



Forschungszentrum Karlsruhe
in der Helmholtz-Gemeinschaft

Wissenschaftliche Berichte
FZKA 7287

Quantitative Modellierung und Simulation von Vormischflammen in inhomogenen Gemischen als gasdynamische Diskontinuität

A. Bronner

Institut für Kern- und Energietechnik

April 2007

Forschungszentrum Karlsruhe

in der Helmholtz-Gemeinschaft

Wissenschaftliche Berichte

FZKA 7287

**Quantitative Modellierung und Simulation von
Vormischflammen in inhomogenen Gemischen
als gasdynamische Diskontinuität**

Y. Bronner

Institut für Kern- und Energietechnik

Von der Fakultät für Maschinenbau der Universität Karlsruhe (TH)

genehmigte Dissertation

Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, Karlsruhe

2007

Für diesen Bericht behalten wir uns alle Rechte vor

Forschungszentrum Karlsruhe GmbH
Postfach 3640, 76021 Karlsruhe

Mitglied der Hermann von Helmholtz-Gemeinschaft
Deutscher Forschungszentren (HGF)

ISSN 0947-8620

urn:nbn:de:0005-072874

Quantitative Modellierung und Simulation von Vormischflammen in inhomogenen Gemischen als gasdynamische Diskontinuität

Zur Erlangung des akademischen Grades eines

Doktors der Ingenieurwissenschaften

von der Fakultät für Maschinenbau der

Universität Karlsruhe (Technische Hochschule)

genehmigte Dissertation von

Dipl.-Ing. Yvan Bronner

aus Annemasse

Tag der mündlichen Prüfung: 21. Dezember 2006

Vorsitzender: o. Prof. Prof. e.h. Dr.-Ing. habil. Herbert Oertel

Hauptreferent: Priv. Doz. Dr.-Ing. Andreas Class

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

Quantitative Modellierung und Simulation von Vormischflammen in inhomogenen Gemischen als gasdynamische Diskontinuität

Im Sonderforschungsbereich 606 "Instationäre Verbrennung: Transportphänomene, Chemische Reaktionen, Technische Systeme" der Universität Karlsruhe, in Zusammenarbeit mit dem Forschungszentrum Karlsruhe sowie dem DLR Stuttgart sollen fortschrittliche Verbrennungskonzepte, bei denen zeitabhängige Prozesse von Bedeutung sind, besser verstanden und weiterentwickelt werden. In diesen Konzepten wird zunehmend die Vormischverbrennung eingesetzt. Die vorliegende Arbeit beschäftigt sich mit der detaillierten Dynamik von Vormischflammen.

Die detaillierte Simulation chemischer und strömungsmechanischer Systeme ist zurzeit noch auf einfache Geometrien beschränkt, da zur Lösung der Erhaltungsgleichungen ein hoher numerischer Aufwand nötig ist. Hydrodynamische Modelle, in denen die physikalisch-chemischen Prozesse durch Modelle behandelt werden, erlauben die Simulation räumlich mehrdimensionaler Systeme, da die notwendige Auflösung sich auf hydrodynamische Längenskalen beschränkt.

Kürzlich wurde von A. G. Class ein hydrodynamisches Modell für Vormischflammen mittels strenger asymptotischer Methoden basierend auf den Grundgleichungen der Strömungsmechanik hergeleitet, das so genannte vereinheitlichte Modell. Die im Vergleich zu den hydrodynamischen Längenabmessungen dünnen Flammen werden als gasdynamische Diskontinuitäten aufgefasst. Dies ermöglicht die mehrdimensionale Modellierung der Flammendynamik und der Wechselwirkungen zwischen der Flamme und der Strömung bei einem vergleichsweise geringen Rechenaufwand.

In der vorliegenden Arbeit wird die vereinheitlichte Theorie für inhomogene Gemische erweitert. In Zusammenarbeit mit dem Institut für Technische Thermodynamik (ITT) der Universität Karlsruhe wird eine Methodik zur Bestimmung von quantitativen Parametern des Flammenmodells aus Rechnungen mit detaillierter Chemie hergeleitet, und für einen konkreten Fall angewendet. Die erhaltene quantitative Flammen-Modellierung wird numerisch umgesetzt unter Verwendung von TVD-Runge-Kutta-, WENO- und Level-Set-Methoden. Im Deutschen Zentrum für Luft- und Raumfahrt (DLR) Stuttgart wird experimentell eine Methan-Unterdruckvormischflamme untersucht. Zweidimensionale stationäre und instationäre Simulationen dieser Flamme werden durchgeführt und deren Ergebnisse mit den experimentellen Daten verglichen.

Quantitative modelling and simulation of premixed flames in inhomogeneous mixtures as gasdynamic discontinuities

The Sonderforschungsbereich 606: “Nonstationary combustion: transport phenomena, chemical reactions, technical systems” at the Universität Karlsruhe in cooperation with the Forschungszentrum Karlsruhe and the DLR Stuttgart aims to improve fundamental understanding and development of advanced combustion concepts, where time dependant processes are relevant. In these concepts premixed combustion is applied to a greater extent. In the present work the detailed dynamic of premixed flames is considered.

The detailed simulation of chemical and fluid mechanical systems is still limited to quite simple geometries, due to the high computational effort required for solving the conservation equations. Hydrodynamic flame models treat the physical-chemical processes through models and reduce thereby the required spatial and temporal resolution to hydrodynamic scales. Thus they allow the simulation of substantially more complex systems.

A. G. Class recently developed a hydrodynamic model for premixed flames applying strict asymptotic methods based on the fundamental equations of fluid mechanics, the so-called unified model. Flames which are thin compared to the hydrodynamic scales are viewed as gasdynamic discontinuities separating the burned and unburned gases. This allows for a multidimensional modelling of flame dynamic and of the interactions between flame and flow and results in a model which can be solved at a comparatively low computational cost.

In the present study the unified theory is extended for inhomogeneous mixtures. In cooperation with the Institut für Technische Thermodynamik (ITT) at Universität Karlsruhe a method for obtaining quantitative parameters of the flame model from 1D detailed flame structure simulations is developed and applied to a specific case. The quantitative flame model is implemented in a numerical code using TVD-Runge-Kutta- and WENO schemes as well as a level set method. In the Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt (DLR) a low pressure methane flame is experimentally studied. Two-dimensional stationary and instationary simulations of this flame are performed and compared with the experimental data.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	11
2	Das quantitative hydrodynamische Modell für inhomogene Gemische	17
2.1	Herleitung	18
2.1.1	Das vereinheitlichte Modell	18
2.1.2	Kompressible Strömungsbeschreibung	21
2.1.3	Herleitung der Sprungbedingungen	28
2.1.4	Asymptotik	29
2.1.5	Flammenposition	31
2.1.6	Flammengeschwindigkeitsbeziehung	33
2.2	Erweiterung für komplexe Chemie	35
2.2.1	Zusätzliche Annahmen	35
2.2.2	Sprungbedingungen und Flammengeschwindigkeitsbeziehung des hydrodynamischen Modells für inhomogene Mischung	37
2.2.3	Das Zwei-Schichten-Modell	40
2.2.4	Grenzen der Modellierung	41
2.3	Von qualitativ zu quantitativ	43
2.3.1	Der INSFLA-Code	44
2.3.2	Auswertung der INSFLA-Daten	48
2.3.3	Gültigkeitsgrenze des Modells charakterisiert durch die Peclet-Zahl	51
2.3.4	Effektive Zeldovich-Zahl	52
2.3.5	Streckung- und Gemischzusammensetzung-Abhängigkeit der Modell-Parameter	54
2.3.6	Einfluß des Zwei-Schichten-Modells	60
3	Anwendung des Modells	64
3.1	Hydrodynamische Grundgleichungen	64
3.2	Erfüllung der Sprungbedingungen	69
3.3	Geometrie und Randbedingungen	70
4	Numerik	76
4.1	Allgemein	76
4.2	Lösung der Navier-Stokes Gleichungen mit einem modifizierten Fractional-Step-Verfahren	76
4.2.1	Prinzip des Fractional-step Verfahrens	77
4.2.2	Erweiterung für gegebene Dichteänderungen	78

4.2.3	Lösung der Poisson-Gleichung	79
4.2.4	Randbedingungen	79
4.3	Level-Set Methode	80
4.3.1	Problematik	80
4.3.2	Prinzip	82
4.3.3	Reinitialisierung der Level-Set Funktion	84
4.3.4	Diskretisierung der Levelset Gleichung	85
4.4	Anwendung der Levelset Methode	87
4.4.1	Erweiterung der Flammengeschwindigkeitsbeziehung	87
4.4.2	Anfangsposition und Flammenstabilisierung	89
4.4.3	Kopplung zwischen Transportgleichungen und Level-Set-Funktion	90
4.5	Numerische Methoden und Validierung	91
4.5.1	Zeitliche Diskretisierung	91
4.5.2	Räumliche Diskretisierung	93
4.5.3	Validierung des Strömungslösers	94
4.6	Struktur des gesamten Codes	97
5	Zweidimensionale quantitative Rechnungen	101
5.1	Stationäre Rechnung	101
5.2	Periodische Konzentrationsstörungen	104
5.3	Numerischer Rechenaufwand	108
6	Zusammenfassung und Ausblick	111
7	Nomenklatur	113
A	Das bewegte Koordinatensystem	115
B	Entdimensionierung	117
C	Streckung	119

Abbildungsverzeichnis

1	Struktur nach Themenfeldern des Sonderforschungsbereichs 606: "Instationäre Verbrennung: Transportphänomene, chemische Reaktionen, technische Systeme" der Universität Karlsruhe in Zusammenarbeit mit dem Forschungszentrum Karlsruhe und dem DLR Stuttgart.	13
---	---	----

2	Vernetzung der zwei theoretischen Modellansätze mit dem Experiment in dem Teilprojekt A5. Die Kopplung zwischen der eindimensionalen detaillierten Simulation der Flammenstruktur und dem Gesamtmodell liefert quantitative Ergebnisse, welche mit den experimentellen Daten verifiziert werden. . . .	15
3	Stabilitätskarte des vereinheitlichten Modells, für kleine Lewis Zahl, $Le = 0.3$. Die rechte Abbildung ist eine vergrößerte Darstellung des eingerahmten Bereichs in der linken Abbildung. Es wird gezeigt, dass die zeitperiodische Eigenlösung oberhalb einer Grenzwellenzahl negative Anfachungsraten aufweist, so dass bei hohen Wellenzahlen Stabilität vorliegt.	16
4	Schematische Darstellung der notwendigen räumlichen Auflösung für die Beschreibung physikalisch-chemischer Vorgänge mit detaillierter Chemie, ILDM Methode und hydrodynamischem Modell.	18
5	Chemolumineszenz (I. Braun) einer laminaren Bunsenflamme. Die Flamme zeigt einen glatten Verlauf. Chemische Reaktionen sind auf eine dünne leuchtende Zone beschränkt. Vor und hinter der Reaktionszone ist die Strömung inert.	19
6	Im Darrieus-Landau-Modell trennt eine Flammenfläche unverbranntes Brenngas von ausgebranntem Rauchgas. Die Flammenfläche breitet sich mit einer konstanten Flammengeschwindigkeit relativ zum unverbrannten Gemisch aus. Die Größen beiderseits der Flammenfläche sind durch Sprungbedingungen verknüpft.	20
7	Schematische Darstellung der grundlegenden Idee zur Herleitung der Sprungbedingungen und Flammengeschwindigkeitsbeziehung im vereinheitlichten Modell. Das reaktive Modell ergibt einen stetigen Verlauf der thermodynamischen Größen. Das hydrodynamische Modell ergibt einen diskontinuierlichen Verlauf. Unterschiede ergeben sich lediglich innerhalb der Flammenstruktur. Die Differenz zwischen den zwei Modellen ergibt integrale Korrekturterme, welche Ausdrücke für die Sprungbedingungen und die Flammengeschwindigkeitsbeziehung liefern.	22
8	Laminare Flammengeschwindigkeit ν_L für Kohlenwasserstoff-Luft-Gemische bei $p = 1bar$, $T_u = 298K$. Punkte: Experimente, Linien: Simulationen mit einem detaillierten Mechanismus.	23

9	Definition der Lage der Unstetigkeitsfläche (Flammenposition) als den Schnittpunkt der äußeren Massenströme (oben). Das Dichteintegral I_R für zwei unterschiedliche Flammenpositionen (mitte: Unstetigkeitsfläche stimmt mit Reaktionsfläche überein, unten: Fläche wird so gewählt, dass sich ein kontinuierlicher äußerer Massenstrom ergibt).	32
10	Flammengeschwindigkeit (INSFLA) für 0.07 bar und 1 bar in Abhängigkeit von dem Äquivalenzverhältnis. In inhomogenen Mischungen muss die Konzentrationsabhängigkeit somit berücksichtigt werden.	36
11	Verdeutlichung des Prinzips des Zwei-Schichten-Modells anhand detaillierter INSFLA-Rechnungen: Aufteilung der Flammenstruktur in zwei Schichten. Rot: Vorheizzone und Reaktionszone, mit dem hydrodynamischen Ansatz modelliert. Blau: CO-Oxidationszone, mit einem Arrhenius-Ansatz modelliert. Das Zwei-Schichten-Modell ergibt eine verbesserte Genauigkeit und eine erweiterte Gültigkeit.	42
12	Struktur des Programmpakets INSFLA. Out: Ausgabemedien, Sto: Zwischendateien. Gestrichelt: nicht verwendete Teilprogramme. Der Programmteil INSINP dient zur Aufbereitung der Daten, die eigentliche numerische Lösung der Erhaltungsgleichungen erfolgt im Programmteil INSRUN.	47
13	Konfiguration der gestreckten Flamme in einer Gegenstromanordnung und Position des Rechengebiets. Durch Symmetrieannahme beschränkt sich das Rechengebiet auf die obere Hälfte. Die Flammenstreckung wird den tangentialen Druckgradient bewirkt.	49
14	Charakteristische Positionen in der Flammenstruktur. Die Berechnung der Modell-Parameter erfolgt zwischen den Integrationsgrenzen $X_{-\infty}$ und $X_{+\infty}$; die Position der Flammenfläche X^* ist durch die Beziehung $I_R = 0$ bedingt; die Position des maximalen OH-Molenbruch-Gradients $X_{OH,m}$ liefert die Verschiebung der experimentell gemessenen Flammenfront.	51
15	Oben: Verlauf der Flammengeschwindigkeit und der Dichte im Frischgas-Gemisch in Abhängigkeit vom Druck. Unten: Peclet-Zahl in Abhängigkeit vom Druck. Die Peclet-Zahl charakterisiert die Gültigkeit des hydrodynamischen Modells, welche mit kleiner Drücke sinkt.	53

16	Effektive Zeldovich-Zahlen für Wasserstoff-Luft, Methan-Luft und Propan-Luft Flammen in Abhängigkeit von der Rauchgastemperatur gemäß Klimenko & Class mit Daten von Abdel-Gayed, Bradley, Hamid & Lawes und Abdel-Gayed, Al-Kishali & Bradley. Die Zeldovich-Zahl misst die Empfindlichkeit der globalen Reaktion auf Temperaturänderungen.	53
17	Verlauf der Zeldovich-Zahl in Abhängigkeit von dem Äquivalenzverhältnis und dem Druck. Die Werte der Zeldovich-Zahl sind aus einem Vergleich zwischen dem analytischen Massenstrom-Ausdruck und den berechneten Werte des Massenstroms hergeleitet. Oben: Äquivalenzverhältnis-Abhängigkeit für verschiedene Drücke. Unten: Mittelwert der Ze-Zahl über den Druck.	55
18	Oben: Korrelation zwischen der Flammentemperatur T_b und dem Äquivalenzverhältnis für verschiedene Drücke. Unten: Verlauf der Ze-Zahl über die Flammentemperatur.	55
19	Oben: Berechnung des Massenstroms über das Äquivalenzverhältnis mit einer linearen Approximation für die Zeldovich-Zahl (unten), im Fall einer ungestreckten stationären Flamme. Blau: INSFLA-Daten. Rot: gerechnete Werte.	56
20	Verlauf der Integrale I_σ , I_{XY} und I_H über die Streckrate für verschiedene Äquivalenzverhältnisse ($\phi = 1, 0.98, 0.93$ und 0.89)	57
21	Verlauf der entdimensionierten Abstände X_r und $X_{OH,m}$ über die Streckrate für verschiedene Äquivalenzverhältnisse ($\phi = 1, 0.98, 0.93$ und 0.89)	57
22	Verlauf der Flammentemperatur T_b und der Temperatur auf der Flammenfläche T^* über die Streckrate für verschiedene Äquivalenzverhältnisse ($\phi = 1, 0.98, 0.93$ und 0.89)	58
23	Verlauf der Integrale I_σ , I_{XY} und I_H über das Äquivalenzverhältnis für verschiedene Druckgradienten ($J = -50$ bis -500)	58
24	Verlauf der entdimensionierten Abstände X_r , X_h und $X_{OH,m}$ über das Äquivalenzverhältnis für verschiedene Druckgradienten ($J = -50$ bis -500)	59
25	Verlauf der Flammentemperatur T_b und der Temperatur auf der Diskontinuität T^* über das Äquivalenzverhältnis für verschiedene Druckgradienten ($J = -50$ bis -500)	59
26	Räumliche Auflösung der Flammenstruktur in INSFLA. Rot: Temperatur-Verlauf. Schwarz: Methan-Molenbruch-Verlauf. Während die Reaktionszone sehr fein diskretisiert ist, zeigen die zwei vergrößerte Bereiche eine geringere Auflösung in der Vorheizzone.	60

27	Verlauf der Integrale I_σ , I_{XY} und I_H über die Streckrate für verschiedene Äquivalenzverhältnisse ($\phi = 1, 0.98, 0.93$ und 0.89) für das Ein-Schicht-Modell das CO -Oxidation einschließt. Die erhaltenen Kurven zeigen einen deutlichen funktionalen Zusammenhang zwischen den Integrale und der Streckung.	61
28	Verlauf der entdimensionierten Abstände X_r und $X_{OH,m}$ über die Streckrate für verschiedene Äquivalenzverhältnisse ($\phi = 1, 0.98, 0.93$ und 0.89) für das Ein-Schicht-Modell das CO -Oxidation einschließt.	62
29	Verlauf der Flammentemperatur T_b und der Temperatur auf die Diskontinuität T^* über die Streckrate für verschiedene Äquivalenzverhältnisse ($\phi = 1, 0.98, 0.93$ und 0.89) für das Ein-Schicht-Modell das CO -Oxidation einschließt.	62
30	Lineare Annäherung von T_b in Abhängigkeit von dem Äquivalenzverhältnis ϕ . $T_b = 3\phi + 2.7$	66
31	Verhältnis der Temperatur auf der Flammenfläche T^* und der Temperatur im Frischgas für mehrere Streckungswerte. Die maximale Abweichung ermöglicht die Annahme eines konstanten Werts für T^*	67
32	Darstellung des Viskositätsfelds. Die Viskosität beträgt einen höheren Wert im Rauchgas als im Brenngasgemisch. Ein auf der Flammenfläche wirksamer zusätzlicher Beitrag bewirkt einen krümmungsproportionalen Sprung des Impulsflusses.	71
33	Unterdruckbrennkammer des im DLR durchgeführten Experiments. Der Unterdruck bewirkt eine Vergrößerung der Dicke der Flammenstruktur und die Druckabsenkung ermöglicht eine Anpassung der Zeitskalen für Chemie und Diffusion.	71
34	Aufbau des Bunsenbrenners. Die Variation der Gemischzusammensetzung erfolgt durch Methan-Zufuhr durch eine Vielzahl von Röhrrchen. Die gleichförmige Anordnung der Röhrrchen sowie ein Gitter bewirken eine horizontal homogene Mischung. Die eindimensionalen optischen Messungen erfolgen an der Flammenspitze.	72
35	Laseroptischer Messaufbau zur gleichzeitigen Raman-spektroskopischen Messung der Temperatur und der Hauptspezies-Konzentrationen (CH_4 , O_2 , N_2 , CO_2 , H_2O , H_2 und CO) auf 14 Positionen einer 7mm langen Messstrecke normal zur Flammenspitze.	73
36	Darstellung des Brenners und der Flamme durch eine Chemolumineszenzphotographie und das sich daraus ergebende räumliche Rechengebiet.	73

37	Veranschaulichung der Grundidee anhand einer Grenzkurve im zweidimensionalen Raum. Die Kurve trennt die Gebiete beiderseits der Kurve und könnte eine Flamme repräsentieren. Sie wird implizit als die Isolinie $\phi = 0$ einer im zweidimensionalen Raum definierten Level-Set-Funktion ϕ dargestellt. Die linke Abbildung zeigt eine geradlinige Grenzkurve; die rechte Abbildung eine kegelförmige Grenzkurve, wie sie eine Bunsenflamme darstellen könnte. Die Verallgemeinerung auf dem dreidimensionalen Raum ist uneingeschränkt möglich.	83
38	Prinzip des Runge-Kutta-Verfahrens dritter Ordnung für eine Erhaltungsgleichung der Typ $\frac{\partial \phi}{\partial t} - F(\phi) = 0$. In einem ersten Schritt ist eine erste Näherung der Funktion ϕ zum Zeitpunkt t_{n+1} eingeschätzt ($\phi = \phi_1$). Im zweiten Schritt ist ein neues Fortschreiten aus den Einschätzungen von $F(\phi_n)$ und $F(\phi_1)$ berechnet, um den Wert von ϕ für den Zeitpunkt $t_n + \frac{\Delta t}{2}$ zu herleiten ($\phi = \phi_2$). Schließlich ist die Einschätzung von ϕ_{n+1} aus einer Mittelung der Flüsse $F(\phi_n)$, $F(\phi_1)$ und $F(\phi_2)$ berechnet.	91
39	Berechnung der ENO und WENO-Ableitungen aus den verschiedenen links- und rechts-basierte Ableitungen. ENO-Scheme: $\phi_{x,i}^- = \phi_{x,i}^{-,0}, \phi_{x,i}^{-,1}$ oder $\phi_{x,i}^{-,2}$. WENO-Scheme: $\phi_{x,i}^- = f(\phi_{x,i}^{-,0}, \phi_{x,i}^{-,1}, \phi_{x,i}^{-,2})$.	94
40	Der Strömungslöser wird anhand der Hagen-Poiseuille-Strömung verifiziert. Gezeigt sind das Rechengebiet und axiale Strömungsgeschwindigkeit.	95
41	Vergleich zwischen analytischen und berechneten Lösungen der Rohr-Strömung für verschiedene Werte der Viskosität und des Druckgradienten. Die Ergebnisse stimmen sehr gut überein für alle betrachteten Fälle.	96
42	Vergleich des berechneten Freistrahls (rechts) mit einer FEMLAB-Rechnung (links). Oben: axiale Strömungsgeschwindigkeit. Unten: Isolinien der axialen Geschwindigkeit.	97
43	Globale Struktur des Programmpakets. Im Programmteil LSinput werden die Geometrie des Rechengebiets, die numerische und strömungsmechanische Parameter sowie die chemische Modellparameter aus den Insfla-Rechnungen zusammengefasst. Im Programmteil LSburn erfolgt die Lösung der Gleichungen.	98

44	Kopplung der verschiedenen Erhaltungsgleichung für eine Zei- titeration. Zuerst wird der Massenstrom aus der Flammen- geschwindigkeitsbeziehung hergeleitet. Die Level-Set-Funktion wird dann bestimmt und in den Temperatur und Konzen- trationsgleichungen verwendet, um die Dichte zu berechnen. Schließlich werden die Navier-Stokes Gleichungen gelöst. . . .	100
45	Vorgehensweise zur Erzeugung eines Flammenprofils aus ein- em OH-Chemolumineszenz-Bild. Der fehlende Teil der Flam- me ist mit einer Symmetrie-Annahme rekonstruiert. Zuletzt wird das Profil mit Spline-Funktionen geglättet.	102
46	Stationäre Simulation mit dem Level-Set-Code. Rechts: statio- näres Flammenprofil und Temperaturfeld. Links: Temperatur- und Konzentrationsprofile entlang der z-Achse.	103
47	Vergleich der stationären Flammenprofile aus Experiment und Simulation. Die Abweichungen zwischen Simulation und Ex- periment ergeben sich aufgrund der Verwendung einer "slip- flow"-Randbedingung und dem künstlichen Festhalten der Flam- me am Rand.	103
48	Maximale Bewegung der Flamme für eine Störung der Brennstoff- Konzentration von 10Hz. Gezeigt sind die Flammenkonturen die am weitesten entfernt von und am nächsten zum Brenner liegen. Die maximale Änderung der Flammenfront erfolgt auf der Flammenspitze.	105
49	Periodische Störungen der Brennstoffkonzentration mit den Frequenzen 10, 20, 50 und 80Hz. Links: zeitliche Entwicklung der Konzentration entlang der Mittelachse. Rechts: Massen- strom durch die Flamme ausgewertet an der Flammenspitze (blau) und an dem Flammenflank (grün). Der Massenstrom ausgewertet an dem Flammenflank bleibt der Brennstoffkon- zentration proportional, während die Flammenspitze ein pha- senverschobenes Verhalten aufweist.	106
50	Auswertung von INSFLA-Daten. Massenstrom durch die Flam- me gegenüber dem Äquivalenzverhältnis für verschiedene Wer- te des tangentialen Druckgradienten J . Die Phasenverschiebung steigt mit steigendem J	107
51	Massenstrom (blau) und Flammenkrümmung (grün) an der Flammenspitze gegenüber Brennstoffkonzentration für Störun- gen mit einer 20Hz Frequenz.	107
52	Massenstrom an der Flammenspitze gegenüber dem Äquiva- lenzverhältnis für den stationären Fall und für Frequenzen von 10, 20, 50, 80 und 100Hz.	108

53	(a): Amplitude des Massenstroms an der Flammenspitze in Abhängigkeit von der Frequenz der Konzentrationsstörung. (b): Amplitude des Massenstroms an der Flammenspitze gewichtet mit der Amplitude der Konzentrationsstörung in Abhängigkeit von der Frequenz der Konzentrationsstörung. Beide Abbildungen zeigen eine Erhöhung der Massenstromsamplitude für Frequenzen um 80 Hz.	109
54	Schritte bei der Konstruktion des krummlinieigen : (Links) Auswahl der Unstetigkeitsfläche als x^1 -Koordinatenfläche und Konstruktion eines Oberflächenkoordinatensystems. (Mitte) Konstruktion weiterer x^1 -Koordinatenflächen mit konstantem Abstand zur Unstetigkeitsfläche. (Rechts) Konstruktion der x^1 -Koordinatenlinien.	116
55	Überischt über die verschiedenen Effekte der Streckung auf die Flammenfront. Die durchgezogene Linie stellt die Flammenfront dar. Die durchgezogenen und gestrichelten Pfeile stellen die Geschwindigkeit des Gases und der Flammenfront dar. . .	120

1 Einleitung

Seit 2002 besteht an der Universität Karlsruhe in Zusammenarbeit mit dem Forschungszentrum Karlsruhe und dem Deutsche Zentrum für Luft- und Raumfahrt (DLR) Stuttgart der Sonderforschungsbereich (SFB) 606 "Instationäre Verbrennung: Transportphänomene, chemische Reaktionen, technische Systeme". Die vorliegende Arbeit wurde im Rahmen dieses Sonderforschungsbereichs angefertigt und beschäftigt sich mit der detaillierten Beschreibung der Dynamik von Flammenfronten.

Die Deckung des steigenden Energiebedarfs der Weltbevölkerung stellt eine der zentralen Aufgaben der Wissenschaft und Technik für die nächsten Dekaden dar. Gegenwärtig werden etwa 80% der Primärenergie durch Verbrennung fossiler Brennstoffe bereitgestellt. Bis zum Jahr 2020 wird ein um 65% steigender Bedarf prognostiziert. Der gesamte Primärenergiebedarf wird dann schätzungsweise zu 95% aus fossilen Brennstoffen gedeckt. Hierbei steht vor allem die Entwicklung einer Technik im Vordergrund, die von Mensch verursachte, unumkehrbare Veränderungen der Umwelt vermeidet bzw. auf ein Minimum beschränkt.

Die wichtigsten Technologien zur Energieumwandlung beruhen auf der Verbrennung von fossilen Brennstoffen in Verbrennungsmotoren, Gasturbinenbrennkammern und technischen Feuerungen und können auch längerfristig nur schwer substituiert werden können.

Bei der Entwicklung neuer Brennverfahren für Kolbenmotoren steht die Reduktion der Emission von Schadstoffen und des Verbrauchs im Mittelpunkt der Forschung, wobei insbesondere die Kraftstoff-Direkteinspritzung bei Diesel- und Otto-Motoren in den letzten Jahren weiterentwickelt wurde. Für stationäre und mobile Gasturbinen wurde die vorgemischte, magerere Betriebsweise (LPP-Konzept, lean-premixed-prevaporized) und die ebenfalls diskutierte gestufte fett-mager Verbrennung (RQL-Konzept rich-quenchean) entwickelt. In der Kraftwerkstechnik hat sich die gestufte Verbrennung mit einer Magerstufe in Drallflammen hoher Energiedichte mit gasförmigen oder flüssigen Brennstoffen als ein zukunftsweisendes Konzept etabliert.

Die Gemischbildung und Verbrennung in Verbrennungsmotoren erfolgt grundsätzlich instationär. In stationären Verbrennungsprozessen in Gasturbinen bzw. technischen Flammen wird eine technische Realisierung fortschrittlicher Verbrennungskonzepte durch instationäre Vorgänge verhindert. Als Beispiele sollen hier angeführt werden Flammenstabilisierung sowie Zünd/Löschvorgänge oder Flammenrückschlag bei magerer, vorgemischter Betriebsweise oder die Kopplung von Energiefreisetzung und Strömung zu sich selbst erhaltenden oder verstärkenden Instationaritäten (Thermoakustik).

Trotz der grundlegenden Bedeutung instationärer Prozesse für die technische Energieumwandlung sind Verbrennung, chemische Reaktionen, Stoff- und Wärmeübertragung sowie deren Kopplung in instationären Geschwindigkeits-, Temperatur- und Druckfeldern in ein- oder mehrphasigen Strömungen gegenwärtig noch nicht vollständig verstanden. Dies liegt einerseits daran, dass experimentelle Methoden, die auf berührungslosen, abbildenden laserspektroskopischen Verfahren beruhen, erst in jüngster Vergangenheit intensiv entwickelt wurden. Andererseits ist es ebenfalls erst in jüngster Zeit gelungen, numerische Methoden für die Anforderungen real instationärer Probleme zu entwickeln. Das Verständnis von instationären Vorgängen ist jedoch eine wesentliche Voraussetzung für die Vorhersage von z.B. Flammenstabilisierung, Zünd/Löschvorgängen, Brennkammerschwingungen und für die Bereitstellung von Entwicklungswerkzeugen für technische Verbrennungseinrichtungen in Form von Modellen bzw. numerischen Verfahren. Gegenwärtig beruhen Modelle in industriell eingesetzten Entwicklungswerkzeugen bis auf wenige Ausnahmen auf stationären oder quasistationären Ansätzen. Der Sonderforschungsbereich 606 trägt dazu bei, diese Lücken zu schließen.

Die Vorhaben sind in die Projektbereiche "Elementare Prozesse bei der instationären Verbrennung", "Zusammengesetzte, komplexe Phänomene" und schließlich "Optimierung von Verbrennungsmaschinen" gegliedert. Die Einzelprojekte sind weiterhin um die Themenfelder "Chemische Reaktionen in instationären Mischungs- und Druckfeldern", "Instationäre Einspritzstrahlen und Verbrennung", "Instationäre Filmströmungen und Grenzschichten", sowie "Zünden, Löschen, Instationäre Flammenausbreitung, Thermoakustik" gruppiert, die die Projektbereiche übergreifen. Abbildung (1) zeigt die schematische Gliederung des Sonderforschungsbereichs.

Die vorliegende Arbeit ist Bestandteil des Bereichs "Zünden, Löschen, instationäre Flammenausbreitung" und wird im Rahmen des Teilprojekts A5 "Experimente und hierarchische Modellierung zu periodischen Störungen in Flammen" durchgeführt.

Ein Themenfeld des Sonderforschungsbereichs sind die grundlegenden Mechanismen, die zu Verbrennungsinstabilitäten führen. Der Ausbreitungsmechanismus einer Vormischflamme beruht auf einem komplexen Zusammenspiel zwischen Strömung, chemischer Kinetik und Transportvorgängen. In der praktischen Anwendung ist dieser Mechanismus zeitabhängigen Störungen ausgesetzt, da im Allgemeinen turbulente Strömungsbedingungen vorliegen und akustische Eigenschaften des Brenners und des Zuleitungssystems Störungen des Druckfelds und der Gemischzusammensetzung einbringen. Bei Gasturbinen neigen z.B. Brennkammern mit hohen Leistungsdichten zu akustischen Instabilitäten, die sich bislang nicht vollständig beschreiben lassen.

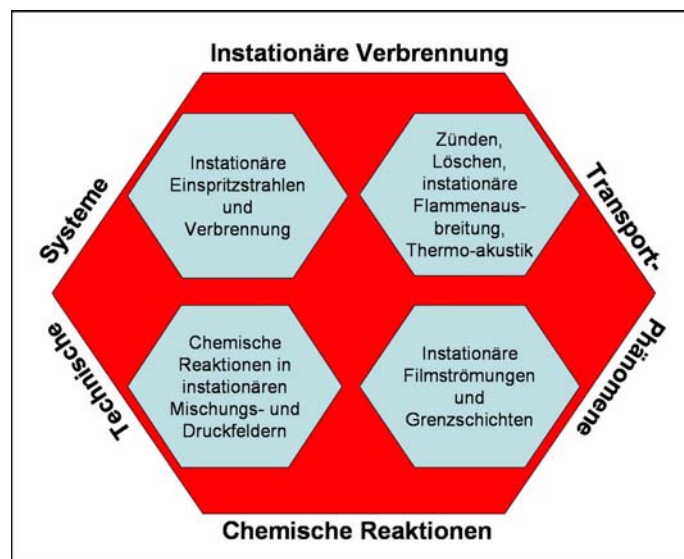


Abbildung 1: Struktur nach Themenfeldern des Sonderforschungsbereichs 606: "Instationäre Verbrennung: Transportphänomene, chemische Reaktionen, technische Systeme" der Universität Karlsruhe in Zusammenarbeit mit dem Forschungszentrum Karlsruhe und dem DLR Stuttgart.

Diese akustischen Instabilitäten bewirken Schwingungen großer Amplitude, die ohne Gegenmaßnahmen zur Zerstörung der Maschine führen. Eine der zu klärenden Frage ist die Rolle der Vormischverbrennung bei akustischen Schwingungen. Die Flamme kann sich passiv verhalten, d.h. sie passt sich unmittelbar an die momentanen akustischen Druckverhältnisse an. Es kann eben so gut möglich sein, dass die Flamme eine Eigendynamik besitzt, so dass sie erst mit einer gewissen Verzögerung oder Resonanz auf neue Druckverhältnisse reagiert.

Ziel des Teilprojekts A5 ist zunächst die Klärung des Verhaltens laminarer Vormischflammen bei periodischen Störungen der Gemischzusammensetzung und der strömungsmechanischen Randbedingungen. Die gefundenen Ansätze sollen später schrittweise zur Beschreibung turbulenter Flammen herangezogen werden. Das vorgeschlagene Forschungsprojekt soll durch zwei hierarchisch aufeinander aufbauenden Modelle für einerseits die chemische Kinetik als auch die globale Strömung sowie durch Experimente mit berührungsfreier Laserdiagnostik zur Klärung möglicher Wechselwirkungen auf verschiedenen Längen- und Zeitskalen aufbauen. Durch das Zusammenwirken der verschiedenen Ansätze wird ein Gesamtmodell erstellt, das mit den experimentellen Daten validiert wird.

Es wird eine Methan-Unterdruckvormischflamme untersucht. Durch periodische Störungen des Strömungsfelds bzw. der Gemischzusammensetzung wird die Flamme so stark gestört, daß sie nicht mehr durch eine Abfolge quasistationärer Zustände beschrieben werden kann.

Im Experiment, das im Rahmen einer Doktorarbeit am DLR Stuttgart durchgeführt wird, werden Parameterbereiche identifiziert, für welche die Flamme empfindlich auf aufgeprägte Störungen reagiert. Durch OH^* -Chemolumineszenz und 2D-LIF sowie 1D-Raman-Spektroskopie sollen die Hauptpezies, ausgewählte Radikale und die Temperatur phasengekoppelt gemessen werden. Durch die Simulation von zeitperiodisch gestörten Flammenstrukturen unter Anwendung komplexer chemischer Kinetik wird der Zusammenhang zwischen einer Zielgröße, z.B. der Flammgeschwindigkeit oder der Amplitude der Störbewegung, und der eingebrachten Störung ermittelt. Hierauf aufbauend werden Modelle entwickelt, welche die Ausbreitung von instationären, gekrümmten und gestreckten Vormischflammen variabler Zusammensetzung beschreiben. Die hierfür erforderlichen Modellparameter werden aus den räumlich und zeitlich aufgelösten Flammenstrukturdaten im Rahmen der vorliegenden Arbeit extrahiert. Die entwickelten Modelle erlauben die Simulation des Gesamtvorgangs wobei die Levelset-Methode zur Anwendung kommt. Der Vorteil dieser numerischen Methode ist die akkurate implizite Darstellung der Geometrie der Flamme. Die Simulation wird mit den laseroptisch bestimmten Messdaten verifiziert. Das Experiment liefert Daten des Gesamtprozesses und verifiziert das Modell auf allen Längenskalen.

Die Besonderheit des Teilprojekts ist die enge Vernetzung von zwei theoretischen Modellansätzen mit einem abgestimmten Experiment. Diese Vernetzung ist in Abbildung (2) dargestellt. Durch das Mitwirken der theoretischen Gruppen bei der Definition des Experiments und die Verknüpfung der hierarchischen Modellansätze untereinander ist gewährleistet, daß für die Problemstellung aussagefähige Daten bereitgestellt werden.

Im Rahmen dieser Promotionsarbeit wird am Institut-für-Kern-und-Energie-Technik (IKET) des Forschungszentrums Karlsruhe die Simulation des Gesamtvorgangs übernommen. Kürzlich wurde von [Class2002] ein hydrodynamisches Modell für Vormischflammen mittels strenger asymptotischer Methoden basierend auf den Grundgleichungen der Strömungsmechanik hergeleitet, das so genannte vereinheitlichte Modell. Dieses Modell beruht auf der ursprünglichen Idee von Darrieus und Landau ([Darrieus1938], [Landau1944]). Die im Vergleich zu den hydrodynamischen Längenabmessungen dünnen Flammen werden als gasdynamische Diskontinuitäten aufgefasst. Dies ermöglicht die mehrdimensionale Modellierung der Flammendynamik und der Wechselwirkungen zwischen der Flamme und der Strömung, sowie Stabilitätsanalysen bei einem vergleichsweise geringen Rechenaufwand. Das Modell

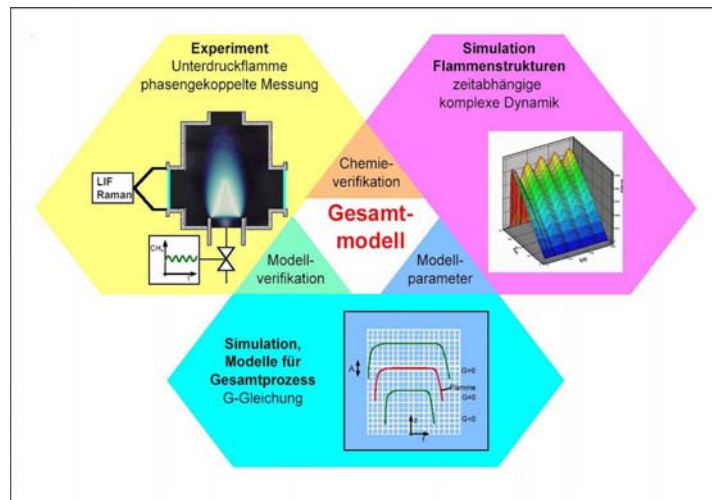


Abbildung 2: Vernetzung der zwei theoretischen Modellansätze mit dem Experiment in dem Teilprojekt A5. Die Kopplung zwischen der eindimensionalen detaillierten Simulation der Flammenstruktur und dem Gesamtmodell liefert quantitative Ergebnisse, welche mit den experimentellen Daten verifiziert werden.

[Class2002] beschränkt sich auf konstante Temperaturen und Gemischzusammensetzungen. Dies gilt sowohl für das unverbrannte Brennstoffgemisch als auch für das Rauchgas. Eine Stabilitätsanalyse diente als qualitative Validierung des Modells (siehe Abbildung (3)). Bisher wurde das Modell noch nicht numerisch umgesetzt und quantitativ überprüft.

Das Ziel dieser Promotion ist die Bereitstellung eines hocheffizienten Verfahrens zur quantitativen Simulation laminarer Vormischflammen mittels des hydrodynamischen Modells. Dieses Verfahren erfordert aufgrund der abstrakten Flammenmodellierung einen Simulationsaufwand der vergleichbar mit einer nichtreaktiven Strömungssimulation ist. Die sich daraus ableitenden Aufgabenstellungen teilen sich in drei Teilaufgaben auf. Im analytischen Teil wird das Flammenmodell auf variable Gemischzusammensetzung erweitert. Im quantitativen Teil wird eine Methodik zur Bestimmung von quantitativen Parametern des Flammenmodells aus Rechnungen mit detaillierter Chemie hergeleitet. Dies erfolgt für einen konkreten Fall. Schließlich werden im numerischen Teil geeignete numerische Methoden ausgewählt und das erweiterte Modell mit quantitativen Parametern in einem eigenen Rechenprogramm umgesetzt. Erste Simulationen vollziehen das Experiment numerisch nach. Durch einen Vergleich mit den experimentellen Messdaten wird die gesamte Methode validiert.

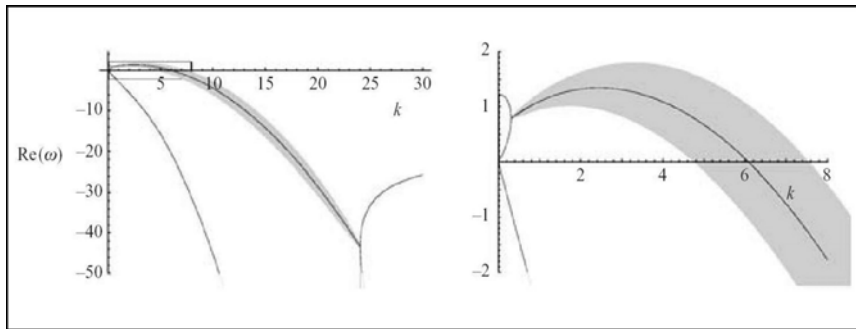


Abbildung 3: Stabilitätskarte des vereinheitlichten Modells, für kleine Lewis Zahl, $Le = 0.3$. Die rechte Abbildung ist eine vergrößerte Darstellung des eingerahmten Bereichs in der linken Abbildung. Es wird gezeigt, dass die zeitperiodische Eigenlösung oberhalb einer Grenzwellenzahl negative Anfachungsraten aufweist, so dass bei hohen Wellenzahlen Stabilität vorliegt.

Zusammenfassend kann gesagt werden, dass durch den SFB606 ein besseres Verständnis instationärer Verbrennungsprozesse erhalten wird. Insbesondere wird im Teilprojekt A5 die Flammendynamik und die Wechselwirkungen zwischen Flamme und Strömung untersucht. Ein hocheffizientes numerisches Verfahren wird bereitgestellt, welches eine günstige Alternative zu den aufwendigen mehrdimensionalen detaillierten Simulationen darstellt. Dies gelingt durch das Zusammenwirken von detaillierten eindimensionalen Rechnungen und einer mehrdimensionalen hydrodynamischen Flammenmodellierung sowie durch Validierung mittels experimenteller Messungen. Für die hydrodynamische Modellierung ist die Theorie von Class ([Class2002] und [Class2003]) angewendet und erweitert. Gegenstand dieser Doktorarbeit ist die analytische Erweiterung der Flammenmodellierung, ihre quantitative und numerische Umsetzung und die Validierung der gesamten Methode durch die Simulation experimentell untersuchter Fälle.

2 Das quantitative hydrodynamische Modell für inhomogene Gemische

Eine reaktive Strömung ist durch eine starke Änderung der Fluideigenschaften und insbesondere der Dichte charakterisiert. Im Fall einer Verbrennung ist der Verlauf der Dichte im Wesentlichen durch die von den chemischen Reaktionen freigesetzte Wärme bestimmt. Die Ausbreitungsgeschwindigkeit der dadurch entstehenden räumlichen Dichteänderung ist viel kleiner als die Schallgeschwindigkeit, so dass kompressible Effekte eine untergeordnete Rolle spielen ([Munz1996]). Die numerische Behandlung einer Strömung mit chemischer Reaktion erfordert also zusätzlich zu den gewöhnlichen Strömungsgleichungen die Berücksichtigung der für die Wärmefreisetzung zuständigen chemischen Phänomene. Es können drei Methoden unterschieden werden.

- Die genaueste Methode besteht darin, alle beteiligte Spezies und Reaktionen detailliert zu beschreiben und zu berechnen. Die vielschichtige Zeit- und Längenskalen (siehe Abbildung (4)) sowie die Anzahl der beteiligten Transportgleichungen erfordern einen riesigen numerischen Aufwand. Die Methode stellt außerordentliche Anforderungen an die numerischen Ressourcen dar und ist nur bedingt auf komplexe mehrdimensionale Probleme anwendbar.
- Chemische Phänomene können durch eine Analyse der Zeitskalen in solche aufgeteilt werden die schnell ins chemische Gleichgewicht relaxieren, solche die mit Strömungszeitskalen wechselwirken und solche die zu langsam sind um beobachtet zu werden. Werden für erste und letztere vereinfachende Annahmen gemacht, führt dies zur so genannten ILDM-Methode (Intrinsic Low-Dimensional Manifolds). Diese benötigt einen deutlich kleineren numerischen Aufwand. Es muss aber weiterhin die Struktur der Flamme aufgelöst werden.
- Eine weitere Vereinfachung des Verbrennungsphänomens und dessen numerischer Simulation kann durch die Anwendung von den so genannten hydrodynamischen Modelle erzielt werden. Es wird der Wärmehaushalt der Flamme in Wechselwirkung mit der Strömung beschrieben, aber die Chemie als Funktion der Flammentemperatur (und weniger weiteren Parameter) vorausberechnet. Somit werden nur strömungsmechanische Längsskalen aufgelöst.

Abbildung (4) fasst für jede Methode die notwendige räumliche Auflösungen zusammen.

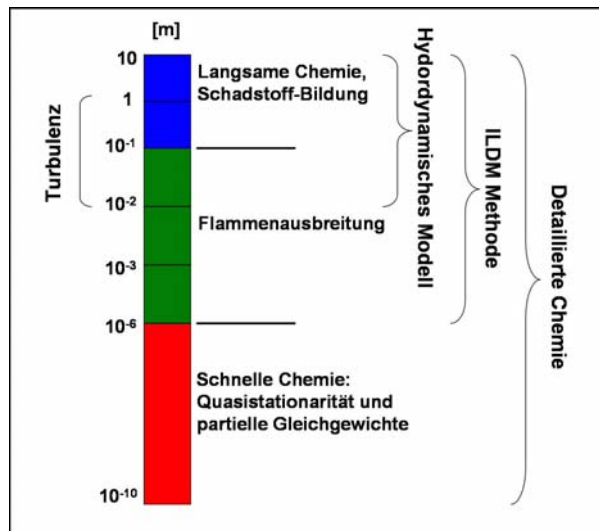


Abbildung 4: Schematische Darstellung der notwendigen räumlichen Auflösung für die Beschreibung physikalisch-chemischer Vorgänge mit detaillierter Chemie, ILDM Methode und hydrodynamischem Modell.

In diesem Kapitel wird das Prinzip von hydrodynamischen Modellen erläutert, sowie ihre Vorteile und Einschränkungen. Insbesondere das vereinfachte Modell von Class ([Class2002] und [Class2003]) wird diskutiert. Die Herleitung und die Erweiterung auf komplexere thermodynamische Konfigurationen sowie die quantitative Umsetzung des vereinfachten Modells werden vorgestellt.

2.1 Herleitung

2.1.1 Das vereinfachte Modell

Zunächst werden die theoretischen Grundlagen des hydrodynamischen Modells erläutert. Betrachtet werden Vormischflammen in beliebigen auch instationären Strömungsfeldern.

Eine Vormischflamme besteht aus einer Mischung von Brenngas und Sauerstoff, die durch chemische Reaktion in ausgebranntes Rauchgas umgewandelt wird. Die Verbrennung findet in einer Reaktionszone statt, deren Breite verglichen zu den hydrodynamischen Längenskalen meistens sehr dünn ist (siehe Abbildung (5)).

Aufgrund dieser Beobachtung haben Darrieus und Landau ([Darrieus1938], [Landau1944]) in den 40. Jahren ein Modell hergeleitet, das chemische Vor-



Abbildung 5: Chemolumineszenz (I. Braun) einer laminaren Bunsenflamme. Die Flamme zeigt einen glatten Verlauf. Chemische Reaktionen sind auf eine dünne leuchtende Zone beschränkt. Vor und hinter der Reaktionszone ist die Strömung inert.

gänge nicht auflöst und lediglich ihren globalen Einfluß auf der hydrodynamischen Längenskala berücksichtigt. Die Vormischflamme wird als eine gasdynamische Diskontinuität aufgefasst, welche die unverbrannte Mischung von den verbrannten Produkten trennt. Diese gasdynamische Diskontinuitätsfläche wird im folgendem als Flammenfläche bezeichnet. Die Flammenfläche ist eine Modellvorstellung, da eine Flamme eine, wenn auch kleine, räumliche Ausdehnung hat. Die Flammenfläche liegt etwa im Bereich der Chemolumineszenz. Hinreichend weit vor und hinter der Flammenfläche sind die Zusammensetzungen, die Temperatur und die Dichte in erster Näherung konstant. Beiderseits der Flamme sind die Strömungsgrößen durch die nicht-reaktiven strömungsmechanischen Grundgleichungen bestimmt. Sprungbedingungen koppeln die Variablen vor und hinter der Flammenfläche (siehe Abbildung (6)).

Dieser Ansatz bietet sich an wenn die Flammendicke deutlich kleiner als die hydrodynamische Längenskala bleibt, d.h. wenn die Flamme als beliebig dünn angenommen werden kann. Die Dicke der Flamme kann mittels der charakteristischen Länge $\tilde{l}_0 = \tilde{\kappa}_f / \tilde{S}_F^0$ abgeschätzt werden, wobei $\tilde{\kappa}_f = \tilde{\lambda}_f / (\tilde{\rho}_f \tilde{c}_{pf})$ die thermische Diffusivität des Brenngasgemischs bezeichnet, oft auch Temperaturleitfähigkeit genannt. Das Verhältnis der charakteristischen Längenskalen von Strömung und Flammenstruktur ist die Peclet-Zahl $Pe = \tilde{l} / \tilde{l}_0$. Auf der hydrodynamischen Skala bewirken chemische Reaktionen, dass sich die Flamme relativ zur Gasmischung ausbreitet. Die Geschwindigkeit dieser Aus-

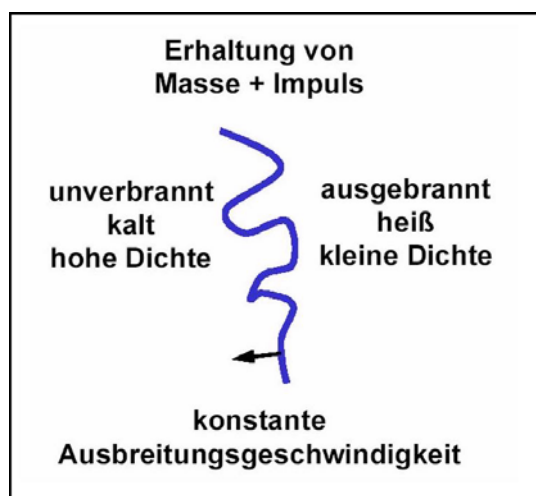


Abbildung 6: Im Darrieus-Landau-Modell trennt eine Flammenfläche unverbranntes Brenngas von ausgebranntem Rauchgas. Die Flammenfläche breitet sich mit einer konstanten Flammengeschwindigkeit relativ zum unverbrannten Gemisch aus. Die Größen beiderseits der Flammenfläche sind durch Sprungbedingungen verknüpft.

breitung normal zur Flamme wird als Flammengeschwindigkeit bezeichnet. Im Darrieus-Landau-Modell ist die Flammengeschwindigkeit als konstant angenommen. Aus der Sicht des Numerikers bedeutet dies, dass die Lösung der gesamten Spezies-Transportgleichungen entfällt, und die räumliche Auflösung der Flammenstruktur erspart werden kann. Die so erhaltenen Vereinfachungen erlauben die numerische Anwendung der Methode auf komplexe mehrdimensionale Fälle durch eine nichtreaktive "zweiphasige" Simulation. Komplexe Wechselwirkungen zwischen chemischen Reaktionen, Wärmeleitung und Stoffdiffusion, welche in den komplexeren reaktiven Modellen betrachtet werden, können mit hydrodynamischen Modellen nicht beschrieben werden.

Das Darrieus-Landau Modell zeigt ein grundlegendes Problem in Hinblick auf die Stabilität der Flammenausbreitung. Eine Stabilitätsanalyse ergibt die Instabilität von Vormischflammen bezüglich Störungen jeglicher Wellenlänge. Diese Aussage steht im offensichtlichen Widerspruch zu experimentellen Befunden. Spätere Arbeiten ([Markstein1951], [Markstein1964], [Matkowsky1979], [Matalon1982]) versuchen das Darrieus-Landau Modell durch die Annahme unterschiedlicher Ausdrücke für die Flammengeschwindigkeit, sowohl auf phänomenologischer als auch auf analytischer Grundlage, zu verbessern. Bis heute ist die Beschreibung der Flammengeschwindigkeit mittels heuristischer Modelle, wie sie in [Markstein1951] vorgeschlagen werden, gän-

gige Praxis. Es wurden zwar Korrekturen der Ergebnisse von Darrieus und Landau mit strengen asymptotischen Methoden vorgenommen, diese zeigen jedoch nur eine Tendenz zur Stabilisierung kurzweiliger Störungen. Durch analytische Arbeiten wurden zwei ausgezeichnete Grenzfälle identifiziert, welche durch die Lewis-Zahl charakterisiert sind. Die Lewis-Zahl ist definiert als das Verhältnis der Diffusivitäten von Wärme $\tilde{\kappa}_f$ zu Brennstoff \tilde{D} , so dass

$$\text{Le} = \frac{\tilde{\kappa}_f}{\tilde{D}}. \quad (1)$$

In [Matalon1982] wird der Grenzfall von Lewis-Zahlen nahe Eins und in [Matkowsky1979] der Fall von sich deutlich von Eins unterscheidenden Lewis-Zahlen betrachtet. Ein Ansatz, welcher beide Grenzfälle gleichzeitig abdeckt, wird erst mit dem vereinheitlichten Modell von Class ([Class2002]) vorgestellt.

Die vereinfachte Betrachtung der Flammenstruktur als gasdynamische Diskontinuität bedingt, dass im hydrodynamischen Modell der Verlauf der Variablen innerhalb der Flammenstruktur von der Wirklichkeit abweicht, aber außerhalb dieser identisch übereinstimmt. Die zugrunde liegende Idee des Modells von Class, in Abbildung (7) schematisch dargestellt, besteht darin, diese räumlich begrenzt auftretende Abweichung zu ermitteln. Dies erfolgt durch einen Vergleich mit dem reaktiven Modell, welches alle physikalischen Phänomene in Betracht zieht. Aus dem Unterschied zwischen dem hydrodynamischen und dem reaktiven Modell wird eine Korrektur abgeleitet, aus der die genauen Sprungbedingungen und die korrekte Flammengeschwindigkeitsbeziehung bestimmt werden.

Es werden jetzt die wesentliche Herleitungsschritte dieser Methode zusammengefasst. Eine Ausführlichere Beschreibung ist in [Class2002] zu finden.

2.1.2 Kompressible Strömungsbeschreibung

Die Ausbreitung von laminaren Flammen ist ein Unterschall-Phänomen (8). Bei typischen atmosphärischen bzw. Unterdruck-Bedingungen, wie sie im Experiment vorliegenden, ergibt sich eine laminare Flammgeschwindigkeit von unter 100 cm/s, was einer repräsentativen Machzahl Ma (das Verhältnis der Flammgeschwindigkeit zur Schallgeschwindigkeit) von der Größenordnung $O(10^{-4})$ entspricht. Dies führt zu der so genannten "Verbrennungssapproximation" ("combustion approximation"), welche einen Ausdruck für den Druck in Potenzen von Ma^{-1} liefert:

$$p(x, t) = P(t) + \tilde{p}(x, t), \quad (2)$$

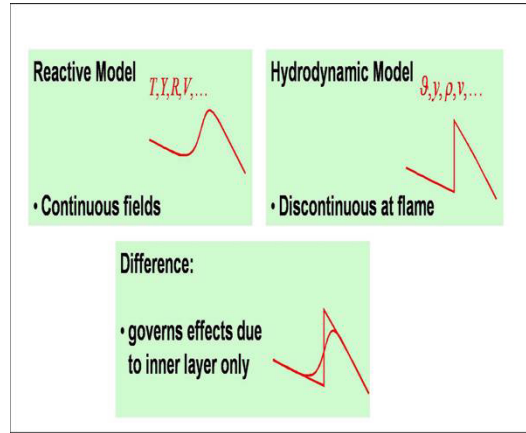


Abbildung 7: Schematische Darstellung der grundlegenden Idee zur Herleitung der Sprungbedingungen und Flammengeschwindigkeitsbeziehung im vereinheitlichten Modell. Das reaktive Modell ergibt einen stetigen Verlauf der thermodynamischen Größen. Das hydrodynamische Modell ergibt einen diskontinuierlichen Verlauf. Unterschiede ergeben sich lediglich innerhalb der Flammenstruktur. Die Differenz zwischen den zwei Modellen ergibt integrale Korrekturterme, welche Ausdrücke für die Sprungbedingungen und die Flammengeschwindigkeitsbeziehung liefern.

wobei $\frac{\tilde{p}(x,t)}{P(t)} = O(\text{Ma}^{-2})$. Dichteänderungen ergeben sich ausschließlich aus Temperatur- bzw. Konzentrationsänderungen, so dass akustische Phänomene nicht betrachtet werden. Kompressibilitätseffekte in der Energiegleichung sind von $O(\text{Ma}^{-2})$ und werden somit vernachlässigt. Es ist zu beachten, dass obwohl der Druckterm in der Energiegleichung nicht mehr auftaucht, er in den Navier-Stokes-Gleichungen nicht vernachlässigt werden kann.

Der Transport und der thermodynamische Zustand eines brennbaren Gasgemisches sind durch die Erhaltungsgleichungen für Masse (Kontinuitätsgleichung), Impuls (Navier-Stokes Gleichungen), Temperatur (Energie-Gleichung) und die an der Reaktion beteiligten chemischen Spezies beschrieben. Es wird angenommen, daß die Flamme und die Strömung nicht wesentlich durch externe Kräfte (z.B. Gravitation) beeinflusst sind. Die kompressible Impulserhaltungs- und Kontinuitätsgleichungen für eine laminare Strömung in dimensionsbehafteter Form lauten:

$$\frac{\partial \tilde{\rho} \tilde{\mathbf{v}}}{\partial \tilde{t}} + \nabla \cdot (\tilde{\rho} \tilde{\mathbf{v}} \otimes \tilde{\mathbf{v}}) = -\nabla \tilde{p} + \nabla \cdot \sigma \quad (3)$$

$$\frac{\partial \tilde{p}}{\partial \tilde{t}} + \nabla \cdot (\tilde{\rho} \tilde{\mathbf{v}}) = 0 \quad (4)$$

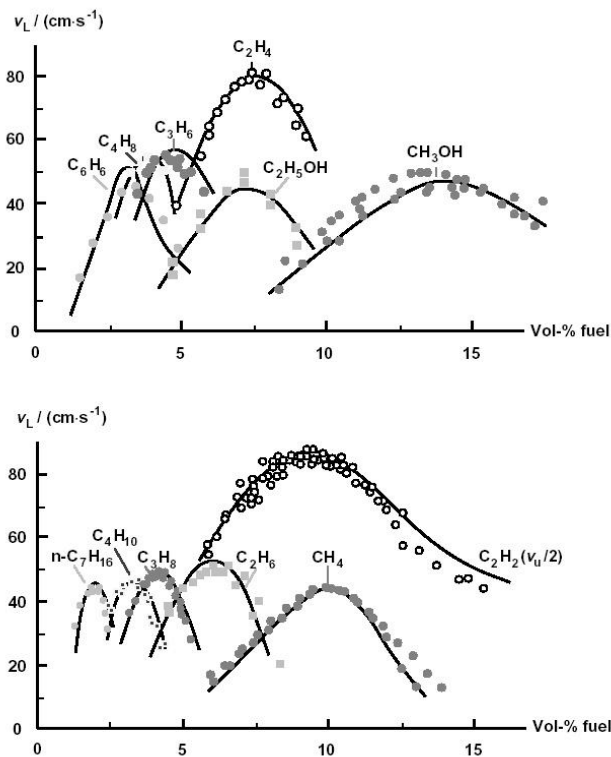


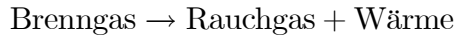
Abbildung 8: Laminare Flammgeschwindigkeit ν_L für Kohlenwasserstoff-Luft-Gemische bei $p = 1\text{bar}$, $T_u = 298\text{K}$. Punkte: Experimente, Linien: Simulationen mit einem detaillierten Mechanismus.

Die abhängige Größen sind der dynamische Druck \tilde{p} und der Geschwindigkeitsvektor $\tilde{\mathbf{v}}$. Der Spannungstensor eines kompressiblen Newtonschen Fluids ist

$$\sigma = \tilde{\mu} \left(\nabla \tilde{\mathbf{v}} + \nabla \tilde{\mathbf{v}}^T - \frac{2}{3} I \nabla \cdot \tilde{\mathbf{v}} \right), \quad (5)$$

wobei der hochgestellte Index "T" die Transponierte der indizierten Matrix bezeichnet, I die Einheitsmatrix und $\tilde{\mu}$ die dynamische Viskosität darstellen.

Betrachtet wird eine globale irreversible Einschritt-Arrhenius-Reaktion



mit einer hohen Aktivierungsenergie. Dies bedingt, dass merkliche chemische Reaktionen nur in einer dünnen Schicht, als Reaktionszone bezeichnet, ablaufen. Die Zeldovich-Zahl Ze , welche die Empfindlichkeit der Reaktionsrate auf Temperaturänderungen charakterisiert und mit der Dicke der Reaktionszone verknüpft ist, nimmt große Werte an.

Vereinfachend wird angenommen, dass eine einzige Spezies des Brenngasgemischs, welche in geringer Konzentration vorliegt, die chemische Reaktion limitiert. Diese Spezies wird als limitierende Spezies bezeichnet. Im Fall magerer (bzw. fetterer) Kohlenwasserstoff/Luft Flammen ist die limitierende Spezies der Kohlenwasserstoff selbst (bzw. der Sauerstoff). Liegt eine einzelne limitierende Spezies vor genügt es deren Konzentration (und damit indirekt die Konzentration der zugehörigen Produkte) zu verfolgen. Die übrigen Konzentrationen in der Mischung bleiben in erster Näherung unverändert. Es genügt eine einzige Transportgleichung für den Molenbruch \tilde{y} der limitierenden Spezies zu betrachten:

$$\frac{\partial \tilde{\rho} \tilde{y}}{\partial \tilde{t}} + \nabla \cdot (\tilde{\rho} \tilde{\mathbf{v}} \tilde{y}) = \nabla \cdot (\tilde{D} \nabla \tilde{y}) - \dot{w}. \quad (6)$$

Der globale chemische Umsatz ist von der limitierenden Spezies, deren normalisierte Konzentration mit Y bezeichnet wird, kontrolliert. Im Brenngas ergibt sich $Y = 1$. Im Rauchgas beträgt $Y = 0$, da die limitierende Spezies vollständig umgesetzt wird. Entsprechend ist die dimensionslose Temperatur T im Brenngas Eins. Im Rauchgasgebiet nimmt das Brenngas in erster Näherung die adiabate Verbrennungstemperatur T_b an. Die Energiegleichung ausgedrückt als Erhaltungsgleichung für die Temperatur lautet:

$$\frac{\partial \tilde{\rho} \tilde{T}}{\partial \tilde{t}} + \nabla \cdot (\tilde{\rho} \tilde{\mathbf{v}} \tilde{T}) = \nabla \cdot (\tilde{\lambda} \nabla \tilde{T}) + \frac{\Delta h_{f,i}^0}{\tilde{C}_p} \dot{w}_i. \quad (7)$$

Die Erhaltungsgleichung (8) für die skalierte Enthalpie \tilde{h} wird durch die Elimination des Reaktionsterms aus Konzentrations- und Energiegleichung abgeleitet (siehe Anhang B). Wir benutzen den Ausdruck "skaliert" da der Vorfaktor $(1 - \text{Le}^{-1})^{-1}$ eingeführt wird.

$$\frac{\partial \tilde{\rho} \tilde{h}}{\partial \tilde{t}} + \nabla \cdot (\tilde{\rho} \tilde{\mathbf{v}} \tilde{h}) = \nabla \cdot (\tilde{\lambda} \nabla (\tilde{h} - \tilde{y})) \quad (8)$$

$$\tilde{h} = \frac{1}{1 - \text{Le}^{-1}} \left(\frac{\tilde{T} - \tilde{T}_f}{\tilde{T}_b - \tilde{T}_f} + \frac{\tilde{y}}{\tilde{y}_f} - 1 \right) \quad (9)$$

Alle Gleichungen werden in dimensionsloser Form für ein bewegtes krummlinieges orthogonales Koordinatensystem formuliert. Das Koordinatensystem wird so gewählt, dass eine möglichst einfache mathematische Behandlung der Gleichungen ermöglicht wird. Die gewählte Darstellung erlaubt eine unmittelbare physikalischen Interpretation der gewonnen Ergebnisse und ist günstig für eine numerische Umsetzung auf der Basis der Levelset-Methode (siehe Kapitel 4.3) geeignet. Mehr Details über die Entdimensionierung und das Koordinatensystem sind im Anhang A und B zu finden. Es wird die Tensor-schreibweise und die Einsteinsche Summationskonvention benutzt.

Auf der Längenskala \tilde{l}_0 der Flammenstruktur ergibt sich ein stetiger Verlauf zwischen den Werten der Variablen im unverbrannten Gemisch zu denjenigen im ausgebrannten Rauchgas. Dies ist durch die Gleichungen für das reaktive Modell beschrieben, welche lauten:

$$\frac{\partial (\sqrt{g}R)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x^j} (\sqrt{g} \mathbf{M}^j) = 0, \quad (10)$$

$$\frac{\partial (\sqrt{g}R \mathbf{V}^i \mathbf{l}_i)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x^j} (\sqrt{g} (\mathbf{M}^j \mathbf{V}^i + g^{ij} P - \Sigma^{ij}) \mathbf{l}_i) = 0, \quad (11)$$

$$\Sigma^{ij} = \frac{\text{Pr} \Lambda}{\text{Pe}} \left(g^{jk} \frac{\partial \mathbf{V}^i}{\partial x^k} + g^{ik} \frac{\partial \mathbf{V}^j}{\partial x^k} - \mathbf{V}^k \frac{\partial g^{ij}}{\partial x^k} - \frac{2}{3} \frac{g^{ij}}{\sqrt{g}} \frac{\partial \sqrt{g} \mathbf{V}^k}{\partial x^k} \right), \quad (12)$$

$$\frac{\partial (\sqrt{g}RT)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x^j} \left(\sqrt{g} \left(\mathbf{M}^j T - \frac{\Lambda}{\text{Pe}} g^{ij} \frac{\partial T}{\partial x^i} \right) \right) = \sqrt{g} \text{Pe} (T_b - 1) W, \quad (13)$$

$$\frac{\partial (\sqrt{g}RY)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x^j} \left(\sqrt{g} \left(\mathbf{M}^j Y - \frac{\Lambda}{\text{PeLe}} g^{ij} \frac{\partial Y}{\partial x^i} \right) \right) = -\sqrt{g} \text{Pe} W, \quad (14)$$

$$\frac{\partial (\sqrt{g}RH)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x^j} \left(\sqrt{g} \left(\mathbf{M}^j H - \frac{\Lambda}{\text{Pe}} g^{ij} \frac{\partial (H - Y)}{\partial x^i} \right) \right) = 0. \quad (15)$$

wobei \sqrt{g} das Volumenelement hergeleitet aus dem kovarianten metrischen Tensor des Koordinatensystems, \mathbf{l}_i ein paralleles Vektorfeld konstanter Richtung und Betrag, $\mathbf{M}^j = R(\mathbf{V}^j - \mathbf{u}^j)$ den Massenstrom durch die Flamme

(oft in der Literatur als "mass burning rate" bezeichnet) und \mathbf{u}^j die Ausbreitungsgeschwindigkeit der Flamme bezüglich eines raumfesten Bezugssystems bezeichnen. Im Fall einer im raumfesten Bezugssystem stationären Flamme gilt $\mathbf{u}^j = 0$.

Werden die Ergebnisse einer asymptotischen Untersuchung der Reaktionszone von [Sivashinsky1976], [Matkowsky1979] oder [Matalon1982] ausgewertet, so kann der globale Reaktionsterm W mittels der Diracschen Deltafunktion δ ausgedrückt werden,

$$W = W_r \delta(x^1 - x_r^1), \quad (16)$$

$$W_r = A Y_r \exp\left(\frac{-T_a}{T_r}\right), \quad (17)$$

wobei x^1 die Raumkoordinate normal zur Flamme, T_a die Aktivierungstemperatur, x_r^1 , W_r , Y_r , T_r die Lage der Reaktionsfläche und die entsprechenden Werte der Reaktionsrate, Brennstoff-Konzentration und Temperatur darstellen.

Im Fall hoher Aktivierungsenergie ist die Abweichung der Temperatur von der adiabaten Verbrennungstemperatur auf der Reaktionsfläche klein, T_r darf durch die folgende Taylor-Entwicklung ausgedrückt werden:

$$T_r = T_b \left(1 - \frac{T_b}{T_a} \phi\right) + O\left(\frac{1}{T_a^2}\right), \quad (18)$$

wobei ϕ von der Größenordnung $O(1)$ ist, und der Exponentiell-Term wird approximiert zu

$$\begin{aligned} \exp\left(-\frac{T_a}{T_r}\right) &\simeq \exp\left(-\frac{T_a}{T_b(1 - T_b/T_a \phi)}\right) \\ &\simeq \exp\left(-\frac{T_a(1 + T_b/T_a \phi)}{T_b}\right) \\ &\simeq \exp\left(-\frac{T_a}{T_b}\right) \exp(-\phi_r) \\ &\simeq \exp\left(-\frac{T_a}{T_b}\right) \exp\left(\frac{T_a}{T_b^2}(T_r - T_b)\right) \end{aligned} \quad (19)$$

angenähert.

Es werden in dieser Arbeit weder tiefe Temperaturen noch hohe Drücke betrachtet. Das System bleibt somit in der Gasphase. Das Brenngasgemisch und das Rauchgas können ohne große Approximationsfehler als ideale Gase aufgefasst werden. Die Zustandsgleichung für ein Idealgas lautet:

$$PV = nRT \quad (20)$$

wobei $P [Pa]$ ist der Druck, $V [m^3]$ das Gasvolumen, $T [K]$ die Temperatur, n die Mol-Anzahl und $R = 8.314 J.K^{-1}.mol^{-1}$ die allgemeine Gaskonstante. Daraus kann der Ausdruck für die Dichte ρ hergeleitet werden,

$$\rho = \frac{nM}{V} \Rightarrow \rho RT = PM, \quad (21)$$

wobei M die molekulare Masse darstellt. Durch die Anwendung der Verbrennungsapproximation ergibt sich ein unmittelbarer Zusammenhang zwischen der Dichte ρ und der Temperatur T :

$$\rho T = \frac{P_0 M}{R} = konst = \rho_f T_f = 1. \quad (22)$$

Auf der hydrodynamischen Skala \tilde{l} sind die Temperatur, Dichte und Viskosität beiderseits der Flammenfläche konstant aber verschieden. Chemische Reaktionen treten nicht auf. Es ergeben sich die Gleichungen für das hydrodynamische Modell, welche mit derselben Vorgehensweise wie die reaktiven Gleichungen hergeleitet sind:

$$\frac{\partial (\sqrt{g}\rho)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x^j} (\sqrt{g}\mathbf{m}^j) = 0, \quad (23)$$

$$\frac{\partial (\sqrt{g}\rho\mathbf{v}^i \mathbf{l}_i)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x^j} (\sqrt{g} (\mathbf{m}^j \mathbf{v}^i + g^{ij} p - \sigma^{ij}) \mathbf{l}_i) = 0, \quad (24)$$

$$\sigma^{ij} = \frac{\text{Pr} \lambda}{\text{Pe}} \left(g^{jk} \frac{\partial \mathbf{v}^i}{\partial x^k} + g^{ik} \frac{\partial \mathbf{v}^j}{\partial x^k} - \mathbf{v}^k \frac{\partial g^{ij}}{\partial x^k} - \frac{2}{3} \frac{g^{ij}}{\sqrt{g}} \frac{\partial \sqrt{g} \mathbf{v}^k}{\partial x^k} \right), \quad (25)$$

$$\frac{\partial (\sqrt{g}\rho\theta)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x^j} \left(\sqrt{g} \left(\mathbf{m}^j \theta - \frac{1}{\text{Pe}} g^{ij} \lambda \frac{\partial \theta}{\partial x^i} \right) \right) = 0, \quad (26)$$

$$\frac{\partial (\sqrt{g}\rho y)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x^j} \left(\sqrt{g} \left(\mathbf{m}^j y - \frac{1}{\text{PeLe}} g^{ij} \lambda \frac{\partial y}{\partial x^i} \right) \right) = 0, \quad (27)$$

$$\frac{\partial (\sqrt{g}\rho h)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x^j} \left(\sqrt{g} \left(\mathbf{m}^j h - \frac{1}{\text{Pe}} g^{ij} \lambda \frac{\partial (h - y)}{\partial x^i} \right) \right) = 0, \quad (28)$$

$$h = \frac{1}{1 - \text{Le}^{-1}} \left(\frac{\theta - 1}{\theta_b - 1} + y - 1 \right). \quad (29)$$

Es wird gefordert, dass das Koordinatensystem mit der tangentialen Geschwindigkeit der Strömung entlang der Flamme transportiert wird. Dies hat zur Folge, dass $\mathbf{u}^\alpha = \mathbf{v}^\alpha$ und dadurch, dass der tangentiale Massenstrom in bewegten krummlinieigen Koordinaten \mathbf{m}^α entlang der Flamme Null ist. Der Index "α" mit $\alpha = 2, 3$ bezeichnet eine Tangentialkomponente. Der normaler Massenstrom wird mit

$$m \equiv \mathbf{m}^1 = \rho (\mathbf{v}^1 - \mathbf{u}^1) \quad (30)$$

bezeichnet.

Da die Flammenstruktur in ein größeres Gebiet eingebettet ist, wird das von der Flammenstruktur eingenommene Gebiet als das "innere" Gebiet bezeichnet (reaktives Modell). Entsprechend gilt die Bezeichnung "äußeres" Gebiet für die nichtreaktive Zone beiderseits der Flamme (hydrodynamisches Modell).

Um die reaktive und die hydrodynamische Variablen unterscheiden zu können, sind die Variablen des reaktiven (bzw. hydrodynamischen) Modells mit großgeschriebenen (bzw. kleingeschriebenen) Namen bezeichnet (siehe Anhang B).

2.1.3 Herleitung der Sprungbedingungen

Die äußeren und inneren Gleichungen unterscheiden sich lediglich insofern als die Dichte in den äußeren Gleichungen konstant ist, während sie sich in den inneren Gleichungen stetig ändert. In einem Abstand von der Flamme verschwindet die Differenz der Dichten der inneren und äußeren Lösung und dadurch ebenfalls die Differenz der anderen Variablen. Wird die Differenz der Gleichungen über das Brenngasgebiet integriert ($x^1 =] - \infty; 0^-]$), dann über das Rauchgasgebiet ($x^1 = [0^+; +\infty[$), und schließlich die Integrale summiert, ergeben sich Sprungbedingungen, welche die integrale Korrektur der hydrodynamischen Variablen beschreiben:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \left(\int_{-\infty}^{\infty} \sqrt{g} (R - \rho) dx^1 \right) \\ & + \frac{\partial}{\partial x^\alpha} \left(\int_{-\infty}^{\infty} \sqrt{g} (\mathbf{M}^\alpha - \mathbf{m}^\alpha) dx^1 \right) + \sqrt{g}^* [m] = 0, \end{aligned} \quad (31)$$

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\partial}{\partial t} (\sqrt{g} (R\mathbf{V}^i \mathbf{l}_i - \rho \mathbf{v}^i \mathbf{l}_i)) + \frac{\partial}{\partial x^\alpha} (\sqrt{g} (J^\alpha (R\mathbf{V}^i \mathbf{l}_i) - J^\alpha (\rho \mathbf{v}^i \mathbf{l}_i))) \right) dx^1 \\ & + \sqrt{g}^* \left[m \mathbf{v}^i \mathbf{l}_i + g^{i1} \mathbf{l}_i p - \frac{\text{Pr} \lambda}{\text{Pe}} \frac{\partial \mathbf{v}^i \mathbf{l}_i}{\partial x^1} \right] = 0, \end{aligned} \quad (32)$$

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^0 \left(\frac{\partial (\sqrt{g} (RY - \rho y))}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x^\alpha} \left(\sqrt{g} \left(\mathbf{M}^{\alpha Y} - \frac{1}{\text{Pe Le}} g^{i\alpha} \Lambda \frac{\partial Y}{\partial x^\alpha} \right) \right) \right) dx^1 \\ & + \int_0^{\infty} \left(\frac{\partial (\sqrt{g} (RY - \rho y))}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x^\alpha} \left(\sqrt{g} \left(\mathbf{M}^{\alpha Y} - \frac{1}{\text{Pe Le}} g^{i\alpha} \Lambda \frac{\partial Y}{\partial x^\alpha} \right) \right) \right) dx^1 \\ & - [\sqrt{g} m y] + \sqrt{g} W_r U (X - X_r) = 0, \end{aligned} \quad (33)$$

$$\begin{aligned}
& \int_{-\infty}^0 \left(\frac{\partial (\sqrt{g} (RH - \rho h))}{\partial t} + \frac{\partial \left(\sqrt{g} \left(\mathbf{M}^\alpha H - \frac{1}{\text{PeLe}} g^{i\alpha} \Lambda \frac{\partial (H-Y)}{\partial x^\alpha} \right) \right)}{\partial x^\alpha} \right) dx^1 \\
& - \int_{-\infty}^0 \frac{\partial}{\partial x^\alpha} \left(\sqrt{g} \left(-\frac{1}{\text{PeLe}} g^{i\alpha} \Lambda \frac{\partial (h-y)}{\partial x^\alpha} \right) \right) dx^1 \\
& + \int_0^\infty \left(\frac{\partial (\sqrt{g} (RH - \rho h))}{\partial t} + \frac{\partial \left(\sqrt{g} \left(\mathbf{M}^\alpha H - \frac{1}{\text{PeLe}} g^{i\alpha} \Lambda \frac{\partial (H-Y)}{\partial x^\alpha} \right) \right)}{\partial x^\alpha} \right) dx^1 \\
& - \left[\sqrt{g} \left(m h - \frac{1}{\text{PeLe}} g^{i1} \Lambda \frac{\partial (h-y)}{\partial x^1} \right) \right] = 0 \tag{34}
\end{aligned}$$

wobei

$$J^i (R\mathbf{V}^i \mathbf{l}_i) = \mathbf{M}^j \mathbf{V}^i \mathbf{l}_i + g^{ij} \mathbf{l}_i P - \Sigma^{ij} \mathbf{l}_i, \tag{35}$$

$$J^i (\rho \mathbf{v}^i \mathbf{l}_i) = \mathbf{m}^j \mathbf{v}^i \mathbf{l}_i + g^{ij} \mathbf{l}_i p - \sigma^{ij} \mathbf{l}_i. \tag{36}$$

Die eckige Klammer $[f]$ bezeichnet den Sprung der äußeren Variable f ($[f] = f(0^+) - f(0^-)$). Der Stern "*" bezeichnet Größen, die an der Unstetigkeitsfläche bei $x^1 = 0$ ausgewertet sind.

2.1.4 Asymptotik

Die Sprungbedingungen enthalten jeweils Integrale der zeitlichen und tangentialen Ableitungen sowohl von hydrodynamischen als auch von reaktiven Variablen. Eine allgemeine analytische Herleitung der Integrale ist nicht möglich. Deshalb werden approximative asymptotische Ausdrücke für die Sprungbedingungen hergeleitet. Dabei wird ausgenutzt, dass die Flamme typischerweise dünn im Vergleich zur Längenabmessung des Strömungsproblems ist. Die Untersuchung beschäftigt sich mit der Flammenzone, deren normale Ausdehnung klein ist. Zunächst wird eine gestreckte Raumkoordinate $X = \text{Pe} x^1$ in Normalenrichtung eingeführt, wobei $\text{Pe} \gg 1$ gilt.

Es soll ausgenutzt werden, dass die Peclet-Zahl Pe ein asymptotisch großer Parameter ist, indem eine asymptotische Reihenentwicklung der inneren Größen nach Potenzen von Pe^{-1} erfolgt

$$F = \sum \text{Pe}^{-n} F_{(n)}. \tag{37}$$

Die äußeren Größen, sowie die geometrischen Größen, welche mit dem krummlinigen Koordinatensystem eingeführt werden und dieses charakteri-

sieren, werden in Taylorreihen entwickelt

$$f = \sum_n \frac{\partial^n f(0)}{(\partial x^1)^n} \frac{\text{Pe}^{-n}}{n!} X^n. \quad (38)$$

Mit der Anwendung der Asymptotik können Grundlösungen für die reaktiven Variablen und Sprungbedingungen von $O(1)$ - und $O(\text{Pe}^{-1})$ -Ordnung hergeleitet werden. Die Sprungbedingungen führender Ordnung liefern:

$$[m_{(0)}] = 0 \quad (39)$$

$$[m_{(0)} \mathbf{v}_{(0)}^1 + p_{(0)}] = 0 \quad (40)$$

$$[m_{(0)} \mathbf{v}_{(0)}^\alpha] = 0 \quad (41)$$

$$[m_{(0)} y_{(0)}] = -W_{r(0)} \quad (42)$$

$$[h_{(0)}] = 0. \quad (43)$$

Die hochgestellte Indizes "1" und " α " bezeichnen Richtungen normal bzw. tangential zur Flammenfläche. Die Sprungbedingungen $O(\text{Pe}^{-1})$ -Ordnung für den Massen- und den Impulsstrom lauten:

$$[m_{(1)}] = \left(\frac{\partial}{\partial t} + \chi \right) I_R \quad (44)$$

$$\begin{aligned} & \left[m_{(0)} \mathbf{v}_{(1)}^1 + m_{(1)} \mathbf{v}_{(0)}^1 + p_{(1)} - \frac{\text{Pr}}{\text{Pe}} \rho \kappa \frac{\partial \mathbf{v}_{(0)}^{1*}}{\partial x^1} \right] = \\ & - \left(\frac{\partial}{\partial t} + \chi \right) (\mathbf{u}_{(0)}^{1*} I_R) - 2 c m_{(0)} I_\sigma \end{aligned} \quad (45)$$

$$\begin{aligned} & \left[m_{(0)} \mathbf{v}_{(1)}^\alpha + m_{(1)} \mathbf{v}_{(0)}^\alpha - \frac{\text{Pr}}{\text{Pe}} \rho \kappa \frac{\partial \mathbf{v}_{(0)}^{\alpha*}}{\partial x^1} \right] = \\ & - \left(\frac{\partial}{\partial t} + \chi \right) (\mathbf{u}_{(0)}^{\alpha*} I_R) - g_{(0)}^{\alpha\beta*} \frac{\partial}{\partial x^\alpha} (m_{(0)} I_\sigma) \end{aligned} \quad (46)$$

Werden die $O(1)$ - und die $O(\text{Pe}^{-1})$ -Ordnung zusammengefasst ergeben sich die komplette Sprungbedingungen für den Massen- und den Impulsstrom:

$$[m] = -\text{Pe}^{-1} \left(\frac{\partial}{\partial t} + \chi \right) I_R, \quad (47)$$

$$[m \mathbf{v}^1 + p - \sigma^{11}] = -\text{Pe}^{-1} 2 c m I_\sigma - \text{Pe}^{-1} \left(\frac{\partial}{\partial t} + \chi \right) (\mathbf{u}_{(0)}^{1*} I_R), \quad (48)$$

$$[m \mathbf{v}^\alpha - \sigma^{1\alpha}] = -\text{Pe}^{-1} \nabla_\perp (m I_\sigma) - \text{Pe}^{-1} \left(\frac{\partial}{\partial t} + \chi \right) (\mathbf{u}_{(0)}^{\alpha*} I_R), \quad (49)$$

wobei c die Krümmung und χ die Streckung (siehe Anhang C) der Flammenfläche darstellen, und

$$I_R = \int_{-\infty}^0 (R_{(0)} - \rho_{f(0)}) dX + \int_0^{\infty} (R_{(0)} - \rho_{b(0)}) dX, \quad (50)$$

$$I_\sigma = m_{(0)} \int_{-\infty}^{\infty} (T_{(0)} - 1) \left(\frac{T_b}{T_{(0)}} + 2 \text{Pr} - 1 \right) dX. \quad (51)$$

2.1.5 Flammenposition

Der äußere normale Massenstrom ist durch die Gleichung (47) gegeben und demnach nicht konstant innerhalb der Flammenstruktur. Die Steigung des Massenstroms ist im Allgemeinen auf beiden Seiten der Flamme unterschiedlich, da sich die Dichten unterscheiden. Es existiert allerdings eine ausgezeichnete Stelle innerhalb der Flammenstruktur, an welcher der äußere Massenstrom im Brenn- und Rauchgas gleich groß sind. Der Massenstrom im "diskontinuierlichen" Modell stimmt innerhalb der Flammenstruktur nicht mit dem physikalischen Massenstrom an der gleichen Stelle überein. Dies gilt im Besonderen an der Unstetigkeitsfläche selbst. Das obere Diagramm in Abbildung (9) zeigt dies schematisch. Die durchgezogene Linie bezeichnet den physikalischen Massenstrom, wohingegen die gestrichelte und die gepunktete Linien den äußeren Massenstrom im Brenn- und Rauchgas bezeichnen. Im Diagramm wird zusätzlich die Reaktionszone im Bereich hoher Temperaturen angedeutet. Die Differenz zwischen der gestrichelten und der gepunkteten Linie ist der Sprung des äußeren Massenstroms. Wird die Lage der Unstetigkeitsfläche durch den Schnittpunkt der Kurve für den äußeren Massenstrom definiert, dann ist der normale Massenstrom stetig an der Unstetigkeitsfläche. Dies gilt nicht für die Steigung. Die eindeutige Lage der Unstetigkeitsfläche an der $[m] = 0$ wird aus Gleichung (47) ermittelt. Es muss das Verschwinden des Integrals I_R gefordert werden. Es ist bemerkenswert, dass $I_R \neq 0$ für jede andere Lage der Unstetigkeitsfläche. Dies ist im mittleren und unteren Diagramm der Abbildung (9) schematisch dargestellt. Die Stetigkeit des Massenstroms ist eine wesentliche Eigenschaft eines Modells, das in numerischen Simulationen eingesetzt werden soll. Nur mit dieser speziellen Wahl der Unstetigkeitsfläche gilt Massenerhaltung auch an der Flammenfläche.

Das Integral I_R kann als Funktion der Temperatur ausgedrückt werden. Für $\Lambda = f(T)$ (typisch $\Lambda \sim T^{1/2}$) liefert die Lösung der Gleichung $I_R = 0$ die Position der Flammenfläche als Temperaturisofläche $T_{(0)}^*$, welche unabhängig vom Massenstrom ist.

Die Anwendung der Annahme $I_R = 0$ in den Gleichungen (48) und (49)

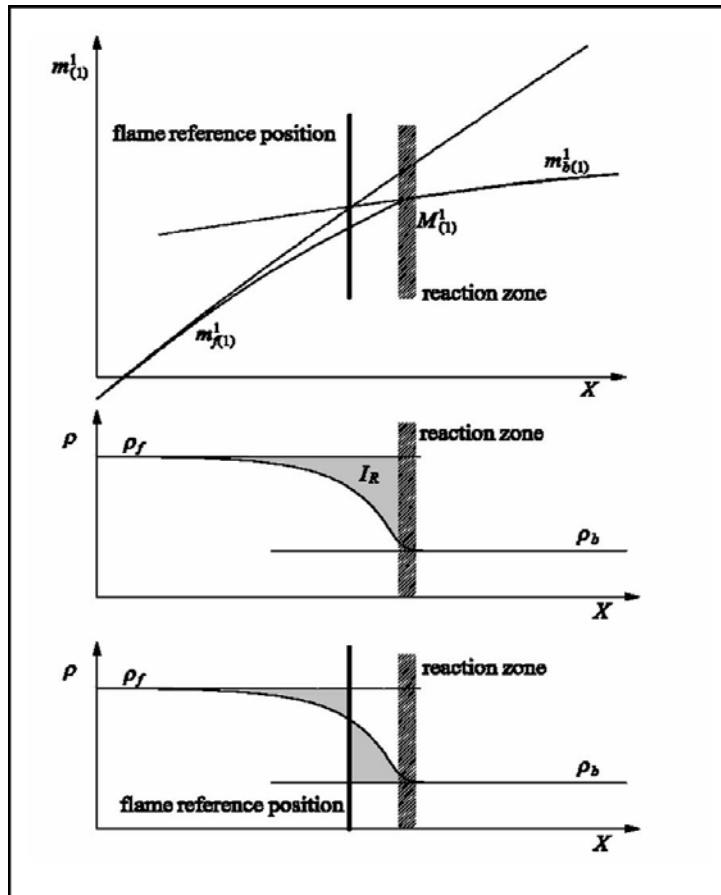


Abbildung 9: Definition der Lage der Unstetigkeitsfläche (Flammenposition) als den Schnittpunkt der äußeren Massenströme (oben). Das Dichteintegral I_R für zwei unterschiedliche Flammenpositionen (mitte: Unstetigkeitsfläche stimmt mit Reaktionsfläche überein, unten: Fläche wird so gewählt, dass sich ein kontinuierlicher äußerer Massenstrom ergibt).

liefert

$$[m\mathbf{v}^1 + p - \sigma^{11}] = -\text{Pe}^{-1} 2 c m I_\sigma, \quad (52)$$

$$[m\mathbf{v}^\alpha - \sigma^{1\alpha}] = -\text{Pe}^{-1} \nabla_\perp (m I_\sigma). \quad (53)$$

Gemäß der Sprungbedingung (52) bewirken Kompressibilitätseffekte innerhalb der Flammenstruktur einen zusätzlichen Drucksprung, welcher der Krümmung der Flamme proportional ist und somit als eine Oberflächenspannung interpretiert werden könnte. Der Drucksprung wird jedoch als Oberflächenkompression bezeichnet, um einerseits das umgekehrte Vorzeichen des Terms hervorzuheben und ihn andererseits von der gewöhnlichen Oberflächenspannung deutlich zu unterscheiden. Variationen der Oberflächenkompression entlang der Flamme bewirken zusätzliche Tangentialspannungen in der äußeren Strömung.

2.1.6 Flammengeschwindigkeitsbeziehung

Durch die spezielle Wahl der Unstetigkeitsfläche ($I_R = 0$) können die Sprungbedingungen $O(\text{Pe}^{-1})$ -Ordnung für die Enthalpie und die Konzentration nach kurzer Zwischenrechnung deutlich vereinfacht werden. Werden sie mit der $O(1)$ -Ordnung zusammengefasst ergibt sich:

$$m = \frac{1}{\text{Pe}} \left(\frac{\partial}{\partial t} + \chi \right) \left(\frac{I_{XY}}{m_{(0)}} \right) - \frac{2 c m_{(0)} X_r}{\text{Pe}} + W_r, \quad (54)$$

$$[m h] = - \left(\frac{\partial}{\partial t} + \chi \right) \left(\frac{I_H}{m_{(0)}} \right), \quad (55)$$

wobei

$$I_H = m_{(0)} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{H_{(0)}}{T_{(0)}} dX, \quad (56)$$

$$I_{XY} = m_{(0)} \left(\int_{-\infty}^0 \left(\frac{Y_{(0)}}{T_{(0)}} - \frac{y_{(0)}}{\theta_{(0)}} \right) dX + \int_0^{\infty} \frac{Y_{(0)}}{T_{(0)}} dX \right). \quad (57)$$

Gemäß Gleichungen (17) und (19) lautet die Reaktionsrate

$$W_r = A Y_r \exp \left(-\frac{T_a}{T_b} \right) \exp \left(\frac{T_a}{T_b^2} (T_r - T_b) \right). \quad (58)$$

Durch die Anwendung der Gleichung (8) wird W_r als Funktion der Enthalpie ausgedrückt und liefert

$$\begin{aligned} W_r &= A Y_r \exp \left(-\frac{T_a}{T_b} \right) \exp \left(\frac{T_a}{T_b^2} (T_b - T_f) \left((1 - \text{Le}^{-1}) H_r - Y_r + Y_f - 1 \right) \right) \\ &= A_T Y_r \exp \left(Z e_f \left((1 - \text{Le}^{-1}) H_r - Y_r + Y_f - 1 \right) \right), \end{aligned} \quad (59)$$

wobei der präexponentielle Faktor A_T so gewählt werden muss, dass der normierte Massenstrom für eine planare adiabate Flamme gleich Eins ist. Die effektive Zeldovitch-Zahl Ze_f stellt die Empfindlichkeit der globalen Reaktion auf Temperaturänderungen dar.

Die Enthalpie H_r und die Konzentration Y_r sind durch ihre Werte im verbrannten Bereich angenähert ($H_r \simeq h_b, Y_r \simeq y_b = 0$) und Beziehung (59) wird

$$W_r = A y_f \exp\left(\frac{-T_a}{T_b}\right) \exp\left(\frac{T_a}{T_b^2} (T_b - T_f) ((1 - Le^{-1}) h_b + Y_f - 1)\right). \quad (60)$$

Zusammen mit der Sprungbedingung (54) und der Wahl $Y_f = 1$ folgt eine Lösung für die Enthalpie h_b

$$h_b = \frac{1}{1 - Le^{-1}} \left(1 + \frac{1}{Ze} \log \left[\frac{\left(m + \frac{X_r}{Pe} m c - \frac{1}{Pe} \left(\frac{\partial}{\partial t} + \chi \right) \left(\frac{I_{xy}}{m} \right) \right)}{A} \right] \right), \quad (61)$$

welche in der Enthalpie-Sprungbedingung (55) eingesetzt wird. Es ergibt sich eine nichtlineare partielle Differentialgleichung für den Massenstrom, die Flammengeschwindigkeitsbeziehung:

$$C \left(\frac{\partial}{\partial t} + \chi \right) \left(\frac{I_H}{m} \right) + m \log \left[m - \frac{1}{Pe} \left(\left(\frac{\partial}{\partial t} + \chi \right) \left(\frac{I_{XY}}{m} \right) - m 2cX_r \right) \right] = 0. \quad (62)$$

Es ist zu beachten, dass die Flammengeschwindigkeit üblicherweise die Geschwindigkeit der Flamme relativ zum unverbrannten Gasgemisch angibt. In der hier gewählten dimensionslosen Darstellung ist die Dichte vor der Flammenfläche Eins und somit entspricht m der dimensionslosen Flammengeschwindigkeit und gleichzeitig auch der dimensionslosen "mass burning rate".

Bei der Herleitung der Flammengeschwindigkeitsbeziehung ist eine Beschränkung auf Variationen auf einer $O(1)$ -Längenskala erfolgt. Indirekt werden kurzweilige Störungen ausgeschlossen. Soll zusätzlich der Einfluss kurzweiliger Störungen entlang der Flamme betrachtet werden, treten neue Diffusionsterme in der so genannte vereinheitlichten Flammengeschwindigkeitsbeziehung auf:

$$C \left(\left(\frac{\partial}{\partial t} + \chi \right) \left(\frac{I_H}{m} \right) - \frac{I_\Delta}{Pe} \nabla_\perp^2 \left(\frac{1}{m} \right) + \frac{I_{\nabla^2}}{Pe} m \left(\nabla_\perp \left(\frac{1}{m} \right) \right)^2 \right) + m \log \left[m - \frac{1}{Pe} \left(\left(\frac{\partial}{\partial t} + \chi \right) \left(\frac{I_{XY}}{m} \right) - m 2cX_r \right) \right] = 0. \quad (63)$$

Diese Differentialgleichung enthält sowohl eine Zeitableitung als auch einen tangentialen Diffusionsterm. Die Flamme benötigt somit eine charakteristische Zeit, um sich an neue Verhältnisse anzupassen. Benachbarte Flammenabschnitte können sich nicht mit unkorrelierten Geschwindigkeiten ausbreiten. Die Verständigung erfolgt durch den tangentialen Diffusionsterm. Die Einflüsse der Streckung und der Krümmung der Flamme werden ebenfalls berücksichtigt, sowie die Lewis-Zahl-Abhängigkeit durch den Term $C = \frac{Z_e}{Pe} \left(1 - \frac{1}{Le}\right)$.

Es ist zu beachten, dass die stationäre Lösung der Differentialgleichung (62) unabhängig von den Anfangsbedingungen ist und somit als Startwert für zeitabhängige Lösungen dienen kann.

2.2 Erweiterung für komplexe Chemie

Die vorige Herleitung ist unter der Annahme eines homogenen Brenngas-Gemischs durchgeführt. Es ist vorausgesetzt, dass sowohl die Brennstoff-Konzentration als auch die Temperaturen im Brenngas und im Rauchgas konstant bleiben. Abbildung (10) zeigt jedoch eine starke Abhängigkeit der Flammengeschwindigkeit vom Äquivalenzverhältnis ($\tilde{\phi}$ reziproken Luftzahl). Obwohl Diffusionsphänomene die Gemischzusammensetzung homogenisieren ist ihrer Einfluß auf der Flammendynamik wichtig. Die adiabate Flammentemperatur T_b hängt ebenfalls vom Äquivalenzverhältnis der Mischung vor der Flamme ab. Mit einer variierenden Verbrennungstemperatur verändert sich die Expansion und dadurch die Strömungsgeschwindigkeit im Rauchgas. Dies stellt wiederum einen Faktor dar, der eine Wechselwirkung zwischen Flammendynamik und Strömung verursacht. Es ist eine wesentliche Zielsetzung der vorliegenden Arbeit diese neue Einflüsse in Betracht zu ziehen und das hydrodynamische Modell dementsprechend für inhomogene Chemie zu erweitern. Die Untersuchung inhomogener Chemie für kurzweilige Störungen entlang der Flamme kann entfallen, da Konzentrationsinhomogenitäten auf kurzen Längenskalen durch Diffusion ausgeglichen werden.

2.2.1 Zusätzliche Annahmen

In der vorherigen Untersuchung ist vereinfacht angenommen, dass Reaktionsrate (17) proportional der Brennstoff-Konzentration ist. Ein allgemeinerer Ausdruck für irreversible globale Einschritt-Arrhenius Reaktionen beliebiger Ordnung berücksichtigt zusätzlich die Sauerstoff-Konzentration $\tilde{Y}_{O_2} = \tilde{y}_f Y_{O_2}$

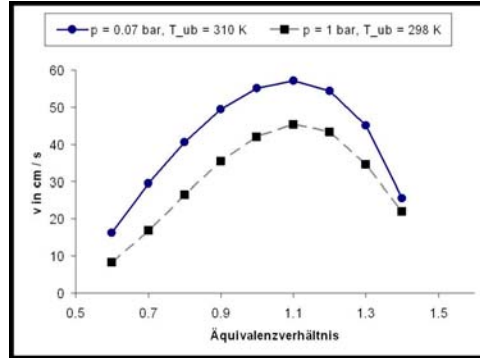


Abbildung 10: Flammgeschwindigkeit (INSFLA) für 0.07 bar und 1 bar in Abhängigkeit von dem Äquivalenzverhältnis. In inhomogenen Mischungen muss die Konzentrationsabhängigkeit somit berücksichtigt werden.

und liefert eine bessere Näherung der Reaktionsrate:

$$\begin{aligned}
 W_r &= A \tilde{y}_f^{\gamma_1 + \gamma_2} Y_{CH_4}^{\gamma_1} Y_{O_2}^{\gamma_2} \exp\left(\frac{-T_a}{T_r}\right) \\
 &\simeq A \tilde{y}_f^{\gamma_1 + \gamma_2} Y_{CH_4}^{\gamma_1} Y_{O_2}^{\gamma_2} \exp\left(-\frac{T_a}{T_b}\right) \exp\left(\frac{T_a}{T_b^2} (T_r - T_b)\right), \quad (64)
 \end{aligned}$$

wobei γ_1 und γ_2 die Reaktionsordnung sind. Der Reaktionsterm weist dann ein Maximum im Fall stoechiometrischer Bedingungen auf. Fette oder magerer Flamme sind kälter als stoechiometrische Flamme, da der überschüssige Sauer- oder Brennstoff zusätzlich erwärmt werden muß. Hier ist zu beachten, dass die Größe des Reaktionsterms nicht von den entdimensionierten Konzentrationen sondern von ihren dimensionsbehafteten Werten abhängen. Die maßgeblichen Werte der Methan- und Sauerstoff-Konzentration für die Reaktionszone Y_{CH_4} und Y_{O_2} sind durch die äußeren unverbrannten Werte y_f und $y_{O_2,f}$ gegeben:

$$W_r \simeq A \tilde{y}_f^{\gamma_1 + \gamma_2} y_f^{\gamma_1} y_{O_2,f}^{\gamma_2} \exp\left(-\frac{T_a}{T_b}\right) \exp\left(\frac{T_a}{T_b^2} (T_r - T_b)\right). \quad (65)$$

Die dimensionslose Brennstoff-Konzentration ist jetzt beliebig von der Zeit- und Raumkoordinaten abhängig. Im Rahmen einer numerischen Umsetzung erfordert dies den Transport des Brennstoffs vor der Flamme zu lösen.

Bisher ist das Rauchgas näherungsweise als isotherm angenommen und Wärmetransport von oder zur Flamme wird vernachlässigt. Soll eine zusammensetzungsabhängige Flammentemperatur und gegebenenfalls die Wärme-freisetzung zusätzlicher Reaktionen im Rauchgas betrachtet werden muss

der Wärmestrom vom Rauchgas bis zur Flammenfläche zusätzlich berücksichtigt werden. Entsprechend wird die Enthalpie H_r , statt durch den Wert der Enthalpie an der Flammenfläche (Rauchgasseite) h_b , durch eine Taylor-Entwicklung genauer angenähert

$$H_r = h_b + \frac{X_r}{\text{Pe}} \frac{\partial h_b}{\partial x^1},$$

wobei X_r den Abstand der Reaktionszone zur Flammenfläche bezeichnet und der Gradient ebenfalls an der Flammenfläche bestimmt wird.

Für den funktionalen Zusammenhang zwischen der Flammentemperatur T_b und der Brennstoffkonzentration werden keine einschränkenden Annahmen getroffen. Dieser soll später aus detaillierten chemischen Daten quantitativ bestimmt werden. Die Temperatur im Brenngasgemisch sei als konstant angenommen.

Gemäß Gleichungen (8) und (65) lautet jetzt der Reaktionsterm

$$W_r = A_T \tilde{y}_f^{\gamma_1 + \gamma_2} y_f^{\gamma_1} y_{O_2,f}^{\gamma_2} \exp \left(Z e_f \left(\left(1 - \frac{1}{\text{Le}} \right) \left(h_b + \frac{X_r}{\text{Pe}} \frac{\partial h_b}{\partial x^1} \right) + \tilde{y}_f - 1 \right) \right), \quad (66)$$

und Beziehung (61) wird

$$h_b = \frac{1}{Z e (1 - \text{Le}^{-1})} \log \left[\frac{\left(m y_f \left(1 + 2 c \frac{X_r}{\text{Pe}} \right) - \frac{\lambda}{\text{Pe Le}} \frac{\partial y_f}{\partial x^1} - \frac{1}{\text{Pe}} \left(\frac{\partial}{\partial t} + \chi \right) \left(\frac{I_{xy}}{m} \right) \right)}{A_T \tilde{y}_f^{\gamma_1 + \gamma_2} y_f^{\gamma_1} y_{O_2,f}^{\gamma_2}} \right] - \frac{X_r}{\text{Pe}} \frac{\partial h_b}{\partial x^1} + \frac{1 - \tilde{y}_f}{1 - \text{Le}^{-1}}. \quad (67)$$

2.2.2 Sprungbedingungen und Flammengeschwindigkeitsbeziehung des hydrodynamischen Modells für inhomogene Mischung

Die oben beschriebene Vorgehensweise zur Herleitung des Modells bleibt unverändert und wird für die jetzt getroffenen Annahmen nicht wieder detailliert ausgeführt. Es werden hier lediglich die neuen Ergebnisse vorgestellt.

Die Sprungbedingungen für den Massen- und Impulsstrom weisen keine Veränderung auf

$$[m] = 0, \quad (68)$$

$$[m \mathbf{v}^1 + p - \sigma^{11}] = -\text{Pe}^{-1} 2cm I_\sigma + o(\text{Pe}^{-1}), \quad (69)$$

$$[m \mathbf{v}^\alpha - \sigma^{1\alpha}] = -\text{Pe}^{-1} \nabla_\perp (m I_\sigma) + o(\text{Pe}^{-1}). \quad (70)$$

Die Flammgeschwindigkeitsbeziehung für inhomogene Mischung und eine chemische Reaktion mit allgemeiner Ordnung lautet jetzt:

$$-\frac{X_r m}{\text{Pe}} \frac{\partial h_b}{\partial x} + \frac{I_H \chi m - \frac{\partial m}{\partial t}}{\text{Pe} m^2} + m \left(\frac{1 - \tilde{y}_f}{1 - \text{Le}^{-1}} - h_f \right) + \frac{m}{\text{Ze} (1 - \text{Le}^{-1})} \log \left[\frac{\left(m \left(1 - \frac{2c X_r}{\text{Pe}} \right) y_f - \frac{I_{xy} \chi m - \frac{\partial m}{\partial t}}{\text{Pe} m^2} \right)}{A_T \tilde{y}_f^{\gamma_1 + \gamma_2} y_f^{\gamma_1} y_{O_2, f}^{\gamma_2}} \right] = 0 \quad (71)$$

Für eine Methan-Luft Flamme werden die Reaktionsordnungen aus den stoechiometrischen Koeffizienten zu $\gamma_1 = 1, \gamma_2 = 2$ abgeschätzt. Es können durch eine Anpassung an chemische/experimentelle Daten genauere Koeffizienten für die globale Reaktion bestimmt werden. Diese erste Approximation für γ_1 und γ_2 wird dennoch als zufriedenstellend eingeschätzt. Nach Einsetzen des Ausdrucks $h_f = \frac{1}{1 - \text{Le}^{-1}} (\tilde{y}_f (y_f - 1))$ und der γ_1 - und γ_2 -Werte wird die Flammgeschwindigkeitsbeziehung:

$$-\frac{X_r m}{\text{Pe}} \frac{\partial h_b}{\partial x} + \frac{I_H \chi m - \frac{\partial m}{\partial t}}{\text{Pe} m^2} + m \frac{1 - \tilde{y}_f y_f}{1 - \text{Le}^{-1}} + \frac{m}{\text{Ze} (1 - \text{Le}^{-1})} \log \left[\frac{\left(m \left(1 - \frac{2c X_r}{\text{Pe}} \right) y_f - \frac{I_{xy} \chi m - \frac{\partial m}{\partial t}}{\text{Pe} m^2} \right)}{A_T \tilde{y}_f^3 y_f y_{O_2, f}^2} \right] = 0 \quad (72)$$

Der präexponentielle Faktor A_T wird so gewählt, dass die Flammgeschwindigkeit m für eine stationäre, ebene, ungestreckte, adiabate Flamme unter stoechiometrische Bedingungen den entsprechenden Wert des mit detaillierter Chemie berechneten Massenstroms annimmt. Für $c = \chi = \frac{\partial}{\partial t} = 0, y_{O_2, f} = y_{O_2, \text{stoech}}, y_f = y_{f, \text{stoech}}, \frac{\partial h_b}{\partial x} = 0$, folgt aus der Beziehung (72)

$$m = A_T \tilde{y}_f^3 y_{O_2, \text{stoech}}^2 \exp [\text{Ze} (\tilde{y}_f y_{f, \text{stoech}} - 1)] \quad (73)$$

und

$$m = m_{\text{stoech}} \Leftrightarrow A_T = \frac{m_{\text{stoech}}}{\tilde{y}_f^3 y_{O_2, \text{stoech}}^2 \exp (\text{Ze} (\tilde{y}_f y_{f, \text{stoech}} - 1))}, \quad (74)$$

wobei m_{stoech} den stationären ungestreckten Massenstrom unter stoechiometrische Bedingungen darstellt.

Die Gleichung (72) wird nach Einsetzen des Ausdrucks für A_T vereinfacht und ergibt:

$$-\frac{X_r m}{\text{Pe}} \frac{\partial h_b}{\partial x} + \frac{I_H \chi m - \frac{\partial m}{\partial t}}{\text{Pe} m^2} + m \tilde{y}_f \frac{y_{f, \text{stoech}} - y_f}{1 - \text{Le}^{-1}} + \frac{m}{\text{Ze} (1 - \text{Le}^{-1})} \log \left[\frac{y_{O_2, \text{stoech}}^2 \left(m \left(1 - \frac{2c X_r}{\text{Pe}} \right) - \frac{I_{xy} \chi m - \frac{\partial m}{\partial t}}{y_f \text{Pe} m^2} \right)}{m_{\text{stoech}} y_{O_2, f}^2} \right] = 0. \quad (75)$$

Die Ausdrücke der Integrale enthalten jetzt die Brennstoff-Konzentration und Enthalpie wie sie sich aus dem hydrodynamischen Modell unmittelbar vor bzw. hinter der Flammenfläche ergeben:

$$I_R = \int_{-\infty}^{X^*} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_f} \right) dX + \int_{X^*}^{X_r} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_b} \right) dX, \quad (76)$$

$$I_\sigma = m^* \int_{-\infty}^{X_r} (T - 1) \left(\frac{T_b}{T} + 2 \text{Pr} - 1 \right) dX, \quad (77)$$

$$I_{XY} = m^* \left[\int_{-\infty}^{X^*} \left(\frac{Y}{T} - \frac{y_f}{T_f} \right) dX + \int_{X^*}^{X_r} \frac{Y}{T} dX \right], \quad (78)$$

$$I_H = m^* \left[\int_{-\infty}^{X^*} \left(\frac{H}{T} - \frac{h_f}{T_f} \right) dX + \int_{X^*}^{X_r} \left(\frac{H}{T} - \frac{h_b}{T_b} \right) dX \right], \quad (79)$$

$$I_X = m^* X_r. \quad (80)$$

Wird anstelle der skalierten Enthalpie die Definition ohne den Vorfaktor $(1 - \text{Le}^{-1})^{-1}$ benutzt, so dass

$$H' = (1 - \text{Le}^{-1}) H = \left(\frac{T - T_f}{Q_1} + \tilde{y}_f (Y - 1) \right) \quad (81)$$

ergibt sich ein neuer Ausdruck für das Integral I'_H :

$$\begin{aligned} I'_H &= (1 - \text{Le}^{-1}) I_H \\ &= m^* \left[\int_{-\infty}^{X^*} \left(\frac{H'}{T} - \frac{h'_f}{T_f} \right) dX + \int_{X^*}^{X_r} \left(\frac{H'}{T} - \frac{h'_b}{T_b} \right) dX \right], \end{aligned} \quad (82)$$

wobei keine explizite Lewis-Zahl-Abhängigkeit mehr auftritt. Wird (82) in der Flammengeschwindigkeitsbeziehung eingesetzt ergibt sich eine neue Beziehung, bei der die Lewis-Zahl nicht mehr explizit auftritt:

$$\begin{aligned} & - \frac{X_r m}{\text{Pe}} \frac{\partial h'_b}{\partial x} + \frac{I'_H \chi m - \frac{\partial m}{\partial t}}{\text{Pe} m^2} + m \tilde{y}_f (y_{f,\text{stoech}} - y_f) + \\ & \frac{m}{\text{Ze}} \log \left[\frac{y_{\text{stoech}}^2}{m_{\text{stoech}} y_{\text{stoech},f}^2} \left(m \left(1 - \frac{2c X_r}{\text{Pe}} \right) - \frac{I_{xy} \chi m - \frac{\partial m}{\partial t}}{y_f \text{Pe} m^2} \right) \right] = 0. \end{aligned} \quad (83)$$

Die Bestimmung einer effektiven Lewis-Zahl, was insbesondere für nahe stoechiometrische Flammen schwierig ist, kann entfallen. Alleine entscheiden sind die Enthalpie- und Konzentrationsprofile, welche sich aus den thermodynamischen Prozessen ergeben. Die Integrale I_{xy} und I_H messen den quantitativen

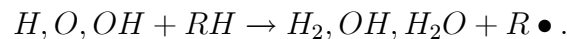
Einfluss unterschiedlicher Wärmeleitfähigkeit und Speziesdiffusivität. Das Auftreten der Terme I_H und I_{xy} vor der Zeitableitung $\frac{\partial m}{\partial t}$ lässt vermuten, dass das zeitliche Verhalten des Massenstroms stark von den thermodynamischen Eigenschaften der Mischung abhängt. Es kann vermutet werden, dass die Flamme nicht immer passiv auf periodische Störungen reagiert, sondern für bestimmte Frequenzen ein eigenes Resonanz-Verhalten zeigen könnte.

2.2.3 Das Zwei-Schichten-Modell

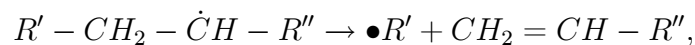
Ein wichtiger Schritt in der Herleitung des Modells ist die asymptotische Entwicklung der Gleichungen in Potenzen der reziproken Peclet-Zahl, wobei große Peclet-Zahlen angenommen werden. Die Genauigkeit der Asymptotik, und dadurch des gesamten Modells, hängt stark von dieser Voraussetzung ab. Es wird jetzt untersucht inwiefern diese Annahme, welche direkt mit der Dicke der Flammenstruktur korreliert, für die Verbrennung von Kohlenwasserstoff-Mischungen zutrifft.

Allgemein wird eine Mischung aus Kohlenwasserstoff und Sauerstoff betrachtet. Der Verbrennungsprozess von Kohlenwasserstoff ist äußerst komplex, es reagieren dabei mehrere hundert Spezies in mehreren tausend Reaktionen. Der Vorgang kann für ein besseres Verständnis vereinfacht beschrieben werden ([Maas1992]).

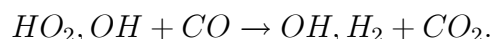
Zunächst bilden sich in einer Vorheizzone reaktiver Spezies (Atome oder Radikale, z.B. H, O oder OH). Die Temperatur nimmt dabei langsam zu. In der Reaktionszone greifen reaktive Spezies den Kohlenwasserstoff $R-H$ (z.B. Oktan C_8H_{18}) unter Bildung von $R\bullet$ an (H-Atom-Abstraktion).



Danach erfolgt der β -Zerfall unter Bildung von Alkenen und kleineren Alkylradikalen R' ,



bis als letzte Bruchstücke Methyl (CH_3)-Radikale entstehen. Je nach der Zusammensetzung werden dann die Methyl-Radikale durch zwei verschiedene Reaktionswege oxidiert und liefern Kohlenmonoxid CO . Das Kohlenmonoxid wird dann in einer CO -Oxidationszone oxidiert und die Temperatur steigt bis zur Flammentemperatur an:

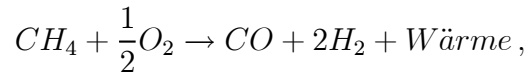


Die gesamte Flammenstruktur besteht aus der Vorheizzone, der Reaktionszone und der CO -Oxidationszone. In der Reaktionszone kann der gesamte

Vorgang in einer globalen Reaktion hoher Aktivierungsenergie und Reaktionsrate vereinfacht werden. Der Umsatz der Spezies und die Temperaturzunahme erfolgen sehr schnell. Die Dicke der Reaktionszone ist entsprechend sehr dünn. Die CO -Oxidation ist die langsamste Reaktion des Prozesses und läuft in einer breiteren Zone ab. Deshalb gilt häufig, dass die Dicke der Reaktionszone deutlich kleiner als die Dicke der CO -Oxidationszone ist.

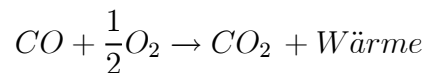
Diese Überlegung führt zu der Definition eines Zwei-Schichten-Modells, in dem die hydrodynamische Sprungbedingungen lediglich die Vorheizzone und die Reaktionszone ersetzen. Die langsame CO -Oxidation, deren ausge dehnte Umsatzzone der Genauigkeit eines Ein-Schicht-Modells schaden würde, ist mit einem gewöhnlichen Arrhenius-Ansatz getrennt modelliert. Die Oxidation des Kohlenmonoxids ist im Vergleich zu den in der Reaktionszone ablaufenden Reaktionen eine langsame Reaktion, welche mit hinreichender Genauigkeit auf der hydrodynamischen Längenskala gelöst werden kann. Es wird im Fall einer numerischen Simulation keine feinere Auflösung des Rechengebiets benötigt. Die Aufteilung der Flamme in zwei unterschiedlich modellierten Schichten trägt, insbesondere im Unterdruckbereich, zu einer deutlichen Erhöhung der Genauigkeit bei.

Im Fall einer Methan-Luft-Flamme werden die Vorheiz- und Reaktionszone durch eine globale Reaktion



ersetzt, deren dynamisches Verhalten und freigesetzten Wärme mit dem hydrodynamischen Ansatz modelliert ist.

Die CO -Oxidation



ist durch Arrhenius Quell- und Senkterme in den Transportgleichungen für die Konzentration und Temperatur modelliert. Abbildung (11) zeigt die Zonen-Aufteilung für eine typische Flammenstruktur.

2.2.4 Grenzen der Modellierung

Die allgemeine Vorgehensweise zur Herleitung des vereinheitlichten Modells erlaubt eine Anwendung auf einen breiten Parameterbereich. Die Voraussetzung einer im Vergleich zu hydrodynamischen Längenskalen dünnen Flamme stellt die Haupteinschränkung dar. Flammen im Unterdruckbereich, deren Reaktionszone druckbedingt ausgedehnt ist, Flammen mit hohen Streckungen und Krümmungen, oder Flammen bei extrem mageren oder fetten Bedingungen, liegen typischerweise an der Grenze oder außerhalb des Gültigkeitsbereichs. Insbesondere das Löschen und Zünden können mit diesem Modell

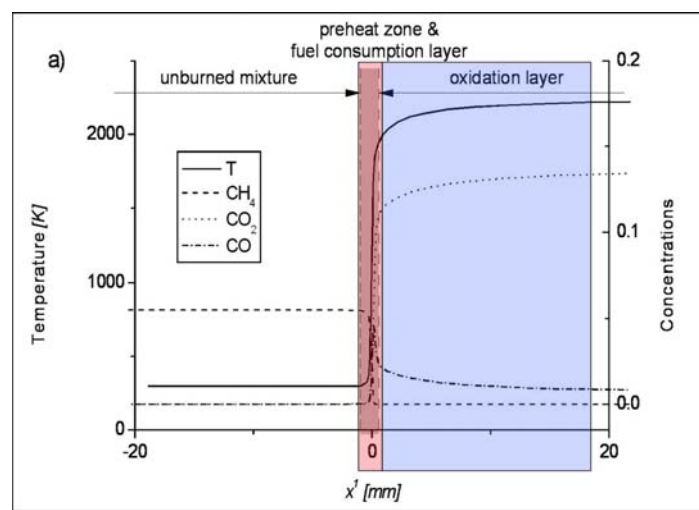


Abbildung 11: Verdeutlichung des Prinzips des Zwei-Schichten-Modells anhand detaillierter INSFLA-Rechnungen: Aufteilung der Flammenstruktur in zwei Schichten. Rot: Vorheizzone und Reaktionszone, mit dem hydrodynamischen Ansatz modelliert. Blau: CO -Oxidationszone, mit einem Arrhenius-Ansatz modelliert. Das Zwei-Schichten-Modell ergibt eine verbesserte Genauigkeit und eine erweiterte Gültigkeit.

nicht beschrieben werden. Das Zwei-Schichten-Modell ist ein erster Schritt in Richtung komplexerer Chemie, der die Genauigkeit und die Anwendbarkeit des Modells verbessert. Ein zuverlässiger Beurteilungskriterium für die Genauigkeit des Modells sind die Modell-Parameter selbst. Diese müssen unabhängig von der Streckung und Krümmung der Flamme sein, weiterhin müssen sich bei gleicher Brennstoffkonzentration stets gleiche Werte ergeben. Die Vorgeschichte einer Flamme darf keinen Einfluss auf die Parameter haben.

Die Annahme einer limitierenden Spezies erfordert eine getrennte Behandlung der mageren und fetten Flammen. In der vorliegenden Modell-Herleitung wurde der Brennstoff als limitierende Spezies gewählt, und somit ist unsere Untersuchung auf magere Flammen beschränkt. Der Fall fetter Flammen lässt sich durch Wahl von Sauerstoff als limitierende Spezies analog behandeln. Für nahezu stoechiometrische Flammen kann sich eventuell durch die Variation der bisher als konstante angenommenen Fluideigenschaften eine geringere Genauigkeit ergeben.

In den vorangegangenen Unterkapiteln wurde ein geschlossenes hydrodynamisches Modell für inhomogene Mischung hergeleitet, welches die hydrodynamischen Größen beiderseits der Flamme durch nicht-reaktive Transportgleichungen (23)-(29) beschreibt. Die Verknüpfung der Variablen beiderseits der Flammenfläche, welche als eine gasdynamische Unstetigkeit aufgefasst ist, erfolgt durch die Sprungbedingungen (68)-(70). Die Bewegung der Flammenfläche relativ zum Fluid ist zusätzlich aus der Differentialgleichung (83) herzuleiten. Der Gültigkeitsbereich dieses Modells ist durch die Zwei-Schichten-Modellierung um ca. eine Größenordnung erhöht. Dafür muss zusätzlich langsame CO-Oxidation im Rauchgas berücksichtigt werden. Somit kann die Flammendynamik für beliebige Strömungsfelder bestimmt werden, wobei natürlich die Gültigkeitsgrenzen des Modells einzuhalten sind. Die in der Numerik notwendige Auflösung in Zeit und Raum ist ähnlich der bei Simulationen nicht-reaktiver Strömung. Verglichen mit dem Aufwand von Rechnungen mit detaillierter Chemie reduziert dies den Aufwand um wenigstens eine Größenordnung pro Raumdimension. Für die praktische Anwendung des vereinheitlichten Modells ist die Vorgabe quantitativer Werte der Modell-Parameter und insbesondere der Integrale unumgänglich. Dies wird im nächsten Abschnitt erläutert.

2.3 Von qualitativ zu quantitativ

Im Rahmen dieser Arbeit soll ein hydrodynamisches Modell erstmals quantitativ umgesetzt werden. Dies erfordert die quantitative Bestimmung aller Parameter des Modells. Zu beachten ist, dass die chemischen Integrale innere

Variablen wie die Temperatur, Spezies-Konzentration und Enthalpie enthalten. Die Profile der inneren Variablen müssen mittels einer Simulation mit detaillierter Chemie bestimmt werden, da experimentelle Werte nicht mit genügender Genauigkeit vorliegen.

2.3.1 Der INSFLA-Code

Die detaillierten Rechnungen zur Bestimmung der Modell-Parameter sind in Zusammenarbeit mit dem Institut für Technische Thermodynamik der Universität Karlsruhe mit dem von Prof. U. Maas entwickelten Code INSFLA durchgeführt. INSFLA ist ein Code für eindimensionale instationäre laminare reaktive Strömungen mit reduzierter oder detaillierter Chemie ([Maas1988], [Stahl1989]). Die reaktive Strömung ist durch die Lösung der Erhaltungsgleichungen der Gesamtmasse, der Teilchenmasse, der Energie und des Impulses beschrieben. Die Erhaltungsgleichungen sind für die primitive Variablen ρ (Dichte), w_i (Massenbrüche) und T (Temperatur) formuliert und lauten

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{v}) = 0, \quad (84)$$

$$\frac{\partial w_i}{\partial t} - \frac{M_i \dot{w}_i}{\rho} + \frac{1}{\rho} \operatorname{div} \vec{j}_i + \mathbf{v} \operatorname{grad} w_i = 0, \quad (85)$$

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \frac{1}{\rho} \operatorname{grad} p + \mathbf{v} \operatorname{grad} \mathbf{v} + \frac{1}{\rho} \operatorname{div} \Sigma = 0, \quad (86)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{v} \operatorname{grad} T - \frac{1}{\rho C_p} \dot{q} + \\ & \frac{1}{\rho C_p} \left(-\frac{\partial p}{\partial t} + \sum_i h_i M_i \dot{w}_i + \sum_i C_{p,i} \vec{j}_i \operatorname{grad} T \right. \\ & \left. + \operatorname{div} \vec{j}_q - \mathbf{v} \operatorname{grad} P + \Sigma : \operatorname{grad} \mathbf{v} \right) = 0. \end{aligned} \quad (87)$$

p steht für den Druck, \mathbf{v} für die Strömungsgeschwindigkeit, M_i für die Molmasse, \dot{w}_i für den chemischen Produktionsterm (Bildungsgeschwindigkeit der Teilchensorte i in der Konzentrationsskala), C_p für die spezifische Wärmekapazität der Mischung bei konstantem Druck, $C_{p,i}$ für die spezifische Wärmekapazität der einzelnen Komponenten bei konstantem Druck, und \dot{q} für die Energiedichte.

Strahlungsphänomene, Gravitation, Druckdiffusion und Dufour-Effekte werden vernachlässigt. Folgende empirische Gesetze werden angewendet:

- das Newton'sche Schubspannungsgesetz

$$\Sigma = -\mu \left[(\operatorname{grad} \mathbf{v}) + (\operatorname{grad} \mathbf{v})^T - \frac{2}{3} (\operatorname{div} \mathbf{v}) \mathbf{I} \right], \quad (88)$$

mit der Viskosität der Mischung μ , wobei die Volumenviskosität vernachlässigt ist;

- das Fourier'sche Wärmeleitungsgesetz

$$\vec{j}_q^c = -\lambda \text{grad } T, \quad (89)$$

mit der Wärmeleitfähigkeit der Mischung λ ;

- das Fick'sche Diffusionsgesetz

$$\vec{j}_i^d = -\rho \frac{w_i}{x_i} D_i^D \text{grad } x_i, \quad (90)$$

$$D_i^D = \frac{1 - w_i}{\sum_{j \neq i} \frac{x_j}{D_{ij}}}, \quad (91)$$

mit dem Fick'sche Diffusionskoeffizient D_i^D ;

- das Thermodiffusionsgesetz

$$\vec{j}_i^T = -\frac{D_i^T}{T} \text{grad } T, \quad (92)$$

mit dem Koeffizient der Thermodiffusion D_i^T ;

- und das Ideale Gasgesetz

$$P = \frac{\rho}{M} RT, \quad \text{mit } M = \frac{1}{\sum_i \frac{w_i}{M_i}}. \quad (93)$$

mit der mittleren Molmasse der Mischung M und der universellen Gaskonstante R .

Thermodynamische Größen einzelner Stoffe wie die spezifische Enthalpie h_i , die spezifische Entropie s_i oder die spezifische Wärmekapazität bei konstantem Druck $C_{p,i}$ sind aus experimentellen Daten durch Polynomansätze angenähert. Die Diffusions- und Viskositätskoeffizienten reiner Substanzen μ_i lassen sich mit Hilfe der Chapman-Enskog-Theorie berechnen. Die Wärmeleitfähigkeits-Koeffizienten mehratomiger Teilchen sind nach einem von Mason und Monchick entwickelten Verfahren berechnet. Sowohl der Viskositätskoeffizient als auch der Wärmeleitfähigkeitskoeffizient einer Gasmischung lassen sich mit hinreichender Genauigkeit über die empirische Beziehung

$$\mu_{mix} = \frac{1}{2} \left[\sum_i x_i \mu_i + \left(\sum_i \frac{x_i}{\mu_i} \right)^{-1} \right], \quad (94)$$

$$\text{bzw. } \lambda_{mix} = \frac{1}{2} \left[\sum_i x_i \lambda_i + \left(\sum_i \frac{x_i}{\lambda_i} \right)^{-1} \right], \quad (95)$$

aus den Viskositäts- und Wärmeleitfähigkeitskoeffizienten der reinen Gase berechnen.

Die Geschwindigkeitskoeffizienten der chemischen Produktionsterme sind durch ein modifiziertes Arrheniusgesetz beschrieben:

$$k_l(T) = A_l T^{\beta_l} \exp\left(\frac{-E_{al}}{RT}\right), \quad (96)$$

wobei der präexponentielle Faktor A_l , der Temperaturexponent β_l und die Aktivierungsenergie E_{al} durch Anpassung an experimentellen Ergebnisse für die Geschwindigkeitskoeffizienten erhalten sind.

Zur Lösung des entstehenden differentiell-algebraischen Differentialgleichungssystems ist eine Ortsdiskretisierung mittels finiter Differenzen verwendet. Die durch die chemische Kinetik bedingte Steifheit des Gleichungssystems erfordert die Anwendung impliziter numerischer Verfahren. Eine Anpassung des Gittersystems erlaubt die Auflösung der Flammenstruktur durch eine große Anzahl von Stützpunkten. Die Dichteverteilung der Stützpunkten wird in Abhängigkeit der Temperatur- und Brennstoffkonzentrationsgradienten gesteuert. In Regionen, wo diese Gradienten klein sind, ist die Gitterpunktdichte entsprechend niedrig. Die Verwendung einer stückweisen monotonen kubischen Hermit Interpolation vermeidet potentielle Überschwinger der Lösung.

Das komplette INSFLA-Programmpaket besteht aus fünf Teilen, von denen drei zur Auswertung der Ergebnisse dienen. Diese drei Teile werden im Rahmen dieser Arbeit nicht benutzt, da die Auswertung der Ergebnisse mit eigenen Matlab-Subroutine durchgeführt ist. In dem Programmteil INSINP werden physikalische Bedingungen, Optionen zur Programmsteuerung (Input-File), Reaktionsmechanismen (Mech-File), thermodynamische Daten (Thermo-File) und molekulare Parameter (Moldat-File) eingelesen und auf ihre Vollständigkeit geprüft. Die so erhaltenen Eingabe-Daten werden im eigentlichen Simulationsprogramm INSRUN eingelesen, in dem die numerische Lösung der Erhaltungsgleichungen unter Berücksichtigung der Rand- und Anfangsbedingungen erfolgt. Die Struktur des Programmpakets ist in Abbildung (12) dargestellt.

Das Programm erlaubt die Simulation laminarer Vormisch- und Diffusionsflammen unter Berücksichtigung der Zeitabhängigkeit für folgende Konfigurationen:

- laminare flache Flammen,

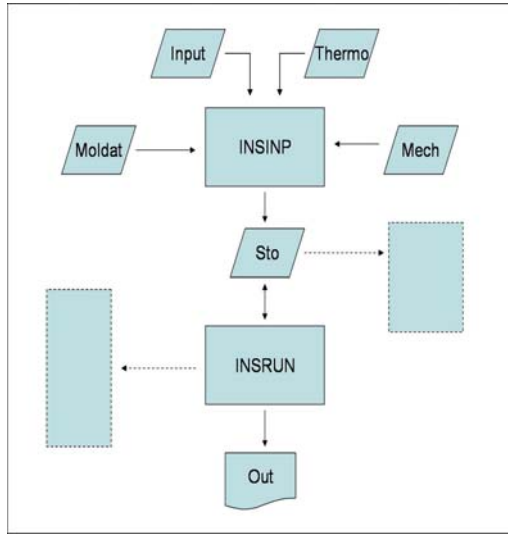


Abbildung 12: Struktur des Programmpakets INSFLA. Out: Ausgabemedien, Sto: Zwischendateien. Gestrichelt: nicht verwendete Teilprogramme. Der Programmteil INSINP dient zur Aufbereitung der Daten, die eigentliche numerische Lösung der Erhaltungsgleichungen erfolgt im Programmteil INSRUN.

- gestreckte Gegenstromflammen,
- induzierte Zündungen durch Wärmezufuhr oder Bildung von Radikalen,
- Selbstzündung,
- Partikelabbrand.

Üblicherweise erfolgt die Rechnung bei niedrigen Mach-Zahlen und konstantem stationärem Druck. Es besteht zusätzlich die Möglichkeit, Stoßwellen zu berechnen mit einem kompressiblen Navier-Stokes-Gleichungslöser.

Die Simulation von Variationen des Strömungsfelds und der Gemischzusammensetzung erfolgt durch die Vorgabe zeitabhängiger Randbedingungen für die Gemischzusammensetzung und die Streckung. Die Streckung ist durch den vorgegebenen tangentialen Druckgradient $J = -\frac{1}{r} \frac{\partial p}{\partial r}$ bedingt, wobei r die Raumkoordinate bezeichnet, und lautet:

$$\chi = \sqrt{-\frac{J}{\rho_f}}, \quad (97)$$

mit der Dichte im unverbrannten Bereich ρ_f . Mehr Details über die Herleitung des Streckungsandrucks sind im Anhang C zu finden.

Als Ergebnis werden die thermokinetische Variablen für jede Zeit- und Raumkoordinate in Form von Tecplot-Daten-Files ausgegeben.

2.3.2 Auswertung der INSFLA-Daten

In dieser Arbeit werden mit dem Programm INSFLA gestreckte vorgemischte Methan-Luft Zwillingsflammen mit Variation der Gemischzusammensetzung simuliert. Obwohl der Code die Möglichkeit bietet, reduzierte chemische Mechanismen durch die ILDM-Methode (Intrinsic-Low-Dimensional-Manifolds) zu verwenden und dadurch den Rechenaufwand zu minimieren, werden hier die detaillierte Reaktionsmechanismen für die Methan-Verbrennung angewendet.

Als Randbedingungen sind die Temperatur und die Spezies-Konzentrationen am "kalten" Ende des Rechengebiets vorgegeben. Die Werte der Spezies-Konzentrationen sind als molare Verhältnisse ausgedrückt, welche vom Programm normiert und als Anfangsbedingungen für die Molenbrüche verwendet werden. Hier werden die Werte für die Methan-, Sauerstoff- und Stickstoff-Konzentrationen eingegeben. Die andere Spezies-Konzentrationen sind automatisch zu Null gesetzt. Es wird ein konstanter Druckgradient quer zum Rechengebiet aufgeprägt, welcher gemäß Gl. (97) zu einer konstanten Flammenstreckung führt. Der statische Druck ist gemäß der Verbrennungsapproximation konstant. Die Konfiguration gestreckter Zwillingsflammen in einer Gegenstromanordnung und die Position des Rechengebiets sind in Abbildung (13) dargestellt.

Die Rechnungen werden ausgewertet sobald ein stationärer Endzustand erzielt wird. Die Ergebnisse der letzten Iteration werden in Matlab importiert und ausgewertet. Die INSFLA-Simulationen berücksichtigen den ganzen Verbrennungsprozess der Methan-Luft-Flamme, wobei dies die CO-Oxidation einschließt. Im Zwei-Schichten-Modell muss die Flammenstruktur bis zum Beginn der CO-Oxidation durch Sprungbedingungen ersetzt werden. Die Bestimmung von den für das hydrodynamische Modell benötigten Parametern muss den Einfluß der CO-Oxidation ausblenden. Dies wird erzielt durch die Aufteilung der Flammenstruktur in zwei getrennte Bereiche. Im ersten Bereich finden die schnellen chemischen Reaktionen statt, für die das hydrodynamische Modell gilt. Im zweiten Bereich läuft die CO-Oxidation ab. Es werden zwei Möglichkeiten zur Definition der Grenze zwischen beiden Bereichen untersucht. Einerseits kann das CH_4 -Konzentrationsprofil ausgehend von der Stelle mit maximaler Ableitung linear extrapoliert werden. Die Nullstelle dieses extrapolierten Profils (mit $X_{+\infty}$ bezeichnet) als Ende der ersten Reaktionszone (der Zone schneller chemischen Vorgänge) gewählt werden. Alternativ kann für $X_{+\infty}$ die Stelle des maximalen CO-Molenbruchs gewählt werden. Die Benutzung des CO-Molenbruchs hat robustere Ergebnisse geliefert. Der Punkt $X_{+\infty}$ stellt das Ende des Bereichs dar, der ausgewertet werden muss, um Parameter des hydrodynamischen Modells zu bestimmen,

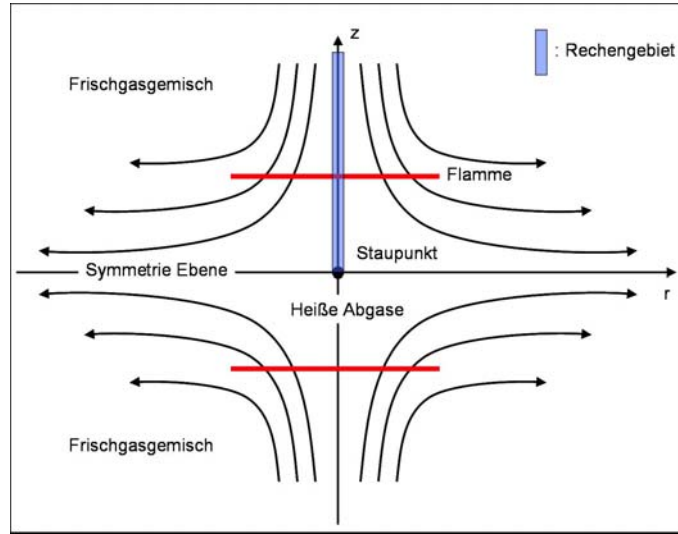


Abbildung 13: Konfiguration der gestreckten Flamme in einer Gegenstromanordnung und Position des Rechengebiets. Durch Symmetrie-Annahme beschränkt sich das Rechengebiet auf die obere Hälfte. Die Flammenstreckung wird den tangentialen Druckgradient bewirkt.

und stellt dadurch die obere Integrationsgrenze der INSFLA-Daten dar. Die im Kapitel 2.1.2 definierte adiabate Verbrennungstemperatur T_b wird an dieser Stelle abgelesen.

Die untere Integrationsgrenze $X_{-\infty}$ und die dort herrschende Temperatur T_f werden an einer beliebigen Stelle mit verschwindenden Ableitungen im unverbrannten Bereich gewählt.

Im vereinheitlichten Modell wird die Flammenposition (mit X^* bezeichnet), und die Grenze zwischen Brenngas- und Rauchgasgebiet wird durch die Beziehung $I_R = 0$ definiert. Der Ausdruck für I_R (76) liefert:

$$I_R = 0 \iff X^* = X_{+\infty} - \frac{1}{\frac{1}{T_f} - \frac{1}{T_b}} \int_{X_{-\infty}}^{X_{+\infty}} \left(\frac{1}{T_f} - \frac{1}{T} \right) dX. \quad (98)$$

Hiermit sind die für die Berechnung der chemischen Integrale benötigten drei Integrationsgrenzen verfügbar. Abbildung (14) zeigt die schematisch das Integrationsgebiet. Die stationäre Annahme ergibt eine verschwindende Geschwindigkeit der Flammenfront relativ zum festen Koordinatensystem, so dass die Ausbreitungsgeschwindigkeit der Flamme gleich der normalen Strömungsgeschwindigkeit ist.

Die aus den INSFLA-Daten gewonnene Parameter sind dimensionsbehaf-

tet und werden mit einer Wellenlinie gekennzeichnet:

$$\tilde{I}_{XY} = \tilde{m}^* \left[\int_{\tilde{X}_{-\infty}}^{\tilde{X}^*} \left(\frac{\tilde{Y}}{\tilde{T}} - \frac{\tilde{Y}_f}{\tilde{T}_f} \right) d\tilde{x} + \int_{\tilde{X}^*}^{\tilde{X}_{+\infty}} \frac{\tilde{Y}}{\tilde{T}} d\tilde{x} \right], \quad (99)$$

$$\tilde{I}_H = \tilde{m}^* \left[\int_{\tilde{X}_{-\infty}}^{\tilde{X}^*} \left(\frac{\tilde{H}}{\tilde{T}} - \frac{\tilde{h}_f}{\tilde{T}_f} \right) d\tilde{x} + \int_{\tilde{X}^*}^{\tilde{X}_{+\infty}} \left(\frac{\tilde{H}}{\tilde{T}} - \frac{\tilde{h}_b}{\tilde{T}_b} \right) d\tilde{x} \right], \quad (100)$$

$$\tilde{I}_\sigma = \tilde{m}^* \int_{\tilde{X}_{-\infty}}^{\tilde{X}_{+\infty}} \left(\tilde{T} - \tilde{T}_f \right) \left(\frac{\tilde{T}_b}{\tilde{T}} + 2 \text{Pr} - 1 \right) d\tilde{x}, \quad (101)$$

$$\tilde{I}_X = \tilde{m}^* \tilde{X}_r, \quad \tilde{X}_r = \left(\tilde{X}_{+\infty} - \tilde{X}^* \right). \quad (102)$$

Die entsprechenden dimensionslosen Integrale sind:

$$I_{XY} = \frac{\text{Pe} \tilde{T}_f^2}{\tilde{Y}_f \tilde{S}_{F0} \tilde{l}} \tilde{I}_{XY}, \quad (103)$$

$$I_H = \frac{\text{Pe} \tilde{T}_f^2}{\tilde{S}_{F0} \tilde{l}} \tilde{I}_H, \quad (104)$$

$$I_\sigma = \frac{\text{Pe}}{\tilde{S}_{F0} \tilde{l}} \tilde{I}_\sigma, \quad (105)$$

$$I_X = \frac{\text{Pe} \tilde{T}_f}{\tilde{S}_{F0} \tilde{l}} \tilde{I}_X, \quad (106)$$

wobei die Umrechnung im Anhang B beschrieben ist.

Es ist zu beachten, dass in der Flammgeschwindigkeitsbeziehung (83) die dimensionslosen chemischen Parameter immer gemeinsam mit dem Vorfaktor Pe^{-1} auftreten. Dieser Vorfaktor hebt sich gegen die in den Beziehungen (103)-(106) ohnehin vorhandene Peclet-Zahl auf. Eine explizite Berechnung einer Peclet-Zahl ist somit nicht notwendig, wenn die dimensionsbehafteten Integrale bekannt sind. Die Streckung wird gemäß Anhang C hergeleitet und normiert.

Für die spätere Validierung des Modells durch den Vergleich mit den experimentellen Daten sollen zusätzliche Informationen aus dem OH-Molenbruch-Profil ausgewertet werden. Experimentell sind OH-Chemolumineszenz-Bilder gemessen. Aus dem maximalen Wert der Chemolumineszenz-Intensität kann die Flammenposition ermittelt werden. Angenommen wird, dass dieses Maximum an der Stelle maximaler Steigung des OH-Molenbruchs auftritt. Im hydrodynamischen Modell ist die Flammenposition gemäß Beziehung (98) an einer anderen Stelle definiert. Für einen Vergleich von Experiment und Modell muss aus der Flammenfläche wie sie das hydrodynamische Modell liefert

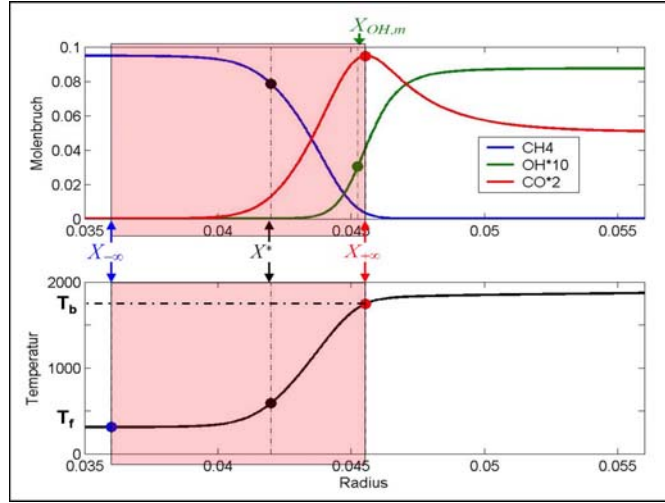


Abbildung 14: Charakteristische Positionen in der Flammenstruktur. Die Berechnung der Modell-Parameter erfolgt zwischen den Integrationsgrenzen $X_{-\infty}$ und $X_{+\infty}$; die Position der Flammenfläche X^* ist durch die Beziehung $I_R = 0$ bedingt; die Position des maximalen OH-Molenbruch-Gradients $X_{OH,m}$ liefert die Verschiebung der experimentell gemessenen Flammenfront.

die Position maximaler Chemolumineszenz abgeleitet werden. Dies erfordert, dass aus den chemischen Daten der Abstand zwischen der Flammenposition X^* und der Position der maximalen Steigung der OH-Konzentration $X_{OH,m}$ hergeleitet wird. Dieser Abstand ist entdimensioniert in Abbildung (21) dargestellt und erweist sich als relativ unempfindlich gegenüber Äquivalenzverhältnis- und Streckungsvariationen. Es wird $X_{OH,m} = 0.19$ gewählt.

2.3.3 Gültigkeitsgrenze des Modells charakterisiert durch die Peclet-Zahl

Die Peclet-Zahl ist durch die Beziehung $Pe = \tilde{l}/\tilde{l}_0$ bestimmt, mit der Dicke der Flamme $\tilde{l}_0 = \tilde{\lambda}_f / \left(\tilde{S}_{F,0} \tilde{\rho}_f \tilde{C}_{p,f} \right)$. Die adiabate Flammgeschwindigkeit $\tilde{S}_{F,0}$ lässt sich aus der Berechnung einer ungestreckten stoichiometrischen Flamme herleiten. Abbildung (15) zeigt eine Abnahme von $\tilde{S}_{F,0}$ mit dem Druck. Die Dichte ρ_f ist direkt aus INSFLA bestimmbar. Ihre Druckabhängigkeit ist in Abbildung (15) dargestellt und zeigt den von dem idealen Gasgesetz vorhergesagten $\rho \sim p$ -Zusammenhang. Der Wärmeleitfähigkeitskoeffizient der Gasmischung lässt sich mit der empirischen Beziehung (95) berechnen, wobei einzelne Werte der Wärmeleitfähigkeiten von Methan und Luft in der

		Luft	Methan	stoechiometrische Mischung
$\tilde{\lambda}_f$	[W/mK]	$2.7 * 10^{-2}$	$3.5 * 10^{-2}$	$2.7 * 10^{-2}$
$\tilde{C}_{p,f}$	[Ws/kgK]	$1 * 10^3$	$2.2 * 10^3$	$1.6 * 10^3$
$\tilde{\mu}_f$	[kg/ms]	$1.9 * 10^{-5}$	$1.15 * 10^{-5}$	$1.8 * 10^{-5}$

Tabelle 1: Werte des Waermeleitfaehigkeitskoeffizient, Waermekapazitaet bei konstantem Druck und Viskositaet fuer T=310K.

Literatur zu finden sind und in Tabelle (1) für $T = 310K$ angegeben sind. Sowohl die Wärmeleitfähigkeit als auch die Wärmekapazität bei konstantem Druck $\tilde{C}_{p,f}$ sind bei konstanter Temperatur druckunabhängig. Da die Gemischzusammensetzung nur schwach variiert, sind $\tilde{\rho}_f, \tilde{\lambda}_f$, und $\tilde{C}_{p,f}$ bei konstantem Druck als konstant angenommen. Für die Wärmekapazität einer Gasmischung kann der arithmetische Mittelwert genommen werden. Dadurch hängt die Peclet-Zahl ausschließlich von dem Druck ab, ihr Zusammenhang ist in Abbildung (15) dargestellt. Die Gültigkeitsgrenze des hydrodynamischen Modells, durch kleinen Pe-Zahlen gekennzeichnet, liegt offensichtlich bei niedrigen Drücke.

2.3.4 Effektive Zeldovich-Zahl

Im Fall komplexer chemischen Kinetik geht jede berücksichtigte Reaktion mit einer eigenen Aktivierungsenergie und einem präexponentiellen Faktor einher. Die in der Gleichung (66) benutzte Zeldovich-Zahl Ze_f ist eine effektive Zeldovich-Zahl, welche sich aus den präexponentiellen Faktoren und Zeldovich-Zahlen jeder einzelnen Reaktionen zusammensetzt. Sie kann experimentell ermittelt werden, indem die globale Reaktionsrate als Funktion der Rauchgastemperatur gemessen wird. In Abbildung (16) sind typische Werte der effektiven Zeldovich-Zahl für einige Kohlen-Wasserstoff-Luft-Flammen als Funktion der Rauchgastemperatur zusammengestellt. Die Zeldovich-Zahl folgt aus der Änderung der Flammengeschwindigkeit als Funktion der Rauchgastemperatur.

In der vorliegenden Arbeit erfolgt die Bestimmung der effektiven Zeldovich-Zahl mit INSFLA aus einzeln Rechnungen und einem Referenzwert m_{stoech} für stoechiometrische Bedingungen.

Wird eine ungekrümmte und ungestreckte stationäre Flamme betrachtet, kann aus der Flammengeschwindigkeitsbeziehung (83) eine analytische Beziehung für den Massenstrom hergeleitet werden

$$m = m_{\text{stoech}} \left(\frac{y_{o_2}}{y_{o_2,\text{stoech}}} \right)^2 \exp [Ze \tilde{y}_f (y_f - y_{f,\text{stoech}})]. \quad (107)$$

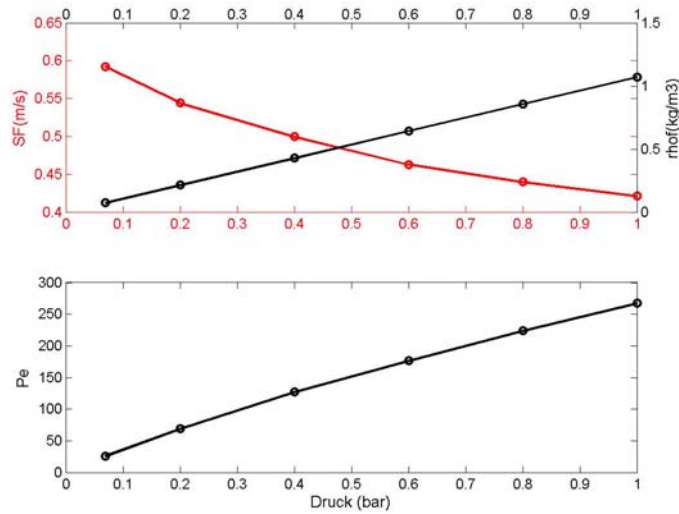


Abbildung 15: Oben: Verlauf der Flammgeschwindigkeit und der Dichte im Frischgas-Gemisch in Abhängigkeit vom Druck. Unten: Peclet-Zahl in Abhängigkeit vom Druck. Die Peclet-Zahl charakterisiert die Gültigkeit des hydrodynamischen Modells, welche mit kleiner Drücke sinkt.

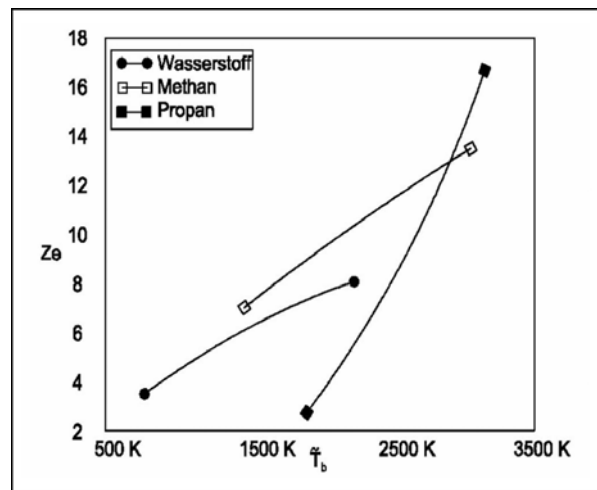


Abbildung 16: Effektive Zeldovich-Zahlen für Wasserstoff-Luft, Methan-Luft und Propan-Luft Flammen in Abhängigkeit von der Rauchgastemperatur gemäß Klimenko & Class mit Daten von Abdel-Gayed, Bradley, Hamid & Lawes und Abdel-Gayed, Al-Kishali & Bradley. Die Zeldovich-Zahl misst die Empfindlichkeit der globalen Reaktion auf Temperaturänderungen.

Durch ein Vergleich zwischen dem mit INSFLA berechneten Massenstrom m_{insfla} und der analytischen Lösung kann ein funktionaler Zusammenhang für die effektive Zeldovich-Zahl hergeleitet werden. Ist die Bedingung $m_{analytisch} = m_{insfla}$ für variable Äquivalenzverhältnisse gefordert, ergibt sich die Zeldovich-Zahl als Funktion der Gemischzusammensetzung:

$$m_{analytisch} = m_{insfla} \quad (108)$$

$$\implies Ze = \frac{1}{\tilde{y}_f (y_f - y_{f,stoech})} \log \left[\frac{m_{insfla}}{m_{stoech}} \left(\frac{y_{o_2,stoech}}{y_{o_2}} \right)^2 \right]. \quad (109)$$

Dieser funktionale Zusammenhang ist in Abbildung (17) für einen Druckbereich von 0.069 bis 1 bar dargestellt. Die Zeldovich-Zahl nimmt bei konstantem Druck mit zunehmendem Äquivalenzverhältnis ab. Die über das Äquivalenzverhältnis gemittelten Werte der Ze-Zahl zeigen eine positive lineare Druck-Abhängigkeit. Dies bedeutet, dass der Massenstrom durch die Flamme m für steigende Drücke zunehmend sensitiv auf Gemischzusammensetzungs-Änderungen reagiert. Ein ähnlicher Verlauf ist für Geschwindigkeitskoeffizienten von chemischen Reaktionen 2. Ordnung schon bekannt ([Maas1992]): für niedrigen Druck ist der Geschwindigkeitskoeffizient proportional zum Druck und es ergibt sich eine lineare Abhängigkeit. Die hier gefundenen Ze-Zahlen müssen nicht mit den oben angegebenen experimentellen Werten übereinstimmen, da die CO-Oxidation hier nicht berücksichtigt wird. Die spezielle Definition der Position zur Auswertung des Massenstroms, welche nah von der Vorheizzone liegt, muss zudem berücksichtigt werden.

Für den Druck $p = 0.069$ bars wurde mit einem angenommenen linearen Zeldovich-Zahl-Zusammenhang

$$Ze = -71.5 \phi + 76.5 \quad (110)$$

den Massenstrom m in Abhängigkeit vom Äquivalenzverhältnis für eine planare ungestreckte Flamme berechnet. Der Vergleich mit dem aus INSFLA ausgewerteten Massenstrom in Abbildung (19) zeigt eine gute Übereinstimmung.

2.3.5 Streckung- und Gemischzusammensetzung-Abhängigkeit der Modell-Parameter

Laut theoretischer Überlegungen sollen die integrale Modell-Parameter im Gültigkeitsbereich, d.h. für $Pe \gg 1$, unabhängig von der Flammenstreckung sein. Eine funktionale Abhängigkeit der Parameter von der Gemischzusammensetzung wird dagegen erwartet, die im einfachsten Fall linear wäre. Die

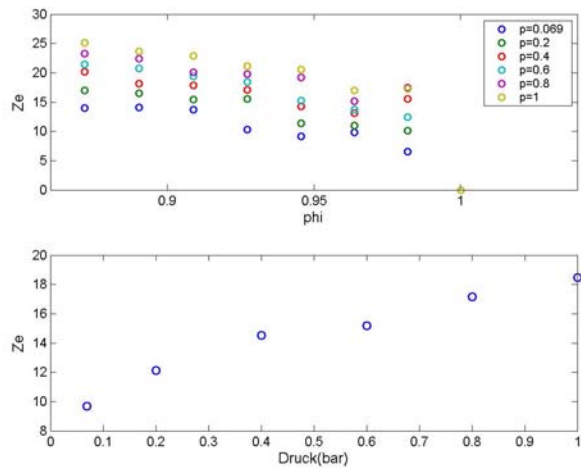


Abbildung 17: Verlauf der Zeldovich-Zahl in Abhängigkeit von dem Äquivalenzverhältnis und dem Druck. Die Werte der Zeldovich-Zahl sind aus einem Vergleich zwischen dem analytischen Massenstrom-Ausdruck und den berechneten Werte des Massenstroms hergeleitet. Oben: Äquivalenzverhältnis-Abhängigkeit für verschiedene Drücke. Unten: Mittelwert der Ze-Zahl über den Druck.

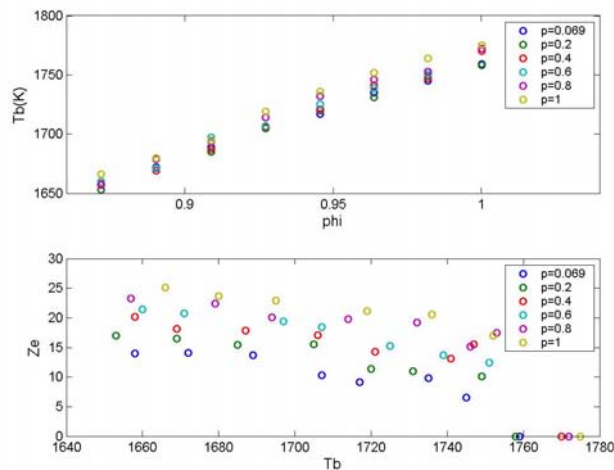


Abbildung 18: Oben: Korrelation zwischen der Flammentemperatur T_b und dem Äquivalenzverhältnis für verschiedene Drücke. Unten: Verlauf der Ze-Zahl über die Flammentemperatur.

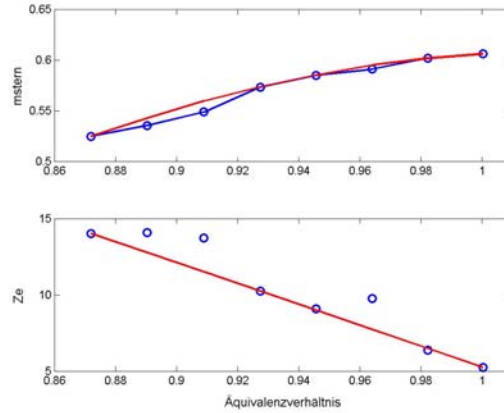


Abbildung 19: Oben: Berechnung des Massenstroms über das Äquivalenzverhältnis mit einer linearen Approximation für die Zeldovich-Zahl (unten), im Fall einer ungestreckten stationären Flamme. Blau: INSFLA-Daten. Rot: gerechnete Werte.

Unabhängigkeit der Parameter von der Flammenstreckung stellt eine wichtige Bedingung für die Anwendbarkeit des hydrodynamischen Modells auf praktische Fälle dar. Die Untersuchung dieser Zusammenhänge wurde für den im Experiment herrschenden Druck $p = 0.069$ bar durchgeführt. Dabei werden einerseits die Parameter, die zur Validierung des Modells mit den experimentellen Daten dienen, bestimmt und andererseits wird überprüft inwieweit die Modellannahmen erfüllt sind. Das Äquivalenzverhältnis der Methan-Luft-Mischung wird von 0.88 bis 1 variiert (magere Flamme), die Streckungswerte liegen innerhalb der Löschgrenzen ($J = -50$ bis -500).

Die Ergebnisse der Auswertung sind in Abhängigkeit von der Streckung in Abbildungen (20), (21) und (22) dargestellt. Die Modell-Parameter weisen eine leichte Sensitivität bezüglich der Streckung auf. Dies weist darauf hin, dass die gewählten Einstellungen nah an der Gültigkeitsgrenze des Modells liegen. Diese Empfindlichkeit bleibt allerdings schwach; die maximale Abweichung vom Mittelwert beträgt für das Integral I_H 11%. Damit ist die Annahme streckungsunabhängiger Parameter gut erfüllt und nachgewiesen.

In den Abbildungen (23), (24) und (25) ist die Gemischzusammensetzung-Abhängigkeit verdeutlicht. Die selben Größen sind diesmal in Abhängigkeit von dem Äquivalenzverhältnis dargestellt. Der Mittelwert der Integrale (über die Streckung gemittelt) zeigt eine Tendenz zu einer linearen Äquivalenzverhältnis-Abhängigkeit.

Das Auftreten einer Abhängigkeit der berechneten Werte von der Streckung

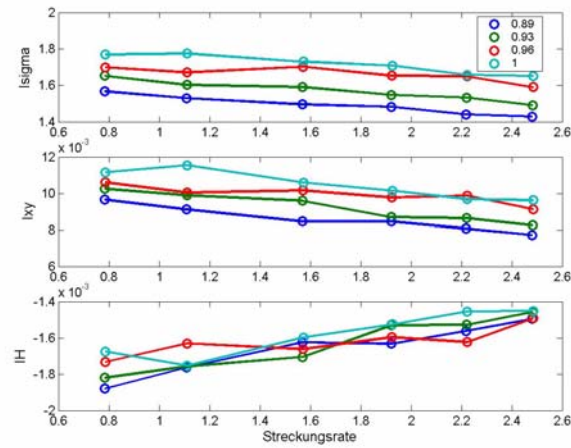


Abbildung 20: Verlauf der Integrale I_{σ} , I_{XY} und I_H über die Streckrate für verschiedene Äquivalenzverhältnisse ($\phi = 1, 0.98, 0.93$ und 0.89)

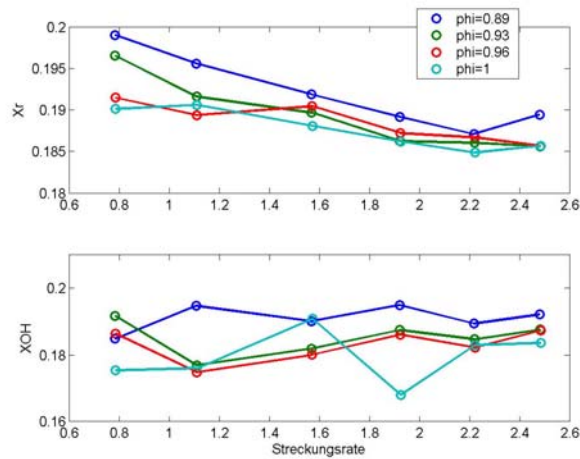


Abbildung 21: Verlauf der entdimensionierten Abstände X_r und $X_{OH,m}$ über die Streckrate für verschiedene Äquivalenzverhältnisse ($\phi = 1, 0.98, 0.93$ und 0.89)

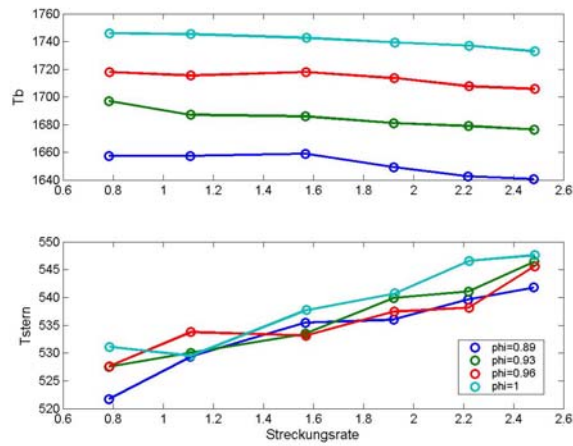


Abbildung 22: Verlauf der Flammentemperatur T_b und der Temperatur auf der Flammenfläche T^* über die Streckrate für verschiedene Äquivalenzverhältnisse ($\phi = 1, 0.98, 0.93$ und 0.89)

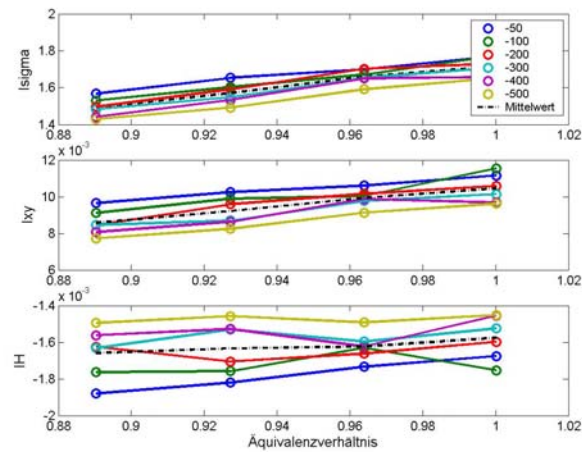


Abbildung 23: Verlauf der Integrale I_σ , I_{XY} und I_H über das Äquivalenzverhältnis für verschiedene Druckgradienten ($J = -50$ bis -500)

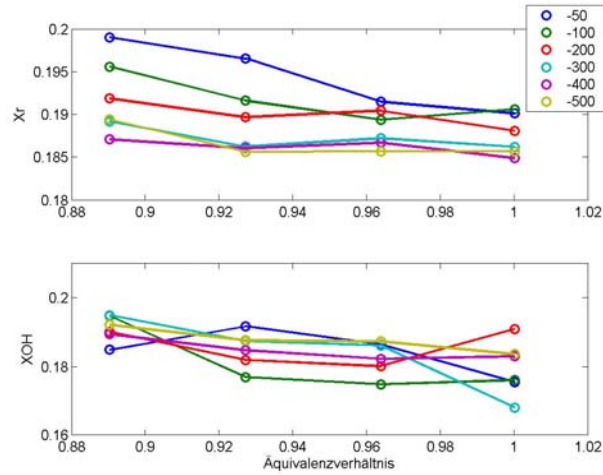


Abbildung 24: Verlauf der entimensionierten Abstände X_r , X_h und $X_{OH,m}$ über das Äquivalenzverhältnis für verschiedene Druckgradienten ($J = -50$ bis -500)

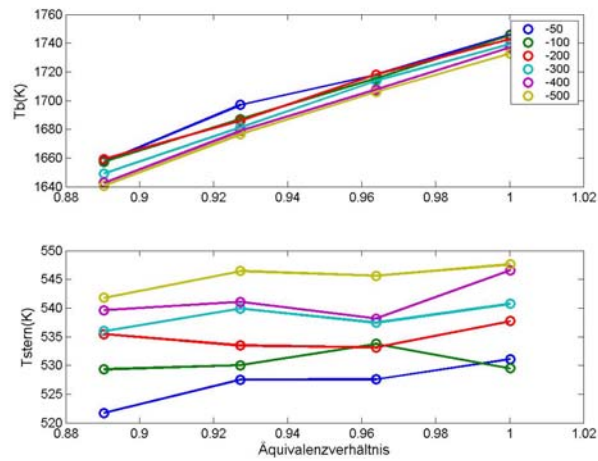


Abbildung 25: Verlauf der Flammentemperatur T_b und der Temperatur auf der Diskontinuität T^* über das Äquivalenzverhältnis für verschiedene Druckgradienten ($J = -50$ bis -500)

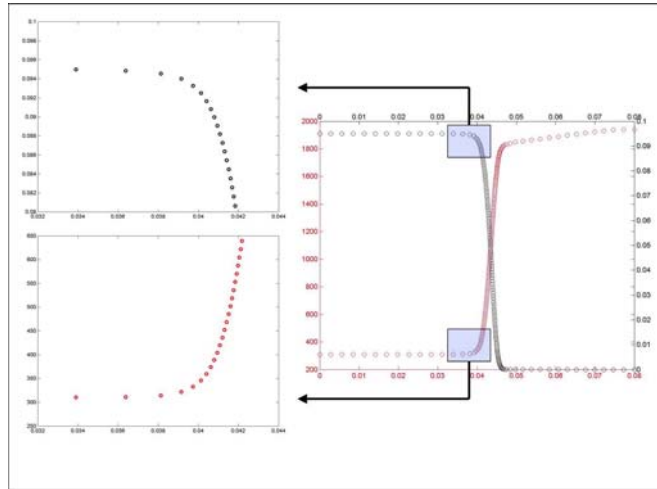


Abbildung 26: Räumliche Auflösung der Flammenstruktur in INSFLA. Rot: Temperatur-Verlauf. Schwarz: Methan-Molenbruch-Verlauf. Während die Reaktionszone sehr fein diskretisiert ist, zeigen die zwei vergrößerte Bereiche eine geringere Auflösung in der Vorheizzone.

kann mehrere Ursachen haben. Erstens erfordert die Berechnung der chemischen Profile für kleine Werte der Streckung ein großes Rechengebiet, wobei die Lage des Staupunkts im Fall einer verschwindenden Streckung gegen unendlich strebt. Dies hat trotz der Gitteradaptivität eine schlechtere Auflösung der Flamme zur Folge. Dies gilt insbesondere in der Vorheizzone (siehe Abbildung (26)). Die Berechnung von empfindlichen Parametern (I_{XY} , I_H , X_r und T^*) kann durch diese geringere Genauigkeit in der Vorheizzone verschlechtert werden. Die Symmetrie der Abweichungen um den Mittelwert und die unregelmäßigen Kurven für gewisse Parameter (I_H , X_r , T^*) scheinen tatsächlich auf ungenaue Ergebnisse hinzuweisen. Zweitens ist eine nichtverschwindende Streckungsabhängigkeit durchaus möglich, da die gewählte Peclet-Zahl etwa 20 beträgt und damit im asymptotischen Sinn noch nicht sehr groß ist.

2.3.6 Einfluß des Zwei-Schichten-Modells

Um die tatsächliche durch die Anwendung des Zwei-Schichten-Modells erzielte Verbesserung der Modell-Genauigkeit zu überprüfen, werden die Ergebnisse mit dem Ein-Schicht-Modell, das CO -Oxidation einschließt, verglichen. Dies bedeutet, dass das Ende der Integrationszone X_r bis zum Ende der Oxidationszone verschoben wird. Die Ergebnisse, in Abbildungen (27), (28) und (29) dargestellt, zeigen eine deutlich stärkere Streckungsabhängigkeit.

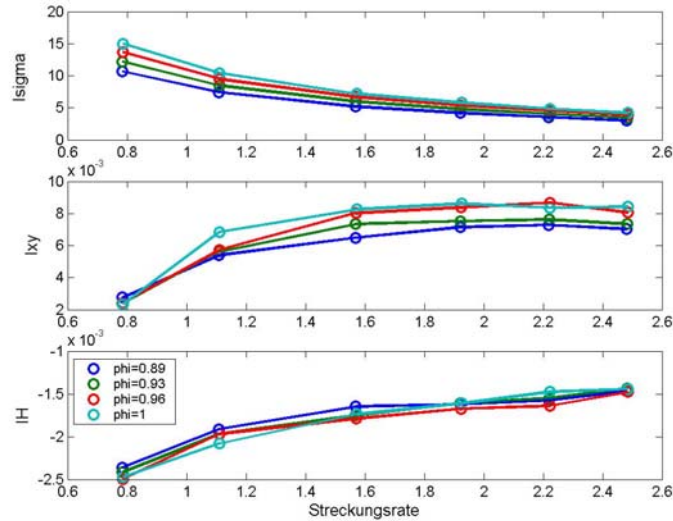


Abbildung 27: Verlauf der Integrale I_σ , I_{XY} und I_H über die Streckrate für verschiedene Äquivalenzverhältnisse ($\phi = 1, 0.98, 0.93$ und 0.89) für das Ein-Schicht-Modell das CO -Oxidation einschließt. Die erhaltenen Kurven zeigen einen deutlichen funktionalen Zusammenhang zwischen den Integrale und der Streckung.

Der glatte Kurven-Verlauf in den Abbildungen deutet zweifellos auf einen funktionalen Zusammenhang hin, wobei zusätzlich eine Streuung der Werte noch zu beobachten ist. Die Gemischzusammensetzung-Abhängigkeit ist im Vergleich hierzu zu vernachlässigen.

In der Tabelle (2) sind im Fall einer festen Konzentration für beide Modellierungen die maximale Abweichungen um den Mittelwert der Parameter dargestellt. Die Einbeziehung der CO -Oxidation verursacht eine deutliche Steigerung des Fehlers, von einem Faktor 3 bis 30.

Es stellt sich also heraus, das die Aufteilung der Flammenstruktur in dem

Δ_{\max} (%)	1-Schicht	2-Schichten
I_{XY}	60	10
I_H	30	11
I_σ	80	5
X_r	90	3

Tabelle 2: Maximale Abweichungen um den Parameter-Mittelwert fuer das Ein-Schicht- und das Zwei-Schichten-Modell.

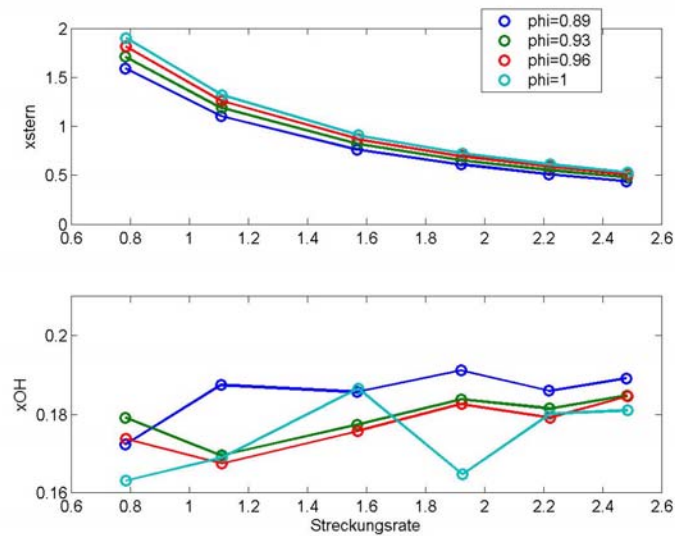


Abbildung 28: Verlauf der entdimensionierten Abstände X_r und $X_{OH,m}$ über die Streckrate für verschiedene Äquivalenzverhältnisse ($\phi = 1, 0.98, 0.93$ und 0.89) für das Ein-Schicht-Modell das CO -Oxidation einschließt.

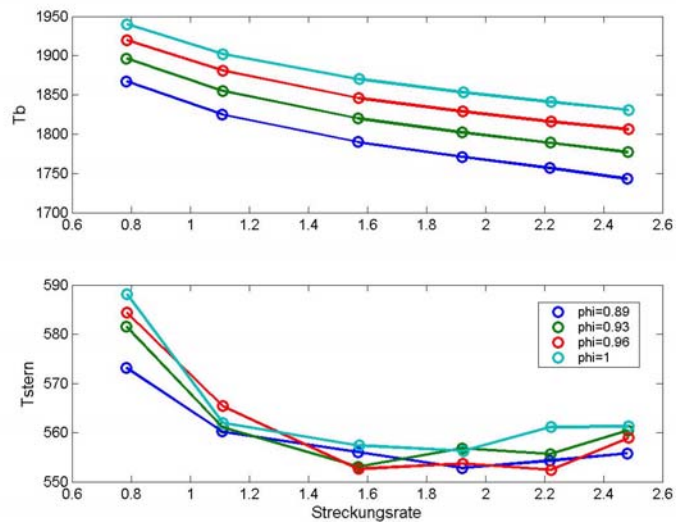


Abbildung 29: Verlauf der Flammentemperatur T_b und der Temperatur auf die Diskontinuität T^* über die Streckrate für verschiedene Äquivalenzverhältnisse ($\phi = 1, 0.98, 0.93$ und 0.89) für das Ein-Schicht-Modell das CO -Oxidation einschließt.

Zwei-Schichten-Modell eine deutliche Verbesserung der Modellierungsgenauigkeit und eine Verbreiterung des Gültigkeitsbereichs liefert. Es sei darauf hingewiesen, dass im Falle instationärer Flammen Streckung- und Zeitabhängigkeiten eine ähnlich große Abhängigkeit der Modell-Parameter liefern können. Für das hier betrachtete Verifizierungsbeispiel einer Unterdruckflamme kann nur das Zwei-Schichten-Modell mit guter Genauigkeit angewendet werden. Eine weitere Verbesserung verspricht die getrennte Behandlung der Vorheizzone in einem Drei-Schichten-Modell. Die chemischen Reaktionen in der Vorheizzone lassen sich allerdings schwieriger durch eine globale Reaktion vereinfachen als die *CO*-Oxidation. Bei normalen Bedingungen bleibt die Dicke der Vorheizzone dünn genug um in dem hydrodynamischen Modell einbezogen zu werden. Die separate Modellierung der Vorheizzone mit detaillierter Chemie wäre jedoch im Fall der Selbstzündung notwendig.

Es wurde in diesem Kapitel gezeigt, welche Vor- und Nachteile bezüglich des Rechenaufwands und der physikalischen Übereinstimmung ein hydrodynamisches Modell besitzt. Die Vorgehensweise zur analytischen Herleitung des vereinheitlichten Modells wurde erläutert. Das Modell beschreibt die Flamme detailliert und weist einen weiten Anwendungsbereich auf. Das Modell wurde für variable Gemischzusammensetzungen erweitert, und die Grenzen des Modells wurden durch die Einführung eines so genannten Zwei-Schichten-Modells abgeschwächt. Quantitative Modell-Parameter wurden bestimmt und die Vorteile einer Aufteilung der Flammenstruktur in einem Zwei-Schichten-Modell wurde bezüglich der Genauigkeit und der Modell-Gültigkeit nachgewiesen.

3 Anwendung des Modells

In den vorigen Kapiteln wurde das Modell definiert und seine quantitativen Parameter für einen Druck $p = 0.069$ bar berechnet. Bisher wurde ausschließlich das Gebiet in unmittelbarer Umgebung der Flamme betrachtet. Der Gegenstand dieses Kapitels besteht darin, die hydrodynamische Grundgleichungen, welche die Strömung und Chemie im ganzen Gebiet beschreiben, so wie sie später numerisch umgesetzt werden, aufzuführen. Die durch das Experiment bedingte Geometrie und zugehörige Randbedingungen werden ebenso vorgestellt. Damit wird die Physik des Experiments, das später nachgerechnet werden soll, vollständig definiert.

3.1 Hydrodynamische Grundgleichungen

Wir beschränken uns jetzt auf den zweidimensionalen Fall. Das hydrodynamische Modell liefert folgende Informationen: der Brennstoff (in dem Fall Methan) wird vollständig in Kohlenmonoxyd CO umgesetzt; die Temperatur springt vom konstanten Wert T_f der unverbrannten Mischung zur variablen Temperatur im Rauchgas T_b ; die Sprungbedingungen für den Impuls sind gemäß Beziehungen (69) und (70) gegeben und berücksichtigen zusätzlich viskose und dynamische Effekte; die Position der Flammenfläche ergibt sich aus kinematischem Zusammenspiel aus Strömungsgeschwindigkeit normal zur Flamme und Massenstrom durch die Flamme m ; der Massenstrom m reagiert gemäß Gl. (83) auf die intrinsischen Eigenschaften der Oberfläche (Flammenkrümmung) und auf die Oberfläche bezogenen strömungsmechanischen Größen (Flammenstreckung) sowie lokale chemische Bedingungen (Brennstoff und Sauerstoff-Konzentration). In der Theorie des vereinheitlichten Modells von ([Class2002]) sind die strömungsmechanischen und chemischen Größen im äußeren Gebiet, d.h. außerhalb der Flammenstruktur, durch nichtreaktive dimensionslose Transportgleichungen bestimmt. Im Zweischichten-Modell wird zusätzlich die Umwandlung des Kohlenmonoxyds in CO_2 im Rauchgas berücksichtigt.

Für die Bestimmung der Transportkoeffizienten wird folgende Vereinfachung getroffen. Es wird nur eine schwache Variation der Gemischzusammensetzung angenommen; die Störung bleibe unterhalb von 20%. Die Abhängigkeit der Transportkoeffizienten (dynamische Viskosität μ , Wärmeleitfähigkeit λ , und Diffusivität des Spezies D) von der Zusammensetzung darf somit vernachlässigt werden. Der Viskositätskoeffizient μ und der Wärmeleitfähigkeitskoeffizient λ sind unabhängig vom Druck und proportional zur Wurzel der Temperatur ($\mu \sim T^{1/2}$, $\lambda \sim T^{1/2}$). Im Gegensatz zu Wärmeleitfähigkeits- und Viskositätskoeffizienten hängt der Diffusionskoeffizient D vom Druck ab

($D \sim 1/p$) und es gilt $D \sim T^{3/2}$ ([Maas1992]). Die Variation der Temperatur im unverbrannten und im verbrannten Bereich sei hinreichend schwach, um konstante Werte für die Transportkoeffizienten und die entsprechenden dimensionslosen Kennzahlen (Lewis und Reynolds-Zahlen) anzunehmen.

Es wird jetzt erläutert, wie sich das Zwei-Schichten-Modell in den Transportgleichungen einsetzen lässt. Ziel dieser Arbeit ist die Beschreibung der dynamischen Wechselwirkungen zwischen Strömung und Flamme. Deswegen werden lediglich diejenigen Konzentrationen bestimmt, die eine Rolle in der Bestimmung der Flammengeschwindigkeit spielen. Aufgrund der Annahme magerer (bzw. fetter) Vormischflammen verschwinden z.B. die Brennstoff-Konzentration (bzw. Sauerstoff-Konzentration) hinter der Flamme sowie die CO -Konzentration vor der Flamme. Für diese Fälle ist die Lösung einer Transportgleichung überflüssig. Zusammenfassend gelten für die CH_4 - und CO -Konzentrationen die folgende Beziehungen:

Vor der Flamme :

$$\frac{\partial \rho Y_{CH_4}}{\partial t} + \nabla(\rho \mathbf{v} Y_{CH_4}) = \frac{\nabla(\lambda \nabla Y_{CH_4})}{Pe Le_{CH_4}}, \quad (111)$$

$$Y_{CO} = 0, \quad (112)$$

hinter der Flamme :

$$\frac{\partial \rho Y_{CO}}{\partial t} + \nabla(\rho \mathbf{v} Y_{CO}) = \frac{\nabla(\lambda \nabla Y_{CO})}{Pe Le_{CO}} + A_{CO} Y_{CO} \exp\left(\frac{-T_a}{T}\right), \quad (113)$$

$$Y_{CH_4} = 0, \quad (114)$$

wobei T_a die Aktivierungstemperatur und A_{CO} der Arrhenius-Koeffizient für die CO -Oxidation, Pe die Peclet-Zahl und Le_{CH_4} (bzw. Le_{CO}) die Lewis-Zahl des Methans (bzw. des Kohlenmonoxids) darstellen.

Gemäß der hohen Aktivierungsenergie-Modellierung des Methan-Abbaus wird die gesamte Methan-Menge auf der Flamme vollständig in Kohlenmonoxid umwandelt. Dies bedeutet, daß die Randbedingung für die CO -Konzentration auf der Flammenfläche zu stellen ist. Es ist zu beachten, dass sich die Flammenfläche im Allgemeinen bewegt. Es erweist sich als günstig, beide Konzentrationen mit einer einzigen Transportgleichung, welche die CH_4 -Konzentration vor der Flamme und die CO -Konzentration hinter der Flamme beschreibt, zu erfassen:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho Y}{\partial t} + \nabla(\rho \mathbf{v} Y) = & \frac{\nabla(\lambda \nabla Y)}{Pe (Le_{CH_4} + (Le_{CO} - Le_{CH_4}) H(x^1))} \\ & + H(x^1) \cdot A_{CO} Y \exp\left(\frac{-T_a}{T}\right), \end{aligned} \quad (115)$$

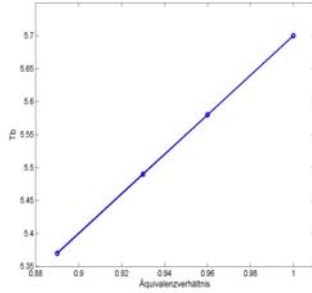


Abbildung 30: Lineare Annäherung von T_b in Abhängigkeit von dem Äquivalenzverhältnis ϕ . $T_b = 3\phi + 2.7$

wobei Y die CH_4 (bzw. CO)-Konzentration vor (bzw. hinter) der Flamme darstellt. $H(x^1)$ bezeichnet die Heavyside Funktion der normalen Koordinate zur Flammenfläche, welche den Wert Eins (bzw. Null) hinter (bzw. vor) der Flamme beträgt. Dadurch wird die Randbedingung für die CO -Konzentration implizit vorgegeben. Diese Vorgehensweise ist zulässig, da die molare CO -Konzentration hinter der Flamme identisch der molaren Methan-Konzentration vor der Flamme ist. Der Arrhenius-Term der CO -Oxidation wird durch den Heavyside-Term $H(x^1)$ lediglich hinter der Flamme eingeschaltet.

Die Konzentrationen im ganzen Rechengebiet berechnen sich durch Anwendung der entsprechenden Heavyside-Terme:

$$Y_{CH_4} = H(-x^1) Y \quad (116)$$

$$Y_{CO} = H(x^1) Y. \quad (117)$$

In der inhomogenen Flammengeschwindigkeitsbeziehung tritt die Sauerstoff-Konzentration auf der Flammenfläche auf. Sie wird aus Y_{CH_4} hergeleitet. Das Brenngasgemisch besteht aus Methan und Luft. Die Luft-Konzentration beträgt $Y_L = 1 - Y_{CH_4}$. Die trockene Luft besteht zu ca. 21% aus Sauerstoff, daraus ergibt sich im unverbrannten Bereich: $Y_{O_2} = 0.21Y_L = 0.21(1 - Y_{CH_4})$. Die Bestimmung des Sauerstoff-Anteils im Rauchgasgebiet ist für unsere Untersuchung nicht notwendig.

Die Temperatur im Brenngasgemisch beträgt T_f . Gemäß den Ergebnisse aus Kapitel 2.3 lässt sich der Sprung der Temperatur auf der Flamme $[T] = T_b - T_f = 3\phi + 1.7$ als eine lineare Funktion der Brennstoffkonzentration annähern (siehe Abbildung (30)). Die Temperatur auf der Flammenfläche ist dagegen nahezu konstant (Abbildung (31)) und es gilt $T^* \simeq 1.7T_f$, was mit der in ([Class2002]) angegebenen Beziehung $T^* = T_f + 0.2(T_b - T_f)$

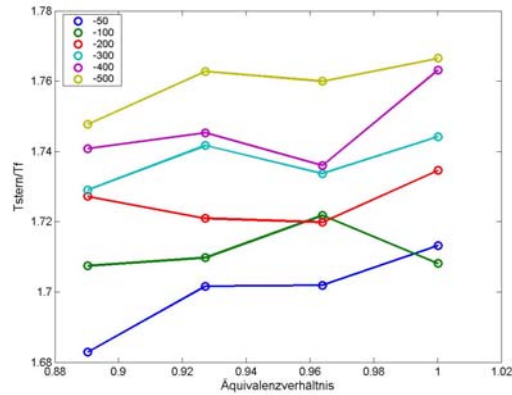


Abbildung 31: Verhältnis der Temperatur auf der Flammenfläche T^* und der Temperatur im Frischgas für mehrere Streckungswerte. Die maximale Abweichung ermöglicht die Annahme eines konstanten Werts für T^* .

überein stimmt. Hinter der Flamme findet bedingt durch die CO -Oxidation eine weitere Erhöhung der Temperatur bis zum Wert T_{b2} statt.

Im Gegensatz zum Ein-Schichten-Modell ist jetzt unerlässlich eine Transportgleichung zu lösen um den Temperaturverlauf im Rauchgasgebiet zu bestimmen. Die Wärmefreisetzung der CO -Oxidation wird mit einem Arrhenius-Quellterm beschrieben, welcher mittels einer Heavyside-Funktion nur im Rauchgas eingeschaltet wird. Der Temperatursprung $[T]$ auf der Flamme stellt eine größere Schwierigkeit dar. Da die Temperatur im unverbrannten Bereich konstant bleibt, genügt es die Temperaturgleichung lediglich im Rauchgasgebiet anzuwenden, wobei T_b als Randbedingung auf der Flammenfläche dient. Die Betrachtung einer sich zeitlich verändernden Geometrie des Rechenggebietes würde einen erheblichen numerischen Aufwand erfordern. Eine elegante Lösung besteht darin, im gesamten unverbrannten Bereich, diejenige Verbrennungstemperatur T_b zu berechnen die sich ergeben würde, wenn sich die Flamme an der entsprechenden Stelle befinden würde. Da gilt $T_b = f(Y_{CH_4,f})$, muss hierfür im unverbrannten Gebiet der Brennstofftransport berechnet werden. Dazu wird anstelle der Wärmeleitfähigkeit die Stoffdiffusivität als Transportkoeffizient benutzt. Als Randbedingung dient ebenfalls die Beziehung $T_b = f(Y_{CH_4,f})$. Die Flammentemperatur T_b wird als lineare Funktion der Brennstoffkonzentration bis zur Flammenfläche transportiert. Im Rauchgasgebiet wird wieder der normale Transportkoeffizient für die Temperatur angewendet. Das tatsächliche Temperaturfeld berechnet

sich schließlich aus

$$T = T_f + H(x^1) (T' - T_f) \quad (118)$$

mit der Transportgleichung für T' :

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial T'}{\partial t} + \rho \mathbf{v} \nabla T' &= \frac{1}{\text{Pe} (\text{Le}_{CH_4} + (1 - \text{Le}_{CH_4}) H(x^1))} \nabla (\lambda \nabla T') \\ &+ H(x^1) A_T (T_{b2} - T') Y \exp\left(\frac{-T_a}{T'}\right), \end{aligned} \quad (119)$$

und auf dem Rand

$$T'_f = T_b (Y_{CH_4, f}). \quad (120)$$

Die konservative Formulierung für den Transport der Temperatur entartet zur trivialen Beziehung aufgrund des idealen Gasgesetzes $\rho T = \text{const.}$. Deswegen wird die Temperaturgleichung in nicht-konservativer Form ausgedrückt.

Die Dichte hängt gemäß Gleichung (22) direkt von der Temperatur ab. Im Gegensatz zur ursprünglichen Darrieus-Landau Formulierung ist die Dichte im Rauchgas nicht konstant, sondern aufgrund der Wärmefreisetzung der CO -Oxidation indirekt durch die Transport-Gleichung für die Temperatur bestimmt.

Als Transport-Gleichungen für Masse und Impuls werden die Navier-Stokes-Gleichungen des hydrodynamischen Modells angewendet. In der Darrieus-Landau Formulierung werden die Navier-Stokes Gleichungen in zwei verschiedenen Gebieten gelöst, mit den Dichten ρ_f und ρ_b im Brenn- und Rauchgas. Die zwei getrennten Lösungen werden durch die Sprungbedingungen auf die Flammenfläche gekoppelt. Wegen den dadurch entstehenden bewegten Geometrien der Gebiete ist die numerische Formulierung numerisch aufwendig. Hinzu kommt, dass jetzt eine variable Dichte im Rauchgas angenommen wird. Es wird eine sogenannte Einfeld-Formulierung der Navier-Stokes-Gleichungen, bei der alle Variablen im ganzen Gebiet definiert sind, bevorzugt. Es werden die Navier-Stokes-Gleichungen für variable Dichte auf dem ganzen Rechengebiet gelöst, wobei die Dichte durch die Beziehung (22) vorgegeben ist. Die Viskosität ist zunächst mit

$$\mu = \mu_f + [\mu] H(x^1) \quad (121)$$

angenähert, mit dem Viskositätssprung $[\mu] = \mu_b - \mu_f$. Diese Beziehung wird unten modifiziert, um die Sprungbedingungen zu erfüllen.

Die angewendeten dimensionslosen Kontinuität- und Impulsgleichungen in zwei Raumkoordinaten für kartesische ($\alpha = 0$) oder zylindrische ($\alpha = 1$)

Koordinaten lauten

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{r^\alpha} \frac{\partial (r^\alpha \rho v_r)}{\partial r} + \frac{\partial (\rho v_z)}{\partial z} = 0, \quad (122)$$

$$\frac{\partial \rho v_r}{\partial t} + \frac{\partial P}{\partial r} + \frac{1}{r^\alpha} \frac{\partial (r^\alpha \rho v_r^2)}{\partial r} + \frac{\partial (\rho v_r v_z)}{\partial z} \quad (123)$$

$$+ \left(\frac{1}{r^\alpha} \frac{\partial}{\partial r} (r^\alpha \sigma_{rr}) - \frac{\alpha}{r} \sigma_{\theta\theta} + \frac{\partial \sigma_{rz}}{\partial z} \right) = 0, \quad (124)$$

$$\frac{\partial \rho v_z}{\partial t} + \frac{\partial P}{\partial z} + \frac{1}{r^\alpha} \frac{\partial (r^\alpha \rho v_r v_z)}{\partial r} + \frac{\partial \rho v_z^2}{\partial z} \quad (125)$$

$$+ \left(\frac{1}{r^\alpha} \frac{\partial}{\partial r} (r^\alpha \sigma_{rz}) + \frac{\partial \sigma_{zz}}{\partial z} \right) = 0, \quad (126)$$

mit der radialen und axialen Richtung r und z , und den Spannungstensor-komponenten

$$\sigma_{rr} = -\mu \left[2 \frac{\partial v_r}{\partial r} - \frac{2}{3} \left(\frac{1}{r^\alpha} \frac{\partial}{\partial r} (r^\alpha v_r) + \frac{\partial v_z}{\partial z} \right) \right], \quad (127)$$

$$\sigma_{\theta\theta} = -\mu \left[2\alpha \frac{v_r}{r} - \frac{2}{3} \left(\frac{1}{r^\alpha} \frac{\partial}{\partial r} (r^\alpha v_r) + \frac{\partial v_z}{\partial z} \right) \right], \quad (128)$$

$$\sigma_{zz} = -\mu \left[2 \frac{\partial v_z}{\partial z} - \frac{2}{3} \left(\frac{1}{r^\alpha} \frac{\partial}{\partial r} (r^\alpha v_r) + \frac{\partial v_z}{\partial z} \right) \right], \quad (129)$$

$$\sigma_{rz} = -\mu \left[\frac{\partial v_r}{\partial z} + \frac{\partial v_z}{\partial r} \right]. \quad (130)$$

3.2 Erfüllung der Sprungbedingungen

Es wird jetzt erläutert, wie die Sprungbedingungen für den Massen- und Impulsstrom (68), (69) und (70) sich in den Navier-Stokes Gleichungen implementieren lassen. Die Sprungbedingung für den Massenstrom (68) ist sehr günstig in Bezug auf numerische Eigenschaften. Im Fall eines unstetigen Massenstroms auf der Flammenfläche wäre eine so genannte virtuelle Oberflächenmasse mit der Oberfläche verknüpft. Im Verlauf einer Rechnung müsste der Strömung Masse entzogen oder hinzugefügt werden, so dass die globale Massenerhaltung nur unzureichend erfüllt wird. Die Bedingung eines stetigen Massenstroms wird bei einer Einfeld-Fomulierung der Navier-Stokes Gleichungen implizit erfüllt. Ein Sprung des Massenstroms müsste dagegen durch Quellterme in der Kontinuitätsgleichung implementiert werden.

Die Umsetzung der Impuls-Sprungbedingungen ist nicht so offensichtlich. Der Sprung des Impulses über die Flamme hinweg ist der Krümmung der

Flamme proportional. Beziehung (69) weist eine nahe Verwandtschaft mit der entsprechenden Beziehung für die Impulsbilanz einer Grenzfläche zwischen zwei unmischbaren Flüssigkeiten

$$\left[p - \frac{\text{Pr}}{\text{Pe}} \rho \kappa \nabla_n v_n \right] = 2c\sigma_s, \quad (131)$$

mit der Krümmung c und der Oberflächenspannung der Grenzfläche σ_s . Üblicherweise wird dieser Sprung mit einem Quellterm $c\sigma_s\delta(x^1)$ in der Impuls-gleichung modelliert, mit der Dirac-delta-Funktion vom Abstand zur Grenzfläche $\delta(x^1)$ ([Sussman1994], [Sethian2003], [Zhang1998]). In unserem Fall kommt der Sprung des Impulses aus zusätzlichen viskosen Effekte auf der Flammenfläche. Diese Überlegung legt es nahe, diesen viskosen Effekt direkt durch geeignete Wahl der Viskosität selbst zu modellieren. Das Viskositätsfeld darf dazu im Rauchgas- und Brenngasgebiet modifiziert werden. Die Modifikation erfolgt ausschließlich auf der Flammenfläche mittels einer Funktion $J(x^1)$ (siehe Abbildung (32)), deren Effekt einen Sprung des Impulses proportional zur Krümmung bei der Lösung der Navier-Stokes Gleichung darstellt. Der Ausdruck der Viskosität lautet jetzt

$$\mu = \mu_f + [\mu] H(x^1) + \mu^* J(x^1) \quad (132)$$

mit $J(x^1) = H^2(x^1) + H^2(-x^1) - 1$ und der Heavyside Funktion H . Der analytische Zusammenhang zwischen μ^* und cmI_σ muss noch bestimmt werden, um einen quantitativen Wert für μ herzuleiten. Es wird die qualitative Annahme $\mu^* = \mu_f$ getroffen.

Die Sprungbedingung (70), welche im allgemeinen einen unstetigen tangentialen Impulsstrom liefert, wird mit diesem Ansatz ebenfalls implizit erfüllt.

3.3 Geometrie und Randbedingungen

Im Rahmen des Teilprojekts A5 wird ein Experiment durchgeführt und soll mit dem hydrodynamischen Modell simuliert werden. Damit sind die geometrischen Daten, Randbedingungen und Stoffeigenschaften der Simulation durch die experimentellen Einstellungen vorgegeben.

Im Deutschen Zentrum für Luft- und Raumfahrt (DLR) in Stuttgart wird als Untersuchungsobjekt eine Methan-Unterdruckvormischflamme definiert ([Ax2006]). Ein zylindrischer Bunsenbrenner mit einem Durchmesser von 40mm ist in einer Unterdruckbrennkammer eingebaut (Abbildung (33)), und zeigt eine stabil brennende Bunsenflamme. Die Unterdruckbedingungen bewirken eine Vergrößerung der Flammenstruktur. Dies ist insbeson-

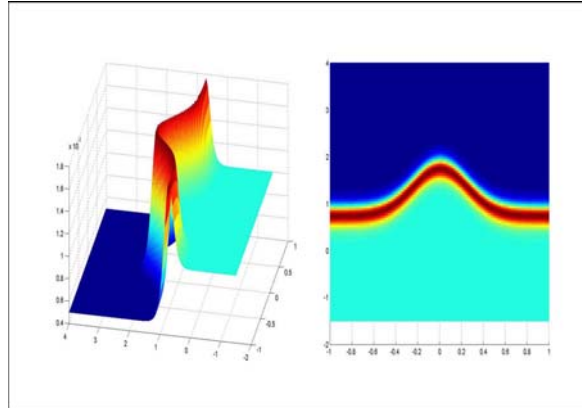


Abbildung 32: Darstellung des Viskositätsfelds. Die Viskosität beträgt einen höheren Wert im Rauchgas als im Brenngasgemisch. Ein auf der Flammenfläche wirksamer zusätzlicher Beitrag bewirkt einen krümmungsproportionalen Sprung des Impulsflusses.



Abbildung 33: Unterdruckbrennkammer des im DLR durchgeführten Experiments. Der Unterdruck bewirkt eine Vergrößerung der Dicke der Flammenstruktur und die Druckabsenkung ermöglicht eine Anpassung der Zeitskalen für Chemie und Diffusion.

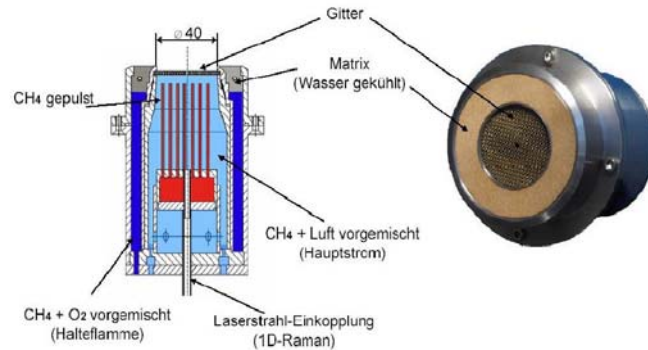


Abbildung 34: Aufbau des Bunsenbrenners. Die Variation der Gemischzusammensetzung erfolgt durch Methan-Zufuhr durch eine Vielzahl von Röhrrchen. Die gleichförmige Anordnung der Röhrrchen sowie ein Gitter bewirken eine horizontal homogene Mischung. Die eindimensionalen optischen Messungen erfolgen an der Flammenspitze.

dere notwendig, um Messungen innerhalb der Flammenstruktur mit hinreichender räumlicher Auflösung zu ermöglichen. Zusätzlich können dadurch die Zeitskalen zwischen der Chemie und den Diffusionsprozessen angepasst werden. Im Experiment werden Parameterbereiche identifiziert, für welche die Flamme empfindlich auf aufgeprägte Störungen reagiert. Durch OH^* -Chemolumineszenz und 2D-LIF sowie 1D-Raman-Spektroskopie werden die Hauptspezies, ausgewählte Radikale und die Temperatur phasengekoppelt gemessen. Die Messung erfolgt entlang einer 7mm langen Strecke mit 14 Messvolumina, welche normal zur Flammenspitze gerichtet ist (Abbildung (35)).

Der Brenner ist axialsymmetrisch. Die Rechnungen können somit mit der zylindersymmetrischen Gleichungsformulierung auf einem zweidimensionalen Rechengbiet durchgeführt werden. Abbildung (36) zeigt das räumliche Gebiet, welches in der Simulation berechnet wird.

Die Randbedingungen der Simulation sind durch das Experiment vorgegeben und lassen sich aus den Einstellungen des Experiments ableiten. Typische Einstellungen und sich daraus ergebende Randbedingungen sind in Tabelle (3) angegeben. Abbildung (34) zeigt eine Schemazeichnung des Brenners mit der Führung des Brenngases bestehend aus Methan und Luft, der durch das Gitter als homogene kalte Mischung in die Brennkammer strömt. Die zeitliche Störung der Zusammensetzung erfolgt durch gepulste Methan-Zufuhr durch eine Vielzahl von Röhrrchen die räumlich unterhalb des Gitters

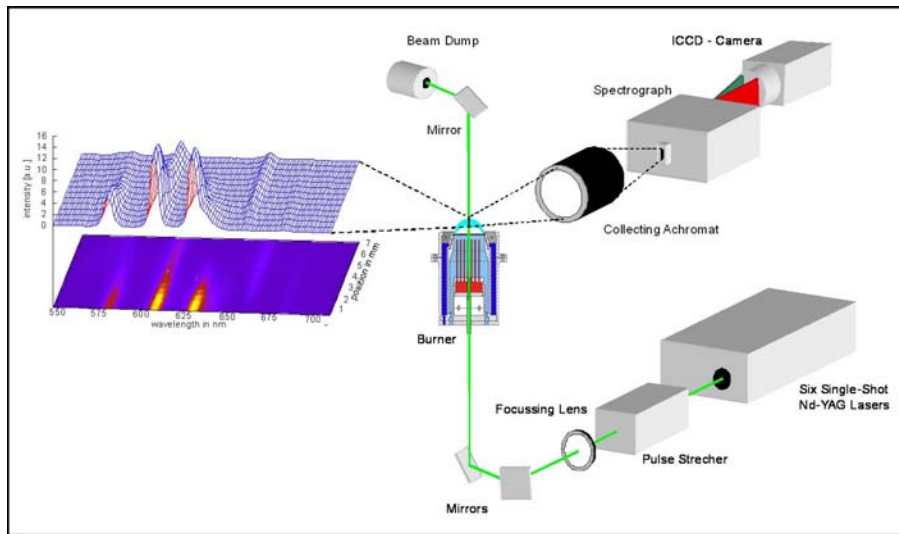


Abbildung 35: Laseroptischer Messaufbau zur gleichzeitigen Raman-spektroskopischen Messung der Temperatur und der Hauptspezies-Konzentrationen (CH_4 , O_2 , N_2 , CO_2 , H_2O , H_2 und CO) auf 14 Positionen einer 7mm langen Messstrecke normal zur Flammenspitze.

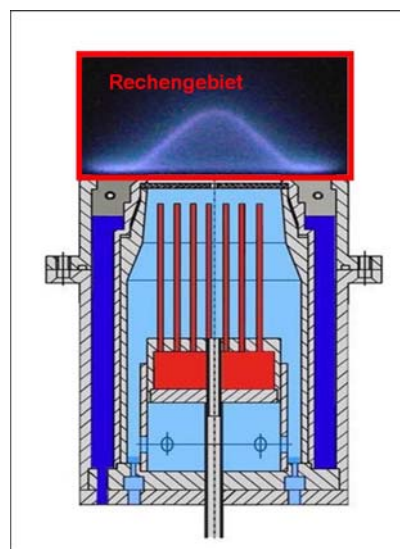


Abbildung 36: Darstellung des Brenners und der Flamme durch eine Chemolumineszenzfotographie und das sich daraus ergebende räumliche Rechengebiet.

angeordnet sind. Durch diffusiven Transport und durch das Gitter gegen Flammenrückschlag ergibt sich bis zum Brenneraustritt eine horizontal homogene Gemischzusammensetzung. Aufgrund der geringen angesetzten Variation der Gemischzusammensetzung bleiben die Strömungsgeschwindigkeit und der Massenstrom näherungsweise konstant. Der gepulste Brennstoff hat Raumtemperatur.

Da die Konzentrationsmessungen an einer festen Messstelle durchzuführen sind, muss die Flamme an dieser Stelle stabilisiert werden. Dabei soll die Flamme möglichst wenig in Vergleich zu einer freibrennenden Flamme gestört werden.

Es gibt im Wesentlichen zwei Stabilisierungsmechanismen. Eine stabile Flammenposition ergibt sich, wenn die Strömungsgeschwindigkeit normal zur Flammenfläche sich exakt mit der Flammengeschwindigkeit ausgleicht. Zum Einen kann sich die Flammengeschwindigkeit anpassen, und andererseits kann sich die Geometrie der Flammenfläche entsprechend ausrichten. Die Flammengeschwindigkeit passt sich an wenn sich die Flamme dem Brenner annähert. Der resultierende Wärmeverlust verursacht eine Verzögerung der Flammengeschwindigkeit und ein Gleichgewicht zwischen Strömungs- und Flammengeschwindigkeit. Dieses aus Wärmeverlusten resultierende Geschwindigkeitsgleichgewicht tritt nur auf, wenn die Strömungsgeschwindigkeit kleiner als die adiabate Flammengeschwindigkeit ist. Andernfalls hebt die Flamme vom Brenner ab. Ist die Strömungsgeschwindigkeit nicht normal zur Flammenfläche gerichtet, ist die Normalkomponente der Strömungsgeschwindigkeit kleiner als der Betrag. Durch geeignete Anstellung der Flamme gegenüber der Strömungsrichtung kann eine stabile Flamme realisiert werden. Dies ist der Fall bei der Kegelflamme des Bunsenbrenners. Stabile Bedingungen liegen allerdings nur vor, wenn der Fußpunkt der Flamme selbst stabil in seiner Lage ist.

Im Experiment wird ein günstiges Stabilisierungsverfahren durch die Anwesenheit einer sehr stabil brennenden Halteflamme, welche konzentrisch um die Hauptflamme herum angeordnet ist, erzielt. Die Halteflamme wird mit einem konstanten Methan-Sauerstoff-Gemisch betrieben und brennt an einer festen Stelle ohne Positionsverschiebung. Die Halteflamme zündet die Hauptflamme, deren Rand somit an einer festen Stelle stabilisiert wird. Dieses Verfahren verhindert das Abheben der Flamme und ermöglicht einen stabilen Betrieb der Hauptflamme für Strömungsgeschwindigkeit oberhalb der adiabaten Flammengeschwindigkeit. Kleinere Geschwindigkeiten resultieren in Flammenrückschlag. Diese Flammenstabilisierung liefert eine Randbedingung für die Flammenposition in der Simulation, deren numerische Umsetzung im nächsten Kapitel erläutert wird.

Zusammenfassend wurde in diesem Kapitel das vollständige hydrodynamische Modell eingeführt sowie die zu betrachtende Flamme vorgestellt. Im nächsten Kapitel erfolgt die numerische Umsetzung.

4 Numerik

In diesem Kapitel wird die numerische Umsetzung des in den vorherigen Kapiteln beschriebenen hydrodynamischen Modells beschrieben. Es werden die angesetzte numerische Werkzeuge und Methoden zur Simulation der im Kapitel 3.3 beschriebenen Bunsenflamme definiert. Dazu gehört die Berechnung der Strömungs- und Transportgrößen (Strömungsgeschwindigkeit, Druck, Temperatur und Spezies-Konzentrationen), sowie die Verfolgung der Bewegung der Flammenfläche. Schließlich erfolgt die Validierung der numerischen Methoden und ihre Kopplung in einem eigens hierfür geschriebenen Programm.

4.1 Allgemein

Ziel der numerischen Umsetzung ist es zu demonstrieren wie das Modell numerisch umgesetzt werden kann. Es soll ein einfaches stabiles Programmpaket geliefert werden, mit dem die Wahl der numerischen Methoden validiert und erste Rechnungen durchgeführt werden können.

Es wird aufgrund seiner hochentwickelten Programmiersprache die Entwicklungsumgebung MATLAB gewählt. Die von MATLAB angebotene vielfältige Visualisierungs- und Postprocessing-Werkzeuge stellen einen zusätzlichen Vorteil für eine schnelle Entwicklung und Auswertung der Ergebnisse dar. Der Code ist mittels eines Finite-Differenzen-Verfahrens hoher Genauigkeit auf einem regelmäßigen strukturierten Gitter programmiert. Das Finite-Differenzen-Verfahren basiert auf der punktweisen Approximation der gesuchten Lösung und der Substitution von Ableitungen durch Differenzenquotienten.

Der Code wird zur Simulation des Bunsenbrenners verwendet. Benutzt wird ein rechteckiges Rechengebiet, wobei der Brennstoff von unten nach oben strömt. Dementsprechend werden in den nächsten Abschnitten der untere Rand mit Eintritt, der obere mit Austritt und die seitlichen Ränder mit Wand bezeichnet.

4.2 Lösung der Navier-Stokes Gleichungen mit einem modifizierten Fractional-Step-Verfahren

Im einer reaktiven Strömung weist die Dichte zeitliche und räumliche Variationen auf. Im Verbrennungsfall nimmt sie auf der Flammenfläche schlagartig ab, was zu einer Expansion und Beschleunigung des Gases führt. Wie im Kapitel 2.1.2 erläutert, wird hier das Dichtefeld durch die Temperaturverteilung bestimmt. Es bestehen keine Wechselwirkungen zwischen Druck

und Dichte berücksichtigt, welche zu akustischen Wellen führen könnten. Die Entkopplung zwischen Druck und Dichte erlaubt es, einen inkompressiblen Strömungslöser für die Navier-Stokes-Gleichungen anzuwenden. Hier wird ein modifiziertes Fractional-Step-Verfahren für variable Dichte entwickelt.

4.2.1 Prinzip des Fractional-step Verfahrens

In diesem Abschnitt wird das Prinzip des Fractional-Step-Verfahrens, eingeführt von Chorin ([Chorin1968]) für die Lösung der Navier-Stokes-Gleichungen für zeitabhängige, inkompressible und viskose Strömungen, vorgestellt.

Für eine inkompressible Strömung stellt das Fehlen einer expliziten Zeitableitung in der Kontinuitätsgleichung die wesentliche Schwierigkeit bei der Bestimmung einer zeitabhängigen Lösung dar. Die Massenerhaltungsbedingung muss durch eine implizite Kopplung zwischen der Kontinuitätsgleichung und dem Druck in den Impulsgleichungen erzielt werden.

Das Fractional-Step-Verfahren löst die Navier-Stokes-Gleichungen in der Zeit, indem eine temporäre Strömungsgeschwindigkeit bei eingefrorenem Druckfeld für jeden Zeitschritt hergeleitet wird. Diese temporäre Strömungsgeschwindigkeit erfüllt somit nicht die Kontinuitätsbedingung. Eine Poisson-Gleichung mit der Divergenz des temporären Geschwindigkeitsfelds als Quellterm wird dann gelöst, um eine Druck-Korrektur zu bestimmen. Aus temporärer Geschwindigkeit und Druck-Korrektur berechnet sich das gesuchte divergenzfreie Geschwindigkeitsfeld. Diese Vorgehensweise wird jetzt detailliert erläutert.

Gemäß Gleichungen (123)-(125) können die Impulsgleichungen wie folgt

$$\frac{\partial \rho \mathbf{v}}{\partial t} + \nabla p = \mathbf{R}, \quad (133)$$

dargestellt werden, wobei die rechte Seite \mathbf{R} konvektive und diffusive Terme zusammenfasst:

$$\mathbf{R} = \begin{cases} - \left(\frac{1}{r^\alpha} \frac{\partial}{\partial r} (r^\alpha \sigma_{rr}) - \frac{\alpha}{r} \sigma_{\theta\theta} + \frac{\partial \sigma_{rz}}{\partial z} \right) - \left(\frac{\partial \rho v_r^2}{\partial r} + \frac{\partial \rho v_r v_z}{\partial z} \right) \\ - \left(\frac{1}{r^\alpha} \frac{\partial}{\partial r} (r^\alpha \sigma_{rz}) + \frac{\partial \sigma_{zz}}{\partial z} \right) - \left(\frac{\partial \rho v_r v_z}{\partial r} + \frac{\partial \rho v_z^2}{\partial z} \right) \end{cases}. \quad (134)$$

Wird in der diskretisierten Form der Gleichung (133)

$$\frac{(\rho \mathbf{v})^{n+1} - (\rho \mathbf{v})^n}{\Delta t} = -\nabla p^{n+1} + \mathbf{R}^n \quad (135)$$

der Druckterm zu Null gesetzt, ergibt sich eine Gleichung für eine temporäre Geschwindigkeit \mathbf{v}_{temp}

$$\rho \mathbf{v}_{temp} = (\rho \mathbf{v})^n + \Delta t \mathbf{R}^n, \quad (136)$$

wobei zu Veranschaulichung das Euler-Vorwärts-Verfahren für die zeitliche Diskretisierung angewandt ist.

Es kann dann eine neue Beziehung hergeleitet werden:

$$(\rho \mathbf{v})^{n+1} = \rho \mathbf{v}_{temp} - \Delta t \nabla p^{n+1}. \quad (137)$$

Nach Anwendung des Divergenzoperators ergibt sich eine Poisson Gleichung für den Druck:

$$\nabla^2 p^{n+1} = \frac{1}{\Delta t} (\nabla \cdot (\rho \mathbf{v}_{temp}) - \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}^{n+1})), \quad (138)$$

wobei gemäß der Kontinuitätsgleichung $\nabla \cdot (\rho \mathbf{v}^{n+1}) = 0$. Schließlich lautet die Druckgleichung:

$$\nabla^2 p^{n+1} = \frac{1}{\Delta t} \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}_{temp}). \quad (139)$$

Die Lösung der Poisson Gleichung (139) liefert den Druck, der dazu verwendet wird, das temporäre Geschwindigkeitsfeld divergenzfrei zu machen. Die Geschwindigkeit zum neuen Zeitpunkt lässt sich aus der Beziehung (137) herleiten. Dieses Verfahren weist den Vorteil auf, die Kontinuitätsbedingung numerisch exakt zu erfüllen.

4.2.2 Erweiterung für gegebene Dichteänderungen

Wird die Dichte nicht mehr als konstant angenommen, sondern zu jedem Zeitpunkt durch die Temperaturverteilung bestimmt, kann das Fractional-step-Verfahren für vorgegebene Dichteänderungen erweitert werden. Die Gleichungen für die temporäre Geschwindigkeit und den Druck können unverändert übernommen werden aus (136) und (138).

Die Kontinuitätsgleichung liefert jetzt

$$\nabla \cdot (\rho \mathbf{v})^{n+1} = -\frac{\partial \rho^{n+1}}{\partial t}. \quad (140)$$

Die zeitlichen Ableitung der Dichte $\left(\frac{\partial \rho}{\partial t}\right)^{n+1}$ tritt dann in der Druckgleichung auf:

$$\nabla^2 p^{n+1} = \frac{1}{\Delta t} \left[\nabla \cdot (\rho \mathbf{v}_{temp}) + \left(\frac{\partial \rho}{\partial t}\right)^{n+1} \right]. \quad (141)$$

Hier ist zu beachten, dass die zeitliche Ableitung der Dichte unabhängig vom Druck und am betrachteten Punkt bekannt ist. Der spezielle Fall einer variablen Dichte erfordert eine konservative Formulierung der Navier-Stokes Gleichungen.

Die neue Druckgleichung kann wie bei dem normalen Verfahren durch die Anwendung eines Poisson-Solvers gelöst werden. Die Geschwindigkeit zum neuen Zeitpunkt ist analog zur Beziehung (137) hergeleitet. Anstelle des Euler-Verfahrens können andere explizite Verfahren wie das Runge-Kutta-Verfahren gewählt werden.

4.2.3 Lösung der Poisson-Gleichung

Das Fractional-Step-Verfahren erfordert die numerische Lösung einer Poisson-Gleichung. Da kein Poisson-Gleichungslöser mit der geforderten Ordnung des Finite-Differenzen-Verfahrens und den gesuchten implementierten Randbedingungen gefunden wurde, wird entschieden, den im kommerziellen Softwarepaket FEMLAB vorhandenen Differentialgleichungslöser zu benutzen. Es ergibt sich der Vorteil, dass FEMLAB auf der MATLAB-Entwicklungsumgebung basiert und sich der Differentialgleichungslöser als MATLAB-Funktion aufrufen lässt. FEMLAB beruht auf der Finite-Elemente-Methode. Dabei ist von Nachteil, dass der Austausch-Prozess der Daten zwischen dem strukturierten Finite-Differenzen-Gitter und dem unstrukturierten FEMLAB-Gitter erfolgt. Dies ist zeitaufwendig und verringert die numerische Genauigkeit. FEMLAB erlaubt es allerdings, ein strukturiertes Gitter zu benutzen, so dass zumindest die Interpolation für die Eckpunkte der Finite-Elemente entfällt.

Die zylindersymmetrische Druckgleichung

$$\nabla^2 p = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial p}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 p}{\partial z^2}. \quad (142)$$

kann nicht mit dem schnellen Poisson-Gleichungslöser aus FEMLAB gelöst werden. Deshalb wird der allgemeine Differentialgleichungslöser benutzt, was einen größeren Rechenaufwand darstellt. Der Code sollte künftig in einer schnelleren Programmiersprache umgeschrieben werden.

Der Druck ist mit Lagrange-Elemente dritter Ordnung diskretisiert. Die ungerade Ordnung verhindert räumliche Druckoszillationen. Die Ordnung wurde an das unten beschriebene WENO-Verfahren angepasst. Als mögliche Randbedingungen sind die gewöhnliche Dirichlet- und Neumann-Randbedingungen für den Druck verfügbar. Die Wahl der Druckrandbedingungen in Bezug auf die Strömungsrandbedingungen ist im nächsten Abschnitt beschrieben.

4.2.4 Randbedingungen

Die gängigsten Randbedingungen für einen Strömungslöser sind die Dirichlet-, Neumann und Inflow/Outflow-Randbedingungen. Die mathematische For-

umformulierung dieser Randbedingungen lautet

$$\begin{aligned} \text{Dirichlet:} & \quad \mathbf{v} = \mathbf{v}|_{Rand}, \\ \text{Neumann:} & \quad \frac{\partial(\mathbf{v} \cdot \mathbf{n})}{\partial n} = \frac{\partial(\mathbf{v} \cdot \mathbf{n})}{\partial n} \Big|_{Rand}, \\ \text{Inflow/Outflow:} & \quad P = P|_{Rand}, \end{aligned}$$

mit der Raumkoordinate normal zum Wand n .

Die Randbedingungen für die Geschwindigkeit werden für die Lösung der Druckgleichung als Druckrandbedingungen umformuliert.

- Die Inflow/Outflow-Randbedingung für die Geschwindigkeit lässt sich trivialerweise in Dirichlet-Randbedingungen für den Druck umsetzen.
- Durch Beziehung (133) kann die Dirichlet-Randbedingung für die Geschwindigkeitskomponente normal zum Rand $v_n = v_n|_{Rand}$ durch eine geschickte Wahl der Anfangsbedingungen als Druck-Neumann-Randbedingung ausgedrückt werden:

$$\left\{ \begin{array}{l} (\rho v_n)|_{t=0} = (\rho v_n)|_{Rand} \\ \frac{\partial(\rho v_n)}{\partial t} = 0 \end{array} \right\} \implies v_n = v_n|_{Rand}, \quad (143)$$

wobei

$$\frac{\partial \rho v_n}{\partial t} = -\frac{\partial p}{\partial n} + R_n. \quad (144)$$

Die Geschwindigkeitskomponente tangential zur Wand kann beliebig gewählt werden und wird bei jeder Zeititeration reinitialisiert.

- Die Neumann-Randbedingung für die Geschwindigkeit wird in dieser Arbeit nicht angewendet.

Für kleine Reynolds-Zahlen können Instabilitäten am Rand auftreten. Diese Instabilitäten sind von den viskosen Terme verursacht und werden durch die Anwendung einer symmetrischen Extrapolation für die Berechnung der viskosen Terme am Rand vermieden. Die Wahl zwischen Dirichlet- oder Inflow/Outflow-Randbedingungen der Geschwindigkeit ergibt sich aus der Geometrie und den Strömungseinstellungen des Experiments.

4.3 Level-Set Methode

4.3.1 Problematik

Das im Kapitel 2.1.1 eingeführte hydrodynamische Modell fasst die Flamme als eine Grenzfläche (Grenzkurve) auf, welche sich normal zu sich selbst mit

einer gemäß Gleichung (83) gegebenen Geschwindigkeit relativ zum Fluid bewegt. Eine numerische Methode zur Verfolgung einer bewegten Fläche (Kurve) ist notwendig, um die zeitliche Entwicklung der Position der Flammenfläche zu bestimmen. Anforderungen an die gewünschte Methode ergeben sich aus der Komplexität der Flammengeschwindigkeitsbeziehung, und möglichen topologischen Änderungen der Flamme, die durch Verschmelzen, Löschung oder Selbstzündung vorkommen können. Weiterhin sind günstige numerische Eigenschaften (Rechenaufwand, Stabilität und Genauigkeit) erwünscht. Es können drei verschiedene Klassen von Verfahren zur Verfolgung einer bewegten Oberfläche unterschieden werden:

- Das "Marker Particle"-Verfahren basiert auf einer Lagrange Approximation. Die Front wird durch Partikel dargestellt. Es wird angenommen, dass die Front durch benachbarte Partikel verläuft, wobei keine expliziten Nachbarschaftsverhältnisse berücksichtigt werden. Diese numerischen Schemen ergeben eine hohe Genauigkeit für kleinskalige Bewegungen der Front. Sie werden jedoch instabil für komplexe Geschwindigkeitsbeziehungen und sind wegen der lokalen Darstellung der Front nur begrenzt einsetzbar, wenn topologische Änderungen der Front auftreten.
- Bei dem "Volume-of-Fluid"-Verfahren wird auf einem festen strukturierten Gitter jeder Gitterzelle einer "volume-fraction"-Wert zugewiesen, welcher den Anteil einer Phase (z.B. Rauchgas) innerhalb der Zelle charakterisiert. Der Wert Eins bedeutet somit die reine Phase (reines Rauchgas), und der Wert Null bedeutet die andere Phase (reines Brenngas). Die Front verläuft durch Zellen mit Werten zwischen Null und Eins. Das Verfahren basiert auf einer Euler-Darstellung und vermeidet die Instabilitätsprobleme und topologische Beschränkungen des "Marker Particle"-Verfahrens. Diese Methode benötigt allerdings eine hohe Raumdiskretisierung, um eine zufriedenstellende Genauigkeit zu erzielen. Die Behandlung einer komplexen Geschwindigkeitsbeziehungen mit den darin enthaltenen intrinsischen geometrischen Eigenschaften der Front ist daher problematisch.
- Für unseren Fall weist das dritte Verfahren, die Level-Set-Methode ([Sethian1996]), dagegen die günstigsten Eigenschaften auf. Diese und das Prinzip des Verfahrens sowie seine praktische Anwendungen werden in den folgenden Abschnitten erläutert.

4.3.2 Prinzip

Es wird ein dreidimensionaler (zweidimensionaler) Fall betrachtet, bei dem zwei unterschiedliche Phasen (z.B. Rauchgas und Brenngasgemisch) durch eine Oberfläche (Kurve) scharf voneinander getrennt sind. Es gibt keine Stelle, wo sich die Phasen mischen können, so dass eine geschlossene Grenzfläche (-Kurve) entsteht (gegebenenfalls schließt sich die Grenzfläche (-Kurve) außerhalb des Rechengebiets). Die Grenzfläche (-Kurve) bewege sich normal zu sich selbst mit der Geschwindigkeit F . Hierbei sei F eine Funktion der Zeit, der geometrischen Eigenschaften der Oberfläche (Kurve), und anderer physikalischen Größen. Die Grundidee der Levelset-Methode besteht darin, diese bewegte Oberfläche (Kurve) implizit als eine Isofläche einer räumlich höherdimensionalen Funktion ϕ darzustellen. Für gewöhnlich wird die Isofläche (Isolinie) $\phi = 0$ gewählt. Es ist ϕ durch die folgende Differentialgleichung bestimmt, die Level-Set-Gleichung:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + F |\nabla \phi| = 0, \quad (145)$$

wobei Anfangsbedingungen $\phi(x, t = 0)$ gegeben sind. Mehr Details über die Herleitung der Level-Set-Formulierung sind in ([Sethian1996]) zu finden.

Als Beispiel ist in Abbildung (37) eine Level-Set Funktion im zweidimensionalen Raum, welche sich mit einer beliebigen Ausbreitungsgeschwindigkeit fortbewegt, für zwei verschiedene Fälle dargestellt. Eine Kurve trennt die Gebiete beiderseits der Kurve und könnte eine Flamme repräsentieren. Sie wird implizit als die Isolinie $\phi = 0$ einer im zweidimensionalen Raum definierten Level-Set-Funktion ϕ dargestellt.

Die Level-Set-Formulierung weist verschiedene günstige Eigenschaften auf.

- Die Funktion $\phi(x, t)$ ist stetig und differenzierbar solange auch F stetig und differenzierbar ist.
- Diese Methode kann im Gegensatz zum "Marker Particle"-Verfahren, auf beliebige Topologien der Grenzfläche (Grenzkurve) angewendet werden.
- Es können geometrischen Eigenschaften wie der Normalenvektor \mathbf{n} oder die mittlere Krümmung c der Grenzfläche (Grenzkurve) unmittelbar aus der Level-Set-Funktion berechnet werden:

$$\mathbf{n} = \frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|}; \quad c = \nabla \cdot \frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|}. \quad (146)$$

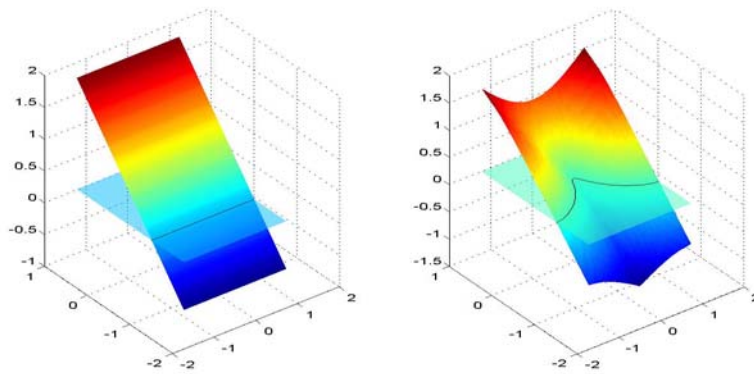


Abbildung 37: Veranschaulichung der Grundidee anhand einer Grenzkurve im zweidimensionalen Raum. Die Kurve trennt die Gebiete beiderseits der Kurve und könnte eine Flamme repräsentieren. Sie wird implizit als die Isolinie $\phi = 0$ einer im zweidimensionalen Raum definierten Level-Set-Funktion ϕ dargestellt. Die linke Abbildung zeigt eine geradlinige Grenzkurve; die rechte Abbildung eine kegelförmige Grenzkurve, wie sie eine Bunsenflamme darstellen könnte. Die Verallgemeinerung auf dem dreidimensionalen Raum ist uneingeschränkt möglich.

- Schließlich kann die Methode unverändert auf zwei- und dreidimensionale Probleme angewendet werden. Im Folgenden wird nur der zweidimensionale Fall betrachtet. Um die Anwendbarkeit der Methode auf dreidimensionale Fälle hervorzuheben wird stets die Begriffe "Grenzfläche" und "Flammenfläche" verwendet, auch wenn sie sich auf den zweidimensionalen Fall und somit eine Grenzkurve beziehen.

Eine erschwerende Eigenschaft der Level-Set-Methode ist das Fehlen eines Diffusionsterms. Dies erfordert einerseits eine spezielle Numerik und andererseits können dadurch scharfe Knicke der Isofläche (Isolinie) $\phi = 0$ entstehen, wenn sich die Topologie ändert, wie beim Herauslösen von Ballen oder bei der Verschmelzung mehrerer Grenzflächen (Grenzkurven). Die wesentliche Beschränkung der Level-Set-Methode ergibt sich aus der anfänglich getroffenen Annahme einer geschlossenen Grenzfläche. Diese Voraussetzung verhindert die Simulation sogenannter "edge-flames", bei denen Flammenlöschung auftritt und sich damit eine räumlich begrenzte Flammenfläche ergibt.

4.3.3 Reinitialisierung der Level-Set Funktion

In der Level-Set-Methode wird die Bewegung einer Grenzfläche durch eine im gesamten Rechengebiet gegebene Level-Set-Funktion beschrieben. Die zusätzliche Raumdimension erlaubt eine gewisse Freiheit in Bezug auf die gewählte Formulierung. Beachtet werden muss, dass die Geschwindigkeit der Grenzfläche nur auf der Flammenfläche definiert ist, da sie nur dort eine physikalische Bedeutung besitzt. Außerhalb der Grenzfläche wo $\phi \neq 0$ darf sich die Level-Set-Funktion prinzipiell beliebig dynamisch entwickeln. Eine zufriedenstellende numerische Genauigkeit in Bezug auf $\phi = 0$ wird allerdings nur erzielt, wenn Gradienten der Level-Set-Funktion begrenzt bleiben, d.h.

$$0 < c \leq |\nabla\phi| \leq C, \quad (147)$$

wobei c and C beliebige Konstanten darstellen. In Bezug auf die numerische Genauigkeit, insbesondere die Genauigkeit der Krümmung und des Normalenvektors der Flammenfront, ergeben sich besonders günstige Verhältnisse, wenn $\phi(x, t)$ so gewählt wird, dass ϕ die Distanz zur Grenzfläche misst. Man spricht von einer "signed distance"-Funktion und es gilt,

$$|\nabla\phi| = 1. \quad (148)$$

Während der Zeitintegration der Level-Set-Gleichung wird diese Bedingung häufig verletzt, d.h. ϕ wird zu steil oder zu flach. Da nur die Isofläche $\phi = 0$ eine physikalische Bedeutung besitzt, kann ϕ andernorts, d.h. für $\phi \neq 0$,

verändert werden, um diese Bedingung wieder herzustellen. Man spricht von einem Reinitialisierungsverfahren. Die Reinitialisierung erfolgt durch Lösung der partiellen Differentialgleichung

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + S(\phi) (|\nabla \phi| - 1) = 0, \quad (149)$$

wobei $S(\phi)$ den Signum von ϕ bezeichnet, mit

$$S(\phi) = \begin{cases} 1 & \phi > 0 \\ 0 & \text{für } \phi = 0 \\ -1 & \phi < 0 \end{cases}. \quad (150)$$

In der Praxis wird ein verschmierter Übergang zwischen ± 1 gewählt. Während des Iterationsprozesses breitet sich die Reinitialisierung ausgehend von der Grenzfläche in beiden Richtungen aus. Es sollte vermieden werden, die Reinitialisierung zu oft auszuführen, da sie einen kleinen numerischen Fehler der Position der Flammenfront verursacht, der als numerische Diffusion interpretiert werden kann

Der Rechenaufwand wird minimiert, indem die Reinitialisierung mit der Zeitintegration der Level-Set Funktion zusammengefasst wird:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + F |\nabla \phi| + \frac{1}{t_{reint}} S(\phi) (|\nabla \phi| - 1) = 0, \quad (151)$$

wobei t_{reint} so eingestellt wird, dass in unmittelbarer Umgebung um $\phi = 0$ die Eigenschaft $|\nabla \phi| = 1$ gut approximiert wird, ohne dass zu grosse numerische Diffusion oder gar numerische Instabilitäten auftreten.

4.3.4 Diskretisierung der Levelset Gleichung

Wie oben beschrieben ermöglicht die Levelset-Methode eine einfache Berechnung der geometrischen Eigenschaften der Grenzfläche. Der Normalenvektor \mathbf{n} ist z.B. durch $\mathbf{n} = \frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|}$ gegeben. Die mehrdeutige Lösung für die Normale an der Stelle scharfer Knicke im Level-Set-Feld fordert die Anwendung eines speziellen Schemas, eingeführt von Sethian und Strain ([Sethian1996]). Die Normale wird zunächst mit allen einseitigen Finite-Differenzen-Näherungen

in jegliche Richtungen berechnet

$$\begin{aligned}
\mathbf{n}_{ij}^* &= \frac{\phi_x, \phi_y}{(\phi_x^2 + \phi_y^2)^{1/2}} \\
&= \frac{(D_{ij}^{+x}, D_{ij}^{+y})}{\left[(D_{ij}^{+x})^2 + (D_{ij}^{+y})^2\right]^{1/2}} + \frac{(D_{ij}^{-x}, D_{ij}^{+y})}{\left[(D_{ij}^{-x})^2 + (D_{ij}^{+y})^2\right]^{1/2}} \\
&\quad + \frac{(D_{ij}^{+x}, D_{ij}^{-y})}{\left[(D_{ij}^{+x})^2 + (D_{ij}^{-y})^2\right]^{1/2}} + \frac{(D_{ij}^{-x}, D_{ij}^{-y})}{\left[(D_{ij}^{-x})^2 + (D_{ij}^{-y})^2\right]^{1/2}}, \quad (152)
\end{aligned}$$

und dann normiert, so dass $\mathbf{n}_{ij} = \mathbf{n}_{ij}^*/|\mathbf{n}_{ij}^*|$. Ist eine einseitige Näherung von $\nabla\phi$ gleich Null, wird dieser Term nicht berücksichtigt und die Wichtung der anderen Terme entsprechend angepasst. Hierin steht $D_{ij}^{\pm xy}$ für Finite-Differenzen-Näherungen der Ableitung in x bzw. y -Richtung, wobei das Vorzeichen einseitige Finite-Differenzen-Formeln in positiver bzw. negativer Koordinatenrichtung bezeichnet.

Die Berechnung der Krümmung erfolgt dann durch die Anwendung der Divergenz mittels zentraler Finite-Differenzen auf den so erhaltenen Normalenvektors.

In der Levelset-Gleichung selbst werden zwei Arten von Termen unterschieden:

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} + F' |\nabla\phi| = 0 \quad (153)$$

$$\text{mit } F' |\nabla\phi| = F |\nabla\phi| + \mathbf{V} \cdot \nabla\phi. \quad (154)$$

Erstens kann die Level-Set-Funktion passiv von einem Geschwindigkeitsfeld transportiert werden. Dieser konvektive Term $\mathbf{V} \cdot \nabla\phi$ wird mit einem upwind-Schema berechnet, wobei Stromaufliegende Werte in der Finite-Differenzen-Darstellung stärker als stromabliegende Werte gewichtet werden. Zweitens bewegt sich die Level-Set-Funktion mit der ihr eigenen Ausbreitungsgeschwindigkeit F . Der entsprechende Term $F |\nabla\phi|$ wird mit einem Schema, welches die Entropie-Bedingung erfüllt, berechnet. Es werden unphysikalische Oszillationen unterdrückt. Beispiele für solche Schemen erster oder zweiter Ordnung sind in ([Sethian1996]) zu finden. Zusammenfassend lautet der diskretisierte Ausdruck der Level-Set-Gleichung:

$$\phi_{ij}^{n+1} = \phi_{ij}^n + \Delta t \left[\begin{array}{c} - \left[\max(F_{0ij}, 0) \nabla^+ + \min(F_{0ij}, 0) \nabla^- \right] \\ - \left[\begin{array}{c} \max(u_{ij}^n, 0) D_{ij}^{-x} + \min(u_{ij}^n, 0) D_{ij}^{+x} \\ + \max(u_{ij}^n, 0) D_{ij}^{-y} + \min(u_{ij}^n, 0) D_{ij}^{+y} \end{array} \right] \end{array} \right], \quad (155)$$

wobei ∇^+ und ∇^- Näherungen von $|\nabla\phi|$ in positiver bzw. negativer Koordinatenrichtung darstellen, welche die Entropie-Bedingung erfüllen.

4.4 Anwendung der Levelset Methode

4.4.1 Erweiterung der Flammengeschwindigkeitsbeziehung

Gemäß Gleichung (30) beträgt die Geschwindigkeit der Flamme normal zu sich selbst für einen ortsfesten Beobachter den Wert $u_n = \mathbf{v}_n - \frac{m}{\rho^*}$, wobei m der Massenstrom durch die Flamme, \mathbf{v}_n die Strömungsgeschwindigkeit normal zur Flamme, und ρ^* die Dichte auf der Flammenfläche darstellen. Die normale Strömungsgeschwindigkeit wird aus dem Ausdruck $\mathbf{v}_n = \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{v} \cdot \frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|}$ bestimmt. Unter Verwendung der Kontinuitätsgleichung ergibt sich eine konservative Form der Level-Set-Gleichung, welche lautet

$$\frac{\partial \rho \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \phi) - m |\nabla \phi| = 0. \quad (156)$$

In dieser Formulierung ist $m |\nabla \phi|$ immer kontinuierlich, so dass auch $\frac{\partial \rho \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \phi)$ kontinuierlich sein muss. Die primitive Formulierung $\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \phi - \frac{m}{\rho} |\nabla \phi| = 0$ ist dagegen in allen Termen diskontinuierlich und wird deshalb nicht benutzt. Insbesondere die Berechnung von $\nabla \phi$ mit gegebenenfalls mehrdeutigen Ergebnisse wie dies bei der Berechnung der Normale diskutiert wurde, wird in (156) vermieden. Statt $\frac{m}{\rho}$ wird m selbst benutzt, wobei der Massenstrom m einen kontinuierlichen Verlauf aufweist.

Die Berechnung des Massenstroms m mittels der Flammengeschwindigkeitsbeziehung (83) ist nicht trivial. Die Differentialgleichung ist analytisch nicht lösbar, und weist wegen dem logarithmischen Term eine hohe Empfindlichkeit auf Parametervariationen auf.

Der Massenstrom m wird mit einem expliziten Verfahren für die zeitliche Diskretisierung bestimmt. Zur Veranschaulichung wird hier das Euler-Vorwärts-Verfahren gezeigt, wobei später das Runge-Kutta-Verfahren gewählt wird:

$$m^{n+1} = m^n + \Delta t \cdot \left(\frac{\partial m}{\partial t} \right)^n,$$

wobei $\left(\frac{\partial m}{\partial t} \right)^n$ aus der diskretisierten Form der Gleichung (83) hergeleitet wird:

$$\begin{aligned} & - \frac{X_r m^n}{\text{Pe}} \left(\frac{\partial h'_b}{\partial x} \right)^n + \frac{I'_H \chi m^n - \left(\frac{\partial m}{\partial t} \right)^n}{(m^n)^2} + m^n \tilde{y}_f (y_{f,\text{stoech}} - y_f^n) + \\ & \frac{m^n}{\text{Ze}} \log \left[\frac{y_{o_2,\text{stoech}}^2 \left(m^n \left(1 - \frac{2c X_r}{\text{Pe}} \right) - \frac{I_{xy} \chi m^n - \left(\frac{\partial m}{\partial t} \right)^n}{(m^n)^2} \right)}{m_{\text{stoech}} (y_{o_2,f}^n)^2} \right] = 0. \end{aligned} \quad (157)$$

Die Massenstrom-Zeit ableitung innerhalb des Logarithmus ist ein destabilisierender Term, welcher eine sehr feine Zeitdiskretisierung erfordert, und hat

einen unwesentlichen Einfluß auf das Endergebnis. Diese Zeitableitung darf auch aus asymptotischen Betrachtungen vernachlässigt werden ([Class2003]). Aus dem Strömungsfeld und der Level-Set-Funktion können zu jedem Zeitpunkt die Krümmung c und die Streckung χ berechnet werden. Weiterhin ergeben sich die Enthalpie und die Brennstoffkonzentration aus den Temperatur- und Konzentrationsfeldern. Die andere Parameter X_r , Pe , I'_H , Ze , und I_{xy} sind entweder konstant oder konzentrationsabhängig, und sind aus den INSFLA-Rechnungen bekannt.

Die Entwicklung der Level-Set-Funktion erfordert eine Definition des Massenstroms auf dem gesamten Rechengebiet. Da die Flammgeschwindigkeit nur auf der Flammenfläche eine physikalische Bedeutung besitzt, soll diese künstlich erweitert werden. Es bestehen mehrere Möglichkeiten.

- Die Beziehung (157) kann auf dem gesamten Rechengebiet gelöst werden, mit lokalen Werten für geometrische und chemische Parameter. Diese einfache Methode wird nicht benutzt, da sie einerseits zeitaufwendig ist und fernab der Flammenfläche unphysikalische oder gar singuläre Werte der Parameter liefern kann.
- Eine effizientere Alternative besteht darin, die Lösung lediglich auf der Flammenfläche zu bestimmen und auf den restlichen Bereich zu extrapolieren, wobei die Extrapolation keine Singularitäten bei der Entwicklung der Level-Set-Funktion verursachen darf. Geeignete Extrapolationsverfahren sind von der Komplexität der Flammenfront abhängig. Die Form der untersuchten Bunsenflamme ist z.B. so einfach, dass eine konstante Extrapolation entlang der axialen Richtung verwendet werden kann. Würde die Flammenfront zweimal die z-Achse schneiden, wäre die hier verwendete konstante Extrapolation nicht mehr anwendbar.
- Die Entwicklung der Level-Set Funktion kann in zwei Bereichen getrennt werden. In der direkten Umgebung der Flamme wird die physikalische Flammgeschwindigkeit benutzt. Außerhalb der Flammenzone wird die Level-Set-Funktion lediglich von der Reinitialisierung bestimmt. Der Übergang zwischen den zwei Gebieten kann durch die Anwendung einer Fenster-Funktion realisiert werden. Diese Methode wird in der folgenden modifizierten Levelset-Gleichung zusammengefasst:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \psi(\phi) F |\nabla \phi| + (1 - \psi(\phi)) S(\phi) (|\nabla \phi| - 1) = 0, \quad (158)$$

mit der Fenster-Funktion $\psi(\phi)$, welche den Wert Eins auf der Flammenfront und den Wert Null andernfalls annimmt.

Die drei Methoden werden getestet, wobei aufgrund der einfachen Geometrie der Bunsenflamme wenige Unterschiede zu beobachten sind. Für komplexere Flammgeometrien weist die dritte Methode (Ein- und Ausschalten der Ausbreitungsgeschwindigkeit und Reinitialisierung) die günstigsten Eigenschaften auf.

Die benötigten Variablen zur Berechnung der Flammengeschwindigkeitsbeziehung, sowie die Lösung der Gleichung (157), werden zunächst auf den Gitterpunkten ausgewertet. Werte an der exakten Flammenposition zwischen den Gitterpunkten werden mit Hilfe der MATLAB spline toolbox aus den benachbarten Gitterpunkten berechnet. Schließlich sollte erwähnt werden, dass als Anfangswert zum Zeitpunkt $t = 0$ der Massenstrom überall zu Eins gesetzt wird.

4.4.2 Anfangsposition und Flammenstabilisierung

Es muß eine Funktion $\phi_{t=0}$ als Anfangsbedingung definiert werden. Die Form der Isolinie $\phi_{t=0} = 0$ kann fast beliebig gewählt werden, da die stationäre Endposition der Flammenfläche unabhängig von der Anfangsposition wird. Die Anfangsposition soll dabei günstig in Bezug auf die ersten Iterationen des Strömungsfelds und der Level-Set-Funktion gewählt werden. Die Position der Isolinie $\phi_{t=0} = 0$ am linken und rechten Rand, d.h. für $(X = X_{0l}; z = z_0)$ und $(X = X_{0r}; z = z_0)$, ist durch die Position der Stabilisierungsflamme vorgegeben, und soll an dieser Stelle festgehalten werden:

$$\phi(t, X_{0l}, z_0) = 0, \quad (159)$$

$$\phi(t, X_{0r}, z_0) = 0. \quad (160)$$

Werden die Werte für $\phi(t, X_{0l}, z_0)$ und $\phi(t, X_{0r}, z_0)$ nach jeder Zeititeration zu Null gesetzt, entstehen Singularitäten in der Level-Set-Funktion, welche zur Instabilität der Rechnung führen. Stattdessen wird die zeitliche Änderung der Levelset-Funktion durch eine glatte Rand-Funktion R zu Null gesetzt:

$$(\phi^{n+1} - \phi^n) = R \cdot (\phi^{n+1} - \phi^n) \quad (161)$$

$$R = \frac{\tanh\left(\frac{-X+X_{0r}-w}{2\Delta x}\right) + \tanh\left(\frac{X-X_{0l}-w}{2\Delta x}\right)}{2}, \quad (162)$$

wobei die Dicke des Übergangs durch die Länge w bestimmt wird. Sie wird typischerweise zu 0.3 gesetzt.

Diese Methode verhindert wirksam das Abheben der Flamme vom Brenner und stabilisiert die Flamme. Gegebenenfalls wird Flammenrückschlag

durch die folgende modifizierte Beziehung erlaubt:

$$(\phi^{n+1} - \phi^n) = R \cdot (\phi^{n+1} - \phi^n) + (1 - R) \max((\phi^{n+1} - \phi^n), 0). \quad (163)$$

Für praktische Rechnungen wird ein Anfangsprofil $\phi_{t=0} = z - z_0$ verwendet, welches einer ebenen Flammenfront entspricht und die Bedingung $|\nabla\phi| = 1$ erfüllt.

4.4.3 Kopplung zwischen Transportgleichungen und Level-Set-Funktion

Wie im Kapitel 3.1 erläutert, ist die Berechnung der Temperatur und der Spezies-Konzentrationen von der Flammenposition, bzw. von der mit der Flamme bewegten Raumkoordinate x^1 , abhängig, und erfolgt durch die Lösung der Gleichungen (115) und (119). Diese sind mit einem expliziten Verfahren zeitlich diskretisiert. Da die Level-Set-Funktion bedingt durch die Reinitialisierung dem Abstand normal zur Flamme entspricht, kann die normale Koordinate x^1 durch den Wert der Level-Set-Funktion ϕ selbst ersetzt werden. Die diskrete Temperatur- und Konzentrationsgleichungen für den Zeitpunkt $n + 1$ lauten dann:

$$T^{n+1} = T^n + \frac{\Delta t}{\rho^n} \left(\frac{\nabla(\lambda\nabla T)}{\text{Pe}(\text{Le}_{CH_4} + (1 - \text{Le}_{CH_4})H(\phi))} - \rho\mathbf{v} \cdot \nabla T \right)^n, \quad (164)$$

$$(\rho Y)^{n+1} = (\rho Y)^n + \Delta t \left(\frac{\nabla(\lambda\nabla Y)}{\text{Pe}(\text{Le}_{CH_4} + (\text{Le}_{CO} - \text{Le}_{CH_4})H(\phi))} - \nabla \cdot \rho\mathbf{v}Y \right)^n. \quad (165)$$

$H(\phi)$ stellt die Heavyside-Funktion dar und wird durch den Ausdruck $H(\phi) = \frac{1}{2}(\tanh(a \cdot \phi) + 1)$ modelliert. Der Parameter a bestimmt die Steigung des Heavyside-Sprungs. Die Physik wird optimal mit einem sehr steilen Übergang widerspiegelt. Die Steigung wird jedoch durch numerische Gesichtspunkte beschränkt. Der Übergang muss eine Mindestanzahl von Gitterzellen enthalten, typischerweise 5-6 Zellen sind nötig, um ein günstiges Verhalten der numerischen Lösung zu gewährleisten.

Als Randbedingungen werden am Brenneintritt die Konzentration auf den Wert im Brenngasgemisch ($Y = Y_{CH_4,f}$) und die Temperatur gemäß Kapitel 3.1 auf $T_b = f(Y_{CH_4,f})$ gesetzt. An der Wand und am Brenneraustritt werden Neumann-Randbedingungen also verschwindende Normalableitungen gefordert.

Die im Kapitel 3.2 beschriebene Viskositätsmodellierung

$$\mu = \mu_f + [\mu] H(x^1) + \mu' J(x^1)$$

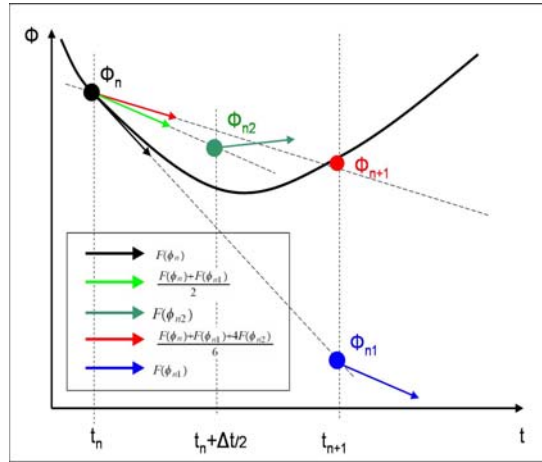


Abbildung 38: Prinzip des Runge-Kutta-Verfahrens dritter Ordnung für eine Erhaltungsgleichung der Typ $\frac{\partial \phi}{\partial t} - F(\phi) = 0$. In einem ersten Schritt ist eine erste Näherung der Funktion ϕ zum Zeitpunkt t_{n+1} eingeschätzt ($\phi = \phi_1$). Im zweiten Schritt ist ein neues Fortschreiten aus den Einschätzungen von $F(\phi_n)$ und $F(\phi_1)$ berechnet, um den Wert von ϕ für den Zeitpunkt $t_n + \frac{\Delta t}{2}$ zu herleiten ($\phi = \phi_2$). Schließlich ist die Einschätzung von ϕ_{n+1} aus einer Mittelung der Flüße $F(\phi_n)$, $F(\phi_1)$ und $F(\phi_2)$ berechnet.

wird unter Verwendung von $x^1 = \phi$ berechnet:

$$\mu = \mu_f + [\mu] H(\phi) + \mu^J J(\phi). \quad (166)$$

4.5 Numerische Methoden und Validierung

4.5.1 Zeitliche Diskretisierung

Für die zeitliche Diskretisierung wird das Runge-Kutta-Verfahren angewandt ([Gerald1994], [Garcia1994]). Das Runge-Kutta-Verfahren beruht auf einer expliziten Abschätzung und nachfolgenden Korrektur der Zeitableitung unter Verwendung unterschiedlicher Zeitschritte, so dass ein Verfahren höherer Ordnung entsteht. Das Prinzip des Verfahrens ist in Abbildung (38) dargestellt. Dieses Schema hat sich als hochgenau und robust erwiesen und erlaubt eine hohe numerische Genauigkeit bei relativ großen Zeitschritten. Unphysikalische Zeitoszillationen werden unterdrückt wenn mindestens Runge-Kutta dritter Ordnung benutzt wird.

Speziell wird eine TVD-Runge Kutta Methode dritter Ordnung angewandt (Total Variation Diminishing), wie in [Shu1987]. Die Grundidee des

TVD-Verfahrens ist die Begrenzung der totalen Variation ([Harten1983]). Die totale Variation einer partiellen Differentialgleichung

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} = 0$$

ist gegeben durch

$$TV = \int \left| \frac{\partial u}{\partial x} \right| dx.$$

Eine numerisches Verfahren wird als TVD-Verfahren bezeichnet wenn gilt

$$TV(u^{n+1}) \leq TV(u^n).$$

Diese Technik kann prinzipiell auf alle numerischen Verfahren angewendet werden, ist aber bei Finite-Volumen- und Finite-Differenzen-Verfahren sehr populär und vermeidet unphysikalische Oszillationen der numerischen Lösung. Das TVD-Prinzip beruht im Fall der Runge-Kutta-Methode auf eine geschickte Wahl der Wichtungskoeffizienten. Der verwendete numerische Algorithmus für eine skalare homogene Erhaltungsgleichung $\frac{\partial u}{\partial t} - L(u) = 0$ lautet:

$$u^{(1)} = u^{(0)} + \Delta t L(u^{(0)}) \quad (167)$$

$$u^{(2)} = \frac{3}{4}u^{(0)} + \frac{1}{4}u^{(1)} + \frac{1}{4}\Delta t L(u^{(1)}) \quad (168)$$

$$u^{(3)} = \frac{1}{3}u^{(0)} + \frac{2}{3}u^{(2)} + \frac{2}{3}\Delta t L(u^{(2)}) \quad (169)$$

oder:

$$u^{(1)} = u^{(0)} + \Delta t L(u^{(0)}) \quad (170)$$

$$u^{(2)} = u^{(0)} + \frac{1}{4}\Delta t L(u^{(0)}) + \frac{1}{4}\Delta t L(u^{(1)}) \quad (171)$$

$$u^{(3)} = u^{(0)} + \frac{1}{6}\Delta t L(u^{(0)}) + \frac{1}{6}\Delta t L(u^{(1)}) + \frac{2}{3}\Delta t L(u^{(2)}) \quad (172)$$

Das TVD-Runge-Kutta-Methode dritter Ordnung wird für die Iteration aller zeitabhängigen Gleichungen angewendet. Um eine konsistente Formulierung zu erzielen werden alle Gleichungen in einer gemeinsamen Runge-Kutta Schleife gelöst. Der maximale Zeitschritt ist durch die bei allen Strömungssimulationen mit expliziten Verfahren auftretende CFL-Bedingung (Courant-Friedrich-Lachs) begrenzt.

4.5.2 Räumliche Diskretisierung

Durch die Verbrennung ergeben sich starke Gradienten von strömungsmechanischen Größen (Dichte, Druck, Strömungsgeschwindigkeit) an der Flammenposition. Hinzu kommt, dass die Flammengeschwindigkeitsbeziehung und die Level-Set Funktion sehr empfindlich auf geometrische und strömungsmechanische Größen reagieren. Dies erfordert die Anwendung eines robusten und hochgenauen numerischen Schemas für die räumliche Diskretisierung. Das WENO-Verfahren (Weighted Essentially Non Oscillatory, ([LIU1994]), ([Jiang1996]), ([Jiang2000])) wurde entwickelt, um Schockwellenausbreitung zu behandeln und gewährleistet nicht oszillierende Eigenschaften sowohl für smooth/glatte als auch für unstetige(diskontinuierliche) Lösungen. Es ist in unserem Code verwendet.

Das WENO-Verfahren basiert auf dem ENO (Essentially Non Oscillatory, ([Shu1987]), ([Harten1987]))-Verfahren. Im ENO-Verfahren werden für jeden Gitterpunkt die räumlichen Ableitungen mittels mehrerer Substencils eingeschätzt. Ein Stencil bezeichnet die Gitterpunkte welche für eine Finite-Differenzen-Diskretisierung herangezogen werden. Von einem Substencil spricht man wenn nur eine Untermenge der Gitterpunkte des Stencils benutzt werden. Die Wahl der optimalen Ableitung in Bezug auf numerische Eigenschaften des Verfahrens ist durch die Glattheit der Lösung auf den Substencils bestimmt (siehe Abbildung (39)). Von den Lösungen auf den verschiedenen Substencils wird diejenige gewählt welche die betragsmäßig kleinste zweite Ableitung aufweist. Dies verhindert weitgehend die Verwendung von Gitterpunkten, welche beiderseits einer Diskontinuität liegen.

Das WENO-Verfahren ist ein zentrales Verfahren in glatten Lösungsbereichen, weist aber die Eigenschaften des ENO-Schemas in Bereichen starker Änderungen auf. Dies wird erzielt durch eine Wichtung der Substencils des ENO Schemas, mit einer Anpassung der Wichtungsfaktoren abgeleitet aus den Beträgen der zweiten Ableitungen der Lösung auf diesen Substencils. Entsprechend variieren die Wichtungsfaktoren kontinuierlich. Die lineare Instabilität und Genauigkeitsminderungen verursacht durch schlagartige Stenciländerungen in ENO Schemas werden dadurch vermieden oder verringert. Das WENO-Verfahren ist außerdem robuster als das ENO-Schema. Das Verfahren wurde ausführlich für transsonische Strömungen mit Schocks getestet und zeigt ein besonders stabiles Lösungsverhalten und glatte Lösungen ohne Überschwinger.

Das verwendete WENO-Verfahren besitzt eine Genauigkeit dritter Ordnung (wie das ENO-Schema) in Bereichen starker Änderungen der Lösung und erreicht eine Genauigkeit fünfter Ordnung in glatten Lösungsbereichen. Es liefert für jede Gitterzelle einerseits die beiden bezüglich der Koordina-

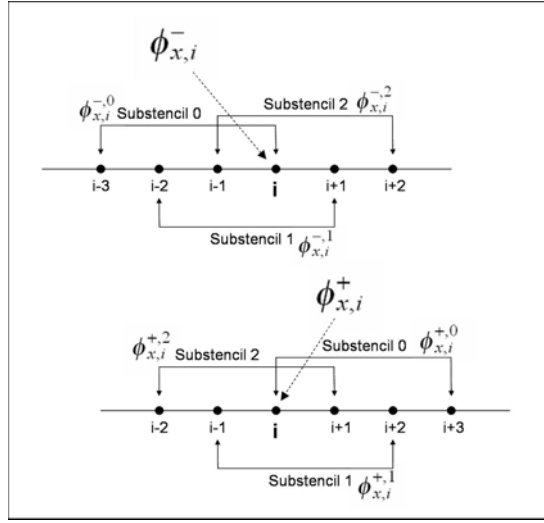


Abbildung 39: Berechnung der ENO und WENO-Ableitungen aus den verschiedenen links- und rechts-basierte Ableitungen. ENO-Scheme: $\phi_{x,i}^- = \phi_{x,i}^{-,0}, \phi_{x,i}^{-,1}$ oder $\phi_{x,i}^{-,2}$. WENO-Scheme: $\phi_{x,i}^- = f(\phi_{x,i}^{-,0}, \phi_{x,i}^{-,1}, \phi_{x,i}^{-,2})$.

tenrichtung einseitigen WENO-Ableitungen ∂^+ und ∂^- , sowie eine mit den WENO-Wichtungsfaktoren gewichtete zweite Ableitung. Die ∂^+ und ∂^- werden in den konvektiven Termen der Gleichungen der Strömungsrichtung entsprechend gewählt.

4.5.3 Validierung des Strömungslösers

Der Strömungslöser wird anhand von zwei inkompressiblen Referenzfällen validiert. Eine Rohrströmung in Zylinderkoordinaten und ein Freistrahls in kartesischen Koordinaten werden nachgerechnet.

Die Hagen-Poiseuillesche Rohrströmung stellt eine Strömung durch ein gerades Rohr von kreisförmigem Querschnitt dar. Die Geschwindigkeitskomponente in radialer und Umfangsrichtung sind gleich Null; die Geschwindigkeitskomponente in axialer Richtung, hier mit v bezeichnet, ist nur von r abhängig. Der Druck ist für jeden Querschnitt konstant. Die Randbedingung für $r = R$ lautet $v = 0$. Die gesamte Problemkonfiguration ist in Abbildung (40) dargestellt. Die analytische Lösung der Navier-Stokes Gleichungen in zylindrischen Koordinaten ergibt für die Geschwindigkeitsverteilung

$$v(r) = -\frac{1}{4\mu} \frac{dp}{dz} (R^2 - r^2) = -\frac{1}{4\mu} \frac{p_0}{L} (R^2 - r^2). \quad (173)$$

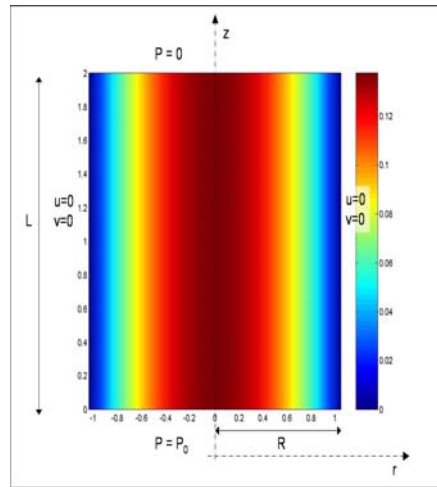


Abbildung 40: Der Strömungslöser wird anhand der Hagen-Poiseuille-Strömung verifiziert. Gezeigt sind das Rechengebiet und axiale Strömungsgeschwindigkeit.

Als Randbedingung für die Simulation werden $p = p_0$ (bzw. $p = 0$) am Eintritt (bzw. Austritt) des Rohres, und $u = v = 0$ an der Wand eingestellt. Die Randbedingungen und Abmessungen sind in Abbildung (40) zusammengefasst. Die Rechnungen werden instationär bis zur Konvergenz der Lösung durchgeführt. Die analytische Lösung wird für verschiedene Werte des Druckgradienten, des Durchmessers, der Länge des Rohres und der Viskosität mit den numerischen Ergebnisse verglichen. Die Ergebnisse sind in Abbildung (41) dargestellt. Sie zeigen eine sehr gute Übereinstimmung für alle berechneten Fälle.

Das Freistrah-Verifikationsbeispiel beschreibt einen Freistrah, der aus einer Düse austritt und sich mit der umgebenden ruhenden Flüssigkeit vermischt. Es besteht keine analytische Lösung, es wird deswegen ein Vergleich mit den Ergebnisse mit dem kommerziellen CFD-Code FEMLAB durchgeführt. Als Randbedingung wird ein Geschwindigkeitsprofil am Eintritt eingesetzt mit einer verschwindenden radialen Geschwindigkeitskomponente. An der Wand und am Düsenaustritt ist der Druck gleich dem Referenzdruck. Die Viskosität wird zu 0.4 gewählt. Die Ergebnisse der beiden Simulationen sind in Abbildung (42) dargestellt. Sie zeigen eine gute Übereinstimmung. Lediglich in der Nähe von den Rändern ergeben sich leichte Abweichungen.

Kompressible Verifikationsfälle müssten Sprungbedingungen wie sie durch das hydrodynamische Modell gegeben sind beinhalten, und liegen nicht vor. Kompressible Ergebnisse werden deswegen lediglich qualitativ überprüft und

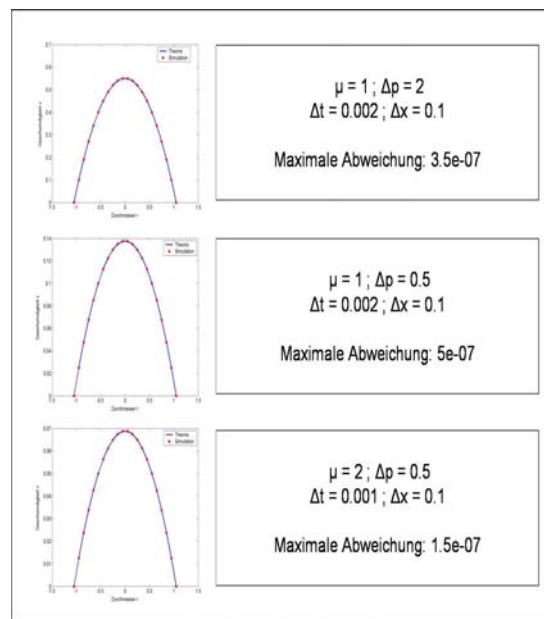


Abbildung 41: Vergleich zwischen analytischen und berechneten Lösungen der Rohr-Strömung für verschiedene Werte der Viskosität und des Druckgradienten. Die Ergebnisse stimmen sehr gut überein für alle betrachteten Fälle.

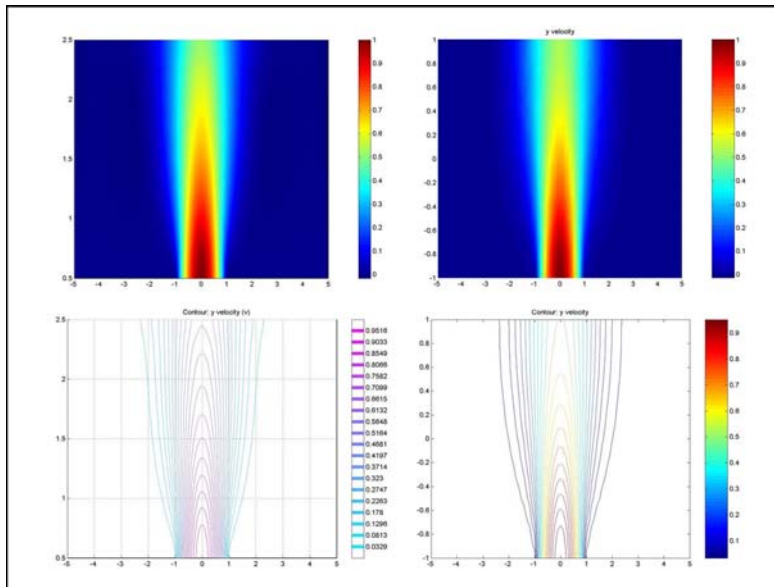


Abbildung 42: Vergleich des berechneten Freistrahls (rechts) mit einer FEMLAB-Rechnung (links). Oben: axiale Strömungsgeschwindigkeit. Unten: Isolinien der axialen Geschwindigkeit.

später mit den Experimenten vom DLR verglichen.

4.6 Struktur des gesamten Codes

In diesem Abschnitt wird die Struktur des im Rahmen dieser Doktorarbeit entwickelten Codes beschrieben. Das Programmpaket besteht aus drei Teilen, von denen zwei zur Aufbereitung der Eingabedateien dienen. Die Berechnung der für das hydrodynamische Modell benötigten chemischen Daten wird wie im Kapitel 2.3 beschrieben mit dem Programm INSFLA durchgeführt. Der Parametersatz wird für einen gegebenen Flammentyp (Methan-Luft, Propan-Sauerstoff, usw.) und einen gegebenen Druck bestimmt. Abbildung (43) zeigt die globale Struktur des Programmpakets.

Der Programmteil "LSinput" dient zum Einlesen und Aufbereitung der für die Simulation benötigten Daten.

Dies umfasst:

- zur Normierung der Variablen dienende Größen, wie die adiabate planare Flammgeschwindigkeit oder die Abmessungen des Rechengebiets.
- numerischen Parameter: Anzahl von Iterationen, Frequenz der Daten-

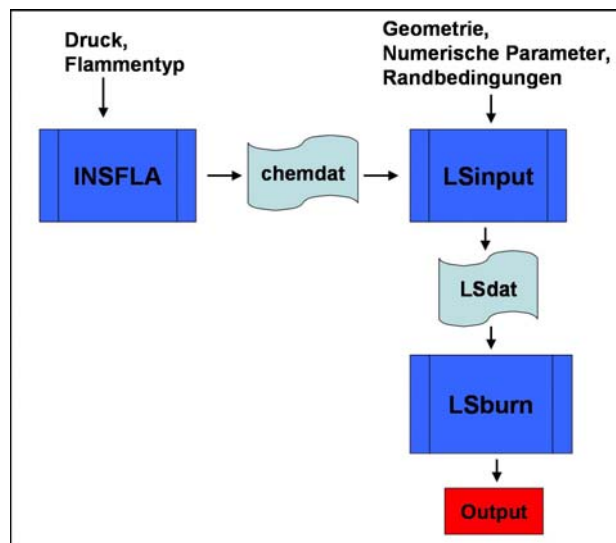


Abbildung 43: Globale Struktur des Programmpakets. Im Programmteil LSinput werden die Geometrie des Rechengebiets, die numerische und strömungsmechanische Parameter sowie die chemische Modellparameter aus den Insfla-Rechnungen zusammengefasst. Im Programmteil LSburn erfolgt die Lösung der Gleichungen.

speicherung, Werte der Raum- und Zeitdiskretisierung, welche durch die Courant-Zahl-Bedingung verknüpft sind.

- Definition von den Anfangs- und Randbedingungen für die Strömung, Konzentrationen und Temperatur.
- Definition des anfänglichen Flammenprofils
- Randbedingung für die Stabilisierung der Flamme (Halteflamme).
- Amplitude und Frequenz der eingesetzten Konzentrationsstörung.

Der Programmteil "LSburn" enthält die Hauptiterationsschleife und die zugehörigen Subroutinen. Es werden die Eingabedateien eingelesen und es wird geprüft, ob die Rechnung aus vorherigen Rechnungsergebnisse gestartet werden soll. In der Hauptschleife werden für jeden Zeitschritt die Flammengeschwindigkeitsbeziehung, die Levelset Gleichung, die Navier-Stokes und die Konzentration- und Temperaturgleichungen mit dem Runge-Kutta-Verfahren gelöst. Abbildung (44) zeigt die Kopplung und den Daten-Austausch zwischen den Gleichungen. Die Ergebnisse der Simulation werden auf eine Zwischendatei geschrieben, welche nach jeder Iteration ergänzt wird. Die Auswertung der Ergebnisse erfolgt direkt in der MATLAB-Umgebung, welche dreidimensionale Darstellungen der berechneten zeitlichen und räumlichen Profile ermöglicht. Selbstprogrammierte Routinen visualisieren die Daten.

Zur numerischen Umsetzung der gesamten Modellierung wird ein Finite-Differenzen-Verfahren auf einem regelmäßigen strukturierten zweidimensionalen Gitter angewendet. Zur Verfolgung der Flammenfläche wird die Levelset Methode gewählt. Die reaktive Strömung wird mit Hilfe eines modifizierten Fractional-step-Verfahrens gelöst, welches die Änderung der Dichte auf der Flammenfläche in Betracht zieht. Für die zeitliche Diskretisierung wird ein TVD-Runge-Kutta-Verfahren dritter Ordnung angewendet. Die räumliche Diskretisierung erfolgt durch die Anwendung des WENO-Verfahrens, was unphysikalische Oszillationen vermeidet. Durch die Kopplung des Level-Set-Algorithmuses mit dem Strömungslöser und den Transportgleichungen wird ein geschlossener Code einsatzbereit, welcher für die Simulation des Experiments verwendet wird.

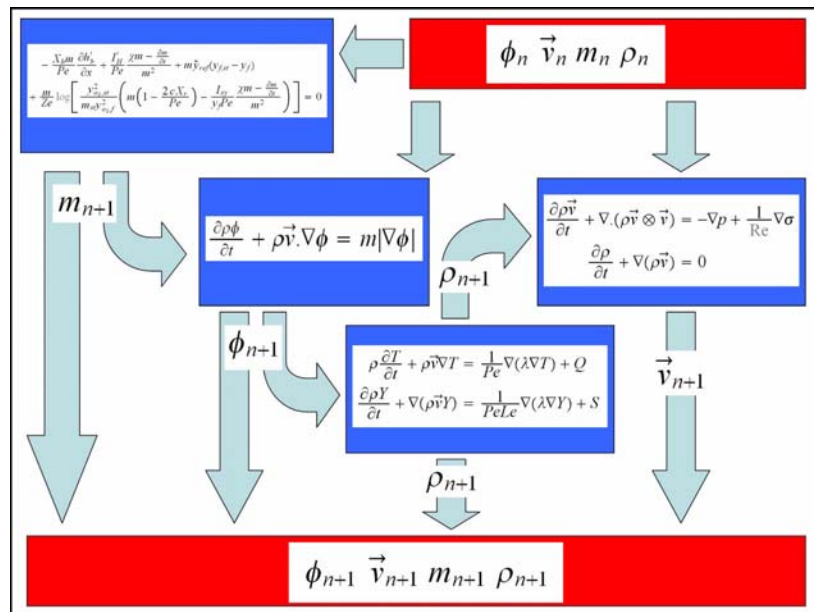


Abbildung 44: Kopplung der verschiedenen Erhaltungsgleichung für eine Zeititeration. Zuerst wird der Massenstrom aus der Flammengeschwindigkeitsbeziehung hergeleitet. Die Level-Set-Funktion wird dann bestimmt und in den Temperatur und Konzentrationsgleichungen verwendet, um die Dichte zu berechnen. Schließlich werden die Navier-Stokes Gleichungen gelöst.

5 Zweidimensionale quantitative Rechnungen

In diesem Kapitel werden erstmals zweidimensionalen Rechnungen mit dem kompletten Zwei-Schichten-Modell gezeigt. Die Ergebnisse der stationären Rechnung werden mit den im DLR gewonnenen experimentellen Ergebnissen verglichen. Die Antwort der Flamme gegenüber Störungen der Brennstoffkonzentration für Frequenzen von 10, 20, 50, 80 und 100Hz wird untersucht.

5.1 Stationäre Rechnung

Zur Validierung der stationären Rechnungen stehen experimentelle Ergebnisse von OH^* -Chemolumineszenz Messungen zur Verfügung ([Ax2006]). Das OH^* -Chemolumineszenz-Verfahren misst das bei der Produktion von OH^* -Radikalen emittierte Licht. Die maximale erhaltene Lichtstärke entspricht der Stelle der maximalen Produktion von OH^* -Radikalen, welche hier durch die Stelle des maximalen OH -Molenbruchgradienten approximiert ist. Aus dieser Position lässt sich die eigentliche Flammenfläche mit einer räumlichen Verschiebung bestimmen. Diese Verschiebung ist gemäß Kapitel 2.3.2 mit dem konstanten Abstand $X_{OH,m}$ gegeben. Abbildung (45) zeigt die Vorgehensweise zur Bestimmung des Flammenprofils aus den gemittelten und Abel-invertierten Bildern der Chemolumineszenz-Messungen.

Die gemessene Flamme wird in einer stationären Simulation nachgerechnet. Tabelle (3) zeigt die verwendeten Parameter, welche den experimentellen Einstellungen entsprechen. Abbildung (46) zeigt die erhaltenen Temperatur- und Konzentrationsprofile entlang der Mittelachse. Das berechnete stationäre Flammenprofil wird in Abbildung (47) mit der experimentell bestimmten Flammenfront verglichen. Die maximale Ausdehnung und die Form der Flamme an der Flammenspitze stimmen gut überein. Die Flanken der Flamme zeigen noch gewisse Abweichungen, deren mögliche Ursachen im folgenden diskutiert werden:

Der erste Grund kann aus dem künstlichen Festhalten der Flamme am Rand (siehe Kapitel 4.4) stammen. Der künstlich eingeschätzte Übergang der Rand-Funktion R , insbesondere seine Steifheit, kann einen Fehler in der Nähe der Stabilisierungsflamme verursachen. Diese Problematik sollte durch Entwicklung einer Modellierung der Randeffekte unter Berücksichtigung des entsprechenden Wärmeverlusts geklärt werden. Es wurden zusätzlich in der Flammengeschwindigkeitsbeziehung die tangentialen Diffusionsterme vernachlässigt. Diese können im Fall starker Konturänderungen einen deutlichen Effekt aufweisen, und dadurch die Übergangskontur in der Nähe des Flammen-Anlegepunkts beeinflussen.

Da eine experimentelle Bestimmung des Strömungsfeldes innerhalb der

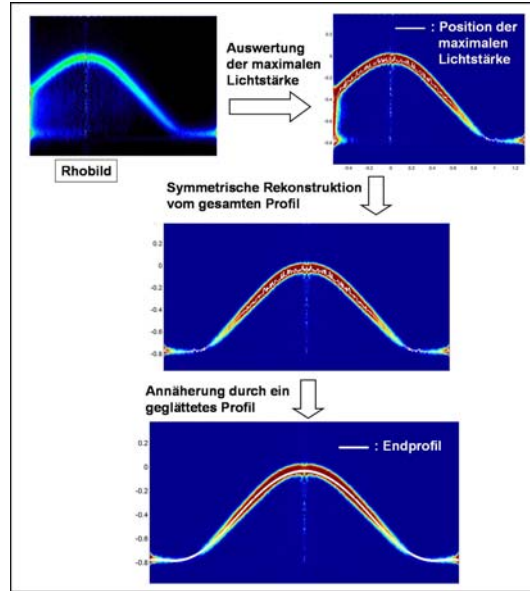


Abbildung 45: Vorgehensweise zur Erzeugung eines Flammenprofils aus einem OH-Chemolumineszenz-Bild. Der fehlende Teil der Flamme ist mit einer Symmetrie-Annahme rekonstruiert. Zuletzt wird das Profil mit Spline-Funktionen geglättet.

	Experiment	Simulation
Absolutdruck	69 mbar	-
Gasgemischtemperatur T_f	310 K	1
Äquivalenzverhältnis	0.88	0.88
Anströmgeschwindigkeit	90 cm/s	1.6
adiabate Flammengeschwindigkeit	56 cm/s	1
Reynolds-Zahl Re	-	25
Rechengebiet (x*z)	48*60 mm	2.4*3
Gitterabstand	2 mm	0.1
Zeitschritt Δt	-	0.001875
I_{XY}	-	0.01
I_H	-	-0.0018
X_r	-	0.19

Tabelle 3: Zusammenfassung der Simulations-Parameter.

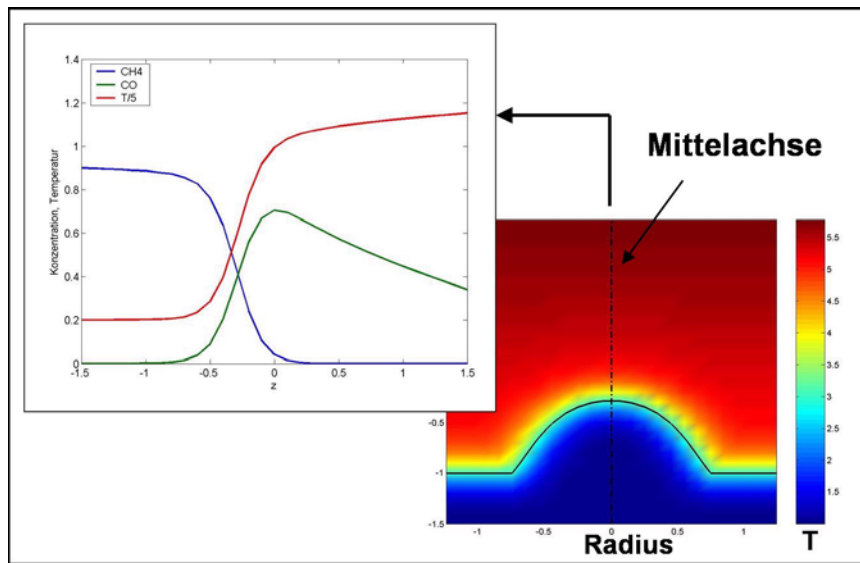


Abbildung 46: Stationäre Simulation mit dem Level-Set-Code. Rechts: stationäres Flammenprofil und Temperaturfeld. Links: Temperatur- und Konzentrationsprofile entlang der z -Achse.

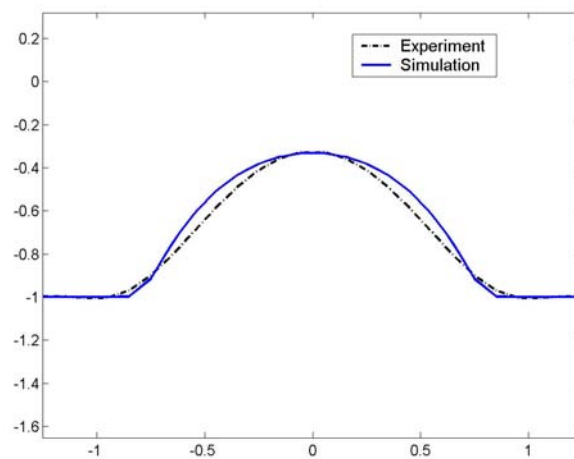


Abbildung 47: Vergleich der stationären Flammenprofile aus Experiment und Simulation. Die Abweichungen zwischen Simulation und Experiment ergeben sich aufgrund der Verwendung einer "slip-flow"-Randbedingung und dem künstlichen Festhalten der Flamme am Rand.

Brennkammer nicht zu Verfügung stand, konnten die Randbedingungen für die Strömungsgeschwindigkeit an der Wand und am Austritt nur abgeschätzt werden. Dies hat eine gewisse Ungenauigkeit der Strömungssimulation zur Folge, welche sich auf die Flammenkontur auswirkt. Eine zweidimensionale Messung der Strömungsgeschwindigkeit, beispielsweise mit einem PIV-Verfahren (Particle Image Velocimetry), wäre notwendig, um die Randbedingungen besser vorgeben zu können. Die Anwendung eines solchen Verfahrens ist allerdings aufgrund der begrenzten optischen Zugänglichkeit nur eingeschränkt möglich. Im Fall einer Simulation der gesamten Brennkammer würden die Randbedingungen genauer definiert. Die Flammenränder würden aber den Rändern des Rechengebiets nicht mehr entsprechen. In diesem Fall lässt sich die Trennung von unverbranntem und verbranntem Bereichen schwieriger definieren.

Außerdem beruht der Vergleich der experimentellen und berechneten Flammenfronten auf der Annahme, dass der Abstand $X_{OH,m}$ entlang der Flamme konstant bleibt. Diese Annahme konnte im zweidimensionalen Fall nicht verifiziert werden. Des Weiteren ist die Aussagefähigkeit des Chemolumineszenz-Verfahrens zur Bestimmung der Flammensposition aufgrund der langen Lebensdauer der OH^* -Radikale begrenzt. Der Umsatz von OH^* -Radikalen erfolgt auf einer breiten Zone hinter der Flamme, was zu einem relativ breiten Lichtsignal führt.

5.2 Periodische Konzentrationsstörungen

Die Antwort der Flamme auf eine periodisch gestörte Gemischzusammensetzung wird anhand von fünf instationären Rechnungen untersucht. Die Methan-Konzentration ist um den dimensionslosen Wert $Y_{CH_4} = 0.9$ mit einer Frequenz von 10Hz (bzw. 20, 50, 80 und 100Hz) und einer Amplitude von 5% angeregt.

Abbildung (48) zeigt die resultierende maximale Verschiebung der Flammenfront für den 10Hz-Fall.

In Abbildung (49) sind der zeitliche Verlauf des Methan-Konzentrationsverlaufs entlang der Mittelachse sowie die Massenströme an Flammenspitze und an Flammenflanke in Abhängigkeit von der Methan-Konzentration dargestellt. Die Störung der Brennstoffkonzentration erreicht die Flamme mit einer durch den Stofftransport verursachten zeitlichen Verzögerung. Die Methan-Konzentration wird direkt an der Flamme ausgewertet. Die Phasenverschiebung zwischen der angesetzten Konzentrationsstörung am Brennereintritt und der Störung, welche die Flammenfläche tatsächlich erreicht, fließt somit nicht in die Auswertung ein. Der Massenstromverlauf an der Flammenspitze zeigt dennoch eine starke Phasenverschiebung gegenüber dem Konzentrationsverlauf, wäh-

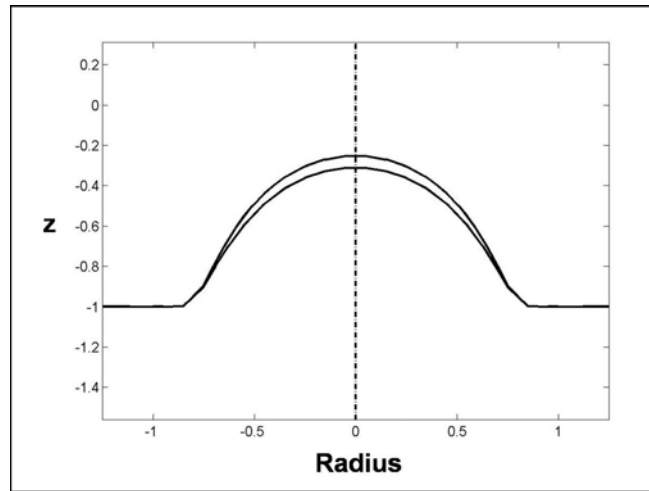


Abbildung 48: Maximale Bewegung der Flamme für eine Störung der Brennstoff-Konzentration von 10Hz. Gezeigt sind die Flammenkonturen die am weitesten entfernt von und am nächsten zum Brenner liegen. Die maximale Änderung der Flammenfront erfolgt auf der Flammenspitze.

rend der Massenstrom an der Flammenflanke einen nahezu proportionalen Zusammenhang aufweist. Dies deutet darauf hin, dass die zeitliche Flammenantwort stark von der Krümmung und Streckung abhängt. An der Stelle höherer Variationen dieser Variablen, der Flammenspitze, erfolgt ein komplexeres zeitliches Verhalten des Massenstroms. Die Auswertung der Massenstromverläufe aus den instationären INSFLA-Rechnungen für periodisch gestörte Brennstoffkonzentrationen unter verschiedenen Streckungswerten, dargestellt in Abbildung (50), bestärkt diese Annahme. Die Phasenverschiebung des Massenstroms steigt mit zunehmender Streckung. Die komplexere Form des Massenstromverlaufs aus der zweidimensionalen Rechnung zeigt, dass mehrdimensionale Effekte zusätzlich auftreten. Dies wird im Fall der 20Hz Frequenz durch die Darstellung der Flammenkrümmung in Abbildung (51) verdeutlicht. Die Flammenkrümmung erreicht bei minimaler Brennstoffkonzentration ein Maximum. Dies trägt trotz niedrigem Brennstoffzufuhr an der Flamme zu einem erhöhten Massenstrom, und somit zu einer Asymmetrie des Phasenverlaufs des Massentroms.

In Abbildung (52) sind die Massenströme an der Flammenspitze gegenüber der Brennstoffkonzentration für die fünf berechneten Frequenzen dargestellt. Das Phasenverhalten wird mit zunehmender Frequenz der Störung regelmäßiger. Die Amplitude der Flammenantwort nimmt im Allgemeinen mit der Frequenz ab. Allerdings ergibt sich in der Umgebung von 80Hz ein lo-

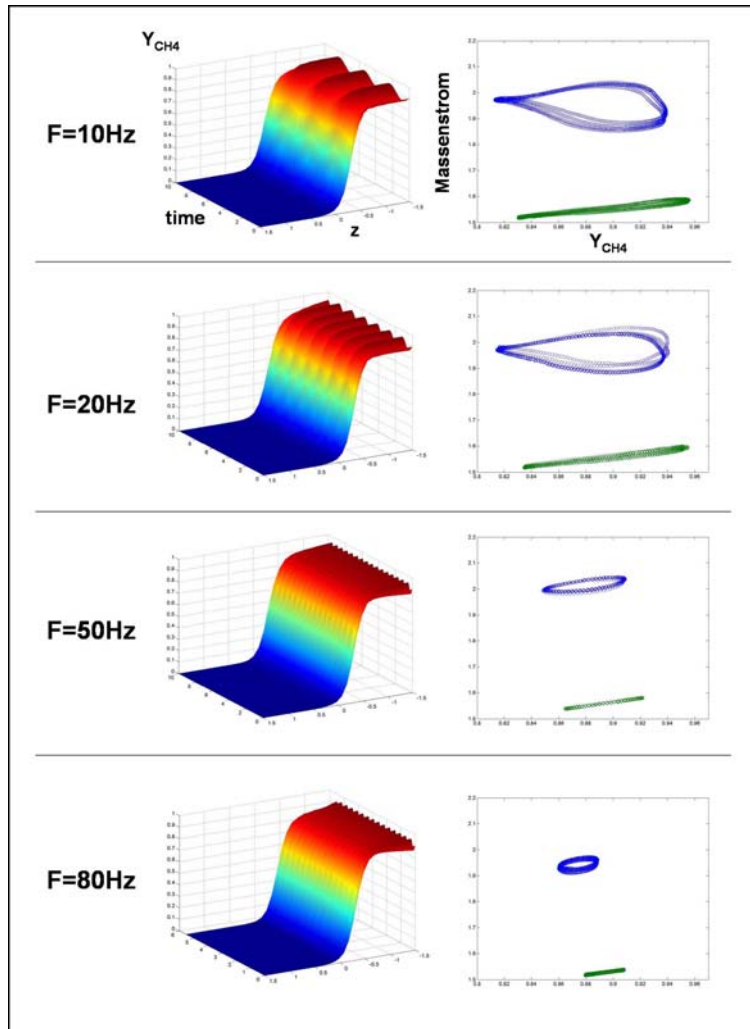


Abbildung 49: Periodische Störungen der Brennstoffkonzentration mit den Frequenzen 10, 20, 50 und 80Hz. Links: zeitliche Entwicklung der Konzentration entlang der Mittelachse. Rechts: Massenstrom durch die Flamme ausgewertet an der Flammenspitze (blau) und an dem Flammenflank (grün). Der Massenstrom ausgewertet an dem Flammenflank bleibt der Brennstoffkonzentration proportional, während die Flammenspitze ein phasenverschobenes Verhalten aufweist.

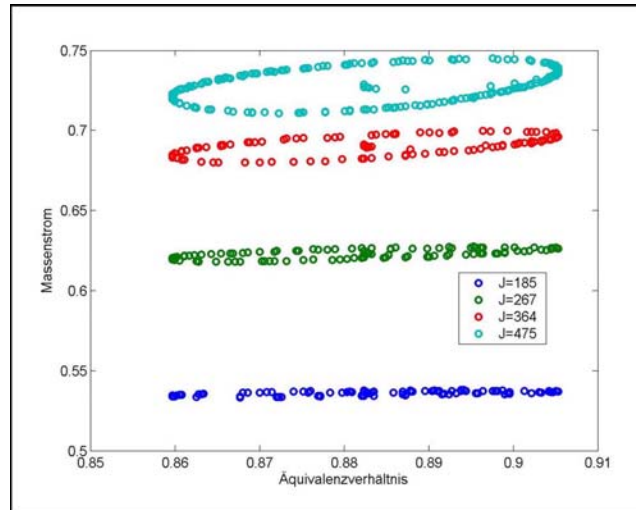


Abbildung 50: Auswertung von INSFLA-Daten. Massenstrom durch die Flamme gegenüber dem Äquivalenzverhältnis für verschiedene Werte des tangentialen Druckgradienten J . Die Phasenverschiebung steigt mit steigendem J .

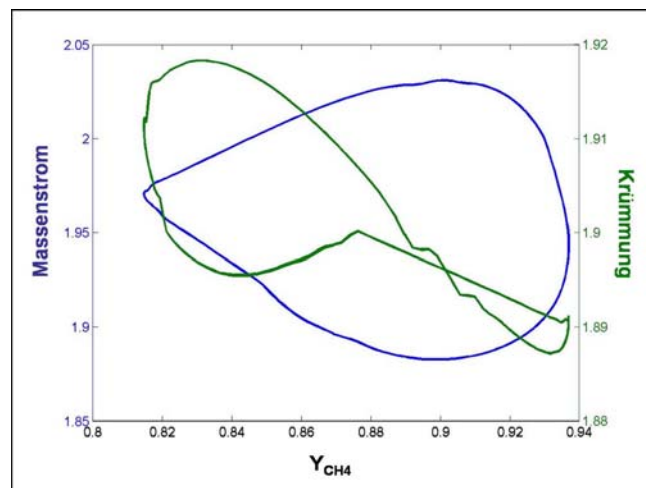


Abbildung 51: Massenstrom (blau) und Flammenkrümmung (grün) an der Flammenspitze gegenüber Brennstoffkonzentration für Störungen mit einer 20Hz Frequenz.

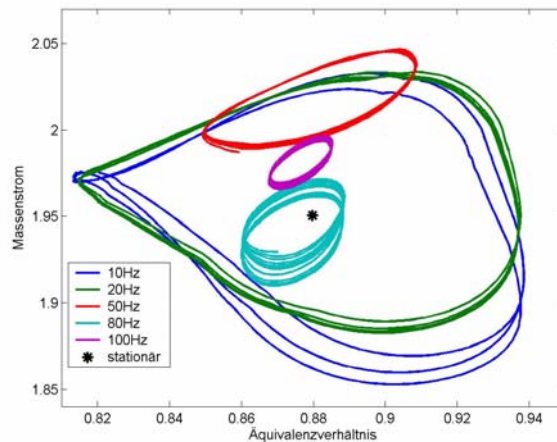


Abbildung 52: Massenstrom an der Flammenspitze gegenüber dem Äquivalenzverhältnis für den stationären Fall und für Frequenzen von 10, 20, 50, 80 und 100Hz.

kales Maximum, was auf ein Resonanzphänomen hinweist. Zu beachten ist, dass die Amplitude der Konzentrationsstörung an der Flamme mit zunehmender Frequenzen abnimmt. Abbildung (53-(a)) zeigt, dass für die 80Hz Frequenz die Amplitude des Massenstroms höher als für die 50Hz und 100Hz Frequenzen wird. Wird die Amplitude des Massenstroms mit der Amplitude der Konzentrationsstörung gewichtet, wie in Abbildung (53-(b)) dargestellt, wird das Resonanzphänomen noch deutlicher.

5.3 Numerischer Rechenaufwand

Die Rechnungen wurden auf einem 2.4GHz-Pentium-Computer durchgeführt. Die Rechenzeit für 10000 Iterationen mit einer Auflösung von 800 Zellen beträgt etwa zwei Tage. Der höchste Anteil der Rechenzeit (etwa 60%) wird für die Lösung der Poisson-Gleichung benötigt. Nochmals 30% werden innerhalb der Spline-Toolbox aufgewendet. Der Rechenaufwand ist von der gleichen Größenordnung wie der einer eindimensionalen reaktiven Strömungssimulation. Die Verwendung eines schnellen Algorithmus zur Lösung der Druckgleichung und die Umsetzung auf eine schnellere Programmiersprache sollten die Rechenzeit bis um etwa eine Größenordnung reduzieren. Der Mehraufwand gegenüber einer nichtreaktiven Strömung sind lediglich drei explizite Differentialgleichungen für die Flammengeschwindigkeit, die Level-Set-Funktion, die Konzentration und die Temperatur. Die eindimensionalen detaillierten Rech-

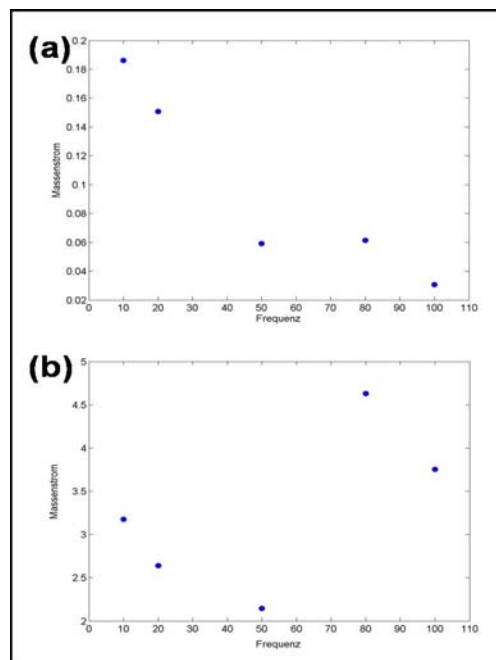


Abbildung 53: (a): Amplitude des Massenstroms an der Flammenspitze in Abhängigkeit von der Frequenz der Konzentrationsstörung. (b): Amplitude des Massenstroms an der Flammenspitze gewichtet mit der Amplitude der Konzentrationsstörung in Abhängigkeit von der Frequenz der Konzentrationsstörung. Beide Abbildungen zeigen eine Erhöhung der Massenstromsamplitude für Frequenzen um 80 Hz.

nungen zur Bestimmung der quantitativen Modellparameter und des Gültigkeitsbereichs werden für einen gegebenen Druck und Mischungstyp einmal durchgeführt. Sie stellen keinen zusätzlichen erheblichen Rechenaufwand dar und können gegebenenfalls aus einer vorher zusammengestellten Datenbank exportiert werden. Dadurch eignet sich eine bezüglich der Berechnungszeit optimierte Version des Codes sehr gut für praktische Anwendungen.

6 Zusammenfassung und Ausblick

Die vorliegende Arbeit umfasst die erste numerische und quantitative Simulation von Methan-Luft Vormischflammen mittels eines hydrodynamischen Modells, wobei inhomogenen Gemischzusammensetzungen berücksichtigt werden.

Das kürzlich entwickelte hydrodynamische Modell von Class ([Class2002]) wird beschrieben und für variable Gemischzusammensetzungen erweitert. Das Modell basiert auf einer Asymptotik für Flammen mit dünner Flammenstruktur. Es erlaubt die Beschreibung der Verbrennung auf hydrodynamischen Längenskalen, so dass die Flammenstruktur nicht aufgelöst werden muss, wodurch ein räumlicher Auflösungsgewinn von wenigstens einer Größenordnung für die Zeit sowie pro Raumdimension entsteht. Ein neues Zwei-Schichten Modell wird definiert, welches die Flammenstruktur in zwei unterschiedlich modellierte Schichten aufteilt, wobei die erste Schicht die Vorheizzone sowie die Reaktionszone und die zweite Schicht die CO -Oxidationszone umfasst. Die Genauigkeit des Gesamtmodells ist dadurch deutlich verbessert und der Gültigkeitsbereich in Richtung dickerer Flammenstrukturen erweitert.

Um quantitative Modellparameter zu ermitteln, werden eindimensionale Rechnungen mit detaillierter Chemie durchgeführt und ausgewertet. Die Abhängigkeit der Modellparameter von der Streckung und der Zusammensetzung werden untersucht, wobei besonderes Interesse der Streckungsabhängigkeit gilt. Diese erlaubt die Bewertung der Gültigkeitsgrenzen des Modells. Hierbei trägt das Zwei-Schichten Modell zu einer erheblichen Genauigkeitssteigerung bei.

Die hydrodynamische Grundgleichungen zur numerischen Umsetzung des hydrodynamischen Modells werden unter der Berücksichtigung variabler Rauchgasdichte und -temperaturen definiert. Zur Umsetzung werden geeignete numerische Methoden ausgewählt. Es wird eine modifizierte Fractional-Step-Methode für niedrige Mach-Zahlen definiert. Die räumliche Diskretisierung erfolgt mit Finiten-Differenzen und einem hochgenauen WENO-Verfahren, und die zeitliche mit einem TVD-Runge-Kutta-Verfahren. Das gleiche Verfahren wird auf die Flammengeschwindigkeitsbeziehung angewendet. Die Bewegung der Flammenfläche wird mit der Level-Set-Methode auf einem festen Gitter verfolgt. Sprungbedingungen werden durch Heaviside- und Dirac-Funktionen erfüllt. Der eigene Code wird durch einen Vergleich mit Testsbeispielen validiert. Bemerkenswert ist der geringe Rechenaufwand, welcher durch die explizite Lösung vier zusätzlicher Differentialgleichungen nur unwesentlich über dem Rechenaufwand einer nichtreaktiven Strömung liegt, bei der schon die implizite Lösung der Druckgleichung den Hauptaufwand darstellt.

Stationäre zweidimensionale Rechnungen einer Unterdruck-Bunsenflamme werden mit experimentellen Ergebnisse verglichen und zeigen eine gute quantitative Übereinstimmung. Erste Simulationen mit periodischen Störungen der Gemischzusammensetzung werden durchgeführt und anhand des Verlaufs des Massenstroms in Abhängigkeit von der instantanen Gemischzusammensetzung diskutiert. Mit zunehmender Frequenz der Störungen nimmt zunächst die Antwort der Flamme ab, um dann wieder anzusteigen.

Zusammenfassend wurde in der vorliegenden Arbeit eine numerische Methode zur Simulation inhomogener laminarer Vormischflammen hergeleitet, welche sich durch ihren geringen Rechenaufwand für mehrdimensionale praktische Untersuchungen der Flammendynamik bestens eignet.

Die im Abschnitt 5.1 vorgestellte Abweichungen der Flammenform zwischen den Ergebnissen von Simulation und Experiment zeigen im Randbereich den Bedarf, eine genauere Modellierung des Flammenverhaltens anzuwenden. Durch eine Modellierung des Wärmeverlusts an dem Brenner und ein Löschmodell, welches die Flammenränder definiert, kann ein besseres Randverhalten erzielt werden.

Der Code dient der weitergehenden Untersuchung des möglichen Resonanzverhaltens der Flamme für unterschiedliche Lewis-Zahlen ($Le < 1$ und $Le > 1$). Die Simulation von Lösch- und Zündphänomenen sollte künftig in einem hybriden Modell berücksichtigt werden. Das Modell muss hierzu durch das lokale Ein- und Ausschalten von detaillierter Chemie in Zonen außerhalb seiner Gültigkeitsgrenzen ergänzt werden. Eine Erweiterung in Richtung turbulenter Flammen ist ebenfalls geplant. Dabei sollen eine mittlere turbulente Flammenkontur und die entsprechende mittlere turbulente Flammengeschwindigkeit und Flammendicke berücksichtigt werden.

7 Nomenklatur

Es wird die Konvention eingeführt, dass Größen, die sich auf die Rauchgase beziehen, in Anlehnung an den englischen Begriff "burned", grundsätzlich mit dem tiefgestellten Index "b" gekennzeichnet werden. Entsprechend wird, in Anlehnung an "fresh" der Index "f" für die Brenngase eingeführt. Der Indizee "r" bezeichnet Größen der Reaktionszone. Dimensionsbehaftete Größen werden mit einer Wellenlinie \sim gekennzeichnet, um diese von den entsprechenden dimensionslosen Größen zu unterscheiden. Die hochgestellten Indizes "1" und " α " (kontravariante Tensorkomponenten) bezeichnen Richtungen normal bzw. tangential zur Flammenfläche.

Dimensionslose Kennzahlen und thermodynamische Koeffizienten

Pe	Peclet-Zahl
Ma	Mach-Zahl
Ze	Zeldovich-Zahl
Ze_f	effektive Zeldovich-Zahl
Pr	Prandtl-Zahl
Le	Lewis-Zahl
λ, Λ	Wärmeleitfähigkeitskoeffizient
κ	thermische Diffusivität/Temperaturleitfähigkeit
μ	dynamische Viskosität
D	Diffusionskoeffizient
C_p	Wärmekapazität bei konstantem Druck
T_a	Aktivierungstemperatur

Mathematische Operatoren

δ	Dirac-Delta-Funktion
H	Heavyside-Funktion
S	Signum Funktion
I	Einheitsmatrix
$\nabla_{\perp} (*)$	tangentiale Ableitung $\mathbf{n} \times \nabla (*) \times \mathbf{n}$
$\nabla (*)$	Gradient
$\nabla \cdot$	Divergenz

Sonstiges

x, X	Raumkoordinaten
r	Radius
\mathbf{l}_i	paralleles Vektorfeld
g^{ij}	metrischer Tensor
\sqrt{g}	Volumenelement
l_0	Dicke der Flamme
l	charakteristische Längenabmessung der Strömung
t	Zeit
ρ, R	Dichte
\mathbf{v}, \mathbf{V}	Strömungsgeschwindigkeit Vektor
\mathbf{u}	Geschwindigkeit der Flammenfläche
\mathbf{m}, \mathbf{M}	Massenstrom durch die Flamme
m	normaler Massenstrom durch die Flamme
y, Y	Konzentration
θ, T	Temperatur
h, H	Enthalpie
σ, Σ	Spannungstensor
X_r	Abstand der Reaktionszone zur Flammenfläche
X^*	Position der Flammenfläche
$X_{\pm\infty}$	Anfang/Ende der Flammenstruktur
c	Flammenkrümmung
χ	Flammenstreckung
S_F^0	adiabate Flammgeschwindigkeit
\dot{w}, W	Reaktionsterm
$I_R, I_\sigma, I_{XY}, I_H$	integrale Parameter des Flammenmodells
ϕ	Level-Set-Funktion
p, P	Druck

A Das bewegte Koordinatensystem

Das in der vereinheitlichten Theorie von [Class2002] benutzte Koordinatensystem wird so gewählt, dass sich eine möglichst einfache Behandlung der Gleichungen ergibt. Weiterhin sollen die gewonnenen Ergebnisse eine physikalischen Interpretation erlauben. In der Untersuchung wird ein infinitesimal kleines Element einer Unstetigkeitsfläche betrachtet. Dessen Entwicklung wird für eine infinitesimal kurze Zeitspanne verfolgt. Das verwendete Koordinatensystem soll nicht in numerischen Rechnungen eingesetzt werden und muss somit auch kein numerisches Gitter hoher Güte liefern. Dennoch kann sich die explizite Konstruktion des Koordinatensystems als nützlich erweisen, um Modellrechnungen mit physikalischen Meßwerten zu vergleichen. Es ist hierbei zu beachten, dass sich das Koordinatensystem bewegt während die Flamme fortschreitet. Die unten beschriebenen Konstruktionsschritte müssen somit für jeden betrachteten Zeitpunkt wiederholt werden.

Abbildung (54) zeigt die wesentlichen Schritte schematisch.

Als erstes, wird die Unstetigkeitsfläche als eine Oberfläche $x^1 = 0$ aufgefasst. Es wird angenommen, dass diese Fläche glatt sei und keine Singularitäten oder Überschneidungen besitze. Als nächstes wird eine Schar Fläche $x^1 = \text{const}$ generiert, so dass jede Fläche $x^1 = \text{const}$ einen konstanten minimalen Abstand zur Unstetigkeitsfläche $x^1 = 0$ aufweist.

Jetzt wird jeder Fläche $x^1 = \text{const}$ ein Wert zugewiesen, der dem vorzeichenbehafteten Abstand von der Unstetigkeitsfläche entspricht. Negative (positive) Werte bezeichnen Oberflächen im Brenngasgemisch (Rauchgasgemisch). Diese Vereinbarung stellt sicher, dass für die Komponente g^{11} des metrischen Tensors $g^{11} = 1$ gilt. Als nächster Schritt wird auf der Unstetigkeitsfläche ein beliebiges Koordinatensystem bestehend aus den Koordinatenlinien $x^2 = \text{const}$ und $x^3 = \text{const}$ gebildet. Dieses Koordinatensystem, das vollständig in der Fläche $x^1 = 0$ liegt, heisst auch intrinsisches Koordinatensystem. Wieder gelten keine Einschränkungen. Im betrachteten Gebiet dürfen lediglich keine singulären Punkte des intrinsischen Koordinatensystems vorliegen. Die Koordinatenpunkte auf der Unstetigkeitsfläche sollen sich jetzt entlang der Oberfläche bewegen. Wird die Entwicklung der Oberfläche über eine längere Zeit verfolgt, können sich starke Verformungen der Koordinatenlinien $x^2 = \text{const}$ und $x^3 = \text{const}$ ergeben. Dies stellt kein Problem dar als nur infinitesimal kurze Zeitspannen betrachtet werden. Sollte das Koordinatensystem in numerischen Rechnungen eingesetzt werden, müsste das Oberflächenkoordinatensystem immer wieder von neuem erzeugt werden, um zu starke Deformation des Koordinatengitters zu vermeiden.

Es kann eine beliebige Geschwindigkeit des intrinsischen Koordinatensystems, das heißt der Koordinatenlinien $x^2 = \text{const}$ und $x^3 = \text{const}$, in

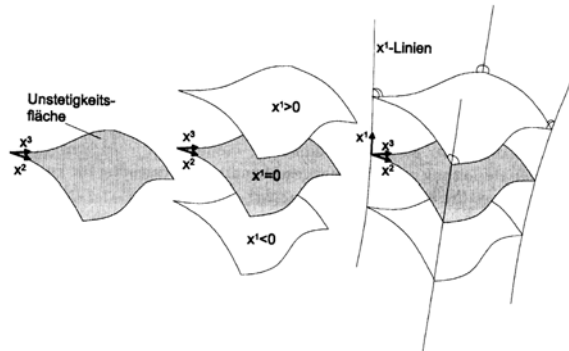


Abbildung 54: Schritte bei der Konstruktion des krummlinieigen : (Links) Auswahl der Unstetigkeitsfläche als x^1 -Koordinatenfläche und Konstruktion eines Oberflächenkoordinatensystems. (Mitte) Konstruktion weiterer x^1 -Koordinatenflächen mit konstantem Abstand zur Unstetigkeitsfläche. (Rechts) Konstruktion der x^1 -Koordinatenlinien.

der Unstetigkeitsfläche gewählt werden. Da asymptotische Methoden Anwendung finden, erfolgt dies für jede Ordnung der Untersuchung von Neuem. In der führenden Ordnung werden die Koordinatenlinien mit der Tangentialgeschwindigkeit der Strömung entlang der Fläche transportiert. Somit ist die Rate, mit der sich die Größe des von den Koordinatenlinien x^2 und x^3 aufgespannte Flächenelement ändert, gleich der Flammenstreckung χ . Diese wird an der Unstetigkeitsfläche gemessen.

Schließlich werden x^1 -Koordinatenlinien erzeugt. Diese stehen senkrecht auf allen Flächen mit $x^1 = \text{const.}$ Diese Operation ist eindeutig. Es besteht jetzt im dreidimensionalen Raum ein Koordinatensystem für dessen metrischen Tensor gilt $g^{11} = 1$ und $g^{12} = g^{13} = g^{21} = g^{31} = 0$. Dieses Koordinatensystem ist orthogonal bezüglich seiner Normalenrichtung.

Zur geeigneten Darstellung der vektoriellen Impulsgleichung wird ein sogenanntes paralleles Vektorfeld \mathbf{l}_i eingeführt. In raumfesten kartesischen Koordinaten besitzt dieses konstante Komponenten. Somit hat \mathbf{l}_i konstant Richtung und Betrag. Im Falle bewegter Koordinaten gilt dies für jeden beliebigen Zeitpunkt. Die Komponenten für \mathbf{l}_i sind hier zeitabhängig.

Dieser Anhang wurde der Vollständigkeit halber eingefügt und gekürzt aus [Class2002] entnommen.

B Entdimensionierung

Um die relative Bedeutung der einzelnen Terme in den Grundgleichungen abwägen zu können, werden die Gleichungen in eine dimensionslose Form überführt. Festgelegt wird eine Referenzlänge \tilde{l} , welche die Abmessungen des Strömungsproblems charakterisiert. (Bei der betrachteten Strömungskonfiguration wird der Durchmesser vom Brenner gewählt.) Als Referenzgeschwindigkeit wird die adiabate stoechiometrische laminare Flammengeschwindigkeit \tilde{S}_F^0 definiert. Die Temperatur \tilde{T}_f des unverbrannten Gemischs und die stoechiometrische Brennstoff-Konzentration $\tilde{Y}_{f,\text{stoech}}$ werden als Referenzgrößen für die Temperatur und die Konzentration benutzt. Entsprechend werden Werte des unverbrannten Gemischs als Referenzgrößen für die Dichte und die Transportkoeffizienten benutzt. Alle dimensionsbehaftete Größen werden mit einer Wellenlinie gekennzeichnet.

Die Normierte Größen sind hier zusammengefasst

$$\begin{aligned} R &= \frac{\tilde{\rho}}{\tilde{\rho}_f}; \mathbf{V} = \frac{\tilde{\mathbf{v}}}{\tilde{S}_F^0} \\ x &= \frac{\tilde{x}}{\tilde{l}}; X = \text{Pe} \frac{\tilde{x}}{\tilde{l}}; t = \frac{\tilde{S}_F^0}{\tilde{l}} \tilde{t} \\ Y &= \frac{\tilde{Y}}{\tilde{Y}_{f,\text{stoech}}}; T = \frac{\tilde{T}}{\tilde{T}_f} \\ P &= \frac{\tilde{p}}{\tilde{\rho}_f (\tilde{S}_F^0)^2}; \lambda = \frac{\tilde{\lambda}}{\tilde{\lambda}_f} \end{aligned}$$

und liefern für die dimensionsbehaftete Transportgleichungen, hier angegeben für den Fall des Ein-Schritt-Modells,

$$\frac{\partial \tilde{\rho} \tilde{\mathbf{v}}}{\partial \tilde{t}} + \nabla \cdot (\tilde{\rho} \tilde{\mathbf{v}} \otimes \tilde{\mathbf{v}}) = -\nabla \tilde{p} + \nabla \cdot \tilde{\sigma} \quad (174)$$

$$\frac{\partial \tilde{\rho}}{\partial \tilde{t}} + \nabla \cdot (\tilde{\rho} \tilde{\mathbf{v}}) = 0 \quad (175)$$

$$\frac{\partial \tilde{\rho} \tilde{Y}}{\partial \tilde{t}} + \nabla \cdot (\tilde{\rho} \tilde{\mathbf{v}} \tilde{Y}) = \nabla \cdot (\tilde{\rho} D_i^D \nabla \tilde{Y}) - \dot{w}_i \quad (176)$$

$$\frac{\partial \tilde{\rho} \tilde{T}}{\partial \tilde{t}} + \nabla \cdot (\tilde{\rho} \tilde{\mathbf{v}} \tilde{T}) = \nabla \cdot \left(\frac{\tilde{\lambda}}{\tilde{C}_p} \nabla \tilde{T} \right) + \frac{\Delta h_{f,i}^0}{\tilde{C}_p} \dot{w}_i \quad (177)$$

die folgende dimensionslose Form:

$$\frac{\partial R\mathbf{V}}{\partial t} + \nabla \cdot (R\mathbf{V} \otimes \mathbf{V}) = -\nabla P + \frac{1}{\text{Re}} \nabla \cdot \Sigma \quad (178)$$

$$\frac{\partial R}{\partial t} + \nabla \cdot (R\mathbf{V}) = 0 \quad (179)$$

$$\frac{\partial RY}{\partial t} + \nabla \cdot (R\mathbf{V}Y) = \nabla \cdot \left(\frac{\lambda}{\text{PeLe}} R\nabla Y \right) - \frac{1}{\tilde{Y}_{f,\text{stoech}}} W \quad (180)$$

$$\frac{\partial RT}{\partial t} + \nabla \cdot (R\mathbf{V}T) = \nabla \cdot \left(\frac{\lambda}{\text{Pe}} \nabla T \right) + \frac{\Delta h_{f,i}^0}{\tilde{T}_f \tilde{C}_p} W \quad (181)$$

wobei

$$\Sigma = \mu \left(\nabla \mathbf{V} + \nabla \mathbf{V}^T - \frac{2}{3} I \nabla \cdot \mathbf{V} \right) \quad (182)$$

$$W = \frac{\tilde{l}}{\tilde{\rho}_f \tilde{S}_F^0} \dot{w}_i; \quad \text{Re} = \frac{\tilde{\rho}_f \tilde{l} \tilde{S}_F}{\tilde{\mu}_f} \quad (183)$$

$$\text{Pe} = \frac{\tilde{l}}{\tilde{l}_0} = \tilde{l} \frac{\tilde{\rho}_f \tilde{c}_{pf} \tilde{S}_F^0}{\tilde{\lambda}_f}; \quad \text{Le} = \frac{\tilde{\lambda}}{D \tilde{\rho}_f \tilde{C}_{pf}} \quad (184)$$

$$T_b - T_f = \frac{\Delta h_{f,i}^0}{\tilde{T}_f \tilde{C}_p}; \quad \mu = \frac{\tilde{\mu}}{\tilde{\mu}_f}. \quad (185)$$

Zwischen den dimensionslosen Kennzahlen Re, Pe, und $\text{Pr} = \frac{\tilde{\mu}_f \tilde{c}_{pf}}{\tilde{\lambda}_f}$ gilt $\frac{1}{\text{Re}} = \frac{\text{Pr}}{\text{Pe}}$.

Wird die Reaktionsrate durch eine Kombination der Energie- und Konzentrationsgleichung $\left(\frac{(181)}{T_b - T_f} + \tilde{Y}_{f,\text{stoech}}(180) \right) / \left(1 - \frac{1}{\text{Le}} \right)$ eliminiert, ergibt sich eine Transport-Gleichung ohne Reaktionsterm für die Enthalpie H :

$$\frac{\partial (RH)}{\partial t} + \nabla \cdot (R\mathbf{V}H) = \frac{1}{\text{Pe}} \nabla \cdot \left(\lambda R \nabla \left(H - \tilde{Y}_{f,\text{stoech}} Y \right) \right) \quad (186)$$

$$H = \frac{1}{1 - \text{Le}^{-1}} \left(\frac{T}{T_b - T_f} + \tilde{Y}_{f,\text{stoech}} Y \right) \quad (187)$$

Die Gleichung (186) gilt für jeden Ausdruck $H' = H + A$, mit $A = \text{const.}$ Die Enthalpie ist schließlich definiert mit:

$$H = \frac{1}{1 - \text{Le}^{-1}} \left(\frac{T - T_f}{T_b - T_f} + \tilde{Y}_{f,\text{stoech}} (Y - 1) \right). \quad (188)$$

C Streckung

Die Flammenstreckung χ (in english "flame stretch rate") ist definiert als die relative zeitliche Änderung der Größe eines Flächenelements A der Flamme:

$$\chi = \frac{1}{A} \frac{\partial A}{\partial t}. \quad (189)$$

Aus der Definition (189) wurden mehrere handhabbare Ausdrücke für die Streckung hergeleitet. In der Arbeit von Chung und Law ([Chung1984]) wurde die Streckung in zwei Terme zerlegt, welche zwei unterschiedliche physikalische Effekte beschreiben:

$$\chi = \nabla \cdot \mathbf{v}_t - u_n \nabla \cdot \mathbf{n}, \quad (190)$$

wobei \mathbf{n} für den Einheitsvektor normal zur Flamme in der Richtung vom Rauchgas, \mathbf{v}_t für die Strömungsgeschwindigkeit tangential zur Flamme, und u_n für die Ausbreitungsgeschwindigkeit der Flamme stehen.

Der erste Term stellt den Effekt einer unregelmäßigen Strömung entlang der Flammenfläche dar (in english "strain"). Ein Beispiel für eine Flamme, welche nur "strain"-Effekte spürt, ist eine Stagnationsflamme. Der zweite Term stellt den Einfluss von der Flammenstreckung durch die zeitliche Änderung der Krümmung der Flammenfläche dar. Eine expandierende sphärische Flamme ist nur von diesem zweiten Effekt betroffen.

Eine Flamme wird nicht gestreckt wenn die Flammenfront stationär bleibt ($u_n = 0$), und die Strömung normal zur Flamme gerichtet ist, wie im Fall einer stationären sphärischen Flamme, oder einer ebenen Flamme mit einem gleichförmigen Strömungsfeld entlang der Flammenfläche. Diese Möglichkeiten sind in Abbildung (55) zusammengefasst.

Die praktische Berechnung der Flammenstreckung stellt eine komplexe Aufgabe dar, da sich schnelle Änderungen der Variablen innerhalb der Flammenstruktur ergeben.

Die Berechnung der Streckung im INSFLA-Code basiert auf der Grenzschichtnäherung für stationäre gestreckte Flamme. Dabei werden die Erhaltungsgleichungen in zwei Raumkoordinaten ((z, x) oder (z, r) je nach Geometrie) auf eine Raumdimension reduziert. Die Grenzschicht wird definiert als die Umgebung des Staupunkts in positiver und negativer z -Richtung, wo sich die betrachteten Eigenschaften der reagierenden Strömung drastisch ändern. Dagegen sind alle Eigenschaften praktisch konstant in weiter außen liegenden Bereichen. Außerdem müssen Variationen (außer der radialen Geschwindigkeit) in r bzw. x -Richtung klein sein. Unter diesen Bedingungen lassen sich alle auftretenden tangential zur Flamme Ableitungen der Temperatur, der

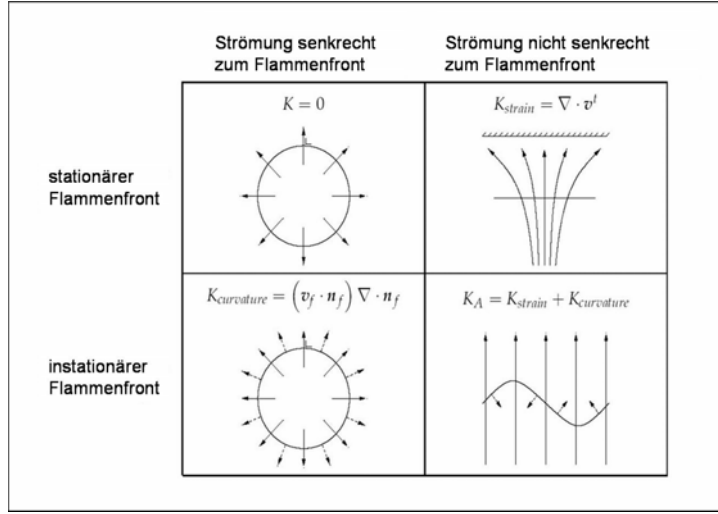


Abbildung 55: Übersicht über die verschiedenen Effekte der Streckung auf die Flammenfront. Die durchgezogene Linie stellt die Flammenfront dar. Die durchgezogenen und gestrichelten Pfeile stellen die Geschwindigkeit des Gases und der Flammenfront dar.

Massenbrüche und der Geschwindigkeitskomponente v_z eliminieren. Daraus folgt der Ansatz einer linearen Abhängigkeit von r für v_r :

$$v_r(z, r) = a r f'(z), \quad (191)$$

$$\frac{\partial v_r}{\partial r} = a \quad (192)$$

wobei f' am kalten Rand gleich Eins gesetzt wird. Es ergibt sich der Ausdruck der Streckung für den stationären Fall

$$\chi = \nabla \cdot \mathbf{v}_t = \frac{\partial v_r}{\partial r} = a. \quad (193)$$

Nach [Williams1985] kann der tangentielle Druckgradient an den Rändern im stationären Fall in Abhängigkeit von der Geschwindigkeitskomponente v_r formuliert werden. Auf der kalten Seite gilt

$$\left(\frac{\partial P}{\partial r} \right)_k = -\rho_k v_{r,k} \left(\frac{\partial v_r}{\partial r} \right)_k = -r a^2 \rho_k. \quad (194)$$

Wird zusätzlich gemäß der Grenzschichtnäherung angenommen dass der Druckgradient senkrecht zur Flamme verschwindet ($\frac{\partial P}{\partial z} = 0$), ergibt sich:

$$J = \frac{1}{r} \frac{\partial P}{\partial r} = -a^2 \rho_k = const, \quad (195)$$

so dass die Streckung durch den sogenannten tangentialen Druckgradient J gegeben ist:

$$\chi = a = \sqrt{-\frac{J}{\rho_k}}. \quad (196)$$

Diese Formulierung ist für die Simulation zeitabhängiger Streckung ungeeignet.

Wir betrachten jetzt zwei- und dreidimensionale Fälle. Die Streckung stellt einen wichtigen Parameter in der Flamengeschwindigkeitsbeziehung dar, dessen Berechnung im Level-Set-Code erfolgt. In [Class2002] wurde eine Methode vorgeschlagen zur Berechnung der Flammenstreckung mittels eines durch Temperaturisoflächen definierten Koordinatensystems. Statt der Temperatur können Isoflächen der Level-Set Funktion zur Bestimmung des Koordinatensystems gewählt werden. Die Formel für die Flammenstreckung lautet dann:

$$\chi = \frac{1}{|\nabla\phi|} \nabla \cdot (|\nabla\phi| \mathbf{u}), \quad (197)$$

wobei \mathbf{u} die Geschwindigkeit des Koordinatensystems darstellt: $\mathbf{u} = \mathbf{n} \times \mathbf{V} \times \mathbf{n} - \frac{1}{|\nabla\phi|} \frac{\partial\phi}{\partial t} \mathbf{n}$, mit \mathbf{n} die Normale zur Flammenfläche und \mathbf{V} die Strömungsgeschwindigkeit. Diese benutzt nur Größen, welche über die Flamme hinweg nahezu konstant sind und liefert robuste Ergebnisse.

Die verwendete Streckung, sowohl in der Theorie als auch im Level-Set-Code, ist eine normierte Streckung. Zum Vergleich mit der physikalischen Werte aus den detaillierten chemischen Rechnungen muss die folgende Beziehung angewendet werden:

$$\chi = \frac{\tilde{l}}{\tilde{S}_F^0} \tilde{\chi}. \quad (198)$$

Literatur

- [Class2002] CLASS, A. G., Ein vereinheitlichtes Modell für Vormischflammen als gasdynamische Diskontinuität. *Forschungszentrum Karlsruhe, Wissenschaftliche Berichte FZKA 6807*, 2002
- [Class2003] CLASS, A. G., MATKOWSKY, B. J. & KLIMENKO, A. Y. Stability of planar flames as gasdynamic discontinuities. *J. Fluid. Mech.* **491** (2003), 51-63.
- [Darrieus1938] DARRIEUS, G. Propagation d'un front de flamme. Vorgestellt auf : *Le Congrès de Mécanique Appliquée, Paris 1938 und 1945*.
- [Landau1944] LANDAU, L. D. On the theory of slow combustion. *Acta Physiocochemic URSS* **19** (1944), 77-85.
- [Klimenko2000a] KLIMENKO, A. Y. & CLASS, A. G. On premixed flames as gasdynamic discontinuities : a simple approach to derive their propagation speed. *Combust. Sci. and Tech.* **160** (2000), 25-37.
- [Klimenko2000b] KLIMENKO, A. Y. & CLASS, A. G. Propagation speed of stretched premixed flames with multi-step reaction mechanisms. *FZKA 6473. Forschungszentrum Karlsruhe, Germany, 2000*.
- [Klimenko2001] KLIMENKO, A. Y. & CLASS, A. G. & O'GORMAN, S. Near-equidiffusion disturbed premixed flames with wider reaction zones. *Flow, Turbulence and Combustion* **69** (2001), 95-122.
- [Markstein1951] MARKSTEIN, G. H. Experimental and theoretical studies of flame front stability. *J. Aero. Sci.* **18** (1951), 199-209.
- [Markstein1964] MARKSTEIN, G. H. Nonsteady flame propagation. *New York : Pergamon Press, ed. 1964*.
- [Matalon1982] MATALON, M. & MATKOWSKY, B. J. Flames as gasdynamic discontinuities. *J. Fluid. Mech.* **124** (1982), 239-259.

- [Matalon1984] MATALON, M. & MATKOWSKY, B. J. On the stability of plane and curved flames. *SIAM J. Appl. Math.*, **44** (1984) 327-343.
- [Matkowsky1979] MATKOWSKY, B. J. & SIVASHINSKY, G. I. An asymptotic derivation of two models in flame theory associated with the constant density approximation. *SIAM J. Appl. Math.*, **37** (1979) 686-699.
- [Sivashinsky1976] SIVASHINSKY, G. I. On a distorted flame front as a hydrodynamic discontinuity. *Acta Astronautica* **3** (1976), 889-918.
- [Klimenko2002] KLIMENKO, A. Y. & CLASS, A. G. Propagation of nonstationary curved and stretched premixed flames with multistep reaction mechanisms. *Combust. Sci. and Tech.* **174** (2002), 1-43.
- [Maas1992] MAAS, U. & WARNATZ, J. Technische Verbrennung. *Springer Lehrbuch* 1992.
- [Williams1985] WILLIAMS, F. A. Combustion theory. *Combustion Science and Engineering Series* 1985.
- [Kuo1986] KUO, K. K. Principles of combustion. *Wiley-Interscience* 1986.
- [Gerlinger2005] GERLINGER, P. Numerische Verbrennungssimulation. *Springer Lehrbuch* 2005.
- [Abdel-Gayed1984a] ABDEL-GAYED, R. G. & AL-KHISHALI, K. J. & BRADLEY, D. Turbulent burning velocity and flame straining in explosions. *Proc. Roy. Soc. of London A* **A391** (1984), 393-414.
- [Abdel-Gayed1984b] ABDEL-GAYED, R. G. & BRADLEY, D. & HAMID, M. N. & LAWES, M. Lewis number effects on turbulent burning velocity. *Twentieth Symposium (Int.) on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh, PA* 1984, pp. 505-512.
- [Maas1988] MAAS, U. Mathematische Modellierung instationärer Verbrennungsprozesse unter Verwendung detaillierter Reaktionsmechanismen. *Inaugural-Dissertation, Universität Heidelberg* 1988.

- [Stahl1989] STAHL, G. Rechnerische Simulation stationärer und instationärer gestreckter Methan- und Propan-Luft Flammen unter Verwendung detaillierter Reaktionsmechanismen. *Inaugural-Dissertation, Universität Heidelberg* 1989.
- [Stahl1991] STAHL, G. & WARNATZ, J. Numerical investigation of Time-Dependent Properties and Extinction of Strained Methane- and Propane-Air Flamelets. *Combustion and Flame* **85** (1991), 285-299.
- [Koenig2005] KOENIG, K. Investigation of the dynamics of periodically perturbed counterflow flames. *Proceedings of the European Combustion Meeting: Louvain-la-Neuve, Belgium* April 3-6 2005, ed.: Véronique Dias Belgian Section of the Combustion Institute.
- [Gerald1994] GERALD, C. F. & WEATHLEY, P. O. Applied Numerical Analysis. *Addison-Wesley* 1994.
- [Garcia1994] GARCIA, A. L. Numerical methods for physics. *Prentice-Hall* 1994.
- [Perot1992] PEROT, J. B. An Analysis of the Fractional Step Method. *Journal of Computational Physics* **108** (1992), 51-58.
- [Johnston2004] JOHNSTON, H. & LIU J.-G. Accurate, stable and efficient Navier-Stokes solvers based on explicit treatment of the pressure term. *Journal of Computational Physics* **199** (2004), 221-259.
- [Guermont1998] GUERMOND, J.-L. & QUARTAPELLE, L. On stability and convergence of projection methods based on pressure poisson equation. *Int. J. Num. Meth. Fluids* **26** (1998), 1039-1053.
- [Brown2000] BROWN, D. L. & CORTEZ, R. & MINION, M. L. Accurate Projection Methods for the Incompressible Navier-Stokes Equations. *Journal of Computational Physics* **168** (2000), 464-499.

- [Petersson2001] PETERSSON, N. A. Stability of Pressure Boundary Conditions for Stokes and Navier-Stokes Equations. *Journal of Computational Physics* **172** (2001), 40-70.
- [Kim1984] KIM, J. & MOIN, P. Application of a Fractional-Step Method to Incompressible Navier-Stokes Equations. *Journal of Computational Physics* **59** (1984), 308-323.
- [Chorin1968] CHORIN, A. J. Numerical solution of the Navier-Stokes equations. *Math. Comput.* **22** (1968), 745-762.
- [Shu1987] SHU, C.-W. & OSHER, S. Efficient Implementation of Essentially Non-oscillatory Shock-Capturing Schemes. *Journal of Computational Physics* **77** (1987), 439-471.
- [Harten1983] HARTEN, A., High Resolution Schemes for Hyperbolic Conservative Laws, *Journal of Computational Physics* **49** (1983), 357-385.
- [LIU1994] LIU, X.-D. & OSHER, S. & CHAN, T. Weighted Essentially Non-oscillatory Schemes. *Journal of Computational Physics* **115** (1994), 200-212.
- [Jiang1996] JIANG, G.-S. & SHU, C.-W. Efficient Implementation of Weighted ENO Schemes. *Journal of Computational Physics* **126** (1996), 202-228.
- [Jiang2000] JIANG, G.-S. & PENG, D. Weighted ENO Schemes for Hamilton-Jacobi Equations. *SIAM Journal on Scientific Computing* **21** (2000), 2126-2143.
- [Harten1987] HARTEN, A. & ENGQUIST, B. & OSHER, S. & CHAKRAVARTHY, S. Uniformly high-order accurate essentially non-oscillatory schemes III. *Journal of Computational Physics* **71** (1987), 231-303.
- [Sethian1996] SETHIAN, J. A. Level Set Methods. Cambridge, UY : *Cambridge University Press* 1996.
- [Chen1997] CHEN, S. & MERRIMAN, B. & OSHER, S. & SMERKAS, P. A Simple Level Set Method for Solving Stefan Problems. *Journal of Computational Physics* **135** (1997), 8-29.

- [Chang1995] CHANG, Y. C. & HOU, T. Y. & MERRIMAN, B. & OSHER, S. A Level Set Formulation of Eulerian Interface Capturing Methods of Incompressible Fluid Flows. *Journal of Computational Physics* **124** (1995), 449-464.
- [Sussman1994] SUSSMAN, M. & SMEREKA, P. & OSHER, S. A Level Set Approach for Computing Solutions to Incompressible Two-Phase Flow. *Journal of Computational Physics* **114** (1994), 146-159.
- [Sethian2003] SETHIAN, J. A. & SMEREKA, P. Level Set Methods for Fluid Interfaces. *Annu. Rev. Fluid Mech.* **2003** **35** (2003), 341-372.
- [Zhang1998] ZHANG, H. & ZHENG, L. L. & PRASAD, V. & HOU, T. Y. A curvilinear level set formulation for highly deformable free surface problems with application to solidification. *Num. Heat Transfer, Part B* **34** (1998), 1-20.
- [Qian1998] QIAN, J. & TRYGGVASON, G. & LAW, C. K. A Front Tracking Method for the Motion of Premixed Flames. *Journal of Computational Physics* **144** (1998), 52-69.
- [Najm1998] NAJM, H. N. & WYCKOFF, P. S. & KNIO, O. M. A Semi-Implicit Numerical Scheme for Reacting Flow I. Stiff Chemistry. *Journal of Computational Physics* **143** (1998), 381-402.
- [Knio1999] NAJM, H. N. & WYCKOFF, P. S. & KNIO, O. M. A Semi-Implicit Numerical Scheme for Reacting Flow II. Stiff, Operator-Split Formulation. *Journal of Computational Physics* **154** (1998), 428-467.
- [Groot2003] GROOT, G. R. A. Modelling of Propagating Spherical and Cylindrical Premixed Flames. *PhD. Thesis, Eindhoven University of Technology* 2003.
- [Bechtold1999] BECHTOLD, J. K. & MATALON, M. Effects on Stoichiometry on Stretched Premixed Flames. *Combustion and Flame* **119** (1999), 217-232.
- [Groot2002] GROOT, G. R. A. & VAN OIJEN, J. A. & DE GOEY, L. P. H. & SESHADRI, K. & PETERS, N. The effects of strain and curvature on the mass burning rate of

premixed laminar flames. *Combust. Theory Modelling* **6** (2002), 675-695.

[Ax2006] AX, H. Private Mitteilung, 2006.

[Munz1996] MUNZ, C.D., ROLLER, S., GERATZ, K.J. & KLEIN, R. The Multiple Pressure Variables (MPV) Method for Weakly Compressible Fluids, *Proc. of GAMM 96 Annual Meeting*, Praha, CZ, Mai 27-31, 1996

[Chung1984] CHUNG, S.H. & LAW, C.K. An invariant derivation of flame stretch. *Combust. Flames* **55** (1984), 123-125.