) und reduzierter Kinetik (gestrichelte Linie) von Fall I (●), Fall II (□) und Fall III (○).	90
7.17	Wärmestromdichte q_W zur Wand (in $\frac{W}{m^2}$) in Abhängigkeit der Zeit t (in s) für Fall III (○) und Fall IV (▷) für die detaillierte (durchgezogene Linie) und reduzierte Kinetik (gestrichelte Linie) [92].	91
7.18	Spezifische Molzahl unterschiedlicher Spezies (in $\frac{mol}{kg}$) an dem Wandabstand $r_W = 0,001$ m als Funktion der Zeit t (in s) [92]. Dargestellt sind die Rechnungen mit detaillierter (durchgezogene Linie) und reduzierter Kinetik (gestrichelte Linie) von für Fall III (○) und Fall IV (▷).	92
7.19	Wärmestromdichte q_W zur Wand (in $\frac{W}{m^2}$) in Abhängigkeit der Zeit t (in s) für Fall I (●), Fall III (○), Fall V (◊) und Fall VI (◁) für die detaillierte (durchgezogene Linie) und reduzierte Kinetik (gestrichelte Linie).	94
7.20	Spezifische Molzahl unterschiedlicher Spezies (in $\frac{mol}{kg}$) an dem Wandabstand $r_W = 0$ m als Funktion der Zeit t (in s) [92]. Dargestellt sind die Rechnungen mit detaillierter (durchgezogene Linie) und reduzierter Kinetik (gestrichelte Linie) für Fall III (○) und Fall IV (▷).	94
7.21	Spezifische Molzahl verschiedener Spezies (in $\frac{mol}{kg}$) in Abhängigkeit der Temperatur T (in K) für unterschiedliche Wandabstände [97]. Dargestellt sind die Ergebnisse der detaillierten Kinetik ohne Wandreaktion (blau), der detaillierten Kinetik mit Wandreaktion (rote, durchgezogene Linie) und der reduzierten Kinetik mit Wandreaktion (rote, gestrichelte Linie).	95

7.22 Wärmestromdichte q_W zur Wand (in $\frac{W}{m^2}$) in Abhängigkeit der
Zeit t (in s) für die detaillierte (durchgezogene Linie) und
reduzierte Kinetik (gestrichelte Linie). 96

Liste eigener Veröffentlichungen und Konferenzbeiträge

Eigene Veröffentlichungen

F. Wang, A. Choudhury, C. Strassacker, B. Nestler. »Spinodal decomposition and droplets entrapment in monotectic solidification«. In: *The Journal of Chemical Physics* 137.3 (2012), 034702.

S. Ganter, C. Straßacker, G. Kuenne, T. Meier, A. Heinrich, U. Maas und J. Janicka. »Laminar near-wall combustion: Analysis of tabulated chemistry simulations by means of detailed kinetics«. In: *International Journal of Heat and Fluid Flow* 70 (2018), S. 259–270.

C. Strassacker, V. Bykov und U. Maas. »REDIM reduced modeling of quenching at a cold wall including heterogeneous wall reactions«. In: *International Journal of Heat and Fluid Flow* 69 (2018), S. 185–193.

C. Strassacker, V. Bykov und U. Maas. »Parametrization and projection strategies for manifold based reduced kinetic models«. In: *Proceedings of the Combustion Institute* 37.1 (2019), Dublin, Irland, S. 763–770.

C. Strassacker, V. Bykov und U. Maas. »REDIM reduced modeling of flame quenching at a cold wall—The influence of detailed transport models and detailed mechanisms«. In: *Combustion Science and Technology* 191.2 (2019), S. 208–222.

M. Steinhausen, Y. Luo, S. Popp, C. Strassacker, T. Zirwes, H. Kosaka, F. Zentgraf, U. Maas, A. Sadiki, A. Dreizler, C. Hasse. »Numerical investigation of local heat-release rates and thermo-chemical states in side-wall quenching of laminar methane and dimethyl ether flames«. In: *Flow, Turbulence and Combustion* (2020).

Y. Luo, C. Strassacker, X. Wen, Z. Sun, U. Maas, C. Hasse. »Strain rate effects on head-on quenching of laminar premixed methane-air flames«. In: *Flow, Turbulence and Combustion* (2020).

C. Strassacker, V. Bykov und U. Maas. »Reduced modeling of Flame-Wall-Interactions of premixed Isooctane-Air Systems including detailed transport and surface reactions«. In: *Veröffentlichung angenommen bei Symposium (International) on Combustion* (2020).

C. Strassacker, V. Bykov und U. Maas. »Comparative analysis of Reaction-Diffusion Manifold based reduced models for Head-On-and Side-Wall-Quenching flames«. In: *Veröffentlichung angenommen bei Symposium (International) on Combustion* (2020).

C. Strassacker, V. Bykov und U. Maas. »A Reduced Kinetic Model for Stratified Flames with Flame-Wall-Interactions«. In: *Veröffentlichung in Vorbereitung* (2020).

Eigene Konferenzbeiträge

C. Strassacker, V. Bykov und U. Maas. »REDIM reduced modeling of quenching at a cold inert wall with detailed transport and different mechanisms«. *International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems* (2017), Boston, USA.

C. Strassacker, V. Bykov und U. Maas. »Investigation on the optimal dimension of Reaction-Diffusion manifold for flame-wall-interactions«. *International ERCOFTAC symposium on engineering, turbulence, modelling and measurements* (2018), Montpellier, Frankreich.

C. Strassacker, V. Bykov, S. Ganter, J. Janicka und U. Maas. »Multi-dimensional transport phenomena of flame-wall-interactions and the REDIM method«. *Proceedings of the European Combustion Meeting* (2019), Lissabon, Portugal.

C. Strassacker, V. Bykov und U. Maas. »Reaction-Diffusion-Maniolds for Flame-Wall-Interactions of Stratified Flames«. *International Colloquium on*

the Dynamics of Explosions and Reactive Systems (2019), Peking, China.

C. Strassacker, V. Bykov und U. Maas. »REDIM reduced modeling of Flame-Wall-Interactions of premixed Isooctane-Air Systems«. *Deutscher Flammentag (2019), Bochum, Deutschland.*

Symbolverzeichnis

1 Lateinische Zeichen

A_l	präexponentieller Faktor
\mathbf{a}	Basisvektor
a_i	Stöchiometrische Koeffizienten der Edukte
\tilde{a}_i	Stöchiometrische Koeffizienten der Produkte
\mathbf{B}	Parametrisierungsmatrix
\mathbf{b}	Basisvektor
\mathbf{C}	Parametrisierungsmatrix
c_i	Konzentration der Spezies i
c_p	Spezifische Wärmekapazität bei konstantem Druck
\mathbf{D}	Matrix der Transportkoeffizienten
$D_{i,j}$	Binärer Diffusionskoeffizient der Spezies i in Spezies j
D_i^D	Effektiver Diffusionskoeffizient der Spezies i
D_i^T	Thermo-Diffusionskoeffizient der Spezies i
\mathbf{d}	Vektor zur Bestimmung des nächstliegenden Zustands auf \mathcal{M}_a
$E_{a,l}$	Aktivierungsenergie der Reaktion l
\mathbf{F}	Thermochemischer Quelltermvektor
\mathbf{F}_ψ	Jacobi-Matrix des chemischen Quellterms
F_i	Quellterm der i -ten Zustandsvariable
\mathbf{G}	Matrix der Gradientenvektoren
\mathbf{G}^*	Matrix der normierten Gradientenvektoren
g	Erdbeschleunigung
\mathbf{H}	Parametrisierungsmatrix
h	Spezifische Enthalpie
\mathbf{I}	Einheitsmatrix
\mathbf{j}_i	Vektor der Diffusionsstromdichte der i -ten Spezies
$\mathbf{j}_{i,d}$	Vektor der Massendiffusion der i -ten Spezies
$\mathbf{j}_{i,p}$	Vektor der Druckdiffusion der i -ten Spezies
$\mathbf{j}_{i,T}$	Vektor der Thermodiffusion der i -ten Spezies
\mathbf{j}_i^s	Vektor der Massenstromdichte der i -ten Spezies

$\dot{\mathbf{j}}_q$	Vektor der Wärmestromdichte
$\dot{\mathbf{j}}_{q,D}$	Vektor der Wärmestromdichte durch Dufour-Effekt
$\dot{\mathbf{j}}_{q,d}$	Vektor der Wärmestromdichte durch Teilchendiffusion
$\dot{\mathbf{j}}_{q,F}$	Vektor der Wärmeleitung
\mathbf{K}	Konstanter Wert der Gradientenabschätzung χ
k_l	Geschwindigkeitskoeffizient der Reaktion l
Le	Lewis-Zahl
M_i	Molare Masse der i -ten Spezies
\bar{M}	Mittlere molare Masse des Gasgemisches
\mathcal{M}	Mannigfaltigkeit der langsamen Prozesse
\mathcal{M}_a	Anfangslösung der REDIM
\mathcal{M}_{REDIM}	REDIM
$\partial\mathcal{M}$	Rand der langsamen Mannigfaltigkeit
m	Anzahl langsamer Prozesse bzw. Dimension von \mathcal{M}
n	Anzahl der thermochemischen Zustandsgrößen
n_f	Anzahl der schnellen chemischen Prozesse
n_s	Anzahl der chemischen Spezies
n_x	Anzahl an Raumdimensionen
\mathbf{P}	Projektionsoperator
p	Druck
q_r	Strahlungsdichte
q_W	Wärmestromdichte zur Wand
\bar{R}	Universelle Gaskonstante
R_g	Spezifische Gaskonstante
r	Ortskoordinate des eindimensionalen Rechengebietes
r_{il}	Bildungsgeschwindigkeit der Spezies i in der Reaktion l
\mathbf{S}	Skalierungsmatrix
T	Temperatur
\mathbf{T}	Transportterm
t	Zeit
$\mathcal{T}^{\mathcal{M}}$	Tangentialer Unterraum von \mathcal{M}
$\mathcal{T}^{\partial\mathcal{M}}$	Tangentialer Unterraum von $\partial\mathcal{M}$
\mathbf{U}	Matrix als Ergebnis der Singulärwertzerlegung
\mathbf{V}	Matrix als Ergebnis der Singulärwertzerlegung
\mathbf{v}	Geschwindigkeitsvektor
\mathbf{W}	Matrix der Eigenvektoren der Jakobimatrix
w_i	Massenbruch der i -ten Spezies
\mathbf{x}	Ortsvektor bestehend aus x , y und z -Koordinate
x	Erster Eintrag des Ortsvektors

x_i	Molenbrüche der i -ten Spezies
Z_l	Stoßzahl mit der Oberfläche
\mathbf{Z}_{\parallel}	Tangentiale Unterraum der REDIM
\mathbf{Z}_{\perp}	Normalen Unterraum der REDIM

2 Griechische Zeichen

β_l	Temperaturerponent der Reaktion l
δ	Abstand zwischen REDIMs
$\mathbf{\Gamma}$	Vektor der Parametrisierungsvariablen
γ_k	Wahrscheinlichkeit für Oberflächenreaktion k
$\boldsymbol{\theta}$	Vektor der generalisierten Koordinaten
$\tilde{\boldsymbol{\theta}}$	Vektor der generalisierten Koordinaten zur Bestimmung von $\boldsymbol{\xi}$
$\boldsymbol{\theta}^{\partial}$	Vektor der generalisierten Koordinaten am Rand der REDIM
$\mathbf{\Lambda}$	Matrix der Eigenwerte der Jakobimatrix
λ	Realteile der Eigenwerte
λ_W	Wärmeleitfähigkeit
$\boldsymbol{\xi}$	Abschätzung der Gradienten des Zustandsvektors
$\tilde{\boldsymbol{\xi}}$	Auf den Rand der REDIM projiziert Abschätzung $\boldsymbol{\xi}$
$\boldsymbol{\xi}_S$	Abschätzung der Gradienten der Spezies
ρ	Dichte
$\boldsymbol{\sigma}$	Matrix der Singulärwerte
τ	Zeit der REDIM-Integration
$\Delta\tau$	Zeitschrittweite der REDIM-Integration
$\boldsymbol{\phi}$	Rechte Seite des detaillierten PDE-Systems
ϕ	Äquivalenzverhältnis
$\boldsymbol{\chi}$	Abschätzung der Gradienten von $\text{grad}\boldsymbol{\theta}$
$\tilde{\boldsymbol{\chi}}$	Modifizierte Abschätzung der Gradienten von $\text{grad}\boldsymbol{\theta}$ am Rand der REDIM
$\boldsymbol{\chi}^{\partial}$	Abschätzung der Gradienten von $\text{grad}\boldsymbol{\theta}$ am Rand der REDIM
χ_i	Symbole der i -ten Spezies
$\boldsymbol{\psi}$	Thermochemischer Zustandsvektor
$\boldsymbol{\psi}_{\beta}$	Matrix der partiellen Ableitungen von $\boldsymbol{\psi}$ nach $\boldsymbol{\beta}$ bei $\partial\mathcal{M}$
$\boldsymbol{\psi}_{\eta}$	Matrix des nach außen zeigenden Normalenvektors zu $\partial\mathcal{M}$
$\boldsymbol{\psi}^{\partial}$	Thermochemischer Zustandsvektor am Rand der REDIM
$\boldsymbol{\psi}_{\boldsymbol{\theta}}^+$	Moore-Penrose Pseudoinverse
$\dot{\omega}_i$	Bildungsgeschwindigkeit der i -ten Spezies

3 Indices

\parallel	Tangential
\perp	Normal
∂	Den Rand der REDIM beschreibend
Br	Brennstoff
det.Transp.	Nutzung des detaillierten Transportmodells
$Le = 1$	Nutzung des vereinfachten Transportmodells
R	Rand des Rechengebiets
r	In Richtung der eindimensionalen r-Koordinate
<i>stöch</i>	Stöchiometrisch
s	Chemische Spezies
x	In Richtung der x-Koordinate
y	In Richtung der y-Koordinate
W	Wand

4 Akronyme

CFD	Computational Fluid Dynamics
DNS	Direkte Numerische Simulation
FGM	Flamelet Generated Manifold
FPI	Flame Prolongation of ILDM
FWI	Flamme-Wand-Interaktion
GGW	Gleichgewicht
HOQ	Head-On Quenching
ILDM	Intrinsic Low Dimensional Manifold
PDE	Partial Differential Equation
REDIM	Reaktions-Diffusions Mannigfaltigkeit
SVD	Singular Value Decomposition
SWQ	Side-Wall Quenching

1 Einleitung

Obwohl Verbrennungsprozesse die wohl älteste genutzte Technologie der Menschheit darstellen, sind sie heute immer noch die Grundlage vieler technischer Anwendungen. Bei diesen Prozessen wird chemisch gespeicherte Energie in thermische Energie gewandelt, welche beispielsweise zum Heizen von Gebäuden genutzt werden kann. Außerdem kann die thermische Energie in mechanische Energie umgewandelt werden.

Im letzten Jahrhundert wurden hauptsächlich fossile Brennstoffe als chemischer Energielieferant genutzt. Diese weisen zum einen den Nachteil auf, dass die vorhandenen Bestände nicht unermüdbar sind, zum anderen entstehen bei deren Verbrennung unerwünschte Treibhausgase. Um sowohl die Ressourcen dieser Brennstoffe zu schonen als auch umweltschädliche Emissionen zu minimieren, müssen Verbrennungsprozesse effizienter gestaltet und besser verstanden werden [101].

Eine Möglichkeit um die Leistungsdichte in Flugtriebwerken und Verbrennungsmotoren zu erhöhen um somit effizientere Antriebe zu entwickeln stellt das sogenannte *Downsizing* dar [37]. Hier wird die Brennkammer bzw. der Brennraum bei gleicher oder steigender Leistung verkleinert. Dies hat zur Folge, dass die Oberfläche im Verhältnis zum Volumen zunimmt wodurch der Einfluss der Wand auf die ablaufenden Verbrennungsprozesse steigt. Dabei können die Wände einen großen Einfluss auf wandnahe Verbrennungsprozesse haben. Hierbei beeinflussen sich die Flamme, die Wand und die vorherrschende Strömung gegenseitig, es kommt zur sogenannten Flamme-Wand-Interaktion (FWI). Im Zuge dessen treten beispielsweise Wandreaktionen auf oder Wärmeverluste an die Wand führen zu lokalem Verlöschen der Flamme in Wandnähe.

Anders als die Verbrennungsprozesse in der Gasphase ist die FWI noch nicht vollständig verstanden. Damit die vorherrschenden Prozesse korrekt modelliert werden können, muss die FWI detailliert analysiert und erforscht werden. Zu diesem Zweck wurden zwei generische Konfigurationen entwickelt, das *Head-On Quenching* (HOQ) [40, 55, 65, 104], bei welchem die Flamme parallel auf die Wand zuläuft und an dieser verlöscht sowie das *Side-Wall Quenching* (SWQ), bei dem sich die Flamme entlang einer Wand bewegt [2, 40, 50], wodurch sich ein stationärer Zustand einstellen kann.

Neben experimentellen Untersuchungen dieser beiden Konfigurationen werden auch numerische Simulationen durchgeführt [2, 9, 27, 32, 40, 42, 76]. Allgemein werden numerischen Strömungssimulationen genutzt, um die in Verbrennungssystemen auftretenden Vorgänge möglichst genau zu verstehen, zu modellieren und anschließend wiederzugeben. Dabei wird unter anderem ein partielles Differentialgleichungssystem genutzt, das chemische Prozesse sowie diffusiven und konvektiven Transport berücksichtigt. Zum Lösen des Differentialgleichungssystems, welches die Erhaltung von Gesamtmasse, Impuls, Energie und Speziesmassen berücksichtigt, werden Computational Fluid Dynamics (CFD) Codes verwendet [101].

Prozesse in der Gasphase, fernab der Wand, sind durch die Forschung der vergangenen Jahre sehr gut verstanden und können daher ohne prinzipiellen Probleme modelliert und numerisch behandelt werden. Die chemische Reaktion wird dabei durch sogenannte Reaktionsmechanismen modelliert wohingegen die molekulare Diffusion durch Diffusionsmodelle beschrieben wird [101].

Die Reaktionsmechanismen beschreiben die chemische Reaktion mit Hilfe einer Vielzahl von Spezies und Reaktionen, was in einem hochdimensionalen Differentialgleichungssystem resultiert. Zudem betragen die in Verbrennungsprozessen typischerweise vorkommenden Zeitskalen Ordnungen von etwa $\mathcal{O}(10^{-10}\text{s})$ bis $\mathcal{O}(1\text{s})$. Dies bedeutet, dass es sich bei den Systemen um sehr steife und nichtlineare Gleichungssysteme handelt [61, 77, 101].

Die in Transportprozessen auftretenden Zeitskalen hingegen sind von der Ordnung $\mathcal{O}(10^{-6}\text{m})$ bis $\mathcal{O}(1\text{m})$ [64], wodurch die Gitterweite sehr klein gewählt werden muss um die kleinsten Längenskalen aufzulösen.

Je nach zu untersuchendem Modellsystem müssen in CFD Codes ein-, zwei- oder dreidimensionale räumliche Probleme gelöst werden. Durch die Erhöhung der räumlichen Dimension steigt die Komplexität des zu lösenden Systems stark an.

Diese Tatsachen führen dazu, dass das Lösen des Differentialgleichungssystems mit dem gesamten Reaktionsmechanismus sehr rechenzeitaufwändig sein kann. Um mit der heutigen Rechenleistung dennoch Simulationen von komplexen Anwendungen zu ermöglichen, werden reduzierte kinetische Modelle entwickelt und angewendet, welche Rechnungen mit vertretbarem Rechenzeitaufwand ermöglichen. Dabei muss ein Kompromiss aus Komplexität und Genauigkeit des reduzierten Systems gefunden werden.

Oftmals werden mannigfaltigkeitsbasierte reduzierte kinetische Modelle für die Reduktion der Kinetik und der Diffusion herangezogen. Beispiele hierfür sind Flameletbasierte Methoden [18], die *Intrinsic Low Dimensional Manifold* (ILDM) [62], die sogenannte *Flame Prolongation of ILDM* (FPI) [34], die

Flamelet Generated Manifold (FGM) [72, 98] und die Reaktions-Diffusions Mannigfaltigkeit (REDIM) [12]. In dieser Arbeit wird die REDIM-Methode, welche Diffusionsprozesse sowie chemische Kinetik berücksichtigt und welche für Verbrennungsprozesse in Wandnähe entwickelt wurde (siehe z.B. [69, 71, 90]) genutzt um die FWI mit wenig Rechenaufwand möglichst akkurat beschreiben zu können.

Die Herausforderungen dabei sind, den Wärmeverlust während der FWI korrekt zu beschreiben, da er essentiell für den Verlauf von sogenannten offenen Systemen ist. Des Weiteren müssen neben reduzierten kinetischen Modellen für eindimensionale Modellsysteme auch reduzierte Modelle für zweidimensionale Modellsysteme bereitgestellt werden, da einige Konfigurationen der FWI nicht eindimensional untersucht werden können (siehe Kapitel 3). Dabei gilt es, die optimalen Dimensionen der reduzierten Modelle zu finden. Eine weitere Herausforderung stellt die Herleitung sowie Implementierung der Randbedingung für heterogene Wandreaktionen im Kontext der REDIM sowie die Implementierung der REDIM für FWI mit Gemischinhomogenitäten dar.

Hierfür werden in Kapitel 2 die Grundlagen der detaillierten numerischen Beschreibung chemisch reagierender Strömungen behandelt. Anschließend wird in Kapitel 3 auf die Grundlagen der FWI eingegangen, wobei neben den generischen Konfigurationen zur Untersuchung der FWI auch der Forschungsstand zur Simulation von FWI beschrieben wird. Außerdem wird die Modellierung von FWI mit den sich ergebenden Randbedingungen für die in Kapitel 2 behandelten Erhaltungsgleichungen für die detaillierte Berechnung vorgestellt.

Kapitel 4 stellt die Grundlagen der REDIM vor, woraufhin in Kapitel 5 auf die REDIMs für FWI eingegangen wird. Im Zuge dessen werden die oben genannten Herausforderungen behandelt und deren Lösungen vorgestellt.

In Kapitel 6 werden die unterschiedlichen Implementierungsmethoden der REDIM mit den sich ergebenden Vor- bzw. Nachteilen vorgestellt. Diese Implementierungsmethoden können auf jedes mannigfaltigkeitsbasierte reduzierte kinetische Modell übertragen werden.

Kapitel 7 zeigt die Anwendung sowie Validierung der REDIMs für FWI, deren Implementierung und theoretischen Grundlagen in Kapitel 5 vorgestellt wurden. Dabei werden verschiedene erstellte REDIMs vorgestellt und getestet. In Kapitel 8 wird die vorliegende Arbeit zusammengefasst und es wird ein Ausblick auf zukünftige Entwicklungsmöglichkeiten gegeben.

2 Mathematische Beschreibung chemisch reagierender Strömungen

Die Dynamik eines chemisch reagierenden Systems kann mathematisch mit Hilfe der dem System zugrunde liegenden Erhaltungsgleichungen bestimmt werden. Bei diesen Gleichungen werden die zu erhaltenden Größen für ein Kontrollvolumen innerhalb der chemisch reagierenden Strömung bilanziert. Das so entstehende partielle Differentialgleichungssystem beschreibt die zeitliche und örtliche Änderung der Zustandsgrößen aufgrund von diffusivem und konvektivem Transport, chemischer Reaktion und Fernwirkung (z.B. Strahlung und Gravitation) [7, 44, 59, 101].

Im Folgenden werden die einzelnen Erhaltungsgleichungen vorgestellt wobei auf ihre detaillierte Herleitung verzichtet wird. Diese ist beispielsweise in [101] und [59] zu finden.

Die allgemeine Kontinuitätsgleichung, welche die Erhaltung der Gesamtmasse beschreibt, ist durch

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

gegeben, wobei ρ die Dichte und \mathbf{v} den Geschwindigkeitsvektor darstellt. Die Änderung der Dichte in Abhängigkeit der Zeit hängt in dieser Gleichung also nur von dem konvektiven Term $\operatorname{div}(\rho \mathbf{v})$ ab.

Die Erhaltung der Speziesmassen wird durch die Gleichung

$$\frac{\partial \rho w_i}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho w_i \mathbf{v}) + \operatorname{div}(\mathbf{j}_{i,D}) = M_i \dot{\omega}_i \quad (2.2)$$

beschrieben. Hierbei bezeichnet w_i den Massenbruch, M_i die molare Masse, $\dot{\omega}_i$ die Bildungsgeschwindigkeit und $\mathbf{j}_{i,D}$ die Diffusionsstromdichte der Spezies i . Anders als in Gleichung 2.1, in der neben der zeitlichen Änderung der Dichte nur ein konvektiver Term auftritt, treten in der Speziesmassenerhaltung ein konvektiver und ein diffusiver Term auf.

Die Erhaltung des Impulses wird durch die Gleichung

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

beschrieben, wobei $\bar{\bar{p}}$ den Drucktensor, \otimes das dyadische Produkt zweier Vektoren und \mathbf{g} die Erdbeschleunigung darstellt. Zusätzlich zu einem diffusiven und einem konvektiven Term trägt in dieser Erhaltungsgleichung auch die Fernwirkung $\rho \mathbf{g}$ einen Anteil zur Dynamik des Systems bei.

Die letzte Erhaltungsgleichung ist die der Gesamtenergie des Systems:

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

Hier beschreibt h die spezifische Enthalpie, q_r die Strahlungsdichte und \mathbf{j}_q die Wärmestromdichte.

Dieses System partieller Differentialgleichungen kann mit Hilfe der Produktregel sowie der Kontinuitätsgleichung in vektorieller Form geschrieben werden [12, 59]:

$$\frac{\partial \boldsymbol{\psi}}{\partial t} = \mathbf{F}(\boldsymbol{\psi}) - \mathbf{v} \operatorname{grad}(\boldsymbol{\psi}) + \frac{1}{\rho} \operatorname{div}(\mathbf{D} \operatorname{grad}(\boldsymbol{\psi})) \equiv \boldsymbol{\phi}(\boldsymbol{\psi}). \quad (2.5)$$

Hier beschreibt $\boldsymbol{\psi} = (h, p, \frac{w_1}{M_1}, \dots, \frac{w_{n_s}}{M_{n_s}})^T$ den $(n = n_s + 2)$ -dimensionalen Zustandsvektor mit n_s Spezies. Des weiteren ist $\mathbf{F}(\boldsymbol{\psi}) = [F_1, F_2, \dots, F_n]^T$ der Quelltermvektor, wobei bei der Vernachlässigung der Fernwirkung durch Strahlung $F_1 = 0$ und mit der Annahme konstanten Druckes $F_2 = 0$ gilt. Weiterhin ist \mathbf{D} die quadratische Transportmatrix.

Für die Schließung von Gleichungssystem 2.5 wird eine thermische Zustandsgleichung benötigt. Da sich die Verbrennungsprozesse in dieser Arbeit durch hohe Temperaturen auszeichnen, wird hier das Gesetz der idealen Gase [26, 101]

$$p = \rho R_g T \quad (2.6)$$

herangezogen. Hier bezeichnet R_g die spezifische Gaskonstante des Gemisches, wobei diese durch

$$R_g = \frac{R}{\bar{M}} \quad (2.7)$$

mit der universellen Gaskonstante R und der mittleren molaren Masse \bar{M} des Gemisches gegeben ist [101].

In den beiden folgenden Unterkapiteln wird die Modellierung des Quellterms sowie die Modellierung der Transportmatrix weiter beschrieben.

2.1 Modellierung der chemischen Reaktion

Für die detaillierte Modellierung der chemischen Kinetik wird üblicherweise auf Reaktionsmechanismen zurückgegriffen, welche aus einzelnen Reaktionen bestehen. Dabei liegt jede einzelne Reaktion in der Form [59, 101]



vor, wobei k_l die Geschwindigkeitskoeffizienten, a_{il} und \tilde{a}_{il} die stöchiometrischen Koeffizienten von Edukten und Produkten der Stoffe i in der Reaktion l und χ_i die Speziesymbole darstellen. Außerdem gibt n_s die Anzahl der Spezies an.

Der Geschwindigkeitskoeffizient k_l kann mit Hilfe des modifizierten Arrheniusansatzes nach

$$k_l = A_l T^{\beta_l} \exp\left(\frac{E_{a,l}}{RT}\right) \quad (2.9)$$

berechnet werden. Hier stellt A_l den präexponentiellen Faktor, β_l den Temperaturexponenten und $E_{a,l}$ die Aktivierungsenergie der Reaktion l dar. Neben der Temperaturabhängigkeit können die Geschwindigkeitskoeffizienten der Teilreaktionen aufgrund der Theorie der unimolekularen Reaktionen auch vom Druck abhängen [81]. Modelle um dieses Phänomen abzubilden sind beispielsweise das Lindemann-Modell [57] oder das Troe-Modell [35].

Die Bildungsgeschwindigkeit r_{il} einer Spezies i in der Reaktion l kann durch [49, 101]

$$r_{il} = k_l (a_{il} - \tilde{a}_{il}) \prod_{i=1}^{n_s} \left(\rho \frac{w_i}{M_i}\right)^{a_{il}} \quad (2.10)$$

berechnet werden. Der chemische Quellterm F_i der Spezies i ergibt sich dann durch Summation der Bildungsgeschwindigkeiten aller Reaktionen zu [101]

$$F_i = \frac{1}{\rho} \sum_{l=1}^R r_{il}. \quad (2.11)$$

Moderne Reaktionsmechanismen können eine sehr große Anzahl an Spezies und Reaktionen aufweisen. Außerdem können sich die Geschwindigkeitskoeffizienten einzelner Elementarreaktionen sehr stark voneinander unterscheiden, wodurch es zu einer sehr hohen Steifigkeit des partiellen Differentialgleichungssystems (PDE-Systems) kommen kann [101]. Beides führt dazu, dass die Berechnung des PDE-Systems sehr zeitintensiv sein kann. Allerdings bilden die unterschiedlichen Zeitskalen des Systems auch die Basis, welche sich bei reduzierten kinetischen Modellen zu Nutze gemacht wird (siehe Kapitel 4).

2.2 Modellierung von Transportprozessen

Die Diffusionsstromdichte $\mathbf{j}_{i,D}$ in Gleichung 2.2 setzt sich aus der Massendiffusion $\mathbf{j}_{i,d}$, der Thermodiffusion $\mathbf{j}_{i,T}$ und der Druckdiffusion $\mathbf{j}_{i,p}$ zusammen [7, 59, 101]:

$$\mathbf{j}_{i,D} = \mathbf{j}_{i,d} + \mathbf{j}_{i,T} + \mathbf{j}_{i,p}. \quad (2.12)$$

Die Massendiffusion wird mit Hilfe des Fickschen Gesetzes berechnet wohingegen die Thermodiffusion (Soret-Effekt) mittels der kinetischen Theorie der Gase bestimmt wird [7, 46]. Die Druckdiffusion ist in den meisten Anwendungen sehr gering, da sie nur bei starken Druckgradienten von Bedeutung ist. Aus diesem Grund wird sie im Rahmen dieser Arbeit vernachlässigt [7].

Wie auch die Diffusionsstromdichte setzt sich die Wärmestromdichte \mathbf{j}_q auch aus unterschiedlichen Anteilen zusammen [7, 59, 101]:

$$\mathbf{j}_q = \mathbf{j}_{q,F} + \mathbf{j}_{q,d} + \mathbf{j}_{q,D}. \quad (2.13)$$

Hier beschreibt $\mathbf{j}_{q,F}$ die Wärmeleitung, welche mit Hilfe des Fourierschen Gesetz berechnet wird, $\mathbf{j}_{q,d}$ den Anteil der Wärmestromdichte, welcher durch Diffusion der Teilchen verschiedener spezifischer Enthalpien hervorgerufen wird und $\mathbf{j}_{q,D}$ den Anteil, der durch den Dufour-Effekt hervorgerufen wird. Dieser ist im Vergleich zu den anderen Anteilen sehr gering und wird deshalb im Rahmen der vorliegenden Arbeit vernachlässigt.

Entsprechend der Diffusionsstromdichte $\mathbf{j}_{i,D}$ sowie der Wärmestromdichte \mathbf{j}_q kann eine Transportmatrix \mathbf{D} formuliert werden. Dabei wird für den Stofftransport durch Speziesgradienten die Curtiss-Hirschfelder-Approximation angewandt um die effektiven Diffusionskoeffizienten D_i^D zu bestimmen. Bei dieser Approximation wird angenommen, dass sich bei der Diffusion einer Spezies alle anderen Spezies mit derselben Geschwindigkeit bewegen [44, 101]. Die effektiven Diffusionskoeffizienten der Spezies i ergeben sich zu [45]

$$D_i^D = \frac{1 - w_i}{\sum_{j \neq i} \frac{x_j}{D_{ij}}} \quad (2.14)$$

wobei D_{ij} Diffusionskoeffizienten binärer Mischungen sind. Die Diffusionsstromdichte ist für die Molenbrüche x_i und die Massenbrüche w_i der Spezies i sowie die Temperatur T und den Druck p dann in allgemeiner Form gegeben durch

$$\mathbf{j}_{i,D} = -\rho \frac{w_i}{x_i} D_i^D \text{grad} x_i - \rho \frac{w_i}{x_i} D_i^T \frac{1}{T} \text{grad} T, \quad (2.15)$$

wobei D_i^T die Diffusionskoeffizienten der Thermodiffusion sind.

Die Wärmestromdichte wird mit der Wärmeleitfähigkeit λ nach

$$\mathbf{j}_q = -\lambda_W \text{grad}T + \sum_i h_i \mathbf{j}_{i,D}. \quad (2.16)$$

berechnet.

In einer Vielzahl von Anwendungen wird die Vereinfachung getroffen, dass alle Spezies die gleichen Diffusionskoeffizienten D aufweisen und die Lewis-Zahl durch [54]

$$\text{Le} = \frac{\lambda_W}{D\rho c_p} = 1 \quad (2.17)$$

gegeben ist [54, 101]. Hier steht c_p für die spezifische Wärmekapazität bei konstantem Druck. Diese Vereinfachung liefert vor allem für die Methanverbrennung gute Ergebnisse [22] und wird im Rahmen dieser Arbeit auch vereinzelt angewandt und mit den Lösungen des detaillierten Diffusionsmodells verglichen.

3 Grundlagen der Flamme-Wand Interaktion

Das Verhalten chemisch reagierender Strömungen wird stark durch naheliegende Wände beeinflusst. So haben Wände beispielsweise einen Einfluss auf die Schadstoff- oder Ablagerungsbildung im Brennraum, außerdem kann es zu katalytischen Effekten kommen. Die Wände wiederum werden durch wandnahe Flammenfronten beeinflusst. Sie erfahren beispielsweise einen durch die Flamme hervorgerufenen Wärmestrom und es kommt zu einer Interaktion zwischen Flamme und Wand. Zudem beeinflussen sich Flammenfronten und die im System vorherrschenden Strömungsfelder gegenseitig und es kommt zu den in Abbildung 3.1 dargestellten Wechselwirkungen.

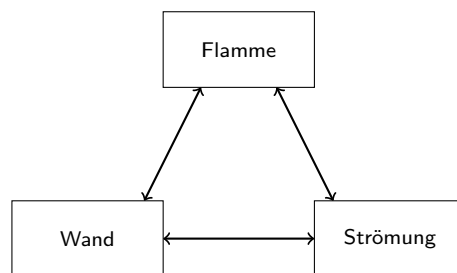


Abbildung 3.1: Schematische Darstellung der Wechselwirkungen der FWI.

Durch die Wechselwirkungen unterscheidet sich die Verbrennung in Wandnähe und die dadurch bedingte FWI maßgeblich von Verbrennungen, welche fernab von Wänden abläuft. Dies äußert sich unter anderem in zusätzlichen Randbedingungen und veränderten Eigenschaften der Flamme.

Im folgenden Kapitel soll zuerst auf die unterschiedlichen Konfigurationen der FWI eingegangen werden, welche sich in zwei grundlegenden generischen Aufbauten unterteilen lassen. Anschließend wird ein Überblick über den Forschungsstand zur Berechnung von Flamme-Wand-Interaktionen gegeben woraufhin die Randbedingungen für die numerische Modellierung der FWI erläutert werden.

3.1 Generische Konfigurationen zur Untersuchung der FWI

Damit die FWI systematisch untersucht werden kann, wurden die Löschvorgänge an Wänden in zwei generische Konfigurationen eingeteilt: Löschung einer zur Wand parallelen Flammenfront (*Head-on Quenching*, HOQ) und Löschung einer zur Wand senkrechten Flammenfront (*Side-Wall-Quenching*, SWQ). Diese beiden Konfigurationen werden in der heutigen Forschung sowohl numerisch als auch experimentell untersucht. In der Praxis treten die zwei Konfigurationen allerdings eher selten auf, da es sich in Motoren oder anderen Verbrennungssystemen meist um eine Mischform der Konfigurationen handelt.

3.1.1 Head-On Quenching

Bei dem sogenannten *Head-On Quenching* verläuft eine Flammenfront parallel auf eine Wand zu und verlischt an dieser (schematisch dargestellt in Abb. 3.2). Bei diesem stets instationären Vorgang wird ein sehr großer Wärmestrom an die Wand abgegeben. Der Zeitpunkt des maximalen Wärmestroms, welcher der Wand zugeführt wird, wird oftmals als Quenchzeitpunkt (Löschzeitpunkt) bezeichnet [89, 95]. Aufgrund der Symmetrie kann diese Konfiguration eindimensional behandelt werden, was die numerische Behandlung enorm vereinfacht. Die so erzielten numerischen Ergebnisse zeigen eine gute Übereinstimmung (siehe unter anderem [89, 95]) mit experimentellen Untersuchungen [65].

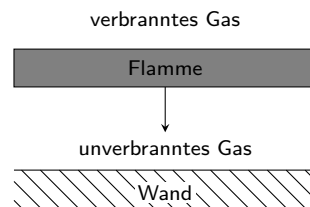


Abbildung 3.2: Schematische Darstellung des *Head-On Quenchings*.

3.1.2 Side-Wall Quenching

Anders als das *Head-On Quenching* kann das *Side-Wall Quenching* auch stationär betrieben werden. Bei dieser Konfiguration verläuft eine Flammenfront

entlang einer Wand (schematisch dargestellt in Abb. 3.3) und wird durch diese beeinflusst. Da sich die Gemischzusammensetzung und der Reaktionsfortschritt sowohl senkrecht als auch parallel zur Wand ändern kann, sind für die Beschreibung dieser Konfiguration in numerischen Untersuchungen mindestens zwei räumliche Dimensionen nötig. Aus diesem Grund müssen die Erhaltungsgleichungen für mindestens zwei Dimensionen gelöst werden, was je nach untersuchtem Kraftstoff und Mechanismus zu einem erheblichen Rechenaufwand führen kann. Um die numerische Untersuchung der SWQ-Konfiguration zu ermöglichen werden oftmals reduzierte kinetische Modelle wie die, in dieser Arbeit eingesetzte, REDIM-Methode angewendet (siehe unter anderem [32]), durch welche sehr gute Übereinstimmungen zu experimentellen Untersuchungen [50] erzielt werden.

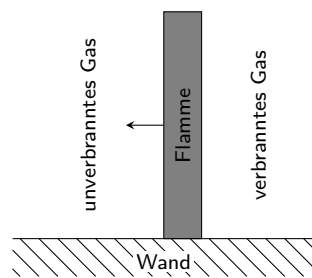


Abbildung 3.3: Schematische Darstellung des *Side-Wall Quenchings*.

3.2 Forschungsstand zur Berechnung von Flamme-Wand-Interaktionen

Nachdem die Abgasrestriktionen immer strenger werden und somit immer genauere Modelle für Verbrennungssysteme gefordert werden, rückt die FWI weiter in den Fokus der heutigen Forschung. Bereits in den 1970-1980 Jahren wurden Oberflächenphänomene in Verbrennungsanwendungen sowie die FWI experimentell untersucht (siehe z.B. [41, 99]). Neben zahlreichen experimentellen Arbeiten wurde die FWI schon in dieser Zeit numerisch beschrieben und analysiert (siehe z.B. [11, 47, 103]). Bei diesen Arbeiten wie auch bei den Arbeiten in der darauffolgenden Zeit (z.B. [9, 20, 27, 42, 78]), handelt es sich aber fast ausschließlich um eindimensionale Berechnungen des HOQ-Modellsystems, da die Berechnung mehrdimensionaler Systeme zu rechenzeitintensiv war. Oft wurde die Wand als inert angenommen.

Schneller werdende Rechner ermöglichten schließlich auch mehrdimensionale detaillierte Direkte Numerische Simulationen (DNS) von FWI [2, 40, 76], wobei die chemische Kinetik oftmals vereinfacht beschrieben wurde (z.B. durch Ein- oder Zweischrittkinetik). Dennoch ist auch heute noch die direkte numerische Lösung der kompletten Erhaltungsgleichungen komplexer technischer Systeme sehr rechenzeitaufwändig. Dies resultiert unter anderem aus der hohen Anzahl von Spezies sowie Reaktionen heutiger Reaktionsmechanismen (z.B. [4, 84]).

Um dennoch Berechnungen komplexer Verbrennungssysteme durchführen zu können um beispielsweise Vorhersagen über diese Systeme zu machen, werden reduzierte Modelle genutzt. Bei diesen Modellen muss ein Kompromiss aus Genauigkeit sowie akzeptablem Berechnungsaufwand gefunden werden. Für den wandnahen Bereich sowie die FWI finden sich in der Literatur nur wenige reduzierte kinetische Modelle. Dies resultiert daraus, dass die Komplexität des Systems durch den Einfluss der Wand stark erhöht ist. Da es in der wandnahen Region zu geringen Temperaturen kommt wodurch Transportprozesse an Bedeutung gewinnen, sollte das reduzierte Modell sowohl die chemische Kinetik als auch Transportprozesse berücksichtigen um Fehler vorzubeugen [25].

Eine Möglichkeit, detaillierte Reaktionsmechanismen zu reduzieren sind Skelettmechanismen, welche für die Berechnung der FWI herangezogen werden [66]. Dies ist allerdings nur für Mechanismen welche durch wenige Spezies beschrieben werden wie z.B. das Wasserstoff-Luft-System sinnvoll, da die Skelettmechanismen von höheren Kohlenwasserstoffen immer noch aus einer großen Anzahl von Spezies und Reaktionen bestehen.

Ein weiteres reduziertes kinetisches Modell, welches für die Beschreibung von FWI genutzt wird, ist die Flamelet Generated Manifolds (FGM) Methode [23, 31, 74, 80]. Allerdings werden bei deren Erzeugung Wandeffekte bzw. die Interaktion mit der Wand meist nicht berücksichtigt, da sie aus einzelnen brennerstabilisierten Flammen erstellt wird.

Auch die sogenannte *Flame-Prolongation of ILDM* wurde für Verbrennungsprozesse in Wandnähe angewendet, allerdings kommt es hier zu Fehlern der Temperatur-Vorhersage in der Wandregion [29].

Die in dieser Arbeit für die Modellreduktion genutzte REDIM-Methode wurde von Steinhilber et al. [89] bereits für FWI angewendet. Im Rahmen der hier vorliegenden Arbeit wird die Verfeinerung des reduzierten Modelles aus [89] vorgestellt. Dabei werden unter anderem unterschiedliche Diffusionsmodelle und Mechanismen sowie die heterogene Wandreaktion implementiert sowie ein- und mehrdimensionale Gradientenabschätzungen in die REDIM-Methode einbezogen.

3.3 Modellierung von Flamme-Wand-Interaktionen

Bei der Modellierung der FWI können wie bei jeder anderen Modellierung verschiedene Detaillierungsgrade gewählt werden. Da die Wandtemperatur der zwei Konfigurationen, welche im vorangegangenen Kapitel vorgestellt wurden, in experimentellen Untersuchungen möglichst konstant gehalten wird (beispielsweise durch Wasserkühlung [65]), kann sie auch bei der numerischen Untersuchung als konstant betrachtet werden. Aus diesem Grund ergibt sich für die Randbedingung der Temperatur an der Wand ($x = 0$ m) die Dirichlet-Randbedingung

$$T(x = 0 \text{ m}) = T_W, \quad (3.1)$$

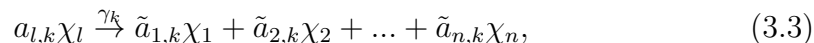
die einen Wärmeübergang zur Wand zulässt.

Für die Formulierung der Spezies-Randbedingung kann die Wand beispielsweise als inert betrachtet werden. In diesem Fall wird davon ausgegangen, dass Teilchen weder in die Wand hinein- noch herausdiffundieren. Aus diesem Grund ist der Massenstrom $j_{i,x}^s$ der Spezies i , der in diesem Fall dem Diffusionsstrom $j_{i,x}$ entlang der x -Koordinate entspricht, in Normalenrichtung zur Wand gegeben durch

$$j_{i,x}^s(x = 0 \text{ m}) = j_{i,x}(x = 0 \text{ m}) = 0. \quad (3.2)$$

Eine weitere, komplexere Randbedingung für die Spezies berücksichtigt heterogene Wandreaktionen. Bei dieser Wandreaktion diffundieren Moleküle (v.a. Radikale) zur Wand, kombinieren dort mit einer bestimmten Wahrscheinlichkeit zu stabilen Teilchen und diffundieren anschließend zurück in die Gasphase (siehe Abb. 3.4). Die Reaktionswahrscheinlichkeit wird dabei experimentell bestimmt. Rekombiniert ein Teilchen nicht mit einem anderen Teilchen, so bleibt es unverändert und diffundiert nach der Reflektion an der Wand zurück in die Gasphase.

Die an der Oberfläche auftretenden Reaktionen



werden durch einen Reaktionsmechanismus vorgegeben und treten mit der Wahrscheinlichkeit γ_k auf [59]. Die Reaktionsrate der Spezies i in der Oberflächenreaktion k ist bei diesen Reaktionen gegeben durch

$$\dot{\omega}_{i,k} = \frac{1}{\rho} \sum_{k=1}^n \gamma_k \cdot Z_l \cdot (\tilde{a}_{ik} - a_{ik}), \quad (3.4)$$

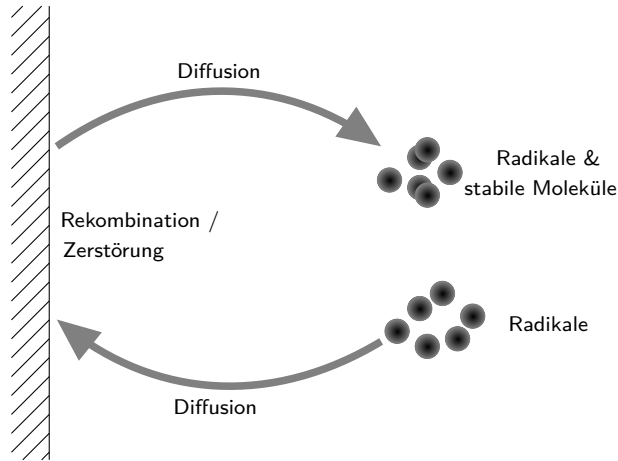


Abbildung 3.4: Schematische Darstellung der heterogenen Wandreaktion.

wobei \tilde{a}_{ik} und a_{ik} die stöchiometrischen Koeffizienten der Spezies i in der Reaktion k sind. Z_l stellt die Stoßzahl mit der Oberfläche dar und ist nach der kinetischen Gastheorie gegeben durch [7]

$$Z_l = \frac{1}{4} \cdot \sqrt{\frac{8RT}{\pi M_i}} \cdot c_i. \quad (3.5)$$

Die gesamte Bildungsrate der Spezies i in allen n_0 Wandreaktionen wird beschrieben durch

$$\dot{\omega}_i = \sum_{k=1}^{n_0} \dot{\omega}_{i,k}. \quad (3.6)$$

Auch für die Formulierung dieser Randbedingung geht man davon aus, dass es keinen Massenfluss $j_{i,x}$ der Spezies i durch die Oberfläche gibt. Allerdings besteht der Massenfluss $j_{i,x}^s$ in Normalenrichtung zur Wand in diesem Fall nicht nur aus dem Diffusionsfluss $j_{i,x}$ normal zur Wand, sondern auch aus dem Reaktionsfluss $\dot{\omega}_i$ der Oberflächenreaktion:

$$j_{i,x}^s = j_{i,x} + \dot{\omega}_i. \quad (3.7)$$

Somit ergibt sich die Randbedingung für die Spezies an der Wand zu

$$j_{i,x}^s = j_{i,x} + \dot{\omega}_i = 0. \quad (3.8)$$

4 Grundlagen der REDIM Methode

Wie bereits in Kapitel 2 erwähnt wurde, ist Gleichung 2.5 aufgrund der stark unterschiedlichen Zeitskalen der chemischen Prozesse ein steifes partielles Differentialgleichungssystem hoher Dimension, deren Lösung je nach Modellsystem sehr viel Rechenzeit in Anspruch nimmt [101]. Um dennoch komplexe Modellsysteme wie beispielsweise die innermotorische Verbrennung oder mehrdimensionale Brenner-Konfigurationen mit vertretbarem Rechenaufwand durchführen zu können [3, 32, 43], werden sogenannte reduzierte kinetische Modelle entwickelt und angewendet.

Eine Methodik zur Modellreduktion liefern mannigfaltigkeitsbasierte reduzierte kinetische Modelle, welche die Dimension der zu lösenden Entwicklungsgleichung 2.5 reduzieren wobei möglichst exakte Ergebnisse erzielt werden sollen. Vertreter dieser Modelle sind beispielsweise die Intrinsic-Low-Dimensional-Manifolds (ILDIM) [6, 8, 12, 58, 61, 62], die Flame-Prolongation of ILDM (FPI) [30, 34, 52], die Flamelet-Generated-Manifold (FGM) [22, 24, 74, 98] und die Reaktions-Diffusions-Mannigfaltigkeit (REDIM) [12–14, 16, 70, 95].

Der Begriff der Mannigfaltigkeit ist für das REDIM-Verfahren von zentraler Bedeutung. Eine differenzierbare Mannigfaltigkeit ist eine niedrigdimensionale Parameterdarstellung im mehrdimensionalen Raum [51, 56]. Diese Mannigfaltigkeit \mathcal{M} hat die Dimension k genau dann, wenn die Mannigfaltigkeit eine Teilmenge des \mathbb{R}^k abbildet [56]. Dies bedeutet, dass sich die Mannigfaltigkeit durch k unabhängige Koordinaten, den sogenannten generalisierten Koordinaten, beschreiben lässt [51, 56].

Wie bereits in Kapitel 2.1 erklärt wurde, treten in Verbrennungssystemen üblicherweise Reaktionen mit stark variierenden Geschwindigkeitskoeffizienten auf, wodurch es zu einem sehr steifen PDE-System kommt [33, 101]. Aufgrund dieser Steifheit wird bei Verbrennungsprozessen nur ein kleiner Teil des thermochemischen Zustandsraums eingenommen [62], wodurch eine reduzierte Beschreibung mit Hilfe einer Mannigfaltigkeit ermöglicht wird. Während die schnellen chemischen Prozesse nach sehr kurzer Zeit abgeschlossen sind und als quasistationär betrachtet werden können bzw. sich im partiellen Gleichgewicht befinden [38, 62, 101], koppeln die langsamen chemischen Prozesse

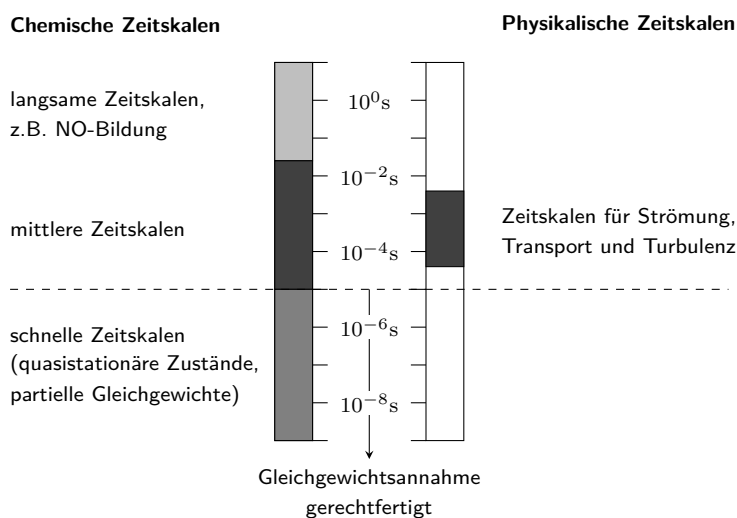


Abbildung 4.1: Schematische Darstellung der Zeitskalen in chemisch reagierenden Strömungen [101].

mit den Transportprozessen des Systems welche beide die Entwicklung der Systemdynamik bestimmen (siehe Abb. 4.1) [14].

Die Entkopplung der schnellen chemischen Prozesse wird bei den oben genannten reduzierten Modellen genutzt, da die schnellen Prozesse, beispielsweise nach einer Störung des Systems, auf die Mannigfaltigkeit führen. Durch diese schnelle Relaxation wird die Mannigfaltigkeit als attraktiv bezeichnet. Die langsamen Prozesse des Systems bestimmen die Systemdynamik entlang der Mannigfaltigkeit sodass die Anzahl der Dimensionen der Mannigfaltigkeit der Anzahl langsamer Prozesse entspricht.

Ist die Mannigfaltigkeit gefunden, können die Zustände sowie alle weiteren notwendigen Informationen in Abhängigkeit der Parametrisierungsvariablen tabelliert werden. Anschließend kann die langsame Systemdynamik mit Hilfe des zuvor erstellten reduzierten kinetischen Modells mit Hilfe weniger Parametrisierungsvariablen bestimmt werden, wobei die Anzahl der Variablen durch die Anzahl der Dimensionen der Mannigfaltigkeit gegeben ist [38]. Dies bedeutet, dass nur noch Entwicklungsgleichungen für die Parametrisierungsvariablen berechnet werden müssen, wodurch die Dimension des Systems reduziert wird.

Im Rahmen dieser Arbeit wird die REDIM Methode eingesetzt, welche die langsame Systemdynamik gekoppelter Reaktions-Diffusions-Prozesse identifiziert. Die mathematisch-physikalischen Grundlagen dieser Methode werden in den kommenden Unterkapiteln beschrieben (eine detaillierte Herleitung

der REDIM-Methode ist in [12, 13, 60] zu finden). Bei dieser Beschreibung wird zuerst auf die REDIM-Entwicklungsgleichung eingegangen, durch welche die langsame invariante Mannigfaltigkeit im Zustandsraum gefunden wird. Anschließend wird die Gradientenabschätzung erläutert, welche für die Abschätzung der molekularen Transportprozesse auf der REDIM zuständig ist um die Kopplung zwischen chemischer Reaktion und Diffusion abzuschätzen. Um die REDIM-Entwicklungsgleichung lösen zu können, müssen für die Ränder der REDIM spezielle Randbedingungen formuliert werden, welche in den Kapiteln 4.3 und 5.4 behandelt werden. Da die REDIM-Entwicklungsgleichung ein partielles Differentialgleichungssystem ist, muss außerdem eine geeignete Anfangslösung, die sogenannte Anfangsmannigfaltigkeit, bereitgestellt werden (siehe Kapitel 4.4). Die numerische Lösung dieses partiellen Differentialgleichungssystems wird im darauffolgenden Unterkapitel beschrieben (Kapitel 4.5), woraufhin die Tabellierung der REDIM in Kapitel 4.6 beschrieben wird.

4.1 REDIM-Entwicklungsgleichung

Die Identifikation der REDIM beruht auf der Lösung einer Entwicklungsgleichung, welche aus geometrischen Bedingungen des Vektorfeldes im thermochemischen Zustandsraum resultiert.

Die REDIM, welche eine Mannigfaltigkeit \mathcal{M} der langsamen Prozesse ist, muss positiv invariant sein damit die von ihr abzubildenden Verbrennungsprozesse korrekt beschrieben werden [14]. Dies bedeutet, dass die Zustände die REDIM für jeden Zeitpunkt $t > t_0$ nicht mehr verlassen können, sofern sie nach der Relaxation der $n_f = n - m$ schnellen Prozesse zum Zeitpunkt t_0 Zustände auf der Mannigfaltigkeit eingenommen haben. Hier entspricht m der Anzahl der langsamen Prozesse und n gibt die Anzahl der thermochemischen Zustandsgrößen. Dies bedeutet, dass $\psi(\mathbf{x}, t) \in \mathcal{M}$ [17]. Daraus resultiert, dass das Vektorfeld ϕ der rechten Seite von Gleichung 2.5 für $t > t_0$ an jedem Punkt tangential, also entlang der langsamen Mannigfaltigkeit \mathcal{M} verlaufen muss und es folgt die Invarianzbedingung [12, 17]

$$\phi \in \mathcal{T}^{\mathcal{M}}. \quad (4.1)$$

Hier entspricht $\mathcal{T}^{\mathcal{M}}$ dem m -dimensionalen tangentialen Unterraum von \mathcal{M} . Dies hat zur Folge, dass für die Projektion des Vektorfeldes ϕ durch den Projektionsoperator \mathbf{P} gelten muss [12]

$$\mathbf{P}\phi = 0, \quad (4.2)$$

wobei \mathbf{P} den Normalenraum der Mannigfaltigkeit \mathcal{M} aufspannt, welcher dem schnellen Unterraum des Zustandsraums entspricht [12].

Durch die Tatsache, dass die Systemdynamik nur noch entlang der Mannigfaltigkeit verläuft, kann die langsame Mannigfaltigkeit \mathcal{M} zur Beschreibung der Dynamik herangezogen werden und es wird nicht der volle Zustandsraum zur Beschreibung benötigt [12].

Damit die Mannigfaltigkeit \mathcal{M} in expliziter Form gegeben werden kann, muss sie so parametrisiert werden, dass jeder Koordinate $\boldsymbol{\theta}$ des m -dimensionalen Unterraumes ein Punkt $\boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{\theta}) \in \mathcal{M}$ im n -dimensionalen Zustandsraum zugeordnet werden kann, sodass

$$\mathcal{M} = \{\boldsymbol{\psi} : \boldsymbol{\psi} = \boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{\theta}), \boldsymbol{\theta} \in \mathbb{R}^m, \boldsymbol{\psi} \in \mathbb{R}^n\}. \quad (4.3)$$

Diese Parametrisierung erfolgt über sogenannte generalisierte Koordinaten $\boldsymbol{\theta} = (\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_m)^T$ [5, 6, 53]. Bei diesen Koordinaten entsprechen die Gitterkoordinaten der Indizierung des jeweiligen Gitterpunktes, wodurch die Abstände der Parametrisierungsvariablen zweier benachbarter Gitterpunkte dem Wert 1 entsprechen.

Der Tangentialraum von \mathcal{M} wird an einer Stelle $\boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{\theta})$ durch die Matrix der partiellen Ableitungen des Zustandsvektors nach den generalisierten Koordinaten aufgespannt und ist gegeben durch [6, 12]

$$\boldsymbol{\psi}_\theta = \begin{pmatrix} \frac{\partial \psi_1}{\partial \theta_1} & \dots & \frac{\partial \psi_1}{\partial \theta_m} \\ \frac{\partial \psi_2}{\partial \theta_1} & \dots & \frac{\partial \psi_2}{\partial \theta_m} \\ \vdots & \dots & \vdots \\ \frac{\partial \psi_n}{\partial \theta_1} & \dots & \frac{\partial \psi_n}{\partial \theta_m} \end{pmatrix}. \quad (4.4)$$

Unter der Verwendung der Kettenregel für das Differential des Zustandsvektors nach den Ortskoordinaten x, y und z

$$\begin{aligned} \text{grad}\boldsymbol{\psi} &= \begin{pmatrix} \frac{\partial \psi_1}{\partial x} & \frac{\partial \psi_1}{\partial y} & \frac{\partial \psi_1}{\partial z} \\ \vdots & \dots & \vdots \\ \frac{\partial \psi_n}{\partial x} & \frac{\partial \psi_n}{\partial y} & \frac{\partial \psi_n}{\partial z} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \frac{\partial \psi_1}{\partial \theta_1} & \dots & \frac{\partial \psi_1}{\partial \theta_m} \\ \frac{\partial \psi_2}{\partial \theta_1} & \dots & \frac{\partial \psi_2}{\partial \theta_m} \\ \vdots & \dots & \vdots \\ \frac{\partial \psi_n}{\partial \theta_1} & \dots & \frac{\partial \psi_n}{\partial \theta_m} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial \theta_1}{\partial x} & \frac{\partial \theta_1}{\partial y} & \frac{\partial \theta_1}{\partial z} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ \frac{\partial \theta_m}{\partial x} & \frac{\partial \theta_m}{\partial y} & \frac{\partial \theta_m}{\partial z} \end{pmatrix} \\ &= \boldsymbol{\psi}_\theta \text{grad}\boldsymbol{\theta} \end{aligned} \quad (4.5)$$

kann das Vektorfeld von ϕ aus Gleichung 2.5 in Abhängigkeit der generalisierten Koordinaten angegeben werden [12]:

$$\begin{aligned}\phi &= \mathbf{F} - \mathbf{v}\psi_{\theta}\text{grad}(\boldsymbol{\theta}) + \frac{1}{\rho}\text{div}(\mathbf{D}\psi_{\theta}\text{grad}(\boldsymbol{\theta})) \\ &= \mathbf{F} - \mathbf{v}\psi_{\theta}\text{grad}(\boldsymbol{\theta}) + \frac{1}{\rho}(\mathbf{D}\psi_{\theta}\text{grad}(\boldsymbol{\theta}))_{\theta}\text{grad}(\boldsymbol{\theta}).\end{aligned}\quad (4.6)$$

Der Projektionsoperator \mathbf{P} , welcher die Dynamik auf den normalen Unterraum von \mathcal{M} projiziert, ist gegeben durch [12]

$$\mathbf{P} = \mathbf{I} - \psi_{\theta}\psi_{\theta}^+ \quad (4.7)$$

mit der Einheitsmatrix \mathbf{I} und der verallgemeinerten Moore-Penrose Pseudoinversen ψ_{θ}^+ [12]

$$\psi_{\theta}^+ = (\psi_{\theta}^T \mathbf{S} \psi_{\theta})^{-1} \psi_{\theta}^T \mathbf{S} \quad (4.8)$$

wobei gilt

$$\psi_{\theta}^+ \psi_{\theta} = \mathbf{I}. \quad (4.9)$$

Hier ist \mathbf{S} eine reguläre Matrix, welche die Größenordnungen der Enthalpie und des Druckes auf die Größenordnung der spezifischen Molzahl angleicht. Durch diese Vorgehensweise wird die Orthogonalität im Zustandsraum determiniert, wodurch Probleme bei der Integration der REDIM-Gleichung unterbunden werden. Im Rahmen dieser Arbeit ist \mathbf{S} definiert als [60]

$$\mathbf{S} = \text{diag}(10^{-12}, 10^{-12}, 1, \dots, 1). \quad (4.10)$$

Neben Gleichung 4.7 kann die Pseudo-Inverse ψ_{θ}^+ auch anders definiert werden, wobei Gleichung 4.9 erfüllt sein muss.

Die Entwicklungsgleichung der REDIM lässt sich mit den Gleichungen 4.6 und 4.7 sowie unter Verwendung einer Abschätzung χ für die lokalen Gradienten $\text{grad}(\boldsymbol{\theta})$ als

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = (\mathbf{I} - \psi_{\theta}\psi_{\theta}^+) \left\{ \mathbf{F} - \mathbf{v}\psi_{\theta}\chi + \frac{1}{\rho}(\mathbf{D}\psi_{\theta}\chi)_{\theta}\chi \right\} \quad (4.11)$$

formulieren. Der zweite Term dieser Gleichung fällt heraus, da mit Gleichung 4.9 gilt

$$\begin{aligned}(\mathbf{I} - \psi_{\theta}\psi_{\theta}^+)\mathbf{v}\psi_{\theta}\chi &= \psi_{\theta}\mathbf{v}\chi - \psi_{\theta}\psi_{\theta}^+\psi_{\theta}\mathbf{v}\chi \\ &= \psi_{\theta}\mathbf{v}\chi - \psi_{\theta}\mathbf{v}\chi \\ &= 0.\end{aligned}\quad (4.12)$$

Dies heißt, dass Konvektionsprozesse keinen direkten Einfluss auf die REDIM haben, und die REDIM durch diese Prozesse lediglich über die Gradientenabschätzung (siehe Kapitel 4.2) beeinflusst werden kann.

Die REDIM Entwicklungsgleichung vereinfacht sich daher zu [12]

$$\frac{\partial \boldsymbol{\psi}}{\partial t} = (\mathbf{I} - \boldsymbol{\psi}_\theta \boldsymbol{\psi}_\theta^+) \left\{ \mathbf{F} + \frac{1}{\rho} (\mathbf{D} \boldsymbol{\psi}_\theta \boldsymbol{\chi})_\theta \boldsymbol{\chi} \right\} \quad (4.13)$$

mit der Dichte $\rho = \rho(\boldsymbol{\theta}(\mathbf{x}, t))$, dem chemischen Quellterm $\mathbf{F} = \mathbf{F}(\boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{\theta}(\mathbf{x}, t)))$ und der Transportmatrix $\mathbf{D} = \mathbf{D}(\boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{\theta}(\mathbf{x}, t)))$, wobei $\boldsymbol{\chi} = f(\boldsymbol{\theta})$. Es wird ersichtlich, dass die REDIM Methode sowohl die chemische Kinetik als auch den molekularen Transport berücksichtigt.

Für die Charakterisierung der molekularen Transportprozesse auf der REDIM wird die Gradientenabschätzung $\boldsymbol{\chi}$ benötigt [12], welche in Kapitel 4.2 weiter beschrieben wird. Mit Hilfe der partiellen Differentialgleichung 4.13 mit dem Zustandsvektor $\boldsymbol{\psi}$ als abhängige sowie den generalisierten Koordinaten $\boldsymbol{\theta}$ und der Zeit t als unabhängige Variablen kann die langsame invariante Mannigfaltigkeit \mathcal{M}_{REDIM} in Abhängigkeit der Gradientenabschätzung $\boldsymbol{\chi}$ approximiert werden. Zur Lösung von Gleichung 4.13 müssen eine Gradientenabschätzung $\boldsymbol{\chi}$, eine geeignete Anfangslösung \mathcal{M}_a sowie geeignete Randbedingungen bereitgestellt werden worauf in den folgenden Unterkapiteln eingegangen wird. Durch eine Integration der Entwicklungsgleichung 4.13 für die Zeit $\tau \rightarrow \infty$ bis hin zum stationären Zustand wird die REDIM erstellt. Mit Erreichen des stationären Zustandes ist die Invarianzbedingung erfüllt und es gilt

$$(\mathbf{I} - \boldsymbol{\psi}_\theta \boldsymbol{\psi}_\theta^+) \boldsymbol{\phi} = 0, \quad (4.14)$$

was bedeutet, dass es sich um eine langsame, invariante Mannigfaltigkeit handelt [17]. Da die REDIM sowohl die chemische Kinetik als auch molekulare Diffusionsprozesse berücksichtigt, zeichnet sich die stationäre Lösung der REDIM dadurch aus, dass die Projektionen des Reaktions- und Diffusionsterms in jeweils entgegengesetzte Richtungen im Zustandsraum zeigen und sich an jedem Punkt der Mannigfaltigkeit \mathcal{M}_{REDIM} aufheben.

Wichtig zu erwähnen ist, dass die REDIM-Gleichung 4.13 unabhängig von deren Parametrisierung $\boldsymbol{\theta}$ ist [15], da sowohl der Projektionsoperator $\mathbf{P} = (\mathbf{I} - \boldsymbol{\psi}_\theta \boldsymbol{\psi}_\theta^+)$ als auch der Quellterm \mathbf{F} und der Diffusionsterm $\frac{1}{\rho} (\mathbf{D} \boldsymbol{\psi}_\theta \boldsymbol{\chi})_\theta \boldsymbol{\chi}$ unabhängig von $\boldsymbol{\theta}$ sind [15].

4.2 Abschätzung der Gradienten zur Berücksichtigung von Transportprozessen

Die Gradientenabschätzung χ ist, wie bereits in vorherigen Kapiteln erwähnt, unentbehrlicher Bestandteil der REDIM-Erstellung, da sie die molekularen Transportprozesse auf der REDIM definiert. Sie ist Teil des Diffusionsterms $\frac{1}{\rho}(\mathbf{D}\psi_\theta\chi)_\theta\chi$ der REDIM-Gleichung, wodurch sowohl die Größe als auch die Zeitskalen der physikalischen Prozesse abgeschätzt werden und somit die Kopplung zwischen chemischer Reaktion und Diffusion wiedergibt. Aus diesem Grund beeinflusst die Gradientenabschätzung auch die stationäre Lösung der REDIM, da durch sie das Gleichgewicht des projizierten Reaktions- und Diffusionsterms, welche in jeweils entgegengesetzte Richtungen zeigen, definiert wird.

Die Gradientenabschätzung χ kann dabei auf verschiedene Weisen bereitgestellt werden. Die einfachste Möglichkeit ist die Vorgabe global konstanter Werte \mathbf{K} über die gesamte Mannigfaltigkeit \mathcal{M}_{REDIM} mit [14]

$$\chi = \mathbf{K}. \quad (4.15)$$

Eine weitere Möglichkeit ist die Bestimmung von χ über räumliche Gradienten des Zustandsvektors ψ , welche beispielsweise bei eindimensionalen Modellsystemen durch

$$\text{grad}(\psi) = \begin{pmatrix} \frac{\partial\psi_1}{\partial r} \\ \frac{\partial\psi_2}{\partial r} \\ \vdots \\ \frac{\partial\psi_n}{\partial r} \end{pmatrix} \quad (4.16)$$

gegeben sind, wobei r die Ortskoordinate ist. In diesem Fall können entweder experimentelle Ergebnisse oder andere Erfahrungswerte für $\text{grad}(\psi)$ gewählt werden. Alternativ können die Gradienten des Zustandsvektors aus detaillierten Rechnungen entnommen werden. Diese können beispielsweise eindimensionale Simulationen sein, bei denen der Zustandsvektor $\psi(r)$ für $r_0 < r < r_1$ vorliegt.

Für die Berechnung der Gradientenabschätzung χ aus $\text{grad}\psi$ wird zunächst die Kettenregel für $\text{grad}\psi$ angewandt

$$\text{grad}\psi = \psi_\theta \text{grad}\theta \quad (4.17)$$

woraufhin beide Seiten mit ψ_θ^+ multipliziert werden

$$\text{grad}\theta = \psi_\theta^+ \text{grad}\psi. \quad (4.18)$$

Hier ist $\text{grad}\boldsymbol{\theta}$ eine $(m \times n_x)$ -Matrix die durch die Abschätzung $\boldsymbol{\chi}$ dargestellt wird und n_x gibt die Anzahl an Raumdimensionen an [14]. Die für die Lösung der REDIM-Gleichung herangezogenen Gradienten des Zustandsvektors $\text{grad}\boldsymbol{\psi}$ werden durch die Abschätzung $\boldsymbol{\xi}$ repräsentiert, wodurch sich aus Gleichung 4.18

$$\boldsymbol{\chi} = \boldsymbol{\psi}_\theta^+ \boldsymbol{\xi} \quad (4.19)$$

ergibt.

In vielen Fällen reicht es aus, die Flammencharakteristik durch die Vorgabe der Gradienten weniger Zustandsvariablen zu beschreiben. Hierbei handelt es sich um Zustandsvariablen, die die wichtigen Prozesse des Verbrennungssystems korrekt beschreiben bzw. die relevanten Informationen durch einzelne Zustandsvariablen ausgedrückt werden können. Beispiele hierfür sind Hauptspezies zur Beschreibung des Mischungszustandes oder des Reaktionsfortschrittes oder der Enthalpiegradient zur Beschreibung des Wärmeverlustes (siehe Kapitel 5).

In diesen Fällen werden die Zustandsvariablen für die Gradientenabschätzung durch die Spaltenvektoren der $(m \times n)$ -dimensionalen Matrix \mathbf{C} definiert, mit welcher Gleichung 4.17 multipliziert wird [88]:

$$\mathbf{C}\boldsymbol{\xi} = \mathbf{C}\boldsymbol{\psi}_\theta\boldsymbol{\chi}. \quad (4.20)$$

Anschließend ergibt sich die Gradientenabschätzung zu

$$\boldsymbol{\chi} = (\mathbf{C}\boldsymbol{\psi}_\theta)^{-1}\mathbf{C}\boldsymbol{\xi}. \quad (4.21)$$

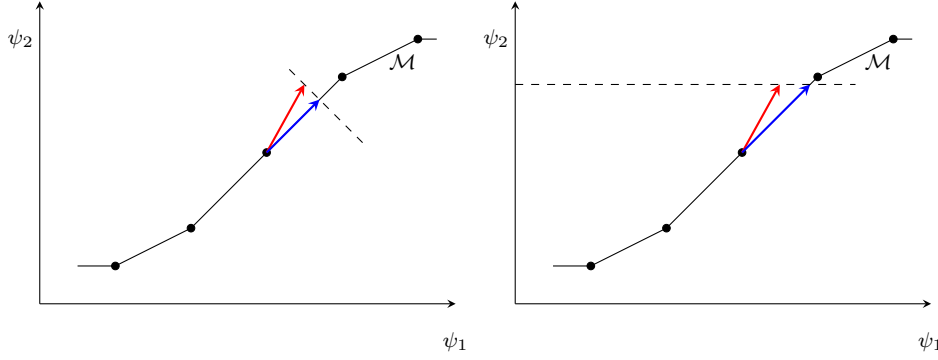
Sollen beispielsweise nur die erste und dritte Zustandsvariable in der Gradientenabschätzung berücksichtigt werden, so ergibt sich für die Matrix \mathbf{C}

$$\mathbf{C} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \dots & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.22)$$

Gleichung 4.21 bringt den Vorteil mit sich, dass weniger Informationen für die Erstellung einer REDIM benötigt werden, allerdings hängt es vom Anwendungsfall ab, ob sich Gleichung 4.18 oder 4.21 für die Generierung der REDIM besser eignet.

Liegt die Schätzung $\boldsymbol{\xi}$ der Gradienten der Zustandsvariablen im tangentialen Unterraum der Mannigfaltigkeit, so führen die Gleichungen 4.18 und 4.21 zum gleichen Ergebnis. Liegen die Gradienten nicht im tangentialen Unterraum der Mannigfaltigkeit, so unterscheiden sich die berechneten Ergebnisse für $\boldsymbol{\chi}$. Im Fall von Gleichung 4.18 wird $\boldsymbol{\xi}$ senkrecht bzw. normal der REDIM auf den

tangentiale Unterraum projiziert (siehe Abb. 4.2a). Für Gleichung 4.21 wird ξ nicht normal zur Mannigfaltigkeit projiziert, sondern nur in Abhängigkeit der durch \mathbf{C} definierten Variablen. Abbildung 4.2b veranschaulicht dies, wobei in dem dargestellten Fall die Zustandsvariable ψ_2 durch \mathbf{C} definiert wurde. Es wird ersichtlich, dass sich in diesem Fall der Wert des Gradienten von ψ_2 durch die Projektion nicht ändert.



(a) Berechnung der Gradientenabschätzung χ mit Gleichung 4.18.

(b) Berechnung der Gradientenabschätzung χ mit Gleichung 4.21.

Abbildung 4.2: Schematische Darstellung unterschiedlicher Möglichkeiten zur Berechnung der Gradientenabschätzung χ (blau), wenn die Schätzung der Gradienten der Zustandsvariablen ξ (rot) nicht im tangentialen Unterraum der REDIM liegt.

Die Gradienten ξ der Zustandsvariablen werden zu Beginn der REDIM-Integration an den Zuständen ψ^a der Anfangsmannigfaltigkeit \mathcal{M}^a definiert. Während der Integration der REDIM ändern sich die Zustände an den diskreten Gitterpunkten und somit auch die Form und Lage der REDIM, wodurch \mathcal{M}^{REDIM} von \mathcal{M}^a abweicht. Dies hat zur Folge, dass an den aktuellen Zuständen der Mannigfaltigkeit \mathcal{M}^{REDIM} keine Gradienten $\text{grad}\psi$ vorliegen, da diese lediglich für die Zustände der Anfangsmannigfaltigkeit \mathcal{M}^a definiert sind. Aus diesem Grund müssen die aktuellen Zustände ψ der REDIM \mathcal{M}^{REDIM} zu jedem Zeitschritt korrespondierenden Zuständen ψ^a zugeordnet werden, von welchen die Gradientenabschätzung entnommen wird.

Diese Zuordnung kann auf unterschiedliche Weise erfolgen. Zum einen kann der minimale quadratische Abstand des gesamten Zustandes nach [60]

$$\psi^a = \min[(\psi(t, \theta^*) - \psi^a) \cdot (\psi(t, \theta) - \psi^a)] \quad (4.23)$$

minimiert werden. Zum anderen kann der minimale quadratische Abstand nur weniger Zustandsvariablen nach [60]

$$\psi^a = \min[(\text{diag}(\mathbf{d})(\psi(t, \theta^*) - \psi^a)) \cdot (\text{diag}(\mathbf{d})(\psi(t, \theta) - \psi^a))] \quad (4.24)$$

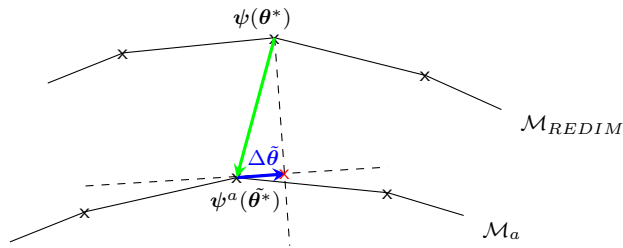


Abbildung 4.3: Interpolation der Gradientenabschätzung ξ der Zustandsvariablen unter Verwendung der Zentraldifferenzen; der Verbindungsvektor zwischen $\psi(\theta^*)$ und $\psi_a(\tilde{\theta}^*)$ ist grün, der Parametervektor $\Delta\tilde{\theta}$ an der Stelle $\tilde{\theta}^*$ ist blau dargestellt [69].

bestimmt werden. Die Wahl des $(1 \times n)$ -Vektors \mathbf{d} hängt vom Anwendungsfall ab, in der Regel handelt es sich aber um Hauptspezies, deren Werte viel entscheidender sind als beispielsweise die Werte von Radikalen, die sich während der REDIM-Integration stark ändern können [60].

Neben der Zuweisung des Gradienten eines bestimmten Gitterpunktes der Anfangsmannigfaltigkeit durch die Gleichungen 4.23 oder 4.24 kann die Gradientenabschätzung ξ zwischen den Gitterpunkten von \mathcal{M}_{REDIM} linear interpoliert werden (vgl. Abb. 4.3) [69]. Dabei wird zuerst mit Hilfe von Gleichung 4.23 oder 4.24 der zu $\psi(\theta^*)$ nächstliegende Punkt $\psi_a(\tilde{\theta}^*)$ auf \mathcal{M}_a identifiziert. Daraufhin wird mit Hilfe von Zentral-, Vorwärts- oder Rückwärtsdifferenzen die Ableitung ψ_θ^a gebildet. Durch die Projektion mit ψ_θ^{a+} wird der Verbindungsvektor zwischen $\psi(\theta^*)$ und $\psi_a(\tilde{\theta}^*)$ auf ψ_θ^a projiziert, wodurch der Parametervektor $\Delta\tilde{\theta}$ an der Stelle $\tilde{\theta}^*$ bestimmt wird. Anschließend kann die Abschätzung ξ an der Stelle $\tilde{\theta}^* + \Delta\tilde{\theta}$ berechnet werden durch [69]

$$\xi(\theta^*) = \xi^a(\tilde{\theta}^*) + \Delta\tilde{\theta} \cdot \frac{\partial(\xi^a(\tilde{\theta}^*))}{\partial\tilde{\theta}}. \quad (4.25)$$

Dieses Vorgehen weist den Vorteil auf, dass die Dimensionen von \mathcal{M}_{REDIM} und \mathcal{M}_a nicht übereinstimmen müssen.

Prinzipiell hängt die Verwendung von Gleichung 4.23, 4.24 oder 4.25 allerdings vom Anwendungsfall ab.

Wichtig zu erwähnen ist, dass die Sensitivität der REDIM in Bezug auf χ in starkem Maße von der Dimension der REDIM abhängt [14]. Dies bedeutet, dass die Gradientenabschätzung mit zunehmender Dimension weniger genau sein muss um gute Ergebnisse in reduzierten Rechnungen zu erzielen. Auf diese Weise können REDIMs mit nur sehr wenigen Vorkenntnissen bezüglich

der Gradienten erstellt werden. Allerdings nimmt der Aufwand zur Erstellung der REDIM mit ansteigender Dimension zu.

4.3 Randbedingungen der REDIM

Die Ränder $\partial\mathcal{M}$ der REDIM $\mathcal{M}_{\text{REDIM}}$ bilden die Begrenzung der Mannigfaltigkeit im Zustandsraum, deren Dimension stets um mindestens eins geringer als die Dimension der REDIM ist. Wie im physikalischen Raum auch, müssen für die Ränder des Rechengebietes bestimmte Randbedingungen formuliert werden.

Bei der Beschreibung der Randbedingungen der REDIM muss nach der Art der Ränder der REDIM unterschieden werden: Es gibt Zustände, welche sowohl im physikalischen Raum als auch im Zustandsraum am Rand des Rechengebiets liegen. Werden bei diesen Rändern im physikalischen Raum Dirichlet-Randbedingungen angewendet, so müssen an den im Zustandsraum auf der REDIM korrespondierenden Gitterpunkten $\boldsymbol{\theta}^\partial$ auch Dirichlet-Randbedingungen angewendet werden, welche durch die Anfangsmannigfaltigkeit \mathcal{M}^a gegeben ist durch

$$\boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{\theta} = \boldsymbol{\theta}^\partial) = \boldsymbol{\psi}^a. \quad (4.26)$$

Diese Randbedingung kann nicht nur für physikalische Ränder der REDIM angewendet werden. Wenn die zwischen den physikalischen Rändern stattfindende Systemdynamik $\boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{x}, t)$ die Ränder der Anfangsmannigfaltigkeit nicht überschreitet und die REDIM die Systemdynamik komplett abdeckt, so kann sie auch für nicht physikalische Ränder der REDIM eingesetzt werden. Dies ist die einfachste Randbedingung, welche in einer Vielzahl von Arbeiten angewendet wurde (z.B. [16, 88–90]). Allerdings kann diese Randbedingung nur genutzt werden, sofern die Lösung der REDIM nicht stark von den implementierten Randbedingungen abhängt, da sich die Ränder während der REDIM-Integration nicht ändern können.

Werden im physikalischen Raum ein Spezialfall der von-Neumann Randbedingungen angewendet, bei dem alle örtlichen Änderungen in normale Richtung zum physikalischen Rechengebiet verschwinden, wird dies durch Vorgabe der Gradientenabschätzung in der REDIM-Integration berücksichtigt. Handelt es sich beispielsweise um eindimensionale Flammenprofile, ergibt sich für den nulldimensionalen Rand r_R des Rechengebietes im physikalischen Raum

$$\boldsymbol{\xi}(r = r_R) = 0. \quad (4.27)$$

Da die Gradientenabschätzung des Zustandsvektors am Randpunkt verschwindet, muss auch die Gradientenabschätzung der generalisierten Koordinaten an den korrespondierenden Randpunkten der REDIM verschwinden und es ergibt sich

$$\boldsymbol{\chi}^\partial = 0. \quad (4.28)$$

Durch diesen Zusammenhang hängt die Form und Lage der REDIM in diesem Gebiet nur noch von dem projizierten Quellterm ab und es ergibt sich die Gleichung

$$\frac{\partial \boldsymbol{\psi}^\partial}{\partial t} = (\mathbf{I} - \boldsymbol{\psi}_\theta \boldsymbol{\psi}_\theta^+) \{ \mathbf{F} \}. \quad (4.29)$$

Neben Dirichlet und von-Neumann-Randbedingungen gibt es im physikalischen Raum unter anderem Randbedingungen, welche heterogene Wandreaktionen berücksichtigen. Die Überführung dieser Randbedingungen in die REDIM-Methode wird in Kapitel 5.4 erläutert, in welchem REDIMs für FWI behandelt werden.

Für Zustände, die auf der REDIM, nicht aber im physikalischen Raum Ränder bilden, kann eine Randbedingung formuliert und genutzt werden, welche aus einer geometrischen Überlegung hervorgeht. Gegeben sei eine invariante Mannigfaltigkeit, welche die zwischen den physikalischen Rändern stattfindende Systemdynamik komplett abdeckt und die Profile die Ränder der REDIM nicht überschreiten. In diesem Fall müssen die Gradienten, welche immer tangential zu den Flammenprofilen verlaufen, am Rand der REDIM ebenso tangential zur Mannigfaltigkeit sein [69]. Dieser Zusammenhang wird mit Hilfe der Abbildungen 4.4a und 4.4b erläutert: Alle Profile, die in einem Punkt $\boldsymbol{\psi}^\partial \in \partial \mathcal{M}$ am Rand der Mannigfaltigkeit verlaufen, die nicht in $\boldsymbol{\psi}^\partial$ starten oder enden, verlaufen entlang, also tangential zu $\partial \mathcal{M}$. Da die räumlichen Gradienten $\text{grad} \boldsymbol{\psi}$ immer entlang der Flammenprofile verlaufen, verlaufen die Gradienten am Rand der REDIM tangential zu dieser. Diese Annahme kann ausgenutzt werden, um eine Randbedingung zu formulieren [69]. Für diese Randbedingung wird eine neue Basis bestehend aus $\boldsymbol{\psi}_\beta$ und $\boldsymbol{\psi}_\eta$ gebildet, wobei $\boldsymbol{\psi}_\beta \perp \boldsymbol{\psi}_\eta$. Hier ist $\boldsymbol{\psi}_\beta$ die Basis des Tangentialraums $\mathcal{T}_{\partial \mathcal{M}}$ und $\boldsymbol{\psi}_\eta$ der nach außen zeigender Normalenvektor zum Rand $\partial \mathcal{M}$.

Für den Fall, dass die Mannigfaltigkeit \mathcal{M} invariant ist und der Gradient tangential zum Rand verläuft, so verschwindet der Anteil von $\text{grad}(\boldsymbol{\psi})|_{\boldsymbol{\psi}^\partial}$ in Richtung $\boldsymbol{\psi}_\eta$. Aus diesem Grund wird die Gradientenabschätzung auf den tangentialen Unterraum des Randes der REDIM projiziert und die modifizierte Abschätzung ergibt sich zu

$$\tilde{\boldsymbol{\xi}}(\boldsymbol{\theta}^\partial) = \boldsymbol{\psi}_\beta \boldsymbol{\psi}_\beta^+ \boldsymbol{\xi}(\boldsymbol{\theta}^\partial). \quad (4.30)$$

Die für die Integration der REDIM benötigte Gradientenabschätzung $\tilde{\chi}$, welche den Gradienten $\text{grad}\beta$ der neuen Basis repräsentiert, ergibt sich zu

$$\tilde{\chi} = \psi_{\beta}^{+} \tilde{\xi}(\theta^{\partial}) \quad (4.31)$$

und der Transportterm \mathbf{T} wird am Rand mit

$$\mathbf{T} = (\mathbf{D}\psi_{\beta}\tilde{\chi})_{\beta}\tilde{\chi} \quad (4.32)$$

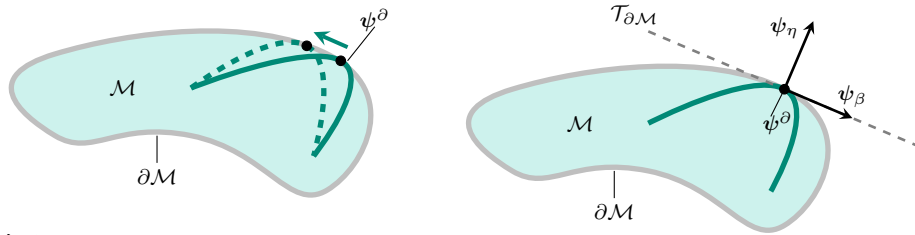
gelöst.

Durch die Projektion des räumlichen Gradienten des Zustandsvektors auf den tangentialen Unterraum des Randes der REDIM mit der Dimension m ergibt sich für den Transportterm die Dimension $m - 1$ [69].

Mit Hilfe dieser Randbedingung ist es außerdem möglich, die REDIM Domäne durch Expansion zu erweitern. Dies ist beispielsweise nötig, wenn die zwischen den physikalischen Rändern stattfindende Systemdynamik durch eine REDIM nicht komplett abdeckt ist und die Profile die Ränder der REDIM aus diesem Grund überschreiten könnten. Das Vektorfeld, bestehend aus chemischem Quellterm und Diffusionsterm, zeigt bei einer invarianten REDIM ins Innere der REDIM, da die Systemdynamik die Ränder der REDIM nicht überschreiten darf. Aus diesem Grund kann die Bedingung

$$\psi_{\eta}^{+} \left(\mathbf{F}(\psi^{\partial}) + \frac{1}{\rho} (\mathbf{D}\psi_{\theta}\chi)_{\theta}\chi \right) \leq 0 \quad (4.33)$$

für die invariante Mannigfaltigkeit formuliert werden. Alternativ kann auch eine strengere Bedingung formuliert werden, bei welcher nicht das aus Quellterm



(a) Schematische Darstellung zweier Profile, welche bei einer invarianten Mannigfaltigkeit bei Erreichen des Randes am Punkt ψ^{∂} tangential zum Rand $\partial\mathcal{M}$ der Mannigfaltigkeit verlaufen.

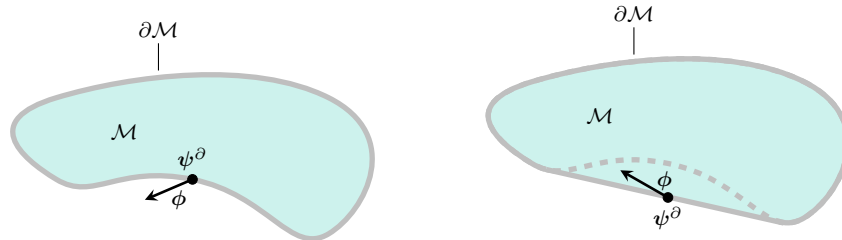
(b) Schematische Darstellung zur Veranschaulichung der neu aufgespannten Basis am Punkt ψ^{∂} des Randes $\partial\mathcal{M}$ der Mannigfaltigkeit.

Abbildung 4.4: Schematische Darstellungen zum besseren Verständnis der zum Rand der Mannigfaltigkeit tangential verlaufenden Gradienten und der lokal neu aufgespannten Basis $\psi_{\beta} \perp \psi_{\eta}$.

und Diffusionsterm resultierende Vektorfeld, sondern jeweils die einzelnen Vektorfelder dieser beiden ins Innere der REDIM zeigen müssen (siehe [69]). Mit Hilfe von Gleichung 4.33 kann die Evolutionsgleichung formuliert werden, welche die Expansion des Anfangsgitters an den Randpunkten zulässt, sofern Gleichung 4.33 nicht erfüllt ist [69]:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = (\psi_\eta \psi_\eta^+) \left(\mathbf{F}(\psi^\partial) + \frac{1}{\rho} (\mathbf{D}\psi_\theta \boldsymbol{\chi})_\theta \boldsymbol{\chi} \right). \quad (4.34)$$

Die Expansion erfolgt tangential zur REDIM, da der Projektionsoperator $(\psi_\eta \psi_\eta^+)$ das Vektorfeld orthogonal auf den nach außen zeigenden Vektor ψ_η projiziert, welcher in tangentialer Richtung zur Mannigfaltigkeit liegt. Um eine invariante Mannigfaltigkeit zu erhalten, wird Gleichung 4.34 angewendet, bis Bedingung 4.33 überall auf dem Rand der REDIM erfüllt ist [69]. Abbildung 4.5 zeigt diese Vorgehensweise schematisch. Das Vektorfeld ϕ des illustrierten Randpunktes ψ^∂ zeigt in Abbildung 4.5a nicht ins Innere der REDIM, sodass Gleichung 4.33 nicht erfüllt ist. Nach Anwendung von Gleichung 4.34 erweitert sich die REDIM Domain. Das aus chemischer Kinetik und Diffusionsterm bestehende Vektorfeld ϕ wird für die neuen Zustände erneut berechnet und die REDIM Domain wird gegebenenfalls weiter expandiert. Dieses Vorgehen wird wiederholt, bis das Vektorfeld ϕ am gesamten Rand $\partial \mathcal{M}$ ins Innere der REDIM zeigt. Dies bedeutet, dass die Zustände die REDIM während der reduzierten Rechnung nicht verlassen können.



(a) Das Vektorfeld ϕ am Randpunkt ψ^∂ zeigt nicht in das Innere der Mannigfaltigkeit, sodass die reduzierte Systemdynamik die Mannigfaltigkeit an dieser Stelle verlassen könnte.

(b) Nach der Expansion zeigt das Vektorfeld ϕ am Randpunkt ψ^∂ in das Innere der Mannigfaltigkeit, sodass die reduzierte Systemdynamik die Mannigfaltigkeit an dieser Stelle nicht verlassen kann.

Abbildung 4.5: Schematische Darstellung zur Veranschaulichung von Bedingung 4.33. Die Bedingung ist in der linken Darstellung nicht erfüllt wohingegen sie in der rechten Abbildung erfüllt ist.

4.4 Anfangslösung der REDIM

Um die REDIM-Gleichung 4.13 zu lösen, muss neben der Gradientenabschätzung und den Randbedingungen eine Anfangsmannigfaltigkeit \mathcal{M}_a bereitgestellt werden. Das in diskreter Form vorliegende Anfangsgitter bildet die Anfangslösung der partiellen Differentialgleichung 4.13. Neben den Zuständen ψ_a der Anfangslösung wird außerdem an den diskreten Gitterpunkten auch die örtliche Gradientenabschätzung ξ des Zustandsvektors gespeichert, mit welcher die Gradientenabschätzung χ berechnet wird.

Je nach Anwendungsfall der REDIM muss der Erstellung des Anfangsgitters unterschiedlich viel Aufmerksamkeit zugewendet werden da die Anfangsmannigfaltigkeit unterschiedlich viele Informationen enthalten müssen. Allerdings sollten im Anfangsgitter der REDIM die physikalischen Ränder bereits Teil der Mannigfaltigkeit sein, da eine Expansion, also eine Erweiterung der REDIM Domain, nur an nicht physikalischen Rändern erfolgen kann. Dies resultiert aus der Tatsache, dass die Bedingung 4.33 unter der Annahme formuliert wurde, dass die Gradienten der detaillierten Rechnungen immer tangential zum Rand der REDIM verlaufen. An den Rändern der REDIM, deren Zustände auch Rändern im physikalischen Raum entsprechen, ist dies aber nicht der Fall.

Für die Anfangslösung der REDIM kann beispielsweise eine über die Parametrisierungsvariable lineare Interpolation aus verbranntem und unverbranntem Gemisch, welche die Ränder der eindimensionalen REDIM darstellen, herangezogen werden [70]. Des Weiteren kann das Anfangsgitter auch aus anderen mannigfaltigkeitsbasierten reduzierten kinetischen Modellen erstellt werden, wie der ILDM [14].

Zudem können Anfangslösungen mit Hilfe von detaillierten Flammenprofilen oder Flammenrechnungen erstellt werden. In diesem Fall werden Ergebnisse aus detaillierten Rechnungen zusammengefasst und anschließend gemäß einer vorgegebenen Parametrisierung auf ein strukturiertes Gitter interpoliert. Dies bringt den Vorteil mit sich, dass das Anfangsgitter nahe an der REDIM liegt, wodurch sich eine sehr schnelle Konvergenz einstellt. Hier muss beachtet werden, dass eine eindeutige Parametrisierung vorliegt. Dies bedeutet, dass sich die detaillierten Profile nicht überschneiden, da sonst kein eindeutiges Anfangsgitter erstellt werden kann. Um diese Überschneidungen zu vermeiden, können auch Linearkombinationen des Zustandsvektors zur Parametrisierung herangezogen werden. Der Vektor der Parametrisierungsvariablen Γ kann nach

$$\Gamma = C\psi \quad (4.35)$$

berechnet werden, wobei \mathbf{C} die $(m \times n)$ -dimensionale Parametrisierungsmatrix darstellt, welche mit dem Zustandsvektor $\boldsymbol{\psi}$ multipliziert wird. Die genaue Festlegung der Parametrisierungsmatrix hängt jedoch unter anderem vom Kraftstoff, dem Transportmodell und der Konfiguration ab.

Für einen Zustandsvektor

$$\boldsymbol{\psi} = \left(h, p, \frac{w_{\text{CO}_2}}{M_{\text{CO}_2}}, \frac{w_{\text{H}_2\text{O}}}{M_{\text{H}_2\text{O}}}, \dots \right) \quad (4.36)$$

und die Parametrisierungsmatrix

$$\mathbf{C} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix} \quad (4.37)$$

ergeben sich die Parametrisierungsvariablen beispielsweise zu

$$\Gamma_1 = h, \quad (4.38)$$

$$\Gamma_2 = \frac{w_{\text{CO}_2}}{M_{\text{CO}_2}} + \frac{w_{\text{H}_2\text{O}}}{M_{\text{H}_2\text{O}}}. \quad (4.39)$$

4.5 Numerische Lösung der REDIM-Gleichung

Die REDIM-Gleichung 4.13 ist ein n -dimensionales partielles Differentialgleichungssystem, welches bis zur stationären Lösung berechnet wird. Um diese Berechnung durchzuführen, wird die Gleichung sowohl im Parameterbereich als auch zeitlich diskretisiert. Die Diskretisierung im Parameterbereich erfolgt dabei durch die Bereitstellung eines Anfangsgitters an dessen Punkten die Zustände $\boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{\theta})$ in diskreter Form vorliegen (siehe Kapitel 4.4). Des Weiteren werden die in der REDIM-Gleichung vorkommenden Differenzenapproximationen durch klassische Finite Differenzen Verfahren [28, 48, 68] auf dem diskreten Gitter berechnet. So wird beispielsweise $\boldsymbol{\psi}_{\boldsymbol{\theta}}$ an jedem Gitterpunkt im Inneren der REDIM mit Hilfe von Zentraldifferenzen durch

$$\boldsymbol{\psi}_{\boldsymbol{\theta}_i} = \frac{1}{2} \left[\boldsymbol{\psi} \begin{pmatrix} \theta_1 \\ \vdots \\ \theta_i + 1 \\ \vdots \\ \theta_m \end{pmatrix} - \boldsymbol{\psi} \begin{pmatrix} \theta_1 \\ \vdots \\ \theta_i - 1 \\ \vdots \\ \theta_m \end{pmatrix} \right] \quad (4.40)$$

bestimmt. Die REDIM-Gleichung wird in generalisierten Koordinaten gelöst, welche den Gitterkoordinaten der jeweiligen Gitterpunkte entsprechen. Aus

diesem Grund ergibt sich als Abstand zwischen zwei benachbarten Gitterpunkten jeweils der Wert 1. Da bei der Zentralfdifferenz die Differenz der Werte an den diskret vorliegenden Gitterpunkten durch zwei Mal dem Abstand zwischen zwei benachbarten Gitterpunkten geteilt werden muss, resultiert dies im Faktor $\frac{1}{2}$. Für die Berechnungen der Differenzenapproximation an den Randpunkten der REDIM werden je Vorwärts- bzw. Rückwärtsdifferenzen angewendet, da in diesem Fall die Zustände $\psi(\theta_i + 1)$ bzw. $\psi(\theta_i - 1)$ nicht definiert sind.

Die Berechnung des Transportterms, welche für alle Gitterpunkte erfolgen muss, kann auf unterschiedliche Weise erfolgen. Zum einen kann die Kettenregel angewendet werden, wodurch der Transportterm in zwei Teile zerlegt werden kann und sich ergibt zu

$$(\mathbf{D}\psi_\theta\chi)_\theta\chi = \mathbf{D}\psi_\theta\chi_\theta\chi + \chi \circ (\mathbf{D}\psi_\theta)_\theta \circ \chi \quad (4.41)$$

wobei gilt

$$(\mathbf{D}\psi_\theta\chi_\theta\chi)_i = D_{i,k} \frac{\partial\psi_k}{\partial\theta_l} \frac{\partial\chi_{lm}}{\partial\theta_j} \chi_{jm}, \quad (4.42)$$

$$(\chi \circ (\mathbf{D}\psi_\theta)_\theta \circ \chi)_i = \frac{\partial D_{ik}}{\partial\theta_l} \frac{\partial\psi_k}{\partial\theta_l} \chi_{kj} \chi_{lj}. \quad (4.43)$$

Im Falle gleicher Diffusivitäten und $Le = 1$ verschwindet der Ausdruck $\mathbf{D}\psi_\theta\chi_\theta\chi$, wodurch die REDIM-Gleichung vereinfacht wird. Gleichung 4.41 kann an den Randpunkten der REDIM in die Richtung, welche nicht entlang des Randes verläuft, nicht gelöst werden, da die Differenzenapproximationen (z.B. die zweite Ableitung $(\mathbf{D}\psi_\theta)_\theta$) mangels diskreter Punkte, welche außerhalb des Randes liegen würden, hier nicht berechnet werden können. Für diese Fälle kann der Diffusionsterm auch in der Form

$$(\mathbf{D}\psi_\theta\text{grad}\theta)_\theta \text{grad}\theta \quad (4.44)$$

direkt gelöst werden, wobei hier nur Vorwärts- bzw. Rückwärtsdifferenzen zum Einsatz kommen.

Zur zeitlichen Diskretisierung der REDIM-Gleichung und somit zur Lösung des parabolischen Gleichungssystems bietet sich prinzipiell ein voll-implizites Lösungsverfahren an, da es sich durch den chemischen Quellterm um ein sehr steifes System handelt und die Wahl der Zeitschrittweite bei expliziten Methoden sehr beschränkt ist [14]. Problematisch hierbei ist jedoch, dass sehr aufwändige Methoden benötigt würden um sehr große Matrizen zu zerlegen. Aus diesem Grund wird für die Lösung der REDIM-Gleichung ein

semi-implizites Verfahren verwendet, welches den chemischen Quellterm semi-implizit und den Diffusionsterm explizit behandelt [14]. Dieses semi-implizites Euler Verfahren erster Ordnung ist gegeben durch

$$\boldsymbol{\psi}^{i+1} - \boldsymbol{\psi}^i = \Delta\tau \mathbf{P}(\boldsymbol{\psi}^i)(\mathbf{F}(\boldsymbol{\psi}^i) + \mathbf{F}_\psi(\boldsymbol{\psi}^i)(\boldsymbol{\psi}^{i+1} - \boldsymbol{\psi}^i) + \mathbf{T}(\boldsymbol{\psi}^i)), \quad (4.45)$$

wobei $\boldsymbol{\psi}^{i+1}$ und $\boldsymbol{\psi}^i$ die Zustandsvektoren des aktuellen Zeitpunktes τ bzw. des nachfolgenden Zeitpunkts $\tau + \Delta\tau$ darstellt, $\Delta\tau$ die Zeitschrittweite ist, \mathbf{F}_ψ die Jacobi-Matrix des chemischen Quellterms bezeichnet und $\mathbf{T}(\boldsymbol{\psi}^i) = (\mathbf{D}\boldsymbol{\psi}_\theta \boldsymbol{\chi})_\theta \boldsymbol{\chi}$ der Transportvektor ist.

Gleichung 4.45 kann anschließend nach dem Zustandsvektor des nächstmöglichen Zeitpunkts umgeformt werden und ergibt sich zu

$$\boldsymbol{\psi}^{i+1} = \boldsymbol{\psi}^i + \Delta\tau(\mathbf{I} - \Delta\tau \mathbf{P}(\boldsymbol{\psi}^i) \mathbf{F}_\psi(\boldsymbol{\psi}^i))^{-1} \mathbf{P}(\mathbf{F}(\boldsymbol{\psi}^i) + \mathbf{T}(\boldsymbol{\psi}^i)). \quad (4.46)$$

Gleichung 4.46 wird bis zur Stationarität gelöst, wobei beachtet werden muss, dass die maximale Zeitschrittweite begrenzt ist. Wird die Zeitschrittweite zu groß gewählt, kann es zu Instabilitäten im Integrationsprozess kommen [19]. Die Wahl der maximalen Zeitschrittweite ist somit abhängig vom Anwendungsfall.

4.6 Tabellierung der REDIM

Nachdem die stationäre Lösung von Gleichung 4.13 mit Hilfe der Gleichung 4.46 gefunden und somit die REDIM erstellt wurde, werden die für die reduzierten Rechnungen benötigten Größen $\boldsymbol{\psi}_\theta^+$, $\boldsymbol{\psi}_\theta^+ \mathbf{F}$ sowie $\mathbf{D}\boldsymbol{\psi}_\theta$ an den jeweiligen Gitterpunkten tabelliert. Außerdem enthält die Tabelle die Zustände $\boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{\theta})$ an den Gitterpunkten der REDIM. Diese Informationen können genutzt werden, um zeiteffiziente Rechnungen mit reduzierter Kinetik durchzuführen. Auf die konkrete Anwendung und Implementierung der REDIM wird in Kapitel 6 eingegangen.

5 REDIM für Flamme-Wand-Interaktionen

Die vorangehenden Kapitel erläuterten die detaillierte Lösung der Berechnung von FWI sowie die Grundlagen der REDIM-Methode. In diesem Kapitel wird auf die konkrete Erstellung und Implementierung unterschiedlicher REDIMs für FWI eingegangen, wobei sich die Mannigfaltigkeiten je nach Anwendungsfall und Detaillierungsgrad unterscheiden. Die Methodik wird in diesem Kapitel für das Methan/Luft System demonstriert, wobei der GRI 3.0 Mechanismus [85] mit 53 Spezies und 325 Reaktionen für die Modellierung der chemischen Kinetik genutzt wird.

5.1 Modellierung des Wärmeverlusts an die Wand

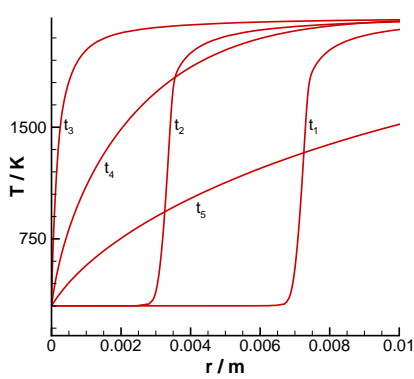
Ziel bei der Erstellung von reduzierten kinetischen Modellen ist neben der Reduktion der Rechenzeit die möglichst exakte Reproduktion der Simulationsergebnisse mit detaillierter Chemie. Um dies zu gewährleisten, muss das reduzierte Modell alle für den jeweiligen Anwendungsfall relevanten thermokinetischen Zustände enthalten. Zwar ist eine automatische Expansion bzw. Erweiterung der REDIM-Domain möglich (siehe Kapitel 4.3), allerdings gilt dies nur für Ränder der REDIM, welche nicht Rändern im physikalischen Raum zugeordnet werden können. Wie weiter unten in diesem Kapitel ersichtlich wird, kann der Rand des Rechengebiets im physikalischen Raum, welcher die Wand modelliert, Rändern der REDIM zugeordnet werden. Aus diesem Grund muss das Anfangsgitter, das zur Erstellung der REDIM für FWI genutzt wird, bereits alle Zustände enthalten, die während der Verlöschung eingenommen werden. Des Weiteren muss die Gradientenabschätzung, welche für die Erstellung der REDIM herangezogen wird, den Wärmeverlust an die Wand wiedergeben. In diesem Unterkapitel wird auf die Erstellung des Anfangsgitters sowie die Bereitstellung der Gradienten zur Berücksichtigung des Wärmeverlustes eingegangen.

Anders als bei Flammen fernab der Wand kommt es bei FWI mit kalten Wänden zu einer Wärmeabgabe an die Wand. Dies wird mit Hilfe einer Dirichlet-Randbedingung für die Temperatur modelliert (vgl. Kapitel 3.3).

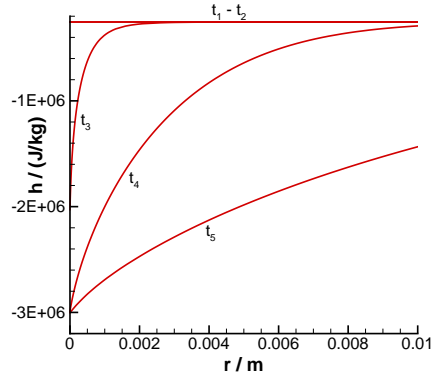
Der zeitliche Temperaturverlauf im Ortsraum, der sich für das vereinfachte Transportmodell mit $Le = 1$ für das HOQ Modellsystem einer stöchiometrischen, vorgemischten Flamme ergibt, ist in Abb. 5.1a dargestellt, wobei sich die Wand bei $r = 0$ m befindet. Zu den Zeitpunkten t_1 und $t_2 > t_1$ läuft die flache, vorgemischte Flamme auf die Wand zu. Bei Erreichen der Wand kommt es zu einer Wärmeabgabe an die Wand woraufhin die Flamme verlöscht. Durch die Wärmeabgabe nimmt die Energie im System ab und die Enthalpie des Gases an der Wand sinkt (vgl. Abb. 5.1b zu den Zeitpunkten $t_3 < t_4 < t_5$). Die Wärmeleitung sorgt für die Abnahme der Temperatur des Gases und sowohl die Temperatur als auch die spezifische Enthalpie des Systems streben einem über das Rechengebiet konstanten Wert, dem chemischen Gleichgewicht (GGW), zu.

Wird dieser Prozess der Verlöschung im Zustandsraum betrachtet, so bilden die Profile eine Fläche. Der durch die spezifische Molzahl von CO_2 und die spezifische Enthalpie h aufgespannt Zustandsraum eignet sich für diese Betrachtung besonders, da CO_2 den Fortschritt der chemischen Reaktion und die spezifische Enthalpie den Fortschritt der Wärmeabgabe an die Wand darstellt. Abbildung 5.1c zeigt die Profile während der Verlöschung in dieser Projektion. Zu Zeitpunkten der Rechnung, bei denen die Flamme noch nicht durch die Wand beeinflusst wird, liegen die Profile übereinander (siehe Abb. 5.1c für die Zeitpunkte t_1 und t_2). Das unverbrannte Gemisch ($\text{CO}_2 \approx 0$) befindet sich im Zustandsraum am unteren Ende dieser Profile, das verbrannte Gemisch am oberen Ende und die Flammenfront befindet sich zwischen diesen Regionen, entlang der Profile. Das System hat noch keinerlei Wärme an die Wand abgegeben, daher ist die spezifische Enthalpie für die Annahme gleicher Diffusivitäten konstant. Erreicht die Flamme die Wand, nimmt die spezifische Enthalpie, ausgehend vom Gasgemisch an der Wand, über den zeitlichen Verlauf ab, wobei gleichzeitig durch die chemische Reaktion CO_2 gebildet wird (vgl. Profile zum Zeitpunkt t_3). Ist das komplette Gemisch verbrannt, kühlt das Gas ab bis sich schließlich alle Zustände im Rechengebiet im chemischen Gleichgewicht befinden.

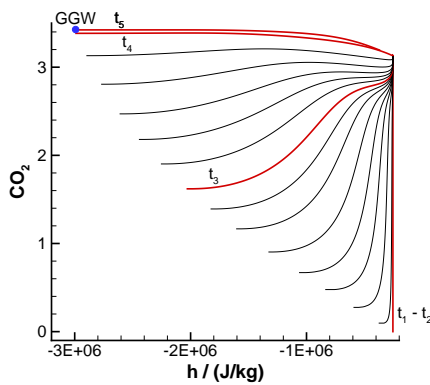
Um eine REDIM für FWI zu erstellen, die den Wandwärmeverlust korrekt beschreibt, wird das Anfangsgitter aus detaillierten Rechnungen des jeweiligen Modellsystems erstellt. Dies hat zur Folge, dass automatisch alle Zustände, welche während der Verlöschung eingenommen werden, in der REDIM berücksichtigt werden. CO_2 und die spezifische Enthalpie h können für die Parametrisierung des Anfangsgitters der REDIM für FWI mit vereinfachtem



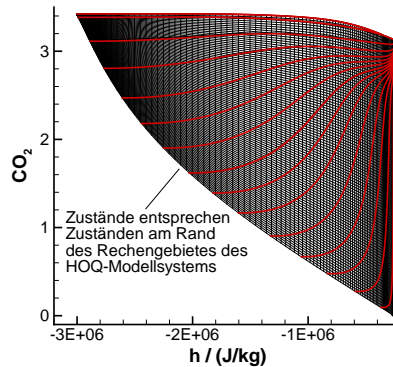
(a) Temperatur T (in K) als Funktion des Ortes (in m) zu verschiedenen Zeiten.



(b) Spezifischen Enthalpie (in $\frac{J}{kg}$) als Funktion des Ortes (in m) zu verschiedenen Zeiten.



(c) Spezifische Molzahl von CO_2 (in $\frac{mol}{kg}$) als Funktion der spezifischen Enthalpie h (in $\frac{J}{kg}$); dargestellt sind die Profile des HOQ-Systems.



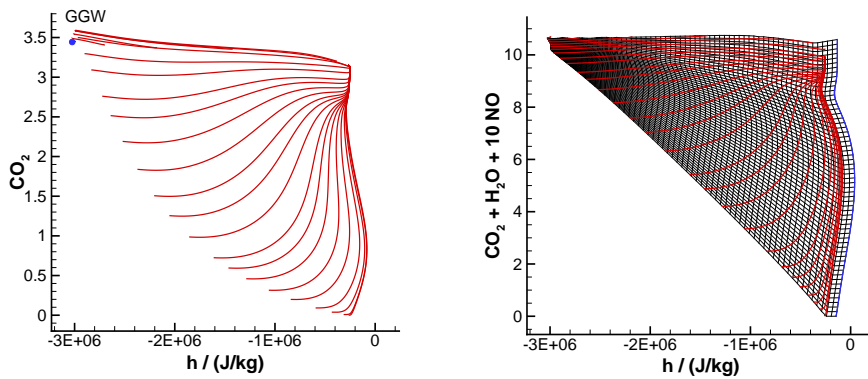
(d) Spezifische Molzahl von CO_2 (in $\frac{mol}{kg}$) als Funktion der spezifischen Enthalpie h (in $\frac{J}{kg}$); dargestellt sind die Profile des HOQ-Systems sowie die Anfangslösung der REDIM [89].

Abbildung 5.1: Zeitlicher Verlauf des HOQ-Verlöschungsprozesses (wobei $t_{i+1} > t_i$) sowie Anfangslösung der REDIM (d) [89] für die stöchiometrische, vorgemischte Methan/Luft-Verbrennung, die mit dem GRI 3.0 Mechanismus [85] und vereinfachtem Transportmodell mit $Le = 1$ berechnet wurde.

Transportmodell gewählt werden, da sie der Forderung nach eindeutigen Zuständen und nicht hinterschneidenden Profilen entspricht (vgl. Kapitel 4.4) [89]. Abbildung 5.1d zeigt das erstellte Anfangsgitter der REDIM. Es ist ersichtlich, dass die Zustände am Rand der REDIM Zuständen am Rand des Rechengebietes des HOQ-Modellsystems zugeordnet werden können, weshalb eine Expansion der REDIM in diesem Bereich nicht möglich ist. Das Anfangsgitter wurde am rechten Rand der REDIM mit Hilfe einer flachen Flamme einer höheren Temperatur des unverbrannten Gases erweitert (blau dargestellt in Abb. 5.1d) [89]. Auf diese Weise wird sichergestellt, dass die Lösung der reduzierten Rechnung nicht auf dem Rand der REDIM erfolgen muss, sondern alle Zustände der flachen Flamme innerhalb der REDIM liegen. Es gibt allerdings auch Modellsysteme, bei welchen die oben genannte Parametrisierung nicht geeignet ist. Dies zeigt sich beispielsweise bei der Verwendung des detaillierten Transportmodells mit Thermo-Diffusion im HOQ-System. Abbildung 5.2a zeigt den Verlauf der Verlöschung im Zustandsraum, welcher durch CO_2 und die spezifische Enthalpie h aufgespannt wird. Es wird ersichtlich, dass sich die Profile in der Nähe des chemischen Gleichgewichtes oben links überschneiden. Aus diesem Grund kann in diesem Bereich kein adäquates Anfangsgitter erstellt werden, da die Zustände in dieser Projektion nicht eindeutig sind. Um eine geeignete Parametrisierung zu erhalten, muss in diesem Fall auf mehrere Spezies zurückgegriffen werden und das Anfangsgitter dieses Modellsystems wird mit Hilfe der spezifischen Enthalpie h und der Linearkombination $\text{CO}_2 + \text{H}_2\text{O} + 10 \cdot \text{NO}$ parametrisiert (siehe Abb. 5.2b) [95].

Wie auch bei der Anfangslösung der REDIM muss der Wärmeverlust des Systems in der Gradientenabschätzung der REDIM berücksichtigt werden. Die Gradientenabschätzung bestimmt die Kopplung von chemischer Kinetik und Transportprozessen und muss daher so gewählt werden, dass sie die für das System relevanten Prozesse korrekt beschreibt. Aus diesem Grund müssen für die REDIM für FWI sowohl der Reaktionsfortschritt als auch der Wärmeverlust an die Wand und die jeweils resultierende Koppelung mit Diffusionsprozessen spezifiziert werden [89].

Damit der Wärmeverlust an die Wand und die daraus resultierenden Transportprozesse korrekt beschrieben werden, wird der Gradient der spezifischen Enthalpie h für die Erstellung der REDIM herangezogen (siehe Abb. 5.3). Für die Spezifikation der Kopplung aus Reaktionsfortschritt und Diffusion wird der Gradient der spezifischen Molzahl von CO_2 genutzt. Die Gradientenabschätzungen werden dabei aus detaillierten Lösungen des Modellsystems gewonnen [89, 95]. Im folgenden Kapitel soll detailliert auf die Gradientenabschätzung der REDIM für FWI eingegangen werden.



(a) Spezifische Molzahl von CO_2 (in $\frac{\text{mol}}{\text{kg}}$) als Funktion der spezifischen Enthalpie h (in $\frac{\text{J}}{\text{kg}}$); dargestellt sind die Profile des HOQ-Systems.

(b) Spezifische Molzahl von $\text{CO}_2 + \text{H}_2\text{O} + 10 \cdot \text{NO}$ (in $\frac{\text{mol}}{\text{kg}}$) als Funktion der spezifischen Enthalpie h (in $\frac{\text{J}}{\text{kg}}$); dargestellt sind die Profile des HOQ-Systems sowie das Anfangsgitter der REDIM.

Abbildung 5.2: Zeitlicher Verlauf des Verlöschungsprozesses im Zustandsraum sowie Anfangslösung der REDIM [95] für die stöchiometrische, vorge-mischte Methan/Luft-Verbrennung mit dem GRI 3.0 Mechanismus [85] und detailliertem Transportmodell mit Thermo-Diffusion.

5.2 Gradientenabschätzung für die Flamme-Wand-Interaktion homogener Gemische

Bereits im vorangegangenen Kapitel wurde erläutert, dass sich für die Bestimmung einer REDIM für FWI eines homogenen Gemisches die örtlichen Gradienten der spezifischen Enthalpie h und der spezifischen Molzahl von CO_2 zur Spezifizierung des Wärmeverlusts an die Wand und des Reaktionsfortschritts eignen. Die Werte der Gradientenabschätzung können dabei aus Beispielrechnungen mit detaillierter Chemie gewonnen werden. In dem folgenden Kapitel wird gezeigt, wie sich diese Gradienten für die unterschiedlichen Modellsysteme des HOQ- (vgl. Kapitel 3.1.1) sowie des SWQ-Systems (vgl. Kapitel 3.1.2) implementieren lassen. Diese beiden Konfigurationen verlaufen im physikalischen Raum sehr unterschiedlich: Bei der HOQ-Konfiguration findet immer ein instationär ablaufender Verlöschungsprozess statt, der aufgrund der Symmetrie eindimensional behandelt werden kann (siehe z.B. [104]). Aus diesem Grund sind in diesem Fall nur eindimensionale, räumliche Gradienten

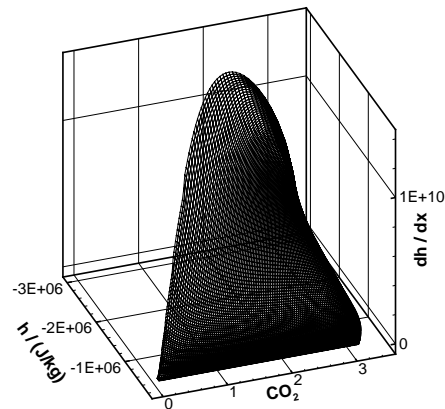


Abbildung 5.3: Gradientenabschätzung der spezifischen Enthalpie (in $\frac{\text{J}}{\text{kg m}}$) als Funktion der spezifischen Molzahl von CO_2 (in $\frac{\text{mol}}{\text{kg}}$) und der spezifischen Enthalpie h (in $\frac{\text{J}}{\text{kg}}$).

erforderlich um die Diffusionsprozesse in der REDIM zu beschreiben. Im Gegensatz dazu breitet sich in der SWQ-Konfiguration eine Flamme entlang einer Wand aus (siehe z.B. [2]), zu dessen Beschreibung ein örtlich zwei- oder dreidimensionales Modellsystem benötigt wird.

In dieser Arbeit wird neben den eindimensionalen Rechnungen des HOQ-Systems die Simulation einer stationären zweidimensionalen SWQ-Flamme untersucht, aus welcher zweidimensionale räumliche Gradienten gewonnen werden. Die verwendete Modellkonfiguration für den SWQ-Brenner ist in Abb. 5.4 dargestellt. Diese Konfiguration ist mit experimentellen Untersuchungen von Jainski et al. [50] vergleichbar: Ein stöchiometrisches Methan / Luft-Gemisch strömt aus einer Düse an einer Wand entlang mit welcher die Flamme interagiert, wobei ein stationärer Betriebspunkt untersucht wird. Die numerische Modellierung, aus deren Ergebnis eine zweidimensionale Gradientenabschätzung entnommen wird, wurde in Darmstadt in der Arbeitsgruppe von Professor Janicka von Ganter et al. durchgeführt [91].

Obwohl die Unterschiede zwischen den Konfigurationen von SWQ und HOQ im physikalischen Raum offensichtlich sind, werden während des Verlöschens in der HOQ-Flamme und der FWI der SWQ-Flamme sehr ähnliche Zustände eingenommen [93]. Dies ist in Abb. 5.5 zu sehen, in der die in den beiden Konfigurationen durchlaufenen Zustände im Zustandsraum dargestellt sind. Darüber hinaus ist in Abb. 5.5a der Massenanteil von OH für die SWQ-Konfiguration dargestellt, wodurch die Übertragung aus dem physikalischen Raum mit Hilfe der OH-Werte in Abb. 5.4 vereinfacht werden soll.

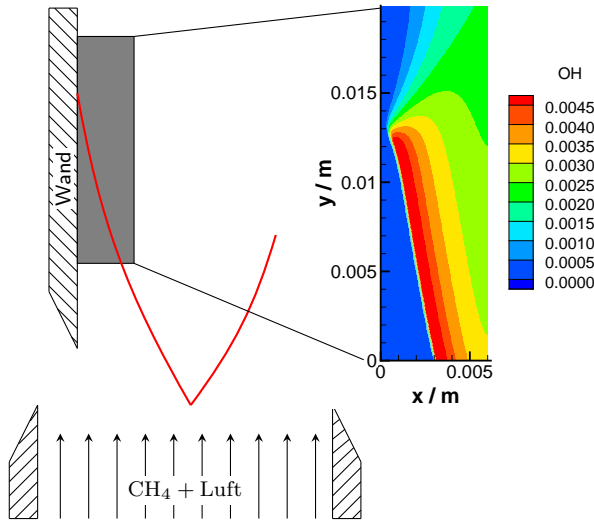
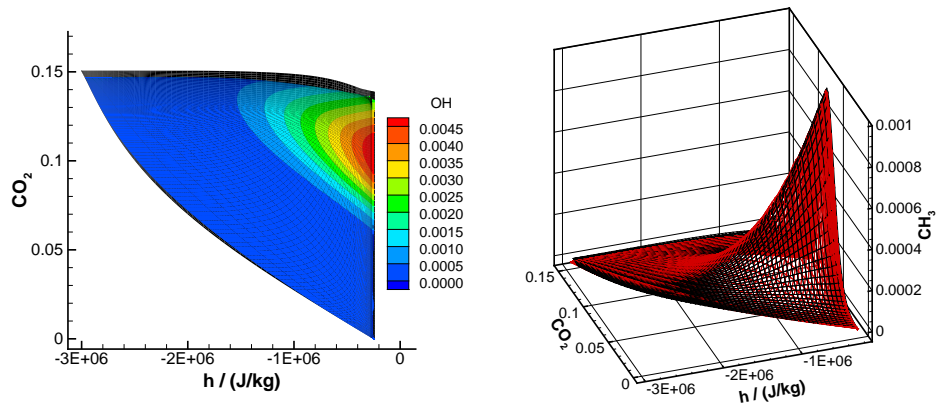


Abbildung 5.4: Schematische Darstellung des SWQ Brenners sowie Farb-Kontur des Massenbruchs von OH (in $(-)$). Die Flammenfront ist durch die rote Linie schematisch dargestellt.

Da es sich bei der SWQ-Konfiguration um einen stationären Betriebspunkt handelt, werden die Zustände in diesem Fall im gesamten zweidimensionalen Rechenggebiet gleichzeitig eingenommen wohingegen sie bei der instationären HOQ-Flamme während des Verlöschungsprozesses durchlaufen werden. Die eingenommenen Zustände der HOQ- und SWQ-Flamme ähneln sich sehr stark, wodurch sich die Frage stellt, welche Bedeutung den Transportphänomenen in den beiden Konfigurationen zukommt. Im Falle des HOQ-Brenners liegen durch die eindimensionale Konfiguration lediglich eindimensionale Gradienten vor, welche alle tangential der eindimensionalen Profile zeigen. Im Fall des SWQ-Brenners variiert die Richtung und der Betrag der räumlichen Gradienten sowohl im physikalischen Raum als auch im Zustandsraum [93]. Dies wird aus Abb. 5.6 ersichtlich, in der die räumlichen Gradienten von CO_2 und von der spezifischen Enthalpie h für den physikalischen Raum und den Zustandsraum dargestellt sind. Der Gradient der spezifischen Enthalpie ist sowohl im Zustandsraum als auch im physikalischen Raum über das gesamte Rechenggebiet in beide Richtungen negativ, wohingegen der Gradient von CO_2 in x -Richtung positiv und in y -Richtung negativ ist. Des Weiteren variiert der Quotient der Gradienten $\frac{\text{grad}_x \psi_i}{\text{grad}_y \psi_i}$ einer Zustandsvariable ψ_i in x - und



(a) Zustände der HOQ- (schwarz) und der SWQ-Konfigurationen (Farbkontur des Massenbruchs von OH in $(-)$) als Funktion des Massenbruchs von CO_2 (in $(-)$) und der spezifischen Enthalpie h (in $\frac{\text{J}}{\text{kg}}$). Die Zustände der SWQ-Konfiguration sind Teil der Zustände der HOQ-Konfiguration.

(b) Massenbruch von CH_3 (in $(-)$) als Funktion des Massenbruchs von CO_2 (in $(-)$) und der spezifischen Enthalpie h (in $\frac{\text{J}}{\text{kg}}$) für die HOQ- (schwarz) und die SWQ- (rot) Konfigurationen [93].

Abbildung 5.5: Zustände, welche während der HOQ- und SWQ-Konfiguration durchlaufen werden.

y -Richtung. Dies verdeutlicht, dass die Gradienten sowohl bezüglich ihres Betrages als auch bezüglich der Richtung sehr stark variieren [93].

Abbildung 5.7 veranschaulicht die Höhenlinien einiger Zustandsvariablen (Spezies und Enthalpie) im Ortsraum. Es werden unterschiedliche Dinge ersichtlich: Zum einen haben die Höhenlinien der Spezies CO_2 eine andere Form als die der spezifischen Enthalpie (siehe Abb. 5.7a). Dies bedeutet, dass die Vektoren der Gradienten von CO_2 und der spezifischen Enthalpie in unterschiedliche Richtungen zeigen. Außerdem wird ersichtlich, dass es Regionen im Rechengebiet gibt, an denen die Gradienten der Spezies nahezu orthogonal zu den Gradienten der Enthalpie zeigen, da sich die Höhenlinien auch nahezu orthogonal schneiden. Analog dazu zeigt Abb. 5.7b, dass es Gitterpunkte gibt, an denen sich die Richtungen der Gradienten unterschiedlicher Spezies stark unterscheiden. Dies bedeutet, dass die Gradienten aller Zustandsvariablen bezüglich ihrer Richtung und ihres Betrages streuen.

Um diese Gradienten in die REDIM zu implementieren, müssen die Gradienten modifiziert werden, damit sie unabhängig von den ursprünglichen Koordinaten werden [93].

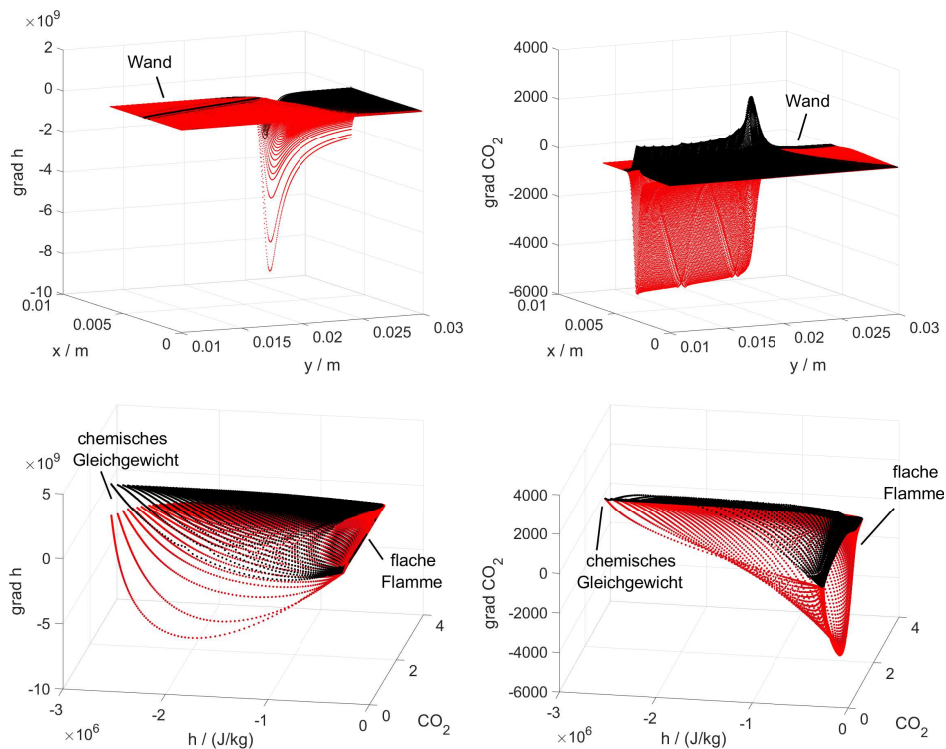
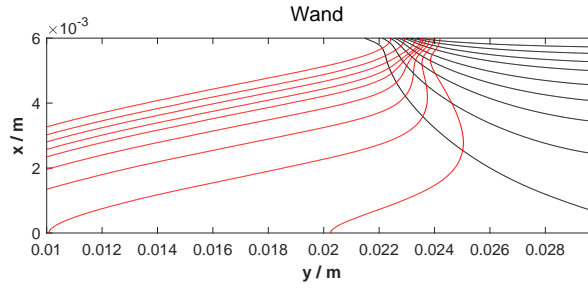


Abbildung 5.6: Komponenten der räumlichen Gradienten der spezifischen Molzahl von CO_2 (in $\frac{\text{mol}}{\text{kg m}}$) und der spezifischen Enthalpie h (in $\frac{\text{J}}{\text{kg m}}$) in x - (schwarz) und y -Richtung (rot) [93]. Dargestellt sind die Gradienten im Ortsraum in Abhängigkeit der x - und y -Koordinate (in m) sowie im Zustandsraum in Abhängigkeit der spezifischen Enthalpie h (in $\frac{\text{J}}{\text{kg}}$) und der spezifischen Molzahl von CO_2 (in $\frac{\text{mol}}{\text{kg}}$).

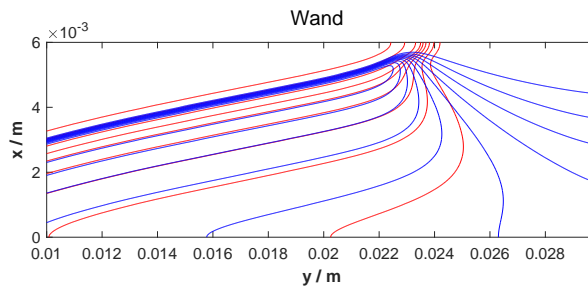
In diesem Unterkapitel wird zuerst die Einbindung eindimensionaler Gradientenabschätzungen ξ des Zustandsvektors dargelegt. Anschließend wird die Modifizierung mehrdimensionaler Gradientenabschätzungen ξ des Zustandsvektors und deren Einbindung in die REDIM erläutert.

5.2.1 Implementierung der eindimensionalen Gradientenabschätzung

Im eindimensionalen Fall des HOQ-Systems (vgl. Kapitel 3.1.1) sind die örtlichen Gradienten durch die Ableitung der Zustandsvariablen nach der eindimensionalen Ortskoordinate r ($\text{grad } h = \frac{dh}{dr}$ sowie $\text{grad } \text{CO}_2 = \frac{d\text{CO}_2}{dr}$) gegeben. Zur besseren Veranschaulichung sind der örtliche Verlauf der spezifischen Molzahl von CO_2 sowie die örtlichen Gradienten der Spezies CO_2 in



(a) Höhenlinien der spezifischen Molzahl von CO_2 (rot) und der spezifischen Enthalpie (schwarz).



(b) Höhenlinien der spezifischen Molzahl von CO_2 (rot) und der spezifischen Molzahl von OH (blau).

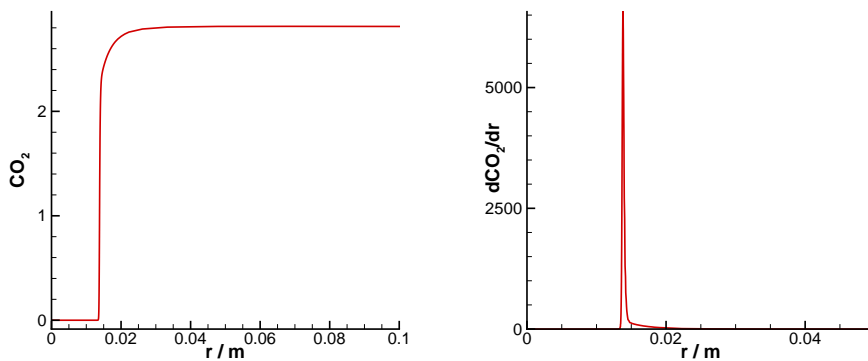
Abbildung 5.7: Höhenlinien einiger Zustandsvariablen zur Visualisierung der Streuung der zweidimensionalen Gradientenvektoren in Abhängigkeit der Ortskoordinaten x und y (in m). Die Zahlenwerte sind der besseren Übersichtlichkeit wegen nicht angegeben.

Abb. 5.8 für eine flache, auf die Wand zulaufende Flamme dargestellt. Die während der Verlöschung auftretenden Gradienten der benötigten Zustandsvariablen werden auf das Anfangsgitter der REDIM interpoliert bzw. gemittelt und können ohne prinzipiellen Probleme mit Hilfe des Zusammenhangs [14]

$$\chi^r = \psi_\theta^+ \cdot \xi^r \quad (5.1)$$

in den Gradienten der generalisierten Koordinate θ überführt und in die REDIM-Gleichung eingebunden werden. Da die örtlichen Gradienten lediglich in eine Ortsrichtung vorliegen, ergibt sich der Transportterm der REDIM-Gleichung zu [14]

$$(\mathbf{D}\psi_\theta\chi)_\theta\chi = (\mathbf{D}\psi_\theta\chi^r)_\theta\chi^r. \quad (5.2)$$



(a) Verlauf der Spezies CO_2 im physikalischen Raum.

(b) Verlauf des Gradienten der Spezies CO_2 im physikalischen Raum.

Abbildung 5.8: Spezifische Molzahl von CO_2 (in $\frac{\text{mol}}{\text{kg}}$) sowie der örtliche Gradienten der Spezies CO_2 (in $\frac{\text{mol}}{\text{kg m}}$) einer flachen Flamme in Abhängigkeit der Ortskoordinate r (in m).

Mit diesem Transportterm wird die REDIM Entwicklungsgleichung 4.13 gelöst und $\text{REDIM}_{\text{HOQ}}$ wird erstellt.

5.2.2 Implementierung der zweidimensionalen Gradientenabschätzung

Das Problem multidimensionaler Gradientenabschätzungen wurde bereits für turbulente Verbrennungsprozesse von Schießl et al. [83] untersucht, allerdings wurde hier lediglich der Einfluss der Speziesgradienten berücksichtigt. Der Gradient der Enthalpie ist sehr wichtig für die Beschreibung von FWI weshalb er für deren Modellierung einbezogen werden sollte. Für die Erstellung einer REDIM ist eine Gradientenabschätzung notwendig, welche unabhängig von den ursprünglichen räumlichen Koordinaten ist. Dies trifft für die aus der zweidimensionalen Simulation des Modellsystems gewonnenen Gradientenabschätzung nicht zu (siehe Abb. 5.6 und Abb. 5.7) [93]. Aus diesem Grund müssen die Gradienten modifiziert werden damit sie in die REDIM-Gleichung implementiert werden können. Hierzu wird analog zur Arbeit von Schießl et al. [83] eine Singulärwertzerlegung (Singular Value Decomposition - SVD) durchgeführt [93]. Um diese durchzuführen, werden die räumlichen Gradienten der $n = n_S + 2$ Zustandsvariablen in x - und y -Richtung an jedem gegebenen Punkt in der zweidimensionalen Berechnungsdomäne bestimmt. Die resultierenden

Werte werden in das Gradientenfeld $G_{i,j} = \text{grad}_i(\psi_j)$ ($i = 1, 2; j = 1, \dots, n$) eingetragen. Anschließend werden die Gradienten nach

$$G_{i,j}^* = \frac{G_{i,j}}{\sqrt{G_{1,j}^2 + G_{2,j}^2}} \quad (5.3)$$

normiert um die Richtung der lokalen Gradienten zu bestimmen [93]. Aufgrund dieser Normierung werden alle Gradienten als gleich wichtig behandelt, auch die Gradienten der Spezies welche nur in sehr geringem Anteil vorhanden sind (Minoritätenspezies). Die Gradienten dieser Spezies weisen in verschiedene Richtungen und die Wichtigkeit der korrekten Modellierung dieser Spezies ist nicht so hoch wie die der Hauptspezies. Um einen Fehler zu vermeiden, der durch die Normierung hervorgerufen wird (vgl. [91]), werden die Gradientenvektoren gefiltert: Es werden nur Einträge des Zustandsvektors berücksichtigt, deren Werte größer als das 0,1-fache des Maximalwerts der entsprechenden Zustandsvariablen im gesamten Berechnungsbereich sind [93]. Anschließend wird die eigentliche Singulärwertzerlegung durchgeführt um ein orthonormales, lokales Koordinatensystem aufzuspannen, das in Richtung der normierten Gradientenvektoren $G_{i,j}^*$ ausgerichtet ist [93]:

$$\mathbf{G}^* = \mathbf{U} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{V}. \quad (5.4)$$

Hier ist \mathbf{U} eine 2×2 -Matrix die aus den Basisvektoren \mathbf{a} und \mathbf{b} des lokalen Koordinatensystems besteht und deren Einträge orthonormal zueinander sind. $\boldsymbol{\sigma}$ ist eine $2 \times n$ -Matrix mit den Singulärwerten, die die Wichtigkeit der entsprechenden Basisvektoren \mathbf{a} und \mathbf{b} beschreiben und \mathbf{V} ist eine $n \times n$ -Matrix. Auf diese Weise wird ein orthonormales, lokales Koordinatensystem, das in Richtung des normalisierten Gradientenvektors \mathbf{G}^* zeigt, eingeführt [93].

Abbildung 5.9 zeigt die Richtungen der Basisvektoren \mathbf{a} im physikalischen Raum. Auch hier wird ersichtlich, dass die Gradienten streuen, da die Basisvektoren \mathbf{a} , welche die Hauptrichtung der Gradienten angeben, nur parallel verlaufen bis die Flamme durch die Wand verlöscht. Rechts von dieser Region variiert die Richtung der Basisvektoren, da die Flamme durch die Wand beeinflusst wird und Wärme an die Wand abgegeben wird. Durch diesen Vorgang verändert sich unter anderem das Strömungsfeld wodurch auch die Gradienten beeinflusst werden [93].

Die lokal ausgerichtete Gradientenabschätzung, welche von den ursprünglichen physikalischen Koordinaten unabhängig ist, ist nach der Durchführung der Singulärwertzerlegung durch

$$G_{i,j}^{a,b} = \sum_{k=1}^2 U_{i,k} \cdot G_{k,j} \quad (5.5)$$

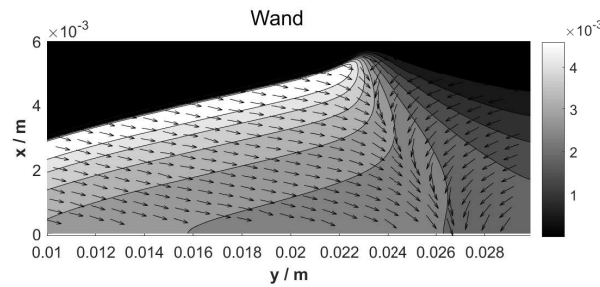


Abbildung 5.9: Kontur des Massenbruchs von OH (in (-)) und Richtungen der Basisvektoren \mathbf{a} (Pfeile) in Abhängigkeit der Ortskoordinaten x und y (in m) [93].

gegeben. Auf diese Weise wird an jedem Gitterpunkt der Haupt- und der Nebenbeitrag der Gradientenabschätzung berechnet [93].

Abbildung 5.10 zeigt die ausgerichteten räumlichen Gradienten von CO_2 und h in die Hauptrichtung \mathbf{a} (schwarz) und die Nebenrichtung \mathbf{b} (blau). Es ist zu beobachten, dass der Wert der Komponente des Gradienten von CO_2 in die Hauptrichtung bei den meisten Zuständen größer ist als die Gradienten in die Nebenrichtung. Für die Gradienten der spezifischen Enthalpie sieht dies anders aus. Hier sind die ausgerichteten Gradienten in die Nebenrichtung oftmals größer als in die Hauptrichtung. Dies bedeutet, dass der Gradient der spezifischen Enthalpie und der Gradient von CO_2 in den meisten Bereichen im Zustandsraum nahezu orthogonal zueinander verlaufen. Durch die Normierung der Gradienten vor der Singulärwertzerlegung werden alle Gradienten als gleich wichtig behandelt und haben den gleichen Einfluss auf die Richtung der Basisvektoren. Darüber hinaus unterscheiden sich die Richtungen der räumlichen Gradienten der Spezies untereinander weniger als sich die Richtung des Gradienten der Enthalpie von den Gradienten der Spezies unterscheidet. Aus diesem Grund wird die Hauptrichtung der angepassten Gradienten von den räumlichen Gradienten der Spezies dominiert, weshalb die ausgerichteten räumlichen Gradienten der Enthalpie in die Hauptrichtung unterschätzt und in die Nebenrichtung überschätzt wird [93].

Anders als in der Arbeit von Schießl et al. [83] können die Gradienten in die Nebenrichtung aus diesem Grund nicht vernachlässigt werden, da der Wärmeverlust zur Wand und der resultierende große Gradient der Enthalpie unterschätzt wird wodurch das reduzierte kinetische Modell ungenau wird [93].

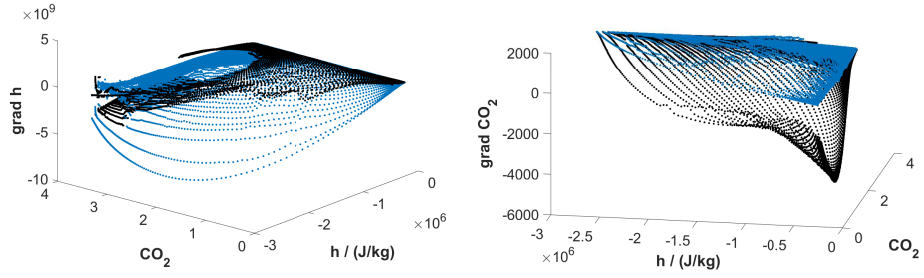


Abbildung 5.10: Komponenten der räumlichen Gradienten der spezifischen Molzahl von CO_2 (in $\frac{\text{mol}}{\text{kg m}}$) und der spezifischen Enthalpie h (in $\frac{\text{J}}{\text{kg m}}$) in \mathbf{a} - (schwarz) und \mathbf{b} -Richtung (blau) in Abhängigkeit der spezifischen Enthalpie h (in $\frac{\text{J}}{\text{kg}}$) und der spezifischen Molzahl von CO_2 (in $\frac{\text{mol}}{\text{kg}}$) [93].

Die ausgerichteten Gradientenabschätzungen in zwei Dimensionen werden mit Hilfe des Zusammenhangs

$$\chi^a = \psi_\theta^+ \cdot \xi^a \quad (5.6)$$

bzw.

$$\chi^b = \psi_\theta^+ \cdot \xi^b \quad (5.7)$$

in die Gradientenabschätzung der generalisierten Koordinate θ überführt [83, 93].

Die Basisvektoren \mathbf{a} und \mathbf{b} spannen ein orthogonales Koordinatensystem auf, daher kann der Diffusionsterm der REDIM-Evolutionsgleichung in die beiden Richtungen \mathbf{a} und \mathbf{b} separat gelöst werden und ergibt sich zu [83, 93]

$$(D\psi_\theta\chi)_\theta\chi = (D\psi_\theta\chi^a)_\theta\chi^a \quad (5.8)$$

$$+(D\psi_\theta\chi^b)_\theta\chi^b. \quad (5.9)$$

Die REDIM Entwicklungsgleichung 4.13 wird mit der so bereitgestellten Gradientenabschätzung gelöst und $\text{REDIM}_{\text{SWQ}}$ wird erstellt.

5.3 Optimale Dimension der REDIM für Flamme-Wand-Interaktionen homogener Systeme

In den vorangegangenen Unterkapiteln wurden zweidimensionale Anfangsgitter für die REDIMs für die HOQ- sowie SWQ-Konfiguration genutzt. Dies

resultierte aus der Tatsache, dass die in den jeweiligen Prozessen eingenommenen Zustände eine zweidimensionale Fläche im Zustandsraum bilden. In diesem Kapitel soll geprüft werden, ob die zweidimensionale REDIM für FWI gerechtfertigt ist. Um dies festzustellen, werden die Beiträge des Quellterms in orthogonale Richtung sowie entlang der Mannigfaltigkeit berechnet.

Ein Verbrennungssystem wird durch unterschiedliche Zeitskalen beeinflusst, die sich unter anderem aus dem Quellterm des Systems ergeben. Die lokale Systemdynamik eines homogenen Systems am Zustand ψ^0 des Zustandsraums ist durch das Vektorfeld $\mathbf{F}(\psi^0)$ gegeben. Die charakteristischen Zeitskalen der chemischen Prozesse können mit Hilfe der Eigenwertanalyse identifiziert werden. Diese Eigenwertanalyse wird mit

$$\mathbf{F}_\psi(\psi^0) = \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \psi} = \mathbf{W} \mathbf{\Lambda} \mathbf{W}^{-1} \quad (5.10)$$

durchgeführt, wobei \mathbf{W} die Eigenvektoren und $\mathbf{\Lambda}$ die Matrix der Eigenwerte der Jakobimatrix sind [16]. Die Eigenvektoren von \mathbf{F}_ψ zeigen die charakteristischen Richtungen der Systemdynamik, während ihre Eigenwerte bzw. das Reziproke der Eigenwerte den Zeitskalen entsprechen.

Aufgrund der Konstanz von Masse, Energie und Druck des homogenen Systems sind die ersten 7 Eigenwerte der Jacobi-Matrix null, wobei 5 Eigenwerte die enthaltenen Elemente (C, N, O, H, Ar) darstellen [16].

Um die Frage nach der optimalen Dimension der REDIM zu beantworten, wird die Jacobi-Matrix auf den tangentialen Unterraum $\mathbf{Z}_\parallel \mathbf{F}_\psi \tilde{\mathbf{Z}}_\parallel$ und den normalen Unterraum $\mathbf{Z}_\perp \mathbf{F}_\psi \tilde{\mathbf{Z}}_\perp$ der REDIM projiziert [16] (vgl. schematische Darstellung in Abb. 5.11). Anschließend werden die Eigenwerte der projizierten Jacobi-Matrix berechnet. Der normale Unterraum der REDIM beschreibt die Richtung der schnellen chemischen Prozesse, während sich die langsamen chemischen Prozesse, die mit physikalischen Prozessen koppeln, entlang des tangentialen Unterraums der REDIM entwickeln.

In den folgenden Unterkapiteln werden die REDIMs mit ein- bzw. zweidimensionaler Gradientenabschätzung bezüglich ihrer Eigenwerte untersucht.

5.3.1 Optimale Dimension der REDIM für Head-on Quenching Systeme

Damit geprüft werden kann, ob eine zweidimensionale REDIM für die Beschreibung des HOQ-Systems ausreicht, wird die Eigenwertanalyse 5.10 an jedem Gitterpunkt der REDIM durchgeführt, wobei die Jacobi-Matrix auf den tangentialen Unterraum $\mathbf{Z}_\parallel \mathbf{F}_\psi \tilde{\mathbf{Z}}_\parallel$ und den normalen Unterraum $\mathbf{Z}_\perp \mathbf{F}_\psi \tilde{\mathbf{Z}}_\perp$

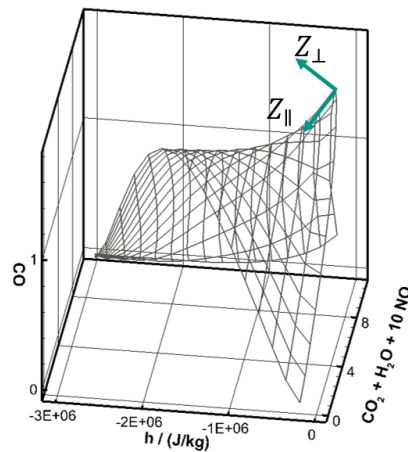


Abbildung 5.11: Schematische Darstellung des tangentialen Unterraums Z_{\parallel} und des normalen Unterraums Z_{\perp} im Zustandsraum, welcher durch die spezifische Enthalpie h (in $\frac{\text{J}}{\text{kg}}$) und die spezifische Molzahl einiger Spezies (in $\frac{\text{mol}}{\text{kg}}$) aufgespannt ist.

der REDIM projiziert wird.

Wie durch die Erhaltung von Masse, Energie und des konstanten Drucks gefordert, sind die ersten 7 Eigenwerte ($\lambda_1, \dots, \lambda_7$) der Jakobi-Matrix null.

Abbildung 5.12 zeigt exemplarisch die Realteile der Eigenwerte $\lambda_8, \lambda_9, \lambda_{10}$ und λ_{40} , wobei sie in der Reihenfolge betragsmäßig von Null aufsteigend sortiert sind. Die Eigenwerte λ_8 und λ_9 entsprechen der Jacobi-Matrix, welche auf den tangentialen Unterraum der REDIM projiziert wird wohingegen $\lambda_{10}, \dots, \lambda_{55}$ den Werten entsprechen, die auf den normalen Unterraum der REDIM projiziert wurden. Es ist zu beobachten, dass die Eigenwerte λ_8 und λ_9 entlang der REDIM teilweise positiv sind, wobei sie für $\lambda_{10}, \dots, \lambda_{55}$ alle negativ sind. Die positiven Eigenwerte veranschaulichen das instabile Verhalten der chemischen Kinetik [16], während die zunehmenden negativen Eigenwerte die relaxierten chemischen Prozesse darstellen.

Es ist zu erkennen, dass für die auf den normalen Unterraum der REDIM projizierten Eigenwerte $|\lambda_{\perp}| \geq 10000$ gilt. Die Kehrwerte dieser Eigenwerte geben die Zeitskalen der korrespondierenden Eigenvektoren an, mit denen sich das System bewegt [58]. Aus diesem Grund sind die charakteristischen Zeitskalen der schnellen, relaxierten Prozesse kleiner als 10^{-4} s wohingegen die Zeitskalen der diffusiven Prozesse, sowie der Wärmeleitung des nicht turbulenten Verbrennungsprozesses, größer als 10^{-4} s sind [101]. Die diffusiven Prozesse koppeln daher mit den Prozessen, welche durch die Eigenwerte λ_8 und λ_9 beschrieben werden.

Hiermit wird gezeigt, dass die Attraktivität der zweidimensionalen Mannigfaltigkeit gegeben ist. Dies bedeutet, dass sie stabil gegenüber kleinen Störungen ist. Die Verwendung der zweidimensionalen Mannigfaltigkeit für die HOQ Flamme ist daher gerechtfertigt.

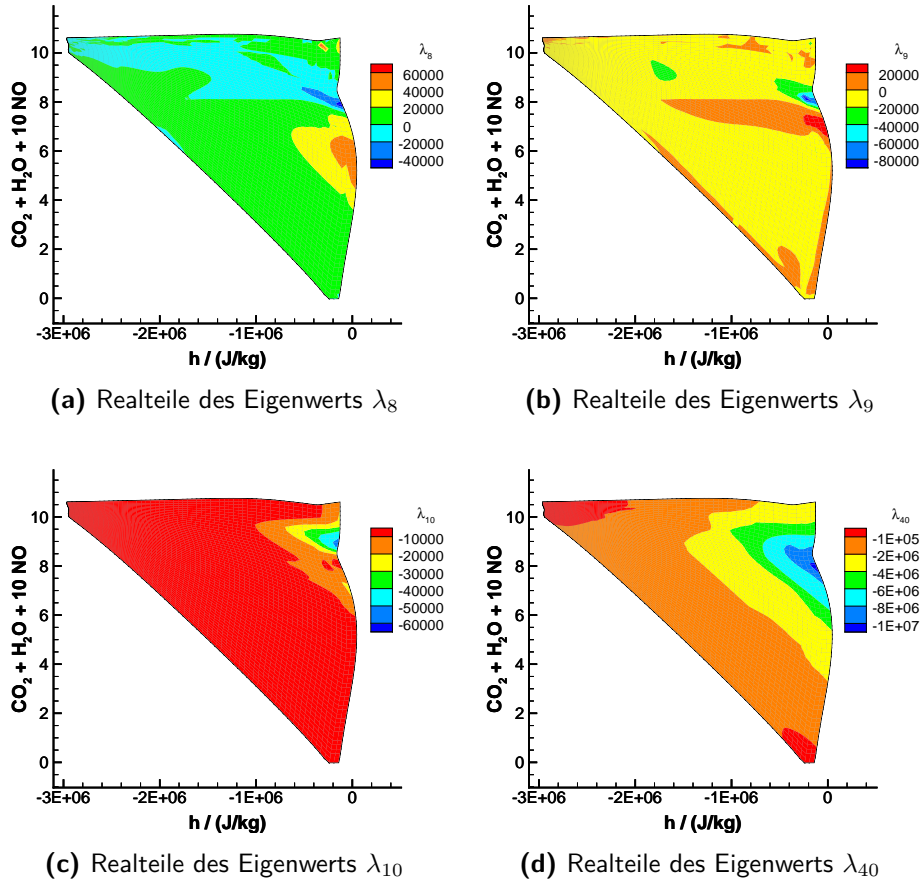


Abbildung 5.12: Realteile der Eigenwerte λ_8 , λ_9 , λ_{10} und λ_{40} der Jacobi-Matrix des chemischen Quellterms auf der zweidimensionalen REDIM der HOQ-Konfiguration in Abhängigkeit der spezifische Enthalpie h (in $\frac{\text{J}}{\text{kg}}$) und der spezifischen Molzahl von $\text{CO}_2 + \text{H}_2\text{O} + 10 \cdot \text{NO}$ (in $\frac{\text{mol}}{\text{kg}}$).

5.3.2 Optimale Dimension der REDIM für Side-Wall Quenching Systeme

Auch bei der REDIM für SWQ-Systeme wird zur Prüfung der optimalen Dimension eine Eigenwertanalyse gemäß 5.10 durchgeführt wobei die Jacobi-

Matrix auf den tangentialen Unterraum $\mathbf{Z}_{\parallel} \mathbf{F}_{\psi} \tilde{\mathbf{Z}}_{\parallel}$ und den normalen Unterraum $\mathbf{Z}_{\perp} \mathbf{F}_{\psi} \tilde{\mathbf{Z}}_{\perp}$ der REDIM projiziert wird.

Die ersten 7 Eigenwerte der Jacobi-Matrix sind auch in diesem Fall null. Abbildung 5.13 zeigt die Realteile der Eigenwerte λ_8 , λ_9 , λ_{10} und λ_{40} , welche in der Reihenfolge von Null aufsteigend sortiert sind. Die Eigenwerte λ_8 und λ_9 entsprechen der Jacobi-Matrix, welche auf den tangentialen Unterraum der REDIM projiziert wird. Sie sind teilweise positiv entlang der REDIM. Auch hier zeigen die positiven Eigenwerte das instabile Verhalten der chemischen Kinetik.

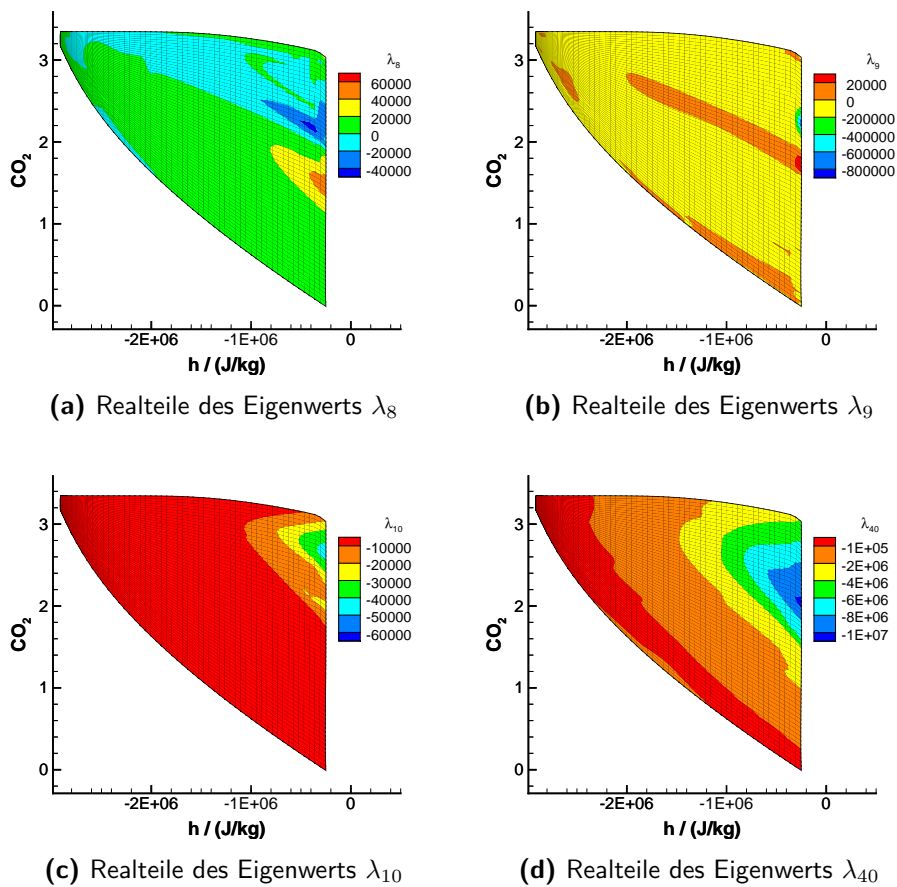


Abbildung 5.13: Realteile der Eigenwerte λ_8 , λ_9 , λ_{10} und λ_{40} der Jacobi-Matrix des chemischen Quellterms auf der zweidimensionalen REDIM der SWQ-Konfiguration in Abhängigkeit der spezifische Enthalpie h (in $\frac{\text{J}}{\text{kg}}$) und der spezifischen Molzahl von CO_2 (in $\frac{\text{mol}}{\text{kg}}$).

Die Eigenwerte $\lambda_{10}, \dots, \lambda_{55}$ sind die auf den normalen Unterraum der REDIM projizierten Eigenwerte, welche überall negativ sind und die schnellen chemischen Prozesse darstellen.

Somit wurde auch im Falle des laminaren SWQ-Systems gezeigt, dass die Attraktivität der zweidimensionalen Mannigfaltigkeit gegeben ist und sie stabil gegenüber kleinen Störungen ist. Dies bedeutet, dass auch die Verwendung einer zweidimensionalen Mannigfaltigkeit für die SWQ Flamme gerechtfertigt ist, wodurch die Erstellung der REDIM und die anschließende Implementierung vereinfacht wird.

5.4 Implementierung heterogener Wandreaktionen in die REDIM

Um die in Kapitel 3.3 für die Berechnung mit detaillierter Chemie vorgestellte heterogene Wandreaktion für FWI in den Kontext der REDIM einzubinden, wurde folgende Randbedingung für die REDIM Methode formuliert und implementiert. Bei der Erstellung der REDIM wird an jedem Gitterpunkt die für die REDIM-Integration notwendige Gradientenabschätzung $\chi = \psi_\theta^+ \xi$ für die generalisierte Koordinate θ berechnet und genutzt. Aus diesem Grund kann die heterogene Wandreaktion direkt über die Bestimmung der Gradientenabschätzung ξ des Zustandsvektors über eine Neumann-Randbedingung vorgegeben werden [96].

Für die Randbedingung der Spezies wird der Speziesgradient $\text{grad}\psi_S$ an der Wand durch einen mathematischen Ausdruck, welcher die Reaktionsrate an der Wand beinhaltet, ersetzt. Ausgehend von der Randbedingung der detaillierten Rechnung in Normalenrichtung zur Wand

$$j_{i,x}^s = j_{i,x} + \dot{\omega}_i = 0 \quad (5.11)$$

mit dem Reaktionsfluss $\dot{\omega}_i$ (siehe Kapitel 3.3) und dem Diffusionsfluss

$$\mathbf{j}_x = -\mathbf{D}\text{grad}_x\psi_S \quad (5.12)$$

ergibt sich [96]

$$\mathbf{D}\text{grad}_x\psi_S = \dot{\omega}. \quad (5.13)$$

Die Diffusionsmatrix ist durch die Massenerhaltung im Falle eines detaillierten Diffusionsmodells singulär, wodurch sie nicht invertiert werden kann [36, 96]. Aus diesem Grund muss Gleichung 5.13 auf einem anderen Weg umformuliert werden. Hierfür kann auf verschiedene Möglichkeiten zurückgegriffen

werden. Zum einen kann die Pseudoinversen der Diffusionsmatrix verwendet werden, zum anderen können nur die für die Wandreaktion wichtigen Spezies berücksichtigt werden. Zudem besteht die Möglichkeit, die Gradientenabschätzung χ der generalisierten Koordinaten mit Hilfe der Wandreaktion direkt vorzugeben.

Bei der Verwendung der Pseudoinversen lässt sich die Gradientenabschätzung ξ_S der Spezies durch

$$\xi_S = D^+ \dot{\omega} \quad (5.14)$$

berechnen, wobei ξ_S die Gradienten der Spezies $\text{grad}_x \psi_s$ darstellt. Des Weiteren besteht die Möglichkeit, nur die für die Wandreaktion und die Verbrennung an der Wand wichtigen Spezies zu berücksichtigen. Wichtige Spezies sind all die Spezies, die durch den Mechanismus in der Wandreaktion involviert sind bzw. in einem gewissen Anteil an der Wand vorliegen. Hier ergibt sich die Gradientenabschätzung für den Zustandsvektor zu [96]

$$\xi_S^* = (C \cdot D \cdot C^T)^{-1} \cdot C \cdot \omega \quad (5.15)$$

oder zu

$$\xi_S^* = (B \cdot D)^{-1} \cdot B \cdot \omega. \quad (5.16)$$

In diesen Fällen werden die oben genannten wichtigen Spezies durch die Matrizen B bzw. C vorgegeben. Die Gradienten der Spezies, die als unwichtig betrachtet werden, werden zu null gesetzt.

Wird die Gradientenabschätzung χ der generalisierten Koordinaten direkt vorgegeben, so ergibt sich

$$\chi = ((H \cdot \psi_\theta)^{-1} \cdot H \cdot D \cdot \psi_\theta)^{-1} (H \cdot \psi_\theta)^{-1} \cdot H \cdot \omega. \quad (5.17)$$

In diesem Fall müssen durch die Matrix H repräsentative Spezies gewählt werden, welche die durch die FWI als auch durch die heterogene Wandreaktion bedingten Szenarien korrekt wiedergeben und beschreiben. Als nachteilig zeigte sich hier jedoch, dass der Enthalpiegradient an der Wand durch Gleichung 5.17 nicht berücksichtigt wird, wodurch es zu Fehlern kommen kann. Allgemein werden zur Bestimmung der REDIM nur die Gradientenabschätzungen einzelner Zustandsvariablen, welche das System repräsentativ beschreiben, benötigt. Für die Verlöschung an der Wand wird deshalb in den meisten Fällen eine Gradientenabschätzung der Enthalpie benötigt. Um die Randbedingung für die Enthalpie zu formulieren, wird die Dirichlet-Randbedingung der Energie (konstante Wandtemperatur) in eine Neumann-Randbedingung

umformuliert, da Randbedingungen in der REDIM direkt durch die Angabe der Gradientenabschätzung vorgegeben werden können [96].

Um die Dirichlet-Randbedingung in eine Neumann-Randbedingung umzuwandeln und die Gradientenabschätzung am Rand der REDIM vorzugeben, wird die Definition des Gradienten

$$\text{grad}\psi = \frac{d\psi}{dr} \quad (5.18)$$

herangezogen. Für die Abschätzung ξ des Gradienten des Zustandsvektors gilt dann in der Form der finiten Differenzen

$$\xi = \frac{\Delta\psi}{\Delta r}. \quad (5.19)$$

Dieser Ausdruck wird daraufhin umformuliert zu

$$\Delta r = \frac{\Delta\psi_i}{\xi_i} \quad (5.20)$$

und unter der Annahme, dass die Distanz Δr zur Berechnung des Gradienten der Enthalpie oder einer Spezies für den gesamten Zustandsvektor an einem Gitterpunkt konstant ist ergibt sich die Bedingung

$$\Delta r = \frac{\Delta\psi_{S,i}}{\xi_{S,i}} = \frac{\Delta h}{\xi_h}, \quad (5.21)$$

wobei $\xi_{S,i}$ die Abschätzung des Gradienten der Spezies i und ξ_h die Abschätzung des Gradienten der spezifischen Enthalpie beschreibt. Diese Gleichung kann wiederum umformuliert werden zu [96]

$$\xi_h = \frac{\Delta h}{\Delta\psi_{S,i}} \xi_{S,i}. \quad (5.22)$$

Um Gleichung 5.22 zu lösen müssen zwei Dinge spezifiziert werden: Zum einen müssen die Punkte bestimmt werden, mit welchen Δh und $\Delta\psi_{S,i}$ determiniert werden. Hier etablierten sich die Werte des Gitterpunkts mit größerer Enthalpie eines bestimmten Gitterpunktes, wobei der Nachbarpunkt gewählt wurde, welcher den nächstgrößeren CO_2 -Wert zu dem jeweiligen Gitterpunkt aufweist. Diese Werte sind erfahrungsgemäß ähnlich zu den Werten, welche in detaillierten Rechnungen auftreten. Des Weiteren müssen Spezies i festgelegt werden, welche repräsentativ für die Gradienten der Spezies an der Wand sind. Hier muss beachtet werden, dass diese Gradienten

nicht null sein dürfen, es sich also um für die Wandreaktion wichtige Spezies handelt [96].

Die vorgeschlagene Umwandlung der Dirichlet-Randbedingung in eine Neumann-Randbedingung erleichtert die numerische Behandlung des Problems, da sowohl für die Spezies als auch für die Enthalpie gleichartige Randbedingungen vorliegen, welche direkt in Form der Gradientenabschätzung vorgegeben werden. Die ursprüngliche Gradientenabschätzung wird durch die von der Wandreaktion vorgegebene Gradientenabschätzung ersetzt und Gleichung 4.13 wird gelöst [96].

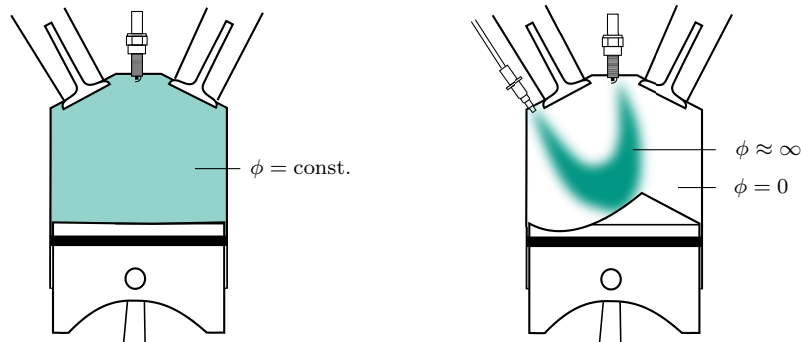
5.5 REDIM für FWI mit Gemischinhomogenitäten

In den vorangegangenen Kapiteln wurde erläutert, wie Reaktions-Diffusions Mannigfaltigkeiten für FWI homogener Gemische erstellt werden. Diese homogenen Gemische treten beispielsweise in Verbrennungsmotoren mit äußerer Gemischbildung auf (siehe Abb. 5.14a, Oxidationsmittel mit Brennstoff homogen gemischt), bei denen der Brennstoff und das Oxidationsmittel vermischt werden, bevor sie in die Brennkammer eingeleitet werden. Allerdings treten in praxisorientierten Anwendungen immer häufiger Verbrennungsprozesse auf, bei denen Brennstoff und das Oxidationsmittel nicht vorgemischt sind und es beispielsweise durch eine direkte Einspritzung zu Gemischinhomogenitäten kommt. Dies ist in Abb. 5.14b schematisch dargestellt: Bei Verbrennungsmotoren mit Direkteinspritzung wird der Kraftstoff direkt in den mit Oxidationsmittel gefüllten Brennraum injiziert, wodurch eine ungleichmäßige Vermischung im Brennraum entsteht und das Äquivalenzverhältnis ϕ lokal variiert. Das Äquivalenzverhältnis wird aus den Massenbrüchen w von Luft und Brennstoff (Br) der aktuellen und stöchiometrischen Mischung durch

$$\phi = \frac{(w_{\text{Luft}}/w_{\text{Br}})_{\text{stöch}}}{w_{\text{Luft}}/w_{\text{Br}}} \quad (5.23)$$

berechnet.

Durch diese Gemischzusammensetzungen müssen reduzierte kinetische Modelle entwickelt werden, welche Gemischinhomogenitäten berücksichtigen. Im Kontext der REDIM bedeutet dies, dass die REDIM erweitert werden muss, da die für homogene Gemischzusammensetzungen erstellten REDIMs dieses Phänomen nicht wiedergeben können [92]. Dies bedeutet, dass neben einer Anfangsmannigfaltigkeit für die REDIM für inhomogene Verbrennungssysteme



(a) Verbrennungsmotor mit äußerer Gemischbildung und nahezu homogenem Gemisch.

(b) Verbrennungsmotor mit direkter Einspritzung und inhomogener Gemischzusammensetzung aus Luft (weiß) und Kraftstoff (grün).

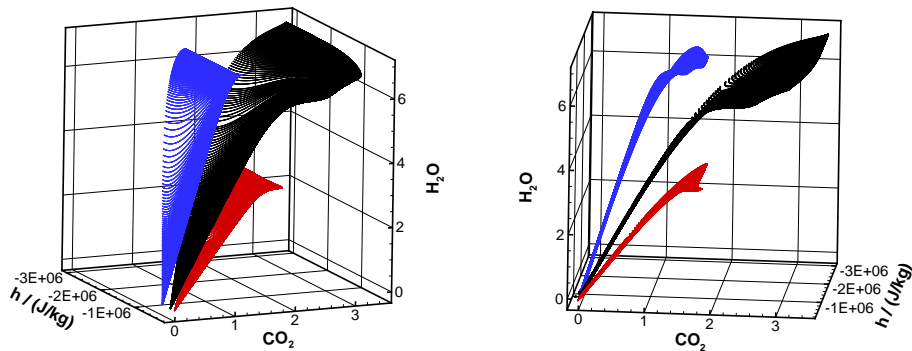
Abbildung 5.14: Schematische Darstellung von Verbrennungsmotoren mit homogener und inhomogener Gemischzusammensetzung.

me eine Gradientenabschätzung bereitgestellt werden muss, um Gleichung 4.13 lösen zu können [92].

Abbildung 5.15a zeigt die während der Verlöschung des HOQ-Systems an einer Wand durchlaufenen Zustände von drei unterschiedlichen, homogenen Gemischzusammensetzungen. Die Wandtemperatur sowie die Temperatur des unverbrannten Gases betragen $T = 300$ K, der Druck beträgt $p = 1$ bar und für die Modellierung der Transportprozesse wurde das vereinfachte Transportmodell mit $Le = 1$ genutzt. Da die Profile der drei unterschiedlichen Rechnungen nicht auf einer Fläche liegen wird ersichtlich, dass eine REDIM für FWI mit Gemischinhomogenitäten mindestens dreidimensional sein muss.

Für die Erstellung der Anfangslösung dieser REDIM werden Rechnungen mit detaillierter Kinetik verschiedener homogener Gemischzusammensetzungen verwendet. Dies hat zur Folge, dass alle Zustände abgedeckt werden, die während der geschichteten FWI durchlaufen werden können. Aus diesem Grund wird das Äquivalenzverhältnis der einzelnen homogenen Rechnungen von $\phi = 0,5 - 2,0$ variiert. Mit Hilfe der Ergebnisse dieser Rechnungen wird daraufhin jeweils eine zweidimensionale Anfangslösung erstellt (siehe Abb. 5.16a) [92].

Durch den unterschiedlich hohen Luft-Anteil variiert der Anteil von N_2 für die verschiedenen zweidimensionalen Anfangslösungen (vgl. Abb. 5.16a und 5.16b). Dies hat zur Folge, dass N_2 als dritte Parametrisierungsvariable herangezogen werden kann [92].



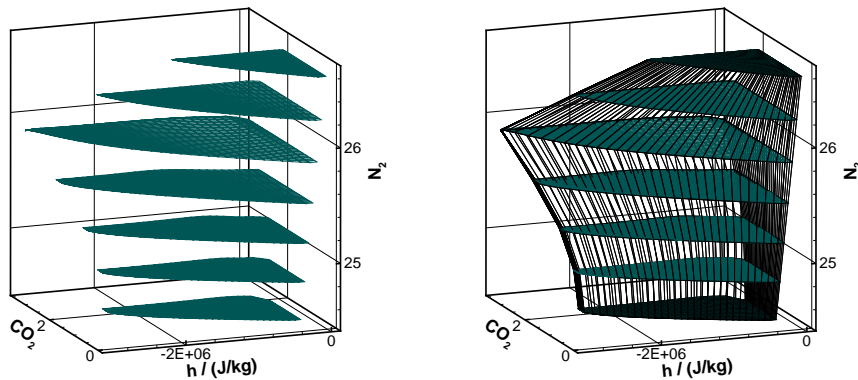
(a) Profile der Flammenlöschung mit unterschiedlichen Gemischzusammensetzungen von Rechnungen mit detaillierter Kinetik.

(b) Richtungen der räumlichen Gradienten welche während der Verlöschung für verschiedene Gemischzusammensetzungen auftreten.

Abbildung 5.15: Analyse der Flammenlöschung mit den Äquivalenzverhältnissen $\phi = 0,5$ (rot), $\phi = 1,0$ (schwarz) und $\phi = 2,0$ (blau) (in (-)) im Zustandsraum welcher durch die spezifische Enthalpie (in $\frac{J}{kg}$) und die spezifischen Molzahlen von CO_2 und H_2O (in $\frac{mol}{kg}$) aufgespannt wird.

Bei der Erstellung der REDIM für FWI inhomogener Verbrennungssysteme muss berücksichtigt werden, dass die REDIM neben der korrekten Beschreibung des Verbrennungsfortschrittes und der Wärmeabgabe zur Wand auch den Mischungsprozess der unterschiedlichen Gaszusammensetzungen korrekt beschreiben muss. Dies bedeutet, dass die Gradientenabschätzung diesen Mischvorgang berücksichtigen muss, da sie die Kopplung von chemischen und physikalischen Prozessen festlegt. Abbildung 5.15b zeigt die räumlichen Gradienten der drei Verlöschungsvorgänge unterschiedlicher Gemischzusammensetzungen im Zustandsraum. Es wird ersichtlich, dass diese Gradientenabschätzungen im Tangentialraum der zweidimensionalen Mannigfaltigkeiten liegen und somit keine Interaktion zwischen den einzelnen Lagen der dreidimensionalen REDIM stattfinden kann. Anders als bei REDIMs für homogene Systeme, bei denen die Gradientenabschätzung komplett aus detaillierten Rechnungen gezogen werden kann, muss die Gradientenabschätzung für die REDIM für Gemischinhomogenitäten so modifiziert werden, dass sie Vermischungsprozesse berücksichtigt [92].

Jede dieser Anfangslösungen unterschiedlicher Gemischzusammensetzungen ist mit der spezifischen Enthalpie und der spezifischen Molzahl von CO_2 parametrisiert. Diese zweidimensionalen Anfangslösungen werden anschließend



(a) Zweidimensionale Anfangsmannigfaltigkeiten der homogen vorge-mischten Verbrennungssysteme unterschiedlicher Gemischzusammensetzungen ($\phi = 0,5$ bis $\phi = 2,0$).

(b) Dreidimensionale Anfangsmannigfaltigkeit der REDIM für geschichtete Verbrennung (schwarz) und zweidimensionale Anfangsmannigfaltigkeiten der homogen vorge-mischten Verbrennungssysteme (grün).

Abbildung 5.16: Zwei- bzw. dreidimensionale Anfangsmannigfaltigkeiten im Zustandsraum; dargestellt sind die spezifische Molzahl von N_2 (in $\frac{\text{mol}}{\text{kg}}$) als Funktion der spezifischen Molzahl von CO_2 (in $\frac{\text{mol}}{\text{kg}}$) und der spezifischen Enthalpie (in $\frac{\text{J}}{\text{kg}}$) [92].

kombiniert und eine dreidimensionale Anfangslösung für die REDIM für geschichtete Verbrennung wird erstellt (siehe Abb. 5.16b). Die hier vorgestellte REDIM weist drei Dimensionen auf, weshalb Gradientenabschätzungen für drei verschiedene Zustandsvariablen angegeben werden müssen. Analog zu zweidimensionalen REDIMs für homogene Mischungen wird der Wärmeverlust zur Wand durch die Gradienten der spezifische Enthalpie und der Fortschritt der chemischen Reaktion durch die Gradienten von CO_2 beschrieben [92]. Um den Fortschritt des Mischprozesses zu spezifizieren, kann für die dritte Dimension die Gradientenschätzung für N_2 herangezogen werden, für die beispielsweise ein konstanter Wert angenommen werden kann [92].

Anschließend wird die REDIM Entwicklungsgleichung mit den spezifizierten Gradienten bis zur Stationarität gelöst.

6 Implementierung mannigfaltigkeitsbasierter reduzierter kinetischer Modelle

Jedes mannigfaltigkeitsbasierte reduzierte kinetische Modell kann in unterschiedlicher Weise implementiert und somit angewendet werden. Die m -dimensionale REDIM wird typischerweise in den generalisierten Koordinaten $\boldsymbol{\theta} = (\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_m)^T$ berechnet. Dies führt dazu, dass der thermo-kinetische Zustand der REDIM in Abhängigkeit dieser Koordinaten, welche die lokalen Koordinaten der REDIM darstellen, vorliegt [14].

Da die Interpretation dieser Parametrisierung nicht sehr intuitiv ist, ziehen einige Wissenschaftler eine einfache und transparente physikalische Interpretation vor und führen Berechnungen in physikalischen Variablen mit einer konstanten Parametrisierungsmatrix \mathbf{C} durch [32, 43]. Diese Parametrisierungsmatrix definiert die konstanten Zustandsvariablen, mit denen die Mannigfaltigkeit parametrisiert wird. Allerdings kann diese Parametrisierung zu Problemen bzw. Fehlern führen. Um dennoch in physikalischen Koordinaten rechnen zu können, kann die reduzierte Modellgleichung die Systemdynamik im tangentialen Unterraum der Mannigfaltigkeit berechnen [94].

In diesem Kapitel werden zuerst die Grundlagen der Implementierung mannigfaltigkeitsbasierter reduzierter kinetischer Modelle dargelegt. Anschließend werden die unterschiedlichen reduzierten Modellgleichungen hergeleitet, vorgestellt und der Unterschied zwischen diesen herausgearbeitet.

6.1 Grundlagen der Implementierung

Bei der Implementierung mannigfaltigkeitsbasierter reduzierter kinetischer Modelle gilt es, unterschiedliche Situationen bezüglich der Mannigfaltigkeiten zu beachten [94]: Zum einen gibt es Mannigfaltigkeiten, welche sowohl den Quellterm als auch Diffusionsprozesse beachten und invariant sowie attraktiv sind. Zu diesen Mannigfaltigkeiten gehören REDIMs, welche mit exakten Gradientenabschätzungen erstellt wurden. In diesem Fall folgt die Systemdynamik

in einer Rechnung mit reduzierter Chemie automatisch der Mannigfaltigkeit und die chemische Reaktion und molekulare Diffusion gleichen sich in die zur Mannigfaltigkeit normale Richtung perfekt aus (siehe Abb. 6.1a) [94].

Allerdings gibt es auch Mannigfaltigkeiten, bei denen dieses Gleichgewicht nicht vorliegt. Dies kann zum einen daran liegen, dass die Mannigfaltigkeit nur auf der Analyse homogener Systeme basiert (z.B. bei der ILDM). Diese Mannigfaltigkeit ist bezüglich des Transportterms nicht invariant wodurch die Systemdynamik die Mannigfaltigkeit ohne Korrektur verlassen würde. Um dem vorzubeugen, wird eine schnelle Relaxation durch eine Projektion auf die Mannigfaltigkeit durchgeführt, wodurch das Vektorfeld der reduzierten Rechnung auf den tangentialen Unterraum der Mannigfaltigkeit projiziert wird [94].

Außerdem gibt es Mannigfaltigkeiten, bei welchen das Gleichgewicht aus diffusiven Prozessen und chemischer Kinetik nicht vorliegt, obwohl sie sowohl den Quellterm als auch Transportprozesse berücksichtigen. Zu diesen Mannigfaltigkeiten zählen beispielsweise die FGM oder eine REDIM mit grober Gradientenabschätzung. In diesem Fall liegt das aus Quellterm und Diffusionsterm bestehende Vektorfeld nicht im tangentialen Unterraum der Mannigfaltigkeit wie es bei der Rechnung mit detaillierter Chemie der Fall ist (siehe Abb. 6.1b). Für diese Mannigfaltigkeiten unterscheiden sich die Ergebnisse in Abhängigkeit der Parametrisierung und der verwendeten reduzierten Modellgleichung [94]. Diese Modellgleichungen werden in den folgenden Unterkapiteln vorgestellt.

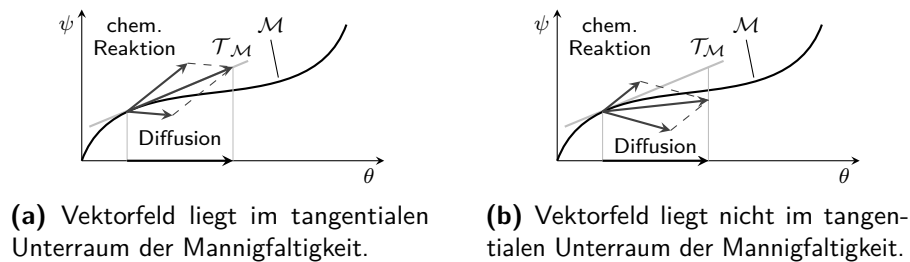


Abbildung 6.1: Schematische Darstellung verschiedener Arten von reduzierten kinetischen Modellen; \mathcal{M} : Mannigfaltigkeit, $\mathcal{T}_{\mathcal{M}}$: Tangente der Mannigfaltigkeit [94].

6.2 Rechnung in generalisierten Koordinaten

Die Entwicklungsgleichung eines reagierenden Systems mit dem Zustandsvektor $\boldsymbol{\psi}$, dem Quellterm \mathbf{F} , der Dichte ρ , der Geschwindigkeit \mathbf{u} und der Diffusionsmatrix \mathbf{D} ist gegeben durch [6]

$$\frac{\partial \boldsymbol{\psi}}{\partial t} = \mathbf{F} - \mathbf{u} \operatorname{grad} \boldsymbol{\psi} + \frac{1}{\rho} \operatorname{div} (\mathbf{D} \cdot \operatorname{grad} \boldsymbol{\psi}). \quad (6.1)$$

Nach Anwendung der Kettenregel auf die Terme

$$\frac{\partial \boldsymbol{\psi}}{\partial t} = \frac{\partial \boldsymbol{\psi}}{\partial \boldsymbol{\theta}} \frac{\partial \boldsymbol{\theta}}{\partial t} = \boldsymbol{\psi}_{\boldsymbol{\theta}} \frac{\partial \boldsymbol{\theta}}{\partial t} \quad (6.2)$$

und

$$\operatorname{grad} \boldsymbol{\psi} = \frac{\partial \boldsymbol{\psi}}{\partial \boldsymbol{\theta}} \operatorname{grad} \boldsymbol{\theta} = \boldsymbol{\psi}_{\boldsymbol{\theta}} \operatorname{grad} \boldsymbol{\theta} \quad (6.3)$$

ergibt sich Gleichung 6.1 zu [14]

$$\boldsymbol{\psi}_{\boldsymbol{\theta}} \frac{\partial \boldsymbol{\theta}}{\partial t} = \mathbf{F} - \mathbf{u} \boldsymbol{\psi}_{\boldsymbol{\theta}} \operatorname{grad} \boldsymbol{\theta} + \frac{1}{\rho} \operatorname{div} (\mathbf{D} \cdot \boldsymbol{\psi}_{\boldsymbol{\theta}} \cdot \operatorname{grad} \boldsymbol{\theta}). \quad (6.4)$$

Anschließend werden beide Seiten der Gleichung mit $\boldsymbol{\psi}_{\boldsymbol{\theta}}^+$ multipliziert wodurch die reduzierte Modellgleichung in generalisierten Koordinaten $\boldsymbol{\theta}$ gegeben ist durch [14]

$$\frac{\partial \boldsymbol{\theta}}{\partial t} = \boldsymbol{\psi}_{\boldsymbol{\theta}}^+ \mathbf{F} - \mathbf{u} \operatorname{grad} \boldsymbol{\theta} + \frac{1}{\rho} \boldsymbol{\psi}_{\boldsymbol{\theta}}^+ \operatorname{div} (\mathbf{D} \cdot \boldsymbol{\psi}_{\boldsymbol{\theta}} \operatorname{grad} \boldsymbol{\theta}). \quad (6.5)$$

Bei der Anwendung von Gleichung 6.5 werden die Werte für $\boldsymbol{\psi}_{\boldsymbol{\theta}}^+ \mathbf{F}$, $\boldsymbol{\psi}_{\boldsymbol{\theta}}^+$ und $\mathbf{D} \cdot \boldsymbol{\psi}_{\boldsymbol{\theta}}$ aus der REDIM-Tabelle entnommen [14]. Die Multiplikation mit $\boldsymbol{\psi}_{\boldsymbol{\theta}}^+$ berechnet die Vektorfelder des Quellterms und des Diffusionsterms automatisch im tangentialen Unterraum der Mannigfaltigkeit wodurch sich die Systemdynamik entlang der Mannigfaltigkeit bewegt und diese in normale Richtung nicht verlassen kann [94].

6.3 Rechnung in physikalischen Koordinaten ohne Projektion

Die reduzierte Modellgleichung in physikalischen Koordinaten ohne Projektion wird wegen ihrer einfacheren Interpretierbarkeit häufig angewendet, beispielsweise bei turbulenten Verbrennungsregimen. Hier wird die Gleichung

in physikalischen Variablen gelöst, was für die Nachbearbeitung oder während der Überwachung des Integrationsprozesses praktisch sein kann (siehe z. B. [1, 67, 100]). Diese Art der Parametrisierung erfordert jedoch, dass die Mannigfaltigkeit nicht mehrdeutig bezüglich der entsprechenden Parametrisierung ist. Dies bedeutet, dass für einen bestimmten physikalischen Parametrisierungsvektor nur ein Eintrag in der Tabelle des reduzierten Modells vorhanden sein darf. Das reduzierte Modell muss folglich monoton parametrisiert sein, was durch eine geschickte Wahl der sogenannten chemischen Fortschrittsvariablen sichergestellt wird. Für die Definition der Fortschrittsvariable gibt es verschiedene Ansätze [39, 73, 75, 79, 102]. Es zeigte sich im Rahmen dieser Arbeit, dass dies vor allem für reduzierte Modelle mit detailliertem Diffusionsmodell für FWI nur über eine Linearkombination aus spezifischen Molzahlen möglich ist [95].

Der Parametrisierungsvektor $\mathbf{\Gamma}$ ist im Falle einer konstanten Parametrisierungsmatrix gegeben durch $\mathbf{\Gamma} = \mathbf{C} \boldsymbol{\psi}$, wobei er aus physikalischen Zustandsvariablen oder aus Linearkombinationen dieser besteht [94]. Die Parametrisierungsmatrix \mathbf{C} ist im Rahmen dieser Arbeit für die Annahme gleicher Diffusivitäten und Lewis-Zahl $Le = 1$ beispielsweise gegeben durch

$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \dots & 0 \end{bmatrix}, \quad (6.6)$$

wodurch sich der Parametrisierungsvektor

$$\mathbf{\Gamma} = \begin{pmatrix} h \\ \frac{w_{CO_2}}{M_{CO_2}} \end{pmatrix} \quad (6.7)$$

ergibt.

Zur Herleitung der Modellgleichung in physikalischen Koordinaten wird Gleichung 6.1 mit der Parametrisierungsmatrix \mathbf{C} multipliziert und es ergibt sich [94]

$$\frac{\partial \mathbf{\Gamma}}{\partial t} = \mathbf{C} \frac{\partial \boldsymbol{\psi}}{\partial t} = \mathbf{C} \mathbf{F} - \mathbf{u} \mathbf{C} \text{grad} \boldsymbol{\psi} + \frac{1}{\rho} \mathbf{C} \text{div} (\mathbf{D} \text{grad} \boldsymbol{\psi}). \quad (6.8)$$

Ist diese Gleichung implementiert, so müssen die Terme \mathbf{F} und \mathbf{D} für die chemische Kinetik und die Diffusion aus dem reduzierten Modell entnommen werden.

Bei dieser reduzierten Modellgleichung wird das Vektorfeld nicht automatisch im tangentialen Unterraum der Mannigfaltigkeit berechnet; daher kann es zu Fehlern kommen, sofern das aus Diffusionsprozessen und chemischer Kinetik bestehende Vektorfeld nicht im tangentialen Unterraum der REDIM liegt (siehe Kapitel 7.1.5) [94].

6.4 Rechnung in physikalischen Koordinaten mit Projektion

Damit die Rechnung mit reduzierter Chemie nicht in generalisierten Koordinaten durchgeführt werden muss, allerdings trotzdem gute Ergebnisse erzielt werden, kann die reduzierte Modellgleichung in physikalischen Koordinaten auf den tangentialen Unterraum der Mannigfaltigkeit projiziert werden [94]. Dies geschieht, ausgehend von Gleichung 6.1, analog zu Gleichung 6.5 mit Hilfe der Kettenregel für

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\partial \psi}{\partial \Gamma} \frac{\partial \Gamma}{\partial t} = \psi_{\Gamma} \frac{\partial \Gamma}{\partial t} \quad (6.9)$$

und

$$\text{grad} \psi = \frac{\partial \psi}{\partial \Gamma} \text{grad} \Gamma = \psi_{\Gamma} \text{grad} \Gamma. \quad (6.10)$$

Die reduzierte Modellgleichung ergibt sich dann zu [94]

$$\frac{\partial \Gamma}{\partial t} = \psi_{\Gamma}^+ \mathbf{F} - \mathbf{u} \text{grad} \Gamma + \frac{1}{\rho} \psi_{\Gamma}^+ \text{div} (\mathbf{D} \psi_{\Gamma} \text{grad} \Gamma). \quad (6.11)$$

Bei der Anwendung von Gleichung 6.11 müssen die Werte für $\psi_{\Gamma}^+ \mathbf{F}$, ψ_{Γ}^+ und $\mathbf{D} \psi_{\Gamma}$ aus der REDIM-Tabelle entnommen werden. Durch die Multiplikation der Gleichung 6.1 mit ψ_{Γ}^+ wird das Vektorfeld im tangentialen Unterraum der Mannigfaltigkeit berechnet.

Der Zusammenhang zwischen ψ_{Γ}^+ und den generalisierten Koordinaten θ kann auch wie folgt verdeutlicht werden [94]:

$$\begin{aligned} \psi_{\Gamma}^+ &= (\psi_{\Gamma}^T \psi_{\Gamma})^{-1} \psi_{\Gamma}^T \\ &= \Gamma_{\theta} (\Gamma_{\theta})^{-1} (\psi_{\Gamma}^T \psi_{\Gamma})^{-1} (\Gamma_{\theta}^T)^{-1} \Gamma_{\theta}^T \psi_{\Gamma}^T \\ &= \Gamma_{\theta} (\Gamma_{\theta}^T \psi_{\Gamma}^T \psi_{\Gamma} \Gamma_{\theta})^{-1} (\psi_{\Gamma} \Gamma_{\theta})^T \\ &= \Gamma_{\theta} [(\psi_{\Gamma} \Gamma_{\theta})^T \psi_{\Gamma} \Gamma_{\theta}]^{-1} (\psi_{\Gamma} \Gamma_{\theta})^T \\ &= \Gamma_{\theta} (\psi_{\theta}^T \psi_{\theta})^{-1} \psi_{\theta}^T \\ &= \Gamma_{\theta} \psi_{\theta}^+ \\ &= \mathbf{C} \psi_{\theta} \psi_{\theta}^+. \end{aligned} \quad (6.12)$$

Der Term $\psi_{\theta} \psi_{\theta}^+$ aus der vorangegangenen Gleichung ist ein Projektionsoperator, welcher die Systemdynamik auf den tangentialen Unterraum der

Mannigfaltigkeit projiziert. Aus diesem Grund setzt sich ψ_{Γ}^{\dagger} aus den auf die Mannigfaltigkeit projizierten Kontrollvariablen zusammen. Dies bedeutet, dass das Vektorfeld durch die Multiplikation mit ψ_{Γ}^{\dagger} im tangentialen Unterraum der Mannigfaltigkeit berechnet wird [94].

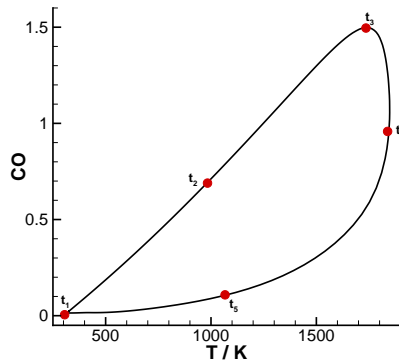
Durch diese Vorgehensweise können auch mit einer reduzierten Modellgleichung in physikalischen Koordinaten bei der Nutzung einer nicht perfekt invarianten Mannigfaltigkeit gute Ergebnisse erzielt werden (siehe Kapitel 7.1.5). Allerdings bleibt das Problem der eindeutigen Parametrisierung bestehend, welches auch bei der reduzierten Modellgleichung in physikalischen Koordinaten ohne Projektion auftritt [94].

7 Anwendung und Validierung der reduzierten Modelle

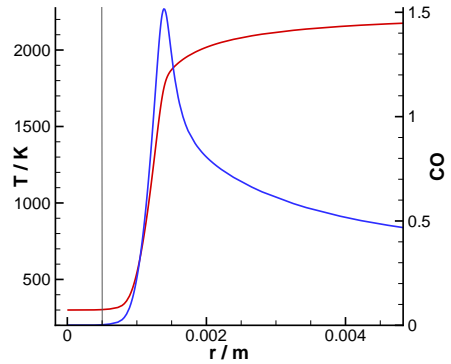
In diesem Kapitel werden die in den vorherigen Kapiteln vorgestellten Grundlagen und Erweiterungen sowie die unterschiedlichen Implementierungskonzepte der REDIM für das Methan / Luft System sowie das Isooktan / Luft System angewendet und ausgewertet. Ausgangspunkt hierfür ist immer die für die FWI vorgestellte Modellierung des Wärmeverlusts an die Wand (siehe Kapitel 5.1) .

Prinzipiell gilt, dass eine REDIM nach ihrer Erstellung vor ihrer weiteren Nutzung in reduzierten Rechnungen validiert werden muss. Dies kann über den Vergleich von Rechnungen mit detaillierter und REDIM-reduzierter Kinetik erfolgen, wobei unterschiedliche Größen miteinander verglichen werden. In der vorliegenden Arbeit werden unter anderem die zwei folgenden Methoden zur Validierung von HOQ-Flammen angewendet.

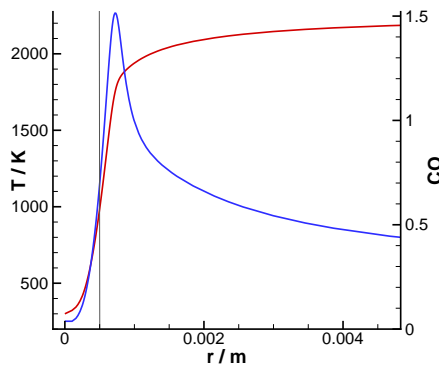
Bei der ersten Methode handelt es sich um eine Untersuchung im Zustandsraum, bei der eine Zustandsvariable in Abhängigkeit einer anderen Zustandsvariable an unterschiedlichen Wandabständen aufgetragen wird. Abbildung 7.1a zeigt beispielhaft die Spezies CO in Abhängigkeit der Temperatur für den Wandabstand $r_W = 0,5$ mm einer HOQ-Flamme. Der Verlauf dieser Kurve ergibt sich wie folgt: Hat die Flammenfront den Wandabstand $r_W = 0,5$ mm noch nicht passiert, so entsprechen die Temperatur und der Wert von CO denen des unverbrannten Gases (siehe Abb. 7.1b). Wenn die Flammenfront den Wandabstand $r_W = 0,5$ mm passiert, erhöhen sich sowohl der Wert von CO als auch die Temperatur (siehe Abb. 7.1c und 7.1d). Anschließend wird das CO umgewandelt wobei sich die Temperatur weiter erhöht (siehe Abb. 7.1e). Nachdem die Flamme verloschen ist, sinkt neben CO auch die Temperatur T durch die Wärmeleitung bis sie schließlich der Wandtemperatur entspricht und nahezu kein CO im System vorhanden ist (das System befindet sich im chemischen Gleichgewicht) (siehe Abb. 7.1f). Bei sehr kleinen Wandabständen (beispielsweise $r_W = 0,1$ mm für das vorliegende Modellsystem) erhöht sich die Temperatur nach Erreichen des Maximalwertes von CO kaum noch und es kommt direkt zu einem Temperaturabfall.



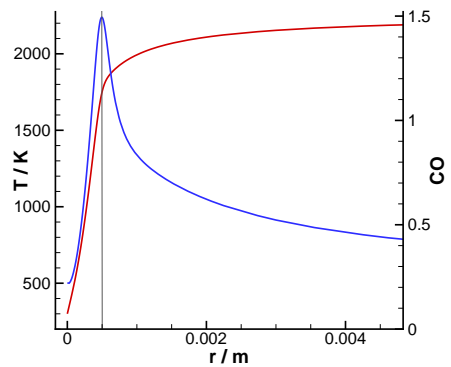
(a) Auswertung im Zustandsraum



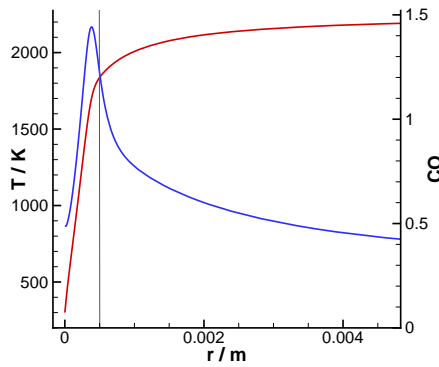
(b) Zeitpunkt t_1



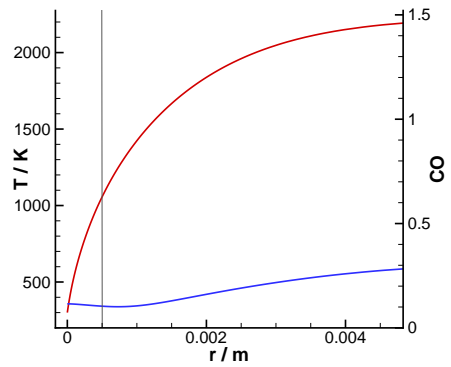
(c) Zeitpunkt t_2



(d) Zeitpunkt t_3



(e) Zeitpunkt t_4



(f) Zeitpunkt t_5

Abbildung 7.1: Beispielhafter Verlauf der spezifischen Molzahl von CO (in $\frac{\text{mol}}{\text{kg}}$) als Funktion der Temperatur T (in K) für den Wandabstand $r_W = 0,5 \text{ mm}$ (Abb. 7.1a), in welchem die Temperatur T (rote Linie, in K) und die spezifischen Molzahl von CO (blau, in $\frac{\text{mol}}{\text{kg}}$) der unterschiedlichen Zeitpunkte $t_1 - t_5$ aus den Abb. 7.1b - 7.1f gekennzeichnet sind.

Bei der zweiten Auswertemethode zum Validieren der REDIM wird bei der HOQ-Konfiguration der Wärmestrom zur Wand

$$q_W = \left| -\lambda \frac{\partial T}{\partial r} \right| \quad (7.1)$$

in Abhängigkeit der Zeit bestimmt (siehe beispielhaft Abb. 7.2). Während die Flamme auf die Wand zuläuft, gibt das System noch keine Energie an die Wand ab und der Wärmestrom beträgt $q_W = 0$. Erreicht die Flamme die Wand, nimmt der Wärmestrom zu. Häufig wird der Zeitpunkt des maximalen Wandwärmestroms als Quenchzeitpunkt benannt. Mit Hilfe dieser Auswertemethode können gleichzeitig zwei Dinge überprüft werden: Wird für die Rechnungen mit detaillierter und reduzierter Kinetik das gleiche Anfangsprofil verwendet, so sind die Quenchzeitpunkte gleich, sofern die Flammengeschwindigkeit durch das reduzierte Modell korrekt wiedergegeben wird. Des Weiteren ist die maximale Wärmeabgabe zur Wand ein Indikator für die Genauigkeit eines reduzierten kinetischen Modells.

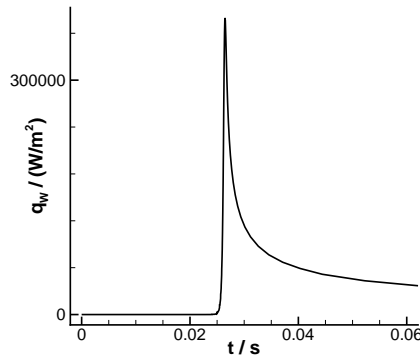


Abbildung 7.2: Beispielhafter Wärmestrom q_W zur Wand (in $\frac{\text{W}}{\text{m}^2}$) in Abhängigkeit der Zeit t (in s) während des Löschungsvorgangs.

In den folgenden Kapiteln werden die für die FWI erstellten REDIMs beschrieben und validiert, wobei unter anderem auf die oben genannten Vergleichsmethoden zurückgegriffen wird. Die Rechnungen mit reduzierter Kinetik erfolgen dabei, sofern nicht anders angegeben, mit Hilfe von Gleichung 6.5. Sowohl die detaillierten als auch die reduzierten eindimensionalen HOQ-Rechnungen werden mit dem Programmpaket INSFLA [63] durchgeführt. In diesem Programmpaket werden die partiellen Differentialgleichungssysteme mit Hilfe des linear impliziten Extrapolationsverfahren LIMEX [21] gelöst.

Sofern nicht anders beschrieben, sind die Randbedingungen der Spezies und der Energie für die detaillierte Kinetik gegeben durch (siehe Kapitel 3.3)

$$T(r = 0 \text{ m}) = T_W, \quad (7.2)$$

$$j_i(r = 0 \text{ m}) = 0, \quad (7.3)$$

wohingegen die Randbedingungen für die reduzierte Kinetik spezifiziert sind als

$$T(r = 0 \text{ m}) = T_W, \quad (7.4)$$

$$j_{\text{CO}_2}(r = 0 \text{ m}) = 0. \quad (7.5)$$

7.1 REDIM für vorgemischte Methan/Luft Systeme mit FWI

Alle im Rahmen dieser Arbeit entwickelten Methoden wurden anhand des Methan/Luft-Systems untersucht und für dieses angewendet. Dieses System bietet unterschiedliche Vorteile: Zum einen ist die Verbrennung von Methan ein bereits gut verstandener Vorgang, für den in der Literatur eine große Anzahl von Reaktionsmechanismen verfügbar sind. Des Weiteren bestehen diese Mechanismen aus relativ wenigen Spezies und Elementarreaktionen im Verhältnis zu den Mechanismen der langkettigen, in konventionellen Motoren und Flugzeugturbinen genutzten Treibstoffen. Dies bedeutet, dass ein genauer Vergleich von Rechnungen mit detaillierter und reduzierter Kinetik möglich ist, da mit solch kleinen Mechanismen auch zweidimensionale Rechnungen mit detaillierter Kinetik durchgeführt werden können. Auf diesem Weg können die Methoden, welche im Rahmen dieser Arbeit entwickelt wurden, numerisch sehr genau untersucht werden. Ein weiterer Vorteil von Methan als Brennstoff ist, dass es oftmals in experimentellen Untersuchungen Anwendung findet. Dies bedeutet, dass experimentelle Ergebnisse vorliegen, mit welchen die Ergebnisse der Berechnungen verglichen werden können.

7.1.1 Einfluss des Diffusionsmodells

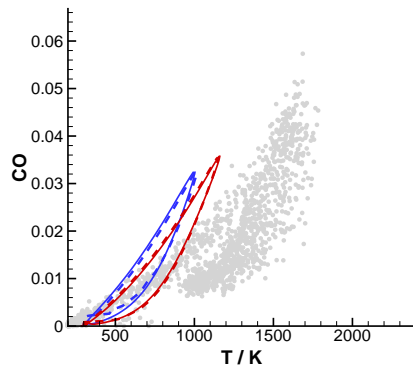
Für die Untersuchung des Einflusses des Diffusionsmodells wird ein HOQ-Modellsystem angewendet, welches vergleichbar zu dem experimentellen Aufbau von Mann et al. [65] ist. Die Wandtemperatur sowie die Temperatur des unverbrannten Gases betragen $T = 300 \text{ K}$ wobei der Druck konstant bei $p = 1 \text{ bar}$ gehalten wird. Für die Modellierung der chemischen Kinetik findet der GRI 3.0-Mechanismus [85] Anwendung [89, 95].

Für die Modellierung des molekularen Transportes kommen zwei unterschiedliche Modelle zum Einsatz: Zum einen wird ein detailliertes Diffusionsmodell mit Thermo-Diffusion angewendet, welches auf der Curtiss-Hirschfelder-Approximation basiert [44]. Des Weiteren wird ein einfaches Diffusionsmodell angewendet, welches vor allem für die Methanverbrennung gute Ergebnisse erzielt [22]: gleiche Diffusivitäten und die Lewis-Zahl $Le = 1$ [89, 95]. Dies vereinfacht die REDIM Evolutionsgleichung enorm, da ein Term der Gleichung herausfällt (siehe Kapitel 4.1) [14]. Die REDIMs für die unterschiedlichen Diffusionsmodelle werden erstellt, wobei die Gradientenabschätzung sowie das Anfangsgitter aus zuvor durchgeführten Rechnungen mit detaillierter Chemie erstellt wurden [89, 95]. Anschließend werden sie in Rechnungen mit reduzierter Kinetik genutzt.

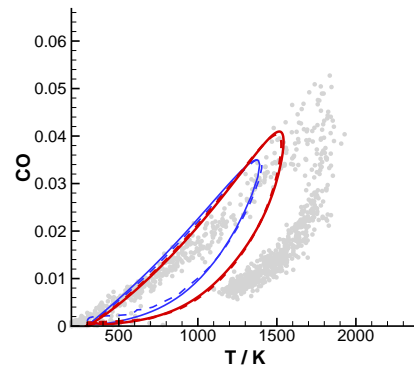
Abbildung 7.3 zeigt die oben beschriebene Auswertemethode für die Rechnungen mit detaillierter und reduzierter Kinetik im Zustandsraum [89, 95]. Des Weiteren sind die experimentellen Ergebnisse von Mann et al. [65] dargestellt. Die Rechnungen mit reduzierter Kinetik stimmen für beide Diffusionsmodelle sehr gut mit den Ergebnissen der detaillierten Chemie überein. Außerdem unterscheiden sich die Ergebnisse der Rechnungen mit detaillierter Diffusion von denen mit einfachem Diffusionsmodell und $Le = 1$. Bei dem detaillierten Diffusionsmodell sind an den dargestellten Wandabständen sowohl die maximale Temperatur als auch der maximale Wert von CO höher als für das vereinfachte Diffusionsmodell. Dies bedeutet, dass der Abstand der Flamme zur Wand zum Quenchzeitpunkt in diesem Fall kleiner ist, was durch die unterschiedlichen Diffusivitäten und dem dadurch erfolgenden Energietransport der verschiedenen Spezies zu erklären ist. Des Weiteren ist zu erkennen, dass die Ergebnisse der Berechnungen für beide Diffusionsmodelle für den Wandabstand $r_W = 0,5$ mm gut mit den experimentellen Ergebnissen übereinstimmen, wohingegen bei kleineren Wandabständen weder die gemessenen Temperaturen noch die detektierten Werte von CO erreicht werden [95].

Der Wärmestrom zur Wand für die unterschiedlichen Rechnungen ist in Abbildung 7.4 dargestellt. Auch hier ist für beide Diffusionsmodelle zu erkennen, dass die Ergebnisse der Rechnungen mit reduzierter Kinetik gut mit den Ergebnissen mit detaillierter Kinetik übereinstimmen. Dies gilt sowohl für den Zeitpunkt als auch für den Wert des maximalen Wandwärmestroms. Allerdings ist auch hier ein signifikanter Unterschied zwischen den Rechnungen mit detailliertem und vereinfachtem Diffusionsmodell zu sehen [95].

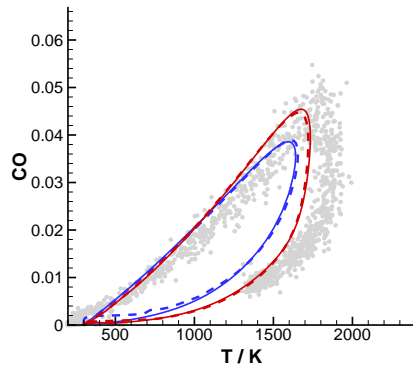
Insgesamt kann gesagt werden, dass die REDIM reduzierte Kinetik die detaillierte Systemdynamik für beide Diffusionsmodelle sehr gut wiedergibt, wobei der entstehende Fehler durch das vereinfachte Diffusionsmodell vielfach



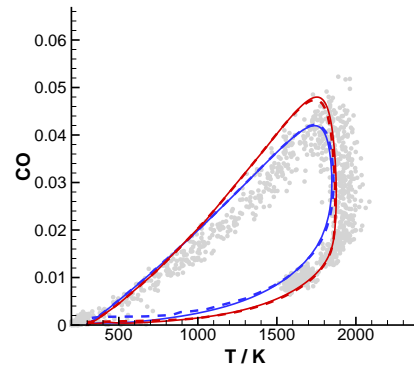
(a) Auswertung für den Wandabstand $r_W = 0,1$ mm



(b) Auswertung für den Wandabstand $r_W = 0,2$ mm



(c) Auswertung für den Wandabstand $r_W = 0,3$ mm



(d) Auswertung für den Wandabstand $r_W = 0,5$ mm

Abbildung 7.3: Werte des Massenbruchs von CO (in $(-)$) als Funktion der Temperatur T (in K), welche an unterschiedlichen Wandabständen auftreten. Dargestellt sind Rechnungen mit $Le = 1$ (blau) sowie detailliertem Diffusionsmodell (rot). Reduzierte (gestrichelte Linie) und detaillierte (durchgezogene Linie) Kinetik [95]. Außerdem dargestellt sind die experimentellen Ergebnisse von Mann et al. [65] (graue Punkte).

größer ist als der Fehler, welcher durch die Reduktion der Kinetik entsteht [95].

7.1.2 Einfluss des Mechanismus

Um die Genauigkeit der REDIM-Methode für vorgemischte FWI neben der Nutzung unterschiedlicher Diffusionsmodelle weiter zu demonstrieren, wird

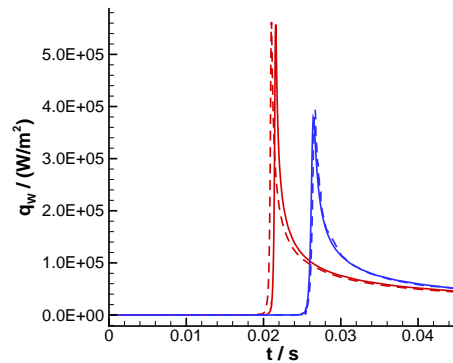


Abbildung 7.4: Wärmestrom q_W zur Wand (in $\frac{\text{W}}{\text{m}^2}$) in Abhängigkeit der Zeit t (in s) während des Löschvorgangs. Dargestellt sind Rechnungen mit $Le = 1$ (blau) sowie detailliertem Diffusionsmodell (rot) mit reduzierter (gestrichelte Linie) und detaillierter (durchgezogene Linie) Kinetik [95].

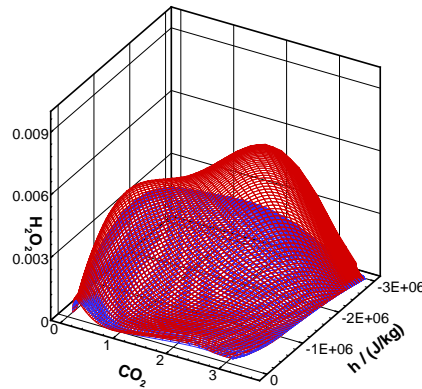
die Methode für das HOQ-Modellsystem für unterschiedliche Mechanismen angewendet [95]. Auch für diese numerischen Untersuchungen ist das Modellsystem vergleichbar zu den durchgeführten Experimenten von Mann et al. [65] wodurch die Wandtemperatur sowie die Temperatur des unverbrannten Gases $T = 300$ K betragen und der Druck konstant bei $p = 1$ bar gehalten wird [95].

Für die Modellierung des molekularen Transportes wird das detaillierte Diffusionsmodell mit Thermo-Diffusion unter Verwendung der Curtiss-Hirschfelder-Approximation [44] angewendet [95].

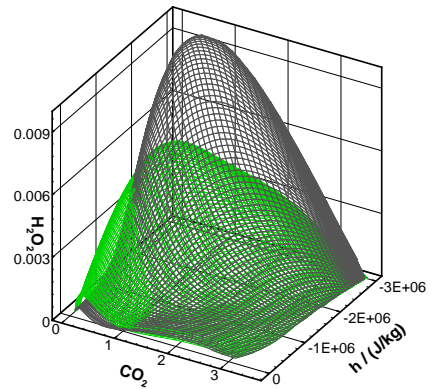
Zur Modellierung der chemischen Kinetik werden neben dem GRI 3.0 Mechanismus [85] auch der SanDiego Mechanismus [82], der Warnatz Mechanismus [87] und der Smooke [86] Mechanismus genutzt.

Abbildung 7.5 zeigt die mit den unterschiedlichen Mechanismen erstellten REDIMs im Zustandsraum. Zu sehen sind die spezifische Molzahl von H_2O_2 (Abb. 7.5a und Abb. 7.5b) bzw. die spezifische Molzahl von OH (Abb. 7.5c und Abb. 7.5d) in Abhängigkeit der spezifischen Enthalpie h und der spezifischen Molzahl von CO_2 . Es ist zu erkennen, dass sich die REDIMs für die Minoritätenspezies H_2O_2 stark unterscheiden, wohingegen sie für das für den Verbrennungsprozess wichtige Radikal OH fast übereinstimmen [95].

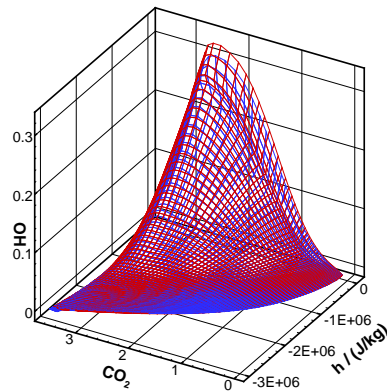
Abbildung 7.6 zeigt den Vergleich der HOQ-Rechnungen mit detaillierter und reduzierter Kinetik im Zustandsraum für die verschiedenen Mechanismen. Neben der Spezies CO (siehe Abb. 7.6a und Abb. 7.6b) ist hier auch der Massenbruch von HO_2 als Funktion der Temperatur für den Wandabstand



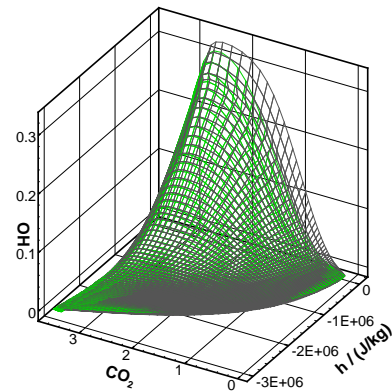
(a) REDIMs im $\text{H}_2\text{O}_2, \text{CO}_2, h^-$ Zustandsraum



(b) REDIMs im $\text{H}_2\text{O}_2, \text{CO}_2, h^-$ Zustandsraum



(c) REDIMs im $\text{OH}, \text{CO}_2, h^-$ Zustandsraum



(d) REDIMs im $\text{OH}, \text{CO}_2, h^-$ Zustandsraum

Abbildung 7.5: REDIMs der unterschiedlichen Mechanismen im Zustandsraum. Gezeigt sind die spezifischen Molzahlen von H_2O_2 und OH (in $\frac{\text{mol}}{\text{kg}}$) in Abhängigkeit der spezifischen Molzahl von CO_2 (in $\frac{\text{mol}}{\text{kg}}$) und der spezifischen Enthalpie h (in $\frac{\text{J}}{\text{kg}}$) [95] für den GRI 3.0 Mechanismus [85] (rot), den Warnatz Mechanismus [87] (blau), den SanDiego Mechanismus [82] (grün) und den Smooke Mechanismus [86] (grau).

$r_W = 0,2$ mm aufgetragen. Alle Rechnungen mit reduzierter Kinetik stimmen sehr gut mit den Rechnungen der detaillierten Kinetik überein. Außerdem variiert der Verlauf der Rechnungen für die unterschiedlichen Mechanismen je nach betrachteter Spezies mehr oder weniger stark. Dies bedeutet, dass es Spezies wie das dargestellte HO_2 gibt, für welche die Mechanismen stark variierende Ergebnisse liefern (siehe Abb. 7.6c und Abb. 7.6d). Dies gilt

hauptsächlich für Minoritätenspezies. Für Hauptspezies sind die Ergebnisse relativ ähnlich, so auch für den Massenbruch von CO (siehe Abb. 7.6a und Abb. 7.6b). Allerdings ist der durch die Mechanismen bedingte Unterschied auch hier größer als der Unterschied der Rechnungen mit detaillierter und reduzierter Kinetik [95].

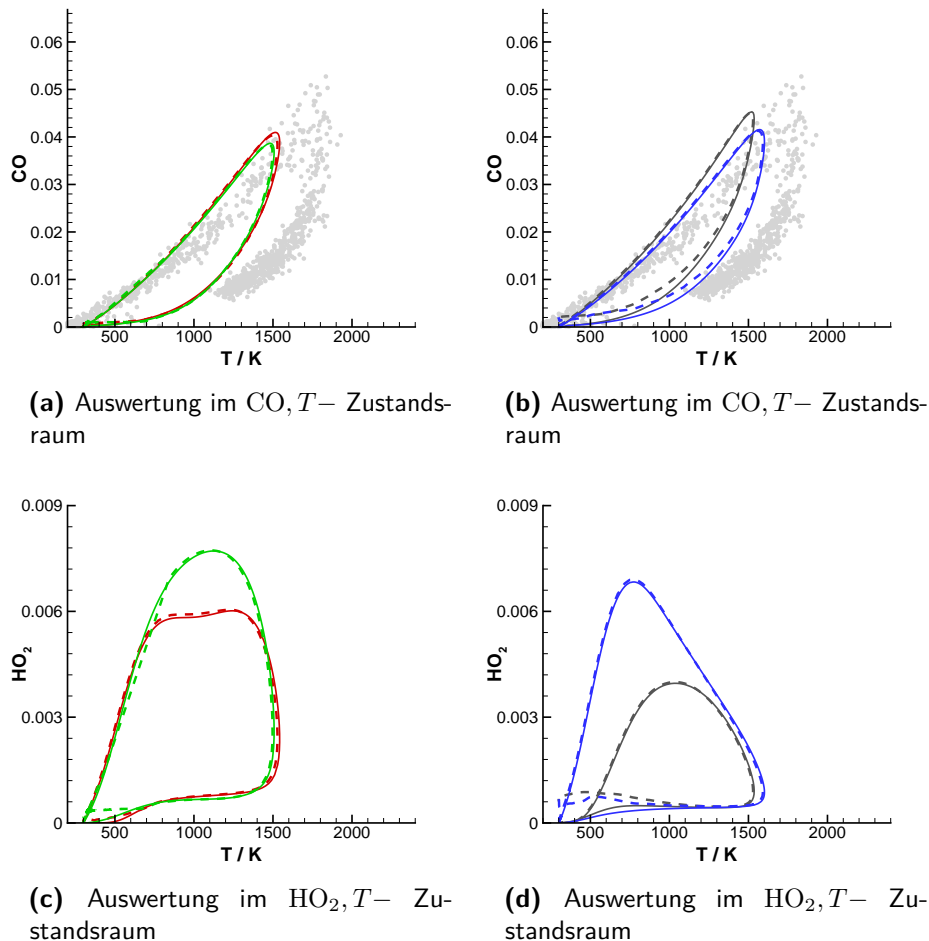


Abbildung 7.6: Werte des Massenbruchs von CO bzw. HO₂ (in (-)) als Funktion der Temperatur T (in K), welche an dem Wandabstand $r_W = 0,2$ mm auftreten [95]. Dargestellt sind die Rechnungen mit dem GRI 3.0 Mechanismus [85] (rot), dem Warnatz Mechanismus [87] (blau), dem SanDiego Mechanismus [82] (grün) und dem Smooke Mechanismus [86] (grau) mit reduzierter (gestrichelte Linie) und detaillierter (durchgezogene Linie) Kinetik. Die experimentellen Ergebnisse von Mann et al. [65] sind ebenfalls dargestellt (graue Punkte).

Abbildung 7.7 zeigt den Verlauf des Wandwärmestroms während des Verlöschungsvorgangs der HOQ-Flamme für die unterschiedlichen Mechanismen. Auch hier sind die Ergebnisse der Rechnungen mit reduzierter und detaillierter Kinetik dargestellt. Es wird ersichtlich, dass sowohl der Quenchzeitpunkt als auch der maximale Wandwärmestrom sehr gut vom reduzierten Modell wiedergegeben werden und der Unterschied zwischen reduzierter und detaillierter Kinetik kleiner ist als der Unterschied, welcher aus den verschiedenen Mechanismen resultiert [95].

Insgesamt kann gesagt werden, dass die REDIM Methode für verschiedene Mechanismen demonstriert wurde und der durch die Modellreduktion entstehende Fehler kleiner ist, als der Fehler, welcher durch die Modellierung des Mechanismus entsteht [95].

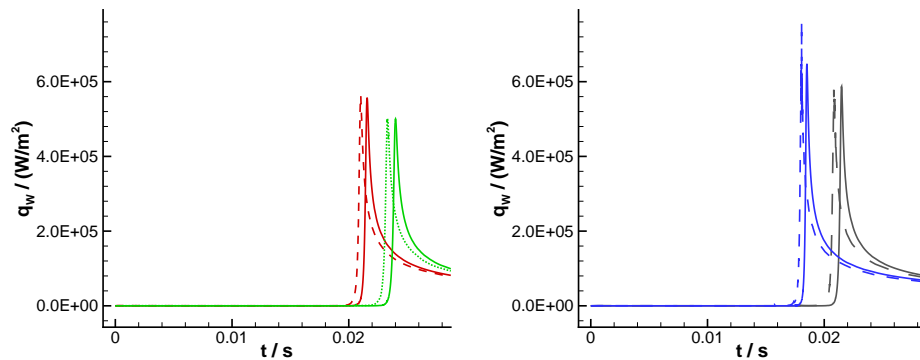


Abbildung 7.7: Wärmestrom q_w (in $\frac{W}{m^2}$) zur Wand als Funktion der Zeit t (in s) während des Verlöschungsvorgangs [95]. Dargestellt sind die Rechnungen, welche mit dem GRI 3.0 Mechanismus [85] (rot), dem Warnatz Mechanismus [87] (blau), dem SanDiego Mechanismus [82] (grün) und dem Smooke Mechanismus [86] (grau) mit reduzierter (gestrichelte Linie) und detaillierter (durchgezogene Linie) Kinetik erstellt wurden.

7.1.3 Einfluss der heterogenen Wandreaktion

Der Einfluss der heterogenen Wandreaktion (siehe Kapitel 5.4) unterscheidet sich je nach betrachtetem Modellsystem. Aus diesem Grund wird die in Kapitel 5.4 vorgestellte Randbedingung für unterschiedliche Modellsysteme angewendet. Zum einen wird sie in diesem Unterkapitel für das Methan/Luft System demonstriert woraufhin es in Kapitel 7.3 für das Isooktan-Luft System gezeigt wird.

Tabelle 7.1: Reaktionsmechanismus der heterogenen Wandreaktion

Edukte	Reaktions- wahrscheinlichkeit	Produkte
1,00 HO ₂	$\xrightarrow{\gamma_k=10^{-2}}$	0,50 H ₂ O + 0,75O ₂
1,00 O	\longrightarrow	0,50 O ₂
1,00 H	\longrightarrow	0,50 H ₂
1,00 OH	\longrightarrow	0,50 H ₂ O + 0,25O ₂

Wie bereits in den vorangegangenen Kapiteln, wird auch hier ein eindimensionales HOQ-Modellsystem gewählt, welches mit den Experimenten von Mann et al. [65] vergleichbar ist: die Wandtemperatur sowie die Temperatur des unverbrannten Gases betragen $T = 300$ K und der Druck ist $p = 1$ bar. Zur Modellierung der chemischen Kinetik wird auf den GRI 3.0 Mechanismus [85] zurückgegriffen. Für die Modellierung der Wandreaktion wird der in Tabelle 7.1 dargestellte Reaktionsmechanismus verwendet, bei dem Radikale an der Wand zu stabileren Molekülen reagieren [96].

Der Einfluss der Wandreaktion hängt stark vom vorherrschenden Druck ab. Bei hohen Drücken sind die freien Weglängen der Teilchen kleiner als bei niederen Drücken wodurch die Moleküle langsamer diffundieren. Aus diesem Grund ist das System in diesem Fall diffusionskontrolliert. Im Falle niedriger Drücke diffundieren die Teilchen schneller und das System ist reaktionskontrolliert. Um die implementierte Wandreaktion zu testen und zu demonstrieren, wird das oben beschriebene HOQ-Modellsystem mit detailliertem Diffusionsmodell zusätzlich für die Drücke $p = 0,2$ bar und $p = 10$ bar angewendet und REDIMs mit diesen Drücken mit der in Kapitel 5.4 vorgestellten Wandreaktion werden erstellt [96].

Für die Ränder der REDIM, welche keine Ränder im physikalischen Raum darstellen werden Randbedingungen gewählt, durch welche sich die Ränder frei entwickeln können (vgl. Kapitel 4.3). Anschließend werden die REDIMs in reduzierten Rechnungen der unterschiedlichen Modellsysteme angewendet und mit den Lösungen der detaillierten Kinetik verglichen. Die Randbedingung der Spezies der detaillierten Lösung ist dabei gegeben durch Gleichung 3.8 [96].

Abbildung 7.8 zeigt die Auswertung der Rechnungen mit detaillierter und reduzierter Kinetik im Zustandsraum für die Wandabstände $r_W = 0,1$ mm und $r_W = 0,02$ mm. Dargestellt sind die spezifischen Molzahlen

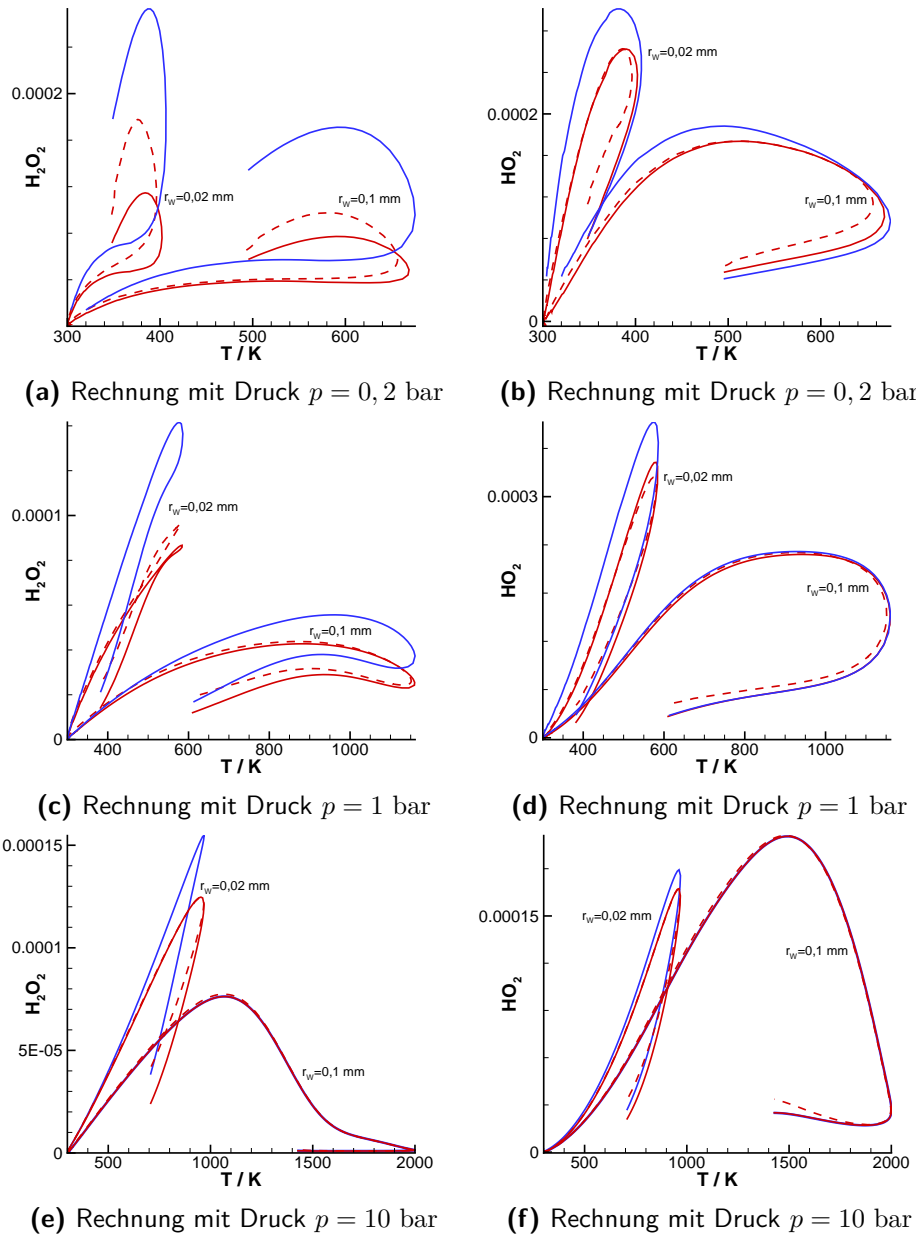


Abbildung 7.8: Werte des Massenbruchs von H_2O_2 bzw. HO_2 (in (-)) als Funktion der Temperatur T (in K), welche an unterschiedlichen Wandabständen für die unterschiedlichen Modellsysteme auftreten [96]. Dargestellt sind Rechnungen mit (rot) und ohne (blau) Wandreaktion mit detaillierter (durchgezogene Linie) und reduzierter Kinetik (gestrichelte Linie).

von H_2O_2 und HO_2 in Abhängigkeit der Temperatur da die Wandreaktion auf diese beiden Spezies den größten Einfluss hat. Auf die anderen Spezies des genutzten Mechanismus hat die Wandreaktion kaum Einfluss was daran liegt, dass bei den vorherrschenden Temperaturen kaum Radikale in direkter Wandnähe vorhanden sind [96]. Neben den Rechnungen mit detaillierter und reduzierter Kinetik mit Wandreaktion ist auch jeweils der Verlauf der detaillierten Rechnung ohne Wandreaktion dargestellt. Es ist zu erkennen, dass die Wandreaktion für den Druck $p = 0, 2$ bar den größten Einfluss hat. Für diesen Druck wird der Verlauf von HO_2 als Funktion der Temperatur sehr gut wiedergegeben, wohingegen es zu leichten Unterschieden für den Verlauf von H_2O_2 für sehr kleine Wandabstände gibt. In diesem Fall liegt das Ergebnis der reduzierten Rechnung zwischen den Ergebnissen der detaillierten Rechnungen mit und ohne Wandreaktion. Für die Drücke $p = 1$ bar und $p = 10$ bar wird die heterogene Wandreaktion von dem reduzierten Modell sehr gut wiedergegeben und unterscheidet sich deutlich von der detaillierten Rechnung ohne Wandreaktion [96]. Insgesamt kann also gesagt werden, dass die heterogene Wandreaktion durch die vorgestellte REDIM-Randbedingung gut wiedergegeben wird [96].

7.1.4 Einfluss mehrdimensionaler Gradienten

In Kapitel 5.2 werden unterschiedliche Gradientenabschätzungen sowie deren Einbindung in den REDIM-Kontext beschrieben. Dabei handelt es sich um ein- bzw. zweidimensionale örtliche Gradienten, welche neben Rechnungen des HOQ-Modellsystems (siehe Kapitel 3.1.1) aus Rechnungen mit dem SWQ-Modellsystem (siehe Kapitel 3.1.2) generiert wurden. In diesem Kapitel sollen REDIMs, welche mit den Gradientenabschätzungen beider Konfigurationen erstellt wurden, verglichen werden. Im Zuge dessen wird geprüft, ob eine REDIM mit HOQ-Gradienten für reduzierte Rechnungen der SWQ-Konfiguration genutzt werden kann.

Für die zu vergleichenden REDIMs wurden der GRI 3.0 Mechanismus [85] und das vereinfachte Diffusionsmodell mit gleichen Diffusivitäten und Lewis-Zahl $Le = 1$ genutzt. Des Weiteren wurde die Wandtemperatur sowie die Temperatur des unverbrannten Gases auf $T = 300$ K gesetzt und der Druck wurde als $p = 1$ bar angenommen [93].

Um den Unterschied dieser REDIMs zu quantifizieren, wird eine dritte REDIM mit HOQ-Gradienten und detailliertem Diffusionsmodell herangezogen, wobei ebenfalls der GRI 3.0 Mechanismus [85] verwendet wurde. Dies ermöglicht, den durch die ein- bzw. zweidimensionalen Gradientenabschätzungen hervorgerufenen Unterschied mit dem durch unterschiedliche Diffusionsmo-

delle hervorgerufenen Unterschied zu vergleichen. Das Diffusionsmodell mit gleichen Diffusivitäten und $Le = 1$ wird für die Methanverbrennung sehr oft angewendet und der dadurch entstehende Fehler gilt als akzeptabel [93]. Ist der Unterschied zwischen den REDIMs unterschiedlicher Gradientenabschätzungen kleiner oder gleich groß wie der Unterschied der REDIMs mit HOQ Gradienten und unterschiedlichen Diffusionsmodellen, so kann die REDIM mit HOQ-Gradienten für reduzierte Rechnungen der SWQ-Konfiguration genutzt werden [93].

Für den Vergleich der drei REDIMs ($REDIM_{HOQ,Le=1}$, $REDIM_{SWQ,Le=1}$ und $REDIM_{HOQ,det.Transp.}$) wird die REDIM mit HOQ-Gradienten und vereinfachtem Transportmodell ($REDIM_{HOQ,Le=1}$) als Referenzwert angenommen.

Für diesen Vergleich wird ein generischer Ansatz verwendet: Es werden die Zustände der REDIMs an allen Gitterpunkten untersucht, indem die Distanz zwischen den entsprechenden Gitterpunkten mit

$$\delta = \|\mathbf{P}_{HOQ,Le=1} \cdot (\boldsymbol{\psi}_{HOQ,Le=1} - \boldsymbol{\psi}_i)\| \quad (7.6)$$

bestimmt wird [93]. Hier sind $\boldsymbol{\psi}_i$ die Zustände von $REDIM_{HOQ,det.Transp.}$ und $REDIM_{SWQ,Le=1}$.

Außerdem ist $\|\dots\|$ die euklidische Norm, der Projektionsoperator

$$\mathbf{P}_{HOQ,Le=1} = \mathbf{I} - \boldsymbol{\psi}_{\boldsymbol{\theta},HOQ,Le=1} \cdot (\boldsymbol{\psi}_{\boldsymbol{\theta},HOQ,Le=1}^T \cdot \mathbf{S} \cdot \boldsymbol{\psi}_{\boldsymbol{\theta},HOQ,Le=1})^{-1} \cdot \boldsymbol{\psi}_{\boldsymbol{\theta},HOQ,Le=1}^T \cdot \mathbf{S} \quad (7.7)$$

projiziert die Distanz der Gitterpunkte auf den normalen Unterraum von $REDIM_{HOQ,Le=1}$ und $\boldsymbol{\psi}_{\boldsymbol{\theta}}$ ist die partielle Ableitung von $\boldsymbol{\psi}$ nach $\boldsymbol{\theta}$, die den tangentialen Unterraum der REDIM aufspannt. Die Skalierungsmatrix $\mathbf{S} = \text{diag}(10^{-12}, 10^{-12}, 1, \dots, 1)$ skaliert die spezifische Enthalpie und den Druck auf die Ordnung 1 und gewährleistet so Orthogonalität im Zustandsraum. Des Weiteren sind die entsprechenden Gitterpunkte der REDIMs diejenigen, die die geringste Differenz der Zustände aufweisen, wobei die spezifische Enthalpie und der Druck mit 10^{-6} skaliert wurden [93].

Anschaulich gesprochen wird durch Gleichung 7.6 der Vektor zwischen REDIMs an jedem Gitterpunkt auf den normalen Unterraum von $REDIM_{SWQ,Le=1}$ projiziert. Der Abstand zwischen den REDIMs ergibt sich also aus der Norm dieser Projektion [93].

Abbildung 7.9 zeigt die so berechneten Abstände in Abhängigkeit der Parametrisierungsvariablen. Es ist zu erkennen, dass der normierte Abstand zwischen $REDIM_{HOQ,Le=1}$ und $REDIM_{HOQ,det.Transp.}$ für die meisten Gitterpunkte größer ist als der Abstand zwischen $REDIM_{HOQ,Le=1}$ und $REDIM_{SWQ,Le=1}$.

Der entstehende Fehler unterscheidet sich dabei um etwa eine Größenordnung [93].

Dies bedeutet, dass der Fehler, welcher durch das ungenaue Transportmodell hervorgerufen wird, größer ist als der Fehler, welcher durch die Verwendung von $\text{REDIM}_{\text{HOQ},Le=1}$ anstelle von $\text{REDIM}_{\text{SWQ},Le=1}$ entsteht. Aus diesem Grund kann $\text{REDIM}_{\text{HOQ},Le=1}$ auch für Berechnungen von SWQ-Konfigurationen genutzt werden [93]. Dies zeigen auch die numerischen Untersuchungen von Ganter et al. [32], bei welchen $\text{REDIM}_{\text{HOQ},Le=1}$ für die reduzierte Beschreibung der SWQ-Konfiguration genutzt wurde, wobei eine gute Übereinstimmung zwischen detaillierter und reduzierter Kinetik vorliegt.

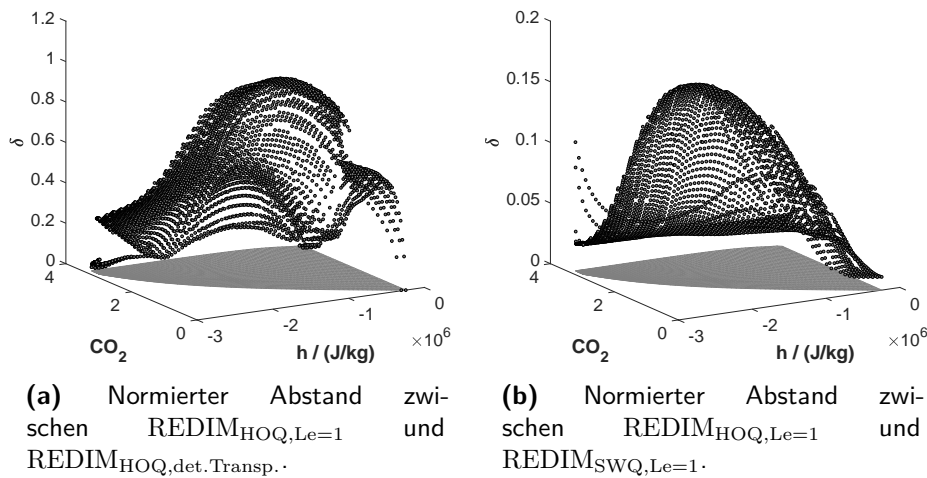


Abbildung 7.9: Normierter Abstand δ zwischen den REDIMs in Abhängigkeit der spezifischen Enthalpie h (in $\frac{\text{J}}{\text{kg}}$) und der spezifischen Molzahl von CO_2 (in $\frac{\text{mol}}{\text{kg}}$).

7.1.5 Implementierung nicht perfekt invarianter REDIMs

In den vorangegangenen Teilkapiteln wurden REDIMs validiert und angewendet, welche als perfekt invariant angenommen werden können. Dies liegt daran, dass zu deren Erstellung sehr genaue Gradientenabschätzungen genutzt wurden, welche aus detaillierten Rechnungen der Modellsysteme stammen. Bereits in Kapitel 6 wurde über die Problematik der Implementierung nicht perfekt invarianter Mannigfaltigkeiten berichtet, welche in diesem Teilkapitel demonstriert werden sollen.

Ausgangspunkt hierfür ist erneut das in den Kapiteln 7.1.1 und 7.1.2 vorgestellte Modellsystem einer HOQ-Flamme: Eine flache Flamme läuft

auf eine Wand zu und verlöscht an dieser, wobei die Wandtemperatur und die Temperatur des unverbrannten Gases 300 K betragen und der Druck konstant bei $p = 1$ bar gehalten wurde. Für die Modellierung der chemischen Kinetik wurde der GRI 3.0 Mechanismus [85] genutzt, für die Modellierung der Diffusion wurde das detaillierte Diffusionsmodell mit Thermo-Diffusion [44] angewendet [94].

Bevor die Implementierung nicht perfekt invarianter Mannigfaltigkeiten demonstriert wird, sollen an dieser Stelle die unterschiedlichen Arten der Implementierung an perfekt invarianten Mannigfaltigkeiten demonstriert werden. Hierfür werden die reduzierten Modellgleichungen in generalisierten Koordinaten (Gleichung 6.5) und physikalischen Variablen mit konstanter Parametrisierungsmatrix (Gleichung 6.8) angewendet und die Ergebnisse werden miteinander verglichen [94].

Modellgleichung 6.5 ist eine sehr generische Modellgleichung, die unabhängig von der Parametrisierung ist. Allerdings scheint die Deutung und das Verständnis dieser Modellgleichung durch die generalisierten Koordinaten im Falle des *Debuggings* schwerer, wodurch einige Forschungsgruppen die Modellgleichung in physikalischen Koordinaten mit konstanter Parametrisierungsmatrix 6.8 vorziehen [94].

Abbildung 7.10 zeigt den Verlauf der Rechnungen im CO, T - sowie OH, CO_2 -Zustandsraum für die Wandabstände $r_W = 0,2$ mm und $r_W = 0,3$ mm [94]. Neben den Ergebnissen mit den reduzierten Modellgleichungen ist hier auch das Ergebnis der Rechnung mit detaillierter Chemie dargestellt. Es ist zu erkennen, dass die Ergebnisse der einzelnen Rechnungen sehr gut miteinander übereinstimmen. Einzig gegen Ende der durchgeführten Rechnungen, nachdem die Flamme verloschen ist und das Gas abkühlt, kommt es durch die grobe Diskretisierung der REDIM in diesen Bereichen zu geringen Abweichungen. Die gute Übereinstimmung der Rechnungen zeigt, dass Gleichung 6.8 im Falle einer perfekt invarianten Mannigfaltigkeit genutzt werden kann, da das Vektorfeld automatisch im tangentialen Raum der Mannigfaltigkeit liegt (siehe Kapitel 6) [94].

Für die Erstellung nicht perfekt invarianter Mannigfaltigkeiten wurde die aus der detaillierten Rechnung des Modellsystems erstellte Gradientenabschätzung mit unterschiedlichen Faktoren $\alpha \in [0, 8; 2, 0]$ multipliziert. Dies hat zur Folge, dass sich die Lage der REDIM verändert, da die REDIM gefunden ist, wenn sich Diffusionsprozesse und Reaktionsprozesse auf der REDIM in Balance halten. Durch diese Veränderung ändern sich nicht nur die Zustände, sondern auch die anderen für die Systemdynamik verantwortlichen Größen [94]. Aus diesem Grund gilt es zu prüfen, ob die Rechnungen mit den

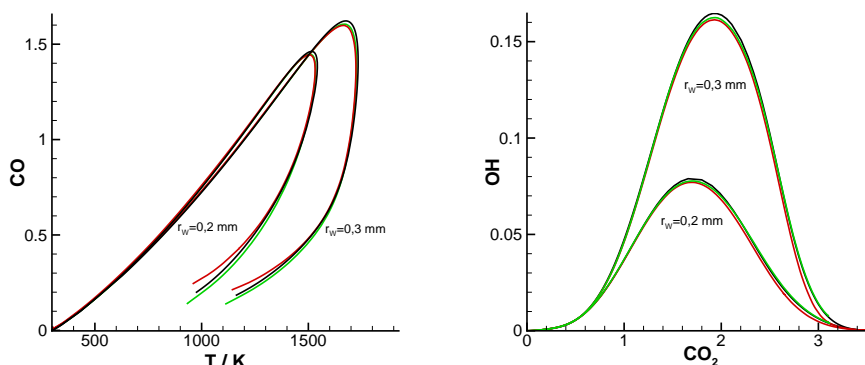


Abbildung 7.10: Werte der spezifischen Molzahl von CO bzw. OH (in $\frac{\text{mol}}{\text{kg}}$) als Funktion der Temperatur T (in K), welche an unterschiedlichen Wandabständen für die perfekt invariante REDIM auftreten [94]. Dargestellt sind Rechnungen der Modellgleichung 6.5 in generalisierte Koordinaten (rot), der Modellgleichung 6.8 in physikalischen Variablen mit konstanter Parametrisierungsmatrix (grün) und die Rechnung mit detaillierter Kinetik (schwarz).

unterschiedlichen Modellgleichungen 6.5 und 6.8 zu den gleichen Ergebnissen führen.

Abbildung 7.11 zeigt den Verlauf der Rechnungen mit reduzierter Kinetik im Zustandsraum für die Wandabstände $r_W = 0,2$ mm und $r_W = 0,3$ mm, wobei die Gradientenabschätzung der REDIM mit dem Faktor $\alpha = 0,9$ multipliziert wurde [94]. Es ist zu erkennen, dass sich die Rechnung mit physikalischen Variablen und fester Parametrisierungsmatrix (Gleichung 6.8) und die Rechnung in generalisierten Koordinaten (Gleichung 6.5) unterscheiden [94]. Dies gilt sowohl für den Verlauf der Spezies CO als Funktion der Temperatur T als auch für den Verlauf der Spezies OH in Abhängigkeit der Spezies CO_2 für beide dargestellten Wandabstände. Es wird ersichtlich, dass sich die Lage der REDIM und somit auch die Systemdynamik der unterschiedlichen Modellgleichungen ändern. Die veränderte Lage hat zur Folge, dass sich die Systemdynamik im Falle einer nicht perfekten Gradientenabschätzung nicht automatisch im tangentialen Unterraum der REDIM befindet [94].

Zur Lösung dieses Problems wurde in Kapitel 6.4 eine verbesserte Modellgleichung 6.11 vorgestellt, bei welcher die Parametrisierungsvariablen auch physikalischen Zustandsvariablen entsprechen. Anders als bei Gleichung 6.8 wird bei der verbesserten Modellgleichung das Vektorfeld automatisch im Tangentialraum der REDIM berechnet [94]. Abbildung 7.11 zeigt neben den oben genannten Ergebnissen auch das Ergebnis der Rechnung mit Gleichung 6.11. Es ist zu erkennen, dass diese Rechnung sehr gut mit der Rechnung in

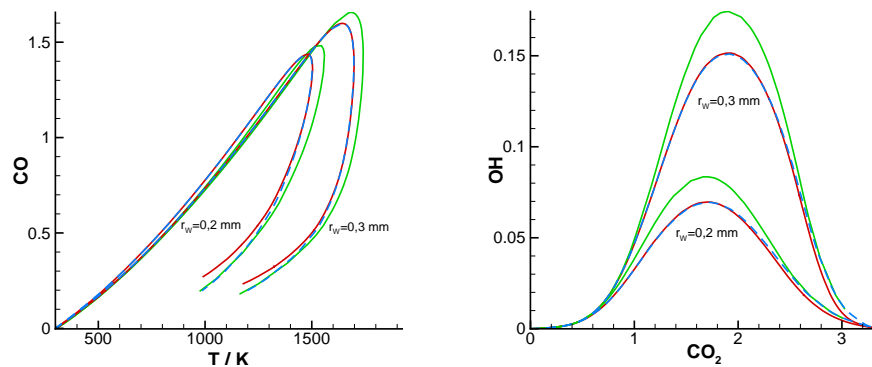


Abbildung 7.11: Werte der spezifischen Molzahl von CO bzw. OH (in $\frac{\text{mol}}{\text{kg}}$) als Funktion der Temperatur T (in K), welche an unterschiedlichen Wandabständen für die REDIM mit $\alpha = 0,9$ auftreten [94]. Dargestellt sind Rechnungen der Modellgleichung 6.5 in generalisierte Koordinaten (rot), der Modellgleichung 6.8 in physikalischen Variablen mit konstanter Parametrisierungsmatrix (grün) und der Modellgleichung in physikalischen Variablen mit Projektion auf den tangentialen Unterraum (blau gestrichelt).

generalisierten Koordinaten übereinstimmt und die beiden Modellgleichungen, welche die Systemdynamik im tangentialen Raum der REDIM berechnen, zu dem gleichen Resultat führen [94].

Um die Problematik mit Modellgleichung 6.8 weiter zu verdeutlichen, sind in Abb. 7.12 die sich für die unterschiedlichen Modellgleichungen ergebenden Flammgeschwindigkeiten in Abhängigkeit des Faktors α dargestellt. Es ist zu erkennen, dass die Flammgeschwindigkeiten für die zwei Modellgleichungen, welche die Systemdynamik im Tangentialraum der REDIM berechnen, gleich sind, wohingegen sie für Gleichung 6.8 variieren. Wird die Gradientenabschätzung durch einen Faktor $\alpha > 1$ vergrößert, hat dies zur Folge, dass auch die Flammgeschwindigkeit zunehmen muss. Für die Modellgleichungen 6.5 und 6.8 ist dies gegeben und die Flammgeschwindigkeit nimmt mit zunehmendem α ebenfalls zu [94]. Für die Ergebnisse der Gleichung 6.8 ist dies allerdings nicht der Fall, wodurch gesagt werden kann, dass diese Gleichung zu fehlerhaften Ergebnissen führen kann [94].

7.2 REDIM für geschichtete Methan/Luft Systeme mit FWI

Neben den in den vorherigen Unterkapiteln vorgestellten homogen vorgemischten Verbrennungssystemen nimmt die geschichtete Verbrennung in heutigen

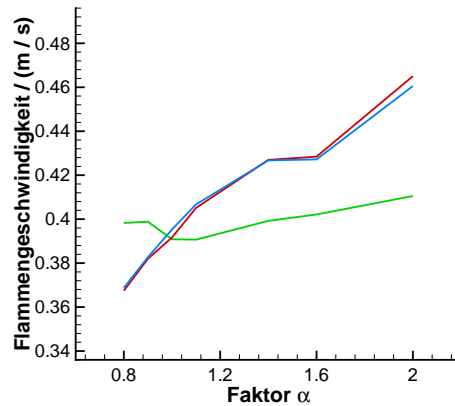


Abbildung 7.12: Flammgeschwindigkeiten (in $\frac{m}{s}$) als Funktion des Faktors α welche mit den verschiedenen Modellgleichungen für die unterschiedlichen REDIMs berechnet wurden [94]. Dargestellt sind Rechnungen der Modellgleichung 6.5 in generalisierte Koordinaten (rot), der Modellgleichung 6.8 in physikalischen Variablen mit konstanter Parametrisierungsmatrix (grün) und der Modellgleichung in physikalischen Variablen mit Berechnung im tangentialen Unterraum (blau gestrichelt).

Verbrennungssystemen (z.B. in modernen Motoren) immer weiter an Bedeutung zu (siehe Kapitel 5.5). In diesem Abschnitt wird die in Kapitel 5.5 vorgestellte Methode zur Erstellung einer REDIM für geschichtete FWI demonstriert und die so erstellte REDIM wird validiert.

Für diese Demonstration wurde der GRI 3.0 Mechanismus [85] für die Modellierung des chemischen Quellterms herangezogen. Außerdem wurden zur Vereinfachung gleiche Diffusivitäten und $Le = 1$ für den molekularen Transport angenommen [92].

Gemäß der in Kapitel 5.5 vorgestellten Beschreibung wurde ein dreidimensionales Anfangsgitter mit Hilfe mehrerer homogener HOQ-Flammen erstellt, wobei der Druck bei $p = 1$ bar gehalten wurde. Das Äquivalenzverhältnis der vorgemischten Flammen wurde von $\phi = 0,5$ bis $\phi = 2,0$ variiert [92].

Zum Lösen der REDIM-Gleichung wurden für die Gradientenabschätzungen in die ersten beiden Richtungen der Gradient der spezifischen Enthalpie und der Gradient von CO_2 aus den detaillierten Lösungen der homogenen Verbrennungssysteme entnommen. Um die Vermischungsprozesse entlang der REDIM zu beschreiben, wurde die Gradientenabschätzung in die dritte Richtung angepasst und es wurde der Gradient

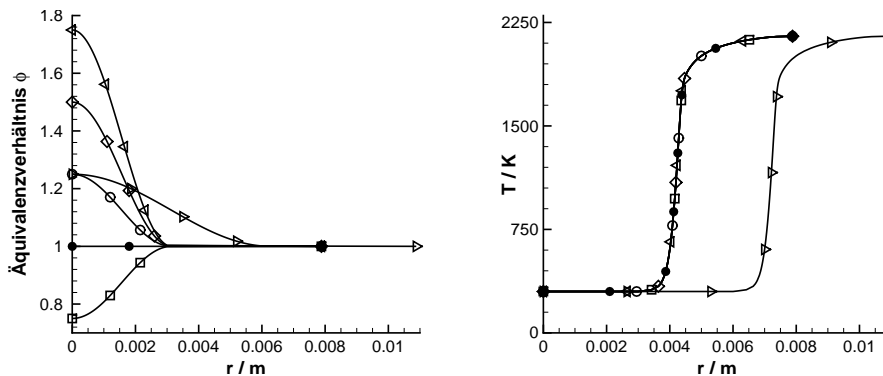
$$\text{grad}N_2 = -100 \frac{\text{mol}}{\text{kg m}} \quad (7.8)$$

Tabelle 7.2: Für die Validierung herangezogene Anfangsprofile für die Rechnungen mit detaillierter und reduzierter Kinetik [92].

Fall	Symbol	ϕ_w an der Wand	Bereich der Inhomogenität
I	●	1,00	keine Schichtung
II	□	0,75	0,003 m
III	○	1,25	0,003 m
IV	▷	1,25	0,006 m
V	◇	1,50	0,003 m
VI	◁	1,75	0,003 m

genutzt [92]. Diese Gradientenabschätzung entspricht ungefähr dem gemittelten räumlichen Gradienten von einer der Beispielrechnungen, welche im Folgenden vorgestellt werden (Fall II).

Um die so erstellte REDIM zu validieren, wurden verschiedene Testfälle generiert, in denen es zu Gemischinhomogenitäten in Wandnähe kommt [92]. Diese Testfälle wurden realisiert, indem ein eindimensionales Anfangsprofil mit über die Ortskoordinate variierendem Äquivalenzverhältnis für das HOQ-Modellsystem angewendet wurde. Abbildung 7.13 zeigt diese Anfangsprofile bezüglich des Äquivalenzverhältnisses ϕ und der Temperatur T als Funktion des Ortes. Außerdem sind die Daten der Anfangsprofile in Tabelle 7.2 angegeben. Ausgehend von diesen Anfangsprofilen wurden Rechnungen mit detaillierter und reduzierter Kinetik durchgeführt und anschließend ausgewertet [92].

**Abbildung 7.13:** Anfangsprofile bezogen auf das Äquivalenzverhältnis ϕ (in $-$) und die Temperatur T (in K) in Abhängigkeit des Wandabstandes r (in m) für Fall I (●), Fall II (□), Fall III (○), Fall IV (▷), Fall V (◇) und Fall VI (◁) [92].

Die Untersuchung und Auswertung erfolgt dabei in drei Unterkapiteln. Durch Tropfenaufprall des Brennstoffs auf die Zylinder- bzw. Kolbenwand ist das Brennstoff-zu-Luft-Verhältnis in Wandnähe typischerweise erhöht [105]. Dies bedeutet, dass das Äquivalenzverhältnis in Wandnähe höher ist als in der Gasphase. Aus diesem Grund liegt der Fokus der Untersuchungen der geschichteten Verbrennungen hier auf Anfangsprofilen mit zunehmendem Brennstoff-zu-Luft-Verhältnis in Wandnähe. Dennoch wird die REDIM zuerst für ein Anfangsprofil mit abnehmenden Äquivalenzverhältnis (Fall II) zur Wand getestet. Die resultierenden detaillierten und reduzierten Rechnungen werden mit Rechnungen mit zunehmendem Äquivalenzverhältnis (Fall III) zur Wand verglichen. Somit wird die REDIM sowohl für Gemischinhomogenitäten mit brennstoffreichem als auch mit brennstoffarmem Gemisch in Wandnähe getestet und validiert [92].

Anschließend werden Rechnungen durchgeführt, welche von Anfangsprofilen mit unterschiedlichen Steigungen bezüglich des Äquivalenzverhältnisses gestartet werden (Fall III und Fall IV) wobei die Gemischzusammensetzung an der Wand und in der Gasphase konstant gehalten wird. Da die Stratifizierung in Fall III innerhalb von 0,003 m und in Fall IV im Bereich von 0,006 m auftritt, variiert der mittlere Gradient der Stratifizierung um den Faktor 2. Auf diese Weise kann sowohl untersucht werden, ob die Steigung der Stratifizierung einen signifikanten Einfluss auf die Ergebnisse hat. Außerdem wird ermittelt, ob die REDIM Schichtungen mit unterschiedlichen Gradienten abdecken kann, obwohl sie mit einer konstanten Gradientenabschätzung erstellt wurde [92].

Zuletzt werden Rechnungen mit Anfangsprofilen unterschiedlicher Stratifizierung verglichen. In diesem Fall wird das Äquivalenzverhältnis an der Wand variiert wobei der Bereich der Schichtung konstant bei 0,003 m beibehalten wird [92].

Zunehmendes und abnehmendes Brennstoff-zu-Luft-Verhältnis an der Wand

In diesem Abschnitt werden Rechnungen, welche von den Anfangsprofilen I, II und III gestartet werden, verglichen. Bei diesen Anfangsprofilen handelt es sich um ein homogenes, stöchiometrisches Gemisch, ein Gemisch mit abnehmendem Äquivalenzverhältnis ($\phi_W = 0,75$) zur Wand und ein Gemisch mit zunehmendem Äquivalenzverhältnis ($\phi_W = 1,25$) zur Wand. Die Flammenfronten der betrachteten Anfangsprofile weisen den gleichen Abstand zur Wand auf.

Abbildung 7.14 zeigt die Wandwärmestromdichte $q_W = | - \lambda \text{ grad } T |$ für die detaillierten und reduzierten Rechnungen ausgehend von den genannten Anfangsprofilen. Es wird ersichtlich, dass der Maximalwert des Wandwärmestroms der homogenen Verbrennung größer ist als die Maximalwerte der geschichteten Verbrennungen. Des Weiteren wird ersichtlich, dass die Flammen zu ähnlichen Zeitpunkten die Wand erreichen, da q_W zu ähnlichen Zeitpunkten zu steigen beginnt wohingegen der maximale Wandwärmestrom zu unterschiedlichen Zeitpunkten erreicht wird. Dieses Verhalten wird durch die REDIM sehr gut wiedergegeben, da die Verläufe der detaillierten Rechnungen gut mit denen der reduzierten Rechnungen übereinstimmen. Sowohl der maximale Wandwärmestrom als auch der Zeitpunkt des maximalen Wandwärmestroms werden sehr gut von der reduzierten Rechnung reproduziert [92].

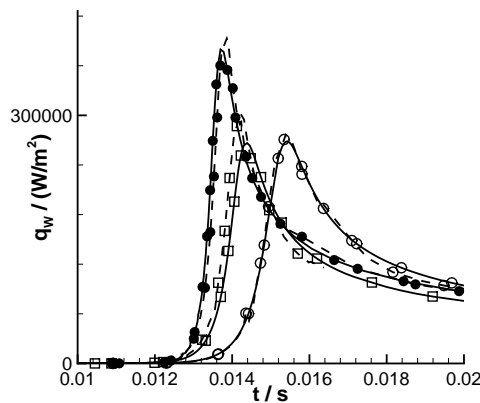


Abbildung 7.14: Wärmestromdichte q_W zur Wand (in $\frac{W}{m^2}$) in Abhängigkeit der Zeit t (in s) für Fall I (●), Fall II (□) und Fall III (○) für die detaillierte (durchgezogene Linie) und reduzierte Kinetik (gestrichelte Linie) [92].

Anders als in vorherigen Kapiteln wird in diesem Kapitel für die Auswertung und Analyse der Spezies nicht der Verlauf einer Zustandsvariable in Abhängigkeit einer anderen für einen bestimmten Wandabstand untersucht. Stattdessen wird eine Zustandsvariable in Abhängigkeit der Zeit für einen bestimmten Wandabstand analysiert [92]. Auf diese Weise geht die Information über den zeitlichen Verlauf nicht verloren.

Abbildung 7.15 zeigt die spezifische Molzahl von CH_4 und CH_2O direkt an der Wand ($r_W = 0$ m) und an dem Wandabstand $r_W = 0,001$ m als Funktion der Zeit. An der Position $r_W = 0,001$ m ist der Einfluss der Wand bereits sichtbar (siehe vorangegangene Kapitel).

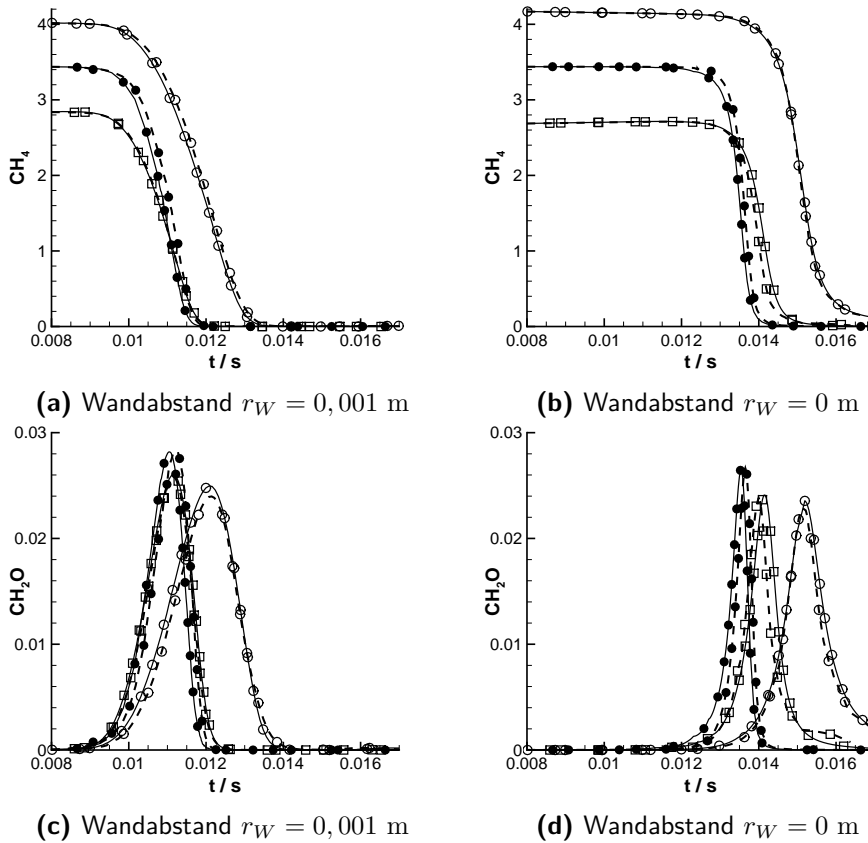


Abbildung 7.15: Spezifische Molzahl unterschiedlicher Spezies (in $\frac{\text{mol}}{\text{kg}}$) an den Wandabständen $r_W = 0$ m und $r_W = 0,001$ m als Funktion der Zeit t (in s) [92]. Dargestellt sind die Rechnungen mit detaillierter (durchgezogene Linie) und reduzierter Kinetik (gestrichelte Linie) von Fall I (\bullet), Fall II (\square) und Fall III (\circ).

Die Flammenfronten passieren zuerst den Wandabstand $r_W = 0,001$ m wodurch die spezifische Molzahl von CH_4 sinkt. Durch die chemische Reaktion wird die Zwischenspezies CH_2O gebildet und anschließend verbraucht, wobei gleichzeitig die Produkte CO_2 und H_2O gebildet werden. Anschließend erreicht die Flamme die Wand und auch hier wird CH_4 oxidiert und CH_2O gebildet und verbraucht. Die Steigung des Abfalls des CH_4 der stöchiometrischen, homogenen Rechnung (Fall I) ist größer als die der geschichteten Verbrennungen. Der maximale Wert von CH_2O wird bei dem Wandabstand $r_W = 0,001$ m für die homogene Rechnung (Fall I) und die Rechnung mit sinkendem Brennstoff-zu-Luft-Verhältnis an der Wand (Fall II) nahezu zeitgleich erreicht, wohingegen der Maximalwert für das ansteigende Brennstoff-zu-Luft-

Verhältnis an der Wand später erreicht wird. Außerdem ist die Steigung des Anstiegs von CH_2O für Fall III geringer als die der anderen beiden Rechnungen. Dies lässt sich durch das Verhalten von freien Flammen unterschiedlicher Äquivalenzverhältnisse erklären, bei welchen die Flammendicke der fetten Flammen größer ist als die der stöchiometrischen oder mageren Flammen. Außerdem ist der maximal erreichte CH_2O -Wert für die fette Verbrennung geringer [92].

Die Maximalwerte des CH_2O direkt an der Wand ($r_W = 0$ m) werden für alle drei Anfangsprofile zu unterschiedlichen Zeitpunkten erreicht, da die Flammen zu unterschiedlichen Zeitpunkten auf die Wand treffen und verlöschen. Diese Beobachtung ist mit dem Verlauf des Wandwärmestroms konsistent, deren Maxima auch zu unterschiedlichen Zeitpunkten erreicht werden [92].

Außerdem zeigt Abbildung 7.15, dass die beschriebene Systemdynamik von der reduzierten Kinetik sehr gut wiedergegeben wird [92].

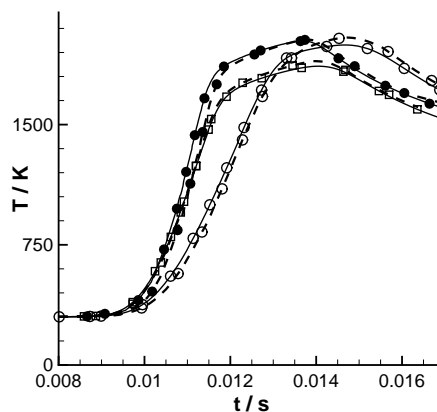


Abbildung 7.16: Temperatur (in K) am Wandabstand $r_W = 0,001$ m als Funktion der Zeit t (in s). Dargestellt sind die Rechnungen mit detaillierter (durchgezogene Linie) und reduzierter Kinetik (gestrichelte Linie) von Fall I (●), Fall II (□) und Fall III (○).

Abbildung 7.16 zeigt den Verlauf der Temperatur als Funktion der Zeit für den Wandabstand $r_W = 0,001$ m (am Wandabstand $r_W = 0$ m beträgt die Temperatur durch die Dirichlet-Randbedingung konstant 300 K). Hier werden sowohl der Verlauf des Erwärmens als auch der Beginn des Abkühlens sehr gut durch die REDIM reproduziert und auch die maximal erreichte Temperatur wird sehr gut wiedergegeben.

Insgesamt kann gesagt werden, dass die REDIM reduzierte Kinetik sowohl für Gemischinhomogenitäten mit fetter als auch mit magerer Mischung an der Wand sehr gute Ergebnisse erzielt und somit für reduzierte Rechnungen genutzt werden kann [92].

Variation des Gradienten der Stratifizierung

In diesem Abschnitt werden Rechnungen verglichen, welche ausgehend von den Anfangsprofilen III und IV starten. Bei diesen Anfangsprofilen betragen die Äquivalenzverhältnisse an der Wand $\phi = 1,25$ und am rechten Rand des Rechengebietes $\phi = 1,0$, allerdings variiert der Gradient der Schichtung bzw. des Äquivalenzverhältnisses um Faktor 2 (siehe Abb. 7.13).

Abbildung 7.17 zeigt die Wärmestromdichte zur Wand für die genannten Rechnungen. Es ist zu beobachten, dass die maximalen Wärmeströme beider Rechnungen unabhängig vom Gradienten der Schichtung nahezu gleich groß sind [92]. Die zeitliche Verschiebung der maximalen Wärmestromdichten ist darauf zurückzuführen, dass sich die Flammenfront aufgrund der unterschiedlichen Steigungen der Schichtung im Anfangsprofil an unterschiedlichen Wandabständen befindet [92].

Des Weiteren ist auch hier zu beobachten, dass sowohl die maximalen Wärmestromdichten als auch die Zeit bei der die maximalen Wärmestromdichten auftreten durch das reduzierte kinetische Modell für beide Fälle sehr gut reproduziert werden [92].

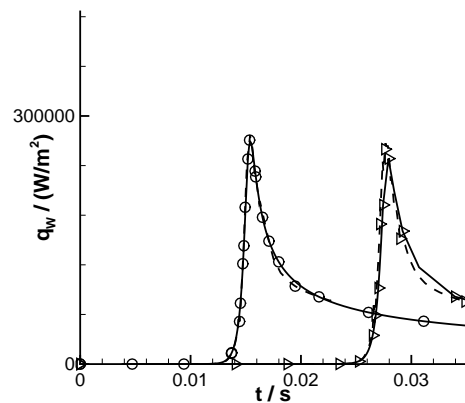


Abbildung 7.17: Wärmestromdichte q_w zur Wand (in $\frac{W}{m^2}$) in Abhängigkeit der Zeit t (in s) für Fall III (\circ) und Fall IV (\triangleright) für die detaillierte (durchgezogene Linie) und reduzierte Kinetik (gestrichelte Linie) [92].

Das gleiche Verhalten zeigt sich für die Profile der Zustandsvariablen als Funktion der Zeit direkt an der Wand ($r_W = 0$ m). Hier sehen die Verläufe sehr ähnlich aus, sie sind lediglich verschoben bezüglich der Zeit. Auch bei dem Wandabstand $r_W = 0,001$ m sehen die zeitlichen Verläufe ähnlich aus, allerdings variiert hier der im Anfangsprofil vorgegebene Wert von beispielsweise CH_4 durch den unterschiedlichen Gradienten der Schichtung [92]. Abbildung 7.18 zeigt dies für die spezifische Molzahl von CH_4 , die zu Beginn der Rechnungen ($t = 0$ s) variiert. Außerdem zeigt die Abbildung den Verlauf der spezifischen Molzahl von CH_2O , der sich für die Rechnungen der unterschiedlichen Anfangsprofile lediglich um die Verschiebung der Zeit unterscheiden. Auch hier erkennt man, dass die Ergebnisse der detaillierten und reduzierten Kinetik sehr gut übereinstimmen obwohl in beiden reduzierten Rechnungen eine REDIM mit gleicher Gradientenabschätzung genutzt wurde [92].

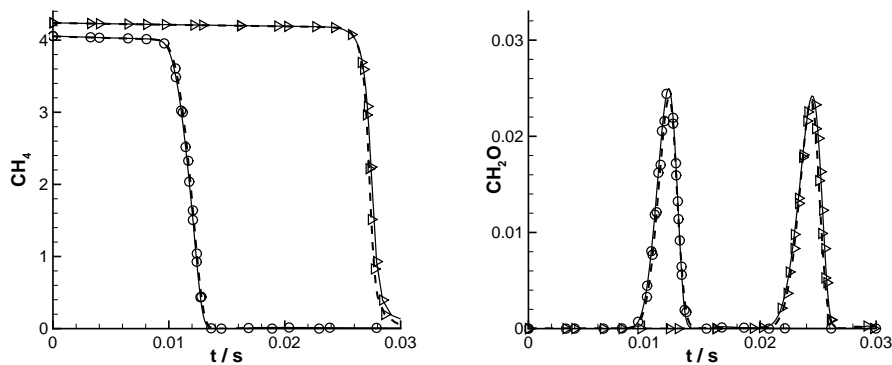


Abbildung 7.18: Spezifische Molzahl unterschiedlicher Spezies (in $\frac{\text{mol}}{\text{kg}}$) an dem Wandabstand $r_W = 0,001$ m als Funktion der Zeit t (in s) [92]. Dargestellt sind die Rechnungen mit detaillierter (durchgezogene Linie) und reduzierter Kinetik (gestrichelte Linie) von für Fall III (\circ) und Fall IV (\triangleright).

Variation der Stärke der Stratifizierung

In diesem Abschnitt wird die Systemdynamik bei variierender Höhe der Stratifizierung an der Wand untersucht. Hierzu wurden reduzierte und detaillierte Rechnungen von den Anfangsprofilen I, III, V und VI gestartet. Die Äquivalenzverhältnisse dieser Anfangsprofile direkt an der Wand betragen $\phi = 1,0$, $\phi = 1,25$, $\phi = 1,5$ und $\phi = 1,75$ wohingegen die Äquivalenzverhältnisse in der Gasphase fernab der Wand bei $\phi = 1,0$ liegen (vgl. Abb. 7.13).

Auch in diesem Abschnitt wird die Wärmestromdichte zur Wand untersucht, die in Abb. 7.19 dargestellt ist. Die Abbildung zeigt, dass die maximale

Wärmestromdichte sowie der Gradient des Verlaufs der Wärmestromdichte mit zunehmendem Äquivalenzverhältnis an der Wand abnehmen. Diese Beobachtung wird durch die oben beschriebenen unterschiedlichen Flammenprofile für die unterschiedlichen Äquivalenzverhältnisse verursacht [92].

Des Weiteren wird aus Abb. 7.19 ersichtlich, dass die maximal erreichten Wärmestromdichten in den Rechnungen unterschiedlicher Anfangsprofile mit der REDIM reduzierten Kinetik sehr gut reproduziert werden, während es geringfügige Unterschiede in der Zeit der maximalen Wärmestromdichte für Fall V und Fall VI gibt. Dieser Unterschied liegt für Fall IV (Beispiel mit der höchsten Schichtung) bei etwa 7 % [92].

Abbildung 7.20 zeigt die spezifischen Molzahlen von CH_4 und CH_2OH für den Wandabstand $r_W = 0$ m als Funktion der Zeit. Es wird ersichtlich, dass die Ungenauigkeiten bzgl. der Zeit auch hier auftreten wohingegen die Maximal- und Minimalwerte durch die reduzierte Kinetik sehr gut wiedergegeben werden. Darüber hinaus ist zu beobachten, dass im verbrannten Gas sowohl für die detaillierte als auch für die reduzierte Kinetik noch CH_4 vorhanden ist, was durch den Kraftstoffüberschuss verursacht wird [92].

Die genannten Abweichungen bei starker Stratifizierung können auf die grobe Diskretisierung der REDIM-Tabelle in die dritte Dimension (Richtung von N_2) zurückzuführen sein. Dies kann durch eine feinere Diskretisierung verbessert werden [92]. Die genutzte REDIM gilt für Äquivalenzverhältnisse von $\phi = 0,5$ bis $\phi = 2,0$. Eine feinere Diskretisierung würde zu einer höheren Gitteranzahl führen. In praktischen Anwendungen variieren die Äquivalenzverhältnisse allerdings weniger, wodurch eine genauere Diskretisierung bei gleichbleibender Gitterpunktanzahl ermöglicht wird [92].

Insgesamt kann gesagt werden, dass die REDIM die Systemdynamik für geschichtete Verbrennungen mit FWI gut beschreiben kann [92].

7.3 REDIM für vorgemischte Isooktan/Luft Systeme mit FWI

Um zu zeigen, dass das in dieser Arbeit vorgestellte reduzierte kinetische Modell auch für Kraftstoffe angewendet werden kann, welche in der Praxis eine größere Bedeutung haben, wurde eine REDIM für FWI von homogenen Isooktan/Luft Systemen erstellt. Dieses System wird üblicherweise durch relativ große Mechanismen abgebildet, was zusätzlich dazu führt, dass die REDIM für einen komplexen Kraftstoff demonstriert wird [97].

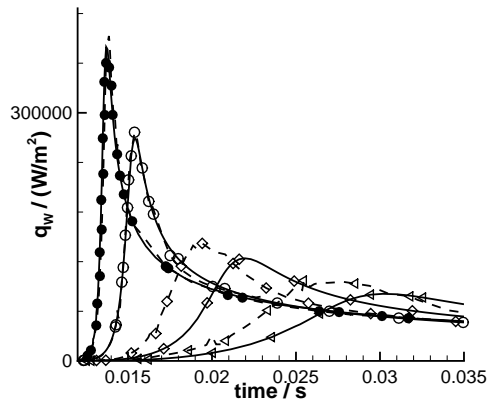


Abbildung 7.19: Wärmestromdichte q_W zur Wand (in $\frac{\text{W}}{\text{m}^2}$) in Abhängigkeit der Zeit t (in s) für Fall I (●), Fall III (○), Fall V (◇) und Fall VI (◁) für die detaillierte (durchgezogene Linie) und reduzierte Kinetik (gestrichelte Linie).

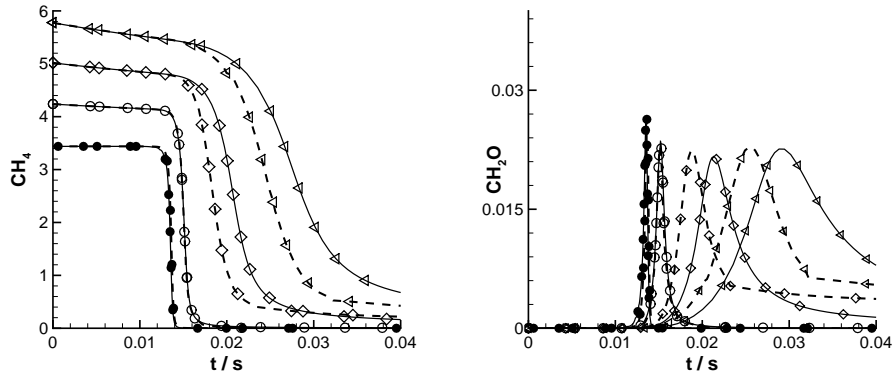


Abbildung 7.20: Spezifische Molzahl unterschiedlicher Spezies (in $\frac{\text{mol}}{\text{kg}}$) an dem Wandabstand $r_W = 0$ m als Funktion der Zeit t (in s) [92]. Dargestellt sind die Rechnungen mit detaillierter (durchgezogene Linie) und reduzierter Kinetik (gestrichelte Linie) für Fall III (○) und Fall IV (▷).

Die REDIM wird für eine HOQ-Flamme beim Druck $p = 1$ bar erstellt, wobei die Temperatur des unverbrannten Gases und der Wand $T = 300$ K betragen. Für die Modellierung der molekularen Diffusion wird das detaillierte Diffusionsmodell basierend auf der Curtis-Hirschfelder-Approximation [44] angewendet, für die Modellierung der chemischen Kinetik dient der Golovitchev-Mechanismus [10] mit 84 Spezies und 412 Reaktionen. Wie auch für das Methan/Luft System, wird der Mechanismus aus Tabelle 7.1 für die Modellierung der Wandreaktion herangezogen [97].

Auch hier werden das zweidimensionale Anfangsgitter der REDIM sowie die Gradientenabschätzung aus zuvor durchgeführten detaillierten Rechnungen des Modellsystems erstellt. An den Rändern der REDIM, welche den physikalischen Rändern im Ortsraum entsprechen, werden als Randbedingung heterogene Wandreaktionen implementiert. An den Rändern der REDIM, deren Zustände im physikalischen Raum keinen Rändern entsprechen, kommt die Randbedingung für freie Mannigfaltigkeitsränder zum Einsatz (siehe Kapitel 4.3) [97].

Nach dem Erstellen der REDIM wird diese für Rechnungen mit reduzierter Chemie genutzt und die Ergebnisse werden mit den Ergebnissen der detaillierten Chemie verglichen.

Abbildung 7.21 zeigt verschiedene Spezies in Abhängigkeit der Temperatur T für unterschiedliche Wandabstände. Dargestellt sind neben den Rechnun-

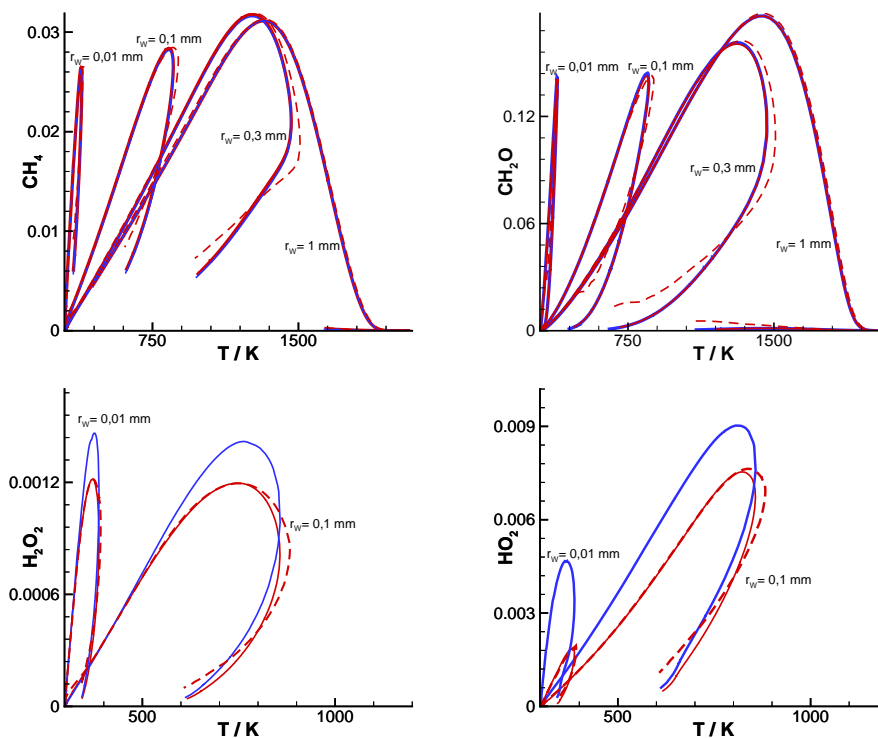


Abbildung 7.21: Spezifische Molzahl verschiedener Spezies (in $\frac{\text{mol}}{\text{kg}}$) in Abhängigkeit der Temperatur T (in K) für unterschiedliche Wandabstände [97]. Dargestellt sind die Ergebnisse der detaillierten Kinetik ohne Wandreaktion (blau), der detaillierten Kinetik mit Wandreaktion (rote, durchgezogene Linie) und der reduzierten Kinetik mit Wandreaktion (rote, gestrichelte Linie).

gen mit detaillierter und reduzierter Chemie mit Wandreaktion auch die Ergebnisse der detaillierten Chemie ohne Wandreaktion. Dies ermöglicht, die Güte der Randbedingung zu demonstrieren. In der Abbildung ist zu erkennen, dass die Wandreaktion fast keinen Einfluss auf die meisten Spezies (wie z.B. die abgebildeten Spezies CH_4 und CH_2O) hat. Wie auch bei Methan (siehe Kapitel 7.1.3) zeigt sich der Unterschied hauptsächlich für die Spezies H_2O_2 und HO_2 , welche durch die Wandreaktion reduziert werden. Es ist zu erkennen, dass die REDIM reduzierte Chemie die detaillierte Chemie sehr gut reproduziert. Auch die implementierte Wandreaktion wird durch das reduzierte Modell sehr gut wiedergegeben [97].

Abbildung 7.22 zeigt die Wandwärmestromdichte als Funktion der Zeit für die detaillierte sowie reduzierte Kinetik mit Wandreaktionen. Es ist zu erkennen, dass die maximale Wärmestromdichte wie auch der Zeitpunkt der maximalen Wärmestromdichte sehr gut von der reduzierten Kinetik reproduziert wird [97].

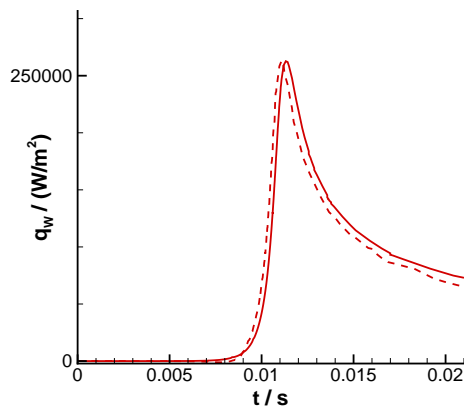


Abbildung 7.22: Wärmestromdichte q_w zur Wand (in $\frac{\text{W}}{\text{m}^2}$) in Abhängigkeit der Zeit t (in s) für die detaillierte (durchgezogene Linie) und reduzierte Kinetik (gestrichelte Linie).

Die Auswertungen zeigen, dass die REDIM auch für den oftmals in der Praxis genutzten Brennstoff Isooktan sehr gute Ergebnisse liefert und für reduzierte Rechnungen herangezogen werden kann. Obwohl der Brennstoff durch die hohe Anzahl an Spezies und Elementarreaktion um ein vielfaches komplexer ist als die im Rahmen der vorliegenden Arbeit genutzten Methan-Mechanismen [82, 85–87], muss für die reduzierte Beschreibung lediglich eine zweidimensionale REDIM genutzt werden [97].

8 Zusammenfassung und Ausblick

Der Einfluss der Wand auf Verbrennungsprozesse gewinnt in der aktuellen Forschung immer mehr an Bedeutung. Dies resultiert zum einen aus dem andauernden Trend des *Downsizings* in modernen Gasturbinen und Verbrennungsmotoren. Außerdem werden Verbrennungssysteme immer besser verstanden und detaillierter modelliert, wodurch das Augenmerk auf den Einfluss der Wand fällt.

Simulationen von komplexen Verbrennungssystemen mit detaillierter Berechnung der chemischen Kinetik stellen auch in der heutigen Zeit trotz modernster Computer einen enormen, oftmals nicht zu bewältigenden Rechenaufwand dar. Die Komplexität wird dabei durch zwei Dinge bestimmt: Zum einen können komplexe Geometrien (z.B. Motoren) simuliert werden, zum anderen bestehen die meisten Reaktionsmechanismen aus einer sehr großen Anzahl von Spezies und Reaktionen. Um dennoch Berechnungen dieser Systeme mit vertretbarem Rechenaufwand zu ermöglichen, werden reduzierte kinetische Modelle entwickelt und implementiert. Ein reduziertes kinetisches Modell, welches sowohl die chemische Kinetik als auch Diffusionsprozesse berücksichtigt, ist die REDIM Methode [14]. Diese wurde ursprünglich für Verbrennungsprozesse in der Gasphase, fernab von Wänden, entwickelt.

Im Rahmen dieser Arbeit wurde die REDIM Methode für Verbrennungsprozesse in Wandnähe adaptiert und weiterentwickelt. Im Zuge dessen musste die REDIM dahingehend erweitert werden, dass sie den bei Flamme-Wand-Interaktionen (FWI) auftretenden Wärmeverlust an die Wand berücksichtigt. Zur weiteren Verfeinerung des reduzierten Modells für FWI wurde eine Randbedingung für heterogene Wandreaktionen formuliert und in die REDIM implementiert.

Damit neben den eindimensionalen Rechnungen des *Head-On Quenching* (HOQ)-Systems auch reduzierte Rechnungen des mehrdimensionalen *Side-Wall Quenching* (SWQ)-Systems mit großer Genauigkeit durchgeführt werden können, wurde eine Methodik zur Einbindung mehrdimensionaler Gradientenabschätzungen für REDIMs mit FWI erarbeitet und implementiert.

Oftmals sind Oxidationsmittel und Brennstoff in der Brennkammer praktischer Anwendungen nicht homogen vorgemischt was in Gemischinhomogenitäten resultiert. Aus diesem Grund wurde die REDIM dahingehend erweitert,

dass sie für die reduzierte Behandlung inhomogener Gemischzusammensetzungen angewendet werden kann.

Für die Validierung der REDIMs wurden Rechnungen mit detaillierter und reduzierter Chemie analysiert und miteinander verglichen. Die detaillierten Auswertungen zeigen, dass alle vorgestellten REDIMs die Systemdynamik der Simulation mit detaillierter Chemie sehr gut reproduzieren.

Neben der Entwicklung und Erstellung von reduzierten kinetischen Modellen für FWI wurde in dieser Arbeit auch die Implementierung mannigfaltigkeitsbasierter reduzierter kinetischer Modelle detailliert untersucht und analysiert. Es wurde gezeigt, dass es, je nach verwendeter reduzierter Modellgleichung, zu einem Fehler kommen kann, sofern die Mannigfaltigkeit nicht perfekt invariant ist. Um dieses Problem zu umgehen, wurde im Rahmen dieser Arbeit eine verbesserte Modellgleichung hergeleitet und implementiert.

Die in der vorliegenden Arbeit vorgestellten reduzierten kinetische Modelle für Verbrennungsprozesse in Wandnähe liefern sehr gute und akkurate Ergebnisse. Dennoch können die Modelle in zukünftigen Arbeiten noch weiter verfeinert werden. Im Rahmen dessen können weitere Untersuchungen bezüglich der Schadstoffbildung durchgeführt werden, welche daraufhin in die REDIM implementiert werden kann. Gleiches gilt für Verbrennungssysteme bei höheren Drücken, wie sie typischerweise in Motoren vorkommen.

Außerdem kann das REDIM-Konzept dahingehend erweitert werden, dass eine hierarchische Mannigfaltigkeitsgenerierung für FWI ermöglicht wird. Dies kann auf Basis einer Randbedingung erfolgen, welche von Neagos et al. [70] vorgestellt und implementiert wurde. Mit Hilfe einer Zeitskalenanalyse und detaillierten Rechnungen kann dabei die für eine Dimensionserhöhung notwendige zusätzliche Richtung abgeschätzt werden.

Die sogenannte Modellreduktion *on the fly* stellt eine weitere Möglichkeit dar, die in künftigen Arbeiten implementiert werden kann. Hierbei wird das reduzierte Modell simultan zur Durchführung der reduzierten Rechnung erstellt. Die sich aus der reduzierten Rechnung ergebenden Gradienten werden direkt für die Berechnung der REDIM herangezogen. Die Implementierung dieses Konzepts mit einer geeigneten Schnittstelle zwischen der Erstellung der REDIM und der Bereitstellung der Gradienten stellt dabei die größte Herausforderung dar.

Literatur

- [1] P. H. de ALMEIDA KONZEN, T. RICHTER, U. RIEDEL und U. MAAS. »Implementation of REDIM reduced chemistry to model an axisymmetric laminar diffusion methane–air flame«. In: *Combustion Theory and Modelling* 15.3 (2011), S. 299–323.
- [2] J. ANDRAE, P. BJÖRNBOM, L. EDSBERG und L.-E. ERIKSSON. »A numerical study of side wall quenching with propane/air flames«. In: *Proceedings of the Combustion Institute*. Bd. 29. 1. Sapporo, Japan, 2002, S. 789–795.
- [3] A. AVDIĆ, G. KUENNE, A. KETELHEUN, A. SADIKI, S. JAKIRLIĆ und J. JANICKA. »High performance computing of the Darmstadt stratified burner by means of large eddy simulation and a joint ATF-FGM approach«. In: *Computing and Visualization in Science* 16.2 (2013), S. 77–88.
- [4] F. BATTIN-LECLERC. »Detailed chemical kinetic models for the low-temperature combustion of hydrocarbons with application to gasoline and diesel fuel surrogates«. In: *Progress in Energy and Combustion Science* 34.4 (2008), S. 440–498.
- [5] J. BAUER. *Effiziente Implementierung reduzierter Reaktionsmechanismen basierend auf intrinsischen niedrig-dimensionalen Mannigfaltigkeiten*. 1. Auflage. Göttingen: Cuvillier Verlag, 2007.
- [6] J. BAUER, V. BYKOV und U. MAAS. »Implementation of ILDMs based on a representation in generalized coordinates«. In: *Proceedings of the European Conference on Computational Fluid Dynamics, ECCOMAS CFD*. Bd. 4. Egmond aan Zee, Niederlande, 2006, S. 1–15.
- [7] R. B. BIRD, W. E. STEWART und E. N. LIGHTFOOT. *Transport Phenomena*. 2. Auflage. New York: John Wiley & Sons Inc., 2007.
- [8] T. BLASENBREY und U. MAAS. »ILDMs of higher hydrocarbons and the hierarchy of chemical kinetics«. In: *Proceedings of the Combustion Institute*. Bd. 28. 2. Edinburgh, Schottland, 2000, S. 1623–1630.

- [9] G. BRUNEAUX, T. POINSOT und J. H. FERZIGER. »Premixed flame-wall interaction in a turbulent channel flow: budget for the flame surface density evolution equation and modelling«. In: *Journal of Fluid Mechanics* 349 (1997), S. 191–219.
- [10] F. BUDA, R. BOUNACEUR, V. WARTH, P.-A. GLAUDE, R. FOURNET und F. BATTIN-LECLERC. »Progress toward a unified detailed kinetic model for the autoignition of alkanes from C4 to C10 between 600 and 1200 K«. In: *Combustion and Flame* 142.1-2 (2005), S. 170–186.
- [11] W. B. BUSH, F. E. FENDELL und S. F. FINK. »Effect of boundary thermal constraint on planar premixed-flame/wall interaction«. In: *Combustion Science and Technology* 24.1-2 (1980), S. 53–70.
- [12] V. BYKOV und U. MAAS. »Extension of the ILDM method to the domain of slow chemistry«. In: *Proceedings of the Combustion Institute*. Bd. 31. 1. Heidelberg, Deutschland, 2007, S. 465–472.
- [13] V. BYKOV und U. MAAS. »Problem adapted reduced models based on reaction-diffusion manifolds (REDIMs)«. In: *Proceedings of the Combustion Institute*. Bd. 32. 1. Montreal, Kanada, 2009, S. 561–568.
- [14] 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.
- [15] V. BYKOV, A. NEAGOS, A. KLIMENKO und U. MAAS. »Hierarchical structure of slow manifolds of reacting flows«. In: *Zeitschrift für physikalische Chemie* 229.6 (2015), S. 833–856.
- [16] 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. 1. Warschau, Polen, 2013, S. 197–203.
- [17] E. CHIAVAZZO, A. N. GORBAN und I. V. KARLIN. »Comparison of invariant manifolds for model reduction in chemical kinetics«. In: *Communication in Computational Physics* 2.5 (2007), S. 964–992.
- [18] P. J. COELHO und N. PETERS. »Unsteady modelling of a piloted methane/air jet flame based on the Eulerian particle flamelet model«. In: *Combustion and Flame* 124.3 (2001), S. 444–465.
- [19] 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.

-
- [20] F. DABIREAU, B. CUENOT, O. VERMOREL und T. POINSOT. »Interaction of flames of $H_2 + O_2$ with inert walls«. In: *Combustion and Flame* 135.1-2 (2003), S. 123–133.
- [21] P. DEUFLHARD, E. HAIRER und J. ZUGCK. »One-step and extrapolation methods for differential-algebraic systems«. In: *Numerische Mathematik* 51.5 (1987), S. 501–516.
- [22] A. DONINI, R. J. M. BASTIAANS, J. A. van OIJEN und L. P. H. DE GOEY. »Differential diffusion effects inclusion with flamelet generated manifold for the modeling of stratified premixed cooled flames«. In: *Proceedings of the Combustion Institute*. Bd. 35. 1. San Francisco, USA, 2015, S. 831–837.
- [23] A. DONINI, R. J. M. BASTIAANS, J. A. van OIJEN und L. P. H. de GOEY. »A 5-D implementation of FGM for the large eddy simulation of a stratified swirled flame with heat loss in a gas turbine combustor«. In: *Flow, Turbulence and Combustion* 98.3 (2017), S. 887–922.
- [24] D. V. EFIMOV, P. de GOEY und J. A. van OIJEN. »QFM: quenching flamelet-generated manifold for modelling of flame–wall interactions«. In: *Combustion Theory and Modelling* (2019), S. 1–33.
- [25] R. EGGELS und L. P. H. DE GOEY. »Mathematically reduced reaction mechanisms applied to adiabatic flat hydrogen/air flames«. In: *Combustion and Flame* 100.4 (1995), S. 559–570.
- [26] N. ELSNER. *Grundlagen der technischen Thermodynamik*. 3. Auflage. Braunschweig / Wiesbaden: Vieweg & Sohn, 1982.
- [27] O. EZEKOYE, R. GREIF und R. F. SAWYER. »Increased surface temperature effects on wall heat transfer during unsteady flame quenching«. In: *Symposium (International) on Combustion*. Bd. 24. 1. Sydney, Australien, 1992, S. 1465–1472.
- [28] J. H. FERZIGER und M. PERIC. *Computational Methods for Fluid Dynamics*. 3. Auflage. Berlin Heidelberg New York: Springer-Verlag, 2008.
- [29] B. FIORINA, R. BARON, O. GICQUEL, D. THEVENIN, S. CARPENTIER, N. DARABIHA u. a. »Modelling non-adiabatic partially premixed flames using flame-prolongation of ILDM«. In: *Combustion Theory and Modelling* 7.3 (2003), S. 449–470.

- [30] B. FIORINA, O. GICQUEL, L. VERVISCH, S. CARPENTIER und N. DARABIHA. »Approximating the chemical structure of partially premixed and diffusion counterflow flames using FPI flamelet tabulation«. In: *Combustion and Flame* 140 (2005), S. 147–160.
- [31] S. GANTER, A. HEINRICH, T. MEIER, G. KUENNE, C. JAINSKI, M. C. RISSMANN, A. DREIZLER und J. JANICKA. »Numerical analysis of laminar methane–air side-wall-quenching«. In: *Combustion and Flame* 186 (2017), S. 299–310.
- [32] S. GANTER, C. STRASSACKER, G. KUENNE, T. MEIER, A. HEINRICH, U. MAAS und J. JANICKA. »Laminar near-wall combustion: Analysis of tabulated chemistry simulations by means of detailed kinetics«. In: *International Journal of Heat and Fluid Flow* 70 (2018), S. 259–270.
- [33] P. GERLINGER. *Numerische Verbrennungssimulation: Effiziente numerische Simulation turbulenter Verbrennung*. 1. Auflage. Berlin Heidelberg: Springer-Verlag, 2005.
- [34] O. GICQUEL, N. DARABIHA und D. THÉVENIN. »Liminar premixed hydrogen/air counterflow flame simulations using flame prolongation of ILDM with differential diffusion«. In: *Proceedings of the Combustion Institute*. Bd. 28. 2. Edinburgh, Schottland, 2000, S. 1901–1908.
- [35] R. G. GILBERT, K. LUTHER und J. TROE. »Theory of Thermal Unimolecular Reactions in the Fall-off Range«. In: *Berichte der Bunsengesellschaft für physikalische Chemie* 87.2 (1983), S. 169–177.
- [36] V. GIOVANGIGLI. »Mass conservation and singular multicomponent diffusion algorithms«. In: *IMPACT of Computing in Science and Engineering* 2.1 (1990), S. 73–97.
- [37] R. GOLLOCH und G. P. MERKER. »Downsizing bei Verbrennungsmotoren«. In: *MTZ-Motortechnische Zeitschrift* 66.2 (2005), S. 126–131.
- [38] 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. Dordrecht: Springer, 2011, S. 193–220.
- [39] V. GRAVEMEIER und W.A. WALL. »Variational multiscale methods for premixed combustion based on a progress-variable approach«. In: *Combustion and Flame* 158 (2011), S. 1160–1170.

-
- [40] A. GRUBER, R. SANKARAN, E. R. HAWKES und J. H. CHEN. »Turbulent flame–wall interaction: a direct numerical simulation study«. In: *Journal of Fluid Mechanics* 658 (2010), S. 5–32.
- [41] W. W. HASKELL und C. E. LEGATE. »Exhaust Hydrocarbon Emissions from Gasoline Engines - Surface Phenomena«. In: *SAE Technical Paper* 720255 (1972).
- [42] C. HASSE, M. BOLLIG, N. PETERS und H. A. DWYER. »Quenching of laminar iso-octane flames at cold walls«. In: *Combustion and Flame* 122.1-2 (2000), S. 117–129.
- [43] A. HEINRICH, S. GANTER, G. KUENNE, C. JAINSKI, A. DREIZLER und J. JANICKA. »3D Numerical Simulation of a Laminar Experimental SWQ Burner with Tabulated Chemistry«. In: *Flow, Turbulence and Combustion* 100.2 (2018), S. 535–559.
- [44] 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. Madison, USA, 1949, S. 127–135.
- [45] J. O. HIRSCHFELDER und C. F. CURTISS. »Theory of propagation of flames. Part I: General equations«. In: *Symposium on Combustion and Flame, and Explosion Phenomena*. Bd. 3. Madison, USA, 1949, S. 121–127.
- [46] J. O. HIRSCHFELDER, C. F. CURTISS und R. B. BIRD. *Molecular Theory of Gases and Liquids*. 1. Auflage. New York: John Wiley & Sons, 1966.
- [47] W. HOCKS, N. PETERS und G. ADOMEIT. »Flame quenching in front of a cold wall under two-step kinetics«. In: *Combustion and Flame* 41 (1981), S. 157–170.
- [48] J. D. HOFFMAN und S. FRANKEL. *Numerical Methods for Engineers and Scientists*. 2. Auflage. Boca Raton: CRC press, 2018.
- [49] K. H. HOMANN. *Reaktionskinetik*. 1. Auflage. Darmstadt: Steinkopff-Verlag, 1975.
- [50] C. JAINSKI, M. RISSMANN, B. BÖHM, J. JANICKA und A. DREIZLER. »Sidewall quenching of atmospheric laminar premixed flames studied by laser-based diagnostics«. In: *Combustion and Flame* 183 (2017), S. 271–282.

- [51] K. JÄNICH. *Mathematik 1: Geschrieben für Physiker*. 1. Auflage. Berlin Heidelberg: Springer-Verlag, 2001.
- [52] P. K. JHA und C. P. T. GROTH. »Tabulated chemistry approaches for laminar flames: Evaluation of flame-prolongation of ILDM and flamelet methods«. In: *Combustion Theory and Modelling* 16.1 (2012), S. 31–57.
- [53] K. KÖNIG. *Hierarchische Implementierungsstrategien für reduzierte Reaktionsmechanismen basierend auf Intrinsischen Niedrigdimensionalen Mannigfaltigkeiten*. 1. Auflage. Karlsruhe: Universitätsverlag, 2008.
- [54] J. KUNES. *Dimensionless physical quantities in science and engineering*. 1. Auflage. London u. a.: Elsevier, 2012.
- [55] J. LAI und N. CHAKRABORTY. »A priori direct numerical simulation modeling of scalar dissipation rate transport in head-on quenching of turbulent premixed flames«. In: *Combustion Science and Technology* 188.9 (2016), S. 1440–1471.
- [56] J. M. LEE. »Smooth manifolds«. In: *Introduction to Smooth Manifolds. Graduate Texts in Mathematics, vol 218*. New York: Springer-Verlag, 2013.
- [57] F. A. LINDEMANN, S. ARRHENIUS, I. LANGMUIR, N. R. DHAR, J. PERRIN und W. C. MCC. LEWIS. »Discussion on the radiation theory of chemical action«. In: *Transactions of the Faraday Society* 17 (1922), S. 598–606.
- [58] U. MAAS. »Automatische Reduktion von Reaktionsmechanismen zur Simulation reaktiver Strömungen«. Habilitation. Universität Stuttgart, 1993.
- [59] U. MAAS. »Mathematische Modellierung instationärer Verbrennungsprozesse unter Verwendung detaillierter Reaktionsmechanismen«. In: *Dissertation Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg* (1988).
- [60] 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. 1. Peking, China, 2011, S. 1253–1259.
- [61] U. MAAS und S.B. POPE. »Implementation of simplified chemical kinetics based on intrinsic low-dimensional manifolds«. In: *Symposium (International) on Combustion* 24 (1992), S. 103–112.

-
- [62] 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.
- [63] U. MAAS und J. WARNATZ. »Ignition processes in hydrogen/oxygen mixtures«. In: *Combustion and Flame* 74 (1988), S. 53–69.
- [64] D. K. MANLEY, A. MCILROY und C. A. TAATJES. »Research needs for future internal combustion engines«. In: *Physics Today* 61.11 (2008), S. 47–52.
- [65] M. MANN, C. JAINSKI, M. EULER, B. BÖHM und A. DREIZLER. »Transient flame–wall interactions: Experimental analysis using spectroscopic temperature and CO concentration measurements«. In: *Combustion and Flame* 161.9 (2014), S. 2371–2386.
- [66] R. MARI, B. CUENOT, J.-P. ROCCHI, L. SELLE und F. DUCHAINE. »Effect of pressure on hydrogen/oxygen coupled flame–wall interaction«. In: *Combustion and Flame* 168 (2016), S. 409–419.
- [67] B. MERCI, B. NAUD, D. ROEKAERTS und U. MAAS. »Joint scalar PDF simulations of a bluff-body stabilised flame with the REDIM approach«. In: *Proceedings of the European Combustion Meeting*. Bd. 4. Wien, Österreich, 2009, S. 1–6.
- [68] C.-D. MUNZ und T. WESTERMANN. *Numerische Behandlung gewöhnlicher und partieller Differenzialgleichungen*. 4. Auflage. Berlin Heidelberg: Springer, 2019.
- [69] A. NEAGOS. »Adaptive Generierung von Reaktions-Diffusions-Mannigfaltigkeiten für die reduzierte Beschreibung chemisch reagierender Strömungen«. In: *Dissertation, Karlsruher Institut für Technologie* (2017).
- [70] 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. 1. Seoul, Korea, 2017, S. 663–672.
- [71] 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.

- [72] P. D. NGUYEN, V. SUBRAMANIAN, P. DOMINGO und L. VERVISCH. »Multidimensional Flamelet Manifolds for hybrid combustion regimes«. In: *Proceedings of the European Combustion Meeting*. Bd. 4. Wien, Österreich, 2009, S. 1–6.
- [73] Yi-Shuai NIU, Luc VERVISCH und Pham Dinh TAO. »An optimization-based approach to detailed chemistry tabulation: Automated progress variable definition«. In: *Combustion and Flame* 160.4 (2013), S. 776–785.
- [74] P. PANTANGI, A. SADIKI, J. JANICKA, M. MANN und A. DREIZLER. »LES of premixed methane flame impinging on the wall using non-adiabatic flamelet generated manifold (FGM) approach«. In: *Flow, Turbulence and Combustion* 92.4 (2014), S. 805–836.
- [75] C. D. PIERCE und P. MOIN. »Progress-variable approach for large-eddy simulation of non-premixed turbulent combustion«. In: *Journal of Fluid Mechanics* 504 (2004), S. 73–97.
- [76] T. J. POINSOT, D. C. HAWORTH und G. BRUNEAUX. »Direct simulation and modeling of flame-wall interaction for premixed turbulent combustion«. In: *Combustion and Flame* 95.1-2 (1993), S. 118–132.
- [77] S. B. POPE. »Small scales, many species and the manifold challenges of turbulent combustion«. In: *Proceedings of the Combustion Institute*. Bd. 34. 1. Warschau, Polen, 2013, S. 1–31.
- [78] P. POPP, M. SMOOKE und M. BAUM. »Heterogeneous/homogeneous reaction and transport coupling during flame-wall interaction«. In: *Symposium (International) on Combustion*. Bd. 26. 2. Neapel, Italien, 1996, S. 2693–2700.
- [79] U. PRÜFERT, S. HARTL, F. HUNGER, D. MESSIG, M. EIERMANN und C. HASSE. »A constrained control approach for the automated choice of an optimal progress variable for chemistry tabulation«. In: *Flow, Turbulence and Combustion* 94.3 (2015), S. 593–617.
- [80] K. K. J. RANGA DINESH, X. JIANG und J. A. van OIJEN. »Analysis of impinging wall effects on hydrogen non-premixed flame«. In: *Combustion Science and Technology* 184.9 (2012), S. 1244–1268.
- [81] Peter John ROBINSON und Kenneth A HOLBROOK. *Unimolecular reactions*. New York: John Wiley & Sons, 1972.

-
- [82] SAN DIEGO MECHANISM WEB PAGE. »Chemical–Kinetic Mechanisms for Combustion Applications, Mechanical and Aerospace Engineering (Combustion Research), University of California at San Diego«. In: <http://web.eng.ucsd.edu/mae/groups/combustion/mechanism.html>, Zugriff am 02.05.2018 (2011).
- [83] R. SCHIESSL, V. BYKOV, U. MAAS, A. ABDELSAMIE und D. THÉVENIN. »Implementing multi-directional molecular diffusion terms into Reaction Diffusion Manifolds (REDIMs)«. In: *Proceedings of the Combustion Institute*. Bd. 36. 1. Seoul, Korea, 2017, S. 673–679.
- [84] J. M. SIMMIE. »Detailed chemical kinetic models for the combustion of hydrocarbon fuels«. In: *Progress in Energy and Combustion Science* 29.6 (2003), S. 599–634.
- [85] G. P. SMITH, D. M. GOLDEN, M. FRENKLACH, N. W. MORIARTY, B. EITENEER, M. GOLDENBERG, C. T. BOWMAN, R. K. HANSON, S. SONG, W. C. GARDINER JR, V. V. LISSIANSKI und Gas Research Institute QIN Z. »GRI 3.0 Mechanism«. In: http://www.me.berkeley.edu/gri_mech, Zugriff am 05.11.2016 (1999).
- [86] M. D. SMOOKE, I. K. PURI und K. SESHADRI. »A comparison between numerical calculations and experimental measurements of the structure of a counterflow diffusion flame burning diluted methane in diluted air«. In: *Symposium (International) on Combustion*. Bd. 21. 1. München, Deutschland, 1988, S. 1783–1792.
- [87] G. STAHL und J. WARNATZ. »Numerical investigation of time-dependent properties and extinction of strained methane- and propane-air flamelets«. In: *Combustion and Flame* 85.3-4 (1991), S. 285–299.
- [88] G. STEINHILBER. »Numerische Simulation turbulenter Verbrennungsprozesse mittels statistischer Verfahren und REDIM reduzierter Kinetik«. In: *Dissertation, Karlsruher Institut für Technologie* (2015).
- [89] G. STEINHILBER, V. BYKOV und U. MAAS. »REDIM reduced modeling of flame-wall-interactions: Quenching of a premixed methane/air flame at a cold inert wall«. In: *Proceedings of the Combustion Institute*. Bd. 36. 1. Seoul, Korea, 2017, S. 655–661.
- [90] 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. 1. Warschau, Polen, 2013, S. 217–224.

- [91] C. STRASSACKER, V. BYKOV, S. GANTER, J. JANICKA und U. MAAS. »Multi-dimensional transport phenomena of flame-wall-interactions and the REDIM method«. In: *Proceedings of the European Combustion Meeting*. Bd. 9. Lissabon, Portugal, 2019, S. 1–6.
- [92] C. STRASSACKER, V. BYKOV und U. MAAS. »A Reduced Kinetic Model for Stratified Flames with Flame-Wall-Interactions«. In: *Veröffentlichung in Vorbereitung* (2020).
- [93] C. STRASSACKER, V. BYKOV und U. MAAS. »Comparative analysis of Reaction-Diffusion Manifold based reduced models for Head-On- and Side-Wall-Quenching flames«. In: *Veröffentlichung angenommen bei Symposium (International) on Combustion*. Adelaide, Australien, 2020.
- [94] C. STRASSACKER, V. BYKOV und U. MAAS. »Parametrization and projection strategies for manifold based reduced kinetic models«. In: *Proceedings of the Combustion Institute*. Bd. 37. 1. Dublin, Irland, 2019, S. 763–770.
- [95] C. STRASSACKER, V. BYKOV und U. MAAS. »REDIM reduced modeling of flame quenching at a cold wall—The influence of detailed transport models and detailed mechanisms«. In: *Combustion Science and Technology* 191.2 (2019), S. 208–222.
- [96] C. STRASSACKER, V. BYKOV und U. MAAS. »REDIM reduced modeling of quenching at a cold wall including heterogeneous wall reactions«. In: *International Journal of Heat and Fluid Flow* 69 (2018), S. 185–193.
- [97] C. STRASSACKER, V. BYKOV und U. MAAS. »Reduced modeling of Flame-Wall-Interactions of premixed Isooctane-Air Systems including detailed transport and surface reactions«. In: *Veröffentlichung angenommen bei Symposium (International) on Combustion*. Adelaide, Australien, 2020.
- [98] 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.
- [99] S.R. VOSEN, R. GREIF und C. K. WESTBROOK. »Unsteady heat transfer during laminar flame quenching«. In: *Symposium (International) on Combustion*. Bd. 20. 1. Ann Arbor, USA, 1985, S. 75–83.

-
- [100] P. WANG, F. ZIEKER, R. SCHIESSL, N. PLATOVA, J. FRÖHLICH und U. MAAS. »Large Eddy Simulations and experimental studies of turbulent premixed combustion near extinction«. In: *Proceedings of the Combustion Institute*. Bd. 34. 1. Warschau, Polen, 2013, S. 1269–1280.
- [101] J. WARNATZ, U. MAAS und R.W. DIBBLE. *Verbrennung: physikalisch-chemische Grundlagen, Modellierung und Simulation, Experimente, Schadstoffentstehung*. 3. Auflage. Berlin: Springer, 2001.
- [102] P. WENZEL, R. STEINER, C. KRÜGER, R. SCHIESSL, C. HOFRATH und U. MAAS. »3D-CFD simulation of di-diesel combustion applying a progress variable approach accounting for detailed chemistry«. In: *SAE Technical Paper* (2007), Nr. 2007-01–4137.
- [103] C. K. WESTBROOK, A. A. ADAMCZYK und G. A. LAVOIE. »A numerical study of laminar flame wall quenching«. In: *Combustion and Flame* 40 (1981), S. 81–99.
- [104] I. S. WICHMAN und G. BRUNEAUX. »Head-on quenching of a premixed flame by a cold wall«. In: *Combustion and flame* 103.4 (1995), S. 296–310.
- [105] L. P. WYSZYNSKI, R. ABOAGYE, R. STONE und G. KALGHATGI. »Combustion imaging and analysis in a gasoline direct injection engine«. In: *SAE Technical Paper* (2004), Nr. 2004-01–0045.