

**Direkte numerische Simulation der Wechselwirkung
von
chemischen Reaktionen, Vermischungsvorgängen
und
Transportprozessen**

Zur Erlangung des akademischen Grades eines

DOKTORS DER NATURWISSENSCHAFTEN

(Dr. rer. nat.)

von der Fakultät für Chemie

der

Universität Fridericiana Karlsruhe (TH)

angenommene

Dissertation

vorgelegt von

Dipl.-Chem. Wolfgang Gerlinger

aus Lauda

Dekan:	Prof. Dr. M. Metzler
1. Gutachter:	Prof. Dr.-Ing. H. Bockhorn
2. Gutachter:	Priv.-Doz. Dr. M. Olzmann
Tag der mündlichen Prüfung:	1. Februar 2002

Diese Arbeit ist am Institut für Chemische Technik an der Universität Karlsruhe (TH) unter Leitung von Herrn Prof. Dr. H. Bockhorn in der Zeit von Oktober 1997 bis Dezember 2001 durchgeführt worden.

Durch die Forschungsvorhaben (Bo 693/8-1 und Bo 693/8-2) ist die Arbeit von der Deutschen Forschungsgemeinschaft gefördert worden.

Danksagungen

Mein Dank gilt Prof. Henning Bockhorn für die Freistellung bei der Vertiefung im Themengebiet, die auch einen Blick über den Tellerrand hinaus ermöglicht hat. Des weiteren bedanke ich mich für die Möglichkeit, Resonanz über die absolvierte Arbeit durch die aktive Beteiligung an zahlreichen wissenschaftlichen Konferenzen zu bekommen.

Bedanken möchte ich mich auch bei allen Mitarbeitern der Instituts für Chemische Technik.

Dr. Jochen Fröhlich und Prof. Kai Schneider danke ich für die zahlreichen nutzbringenden und hilfreichen wissenschaftlichen Diskussionen und für die Bereitstellung von Programmcodes.

Den Diplomanden bzw. Seminararbeitern Sylvain Cail, Pratap Sathia und Frank Wetzell danke ich für ihre Zusammenarbeit.

Besonders danken möchte ich bei meinem Arbeitskollegen und Freund Jörg Ziuber, der mir die Zeit des Studiums und der Promotion sehr bereichert hat.

Ihm und Peter Rüger danke ich für das Lesen des Manuskripts dieser Arbeit.

Ich danke meinen Eltern für ihre Unterstützung.

Der meiste Dank gebührt schließlich meiner Frau Andrea, die mir in der Zeit der Promotion immer zur Seite gestanden hat.

Inhaltsverzeichnis

Abstract	IV
Symbolverzeichnis	VII
1 Einleitung	1
1.1 Einordnung der Arbeit	1
1.2 Direkte numerische Simulation	3
1.3 Numerische Verfahren	4
1.3.1 Spektralmethoden	5
1.3.2 Vergleich mit einem Finite-Volumen-Ansatz	8
1.4 Gliederung der Arbeit	12
2 Stabilität von Flammenstrukturen ohne konvektive Strömung	13
2.1 Motivation	13
2.1.1 Relevanz	13
2.1.2 Historie	15
2.1.3 Originalität	16
2.1.4 Gliederung des Kapitels	17
2.2 Physikalisches Modell	18
2.2.1 Gleichungssystem für sphärische Flammenstrukturen	18
2.2.2 Zeldovich-Flammen	20
2.2.3 Asymptotische Profile von Temperatur und Massenbruch	21
2.2.4 Stabilitätstheorie	22
2.3 Kugelsymmetrische Untersuchungen	25
2.3.1 Numerische Methode	25
2.3.2 Physikalisches Setup	26
2.3.3 Quantifizierung des Randeinflusses	28

2.3.4	Stabilität sphärischer Flammen	29
2.3.5	Charakteristische Merkmale stabiler Flammen	34
2.4	Evolution dreidimensional gestörter Flammen	39
2.4.1	Numerische Methode	40
2.4.2	Anfangs- und Randbedingungen	41
2.4.3	Implementierung und Komplexität	42
2.4.4	Einfluß der Lewis-Zahl	45
2.4.5	Zeitliche Entwicklung der thermo-diffusiven Instabilität	46
2.4.6	Einfluß vom Anfangsradius und vom Strahlungskoeffizienten	50
2.5	Dreidimensionale Stabilität kugelsymmetrischer Flammen	52
2.5.1	Verfeinerung der numerischen Methode	52
2.5.2	Start mit kugelsymmetrischen Profilen	55
2.5.3	Evolution der dreidimensionalen Flammen	57
2.5.4	Flammenprofile	60
2.5.5	Gründe für das Auffalten	60
2.5.6	Musterbildung	64
2.5.7	Dreidimensionale Stabilitätsgrenze	69
2.6	Diskussion	70
3	Vermischung in wirbelbehafteten Strömungen	73
3.1	Einführung	73
3.1.1	Numerische Methoden	73
3.1.2	Turbulenz	75
3.1.3	Mischung	76
3.1.4	Gliederung des Kapitels	78
3.2	Physikalisches und mathematisches Modell	79
3.2.1	Erhaltungsgleichungen	79
3.2.2	Wirbelstärke	81
3.2.3	Chemische Reaktionen	82
3.2.4	Numerik	82
3.2.5	Forcing	84

3.2.6	Analysemethoden	84
3.3	Kohärente Strukturen und Vermischung in zwei Dimensionen	91
3.3.1	Anfangsbedingungen und Parameter	91
3.3.2	Zeitliche Evolution der Drei-Wirbel-Konfiguration	93
3.3.3	Globale Zeitskalen	98
3.3.4	Energie- und Skalarspektren	102
3.3.5	Massenbruchverteilung	103
3.4	Dreidimensionale Betrachtung	104
3.4.1	Evolution zweier korotierender Wirbelschläuche	104
3.4.2	Strömungskonfiguration für dreidimensionale Turbulenz	107
3.4.3	Evolution der Wirbelstärke und des Massenbruchs	109
3.4.4	Vermischungskriterien	109
3.5	Wechselwirkung von Vermischung und chemischen Reaktionen	112
3.5.1	Ein-Schritt-Reaktion	112
3.5.2	Zwei-Schritt-Reaktion	114
3.6	Fazit	117
4	Zusammenfassung und Ausblick	121
	Literaturverzeichnis	125

Abstract

The present work deals with direct numerical simulations of the interaction of chemical reactions with transport and mixing processes. Direct numerical simulations are defined to solve the governing equations without parametrizing the fine scales by additional modelling. In the present approaches, this is necessary as molecular mixing and chemical reactions especially take place on the fine scales. Such simulations incorporate various time and length scales so that a large number of time steps and grid points has to be covered by the numerical simulations. To clarify the effects in satisfactory detail, very accurate numerical methods have to be used. In this work, a pseudospectral method of high order is used to solve the multi-dimensional equations. In Chapter 1 an overview over these methods is given together with a comparison with a standard finite-volume-method. To fulfil the computational demands of large scale problems, the two- and three-dimensional codes are parallelized for distributed memory computers using the standard message-passing-interface library.

Chapter 2 comprises numerical studies on the stability of premixed lean hydrogen-air flames in absence of buoyant convection. The thermo-diffusive model with Arrhenius type one-step finite rate chemical reaction and a Stefan–Boltzmann radiation model is employed to investigate the transient behaviour of spherically ignited flame structures. The results are compared with theoretical and experimental data from the literature [102, 19, 106]. Particular attention is devoted to steady flames and their stability behaviour with respect to one- and three-dimensional perturbations.

The stability of spherically symmetric flames is studied using one-dimensional finite differences. In particular, the dependence on the initial profile, the initial size and the radiation coefficient are discussed. The simulations exhibit slowly growing flames, extinguishing flames, oscillating flames, and stationary flames. Plotting the stability limit as a function of the flame radius and the radiation coefficient yields a bifurcation diagram which shows the high sensitivity of the flame structures on the ignition profile. The stability curve determined in this way completely characterizes the system with combined near- and far-field radiation. According to theory the curve lies in between the two theoretically derived ones for the cases of pure near- and far-field radiation, respectively [19]. Furthermore, the stable branch is limited for high radiative heat losses due to one-dimensional perturbations, and the stability limit agrees with a combination of the pure limits of near- and far-field heat loss used in theory. For low radiation coefficients no stability limit is observed due to three-dimensional perturbations. The results also agree qualitatively with laboratory experiments where the steady flame radius increases

with the ratio of heat production and heat loss [106]. The asymptotic profiles of the mass fraction agree with the theoretically derived asymptotical ones, i.e. an $1/r$ decay. However, for the temperature a different decay is found, i.e. a modified Bessel function which has been justified by higher order asymptotical analysis, i.e. by considering a Helmholtz type equation incorporating also the radiative losses. In the flame centre the temperature profile exhibits a parabolic profile which agrees with the results found in the literature [22, 23].

The three-dimensional stability behaviour is investigated using high resolution parallel numerical simulation. Due to the spatial stiffness of the problem a grid stretching is necessary to resolve the narrow chemical reaction zone in a sufficiently large domain implied by the large tails, i.e. a slow decay, of the mass fraction and the temperature profiles to avoid the influence of boundary effects. Five flames, which yield steady flames in the spherically symmetric one-dimensional computations, were chosen to study their stability with respect to three-dimensional perturbations. The restriction to a finite domain size forced to study the stability in detail to exclude problems introduced by the numerical discretization and the boundary. For the five discussed flames different but typical phenomena of lean mixtures are found. A splitting can be observed for the larger flames exhibiting an increased number of cells with decreasing radiative heat loss. This agrees well with experimental observations of such flames under micro-gravity conditions [105]. The patterns and drift velocities can also be linked to the experimental results [24]. Flames with medium flame radii undergo a deformation into a prolate spheroid and exhibit a splitting into two cells [20]. This behaviour is theoretically predicted by asymptotic analyses near the stability limit for flames in an infinite domain [23]. However, from the numerical simulations it is difficult to attribute the splitting to a three-dimensional instability or to the influence of the bounded domain and hence to the direction-dependent fuel distribution. The three-dimensional stability limit can therefore not be fixed to a certain point in the stability diagram, but the results indicate that the stability limit lies in the interval of $r \approx 0.3$ to $r \approx 0.5$. This region, however, corresponds to the stability limit found for pure near-field heat losses in theory. For very small flame radii, finally, a stationary flame ball was computed which exists for times much larger than the typical diffusion time. To the knowledge of the author, this is the first three-dimensional computation of a stationary flame ball.

Summarizing it can be stated that the reported numerical model is well-suited to describe lean premixed combustion in absence of buoyant convection. Spherically symmetric effects as asymptotic profiles and one-dimensional stability [23] can be explained and clarified in the spherically symmetric formulation. However, the three-dimensional instability and direction-dependent effects as the pattern formation observed in experiments [105] can only be included by multi-dimensional computation. In recent studies e.g. the interference of several flame structures is investigated numerically and analytically one-dimensionally assuming a homogeneous surrounding of the flame [34]. The current model allows studies of the interaction of distinct flames of spherical or of different shape without the assumption of homogeneity.

Chapter 3 is concerned with the interaction of mixing in vortical flows and chemical reactions [57]. Therefore, the instationary Navier–Stokes-equations and the species’ transport equations are integrated in a periodic two- and three-dimensional domain, respectively. Again, direct numerical simulations are performed by means of a pseudo-spectral method for space integration and a semi-implicit finite difference time scheme. The main assumptions are to suppose constant transport coefficients and density. The temperature is neglected as isothermal conditions are employed for one phase flows.

The influence of the vortex motion on the mixing of species is investigated in a two-dimensional system. Here, the computational demands allow to perform detailed parameter studies. Presented are various calculations with different vortex arrangements. The vorticity profile is Gaussian. Additionally the results are compared with a decaying, fully developed turbulent flow. Their influence on the scalar mixing is investigated using two different initial conditions for the mass fraction for two species A and B. The Schmidt number is varied in the range of 0.05 to 5. Computing global mixing time scales by fitting the variance decay, a quantitative description of the mixing rate is established. Especially, two main processes are identified to be responsible for the mixing dynamics: the generation of spirals in the species interfaces, and the merging of vortices [57]. Both processes provide for effective convective motion and hence create the fine scales required for molecular diffusion. The dependence of the time scales on the Schmidt number for the vortex structures lies in between the two extremes: the case of pure diffusion and the one of fully developed turbulence. The spectral distribution is discussed by the energy and scalar spectra. They exhibit typical phenomena of turbulent flows, i.e. show inertial subranges [68].

The vortex structure of a homostrophic dipole is also studied in a three-dimensional simulation in form of two parallel vortex tubes with a small additional three-dimensional perturbation. This mainly two-dimensional structure exhibits three-dimensional instability as reported in [83], and the influence of the third direction is increasing during the simulation. The regarded time interval, however, is very small so that almost no difference is visible in the mass fraction variance decay. The mechanical-to-scalar time-scale ratio is computed in three-dimensional isotropic turbulence and is validated with [94].

Chemical reactions are studied by two-dimensional simulations using two different reaction schemes. The interaction of the mixing process and the chemical reaction are of reasonable relevance if the time scales are of the same order. The chemical reaction steepens up the gradients in the mass fraction fields and hence creates additional fine scales. The spatial distribution of the mass fraction is reported for non-reactive and reactive flows. For turbulent flows the Beta-PDF yields good information during the whole mixing process [64, 60] whereby the clipped Gauß-PDF only can be used to describe the initial and very late stages of the process.

Symbolverzeichnis

In dieser Arbeit sind alle dimensionsbehafteten Größen mit einer Tilde \sim gekennzeichnet. Alle anderen sind entweder von vorne herein dimensionslos oder mit den in den einzelnen Kapiteln aufgezeigten Referenzgrößen dimensionslos gemacht.

Bei der Darstellung reeller Zahlen wird der englischen Nomenklatur gefolgt, so daß statt einem Komma ein Punkt verwendet wird.

Lateinische Symbole

a_m	Fitparameter ($m = 1, \dots, 6$)
A	Vorfaktor
A	chemische Spezies; Reaktant
B	chemische Spezies; Reaktant
c, c_m	Konstante bzw. Integrationskonstante ($m = 1, 2$)
c_p	spezifische Wärmekapazität
d	Zahl der Dimensionen im Raum
D	Diffusionskoeffizient
e_ι	Einheitsvektoren im kartesischen Koordinatensystem ($\iota = 1, 2, 3$)
E	Energie
E_Y	skalare Energie
E_a	Aktivierungsenergie
g	Erdbeschleunigung
G	nicht-linearer Operator
i	imaginäre Konstante ($\sqrt{-1}$)
i	Laufzahl über Spezies ($i = A, B, P, Q$)
j	Laufzahl über chemische Reaktion
k_j	Reaktionsgeschwindigkeitskoeffizient der Reaktion j
l_Λ	integrale Längenskala
l_η	Kolmogorov-Längenskala
l_{η_Y}	Batchelor-Längenskala
l_p	Planck-Länge
L	Linearer Operator
m	allgemeine Laufvariable
M	molare Masse

n	diskreter Zeitindex
N	Zahl von Gitterpunkten in einer Richtung
o_{ij}	Reaktionsordnung einer Spezies i in einer Reaktion j
p	Druck
P	chemische Spezies; gewünschtes Produkt
q	Zahl verwendeter Prozessoren
Q_j	spezifische Reaktionsenthalpie der Reaktion j
Q	chemische Spezies; unerwünschtes Nebenprodukt
r	Radius
R	allgemeine Gaskonstante
s	Strahlungskoeffizient
s_{skal}	Skalierungsfaktor des Strahlungskoeffizienten
S	<i>speed-up</i>
S_1	laminare Flammgeschwindigkeit
t	Zeit
t_{diff}	Zeitpunkt, zu dem im Zentrum ein Randeinfluß zu spüren sein kann
t_{mix}	Mischungszeitskala
t_{split}	Zeitpunkt, zu dem ein Aufplatzen in SF _{3D} zu sehen ist
T	Temperatur
\vec{v}, v_ι	Geschwindigkeit; Vektor und Komponenten ($\iota = 1, \dots, 3$)
V	Volumen
\vec{w}, w_ι	Wirbelstärke; Vektor und Komponenten ($\iota = 1, \dots, 3$)
\vec{x}, x_ι	Ortskoordinate; Vektor und Komponenten ($\iota = 1, \dots, 3$)
Y_i	Massenbruch der Spezies i
z_1, z_2	Koeffizienten einer Koordinatentransformation

Griechische Symbole

α	Temperatur-Verhältnis
$\tilde{\alpha}$	modifiziertes Temperatur-Verhältnis, $\alpha^{-1} - 1$
β_1, β_2	Parameter in Beta-PDF
γ	Exponent in der Stabilitätskurve
δ	Dirac-Funktion
$\delta r, \delta x$	Ortsgitterweite
δt	Zeitschrittweite
δ_T	Flammendicke, basierend auf T
δ_ω	Flammendicke, basierend auf ω

$\Delta_R H$	molare Reaktionsenthalpie
Δt	Zeitintervall
\mathcal{E}	Schwellwert
ϵ, ϵ_Y	Dissipationsrate, skalare Dissipationsrate
ι, j	Laufvariablen
$\vec{\kappa}, \kappa_\iota$	Wellenzahl; Vektor und Komponenten ($\iota = 1, \dots, 3$)
λ	Wärmeleitfähigkeitskoeffizient
Λ	Gebietsgröße
μ	dynamischer Viskositätskoeffizient
ν_{ij}	stöchiometrischer Koeffizient einer Spezies i in einer Reaktion j
$\vec{\xi}, \xi_\iota$	physikalische Koordinate nach einer Koordinatentransformation, Vektor und Komponenten ($\iota = 1, \dots, 3$)
ρ	Dichte
σ	Strahlungsterm
$\check{\sigma}$	korrigierter Strahlungsterm
σ_{SB}	Stefan-Boltzmann-Konstante
φ	abstrakte physikalische Größe
ϕ, θ	Winkel im Kugelkoordinatensystem (Azimut- und Pol-Winkel)
Φ, Θ	Ansatz- und Testfunktion
χ	Parameter für Wärmestrahlung
ψ, Ψ	PDF und zugehörige Verteilungsfunktion
ω_j	chemische Reaktionsrate einer Reaktion j

Dimensionslose Kennzahlen

Da	Damköhler-Zahl
Le	Lewis-Zahl
Re	Reynolds-Zahl
Sc	Schmidt-Zahl
Ze	Zeldovich-Zahl

Indizes

0	Anfangsbedingung
*	stationäre Lösung im „ <i>flame sheet model</i> “
ad	verbrannter Status einer adiabat brennenden planaren Flamme
rand	Größe am Rand des Gebiets, d.h. bei $\Lambda/2$

fern	Fernfeldbereich (Strahlung)
front	Größe in der Flammenfront, d.h. bei r_{start}
int	über das Rechengebiet integrierte Größe
max	Maximalwert
nah	Nahfeldbereich (Strahlung)
num	numerisch ermittelter Wert
ref	Referenzgröße
s	stationärer Anteil einer Größe
stab	stabile Lösung
start	Startwert
th	theoretisch abgeleiteter Wert
u	unverbrannter Zustand
z	Zeldovich-Lösung

Hochgestellte Indizes

*	Adams-Bashforth Extrapolation
(m)	m -te Ableitung einer Größe
$\hat{\varphi}$	Fourier-Transformierte der Größe φ
$\bar{\varphi}$	Mittelwert der Größe φ

Kapitel 1 Einleitung



er nur die Chemie versteht, versteht auch die nicht recht.

(Georg C. Lichtenberg, 1742-1799)

1.1 Einordnung der Arbeit

Reagierende Strömungen stellen technisch und theoretisch eine große Herausforderung dar. Bei der theoretischen Behandlung reagierender Strömungen durch numerische Simulationen liegt dies daran, daß bereits bei vielen Anwendungsproblemen selbst mit modernen Supercomputern eine mathematische bzw. numerische Lösung nicht selbstverständlich ist. So können mit einer bestimmten Rechenleistung nur eine begrenzte Zahl von Gleichungen gelöst werden. Der maximale Aufwand, der dadurch an ein System gestellt werden kann, ist vereinfacht mit der Kurve in Abb. 1.1 darstellbar. Probleme im Bereich I sind im Gebiet der reinen Strömung anzutreffen. Hier unterliegt die Strömung hohen Voraussetzungen wie z.B. komplexen Geometrien, Turbulenz oder Wandinstabilitäten. Bereich II dagegen ist interessant für die Chemie, wenn der Schwerpunkt auf die Reaktionskinetik und Thermodynamik gelenkt wird, die Ortsabhängigkeit durch die Annahme eines homogenen chemischen Reaktors aber vernachlässigt wird. Zur Beschreibung turbulenter reagierender Strömungen wie z.B. bei Verbrennungsprozessen müssen aber beide Arten von Prozessen berücksichtigt werden, da oft die Chemie und die Strömung aufgrund ähnlicher Orts- und Zeitskalen miteinander wechselwirken. Dadurch wird der Aufwand zur Beschreibung dementsprechend größer, und man bewegt sich bei Systemen, die eine Strömung aus dem Bereich I und ein chemisches Reaktionssystem aus II beinhalten, vom Aufwand her im Bereich III. Systeme jenseits der abgebildeten Kurve sind jedoch mit heutigen Computern nicht zu bearbeiten.

Hier stehen nun zwei Alternativen zur Diskussion. Die erste besteht in einem Abwarten, bis die Kurve maximalen Aufwands durch technologischen Fortschritt nach rechts oben verschoben ist. Eine solche Verschiebung ist beobachtbar, es kann vereinfacht abgeschätzt werden, daß die Rechenleistung moderner Computer sich alle 18 Monate verdoppelt. Die zweite Alternative liegt in der Abstraktion von Teilaspekten aus dem zu betrachteten System, d.h. die Reduktion der Komplexität und der Zahl der zu lösenden Gleichungen. Dadurch müssen zwar Abstriche in der Genauigkeit und der Allgemeingültigkeit der Ergebnisse gemacht werden, aber nur so ist

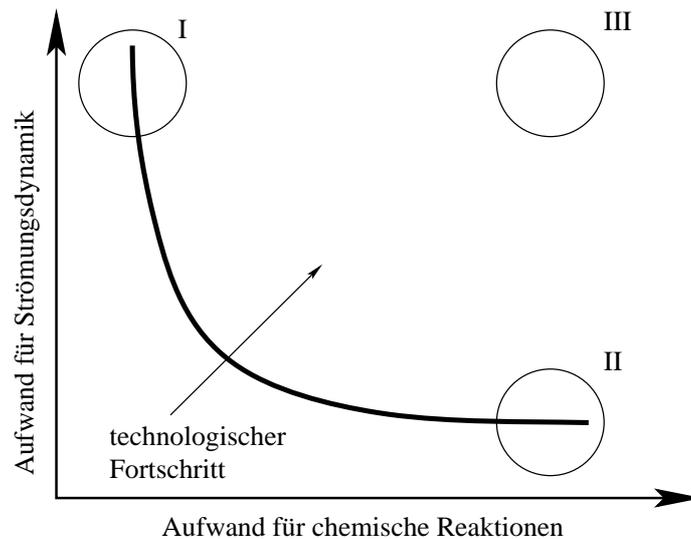


Abbildung 1.1: Restriktion an die Komplexität numerischer Simulationen bei Beachtung chemischer Kinetik und Fluidodynamik.

das System bearbeitbar. Abb. 1.1 muß bei der Durchführung industrieller Entwicklungs- und Forschungsprojekte um eine ökonomische Dimension erweitert werden. Des weiteren ist eine Quantifizierung der in Abb. 1.1 gezeigten Zusammenhänge notwendig. Hier dient sie nur zur Veranschaulichung der prinzipiellen Problematik. Die im folgenden präsentierten Simulationen bewegen sich zwischen den Bereichen I und II auf bzw. unterhalb der Aufwandskurve.

Die Vielzahl der physikalischen und chemischen Prozesse in realen Systemen sollen am Ende dieses Abschnitts an einer Tankflamme verdeutlicht werden. Dieses Beispiel steht exemplarisch für einen beliebigen technischen Prozeß aus der chemischen Industrie. Abb. 1.2 zeigt eine Photographie einer Tankflamme, einer auftriebsbedingten Diffusionsflamme in drei räumlichen Dimensionen. Durch den Auftrieb ist die Strömung instationär, wirbelbehaftet und schwach turbulent. Brennstoff und Oxidationsmittel sind nicht vorgemischt. Es handelt sich um ein komplexes System, das ohne Vereinfachungen oder Modellierung numerisch nicht zu bewältigen ist. Verwendet man vorhandene Modelle z.B. der Strömung, die diese unter statistischen Gesichtspunkten betrachten, so ist es problematisch, Wechselwirkungen zwischen den einzelnen Prozessen aufgrund der getroffenen Modellannahmen zu qualifizieren bzw. zu quantifizieren. In Tankflammen sind vor allem Wechselwirkungen der folgenden Phänomene von Bedeutung:

Turbulenz: Nahe des Flammenfußes herrschen in Tankflammen laminare Strömungsbedingungen. Nach oben hin schlagen sie jedoch aufgrund von Instabilitäten durch Wechselwirkung mit Auftrieb und chemischer Reaktion in grobballige Turbulenz um.

Kohärente Wirbel sind sowohl große Ringwirbel, die sich für das Nähren der Flamme mit Luft verantwortlich erweisen, als auch kleinere Wirbel in der Strömung, die längere Zeit

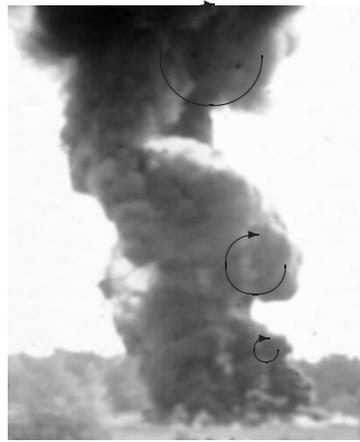


Abbildung 1.2: Darstellung einer Tankflamme zur Illustration der physikalischen und chemischen Prozesse in turbulenten reagierenden Strömungen.

existieren. Kohärente Strukturen sind wesentlich zur Beschreibung der Strömungsdynamik.

Auftrieb: Durch Dichteunterschiede in der Strömung sorgen Auftriebseffekte im Bereich des Flammenfußes für die Ausbildung großer Ringwirbel, die sich durch den Auftrieb nach oben bewegen.

Vermischung: Eine effiziente Vermischung ist die Folge ausgeprägten konvektiven Transports und die Voraussetzung für eine chemische Reaktion. In der Flammengrenzschicht findet die molekulare Vermischung von Brennstoff und Luft statt.

Chemische Reaktion: Exotherme Reaktionen erhöhen die Temperatur und sorgen damit für die Dichteunterschiede und Auftriebseffekte in einer Flamme.

Strahlung ist ein wesentlicher Wärmetransportmechanismus in Flammen. Zur Brandsicherheit und Feuerbekämpfung sind Kenntnisse über die Strahlungsprozesse in Tankflammen von großem Interesse.

1.2 Direkte numerische Simulation

Ziel dieser Arbeit ist es nun gerade nicht, ein physikalisches System wie eine Tankflamme zu durchleuchten bzw. numerisch abzubilden. Im Rahmen dieser Arbeit wird insbesondere auf fundamentale Zusammenhänge und Wechselwirkungsmechanismen einzelner Prozesse Wert gelegt, um die Vorgänge in reagierenden Strömungen besser zu verstehen. Wie im letzten Abschnitt dargestellt, kann eine solche Genauigkeit in der Darstellung nur für ein begrenzt komplexes System erreicht werden. Das bedeutet, daß Systeme untersucht werden, die nicht alle der oben

aufgelisteten physikalischen und chemischen Vorgänge beinhalten. So wird in Kapitel 2 ein System betrachtet, welches die Prozesse molekulare Diffusion, chemische Reaktion und Strahlung hervorhebt, während für das in Kapitel 3 beschriebene System v.a. die Vorgänge Turbulenz, Wirbel, Vermischung und chemische Reaktionen eine Rolle spielen. Die Unterdrückung einzelner Mechanismen kann in Laborexperimenten zu erheblichem zusätzlichem Aufwand führen.

Zusätzlich zu Laborexperimenten können reagierende Strömungen mathematisch beschrieben werden, indem die physikalischen und chemischen Vorgänge in Gleichungen abgebildet und gelöst werden. Numerische Simulationen erlauben die Spezialisierung auf die Wechselwirkung einzelner Aspekte ohne großen apparativen bzw. sicherheitstechnischen Aufwand. Meist ergeben sich partielle Differentialgleichungen im Ort und in der Zeit, die analytisch nicht lösbar sind, so daß eine numerische Simulation zur Lösung notwendig ist.

Detailgetreue Experimente werden in diesem Zusammenhang mit Hilfe der direkten numerischen Simulation (DNS) erzielt. Der Begriff der DNS stammt ursprünglich aus der Strömungsdynamik und bezeichnet die modellfreie Lösung der Navier-Stokes-Gleichungen [61, 93]. Zu beachten ist hierbei, daß die Beschreibung anhand von partiellen Differentialgleichungen bereits mit einer gewissen Modellierung verbunden ist. So sind die Navier–Stokes-Gleichungen beispielsweise auf viskose Fluide anwendbar. DNS bedeutet lediglich, daß für deren Lösung keine weitere Modellierung, die häufig für kleine Strukturen vorgenommen wird, erfolgt. Die DNS beruht auf der Berechnung der zeitlichen und räumlichen Evolution der Geschwindigkeit, Temperatur und der Massenbrüche der im System enthaltenen Spezies, ohne daß Modellterme für die feinskaligen Anteile der Strömung eingeführt werden [61]. Diese Art der Berechnung hat den Vorteil, daß in Bezug auf die Turbulenz keine vereinfachenden Modellannahmen vorausgesetzt werden. Können geeignete Anfangs- und Randbedingungen definiert werden, ist die Genauigkeit und Allgemeingültigkeit der DNS ungeschlagen [95]. Zudem kann zum Beispiel gezielt der Einfluß kohärenter Strukturen untersucht werden. Die Problematik besteht darin, daß die modellfreie Simulation turbulenter Strömungen extrem rechenintensiv ist. Die Zeit- und Raumskalen müssen komplett aufgelöst werden. Daher wird die DNS, obwohl vom Prinzip her ein sehr einfacher Ansatz, auch erst mit Beginn der 70er Jahre angewendet [87]. Aufgrund des Rechenaufwands ist der Ansatz v.a. dafür geeignet, in speziellen Anwendungen sehr genaue Ergebnisse zu liefern bzw. das Vorgehen bei der Modellierung durch Validierungsrechnungen zu unterstützen. In dieser Arbeit werden beide Vorgehensweisen verfolgt. Das Ausmaß des Rechenaufwands wird in den einzelnen Kapiteln explizit behandelt.

1.3 Numerische Verfahren

Eine detailgetreue Darstellung eines Systems kann nur mit Hilfe von präzisen numerischen Methoden geschehen. Nach Abbildung des betrachteten Systems durch partielle Differentialgleichungen müssen diese in Ort und Zeit diskretisiert und unter Beachtung von Anfangs-

und Randbedingungen gelöst werden. Die Zeitdiskretisierung erfolgt in dieser Arbeit mit Hilfe klassischer finiter Differenzen [51]. Diese werden je nach Problemstellung geringfügig variiert und deshalb bei der Beschreibung der numerischen Methode jeweils direkt erläutert. Die Ortsdiskretisierung erfolgt im allgemeinen durch Spektralmethoden, die sich durch bestimmte Eigenschaften gegenüber anderen Verfahren auszeichnen [27]. Nach einer kurzen Einführung werden die Vorzüge bzw. Nachteile der Spektralmethoden anschaulich an zwei Beispielen durch Gegenüberstellung mit einer Finite-Volumen-Methode illustriert.

1.3.1 Spektralmethoden

Im folgenden wird die numerische Diskretisierung einer Transportgleichung für eine abstrakte physikalische Größe $\varphi(x, t)$ in einer räumlichen Dimension x und in der Zeit t beschrieben. Der Übersichtlichkeit halber werden die ortsabhängigen Terme durch je einen linearen und nicht-linearen Differentialoperator $L(\varphi)$ bzw. $G(\varphi)$ abgekürzt.

$$\partial_t \varphi + L(\varphi) = G(\varphi) \quad (1.1)$$

Für das System werden periodische Randbedingungen in x angenommen, wobei die Periode Λ betrage. Für diesen Fall lauten die Anfangs- und Randbedingungen:

$$\begin{aligned} \text{AB: } \quad \varphi(x, t_0) &= \varphi_0(x) && \text{für } t = t_0; x \in [0; \Lambda[\\ \text{RB: } \quad \varphi^{(m)}(0, t) &= \varphi^{(m)}(\Lambda, t) && \text{für } t > t_0 \end{aligned} \quad (1.2)$$

wobei $\varphi^{(m)}$ die m -te Ableitung von φ bezeichnet und $m \in \mathbb{N}$ ist.

Gleichung (1.1) ist Ausgangspunkt für viele numerische Methoden, bei denen in der Zeit finite Differenzen und im Ort Spektralmethoden verwendet werden. Die exakte Lösung für eine Variable $\varphi(x, t)$ kann bei diesen Methoden durch eine unendliche Reihe aus zeitabhängigen Koeffizienten $\hat{\varphi}_\kappa(t)$ und einen Satz von vorgegebenen ortsabhängigen Ansatzfunktionen $\Phi_\kappa(x)$ dargestellt werden. Durch diese Vorgehensweise wird φ in einen orts- und einen zeitabhängigen Term separiert. Bei günstiger Wahl der Ansatzfunktionen klingen die Koeffizienten schnell ab, so daß man die Funktion durch eine endliche Reihe approximieren kann. Die Bestimmung der unbekanntenen $\hat{\varphi}_\kappa(t)$ erfolgt durch Minimierung des gewichteten Residuums, welches man erhält, indem man den Separationsansatz in die Differentialgleichung einsetzt, die Gleichung mit einem Satz von Testfunktionen $\Theta_\kappa(x)$ wichtet, die zu den Ansatzfunktionen orthogonal sind, und über das gesamte Gebiet integriert. Hieraus erhält man ein Gleichungssystem aus N Gleichungen, deren Unbekannte die gesuchten Koeffizienten sind [27, 51].

Unter periodischen Randbedingungen eignet sich besonders der Fourier–Galerkin-Ansatz, bei dem man als Ansatz- und Testfunktionen trigonometrische Polynome vom Grad $N/2$ in x -Richtung wählt [44, 27, 45].

$$\Phi_{\kappa}(x) = \exp\left(\frac{2\pi}{\Lambda}i\kappa x\right) \quad \kappa \in \left[-\frac{N}{2}, \frac{N}{2} - 1\right] , \quad (1.3)$$

$$\Theta_{\kappa}(x) = \frac{1}{\Lambda} \exp\left(-\frac{2\pi}{\Lambda}i\kappa x\right) . \quad (1.4)$$

Die Funktion $\varphi(x, t)$ wird in diesem Fall anhand der Werte φ_{ι} an den Stützstellen $x_{\iota} = \iota\Lambda/N$ als abgeschnittene Fourier-Reihe dargestellt.

$$\varphi_{\iota}(t) = \sum_{\kappa=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} \hat{\varphi}_{\kappa}(t) \exp\left(\frac{2\pi}{N}i\kappa\iota\right) \quad \iota = 0, \dots, N-1 . \quad (1.5)$$

Die diskreten Fourier-Koeffizienten $\hat{\varphi}_{\kappa}(t)$ erhält man aus den Funktionswerten mit Hilfe von:

$$\hat{\varphi}_{\kappa}(t) = \frac{1}{N} \sum_{\iota=0}^{N-1} \varphi_{\iota}(t) \exp\left(-\frac{2}{N}i\kappa\iota\right) \quad \kappa = -\frac{N}{2}, \dots, \frac{N}{2} - 1 . \quad (1.6)$$

Bildet man nun das gewichtete Residuum und beachtet die Orthogonalitätseigenschaft der Ansatz- und Testfunktionen, erhält man das im Ort diskrete Gleichungssystem.

$$\left(\partial_t + \hat{L}\right) \hat{\varphi}_{\kappa}(t) = \hat{G}(\varphi(t)) , \quad (1.7)$$

wobei $\hat{G}(\varphi(t))$ die Fourier-Transformierte des nicht-linearen Terms bezeichnet. Diese abstrakte Methodik wird anhand des Beispiels im nächsten Abschnitt verdeutlicht, (1.8) und (1.9) beschreiben die partielle Differentialgleichung (1.1) und die im Raum diskrete Gleichung (1.7), die auch in der Zeit diskretisiert ist.

Man bezeichnet dieses Vorgehen der Ortsdiskretisierung als Spektralmethode, da die $\hat{\varphi}_{\kappa}$ Eigenfunktionen des linearen Operators sind. Stellt L einen Diffusionsterm dar, ist der Operator aufgrund der Differentiationseigenschaft der Fourier-Transformation eine diagonale Matrix und hat als Einträge in der Diagonalen die Eigenwerte des Operators. Zu beachten ist, daß in (1.3), (1.5) und (1.6) die Fourier-Reihe bei einer oberen Grenze von $N/2 - 1$ abgeschnitten wird. Dies hat seine Ursache in der Verwendung der schnellen Fourier-Transformation (FFT, *engl. Fast Fourier Transform*), um zwischen physikalischem und Fourier-Raum zu wechseln. Bei FFT-Algorithmen ist es notwendig, daß die Zahl der Koeffizienten ein Vielfaches von zwei ist. In dieser Arbeit findet ein Algorithmus von Temperton Anwendung, der für N Primfaktoren von 2, 3, 5 und 7 zuläßt [115, 116]. Bei d -dimensionalen Differentialgleichungen ist das Vorgehen prinzipiell dasselbe wie bei der hier vorgestellten eindimensionalen Diskretisierung.

Die Schwierigkeit der Lösung von (1.7) liegt in der Auswertung der nicht-linearen Terme. Für den Fall quadratischer Nicht-Linearitäten, wie sie in dieser Arbeit zum Beispiel in Form

von Konvektions- oder Reaktionstermen auftreten, müssen bei rein spektraler Auswertung im Fourier-Raum Faltungen berechnet werden. Dies bedeutet für jede Faltung einen erheblichen Rechenaufwand von N^{2d} komplexen Multiplikationen.

Transformiert man die beiden Anteile des nicht-linearen Terms zurück in den physikalischen Raum, werden aus den Faltungstermen Multiplikationen. Der Rechenaufwand verringert sich auf:

- zwei inverse Fourier-Transformationen ($\mathcal{O}(N^d \log_2 N^d)$ Multiplikationen),
- die Auswertung im physikalischen Raum (N^d Multiplikationen) und
- eine Fourier-Transformation zur Bestimmung der Fourier-Koeffizienten des nicht-linearen Terms ($\mathcal{O}(N^d \log_2 N^d)$ Multiplikationen),

also insgesamt von N^{2d} auf $\mathcal{O}(N^d(1 + 2 \log_2 N^d))$. Dieses Vorgehen bezeichnet man als Pseudo-Spektralmethode.

Die wesentlichen Eigenschaften von Spektralmethoden sind im folgenden aufgezählt:

Auflösung: Um Strömungen direkt numerisch simulieren zu können, müssen alle Skalen bis zur Dissipationsskala aufgelöst werden. Im physikalischen Raum ist die auflösbare Gitterbreite $\delta x = \Lambda/N$. Für eine DNS nimmt die notwendige Anzahl an Fourier-Moden mit steigender Reynolds-Zahl (s.u.) zu, der Faktor ist bei Spektralmethoden jedoch um den Faktor 3 bis 7 kleiner als bei klassischen Verfahren mit finiten Differenzen [27].

Genauigkeit: Spektralmethoden besitzen exponentielle Konvergenzeigenschaften, die Fourier-Koeffizienten klingen für glatte Funktionen schneller ab als jede Potenz von $1/N$. Diese Eigenschaft wird als spektrale Genauigkeit bezeichnet. Verglichen mit klassischen Methoden werden bei Spektralmethoden die feinen Skalen präzise approximiert, d.h. der Fehler durch numerische Diffusion ist kleiner. Ebenso sind die Phasenfehler geringer. Deshalb eignen sich Spektralmethoden insbesondere für nicht-lineare Probleme. Dies ist besonders wichtig bei der Untersuchung chemischer Reaktionen, die eine molekulare Vermischung, d.h. die Betrachtung feiner Skalen voraussetzen.

Ein Nachteil der Spektralmethoden ergibt sich bei Funktionen mit inhomogenen Regularitäten, die aufgrund des globalen Charakters der Ansatzfunktionen nur für $N \rightarrow \infty$ genau beschrieben werden können.

Rechenaufwand: Bei gleichem N ist der rechnerische Aufwand zur Lösung der nicht-linearen Transportgleichungen bei Spektralmethoden größer als bei Methoden mit finiten Differenzen. Jedoch müssen zur Erreichung der gleichen Genauigkeit bei letzteren höhere Auflösungen gewählt werden. Außerdem können bei ersteren die nicht-linearen Terme

pseudo-spektral ausgewertet werden. Insgesamt sind Spektralmethoden meist effizienter als Finite-Differenzen-Verfahren. Durch die pseudo-spektrale Auswertung kann das Problem des *aliasing* entstehen, d.h. durch die Nicht-Linearität der Differentialgleichungen werden hohe Wellenzahlen produziert. Zur Behebung dieses Problems existieren eine Reihe von Methoden [27], bei ausreichender Auflösung ist nach [27] kein *de-aliasing* notwendig.

Voraussetzungen: Bei der Verwendung von Fourier–Galerkin-Methoden ist die Implementierung periodischer Randbedingungen notwendig. Des weiteren ist man auf reguläre Gitter beschränkt, so daß nur einfache Geometrien in Frage kommen. Abhilfe schaffen sog. Penalisationsmethoden, die poröse Wände und Ränder erlauben oder die Verwendung anderer Ansatzfunktionen wie beispielsweise Tschebyschew-Polynome [27, 49, 50]. Das dort zur Verfügung stehende Gitter muß aber meist noch transformiert werden, so daß im Endeffekt für die Implementierung von Dirichlet- oder Neumann-Randbedingungen ein hoher Preis bezahlt werden muß. Bei Spektralmethoden entstehen bei schlecht aufgelösten Gradienten Oszillationen, die sich aufgrund der Ansatzfunktionen über das ganze Feld ausdehnen.

1.3.2 Vergleich mit einem Finite-Volumen-Ansatz

Die Vor- und Nachteile einer Spektralmethode sind bereits theoretisch diskutiert worden. Anhand zweier Beispiele werden die Unterschiede zu einer Finite-Volumen-Methode (FVM) nun verdeutlicht. Für Vergleiche mit anderen Methoden wird auf einschlägige Literatur verwiesen [44, 27]. So existieren heute z.B. Methoden sechster Ordnung mit kompakten finiten Differenzen, die eine ähnliche Genauigkeit wie Spektralmethoden aufweisen [74].

Im ersten Beispiel wird der Transport eines Stoffballens um einen Festkörperwirbel mit konstanter Winkelgeschwindigkeit beschrieben [125]. Das Rechengebiet ist ein quadratisches, kartesisches Gitter der Länge $\tilde{\Lambda} = 10$ cm, welches mit $N = 100$ bzw. 200 äquidistanten Stützstellen in jeder Richtung diskretisiert ist. Die Winkelgeschwindigkeit eines im Zentrum des Rechengebiets gelegenen Wirbels beträgt 20/s und es wird eine Umdrehung innerhalb 0.314 s betrachtet. Der Diffusionskoeffizient ist $\tilde{D} = 10^{-7}$ m²/s. Die zeitliche Entwicklung des Massenbruchs kann anhand der folgenden Gleichung beschrieben werden

$$\partial_t \tilde{Y} + \underbrace{\vec{v} \cdot \tilde{\nabla} \tilde{Y}}_{G(\tilde{Y})} - \underbrace{\tilde{D} \tilde{\nabla}^2 \tilde{Y}}_{L(\tilde{Y})} = 0 \quad , \quad (1.8)$$

wobei die Konvektion mit einem nicht-linearen und die Diffusion einem linearen Term aus (1.1) ausgedrückt werden kann. Für dieses Beispiel existiert eine analytische Lösung, die aus der Sicht eines mitbewegten Beobachters der Lösung der instationären, zweidimensionalen Wärmeleitungsgleichung entspricht. Da am Rand alle Terme vernachlässigbar klein sind, können die

Randbedingungen frei gewählt werden, so daß bei Annahme von Periodizität die oben dargestellte Fourier–Galerkin-Methode Anwendung finden kann. In der Zeit wird ein semi-implizites Verfahren zweiter Ordnung verwendet, welches aus einem Euler–Backwards-Verfahren (EB2) für die linearen Terme und aus einer Adams–Bashforth-Extrapolation (AB2) für die nicht-linearen Terme besteht. Dies führt zur folgenden diskreten Gleichung im Fourier-Raum

$$\frac{4\widehat{Y}^{n+1} - 3\widehat{Y}^n + \widehat{Y}^{n-1}}{2\delta\tilde{t}} + \sum_{\iota=1}^2 \widehat{\tilde{v}_\iota \partial_{\tilde{x}_\iota} (2\tilde{Y}^n - \tilde{Y}^{n-1})} + \sum_{\iota=1}^2 \tilde{\kappa}_\iota^2 \tilde{D}\widehat{Y}^{n+1} = 0 \quad , \quad (1.9)$$

die nach \widehat{Y}^{n+1} aufgelöst werden kann. Die Ableitungen $\partial_{\tilde{x}_\iota} (\tilde{Y}^n - \tilde{Y}^{n-1})$ erhält man dabei durch Rücktransformation von $i\tilde{\kappa}_\iota (\widehat{Y}^n - \widehat{Y}^{n-1})$ aus dem Fourier-Raum. Aufgrund der gewählten Bedingungen ist dieses Testbeispiel optimal für die Verwendung der Fourier–Galerkin-Methode.

Für die Diskretisierung anhand der FVM wird an dieser Stelle auf [125] verwiesen, es handelt sich um ein auf dem TEACH-Code (*teaching elliptic axisymmetric characteristics heuristically*) basierendes Verfahren, das die Druckkorrektur mit einem SIMPLE-Verfahren (*semi-implicit method for pressure linked equations*) löst. Für die Diskretisierung der Konvektionsterme werden verschiedene Ansätze gewählt, wobei hier nur von den Ergebnissen mit dem QUICK-Ansatz berichtet wird, der die besten Ergebnisse liefert [85].

Abb. 1.3a zeigt die Anfangsbedingung für den Massenbruch und überlagert das Vektorfeld der Geschwindigkeit. In Abb. 1.3b,c sind die Stoffballen nach einer Umdrehung für die Spektralmethode und das Finite-Volumen-Verfahren gezeigt. Der vergrößerte Ausschnitt ist in Abb. 1.3a markiert. Man erkennt, daß die Kreisform bei der Spektralmethode beibehalten wird, während bei der FVM eine Ausdehnung in Strömungsrichtung erfolgt ist. Dies ist eine Folge der numerischen Diffusion. Ein Vergleich der Schnitte durch die in Abb. 1.3a gezogene Linie zeigt die Unterschiede noch deutlicher. Während der Schnitt bei der Spektralmethode faßt deckungsgleich mit der analytischen Lösung ist, zeigt die FVM deutliche Abweichungen. Zusätzlich ist die Rechenzeit bei der Spektralmethode sehr gering, auf einem Pentium III 800 benötigt die Simulation 2.75 min, während für die FVM-Simulation 137 min nötig sind. Bei diesem Vergleich sollte beachtet werden, daß für die FVM im Gegensatz zur Spektralmethode größere Zeitschritte implementiert werden können, ohne daß der Code divergiert. Dadurch kann die Rechenzeit verringert werden. Jedoch werden die Diskrepanzen zur analytischen Lösung dadurch größer, z.B. sinkt bei einer Verdoppelung des Zeitschrittes das Massenbruch-Maximum auf 0.61 und bei einer weiteren Verzehnfachung auf 0.30. Eine Verdoppelung der Gitterauflösung liefert hingegen bei der ursprünglichen Zeitschrittweite ein Maximum des Massenbruchs von 0.80.

Anhand des zweiten Beispiels wird die Entwicklung eines laminaren Anfahrwirbels beim Austritt aus einer Düse gezeigt, wobei wieder eine ebene zweidimensionale Diskretisierung verwendet wird [26]. Die Eigenschaften einer solchen Strömung erlauben eine Untersuchung mittels

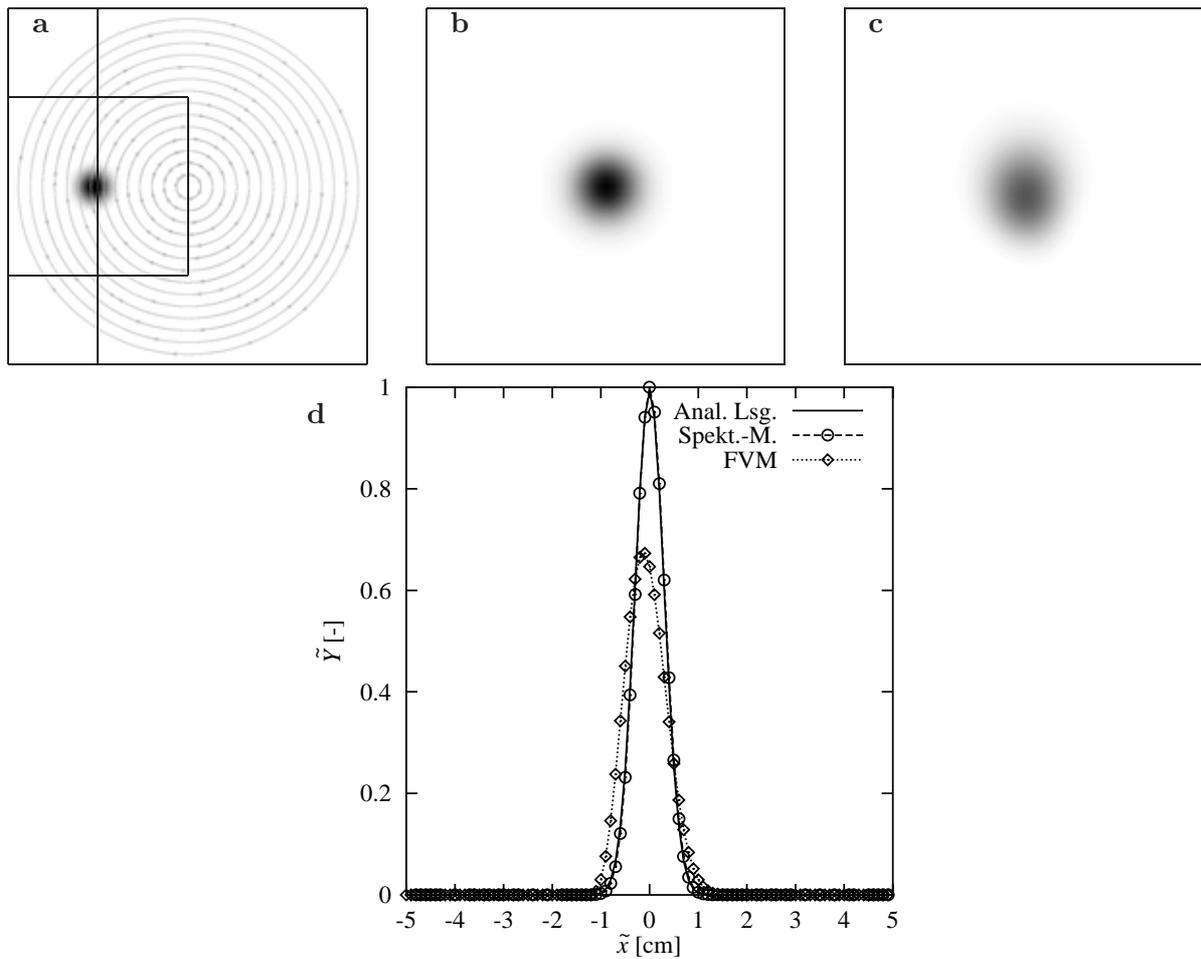


Abbildung 1.3: Laminare Strömung um einen Festkörperwirbel. **a:** Anfangsbedingung für den Massenbruch; **b,c:** Massenbruch nach einer Wirbelumdrehung, gerechnet mit einer Spektral- bzw. Finite-Volumen-Methode; gezeigt ist der in **a** markierte Ausschnitt; **d:** Eindimensionaler Schnitt durch das Massenbruchfeld nach einer Umdrehung entlang der in **a** gezeigten Achse.

DNS, aufgrund der laminaren Struktur des Problems können Turbulenzmodelle nicht verwendet werden. Aufgrund der Randbedingungen können jedoch keine reinen Fourier-Methoden zum Einsatz kommen. Alternativ werden hier in Strömungsrichtung eine Tschebyschew-Kollokations-Methode verwendet [27], wobei eine Gittertransformation durchgeführt wird [50], um die Region um die Düse fein aufzulösen. Quer zur Strömungsrichtung werden wieder periodische Randbedingungen und eine Fourier–Galerkin-Methode implementiert. Die Methodik soll hier nicht weiter vertieft werden, jedoch ist anzumerken, daß sie numerisch aufwendiger ist als die Fourier-Methode. Für den Vergleich wird wieder die oben erwähnte FVM verwendet. Gelöst werden die Navier–Stokes- und Stofftransportgleichungen, die in Kapitel 3 eingeführt werden.

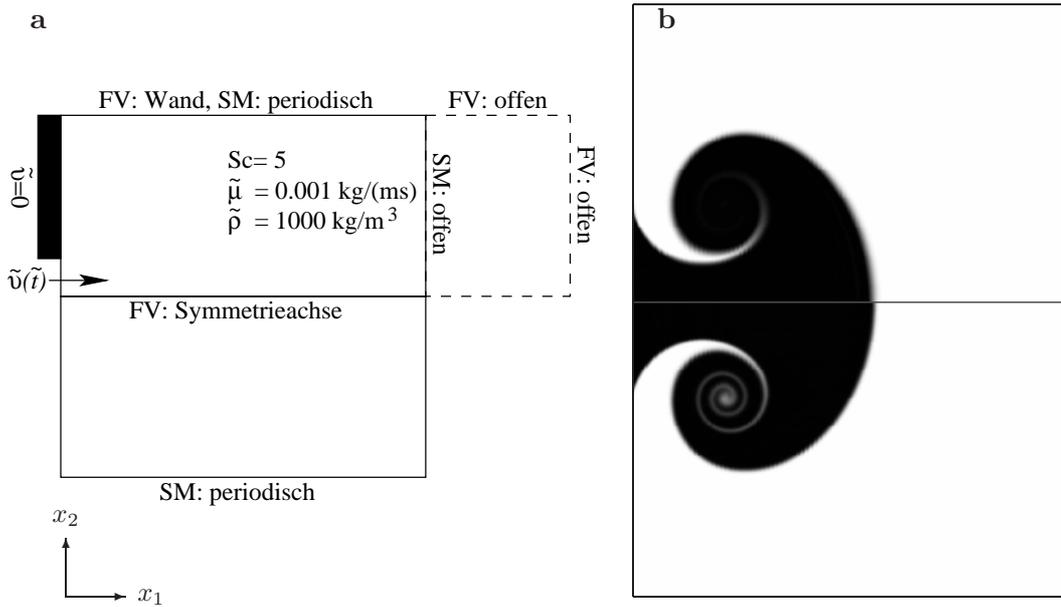


Abbildung 1.4: Simulation eines Einzelwirbels aus einer Düse. **a:** Randbedingungen und Parameter, **b:** Gegenüberstellung der Methoden: oberhalb der Symmetrieachse: Finite-Volumen-Methode, unterhalb: Spektralmethode.

Die Systemparameter sind in Abb. 1.4a erläutert. Aufgrund der periodischen Randbedingungen in x_2 -Richtung wird bei der Spektralmethode beiderseits der Symmetrieachse gerechnet, bei der FVM ist dies nicht notwendig. Zur Verbesserung der numerischen Konvergenzeigenschaften wird dort das Gebiet in x_1 um einige Zellen verlängert. An dieser Verlängerung wird eine offene Randbedingung gewählt. Die Einflüsse der unterschiedlichen Randbedingungen sind in [26] quantifiziert und spielen bei dem hier gezeigten Beispiel eine vernachlässigbare Rolle. Der Massenbruch ist im Inneren anfangs null und in der Düse eins. Das Geschwindigkeitsprofil am Einlaß ist zeitabhängig

$$\tilde{v}_1(\tilde{t}) = \begin{cases} 4.6 \frac{\text{cm}}{\text{s}} (1 + \sin(\frac{3\pi}{2} + \pi\tilde{t})) & \text{für } \tilde{t} \leq 2 \text{ s} \\ 0 & \text{für } \tilde{t} > 2 \text{ s} \end{cases} \quad (1.10)$$

Jenseits der Düse ist die Geschwindigkeit am Rand gleich null, wobei zur Vermeidung des Gibbs-Phänomens bei der Spektralmethode das Geschwindigkeitsprofil leicht geglättet ist. Abb. 1.4b zeigt das Massenbruchfeld nach 2 s. Oberhalb der Symmetrieachse ist das Ergebnis mit der FVM, unterhalb mit der Spektralmethode gezeigt. Am Düsenaustritt bildet sich ein Wirbel, der den Stoff transportiert und eine spiralförmige Grenzfläche bildet. In dieser Spirale erfolgt aufgrund der hohen Gradienten durch Diffusion ein Massenbruchausgleich. Bei der FVM ist dieser molekulare Vermischungseffekt offensichtlich stärker ausgeprägt, was wieder auf die numerische Diffusion zurückzuführen ist. Die Spektralmethode spiegelt die Physik besser wider. Jedoch ist anzumerken, daß mit der Spektralmethode die Auflösung nicht groß genug gewählt werden kann, um solche Anfahrwirbel in Wasser zu beschreiben ($Sc = 400$). Dies ist in

[26] erwünscht gewesen, um die Ergebnisse an experimentellen Untersuchungen zu validieren, aber nicht möglich, da die auftretenden Gradienten zu steil sind¹. In puncto Rechenzeit ist die Spektralmethode etwas schneller als die FVM, der Speicheraufwand ist aber besonders bei größeren Auflösungen erheblich größer.

Aus diesen beiden Beispielen ist erkennbar, daß Spektralmethoden besonders dann von Vorteil sind, wenn feinskalige, d.h. molekulare Effekte betrachtet werden.

1.4 Gliederung der Arbeit

In diesem Kapitel ist bereits angeklungen, daß die DNS in Verbindung mit Spektralmethoden sich insbesondere dazu eignet, spezielle Aspekte eines Systems hervorzuheben, wobei der Rest aus Gründen des hohen Aufwands ausgeklammert wird. Dies soll anhand zweier Systeme in den folgenden Kapiteln geschehen.

In Kapitel 2 wird von konvektiver Strömung abstrahiert, Transportvorgänge werden durch Strahlung und Wärmeleitung bzw. Diffusion beschrieben. Die Untersuchung dreidimensionaler Flammenstrukturen kann damit studiert werden. Als Beispielsystem dienen magere Wasserstoff-Luft-Vormischflammen, deren tiefes Verständnis für zukünftige Entwicklungen von schadstoffarmen Verbrennungsmaschinen von Bedeutung ist, zumal das Potential von Wasserstoff als Brennstoff Gegenstand aktueller Forschung ist. Die hier gezeigten Flammen sind experimentell untersucht und unter Annahme von Symmetriebedingungen mit komplexer Reaktionskinetik numerisch bzw. für den Grenzfall dünner Flammen analytisch untersucht. Mehrdimensionale numerische Rechnungen sind jedoch selten. In dieser Arbeit wird das instationäre Verhalten solcher Flammen in allen drei räumlichen Dimensionen dargestellt.

In Kapitel 3 werden Untersuchungen von Vermischungsprozessen in wirbelbehafteten inkompressiblen Strömungen vorgenommen. Diese werden vor allem unter vereinfachender Betrachtung der chemischen Reaktionen vorgenommen. Anhand zweidimensionaler Untersuchungen wird eine Parameterstudie zur Klärung der Wirkungsweise kohärenter Wirbelstrukturen bezüglich der Vermischung chemischer Spezies durchgeführt. Die Relevanz der hier gefundenen Ergebnisse werden durch ausgewählte Simulationen mit dreidimensionalen Ergebnissen verglichen.

¹Die FVM ist hier robuster, jedoch liefert $Sc = 400$ oder etwa $Sc = 10^{12}$ aufgrund der dominierenden numerischen Diffusion in etwa dasselbe Ergebnis wie $Sc = 5$.

Kapitel 2 Stabilität von Flammenstrukturen unter Ausschluß konvektiver Strömung

irect numerical simulation . . . are being widely pursued for definition of detailed features of flame structure and transport processes (and their interactions) associated with combustion. Because of the large range of length and timescales, DNS of practical or even idealized devices is considered to be a technology of the future, at best. . . Microgravity experiments again lessen the range of scales and may make the problem tractable . . . [69]

In diesem Kapitel werden insbesondere die Wechselwirkungen der physikalischen Transportprozesse der Diffusion, Wärmeleitung und -strahlung mit der chemischen Kinetik untersucht. Als Beispielsystem wird eine magere Mischung von 6.5% Wasserstoff in Luft gewählt. Die präsentierten Ergebnisse sind in verschiedenen Veröffentlichungen zusammenfassend dargestellt [11, 12, 54, 56] bzw. im Druck [58].

2.1 Motivation

2.1.1 Relevanz

Die globalen Probleme der Umweltverschmutzung durch Abgase und der Treibhauseffekt erfordern die Entwicklung und Nutzung sauberer und effektiver Verbrennungs- und Wärmekraftmaschinen. Bis dato sind Flammen unter stöchiometrischen Bedingungen wohl untersucht und verstanden. Innovative Technik setzt jedoch immer mehr auf magere Brennstoffmischungen, da diese weniger schädliche Nebenprodukte verursachen und höhere Wirkungsgrade erzielen. Verglichen mit stöchiometrischen Bedingungen sind magere sehr komplex, da die Zeitskalen der chemischen Reaktionen, der durch die Erdgravitation bedingten Auftriebsströmung, des diffusiven Stofftransports, der Wärmeleitung und -strahlung von derselben Größenordnung sind [102], d.h. alle physikalischen und chemischen Vorgänge wechselwirken miteinander. Aktuelle Reaktionsmechanismen der Verbrennung sind vor allem für stöchiometrische Flammen entwickelt und optimiert, in der Nähe von Stabilitäts-, Zünd- und Löschgrenzen besteht aber weiterhin Forschungsbedarf.

Die grundlegenden Wechselwirkungen von Strahlung, diffusivem Transport und chemischer Reaktion sowie Kenntnisse über Zündung, Ausbreitung und Verlöschen sind von fundamentaler Bedeutung für das Verständnis von Flammen. Bei jedem Verbrennungsprozeß entsteht Wärme, was Dichteänderungen im System zur Folge hat und daher Auftriebskräfte bedingt durch die Erdanziehung verursacht. Die Schwerkraft beeinflusst die Verbrennung und führt zu einer Vielzahl von Effekten, die ihre größte Auswirkung gerade in den Hochtemperaturzonen zeigen [69], d.h. in der Flammenfront. Problematisch ist dabei, daß Gravitationskräfte richtungs- und damit apparateabhängig sind. Z.B. sind Flammengeschwindigkeiten, die in der „*standard flammability limit tube*“ gemessen werden, richtungsabhängig, man unterscheidet zwischen „*upward*“ und „*downward propagating velocity*“ [33]. Signifikanter ist hier noch die Tatsache, daß der Auftrieb die anderen Transportprozesse (Diffusion, Wärmeleitung und Wärmestrahlung) unter üblichen mageren Bedingungen dominiert [101]. Daher können mit Experimenten auf der Erde nur schwer grundsätzlich neue Erkenntnisse über die Wechselwirkungen von Transportprozessen und chemischen Reaktionen erhalten werden.

Eine vielversprechende Alternative ist die Durchführung von Laborexperimenten unter Mikrogravitationsbedingungen (μg). Dort ist der Einfluß freier Konvektion sehr gering. Viele solcher Experimente sind in den letzten 15 Jahren von der NASA und der ESA unter gehörigem Aufwand in Falltürmen, Parabolflügen und im All durchgeführt worden [105] bzw. sind Teil aktueller Forschungsprojekte. In einer solchen Umgebung sind präzise und grundlegende Studien von Diffusion, Wärmeleitung, Strahlung und chemischer Reaktion sowie deren Wechselwirkungen möglich. Hier können thermo-diffusive Flammen ohne den Einfluß von Auftriebsströmungen untersucht werden [100, 1, 105, 2, 103]. Auftriebseffekte können dabei vernachlässigt werden, solange die Erdbeschleunigung $g < 0.01$ ist [131]. Beispielsweise können absolute Verlöschungs- und Zündgrenzen [77, 102] und die Evolution thermo-diffusiver Instabilitäten [90, 101] im Detail untersucht werden. Verbrennungsmodelle können konvektionsfrei validiert werden [118], bevor sie auf Flammen, die unter Erdgravitationsbedingungen brennen, angewendet werden. Die daraus erhaltenen Einsichten sind essentiell, um für magere Flammen eine effiziente Energienutzung zu gewährleisten. Zusätzlich liefern sie wichtige sicherheitsrelevante Informationen.

Dieses Kapitel widmet sich der Ausbreitung thermo-diffusiver Flammenfronten. Die theoretische Durchdringung solcher Flammen ermöglicht ein besseres Verständnis fundamentaler Aspekte der Verbrennung: der Wechselwirkung zwischen Transport und Vermischung von Skalaren sowie von Thermodynamik und chemischer Kinetik. Die dabei eingeführte Vereinfachung des Verbrennungsprozesses dient z.B. der Untersuchung von Zündgrenzen von Gemischen, transienten Prozessen in Flammen und Instabilitäten. Die daraus gewonnenen neuen Einblicke in elementare Phänomene können anschließend nutzbringend für Verbrennungsprozesse, die konvektiv beeinflusst sind, eingesetzt werden. So ermöglicht die Betrachtung eines thermo-diffusiven Modells, das lokale Verlöschungs- oder Zündverhalten in Flammen unbeeinflusst von der richtungsabhängigen Gravitation zu studieren.

2.1.2 Historie

Die Stabilität vorgemischter Flammen ist intensiv untersucht worden. Bei ebenen adiabaten Flammen werden durch lineare Stabilitätsanalysen zwei Arten von Instabilitäten gefunden. Zum einen besteht ein destabilisierender Effekt in der hydrodynamischen Darrieus–Landau-Instabilität, die durch die Gasexpansion bei der Verbrennung zustande kommt [91]. Bei kleiner Lewis-Zahl existiert die thermo-diffusive Instabilität [110]. Sind die diffusiven Transportgeschwindigkeiten für Wärme und Stoff stark unterschiedlich, kann es bei Flammen zu einer Faltenbildung kommen und schließlich zu lokalen Verlöschungsphänomenen [35]. In direkten Simulationen findet oft das thermo-diffusive Modell Anwendung, „*in order to reduce the computations while apparently preserving the major aspects of the relevant phenomenology*“ [66]. Diese klassische Vorgehensweise wird hier mit einer exothermen Reaktion mit einer Arrhenius-Kinetik verwendet.

Sphärische, thermo-diffusive Flammenstrukturen sind erstmals 1944 von Zeldovich erwähnt worden [129]. Das dort verwendete Modell enthält eine Ein-Schritt-Kinetik mit formal unendlicher Aktivierungsenergie, jedoch keine Wärmestrahlung. Analytische Untersuchungen ergeben sphärische Lösungen, die jedoch instabil sind [130]. Erste experimentelle Studien mit mageren Wasserstoff-Luft-Gemischen sind seit 1990 von Ronney durchgeführt worden [100]. In Fallturmexperimenten sind dabei zufällig Flammenstrukturen aufgetreten, die über die ganze Fallzeit stabil sind. In der Folge sind Experimente in Parabolflügen und im All, d.h. unter Mikrogravitationsbedingungen durchgeführt worden, um diese thermo-diffusiven Phänomene unter Ausschluß der Konvektion zu untersuchen [105]. Eine Übersicht über die Arbeiten findet sich in [101, 106]. Gleichzeitig sind theoretische Studien durchgeführt worden, die in [19] zusammengefaßt sind. Unter Einbeziehung von Strahlungstermen in die Gleichungen von Zeldovich kann gezeigt werden, daß dreidimensional stabile sphärische Flammenstrukturen existieren können. Studien werden bis heute durchgeführt [34].

In kugelsymmetrischer Umgebung sind numerische Simulationen sowohl mit reduzierter als auch detaillierter chemischer Kinetik durchgeführt worden [127]. Mehrdimensionale Simulationen sind jedoch sehr rar. Frühere Arbeiten in zwei Dimensionen mit einem adaptiven Wavelet-Code [13] haben die Existenz von quasi-stabilen kreisförmigen Flammen gezeigt, die auch in Experimenten und Stabilitätsanalysen gefunden worden sind [18]. Lediglich in [90] werden dreidimensionale Rechnungen gezeigt, dort werden aber nur auffaltende Strukturen präsentiert.

Die Experimente zeigen unterschiedliche Effekte wie zum Beispiel langsam wachsende sphärische, verlöschende Flammen, sich auffaltende Flammenstrukturen wie auch stationäre kugelförmige Flammen, die über lange Zeit beobachtbar und stabil sind [101]. Bei ersteren nimmt der Radius dabei mit \sqrt{t} zu [21]. Letztere werden als „*Flame Balls*“ bezeichnet und sind seit 50 Jahren in der wissenschaftlichen Diskussion. Zu den wesentlichen Eigenschaften solcher Flammen unter Mikrogravitationsbedingungen gehört, daß sie die wahrscheinlich schwächsten

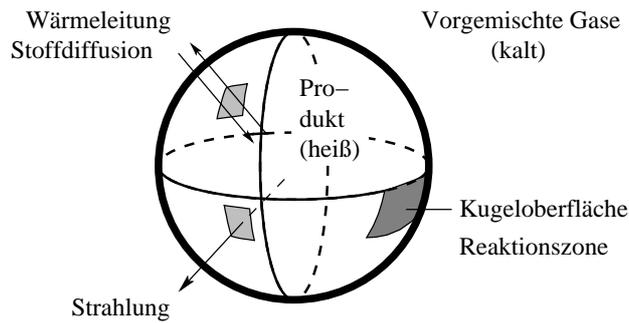


Abbildung 2.1: Schematische Zusammenfassung der physikalischen Terme.

Flammen mit unter 1 W Leistung² sind, daß sie sich nicht ausbreiten und außerhalb der konventionell definierten Verlöschungsgrenzen brennen [105]. *Flame Balls* können in Experimenten miteinander wechselwirken, sie driften dabei auseinander, wobei der Abstand zweier Flammenstrukturen für eine Mischung von 3.57% H₂ in Luft mit $t^{0.438}$ zunimmt [24]. Die Theorie in [24] sagt dagegen einen Anstieg mit $\sqrt[3]{t}$ vorher.

2.1.3 Originalität

In Abb. 2.1 ist schematisch eine solche stabile Flammenstruktur skizziert. Eine Kugel von heißen Verbrennungsprodukten ist umgeben von den kalten, nicht verbrannten Reaktanten. Die Flamme wird genährt durch diffusiven Stofftransport. Die produzierte Wärme in der Reaktionsfront wird durch Wärmeleitung und -strahlung nach außen transportiert.

Flame Balls können mit Modellen unterschiedlicher Komplexität untersucht werden, je nachdem, welchen Mechanismen das Hauptaugenmerk gilt und wie detailgetreu diese beschrieben werden sollen. Das Phänomen der stabilen Flammen kann bereits in einer relativ einfachen Konfiguration diskutiert werden. Dabei wird eine Ein-Schritt-Kinetik angewendet, die Dichte und die Transportkoeffizienten werden als konstant angesehen, und es wird das Strahlungsmodell eines schwarzen Strahlers angenommen. Diese Modelle können durch modernere, komplexere ausgetauscht werden, so daß *Flame Balls* und ähnliche Phänomene sich ideal dafür eignen, um Modelle im Grenzbereich zu testen [102, 101, 103, 127]. In diesem Abschnitt steht nicht das Testen der Modelle im Vordergrund. Vielmehr soll neben einem qualitativen Vergleich mit Experimenten ein Vergleich gezogen werden zwischen den asymptotischen Stabilitätsanalysen, die sehr einfache Modelle verwenden und den weniger stark einschränkenden numerischen Methoden. Die ersteren basieren vor allem auf der Grenzbedingung unendlich hoher Aktivierungsenergie, so daß für die Reaktionsrate ein δ -Funktions-Modell angewendet werden kann. Des weiteren werden Strahlungsverluste nur rudimentär behandelt [22, 23, 19].

²Eine Kerze hat zum Vergleich eine Leistung von ca. 50 W.

Letztere sind teilweise mit komplexer chemischer Kinetik und Strahlungsmodellen ausgestattet, nehmen jedoch sphärische Symmetrie an [127, 118], so daß nur eine räumliche Koordinate in die Modellgleichungen eingeht. In der vorliegenden Arbeit wird eine dreidimensionale Betrachtung gewählt, die wesentlich aufwendiger ist als eine eindimensionale Beschreibung des Problems. Da außerdem die charakteristischen Zeitskalen diffusiv und somit sehr groß sind, sind solche Simulationen sehr kostspielig. Daher können in naher Zukunft wohl keine sehr viel aufwendigeren Modelle verwendet werden als die in dieser Arbeit implementierten [90].

Trotzdem sind die gemachten Annahmen nicht so restriktiv wie vielleicht erwartet. So verschwindet z.B. für einen *Flame Ball* im oder nahe des stationären Zustands die Gasgeschwindigkeit bzw. wird vernachlässigbar klein [23, 13]. Insofern ist die Darrieus-Landau-Instabilität bereits physikalisch ausgeschlossen und nicht etwa durch die Voraussetzung konstanter Dichte. Die thermo-diffusiven Gleichungen sind außerdem in vielen Veröffentlichungen verwendet worden, die sich mit dem Problem befaßt haben [104, 22, 23, 77]. Es kann gezeigt werden, daß im Falle sphärischer Symmetrie die Ergebnisse, die man unter der Annahme konstanter Dichte erhält, direkt auf solche mit variabler Dichte abgebildet werden können [23]. Die Gleichungen haben weiterhin in verwandten Gebieten der Verbrennungsforschung Anwendung gefunden [30, 66].

In Experimenten [105] und numerischen Simulationen [127] sind sphärische Flammenstrukturen untersucht worden, indem das Mischungsverhältnis von Brennstoff zu Luft variiert worden ist. Ein fetteres Gemisch liefert eine höhere Flammentemperatur und somit eine höhere Reaktionsgeschwindigkeit. Insgesamt wird dabei das Verhältnis der Wärmeproduktion zur Wärmeabfuhr durch Strahlung erhöht [106]. Des weiteren erhält man bei fetteren Gemischen größere Flammenstrukturen. In den zitierten numerischen Simulationen sind *Flame Balls* bis zu einem Wasserstoffgehalt von 10.7% bzw. bei Verwendung eines komplexen Strahlungsmodells bis 6.4% [118] gefunden worden. In dieser Arbeit wird ein 6.5%-iges Gemisch von H_2 in Luft untersucht. Analog zu den Experimenten wird das Verhältnis von Wärmezu- und -abfuhr verändert, hier allerdings durch Variation des Strahlungskoeffizienten. Dies liefert ähnliche Ergebnisse wie oben dargestellt [106].

2.1.4 Gliederung des Kapitels

Dieses Kapitel ist wie folgt gegliedert. In Abschnitt 2.2 werden das physikalische Modell und die zugrunde liegenden Differentialgleichungen diskutiert. Die Ergebnisse der theoretischen Stabilitätsanalysen werden wiederholt und in die hier verwendete Formulierung übersetzt. In Abschnitt 2.3 werden Flammen unter Annahme von Kugelsymmetrie diskutiert, um die Stabilität sphärischer Flammenstrukturen zu untersuchen. Variiert werden dabei die Zündbedingungen, die Größe der Anfangsstrukturen und die Höhe des Strahlungskoeffizienten. Diskutiert werden die Flammendynamik, die Profile stabiler Lösungen sowie die Stabilitätskurve in Abhängigkeit

der charakteristischen Parameter. Für letztere erfolgt ein Vergleich mit der Stabilitätskurve aus asymptotischen Untersuchungen. In den Abschnitten 2.4 und 2.5 werden dreidimensionale Effekte analysiert. Die Auslösung und die Dynamik von Instabilitäten werden präsentiert. Daran anschließend folgt die Untersuchung der Flammen, die in den kugelsymmetrischen Rechnungen als stationär klassifiziert worden sind, in drei räumlichen Dimensionen. Man erhält sowohl langlebige Strukturen als auch verlöschende oder auffaltende Flammen.

2.2 Physikalisches Modell

2.2.1 Gleichungssystem zur Berechnung sphärischer Flammenstrukturen

In der Literatur zu sphärischen Flammenstrukturen werden die zugrunde liegenden Differentialgleichungen in verschiedenen Formulierungen beschrieben. Vor allem bei Anwendung komplexer Reaktionskinetik findet man eine dimensionsbehaftete Schreibweise. Im Falle der asymptotischen Untersuchungen stellt der Zeldovich-Radius (s.u.) die zentrale Größe dar, so daß dort auf diese Größe normiert wird. Bei Anwendung einer Arrhenius-Ein-Schritt-Reaktionskinetik hat sich die Normierung mittels der Flammendicke und Flammgeschwindigkeit bewährt. Diese Form illustriert am besten die Unterschiede zwischen einer planaren Flammenfront und sphärischen Flammenstrukturen und wird auch in dieser Arbeit verwendet.

$$\tilde{\rho} \tilde{c}_p \partial_{\tilde{t}} \tilde{T} - \tilde{\lambda} \tilde{\nabla}^2 \tilde{T} = \tilde{Q} \tilde{\omega} - \tilde{\sigma} \quad (2.1)$$

$$\tilde{\rho} \partial_{\tilde{t}} \tilde{Y} - \tilde{\rho} \tilde{D} \tilde{\nabla}^2 \tilde{Y} = -\tilde{\omega} \quad (2.2)$$

$$\tilde{\omega} = \tilde{\rho} \tilde{A} \tilde{Y} \exp\left(-\frac{\tilde{E}_a}{\tilde{R} \tilde{T}}\right) \quad (2.3)$$

$$\tilde{\sigma} = 4 \tilde{\sigma}_{\text{SB}} \tilde{l}_p (\tilde{T}^4 - \tilde{T}_u^4) \quad (2.4)$$

Die dimensionsbehafteten Gleichungen (2.1)–(2.4) beschreiben den Transport von Stoff und Enthalpie anhand der Bilanzgleichungen für den Massenbruch \tilde{Y} und die Enthalpie, hier aufgrund der als konstant angenommenen Wärmekapazität \tilde{c}_p und Dichte $\tilde{\rho}$ in Form einer Gleichung für die Temperatur \tilde{T} . Die zeitliche Änderung der Temperatur setzt sich dann zusammen aus dem Fourierschen Gesetz mit dem Wärmeleitfähigkeitskoeffizienten $\tilde{\lambda}$, einer chemischen Reaktion mit der spezifischen Reaktionsenthalpie \tilde{Q} und einem Strahlungsterm $\tilde{\sigma}$. Die molare Reaktionsenthalpie $\Delta_R \tilde{H}$ erhält man aus \tilde{Q} durch Multiplikation mit der molaren Masse von Wasserstoff \tilde{M} . Die Terme in der Massenbruchgleichung sind die Ficksche Diffusion mit dem binären Diffusionskoeffizienten \tilde{D} von Wasserstoff in Luft und die chemische Reaktion. Der Reaktionsterm beschreibt eine exotherme irreversible Oxidation von Wasserstoff mit Hilfe eines formalkinetischen Ansatzes. Der Arrhenius-Term beinhaltet dabei die Aktivierungsenergie

\tilde{E}_a , einen Vorfaktor \tilde{A} und die Gaskonstante \tilde{R} . Strahlung wird mit einem klassischen Stefan–Boltzmann-Ansatz modelliert, welcher die Stefan–Boltzmann-Zahl $\tilde{\sigma}_{\text{SB}}$ und die Planck-Länge \tilde{l}_p enthält. Eine Ursache möglicher Instabilitäten des Systems besteht in der unterschiedlich schnellen Diffusion von Wärme und Stoff.

Die Gleichungen (2.1)–(2.4) werden in die folgenden dimensionslosen Gleichungen transformiert

$$\partial_t T - \nabla^2 T = \omega - \sigma \quad (2.5)$$

$$\partial_t Y - \frac{1}{Le} \nabla^2 Y = -\omega \quad (2.6)$$

$$\omega = AZe^2 Y \exp\left(\frac{Ze(T-1)}{1+\alpha(T-1)}\right) \quad (2.7)$$

$$\sigma = s((T + \alpha^{-1} - 1)^4 - (\alpha^{-1} - 1)^4) \quad , \quad (2.8)$$

wobei folgende Referenzgrößen verwendet werden

$$\tilde{t}_{\text{ref}} = \frac{\tilde{\lambda}}{\tilde{\rho} \tilde{c}_p \tilde{S}_{1,\text{ad}}^2} \quad , \quad \tilde{x}_{\text{ref}} = \frac{\tilde{\lambda}}{\tilde{\rho} \tilde{c}_p \tilde{S}_{1,\text{ad}}} \quad , \quad (2.9)$$

$$\tilde{T}_{\text{ref}} = \tilde{T}_{\text{ad}} - \tilde{T}_{\text{u}} = \frac{\tilde{Q} \tilde{Y}_{\text{u}}}{\tilde{c}_p} \quad , \quad \tilde{Y}_{\text{ref}} = \tilde{Y}_{\text{u}} \quad . \quad (2.10)$$

Die Indizes $_{\text{u}}$ und $_{\text{ad}}$ beziehen sich auf das unverbrannte Gas bzw. den Zustand einer adiabat brennenden planaren Flammenfront mit laminarer Flammengeschwindigkeit $\tilde{S}_{1,\text{ad}}$. Der Massenbruch \tilde{Y} und die Temperatur \tilde{T} sind auf die folgende Weise normiert:

$$Y = \frac{\tilde{Y}}{\tilde{Y}_{\text{ref}}} \quad , \quad T = \frac{\tilde{T} - \tilde{T}_{\text{u}}}{\tilde{T}_{\text{ref}}} \quad . \quad (2.11)$$

Aufgrund des Wasserstoffunterschusses ist der Stofftransport durch den des Wasserstoffs limitiert, während der Enthalpietransport vor allem in der Luft zustande kommt. Die Lewis-Zahl wird deshalb aus dem Verhältnis der Temperaturleitzahl von Luft zum binären Diffusionskoeffizienten von Wasserstoff in Luft gebildet,

$$Le = \frac{\tilde{\lambda}}{\tilde{\rho} \tilde{c}_p \tilde{D}} \quad . \quad (2.12)$$

Der Reaktionsterm (2.7) enthält als dimensionslose Parameter den Temperaturkoeffizienten α , die Zeldovich-Zahl Ze und den Vorfaktor A .

$$\alpha = \frac{\tilde{T}_{\text{ad}} - \tilde{T}_{\text{u}}}{\tilde{T}_{\text{ad}}} \quad , \quad Ze = \frac{\alpha \tilde{E}_a}{\tilde{R} \tilde{T}_{\text{ad}}} \quad , \quad A \approx \frac{1}{2Le} \left(1 + \frac{2(3\alpha - 2.344 + Le)}{Ze}\right) \quad (2.13)$$

Letzterer kann durch $A = 1/(2Le)$ [25] angenähert werden. Durch diese Approximation erhält man eine dimensionslose Flammengeschwindigkeit von eins für eine adiabate planare Flamme bei hoher Aktivierungsenergie [66]. Für $Ze = 10$ ergibt sich beispielsweise eine dimensionslose Flammengeschwindigkeit von $S_{1,\text{ad}} = 1.018$. Wie in [12, 13] werden die folgenden Werte verwendet: $Le = 0.3$, $\tilde{T}_{\text{u}} = 300$ K, $\tilde{T}_{\text{ad}} = 830$ K [100], $\tilde{Y}_{\text{u}} = 0.48$ Massenprozent und $\tilde{E}_a = 110$ kJ/mol

[84, 127], die zu $\alpha = 0.64$ und $Ze = 10$ führen. Bei $\tilde{M} = 2 \text{ g/mol}$ ist die molare Reaktionsenthalpie dann $\Delta_R \tilde{H} = -222 \text{ kJ/mol}$. Diese Daten beziehen sich auf eine 6.5% H_2 -Luft Flamme [100]. Der Strahlungsterm bezieht sich auf den optisch dünnen Grenzfall, eine Bedingung, die in den meisten (μg)-Experimenten vorherrscht. Der Strahlungskoeffizient s , der das Ausmaß der Strahlung wiedergibt, wird hier als unabhängiger Parameter verwendet. In qualitativ vergleichbaren Experimenten kann der Strahlungseinfluß durch Zufügen von CF_3Br zum Brennstoff variiert werden [19].

Zur Lösung der Gleichungen (2.5)–(2.8) müssen noch Anfangs- und Randbedingungen definiert werden. Dies geschieht in den folgenden Abschnitten.

2.2.2 Zeldovich-Flammen

Zur Einführung in die Problematik werden die klassischen Ergebnisse von Zeldovich präsentiert [130] und in die hier verwendete Formulierung transformiert. Das bedeutet, als Referenzgröße wird anstatt des Zeldovich-Radius die Flammendicke einer planaren adiabaten Flammenfront verwendet. Zeldovich hat die Existenz stationärer kugelsymmetrischer Flammen in einer vorgemischten Atmosphäre bei kleiner Lewis-Zahl bewiesen. Als Vereinfachungen hat er konstante Dichte und einen δ -Funktions-Ansatz für eine Ein-Schritt-Kinetik angenommen, welche eine unendlich hohe Aktivierungsenergie voraussetzt und eine Flammenfront der Dicke null ergibt. Letztere erlaubt den Reaktionsterm $\tilde{\omega}$ in (2.1),(2.2) zu ersetzen durch

$$\tilde{\omega}_\delta = \tilde{\rho} \tilde{A} \exp\left(\frac{-\tilde{E}_a}{2\tilde{R}\tilde{T}_*}\right) \delta(\tilde{r} - \tilde{r}_*) \quad , \quad (2.14)$$

wobei \tilde{T}_* die Flammentemperatur und \tilde{r}_* den Flammenradius bezeichnet. In Abwesenheit von Strahlungsverlusten ($\tilde{\sigma} = 0$) existiert eine stationäre sphärische Lösung von (2.1),(2.2) unter folgenden Randbedingungen

$$\partial_{\tilde{r}} \tilde{T}(\tilde{r} = 0) = 0 \quad , \quad \tilde{Y}(\tilde{r} = 0) = 0 \quad , \quad (2.15)$$

$$\tilde{T}(\tilde{r} \rightarrow \infty) = \tilde{T}_u \quad , \quad \tilde{Y}(\tilde{r} \rightarrow \infty) = \tilde{Y}_u \quad . \quad (2.16)$$

Diese beschreibt die Zeldovich-Flamme, die durch den Index z gekennzeichnet wird. Für $\tilde{r} < \tilde{r}_z = \tilde{r}_*$ ist die konstante Temperatur

$$\tilde{T} = \tilde{T}_z = \tilde{T}_* = \tilde{T}_u + \frac{\tilde{Q} \tilde{Y}_u}{\tilde{c}_p Le} \quad . \quad (2.17)$$

Der Flammenradius ist gegeben durch

$$\tilde{r}_z = \tilde{r}_* = \frac{\tilde{Y}_u \tilde{\lambda}}{Le \tilde{\rho} \tilde{A} \tilde{c}_p} \exp\left(\frac{-\tilde{E}_a}{2\tilde{R}\tilde{T}_z}\right) \quad . \quad (2.18)$$

Die Geschwindigkeit einer ebenen Flamme mit der Temperatur \tilde{T}_* in diesem System ist

$$\tilde{S}_{1,\text{ad}}(\tilde{T}_*) = \frac{\tilde{A}}{\tilde{Y}_u} \exp\left(\frac{-\tilde{E}_a}{2\tilde{R}\tilde{T}_*}\right) \quad (2.19)$$

so daß [21]

$$\tilde{r}_z = \frac{\tilde{\lambda}}{Le\tilde{\rho}\tilde{c}_p\tilde{S}_{1,\text{ad}}(\tilde{T}_z)} \quad . \quad (2.20)$$

Einsetzen der Referenzlänge x_{ref} aus (2.9), die auf der Geschwindigkeit $\tilde{S}_{1,\text{ad}}(\tilde{T}_{\text{ad}})$ einer adiabaten Flamme basiert, ergibt den dimensionslosen Zeldovich-Radius

$$r_z = \frac{1}{Le} \frac{\tilde{S}_{1,\text{ad}}(\tilde{T}_{\text{ad}})}{\tilde{S}_{1,\text{ad}}(\tilde{T}_z)} \quad , \quad (2.21)$$

der folgendermaßen umgeschrieben werden kann

$$r_z = \frac{1}{Le} \exp\left(-\frac{Ze}{2\alpha + \frac{2Le}{1-Le}}\right) \quad . \quad (2.22)$$

In der Literatur über numerische Studien von *Flame Balls* gibt es meist keine Vergleiche zur Stabilitätsanalyse. Um einen solchen Vergleich durchzuführen, wird in dieser Arbeit die adiabate Flammengeschwindigkeit in (2.19) verwendet. Dieses Vorgehen kann prinzipiell auch für beliebige andere chemische Systeme durchgeführt werden. Mit den oben erwähnten Parametern erhält man einen theoretischen Zeldovich-Radius von $r_{z,\text{th}} = 0.031$ in den hier verwendeten Einheiten.

2.2.3 Asymptotische Profile von Temperatur und Massenbruch

Das asymptotische Verhalten für große Radien kann für T und Y aus den Grundgleichungen (2.5)–(2.8) abgeleitet werden, da die Reaktionsrate für große r verschwindet. Ist nur das Nahfeld verantwortlich für die Strahlungsverluste, ist der Strahlungsterm fern der Flammenfront ebenfalls vernachlässigbar. In diesem Fall können die Bilanzgleichungen von T und Y für große Radien einfacher geschrieben werden:

$$-\frac{1}{Le}\nabla^2 Y(r) = 0 \quad (2.23)$$

$$-\nabla^2 T(r) = 0 \quad . \quad (2.24)$$

Die Fundamentallösungen dieser Gleichungen können in d räumlichen Dimensionen unter Annahme von Rotationssymmetrie angenommen werden. Der Operator ∇^2 wird dabei durch $d/r\partial_r + \partial_{rr}$ ersetzt. Dadurch ergibt sich ein eindimensionales Problem mit den folgenden Lösungen [112, 101]:

$$T_{1d} = c_1 + c_2 r \quad , \quad T_{2d} = c_1 + c_2 \ln(r) \quad , \quad T_{3d} = c_1 + \frac{c_2}{r} \quad , \quad (2.25)$$

wobei die $c_{1,2}$ jeweils Integrationskonstanten sind, die für die verschiedenen Fälle nicht identisch sind. Das bedeutet, daß aufgrund der Unbegrenztheit Flammen in ein oder zwei Dimensionen nicht stabil sein können. Man erhält zwar quasi-stabile Strukturen, die über längere Zeit existieren [11, 13], jedoch sorgen stets vorhandene eindimensionale Störungen für das Verlöschen der Flammen. Lediglich bei Vorhandensein einer nicht zu vernachlässigbaren Störung, wie z.B. einem Gittereinfluß in der Anfangsbedingung [13] kann es zu einem Auffalten in mehrere Teilstrukturen kommen. In drei Dimensionen sind stationäre Lösungen möglich, da die Lösung für $r \rightarrow \infty$ gegen null geht. Mit Hilfe der Randbedingungen können die Integrationskonstanten c_1, c_2 bestimmt werden. Die Flammenstruktur, die von Zeldovich erhalten worden ist, ist unter den Annahmen aus dem letzten Abschnitt

$$T = \begin{cases} \frac{1}{Le}; & r \leq r_z \\ \frac{1}{Le} \frac{r_z}{r}; & r > r_z \end{cases} \quad (2.26)$$

$$Y = \begin{cases} 0; & r \leq r_z \\ 1 - \frac{r_z}{r}; & r > r_z \end{cases} \quad (2.27)$$

Verglichen mit einer ebenen Flamme können in solchen Flammen bedeutend höhere Temperaturen auftreten. Des weiteren fällt die Temperatur reziprok zum Radius und nicht proportional zu $\exp(-r)$ wie im ebenen Fall.

Bei Einführung von Fernfeldstrahlung anhand eines Stefan-Boltzmann-Modells (2.8), wie es in dieser Arbeit angewendet wird, verändert sich die Situation. Linearisierung des Strahlungsterms (2.8) um den unverbrannten Zustand liefert

$$-\frac{1}{Le} \nabla^2 Y(r) = 0 \quad (2.28)$$

$$-\nabla^2 T(r) + cT(r) = 0 \quad (c = \text{konst.}) \quad (2.29)$$

Diese Gleichungen sind wie (2.23),(2.24) unabhängig voneinander, so daß die Fundamentallösungen in drei Dimensionen ableitbar sind [112]. Für den Massenbruch erhält man keine Änderung, während für die Temperatur eine modifizierte Bessel-Funktion abgeleitet wird.

$$Y(r) \sim \frac{1}{r} \quad (2.30)$$

$$T(r) \sim \frac{\exp(-r)}{r} \quad (2.31)$$

Analog ergibt sich mit diesem Strahlungsmodell für die Temperatur eine Fundamentallösung $T(r) \sim \exp(-r)/\sqrt{r}$ in zwei räumlichen Dimensionen, d.h. hier ist für die Temperatur eine stationäre Lösung möglich, der Massenbruch erlaubt eine solche jedoch nicht.

2.2.4 Stabilitätstheorie

Wie bereits von Zeldovich festgestellt, sind die oben dargestellten stationären Lösungen für eine sphärische Flamme instabil und können in Experimenten nicht beobachtet werden. Wärme-

verluste, z.B. hervorgerufen durch Strahlung, können jedoch die Flamme stabilisieren. In diesem Abschnitt werden kurz die Ergebnisse der asymptotischen Stabilitätsanalysen wiederholt [22, 23]. Sie basieren wie bereits erwähnt auf dem Modell einer unendlich dünnen Flammenfront und auf der Annahme konstanter Dichte. Die stabilisierenden Strahlungsverluste werden in den asymptotischen Analysen mittels eines Nahfeld- oder Fernfeldansatzes formuliert. Die letzteren modellieren eine kalte Wand oder ein kaltes Gas fern der Flammenfront und haben dieselben Temperatur- und Massenbruchprofile wie die Zeldovich-Flammen zur Folge. Erstere sind durch $\sigma = 0$ für $r > r_*$ modelliert worden. Dadurch erhält man Profile außerhalb der Flammenfront, die sich ebenfalls mit den Zeldovich-Flammen decken, im Innern unterscheiden sie sich aber davon. Man erhält

$$T \sim \begin{cases} r^2; & r \leq r_z \\ \frac{1}{r}; & r > r_z \end{cases} \quad (2.32)$$

$$\begin{aligned} Y &= 0; & r \leq r_z \\ 1 - Y &\sim \frac{1}{r}; & r > r_z \end{aligned} \quad (2.33)$$

Strahlungsverluste durch das Fernfeld können auch von der Temperatur abhängen $\sigma = \sigma(T)$. Sie beeinflussen dann auch das Temperaturprofil für große r , wie im letzten Abschnitt gezeigt. Hierauf und auf die relative Stärke von Nah- und Fernfeldstrahlung wird in den Ergebnissen eingegangen. Die qualitative Struktur der Flamme stimmt bei den beiden Arten des Strahlungsverlustes überein, solange die Fernfeldverluste nicht dominieren [23]. Bei einem Fernfeld der Stärke χ_{fern} und einem Nahfeld der Stärke χ_{nah} , ist der stationäre Radius einer Flamme r_* bestimmt durch [23]

$$\chi_{\text{fern}} \frac{r_*}{r_z} + \chi_{\text{nah}} \left(\frac{r_*}{r_z} \right)^2 - \ln \frac{r_*}{r_z} = 0 \quad . \quad (2.34)$$

Definiert man einen gemeinsamen Strahlungsparameter χ , kann der Radius als Funktion von χ ausgedrückt werden. Dies ist in Abb. 2.2 für $\chi = \chi_{\text{fern}}$ ($\chi_{\text{nah}} = 0$) und $\chi = \chi_{\text{nah}}$ ($\chi_{\text{fern}} = 0$) geschehen. Man erkennt, daß es eine stationäre Lösung nur unterhalb einer Grenze gibt, ansonsten verlöschen die Flammen. An dieser Grenze existiert genau eine Lösung für r_* , darunter gibt es zwei stationäre Lösungen unterschiedlicher Größe. Die Stabilitätsanalyse gegenüber eindimensionalen – also kugelsymmetrischen – Störungen zeigt, daß die Flammen für Nah- und Fernfeld-Verluste mit

$$\frac{r_*}{r_z} < \frac{1}{\sqrt{2\chi_{\text{nah}}}} \quad \text{bzw.} \quad \frac{r_*}{r_z} < \frac{1}{\chi_{\text{fern}}} \sqrt{\frac{1+Le}{1-Le}} \quad (2.35)$$

instabil sind [23]. Die entsprechenden Kurven sind in Abb. 2.2 dargestellt. Das bedeutet, daß der untere Ast immer instabil ist. Fernfeldverluste beeinflussen die Stabilitätsgrenze der kleinen Flammen zusätzlich, die Grenze ist in Richtung des oberen Astes verschoben. Kugelförmige Flammen können ebenso dreidimensionalen Instabilitäten ausgesetzt sein. Die Theorie in [23] zeigt, daß nur für Nahfeldverluste dieses Phänomen existiert. Für $\chi = \chi_{\text{nah}}$ ($\chi_{\text{fern}} = 0$) erhält

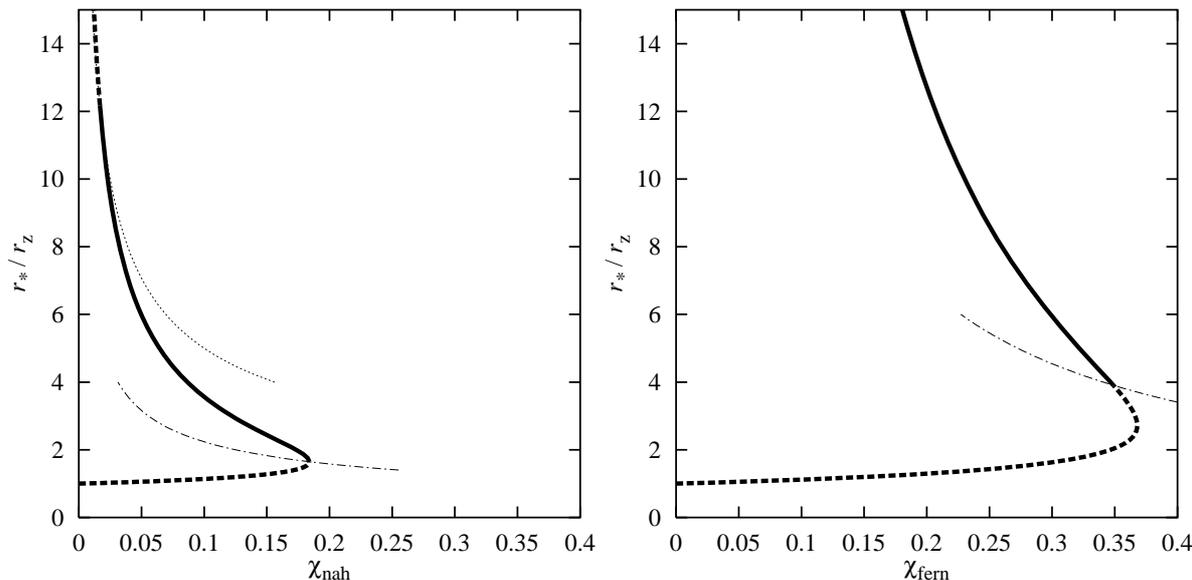


Abbildung 2.2: Stationäre sphärische Flammen und deren Stabilität bei $Le = 0.3$. Radius r_*/r_z eines stationären *Flame Ball* für reine **a:** Nahfeldverluste und **b:** Fernfeldverluste. Die dicken Linien stellen Lösungen von (2.34) dar, wobei der stabile Bereich jeweils durch durchgezogene und die instabilen Äste durch gestrichelte Linien gekennzeichnet sind. Die feinen Linien markieren die eindimensionalen (punktgestrichelt) bzw. die dreidimensionalen (gepunktet) Stabilitätsgrenzen.

man instabile Flammen für

$$\frac{r_*}{r_z} < \sqrt{\frac{5}{2\chi_{\text{nah}}}} \quad (2.36)$$

(s. Abb. 2.2), während für $\chi_{\text{nah}} = 0$ keine dreidimensionale Instabilität beobachtet wird. Die lineare Stabilitätsanalyse macht auch eine Aussage über die Wellenzahl, für die die Instabilität am schnellsten wächst und die die Evolution nach dem Auffalten dominiert. Hier entspricht sie einem Prolator [20], eine Information, die auch relevant ist im Zusammenhang mit den Ergebnissen dieser Arbeit.

Die asymptotischen Analysen sind unter vereinfachten Annahmen über das Reaktions- und das Strahlungsmodell durchgeführt worden. Dabei muß beachtet werden, daß „*near- and far-field losses is a creature of asymptotics*“ [19]. Generell gehen beide Arten in die Differentialgleichung für die Temperatur ein, z.B. (2.4), (2.8). Die hier wiederholten analytischen Untersuchungen illustrieren die Grenzfälle und erklären die prinzipiellen Effekte. Die in dieser Arbeit gemachten Annahmen sind weniger restriktiv und werden mit den hier dargestellten Ergebnissen verglichen.

2.3 Kugelsymmetrische Untersuchungen

2.3.1 Numerische Methode

Wesentliches Element der sphärischen Flammenstrukturen ist deren innewohnende Kugelsymmetrie. Wird diese aufrechterhalten, kann das System von Differentialgleichungen (2.5)–(2.8) in Kugelkoordinaten r, θ, ϕ geschrieben werden, wobei keine Abhängigkeit von den Winkeln θ und ϕ vorliegt. Der Operator ∇^2 wird dann in drei Dimensionen durch $2/r\partial_r + \partial_{rr}$ ersetzt, und es ergibt sich ein eindimensionales Problem. Untersuchungsgegenstand sind die anfängliche Größe, die Struktur der Flamme sowie Strahlungsverluste. Das Rechengebiet umfaßt $r \in [0; \Lambda]$, wobei Λ genügend groß zu wählen ist, um einen numerischen Einfluß speziell gewählter Randbedingungen ausschließen zu können. Darauf wird noch im Detail eingegangen. Bei $r = 0$ werden homogene Neumann-Randbedingungen verwendet, so daß das Problem der Singularität im Flammenzentrum vermieden wird, bei $r = \Lambda$ werden Dirichlet-Randbedingungen implementiert:

$$\partial_r T(t, r = 0) = 0 \quad , \quad \partial_r Y(t, r = 0) = 0 \quad (2.37)$$

$$T(t, r = \Lambda) = 0 \quad , \quad Y(t, r = \Lambda) = 1 \quad (2.38)$$

Die numerische Diskretisierung erfolgt anhand klassischer finiter Differenzen in Ort und Zeit. Das Zeitschema ist semi-implizit und von zweiter Ordnung. Die linearen Diffusionsterme werden implizit mit einer Crank–Nicolson-Methode gelöst, die nicht-linearen chemischen Reaktions- und Strahlungsterme sind explizit (mittels AB2) diskretisiert. Die semi-implizite Vorgehensweise vermeidet die Lösung nicht-linearer Gleichungssysteme, ohne jedoch die Zeitschrittweite zu sehr nach oben zu beschränken. Der Ort wird mit zentralen finiten Differenzen zweiter Ordnung auf einem äquidistanten Gitter diskretisiert. Das resultierende diskrete tridiagonale Gleichungssystem wird mit einer Cholesky-Dekomposition gelöst. Die thermo-diffusiven Gleichungen (2.5)–(2.8) werden schließlich mit den unten beschriebenen Anfangsbedingungen vervollständigt.

In den beschriebenen Simulationen werden in radialer Richtung $N = 5000$ bis $N = 25000$ Gitterpunkte verwendet, und die Zeitschrittweite beträgt zwischen $\delta t = 10^{-5}$ und $\delta t = 5 \cdot 10^{-4}$. In allen Fällen wird mit diesen Werten eine ausreichende Auflösung in Ort und Zeit erreicht.

Die Simulationen dienen der Untersuchung der eindimensionalen Stabilität der sphärischen Flammen und werden gestoppt, sobald eines der folgenden Kriterien erfüllt wird:

Verlöschen der Flamme: Diese Bedingung ist dadurch definiert, daß für die maximale Temperatur im Rechengebiet $T_{\max} < 0.2$ gilt. Zusätzlich unterschreitet die integrale Reaktionsrate eine Schwelle von $\mathcal{E} = 10^{-5}$ oder der Flammenradius beträgt weniger als 0.1 % der Gebietslänge.

Wachsende Flamme: Ein zweites Szenario besteht in einer sich ausbreitenden Flammenfront, d.h. im sphärisch-symmetrischen Fall in einer Expansion der Flammenstruktur. Dieser Fall liegt vor, wenn der Flammenradius stetig größer wird und schließlich 90% von Λ beträgt.

Stationäre Lösung: Eine stationäre kugelsymmetrische Flamme der Gleichungen (2.5)–(2.8) ist dadurch gekennzeichnet, daß $\partial_t T = 0$ und $\partial_t Y = 0$. Offensichtlich wird diese Bedingung nicht in endlicher Zeit erreicht. Deshalb wird als abgeschwächte Forderung verwendet, daß die Änderung der Temperatur und des Massenbruchs in der diskreten L_2 -Norm in einem Zeitintervall von $\Delta t = 1$ kleiner ist als $\mathcal{E} = 10^{-5}$. Dies gilt für die Temperatur T

$$\frac{\|T(t + \Delta t) - T(t)\|^2}{\frac{1}{2}(\|T(t + \Delta t)\|^2 + \|T(t)\|^2)} < \mathcal{E} \quad (2.39)$$

und analog für Y .

Zeitüberschreitung: Andere Evolutionen, die durch die obigen Kriterien nicht abgedeckt werden (z.B. oszillierende Flammen), werden nach einer Maximalzeit von $t = 2000$ angehalten.

Die Komplexität der eindimensionalen Rechnungen wird kurz anhand der Rechenzeit für eine typische Simulation skizziert. Auf einem Pentium III mit 450 MHz Taktfrequenz und 100 MHz Frontside-Bustakt benötigt eine Rechnung mit 10 000 Gitterpunkten und bei einem betrachteten Zeitintervall von $t = 100$ (d.h. 200 000 Zeitschritte) 2,5 MB Speicher und 4,5 Stunden Rechenzeit. Der Code skaliert dabei linear mit der Zahl der Gitterpunkte bzw. der Zeitschritte. Für Abb. 2.4b sind ca. 3 000 Rechnungen durchgeführt worden.

2.3.2 Physikalisches Setup

Um die Stabilität einer sphärischen Flammenstruktur mit Radius r_0 zu untersuchen, werden vier verschiedene Zündprofile $SF_{1d}.A^3$ bis $SF_{1d}.D$ der Temperatur und des Massenbruchs gewählt. Anwendung finden unterschiedliche Profile, um zum einen die Sensitivität der endgültigen Lösung gegenüber der Anfangsbedingung zu testen und um zum anderen zu klären, ob Verläufe von T und Y weit entfernt von der Flammenfront eine berechnete stabile Lösung beeinflussen. Diese Vorgehensweise garantiert, daß die finale Lösung die Folge physikalischer Prozesse und nicht ein Artefakt der gewählten Anfangsbedingung ist. Im folgenden werden diese verschiedenen Profile motiviert und diskutiert. Das Flammeninnere wird für $SF_{1d}.A$ bis $SF_{1d}.C$ modelliert durch

$$T(t = 0, r \leq r_0) = 1 \quad (2.40)$$

$$Y(t = 0, r \leq r_0) = 0 \quad (2.41)$$

³SF steht für stabile Flamme.

Das äußere Feld von SF_{1d}.A erhält man mit Hilfe asymptotischer Untersuchungen unter vereinfachenden Annahmen (s. (2.26),(2.27)) als stationäre Lösung, falls keine Strahlungsverluste im Fernfeld vorliegen [19].

$$\text{SF}_{1d}.\text{A:} \quad T(t = 0, r > r_0) = \frac{r_0}{r} \quad (2.42)$$

$$Y(t = 0, r > r_0) = 1 - \frac{r_0}{r} \quad . \quad (2.43)$$

In zweidimensionalen Untersuchungen [11, 13] ist ein Profil verwendet worden, welches sich aus der stationären Lösung sich konstant bewegender, adiabater ebener Flammenfronten ableitet. Diese Initialisierung korrespondiert auch mit der Lösung nullter Ordnung von SVF (*slowly varying flame*) [104].

$$\text{SF}_{1d}.\text{B:} \quad T(t = 0, r > r_0) = \exp\left(-\left(\frac{r}{r_0} - 1\right)\right) \quad (2.44)$$

$$Y(t = 0, r > r_0) = 1 - \exp\left(-Le\left(\frac{r}{r_0} - 1\right)\right) \quad . \quad (2.45)$$

In den zweidimensionalen Untersuchungen können nur quasi-stabile Lösungen ermittelt werden. Im Gegensatz zu diesen quasi-stabilen Lösungen weicht die in dieser Arbeit ermittelte Lösung für den Massenbruch erheblich von dieser Anfangsbedingung ab.

In SF_{1d}.C werden die beiden ersten Bedingungen kombiniert:

$$\text{SF}_{1d}.\text{C:} \quad T(t = 0, r > r_0) = \exp\left(-\left(\frac{r}{r_0} - 1\right)\right) \quad (2.46)$$

$$Y(t = 0, r > r_0) = 1 - \frac{r_0}{r} \quad . \quad (2.47)$$

SF_{1d}.C ist motiviert durch die Ähnlichkeit zur Fundamentallösung der zeitunabhängigen Gleichungen mit einem linearisierten Strahlungsterm für große Radien, s. (2.30), (2.31).

Zusätzlich wird ein „hot spot“ modelliert durch

$$\text{SF}_{1d}.\text{D:} \quad T(t = 0, r) = \frac{1}{2} \left(1 + \operatorname{erf}\left(100 \frac{r_0 - r}{r_0}\right)\right) \quad (2.48)$$

$$Y(t = 0, r) = \frac{1}{2} \left(1 - \operatorname{erf}\left(100 \frac{r_0 - r}{r_0}\right)\right) \quad . \quad (2.49)$$

Diese Anfangsbedingung approximiert eine Sprungfunktion, d.h. die räumliche Trennung der verbrannten Gase von den kalten Reaktanten. Eine Glättung umgeht sehr hohe Reaktionsraten zu Beginn der Simulation. Die Form dieser Glättung beschreibt dabei eine diffusive Vermischung kurz vor Eintreten der Reaktion.

Neben der Form der Profile sind die weiteren charakteristischen Parameter der untersuchten 6.5% H₂-Luft-Flamme der Strahlungskoeffizient s und der anfängliche Flammenradius r_0 . Diese Parameter werden in einem weiten Bereich von $s \in [0.025; 40]$ und $r_0 \in [0.0125; 20]$ variiert. Beide können auch in Experimenten variiert werden, s wie erwähnt durch Zugabe von CF₃Br [19], r_0 durch Veränderung der Zündbedingungen.

2.3.3 Quantifizierung des Randeinflusses

Sphärisch symmetrische, stationäre Flammen sind physikalisch gesehen isolierte Strukturen, die unabhängig und weit entfernt von Rändern existieren. Bei einem entsprechend ausgedehnten System erhält man für jede Art von äußeren Randbedingungen zumindest quasi-stabile Flammen. In einem begrenzten Gebiet dagegen gibt es keine absolut stabilen Flammenstrukturen, da nach endlicher Zeit der Brennstoff verbraucht ist. Diese natürliche Restriktion, der jedes Laborexperiment unterliegt, kann in Berechnungen überwunden werden, indem man feste äußere Randwerte für T und Y implementiert. Auf diese Weise gelingt es, ein unendlich großes Reservoir an Brennstoff zu simulieren. Das bedeutet, daß mit den hier angewendeten Dirichlet-Randbedingungen absolut stabile Flammen prinzipiell möglich sind. Nahe der äußeren Grenze können die Profile gegenüber denen von realen Flammen leichte Abweichungen aufweisen. Um das Ausmaß dieser Abweichungen zu quantifizieren und in späteren Rechnungen durch eine entsprechende Gebietsgröße zu minimieren, wird deshalb in verschiedenen Rechnungen die Gebietsgröße variiert (s. Tab. 2.1). Für $\Lambda = 50$ werden zwei Simulationen mit unterschiedlicher Zahl von Gitterpunkten durchgeführt, um zusätzlich Aussagen über die Güte der örtlichen Auflösung zu machen.

Als Anfangsbedingung wird $SF_{1d} \cdot A$ mit $r_0 = 0.5$ verwendet, der Strahlungskoeffizient beträgt $s = 1$. Diese Parameterkonstellation liefert eine stationäre Flamme. Die resultierenden stationären Profile von T und Y zeigt Abb. 2.3. Man erkennt einen schnellen Abfall der Temperatur, so daß die Profile der verschiedenen Rechnungen nahezu identisch sind. Die genaue Form des Profils wird in Abschnitt 2.3.5 behandelt, wengleich ein exponentielles Abklingen bei großen Radien bereits anhand der Achsenwahl (logarithmisch-linear) sichtbar ist. Das vergleichsweise langsame Abklingen von $1 - Y$ ist eine Folge von $Le < 1$ und eines fehlenden Analogon zum Strahlungsterm in (2.8). Die Abweichung vom Idealfall mit unendlich großem Rechengebiet nehmen mit kleiner werdendem Λ zu, der Fehler ist allerdings ein systematischer. In einer Simulation mit kleinem Λ wird am äußeren Rand mit $Y = 1$ der Massenbruch zu hoch angesetzt. Dieser Fehler setzt sich bis zum Zentrum fort, wenn die absolute Größe dieser Abweichung auch deutlich kleiner wird. Dies bedeutet eine Verschiebung der Reaktionsrate zu größeren Radien und hat eine geringfügig größere Flammenstruktur zur Folge. Die Unterschiede im Radius der stationären Lösung, hier definiert durch die Position der maximalen Reaktionsrate, beträgt jedoch nur 2% für die verschiedenen Rechnungen und ist somit von der Größenordnung der räumlichen Auflösung. Diese ist ausreichend, wie man an den Simulationen mit $\Lambda = 50$ erkennt; die beiden Simulationen liefern identische Ergebnisse. Aufgrund dieser Tests wird für alle folgenden Simulationen mit Kugelsymmetrie die Gebietslänge folgendermaßen festgelegt: $\Lambda = 100r_0$ bis $200r_0$. Dadurch ist zum einen gewährleistet, daß bei der gewählten Zahl von Gitterpunkten die Flammenfront hinreichend gut aufgelöst ist, während zum anderen das Fernfeld ausreichend repräsentiert wird. Der Fehler im stationären Radius schließlich kann bei einer

Tabelle 2.1: Einfluß der Gebietslänge Λ auf die stationäre Lösung einer sphärischen Flamme: maximale Reaktionsrate ω_{\max} sowie deren Position r_{stab} . N ist die Zahl der Gitterpunkte und δr die Gitterweite. Berechnungen für SF_{1d}.A, $r_0 = 0.5$, $s = 1$.

Λ	25	50	50	100	500
N	5 000	5 000	10 000	10 000	25 000
ω_{\max}	33.3	33.8	33.8	34.0	34.3
r_{stab}	0.535	0.53	0.530	0.52	0.52
δr	0.005	0.01	0.005	0.01	0.02

solchen Gebietsgröße vernachlässigt werden.

2.3.4 Stabilität sphärischer Flammen

Im nächsten Schritt wird die Dynamik der sphärischen Flammen für verschiedene Anfangsradien und für verschiedene Werte des Strahlungskoeffizienten diskutiert. Die zeitliche Evolution wird dabei mittels der über das Gebiet integrierten Reaktionsrate ω_{int} dargestellt.

$$\omega_{\text{int}} = \int_0^{\Lambda} 4\pi r^2 \omega \, dr \quad (2.50)$$

In Abb. 2.4a ist diese Größe für vier typische Fälle angegeben, in denen sich eine stabile Lösung entwickelt. Die stationäre Lösung ist in allen Fällen bei $t = 1000$ erreicht. Man erkennt, daß die integrale Reaktionsrate mit kleiner werdendem s steigt. Dies impliziert eine größere Reaktionsoberfläche und somit einen größeren Flammenradius, wie aus Theorie und Experiment bekannt ist (s. Abschnitt 2.2.4) und später im Detail diskutiert wird. Zu Beginn der Simulationen steigt die Reaktionsrate für die Fälle mit den Anfangsbedingungen SF_{1d}.A, SF_{1d}.C und SF_{1d}.D an. Bei SF_{1d}.D kann dieser Anstieg darauf zurückgeführt werden, daß durch die steilen Anfangsprofile die Reaktionszone sehr dünn ist. Daher ist ω_{int} zu Beginn klein, auch wenn die maximale Reaktionsrate in dieser dünnen Flammenfront außergewöhnlich hoch ist. Durch die steilen Profile und die exotherme Reaktion steigt die Temperatur in der Flammenfront stark an, gleichzeitig verbreitert sich durch diffusive Prozesse die Reaktionszone, so daß die integrale Reaktionsrate stark ansteigt. Bei SF_{1d}.A und SF_{1d}.C stimmt das Anfangsprofil des Massenbruchs schon gut mit dem zu erreichenden stationären Profil überein (s. Abschnitt 2.2.3), das Temperaturprofil klingt jedoch zu langsam ab. Insofern sind die Temperaturen zu Beginn außerhalb der Reaktionsfront zu hoch. Im Flammenzentrum sind die Anfangsprofile nicht an die Gleichungen mit Strahlung angepaßt. Dort ist die Reaktionsrate vernachlässigbar, die Strahlung senkt T , so daß hier die Temperatur kleiner ist als in der Flammenfront. Dieser Effekt verstärkt sich zu Beginn durch die exotherme Reaktion. Die Flammen expandieren anfänglich,

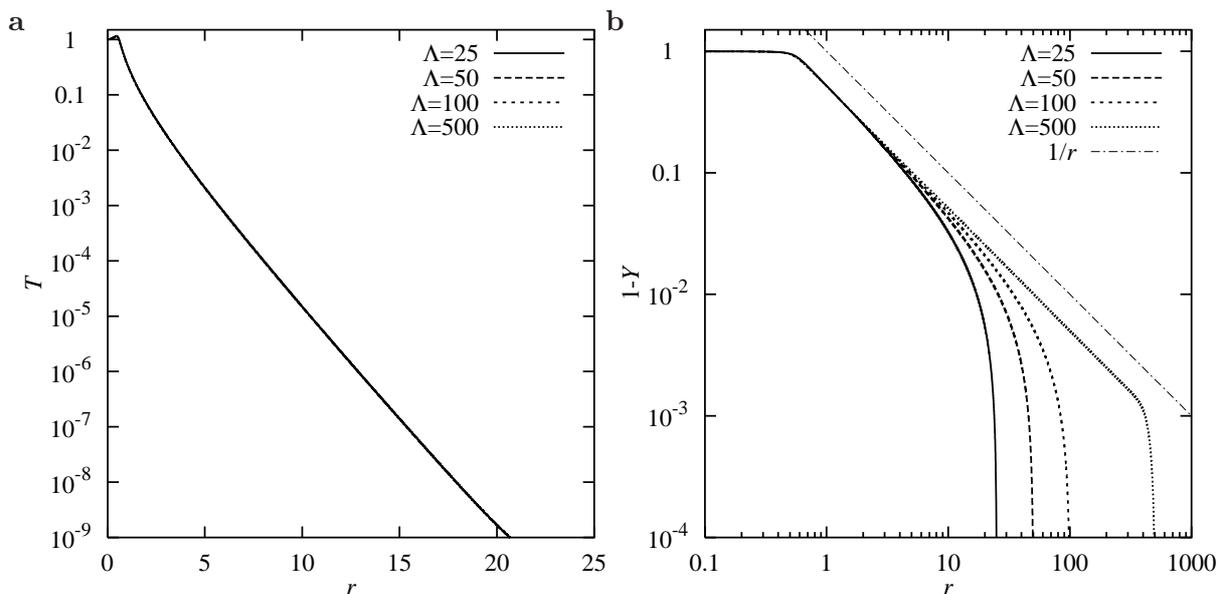


Abbildung 2.3: Stationäre Profile der Flamme mit $r_0 = 0.5$ und $s = 1$ für unterschiedliche Gebietsgrößen Λ . **a:** T ; **b:** $1 - Y$. In **a** ist nur ein Teil des Gebiets auf einer linearen Abszisse gezeigt.

so daß auch hier eine Zunahme von ω_{int} zu verzeichnen ist. Später werden die Flammen wieder kleiner bis schließlich eine stationäre Lösung erreicht wird und die integrale Reaktionsrate einen Grenzwert erreicht. Für Konfiguration SF_{1d}.B nimmt der Massenbruch von innen nach außen nur sehr langsam zu. Der Bereich außerhalb der Reaktionszone ist zu Beginn nur unzureichend mit Stoff ausgestattet, so daß die integrale Reaktionsrate sinkt. Dies sorgt anfänglich zu einer Verringerung des Radius. Nach einem Zeitintervall von ca. $t \approx 1$ ist das Massenbruchprofil entsprechend angepaßt, d.h. die Flamme wird ausreichend mit Wasserstoff versorgt. Dann verhält sich die Flamme so, wie es in den anderen Konfigurationen von Anfang an zu beobachten ist (s. Abb. 2.4a).

In allen Fällen durchläuft ω_{int} also ein Maximum, bevor die stationäre Lösung erreicht wird. Die Dauer dieser transienten Phase korreliert mit dem Strahlungskoeffizienten s . Eine höhere Strahlung bedeutet einen verbesserten Enthalpietransport nach außen. Besonders zu Beginn der Rechnung führt dies zu einer beschleunigten Dynamik, da der Wärmeaustausch aufgrund von $Le < 1$ den geschwindigkeitsbestimmenden Transportprozeß darstellt. Folglich wird das Maximum von ω_{int} in Abb. 2.4a umso früher erreicht, je größer s . Dieser Effekt ist in zusätzlichen Rechnungen gezeigt worden, in denen als einziger Parameter s variiert, d.h. dieselbe Anfangsbedingung verwendet worden ist. Hierauf wird in dieser Arbeit nicht weiter eingegangen, da die Tendenzen bereits in Abb. 2.4a zu erkennen sind. Vergleichbar ist dies mit Ergebnissen aus [127], in denen der Brennstoff-Massenbruch anstatt des Strahlungskoeffizienten verändert wird. Dort wird eine Zeitskala proportional zu r_*^2 abgeleitet, zu der eine Stabilisierung der

Flamme stattfindet. Und r_* nimmt wie erwähnt mit steigendem s ab.

Die ganze Schar von verwendeten Parameterkonstellationen ist in Abb. 2.4b in Form eines Bifurkationsdiagramms dargestellt. Die Eintragungen in Form der feinen Punkte verweisen auf die (r_0, s) -Konstellationen, für die Simulationen für jeweils alle vier Konfigurationen SF_{1d}.A bis SF_{1d}.D durchgeführt worden sind. Die Symbole repräsentieren dabei die Anfangsbedingungen, die stationäre Lösungen liefern. Schließlich vereint die Kurve die gefundenen stationären Lösungen, d.h. sie stellt den stationären Radius als Funktion des Strahlungskoeffizienten dar. Zu beachten ist hierbei, daß der Flammenradius während einer Simulation selbst für $t \approx 0$ von dem anfänglichen Radius abweichen kann, weil die Radien r_0 und r_{stab} auf unterschiedlichen Definitionen basieren. Ersterer ist gegeben durch die Position der maximalen Reaktionsrate, während letzterer durch die Funktionen der Anfangsbedingungen beschrieben wird.

Obige Ergebnisse zeigen, daß die Flammen sehr sensitiv auf die gewählte Anfangsbedingung reagieren, wovon in Experimenten [101] von selbst verlöschenden Flammen berichtet wird. Die verschiedenen Zündkonstellationen liefern stabile Lösungen für verschiedene Parameter r_0 und s . Wird jedoch eine stabile Lösung gefunden, ist sie nur abhängig vom Strahlungskoeffizienten (s. Abb. 2.4b) und nicht von den gewählten Anfangsbedingungen. Die Ergebnisse können folgendermaßen zusammengefaßt werden:

- Strahlungskoeffizienten im Intervall $s \in [0.25; 1.5]$ ermöglichen stabile Flammen für SF_{1d}.C. Die asymptotischen Profile entsprechen denen aus der Anfangsbedingung sehr gut, so daß Flammen in einem sehr weiten Parameterbereich gefunden werden.
- Konfiguration SF_{1d}.A zeichnet sich durch ein zu langsam abklingendes Temperaturprofil aus. Insofern sind die Temperaturen außerhalb der Flammenfront zu hoch. Zum Erreichen von stationären Lösungen ist im Vergleich zu SF_{1d}.C ein höherer Strahlungseinfluß nötig, um die nötigen Korrekturen in der Temperatur vorzunehmen.
- Erhöht man den Einfluß der Strahlung noch weiter, ermöglichen nur sehr steile Profile eine hohe Reaktionsgeschwindigkeit. Diese ist notwendig, da bei kleinen Strukturen die Flammentemperatur größer ist als die adiabate Temperatur. Dieser Effekt wird durch (2.26) für alle Strukturen vorhergesagt, in dieser Arbeit aber vor allem für sehr kleine Strukturen gefunden (s.u., Tab. 2.2). Daher liefert nur die Konfiguration des *hot spot* (SF_{1d}.D) stabile Lösungen.
- Bei kleinem Strahlungskoeffizienten ergeben sich stationäre Flammen für SF_{1d}.B, für die das Y -Profil im Vergleich zur stationären Lösung nach außen langsam ansteigt. Diese Anfangsbedingung sorgt für ein Absinken der Reaktionsrate und damit der Temperatur. Nur so wird verhindert, daß die Flamme schnell nach außen propagiert.

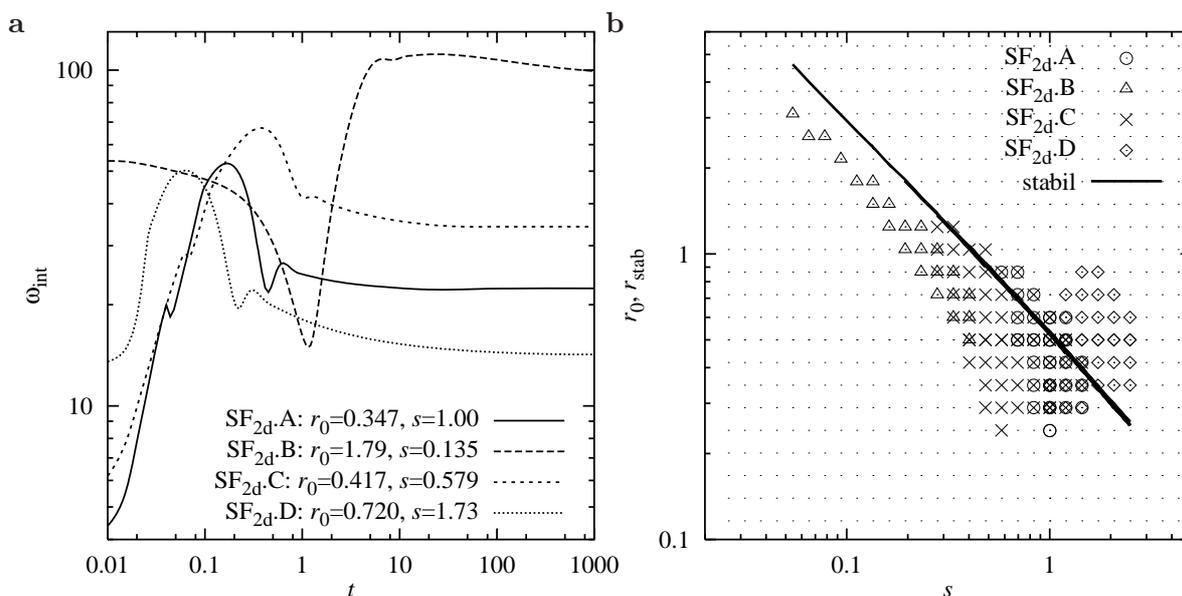


Abbildung 2.4: **a:** Evolution der integralen Reaktionsrate ausgewählter Flammenstrukturen mit einer stationären Lösung in einer doppelt-logarithmischen Auftragung. **b:** Kugelsymmetrische Flammen im Parameterraum. Symbole verweisen auf Anfangsbedingungen (2.40)–(2.49), die eine stabile Flamme ergeben, feine Punkte markieren verlöschende Flammen. Stabile Lösungen liegen auf der Kurve.

Wie bereits erwähnt entsprechen die stabilen Lösungen den (s, r_{stab}) -Konstellationen auf der Kurve in Abb. 2.4b. Zwischen $0.5 < s < 2$ sind die Flammen relativ robust bezogen auf den Anfangsradius, d.h. auch für kleine Radien kann man stationäre Flammen errechnen. Außerhalb des genannten Intervalls für s werden die Flammen zunehmend sensitiv für Störungen, da der Enthalpietransport sehr klein bzw. die Strahlungsverluste sehr hoch sind. Die Anfangsradien und die Profile müssen dann näher an der stationären Lösung liegen. Numerische Simulationen mit komplexer Reaktionskinetik [127] bestätigen diese Ergebnisse bei Variation des Brennstoffgehalts. Für magere und besonders für die fettesten der studierten Mischungen muß der Anfangsradius sehr genau der stationären Flammengröße entsprechen, sonst verlöschen die Flammen.

Abb. 2.5 zeigt die Evolution von Flammen für verschiedene Parameterkonstellationen, die verlöschende (a) oder oszillierende (b) Flammenstrukturen liefern. Wie aus Abb. 2.4b ersichtlich, findet man stabile Lösungen für eine Flammenstruktur mit SF_{1d}.B und $s = 0.233$, falls der Anfangsradius im Intervall $0.86 \leq r_0 \leq 1.24$ liegt. Die hier diskutierten Flammen liegen gerade an der Stabilitätsgrenze im Bifurkationsdiagramm. Ist r_0 zu groß (z.B. $r_0 = 1.49$), wird die Flamme von Beginn an kleiner und verlöscht schließlich (vgl. auch [127]). Bei zu kleinen Radien ($r_0 = 0.72$) verhält sich die Flamme anfänglich wie eine stabile Flamme, verlöscht jedoch

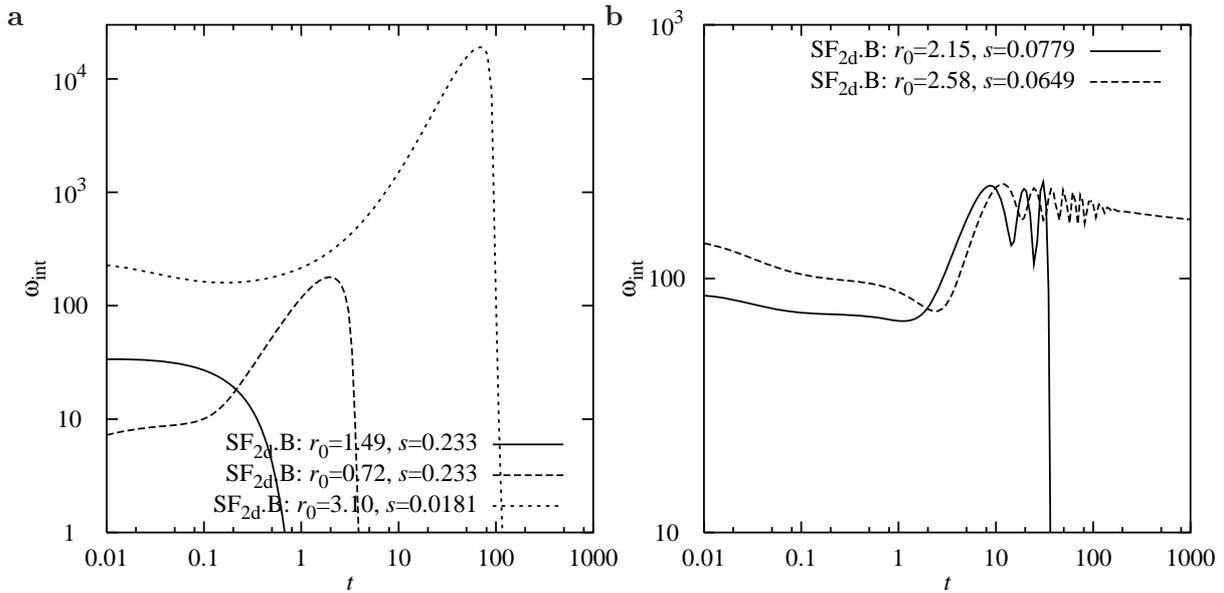


Abbildung 2.5: Evolution der integralen Reaktionsrate ausgewählter Flammenstrukturen in einer doppelt-logarithmischen Auftragung. **a:** Instabile und **b:** oszillierende Flammen.

später. Ist der Strahlungskoeffizient sehr klein und gleichzeitig der Anfangsradius sehr groß ($s = 0,0181, r_0 = 3,1$), erhält man Flammen, die sich stetig ausbreiten und schließlich verlöschen. In der Nähe der Stabilitätsgrenze findet man oszillierende Flammen, die in der Literatur vor allem für große Lewis-Zahlen erwähnt werden [110]. Diese Fluktuationen können zur Verlöschung ($r_0 = 2,15, s = 0,00779$) und zu stabilen Flammen ($r_0 = 2,58, s = 0,00649$) führen.

Aufgrund der hohen Sensitivität der Flammen bei besonders kleinen und großen Strahlungskoeffizienten ist es mit den Konfigurationen SF_{1d}.A bis SF_{1d}.D nicht möglich, den kompletten Bereich stabiler sphärischer Flammen zu ermitteln. Daher sind weitere Simulationen durchgeführt worden. In diesen sind die stationären Profile von T und Y bei einem bestimmten s als Anfangsbedingungen für eine neue Simulation verwendet worden, in der der Strahlungskoeffizient geringfügig variiert wird. Auf diese Weise ist es möglich, sich durch schrittweise Veränderung des Strahlungskoeffizienten an der Stabilitätskurve „entlang zu hangeln“ und so den gesamten stabilen Ast der Stabilitätskurve zu ermitteln. Die erzielten Ergebnisse dieser Simulationen zeigen die Symbole in Abb. 2.6, die sich zur Kurve stabiler kugelsymmetrischer Flammen aufreihen. Für kleine Radien wird das Ende des stabilen Astes aufgrund von ein-dimensionalen Instabilitäten erreicht. Dies entspricht den oben wiederholten Ergebnissen aus der Theorie (s. Abb. 2.2) und wird zusätzlich bestätigt durch experimentelle Untersuchungen [100]. Dreidimensionale Instabilitäten können unter der Annahme von Kugelsymmetrie nicht beobachtet werden, so daß es prinzipiell möglich ist, stationäre Lösungen für sehr große Radien zu berechnen. Dann ist der Strahlungseinfluß aber sehr gering, der Enthalpietransport wird

zunehmend durch Wärmeleitung limitiert. Zusätzlich wird das Rechengebiet aufgrund der zunehmenden Größe der Flammen immer ausladender, und folglich werden die Simulationszeiten, bis eine stationäre Lösung erreicht wird, immens. Aus diesem Grund werden keine Lösungen jenseits der in Abb. 2.6 gezeigten berechnet.

Der Stefan–Boltzmann Strahlungsterm, der in dieser Arbeit verwendet wird, verursacht Strahlungsverluste im Nah- und Fernfeldbereich. Dies entspricht $\chi_{\text{fern}}, \chi_{\text{nah}} \neq 0$ in (2.34). Um die präsentierten Ergebnisse mit den asymptotischen Analysen zu vergleichen, wird eine kombinierte Stabilitätskurve der Form

$$s \sim \left(\frac{r_{\text{stab}}}{r_z} \right)^{-\gamma} \ln \frac{r_{\text{stab}}}{r_z} \quad (2.51)$$

angenommen, wobei s proportional zum gemeinsamen Strahlungskoeffizienten χ ist. Reine Verluste aus dem Nahfeld werden erzielt für $\gamma = 2$ und reine Fernfeldverluste ergeben $\gamma = 1$. Für kombinierte Strahlungsverluste kann dann $1 \leq \gamma \leq 2$ angenommen werden. Tatsächlich ergibt eine Kurvenanpassung mittels einer nicht-linearen Regression mit dem Marquardt–Levenberg-Algorithmus eine sehr gute Approximation von (2.51) mit $\gamma = 1.54$. Daraus läßt sich der Zeldovich-Radius numerisch ableiten. Man erhält $r_{z,\text{num}} = 0.01$. Dieser Wert stimmt gut mit dem in Abschnitt 2.2.2 theoretisch hergeleiteten Wert von $r_{z,\text{th}} = 0.031$ überein. Kleinere Abweichungen können aufgrund der speziellen Definition der Flammengröße über die Position der maximalen Reaktionsrate nicht ausgeschlossen werden. Erstaunlich ist jedoch, daß der Zeldovich-Radius wesentlich kleiner ist als die Flammendicke einer adiabaten planaren Flammenfront. Dies entspricht auch numerischen Simulationen mit komplexer Reaktionskinetik. Dort ergibt sich bei 3.44% H_2 -Luft-Flammen ein Radius von $\tilde{r}_* = 0.197$ cm bzw. bei einem 5.82%-Gemisch $\tilde{r}_* = 0.054$ cm [126]. Nutzt man Ähnlichkeiten der Gleichungen (2.51) und (2.34) aus, läßt sich die Strahlung skalieren, so daß die Stabilitätsgrenzen in Abb. 2.6 eingezeichnet werden können. Man erhält $s_{\text{skal}} = 116$. Die theoretische Stabilitätskurve für Nah- und Fernfeldverluste ist in Abb. 2.6 eingezeichnet. Skaliert sind die Kurven mit $r_{z,\text{num}}$ und s_{skal} . Man erkennt eine sehr gute Übereinstimmung der numerischen Simulationen mit den theoretischen Ableitungen. Ebenso liegt die numerisch ermittelte eindimensionale Stabilitätsgrenze genau zwischen den beiden Strahlungsgrenzfällen, die durch die Dreiecke gekennzeichnet sind.

2.3.5 Charakteristische Merkmale stabiler Flammen

In Tab. 2.2 sind einige charakteristische Eigenschaften von ausgewählten stabilen Flammen zusammengestellt. Mit sinkender Strahlungsstärke werden die stabilen Flammen größer, wie auch aus der Stabilitätskurve zu ersehen ist. Trotz abnehmendem s fallen die maximalen und zentralen Temperaturen. Dies ist ein Effekt der verringerten Krümmung der Oberfläche der Flamme, wodurch die maximale Reaktionsrate kleiner wird, was wiederum aus der thermodynamischen Instabilität bei kleiner Lewis-Zahl folgt [110]. Die integrale Reaktionsrate steigt im

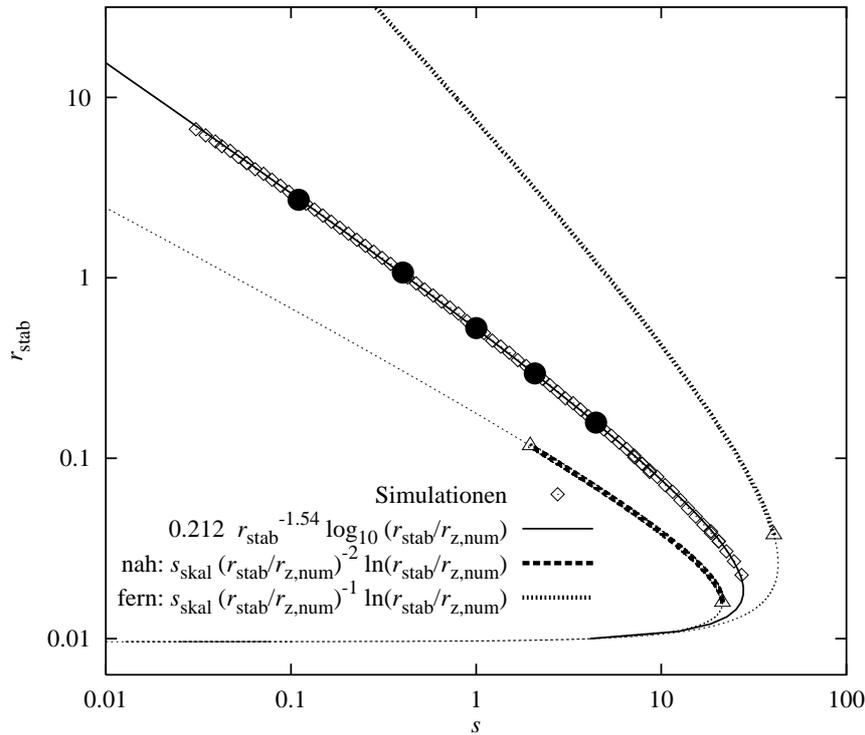


Abbildung 2.6: Stationäre Lösungen zusammen mit einer Approximation der Stabilitätskurve. Die schwarz ausgefüllten Kreise markieren die Lösungen, die später als Anfangsbedingungen für dreidimensionale Untersuchungen gewählt werden. Die Stabilitätskurven für die beiden Strahlungsgrenzfälle sind ebenfalls eingezeichnet (vgl. Abb. 2.2), wobei die stabilen Äste fett eingezeichnet sind. Die ein- und dreidimensionalen Stabilitätsgrenzen für diese Kurven sind durch die Dreiecke wiedergegeben.

Gegensatz zur maximalen an, da das Reaktionsvolumen (Kugelschale) mit dem Quadrat des Radius ansteigt und den Effekt der Krümmung übertrifft. Wie bereits erwähnt erkennt man, daß die Flammentemperatur wesentlich höher als die adiabate Flammentemperatur einer ebenen Flamme sein kann. Die höchsten Temperaturen beobachtet man für sehr kleine Flammen mit hoher Oberflächenkrümmung, obwohl im Gegensatz dazu die Strahlungskoeffizienten dort ebenfalls am höchsten sind. Durch die kleinen Volumina ist der integrierte Strahlungsverlust bei den kleinen Flammenstrukturen dennoch sehr gering.

Abb. 2.7 zeigt die Profile zweier ausgewählter Flammen mit $r_{\text{stab}} = 0.526$ bzw. $r_{\text{stab}} = 2.70$. Wu et al. [127] haben detaillierte und reduzierte Reaktionskinetik verglichen und gezeigt, daß reduzierte Chemie geeignet ist, die relevanten Informationen zu stationären sphärischen Flammen herauszuarbeiten. Dabei ist offensichtlich, daß die Verwendung einer endlichen Aktivierungsenergie notwendig ist, um eine endliche Flammendicke zu repräsentieren. Dies ist

Tabelle 2.2: Charakteristika typischer stationärer Flammenstrukturen: Strahlungskoeffizient, stabiler Flammenradius, maximale und zentrale Flammentemperatur, maximale und integrale Reaktionsrate, Flammendicke basierend auf T und ω (s. (2.52),(2.53)), und Verhältnis von Nah- und Fernfeldstrahlung, wie in (2.54), (2.55) definiert. Die letzte Zeile zeigt zum Vergleich Werte einer adiabaten planaren Flammenfront.

s	r_{stab}	T_{max}	$T(r=0)$	ω_{max}	ω_{int}	δT	$\delta \omega$	$\sigma_{\text{nah}}/\sigma_{\text{fern}}$
2.99	0.222	1.45	1.34	153	6.53	0.132	0.0686	0.29
1.00	0.527	1.15	1.01	33.9	22.0	0.286	0.158	0.29
0.335	1.19	0.996	0.816	7.65	49.2	0.571	0.302	0.33
0.11	2.70	0.862	0.651	1.74	113	1.11	0.582	0.39
0.0320	6.43	0.743	0.507	0.353	269	2.36	1.22	0.44
planar	–	1	1	1.93	1.02	0.784	0.464	–

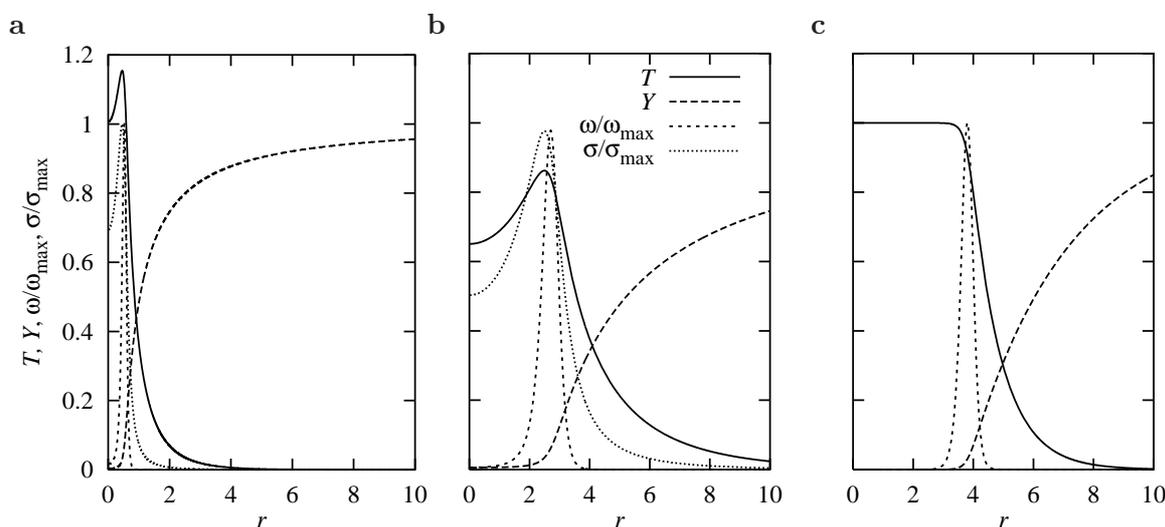


Abbildung 2.7: Profile dreier Fälle aus Tab. 2.2: Temperatur, Massenbruch $1-Y$, normierte Reaktionsrate und normierter Strahlungsverlust als Funktion von r ; **a:** $r_{\text{stab}} = 0.527$; **b:** $r_{\text{stab}} = 2.70$; **c:** planare Flammenfront. Die Achsen sind in allen Plots gleich gewählt.

insbesondere dann von Bedeutung, wenn man nicht nur an der Asymptotik der Flammen fern der Reaktionsfront, sondern eben auch in der Struktur dieser interessiert ist. Vor allem bei der Diskussion der Ausbreitung einer dreidimensionalen Instabilität in Abschnitt 2.4 ist dies von großer Wichtigkeit. Das hier verwendete Reaktionsmodell mit einer Arrhenius-Kinetik und einem Stefan–Boltzmann-Strahlungsterm beinhaltet sowohl eine endliche Aktivierungsenergie als auch einen temperaturabhängigen Strahlungsterm. Aufgrund dessen ändert sich zum einen die Asymptotik des Temperaturprofils im Vergleich zu den analytischen Studien (s. Abschnitt 2.2.2), man erhält für die Temperatur eine Fundamentallösung, die gemäß $\exp(-r)/r$ abklingt (s. (2.31)), d.h. schneller als $1/r$ (s. (2.26), (2.32)). Die endliche Aktivierungsenergie sorgt zum anderen für eine nicht vernachlässigbare Flammendicke. Sie ist in Tab. 2.2 auf zwei verschiedene Arten ermittelt, einerseits bezogen auf die Reaktionsrate und andererseits bezogen auf die Temperatur:

$$\delta_\omega = 2 \left| r_{\text{stab}} - r_{\omega=0.5\omega(r_{\text{stab}})} \right| \quad (2.52)$$

$$\delta_T = \left| r_{\text{stab}} - r_{T=0.5T(r_{\text{stab}})} \right| \quad (2.53)$$

Erstere ist in den zitierten analytischen Untersuchungen null, wobei sie hier ca. die Hälfte der temperaturbezogenen Flammendicke ausmacht. Tab. 2.2 zeigt auch, daß in den gezeigten Flammen δ_ω immer um Faktor fünf kleiner ist als der Flammenradius. Dies deutet darauf hin, daß die endliche Flammenausdehnung nicht vernachlässigt werden darf. Vor allem für kleine Flammen ist die Reaktionsrate für $r \rightarrow 0$ nicht null, wie aus Abb. 2.7a ersichtlich. Das bedeutet, daß die beiden Reaktionsfronten nicht unabhängig voneinander zu betrachten sind, sondern miteinander koppeln. Infolgedessen ist es wichtig, die Flammenstruktur als Ganzes zu sehen.

Um die Übereinstimmung der numerischen Ergebnisse mit den asymptotischen Profilen (2.30), (2.31) und (2.32) zu testen, werden für den Massenbruch (für große Radien) und die Temperatur (für große und kleine Radien) Anpassungen mittels nicht-linearer Regression durchgeführt. Die Details der Approximationen können Tab. 2.3 entnommen werden. Die Parameter a_m ($m = 1, \dots, 6$) sind dabei die Unbekannten. Wie weiter oben diskutiert, ist der Massenbruch mehr durch die äußeren Randbedingungen beeinflusst als das Temperaturprofil. Dies wird berücksichtigt, indem für die Kurvenanpassung des Massenbruchs ein kleineres Ortsintervall verwendet wird. Die Güte der Regression illustriert Abb. 2.8a-c für zwei ausgewählte Flammen. Sie entsprechen den asymptotischen Analysen sehr gut. Insbesondere die Massenbruchprofile treffen die Lösung (2.30). Dies wird bekräftigt durch die Tatsache, daß die Parameter a_1 und a_2 für alle untersuchten Flammen etwa eins sind. Das lineare Verhalten in den doppelt-logarithmischen Darstellungen wird zusätzlich durch Abb. 2.3b verdeutlicht. Die Temperaturprofile repräsentieren die Asymptotik (2.31) ebenfalls gut, jedoch ist a_5 nicht genau 1. Dies ist auf die endliche Aktivierungsenergie zurückzuführen. Gerade im Bereich der Reaktionsfront ändert sich der Temperaturverlauf im Vergleich zur Fundamentallösung und

Tabelle 2.3: Funktionen, betrachtete Radienintervalle, angepaßte Koordinaten und Fitparameter für Approximationen der Temperatur- und Massenbruchprofile von stabilen Flammenstrukturen mittels einer Methode der kleinsten Quadrate.

	Funktion	Intervall	Koordinaten
Y	$1 - Y = a_1 \left(\frac{r_{\text{stab}}}{r}\right)^{a_2}$	$[r_{\text{stab}}; r_{Y=0.9}]$	$\log(1 - Y)$ vs. $\log(r)$
T	$T = a_3 \exp\left(-a_4 \frac{r}{r_{\text{stab}}}\right) \left(\frac{r_{\text{stab}}}{r}\right)^{a_5}$	$[r_{\text{stab}}; r_{T=10^{-8}}]$	$\log(T)$ vs. r
T	$T = T(r=0) + a_6 \left(\frac{r}{r_{\text{stab}}}\right)^2$	$[0; 2r_{\text{stab}} - r_{T_{\text{max}}}]$	T vs. r

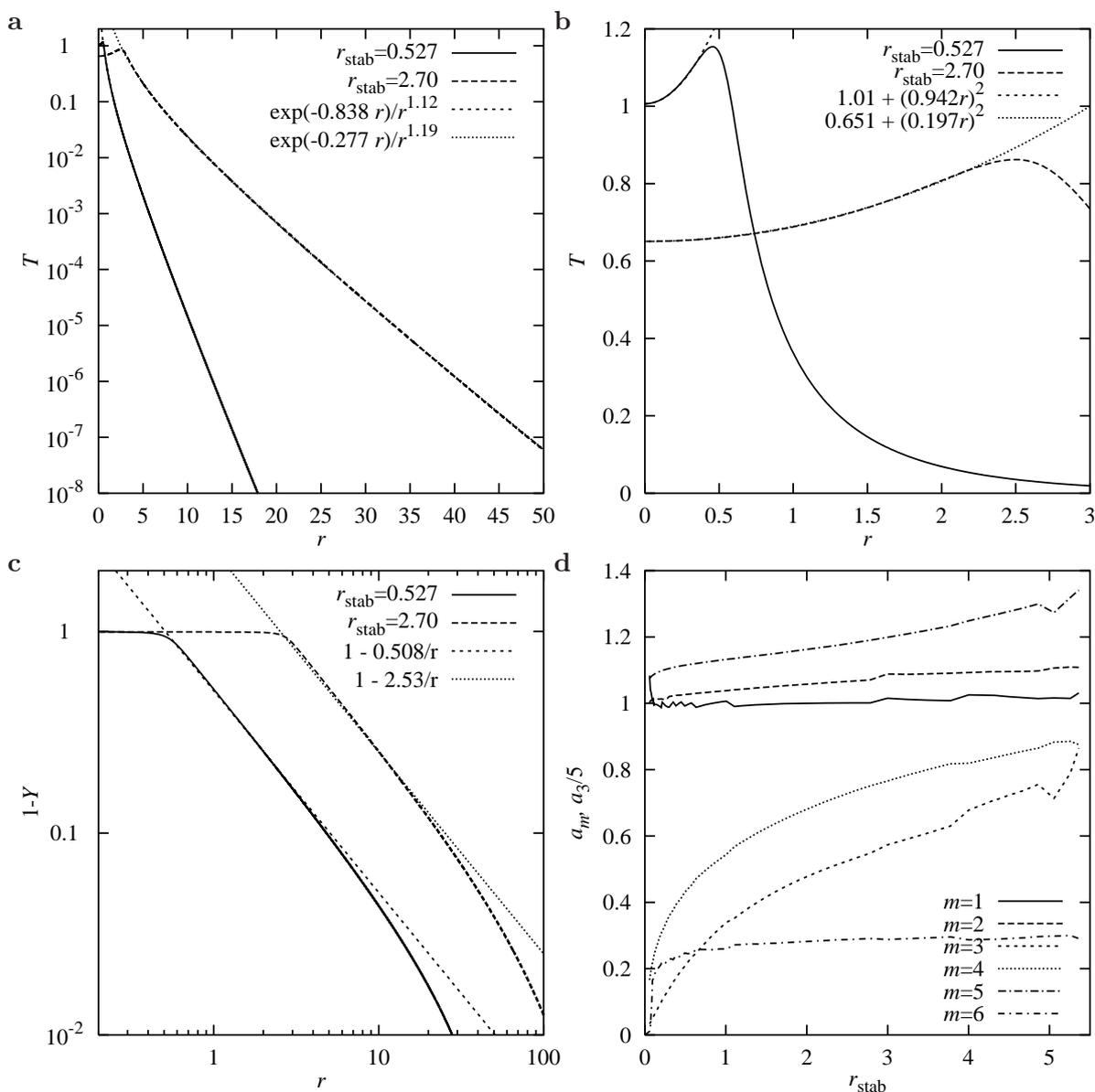


Abbildung 2.8: Kurvenapproximationen gemäß Tab. 2.3. **a:** Temperaturprofile für große Radien und **b:** für kleine. **c:** Massenbruch $1 - Y$ für große Radien. **d:** Abhängigkeit der Fitparameter (a_m , $m=1, \dots, 6$) vom stationären Radius.

damit Parameter a_5 . Außerdem beschreibt der linearisierte Strahlungsterm vor allem in diesem Bereich das System nur unvollständig. Interessanterweise steigen a_3 bzw. a_4 annähernd proportional mit $\sqrt{r_{\text{stab}}}$ bzw. $\sqrt[3]{r_{\text{stab}}}$. Das parabolische Temperaturprofil für kleine Radien kann ebenfalls mit endlicher Aktivierungsenergie beobachtet werden. Das bedeutet, daß dieses Profil mehr durch den Strahlungsterm als durch die chemische Reaktionsrate zustande kommt. Der Parameter a_6 ist jedoch nicht abhängig vom Strahlungseinfluß, wie in [22] beschrieben. Demgegenüber nimmt die Temperatur im Zentrum der Flamme mit zunehmender Strahlung zu und nicht ab. Das wird bekräftigt durch die Tatsache, daß der Einfluß von Krümmungseffekten sich wie oben diskutiert vermindert.

Mit dem Strahlungsmodell (2.8) sind wie erwähnt das Nah- und das Fernfeld von der Strahlung betroffen. Um deren relative Größe abzuschätzen, wird die Position der maximalen Reaktionsrate r_{stab} als Grenze zwischen Nah- und Fernfeld definiert. Diese Vorgehensweise entspricht der aus dem „*thin flame sheet model*“. Man erhält dann

$$\sigma_{\text{nah}} = \int_0^{r_{\text{stab}}} \sigma(r) 4\pi r^2 dr \quad (2.54)$$

$$\sigma_{\text{fern}} = \int_{r_{\text{stab}}}^{\Lambda} \sigma(r) 4\pi r^2 dr \quad . \quad (2.55)$$

Das Verhältnis dieser Werte liegt in den gezeigten Berechnungen zwischen 1:4 und 1:2, wie aus Tab. 2.2 hervorgeht. Dieser gleichmäßige Beitrag zur Gesamtstrahlung von Nah- und Fernfeld paßt zur ermittelten Stabilitätskurve in Abb. 2.6, die mit $\gamma = 1.54$ ziemlich genau zwischen den beiden Grenzfällen liegt.

2.4 Evolution dreidimensional gestörter Flammen

Zur Simulation in drei Dimensionen werden zwei Wege beschritten, die sich aufgrund des Ziels der jeweiligen Rechnungen in den Anforderungen an den Code unterscheiden. In diesem Abschnitt wird von einer bestimmten Anfangsbedingung ausgegangen, die eine Zündung abstrakt simulieren und das anschließende transiente Verhalten beschreiben soll. Insofern entspricht das Vorgehen hier den kugelsymmetrischen Untersuchungen. Im Vordergrund steht vor allem die Betrachtung der Auslösung und Evolution dreidimensionaler Instabilitäten aufgrund von ausgeprägten geometrischen Störungen der Kugelform der Flamme. Durch diese Störungen erwartet man eine sich langsam bewegende Flammenfront, zu deren Beschreibung sich die Methode im nächsten Abschnitt eignet. In diesem Teil fällt der Fokus also auf instabile Flammen.

Abschnitt 2.5 befaßt sich dann mit den kugelsymmetrisch stationären Lösungen, um diese quasi-eindimensional stabilen Flammen auf dreidimensionale Stabilität zu prüfen. Das hierfür

verwendete numerische Vorgehen aus dem übernächsten Abschnitt nutzt die Vorgaben aus den eindimensional stationären Lösungen, das Gitter und die Gleichungen für die Temperatur und den Massenbruch werden verfeinert.

2.4.1 Numerische Methode

Die Schwierigkeit in der numerischen Lösung der Gleichungen bedingt durch die Existenz vieler unterschiedlicher Orts-Skalen – Gebietsgröße im Verhältnis zur Dicke der Reaktionszone – und den Nicht-Linearitäten von Reaktions- und Strahlungsterm erfordert den Einsatz effizienter numerischer Verfahren. Im dreidimensionalen Fall kommen Fourier-Pseudo-Spektralmethoden zum Einsatz. Die parallelisierte Implementierung mittels explizitem Datenaustausch zwischen den einzelnen Prozessoren ermöglicht es, Rechnungen mit einer örtlichen Auflösung von bis zu 256^3 auf 64 Knoten einer IBM RS/6000 SP bzw. SMP (Rechenzentrum Karlsruhe) durchzuführen.

Zur Zeitdiskretisierung wird im dreidimensionalen Fall eine exakte Zeitintegration verwendet, die die genaue Lösung für die linearen Diffusions- und Wärmeleitungsterme beinhaltet. Die nicht-linearen Terme werden mit einer Adams–Bashforth-Extrapolation zweiter Ordnung (AB2) explizit berechnet. Für den Massenbruch $\widehat{Y}_{\vec{\kappa}}^{n+1} = \widehat{Y}(t^{n+1}, \kappa_1, \kappa_2, \kappa_3)$ im Fourier-Raum ergibt sich beispielsweise folgende Diskretisierung.

$$\widehat{Y}_{\vec{\kappa}}^{n+1} = \left[\widehat{Y}_{\vec{\kappa}}^n + \frac{3\delta t}{2} (-\widehat{\omega}_{\vec{\kappa}}^n) - \frac{\delta t}{2} (-\widehat{\omega}_{\vec{\kappa}}^{n-1}) \exp \left(-\frac{\sum_{l=1}^3 \kappa_l^2}{Le} \delta t \right) \right] \exp \left(-\frac{\sum_{l=1}^3 \kappa_l^2}{Le} \delta t \right) \quad (2.56)$$

Der Exponentialterm hat seinen Ursprung in der exakten Lösung für die Diffusion, die Faktoren $3/2$ und $1/2$ kommen von der AB2-Extrapolation [27]. Die Wellenzahl $\vec{\kappa} = (\kappa_1, \kappa_2, \kappa_3)$ bezeichnet das Analogon im Fourier-Raum zur Ortskoordinate $\vec{x} = (x_1, x_2, x_3)$ im physikalischen Raum. Die analoge Gleichung für die Temperatur beinhaltet $\omega - \sigma$ statt $-\omega$ als nicht-linearen Term und keinen Faktor $1/Le$ vor dem molekularen Austauschterm.

Die Nicht-Linearitäten im Reaktions- bzw. Strahlungsterm werden pseudo-spektral ausgewertet. Ein *de-aliasing* wird nicht durchgeführt, da der Fehler vernachlässigbar ist. Der größte numerische Aufwand in der Berechnung liegt in der dreidimensionalen FFT zwischen physikalischem und spektralem Raum. Um hohe Auflösungen ohne größere Rechenzeit erzielen zu können, ist der Code parallel implementiert worden. Die Kommunikation zwischen den einzelnen Prozessoren erfolgt explizit mit Hilfe des standardisierten „*message passing interface*“ (MPI), um eine Portabilität auf andere Rechnerplattformen garantieren zu können.

Die Parallelisierung basiert auf einer zyklischen Blockverteilung der x_1x_2 -Ebenen der Datenfelder über die einzelnen Prozessoren. Nach der FFT in x_2 -Richtung werden die Ebenen neu

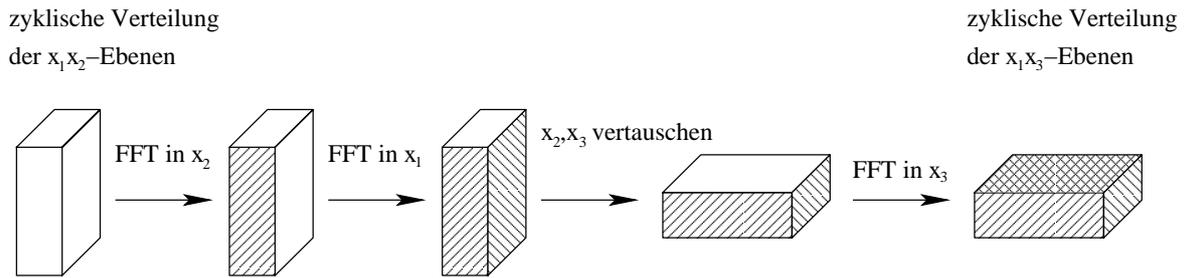


Abbildung 2.9: Parallelisierung der dreidimensionalen FFT, dargestellt ist ein Datenfeld auf einem Prozessor.

auf die Prozessoren verteilt, indem die x_2 - und x_3 -Koordinaten permutiert werden (Abb. 2.9). Dies ist notwendig, da die FFT in einer bestimmten Richtung die kompletten Vektoren in dieser Richtung auf einem Prozessor benötigt. Danach wird die FFT in x_1 - und schließlich in x_3 -Richtung ausgeführt. Ein Aufsplitten in Berechnung und Kommunikation ist versucht worden und in [12] beschrieben. Jedoch ist es auf der IBM RS/6000 SP bzw. SMP und auch auf PC-Clustern nicht möglich, ein „*latency hiding*“ und somit Zeiteinsparungen durch das gleichzeitige Kommunizieren und Rechnen zu erhalten, da für die Kommunikation auch Prozessorleistung benötigt wird. Auf anderen Architekturen sollte eine solche Vorgehensweise jedoch weitere Einsparungen in der Rechenzeit mit sich bringen. Die inverse Transformation vom spektralen in den physikalischen Raum erfolgt in der umgekehrten Reihenfolge. Die übrigen Teile des Algorithmus können ohne jegliche Kommunikation auf den einzelnen Prozessoren ausgeführt werden. Lediglich Ausgaberroutinen, die z.B. für eine Mittelwertbildung je 1 Datum auf einem Prozessor bündeln, benötigen minimalen Kommunikationsaufwand, der nicht weiter ins Gewicht fällt.

2.4.2 Anfangs- und Randbedingungen

Soweit nicht anderweitig explizit notiert, werden für die in diesem Abschnitt dargestellten Simulationen folgende Parameterwerte gewählt: Das Rechengebiet umfaßt einen Kubus mit Seitenlänge $\Lambda = 80$ und 256 Gitterpunkten in jeder Richtung, d.h. über 16 Mio. Punkte gehen in die Berechnung ein. Diese Diskretisierung ist hinreichend fein, um die schmale Reaktionszone aufzulösen. Die Zeitschrittweite beträgt anfangs $\delta t = 5 \cdot 10^{-4}$ und wird ab $t = 2$ verdoppelt. Der Anfangsradius ist $r_0 = 3$ und der Strahlungskoeffizient $s = 0.1$. Dies entspricht einer Parameterkonstellation in der Nähe der Stabilitätskurve. Die thermodynamischen Werte entsprechen einer 6.5 % Wasserstoff-Luft-Flamme.

Untersucht werden isolierte Flammenstrukturen. Störungen durch die Ränder werden durch ein relativ großes Gebiet weitgehend vermieden, so daß es gerechtfertigt ist, periodische Randbedingungen anzunehmen. In allen gezeigten Anfangsbedingungen sind die Ableitungen für Y

und T an den Rändern kleiner als die Rechengenauigkeit. Die betrachteten Zeitintervalle sind des weiteren so klein, daß die Ausbreitung von Phantomflammen, die durch die Periodizität außerhalb der Ränder hervorgerufen werden, keinen bzw. nur sehr geringen Einfluß auf die Evolution der Flammen hat.

Die Anfangsbedingungen der Temperatur und des Massenbruchs werden in zwei Schritten generiert. Zuerst werden als Gerüst sphärisch symmetrische Strukturen verwendet, deren asymptotisches Verhalten von einer planaren adiabaten Flammenfront abgeleitet wird [36]. Im zweiten Schritt werden diese sphärischen Strukturen mit einer geometrischen Störung versehen [56], wobei zwei Arten von Störungen verwendet werden. Die eine betrifft eine ellipsenförmige Streckung der Flamme entlang der drei Ellipsenachsen r_A, r_B, r_C . Die daraus resultierende Flamme läßt sich durch folgende Anfangsbedingung IF_{3d}.A⁴ beschreiben

$$\text{IF}_{3d}.A \quad T_0(\vec{x}, r' > 1) = \exp(-(1 - r')) \quad (2.57)$$

$$Y_0(\vec{x}, r' > 1) = 1 - \exp(-Le(1 - r')) \quad , \quad (2.58)$$

wobei der Radius $r' = \sqrt{(x_1/r_A)^2 + (x_2/r_B)^2 + (x_3/r_C)^2}$ mit den Ellipsenachsen skaliert ist. Innerhalb der Flammenstruktur sind $T_0(\vec{x}, r' \leq 1) = 1$ und $Y_0(\vec{x}, r' \leq 1) = 0$. Die andere ist eine dreidimensionale, willkürliche Störung, die zeigen soll, daß aus instabilen Flammen quasi-stabile Flammenstrukturen entstehen können. Hier werden als anfängliche Profile die asymptotisch ermittelten stationären Lösungen unter Annahme von Kugelsymmetrie verwendet [19]. Diese werden aufgrund des begrenzten Gebiets geeignet geglättet. Die Glättung betrifft v.a. die äußere Region des Rechengebiets und hat keinen Einfluß auf die anfängliche Evolution. Die aufgeprägte Störung ist hierbei eine lokale sinusförmige Streckung des Radius in der x_1x_2 -Ebene mit Frequenz 5 und einer Amplitude von 20% des Anfangsradius. Diese Veränderung des Radius r' ist zusätzlich in x_3 -Richtung einer Phasenverschiebung unterworfen.

$$\text{IF}_{3d}.B \quad T_0(\vec{x}, r' > r_0) = \exp\left(-\frac{(r_0 - r')^2}{100}\right) \frac{r_0}{r'} \quad (2.59)$$

$$Y_0(\vec{x}, r' > r_0) = 1 - T_0(r') \quad . \quad (2.60)$$

Innerhalb der Flammenstruktur sind wieder $T_0(\vec{x}, r \leq r_0) = 1$ und $Y_0(\vec{x}, r \leq r_0) = 0$. Zusätzlich werden analog zu den eindimensionalen Simulationen Rechnungen (s. Abb. 2.4b) mit IF_{3d}.B ohne Aufprägung der Störung durchgeführt, um das transiente Verhalten zu beobachten. Es wird eine Parameterstudie in begrenztem Ausmaß für s und r_0 durchgeführt.

2.4.3 Implementierung und Komplexität

Bei den Simulationen in dieser Arbeit handelt es sich um Probleme hoher Komplexität im Bereich des wissenschaftlichen Rechnens, die nur mit hinreichend großer Rechenkapazität bewältigt werden können. Solche Probleme stellen eine Herausforderung für numerische Simulationen

⁴IF steht für Instabile Flamme.

dar und können außer durch Laborexperimente kaum anders betrachtet werden. Hierzu werden Algorithmen mit fast linearer Komplexität benötigt. Wichtige Eigenschaften eines erfolgreichen wissenschaftlichen Rechnens sind hier hierarchisch strukturierte Algorithmen, parallele Implementierungen und adaptive Codes. Der vorgestellte Code beinhaltet die ersten beiden Eigenschaften. Eine adaptive Diskretisierung in der Zeit ist nicht notwendig, da die optimale Zeitschrittweite aufgrund der Fast-Stationarität sich so gut wie nicht ändert. Im Ort ist ein adaptives Gitter bei instationären Phänomenen wie der Evolution der Instabilität durch die Anforderungen erwünscht, jedoch mit der vorgestellten Fourier-Methode nicht zu bewerkstelligen. Im nächsten Abschnitt wird ein adaptiertes Gitter verwendet, was aufgrund der dort vorgenommenen Stabilitätsbetrachtung ausreicht.

Die dreidimensionalen thermo-diffusiven Rechnungen mit Auflösungen von 256^3 benötigen 12 Stunden Rechenzeit parallel auf 64 Prozessoren, wobei über 10 000 Zeitschritte in die Berechnungen eingehen. Dabei sind etwa 50 bis 100 MB Hauptspeicher pro Prozessor nötig. Im Zusammenhang mit parallelen Implementierungen ist vor allem die Skalierbarkeit des Programmcodes von Bedeutung. Diese macht eine Aussage, inwieweit es sich lohnt, die Berechnung auf mehrere Prozessoren auszuweiten. Da die Parallelisierung dieser Methode nur die FFT-Routinen betrifft, reicht es aus, die Skalierbarkeit dieser zu untersuchen. Die restlichen Routinen sind per se vollkommen skalierbar.

Die Skalierbarkeit der FFT wird mit einem „benchmarking“ untersucht, wobei sowohl das zeit- als auch das speicherkritische Modell [76] angewendet wird. Bei ersterem wird ein Problem fester Größe auf verschiedener Anzahl von Prozessoren berechnet und der *speed-up* $S(q) = t_{\text{par}}(q)/t_{\text{seq}}$ durch die Parallelisierung berechnet. Dabei sind $t_{\text{par}}(q)$ die notwendige Zeit bei paralleler Ausführung mit q Prozessoren und t_{seq} die beanspruchte Zeit bei sequentieller Durchführung auf einem Prozessor. Der maximal theoretische Wert ist dabei gegeben durch $S_1^{\text{max}} = q$. Beim zweiten Modell wird das Problem mit der Zahl der Prozessoren vergrößert, so daß ein maximaler *speed-up* von eins möglich ist. Hier kann dieser nicht ganz erreicht werden, da die Fourier-Transformation nicht ganz linear, sondern mit $N \log_2(N)$ skaliert, so daß sich $S_2^{\text{max}} = 1/\log_2(N)$ ergibt. In Abb. 2.10 sind sowohl die maximalen *speed-ups* für die beiden Modelle als auch die tatsächlich ermittelten Werte dargestellt. Die zugrunde liegenden Rechnungen nutzen 1 bis 64 Prozessoren, wobei jeweils 100 inverse FFTs⁵ berechnet worden sind. Für das erste Modell ist die gewählte Auflösung 128^3 , während sie beim zweiten Modell jeweils mit der Prozessorzahl von 64^3 auf schließlich 256^3 verdoppelt wird. Man erkennt, daß für den Datenaustausch zwischen den Prozessoren nahezu die Hälfte der Zeit benötigt wird, so daß fast kein *speed-up* von einem auf zwei Prozessoren zu verzeichnen ist. Für die IBM RS/6000 SMP verläuft die *speed-up*-Kurve für mehr als zwei Prozessoren fast parallel zu S_{max} , insbesondere beim zeitkritischen Modell. Berücksichtigt man dieses überproportionale Anwachsen des Pro-

⁵Die inversen FFTs sind gewählt worden, da die hier vorgestellten Codes durchschnittlich mehr inverse FFTs als FFTs berechnen.

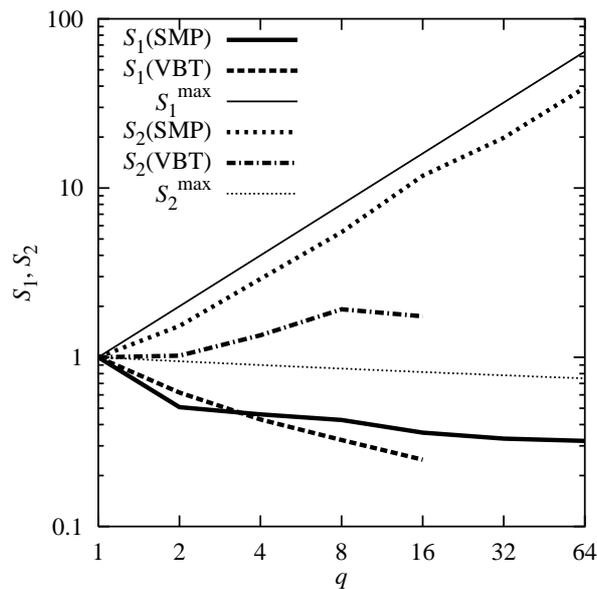


Abbildung 2.10: Gemessene und maximale *speed-ups* des Programmcodes für dreidimensionale thermo-diffusive Flammenfronten.

Tabelle 2.4: Anteil der FFT und IFFT an der gesamten Rechenzeit.

Rechner	äquidistantes Gitter	gestrecktes Gitter
IBM RS/6000 SMP	40.2 %	64.7 %
IBM RS/6000 SP	36.8 %	63.4 %
VBT PC-Cluster	73.1 %	70.7 %

blems im Vergleich zum benötigten Speicher, kann man schließen, daß die Implementierung der parallelen FFT sowohl bezüglich der Rechenzeit als auch der Problemgröße skalierbar ist. Der PC-Cluster vermag den hohen Kommunikationsaufwand zwischen den einzelnen Prozessoren lediglich bis zu einer Maximalzahl von acht Prozessoren zu verkraften. Bis dorthin ist die FFT ebenfalls sehr gut skalierbar. Darüber hinaus nimmt der *speed-up* jedoch sogar wieder ab, d.h. eine Ausführung auf acht Prozessoren ist dort am effizientesten.

Um die Skalierbarkeit des kompletten Codes abzuschätzen, wird zusätzlich ein „*profiling*“ durchgeführt. Man erhält dadurch die in Tab. 2.4 aufgelisteten prozentualen Rechenzeiten, die der Code in bestimmten Unterprogrammen wie z.B. der FFT verweilt. Für die Berechnungen in diesem Abschnitt ist die Spalte „äquidistantes Gitter“ relevant, die letzte Spalte betrifft die Implementierung, die in Abschnitt 2.5 erläutert wird. Man erkennt, daß auf den IBM-Großrechnern die FFT nur ca. 40% der gesamten Rechenzeit ausmacht. Insofern ist der tatsächlich erreichte *speed-up* des gesamten Programmcodes viel näher an den optimalen Werten, d.h. der Verlust beim Übergang von einem auf zwei Prozessoren ist nicht so dramatisch.

Tabelle 2.5: Vergleich verschiedener FFT-Routinen. Auflösung 128^3 , 8 Prozessoren. PDRCFT3 entstammt der PESSL-Bibliothek, die aus Routinen für wissenschaftliches Rechnen besteht. PFFT3d ist die vorgestellte Routine.

Prozessor und Code	Zeit [s]
IBM RS/6000 SMP, PDRCFT3	0.0833
IBM RS/6000 SMP, PFFT3d	0.127
IBM RS/6000 SP, PDRCFT3	0.252
IBM RS/6000 SP, PFFT3d	0.229
VBT PC-Cluster, PFFT3d	0.991

Tabelle 2.6: Veränderung der Achsenverhältnisse einer ellipsoiden Flammenstruktur bei $Le = 1$.

Achsen	$t = 0$	$t = 10$
$A : B$	0.25	0.79
$A : C$	0.5	0.90
$B : C$	2	1.14

Auf einem PC-Cluster hingegen ist die FFT nicht so effektiv, so daß hier die Skalierbarkeit schlechter ist als auf der IBM RS/6000 SP bzw. SMP.

2.4.4 Einfluß der Lewis-Zahl

Bei vielen Gasen sind Lewis-Zahlen von ca. 1 gegeben. Planare Flammenfronten weisen dann keine thermo-diffusive Instabilität auf. Dies kann direkt auf den Fall sphärischer Flammenfronten mit großem Anfangsradius und geringer Krümmung übertragen werden. Sphärische Flammenstrukturen mit anfänglichen Störungen wie lokale Streckungen relaxieren zu Kugeln und expandieren. Abb. 2.11 zeigt die Reaktionsgeschwindigkeit einer ellipsoiden Flamme $IF_{3d}.A$ mit den Achsen $r_A = 1$, $r_B = 4$ und $r_C = 2$, wobei die Zeiten $t = 0$ innen und $t = 10$ außen überlagert sind. Folgende Parameter sind implementiert: $\alpha = 0.8$, d.h. $T_{ad} = 1500$ K, $s = 0$ und $\Lambda = 25$. Man erkennt deutlich, daß das Ellipsoid während einer Wachstumsphase zu einer Kugel relaxiert, die Verhältnisse der Achsen vermindern sich in den 10 Zeiteinheiten gemäß Tab. 2.6. Außerdem gleicht sich die Flammendicke in allen Richtungen auf einen einheitlichen Wert an. Das Verständnis dieses Nivellierungseffekts ist notwendig für die weiteren Simulationen, denn der Ausgleichsprozeß existiert auch für $Le < 1$. Die aufgeprägte Störung muß dann groß genug sein, die Instabilität auszulösen, bevor die Relaxation vervollständigt ist.

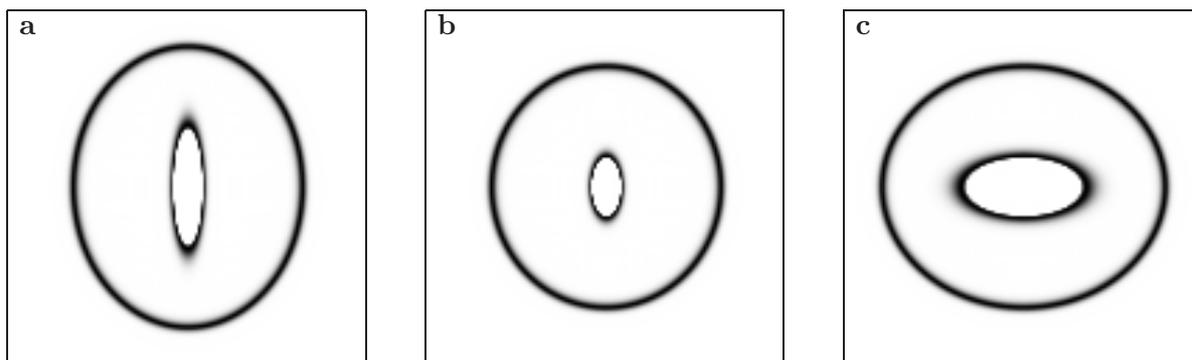


Abbildung 2.11: Schnitte durch das Zentrum einer ellipsoiden Flammenstruktur mit den Achsenverhältnissen von 1:4:2 für $Le = 1$ zu den Zeiten $t = 0$ (innen) und 10 (außen); **a:** x_1x_2 -Ebene, **b:** x_1x_3 -Ebene, **c:** x_2x_3 -Ebene.

2.4.5 Zeitliche Entwicklung der thermo-diffusiven Instabilität

Hier wird v.a. eine zweidimensionale Störung betrachtet, indem ein Radienverhältnis von $r_A : r_B : r_C = 1 : 1 : 2$ eingestellt wird. Dieser Typ eines Prolators wird gewählt, da er der bevorzugten Verformung entspricht, die bei Auslösung der dreidimensionalen Instabilität laut Theorie auftritt. Bei Lewis-Zahlen von $Le < 1$ sind planare adiabate Flammen thermo-diffusiv instabil, so daß sich anfängliche Störungen aufschaukeln [36]. Strahlungseinflüsse dagegen tragen zur Stabilisierung bei, so daß die Instabilität unterdrückt werden kann. Die zeitliche Entwicklung gestörter Flammenstrukturen wird anhand zweier Beispiele untersucht.

In Abb. 2.12 ist die Entwicklung eines Ellipsoids $IF_{3d,A}$ mit Achsen von $r_A = r_B = 1.5$ und $r_C = 3$ anhand der Temperatur-Isoflächen von $T = 0.5$ für $Le = 0.3$ dargestellt [11]. Die Anfangsbedingung ist dabei leicht variiert worden, indem das Ellipsoid in Abb. 2.12a um die Winkel $\phi = \pi/3$ und $\theta = \pi/4$ gedreht worden ist. Des weiteren ist die Flammendicke bezogen auf r_A . Zur Veranschaulichung der Orientierung des Ellipsoids sind die Hyperebenen senkrecht zu den Ellipsoid-Achsen transparent superpositioniert. Wie in zweidimensionalen Simulationen [13] teilt sich die Struktur entlang der größten Störung auf, so daß sich zwei Zellen entlang der längeren Achse C ausbilden. Daraus entstehen zwei nahezu sphärische Flammen, die schrittweise in mehr und mehr Strukturen auffalten [105]. Da die beiden entstehenden Zellen eine fast sphärische Geometrie aufweisen, wird das nachfolgende, komplexere Muster durch die Ortsdiskretisierung beeinflusst. Bei der nicht gedrehten Struktur (Abb. 2.12b) kann man so ein analoges Muster zur Zeit $t = 5$ erkennen. Nach 10 Zeiteinheiten unterscheiden sich die Muster, da dann der Einfluß der kartesischen Diskretisierung zwar die Richtung des Auffaltens, jedoch nicht den Vorgang des Auffaltens selbst mitbestimmt. Betrachtet man sich die integrale Reaktionsgeschwindigkeit ω_{int}

$$\omega_{\text{int}} = \int \omega dV \quad (2.61)$$

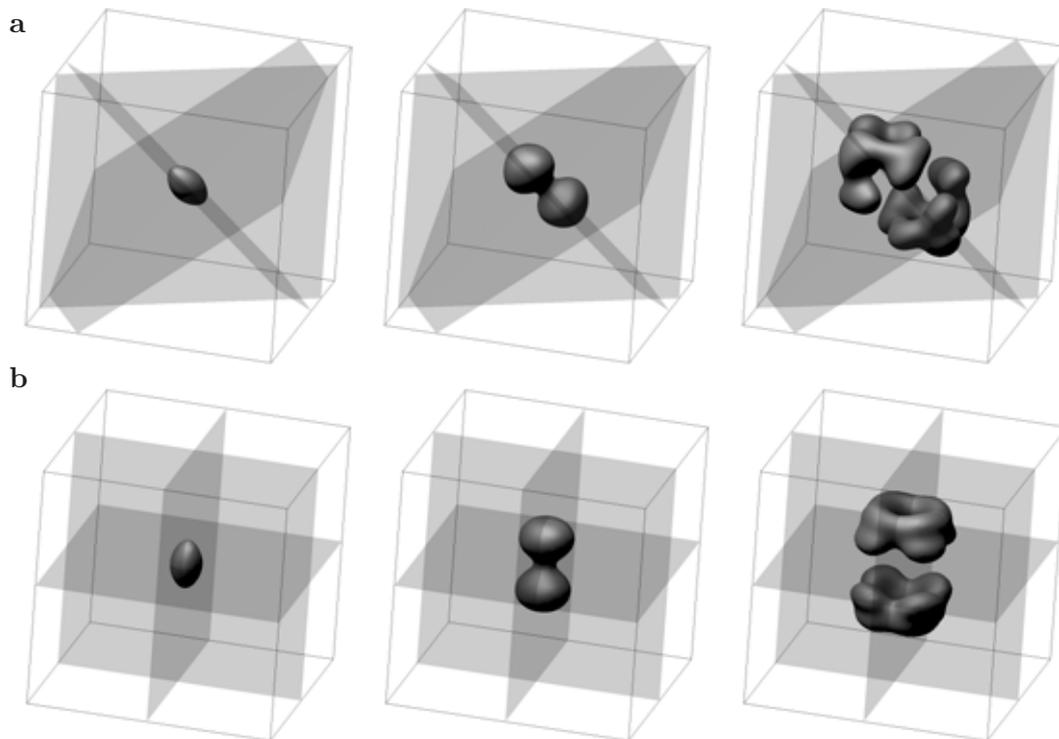


Abbildung 2.12: Entwicklung einer ellipsoiden Flammenstruktur mit Achsenverhältnissen von 1:1:2 bei $Le = 0.3$ zu den Zeiten $t = 0, 5, 10$; **a:** im Koordinatensystem um $\varphi = \pi/3$ und $\vartheta = \pi/4$ rotierte Struktur; **b:** nicht rotiert; gezeigt ist jeweils der zentrale Ausschnitt des Rechengebiets mit halber Gebietslänge mit den Isoflächen der Temperatur, $T = 0.5$.

in Abb. 2.13, so erkennt man gleiches Verhalten bis nach der Aufteilung in die zwei Zellen, d.h. bis zu dem Zeitpunkt, zu dem die physikalische Störung die Ortsdiskretisierung nicht mehr überwiegt. Der Einfluß der Diskretisierung auf ellipsenförmig gestörte Strukturen ist in zweidimensionalen Untersuchungen eingehend studiert worden und nicht Teil dieser Arbeit [13].

Eine dreidimensional gestörte Flamme $IF_{3d}.B$ wird untersucht, indem eine künstliche Störung auf eine kugelsymmetrische Flamme aufgeprägt wird, die natürliche Asymmetrien bei der Zündung simulieren soll. In Laborexperimenten und der Natur sind Zündphänomene in den seltensten Fällen genau kugelsymmetrisch und wenn, dann auch nur zufällig. Auch wenn die Diskretisierung eine Störung bewirkt und somit einen Einfluß auf die Musterbildung hat, kann jedoch gezeigt werden, daß sich unabhängig davon mit der Zeit sphärische Zellen ausbilden. Das wiederum bedeutet, daß das Auffalten wie die Musterbildung generisch sind. Ebenso ist die Formation mehrerer quasi-stabiler Strukturen qualitativ vergleichbar mit experimentellen Ergebnissen. Die Distanz der Zellen nimmt dabei sowohl für die oben beschriebenen Ellip-

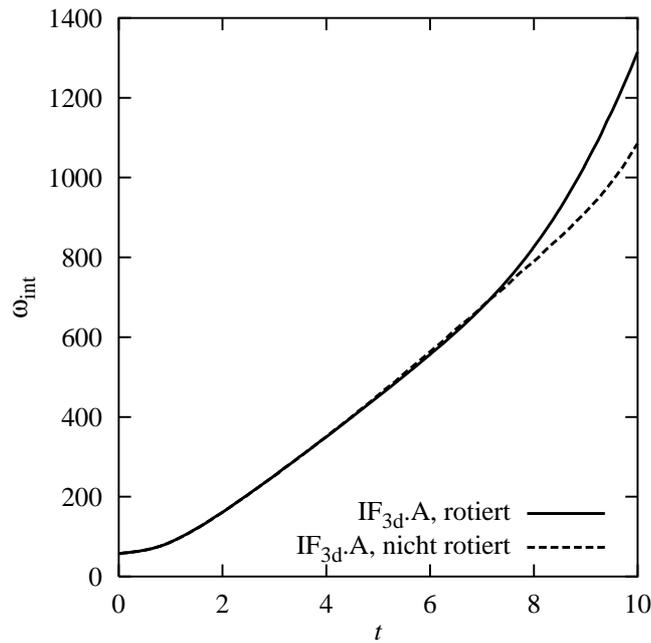


Abbildung 2.13: Integrale Reaktionsgeschwindigkeit für die nicht rotierte und rotierte ellipsoide Flammenstrukturen aus Abb. 2.12.

sen wie auch für die hier gezeigte Struktur mit \sqrt{t} zu, was sehr gut mit den experimentellen Ergebnissen (s. Abschnitt 2.1.2) vereinbar ist. Die dreidimensionale Störung ist eine geometrische und führt zu einer Struktur in Form eines Pentagon und wird als Anfangsbedingung zur Berechnung der weiteren Evolution des transienten Verhaltens dieser Flamme verwendet.

Die Evolution zeigt Abb. 2.14. Zu Beginn wächst die Struktur kontinuierlich an, und zwischen $t = 2$ und $t = 6$ wird ein erstes Auffalten an den fünf bevorzugten Stellen beobachtet. Dieser Prozeß wird ausgelöst durch die aufgeprägte Störung. Anschließend findet ein schrittweises Auffalten statt, wobei ein Pentagon von fünf Flammenstrukturen entsteht. Die relativen Positionen der Einzelzellen, deren Form und Größe bleiben relativ lange Zeit bestehen, die gesamte Struktur bewegt sich nur langsam in x_3 -Richtung (s. Tab. 2.7). Zu späteren Zeitpunkten ($t = 15$) haben alle verbleibenden Flammenstrukturen ähnliche Form und Größe. Daraus kann man schließen, daß eine Attraktion zu einer bestimmten Flammengröße für einen bestimmten Strahlungseinfluß existiert. Alle größeren Strukturen teilen sich in kleinere Zellen auf, und alle kleineren Zellen wachsen oder verlöschen. Für diese Simulation können Diskretisierungseinflüsse als vernachlässigbar angesehen werden, ansonsten wäre eine Richtungsabhängigkeit in dem entstehenden Pentagon zu erkennen.

Es zeigen sich aber wie in Experimenten Strukturen, die ihr Aussehen über längere Zeit nicht ändern, sondern eine nahezu sphärische Struktur lange Zeit beibehalten.

Tabelle 2.7: Mittlere Position in x_3 -Richtung $x_{3,\text{FB}}$, mittlerer Radius und mittlere Distanz der fünf quasi-stabilen Flammenstrukturen in Abb. 2.14.

t	$x_{3,\text{FB}}$	Radius	Distanz
8	14.4	2.3	5.6
10	16.3	2.4	5.5
12.5	19.4	2.5	5.6
15	21.9	2.6	6.0

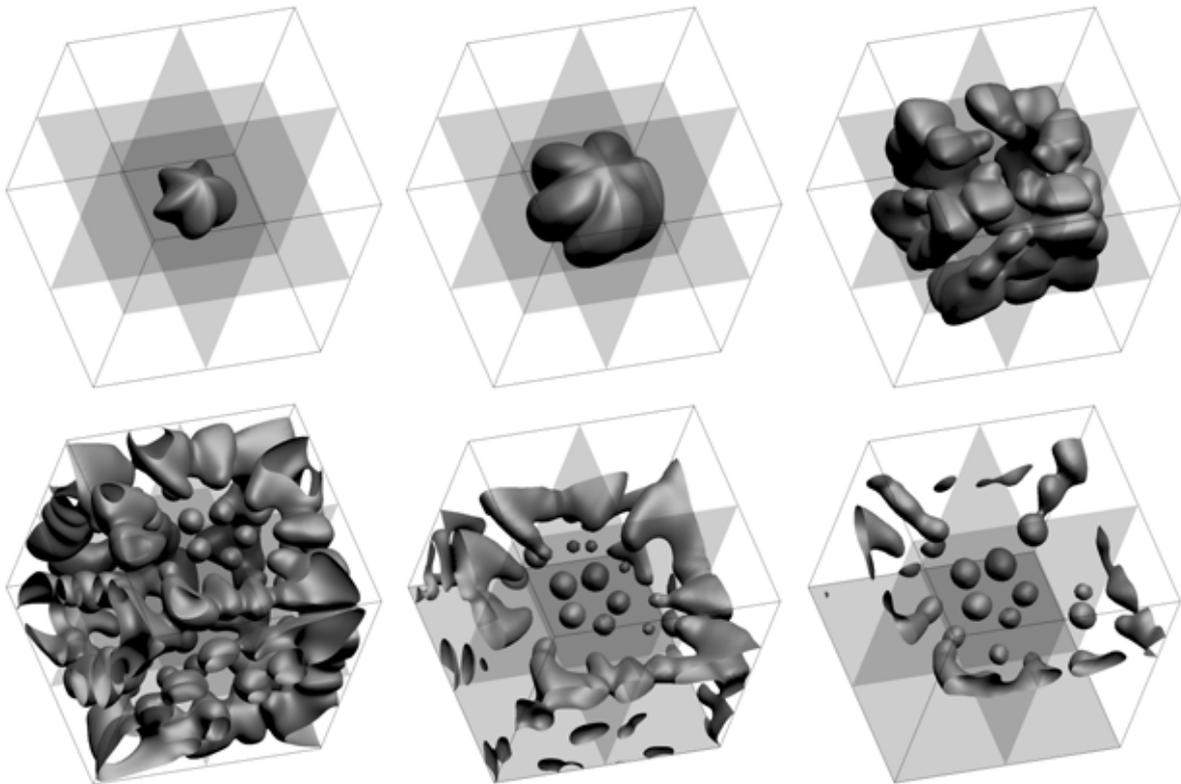


Abbildung 2.14: Evolution der Flammenstruktur $\text{IF}_{3\text{d}}.B$; $r_0 = 3$. Gezeigt sind Isoflächen der mittleren Temperatur $T = 0.5$ in Ausschnitten der Seitenlänge $\Lambda/2$ zu den Zeiten $t = 0, 2, 6, 10, 12.5$ und 15 . Die transparenten Ebenen illustrieren die Position des Ursprungs.

2.4.6 Einfluß vom Anfangsradius und vom Strahlungskoeffizienten

In Analogie zu den kugelsymmetrischen Simulationen wird im letzten Teil dieses Abschnitts das transiente Verhalten ausgehend von ungestörten sphärisch symmetrischen Flammen analysiert. Die Anfangsbedingung $SF_{1d}.A$ wird aufgrund der Restriktionen in drei Dimensionen geeignet geglättet (2.59),(2.60). Da dennoch die Reaktionszone gut genug aufgelöst werden muß, können nur Strukturen bei vergleichsweise kleinen s betrachtet werden. Diese sind größer und weisen flachere Profile auf. In Abb. 2.15a ist die zeitliche Entwicklung der integralen Reaktionsrate für fünf Fälle dargestellt. Der Einfluß des Anfangsradius wird anhand dreier Simulationen mit $s = 0.1$ diskutiert. Bei kleineren Radien von $r_0 = 3, 3.5$ weist die instationäre Entwicklung zuerst ein lokales Maximum auf. Bis zu dessen Erreichen expandiert die Flamme, der folgende Abfall von ω_{int} kann mit einem Auffaltvorgang in Teilstrukturen und folglich mit lokalen Verlöschungen in Verbindung gebracht werden. Verbunden mit dem Auffalten in kleinere Zellen wächst die Oberfläche der Zellen, somit steigt die integrale Reaktionsgeschwindigkeit. Die Flammenstrukturen sind in Abb. 2.15b-d anhand von zweidimensionalen Schnitten illustriert. Die oberste Struktur zeigt dabei das Muster nach einem zweiten Auffalten. Da sphärische Strukturen keine Vorzugsrichtung für das Auffalten aufweisen, spielt natürlicherweise die Diskretisierung die auslösende Rolle bei der Musterbildung. Das Phänomen des Auffaltens jedoch ist generisch wie bereits diskutiert (s. auch [13]). Die Evolution einer Flamme mit $r_0 = 3.5$ beginnt ebenfalls mit einem Auffalten, später jedoch verlöscht die Flamme. Bei einer exothermen Reaktion steigt die Temperatur durch die chemische Reaktion, die sich nur an der Oberfläche der Struktur abspielt und deshalb mit r^2 ansteigt. Gleichzeitig sorgt die volumenabhängige Strahlung für ein Abkühlen mit r^3 . Mit steigendem Radius nimmt somit der Abkühlungseffekt zu, der sich bei $r_0 = 4$ in einem Verlöschen der Flamme äußert. Noch größere Anfangsradien wie $r_0 = 8$ führen zum sofortigen Verlöschen der Flamme, wobei die maximale Reaktionsgeschwindigkeit abnimmt und die Reaktionszone breiter wird (s. Abb. 2.15c). Zwischen den beiden Szenarien des Auffaltens und des Verlöschens sind in Experimenten und in zweidimensionalen Simulationen stabile bzw. quasi-stabile sphärische Flammenfronten gefunden worden, deren Radius über längere Zeit konstant ist (s. Zellen in Abb. 2.14).

Der Einfluß der thermischen Strahlung wird in Abb. 2.15a durch Veränderung des Strahlungskoeffizienten bei gleichem Anfangsradius von $r_0 = 3$ untersucht. Ein kleinerer Strahlungskoeffizient $s = 0.05$ führt dazu, daß die Kühlung des Kerns der Struktur weniger ausgeprägt ist. Instabilitäten führen dann bei kleinen Radien ebenfalls zum lokalen Verlöschen der Flammenfront, die Tendenz zum Zerfall in einzelne Zellen ist jedoch weniger stark ausgeprägt als bei $s = 0.1$. Vielmehr ist die Flammenfront eher gefaltet wie aus Abb. 2.15d ersichtlich wird. Nach 10 Zeiteinheiten ist die Struktur deshalb auch in wesentlich mehr Zellen zerfallen als die Referenzsimulation mit $s = 0.1$. Bei erhöhtem Strahlungseinfluß ($s = 0.2$) und somit verstärkter Kühlung des Flammenkerns kommt es dann zum Verlöschen der Flammenstrukturen.

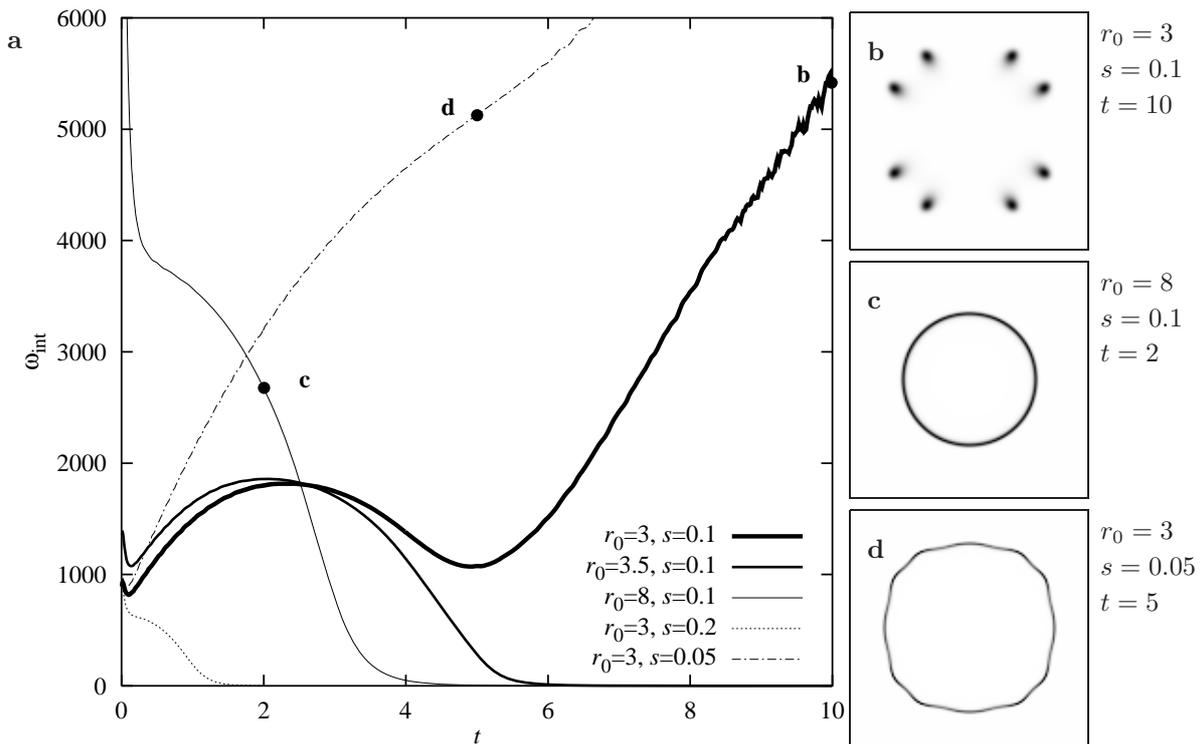


Abbildung 2.15: a: $IF_{3d}.B$ ohne Störung: Evolution der integralen Reaktionsgeschwindigkeit für Simulationen mit $s = 0.1$ und $r_0 = 3, 3.5, 8$ sowie mit $s = 0.05, 0.2$ und $r_0 = 3$. b-d: Ausschnitt aus horizontalen Schnitten der Reaktionsgeschwindigkeit an den Punkten b, c, d im Evolutionsdiagramm.

Die Anfangsradien der verlöschenden Strukturen sind jedoch zu kleineren Werten hin verschoben. Die Einflüsse des Anfangsradius und der Strahlung korrelieren mit den bereits erwähnten experimentellen Ergebnissen.

Das Bifurkationsdiagramm 2.16 faßt die verschiedenen Simulationen zusammen. Die gezeigten drei Szenarien für $s = 0.1$ werden für weitere Anfangsradien und Strahlungskoeffizienten identifiziert. In die Abbildung ist ebenfalls die Stabilitätskurve aus Abb. 2.6 eingezeichnet, die zwischen den beiden Szenarien „auffaltend“ bzw. „auffaltend u. verlöschend“ verläuft. Wie später gezeigt wird, sind Flammen bei diesen Parameterkonstellationen thermo-diffusiv instabil. Ansonsten sollten bei entsprechender Auflösung und Rechenzeit stationäre Lösungen möglich sein.

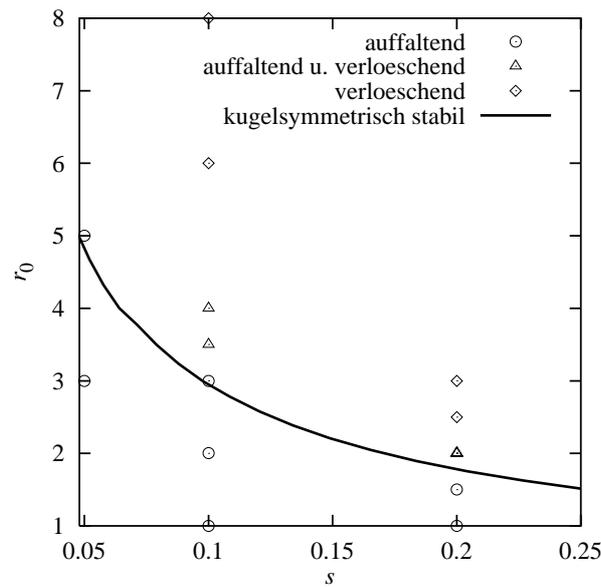


Abbildung 2.16: Bifurkationsdiagramm zur Illustration der Stabilitätsgrenzen isolierter dreidimensionaler Flammenstrukturen; aufgetragen ist der Anfangsradius gegen den Strahlungskoeffizienten.

2.5 Dreidimensionale Stabilität von kugelsymmetrisch stationären Flammenstrukturen

2.5.1 Verfeinerung der numerischen Methode für dreidimensionale Flammen

Zur Untersuchung des dreidimensionalen Verhaltens sphärischer Flammenstrukturen wird die oben erwähnte Pseudo-Spektralmethode verfeinert [27], so daß das Stabilitätsverhalten der Flammen im Detail studiert werden kann. Die enge chemische Reaktionszone zusammen mit der Notwendigkeit eines genügend großen Rechengebiets erfordern eine große Zahl von Skalen und somit eine hohe Anzahl von Gitterpunkten, gerade für dreidimensionale Untersuchungen. Daher wird das kartesische Koordinatensystem an dieses Problem angepaßt, indem es lokal in der Reaktionszone durch eine Koordinatentransformation des folgenden Typs verfeinert wird [92].

$$\xi_\iota = \frac{\Lambda}{2} (z_1 x_\iota + (1 - z_1) x_\iota^{z_2}) \quad \text{für } x_\iota \in [-1; 1] \quad \text{und } \iota = 1, 2, 3. \quad (2.62)$$

Die zweiten Ableitungen bezüglich der neuen Koordinaten ξ_ι ($\iota = 1, 2, 3$) sind dann gegeben durch

$$\partial_{\xi_\iota \xi_\iota} = \frac{\Lambda}{2} \left(-\frac{\partial_{x_\iota x_\iota} \xi_\iota}{(\partial_{x_\iota} \xi_\iota)^3} \partial_{x_\iota} + \frac{1}{(\partial_{x_\iota} \xi_\iota)^2} \partial_{x_\iota x_\iota} \right) \quad . \quad (2.63)$$

Die Parameter z_1 und z_2 bestimmen den Grad der Verfeinerung im Zentrum des kubischen Gitters mit Seitenlänge Λ . Bei der Wahl von z_1 und z_2 ist eine Balance zu wahren zwischen

ausreichender Auflösung der Reaktionszone und Berücksichtigung des Fernfeldes, wenn auch die Auflösung in letzterem viel grober sein kann. Die verwendeten Werte für z_1 und Λ sind in Abschnitt 2.5.2 beschrieben. Alle Simulationen, die hier diskutiert werden, sind mit $z_2 = 7$ durchgeführt worden.

Zur Erhöhung der numerischen Stabilität des Codes wird der Strahlungsterm σ aus (2.8) umformuliert. Zur Vereinfachung der Schreibweise wird hierzu der Parameter $\check{\alpha} = \alpha^{-1} - 1$ eingeführt:

$$\sigma(T) = 4s\check{\alpha}^3 T + \underbrace{6s\check{\alpha}^2 T^2 + 4s\check{\alpha} T^3 + sT^4}_{\check{\sigma}(T)} . \quad (2.64)$$

Die Zeitdiskretisierung erfolgt mit dem EB2/AB2-Schema aus Abschnitt 1.3.2. Der lineare Term aus (2.64) wird hierbei implizit diskretisiert, während die nicht-linearen Terme, d.h. der chemische Reaktionsterm ω und die verbleibenden Terme aus dem abgeleiteten Strahlungsterm $\check{\sigma}(T)$ explizit diskretisiert werden. Aufgrund der Anwendung des nicht-linearen Gitters gilt dies auch für die Diffusionsterme. Man erhält daraus das folgende System von in der Zeit diskreten Gleichungen

$$\frac{3T^{n+1} - 4T^n + T^{n-1}}{2\delta t} - 4s\check{\alpha}^3 T^{n+1} = \nabla^2 T^* + \omega(T^*, Y^*) - \check{\sigma}(T^*) \quad (2.65)$$

$$\frac{3Y^{n+1} - 4Y^n + Y^{n-1}}{2\delta t} = \frac{1}{Le} \nabla^2 Y^* - \omega(T^*, Y^*) \quad (2.66)$$

mit $T^* = 2T^n - T^{n-1}$, $Y^* = 2Y^n - Y^{n-1}$ und dem Zeitindex n . Die explizite Diskretisierung der nicht-linearen Terme umgeht die Lösung eines nicht-linearen Gleichungssystems in jedem Zeitschritt. Dafür muß jedoch, um die Stabilität des numerischen Schemas gewährleisten zu können, eine maximale Zeitschrittweite δt in Kauf genommen werden, die durch die Reaktionsrate, die Strahlung und die Diffusion – und damit das Quadrat des kleinsten Gitterabstands – nach oben beschränkt ist. Gerade für sehr kleine Flammen führt diese Limitierung zu sehr zeitaufwendigen Simulationen. Daher müssen die Zeitschrittweiten um ca. drei Größenordnungen kleiner gewählt werden als bei den Simulationen mit äquidistantem Gitter (s. Abschnitt 2.4). Hier zeigt sich die Mächtigkeit der impliziten Diskretisierung des Diffusionsterms. Die voll diskreten Gleichungen enthalten statt dem ∇^2 -Operator die Summe der drei räumlichen zweiten Ableitungen (2.63), die beispielsweise für die Temperatur folgendermaßen berechnet werden

$$\nabla^2 T_x^* = \frac{\Lambda}{2} \sum_{l=1}^3 \left(-\frac{\partial_{x_l x_l} \xi_l}{(\partial_{x_l} \xi_l)^3} (\widehat{i\kappa_l \widehat{T}_\kappa^*}) - \frac{1}{(\partial_{x_l} \xi_l)^2} (\widehat{\kappa_l^2 \widehat{T}_\kappa^*}) \right) . \quad (2.67)$$

Da hier gerade das Stabilitätsverhalten bzgl. dreidimensionaler Störungen interessiert, werden die Unbekannten aufgeteilt in einen Anteil T_s bzw. Y_s , der in der kugelsymmetrischen Formulierung die stationäre Lösung darstellt, und einen zeitlich fluktuierenden Anteil T' und Y' , d.h.

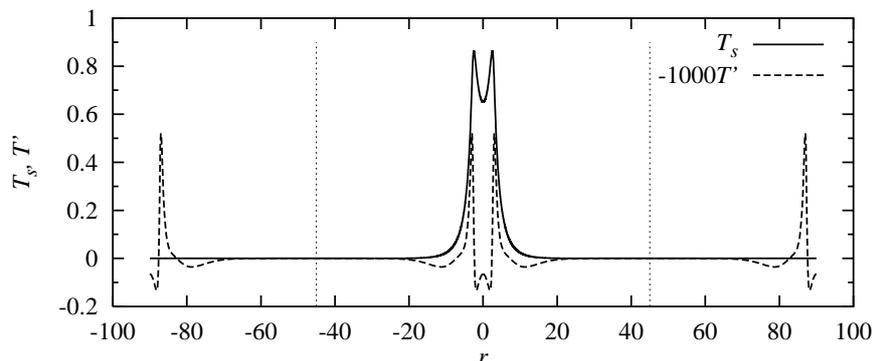


Abbildung 2.17: Veranschaulichung der Aufspaltung der Temperatur in einen periodischen und in einen nicht periodischen Anteil. Dabei ist der Anteil T' um den Faktor 1000 in der Amplitude vergrößert.

die Abweichung von der eindimensional stabilen Lösung.

$$T(t) = T_s + T'(t) \quad , \quad Y(t) = Y_s + Y'(t) \quad (2.68)$$

Man erhält die folgenden in der Zeit diskreten Gleichungen für die Unbekannten T^{m+1} , Y^{m+1} im neuen Zeitschritt t^{n+1} .

$$\frac{(3 - 4s\check{\alpha}^3)T^{m+1} - 4T^m + T^{m-1}}{2\delta t} = 4s\check{\alpha}^3 T_s + \nabla^2 T_s + \nabla^2 T^m + \omega(T^*, Y^*) - \check{\sigma}(T^*) \quad (2.69)$$

$$\frac{3Y^{m+1} - 4Y^m + Y^{m-1}}{2\delta t} = \underbrace{\frac{1}{Le} \nabla^2 Y_s}_{\neq f(t)} + \underbrace{\frac{1}{Le} \nabla^2 Y^m - \omega(T^*, Y^*)}_{= f(t)} \quad (2.70)$$

Zur räumlichen Diskretisierung wird das bekannte Fourier–Galerkin-Verfahren mit pseudo-spektraler Auswertung der nicht-linearen Terme verwendet, d.h. die Unbekannten T' und Y' werden in abgeschnittene Fourier-Reihen entwickelt. Dies beinhaltet gleichzeitig die Annahme periodischer Randbedingungen für T' und Y' in jeder Richtung [35]. Je größer dabei die Periodenlänge Λ ist, desto besser ist die Annäherung an ein nicht begrenztes Problem. Die Periodizität gilt nicht für die stationären Anteile der Temperatur und des Massenbruchs. Die Diskretisierung der Lösung in einen nicht periodischen, stationären Anteil und einen periodischen Rest kleinerer Amplitude vermindert den numerischen Aufwand verglichen mit einem periodischen Ansatz des Gesamtproblems, da das Rechengebiet kleiner gewählt werden kann. Dies veranschaulicht Abb. 2.17. Eine vergleichbar gute Darstellung des Randes erhält man bei periodischer Darstellung der Temperatur T bei einer sehr viel größeren Boxlänge. Die Ortsableitungen werden im Fourier-Raum berechnet, d.h. eine Ableitung ∂_{x_i} kann mit Hilfe einer einfachen Multiplikation $i\kappa_i$ mit spektraler Genauigkeit bestimmt werden. Die nicht-linearen Terme und die variablen Koeffizienten der Koordinatentransformation werden schließlich mittels einer Kollokationsmethode im physikalischen Raum berechnet, wobei wieder kein *de-aliasing*

verwendet wird. In jedem Zeitschritt müssen dann sieben dreidimensionale FFTs bzw. inverse FFTs für die beiden physikalischen Größen und deren Ableitungen berechnet werden. Selbst mit einer Koordinatentransformation und bei Separation der Variablen in einen zeitunabhängigen und einen zeitabhängigen Teil muß das Rechengebiet begrenzt werden. Dies limitiert gleichzeitig das Zeitintervall, für die die Lösung aus (2.69),(2.70) einen isolierten *Flame Ball* beschreibt. Nach einer endlichen Zeit, die korreliert ist mit der Boxgröße, erhält man eine Störung durch die Phantomflammen außerhalb der periodischen Box. Das bedeutet, daß auch mit dieser Methode keine absolut stabilen Flammen simuliert werden können. Prinzipiell kann dieses Problem durch Inkaufnahme zusätzlichen Rechenaufwands behoben werden, indem man die Boxgröße erweitert. Andere Diskretisierungen können ebenfalls Abhilfe schaffen, doch ist die hier verwendete Fourier-Methode sehr vorteilhaft, da sie eine Diskretisierung sehr hoher Ordnung erlaubt und dafür nur sehr geringen Rechenaufwand erfordert (s. auch Abschnitt 1.3.2). Die Rechenzeit kann aufgrund der großen Zahl von Gleichungen erheblich größer werden, so daß eine parallele Ausführung des Programmcodes notwendig ist. Die Simulationen sind auf 12 bis 20 Prozessoren auf der IBM RS/6000 SMP des Rechenzentrums Karlsruhe bzw. dem PC-Cluster des EBI-VBT, der aus 70 Prozessoren besteht, durchgeführt worden und benötigen einige Tage oder Wochen.

2.5.2 Start mit kugelsymmetrischen Profilen

Als Startbedingung zur Untersuchung der dreidimensionalen Stabilität werden die stationären Profile der Temperatur und des Massenbruchs aus Abschnitt 2.3 verwendet. Mit der Diskretisierung einer sphärisch symmetrischen Lösung auf einem kartesischen Gitter erhält man dieselbe diskrete Lösung, wenn die Gitterweite gegen null tendiert. Irgendeine kleine Störung muß aber vorhanden sein, um eventuell vorhandene Instabilitäten auszulösen. Für eine begrenzte Schrittweite im Ort ist jede Art numerischer Diskretisierung mit einem Fehler behaftet, dessen Einfluß auf die Lösung ist jedoch klein verglichen mit den physikalischen Instabilitäten [58]. Untersucht werden fünf sphärische Flammen, für die in den kugelsymmetrischen Rechnungen stationäre Profile ermittelt worden sind. Sie sind in Abb. 2.6 durch die schwarz ausgefüllten Kreise markiert. Tab. 2.8 zeigt die Anfangsbedingungen und gewählten numerischen Parameter. Obwohl ein lokal verfeinertes Gitter verwendet wird, ist die Boxgröße begrenzt auf ca. 15 bis 20 Flammenradien. Für die kleinste Flammenstruktur ist sogar eine Limitierung der Boxlänge auf ca. 10 notwendig. Dies ist klein bezogen auf die kugelsymmetrischen Simulationen, dennoch aber relativ groß wegen der Aufteilung der Unbekannten in einen zeitunabhängigen (nicht periodischen) Anteil und eine zeitabhängige Fluktuation. Es existieren also zwei Effekte, die die Stabilität beeinflussen. Der eine entsteht durch die gewählten Randbedingungen, der andere ist ein Diskretisierungseffekt und hat seinen Ursprung in der Gitterweite in der Reaktionszone. Auf beide wird in dieser Arbeit eingegangen.

Tabelle 2.8: Numerische Parameter in den dreidimensionalen Simulationen: stationärer Radius r_{start} aus den kugelsymmetrischen Untersuchungen, Strahlungskoeffizient s , Zahl an Gitterpunkten N in jeder Raumrichtung, Boxlänge Λ , Gitterparameter z_1 , Zeitschrittweite δt und Zahl verwendeter Prozessoren q für die Simulation.

	r_{start}	s	N	Λ	z_1	δt	q
SF _{3d} .A	2.7	0.11	96	90	0.15	$2 \cdot 10^{-4}$	16
SF _{3d} .B	1.1	0.40	80	32	0.15	$4 \cdot 10^{-5}$	20
SF _{3d} .C	0.53	1.00	72	20	0.16	$2 \cdot 10^{-5}$	12
SF _{3d} .D	0.30	2.07	80	12	0.10	$3 \cdot 10^{-6}$	20
SF _{3d} .E	0.157	4.44	64	3.0	0.12	$4.2 \cdot 10^{-7}$	16

Tabelle 2.9: Werte der stationären Profile und einzelner Terme in den Gleichungen (2.5),(2.6) am Rand des Rechengebiets; bestimmt aus den sphärischen Anfangsbedingungen bei $r = \Lambda/2$.

	T_s	Y_s	$\nabla^2 T_s$	$\nabla^2 Y_s$	$4s\check{\alpha}^3 T_s$	$\check{\sigma}$	ω
SF _{3d} .A	1.4e-7	0.96	2.3e-8	-7.8e-7	1.1e-8	4.0e-15	1.8e-9
SF _{3d} .B	1.6e-5	0.95	4.8e-6	1.9e-6	4.7e-6	2.0e-10	1.8e-9
SF _{3d} .C	1.5e-5	0.95	1.1e-5	-1.7e-7	1.0e-5	4.0e-10	1.8e-9
SF _{3d} .D	4.6e-5	0.96	6.9e-5	-9.8e-6	6.7e-5	8.2e-9	1.8e-9
SF _{3d} .E	1.1e-2	0.90	3.5e-2	1.5e-8	3.4e-2	1.0e-3	3.1e-9

Der erste Effekt kann vernachlässigt werden, wenn gewährleistet ist, daß die Terme $\nabla^2 T'$, $\nabla^2 Y'$, $\check{\sigma}$ und ω in den Gleichungen (2.69), (2.70) am Rand verschwindend klein sind. In diesem Fall hat die aufgeprägte Periodizität keinen Einfluß auf die berechnete Lösung. In Tab. 2.9 sind die Zahlenwerte dieser Terme am Rand des dreidimensionalen Systems zusammengefaßt. Die Werte für die Temperatur und den Massenbruch unterscheiden sich in der zweiten Stelle von $T(r \rightarrow \infty) = 0$ und $Y(r \rightarrow \infty) = 1$. Dies wird durch die Terme $\nabla^2 T_s$, $4s\check{\alpha}^3 T_s$, und $\nabla^2 Y_s$ aufgefangen. Die Terme $\nabla^2 T'$, $\nabla^2 Y'$ sind zu Beginn definitionsgemäß null, sie wachsen jedoch im Laufe der Zeit an. Aufgrund von $Le < 1$ ist die zeitliche Limitierung des berechneten Zeitintervalls ohne Randeinfluß bedingt durch den Stofftransport. Der Randeinfluß durch von null verschiedene Werte von ω und $\check{\sigma}$ kann für die ersten vier Fälle zur Zeit $t = 0$ offensichtlich vernachlässigt werden. Auch für den letzten Fall ist dieser Einfluß sehr klein. Auf die Größen $\nabla^2 T'$ und Y' wird weiter unten im Detail eingegangen, um eine Veränderung des Randeinflusses mit der Zeit zu dokumentieren.

Um das Ausmaß des zweiten Effekts zu minimieren, müssen die Parameter N , z_1 , δt so gewählt werden, daß die Größen im Innern der Domäne adäquat in Ort und Zeit diskretisiert

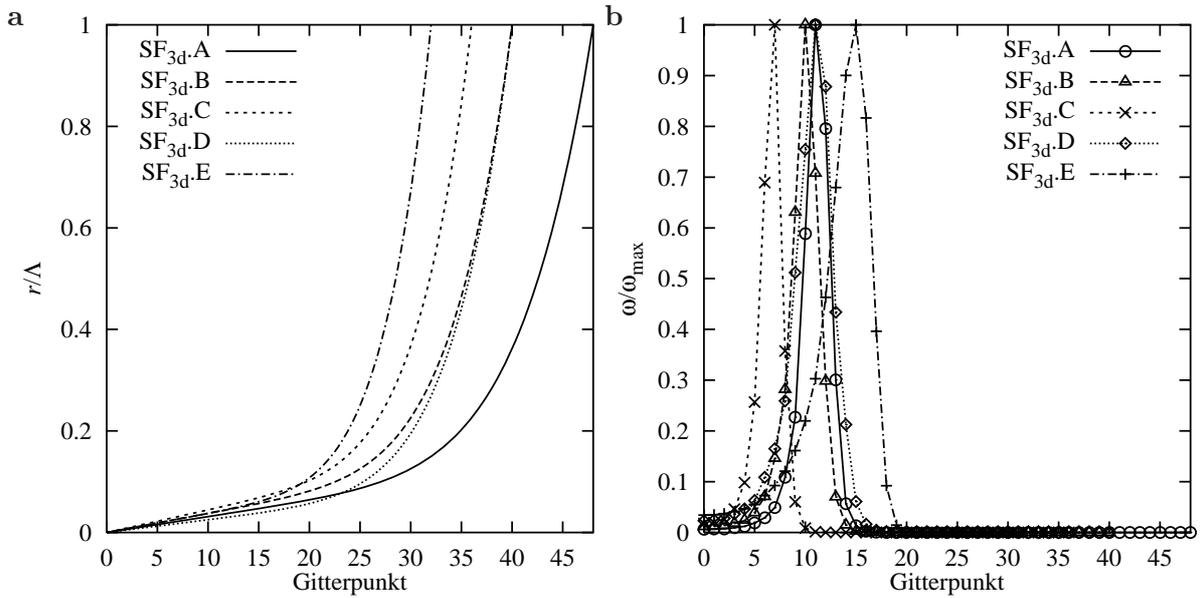


Abbildung 2.18: Qualität der Auflösung in den dreidimensionalen Rechnungen.
a: Gittertransformation in den fünf Fällen. **b:** Eindimensionale Schnitte entlang der Raumdiagonalen durch die Felder der Reaktionsrate.

sind. In Abb. 2.18a ist der normierte Radius für die verschiedenen Fälle als Funktion des numerischen Gitters gezeichnet. Zu erkennen ist die starke Nicht-Linearität und die damit verbundene, nötige Feinheit des Gitters im Flammenzentrum. Da die starke Krümmung der kleineren Flammenstrukturen die chemische Reaktion fördert [79], sind die Temperatur- und Massenbruchprofile in diesen Simulationen steiler. Daher muß das Gitter insbesondere für die Simulationen SF_{3d}.D und SF_{3d}.E sehr fein sein. Dies kann nur durch eine Verkleinerung von z_1 oder Λ erreicht werden. Abb. 2.18b zeigt die diskreten Profile der chemischen Reaktionsrate. Sie sind normiert auf ein Maximum von 1. Die Abszisse ist dabei die Raumdiagonale im kartesischen Koordinatensystem, d.h. die Richtung mit der größten Gitterauflösung. Die Streckenzüge zwischen den Punkten dienen dabei lediglich der Darstellung, die Repräsentation der Unbekannten durch die Fourier-Diskretisierung ist glatter. Zudem ist die Reaktionsrate die Größe mit den steilsten Gradienten und die Temperatur- und Massenbruchprofile sind viel flacher. Dies kann aus der stationären Lösung ($\partial_t = 0$) aus (2.6) entnommen werden, dann ist $-1/Le\nabla^2 Y = -\omega$. Das verdeutlicht, daß die Qualität der Diskretisierung für alle Größen ausreichend ist. Sie vermag eine physikalische Instabilität aufzulösen, bestimmt jedoch nicht die Evolution derselben.

2.5.3 Evolution der dreidimensionalen Flammen

Wie in den vorigen Abschnitten wird zur Gewinnung eines ersten Einblicks in die hier vorgestellten Simulationen auf die Dynamik der verschiedenen Flammen eingegangen. Als cha-

rakteristische Größe wird wieder die integrale Reaktionsgeschwindigkeit (2.61) gewählt. Die zeitliche Entwicklung zeigt Abb. 2.19a. Zu Beginn ist diese Größe erwartungsgemäß für alle Flammen relativ konstant, da von einer Lösung ausgegangen wird, die eindimensional stabil ist. Die kleinen Störungen benötigen Zeit, bis sie sich – das Vorhandensein einer Instabilität vorausgesetzt – aufschaukeln. Zum Ende der jeweiligen Rechnungen kann in allen Fällen außer SF_{3d}.E ein starker Anstieg in ω_{int} beobachtet werden, was gewöhnlich [12, 13] mit einem Zerfall der Flamme in mehrere Teilstrukturen einhergeht. In diesen Teilstrukturen ist jeweils eine große Krümmung der Flamme (mit hohen Temperaturen) gegeben, außerdem steigt durch das Splitten das gesamte Reaktionsvolumen an. Beide Effekte erhöhen ω_{int} .

Die Pfeile in Abb. 2.19a markieren die Zeitspanne, die nötig ist, um eine Information per diffusivem Stofftransport vom Rand zum Flammenzentrum hin (oder umgekehrt) zu transportieren. Dabei wird eine charakteristische Geschwindigkeit von $1/Le$ angenommen. Mit anderen Worten kennzeichnen die Pfeile die Zeit t_{diff} , nach der frühestens im Flammenzentrum mit einem Randeinfluß zu rechnen ist. Dieser Zeitpunkt ist in den verschiedenen Simulationen aufgrund der jeweiligen Boxgröße Λ unterschiedlich (s. Tab. 2.8). Nun ist anzunehmen, daß die Flammen mit den größten Störungen am Rand am frühesten auffalten, wenn darin das einzige Kriterium für das Ansteigen von ω_{int} besteht, was jedoch bei den kleinen Flammenstrukturen mit den größten Werten für den Strahlungsterm in Tab. 2.9 der Fall ist. Trotzdem geschieht das Auffalten relativ zu t_{diff} bei kleiner werdenden Flammenstrukturen später (s. Abb. 2.19a): Für die größte untersuchte Flammenstruktur (SF_{3d}.A), steigt ω_{int} noch vor Erreichen der charakteristischen Diffusionszeit stark an. Bei SF_{3d}.B sind die Zeiten von derselben Größenordnung, während für die kleineren Flammen der Anstieg von ω_{int} viel später stattfindet als die diffusive Zeitskala vorhersagt bzw. bei SF_{3d}.E überhaupt keine Zunahme von ω_{int} zu verzeichnen ist.

Eine Eigenschaft von integralen Größen wie ω_{int} ist die ihnen anhaftende mangelnde Sensitivität gegenüber lokalen Veränderungen in der Lösung. Eine sich langsam entwickelnde Instabilität wird anhand solcher Größen erst spät erkannt. Zusätzlich können sich Veränderungen im Datenfeld kompensieren, so daß sich ω_{int} gar nicht oder nur wenig verändert. Um Abweichungen von der sphärisch symmetrischen Lösung möglichst früh beobachten zu können, ist in Abb. 2.19b das örtliche Maximum des Diffusionsterms der Fluktuation der Temperatur $(\nabla^2 T')_{\text{max}}$ dargestellt. Bei einem lokalen Verlöschen der Flamme, wie es bei einem Auffaltvorgang der Fall ist, verändert sich die Temperatur aufgrund der Nicht-Linearität des Reaktionsterms stark in Abhängigkeit von der Richtung, da die Flammenkrümmung zunimmt. Somit reagiert diese Größe sensitiv auf lokale Veränderungen gerade in der Flammenfront. Zu Beginn ist $(\nabla^2 T')_{\text{max}} = 0$, es ist jedoch aufgrund kleiner Unterschiede der beiden Diskretisierungsarten ein früher Anstieg auf einen bestimmten Wert zu beobachten. Für Flammen mit kleinen Radien (SF_{3d}.C und SF_{3d}.D) scheint es, daß die Simulationen auf einen bestimmten Wert für $(\nabla^2 T')_{\text{max}}$ konvergieren, was ein zweiter Hinweis auf die Stationarität dieser beiden Strukturen in einer unbegrenzten Umgebung ist. Nach einiger Zeit destabilisieren sich die

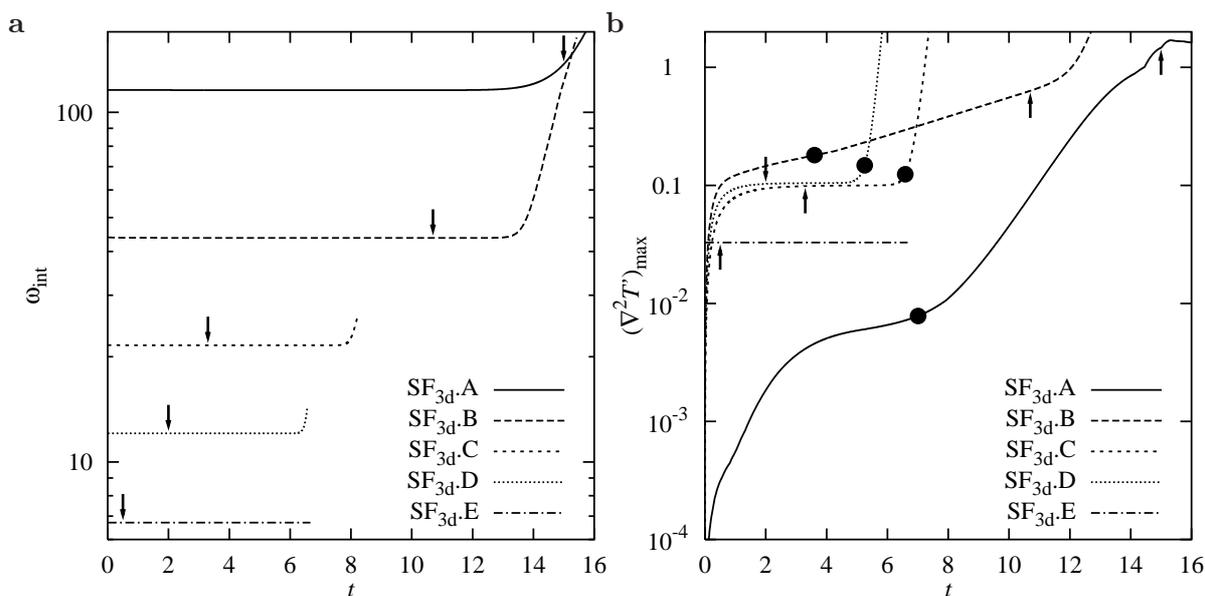


Abbildung 2.19: Illustration der dreidimensionalen Evolution von anfänglich sphärischen Flammenstrukturen mit $r_{\text{start}} = 2.7$ (SF_{3d}.A), 1.1 (SF_{3d}.B), 0.53 (SF_{3d}.C), 0.30 (SF_{3d}.D) und 0.16 (SF_{3d}.E). **a:** integrale chemische Reaktionsrate, **b:** entsprechende Maxima des Diffusionsterms der Fluktuation der Temperatur. Die Bedeutung der Symbole (Pfeile und ausgefüllte Kreise) wird im Text erläutert.

se Flammen, der damit verbundene Anstieg von $(\nabla^2 T')_{\text{max}}$ und damit auch das Auffalten in mehrere Einzelstrukturen kann nun ein Artefakt der Randbedingung sein oder durch eine dreidimensionale Instabilität hervorgerufen werden. Dies kann für diese beiden Fälle aufgrund der bisher gezeigten Ergebnisse nicht definitiv entschieden werden. Größere Strukturen (SF_{3d}.A und SF_{3d}.B) zeigen keine Konvergenz von $(\nabla^2 T')_{\text{max}}$ auf ein Plateau. Nach den anfänglichen Veränderungen steigt $(\nabla^2 T')_{\text{max}}$ monoton an. Das bedeutet, daß diese Flammen instabil gegenüber einer dreidimensionalen Störung sind. In Abb. 2.19b sind die Zeitpunkte t_{split} , zu denen ein Aufspalten der Flammenstrukturen in mehrere Teilzellen zu erkennen ist, durch ausgefüllte Symbole markiert. Als Kriterium wird dabei der Zeitpunkt gewählt, an dem die Isofläche der Temperaturfluktuation mit 80% der Maximaltemperatur von der Kugelsymmetrie beobachtbar abweicht, d.h. lokale Verlöschungen zu sehen sind. Für SF_{3d}.C und SF_{3d}.D ist dies der Fall, kurz nachdem $(\nabla^2 T')_{\text{max}}$ steil ansteigt, d.h. zu den Zeiten $t = 6.6$ bzw. $t = 5.25$. Für SF_{3d}.A und SF_{3d}.B geschieht dieses Auffalten relativ früh zu $t = 3.6$ bzw. $t = 7$, also sogar vor dem erwähnten Anstieg von $(\nabla^2 T')_{\text{max}}$.

Alle erwähnten Zeitpunkte sind in Tab. 2.10 zusammengestellt und folgendermaßen klassifiziert. Die Fälle mit $t_{\text{diff}} > t_{\text{split}}$ sind gekennzeichnet durch „frühes Auffalten“, alle gezeigten Indizien sprechen dafür, daß SF_{3d}.A und SF_{3d}.B wegen einer Instabilität auffalten. Für SF_{3d}.C und SF_{3d}.D wird die Bezeichnung „quasi-stabil“ verwendet. Die Zeiten sind alle von dersel-

ben Größenordnung, so daß eine eindeutige Zuordnung schwierig ist. Schließlich wird im Fall SF_{3d}.E weder ein Anstieg von $(\nabla^2 T')_{\max}$ noch ein Auffalten in Teilzellen beobachtet, obwohl die Rechenzeit sehr viel länger als t_{diff} ist. Es handelt sich hierbei um einen „stabilen“ *Flame Ball*.

2.5.4 Flammenprofile

Abb. 2.20a zeigt für SF_{3d}.B Diagramme der kugelsymmetrisch gemittelten Temperatur- und Massenbruchprofile zum Zeitpunkt $t = t_{\text{split}}/2$. Dort sind die zeitlichen Veränderungen minimal, da die anfänglichen Korrekturen bereits in die Profile eingearbeitet sind, während das Auffalten als noch nicht initiiert angenommen wird. Die Unterschiede im Hinblick auf die eindimensionalen Simulationen sind sehr klein (s. Abb. 2.20a). Abb. 2.20b stellt die Temperaturfluktuation allein für die fünf Flammen dar, wobei durch Fehlen der Bedingung $t = t_{\text{split}}/2$ für SF_{3d}.E das Profil zum Ende der Rechnung ermittelt wird. In allen Fällen erkennt man ähnliche Profile im Vergleich zu den kugelsymmetrischen Profilen. Man beobachtet einen Anstieg im Zentrum der Flamme und ein leichtes Abfallen in der Flammenfront. Der Massenbruch, der hier nicht gezeigt ist, zeigt gegensätzliches Verhalten, da eine höhere Temperatur eine größere Reaktionsrate und somit einen geringeren Brennstoff-Massenbruch zur Folge hat. Diese Effekte können eine Konsequenz der Neumann-Randbedingung für $r \rightarrow 0$ in den eindimensionalen Untersuchungen sein. Die Unterschiede sind aber gering verglichen mit den Werten der Temperatur ($T'/T_s < 0.4\%$), wobei interessanterweise die Abweichung von der kugelsymmetrischen Lösung für SF_{3d}.A kleiner ist als für SF_{3d}.C, obwohl erstere „frühes Auffalten“ zeigt, letztere jedoch als „quasi-stabil“ gilt. Man kann schließen, daß bei Abwesenheit von dreidimensionalen Instabilitäten die kugelsymmetrischen Profile die Flammenstrukturen sehr gut beschreiben, wenn nicht im schlimmsten Fall davon ausgegangen wird, daß die Geschwindigkeit zur Einstellung eines dreidimensional stationären Profils sehr langsam ist. Dies kann zumindest für den letzten Fall SF_{3d}.E aufgrund der langen Rechenzeit ($t = 13.5t_{\text{diff}}$) ausgeschlossen werden.

2.5.5 Gründe für das Auffalten

Die Schwierigkeit der in diesem Abschnitt gezeigten Rechnungen ist wie bereits erwähnt, daß Aussagen in einem unbegrenzten Gebiet erwünscht sind, jedoch die Abgeschlossenheit des Rechengebiets aufgrund der begrenzten Rechenkapazität notwendig ist. Daher ist ein Beweis aufgrund von Indizien notwendig um festzustellen, ob eine intrinsische dreidimensionale Instabilität das Auffalten der Flammenstrukturen hervorruft oder nicht. Die größeren vier Flammen zeigen dieses Verhalten. In den Fällen SF_{3d}.A und SF_{3d}.B hat sich dabei bereits gezeigt, daß hier eine dreidimensionale Instabilität die Ursache des Auffaltens ist, während bei SF_{3d}.C und SF_{3d}.D diese Sicherheit nicht besteht.

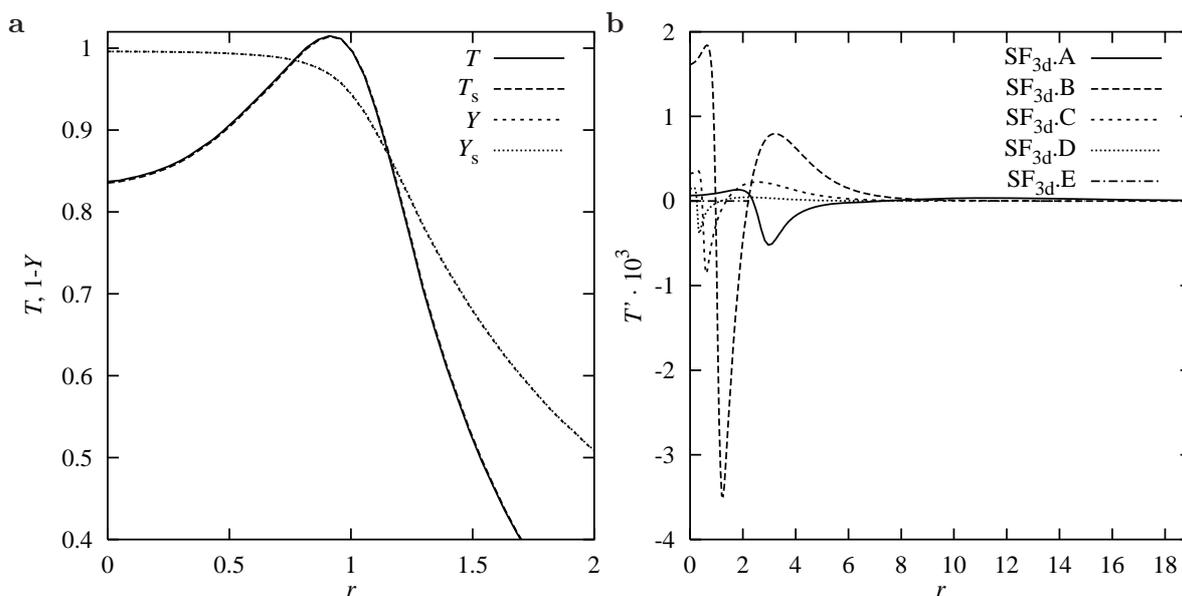


Abbildung 2.20: Kugelsymmetrisch gemittelte Profile zum Zeitpunkt $t = t_{\text{split}}/2$ bzw. für SF_{3d}.E bei Abbruch der Simulation. **a:** SF_{3d}.B: Vergleich von Temperatur und Massenbruch mit der stationären eindimensionalen Lösung in einem vergrößerten Ausschnitt des Rechengebiets. **b:** T' zur Veranschaulichung der Abweichungen zum ermittelten sphärisch symmetrischen Profil.

Weitere Hinweise liefert die punktweise Darstellung der Massenbruchfluktuation in Abhängigkeit vom Radius $r = \sqrt{\xi_1^2 + \xi_2^2 + \xi_3^2}$, d.h. dem Abstand zum Flammenzentrum. Man erhält dadurch überlagerte Schnitte von $Y'(r) = Y'(\xi_1, \xi_2, \xi_3)$ in die verschiedenen Raumrichtungen als „scatter plots“ (s. Abb. 2.21), die Aussagen über momentane und lokale Abweichungen von der Kugelsymmetrie machen. Spezielles Augenmerk soll dabei auf die maximalen Unterschiede in der Flammenfront bzw. am Rand gelenkt werden. Letzterer wird hier durch $r = \Lambda/2$ definiert, d.h. der kürzeste Abstand vom Flammenzentrum zum Gebietsrand in Achsenrichtung. Zur Veranschaulichung ist in Abb. 2.21a die maximale Abweichung in der Flammenfront als „scatter“ bezeichnet. Da der Stofftransport schneller ist als der der Wärme, können Randeinflüsse zuerst in den Feldern des Massenbruchs entdeckt werden. Abb. 2.21a zeigt $Y'(r)$ für den Fall SF_{3d}.D zu den Zeitpunkten $t/t_{\text{split}} = 0.5, 0.9$ und 1.0 . Bis zu $t/t_{\text{split}} = 0.9$ ist die Abweichung von der Kugelsymmetrie in der Flammenfront sehr klein. Das heißt, auch wenn man geringe Abweichungen des Profils von der eindimensionalen Lösung erkennt, bleibt die Flamme doch sphärisch symmetrisch. Anschließend wächst der scatter monoton. Ein Auffalten ist beobachtbar, sobald der scatter von Y' bei $r \approx 0.34$ ca. 50% des Maximums der Massenbruchfluktuation beträgt. Vergrößert man die Regionen um den Gebietsrand (Abb. 2.21c) und in der Flammenfront (Abb. 2.21b), beobachtet man, daß der scatter am Rand von derselben Größenordnung ist wie der in der Reaktionszone. Sobald das Auffalten initiiert ist, wächst der

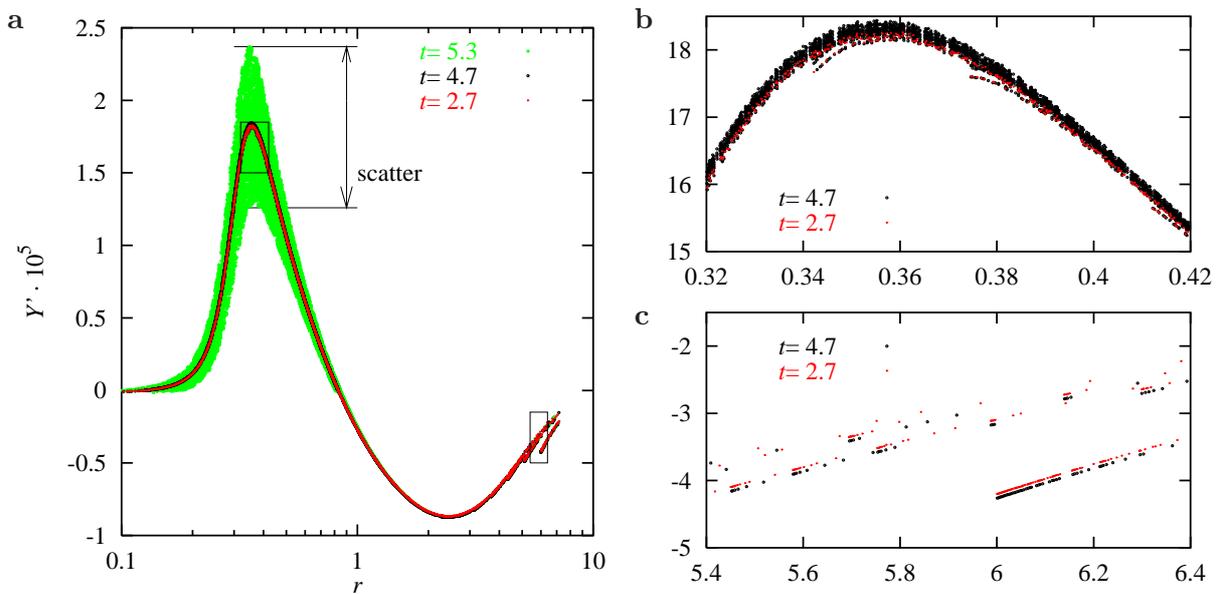


Abbildung 2.21: Massenbruchfluktuation für die Konfiguration $SF_{3d.D}$; **a:** Diagramm der überlagerten Schnitte von Y' zu den Zeitpunkten $t = 2.7, 4.7$ und 5.3 , d.h. 50 %, 90 % und 100 % von t_{split} . Vergrößerung der beiden markierten Bereiche in **b:** der Flammenfront und **c:** der Randregion für $t = 2.7$ und 4.7 .

scatter in der Reaktionszone natürlich stärker als am Rand. Die Flammenfortpflanzung hängt dann von der Raumrichtung ab, da mit dem Auffalten lokale Verlöschungen entstehen. In Regionen der Verlöschung sinkt die Reaktionsrate, der Massenbruch erhöht sich durch diffusiven Stofftransport. In den Flammenstrukturen erhöht sich die Reaktionsrate aufgrund der höheren Krümmung der Reaktionsoberfläche, so daß der Massenbruch hier weiter sinkt. Daher steigt der *scatter* bei $r \approx 0.34$ schnell an. Am Rand geht die Reaktionsrate und der Einfluß der Strahlung gegen null, weil die Temperaturen sehr gering sind. Dort ist der *scatter* von derselben Größenordnung wie die Werte der nicht-linearen Terme (s. Tab. 2.9).

Der Mechanismus des Auffaltens kann aufgrund dieser Beobachtungen folgendermaßen erklärt werden. Der Abstand von der Flamme zum Rand des Rechengebiets hängt von der Raumrichtung ab, er ist minimal entlang der kartesischen Koordinaten und maximal entlang der Raumdiagonalen. Aufgrund dessen beobachtet man einen *scatter* von Y' bei $r \approx 6$. Der diffusive Stofftransport hat nun zwei Effekte auf die resultierenden dreidimensionalen Störungen. Zum einen ergibt sich ein Stofftransport in radialer Richtung auf die Flamme zu, so daß man Massenbruchprofile erwartet, die von der Raumrichtung abhängig sind. Das bedeutet, daß durch diesen Effekt die *scatter* von Y' auch für $r < 6$ zu sehen sein müßten. Zum anderen werden diese *scatter* jedoch in tangentialer Richtung ausgeglichen, so daß der *scatter* bis $r \approx 2$ wieder geringer wird (Abb. 2.21a). Jedoch wird durch diesen Homogenisierungseffekt das gemittelte Profil von Y' bei kleinen Radien verändert. Dadurch wiederum wird der *scatter* in der

Tabelle 2.10: Verhältnis des maximalen „scatter“ von Y' am Rand, $r \approx \Lambda$ ($\Delta Y'_{\text{rand}}$), und in der Flammenfront, r_i ($\Delta Y'_{\text{front}}$) zu vier Zeitpunkten $t/t_{\text{split}} \approx 0.5, 0.9, 1.0$ und sobald das endgültige Muster erkennbar ist. (Für SF_{3d}.E zum Ende des Rechenlaufs. Zusätzlich Angabe von t_{diff} , s. Text.)

„frühes Auffalten“			„quasi-stabil“			„stabil“		
Fall (r_{start})	t	$\Delta Y'_{\text{rand}} / \Delta Y'_{\text{front}}$	Fall (r_{start})	t	$\Delta Y'_{\text{rand}} / \Delta Y'_{\text{front}}$	Fall (r_{start})	t	$\Delta Y'_{\text{rand}} / \Delta Y'_{\text{front}}$
SF _{3d} .A (2.7)	3.6	4.67e-02	SF _{3d} .C (0.5)	3.3	t_{diff}	SF _{3d} .E (0.16)	0.5	t_{diff}
	6.2	1.02e-02		3.4	9.37e-01		6.7	2.3
	7.0	6.20e-03		5.8	8.51e-01			
	10.8	3.35e-04		6.6	6.48e-02			
	15.0	t_{diff}		7.2	9.09e-04			
SF _{3d} .B (1.1)	2.0	1.38e-03	SF _{3d} .D (0.3)	2.0	t_{diff}			
	3.2	2.80e-03		2.7	4.50e+00			
	3.6	3.00e-03		4.7	2.62e+00			
	10.7	t_{diff}		5.3	1.23e-01			
	12.2	8.60e-04		5.9	2.65e-03			

Flammenfront hervorgerufen, der das Auffalten in Teilstrukturen auslöst.

Zur Quantifizierung des Randeinflusses ist in Tab. 2.10 das Verhältnis der *scatter* in der Flammenfront und am Rand zu den Zeitpunkten $t/t_{\text{split}} \approx 0.5, 0.9, 1.0$ und sobald das endgültige Muster der Strukturen erkennbar ist, zusammengefaßt Für SF_{3d}.E ist dieses Verhältnis zum Ende der Rechnung dargestellt. Für alle Fälle außer SF_{3d}.E ist der *scatter* in der Reaktionszone zum Zeitpunkt $t \geq t_{\text{split}}$ größer als am Rand. Wie erwähnt wird das Verhältnis nach dem Auffalten größer. Bis $t/t_{\text{split}} = 0.9$ sind jedoch Unterschiede zwischen den Rechnungen zu beobachten. Für SF_{3d}.A und SF_{3d}.B machen die *scatter* am Rand nur etwa 5% derjenigen in der Flammenfront aus. Wie oben erwähnt, wird das Auffalten bereits früh eingeleitet, so daß Änderungen am Rand überhaupt noch nicht die Flamme erreicht haben können. Dies bestätigt die obige Schlußfolgerung weiter, daß das Auffalten generisch ist und durch die Auslösung einer dreidimensionalen Instabilität begründet ist. Erst sehr spät, d.h. bei $t = 18$ für SF_{3d}.A und $t = 14.8$ für SF_{3d}.B, kann ein leichtes Ansteigen des *scatter* am Rand beobachtet werden. Dies ist ein Zeichen dafür, daß die Flamme Teile des Rechengitters erreicht, wo die Auflösung grober wird und nicht mehr ganz ausreicht. Daher werden die Simulationen zu diesen Zeitpunkten abgebrochen. Für SF_{3d}.C ist das Verhältnis der *scatter* etwa eins und für SF_{3d}.D ist es um 2.5, bevor das Auffalten initiiert wird. Das bedeutet, die Abweichungen von der Kugelsymmetrie sind am Rand zwar größer als in der Flammenfront, jedoch von derselben Größenordnung. Schließlich ist für SF_{3d}.E keinerlei Anzeichen eines Auffaltens bis zum Ende der Rechnung zu

erkennen, obwohl die Störung am Rand genügend Zeit hat, sich bis zur Flamme vorzuarbeiten. Der Einfluß des Randes steigt mit abnehmender Flammengröße. Gleichzeitig nimmt die Stabilität mit abnehmendem Radius zu, die Zeitspanne bis zum Auffalten steigt an.

2.5.6 Musterbildung

Nach eingehender Diskussion der Stabilität sphärischer Flammenstrukturen soll im letzten Abschnitt dieses Kapitels eine weitere wesentliche Eigenschaft der dreidimensionalen Simulationen ausgenutzt werden, indem die Entwicklung der Instabilität und das Auffalten in mehrere Teilstrukturen betrachtet werden. Für nicht kugelsymmetrische Flammenformationen ist dies bereits in Abschnitt 2.4 geschehen. Dies ist auch ein Vorteil gegenüber der linearen Stabilitätsanalyse, die zwar in der Nähe der Stabilitätsgrenze eine Aussage über die Zahl der sich bildenden Zellen machen kann, die instationäre Evolution der Flammen aber nicht beschreiben kann. Dieser Vorgang ist bestimmt durch die Nicht-Linearität der deformierten Flamme oder durch die Wechselwirkung mehrerer Flammenstrukturen. Experimentelle Studien [105, 106] haben gezeigt, daß stabile Flammen für unterschiedliche Brennstoff-Massenbrüche existieren, und daß die Zahl beobachteter Teilflammen nach einem Auffaltvorgang sich mit dem Massenbruch von Wasserstoff erhöhen. Diese Brennstoffanreicherung entspricht wie erwähnt einer Verringerung der Strahlung in den hier gezeigten Rechnungen.

Die zeitliche Evolution der Flammen wird gezeigt anhand zweier Isoflächen der Temperaturfluktuation T' . Die Isoflächen werden bei 50 % der Extrema der jeweiligen Felder gewählt, und die Abbildungen zeigen einen vergrößerten Ausschnitt des Rechengebiets von ca. $6.7r_{\text{start}}$. Diese Isoflächen sind transparent überlagert von zweidimensionalen Schnitten senkrecht zu den Koordinatenachsen durch den Ursprung, auf welchen noch fünf Isolinien eingezeichnet sind. Die Farbpalette ist um null zentriert. Diese Art der Visualisierung ermöglicht Studien über das transiente räumliche Verhalten von anfänglich kugelsymmetrischen Flammen. Zusätzlich beschreiben sie die Musterbildung von Flammen, die instabil werden und in Teilflammen auffalten. Zu beachten ist, daß getrennte Strukturen in einer T' -Abbildung nur eine erste Abweichung von der Kugelsymmetrie aufzeigen und nicht notwendigerweise isolierten Flammenzellen entsprechen. Um dies zu verdeutlichen, sind in den Abb. 2.22 bzw. 2.23 die Isoflächen der Temperatur zu den Zeitpunkten $t = 12.2$, $t = 14.8$ für SF_{3d}.B bzw. $t = 4.7$ und $t = 6.5$ für SF_{3d}.D dargestellt. In den Abb. 2.24 bis 2.27 sind dann die Muster von T' für die Fälle SF_{3d}.A bis SF_{3d}.D abgebildet. SF_{3d}.E bleibt bis ans Ende der Rechenzeit kugelsymmetrisch und wird daher nicht gezeigt.

Abb. 2.24 zeigt SF_{3d}.D mit $r_{\text{start}} = 0.3$, $s = 2.07$ (s. Tab. 2.8), dargestellt sind die Felder zu den in Tab. 2.10 diskutierten Zeitschritten und zusätzlich bei Abbruch der Rechnung. Die Flamme bleibt nahezu kugelsymmetrisch bis $t = 4.7$ (Abb. 2.24a,b). Danach ($t = 5.3$, Abb. 2.24c) ist eine Deformation in einen Ellipsoid und ein Aufsplitten in zwei Zellen mit positivem T' und

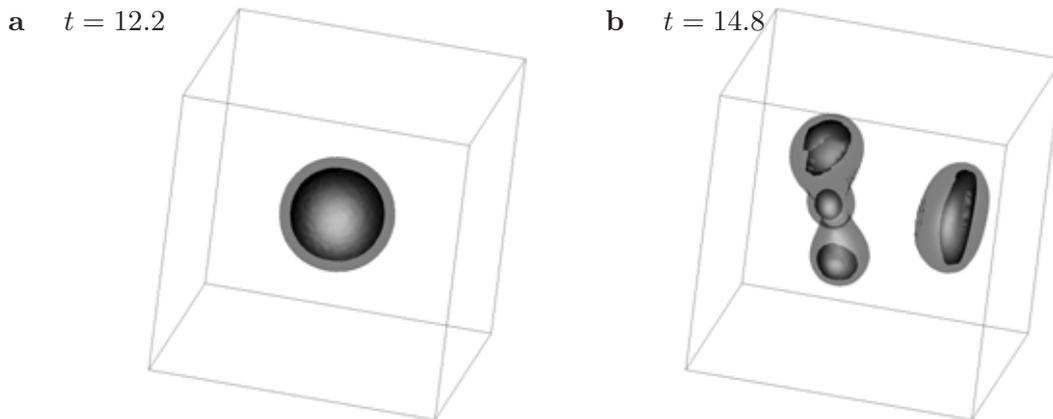


Abbildung 2.22: SF_{3d}.B: Zwei Isflächen, 60% und 90% des Temperaturmaximums. Dargestellt ist der zentrale Ausschnitt des Rechengebiets mit Seitenlänge $6.7r_{\text{start}}$. **a:** $t = 12.2$, **b:** $t = 14.8$.

zwei mit negativem T' ($t = 5.9$, Abb. 2.24d) zu beobachten. Die Temperatur T indes weicht erst zur Zeit $t = 6.5$ von der sphärischen Symmetrie ab (s. Abb. 2.23) und zeigt die Form eines Prolators.

Für einen Vergleich mit den theoretischen Überlegungen aus Abschnitt 2.2 ist zu beachten, daß das hier vorgestellte Modell Strahlungseinflüsse des Nah- und Fernfeldes berücksichtigt und die Stabilitätskurve inmitten der beiden theoretisch abgeleiteten liegt. Das endliche Rechengebiet sorgt dabei für eine leichte Verschiebung der Stabilitätskurve im Vergleich zu der in Abb. 2.2 ermittelten, die für ein unendliches bzw. sehr großes Gebiet abgeleitet worden ist. Eine Parameterkonstellation, die in einem unendlichen Gebiet einen stabilen *Flame Ball* ergeben würde, kann dann zu einer instabilen, auffaltenden Flammenstruktur führen. Im Falle von SF_{3d}.D erfolgt die Initiierung des Auffaltens entlang der bevorzugten Richtungen des Koordinatensystems, was an der sehr frühen Phase des Auffaltvorgangs gezeigt werden kann. Ein Blick entlang der Raumdiagonalen in Abb. 2.24f illustriert die leichte Abweichung von der Kugelsymmetrie, die von der Würfelform des Systems herrührt. Es entwickelt sich daraus jedoch das Muster, welches in den asymptotischen Analysen vorhergesagt wird (s. Abschnitt 2.2 und Abb. 2.24c-e) [58]. Dies spricht dafür, daß die Flamme instabil gegenüber einer dreidimensionalen Instabilität ist. Durch die leichte Verschiebung der Stabilitätskurve kann diese Parameterkonstellation aber trotzdem in einem unendlichen Gebiet zu einem stabilen *Flame Ball* führen.

In den Abb. 2.25 bis 2.27 sind die Isflächen von T' für die Fälle SF_{3d}.C, SF_{3d}.B und SF_{3d}.A zu zwei Zeitpunkten dargestellt, nachdem die Flammenstrukturen die Deformationsphase beendet haben. Die anfängliche Evolution bis $t/t_{\text{split}} = 0.9$ ähnelt der von SF_{3d}.D. Danach gibt es jedoch Abweichungen. Diese Flammen sind instabil gegenüber dreidimensionalen Störungen, und man beobachtet eine unterschiedliche Anzahl von Teilstrukturen nach dem Auffalten. Bei

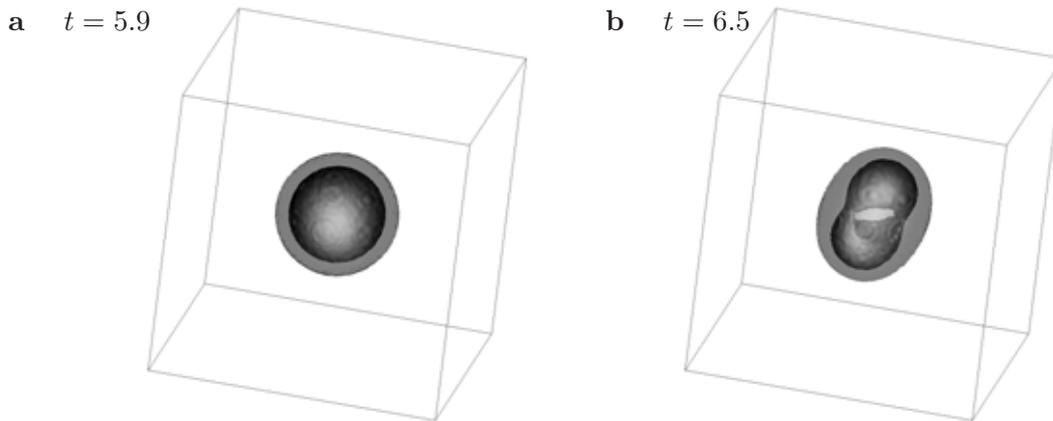


Abbildung 2.23: SF_{3d}.D: Zwei Isflächen, 60% und 90% des Temperaturmaximums. Dargestellt ist der zentrale Ausschnitt des Rechengebiets mit Seitenlänge $6.7r_{\text{start}}$. **a:** $t = 5.9$, **b:** $t = 6.5$.

einem Startradius von $r_{\text{start}} = 0.53$ (s. Abb. 2.25) bilden sich bei $t = 7.2$ zwei Zellen mit positiver Abweichung verglichen mit T_s . Für $r_{\text{start}} = 1.1$ (s. Abb. 2.26) erhält man vier solcher Zellen, während sich für $r_{\text{start}} = 2.7$ acht auseinander driftende Zellen bilden, wie aus Abb. 2.27 ersichtlich wird.

Für die letzten beiden Fälle beobachtet man zuerst bei ca. $t/t_{\text{split}} \approx 1.0$ ein Sinken der Temperatur entlang der Koordinatenachsen. Es bildet sich eine oktaederförmige Struktur von Zellen mit negativem T' (s. Abb. 2.26a, 2.27a). Später steigt die Temperatur lokal an, und Zellen mit positiver Abweichung von T_s bewegen sich nach außen in radialer Richtung. Zu beachten ist, daß allgemein zumindest eine kleine Störung notwendig ist, um die dreidimensionale Instabilität auszulösen. In den hier präsentierten Simulationen ist solch eine geringe Störung durch die kartesische Diskretisierung gegeben. Zu Beginn der Deformationsphase folgen die Flammen dieser kleinen Störung. Jedoch prägt die Physik den Flammen dann eine festgelegte Anzahl von Zellen auf. In einer Übergangsphase formt sich dann das generische Flammenmuster, welches keine bevorzugte Raumrichtung im kartesischen Koordinatensystem aufweist. Dies kann anhand der Ortsvektoren der Position der maximalen Temperatur in den endgültigen Mustern der Abb. 2.24b, 2.25b und 2.26b verdeutlicht werden. Diese Vektoren sind $\vec{x}(\omega_{\text{max}}) = (0.02, 0.25, -0.97)$, $(0.18, 0.78, 0.60)$ bzw. $(0.56, 0.67, 0.48)$ für SF_{3d}.D, SF_{3d}.C bzw. SF_{3d}.B. Die Zellen im Falle von SF_{3d}.B haben zusätzlich unterschiedliche Form und Größe. Einzige Ausnahme ist SF_{3d}.A mit einem Vektor von $\vec{x}(\omega_{\text{max}}) = (0.59, 0.57, 0.57)$ und acht entlang der Raumdiagonalen ausgerichteten Flammenstrukturen. In diesem Fall entspricht die Zahl der gebildeten Zellen zufällig der anfänglich gebildeten Struktur.

In den erwähnten Experimenten ergeben sich aus einer einzelnen Zündquelle eine mit dem Brennstoff-Massenbruch ansteigenden Zahl von *Flame Balls*. Die Evolution von einer transienten Zündbedingung zu stabilen Flammen kann mit einem Auffalten einer instabilen Flammen

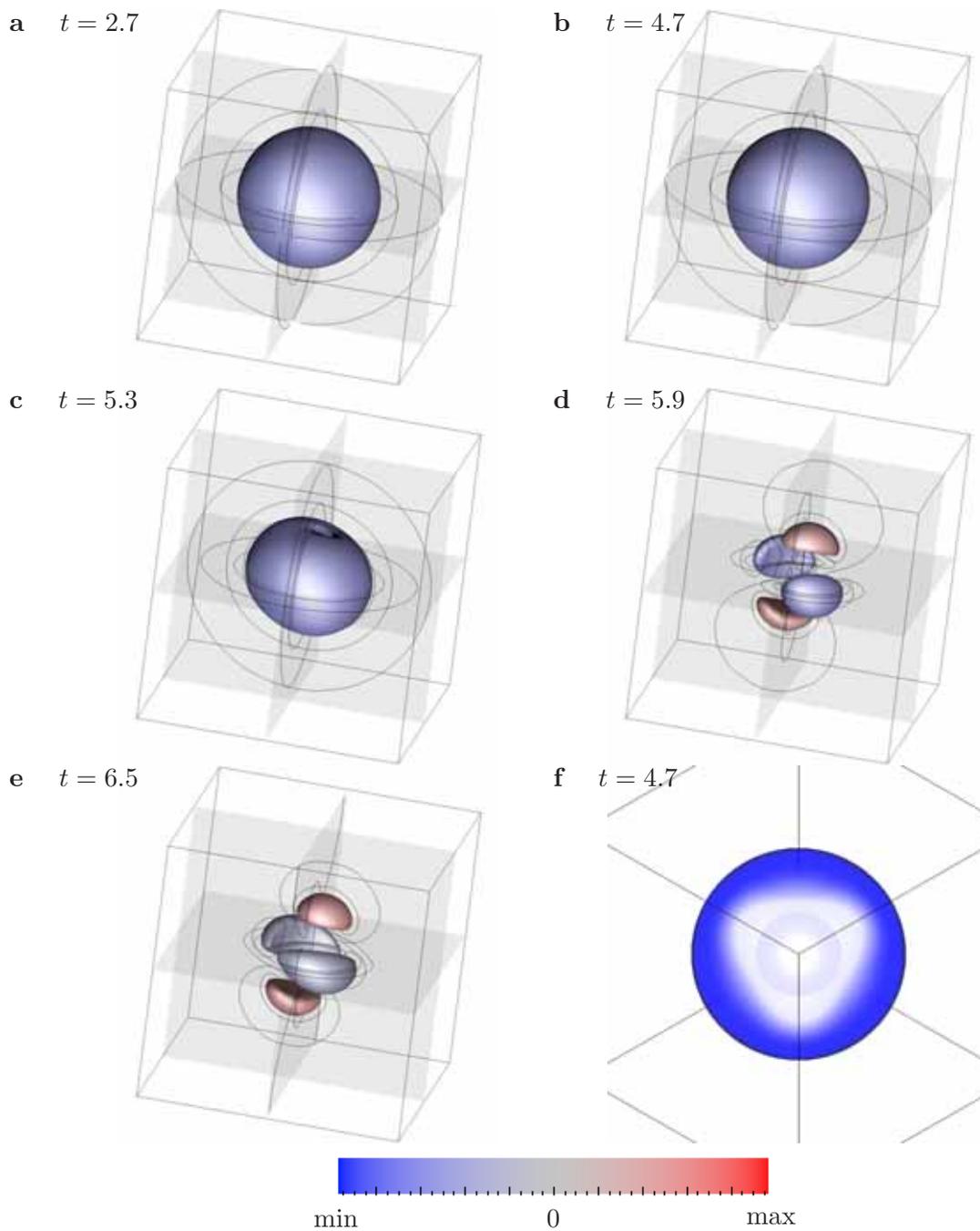


Abbildung 2.24: SF_{3d} .D: T' -Isoflächen bei 50% der Extrema von T' . Dargestellt ist der zentrale Ausschnitt des Rechengebiets mit Seitenlänge $6.7r_{\text{start}}$. Transparent überlagert: Schnitte senkrecht zu den Koordinatenachsen durch den Ursprung mit fünf Isolinien auf jeder Schnittebene. **a:** $t = 2.7$, **b:** $t = 4.7$, **c:** $t = 5.3$, **d:** $t = 5.9$ und **e:** $t = 6.5$. **f:** Blick entlang der Raumdiagonalen, $t = 4.7$.

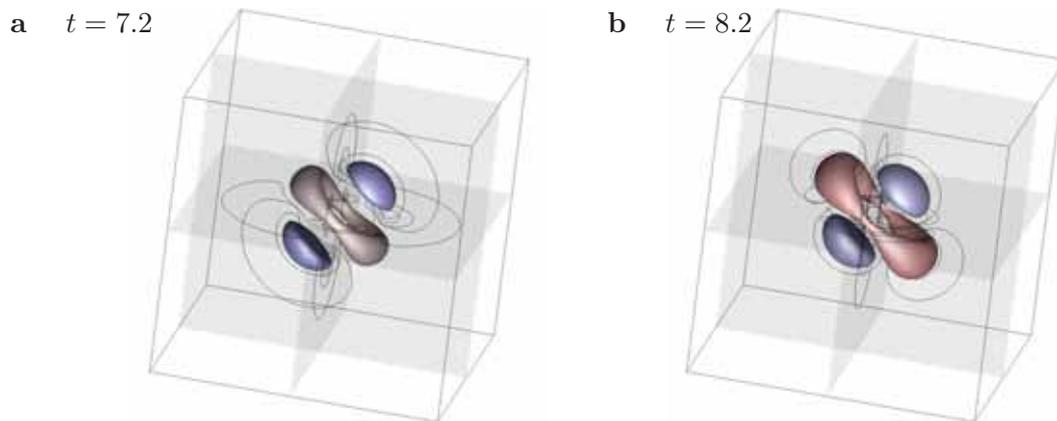


Abbildung 2.25: $SF_{3d}.C$: Intermediäres und endgültiges Muster. Darstellung analog zu Abb. 2.24. **a:** $t = 7.2$, **b:** $t = 8.2$.

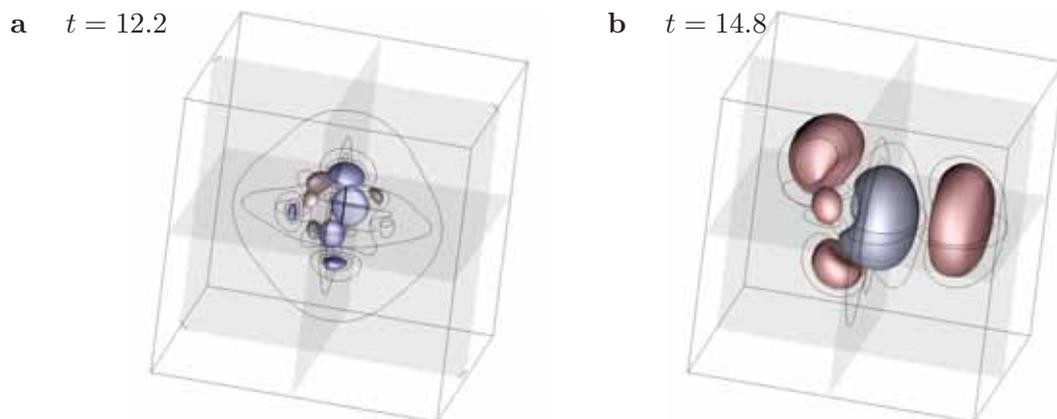


Abbildung 2.26: $SF_{3d}.B$: Intermediäres und endgültiges Muster. Darstellung analog zu Abb. 2.24. **a:** $t = 12.2$, **b:** $t = 14.8$.

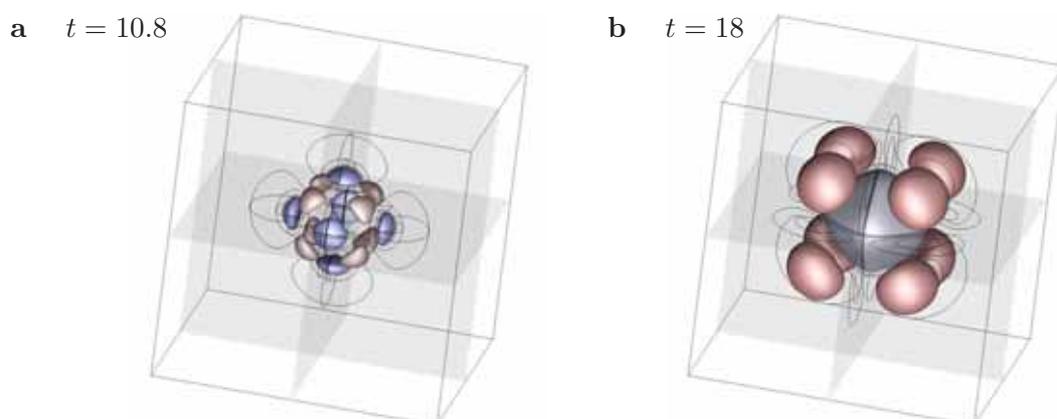


Abbildung 2.27: $SF_{3d}.A$: Intermediäres und endgültiges Muster. Darstellung analog zu Abb. 2.24. **a:** $t = 10.8$, **b:** $t = 18.0$.

Tabelle 2.11: Charakterisierung der Flammenstabilität: Zeitpunkte des Anstiegs der integralen Reaktionsrate und des Aufsplittens in Teilstrukturen; Verhältnis des „scatter“ von Y' , Zahl gebildeter Zellen und Flammenverhalten unter einer anderen Störung. Die Wertungen ++ bis -- deuten auf intrinsische Stabilität bzw. Instabilität hin.

	$\omega_{\text{int}}(t)$ $t_{\omega\uparrow} > t_{\text{diff}}$	$(\nabla^2 T'(t))_{\text{max}}$ $t_{\text{split}} > t_{\text{diff}}$	<i>scatter</i> $\Delta Y'_{\text{rand}} > \Delta Y'_{\text{front}}$	Muster Bezug zu [106]	andere Störung
SF _{3d} .A	–	--	--	--	--
SF _{3d} .B	±	--	--	--	--
SF _{3d} .C	+	+	–	±	–
SF _{3d} .D	+	++	±	+	+
SF _{3d} .E	++	++	++	++	++

in mehrere Einzelstrukturen qualitativ verglichen werden. In beiden Fällen nimmt die Zahl von Zellen mit einem ansteigenden Verhältnis von Wärmeproduktion zu Wärmeverlust zu. Dies ist erklärbar analog zum Mechanismus der thermo-diffusiven Instabilität von planaren Flammenfronten. Dort ist die bevorzugte Wellenzahl der Instabilität vorgegeben. Übertragen auf das hier verwendete System ergibt sich, daß die Zahl von gebildeten Zellen sich mit der Größe der anfänglichen Flammenstruktur erhöht. Mit anderen Worten, das Verhältnis des Flammenumfangs zu der bevorzugten Flammengröße steigt mit dem Radius an.

Weitere Simulationen, die hier nicht präsentiert werden, zeigen das transiente Verhalten dreier Flammen mit $r_{\text{start}} = 0.3$, $r_{\text{start}} = 0.53$, bzw. $r_{\text{start}} = 2.7$ (analog zu SF_{3d}.D, SF_{3d}.C und SF_{3d}.A) bezüglich einer kleinen numerischen Störung. Im Falle von $r_{\text{start}} = 0.3$ erhält man dabei eine um die stationäre sphärische Lösung oszillierende Flamme, während in den anderen beiden Fällen ein ähnliches Verhalten wie oben dargestellt gefunden wird. Dies ist ein weiteres Argument dafür, daß die Flamme mit $r_{\text{start}} = 0.3$ in einem unbegrenzten Gebiet eine stationäre sphärische Flamme ergibt.

2.5.7 Dreidimensionale Stabilitätsgrenze

Tab. 2.11 faßt die gezeigten Ergebnisse zu den fünf untersuchten Flammen zusammen. Aus diesen Erkenntnissen kann geschlossen werden, daß die größeren Flammen mit Startradien von $r_{\text{start}} = 2.7$ und $r_{\text{start}} = 1.1$ instabil gegenüber dreidimensionalen Instabilitäten sind. Es hat sich gezeigt, daß sie nicht vom Rand oder von einem numerischen Fehler signifikanter Größe beeinflußt werden. Das gebildete Muster stimmt qualitativ mit experimentellen Ergebnissen überein. Die Flammen mit $r_{\text{start}} = 0.53$ und $r_{\text{start}} = 0.30$ leben relativ lange, sind schließlich jedoch instabil in einem begrenzten Rechengebiet. Sie werden daher quasi-stabile Flammen

genannt, auch wenn es Indizien dafür gibt, daß zumindest letztere in einem unbegrenzten Gebiet stabil ist. Die Flamme mit $r_{\text{start}} = 0.16$ kann eindeutig als stabiler *Flame Ball* bezeichnet werden, da innerhalb eines sehr langen Zeitraums kein Hinweis auf eine Instabilität entdeckt werden kann.

Es ist bereits darauf hingewiesen worden, daß die Stabilitätsgrenze bezüglich eindimensionaler Störungen für das hier verwendete Strahlungsmodell zwischen den beiden in der Literatur verwendeten Teilmodellen der Strahlung liegt. Nimmt man die Nahfeldverluste als Ausgangspunkt, verschiebt sich diese Stabilitätsgrenze nach rechts oben, wenn Fernfeldverluste zugelassen werden. Analog verschiebt sich die Stabilitätsgrenze bezüglich dreidimensionaler Störungen nach links oben. Daraus kann die Position der Stabilitätsgrenze zwischen $r = 0.53$ und $r = 0.30$ geschätzt werden.

2.6 Diskussion

Dieses Kapitel umfaßt numerische Simulationen, die die Untersuchung der Stabilität von mageren Vormischflammen unter Ausschluß von Auftriebsströmungen zum Gegenstand haben. Das thermo-diffusive Modell mit einer Arrhenius-Kinetik und einem Stefan–Boltzmann-Strahlungsmodell wird angewendet, um das transiente Verhalten von sphärisch symmetrischen Flammenstrukturen zu untersuchen. Um die Ergebnisse mit theoretischen und experimentellen Daten aus der Literatur vergleichen zu können, sind die wesentlichen Inhalte der aktuellen Forschung auf diesem Gebiet wiederholt und in die hier verwendete Formulierung der Gleichungen transformiert worden. Zusätzlich sind die veränderten Bedingungen durch den Strahlungsterm mit einer linearen Stabilitätsanalyse direkt in die Ergebnisse eingeflossen. Dabei interessieren vor allem stationäre Flammen und deren Stabilitätsverhalten gegenüber ein- und dreidimensionalen Störungen.

Numerische Simulationen unter Annahme von Kugelsymmetrie nutzen einen eindimensionalen Code. Dabei wird insbesondere der Einfluß der Anfangsprofile, der anfänglichen Größe und des Strahlungskoeffizienten diskutiert. Dreidimensionale Effekte werden hierbei außer Acht gelassen. Die Simulationen zeigen langsam wachsende, verlöschende, oszillierende und stationäre Flammen [101]. Die Stabilitätsgrenze als Funktion des anfänglichen Flammenradius und des Strahlungskoeffizienten ergibt ein Bifurkationsdiagramm, welches die hohe Sensitivität – von der auch Experimente unter Mikrogravitationsbedingungen berichten – der Flammenstrukturen gegenüber den Anfangsbedingungen aufzeigt. Die Stabilitätskurve kann auf diesem Wege bestimmt werden. Sie charakterisiert das System mit dieser Art von Strahlungsmodell vollständig. Entsprechend der theoretischen Ableitungen liegt die Kurve genau zwischen den beiden Kurven der Theorie, die nur je einen Teil der Strahlung abdecken [22, 23]. Darüber hinaus wird die eindimensionale Stabilitätsgrenze gut beschrieben. Für kleine Strahlungskoeffizienten wird

keine Stabilitätsgrenze beobachtet, da das System dreidimensionale Störungen wegen der Kugelsymmetrie nicht beinhaltet. Die Ergebnisse stimmen außerdem qualitativ mit Experimenten überein, in denen zwar ein anderer Parameter, dadurch jedoch ebenfalls das Verhältnis von Wärmeproduktion und Wärmeverlust verändert worden ist [106]. Die asymptotischen Profile des Massenbruchs stimmen mit den abgeleiteten überein, d.h. sie zeigen einen $1/r$ -Verlauf. Der Temperaturverlauf unterscheidet sich jedoch von dem aus der einschlägigen Literatur, dies kann aber auf das Strahlungsmodell zurückgeführt werden. Eine lineare Analyse liefert hier eine modifizierte Bessel-Funktion als Lösung, die mit den numerischen Ergebnissen sehr gut vereinbar ist. Im Flammenzentrum weist die Temperatur das parabolische Profil auf, welches auch in der Literatur gefunden wird [22].

Zur Illustration der Instationarität der Flammen ist, analog zu den kugelsymmetrischen Betrachtungen, in drei Dimensionen zuerst von einer aus der Literatur motivierten Anfangsbedingung ausgegangen worden. Dies ist nur für eine begrenzte Zahl von Parameterkonstellationen und aufgrund der hohen Zahl leicht abgewandelt erfolgt. Der numerische Aufwand kann anhand eines hochauflösenden, dreidimensionalen und parallelisierten Codes hoher Ordnung bewältigt werden. Aufgeprägte Störungen dienen als Modell für natürliche Abweichungen von der Kugelsymmetrie und erklären das instationäre Verhalten der Flammen. Gezeigt wird die Evolution ausgehend von der typischen Verformung der Flammen an der dreidimensionalen Stabilitätsgrenze. Man erkennt bei Lewis-Zahlen von eins das Fehlen einer thermo-diffusiven Instabilität, so daß eine Relaxation zur Kugelform stattfindet. Hingegen teilen sich bei kleineren Lewis-Zahlen die Flammen gemäß den Vorhersagen von experimentellen und theoretischen Untersuchungen auf und zerteilen sich schrittweise in mehrere Flammenstrukturen [20, 105]. Weiterhin kann gezeigt werden, daß aus solchen Störungen auch quasi-stabile Flammen hervorgehen können. Auch bei Vorhandensein einer thermo-diffusiven Instabilität erkennt man ein sich änderndes Verhalten, je nachdem auf welcher Seite der Stabilitätskurve man sich befindet.

Schließlich sind fünf ausgewählte, kugelsymmetrisch stabile Flammen auf dreidimensionale Stabilität geprüft worden, indem die stationären Profile aus den eindimensionalen Simulationen als Startbedingung verwendet worden sind. Aufgrund der räumlichen Steifheit des Problems ist eine nicht-lineare Koordinatentransformation notwendig, um gleichzeitig die enge Flammenfront aufzulösen und das Fernfeld mittels eines genügend großen Rechengebiets zu repräsentieren und so Randeffekte auszuschließen. Die Einschränkung auf ein begrenztes Rechengebiet macht es notwendig, die Untersuchungen genau zu analysieren, um Probleme durch eine ungenügende Auflösung und durch Randeffekte ausschließen zu können. Für die fünf diskutierten Flammen werden unterschiedliche typische Phänomene magerer Vormischflammen gefunden. Dabei kann für die größeren Flammenstrukturen bei geringerem Strahlungseinfluß ein Auffalten mit einer steigenden Zahl von Teilstrukturen beobachtet werden. Dies ist gut mit experimentellen Beobachtungen solcher Flammen unter Mikrogravitationsbedingungen verein-

bar [106]. Flammen mittleren Radius erleben eine Deformation in eine Prolatorgeometrie und zeigen ein Aufteilen in zwei Zellen. Dieses Verhalten entspricht der Vorhersage durch analytische Untersuchungen in der Nähe der Stabilitätsgrenze für isolierte Flammen, d.h. in einem unbegrenzten Gebiet [20]. Jedoch ist es nicht eindeutig festzustellen, ob das Auffalten von einer physikalischen oder systeminduzierten Instabilität herrührt. Das bedeutet, daß die dreidimensionale Stabilitätsgrenze nicht auf einen bestimmten Punkt in der Stabilitätskurve, sondern „nur“ einem Intervall zwischen $r \approx [0.3; 0.5]$ zugeordnet werden kann. Dieser Bereich paßt sich aber gut an die Ergebnisse der analytischen und experimentellen Untersuchungen an. In Experimenten umfaßt das Größenspektrum stabiler Flammen ca. eine Größenordnung von etwa 0.1 bis 1 cm. Bei Verwendung des theoretisch abgeleiteten Zeldovich-Radius von $r_{z,th} = 0.031$ wäre die Stabilitätsgrenze hier dann bei ca. 0.31 zu suchen. Sehr kleine Flammen mit Größen kleiner als die Flammendicke liefern schließlich stationäre Flammen. Die hier gezeigten Simulationen zeigen die ersten Simulationen eines stabilen *Flame Ball* in drei Dimensionen.

Zusammenfassend kann festgestellt werden, daß das vorgestellte numerische Modell sehr gut geeignet ist, magere Vormischflammen in Abwesenheit der Konvektion zu beschreiben. Kugelsymmetrische Effekte wie die asymptotischen Profile, die Stabilitätskurve inklusive eindimensionale Stabilitätsgrenze [23] können erklärt werden. Dreidimensionale und richtungsabhängige Effekte wie die Musterbildung [105] können nur mit mehrdimensionalen Untersuchungen studiert werden. In neueren Studien ist zum Beispiel eine homogene Umgebung der Flamme angenommen worden, um Wechselwirkungen zwischen den Flammen zu untersuchen [34], wobei dann wieder Kugelsymmetrie vorausgesetzt wird. Das hier vorgestellte Modell erlaubt darüber hinaus Studien der Wechselwirkung bestimmter Flammen mit bestimmter Form oder Größe ohne die Annahme der Homogenität. In naher Zukunft sind bei steigender Rechenkapazität auch Untersuchungen mit komplexerer chemischer Kinetik [80] und Strahlungsmodellen möglich. Ebenso ist die Verwendung von temperaturabhängigen Transportkoeffizienten, die eine leichte Verschiebung der Stabilitätskurve bewirken können, bei expliziter Betrachtung der Diffusionsterme unproblematisch.

Kapitel 3 Untersuchung der Vermischung in wirbelbehafteten Strömungen



In the context of turbulent flows, a continuing major challenge to research is to develop methodologies (using the ever increasing available computer power) to calculate the flow and turbulence properties of practical relevance in engineering, atmospheric sciences . . . There is a broad range of turbulent flow problems, varying in geometrical complexity, many involving additional physical and chemical processes . . . While the computational cost of DNS precludes its use for high-Reynolds-number flows, it provides invaluable information for the development and testing of other approaches. [95]

Gegenstand dieses Kapitels ist die Untersuchung der Vermischung in mehrdimensionalen Strömungen, die langlebige Wirbelstrukturen beinhalten. Hierbei wird unter isothermen Bedingungen auch die Wechselwirkung mit chemischen Reaktionen studiert. Ein Teil der im folgenden dargestellten Ergebnisse sind publiziert worden [15, 14, 55, 53, 57].

3.1 Einführung

3.1.1 Numerische Simulationsmethoden zur Beschreibung turbulenter Strömungen

In industriellen Prozessen finden Vermischung und chemische Reaktion vorrangig unter turbulenten Strömungsbedingungen statt. Besonders bei exothermen Reaktionen bildet ein grundlegendes Verständnis von Strömung, Vermischung und chemischer Reaktion sowie deren Wechselwirkung die Basis für die Auslegung chemischer Reaktoren und erlaubt die Optimierung des Betriebsablaufs in technischen Prozessen. Komplementär zu Laborexperimenten ermöglichen numerische Simulationen relativ einfach zielgerichtete Studien bestimmter Konfigurationen und Parameterbereiche ohne großen apparativen bzw. sicherheitstechnischen Aufwand [10]. Grundlage hierfür bildet die detaillierte mathematische Modellierung der physikalischen

und chemischen Prozesse anhand von Systemen nicht-linearer partieller Differentialgleichungen (Navier–Stokes- und Stofftransportgleichungen). Präzise numerische Methoden aus dem Bereich des wissenschaftlichen Rechnens bieten anschließend die Möglichkeit, das instationäre und zumeist turbulente Strömungsverhalten zu simulieren. Aufgrund des großen Spektrums von Orts- und Zeitskalen ist jedoch eine vereinfachende Modellierung der physikalischen und chemischen Vorgänge bei der numerischen Simulation unumgänglich.

Gegenwärtig existierende Modelle vernachlässigen häufig wesentliche Informationen. Beispielsweise wird in der Strömungsdynamik das intermittente Verhalten kohärenter Wirbelstrukturen in statistischen Modellen nicht bzw. nur unzureichend berücksichtigt. Gerade solche kohärenten Strukturen, die einen Großteil der Turbulenzenergie in Strömungen beinhalten, sind jedoch als wesentliche Einflußgrößen für skalaren Transport und Intermittenz in turbulenten Strömungen charakterisiert worden [81, 123].

In der Hierarchie der Modellierung turbulenter Strömungen stellen

- die Reynolds-gemittelten Erhaltungsgleichungen (RANS) zusammen mit statistischen Turbulenzmodellen (z.B. k - ϵ -Modell⁶) zur Bestimmung eines turbulenten Viskositätskoeffizienten den Ausgangspunkt dar. Hierbei wird eine stationäre, statistisch gemittelte Lösung bestimmt. Das transiente Verhalten der Wirbelstrukturen wird nicht berücksichtigt. Die Modellierung der nicht-linearen chemischen Reaktionsterme erfolgt meist mittels Momente-Methoden oder vorgegebenen Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen (PDF, *engl. probability density function*) [46]. Z.B. werden häufig abgeschnittene Gauß- oder Beta-Funktionen verwendet [62].
- Mit Hilfe der rechenintensiveren Large Eddy Simulation (LES) können instationäre Phänomene der Strömung erfaßt werden, indem die Evolution grober Strukturen bis zu einer bestimmten Abschneideskala deterministisch berechnet wird. Der Einfluß feinskaliger Komponenten, auf welchen gerade die molekulare Vermischung und damit die chemische Reaktion stattfinden, werden statistisch modelliert (z.B. Smagorinsky-Modell [111]), das intermittente Verhalten der Strömung wird nur bedingt wiedergegeben. Für reagierende Strömungen kommen hierbei instationäre PDF-Modelle zur Modellierung der chemischen Reaktion zum Einsatz, wobei die Mischung der Skalaren einer zusätzlichen Modellierung bedarf [93].
- Neben obigen Strömungsmodellen werden zudem rein statistische Modelle verwendet, die auf der Lösung von PDF-Transportgleichungen von Strömung und chemischer Spezies basieren. Die numerische Lösung dieser Transportgleichungen erfolgt meist mit Monte-Carlo-Methoden [94].

⁶In diesem Modell bedeutet k die turbulente kinetische Energie der Strömung, die in dieser Arbeit mit E bezeichnet wird.

Mit der ständig wachsenden Rechenleistung und Speicherkapazität heutiger Computer gewinnt die DNS (s. Abschnitt 1.2) zur Durchführung grundlegender wissenschaftlicher Studien zunehmend an Bedeutung [93]. Für beschränkte Parameterbereiche und einfache Geometrien kann die DNS für reagierende Strömungen angewendet werden. Mit Hilfe der DNS können in gezielter Weise numerische Experimente durchgeführt werden, die modellfrei das intermittente Verhalten der Strömung voll berücksichtigen und somit tiefgehende und neue Einblicke in die Wirkungsweise turbulenter Strömungen ermöglichen. Zudem kann z.B. gezielt der Einfluß kohärenter Strukturen untersucht werden.

Die Problematik besteht darin, daß die modellfreie Simulation turbulenter Strömungen sehr rechenintensiv ist. Die turbulenten Größenverhältnisse müssen komplett aufgelöst werden. Um dies zu erreichen, sind in jeder Raumdimension $N \sim Re^{d/4}$ Gitterpunkte ($d = 2, 3$) notwendig. Die Zahl der Zeitschritte steigt proportional zu \sqrt{Re} . Die noch einzuführende Reynolds-Zahl Re nimmt dabei mit der Turbulenzintensität zu. Das bedeutet, daß zur Simulation turbulenter Strömungen eine große Zahl von Gleichungen beachtet werden muß. Der enorme Rechenaufwand kann nur mit Hilfe moderner Supercomputer und effizienter numerischer Methoden bewältigt werden. Die größten Auflösungen, die hiermit erzeugt werden können, liegen bei etwa 2048^3 Gitterpunkten für eine Strömungsrechnung. In dieser Arbeit werden Simulationen mit bis zu 256^3 Gitterpunkten und fünf chemischen Spezies gerechnet.

3.1.2 Turbulenz

In einer Strömung wirken zwischen den einzelnen Volumenelementen eines viskosen Fluids sowohl Zähigkeits- als auch Trägheitskräfte [124]. Je nach dem Verhältnis der beiden Kräfte bilden sich verschiedene Strömungsarten aus. Man unterscheidet zwischen laminarer und turbulenter Strömung und einem instabilen Übergangsbereich [37]. Der Übergang von laminarer zu turbulenter Strömung kann anhand der Reynolds-Zahl charakterisiert werden. Unterhalb einer kritischen Reynolds-Zahl beobachtet man laminare Bedingungen. Bei niedrigen Fließgeschwindigkeiten bewegen sich die von der Strömung transportierten Größen entlang festgelegter Bahnen, den Stromlinien, in einzelnen Fluidschichten. Der Impuls-, Wärme- und Stoffaustausch zwischen den Schichten findet nur durch diffusive Prozesse wie Reibung, Wärmeleitung bzw. Stoffdiffusion statt. Steigt die Strömungsgeschwindigkeit an, so reichen die viskosen Kräfte nicht aus, die kinetische Energie zwischen den Fluidschichten zu transportieren. Im Bereich von Störungen bilden sich aufgrund von Instabilitäten Wirbel aus, um die destabilisierenden Trägheitskräfte zu kompensieren [59]. In einem Übergangsbereich klingen die Wirbel im weiteren Verlauf des Flusses wieder ab. Bei noch höheren Geschwindigkeiten klingen die Störungen nicht ab, sondern schaukeln sich auf und breiten sich über das ganze Gebiet aus. Dies ist die Strömungsart der voll ausgebildeten Turbulenz.

Unter Turbulenz (*lat. turbulentus: unruhig, Unruhe erregend*) versteht man eine wirbelbe-

haftete, instationäre, regellose, dreidimensionale Strömung [63, 95]. Die transportierten Größen (Impuls, Stoffmenge einer Spezies i , Temperatur) unterliegen zufälligen Schwankungen in Raum und Zeit und zeigen chaotisches Verhalten. Viele der Eigenschaften werden auch in zweidimensionalen Strömungen gefunden, so daß viele Autoren auch von zweidimensionaler Turbulenz sprechen [75]. Da jedoch in zwei Dimensionen die Wirbelstärke senkrecht auf dem Geschwindigkeitsfeld steht, entfällt das Phänomen der Wirbelstreckung, die ein wesentliches Charakteristikum dreidimensionaler Turbulenz ist [48]. Die Streckung der Wirbelstärkegradienten ist jedoch zu sehen.

Trotz des chaotischen Verhaltens der Geschwindigkeit sind in turbulenten Strömungen immer wieder Bereiche vorzufinden, in denen über längere Zeit bzw. längeren Weg die Bewegung ähnlich bleibt. Es handelt sich hierbei um das Phänomen der Kohärenz. Kohärente Strukturen sind Wirbelkonfigurationen, die über mehrere Wirbelumdrehungen existieren [43]. In ihnen ist der Großteil der kinetischen Energie der Strömung enthalten, weshalb ihnen große Bedeutung in der Dynamik der Turbulenz zukommt [42]. Aufgrund des zufälligen konvektiven Stofftransports zeichnen sich turbulente Strömungen durch erheblich verbesserte Vermischungseigenschaften aller transportierten Größen im Vergleich zu laminaren Strömungen aus [113, 89, 95].

Theoretisch ist eine Strömung bei Kenntnis der Anfangs- und Randbedingungen deterministisch bestimmt [48]. In realen Systemen turbulenter Strömungen ist die Kenntnis dieser Bedingungen häufig fehlerbehaftet und unvollständig, so daß Störungen auftreten können. In Zusammenhang mit der Nicht-Linearität der Transportgleichungen entsteht das scheinbar regellose Verhalten der physikalischen Größen, was eine exakte Beschreibung solcher Systeme extrem schwierig macht [61, 95]. Bedingt durch die chaotischen Schwankungen der von der Strömung transportierten Größen verwendet man zur Beschreibung turbulenter Systeme statistische Größen. Diese gemittelten Größen liefern oft ausreichende Informationen, um einen Prozeß auszulegen und zu optimieren.

3.1.3 Mischung

Die Homogenisierung von Gasen und Flüssigkeiten ist eine der ältesten und gleichzeitig wichtige Grundoperationen der Verfahrenstechnik. Sie wird in fast allen Prozessen der chemischen Industrie, in der Verbrennungstechnik aber auch in der pharmazeutischen und Lebensmittelindustrie sowohl als Vorstufe zur chemischen Reaktion als auch mit gleichzeitig ablaufenden chemischen Reaktionen eingesetzt. Experimentelle und theoretische Forschungsarbeiten haben bisher zwar zur relativ genauen Voraussage des Leistungseintrags und der sich in Mischern einstellenden Strömungsfelder geführt, die Vorhersage von darin ablaufenden homogenen chemischen Reaktionen ist aber ungenau. Sie erfolgt bisher über die Angabe von Mischzeiten, welche auf experimentellem Wege für die jeweils eingesetzten Mischapparate ermittelt werden und zudem von den dabei eingesetzten Meßmethoden abhängen. Ziel zukünftiger Arbeiten wird

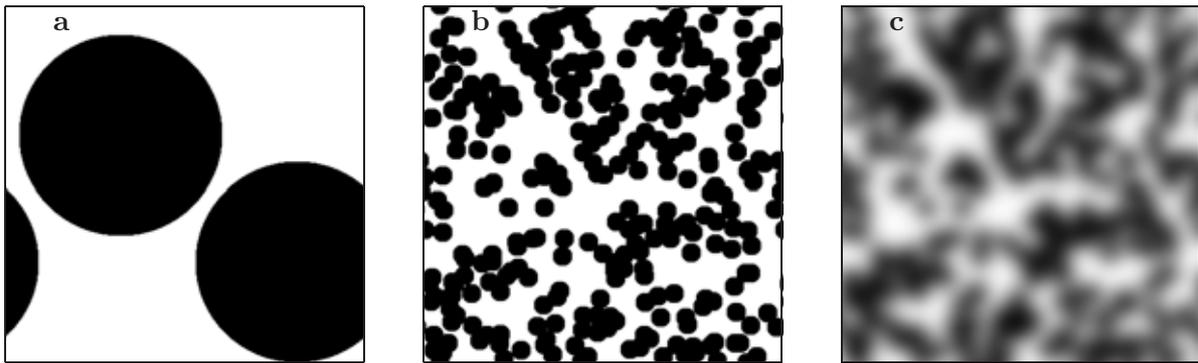


Abbildung 3.1: Teilschritte bei der Vermischung chemischer Spezies. **a:** Verteilung des Massenbruchs durch Konvektion im Volumen, **b:** Deformation der Strukturen und Vergrößerung der Grenzlinie, **c:** Verringerung der Varianz des Massenbruchs.

sein, die Wirkung der im makroskopischen Maßstab ablaufenden Transportprozesse auf die in Bereichen mikroskopischer Zeit- und Ortsskalen ablaufenden Transport- und Umwandlungsvorgänge zu berechnen, so daß Ausbeuten und Selektivitäten chemischer Reaktionen prognostiziert werden können. Dies ist jedoch äußerst schwierig, denn die auf mikroskopischen Orts- und Zeitskalen ablaufenden Ausgleichsvorgänge lassen sich durch konstruktive Maßnahmen bei der Apparategestaltung nur in makroskopischen Maßstäben beeinflussen. Die Wirksamkeit der oben angegebenen Mischeinrichtungen ist daher stark von der Apparategröße abhängig. An Apparaten in Laborgröße erzielte experimentelle Ergebnisse lassen sich bisher nur mit sehr eingeschränkter Gültigkeit auf solche in Betriebsgröße übertragen.

Abb. 3.1 erläutert die physikalischen Vorgänge bei der Mischung. Beim homogenen Vermischen von zwei Gasen unterschiedlicher Zusammensetzung oder von zwei ineinander löslichen Flüssigkeiten, von denen einzelne Komponenten eine homogene chemische Reaktion eingehen, können die schematisch dargestellten drei Teilschritte unterschieden werden [82, 122]:

- Einzelne Teilvolumina des Gases oder der Flüssigkeit, charakterisiert durch ihren Massenbruch, werden im gesamten Mischer durch konvektiven Transport verteilt. Die Volumenelemente bleiben erhalten, sie werden lediglich infolge der viskosen Reibung im Strömungsfeld deformiert. Die örtlichen Massenbruch-Unterschiede zwischen den Teilvolumina bleiben bestehen (s. Abb. 3.1a).
- Die linearen Abmessungen der Volumenelemente werden je nach Viskosität der Fluide durch molekularen oder turbulenten Impulsaustausch reduziert. Dabei nimmt die Größe Teilvolumina bis auf einen Grenzwert ab (s. Abb. 3.1b), der den Übergang von der Makro- zur Mikrovermischung kennzeichnet. Die beiden Vorgänge werden zusammen als Makrovermischung bezeichnet und sind nach Ablauf der Makromischzeit beendet.

- Unterhalb der Grenzgröße unvermischter Volumenelemente, die durch die turbulenten Schwankungsbewegungen nicht weiter zerteilbar sind, wird der weitere Massenbruchausgleich allein durch molekulare Diffusion verursacht. Je größer die durch Konstruktion und Betriebsweise des Mischapparates beeinflussbaren turbulenten Schwankungen sind, desto kleiner sind die lokalen Abmessungen nach beendeter Makrovermischung und um so schneller findet der diffusive Massenbruchausgleich während des Mikrovermischens statt. Hierfür wird die Mikromischzeit benötigt (s. Abb. 3.1c).

Sind die beschriebenen Vorgänge von homogenen chemischen Reaktionen zwischen zwei oder mehr Komponenten überlagert, so hängen die umgesetzten Reaktionsströme stark vom Fortschritt der Vermischung ab. Dies gilt, wenn die Mikromischzeit von gleicher Größenordnung oder größer als die der Zeitskala der chemischen Reaktion ist. Auf experimentellem Wege sind Mikromischzeiten durch Zugabe von reagierenden Stoffen in den Mischer zugänglich, wenn konkurrierende Reaktionen eingegangen werden. Aus dem Produktverhältnis lassen sich dann Aussagen über die Mikromischung ableiten. Verwendete Reaktionssysteme sind z.B. eine Konsekutivreaktion im Verlauf der Diazo-Kopplung von 1-Naphthol mit Sulfanilsäure [5, 6] oder Parallelreaktionen [121, 122]. Die Meßmethode mit konkurrierenden Reaktionen setzt eine ideale Mikrovermischung voraus. Dies wird durch sehr kleine Massenströme erreicht. Trotzdem wandert eine optisch erkennbare Reaktionswolke durch den Mischer, so daß nur eine schlechte räumliche Zuordnung für gemessene Mikromischzeiten möglich ist. Für laminare Mischvorgänge kann diese Technik nicht eingesetzt werden. Die Mikrovermischung läuft dann zu langsam ab, so daß Reaktanten während der Mikrovermischung durch große Bereiche des Rührgefäßes transportiert werden und keine Aussagen über die örtliche Mikromischgüte möglich sind.

3.1.4 Gliederung des Kapitels

Im nächsten Abschnitt werden die numerischen Grundlagen zur Untersuchung des Vermischungsverhaltens von Fluiden in wirbelbehafteten Strömungen bereitgestellt. Anschließend werden die Ergebnisse gezeigt. In einem ersten Schritt werden die Simulationen in zwei Dimensionen durchgeführt. Beispiele für weitgehend zweidimensionale Strömungen findet man in der Ozeanographie und Meteorologie. Zweidimensionale Untersuchungen haben den Vorteil geringerer Komplexität, so daß gezielte Parameterstudien möglich sind. Dies wird erreicht, indem verschiedene typische Wirbelstrukturen auf ihre Vermischungseigenschaften hin geprüft werden und der Einfluß der Kennzahlen genau studiert wird. Die Untersuchung dreidimensionaler Strömungen erfolgt zum einen anhand einer zweidimensionalen Struktur, die in der dritten Dimension gestört ist, so daß Aussagen über die Dreidimensionalität der Strömung möglich sind. Zum anderen wird ein Strömungsfeld mit dreidimensionaler Turbulenz untersucht. Im letzten Abschnitt wird die Wechselwirkung von chemischen Reaktionen mit der Vermischung anhand zweier Beispiele untersucht.

3.2 Physikalisches und mathematisches Modell

3.2.1 Erhaltungsgleichungen zur Beschreibung von Vermischung in wirbelbehafteten Strömungen

Mathematisch kann die zeitliche und räumliche Evolution fluider Systeme mit den Transport- oder Bilanzgleichungen von Impuls, gesamter Masse, Enthalpie und Stoffmenge jeder Spezies beschrieben werden. Es handelt sich hierbei um gekoppelte, nicht-lineare partielle Differentialgleichungen, die bei komplexen physikalischen Systemen ohne Vereinfachungen nur in wenigen Fällen lösbar sind. Im folgenden werden die Bedingungen bzw. Annahmen erläutert, die an das hier verwendete System gestellt werden:

- Die Fluide sind inkompressibel. Zusätzlich wird eine konstante Dichte $\tilde{\rho}$ vorausgesetzt. Infolgedessen reduziert sich die Kontinuitätsgleichung, d.h. die Erhaltungsgleichung für die gesamte Masse, zu Gleichung (3.2), die die Divergenzfreiheit der Geschwindigkeit $\vec{v} = (\tilde{v}_1, \tilde{v}_2, \tilde{v}_3)$ verlangt.
- Untersucht werden einphasige viskose Fluide. Die Impulserhaltung kann dann anhand der Navier–Stokes-Gleichungen (3.1) beschrieben werden. Das System ist frei von äußeren Spannungs- und Volumenkräften. Der Umwandlungsterm in (3.1) beinhaltet lediglich Impulsänderungen durch die Kräfte, die durch den äußeren Druck \tilde{p} auf bilanzierte Kontrollvolumen wirken.
- Im Vordergrund des Kapitels stehen v.a. Effekte der Vermischung. Temperaturänderungen werden vernachlässigt. Die Lösung der Enthalpietransportgleichung entfällt daher.
- Die zeitliche Entwicklung des Massenbruchs spiegelt sich in den Stofftransportgleichungen (3.3) wider. Sie sind hier als Bilanzen der Massenbrüche \tilde{Y}_i für jede Spezies i geschrieben und beinhalten die j chemischen Reaktionen mit den Umwandlungsgeschwindigkeiten $\tilde{\omega}_j$ als Quelle bzw. Senke, in die die Spezies i mit dem stöchiometrischen Koeffizienten ν_{ij} und den Reaktionsordnungen σ_{ij} eingehen. Der Reaktionsgeschwindigkeitskoeffizient der Reaktion j wird mit \tilde{k}_j bezeichnet.
- Für die diffusiven Effekte der Reibung und der Stoffdiffusion werden die empirischen Gesetze von Newton bzw. Fick mit konstanten Transportkoeffizienten angenommen. Für die Reibung ist dies der dynamische Viskositätskoeffizient $\tilde{\mu}$ und für die Stoffdiffusion der Diffusionskoeffizient \tilde{D}_i einer Spezies i . Des weiteren gibt es keine Überlagerungseffekte.

Diese Annahmen schlagen sich im folgenden Gleichungssystem nieder, welches unter geeigneten Anfangs- und Randbedingungen lösbar ist. Das Gleichungssystem stellt die Navier–Stokes-Gleichungen in der Notation der sog. primitiven Variablen Geschwindigkeit und Druck dar.

$$\partial_t \vec{v} + \vec{v} \cdot \tilde{\nabla} \vec{v} - \frac{\tilde{\mu}}{\tilde{\rho}} \tilde{\nabla}^2 \vec{v} + \frac{1}{\tilde{\rho}} \tilde{\nabla} \tilde{p} = 0 \quad , \quad (3.1)$$

$$\tilde{\nabla} \cdot \tilde{\vec{v}} = 0 \quad , \quad (3.2)$$

$$\partial_t \tilde{Y}_i + \tilde{\vec{v}} \cdot \tilde{\nabla} \tilde{Y}_i - \tilde{D}_i \tilde{\nabla}^2 \tilde{Y}_i = \sum_j \nu_{ij} \tilde{\omega}_j \quad , \quad (3.3)$$

$$\tilde{\omega}_j = \tilde{k}_j \prod_i \tilde{Y}_i^{o_{ij}} \quad . \quad (3.4)$$

Die Gleichungen (3.1)–(3.4) sind dimensionsbehaftet. Um sie dimensionslos zu machen, werden zur Normierung Referenzgrößen verwendet. In dieser Arbeit wird sowohl die zeitliche Entwicklung einzelner Wirbel als auch die turbulenter Strömungen diskutiert. Für diese Vorgehensweisen werden in der Literatur unterschiedliche Referenzgrößen vorgeschlagen. Die Simulationen basieren jedoch auf vergleichbaren dimensionsbehafteten Größen, die so gewählt worden sind, daß sie eine Gasströmung beschreiben können (s. [57]). Daher wird hier eine einheitliche Definition dieser Referenzgrößen verwendet, eine Diskussion der speziellen Definitionen erfolgt in den folgenden Abschnitten.

$$\tilde{v}_{\text{ref}} = (\tilde{v}_l)_{\text{max}} \quad , \quad \tilde{x}_{\text{ref}} = \tilde{\Lambda} \quad , \quad \tilde{Y}_{i,\text{ref}} = \tilde{Y}_{A,\text{max}} \quad (3.5)$$

In Zusammenhang mit einem chemischen Prozeß ist man unter anderem an den Stoff-, Energie- und Impulsströmen interessiert, um optimale Betriebsbedingungen für einen chemischen Reaktor zu finden. Diese Ströme sind von den physikalischen Größen und von den Abmessungen des Reaktors abhängig. Bildet man die Verhältnisse geeigneter Größen, erhält man dimensionslose Kenngrößen, anhand derer man einen Prozeß unabhängig von den Systemabmessungen charakterisieren kann (Ähnlichkeitstheorie) [59]. Dadurch wird ein „scale-up“ vom Laborreaktor über Zwischenstufen erheblich vereinfacht. Des weiteren können verschiedene Systeme anhand der dimensionslosen Kenngrößen verglichen werden [4]. Typischerweise definiert man als Kenngrößen die Reynolds-Zahl Re , die Schmidt-Zahl Sc_i für jede Spezies i und die Damköhler-Zahl erster Art Da_j für jede chemische Reaktion j .

$$Re = \frac{\tilde{v}_{\text{ref}} \tilde{x}_{\text{ref}} \tilde{\rho}}{\tilde{\mu}} \quad , \quad Sc_i = \frac{\tilde{\mu}}{\tilde{\rho} \tilde{D}_i} \quad , \quad Da_j = \tilde{k}_j \frac{\tilde{x}_{\text{ref}}}{\tilde{v}_{\text{ref}}} \quad . \quad (3.6)$$

Die Reynolds-Zahl liefert eine Aussage über die Art der Strömung. Sie ist eine Maßzahl für das Verhältnis von konvektivem Impulstransport zu diffusivem Impulstransport durch Reibung. Turbulenz liegt bei hohen Re vor. Die Schmidt-Zahl ist ein Maß für das Verhältnis von viskoser Reibung zu diffusivem Stofftransport, die Damköhler-Zahl skaliert die Geschwindigkeit der chemischen Reaktionen mit einer charakteristischen Zeit, die bei der hier gewählten Betrachtungsweise aus einer Systemabmessung und der Geschwindigkeit ermittelt wird.

Diese Referenzgrößen führen zu dem dimensionslosen Gleichungssystem

$$\partial_t \vec{v} + \vec{v} \cdot \nabla \vec{v} - \frac{1}{Re} \nabla^2 \vec{v} + \frac{1}{\rho} \nabla p = 0 \quad , \quad (3.7)$$

$$\nabla \cdot \vec{v} = 0 \quad , \quad (3.8)$$

$$\partial_t Y_i + \vec{v} \cdot \nabla Y_i - \frac{1}{Re Sc_i} \nabla^2 Y_i = \sum_j \nu_{ij} \omega_j \quad , \quad (3.9)$$

$$\omega_j = Da_j \prod_i Y_i^{o_{ij}} . \quad (3.10)$$

Die Gleichungen werden in einem quadratischen bzw. kubischen Rechengebiet mit Seitenlänge $\Lambda = 1$ unter periodischen Randbedingungen für jede Größe gelöst. Die Anfangsbedingungen werden in den folgenden Abschnitten explizit aufgeführt. Abstrakt können diese Bedingungen mit Hilfe von (1.2) in mehreren Dimensionen formuliert werden.

Die Navier–Stokes-Gleichungen (3.7)–(3.8) sind unter den angeführten Voraussetzungen nicht an die Stofftransportgleichungen (3.9) gekoppelt und können separat gelöst werden. Zur Lösung der letzteren ist die Kenntnis des Geschwindigkeitsfeldes notwendig, das sich aus den Navier–Stokes-Gleichungen ergibt. Insofern sind die Stofftransportgleichungen an die Bewegungsgleichungen gekoppelt. Dieser Einfluß der Strömung auf die Vermischung und die chemische Reaktion wird in dieser Arbeit untersucht und diskutiert.

3.2.2 Wirbelstärke

Typischerweise beobachtet man in turbulenten Strömungen die Ausbildung von Wirbeln [63], die allgemein sich drehende Bewegungen eines Fluids um eine Achse bezeichnen. Zur Beschreibung solcher rotationsbehafteter Strömungen führt man als vektorielle Größe die Wirbelstärke \vec{w} ein, die definiert ist als die Rotation der Geschwindigkeit (3.11).

$$\vec{w} = \nabla \times \vec{v} = \begin{vmatrix} \vec{e}_1 & \vec{e}_2 & \vec{e}_3 \\ \partial_{x_1} & \partial_{x_2} & \partial_{x_3} \\ v_1 & v_2 & v_3 \end{vmatrix} = \begin{pmatrix} \partial_{x_2} v_3 - \partial_{x_3} v_2 \\ \partial_{x_3} v_1 - \partial_{x_1} v_3 \\ \partial_{x_1} v_2 - \partial_{x_2} v_1 \end{pmatrix} , \quad (3.11)$$

Dabei sind $\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3$ die Einheitsvektoren im kartesischen Koordinatensystem.

In zweidimensionalen Systemen reduziert sich der Wirbelstärkevektor zu einem Pseudo-Skalar, da keine Abhängigkeit von x_3 vorliegt und die Geschwindigkeit $v_3 = 0$ ist. Dieser steht senkrecht auf der x_1x_2 -Ebene des Geschwindigkeitsfeldes und besitzt den Wert der w_3 -Komponente. Kennt man das Wirbelstärkefeld in inkompressiblen Strömungen, können die Geschwindigkeitskomponenten aus der Wirbelstärke mit (3.8) und (3.11) bis auf eine Potentialströmung „zurückgerechnet“ werden.

$$\vec{v} = -\nabla^{-2}(\nabla \times \vec{w}) = \frac{-1}{\partial_{x_1x_1} + \partial_{x_2x_2} + \partial_{x_3x_3}} \begin{vmatrix} \vec{e}_1 & \vec{e}_2 & \vec{e}_3 \\ \partial_{x_1} & \partial_{x_2} & \partial_{x_3} \\ w_1 & w_2 & w_3 \end{vmatrix} . \quad (3.12)$$

Die Wirbelstärke ist zur Beschreibung turbulenter und wirbelbehafteter Strömungen besser geeignet als die Geschwindigkeit, da in Wirbeln die Wirbelstärke sehr hoch und stark lokalisiert ist. Die Geschwindigkeit läßt solche Aussagen nicht zu, da sie z.B. in Wirbeln langsamer

abklingt. Die Wirbelstärke zeigt daher kompakter, in welchen Bereichen sich Turbulenz konzentriert. In zwei Dimensionen kommt dem hinzu, daß die Visualisierung und Analyse eines Skalarfeldes bedeutend einfacher ist als die eines Vektorfeldes.

3.2.3 Chemische Reaktionen

Ohne chemischen Quellterm sind die Massenbrüche der Stoffe i passive Skalare, d.h. die Evolution eines Skalars beeinflußt nicht die der anderen. Nach Lösung der Navier–Stokes-Gleichungen können dann die Differentialgleichungen der Massenbrüche in jedem Zeitschritt separat gelöst werden, indem man das Geschwindigkeitsfeld in (3.9) einsetzt und die Gleichungen für Y_i löst. Mit einem chemischen Quellterm sind die Differentialgleichungen für die Massenbrüche über die Reaktionsterme gekoppelt und müssen gemeinsam gelöst werden. Eine Rückwirkung auf das Strömungsfeld beobachtet man in diesem Fall nicht.

Der Einfluß der Strömung auf chemische Reaktionen soll anhand zweier verschiedener Reaktionssysteme untersucht werden. Das erste besteht in einer irreversiblen, isothermen Ein-Schritt-Reaktion zweier Spezies A und B zu einem Produkt P. Die Reaktionsgeschwindigkeit ω kann nach (3.10) mit einem Ansatz zweiter Ordnung beschrieben werden.



$$\omega = DaY_A Y_B \quad (3.14)$$

Ein solcher Ansatz eignet sich zur Analyse der Kopplung von Vermischung und chemischer Reaktion, da die Reaktionsgeschwindigkeit nur an den Orten große Wert besitzt, wo A und B lokalisiert sind [86].

Ein zweites System besteht in einer Parallel-Konsequativ-Reaktion nach folgenden Reaktionsgleichungen



$$\omega_1 = Da_1 Y_A Y_B \quad (3.17)$$

$$\omega_2 = Da_2 Y_A Y_P \quad , \quad (3.18)$$

wobei die erste Reaktion schneller sei als die zweite ($Da_1 > Da_2$). Dieses Reaktionssystem stellt eine Art autokatalysierte Reaktion dar, die in vielen technischen Anwendungen eine Rolle spielt (z.B. in biochemischen Systemen) und vielfach in der Literatur diskutiert wird [29, 122, 28].

3.2.4 Numerik

Zur numerischen Lösung müssen die Gleichungen (3.8)–(3.10) im Ort und in der Zeit in geeigneter Weise diskretisiert werden [108, 57]. Die Zeitdiskretisierung wird mit Hilfe finiter

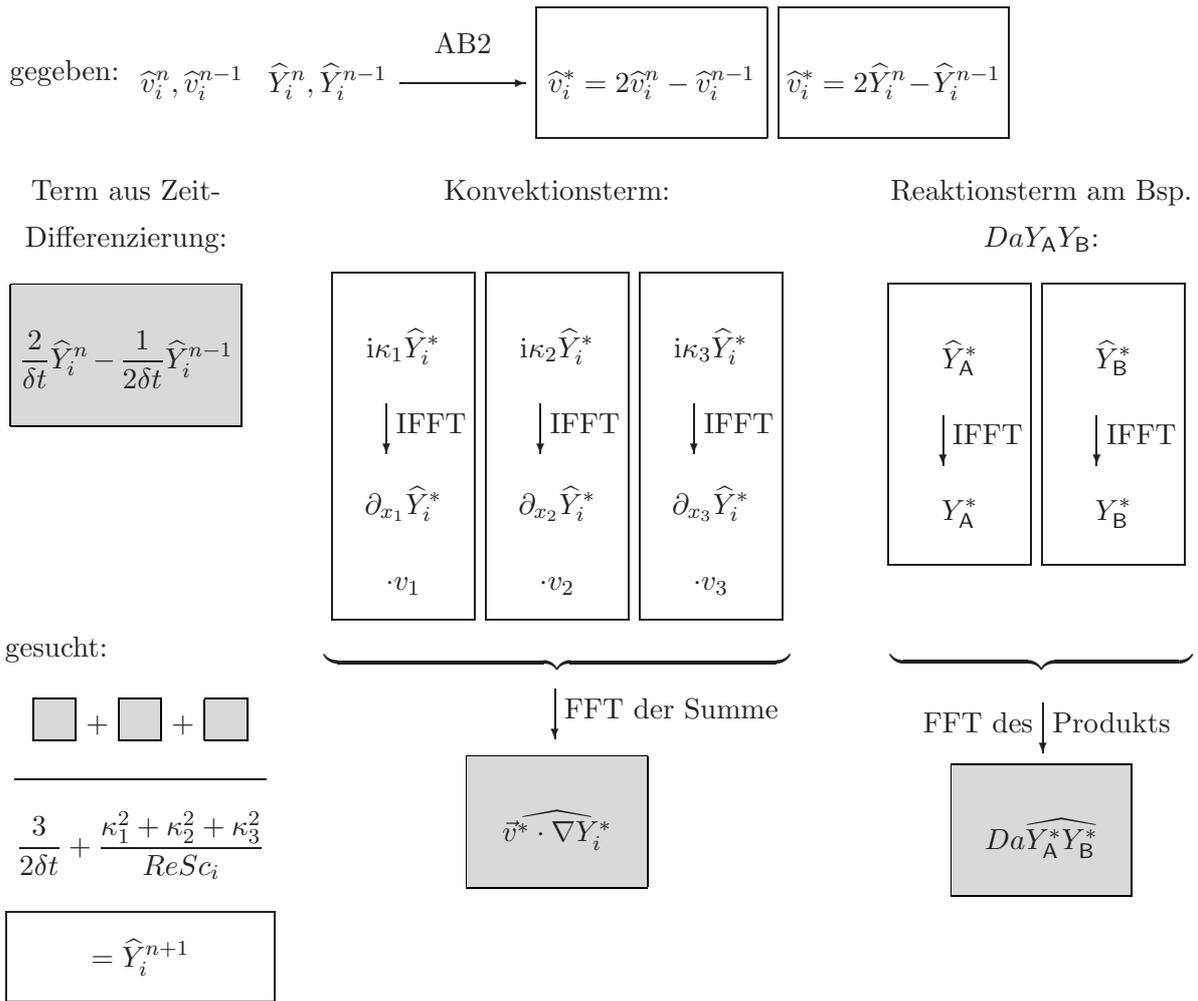


Abbildung 3.2: Schaubild zur numerischen Lösung der Massenbruchgleichung. Die Geschwindigkeiten $\widehat{v}_i^n, \widehat{v}_i^{n-1}$ sind gegeben.

Differenzen durchgeführt. Für die numerische Lösung wird das in Abschnitt 1.3.2 gezeigte semi-implizite Verfahren zweiter Ordnung (EB2/AB2) angewendet, welches die Vorteile eines expliziten mit denen eines impliziten Verfahrens kombiniert [108]. Aufgrund des stabilisierenden Einflusses des impliziten Verfahrens muß die Zeitschrittweite nicht so klein gewählt werden wie bei einem rein expliziten Verfahren. Dies bedeutet, daß die Zahl der Rechenschritte bezüglich der zeitlichen Auflösung relativ klein gehalten werden kann. Zusätzlich verringert sich der Rechenaufwand bei der Lösung der Gleichung durch die Anwendung des expliziten Verfahrens für den nicht-linearen Term. Die Ortsdiskretisierung erfolgt mit Hilfe der in Abschnitt 1.3.1 dargestellten Spektralmethoden. Für das relativ einfache Beispiel in Abschnitt 1.3.2 ist die diskrete Gleichung diskutiert worden. Hier soll die numerische Lösung anhand des Schaubildes 3.2 für den Massenbruch illustriert werden. Die Lösung der Geschwindigkeitsgleichung erfolgt zur Einsparung von FFTs anhand von [7].

Die Skalierung des Codes kann wieder abgeschätzt werden, indem der Anteil der FFT an der Gesamtrechenzeit bei serieller Ausführung des Codes durch ein *profiling* ermittelt wird (s. auch Tab. 2.4). Für diesen Fall wurde hierzu eine Test-Rechnung mit 64^3 -Auflösung auf einem Prozessor ausgeführt. Man erhält auf der IBM RS/6000 SMP einen Anteil von 30.4% und auf dem VBT PC-Cluster einen von 61.0% an der gesamten Rechenzeit.

3.2.5 Forcing

Falls kein Quellterm in der Impulserhaltungsgleichung zur Verfügung steht, sind Strömungen innerhalb periodischer Randbedingungen durch ein Abklingen der Energie gekennzeichnet. Ein solcher ist in den Navier–Stokes-Gleichungen (3.7) nicht enthalten. Um statistisch stationäre Turbulenz zu erhalten, wird in der numerischen Simulation daher häufig als künstliche Methode zur Erhöhung der Energie das *forcing* verwendet [95]. Dabei wird der Strömung auf groben Skalen Energie zugeführt, wofür mehrere Methoden existieren [41]. Nach einer Modellvorstellung wird dadurch den großen Wirbelstrukturen Energie zugeführt. In den hier präsentierten Simulationen mit dreidimensionaler Turbulenz erfolgt die Energiezufuhr ähnlich zu einer Methode von [67], welche die Energie in einem Frequenzband konstant hält. Dabei kann das Problem von unnatürlich eingefrorener Helizität im Geschwindigkeitsfeld auftreten [41]. Um dieses Problem möglichst zu vermeiden und den Rechenaufwand gering zu halten, wird in dieser Arbeit die Energie, die in der Wellenzahl $\kappa = 8\pi$ beinhaltet ist, alle 50 Zeitschritte auf das Ausgangsniveau angehoben, indem alle Fourier-Koeffizienten auf diesem Frequenzband mit der Wurzel des Energieverhältnisses skaliert werden. Dazwischen kann sich das Geschwindigkeitsfeld natürlicherweise entwickeln. Die Kontinuitätsgleichung ist dadurch per se eingehalten. Die statistischen Eigenschaften des Geschwindigkeitsfeldes bleiben ebenso erhalten.

Bei einem *forcing* in zweidimensionalen Strömungen entsteht das Problem, daß aufgrund der inversen Energiekaskade die Energie auf den groben Skalen ansteigt. Dieses Problem kann durch einen zusätzlichen, künstlichen Dissipationsterm auf den groben Skalen behoben werden. Die Viskosität ist jedoch bei den hier gezeigten zweidimensionalen Simulationen sehr hoch, so daß die Energie besonders im Vergleich zu den dreidimensionalen Berechnungen nur langsam abnimmt. Daher wird in den zweidimensionalen Strömungen auf ein *forcing* verzichtet.

3.2.6 Analysemethoden

Turbulente Strömungen sind wie erwähnt dreidimensional, instationär und zufällig. Seit Ende des 19. Jahrhunderts versuchen Wissenschaftler vergebens, Turbulenz analytisch oder mit einem Modell quantitativ zu beschreiben, so daß Turbulenz nicht exakt vorhergesagt werden kann. Werden Experimente aber häufig wiederholt und mittelt man über die Realisationen, können statistische Eigenschaften extrahiert werden [98]. Viele Turbulenzmodelle fußen auf dieser Ensemble-Mittelung und versuchen, das Phänomen auf diese Weise faßbar zu machen.

Statistische Beschreibung

In dieser Arbeit werden aufwendige Simulationen einzelner Realisationen solcher Experimente numerisch durchgeführt. Analog zu den Turbulenzmodellen werden statistische Größen ermittelt. Die Mittelung erfolgt hier über den Raum und nicht wie bei der Ensemble-Betrachtung über eine Vielzahl von Zufallsexperimenten. Eine Vertauschung von Ensemble- und Ortsmitteilung kann vorgenommen werden, wenn die Gültigkeit der Ergodizitäts-Hypothese angenommen wird [48].

Als statistische Größen werden die räumlichen Verteilungen der Größen in Form von Histogrammen ermittelt, die die Wahrscheinlichkeitsverteilungen bei der Ensemble-Mittelung approximieren und hier auch so genannt werden.

Die Wahrscheinlichkeitsverteilung einer stetigen Zufallsvariable φ kann mit Hilfe der PDF $\psi(\varphi)$ oder durch die entsprechende Verteilungsfunktion $\Psi(\varphi)$ vollständig beschrieben werden.

$$\Psi(\varphi) = \int_{-\infty}^{\varphi} \psi(\check{\varphi}) d\check{\varphi} \quad (3.19)$$

Der Wert $\Psi(\varphi)$ gibt die Wahrscheinlichkeit an, daß $\varphi \leq \check{\varphi}$ ist. Die PDF ist aufgrund des monotonen Anwachsens von $\Psi(\varphi)$ nie negativ, das Integral ist auf eins normiert [48].

In der PDF-Modellierung werden Transportgleichungen für solche PDFs aufgestellt, die zur Lösung verschiedene Schließungsansätze benötigen. Dabei wird entweder die Evolution der ganzen PDF berechnet, oder es werden zur Verminderung des Rechenaufwands vorgegebene Formen dieser verwendet. Breite Anwendung finden dabei die Beta-PDF ψ_β oder abgeschnittene Gauß-Funktionen ψ_G [62]. Beide haben gemeinsam, daß sie durch die ersten beiden Momente hinreichend definiert sind.

$$\psi_\beta(Y) = \frac{Y^{\beta_1-1}(1-Y)^{\beta_2-1}}{\int_0^1 \check{Y}^{\beta_1-1}(1-\check{Y})^{\beta_2-1} d\check{Y}} \quad Y \in [0; 1] , \quad (3.20)$$

$$\text{mit } \beta_1 = \bar{Y} \left(\frac{\bar{Y}(1-\bar{Y})}{\langle Y^2 \rangle} - 1 \right) \quad (3.21)$$

$$\beta_2 = (1-\bar{Y}) \left(\frac{\bar{Y}(1-\bar{Y})}{\langle Y^2 \rangle} - 1 \right) \quad (3.22)$$

$$\psi_G(Y) = \begin{cases} \int_{-\infty}^0 (2\pi\langle Y^2 \rangle)^{-\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{(\check{Y}-\bar{Y})^2}{2\langle Y^2 \rangle}\right) d\check{Y} & Y = 0 \\ (2\pi\langle Y^2 \rangle)^{-\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{(Y-\bar{Y})^2}{2\langle Y^2 \rangle}\right) & Y \in]0; 1[\\ \int_1^{\infty} (2\pi\langle Y^2 \rangle)^{-\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{(\check{Y}-\bar{Y})^2}{2\langle Y^2 \rangle}\right) d\check{Y} & Y = 1 \end{cases} \quad (3.23)$$

Durch die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion sind sämtliche Momente der Größe φ bestimmt, d.h. die PDF enthält die komplette statistische Information der Größe φ .

$$\overline{\varphi^m} = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi^m \psi(\varphi) d\varphi \quad \text{wobei } m \in \mathbb{N} \quad (3.24)$$

Beispielsweise ist der Mittelwert $\overline{\varphi}$ das erste Moment. In dieser Arbeit werden zentrierte Momente verwendet, die statt durch einen Strich durch eckige Klammern gekennzeichnet werden.

$$\langle \varphi^m \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} (\varphi - \overline{\varphi})^m \psi(\varphi) d\varphi \quad \text{wobei } m \in \mathbb{N} \quad (3.25)$$

Globale Mischungszeitskalen

Zur Klassifizierung verschiedener Prozesse bezüglich Effektivität und Geschwindigkeit benötigt man Aussagen über die zeitliche Abhängigkeit des Prozesses. Im folgenden soll als Beispielproblem die Vermischung zweier chemischer Spezies A und B in einem Strömungsfeld behandelt werden. Hier stellt sich zum Beispiel die Frage, wann A und B total vermischt sind, d.h. nach welcher Zeit der Massenbruch von A im ganzen Feld den Wert des Mittelwertes annimmt. Dies ist der Fall, wenn die ermittelte Varianz $\langle Y^2 \rangle$ des Massenbruchs von A null ist.

Häufig nähern sich Prozesse dem endgültigen Ziel $\lim_{t \rightarrow \infty} \langle Y^2(t) \rangle = 0$ asymptotisch, so daß sich als Mischzeit $t_{\text{mix}} = \infty$ ergeben würde. Eine Ordnung solcher Prozesse läßt sich auf diese Weise nicht aufstellen. Um aber niedrige Werte für $\langle Y^2(t) \rangle$ zu erhalten, sind extrem hohe Rechenzeiten notwendig, so daß eine funktionale Beschreibung von $\langle Y^2(t) \rangle$ von Vorteil ist.

Globale Zeitskalen können aus dem Abklingverhalten der Varianz des Massenbruchs ermittelt werden. In der Industrie werden hierzu häufig Grenzwerte für die Varianz festgelegt. Die Vermischung wird beispielsweise als abgeschlossen definiert, wenn $\langle Y^2 \rangle / \langle Y_0^2 \rangle \leq 5\%$. Die Mischzeit ergibt sich dann aus dem Zeitintervall, welches bis zum Erreichen dieses Zustandes verstreicht. Das Problem dieser Definition ist, daß der Weg bis dorthin überhaupt nicht berücksichtigt wird. Es erfolgt dann keine Unterscheidung der folgenden beiden Prozesse: Der eine sorgt für eine kontinuierliche Vermischung, so daß die Varianz gleichmäßig bis zum oben genannten Grenzwert abnimmt. Der andere sei charakterisiert durch eine schnelle anfängliche dann aber sich verlangsamende Vermischung. Der Verlauf der Varianz ist dann stärker gekrümmt. Gerade bei reagierenden Systemen kann dies zu Veränderungen im Umsatz bzw. in der Selektivität führen. Um die ganze zeitliche Entwicklung der Varianz zu berücksichtigen, wird die tatsächliche Varianzentwicklung in dieser Arbeit an ein exponentielles Abklingen derselben angenähert.

$$\langle Y^2(t) \rangle \sim \exp\left(-2\frac{t}{t_{\text{mix}}}\right). \quad (3.26)$$

Zum Vergleich von Mischungsprozessen führt man klassischerweise dabei die charakteristische Zeit t_{mix} für die Vermischung ein [32, 114]. Diese gibt den fiktiven Zeitpunkt eines vollständigen Massenbruchausgleichs unter der Voraussetzung an, daß die Vermischung zeitinvariant mit der

Anfangsgeschwindigkeit stattfindet. Für abklingende Exponentialfunktionen kann die charakteristische Zeit am Schnittpunkt einer Tangente an den Verlauf der Standardabweichung zur Zeit $t = 0$ mit der Zeitachse abgelesen werden. Ermittelt wird t_{mix} durch Approximation des tatsächlichen Varianzverlaufs an die Exponentialfunktion mittels linearer Regression.

Ist man an einer genaueren Betrachtung turbulenter Prozesse interessiert, reicht eine Beschreibung ausschließlich mit statistischen Größen teilweise nicht aus. Durch die Mittelung geht die örtliche Information bei Momenten erster und zweiter Ordnung verloren. Detaillierte Aussagen über kohärente Strukturen sind mit statistischen Methoden nicht möglich. Aussagen hierzu werden in dieser Arbeit durch Visualisierung der Massenbruchfelder in Verbindung mit den Wirbelstärkefeldern gemacht.

Spektrale Betrachtung

Turbulente Strömungen sind wirbelbehaftet, man beobachtet die Ausbildung kohärenter Strukturen, die sich in Raum und Zeit auf eine charakteristische Art entwickeln. Die Größe der Wirbel reicht dabei von der Systemabmessung, weshalb Turbulenz stark von Randbedingungen beeinflusst wird, bis auf die Ebene molekularer Austauschvorgänge. Aufgrund der Kohärenz und der Evolution der Wirbel erhält Turbulenz in Raum und Zeit „quasi-periodische“ Eigenschaften [63]. Ein erster Ansatz in [99] beschreibt, daß Energie durch die größten Abmessungen in das System eingeführt wird, diese Wirbel dann in kleinere zerfallen bis sie schließlich klein genug sind und die Reibung diese Wirbel vernichtet:

Big whorls have little whorls, which feed on their velocity; And little whorls have lesser whorls, and so on to viscosity (in the molecular sense). [99]

Die verschiedenen Längenskalen solcher Wirbelstrukturen können anhand der Autokorrelationsfunktion ermittelt werden. Die Quasi-Periodizität im Ort führt zu einer Modellvorstellung, Turbulenz anhand von Wellenzahlen \vec{k} im spektralen Raum zu beschreiben.⁷ Die oben genannten Längenskalen entsprechen im Fourier-Raum charakteristischen Wellenzahlen, die folgendermaßen zusammenhängen

$$\kappa = \frac{2\pi}{l} \quad , \quad (3.27)$$

wobei zu beachten ist, daß Wirbel einer bestimmten Größe nicht genau einer Wellenzahl zuzuschreiben sind. Dies wäre nur dann der Fall, wenn sich eine Wirbelstruktur sinusförmig unendlich im Ort ausdehnt. Eine begrenzte Struktur kann aber prinzipiell einem begrenzten Wellenzahlenbereich zugeschrieben werden.

⁷Analog kann man die zeitliche „Quasi-Periodizität“ durch Frequenzen charakterisieren.

Energie-Spektren

Eine wichtige Größe im Zusammenhang mit Turbulenz ist die kinetische Energie E der Strömung, die in der Strömungsdynamik meist als massenspezifische Größe angegeben wird. Man erhält sie durch Integration des Geschwindigkeitsquadrats über den Ort \vec{x} , oder durch die Parsevalsche Identität [31] durch Integration über die Wellenzahlen im Fourier-Raum.

$$E = \frac{1}{2V} \int |\vec{v}(\vec{x})|^2 d\vec{x} = \frac{1}{2} \int |\widehat{\vec{v}}(\vec{\kappa})|^2 d\vec{\kappa} \quad (3.28)$$

In homogener, isotroper Turbulenz – wie in dieser Arbeit betrachtet – ist die Energie nicht von der Richtung abhängig. Die Auftragung der spektralen Energieverteilung ergibt das eindimensionale Energiespektrum nach Taylor, der Fourier-Transformierten der Autokorrelationsfunktion. Numerisch kann dieses Spektrum durch die Summation der Energie auf den konzentrischen Kugelschalen der Größe $\kappa = |\vec{\kappa}| = \sqrt{\kappa_1^2 + \kappa_2^2 + \kappa_3^2} \in [\kappa - 1/2; \kappa + 1/2[$ ermittelt werden.

$$E(\kappa) = \frac{1}{2} \sum_{\kappa=|\vec{\kappa}|} |\widehat{\vec{v}}(\vec{\kappa})|^2 \quad (3.29)$$

Die Auftragung der spektralen Energieverteilung in Abhängigkeit von κ erfolgt meist doppelt logarithmisch. Dies ist dadurch motiviert, daß Potenzgesetze in dieser Auftragsweise Geraden mit Steigung des Exponenten ergeben. Die Form des Spektrums kann mit Hilfe der phänomenologischen Theorien von Kolmogorov [70, 71] für dreidimensionale Turbulenz bzw. von Kraichnan und Batchelor für zweidimensionale Turbulenz beschrieben werden [72, 9]. Hieraus ergeben sich Inertialbereiche, in denen der Verlauf mit Potenzgesetzen beschrieben werden kann. Die Verläufe der Spektren können laut der Modellvorstellung folgendermaßen physikalisch erklärt werden. In drei Dimensionen wird einer Strömung durch großskalige Wirbel Energie zugeführt. Entlang einer Energiekaskade geben diese in selbstähnlichen Prozessen – wie oben erwähnt – Energie an kleinere Wirbel weiter. Dies erfolgt bis zur Kolmogorov-Skala, bei der dann durch Dissipation die kinetische Energie in Reibung umgewandelt wird. Innerhalb des Inertialbereiches zwischen diesen beiden Skalen findet man ein Spektrum der Form $\kappa^{-5/3}$. Der Energietransport wird im physikalischen Raum durch den Zerfall größerer Strukturen durch Wirbelstreckung in kleinere bewirkt [99]. In zwei Dimensionen erfolgt der Energietransport zu größeren Wellenzahlen entlang der Enstrophiekaskade mit einem κ^{-3} -Spektrum. Die Enstrophie ist hierbei das Analogon der Energie für die Wirbelstärke. Der Transport entlang der Energiekaskade ($\kappa^{-5/3}$) erfolgt dagegen zu kleineren Wellenzahlen. Physikalisch gesehen werden die Wirbel entlang der Enstrophiekaskade langgezogen, so daß sich die Wellenzahl erhöht, entlang der Energiekaskade vereinigen sich die Wirbel zu großskaligen Strukturen, da die Wirbelstreckung hier nicht existiert.

Turbulente Skalen

In der Turbulenztheorie sind die integrale Längenskala l_Λ , bei der die Energie zugeführt wird, und die Kolmogorov-Skala l_η von Bedeutung [65]. Sie können aus dem Spektrum abgeleitet

werden.

$$l_\Lambda = \frac{3\pi}{4E} \int_{\kappa_0}^{\kappa_{\max}} \frac{E(\kappa)}{\kappa} d\kappa \quad , \quad l_\eta = \left(\frac{\mu^3}{\rho^3 \epsilon} \right)^{\frac{1}{4}} \quad (3.30)$$

Die Dissipationsrate ϵ ist definiert durch

$$\epsilon_{ij} = \frac{\mu}{\rho} \left\langle \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right\rangle \quad ; \quad \epsilon = \frac{\mu}{\rho} \langle \nabla v_1 \cdot \nabla v_1 + \nabla v_2 \cdot \nabla v_2 + \nabla v_3 \cdot \nabla v_3 \rangle \quad . \quad (3.31)$$

Zu beachten ist, daß die Definition der Dissipationsrate anhand des ersten Ausdrucks einen Tensor darstellt. In der Turbulenztheorie wird aber meist nur dessen Spur betrachtet, welche durch den zweiten Ausdruck repräsentiert ist. Aufgrund diffusiver Prozesse nimmt die Energie der Strömung monoton ab. Die zeitliche Ableitung der Energie beschreibt die Dissipationsrate, die ebenfalls aus dem Spektrum abgeleitet werden kann [48].

$$\epsilon = \partial_t E(t) = 2 \frac{\mu}{\rho} \sum_0^\infty \kappa^2 E(\kappa) \quad (3.32)$$

Der Rechenaufwand im Ort kann anhand des Verhältnisses der integralen und der Kolmogorov-Skala abgeleitet werden, welches mit der Reynolds-Zahl zunimmt:

$$\frac{l_\Lambda}{l_\eta} \sim Re^{d/4} \quad . \quad (3.33)$$

Analog zur integralen und Kolmogorov-Skala im Ort können für die großen bzw. kleinen Wirbel Zeitskalen definiert werden. Erstere wird meist als Wirbelumdrehungszeit interpretiert.

$$t_\Lambda = \frac{2E}{\epsilon} \quad , \quad t_\eta = \left(\frac{\mu}{\epsilon \rho} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (3.34)$$

Die bisher gezeigten Größen können analog zur Geschwindigkeit auch für Skalare wie den Massenbruch abgeleitet werden. Man erhält daraus eine dem Energiespektrum analoge Auftragung, die im folgenden Skalarspektrum genannt wird. Sie beschreibt die spektrale Verteilung der Varianz des Massenbruchs.

$$E_Y(\kappa) = \frac{1}{2} \sum_{\kappa=|\vec{\kappa}|} |\hat{Y}(\vec{\kappa})|^2 \quad (3.35)$$

In den Skalarspektren zeigen sich analog zur Enstrophiekaskade im Energiespektrum Bereiche, in denen selbstähnliche Prozesse ablaufen. Dabei ergeben sich in zwei wie in drei Dimensionen wieder Inertialbereiche. In Abb. 3.3 sind das Energiespektrum und die Skalarspektren des Massenbruchs schematisch für Schmidt-Zahlen von $Sc > 1$ bzw. $Sc < 1$ im nicht-reaktiven dreidimensionalen Fall, d.h. für passive Skalare, aufgetragen. Diese weisen in der doppelt logarithmischen Auftragung Geraden auf, die auf Kaskadenprozesse hindeuten. Die verschiedenen Inertialbereiche sind in Tab. 3.1 für zwei- und dreidimensionale Turbulenz zusammengefaßt.

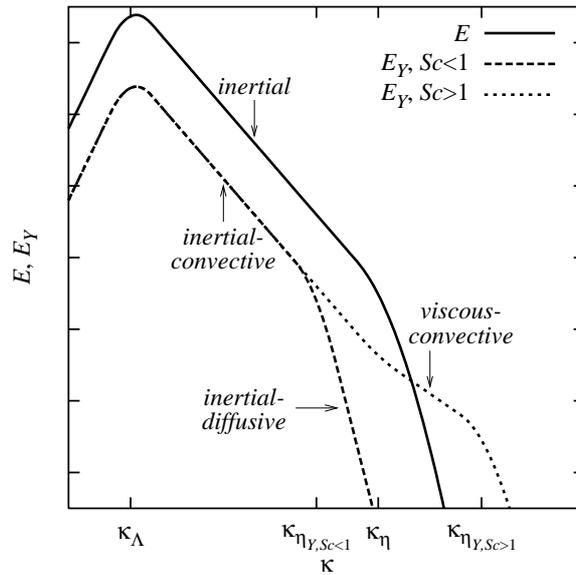


Abbildung 3.3: Schematische Darstellung des Energiespektrums und der Spektren für den Massenbruch für $Sc < 1$ bzw. $Sc > 1$ in dreidimensionaler Turbulenz [75].

Weitergehende Erklärungen der verschiedenen Kaskaden finden sich beispielsweise in [75]. Die Dissipation des Massenbruchs tritt bei der Batchelorskala l_{η_Y} ein. Analog zur Strömung können eine integrale t_{Λ_Y} und eine molekulare Zeitskala t_{η_Y} für die Vermischung definiert werden. Dabei findet man die skalare Dissipationsrate ϵ_Y , Y' beschreibt die lokale Abweichung des Massenbruchs vom Mittelwert. In dieser Arbeit werden hiervon nur die folgenden Größen benötigt

$$t_{\Lambda_Y} = \frac{2E_Y}{\epsilon_Y} \quad , \quad \epsilon_Y = D \langle \nabla Y' \cdot \nabla Y' \rangle = 2D \sum_0^{\infty} \kappa^2 E_Y(\kappa). \quad (3.36)$$

Tabelle 3.1: Inertialbereiche in den Energie- und Skalarspektren für zwei- und dreidimensionale Turbulenz.

Spektrum	κ -Bereich	Name	2D	3D
$E(\kappa)$	$[\kappa_{\Lambda} - \kappa_{\eta}]$	<i>inertial</i>	-3	-5/3
$E_Y(\kappa), Sc < 1$	$[\kappa_{\Lambda} - \kappa_{\eta_Y}]$	<i>inertial-convective</i>	-1	-5/3
	$[\kappa_{\eta_Y} - \infty]$	<i>inertial-diffusive</i>	-7	-17/3
$E_Y(\kappa), Sc > 1$	$[\kappa_{\Lambda} - \kappa_{\eta}]$	<i>inertial-convective</i>	-1	-5/3
	$[\kappa_{\eta} - \kappa_{\eta_Y}]$	<i>viscous-convective</i>	-1	-1

Tabelle 3.2: Parameter für sechs Strömungskonfigurationen; m bezeichnet die Wirbelanzahl.

Fall	m	$x_{1,1}$	$x_{1,2}$	$x_{1,3}$	$x_{2,1}$	$x_{2,2}$	$x_{2,3}$	$w_{\max,1}$	$w_{\max,2}$	$w_{\max,3}$	s_l
KW _{2d} .A	1	$\frac{3\Lambda}{8}$			$\frac{\Lambda}{2}$			62.74			$\frac{2}{\Lambda}$
KW _{2d} .B	2	$\frac{3\Lambda}{8}$	$\frac{5\Lambda}{8}$		$\frac{\Lambda}{2}$	$\frac{\Lambda}{2}$		62.74	-62.74		$\frac{2}{\Lambda}$
KW _{2d} .C	2	$\frac{3\Lambda}{8}$	$\frac{5\Lambda}{8}$		$\frac{\Lambda}{2}$	$\frac{\Lambda}{2}$		62.74	62.74		$\frac{2}{\Lambda}$
KW _{2d} .D	3	$\frac{3\Lambda}{8}$	$\frac{5\Lambda}{8}$	$\frac{5\Lambda}{8}$	$\frac{\Lambda}{2}$	$\frac{\Lambda}{2}$	$\frac{4+\sqrt{2}}{8}\Lambda$	62.74	62.74	-31.72	$\frac{2}{\Lambda}$
TS _{2d}		Voll ausgebildete Turbulenz						max. 70.30			

3.3 Kohärente Strukturen und Vermischung in zwei Dimensionen

In diesem Abschnitt wird der Einfluß von Wirbeln und deren Interaktion auf die Vermischung von passiven Skalaren untersucht [57]. Nach der Einführung der Anfangsbedingungen und der Parameter werden zuerst qualitativ die verschiedenen Mischungsprozesse der Wirbel beschrieben. Anschließend werden mit statistischen und spektralen Größen diese Vorgänge für nicht-reagierende Strömungen quantifiziert. Der Einfluß der Wirbelstrukturen auf die Vermischung wird nach Einführung der Anfangsbedingungen und Parameter anschaulich anhand der zeitlichen Evolution dreier Wirbel verdeutlicht, wobei auch der Einfluß der Schmidt-Zahl erörtert wird. Eine Quantifizierung der Vermischung erfolgt anschließend mit Hilfe von Mischungszeitskalen globaler Art.

3.3.1 Anfangsbedingungen und Parameter

Untersucht werden verschiedene Wirbelkonfigurationen. Die Wirbelfelder bestehen aus einer Superposition aus m Oseen-Wirbeln [3], die ein rotationssymmetrisches Gaußsches Profil der Wirbelstärke aufweisen:

$$w_0(x_1, x_2) = \sum_{\iota=1}^m w_{\max,\iota} \exp\left(-\frac{(x_1 - x_{1,\iota})^2 + (x_2 - x_{2,\iota})^2}{s_\iota^2}\right). \quad (3.37)$$

In Tab. 3.2 sind die Parameterwerte fünf verschiedener Strömungskonfigurationen KW_{2d}.A–TS_{2d}⁸ zusammengefaßt. KW_{2d}.A beschreibt einen isolierten Monopol, eine einfache, jedoch grundlegende kohärente Struktur in turbulenten Strömungen. Dieses Feld ähnelt einem Rührer in einem chemischen Reaktor. KW_{2d}.B und KW_{2d}.C sind homo- bzw. heterostrophe Dipole, die aus zwei gleich- bzw. gegensinnig rotierenden Wirbeln bestehen. Der Schwerpunkt homostropher Wirbel ist ein Fixpunkt im Strömungsfeld, während der von heterostrophen

⁸KW steht für kohärente Wirbelstruktur, TS für turbulente Strömung.

Wirbeln schnell durch das Gebiet wandert [38]. Ist die Distanz zwischen gleichsinnig rotierenden Wirbeln gering, verschmelzen sie innerhalb kurzer Zeit, gegensinnig rotierende Wirbel verschmelzen nicht. $KW_{2d}.D$ besteht aus zwei identischen linksdrehenden Wirbeln und aus einem schwächeren rechtsdrehenden. Nicht-viskose Punktwirbel in einem solchen Arrangement kollabieren in endlicher Zeit in denselben Punkt [78], d.h. diese Konfiguration gewährleistet ein schnelles Verschmelzen der korotierenden Wirbel. Das Verschmelzen beinhaltet eine generische nicht-lineare Interaktion in der Strömung [68], d.h. diese spezielle Positionierung der Wirbel erlaubt die Untersuchung dieser Art Wirbelinteraktion, da der dritte Wirbel die anderen beiden zusammendrückt und somit ihr Vereinigen beschleunigt. In turbulenten Strömungen steigt die Wahrscheinlichkeit der Verschmelzungsvorgänge mit der Wirbeldichte und somit mit der Reynolds-Zahl. Als Anwendungsbeispiele wird ein Strömungsfeld mit voll entwickelter Turbulenz untersucht, um das Verhalten der isolierten Strukturen auch realen Bedingungen zuzuordnen. Das Wirbelstärkefeld TS_{2d} entstammt einer statistischen Anfangsbedingung anhand Gaußscher Zufallszahlen, die mit einem Breitband-Energiespektrum versehen worden ist und sich dann mehrere Wirbelumdrehungen lang entwickelt hat [57]. Das entstehende Wirbelfeld ist für die Simulationen so skaliert worden, daß die Wirbelstärkewerte im gleichen Bereich sind wie bei den isolierten Strukturen ($KW_{2d}.A$ – $KW_{2d}.D$). Das Anfangsfeld (s. Abb. 3.4b) zeigt kohärente Strukturen, ist gut aufgelöst und hat ein κ^{-5} -Spektrum, was auch in vielen anderen Simulationen zu finden ist [75]. Zu beachten ist, daß in allen Fällen kein externes *forcing* betrieben wird, so daß die Energie monoton abnimmt.

Anhand dieser Wirbelkonfigurationen wird die Mischungsdynamik zweier anfänglich vollständig segregierter chemischer Spezies A und B mit gleicher Schmidt-Zahl untersucht. Um die unterschiedlichen Mischungsprozesse analysieren zu können, werden die Skalare in parallelen Streifen angeordnet. In Konfiguration *I* ist die Orientierung der Streifen vertikal, so daß die Grenze für $KW_{2d}.B$, $KW_{2d}.C$, und $KW_{2d}.D$ zwischen den Spezies zwischen den Wirbeln liegt. Diese Anfangsbedingung kann mit folgender Funktion beschrieben werden.

$$Y_{A,0}(x_1, x_2) = 1 - Y_{B,0}(x_1, x_2) = \begin{cases} 1 & 0 \leq x_1 < \frac{\Lambda}{2} \quad 0 \leq x_2 < \Lambda, \\ 0 & \frac{\Lambda}{2} \leq x_1 < \Lambda \quad 0 \leq x_2 < \Lambda. \end{cases} \quad (3.38)$$

Diese Anordnung dient des Studiums der Mischungsprozesse durch Wirbelverschmelzung. Konfiguration *II* erhält man aus *I* durch eine Drehung der Massenbruchfelder um $-\pi/2$. Diese ist geeignet, den Einfluß der Spiralbildung auf die Vermischung zu studieren, da die Wirbel inmitten der Grenze zwischen A und B liegen. Um Probleme durch das Gibbs-Phänomen mit Spektralmethoden [27] zu vermeiden, sind die Sprungfunktionen in geeigneter Weise geglättet [51]. Abb. 3.4 zeigt die Anfangsbedingung für den Drei-Wirbel-Fall und die abklingende, voll entwickelte Turbulenz sowie das Massenbruchfeld *I*.

In den Simulationen werden die folgenden Parameter verwendet. Die räumliche Auflösung beträgt $\delta x = \frac{\Lambda}{400}$, d.h. 160 000 Gitterpunkte gehen in die Berechnung ein.

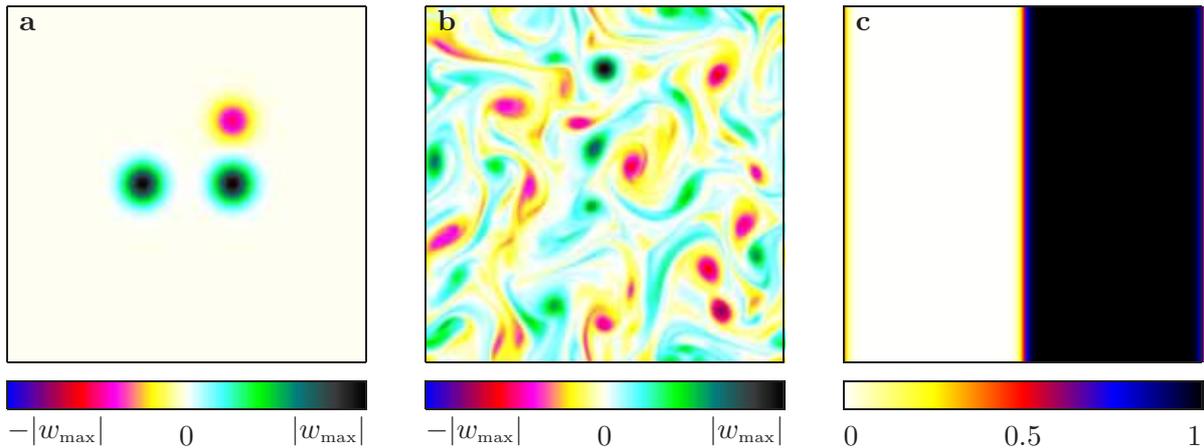


Abbildung 3.4: Anfangsfelder der Wirbelstärke (a: Drei-Wirbel-Fall, b: turbulentes Feld) und des Massenbruchs I (c); mit zugehörigen Farbpaletten. Alle Abbildungen in Abschnitt 3.3 zeigen das komplette Rechengebiet.

Tabelle 3.3: Übersicht über einige Schmidt-Zahlen bei $p = 1$ bar, $T = 293$ K und die kinematische Viskosität trockener Luft [16].

Spezies i	H ₂	O ₂	H ₂ O	Essigsäure	Ethanol	n -Oktan
$Sc_{i,\text{Luft}}$	0.216	0.748	0.612	1.16	1.29	2.57

Basierend auf (3.6) ergibt sich für einen Wirbel mit der Amplitude $w_{\max} = 62.74$ eine Reynolds-Zahl der kohärenten Wirbel von $Re = 39\,500$, für den Fall der voll entwickelten Turbulenz erhält man $Re = 35\,300$. Mit einer Zeitschrittweite von $\delta t = 1.25 \cdot 10^{-4}$ für KW_{2d}.A–KW_{2d}.D bzw. $\delta t = 1.12 \cdot 10^{-4}$ für TS_{2d} sind 16 000 Zeitschritte gerechnet worden. Die anfängliche Wirbelumdrehungszeit τ der stärksten Wirbel beträgt für KW_{2d}.A–KW_{2d}.D $\tau = 0.20$ und für TS_{2d} ca. $\tau = 0.18$, so daß ca. zehn Wirbelumdrehungen simuliert werden. Die Zahlenwerte entsprechen denen des gasförmigen Stoffsystems aus [57]. Verwendet man die in [117] verwendete Definitionen der Re für Einzelwirbel bzw. für turbulente Strömungen, erhält man ebenso vergleichbare Werte für die verschiedenen Konfigurationen. Die Schmidt-Zahlen variieren zwischen 0.05 und 5, was den Randbedingungen verschiedener Stoffsysteme entspricht (s. Tab. 3.3).

3.3.2 Zeitliche Evolution der Drei-Wirbel-Konfiguration

Abb. 3.5 zeigt die zeitliche Entwicklung der Wirbelstärke (a) und des Massenbruchs für die Konfigurationen I (b) und II (c) für $Sc = 1$. Die Dynamik in den Massenbruchfeldern kann in die in Abschnitt 3.1.3 definierten Makro- und Mikrovermischung aufgeteilt werden. Zu Beginn verursacht das Geschwindigkeitsfeld eine grobskalige Bewegung durch Konvektion. Fluidelemente unterschiedlicher Massenbrüche werden aufeinander zubewegt, so daß die Grenzlinie

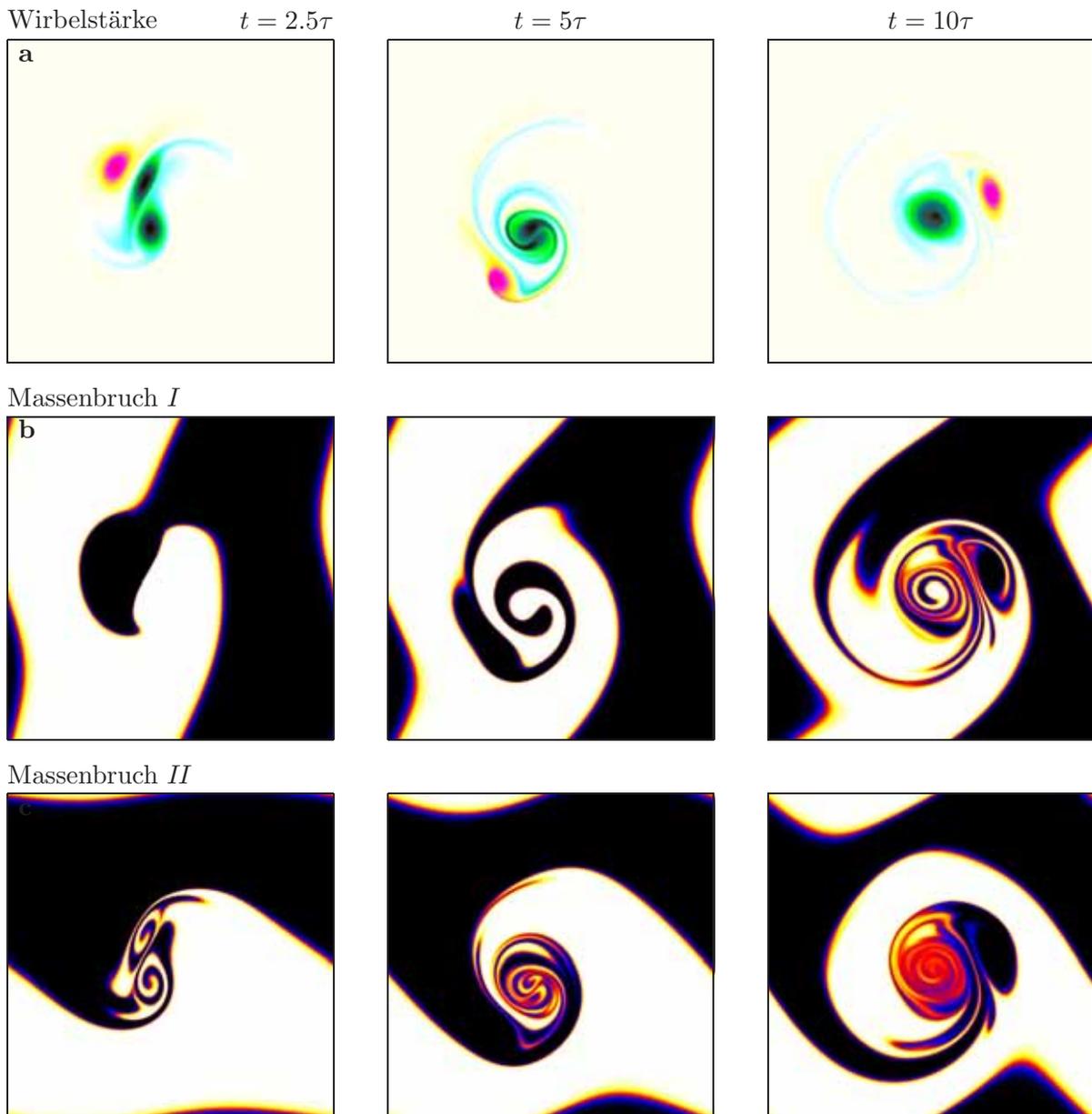


Abbildung 3.5: Evolution dreier Wirbel nach 2.5, 5 und 10 Wirbelumdrehungen;
a: Wirbelstärke, **b:** Massenbruch *I*, **c:** Massenbruch *II*; Farbpalette gemäß
 Abb. 3.4.

zwischen den Spezies verlängert wird (Makrovermischung). An dieser Grenze diffundieren die Spezies aufgrund großer Massenbruchgradienten, was einen Massenbruchausgleich bis zur molekularen Ebene zur Folge hat (Mikrovermischung). Zu beachten ist, daß die Gesamteffizienz der Mischung stark von der tatsächlichen Konfiguration abhängt.

In Konfiguration *I* geschieht das Mischen auf groben Skalen, die Grenzlinie zwischen den Spezies wird ausgeweitet, jedoch ist nach fünf Wirbelumdrehungen noch fast an keiner Stelle im Massenbruchfeld eine Mikrovermischung zu erkennen. Nach zehn Umdrehungen sind die beiden linksdrehenden Wirbel fast miteinander verschmolzen. Während dieser Verschmelzung rotieren diese Wirbel immer schneller umeinander, und feine Skalen, d.h. steile Gradienten werden erzeugt. In diesen feinskaligen Gebieten findet eine effektive Mikrovermischung durch Diffusion statt, was in den Bildern ($Y = 0.5$) deutlich wird. Konfiguration *II* zeigt einen zusätzlichen Vorgang zu dem des Verschmelzens auf. Die Grenzlinie wird aufgerollt, da sie direkt in den Wirbeln lokalisiert ist. Daher werden schon zu frühen Zeitpunkten Spiralen mit steilen Gradienten gebildet, so daß eine molekulare Vermischung schon nach fünf Wirbelumdrehungen beobachtet werden kann. Daraus kann geschlossen werden, daß Wirbel die diffusive Vermischung durch konvektiven Transport und Aufrollen von Grenzlinien beschleunigen. Durch beide Effekte wird die Grenzlinie verlängert und feine Skalen werden im Massenbruchfeld gebildet. Sind diese Skalen bei gegebener Sc fein genug für eine Diffusion, tritt Mikrovermischung auf.

Abb. 3.6 zeigt die Evolution der voll entwickelten Turbulenz aus TS_{2d} . In diesem Fall sind viele Wirbel statistisch im Feld verteilt; teils in der Grenze zwischen den Spezies, teils nicht. Zu identifizieren sind die beiden wesentlichen Mechanismen, wie kohärente Wirbel die Vermischung von chemischen Spezies beschleunigen können. Zum einen sorgen quasi-singuläre Strukturen (**B**) durch Aufrollen von Grenzflächen zu Spiralen für steile Gradienten in den Massenbruchfeldern und somit für eine frühe effiziente Vermischung. Zum anderen ist das spätere Verschmelzen gleichrotierender Wirbel (**A**) dafür verantwortlich, daß Stoffballen mit verschiedenem Massenbruch durch effektives Makrovermischen ineinander aufgelöst werden können [52, 57].

Während des Mischprozesses der Wirbel konkurriert die Konvektion durch die Wirbel mit der molekularen Diffusion um die Bildung bzw. Zerstörung feiner Skalen im Massenbruchfeld. Das Verhältnis der Transportgeschwindigkeiten von Konvektion und Diffusion ist durch Sc bestimmt. Abb. 3.7 illustriert für den Drei-Wirbel-Fall die Abhängigkeit der Vermischung von Sc in horizontalen Schnitten durch das Massenbruchfeld bei $x_2 = \Lambda/2$ (s. auch Abb. 3.5 für $Sc = 1$).

In Konfiguration *I* sind nach fünf Wirbelumdrehungen fast keine feinskaligen Strukturen sichtbar, so daß weder für $Sc = 1$ noch $Sc = 0.1$ eine merkliche Diffusion stattgefunden hat. Einzige Ausnahme ist der linke Peak, der durch die Translation eines Wirbels quer durch die Grenzlinie entstanden und im Filament der beiden Wirbel lokalisiert ist. Nach zehn Umdrehungen sind

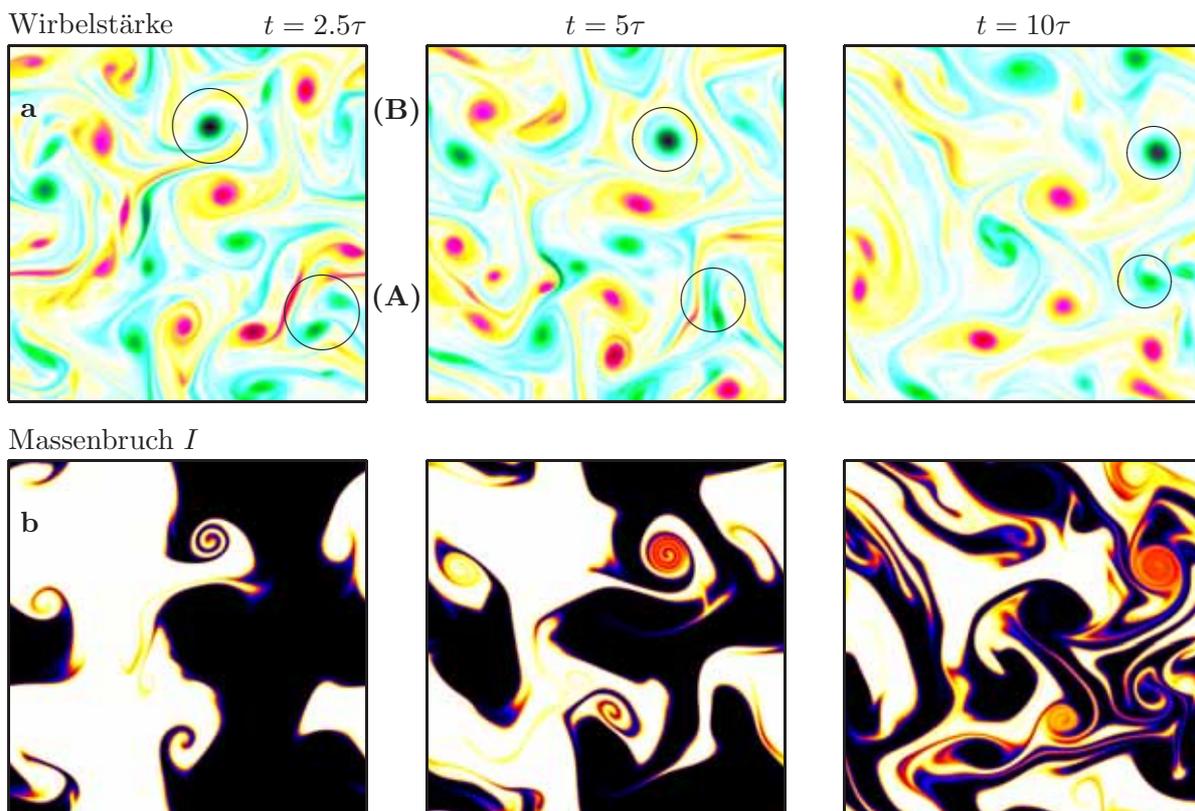


Abbildung 3.6: Evolution des Falles der turbulenten Strömung nach 2.5, 5 und 10 Wirbelumdrehungen; **a:** Wirbelstärke, **b:** Massenbruch I ; gekennzeichnete Gebiete **(A):** Verschmelzen, **(B):** Spiralbildung; Farbpalette gemäß Abb. 3.4.

durch die Konvektion viele feinskalige Anteile entstanden, die eine Diffusion vorantreiben. Für $Sc = 0.1$ sind die Gradienten im Zentrum der verschmolzenen Wirbel weitgehend geglättet, für $Sc = 1$ sind diese noch nicht steil genug, so daß die Vermischung noch nicht beendet ist. In Konfiguration *II* sind bereits bei $t = 5\tau$ feine Skalen vorhanden, die für eine „Vorvermischung“ sorgen, so daß für $Sc = 0.1$ die Mischung schon weitgehend beendet ist, während für $Sc = 1$ die Massenbruchwerte im Intervall von 0.1 bis 0.9 zu finden sind. Nach zehn Wirbelumdrehungen sind sich die Massenbruchfelder sehr ähnlich, d.h. die Amplitude der Oszillationen ist verglichen mit I weitgehend abgeklungen.

Bei kleineren Sc findet Mikrovermischung zu einem früheren Stadium der Makromischung statt, da der diffusive Vermischungsprozeß schon bei kleinen Gradienten effektiv im Massenbruchfeld wirken kann. Die Konvektion durch die Wirbel vergrößert Massenbruchgradienten und beschleunigt auf diese Weise die Diffusion. Im Falle einer guten Makrovermischung ist ein großer Diffusionskoeffizient von geringer Bedeutung (vgl. in Konfiguration *II*: $Sc = 0.1$ und $Sc = 1$).

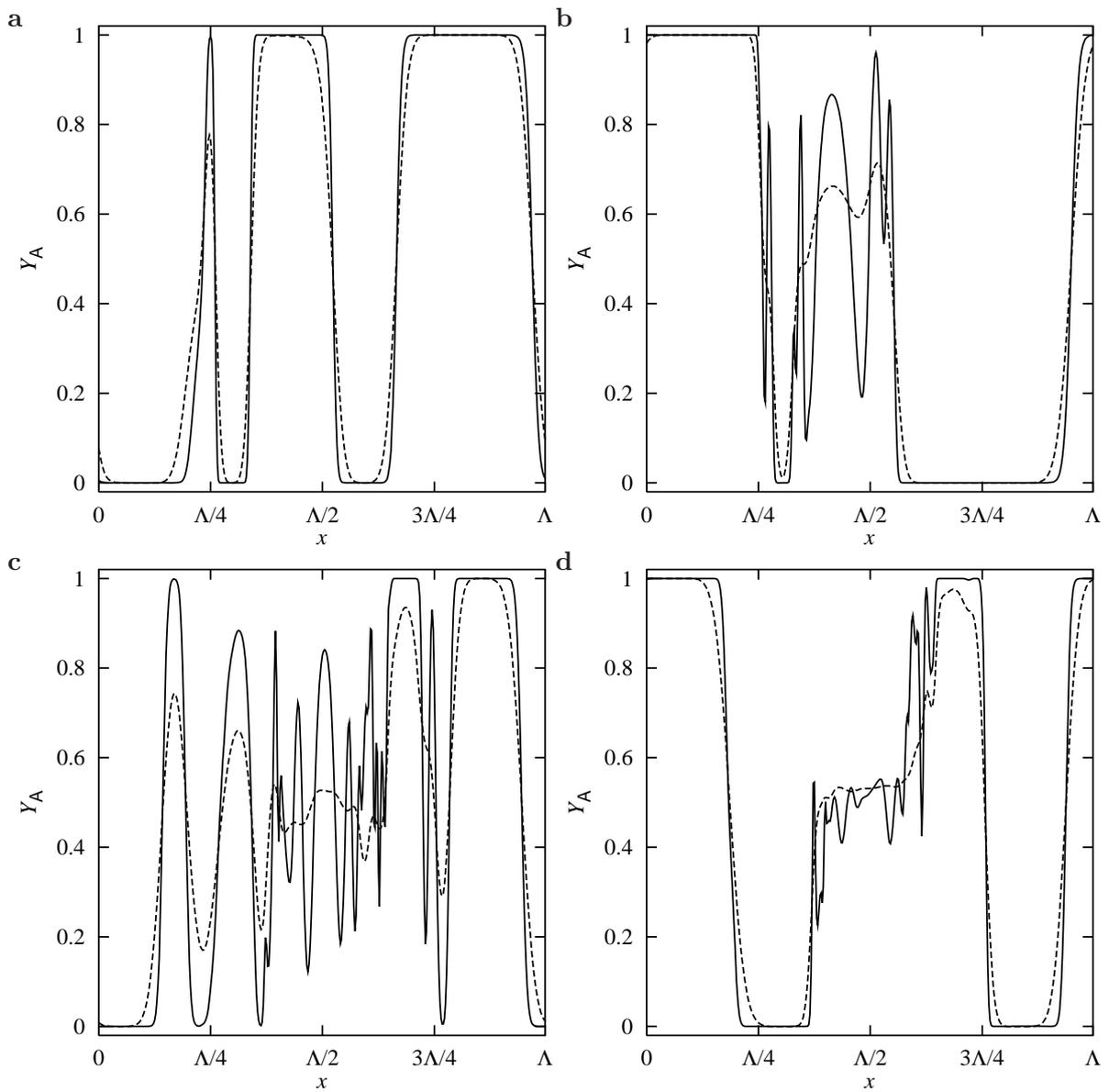


Abbildung 3.7: Horizontale Schnitte durch das Massenbruchfeld bei $x_2 = \Lambda/2$:
a,c: Konfiguration *I*, **b,d:** *II*; **a,b:** $t = 5\tau$, **c,d:** $t = 10\tau$. Durchgezogene Linien:
 $Sc = 1$, gestrichelt: $Sc = 0.1$.

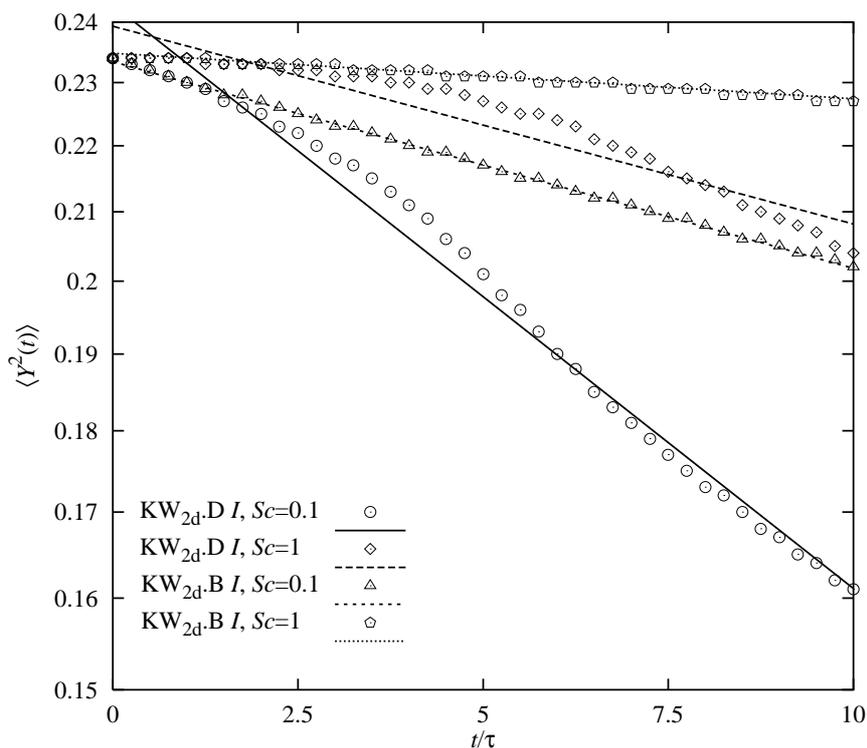


Abbildung 3.8: Varianzevolution (Punkte) und exponentielle Approximation (Geraden) für $KW_{2d}.B I$ und $KW_{2d}.D I$ für $Sc = 0.1$ und $Sc = 1$.

3.3.3 Globale Zeitskalen

Zeitskalen, die auf dem Abklingverhalten der Varianz basieren, spiegeln direkt den Mischungsprozeß wider. Im Falle reiner Diffusion, d.h. ohne konvektiven Transport, erhält man für jede Wellenzahl κ eine exponentiell abklingende Varianz nach Gleichung (3.26). Die Zeitskala der Vermischung ist dabei $t_{\text{mix}} = \kappa^{-2} D^{-1}$. Die gewählte Anfangsbedingung stellt eine Überlagerung mehrerer Wellenzahlen dar, jedoch ist das asymptotische Verhalten durch die langsamste Zeit der kleinsten Wellenzahl bestimmt. Abb. 3.8 zeigt die Evolution von $\langle Y^2(t) \rangle$ für die Konfigurationen $KW_{2d}.B I$ und $KW_{2d}.D I$ für jeweils zwei Schmidt-Zahlen zusammen mit den Regressionsgeraden.

Der Zwei-Wirbel-Fall approximiert die Exponentialfunktion sehr gut. Die Effekte der Wirbelverschmelzung und Spiralbildung werden global in der Zeit berücksichtigt, so daß für die Drei-Wirbel-Konfiguration Diskrepanzen zu verzeichnen sind. So nimmt die Varianz während der Verschmelzung der beiden Wirbel (bei ca. $t = 5\tau$) schneller ab. Die Tendenz und somit die Mischzeit sind jedoch sehr gut approximiert. Dies bestätigt auch eine Simulation über 100τ für $KW_{2d}.A$ mit $Sc = 1$, die einen Unterschied von lediglich 18% in der Mischungszeit ergibt.

Die Zeitskalen für die verschiedenen Konfigurationen, die durch diese lineare Regression der logarithmierten Varianzwerte bestimmt wurden, sind in Tab. 3.4 zusammengestellt. Der Einfluß

Tabelle 3.4: Globale Mischungszeitskalen t_{mix} in Einheiten der Wirbelumdrehungszeit τ .

Sc	Diffusion		KW _{2d} .A		KW _{2d} .B		KW _{2d} .C		KW _{2d} .D		TS _{2d}	
	Simul.	asymp.	<i>I</i>	<i>II</i>	<i>I</i>	<i>II</i>	<i>I</i>	<i>II</i>	<i>I</i>	<i>II</i>	<i>I</i>	<i>II</i>
0.05	120	250	67.1	50.5	88.3	36.5	36.3	41.3	35.8	42.3	17.0	20.8
0.1	195	500	101	69.8	138	45.3	52.8	58.8	48.8	59.3	22.8	25.2
0.2	326	1 000	154	95.5	215	55.8	76.3	80.3	66.0	80.3	30.3	31.1
0.5	684	2 500	280	142	390	73.8	124	113	102	115	43.8	42.4
1.0	1 260	5 000	456	194	624	94.3	180	143	144	146	58.5	54.8
2.0	2 400	10 000	770	270	1 070	126	270	179	210	186	79.0	72.6
5.0	5 780	25 000	1 630						336	260		

Tabelle 3.5: Steigungen der log-log-plots der t_{mix} gegen Sc .

Fall	Diff.	KW _{2d} .A	KW _{2d} .B	KW _{2d} .C	KW _{2d} .D	TS _{2d}
<i>I</i>	0.841	0.688	0.670	0.540	0.477	0.415
<i>II</i>	0.841	0.450	0.328	0.392	0.398	0.340

der Wirbelverschmelzung wird für KW_{2d}.B, KW_{2d}.C und KW_{2d}.D anhand der Konfiguration *I* des Massenbruchs untersucht. In der Strömung zweier gegensinnig rotierender Wirbel gibt es weder Verschmelzung noch kreuzen die Wirbel die Grenzlinie. Dagegen beschreiben die gleichdrehenden Wirbel das Phänomen einer langsamen Verschmelzung [51, 57]. Innerhalb von zehn Wirbelumdrehungen nimmt der Abstand zwischen den beiden Wirbeln fast nicht ab. Durch die Rotation der beiden Wirbel umeinander rühren die Wirbel die Fluide auf größeren Skalen, so daß der Einfluß der Makrovermischung steigt. Die drei Wirbel verschmelzen sehr schnell, wobei der dritte Wirbel selbst nur wenig in den Prozeß des Mischens des Massenbruchs einwirkt. Er beschleunigt lediglich das Verschmelzen der beiden linksdrehenden Wirbel (s. Abb. 3.5). Da keiner der Wirbel in der Grenze zwischen den Spezies plaziert ist, ist keine Bildung von Spiralen bis auf die durch die grobskalige Rotation beider Wirbel bei der Verschmelzung zu beobachten. In Abb. 3.9a sind die Mischungszeitskalen als Funktion von Sc in einer doppelt logarithmischen Skala dargestellt. Für eine feste Schmidt-Zahl sinkt die Mischungszeitskala mit steigendem Einfluß der Wirbelinteraktion. Es ist zu beobachten, daß der Einfluß der Wirbel und der des Verschmelzens mit steigender Sc stark zunimmt. Die Steigungen der angepaßten Geraden sind in Tab. 3.5 zusammengefaßt.

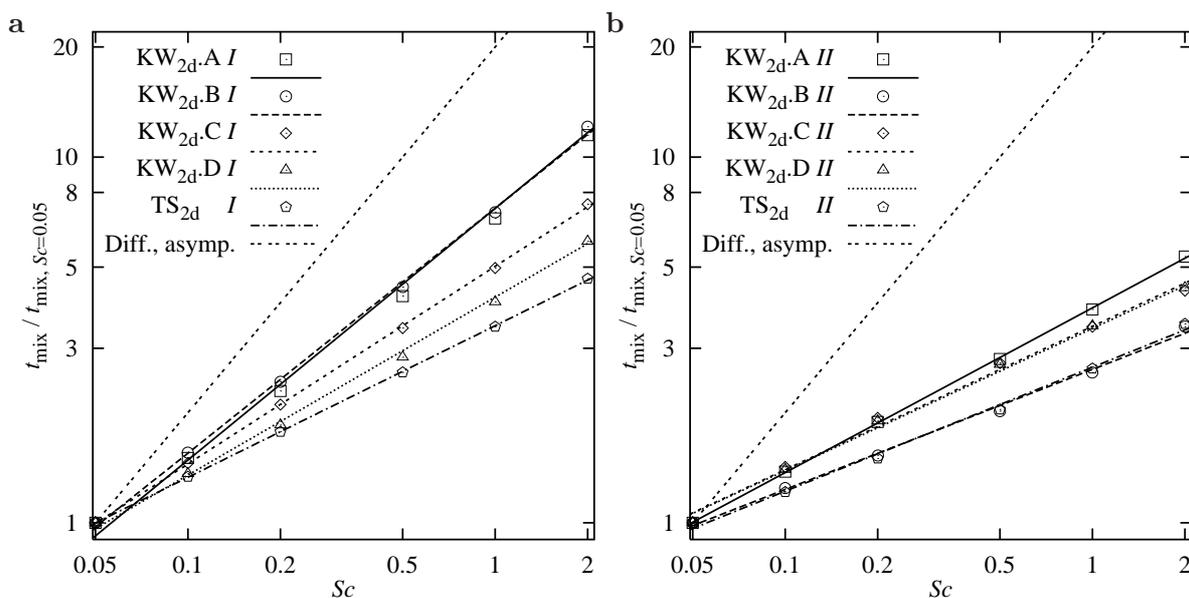


Abbildung 3.9: Doppelt logarithmische Darstellung von t_{mix} gegen Sc zur Illustration des Einflusses der **a:** Wirbelverschmelzung (an Konfiguration *I*) und **b:** der Generierung von Spiralen (an *II*) auf die Vermischung; die Zeitskalen sind normiert mit $t_{0, Sc=0.05}$.

Theoretische Untersuchungen ergeben die folgenden Beziehungen zwischen t_{mix} und Sc :

$$\begin{aligned} \text{Reine Diffusion, asymptotisch: } t_{\text{mix}} &\sim Sc. \\ \text{Voll entwickelte Turbulenz: } t_{\text{mix}} &\sim Sc^{0.4}. \end{aligned} \quad (3.39)$$

Die Steigungen liegen für alle Konfigurationen zwischen diesen beiden Extremfällen. Für alle erhält man eine Potenzfunktion (s. Abb. 3.9a). Je weniger Einfluß der Wirbelverschmelzung, desto steiler verläuft die Gerade und desto wichtiger ist der Einfluß der Diffusion. In voll entwickelter Turbulenz ist die Generierung steiler Gradienten in den Massenbruchfeldern sehr effektiv, so daß eine Mischung bis zu hohen Sc erkennbar ist. Die Steigung in Abb. 3.9a stimmt sehr gut mit theoretischen Untersuchungen überein, die für voll ausgebildete dreidimensionale Turbulenz einen Exponenten von 0.4 ergeben [97].

Trotz fehlender Wirbelverschmelzung und Spiralbildung ist für KW_{2d-A} und KW_{2d-B} *I* die Steigung kleiner als für reine Diffusionsprobleme. Bei ersterer sorgt der Wirbel, der mitten im Gebiet einer Spezies lokalisiert ist, langsam für die Verlängerung der Grenzfläche, bei letzterer werden durch den Transport der beiden Wirbel die Gradienten in der Grenzfläche stets nachgebildet. Diese Effekte tragen aber nur wenig zur Vermischung bei, so daß für sehr kleine Sc fast kein Unterschied der Mischungszeitskalen zu Simulationen ohne Konvektionseinfluß beobachtet wird.

Das bedeutet, daß die einzelnen Situationen als eine Superposition der beiden Extrema angese-

hen werden können, die in verschiedenen Regionen der Felder dominieren. In den Wirbelzentren hat die konvektive Vermischung einen großen Einfluß, während in den äußeren Bereichen vor allem Diffusion für die Vermischung sorgt.

Der Einfluß der Spiralenerzeugung, die durch das Aufrollen von Grenzlinien in Wirbeln geschieht, wird durch die Analyse der Massenbruch-Konfiguration *II* untersucht. Zwischen den Strömungen $KW_{2d}.C$ und $KW_{2d}.D$ gibt es keine signifikanten Unterschiede in den Zeitskalen, da die Spiralen das System „vormischen“, bevor die Wirbelverschmelzung an Einfluß gewinnt. Nur bei großen $Sc > 1$, sind die Skalen nicht fein genug, um eine hinreichend große Dissipation zu gewährleisten, so daß das Verschmelzen eine Rolle spielt. Jedoch verlangsamt die Wirbelvereinigung die Vermischung statt sie zu beschleunigen. Dies kann damit erklärt werden, daß beim Verschmelzen viel Wirbelstärke dissipiert wird und somit keine weiteren Spiralen gebildet werden können. Bereits nach fünf Wirbelumdrehungen ist einer der beiden linksdrehenden Wirbel fast vollständig dissipiert, so daß die Makrovermischung in der Folge nur von dem verbleibenden Wirbel ausgeführt werden kann [108, 109]. Die Zeitskalen für den Strömungsfall $KW_{2d}.B$ sind durch die großen Zahlenwerte der Geschwindigkeit zwischen den beiden Wirbeln sehr viel kleiner als die oben beschriebenen. Dadurch werden schneller Spiralen geformt als für die anderen Strömungskonfigurationen. Ein Spezialfall ist die Strömung durch einen Wirbel. Bei hohen Sc ist der diffusive Einfluß an der anfänglichen Grenzlinie vernachlässigbar klein, so daß die Zeitskalen doppelt so groß sind wie bei $KW_{2d}.B$. Wie erwartet sind die kleinsten Zeitskalen und somit die beste Vermischung in der voll entwickelten turbulenten Strömung durch den effektiven konvektiven Transport im gesamten Massenbruchfeld zu verzeichnen.

Wie oben ist die Abhängigkeit der Zeitskalen von der Schmidt-Zahl in doppelt logarithmischer Darstellung in Abb. 3.9b gezeigt. Sitzen die Wirbelzentren in der Grenzfläche, sind die Zeitskalen weniger von der Schmidt-Zahl abhängig als in Konfigurationen *I* und tendieren mehr zum Verlauf des turbulenten Falls. Der Exponent der Potenzfunktionen beträgt in allen Konfigurationen etwa 0.4 (s. Tab. 3.5). Einzige Ausnahmen sind die Strömung in einem Wirbel $KW_{2d}.A$ und $KW_{2d}.B$ *II*. Im ersteren stellt der Wirbel einen Fixpunkt im Strömungsfeld dar und verlangsamt die Spiralbildung sukzessive, da der Bereich des Wirbelzentrums bald vermischt ist. Im letzteren sorgen die hohen Geschwindigkeiten in der Region zwischen den Wirbeln für eine beschleunigte Spiralbildung und für eine schnelle Bewegung der Wirbel durch das Feld.

Die Spiralen durch den Aufrollprozeß der Wirbel sorgen für starke Gradienten im Massenbruchfeld, die vergrößert werden bis die Dissipation abhängig von Sc diese wieder glättet. Je besser die Spiralbildung, desto schneller werden die Massenbruchfelder vermischt. Abb. 3.9b zeigt deutlich, daß für diese spezielle Konfiguration die Abhängigkeit der Zeitskala von Sc für den turbulenten Fall und den heterostrophen Dipol fast übereinstimmen.

Festzuhalten bleibt, daß der Mischungsprozeß sehr sensitiv in Bezug auf die spezielle Strö-

mungskonfiguration und auf die Anfangsbedingung reagiert. Vergleicht man die Zeitskalen für die verschiedenen Massenbruchfelder in $KW_{2d}.D$, erkennt man, daß für kleine Sc die Zeitskalen für I kleiner sind als für II . Dies kommt dadurch zustande, daß die Generierung der Spiralen nicht ausschlaggebend ist in diesen Konfigurationen, da die Wirbelverschmelzung das Feld auch ohne Spiralbildung bis zum Zeitpunkt $t = 10\tau$ vermischt. Außerdem sind die Gradienten in den Wirbelfilamenten für Konfiguration I sehr steil, was im linken Peak in Abb. 3.7 zum Zeitpunkt $t = 5\tau$ deutlich wird. Vor allem dort erfolgt diffusive Vermischung, was geringere Zeitskalen im Vergleich zu Konfiguration II zur Folge hat. Bei großen Sc werden die Gradienten nur bei zusätzlicher Bildung von Spiralen so stark vergrößert, daß eine molekulare Vermischung einsetzen kann und die Zeitskalen für Konfiguration II kleiner sind. Im Falle der Strömung $KW_{2d}.C$ ist dieser Umschlag bei kleineren Sc zu verzeichnen, da hier das Verschmelzen nur langsam voranschreitet.

3.3.4 Energie- und Skalarspektren

Wie bereits erwähnt, kommt bei der Auswertung turbulenter Strömungen im Fourier-Raum den Energie- und Skalarspektren eine wesentliche Bedeutung zu. Sie liefern Informationen über die spektrale Verteilung der Varianz der Geschwindigkeit bzw. des Massenbruchs, ermöglichen also Aussagen bezüglich der Vermischungsgüte.

Die anfänglichen Energiespektren der Fälle $KW_{2d}.A$ – $KW_{2d}.D$ fallen dabei aufgrund der Gauß-Form der Wirbelstärke für die einzelnen Wirbel sehr schnell ab. Während sich das Spektrum für einen Wirbel nicht ändert [51], erhält man für $KW_{2d}.C$ und $KW_{2d}.D$ nach 10τ Spektren, die Inertialbereiche mit der Steigung -4 enthalten (s. Abb. 3.10a) [68]. Dies deutet auf Mechanismen, die denen aus turbulenten Strömungen ähnlich sind. Energie wird in die Wirbelfilamente transferiert und dort aufgrund der hohen Gradienten durch viskose Effekte dissipiert. Das turbulente Feld, welches mit einem vorgegebenen Spektrum initialisiert worden ist [57], zeigt nach 10τ einen Inertialbereich mit κ^{-5} (s. Abb. 3.10b). Diese Steigung entspricht nicht der theoretisch abgeleiteten (s. Abschnitt 7), wird aber in vielen Simulationen gefunden [8].

Nach der Theorie erfolgt der Transport der skalaren Energie für $Sc = 1$ analog zum Energietransfer, so daß sich analoge Skalarspektren ergeben sollten. Wird für den Drei-Wirbel-Fall das Massenbruch- und Wirbelstärkefeld identisch initialisiert [51], zeigt sich diese Analogie zwischen Massenbruch und Wirbelstärke. Für $Sc = 10$ erhält man zusätzlich den *viscous-convective* Inertialbereich mit einer Steigung von -1.2 (s. Abschnitt 7). Im Falle einer Initialisierung segregierter Spezies anhand von Konfiguration I oder II entspricht das Spektrum dem einer Sprungfunktion mit κ^{-2} . Dieser Bereich ist für alle hier gezeigten Simulationen dominant. Trotzdem findet man in den Abb. 3.10a,b für feine Skalen die Inertialbereiche aus den Energiespektren wieder. Während die grobskalige Form des Spektrums erhalten bleibt, sorgen die kleinen Wirbel für Veränderungen in der Grenzfläche. Mit anderen Worten wird die Varianz

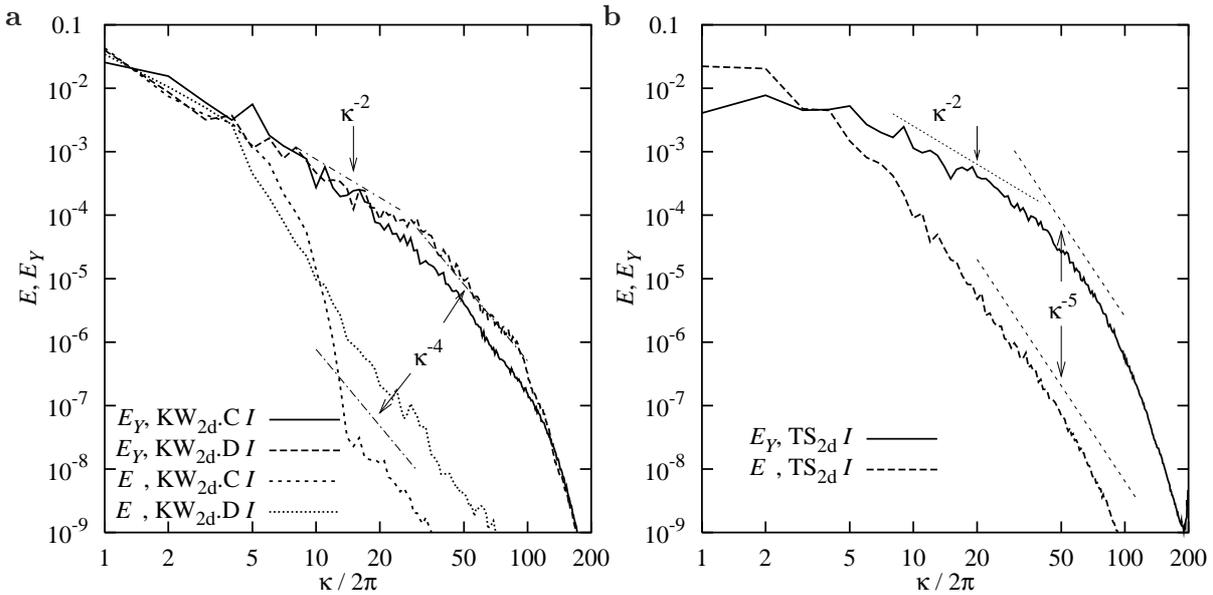


Abbildung 3.10: Energie- und Skalarspektren nach $t = 10\tau$. **a:** $KW_{2d}.C I$ und $KW_{2d}.D I$, **b:** $TS_{2d} I$.

des Massenbruchs auf feinen Skalen durch die Wirbel beeinflusst und reduziert.

3.3.5 Massenbruchverteilung

Die räumliche Verteilung des Massenbruchs kann anhand von Histogrammen dargestellt werden, welche die PDF approximieren. Aufgrund der großen Mischungszeitskalen sind die hier gezeigten Simulationen mit $Sc_A = Sc_B = 0.5$ durchgeführt worden. Abb. 3.11a zeigt die PDFs des Massenbruchs für $KW_{2d}.D II$ und Abb. 3.11b die für $TS_{2d} II$ nach 10τ , 20τ und 30τ . Die Histogramme stellen die tatsächliche Massenbruchverteilung dar, während die gestrichelten und gepunkteten Kurven die Gauß- bzw. Beta-PDF repräsentieren. Letztere können anhand der Mittelwerte und der Varianzen der jeweiligen Datenfelder ermittelt werden. Im Drei-Wirbel-Fall erkennt man eindeutig die Überlagerung zweier Bereiche. Der eine kennzeichnet die Region, in der die Wirbel für eine sehr effiziente Vermischung sorgen. Hier liegen vor allem Massenbruchwerte um den Mittelwert vor. Außerhalb dieser Region findet man jedoch noch unvermischte Regionen, die durch die Minimal- und Maximalwerte des Massenbruchs charakterisiert sind. Liegen Systeme mit lokalen Unterschieden in der Strömungsart vor, z.B. auch bei stark ausgeprägter Intermittenz, dann sind offensichtlich höhere Momente zur Beschreibung der Massenbruchverteilung notwendig. Hat man dagegen voll ausgebildete „homogene“ Turbulenz, dann beschreibt die Beta-PDF gut den Vermischungszustand einer Strömung. Eine Modellierung mit abgeschnittenen Gauß-Funktionen ist dagegen nur sinnvoll, wenn eine gute Vermischung vorliegt.

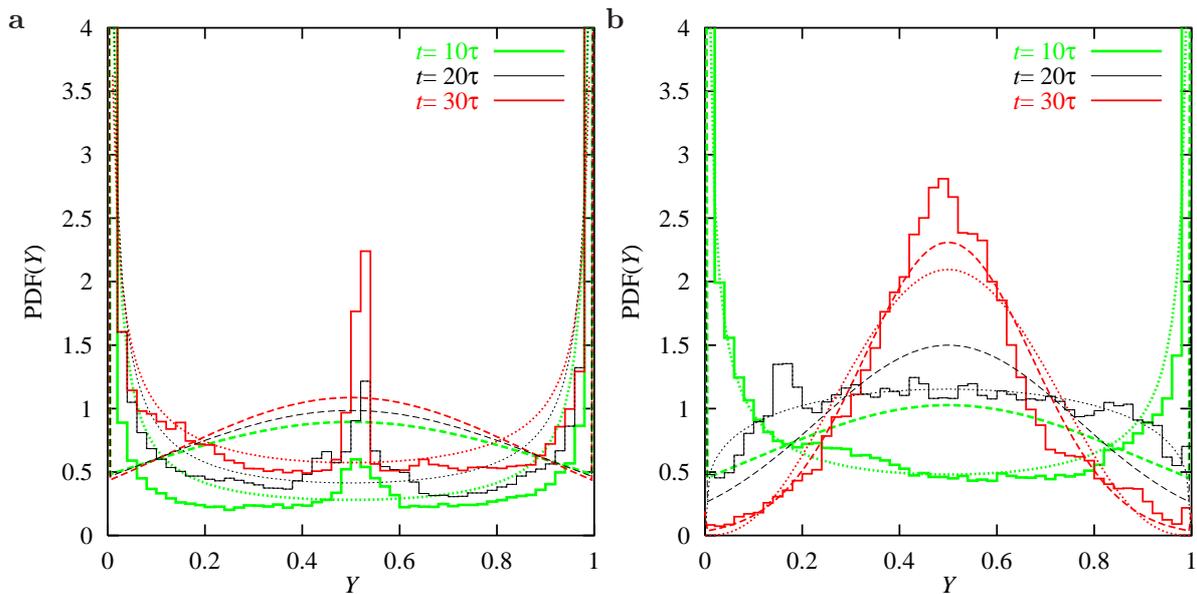


Abbildung 3.11: PDF des Massenbruchs nach 10τ , 20τ und 30τ . **a:** $KW_{2d}.D II$, **b:** $TS_{2d} II$. Zugehörige Beta- (gepunktet) und Gauß-PDF (gestrichelt).

3.4 Dreidimensionale Betrachtung

Viele Phänomene der Turbulenz sind auch in zweidimensionalen Strömungen enthalten. Es fehlen jedoch auch wesentliche Aspekte wie z.B. der Effekt der Wirbelstreckung. Zur Einordnung der oben erhaltenen Ergebnisse werden vergleichbare Simulationen in drei räumlichen Dimensionen durchgeführt. Aufgrund des hohen Rechenaufwands bei dreidimensionalen DNS kann im Rahmen dieser Arbeit jedoch keine derart ausgedehnte Parameterstudie wie bei den zweidimensionalen Untersuchungen erfolgen. Hierfür wird auf die Literatur verwiesen [128, 96, 17, 83, 119, 120].

3.4.1 Evolution zweier korotierender Wirbelschläuche

Analog zu den zweidimensionalen Untersuchungen kohärenter Strukturen in Abschnitt 3.3 wird hier die kohärente Struktur des homostrophischen Dipols $KW_{2d}.C$ in Form zweier paralleler Wirbelschläuche in drei räumlichen Dimensionen studiert [83, 107]. Die Anfangsbedingung für die Wirbelstärke wird durch $w = (0, 0, w_3)$ beschrieben, wobei die Komponente w_3 anhand von (3.37) implementiert wird. Es handelt sich hier um eine elementare Studie einer zweidimensionalen Strömung, die als Artefakt mit einer geringen dreidimensionalen Störung versehen ist. In $KW_{3d}.C^1$ wird zum Anfangsfeld gemäß (3.37) ein weißes Rauschen mit maximal 10% der maximalen Wirbelstärke addiert. In $KW_{3d}.C^2$ bleiben die Wirbelstärkewerte unbeeinflusst,

verändert werden lediglich die Positionen der Wirbel durch

$$x'_{2,1} = x_{2,1} + \frac{1}{10\Lambda} \sin\left(4\frac{2\pi}{\Lambda}x_3\right) \quad , \quad x'_{2,2} = x_{2,2} + \frac{1}{10\Lambda} \cos\left(4\frac{2\pi}{\Lambda}x_3\right) \quad . \quad (3.40)$$

Das bedeutet, daß die Wirbel in x_3 -Richtung um etwa $1/4$ des Abstandes der beiden Wirbel mit einer Frequenz von vier ausgelenkt werden. Die Störung für w erfolgt bei $KW_{3d}.C^1$ also auf feinen und für $KW_{3d}.C^2$ auf den groben Skalen. Die Simulationen werden mit einer räumlichen Auflösung von 128^3 und einer Zeitschrittweite von $\delta t = 5 \cdot 10^{-5}$ durchgeführt. Die Reynolds-Zahl wird aufgrund der reduzierten Auflösung im Vergleich zu Abschnitt 3.3 auf $Re = 9875$ reduziert.

Aus den Simulationen kann der Einfluß der dritten Dimension auf die Entwicklung der kohärenten Strukturen folgendermaßen erklärt werden. Durch Störungen werden die Wirbelschläuche deformiert, so daß Energie in die v_3 -Komponente transferiert wird. Abb. 3.12a zeigt diese Geschwindigkeitskomponente für die drei Fälle. Für $KW_{3d}.C^2$ ist v_3 zu Beginn wie für $KW_{2d}.C$ gleich null, durch den variierenden Abstand der Wirbelzentren in x_3 steigt v_3 jedoch schnell an. Nach einem Zeitintervall von vier Wirbelumdrehungen ist die nicht-lineare Interaktion so groß, daß die Gitterauflösung von 128^3 nicht mehr ausreicht, um die feinsten Strukturen aufzulösen. Die Simulation ist daher nach 4τ abgebrochen worden. Für $KW_{3d}.C^1$ hat man durch das adiierte Zufallsfeld bereits zu Beginn von null verschiedene v_3 . Das Maximum ändert sich bis zu 4τ aber nur wenig, da die feinskalige Störung der Dissipation unterliegt. Erst später beobachtet man die Auswirkung der Dreidimensionalität, so daß das Maximum von v_3 schließlich ansteigt. Dies unterstreicht auch Abb. 3.12b in Form der Energiespektren für die drei Fälle nach vier Wirbelumdrehungen. Die grobskalige Störung bewirkt bei $KW_{3d}.C^2$ einen vermehrten Energietransfer zu den feineren Skalen. Dadurch ergeben sich Änderungen im Spektrum ab einer Wellenzahl von $\kappa = 16\pi$. Der Inertialbereich mit κ^{-4} wird zu kleineren wie größeren Wellenzahlen hin ausgeweitet. Für $KW_{3d}.C^1$ ist der Inertialbereich im selben Wellenzahlenbereich zu finden wie für $KW_{2d}.C$, die Energie ist in diesem Bereich aber erhöht. In beiden Fällen bleibt die Steigung des Inertialbereichs unverändert bezogen auf die zweidimensionale Simulation. Abb. 3.12c zeigt das Massenbruchfeld für $KW_{3d}.C^1$ I nach neun Wirbelumdrehungen anhand einer Isofläche des Massenbruchs ($Y = 0.5$) und drei zweidimensionalen Schnitten. Die lokalen Veränderungen in der Wirbelstärke bewirken, daß die Wirbel unterschiedlich schnell umeinander kreisen, was im Massenbruch wiederzuerkennen ist. Abb. 3.12d zeigt das Abklingverhalten der Varianz des Massenbruchs für $Sc = 1$ und $Sc = 0.2$. Für beide Schmidt-Zahlen stimmt die Evolution der Varianz für die Simulationen fast überein.

Insgesamt zeigt sich, daß die Struktur des Wirbelstärkefeldes sich in den angestregten Untersuchungen lange Zeit nicht ändert, d.h. der Einfluß der dritten Dimension sehr gering bleibt. Die dritte Geschwindigkeitskomponente hat zum Ende der jeweiligen Rechnungen zwar hohe Werte, diese sind jedoch in feinen Strukturen zu finden. Infolgedessen sind Änderungen im Strömungsverhalten lediglich in dem beschränkten Gebiet zwischen den beiden Wirbelschläuchen

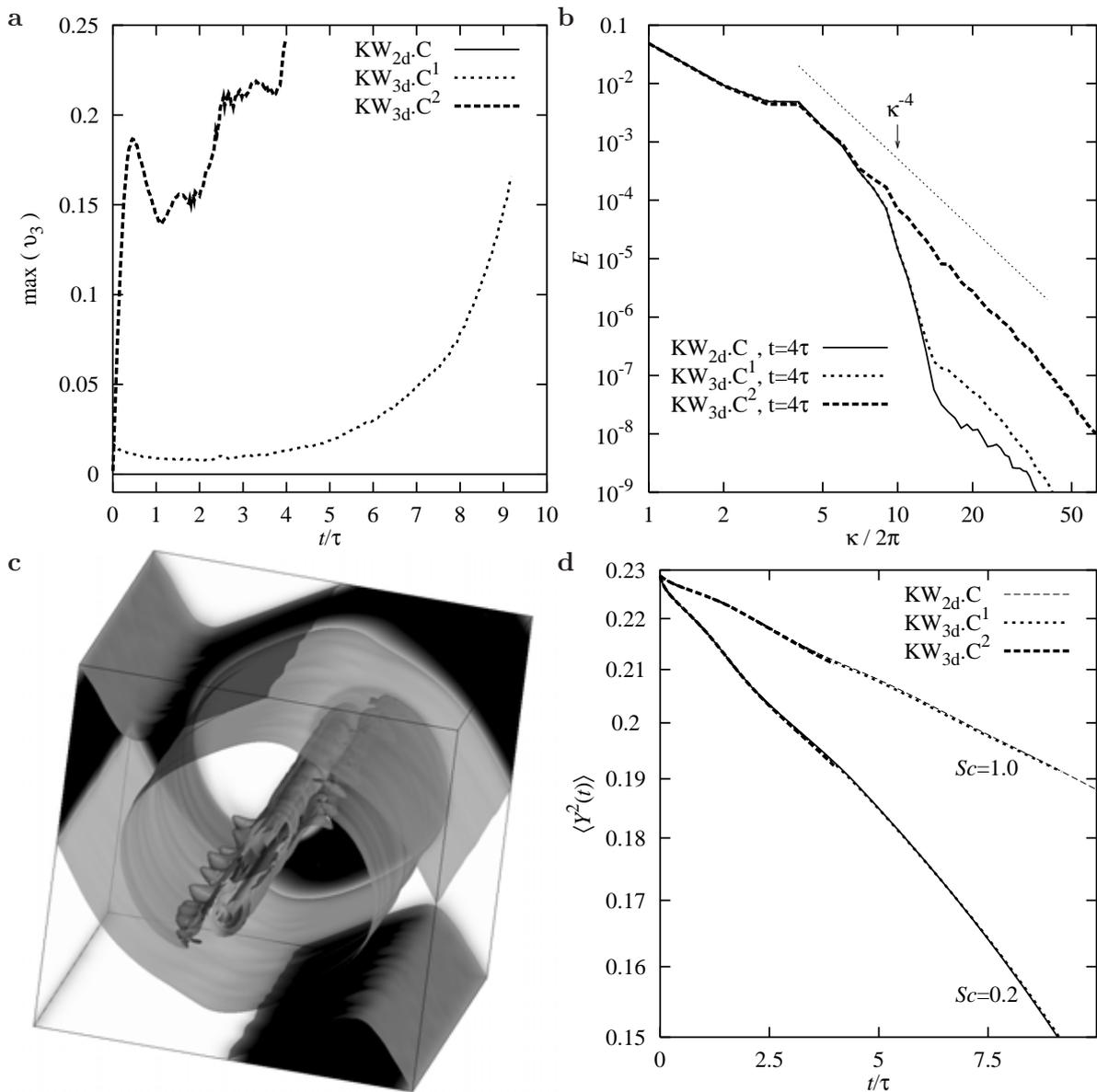


Abbildung 3.12: KW_{2d}.C, KW_{3d}.C¹ und KW_{3d}.C². **a:** Örtliches Maximum von v_3 , **b:** Energiespektrum zu $t = 4\tau$. **c:** Massenbruchfeld I nach neun Wirbelumdrehungen im Strömungsfeld KW_{3d}.C²; dargestellt ist die Isofläche des Massenbruchs ($Y = 0.5$) und drei zweidimensionale Schnitte. **d:** Abklingverhalten der Varianz für die Massenbruch-Konfiguration I für $Sc = 0.2$ bzw. $Sc = 1$.

zu finden, wie auch aus Abb. 3.12c hervorgeht. Die grobskalige Bewegung bleibt zweidimensional. Bei höherer Reynolds-Zahl und/oder nicht-paralleler Ausrichtung der Wirbelschläuche im Raum ist hier ein stärkerer Einfluß der dritten Dimension zu erwarten [83].

3.4.2 Strömungskonfiguration für dreidimensionale Turbulenz

Die Anfangsbedingung zur Untersuchung turbulenter Strömungen ist im Gegensatz zu dem zweidimensionalen Pendant nicht aus einem vorgegebenen Spektrum entstanden. Für die Wirbelstärke wird ein Feld aus weißem Rauschen initiiert. Das daraus entstehende Geschwindigkeitsfeld weist eine Gauß-Verteilung und ein Spektrum von $E(\kappa) \sim \kappa^0$ auf (s. Abb. 3.13). Die Divergenzfreiheit wird durch eine zyklische Umwandlung in die Wirbelstärke und zurück erreicht. Die zeitliche Evolution eines solchen Zufallsfeldes liefert schließlich die in TS_{3d} genutzte Anfangsbedingung für die Geschwindigkeit. Aufgrund von Problemen bei der Diskretisierung von Feldern, die ein solch flaches Spektrum und damit hohe Gradienten der Geschwindigkeit und Wirbelstärke aufweisen, wird zu Beginn eine kleine Reynolds-Zahl von $Re = 17.5$ gewählt. Dadurch werden die Gradienten durch Reibung abgebaut, wodurch die Energie auf feinen Skalen schnell abnimmt. Durch *forcing* wird die Energie bei $\kappa = 8\pi$ konstant gehalten. Sobald sich ein stationäres Spektrum ergibt, wird Re künstlich verdoppelt. Dieses Vorgehen wird wiederholt bis $Re = 4480$. Bei dieser Reynolds-Zahl erhält man jedoch kein stationäres Spektrum, die Energie steigt auf den feinen Skalen durch unzureichende Diskretisierung stark an (s. Abb. 3.13a).

Für die weiteren Simulationen TS_{3d} wird das Feld verwendet, welches für $Re = 2240$ ermittelt worden und gut aufgelöst ist. Die Turbulenz ist jedoch nicht sehr ausgeprägt, da das Spektrum nur in einem sehr begrenzten Frequenzbereich von $\kappa = 8\pi$ bis $\kappa = 20\pi$ die Steigung $-5/3$ besitzt. Das Geschwindigkeitsfeld zeichnet sich durch eine Gauß-förmige Verteilung der Komponenten aus, die in Abb. 3.13b für v_1 dargestellt ist. Mittelwert, Varianz und Histogramm sind direkt aus dem Datenfeld bestimmt. Die Reynolds-Zahl kann bei Anwendung eines *de-aliasing* noch größer gewählt werden [65]. Durchgeführt worden sind Simulationen mit $Sc = 0.5, 1$ und 2 in einem kubischen Gebiet der Länge $\Lambda = 1$. Die räumlichen Auflösungen sind 192^3 bzw. 256^3 , und die Zeitschrittweite beträgt $\delta t = 3.6 \cdot 10^{-5}$.

In diesem Abschnitt werden v.a. statistische Eigenschaften der betrachteten Strömung herausgearbeitet. Statt den Konfigurationen *I* bzw. *II*, die der Untersuchung der Vermischung in kohärenten Strukturen dienen, wird daher eine Anfangsbedingung *III* für den Massenbruch verwendet, die besonders auf statistische Studien ausgerichtet ist. Entsprechend Abb. 3.1 werden Volumenelemente mit einem Massenbruch von $Y = 1$ zufällig im Rechenggebiet verteilt. Im restlichen Gebiet findet man $Y = 0$. Um Probleme durch das Gibbs-Phänomen zu vermeiden, sind die Gradienten zwischen den Volumenelementen mittels der Fehlerfunktion leicht geglättet. Zum Vergleich werden diese Simulationen auch in zwei Dimensionen ausgeführt. Die

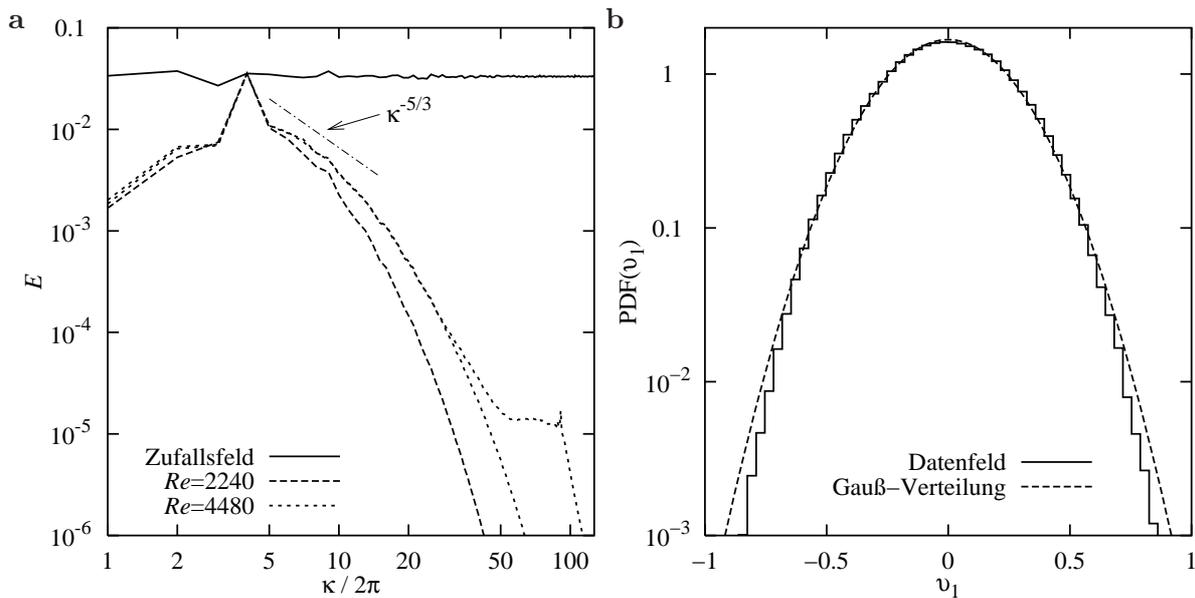


Abbildung 3.13: a: Energiespektren während der Eingangssimulation zur Generierung einer Anfangsbedingung für die Geschwindigkeit. b: Histogramm der v_1 -Komponente der Geschwindigkeit für das Anfangsfeld TS_{3d} , zusammen mit einer Gaußverteilung ($\langle v_1^2 \rangle = 0.0567$ und $\bar{v}_1 = 0$).

Tabelle 3.6: Turbulente Skalen in den anfänglichen Strömungsfeldern TS_{2d} , TS_{3d} .

	l_Λ	l_η	t_Λ	t_η
2d	0.140	0.00324	12.2	0.0929
3d	0.0887	0.00506	1.34	0.0573

Reynolds-Zahl wird verglichen mit Abschnitt 3.3 auf ein Viertel, d.h. auf $Re = 8825$ reduziert. Das berechnete Zeitintervall beträgt in TS_{2d} $t \in [0; 3.6]$ und in TS_{3d} $t \in [0; 0.9]$.

Tab. 3.6 stellt die turbulenten Skalen der Anfangsbedingungen TS_{2d} und TS_{3d} gegenüber. In zwei wie in drei Dimensionen ist die integrale Länge kleiner als die Größe des Rechengebiets, so daß die zeitliche Evolution nicht von den gewählten Randbedingungen dominiert wird. Die Kolmogorov-Länge liegt in der Größenordnung der Gitterweite. Dies ist unproblematisch, da (3.30) die Größe der kleinsten Wirbel unterschätzt [94, 95]. In den dreidimensionalen Simulationen sind diese Skalen aufgrund der statistischen Stationarität weitgehend konstant, während sie sich in den zweidimensionalen Untersuchungen monoton verändern.

Tabelle 3.7: Globale Mischzeiten t_{mix} für Simulationen $\text{TS}_{2\text{d}}$ und $\text{TS}_{3\text{d}}$. Die in Klammern angegebenen Werte sind Standardabweichungen bei Durchführung von Simulationen mit fünf Realisationen für den Massenbruch.

Fall	$Sc = 0.5$	$Sc = 1$	$Sc = 2$	$Sc = 5$
$\text{TS}_{2\text{d}} I, Re = 8\,825$		4.202		7.205
$\text{TS}_{2\text{d}} II, Re = 8\,825$		5.249		8.262
$\text{TS}_{2\text{d}} III, Re = 8\,825$	1.468	2.491 (0.169)	2.389	3.871 (0.185)
$\text{TS}_{3\text{d}} III, Re = 2\,240$	0.8151	0.9762 (0.023)	1.138	

3.4.3 Evolution der Wirbelstärke und des Massenbruchs

Abb. 3.14 zeigt die zeitliche Evolution einer Berechnung in drei Dimensionen. Dargestellt ist in Abb. 3.14a der Betrag der Wirbelstärke zu drei Zeiten $t = 0, 0.45$ und $t = 0.89$. Aus den Isoflächen kann die Wirbelform in turbulenten Strömungen abgeleitet werden. Hier erkennt man vor allem lange Wirbelschläuche als charakteristische Strukturen in der Strömung [123]. In den Schnitten zeigen sich, ähnlich wie in den zweidimensionalen Simulationen (vgl. Abb. 3.6a), sowohl Wirbel als auch langgezogene Filamente. Zusätzlich beeinflusst der Effekt der Wirbelstreckung durch dreidimensionale Interaktionen der Wirbel die Form der Wirbelstrukturen. Abb. 3.14b zeigt die Evolution des Massenbruchs bei einer Schmidt-Zahl von $Sc = 1$. Wie in Abschnitt 3.3 findet man Prozesse der Makrovermischung, die die Grenzfläche zwischen chemischen Spezies verlängert. Dadurch werden die Gradienten im Massenbruchfeld erhöht, so daß durch Mikrovermischung die Varianz des Massenbruchs abnimmt.

3.4.4 Vermischungskriterien

Zur Quantifizierung der Vermischung werden in diesem Abschnitt die globalen Zeitskalen bzw. die Massenbruchverteilungen betrachtet. Des weiteren wird das Verhältnis der in vielen Simulationen verwendeten integralen Zeitskalen (3.34),(3.36) diskutiert.

Tab. 3.7 faßt die Mischungszeiten für verschiedene Konfigurationen zusammen. Aufgrund der unterschiedlichen Reynolds-Zahl und des *forcing* sind die Daten aus den zwei- und dreidimensionalen Simulationen nicht direkt vergleichbar. Sind in Tab. 3.7 Werte in Klammern angegeben, so bedeuten diese die Standardabweichung als Fehlerindikator für die Mischungszeitskalen. Letztere sind dann statistisch gemittelt aus Simulationen mit fünf verschiedenen Konstellationen für den Massenbruch. Beobachtet werden für *III* generell kleinere t_{mix} als für *I* bzw. *II*. In letzteren ist die Grenzfläche zwischen den unvermischten Gebieten bei $t = 0$ nur sehr klein (s. Abb. 3.4c), während sie in der ersteren bereits sehr ausgeprägt ist (s. Abb. 3.14b). Dies

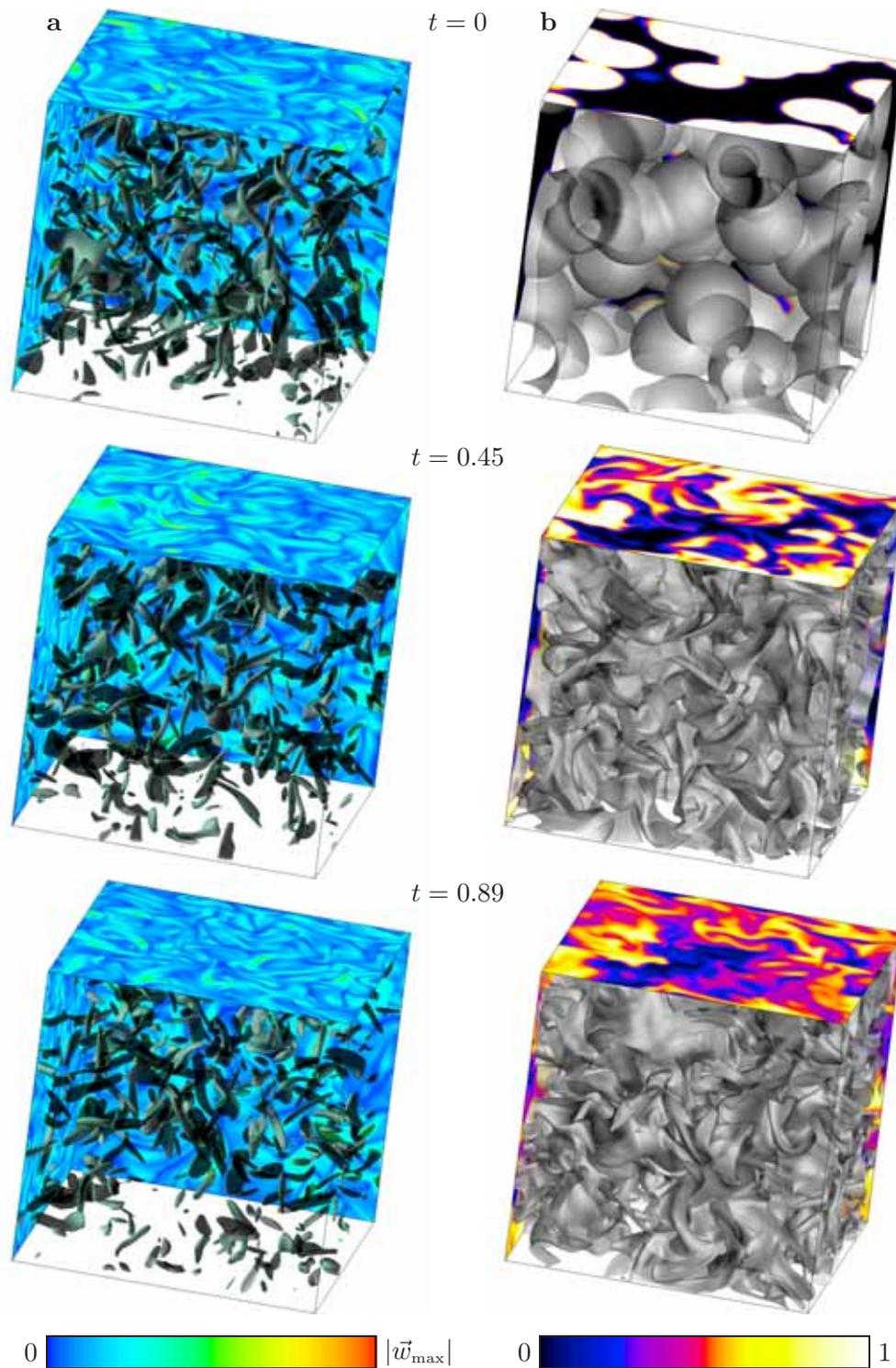


Abbildung 3.14: Zeitliche Evolution von TS_{3d} . **a:** Betrag der Wirbelstärke und **b:** Massenbruch zu den Zeitpunkten $t = 0$, 0.45 und $t = 0.89$. Dargestellt sind Isoflächen der Wirbelstärke ($w = |\vec{w}_{\max}|/3$) und des Massenbruchs ($Y = 0.5$) und je drei Schnitte. Die maximale Wirbelstärke beträgt $|\vec{w}_{\max}| = 110$.

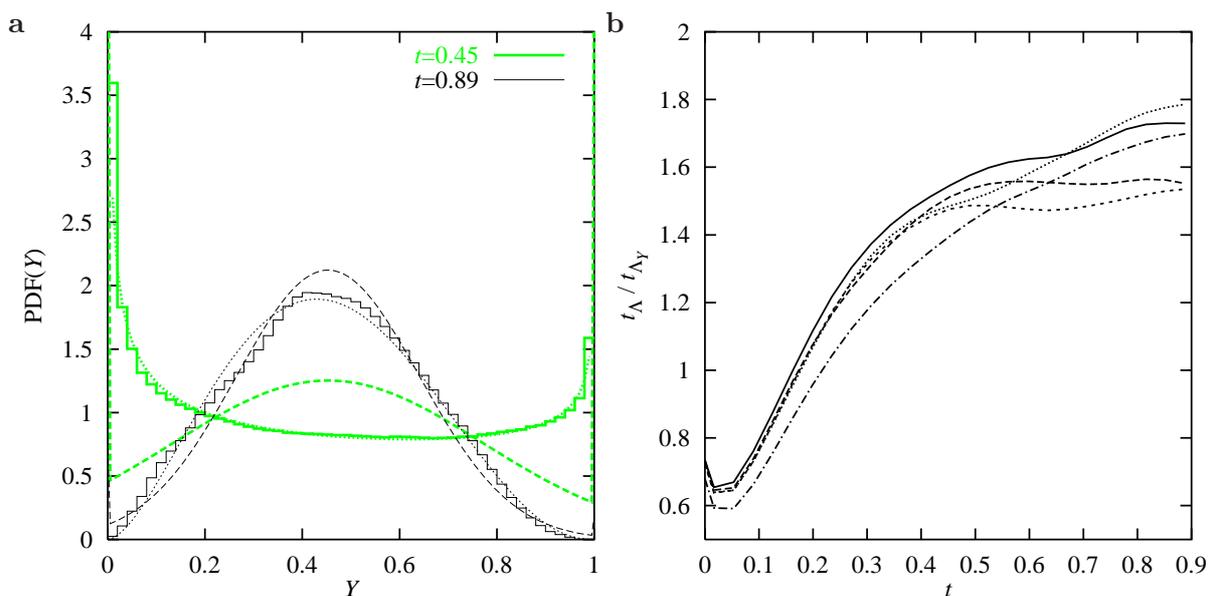


Abbildung 3.15: **a:** Histogramme des Massenbruchs für TS_{3d} *III*, $Sc = 1$ zu zwei Zeitpunkten. Dargestellt sind ebenfalls Beta- (gepunktet) und Gauß-PDF (gestrichelt). Mittelwert und Varianz hierfür sind aus den jeweiligen Datenfeldern ermittelt. **b:** Zeitliche Evolution des *mechanical-to-scalar time-scale ratio* für verschiedene Realisationen des Massenbruches für TS_{3d} *III*.

ist eine Folge der bei Konfiguration *III* schon zu Beginn vorliegenden ausgeprägten Makrovermischung. Dadurch gewinnt der Prozeß der Mikrovermischung ebenfalls früher an Bedeutung. Die globale Zeitskala der Vermischung wird dadurch vermindert.

Zum Vergleich der Ergebnisse mit den in der PDF-Modellierung vorgegebenen Verteilungen für die Massenbrüche werden Histogramme der Massenbruchfelder TS_{3d} *III* für Simulationen mit $Sc = 1$ erstellt (s. Abb. 3.15a). Die ebenfalls aus diesen Feldern ermittelten Mittelwerte und Varianzen ergeben die Beta- und abgeschnittenen Gauß-PDFs. Wie in Abschnitt 3.3 sind für die abgeschnittenen Gauß-Funktionen in der frühen Phase der Simulation starke Diskrepanzen zu sehen. Die Beta-PDF, die für dreidimensionale turbulente Strömungen theoretisch abgeleitet worden ist [64, 60], beschreibt dagegen alle Massenbruchwerte in allen Simulationen und zu allen Zeiten sehr gut.

Im Zusammenhang mit statistisch stationärer Turbulenz werden in der Literatur häufig die integralen Zeitskalen der Strömung t_Λ und der skalaren Vermischung t_{Λ_Y} ins Verhältnis gesetzt [94, 73, 46] und als *mechanical-to-scalar time-scale ratio* bezeichnet. In einfachen Mischungsansätzen wird zur Schließung der skalaren Dissipation bei $Sc = 1$ häufig ein Verhältnis von $t_\Lambda/t_{\Lambda_Y} = 2$ angenommen [47]. Voraussetzung für die Annahme eines konstanten t_Λ/t_{Λ_Y} sind voll ausgebildete Spektren und ähnliche Mechanismen für die Dissipation der Geschwindigkeit

und des Massenbruchs [46]. Abb. 3.15d zeigt die Evolution dieses Verhältnisses für verschiedene Massenbruch-Konstellationen mit $Sc = 1$. Für alle Simulationen bewegt sich t_Λ/t_{Λ_Y} auf einen Grenzwert zwischen 1.5 und 1.8 zu. Dies entspricht den in DNS gefundenen Werten, die gewöhnlich im Bereich von 0.6 bis 2.4 liegen [40]. Im Anfangsstadium der Vermischung ist das Spektrum des Massenbruchs jedoch noch nicht voll ausgebildet, so daß hier Änderungen in t_Λ/t_{Λ_Y} zu verzeichnen sind.

3.5 Wechselwirkung von Vermischung und chemischen Reaktionen

Reagierende Systeme werden im Rahmen dieser Arbeit ausschließlich in zweidimensionalen Simulationen betrachtet. Aufgrund der erhöhten Gradienten in den Massenbruchfeldern sind alle Simulationen mit einer räumlichen Auflösung von 600^2 und einer Zeitschrittweite von $\delta t = 8 \cdot 10^{-5}$ durchgeführt worden.

3.5.1 Ein-Schritt-Reaktion

Der Einfluß einer chemischen Reaktion wird in diesem Abschnitt anhand einer binären, irreversiblen isothermen Reaktion zweiter Ordnung zwischen den chemischen Spezies A und B untersucht, wie in (3.13),(3.14) dargestellt [57]. Dabei sind $Sc_A = Sc_B = 1$. Die Damköhler-Zahl variiert von $Da = 4.0, 20$ bis $Da = 100$. Die Anfangsbedingung für den Massenbruch von A ist gegeben durch das Feld II , den Massenbruch von B erhält man durch die Bedingung $Y_{B,0} = 1 - Y_{A,0}$. Untersucht wird die Reaktion in den Strömungsfeldern $KW_{2d}\cdot D$ bzw. TS_{2d} (s. Abschnitt 3.3). Die Reynolds-Zahlen entsprechen denen aus Abschnitt 3.3.

Da eine chemische Reaktion nur in molekular vermischten Regionen stattfinden kann, hat die Reaktionsgeschwindigkeit große Werte nur in der Grenzlinie zwischen A und B. Für sehr schnelle chemische Reaktionen, d.h. $Da \rightarrow \infty$, kann ω_{int} als Mikrovermischungskriterium betrachtet werden, da das System dann einem „gemischt = reagiert“-Problem entspricht. In einem solchen Fall ist ω_{int} nur abhängig vom Vermischungs-Prozeß, da dieser die größte Zeitskala aufweist. Der andere Grenzfall sehr langsamer Reaktionen ($Da \rightarrow 0$) dagegen impliziert eine molekulare Vermischung vor Eintreten der Reaktion.

Abbildung 3.16 zeigt die integrale Reaktionsgeschwindigkeit ω_{int} für verschiedene Simulationen. Wegen der geglätteten Anfangsbedingung und der damit verbundenen leichten Vorvermischung nimmt die Reaktionsrate zu Beginn große Werte an, die jedoch schnell abfallen. Betrachtet man eine vergleichsweise langsame Reaktion für $KW_{2d}\cdot D$ II mit $Da = 4.0$, beobachtet man nach dieser Anfangsphase fast keine Änderungen in der integralen Reaktionsgeschwindigkeit. Das bedeutet, daß die Geschwindigkeiten von molekularer Vermischung durch

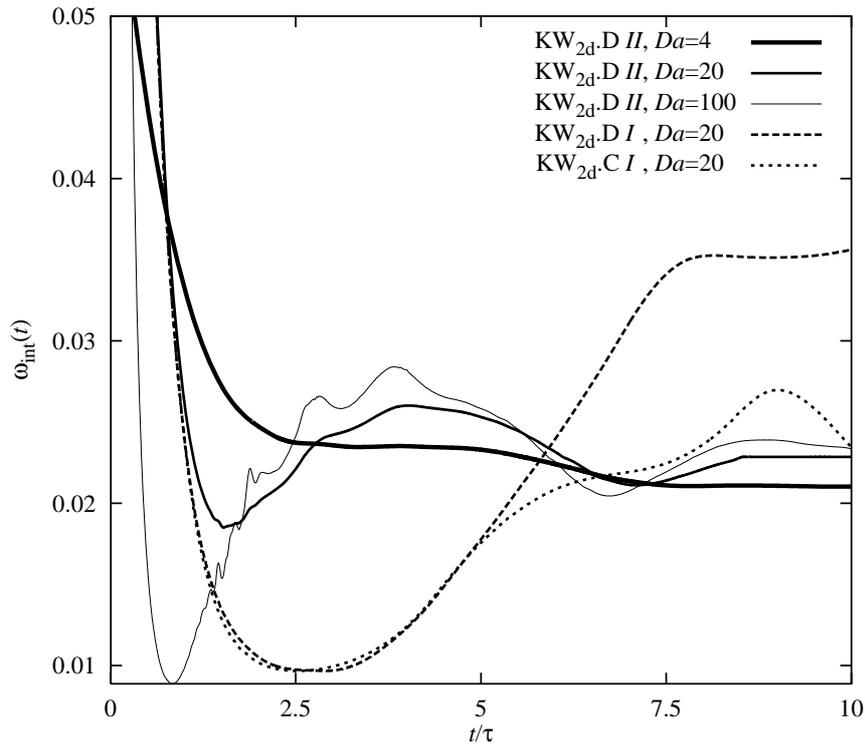


Abbildung 3.16: Integrale Reaktionsgeschwindigkeit ω_{int} für die Simulationen $\text{KW}_{2\text{d}}\cdot\text{D I}$ (durchgezogene Linien: $Da = 4.0, 20, 100$), für $\text{KW}_{2\text{d}}\cdot\text{D II}$ und für $\text{KW}_{2\text{d}}\cdot\text{C I}$ (gestrichelt, jeweils $Da = 20$).

Spiralbildung und Abreaktion der gemischten Gebiete von derselben Größenordnung sind. Bei $Da = 20$ konkurrieren die beiden Prozesse miteinander, so daß man den Effekt der frühen Spiralbildung direkt in der Evolution von ω_{int} in dem Ansteigen von 1.5τ bis 4τ findet. Nach der dadurch sehr effektiven Vermischung nimmt die Reaktionsrate wieder ab und steigt erst wieder an, wenn die beiden großen Wirbel verschmolzen sind. Sind die Reaktionsgeschwindigkeiten noch höher ($Da = 100$), ist dieser Effekt noch stärker, ω_{int} spiegelt dann direkt die Charakteristika der Strömung und Vermischung wider. Der Einfluß der Wirbelverschmelzung wird anhand des Vergleichs der Konfigurationen $\text{KW}_{2\text{d}}\cdot\text{D I}$ und $\text{KW}_{2\text{d}}\cdot\text{C I}$ deutlich, die wie erwähnt schnelle bzw. langsame Wirbelverschmelzung zeigen. Der Effekt der Spiralbildung dagegen tritt bei Massenbruch-Konfiguration I nicht auf. Die Verläufe von ω_{int} sind zu Beginn ähnlich, später jedoch sind die Werte bei der Zwei-Wirbel-Konfiguration kleiner als für die Drei-Wirbel-Konfiguration. Dieser Unterschied kann direkt auf die Wirbelverschmelzung zurückgeführt werden.

Abb. 3.17a zeigt Schnitte durch das Massenbruchfeld von A für die drei Werte der Damköhler-Zahl nach zehn Wirbelumdrehungen für $\text{KW}_{2\text{d}}\cdot\text{D II}$. Je schneller die chemische Reaktion, desto mehr werden die Massenbruchgradienten in der Grenze zwischen A und B erhöht. Analog zum

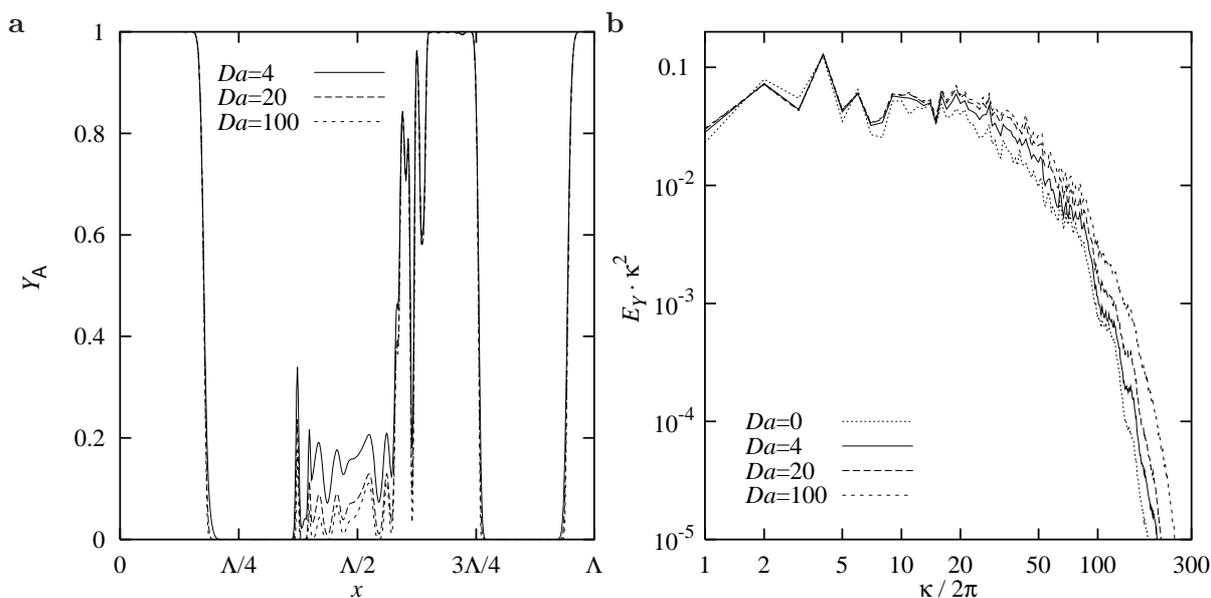


Abbildung 3.17: **a:** Horizontale Schnitte ($x_2 = \Lambda/2$) durch das Massenbruchfeld von A für KW_{2d}.D II nach 10τ ; **b:** dazugehörige Skalarspektren des Massenbruchs.

Konvektionsprozeß erhöht die Reaktion dadurch den Einfluß der molekularen Diffusion. Die skalare Energie wird dadurch zu höheren Werten für κ verschoben. Dies kann im Skalarspektrum, welches in Abb. 3.17b zur Veranschaulichung des Effektes mit κ^2 multipliziert dargestellt ist, beobachtet werden.

Analog zu den Untersuchungen in Abschnitt 3.3.5 wird für die reagierende Strömung die Massenbruchverteilung mit den in Modellen verwendeten PDFs verglichen. Die Damköhler-Zahl ist $Da = 4.0$, alle anderen Parameter entsprechen denen aus Abschnitt 3.3.5. Auch für reagierende Strömungen (s. Abb. 3.18) entsprechen die Ergebnisse denen aus dem genannten Abschnitt. Für den Drei-Wirbel-Fall kann keine Modell-PDF angemessen angepaßt werden, während die Übereinstimmung im turbulenten Fall mit der Beta-PDF sehr gut ist. Da die Massenbrüche v.a. auf die Randbereiche von $Y \approx 0$ und $Y \approx 1$ verteilt sind, zeigt die abgeschnittene Gauß-Funktion hier deutliche Schwächen.

3.5.2 Zwei-Schritt-Reaktion

Ein komplexeres chemisches System besteht aus einer Parallel-Folgereaktion nach (3.15)–(3.18). In [29] ist für ein solches Schema aus einer Parallel- und Folgereaktion die Selektivität für das Nebenprodukt in Abhängigkeit der verschiedenen Systemparameter untersucht worden, [28] beschäftigt sich mit der Anwendung von Schließungsmodellen für solche Reaktionen. In dieser Arbeit werden analog zu den Betrachtungen aus dem letzten Abschnitt vor allem Vergleiche mit Modell-PDFs vorgenommen. Zusätzlich werden Umsatz der Reaktanten bzw.

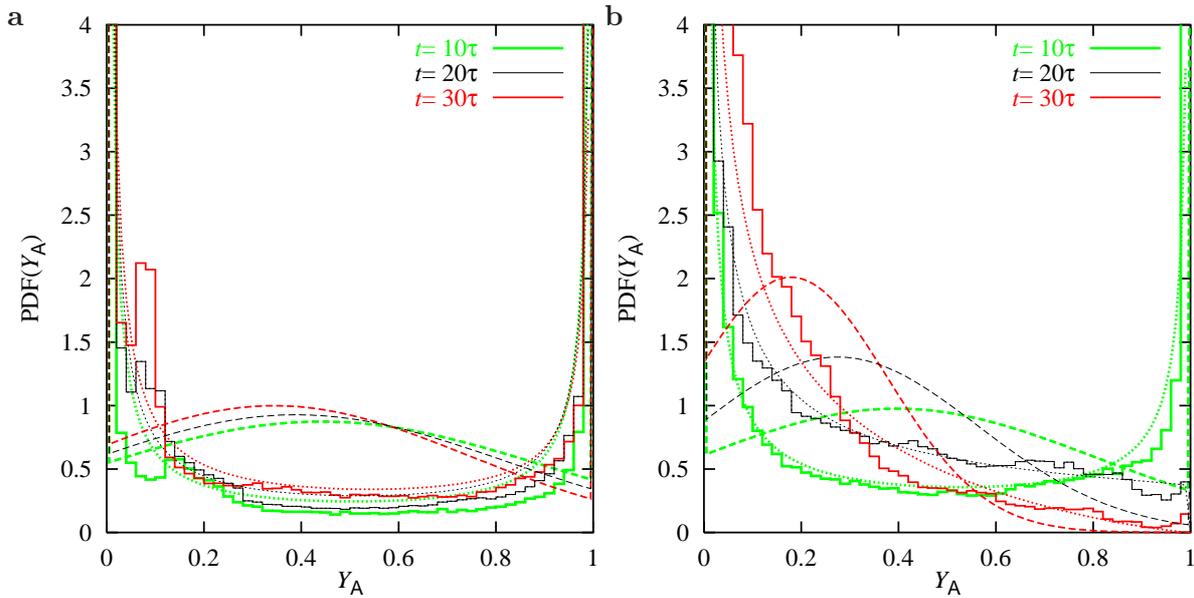


Abbildung 3.18: PDF des Massenbruchs in einer reagierenden Strömung mit $Da = 4.0$ nach 10τ , 20τ und 30τ . **a:** $KW_{2d}.D II$, **b:** $TS_{2d} II$. Zugehörige Beta- (gepunktet) und Gauß-PDF (gestrichelt).

Ausbeute der Produkte betrachtet. Die Ergebnisse bezüglich der Gradientenerhöhung durch die Reaktion, Schnitte durch die Datenfelder und der integralen Reaktion entsprechen denen aus vorigem Abschnitt, so daß sie in diesem Abschnitt nicht präsentiert werden.

Als Anfangsbedingung für die Massenbrüche von A werden die Konfiguration *I* bzw. *III* gewählt, der Massenbruch von B ist wieder gegeben durch $Y_{B,0} = 1 - Y_{A,0}$. Die Massenbrüche der Produkte betragen zu Beginn $Y_{P,0} = Y_{Q,0} = 0$. Als Strömungsfeld wird TS_{2d} mit einer Reynolds-Zahl von $Re = 9875$ verwendet. Die Schmidt-Zahl beträgt für alle Spezies einheitlich $Sc_i = 1$. Untersucht werden zwei Parametersätze für das Reaktionsschema, wobei das Verhältnis der Reaktionsgeschwindigkeitskoeffizienten konstant ist. Betrachtet wird ein System schneller Reaktionen mit $Da_1 = 100$, $Da_2 = 20$ ($TS_{2d}.S$) und eines langsamer Reaktionen mit $Da_1 = 5$, $Da_2 = 1$ ($TS_{2d}.L$).

Abb. 3.19a zeigt die Evolution der Restanteile von A und B sowie die Ausbeuten an P und Q für den Fall $TS_{2d}.S III$. Die anhand der Konfiguration *III* makro-vorgemischten Volumenelemente weisen eine geringe Mischungszeitskala auf, so daß die Reaktion schnell einsetzt. Durch die hohen Reaktionsgeschwindigkeiten nehmen Y_A und Y_B schnell ab, wobei der Massenbruch von A wegen der Teilnahme an der Folgereaktion schneller sinkt. Schon nach einer relativ kurzen Zeit von $t \approx 0.5$ wird die Ausbeute an Q größer als die von P, d.h. die Reaktion geht durch bis zum Nebenprodukt. Bei $t \approx 2$ ist der Restanteil an A soweit zurückgegangen, daß die Massenbrüche sich nur noch wenig ändern. Die Evolution der Restanteile bzw. Ausbeuten für $TS_{2d}.L III$ ist in Abb. 3.19b dargestellt. Die Restanteile der Reaktanten nehmen hier bis

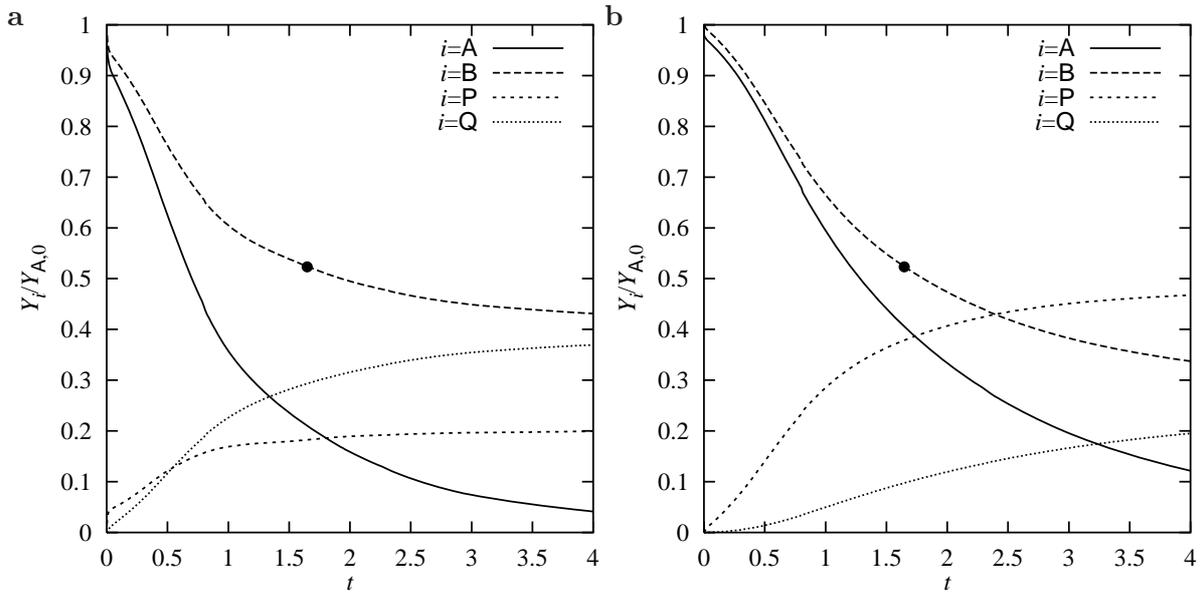


Abbildung 3.19: Zeitliche Evolution der Restanteile bzw. Ausbeuten in zweidimensionaler Turbulenz für Konfiguration III. **a:** $Da_1 = 100$, $Da_2 = 20$. **b:** $Da_1 = 5$, $Da_2 = 1$.

$t = 0.75$ nur langsam ab. Zusätzlich verlaufen die Kurven für die Massenbrüche der Reaktanten weitgehend parallel. Das bedeutet, daß die Folgereaktion nur eine geringe Rolle spielt, was in der sehr langsam ansteigenden Ausbeute an Q zu sehen ist. In diesem Fall findet man eine Selektivität zugunsten des gewünschten Produkts P. Ein Vergleich der Reaktionssysteme zeigt wie erwartet, daß im Fall von $TS_{2d}.L$ weniger A verbraucht wird. Ab dem in den Abbildungen durch die Punkte gekennzeichneten Zeitpunkt ($t \approx 1.65$) ist der Verbrauch an B jedoch für das langsamere Reaktionssystem größer. Trotz der um den Faktor 20 kleineren Damköhler-Zahlen wird dadurch auch mehr von dem gewünschten Produkt P produziert. Das bedeutet, daß die Erhöhung der Reaktionsgeschwindigkeit nicht unbedingt zum Erfolg führt, wenn die Menge eines gewünschten Produkts maximiert werden soll. Mit anderen Worten kann bei Reaktionen mit einer langsamen Folgereaktion die Ausbeute an dem gewünschten Produkt gesteigert werden, indem die Reaktionsgeschwindigkeitskoeffizienten z.B. durch eine Temperaturerniedrigung verkleinert werden.

Simulationen mit Konfiguration I für die Massenbrüche zeigen prinzipiell das gleiche Verhalten, wengleich durch die anfänglich stärkere Segregation der Reaktanten die Mischungszeitskalen größer sind und damit die integralen Reaktionsgeschwindigkeiten geringer sind. Tab. 3.8 stellt die Ausbeuten an den Produkten für die verschiedenen Berechnungen zu den Zeiten $t = 2$ und $t = 4$ gegenüber. Die Daten zeigen, daß die Ergebnisse weitgehend unabhängig von der gewählten Anfangsbedingung sind. Zusätzlich wird deutlich, daß bei den einzelnen Simulationen zu frühen Zeiten die Produktion von P noch mehr bevorzugt ist. In der Prozeßoptimierung

Tabelle 3.8: Ausbeuten bzw. Ausbeuteverhältnis der Produkte P und Q für *I* bzw. *III* und $Da_1 = 100$, $Da_2 = 20$ bzw. $Da_1 = 5$, $Da_2 = 1$ zu den Zeitpunkten $t = 2, 4$.

<i>t</i>		$Da_1 = 100, Da_2 = 20$		$Da_1 = 5, Da_2 = 1$	
		<i>I</i>	<i>III</i>	<i>I</i>	<i>III</i>
2	$Y_P/Y_{A,0}$	0.189	0.407	0.120	0.226
	$Y_Q/Y_{A,0}$	0.316	0.120	0.192	0.057
	Y_P/Y_Q	0.60	3.4	0.62	4.0
4	$Y_P/Y_{A,0}$	0.199	0.468	0.168	0.394
	$Y_Q/Y_{A,0}$	0.369	0.195	0.349	0.166
	Y_P/Y_Q	0.54	2.4	0.48	2.4

müssen bei solchen Reaktionen Abwägungen zwischen Selektivität und maximaler Ausbeute getroffen werden, die bei der Auslegung technischer Anwendungen zusätzlichen Bedingungen z.B. ökonomischer Art unterliegen.

Die Verteilung des Massenbruchs im Rechenggebiet ist schließlich in Abb. 3.20 für $TS_{2d,S III}$ und $TS_{2d,L III}$ zum Zeitpunkt $t = 2$ dargestellt. Die Histogramme der Reaktanten B und A (hier nicht gezeigt) können anhand der Beta-PDF gut beschrieben werden, für die Produkte ergeben sich jedoch Schwierigkeiten. Zum einen muß für die Normierung der Produkthistogramme ein erheblicher Aufwand betrieben werden, zum anderen wird die Massenbruchverteilung des gewünschten Produkts nur mäßig gut beschrieben. Der Massenbruch des Nebenprodukts Q dagegen kann sowohl mit der Beta- als auch mit der Gauß-PDF angemessen dargestellt werden. Die Abweichungen für P liegen wohl daran, daß das Produkt sowohl gebildet wird als auch weiter reagieren kann, Q dagegen wird in Gebieten mit guten Vermischungseigenschaften produziert und dadurch selbst gut vermischt.

3.6 Fazit

Die Arbeiten in diesem Kapitel beschäftigen sich mit numerischen Grundlagenuntersuchungen der Wechselwirkung rotationsbehalteter Strömungen mit Vermischungsvorgängen und chemischen Reaktionen. Die zeitliche Entwicklung des Massenbruchs wird in solchen Systemen beeinflusst durch konvektiven und diffusiven Stofftransport sowie durch chemische Reaktionen. Die Beschreibung erfolgt durch ein physikalisches Modell, welches die Navier–Stokes- und Stoffbilanz-Gleichungen enthält. Da vorrangig Vermischungseffekte studiert werden, werden isotherme Bedingungen angenommen, so daß die Enthalpie-Bilanz-Gleichung nicht berücksichtigt werden muß. Die wesentlichen Annahmen bestehen in der Voraussetzung inkompressibler,

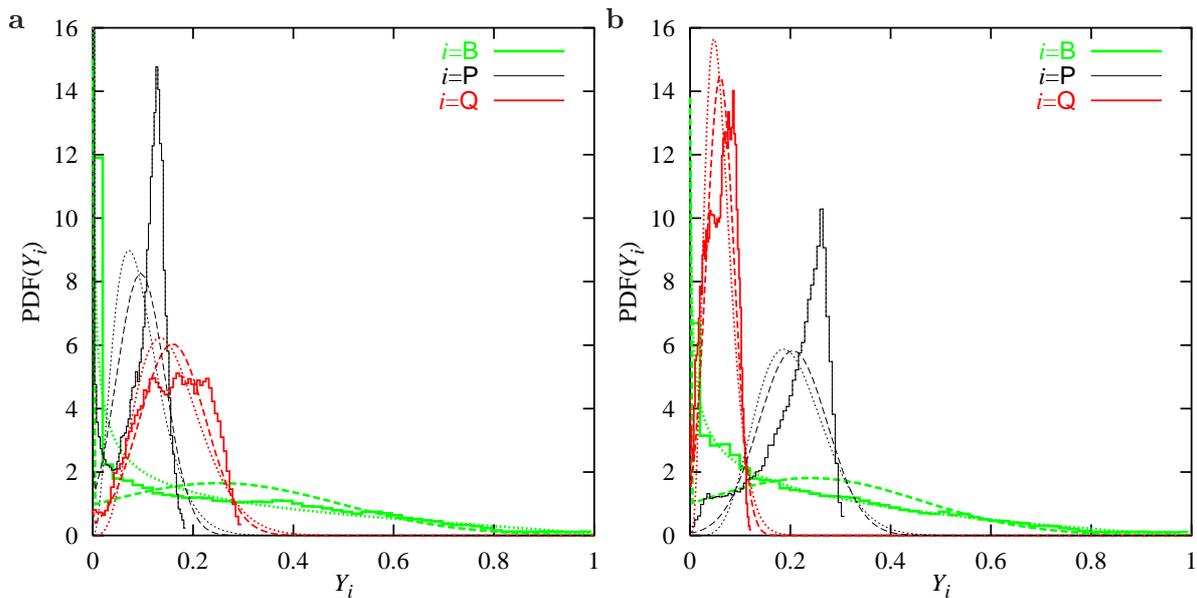


Abbildung 3.20: Histogramme des Massenbruchs $TS_{2d, III}$ zum Zeitpunkt $t = 2$. Dargestellt sind jeweils auch die in Modellen verwendeten Beta- (gepunktet) und Gauß-PDF (gestrichelt). **a:** $Da_1 = 100$, $Da_2 = 20$. **b:** $Da_1 = 5$, $Da_2 = 1$.

einphasiger Fluide mit konstanten Transportkoeffizienten, für das Rechengebiet werden periodische Randbedingungen angenommen. Untersucht wird das Mischverhalten zweier anfangs segregierter chemischer Spezies A und B. Die direkte numerische Simulation erfolgt in v.a. in zwei Dimensionen, erste Ergebnisse in drei Dimensionen werden ebenfalls präsentiert.

Vermischung und chemische Reaktion laufen in technischen Reaktoren meist unter turbulenten Strömungsbedingungen ab, da sie für alle transportierten Größen verbesserte Transporteigenschaften besitzen [48]. Diese Arbeit versucht, die Wirkungsweise einzelner elementarer Wirbelstrukturen anhand ihrer Vermischungseigenschaften in Abhängigkeit von der Schmidt-Zahl zu klassifizieren. Die Entstehung und Entwicklung solcher rotierender Strukturen spielen in vielen Systemen eine nicht zu unterschätzende Rolle [42, 125]. In zweidimensionalen Simulationen sind unterschiedliche Anordnungen von Wirbeln mit Gauß-förmigem Profil der Wirbelstärke als Strömungsfeld verwendet worden. Diese zeichnen sich dadurch aus, daß der Effekt der Wirbelverschmelzung, eine nicht-lineare Interaktion in rotationsbehafteten Strömungen, unterschiedlich stark ausgeprägt ist. Beinhaltet eine Strömung das Phänomen der Wirbelverschmelzung, finden sich in den Energie- und Skalarspektren ähnlich wie in turbulenten Strömungen Inertialbereiche [68, 57]. Ein Vergleich der zeitlichen Entwicklung dieser Wirbelstrukturen mit der Evolution voll ausgebildeter, abklingender zweidimensionaler Turbulenz illustriert anschaulich, daß solche Wirbelstrukturen auch unter turbulenten Bedingungen vorzufinden sind.

Die Ergebnisse zeigen, daß solche kohärenten Strukturen wesentliche Eigenschaften zweidi-

mensionaler Turbulenz beinhalten. In Bezug auf die Makrovermischung chemischer Spezies sind hier vor allem zwei Prozesse zu nennen:

Verschmelzung von Wirbeln: Durch die Verschmelzung von Wirbeln entsteht eine grobskalige Rotation, die eine effektive Makrovermischung der in der Strömung enthaltenen Volumenelemente verursacht. Dies bringt eine Verlängerung der Grenzfläche zwischen chemischen Spezies mit sich und bewirkt, daß die molekulare Vermischung in einem größeren Teilgebiet der Strömung erfolgt.

Ausbildung von spiralförmigen Strukturen: Wirbel, die in Grenzflächen zwischen zwei Spezies liegen, sorgen für eine schnelle Aufrollung der Grenzfläche. Dadurch werden die Massenbruchgradienten erhöht, was eine beschleunigte Mikrovermischung zur Folge hat.

Die Quantifizierung der Vermischung erfolgt anhand globaler Mischungszeitskalen, die aus dem Abklingverhalten der Varianz des Massenbruchs einer Spezies ermittelt werden [32, 114]. Diese enthalten nicht nur die Information eines endgültigen Mischungs Zustands, sondern die zeitliche Entwicklung des Mischungsprozesses.

In Abhängigkeit von der Schmidt-Zahl ergeben sich für die Mischungszeitskalen für die einzelnen Wirbelkonfigurationen Potenzgesetze. Solche können für die reine Diffusion abgeleitet werden bzw. sind für dreidimensionale Turbulenz in der Literatur zu finden [97]. Für die hier untersuchten Konfigurationen liegt der Exponent in diesen Potenzfunktionen zwischen diesen beiden Extrema für die Strömung. Dabei erhält man für die beiden oben diskutierten Mechanismen der Makrovermischung unterschiedliche Ergebnisse. Der Exponent ist abhängig vom Einfluß der Wirbelverschmelzung, wobei man sich bei starkem Einfluß derselben in Richtung des Exponenten für die Turbulenz bewegt. Im Falle der Spiralbildung findet man für alle Konfigurationen ähnliche Exponenten, d.h. die Art der Makrovermischung ist nur wenig abhängig von der Zahl der Wirbel in der Grenzfläche.

Die Wechselwirkung der Vermischung mit chemischen Reaktionen ist anhand zweier Reaktionssysteme in zweidimensionalen Simulationen erfolgt. Diese Wechselwirkung ist insbesondere dann von Bedeutung, wenn die Zeitskalen der Prozesse von derselben Größenordnung sind. Zum einen ist eine binäre Ein-Schritt-Reaktion zweier unvermischter Spezies A und B betrachtet worden. Qualitativ kann die Stärke der Kopplung von Vermischung und chemischer Reaktion anhand der integralen Reaktionsrate erklärt werden. Infolge der chemischen Reaktion erhöhen sich die Gradienten im Massenbruchfeld, was im Skalarspektrum beobachtet werden kann. Dadurch wird die Mikrovermischung beschleunigt. Bei komplexeren chemischen Reaktionen ist die gleichzeitige Untersuchung von Reaktionskinetik und Vermischung von großer Bedeutung. Dies kann anhand einer Zwei-Schritt-Reaktion verdeutlicht werden, die aus einer schnellen ersten und einer langsameren Folgereaktion besteht. Die Produktverteilung ist hierbei sowohl abhängig von den Damköhler-Zahlen als auch von den Vermischungseigenschaften

in der Strömung. So kann z.B. die Ausbeute an einem gewünschten Produkt gesteigert werden kann, indem die Reaktionsrate bei gleichen Vermischungseigenschaften vermindert wird.

Bei der Simulationen reagierender Strömungen werden häufig vorgegebene Verteilungsfunktionen für die Massenbrüche der chemischen Spezies verwendet. In dreidimensionaler Turbulenz ist als Form die Beta-PDF abgeleitet worden [64, 60]. Aufgrund der einfacheren Handhabung findet jedoch auch die abgeschnittene Gauß-Funktion Anwendung. Die hier gezeigten Simulationen zweidimensionaler Turbulenz bestätigen die Übereinstimmung mit der Beta-PDF sowohl in nicht-reagierenden als auch in reagierenden Strömungen, lediglich Zwischenprodukte in gekoppelten chemischen Reaktionen werden nur bedingt wiedergegeben. Abgeschnittene Gauß-Funktionen zeigen deutliche Schwächen während des Vermischungsprozesses. Die Massenbruchverteilungen in Strömungen der untersuchten kohärenten Wirbelstrukturen dagegen können nicht anhand der Modell-PDFs beschrieben werden, da sie starke lokale Unterschiede in den Vermischungseigenschaften aufweisen.

Eine parallele Implementierung des Codes ermöglicht Simulationen in drei räumlichen Dimensionen. Implementiert man eine zweidimensionale Wirbelstruktur in drei Dimensionen und versetzt sie mit einer geringen Störung, so erhält man bereits bei kleinen Reynolds-Zahlen einen Einfluß der dritten Dimension durch die Nicht-Linearität der Gleichungen [107]. Das betrachtete Zeitintervall von zehn Wirbelumdrehungen ist dabei jedoch zu kurz, um Veränderungen im Abklingverhalten der Varianz des Massenbruchs und somit in der Mischungszeitskala zu registrieren. Die Implementierung einer turbulenten dreidimensionalen Strömung bestätigt, daß in drei Dimensionen die Wirbelstrukturen aus langen Schläuchen bestehen [123]. Um Strömungen mit höheren Reynolds-Zahlen in drei Dimensionen zu simulieren, muß der Code weiter optimiert werden. Zur Erhöhung der Stabilität wird in Zukunft ein Zeitschema implementiert, welches die exakte Integration der molekularen Austauschterme vorsieht [27] und für die thermo-diffusiven Flammen in dieser Arbeit angewendet worden ist. Bei Anwendung eines *forcing* ist zusätzlich die Einführung eines *de-aliasing* zur Vermeidung von Fehlern auf den feinen Skalen notwendig, so daß bei gleicher Auflösung Strömungen mit höheren Reynolds-Zahlen gerechnet werden können.

Bei steigender Rechenkapazität ist es in naher Zukunft möglich, größere Reaktionsmodelle zu implementieren und die Temperaturabhängigkeit der chemischen Reaktionen zu berücksichtigen.

Kapitel 4 Zusammenfassung und Ausblick



In the next few years teraflop (10^{12} flops) computers will open an age in which we can study physics in new parameter domains, providing insights that may lead to new discoveries. These teraflop computers will be massively parallel, involving hundreds if not thousands of coupled processors tackling problems involving trillions of data points. [88]

Diese Arbeit zielt auf die direkte numerische Simulation der einzelnen Vorgänge in instationären reagierenden Strömungen. Dabei sind insbesondere die Wechselwirkung der chemischen Reaktion mit Transportprozessen durch Wärmestrahlung und -leitung sowie Stoffdiffusion bzw. mit Wirbelbewegungen und Vermischungsprozessen untersucht worden. Die direkte numerische Simulation eignet sich für solche wissenschaftlichen Grundlagenuntersuchungen, da sich die molekulare Vermischung und somit die chemische Reaktion auf den sehr feinen Skalen abspielen, die sonst meist modelliert werden. Implementiert worden ist hierzu ein Fortran77-Code auf Basis klassischer Fourier-Pseudo-Spektralmethoden im Ort [108, 57], der sich durch seine hohe Genauigkeit und Ordnung auszeichnet, so daß Probleme durch numerische Diffusion und Dispersion sehr gering sind [27]. Aufgrund der sehr großen Zahl von zu lösenden Gleichungen in dreidimensionalen Systemen ist diese Methode parallelisiert worden. Durch die Verwendung der *message passing interface*-Bibliothek für die Kommunikation zwischen den einzelnen Prozessoren entsteht ein plattformunabhängiger Code auf heute üblichen Parallelrechnern mit verteiltem Arbeitsspeicher. Die Simulationen in dieser Arbeit sind an universitäts- bzw. institutseigenen Rechnern durchgeführt worden (IBM RS/6000 SP, IBM RS/6000 SMP und PC-Cluster). Bei Verwendung von 32 Prozessoren sind Simulationen mit Auflösungen von 256^3 und zehn chemischen Spezies möglich. Mit diesem Code sind im wesentlichen zwei Systeme untersucht worden.

Das eine besteht in der Betrachtung thermo-diffusiver sphärischer Flammenstrukturen unter Ausschluß von konvektiver Strömung. Das betrachtete System besteht aus einer vorgemischten, mageren Wasserstoff-Luft-Atmosphäre, die in der Literatur anhand von Experimenten, theoretischen und numerischen Untersuchungen studiert worden ist [102, 19, 126, 66]. In dieser Arbeit wird die instationäre Entwicklung isolierter sphärischer Flammen diskutiert. Der

Einfluß der Wärmestrahlung und der Flammengröße wird in einem ersten Schritt unter Annahme von Kugelsymmetrie mit einem eindimensionalen Code studiert. Die Evolution in allen drei räumlichen Dimensionen wird dann für ausgewählte Flammen untersucht. Um den damit verbundenen Rechenaufwand zu bewältigen, sind Vereinfachungen in den Modellgleichungen nötig. Die chemische Reaktion wird anhand eines irreversiblen Ein-Schritt-Mechanismus modelliert, für die Strahlung wird ein Stefan–Boltzmann-Modell verwendet. Weiterhin werden eine konstante Dichte und Transportkoeffizienten angenommen. Mit diesem thermo-diffusiven Modell werden die Wechselwirkungen von chemischer Reaktion, Stofftransport durch Diffusion und Wärmetransport durch Wärmeleitung und Strahlung studiert.

In den Simulationen werden die verschiedenen aus Experimenten bekannten Szenarien validiert:

- Man beobachtet langsam wachsende Flammenstrukturen, die aufgrund der eindimensionalen Instabilität schließlich verlöschen [104].
- Durch die dreidimensionale Instabilität ergeben sich auffaltende Flammenstrukturen, die mit einer vorhergesagten Geschwindigkeit auseinander driften. Die Zahl der auftretenden Teilstrukturen stimmt qualitativ mit den experimentellen Ergebnissen überein [100].
- Schließlich liefern die Simulationen dreidimensional stabile Flammen, die sich im Parameterdiagramm zu einer Stabilitätskurve aufreihen. Die Form der Kurve und die ein- und dreidimensionalen Stabilitätsgrenzen sind mit Resultaten aus der linearen Stabilitätstheorie vereinbar [19].

Die in der Literatur verwendeten Modelle beschreiben jeweils nur einen Teil der Eigenschaften solcher thermo-diffusiven sphärischen Flammenstrukturen. Das hier verwendete Modell vereint die wesentlichen Charakteristika und bildet somit eine Brücke zwischen den Experimenten und den jeweils speziellen theoretischen Untersuchungen. Die hier gezeigten Ergebnisse erlangen besondere Relevanz gerade in mageren Flammen, in denen die Zeitskalen der einzelnen Prozesse von derselben Größenordnung sind.

Die Wechselwirkung von chemischen Reaktionen, Vermischung und konvektiver Strömung bildet den Mittelpunkt des zweiten in dieser Arbeit betrachteten Systems. Hierzu werden die inkompressiblen Navier-Stokes- und Stofftransportgleichungen in einem periodischen Gebiet gelöst. Vorausgesetzt werden isotherme Bedingungen und konstante Transportkoeffizienten. Untersucht wird der Einfluß von ausgewählten Wirbelstrukturen auf die Vermischung zweier segregierter chemischer Spezies. Solche Wirbelstrukturen sind als Charakteristika zweidimensionaler Turbulenz identifiziert worden [42]. Die Wirbel sorgen für eine Makrovermischung der Massenbruchfelder, was eine effektivere Mikrovermischung zur Folge hat. Zwei wesentliche Mechanismen zur Makrovermischung durch konvektive Vermischung können identifiziert werden:

- Die Verschmelzung von Wirbeln sorgt für einen effektiven konvektiven Transport im Rechengebiet, wodurch die Grenzfläche zwischen Volumenelementen verschiedenen Massenbruchs verlängert wird.
- Die Bildung von spiralförmigen Strukturen im Massenbruchfeld durch in solchen Grenzflächen platzierten Wirbeln sorgt für Aufrollung von Grenzflächen, wodurch die Massenbruchgradienten erhöht werden.

Strömungen, die solche Wirbelstrukturen beinhalten, sind durch globale Vermischungszeitskalen klassifiziert worden. Diese Zeitskalen werden aus dem Abklingverhaltens der Varianz des Massenbruchs berechnet. Alle untersuchten Strömungen besitzen Mischungszeitskalen, die in Abhängigkeit von der Schmidt-Zahl Potenzgesetzen gehorchen, wobei mit zunehmendem Einfluß der Wirbelverschmelzung die Vermischung verglichen mit reiner Diffusion beschleunigt wird und man sich zweidimensionaler Turbulenz annähert. Die Wirbel sorgen hierbei für eine beschleunigte Makrovermischung, wodurch die Mikrovermischung, die alleine für das Abklingen der Varianz verantwortlich ist, auch vorangetrieben wird.

Die Wechselwirkung der Vermischung mit chemischen Reaktionen ist anhand zweier einfacher Reaktionssysteme untersucht werden. Bei ähnlichen Zeitskalen von Vermischung und chemischer Reaktion ist die Reaktionsgeschwindigkeit stark von der aktuellen Mischgeschwindigkeit abhängig wie aus der Evolution der Reaktionsrate zu ersehen ist. Letztere sorgt wiederum für eine Erhöhung der Gradienten und beschleunigen somit die Mikrovermischung. Zum anderen sind Ausbeute und Selektivität bei komplexeren Reaktionssystemen vom Mischverhalten der Strömung abhängig. In der PDF-Modellierung turbulenter reagierender Strömungen finden Beta-Funktionen und abgeschnittene Gauß-Funktionen Anwendung. Die zeitliche Evolution der Massenbruchverteilung von Reaktanten und Endprodukten kann in nicht-reagierenden wie reagierenden zwei- und dreidimensionalen turbulenten Strömungen sehr gut mit Hilfe von Beta-Funktionen beschrieben werden. Die abgeschnittene Gauß-Funktion dagegen ist lediglich in den Grenz-Bereichen der totalen Segregation und der weitgehenden molekularen Vermischung zur Beschreibung der Massenbruchverteilung sinnvoll. Der dazwischen liegende Mischungsprozeß wird nur bedingt wiedergegeben.

Aufwendige dreidimensionale Simulationen zeigen, daß geringe Störungen in weitgehend zweidimensionalen Strömungen aufgrund von Instabilitäten die Dreidimensionalität bewirken, die grobe Struktur bleibt jedoch zweidimensional. Ebenfalls angestrengte Untersuchungen von stationärer homogener isotroper Turbulenz in drei Dimensionen illustrieren, daß Wirbelschläuche die wesentlichen Strukturen in dreidimensionaler Turbulenz darstellen [123]. Wie in der Literatur vorgeschlagen [94, 46], kann die Vermischung in voll ausgebildeten Strömungen anhand eines turbulenten Zeitmaßes charakterisiert werden.

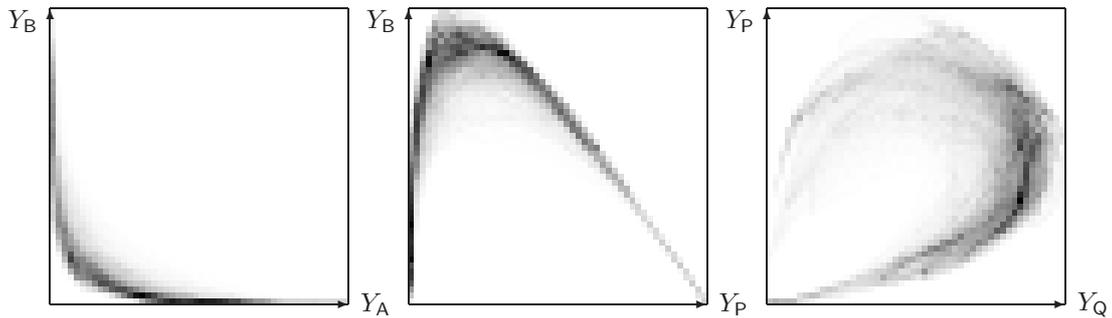


Abbildung 4.1: Verbund-PDF für TS_{2d} . III zum Zeitpunkt $t = 2.1$. Die Massenbrüche sind jeweils im Bereich zwischen dem Minimum und Maximum für die jeweilige Spezies dargestellt.

Zur Kontrolle und Optimierung chemischer Prozesse ist ein tiefgehendes Verständnis von Strömung, Vermischung und chemischer Reaktion sowie deren Wechselwirkungen notwendig. Basierend auf diesen fundamentalen Erkenntnissen können Modelle für solche Systeme entwickelt bzw. erweitert werden. Modelle sind notwendig, da die Vielzahl der Freiheitsgrade zur Beschreibung industrieller Applikationen zu groß ist, um ohne Reduktion der Komplexität erfaßt zu werden. Mit dem existierenden DNS-Code können die Voraussetzungen solcher Modelle überprüft werden.

Zukünftige Arbeiten können auf eine Erhöhung der Rechenkapazität hoffen, die z.B. höhere Reynolds-Zahlen zuläßt. Des weiteren können einfache nicht-isotherme Reaktionen implementiert werden. Weitere Validierungen von Modellvorstellungen zielen auf Verbundwahrscheinlichkeiten für chemische Spezies in reagierenden Systemen, die in Experimenten nur schwer meßbar sind. Abb. 4.1 zeigt z.B. einige Verbundwahrscheinlichkeitsverteilungen für die Spezies des in Abschnitt 3.5 diskutierten Zwei-Schritt-Modells. Die zweidimensionalen Histogramme sind dabei in 50^2 Boxen unterteilt und zeigen die Massenbrüche jeweils zwischen ihrem Minimum und Maximum. Man erkennt, daß die Massenbruchverteilungen der Reaktanten und Produkte durch bedingte PDFs beschrieben werden müssen. Experimentell können solche Verbundwahrscheinlichkeitsdichtefunktionen gemessen werden [39], so daß eine Validierung am Experiment direkt möglich ist.

Literaturverzeichnis

- [1] ABBUD-MADRID, A. and RONNEY, P.D.: *Premixed flame propagation in an optically thick gas.*
AIAA Journal, 31(11):2179–2180, 1993.
- [2] ABID, M., WU, M.-S., LIU, J.B., RONNEY, P.D., UEKI, M., MARUTA, K., KOBAYASHI, H., NIIOKA, T., and VANZANDT, D.M.: *Experimental and numerical study of flame ball IR and UV emissions.*
Combust. Flame, 116:348–359, 1999.
- [3] ALBRING, W.: *Elementarvorgänge fluider Wirbelbewegungen.*
Akademie, Berlin, 1981.
- [4] BAERNS, M., HOFMANN, H. und RENKEN, A.: *Chemische Reaktionstechnik*, Band 1 der Reihe *Lehrbuch der technischen Chemie.*
Georg Thieme, Stuttgart, 2., durchgesehene Auflage, 1995.
- [5] BALDYGA, J. and BOURNE, J.R.: *Simplification of micromixing calculations, I. derivation and application of new model.*
Chem. Eng. J., 42:83–92, 1989.
- [6] BALDYGA, J. and BOURNE, J.R.: *Simplification of micromixing calculations, II. new applications.*
Chem. Eng. J., 42:93–101, 1989.
- [7] BASDEVANT, C.: *Technical improvements for direct numerical simulation of homogeneous three-dimensional turbulence.*
J. Comput. Phys., 50:209–214, 1983.
- [8] BASDEVANT, C., PERRIER, V., PHILIPOVITCH, T., and DO KHAC, M.: *Local spectral analysis of turbulent flows using wavelet transforms.*
In BEALE, J.T., COTTET, G.H., and HUBERSON, S. (editors): *Vortex Flows and Related Numerical Methods*, pages 1–26. Kluwer Academic Publishers, 1993.
- [9] BATCHELOR, G. K.: *Computation of the energy spectrum in homogenous two-dimensional turbulence.*
Phys. Fluid, Suppl. II, 12:233–239, 1969.
- [10] BOCKHORN, H.: *Simulation chemischer Reaktionen in turbulenten Strömungen.*
Chem.-Ing.-Tech., 63(7):715–724, 1991.
- [11] BOCKHORN, H., FRÖHLICH, J., GERLINGER, W., and SCHNEIDER, K.: *Numerical investigations on the stability of flame balls.*

- In PAPAILIOU, K. ET AL. (editor): *4th European Computational Fluid Dynamics: Computational Fluid Dynamics*, volume 1, pages 990–995. John Wiley and Sons, 1998.
- [12] BOCKHORN, H., FRÖHLICH, J., GERLINGER, W., and SCHNEIDER, K.: *Direct numerical simulation of flame balls*.
In KEIL, F., MACKENS, W., VOSS, H., and WERTHER, J. (editors): *Scientific Computing in Chemical Engineering II: Combustion and Flame, Computer Aided Process Design, Control, Image Processing, Optimization, Neural Network*, volume 2, pages 102–109, Berlin, 1999. Springer.
- [13] BOCKHORN, H., FRÖHLICH, J., and SCHNEIDER, K.: *An adaptive two-dimensional wavelet-vaguelette algorithm for the computation of flame balls*.
Combust. Theory Modelling, 3(1):177–198, 1999.
- [14] BOCKHORN, H., GERLINGER, W. und SCHNEIDER, K.: *Direkte numerische Simulation von Mischung und Turbulenz in zweidimensionalen Strömungen*.
Chem.-Ing.-Tech., 72(6):618–621, 2000.
- [15] BOCKHORN, H., GERLINGER, W., SCHNEIDER, K., and ZIUBER, J.: *Simulation and analysis of mixing in two-dimensional turbulent flows using Fourier and wavelet techniques*.
In KEIL, F., MACKENS, W., VOSS, H., and WERTHER, J. (editors): *Scientific Computing in Chemical Engineering II: Molecular Properties, Reaction Diffusion Problems, Reaction Engineering, Simulation of Reactive Flows*, volume 1, pages 344–351, Berlin, 1999. Springer.
- [16] BOLZ, R.E. and TUVE, G.L. (editors): *Handbook of Tables for Applied Engineering Science*.
Chemical Rubber, Ohio, 1970.
- [17] BRETHOUWER, G. and NIEUWSTADT, F.T.M.: *Mixing of weakly and strongly diffusive passive scalars in isotropic turbulence*.
In *Direct and Large-Eddy Simulation III*, pages 311–322. Kluwer, 1999.
- [18] BUCKMASTER, J.: *A flame-string model and its stability*.
Combust. Sci. Tech., 84:163–176, 1992.
- [19] BUCKMASTER, J.: *The structure and stability of laminar flames*.
Annu. Rev. Fluid Mech., 25:21–53, 1993.
- [20] BUCKMASTER, J., GESSMANN, R., and RONNEY, P.: *The three-dimensional dynamics of flame-balls*.
Proc. Comb. Inst., 24:53–59, 1992.
- [21] BUCKMASTER, J.D. and JOULIN, G.: *Radial propagation of premixed flames and \sqrt{t} behaviour*.

- Combust. Flame, 78:275–286, 1989.
- [22] BUCKMASTER, J.D., JOULIN, G., and RONNEY, P.D.: *The structure and stability of nonadiabatic flame balls.*
Combust. Flame, 79:381–392, 1990.
- [23] BUCKMASTER, J.D., JOULIN, G., and RONNEY, P.D.: *The structure and stability of nonadiabatic flame balls, II. Effects of far-field losses.*
Combust. Flame, 84:411–422, 1991.
- [24] BUCKMASTER, J.D. and RONNEY, P.D.: *Flame ball drift in the presence of a total diffusive heat flux.*
Proc. Comb. Inst., 27:2603–2610, 1998.
- [25] BUSH, W.B. and FENDELL, F.E.: *Asymptotic analysis of laminar flame propagation for general Lewis numbers.*
Combust. Sci. and Tech., 1:421–428, 1970.
- [26] CAIL, S.: *Vergleich von Spektralmethode und Finite-Volumen-Verfahren anhand der Berechnung laminarer ebener Wirbelstrukturen*, 2001.
Seminararbeit, Institut für Chemische Technik und Engler–Bunte-Institut - Bereich Verbrennungstechnik, Universität Karlsruhe(TH).
- [27] CANUTO, C., HUSSAINI, M.Y., QUARTERONI, A., and ZANG, T.A.: *Spectral Methods in Fluid Dynamics.*
Springer, Berlin, 1988.
- [28] CHAKRABARTI, M. and HILL, J.C.: *First-order closure theories for series-parallel reaction in simulated homogeneous turbulence.*
AIChE Journal, 43(4):902–912, 1997.
- [29] CHAKRABARTI, M., KERR, R.M., and HILL, J.C.: *Direct numerical simulation of chemical selectivity in homogeneous turbulence.*
AIChE Journal, 41(11):2356–2370, 1995.
- [30] CHAMPION, M., DESHAIES, B., JOULIN, G., and KINOSHITA, K.: *Spherical flame ignition: Theory versus experiments for lean propane-air mixtures.*
Combust. Flame, 65:319–337, 1986.
- [31] CONDON, E.U.: *Handbook of Physics.*
McGraw-Hill, New York, 2. edition, 1967.
- [32] CORRSIN, S.: *The isotropic turbulent mixer: Part II. Arbitrary Schmidt number.*
AIChE Journal, 10(6):870–877, Nov. 1964.
- [33] COWARD, H. and JONES, C.: *Limits of flammability of gases and vapors.*
U.S. Bur. Mines Bull, 503:119–131, 1952.

- [34] D'ANGELO, Y. and JOULIN, G.: *Collective effects and dynamics of non-adiabatic flame balls*.
Combust. Theory Modelling, 5(1):1–20, 2001.
- [35] DENET, B. and HALDENWANG, P.: *A local extinction of the thermo-diffusive premixed flame at low Lewis number*.
In DERVIEUX, A. and LARROUTUROU, B. (editors): *Numerical combustion*, volume 351 of *Lecture notes in physics*, pages 223–232. Springer, Berlin, 1989.
- [36] DENET, B. and HALDENWANG, P.: *Numerical study of thermal-diffusive instability of premixed flames*.
Combust. Sci. and Tech., 86:199–221, 1992.
- [37] DIALER, K., ONKEN, U und LESCHONSKI, K.: *Grundzüge der Verfahrenstechnik und Reaktionstechnik*.
Carl Hanser, München, 1989.
- [38] DO-KHAC, M., BASDEVANT, C., PERRIER, V., and DANG-TRAN, K.: *Wavelet analysis of 2D turbulent fields*.
Physica D, 76:252–277, 1994.
- [39] EBERSOHL, N., KLOS, T., SUNTZ, R., and BOCKHORN, H.: *One-dimensional Raman scattering for determination of multi-point joint scalar PDFs in turbulent diffusion flames*.
Proc. Combust. Inst., 27:997–1005, 1998.
- [40] ESWARAN, V. and POPE, S.B.: *Direct numerical simulations of the turbulent mixing of a passive scalar*.
Phys. Fluids, 31(3):506–520, 1988.
- [41] ESWARAN, V. and POPE, S.B.: *An examination of forcing in direct numerical simulations of turbulence*.
Comput. Fluids, 16(3):257–278, 1988.
- [42] FARGE, M.: *Wavelet transforms and their applications to turbulence*.
Annu. Rev. Fluid Mech., 24:395–457, 1992.
- [43] FARGE, M., KEVLAHAN, N., PERRIER, V., and GOIRAND, E.: *Wavelets and turbulence*.
Proc. IEEE, 84(4):639–669, 1996.
- [44] FLETCHER, C.A.: *Computational Galerkin Methods*.
Springer series in computational physics. Springer, Berlin, 1984.
- [45] FLETCHER, C.A.: *Computational Techniques for Fluid Dynamics: Fundamental and General Techniques*.
Springer series in computational physics. Springer, Berlin, 2. edition, 1991.

- [46] FOX, R.O.: *Computational methods for turbulent reactive flows in the chemical process industry*.
Revue l'Institut Francais du pétrole, 51(2):215–242, 1996.
- [47] FOX, R.O.: *The Lagrangian spectral relaxation model of the scalar dissipation in homogeneous turbulence*.
Phys. Fluids, 9(8):2364–2386, 1997.
- [48] FRISCH, U.: *Turbulence*.
Cambridge University Press, Cambridge, 1995.
- [49] FRÖHLICH, J. and PEYRET, R.: *Calculations of non-Boussinesq convection by a pseudo-spectral method*.
Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 80:425–433, 1990.
- [50] FRÖHLICH, J. and PEYRET, R.: *A spectral algorithm for low Mach number combustion*.
Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 90:631–642, 1991.
- [51] GERLINGER, W.: *Direkte numerische Simulation nicht-reaktiver und reaktiver Strömungen: Interaktion of Strömung, Vermischung und chemischer Reaktion*.
Diplomarbeit, Universität Karlsruhe (TH), Institut für Chemische Technik, 1997.
- [52] GERLINGER, W., SCHNEIDER, K. und BOCKHORN, H.: *Direkte numerische Simulation des Mischverhaltens in zweidimensionalen turbulenten Strömungen*.
Chem.-Ing.-Tech., 71(9):950–951, 1999.
- [53] GERLINGER, W., SCHNEIDER, K., and BOCKHORN, H.: *Direct numerical simulation of mixing in geophysical flows*.
In DOPAZO, C. ET AL. (editor): *Advances in Turbulence VIII*, pages 355–358, CIMNE Barcelona, 2000.
- [54] GERLINGER, W., SCHNEIDER, K., and BOCKHORN, H.: *DNS of 3D flame instabilities*.
Z. Angew. Math. Mech., 81(S3):S529–S530, 2000.
- [55] GERLINGER, W., SCHNEIDER, K., and BOCKHORN, H.: *Mixing in 2D turbulent reactive flows*.
Z. Angew. Math. Mech., 81(S3):S531–S532, 2000.
- [56] GERLINGER, W., SCHNEIDER, K., and BOCKHORN, H.: *Numerical simulation of three-dimensional instabilities of spherical flame structures*.
Proc. Comb. Inst., 28:793–799, 2000.
- [57] GERLINGER, W., SCHNEIDER, K., FALK, L., and BOCKHORN, H.: *Numerical simulation of the mixing of passive and reactive scalars in two-dimensional flows dominated by coherent vortices*.
Chem. Eng. Sci., 55:4255–4269, 2000.

- [58] GERLINGER, W., SCHNEIDER, K., FRÖHLICH, J., and BOCKHORN, H.: *Numerical simulations on the stability of spherical flame structures.*
eingereicht bei Combust. Flame, 2001.
- [59] GERSTEN, K.: *Einführung in die Strömungsmechanik.*
Friedr. Vieweg & Sohn, Braunschweig, 2., durchgesehene Auflage, 1981.
- [60] GIRIMAJI, S.S.: *Assumed β -PDF model for turbulent mixing: Validation and extension to multiple scalar mixing.*
Comb. Sci. and Tech., 78:177–196, 1991.
- [61] GIVI, P.: *Model-free simulations of turbulent reactive flows.*
Prog. Energy Combust. Sci., 15:1–107, 1989.
- [62] HEYL, A.: *Modellierung komplexer chemischer Reaktionen in turbulenten Strömungen.*
Doktorarbeit, Universität Karlsruhe (TH), Chemieingenieurwesen, Dezember 1999.
- [63] HINZE, J.O.: *Turbulence*, volume 1 of *Series in Mechanical Engineering.*
McGraw-Hill, New York, 2nd edition, 1975.
- [64] JANICKA, J., KOLBE, W., and KOLLMANN, W.: *Closure of the equations for the probability density function of turbulent scalar fields.*
J. Non-Equilib. Thermodyn., 4:47–66, 1979.
- [65] JUNEJA, A. and POPE, S.B.: *A DNS study of turbulent mixing of two passive scalars.*
Phys. Fluids, 8(8):2161–2184, 1996.
- [66] KAGAN, L. and SIVASHINSKI, G.: *Self-fragmentation of nonadiabatic cellular flames.*
Combust. Flame, 108:220–226, 1997.
- [67] KERR, R.M.: *Higher-order derivative correlations and the alignment of small-scale structures in isotropic numerical turbulence.*
J. Fluid Mech., 153:31–58, 1985.
- [68] KEVLAHAN, N. and FARGE, M.: *Vorticity filaments in two-dimensional turbulence: Creation, stability and effect.*
J. Fluid Mech., 346:49–76, 1997.
- [69] KING, M.K. and ROSS, H.D.: *Overview of the NASA microgravity combustion program.*
AIAA Journal, 38(8):1337–1345, 1998.
- [70] KOLMOGOROV, A.N.: *Dissipation of energy in locally isotropic turbulence.*
Dokl. Adad. Nauk SSSR, 32:19–21, 1941.
- [71] KOLMOGOROV, A.N.: *The local structure of turbulence in incompressible viscous fluid for very large Reynolds numbers.*
Dokl. Adad. Nauk SSSR, 30:299–303, 1941.
- [72] KRAICHNAN, R.: *Inertial ranges in two-dimensional turbulence.*

- Phys. Fluid, 10:1417–1423, 1967.
- [73] LAUNDER, B.E.: *Current capabilities for modelling turbulence in industrial flows.*
Appl. Scient. Res., 48:247–269, 1991.
- [74] LELE, S.K.: *Compact finite difference schemes with spectral-like resolution.*
J. Comput. Phys., 103:16–42, 1992.
- [75] LESIEUR, M.: *Turbulence in Fluids.*
Kluwer, Dordrecht, 3rd, rev. and enlarged edition, 1997.
- [76] LLORENTE, I.M., TIRADO, F., and VÁZQUEZ, L.: *Some aspects about the scalability of scientific applications on parallel architectures.*
Parallel Comp., 22:1169–1195, 1996.
- [77] LOZINSKI, D., BUCKMASTER, J., and RONNEY, P.: *Absolute flammability limits and flame-balls.*
Combust. Flame, 97:301–316, 1994.
- [78] MARCHIORO, C. and PULVIRENTI, M.: *Mathematical Theory of Incompressible Nonviscous Fluids.*
Springer, Berlin, 1994.
- [79] MARKSTEIN, G.H.: *Experimental and theoretical studies of flame front stability.*
J. Aeronaut. Sci., 18(3):199–209, 1951.
- [80] MAUSS, F., PETERS, N., ROGG, B., and WILLIAMS, F.A.: *Reduced kinetic mechanisms for premixed hydrogen flames.*
In *Reduced Kinetic Mechanisms for Applications in Combustion Systems*, pages 29–43.
Springer, Berlin, 1993.
- [81] MCWILLIAMS, J.C.: *The emergence of isolated coherent vortices in turbulent flows.*
J. Fluid Mech., 146:21–43, 1984.
- [82] MERSMANN, A., GEISLER, R. und VOIT, H.: *Makro- und Mikromischen im Rührkessel.*
Chem.-Ing.-Tech., 60(12):947–955, 1988.
- [83] MEUNIER, P., LEWEKE, T., and ABID, M.: *Three-dimensional instability of two merging vortices.*
In *Proceedings of the 8th European Turbulence Conference*, pages 15–18, Kluwer, 2000.
- [84] MITANI, T. and WILLIAMS, F.A.: *Studies of cellular flames in hydrogen-oxygen-nitrogen mixtures.*
Combust. Flame, 39:169–190, 1980.
- [85] NOLL, B.: *Numerische Strömungsmechanik – Grundlagen.*
Springer, Berlin, 1993.
- [86] O’BRIEN, E.E.: *Turbulent Mixing in Systems with Simple Reactions.*

- Plenum Press, New York, 1975.
- [87] ORSZAG, S.A.: *Numerical simulations of incompressible flows within simple boundaries. I. Galerkin (spectral) representations.*
Stud. Appl. Math., 50:293, 1971.
- [88] ORSZAG, S.A. and ZABUSKY, N.J.: *High-performance computing and physics.*
Physics Today, pages 22–23, 1993.
- [89] OTTINO, J.M.: *Mixing, chaotic advection, and turbulence.*
Annu. Rev. Fluid Mech., 22:207–253, 1990.
- [90] PATNAIK, G., KAILASANATH, K., and SINKOVITS, R.S.: *A new time-dependent, three-dimensional flame model for laminar flames.*
Proc. Comb. Inst., 26:899–905, 1996.
- [91] PELCE, P. and CLAVIN, P.: *Influence of hydrodynamics and diffusion upon the stability limits of laminar premixed flames.*
J. Fluid Mech., 124:219–237, 1982.
- [92] PEYRET, R.: *Introduction to spectral methods with application to fluid mechanics.*
In *Computational Fluid Dynamics*, Lecture Series 1986-04, pages 1–46. van Karman Institute for Fluid Dynamics, 1986.
- [93] POINSOT, T., CANDEL, S., and TROUVÉ, A.: *Applications of direct numerical simulations to premixed turbulent combustion.*
Prog. Energy Combust. Sci., 21:531–576, 1996.
- [94] POPE, S.B.: *PDF methods for turbulent reactive flows.*
Prog. Energy Combust. Sci., 11:119–192, 1985.
- [95] POPE, S.B.: *Turbulent flows.*
Cambridge University Press, Cambridge, 2000.
- [96] PUMIR, A.: *A numerical study of mixing of a passive scalar in three dimensions in the presence of a mean gradient.*
Phys. Fluids, 6:2118–2132, 1994.
- [97] RAYNAL, F. and GENGE, J.-N.: *Energy saving in chaotic laminar mixing.*
Int. J. Heat and Mass Transfer, 40(14):3267–3273, 1997.
- [98] REYNOLDS, O.: *An experimental investigation of the circumstances which determine whether the motion of water shall be direct or sinuous, and the law of resistance in parallel channels.*
Phil. Trans. Roy. Soc. London, pages 51–105, 1883.
- [99] RICHARDSON, L.F.: *Weather Prediction by Numerical Process.*
Cambridge University Press, Cambridge, 1922.

- [100] RONNEY, P.D.: *Near-limit flame structures at low Lewis number*.
Combust. Flame, 80:1–14, 1990.
- [101] RONNEY, P.D.: *Premixed laminar and turbulent flames at microgravity*.
Space Forum, 4:49–98, 1998.
- [102] RONNEY, P.D.: *Understanding combustion processes through microgravity research*.
Proc. Comb. Inst., 27:2485–2506, 1998.
- [103] RONNEY, P.D.: *A perspective on the role of microgravity in combustion research*.
Combust. Flame, 116:317–318, 1999.
- [104] RONNEY, P.D. and SIVASHINSKI, G.: *A theoretical study of propagation and extinction of nonsteady spherical flame fronts*.
SIAM J. Appl. Math., 49(4):1029–1046, 1989.
- [105] RONNEY, P.D., WU, M.-S., PEARLMAN, H.G., and WEILAND, K.: *Experimental study of flame balls in space: Preliminary results from STS-83*.
AIAA Journal, 38(8):1361–1368, 1998.
- [106] RONNEY, P.D., WU, M.-S., PEARLMAN, H.G., and WEILAND, K.: *Structure of flame balls at low Lewis-number (SOFBALL): Results from the STS-83 & STS-94 space flight experiments*.
Online-version, <http://carambola.usc.edu/SOFBALLtalk/index.html>, 2000.
- [107] SATHIA, P.: *Numerical simulation of mixing in flows dominated by two and three dimensional coherent structures*.
Master's thesis, Universität Karlsruhe (TH) and Indian Institute of Technology Delhi, Institut für Chemische Technik, Feb. 2001.
- [108] SCHNEIDER, K.: *Wavelets, turbulence and chemical reactions*.
PhD thesis, Universität Karlsruhe (TH), Institut für Chemische Technik, Dezember 1996.
- [109] SCHNEIDER, K., KEVLAHAN, N., and FARGE, M.: *Comparison of an adaptive wavelet method and nonlinearly filtered pseudo-spectral methods for the two-dimensional Navier–Stokes equations*.
Theoret. Comput. Fluid Dynamics, 9(3/4):191–206, 1997.
- [110] SIVASHINSKY, G.I.: *Diffusional thermal theory of cellular flames*.
Combust. Sci. and Tech., 15:137–146, 1977.
- [111] SMAGORINSKY, J.S.: *General circulation experiments with the primitive equations. I. The basic experiment*.
Mon. Weather Rev., 91:99–164, 1963.
- [112] STEIN, E.M. and WEISS, G.: *An Introduction to Fourier Analysis on Euclidean Spaces*.
Princeton University Press, Princeton, 1971.

- [113] STREETER, V.L.: *Handbook of Fluid Dynamics*.
McGraw-Hill, New York, 1961.
- [114] SUBRAMANIAM, S. and POPE, S.B.: *A mixing model for turbulent reactive flows based on Euclidean minimum spanning trees*.
Combust. Flame, 115(4):487–514, 1998.
- [115] TEMPERTON, C.: *A note on prime factor FFT algorithms*.
J. Comp. Phys, 52:198–204, 1983.
- [116] TEMPERTON, C.: *Self-sorting mixed-radix fast Fourier transforms*.
J. Comp. Phys, 52:1–23, 1983.
- [117] TING, L. and KLEIN, R.: *Viscous Vortical Flows*, volume 374 of *Lecture Notes in Physics*.
Springer, Berlin, 1991.
- [118] TSE, S.D. and LAW, C.K.: *A computational study of the transition from localized ignition to flame ball in lean hydrogen/air mixtures*.
Proc. Comb. Inst., 28:1917–1924, 2000.
- [119] VILLERMAUX, E. and INNOCENTI, C.: *On the geometry of turbulent mixing*.
J. Fluid Mech., 393:123–147, 1999.
- [120] VILLERMAUX, E. and REHAB, H.: *Mixing in coaxial jets*.
J. Fluid Mech., 425:161–185, 2000.
- [121] VILLERMAUX, J., FALK, L., FOURNIER, M.C., and DETREZ, C.: *Use of parallel competing reactions to characterize micromixing efficiency*.
AIChE Symp. Ser., 286(88):6, 1991.
- [122] VILLERMAUX, J., FOURNIER, M.C., and FALK, L.: *A new parallel competing reaction system for assessing micromixing efficiency - determination of micromixing time by a simple mixing model*.
Chem. Eng. Sci., 51(23):5187–5192, 1996.
- [123] VINCENT, A. and MENEGUZZI, M.: *The dynamics of vortex tubes in homogeneous turbulence*.
J. Fluid Mech., 258:245–254, 1994.
- [124] WARNATZ, J. und MAAS, U.: *Technische Verbrennung*.
Springer, Berlin, 1993.
- [125] WETZEL, F.: *Numerische Berechnung laminarer Ringwirbelstrukturen*.
Diplomarbeit, Universität Karlsruhe (TH), Engler–Bunte-Institut, Bereich Verbrennungstechnik, Juni 1991.
- [126] WU, M.-S., LIU, J.-B., and RONNEY, P.D.: *Numerical simulation of diluent effects on flame ball structure and dynamics*.

- Proc. Comb. Inst., 27:2543–2550, 1998.
- [127] WU, M.-S., RONNEY, P.D., COLANTONIO, R.O., and VANZANDT, D.M.: *Detailed numerical simulation of flame ball structure and dynamics*.
Combust. Flame, 116:387–397, 1999.
- [128] ZABUSKY, N.J. and MELANDER, M.V.: *Three-dimensional vortex tube reconnection: Morphology for orthogonally-offset tubes*.
Physica D, 37:555–562, 1989.
- [129] ZEL'DOVICH, YA.B.: *Theory of Combustion and Detonation of Gases*.
Academy of Sciences, Moscow, 1944.
- [130] ZEL'DOVICH, YA.B., BARENBLATT, G.I., LIBROVICH, V.B., and MAKHVILADZE, G.M.:
The Mathematical Theory of Combustion and Explosions.
Consultants Bureau, New York, 1985.
- [131] ZIUBER, J., GERLINGER, W., SCHNEIDER, K., and BOCKHORN, H.: *Numerical studies on the stability of multi dimensional spherical flame structures*, 2000.
8th Int. Conf. on Num. Combust., Amelia Island, Florida.

Lebenslauf

Name: Wolfgang GERLINGER
geboren am: 23. September 1971
geboren in : Lauda
Familienstand: verheiratet
Nationalität: Deutsch

Ausbildung

1978 - 1982: Grundschule in Markelsheim
1982 - 1991: Gymnasium in Weikersheim
1991: Abitur
1991 - 1992: Wehrpflicht
1992 - 1994: Grundstudium der Chemie in Würzburg
1994: Vordiplom in Chemie
seit 1994: Studium der Wirtschaftswissenschaften in Hagen
1994 - 1997: Hauptstudium der Chemie in Karlsruhe
1997: Diplom in Chemie
1998: Vordiplom in Wirtschaftswissenschaften

Berufsweg

seit 1997: Wissenschaftlicher Angestellter an der Universität Karlsruhe
(Arbeitskreis Prof. Dr.-Ing. H. Bockhorn)