

**Die Anwendung eines probabilistischen Partikelmodells
für die Modellierung der turbulenten Verbrennung in
Brennkammern**

Von der Fakultät Luft- und Raumfahrttechnik und Geodäsie der Universität Stuttgart zur
Erlangung der Würde eines Doktor-Ingenieurs (Dr.-Ing.) genehmigte Abhandlung

Vorgelegt von

Thomas Aumeier

aus Räckelwitz

Hauptberichter: Prof. Dr.-Ing. M. Aigner

Mitberichter: Prof. Dr. A. Kronenburg

Tag der mündlichen Prüfung: 10. Dezember 2010

Institut für Verbrennungstechnik der Luft- und Raumfahrt
der Universität Stuttgart

2011

Danksagung

Diese Promotion verdankt ihre Fertigstellung vor allem einigen, wenigen Menschen, denen diese Danksagung gewidmet ist:

Danken möchte ich Herrn Prof. Dr.-Ing. Manfred Aigner, der mir die Möglichkeit zu diesem Wagnis gab und Herrn Dr.-Ing. habil. Berthold Noll, der für Fragen aller Art jederzeit zur Verfügung stand. Ebenso dankbar bin ich Herrn Prof. Dr. Andreas Kronenburg für das Prüfen und Begutachten der Arbeit.

Im DLR, insbesondere im Institut für Verbrennungstechnik, vor allem in der Abteilung Numerische Simulation in Köln bedanke ich mich für den regen, fachlichen Diskurs bei Dr. Harald Schütz und meinen Kollegen, Michael Rachner, Dr. Johannes Koopman sowie Guido Schmitz.

Meiner lieben Frau Karin bin ich sehr dankbar für die große Geduld mich so lang teilen zu müssen und die stete Motivation zu wissen, wofür.

Zu guter Letzt möchte ich Tom E. Hausmaier für seine Hartnäckigkeit und Energie danken, die er in das Projekt investiert hat.

Bonn, den 28.06.2011

Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis.....	9
Nomenklaturverzeichnis.....	13
Zusammenfassung.....	17
Abstract.....	19
1 Einführung.....	21
1.1 Ziel der Arbeit.....	21
1.2 Lagrangesche Partikelverfahren.....	22
1.3 Stand der Arbeiten/Motivation.....	24
2 Die Bilanzgleichungen reagierender Strömungen.....	27
2.1 Beschreibung physikalischer Systeme in finiten Volumen.....	27
2.1.1 Die Kontinuumstheorie.....	27
2.1.2 Physikalische Bezugssysteme.....	28
2.1.3 Das Transporttheorem und die ortsfesten Bilanzgleichungen.....	29
2.1.4 Die substantielle Ableitung.....	30
2.2 Formulierung der allgemeinen Bilanzgleichungen.....	30
2.2.1 Massenbilanz (Kontinuitätsgleichung).....	30
2.2.2 Massenbilanz der Einzelkomponenten.....	31
2.2.3 Impulsbilanz.....	31
2.2.4 Energiebilanz.....	31
2.2.5 Die Bilanzgleichungen mit Hilfe der substantiellen Ableitung.....	32
2.3 Die phänomenologischen Gleichungen.....	33
2.3.1 Newtonscher Spannungsansatz.....	34
2.3.2 Ficksches Diffusionsgesetz.....	34
2.3.3 Fouriersches Wärmeleitungsgesetz.....	34
2.3.4 Transportkoeffizienten und thermodynamische Beziehungen.....	34
2.4 Chemische Reaktionen.....	36
3 Turbulenz und gemittelte Erhaltungsgleichungen.....	39
3.1 Laminare und turbulente Strömungen.....	39
3.2 Charakterisierung der Turbulenz.....	40
3.3 Numerische Simulation der Turbulenz.....	42
3.4 Statistische Modellierung turbulenter Strömungen.....	43
3.4.1 Reynolds-Zerlegung.....	43
3.4.2 Favre-Zerlegung.....	43
3.4.3 Mittelwerte.....	43
3.5 Mittelung der Gleichungen.....	44
3.6 Turbulenzmodellierung.....	45

3.6.1 Reynolds-Spannungen.....	46
3.6.2 Komponentenflüsse.....	48
3.6.3 Energieflüsse.....	49
3.6.4 Turbulente Transportkoeffizienten.....	49
3.6.5 Mittlerer chemischer Quellterm.....	49
4 Turbulenz-Chemie Interaktionen.....	51
4.1 Spezifizierung von Verbrennungsprozessen.....	51
4.1.1 Die turbulente Verbrennung.....	51
4.1.2 Diffusionsflammen.....	52
4.1.3 Vormischflammen.....	55
4.1.4 Partielle Vormischflammen.....	58
4.2 Modelle zur Berechnung des chemischen Quellterms.....	59
4.2.1 Die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion.....	59
4.2.2 Presumed - PDF.....	60
4.2.3 Modelle mit Presumed-PDF-Ansatz.....	61
4.2.4 Der Presumed PDF-Ansatz für Diffusionsflammen.....	66
4.2.5 Die PDF Transportgleichung.....	69
4.3 Partikelmodell der PDF-Transportgleichung.....	73
4.3.1 Grundlage diskreter Partikelverfahren.....	74
4.3.2 Lagrangesche Partikelverfahren zur Lösung der PDF.....	75
4.3.3 Modellierung der Teilprozesse der PDF-Partikelgleichung.....	77
4.3.4 Mischungsmodelle auf Partikelebene.....	78
4.4 Lagrangesche Ansätze für den chemischen Quellterm.....	79
4.4.1 Der CRE Ansatz.....	80
4.4.2 Das IEM Modell.....	80
4.4.3 Das ESCIMO Modell.....	81
4.4.4 Das IEM Modell von Borghi.....	83
4.4.5 Das PEUL Modell von Gilbank.....	86
4.4.6 Das PEUL+ Modell von Cailleau.....	89
4.4.7 Potential und Einschränkungen des PEUL+ Modells.....	91
5 Das PEUL+ Modell bei instationärer Kopplung.....	93
5.1 Besonderheiten der instationären Kopplung.....	93
5.2 Das Partikelmodell.....	95
5.2.1 Die Lagrangeschen Gleichungen für diskontinuierliche Systeme.....	95
5.2.2 Energiebilanz.....	96
5.2.3 Stoffbilanz.....	98
5.2.4 Impulsbilanz.....	98
5.2.5 Ableitung der Partikelgleichungen.....	98
5.3 Partikelrandbedingungen und Trajektorienberechnung.....	101
5.3.1 Partikelstartbedingungen.....	101
5.3.2 Partikeldichte.....	102
5.3.3 Partikeltrajektorien.....	103
5.3.4 Das Dispersionsmodell.....	103
5.3.5 Modifiziertes Dispersionsmodell.....	106
5.3.6 Dispersionsmodell unter Berücksichtigung der Partikeldichte.....	106
5.3.7 Partikellokalisierung.....	110
5.3.8 Speichermanagement.....	110
5.4 Die Lösung der Lagrangeschen Partikelgleichungen.....	111

5.4.1 Die Berechnung der Mischung.....	111
5.4.2 Alternative Bestimmung der Austauschrate.....	114
5.4.3 Die Berechnung des chemischen Quellterms.....	115
5.5 Der Strömungslöser.....	116
5.6 Kopplung von Partikel- und Strömungslöser.....	117
5.6.1 Programmaufbau.....	117
5.6.2 Die Funktion „Define_Adjust“.....	118
5.6.3 Die Funktion „Define_Source“.....	119
6 Anwendungsbeispiele.....	121
6.1 Die turbulente CH ₄ /H ₂ /N ₂ - Diffusionsflamme.....	121
6.1.1 Experimenteller Aufbau.....	121
6.1.2 Betriebsbedingungen und numerische Simulation.....	122
6.1.3 Vorgehensweise für die Berechnung.....	123
6.1.4 Ergebnisse der numerischen Simulation.....	124
6.2 Die FLOX®-Verbrennung.....	132
6.2.1 Das Konzept der FLOX®-Verbrennung.....	132
6.2.2 Experimenteller Aufbau.....	132
6.2.3 Betriebsbedingungen und numerische Simulation.....	134
6.2.4 Vorgehensweise für die Berechnung.....	135
6.2.5 Ergebnisse der numerischen Simulation.....	135
6.3 Verbrennung von Synthesegas.....	143
6.3.1 Die Synthesegasverbrennung.....	143
6.3.2 Experimenteller Aufbau.....	143
6.3.3 Betriebsbedingungen und numerische Simulation.....	144
6.3.4 Vorgehensweise für die Berechnung.....	145
6.3.5 Ergebnisse der numerischen Simulation.....	145
7 Zusammenfassung und Ausblick.....	151

Abbildungsverzeichnis

Abbildung 3.1: Chemische und physikalische Zeitskalen in einer turbulenten Strömung ([Por03]).....	38
Abbildung 3.2: Auflösung von Zeitskalen in der numerischen Simulation.....	42
Abbildung 3.3: Meßwerte einer physikalischen Größe in einer turbulenten Strömung.....	43
Abbildung 4.1: Regime in Diffusionsflammen als Funktion der Da-Zahl Da und der turbulenten Re- Zahl Re_t [PV01].....	55
Abbildung 4.2: Borghi Diagramm a) und modifiziertes Borghi-Diagramm b) [PV01].....	57
Abbildung 4.3: Trajektorien im Zustandsraum mit Hilfe des IEM Modells, links: homogene Turbulenz, rechts: nicht-homogene Turbulenz.....	84
Abbildung 4.4: Vorgehensweise bei stationärer Kopplung von Strömungslöser und Partikelmodell.....	89
Abbildung 4.5: PDF für die charakteristische Austauschzeit.....	90
Abbildung 5.1: 1-D Rechengitter.....	93
Abbildung 5.2: Vorgehensweise bei instationärer Kopplung von Strömungslöser und Partikelmodell.....	94
Abbildung 5.3: Partikelmodell des abgeschlossenen Systems.....	99
Abbildung 5.4: Partikelmodell in unendlich ausgedehnter Umgebung.....	100
Abbildung 5.5: Geschwindigkeitsfunktion im kontinuierlichen (links) und diskontinuierlichen (rechts) Random Walk Modell.....	104
Abbildung 5.6: Feld des Zufallsvektors RNDM und das inkrementenweise Abgreifen einer neuen Zufallszahl.....	105
Abbildung 5.7: Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung sowie zugehörige Summenhäufigkeitsverteilung.....	107
Abbildung 5.8: Zusammensetzung des Geschwindigkeitsvektors am Partikel.....	107
Abbildung 5.9: Partikeltrajektorien mit a) Dispersionsmodell und b) mit modifiziertem Dispersionsmodell.....	109
Abbildung 5.10: Partikelbehandlung an den Zellflächen.....	110
Abbildung 5.11: Darstellung des Übertragungsverhaltens eines Systems.....	112

Abbildung 5.12: Darstellung des Übertragungsverhaltens bei unterschiedlichen Zeitkonstanten τ_{iem}	113
Abbildung 5.13: Organisation der Programmstruktur von CFD- und Partikellöser.....	117
Abbildung 6.1: Schematische Darstellung des Diffusionsbrenners.....	121
Abbildung 6.2: Anordnung und Abmessung des Rechennetzes für die Diffusionsflamme. .	123
Abbildung 6.3: Vergleich gemessener und berechneter Axialgeschwindigkeiten in unterschiedlichen Höhen über dem Brenner mit k- ω sowie k- ϵ Turbulenzmodell.....	125
Abbildung 6.4: Mittlere Temperatur- und Speziesverteilung sowie deren Maximalwerte in der Diffusionsflamme mit PEUL+ - Modell, vertikale und horizontale Längen in mm.....	125
Abbildung 6.5: Verläufe berechneter Speziesmassenbrüche in verschiedenen Höhen über dem Brenner.....	126
Abbildung 6.6: Gemessene und mit PEUL.+ berechnete Temperaturverläufe bei $x/d = 5, 20$ und 60	127
Abbildung 6.7: Gemessene und mit PEUL+ berechnete Speziesmassenbrüche bei $x/d = 5, 20$ und 60	128
Abbildung 6.8: RMS-Werte der Temperatur in verschiedenen Höhen über dem Brenner	129
Abbildung 6.9: RMS-Werte des OH Massenanteils in verschiedenen Höhen über dem Brenner.....	129
Abbildung 6.10: RMS-Werte des CH ₄ Massenanteils in verschiedenen Höhen über dem Brenner.....	130
Abbildung 6.11: PDF der Temperatur, OH- und H ₂ O Massenanteile in Punkt A von Abb. 6.4.....	130
Abbildung 6.12: PDF der Temperatur, OH- und H ₂ O Massenanteile in Punkt C von Abb.6.4.....	131
Abbildung 6.13: PDF der Temperatur, OH- und H ₂ O Massenanteile in Punkt B von Abb.6.4.....	132
Abbildung 6.14: Schnitt durch Brenner und Brennkammer (links), Querschnitt des Brenners (rechts).....	133
Abbildung 6.15: Darstellung der Mischung im FLOX [®] Brenner.....	133
Abbildung 6.16: Axiales Geschwindigkeitsfeld mit Stromlinien im FLOX [®] Brenner.....	133
Abbildung 6.17: Ausgewählte Trajektorien durch Brenner und Brennkammer.....	135

Abbildung 6.18: Verteilungsfunktion und Summenhäufigkeit der Verweilzeiten im FLOX [®] - Brenner für 20.000 gestartete Partikel.....	136
Abbildung 6.19: Mittlere Temperaturverteilung in der Brennkammer mit PEUL+-Model.....	136
Abbildung 6.20: Mittlerer OH Molanteil in der Brennkammer mit PEUL+-Modell.....	137
Abbildung 6.21: Mittlerer CO Molanteil in der Brennkammer mit PEUL+-Modell.....	137
Abbildung 6.22: Mittlerer NO Molanteil in der Brennkammer mit PEUL+-Modell.....	138
Abbildung 6.23: RMS-Werte der Temperatur, NO _x und N ₂ O Molanteile in der Brennkammer.....	139
Abbildung 6.24: PDF der Temperatur und des OH Massenanteils in Punkt A von Abb. 6.23 der FLOX [®] -Brennkammer.....	139
Abbildung 6.25: PDF der Temperatur und des OH Massenanteils in Punkt B von Abb. 6.23 der FLOX [®] -Brennkammer.....	140
Abbildung 6.26: PDF der NO und NO ₂ Massenanteile in Punkt B von Abb. 6.23 der FLOX [®] - Brennkammer.....	141
Abbildung 6.27: Scatterplots der berechneten Temperatur, CO- und OH Massenanteile über den nach Bilger definierten Mischungsbruch aufgetragen.....	142
Abbildung 6.28: Schnitt durch Brenner und Brennkammer (links), Querschnitt des Brenners (rechts).....	143
Abbildung 6.29: Fotografische Aufnahme des Brenners bei einer Leistung von 20 kW mit einer Syngas-Methan Brennstoffmischung (M. Tsurikov, DLR, Nov. 2004).....	144
Abbildung 6.30: Axiale und radiale Geschwindigkeitsprofile aus experimentellen Untersuchungen (gestrichelte Linie) sowie der Simulation (durchgezogene Linie).....	145
Abbildung 6.31: Mittlere Temperaturverteilung im Längsschnitt durch die Brennkammer für verschiedene Verbrennungsmodelle.....	146
Abbildung 6.32: Mittlere Verteilung des H ₂ O und OH Massenanteils im Längsschnitt durch die Brennkammer für verschiedene Verbrennungsmodelle.....	147
Abbildung 6.33: Darstellung der RMS-Werte aus Partikelgrößen.....	148
Abbildung 6.34: Mittlere OH-Intensität und deren Fluktuationen sowie OH-Chemiluminescence.....	149
Abbildung 6.35: PDF der Temperatur an zwei verschiedenen Positionen in der Brennkammer.....	149

Nomenklaturverzeichnis

Lateinische Nomenklatur

Zeichen	Einheit	Bedeutung
A	$[m^2]$	Fläche
A	$[*]$	vorexponentieller Faktor in Arrhenius Gleichung
a	$[m\ s^{-2}]$	Beschleunigung
a_{kr} , b_{kr}	$[kmol_k\ kmol^{-1}]$	stoichiometrische Koeffizienten der Komponente k in Reaktion r
c	$[-]$	Fortschrittsvariable
C	$[-]$	Konstante
c_k	$[kmol_k\ m^{-3}]$	molare Konzentration der Komponente k
c_p	$[J\ kg^{-1}\ K^{-1}]$	spez. Wärmekapazität bei konstantem Druck
c_v	$[J\ kg^{-1}\ K^{-1}]$	spez. Wärmekapazität bei konstantem Volumen
D_k	$[m^2\ s^{-1}]$	molekularer Diffusionskoeffizient
D_t	$[m^2\ s^{-1}]$	turbulenter Diffusionskoeffizient
D_{eff}	$[m^2\ s^{-1}]$	effektiver Diffusionskoeffizient
e	$[J\ kg^{-1}]$	spezifische Gesamtenergie
E	$[*]$	Lebenszeitverteilung
E	$[J]$	kinetische Energie
E^a	$[J\ mol^{-1}]$	Aktivierungsenergie
f , f	$[m\ s^{-2}]$, $[*]$	Körperkraft, Massendichtefunktion
F_{kr}	$[mol_k\ m^{-3}\ s^{-1}]$	Jacobi Matrix
F	$[kg\ m\ s^{-2}]$	Kraft
$F_{i...j}$, $G_{i...j}$, $H_{ki...j}$	$[*]$	Tensorfelder
G	$[J\ kg^{-1}]$	Potential der Energie
H , H_k	$[J]$	Enthalpie, molare Enthalpie der Komponente k
h , h_k	$[J\ kg^{-1}]$, $[J\ kg_k^{-1}]$	spez. Enthalpie, spez. Enthalpie der Komponente k
$(\Delta h_f^0)_k$	$[J\ kg_k^{-1}]$	spez. Bildungsenthalpie der Komponente k
I , I_k	$[J\ kg^{-1}]$, $[J\ kg_k^{-1}]$	spez. innere Energie, spez. innere Energie der Komponente
I	$[kg\ m\ s^{-1}]$	Impulsvektor
J_k	$[kg\ s^{-1}\ m^{-2}]$	Vektor der Stoffstromdichte
\dot{j}_k	$[kg_k\ s^{-1}\ m^{-2}]$	Vektor der Diffusionsstromdichte der Komponente k
\dot{j}_q	$[J\ s^{-1}\ m^{-2}]$	Vektor der Wärmestromdichte
k	$[m^2\ s^{-2}]$	turbulente kinetische Energie
k^f , k^b	$[*]$	Geschwindigkeitskoeffizienten der Hin- und Rückreaktion
K_r^c	$[*]$	Gleichgewichtskonstante der Reaktion r
K_p	$[-]$	proportionaler Übertragungsbeiwert
l , L	$[m]$, $[m]$	Längenmaß, charakteristische Länge
m , M	$[kg]$	Masse
n	$[-]$	Temperaturexponent in Arrhenius Gleichung

n	$[\text{m}^{-3}]$	Partikeldichte
n^p	$[-]$	Position des Zufallsvektors im Feld RNDM
n_k	$[\text{mol}_k]$	Molmenge
N	$[-]$	Anzahl Gitterpunkte, Anzahl unabhängiger Realisierungen
\mathbf{p}	$[\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-2}]$	Drucktensor
p	$[\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-2}]$	Druck
p	$[*]$	Wahrscheinlichkeitsdichte
P	$[-]$	Gesamtpartikelanzahl
P	$[\text{J s}^{-1}]$	Leistung
P	$[*]$	Wahrscheinlichkeit
Q	$[*],[\text{J}]$	Erwartungswert, Wärmemenge
\dot{Q}	$[\text{J m}^{-3} \text{s}^{-1}]$	spez. Wärmestromdichte
R_0	$[\text{J mol}^{-1} \text{K}^{-1}]$	allgemeine Gaskonstante ($R_0=8.314$)
s	$[-], [\text{m s}^{-1}]$	Equivalence Ratio, Flammengeschwindigkeit
S	$[*]$	Summenfunktion
S, S_k	$[\text{J K}^{-1}], [\text{J mol}_k^{-1} \text{K}^{-1}]$	Entropie, molare Entropie der Komponente k
t	$[\text{s}]$	Zeit
t_a	$[\text{s}]$	Aufenthaltszeit
T	$[\text{K}]$	Temperatur
T	$[\text{s}]$	Zeitkonstante
U	$[\text{J}], [\text{m s}^{-1}]$	innere Energie, charakteristische Geschwindigkeit
u_i	$[\text{m s}^{-1}]$	Geschwindigkeitsvektor mit $i = 1,2,3$
\mathbf{u}	$[\text{m s}^{-1}]$	Geschwindigkeitsvektor
\mathbf{u}_k	$[\text{m s}^{-1}]$	Geschwindigkeitsvektor für die Komponente k
u, v, w	$[\text{m s}^{-1}]$	Geschwindigkeitskomponenten
V	$[\text{m}^3]$	Volumen
\mathbf{V}_k	$[\text{m s}^{-1}]$	Diffusionsgeschwindigkeitsvektor der Komponente k
W_k	$[\text{kg}_k \text{ kmol}^{-1}]$	molare Masse der Komponente k
W	$[\text{J}]$	Arbeit
x_i	$[\text{m}]$	kartesische Ortskoordinaten mit $i = 1,2,3$
$x_{i,0}$	$[\text{m}]$	Anfangswert der Ortskoordinaten
x, y, z	$[\text{m}]$	kartesische Ortskoordinaten
X_k	$[\text{kmol}_k \text{ kmol}^{-1}]$	Molanteil der Komponente k
Y_k	$[\text{kg}_k \text{ kg}^{-1}]$	Massenanteil der Komponente k
Y_k^*	$[\text{kg}_k \text{ kg}^{-1}]$	Massenanteil Feinstruktur der Komponente k
Z_i	$[\text{kg}_i \text{ kg}^{-1}]$	Massenanteil des Elementes i
z	$[-]$	Mischungsbruch
z_B	$[-]$	Mischungsbruch nach Bilger

Kennzahlen

Zeichen	Bedeutung
Da	Damköhler-Zahl
Ka	Karlowitz-Zahl
Le	Lewis-Zahl
Pr	Prandtl-Zahl
Re	Reynolds-Zahl
Sc	Schmidt-Zahl

Griechische Nomenklatur

Zeichen	Einheit	Bedeutung
α	[-]	Gewichtsfunktion
α_s	[-]	Segregationsfaktor
δ	[-]	Kronecker-Symbol
δ	[-], [m]	Dirac-Funktion, Flammendicke
ε	[m ² s ⁻³]	Dissipationsrate
κ^*	[-]	Anteil der Feinstrukturen im PaSR Modell
κ	[m ⁻¹]	reziproker Wert der Wirbelabmessung
λ	[W m ⁻¹ K ⁻¹]	Wärmeleitfähigkeit
λ_t	[W m ⁻¹ K ⁻¹]	turbulente Wärmeleitfähigkeit
μ	[kg m ⁻¹ s ⁻¹], [*]	dynamische Viskosität, Parameter der Gaußverteilung
μ_d	[kg m ⁻¹ s ⁻¹]	Druckzähigkeit
μ_k	[J mol _k ⁻¹]	chemisches Potential
μ_t	[kg m ⁻¹ s ⁻¹]	turbulente Viskosität
ν	[m ² s ⁻¹]	kinematische Viskosität
ξ	[-]	tabellierte gaußverteilte Zufallszahl
ξ^*	[m]	Länge der feinen Strukturen im EDC Modell
ρ	[kg m ⁻³]	Dichte
ρ_k	[kg _k m ⁻³]	Dichte der Komponente k
Σ_f	[m ⁻¹]	Flammenoberflächendichte
σ	[*]	Parameter der Gaußverteilung
σ	[kg m ⁻¹ s ⁻²]	Spannungstensor
σ_t	[kg m ⁻¹ s ⁻²]	turbulenter Spannungstensor
τ	[s]	Zeitmaß
τ^*	[s]	Zeitskala in den Feinstrukturen
Φ	[*]	beliebige physikalische Größe eines Zustandsraums
Φ	[*]	Zufallsvariable
χ	[*]	skalare Dissipationsrate
χ_k	[-]	chemisches Symbol einer Komponente k
ψ	[*]	Variable aus Zustandsraum der Zufallsvariable
Ψ	[J]	Dissipationsenergie
ω	[s ⁻¹]	Wirbelstärke
$\dot{\omega}_k$	[kg _k m ⁻³ s ⁻¹]	Reaktionsrate der Komponente k, chemischer Quellterm
$\dot{\omega}_h$	[J m ⁻³ s ⁻¹]	Wärmefreisetzung, chemischer Quellterm
$\dot{\omega}_r$	[mol m ⁻³ s ⁻¹]	Reaktionsrate in Reaktion r
Ω_k	[mol m ⁻³ s ⁻¹]	Reaktionsrate entlang der Flammenoberfläche

Indizes

Zeichen	Bedeutung
	konditioniert
<i>b</i>	verbrannt (burnt)
<i>c</i>	chemisches Maß
<i>d</i>	Dicke der Diffusionsschicht
<i>diss</i>	dissipiert
<i>D</i>	Diskret
<i>F</i>	Brennstoff
<i>FG</i>	Fine Grained
<i>i, j, k, m</i>	Laufvariablen
<i>irrev</i>	irreversibel
<i>La</i>	Lagrange
<i>L</i>	Laminar
<i>O</i>	Oxidator
<i>P</i>	Produkte
<i>p</i>	Partikel
<i>r</i>	Reaktion, Reaktionszone
<i>ref</i>	Referenzwert
<i>rev</i>	reversibel
<i>rms</i>	root mean square
<i>st</i>	stöchiometrisch
<i>t</i>	integrales turbulentes Maß
<i>T</i>	turbulent
<i>TC</i>	thermochemisch
<i>u</i>	unverbrannt (unburnt)
η	Kolmogorov Maß
*	Zufallsvariable
0	Anfangswert
'	Schwankungsanteil bei Reynolds-Mittelung
"	Schwankungsanteil bei Favre-Mittelung
-	zeitliche Mittelung
~	Favre-Mittelung
$\langle \rangle$	Erwartungswert

[*]: Einheiten entsprechend der Problemstellung

Zusammenfassung

Die Modellierung von Verbrennungsvorgängen in turbulenten Strömungen ist eine wichtige Voraussetzung, um deren Auswirkungen auf die Strömung berechnen und Vorhersagen zu Auslegungs- und Optimierungsarbeiten treffen zu können. Durch die Vielzahl von den an Verbrennungsreaktionen teilnehmenden Stoffen sowie den bei der Verbrennung zu durchlaufenden Reaktionspfaden in Form der Reaktionsgleichungen entstehen komplexe chemische Systeme, die mit geeigneten Verfahren gelöst werden müssen und zugleich den Einfluss der Turbulenz in den zeitlich gemittelten Erhaltungsgleichungen berücksichtigen. Im Gegensatz zur Strömung finden die chemischen Reaktionen auf einem wesentlich breiteren zeitlichen Spektrum statt und laufen auf molekularer Ebenen ab. Die Formulierung der Gleichungen für die bei chemischen Reaktionen auftretenden Reaktionsraten ist durch eine Lagrangsche Beschreibung charakterisiert und nur von der Zeit abhängig. Bei der Modellierung werden je nach Anwendungsfall spezifische Verbrennungsmodelle für die in der Praxis auftretenden Verbrennungsregime eingesetzt. In der vorliegenden Arbeit wird ein Modell für die Berücksichtigung der Chemie-Turbulenz Interaktionen in anwendungsnahen Brennkammern vorgestellt, welches sowohl für Diffusions- und Vormischflammen als auch in teilvorgemischte Flammen eingesetzt werden kann. Mit Hilfe des Modells werden die zeitlich gemittelten chemischen Quellterme berechnet und in die Transportgleichungen der beteiligten Stoffe und die Energiegleichung des kommerziellen Strömungslösers FLUENT[®] eingebunden. Die Einbindung erfolgt über eine von FLUENT[®] bereitgestellte benutzerorientierte Schnittstelle, den sogenannten User Defined Functions (UDF). Es werden die Transportgleichungen aller an der Reaktion beteiligten Stoffe gelöst und deren Quellterme mit Hilfe eines detaillierten Reaktionsmechanismus berechnet. In dem hier entwickelten Modell erfolgt die zeitliche Mittelung und damit die Modellierung durch die Betrachtung einer großen Anzahl von Partikeln, für die zusätzliche Lagrangsche Gleichungen für jedes Partikel gelöst werden. Grundlage des Modells bildet die Berechnung von Trajektorien sogenannter fluider Partikel, die sich mit dem turbulenten Strömungsfeld bewegen. Auf ihrem Weg durch das Strömungsfeld finden an jedem Partikel Austauschprozesse in Form der Durchmischung mit ihrer Umgebung als auch chemische Reaktionen statt. Die Umgebung wird durch das mittlere Strömungsfeld in direkter Partikelnähe repräsentiert und wird lokal durch eine Rechenzelle definiert. Auf Partikelebene müssen die Austauschvorgänge modelliert werden. Dabei wird das einfache IEM (Intermediate Exchange by the Mean) Modell herangezogen. Der chemische Quellterm kann direkt aus den Partikelgrößen berechnet werden und Bedarf keiner weiteren Modellierung. Aus einem Ensemble an Partikeln wird anschließend nach jedem Zeitschritt ein mittlerer Quellterm für jede Zelle des Gitters berechnet und an den CFD-Löser übergeben. Diese Vorgehensweise setzt die Lösung der instationären Gleichungen voraus. Das Verfahren basiert auf der in der Literatur bekannten PEUL - Methode (PEUL – Probabilistique Eulerienne Lagrangienne) und wird erstmals auf eine instationäre Kopplung von Eulerschem Strömungslöser und Lagrangschen Partikellöser

angewendet. Aufgrund der hohen Anzahl benötigter Partikel ist der rechnerische Aufwand für das Modell sehr hoch. Bei der Anwendung des Modells werden drei verschiedenen Fälle untersucht: Eine turbulente Methan-Luft Freistrahlf Flamme, eine vorgemischte Magerverbrennung von Methan im FLOX[®] Betrieb sowie eine Diffusionsflamme in einer generischen Modellbrennkammer zur Verbrennung von Synthesegas. Die Ergebnisse werden in der Arbeit vorgestellt und liefern eine gute Übereinstimmung mit experimentellen Untersuchungen, lassen jedoch auch die Defizite im Modell erkennen.

Abstract

The modeling of combustion phenomena in turbulent flows is an important requirement to calculate the effects on the underlying flow field and thus to use the results for design studies and optimization processes in technical applications. Complex chemical systems arise due to the large amount of species participating in combustion reactions as well as multiple reaction paths which are represented by a set of reaction equations. These systems have to be solved with suitable numerical techniques and must consider the influence of turbulence in the mean transport equations, respectively. Compared to the time scales in the flow, chemical reactions occur on a more expanded range of time at a molecular level. This effect reflects in the formulation of the equations for the calculation of chemical reaction rates, which are given in a Lagrangian formulation and therefore only depends on time. In practical cases specific combustion models are used depending on the combustion regime which is associated within an application. In this thesis a combustion model for turbulence chemistry interactions is presented, which can be used, independently of the combustion regime, for both diffusion and premixed flames as well as for partially premixed flames in realistic combustors. With the aid of the model the mean chemical source terms can be coupled to the species transport equations and the energy equation of the commercial CFD - solver FLUENT[®]. This is done within the solver by a user-friendly interface, the so-called User Defined Functions (UDF). Transport equations for each specie progressing in the chemical reactions are solved and its source terms are calculated with the aid of a detailed reaction mechanism. In the presented model the calculation of the mean values is performed by coupling a Lagrangian solution procedure with an Eulerian finite volume solver. A very large amount of individual particles are considered where for each particle additional Lagrangian equations have to be solved. The basic principle of the model is the calculation of fluid particle trajectories, which are moved through the flow field. Exchange processes with the surrounding fluid as well as chemical reactions occur to each fluid particle on its way through the flow field. The surrounding fluid is represented by the mean flow nearby the particle and is locally defined by a computational cell. Exchange processes have to be modeled. For this purpose a very simple model known as the IEM (Intermediate Exchange by the Mean) model is used. The chemical source term is given in a closed formulation and can be directly calculated from particle data. This is one of the main advantages of the described procedure. From an ensemble of fluid particles the mean source terms after each numerical time step can be calculated and are passed to the CFD-solver. This procedure implies the solution of the unsteady transport equations in FLUENT[®]. The presented model is based on a model, which is known as PEUL (PEUL – Probabilistique Eulerienne Lagrangienne) in literature and was applied for the first time in an unsteady coupling of the Lagrangian particle solver and the Eulerian flow solver. However, the computational effort is very high due to the high amount of particles which are necessary for the calculation. In this study three different applications are investigated: a turbulent methane-air jetflame, a premixed lean combustion of methane under FLOX[®] operation

conditions as well as a diffusion flame in a generic combustor for the combustion of synthesis gas. The results are presented and show in general a good consistency with the experimental data. Nevertheless, they also offer some shortcomings, which are discussed. A lot of computational efforts limits the model in very large configurations.

1 Einführung

1.1 Ziel der Arbeit

Die numerische Simulation turbulenter reagierender Strömungen in realen Brennkammern mit Hilfe eines Lagrangeschen Partikelmodells ist Gegenstand der vorliegenden Arbeit. Da die in Brennkammern auftretenden physikalischen und chemischen Vorgänge auf einem Spektrum stark unterschiedlicher Zeit- und Längenskalen (s. Abs. 3.2) ablaufen, basiert deren mathematische Beschreibung auf der zeitlichen Mittelung der zugrunde liegenden partiellen Differenzialgleichungssysteme in RANS/URANS-Verfahren (s. Abs. 3.3 und Abs. 3.4). Aufgrund der Mittelung resultieren ungeschlossene Terme, die modelliert werden müssen, um die Gleichungen zu lösen. Da der chemische Quellterm eine stark nichtlineare Größe ist, kann er nicht unmittelbar aus den gemittelten Größen berechnet werden (s. Abs. 3.6.5). In der vorliegenden Arbeit wird ein Modell für die Chemie-Turbulenz Interaktion zur Berechnung der chemischen Quellterme basierend auf dem PEUL+-Modell [Cai94] (s. Abs. 4.4.5 und 4.4.6) entwickelt. Das Ziel der Arbeit war es, das Modell in einem Computerprogramm umzusetzen und zur Berechnung zweier unterschiedlicher Brennkammerkonfigurationen sowie einer turbulenten Freistrahlf Flamme zu benutzen sowie die Stärken und Schwächen des Modells zu evaluieren. Ein weiterer Schwerpunkt der Arbeit lag dabei auch auf der instationären Formulierung der physikalischen und chemischen Zusammenhänge mit Hilfe der Lagrangeschen Partikelgleichungen und deren Kopplung an einen Eulerschen Strömungslöser. In dieser Arbeit kommt für die Lösung der Eulerschen Bilanzgleichungen der Gasphasenströmung ein finites Volumenverfahren der Software FLUENT[®]-CFD 6.3.26 [Fluent] zum Einsatz. Die chemischen Reaktionen der Verbrennung werden mit IGNIS [Sch06], einem Programmpaket des DLR ermittelt, das die kinetisch kontrollierten Reaktionsraten berechnet. In den Berechnungen werden komplexe Reaktionsmechanismen sowie eine Vielzahl chemischer Spezies berücksichtigt. Neben der Wärmefreisetzung kann auch die Schadstoffbildung (unverbrannte Kohlenwasserstoffe, NO_x) berechnet werden. Mit dem Partikelmodell werden die mittleren Quellterme bestimmt und in die entsprechenden Bilanzgleichungen des Strömungslösers eingebunden. Ein Lagrangescher Ansatz, der es ermöglicht die Trajektorien der Partikel sowie die Änderung der Partikelgrößen durch chemische Reaktion und Mischung entlang der Trajektorien zu berechnen, kommt zur Anwendung und wird in Abs. 5 näher erläutert. Für die Ankopplung von IGNIS werden die von FLUENT[®] bereitgestellten „User Defined Functions“ (UDF) angewandt und den entsprechenden Anforderungen angepasst. Bei der Kopplung wird erstmalig die instationäre Vorgehensweise für das PEUL+-Modell genutzt und IGNIS wird zu Beginn eines jeden globalen Zeitschritts aufgerufen. Da die Lagrangeschen Gleichungen nur zeitabhängig sind, ist es naheliegend auch die instationäre Formulierung bei der Eulerschen Vorgehensweise zu wählen. Zudem können bei einer stationären Formulierung unphysikalische Zustände in der Lösung durchlaufen werden, so dass die Rechnung zur Divergenz tendieren kann. Divergenz

wird somit durch den Einsatz der instationären Methode minimiert. Mit der Diskretisierung des zeitabhängigen Terms hat in den meisten Fällen der Löser aufgrund der Verstärkung der Diagonalelemente in der Lösungsmatrix ein verbessertes Konvergenzverhalten.

1.2 Lagrangesche Partikelverfahren

Um physikalische Systeme zu beschreiben, können zwei unterschiedliche Betrachtungsweisen herangezogen werden: eine ortsfeste Betrachtung (Euler) und eine Betrachtung aus Sicht des sich mitbewegenden Beobachters (Lagrange) [Scha70]. In der Fluidmechanik haben sich bei der mathematischen Formulierung die auf der Kontinuumstheorie (s. Abs. 2.1.1) basierenden Eulerschen Bilanzgleichungen durchgesetzt (s. Abs. 2.2.1 – 2.2.4.). Eine Lagrangesche Betrachtung mit Hilfe der Kontinuumstheorie ist mit der substantiellen Ableitung möglich (s. Abs. 2.2.5). Physikalische Systeme können jedoch auch als ein Ensemble diskreter Teilchen betrachtet werden, wie dies in den Gleichungen der klassischen Newtonschen Mechanik für Festkörpersysteme zur Anwendung kommt. Hier hat sich die Lagrangesche Betrachtung von bewegten Teilchen oder Partikeln durchgesetzt (s. Abs. 5.2). Interaktionen zwischen den Teilchen sind dann sehr komplex und aufwendig zu formulieren. Wird diese Betrachtung auf ein Fluid angewendet, muss es als eine Vielzahl einzelner Fluidelemente aufgefasst werden, die in sich ein abgeschlossenes System bilden. Können die Interaktionen zwischen den Partikeln vernachlässigt werden, ist diese Betrachtung vorteilhaft, z.B. wenn es sich um das Verhalten einzelner Partikel in einer Strömung handelt, wie z.B. der Tropfenausbreitung bei der Zweiphasenmodellierung oder des Wärmetransports durch Strahlung in einem Monte-Carlo Verfahren. Für die Berechnung turbulenter reagierender Strömungen sind Verfahren bekannt, bei denen Partikelmodelle auf Basis der Lagrangeschen Betrachtungsweise angewendet werden. Diese werden meist in Kombination mit einem Eulerschen Strömungslöser eingesetzt. Die definierten Rechenpartikel sind dabei Träger spezieller Eigenschaften entsprechend der gegebenen Problemstellung und sollen im Folgenden erörtert werden.

Spraysimulation. In der numerischen Simulation von Zerstäubungs- und Ausbreitungsvorgängen von Flüssigkeitstropfen in Mehrphasensystemen hat sich die Lagrangesche Vorgehensweise etabliert [CSS77], [ARB89]. Eine typische Anwendung bildet z.B. die Kraftstoff einspritzung bei der motorischen Verbrennung oder die turbulente Gemischbildung von mit Flüssigkraftstoff betriebenen Brennkammern, wie z.B. in Fluggasturbinen. Der Spray wird durch Rechenpartikel repräsentiert. Da die Anzahl der realen Tröpfchen zu hoch ist, um sie alle zu simulieren, beschränkt man sich auf eine limitierte aber repräsentative Anzahl von Rechenpartikeln, die entlang ihrer stochastischen Bahnen verfolgt werden. Jedes dieser Partikel steht dann für eine bestimmte Anzahl realer Tröpfchen, deren Eigenschaften sich aus den berechneten Eigenschaften des Rechenpartikels ergeben. Diese Eigenschaften sind z.B. Partikelort und Partikelgeschwindigkeit, Masse, Temperatur sowie Zusammensetzung. Die lokalen Partikeleigenschaften werden durch in Lagrangeschen Systemen formulierten Bilanzgleichungen für Masse, Impuls und Energie entlang der Partikelbahn errechnet. Der jeweilige Partikelort lässt sich nun der entsprechenden Rechenzelle des Eulerschen Gasfeldlösers zuordnen, in der sich das Partikel gerade befindet. In dieser Zelle wird Masse, Impuls und Energie mit dem Gas ausgetauscht. Dieser Austausch zwischen Partikel und Gas ist immer streng konservativ.

Strahlungssimulation. Zur Berechnung der Wärmestrahlung in einer Brennkammer kann ein Monte-Carlo Verfahren¹ angewendet werden [Schm96], [SHL91], um statistische Mittelwerte von physikalischen Größen zu berechnen. Der Strahlungseinfluss wird durch einen Quellterm in der Energiegleichung (s. Gl.(2.32)) berücksichtigt. Es werden Strahlen mit definiertem Energieinhalt durch Partikel, sogenannte „numerische Photonen“ repräsentiert. Die Zellen und Wandflächenelemente des Eulerschen Gasfeldlösers emittieren Partikel, die Strahlungsenergie entlang ihrer Trajektorien durch das Gebiet transportieren. Im Gegensatz zu Spraypartikeln bewegen sich die Partikel mit „unendlicher“ Geschwindigkeit, so dass deren Weg durch Geraden beschrieben ist und sie damit vom Gasfeld vollkommen unbeeinflusst bleiben. Die Richtung wird beim Start der Partikel zufällig festgelegt. Ihr zurückgelegter Weg ist durch Absorption, Reflexion sowie Transmission gekennzeichnet, wobei dieser Austausch durch die statistische Verteilung der Partikel im Gebiet gekennzeichnet ist. Die Richtung des Strahls, z.B an einer Wand oder einem Rußpartikel ändert sich infolge Reflexion, wobei der reflektierte Energieanteil solange weiter verfolgt wird, bis er das Rechengebiet verlassen hat. Der Mittelwert aus allen betrachteten Ereignissen liefert den mittleren Strahlungsquellterm pro Rechenzelle oder Wandflächenelement. Er wird durch Umverteilung abgestrahlter Energie von Ort zu Ort ausgetauscht, wodurch die Gesamtenergiebilanz erfüllt ist.

Chemische Reaktionen der Gasphase. In einer Arbeit von Borghi [Bor96] wird ein Vergleich zwischen der turbulenten Verbrennung in der Gasphase und der turbulenten Sprayausbreitung angestellt und darauf verwiesen, dass beide sehr ähnliche Charakteristika besitzen. Die mittleren chemischen Quellterme der Gasphase eines Kontinuums können wie beim Spray und auch der Strahlung mit Hilfe von diskreten Rechenpartikeln simuliert werden. Es handelt sich dabei um Partikel derselben Phase wie bei der Eulerlösung, die in der Modellvorstellung gasförmige „Fluidballen“ repräsentieren und durch ihr Spektrum die zeitlichen Fluktuationen innerhalb einer Rechenzelle beschreiben. Da auch hier die Anzahl der realen Partikel sehr hoch ist, beschränkt man sich auf eine limitierte Anzahl von Rechenpartikel. Jedes Partikel repräsentiert eine bestimmte Anzahl realer „Fluidballen“, deren Eigenschaften sich aus berechneten Eigenschaften des Rechenpartikels ergeben. Die Trajektorien der Partikel entwickeln sich entsprechend der zugrunde liegenden Gasphasenströmung und markieren das Verhalten eines Tracers im Gasfeld, wenn nur deren Transport im physikalischen Raum betrachtet werden soll. Die zeitliche Änderung entlang der Partikelbahn erfolgt durch chemische Reaktionen und Mischung mit dem Gasfeld der Eulerschen Lösung. Der Mittelwert aus allen betrachteten Partikeln liefert den mittleren Chemiequellterm pro Rechenzelle. Um Konservativität zu gewährleisten werden die spezifischen Partikelgrößen aus der mittleren Dichte des Eulerschen Gasfeldes ermittelt. Die Entwicklung eines Berechnungsprogramms für die Modellierung der mittleren chemischen Quellterme durch das PEUL+-Modells ergänzt die bereits im DLR verwendeten Partikelmodelle für Spray- und Strahlungssimulation.

Reine Partikelverfahren, sogenannte MPM (Meshless Particle Method), kommen zum Einsatz, wenn Kontinuen mit Partikeln beschrieben werden [Dzw02]. Jedes Partikel beschreibt streng genommen die feinsten Strukturen einer turbulenten Strömung und löst diese damit räumlich und zeitlich vollständig auf. Ein Partikel kann direkt mit einer physikalischen Größe assoziiert werden, bzw. einen Teil eines Kontinuums verkörpern. Jedes Partikel trägt einen Satz Variablen, die dem jeweiligen Problem entsprechen. Die Entwicklung dieser Größen im System ist durch die Erhaltungssätze gegeben. Nutzt man die

¹ Verfahren aus der Stochastik, bei dem sehr häufig durchgeführte Zufallsexperimente die Basis bilden. Mit Hilfe der Wahrscheinlichkeitstheorie wird dann versucht, analytisch unlösbare mathematische Probleme numerisch zu lösen.

substantielle Ableitung für ein diskretes Partikel, ergeben sich die Gleichungen entsprechend Abs. 2.2.5. Die Konvektion kann für einzelne Partikel direkt und ohne numerische Diffusion aus der Lagrangeschen Bewegung der Partikel berechnet werden, was durch die linken Seiten (s. Abs. 2.2.5) zum Ausdruck gebracht wird. Die auf der rechten Seite der Gleichung vorkommenden Terme enthalten räumliche Ableitungen, wie Druck- oder Geschwindigkeitsgradienten, außerdem Diffusionsterme. Alle Terme, die mit Differenzialoperatoren ausgedrückt sind, sollen als Partikel-Interaktionen interpretiert werden. Punktweise Abhängigkeiten wie Quellterme sowie externe Massenkräfte, können relativ einfach berechnet werden. Die funktionalen Abhängigkeiten in den Gleichungen werden mit Partikeln approximiert und je nach Verfahren wird ganz auf ein Rechengitter verzichtet. Entsprechend den aufgelösten Längenskalen werden verschiedene Verfahren angewandt. MD (Molecular Dynamics) lösen die atomistischen Strukturen auf, während mesoskopische Skalen mit Hilfe von DPD (Dissipative Particle Dynamics) oder CA (Lattice Gas Cellular Automata) arbeiten [Lea01]. Auf makroskopischer Ebene finden SPH (Smoothed Particle Hydrodynamics) z.B. in der Berechnung kompressibler Fluide Anwendung [MG83], [HI93] und kommen dabei vollständig ohne Rechengitter aus. SPH wurde ursprünglich für die Modellierung astronomischer Phänomene eingeführt und später auf die Festkörper- und Fluidmechanik übertragen. Aufgrund von Problemen in Konsistenz und Randbedingungen gibt es verschiedene weiterentwickelte Methoden, wie z.B. RKPM (Reproducing Kernel Particle Method) von W.K. Liu et. al. 1995 [LJZ95] sowie Li and Liu 2002 [LL02]. Andere Methoden sind PIC (Particle-in-Cell), MAC (Marker-and Cell) oder FLIC (Fluid-in Cell), welche nicht ganz ohne eine Netzstruktur auskommen. Dazu zählt auch die FLIP-Methode (Fluid-Implicit-Particle) [BR86] [BKR88], welche für inkompressible Strömungen zur Anwendung kommt [UTM92]. Eine vollständig netzfreie Methode für inkompressible Strömungen liefert MPS (Moving Particle Semi-Implicit) [KTO95]. MPM's können sowohl deterministisch als auch probabelistisch (MD oder Monte Carlo basierte MD, DPD) formuliert sein. Die meisten dieser Verfahren haben Lagrangeschen Charakter und nutzen explizite Verfahren zur zeitlichen Integration. Sie kommen vorwiegend ohne Rechenetz aus. Allerdings füllen im Vergleich zu einem Gitter die Partikel den betrachteten Raum nicht vollständig aus, so dass Unstetigkeiten im Verlauf intensiver Größen auftreten. Da außerdem keine festen Konnektivitäten bestehen, müssen Partikelwechselwirkungen formuliert werden. Eine sehr hohe Zahl an Partikeln muss verfolgt werden, um die Strömung in ihrer Gesamtheit zu erfassen. Auch sind bei der Berechnung von Fluiden mit Partikelmethoden die relativen Positionen der einzelnen Partikel des Fluides nicht-trivialen Einflüssen ausgesetzt. Reine Partikelverfahren kommen in der Verbrennungssimulation vor allem deshalb nicht zur Anwendung, da diese u.a. variable Dichten erfordern.

1.3 Stand der Arbeiten/Motivation

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurden insbesondere Modelle untersucht, bei denen die Beschreibung des Mischungsvorganges sowie chemischer Reaktionen auf einer Lagrangeschen Betrachtungsweise basieren. Es wird ausschließlich die Zeitabhängigkeit der Spezieskonzentrationen und der Temperatur der betrachteten Fluidelemente formuliert. Dieser Ansatz erlaubt es jedoch nur schwer, interagierenden Teilprozesse aus der Strömung des Fluides, wie z.B. Impulsaustausch durch Partikelkollision sowie Diffusionsvorgänge über Partikeloberflächen mit in die Betrachtung aufzunehmen. Im Gegensatz dazu fokussiert die Eulersche Betrachtung eine räumliche anstelle der materiellen Beschreibung, bei der konvektiver und diffusiver Transport des Fluides mit Hilfe von partiellen Differenzialgleichungen beschrieben werden (s. Abs. 2.2). Bei der Anwendung in turbulenten

reagierenden Strömungen entstehen bei RANS- und LES-Verfahren (s. Abs. 3.3) zeitgemittelte Größen und Fluktuationen, die nicht direkt zur Berechnung des Quellterms eingesetzt werden können (s. Abs. 3.6.5). Während sich die Lagrangesche Betrachtung für die direkte Berechnung chemischer Reaktionen an Partikeln besonders eignet, müssen in der Eulerschen Betrachtung Modell zur Berechnung der zeitgemittelten chemischen Quellterme herangezogen werden. Die strömungsrelevanten Vorgänge können besser über die räumlichen Ableitungen in den Differenzialgleichungen beschrieben werden, was wiederum mit dem Lagrangeschen Ansatz für Partikel schwierig ist. Beide Ansätze miteinander zu kombinieren, um deren jeweilige vorteilhafte Beschreibungen zu nutzen, wird mit einem Lagrangeschen Modell für die Berechnung der chemischen Reaktionen realisiert. Das erste und auch einfachste Modell ist das IEM-Modell (= Intermediate Exchange with the Mean s. Abs. 4.4.2) von Aubry und Villermaux [AV75], welches ursprünglich nicht für Verbrennungsvorgänge sondern chemische Reaktion in einem homogenen Reaktor entwickelt wurde. In diesem Modell wird der „Lebenszyklus“ einzelner nicht weiter differenzierter Fluidpartikel über eine Lagrangesche Gleichung beschrieben. Deren demographische Entwicklung wird über eine Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion berücksichtigt. Sie gibt die Wahrscheinlichkeit an, mit der sich ein Fluidpartikel im Reaktor einer Gruppe von Partikeln mit einer bestimmten Zusammensetzung zuordnen lässt. Somit lassen sich strömungsrelevante Größen im Modell berücksichtigen, die nicht durch das Lösen der partiellen Differenzialgleichungen eines Eulerschen Verfahrens berechnet werden. Ein weiterer Ansatz stammt von Spalding, der die Kombination von Lagrange und Euler in der ESCIMO Theorie zusammenfasst [Spa77],[Spa82]. Die Struktur der betrachteten Fluidpartikel ist deutlich komplexer als im IEM-Modell und beinhaltet verschiedene physikalische Phänomene: Aufrollen, Streckung sowie Schichtung von Fluidelementen, den sogenannten „Folds“. Spalding ordnet den Fluidelementen ebenfalls eine Wahrscheinlichkeit zu, sich in einer bestimmten Gruppe von Elementen zu befinden, in denen sich deren Größe und/oder Zusammensetzung verändert. Die Dynamik des Strömungsfeldes wird beim ESCIMO-Modell mit einem klassischen Eulerschen Verfahren gelöst. Den Gedanken der Lösung Lagrangesscher Gleichungen im Zusammenwirken mit einem Eulerschen Verfahren greifen ebenfalls Pourbaix als auch Borghi auf [Bor88]. Sie wenden das einfache IEM Modell von Aubry und Villermaux auf die Berechnung einer turbulenten reagierenden Strömung an. Eine angenommene PDF wird mit dem Mittelwert und den Schwankungen aus der Lösung der Eulerschen Gleichungen für einen nichtreagierenden Tracer für jede Rechenzelle konstruiert. In jeder Zelle des Gebietes werden dann aus den Anfangsbedingungen entsprechend der Problemstellung die momentanen Spezieskonzentrationen in Abhängigkeit der Verteilung des Tracers berechnet. Eine Modifizierung erfährt diese Vorgehensweise durch die Berücksichtigung der physikalischen Trajektorien für einzelne Fluidpartikel, entlang derer die Lagrangeschen Gleichungen integriert werden können [BP81], [BP83/1], [Pou83]. Zunächst vermeiden Borghi und Pourbaix jedoch die Berechnung der tatsächlichen physikalischen Trajektorien und nehmen an, dass sich die Partikel in unmittelbarer Nähe der betrachteten Rechenzelle befinden und nicht notwendigerweise aus den Einlässen des Rechengebietes stammen. Die Anfangsbedingung für die dort startenden Partikel festzulegen, ist die Schwierigkeit dieses Ansatzes. Dieses Modell wird von Borghi auch als PEUL (Programme Eulerienne Lagrangienne) bezeichnet, während es in der nachfolgenden, meist französischsprachigen Literatur, auch als Modèle Probabilistique Eulerienne Lagrangienne benannt wird. Konsequenterweise erfolgt in einer weiteren Entwicklung von PEUL die Berechnung der physikalischen Trajektorien, die erstmals in einer Arbeit von Gilbank [Gil89] vorgestellt wurde. Die Partikel werden durch das turbulente Strömungsfeld bewegt, das mit Hilfe der

Eulerschen Gleichungen berechnet wird. Entlang der Partikelbahnen erfolgt nun die Berechnung der Partikelgrößen mit Hilfe der Lagrangeschen Gleichungen. Es werden eine Vielzahl von Partikeln verfolgt und der mittlere chemische Quellterm aus einem Ensemble von Partikeln gebildet, die sich innerhalb einer Rechenzelle befinden. Die Ausweitung von PEUL zu PEUL+ auf einen 3D Anwendungsfall wird von Cailleau [Cai94] vorgestellt. Eine weitere Anwendung von PEUL+ ist die Berechnung der Rußbildung in einer Flugtriebwerksbrennkammer von Varin [Var99]. In der Literatur beschränkt sich die Anwendung von PEUL auf eine statistisch stationäre Strömung. Die Kopplung von Lagrangeschem Partikelmodell und Eulerschem finiten Volumenverfahren in einer instationären Berechnung nach der PEUL-Methode wurde in der vorliegenden Arbeit entwickelt und ist in verschiedenen Anwendungsfällen untersucht werden.

2 Die Bilanzgleichungen reagierender Strömungen

In der numerischen Simulation von Strömungen basiert die Lösung von Masse, Impuls und Energie auf Bilanzgleichungen, die einem Erhaltungsprinzip folgen und einer allgemeinen Form entsprechen [Scha70]. Zusätzlich werden empirische Ansätze zur Formulierung des Impulsaustauschs (Newtonsches Gesetz), des Wärme- (Fouriersches Gesetz) und Stofftransports (Ficksches Gesetz), der Gasdynamik (ideales Gasgesetz) sowie Ansätze zur Berechnung chemischer Reaktionen (Arrhenius) herangezogen. Zusammen bilden sie ein System mathematischer Gleichungen, um die Vorgänge in kompressiblen und reibungsbehafteten Strömungen zu beschreiben. Chemische Reaktionen können dabei zu großen zeitlichen und lokalen Temperaturgradienten und somit auch zu erheblichen Dichteunterschieden führen, was eine spezielle Formulierung der Gleichungen erfordert. Außerdem müssen die Massen der an der Reaktion beteiligten Spezies bilanziert werden [PF97] [TAP97].

2.1 Beschreibung physikalischer Systeme in finiten Volumen

Im Folgenden werden die allgemeinen Gleichungen in einem Eulerschen Bezugssystem für finite Volumen formuliert. Das gesamte Gebiet wird dabei in Volumenelemente zerlegt, die vom Fluid durchströmt und an denen die Bilanzen für Masse, Impuls und Energie aufgestellt werden. Alternativ können mit Hilfe der substantiellen Ableitung die Bilanzen auf ein bewegtes Volumenelement überführt werden, was zu einer Lagrangeschen Betrachtung führt. Grundlage der finiten Volumenmethode ist die Kontinuumstheorie.

2.1.1 Die Kontinuumstheorie

Alle Erscheinungen, zu deren Beschreibung die diskontinuierliche Struktur der Materie benötigt wird, werden bei der Beschreibung eines Kontinuums außer Betracht gelassen. Ausgenommen sind hoch verdünnte Gase sowie Plasmen. Es wird eine empirische Betrachtung angestellt, bei der geltende Gesetzmäßigkeiten für die Materialgesetze, z.B. für das ideale Gas, nicht aus der Atomstruktur hergeleitet werden. Das Verhalten eines Fluids wird mit Hilfe makroskopischer Eigenschaften, wie Geschwindigkeit, Druck, Dichte und Temperatur beschrieben und repräsentieren eine Mittelung über eine genügend große Anzahl an Molekülen. Deren mittlere freie Weglänge ist sehr klein gegenüber der kleinsten charakteristischen Abmessung der Strömung l_{min} . Das kleinste mögliche Fluidelement in einem Kontinuum wird somit nicht durch das individuelle Verhalten seiner Moleküle beeinflusst. Bei turbulenten nicht reagierenden Strömungen ist die Kolmogorov-Länge l_η das kleinste relevante Längenmaß. Da bei reagierenden Strömungen chemische Reaktionen auf molekularer Ebene ablaufen, liegen deren kleinste Strukturen noch weit darunter, was die

Kontinuumstheorie nicht berücksichtigen kann. Um chemische Reaktionen genau zu formulieren, müssten die Berechnungen auf Molekülebene stattfinden, was aber unmöglich zu realisieren ist.

2.1.2 Physikalische Bezugssysteme

Anhand kinematischer Betrachtungen sollen zunächst wesentliche Unterschiede zwischen den Bezugssystemen erläutert werden. In einem Kontinuum wird das Eulersche Bezugssystem bevorzugt, während für Partikelsysteme die Lagrangesche Betrachtung sinnvoll ist.

Lagrange. Die Bewegungen eines Teilchens lassen sich durch eine Funktion

$$x_i = x_i(a_p, t) \quad (2.1)$$

beschreiben, die angibt, an welchem Punkt x_i sich das Teilchen a_p zur Zeit t befindet. a_i ist die Lagrangesche Variable in einem Lagrangeschen Bezugssystem. Durch den Ortsvektor x_i

$$x_i = x_i(x_{i,o}, t) \quad \text{wobei} \quad x_i = x_{i,o} \quad \text{für} \quad t = t_o \quad (2.2)$$

wird die momentane Lage des Teilchens in einem Fluid beschrieben. Der Ortsvektor ist nur von der Zeit und seiner Anfangsposition abhängig. Die Geschwindigkeit ist bei konstantem $x_{i,0}$ nur eine Funktion von t , da die feste Wahl eines Teilchens erfolgt. Die Differentiation nach der Zeit liefert die Lagrangesche Geschwindigkeit $u_i(t)$ und Beschleunigung $a_i(t)$:

$$u_i(t) = \frac{dx_i}{dt}, \quad a_i(t) = \frac{du_i}{dt} = \frac{d^2 x_i}{dt^2} \quad (2.3)$$

Ist der Geschwindigkeitsverlauf eines Teilchens als Funktion der Zeit bekannt, kann der zurückgelegte Weg beschrieben werden.

Euler. Da sich an einem Ort zur Zeit t nur ein Teilchen befinden kann, gilt die Umkehrung

$$a_i = a_i(x_p, t), \quad (2.4)$$

die angibt, welches Teilchen a_i sich zur Zeit t im Punkt x_p befindet. x_p ist die Eulersche Variable in einem Eulerschen Bezugssystem. Es wird die Geschwindigkeit an einem festen Punkt erfasst und alle Teilchen untersucht, die an diesem Punkt vorbei strömen. Dabei ist nicht relevant, woher das Teilchen kommt. Die Eulersche Geschwindigkeit lässt sich als Funktion des Beobachtungsortes und der Zeit durch

$$u_i = u_i(x_i, t) = u_i(x, y, z, t) \quad (2.5)$$

ausdrücken. Die Darstellung des Beschleunigungsvektors a_i ist nicht durch einfaches Ableiten nach t zu gewinnen, da keine explizite Information über das Verhalten des Teilchens vor und nach dem Bezugspunkt vorliegt. Es ist notwendig, die Zeitabhängigkeit von x_i in die Betrachtung mit einzubeziehen:

$$u_i = u_i(x_i(t), t) \quad (2.6)$$

Die Ableitung der Geschwindigkeit ergibt sich aus Gl.(2.6)

$$a_i = \frac{du_i}{dt} = \frac{\partial u_i}{\partial t} + u_i \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \quad (2.7)$$

als substantielle Ableitung und wird in Abs. 2.1.4 näher erläutert. Die Beobachtungen lassen sich mit Hilfe der Kontinuumstheorie für alle Partikel auf den gesamten Raum ausdehnen, ohne unendlich viele Beobachtungspunkte untersuchen zu müssen [Scha70].

2.1.3 Das Transporttheorem und die ortsfesten Bilanzgleichungen

Das Reynoldssche Transporttheorem [Scha70] stellt einen Zusammenhang zwischen der Eulerschen und der Lagrangeschen Betrachtungsweise eines Kontrollvolumens her. Es wird verwendet, um die grundlegenden Erhaltungssätze der Kontinuumsmechanik herzuleiten. Deren Herleitung basiert auf der zeitlichen Änderung eines materiellen Volumens, dessen Eigenschaften sich ändern. Dieses Volumen wird immer von denselben Teilchen gebildet, seine Gestalt und räumliche Lage verändern sich. Charakteristische physikalische Größen in einem Kontinuum sind stetige Funktionen des Ortes und der Zeit, die als intensive Größen bezeichnet werden. Mit

$$F_{i\dots j} = f(x_p, t) \quad (2.8)$$

lassen sie sich darstellen, wobei $F_{i\dots j}$ einen beliebigen Tensor angibt. Werden intensive Größen z.B. über ein Volumen integriert, ergeben sich extensive Größen. Extensive Größen sind nur Funktionen der Zeit, so dass von ihnen auch nur die zeitliche Ableitung d/dt gebildet werden kann. Bei der Integration über einen raumfesten Bereich V , hängen die Integrationsgrenzen nicht von der Zeit ab, so dass zeitliche Differentiation und räumliche Integration vertauschbar sind:

$$\frac{d}{dt} \int_V F_{i\dots j} dV = \int_V \frac{\partial F_{i\dots j}}{\partial t} dV \quad (2.9)$$

Bei einer Integration über einen materiellen Bereich \mathcal{V} ist dieses Vertauschen nicht möglich und muss dann mit Hilfe des Transporttheorems ausgedrückt werden:

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}} F_{i\dots j} dV = \frac{d}{dt} \int_V F_{i\dots j} dV + \oint_{\mathfrak{A}, A} F_{i\dots j} u_k dA_k \quad (2.10)$$

Statt des materiellen Bereichs kann dann der raumfeste Bereich gesetzt werden, wenn dieser sich gerade mit dem materiellen Bereich deckt, vermehrt um den Fluss, der in der Zeiteinheit über die Oberfläche A aus dem raumfesten Volumen an Materie abfließt. Die daraus folgenden Herleitungen für die Bilanzgleichungen raumfester Volumen in der allgemeinen Form sind in [Scha70] ausführlich abgehandelt und sie lautet in ihrer differenziellen Form:

$$\frac{\partial F_{i\dots j}}{\partial t} + \frac{\partial F_{i\dots j} u_k}{\partial x_k} = \frac{\partial H_{ki\dots j}}{\partial x_k} + G_{i\dots j} \quad (2.11)$$

mit $F_{i\dots j}$, $G_{i\dots j}$ und $H_{ki\dots j}$ als beliebige Tensorfelder. Integriert über ein raumfestes Volumen folgt unter Ausnutzung von Gl.(2.9):

$$\frac{d}{dt} \int_V F_{i\dots j} dV = \int_V \left(G_{i\dots j} - \frac{\partial F_{i\dots j} u_k}{\partial x_k} + \frac{\partial H_{ki\dots j}}{\partial x_k} \right) dV \quad (2.12)$$

Die Zunahme einer extensiven Größe in einem beliebig abgegrenzten raumfesten Volumen ist gleich einer anderen extensiven Größe im selben Volumen. Mit dem Gaußschen Satz führt Gl. (2.12) zu

$$\frac{d}{dt} \int_V F_{i\dots j} dV = \int_V G_{i\dots j} dV - \oint_A F_{i\dots j} u_k dA_k + \oint_A H_{ki\dots j} dA_k \quad (2.13)$$

2.1.4 Die substantielle Ableitung

Durch die substantiellen Ableitung kann das Kontrollvolumen eines Kontinuums in der Lagrangeschen Betrachtungsweise formuliert werden. Von einer intensiven Größe $F_{i\dots j}$ lassen sich vier mögliche partielle Ableitungen bilden. Die zeitliche Ableitung der intensiven Größe in einem Lagrangeschen Bezugssystem ist die substantielle Ableitung von $F_{i\dots j}$:

$$\frac{DF_{i\dots j}}{Dt} = \left(\frac{\partial F_{i\dots j}}{\partial t} \right)_{a_k} \quad (2.14)$$

Angewandt auf Gl.(2.1) gibt sie die Geschwindigkeit an, die das Teilchen a_i zur Zeit t besitzt:

$$\frac{Dx_i}{Dt} = u_i(a_p, t) \quad (2.15)$$

Gl.(2.15) kann mit Gl.(2.4) auf Eulersche Variablen umgeschrieben werden:

$$u_i(a_p, t) = u_i(a_p(x_q, t), t) = u_i(x_q, t) \quad (2.16)$$

Durch Weglassen der unabhängigen Variablen ist dann

$$\frac{Dx_i}{Dt} = u_i \quad (2.17)$$

Nach Ausführung der Differentiation werden die Lagrangeschen Variablen durch die Eulerschen ersetzt ($=D/Dt$). Aus dem totalen Differenzial von $F_{i\dots j}$ in Eulerschen Variablen

$$dF_{i\dots j} = \frac{\partial F_{i\dots j}}{\partial t} dt + \frac{\partial F_{i\dots j}}{\partial x_k} dx_k \quad (2.18)$$

folgt durch Bildung der substantiellen Ableitung unter Berücksichtigung von Gl.(2.17)

$$\frac{DF_{i\dots j}}{Dt} = \frac{\partial F_{i\dots j}}{\partial t} + u_k \frac{\partial F_{i\dots j}}{\partial x_k} \quad (2.19)$$

Die zeitliche Änderung einer physikalischen Eigenschaft eines Volumenelementes ist gleich der zeitlichen Änderung dieser Eigenschaft am betrachteten Ort, vermehrt um die örtliche Änderung dieser Eigenschaft zum betrachteten Zeitpunkt, die das Teilchen infolge der Bewegung erfährt.

2.2 Formulierung der allgemeinen Bilanzgleichungen

Für die Formulierung der allgemeinen Gleichungen reibungsbehafteter kompressibler Strömungen kommen die in Abs. 2.1.3 hergeleiteten Beziehungen in vereinfachter Schreibweise in ihrer differenziellen Form zur Anwendung.

2.2.1 Massenbilanz (Kontinuitätsgleichung)

Für ein beliebig abgegrenztes raumfestes Volumenelement ist die Zunahme an Masse gleich dem Zufluss an Masse in das Volumen:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (2.20)$$

2.2.2 Massenbilanz der Einzelkomponenten

Da es sich bei reagierenden Strömungen um ein Mehrkomponentensystem handelt, muss die Kontinuitätsgleichung auch für jede einzelne Spezies k formuliert werden. Die Masse jeder Komponente kann durch chemische Reaktionen gebildet oder verbraucht werden:

$$\frac{\partial \rho_k}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{J}_k = \dot{\rho}_k^c \quad (2.21)$$

Hier ist ρ_k die Dichte und $\dot{\rho}_k^c$ eine Quelle oder Senke aufgrund chemischer Reaktionen. Die Stoffstromdichte \mathbf{J}_k setzt sich aus einem konvektiven (1) und einem diffusiven (2) Anteil zusammen:

$$\mathbf{J}_k = \rho_k \mathbf{u}_k = \underbrace{\rho_k \mathbf{u}}_{(1)} + \underbrace{\rho_k \mathbf{V}_k}_{(2)} = \rho_k \mathbf{u} + \mathbf{j}_k \quad (2.22)$$

Die lokale Strömungsgeschwindigkeit \mathbf{u}_k der Spezies k bildet sich additiv aus der mittleren Strömungsgeschwindigkeit \mathbf{u} und der Diffusionsgeschwindigkeit \mathbf{V}_k . Es wird $\mathbf{j}_k = \rho_k \mathbf{V}_k$ als Diffusionsstromdichte bezeichnet und Gl.(2.21) zu

$$\frac{\partial \rho_k}{\partial t} + \operatorname{div} (\rho_k \mathbf{u}) + \operatorname{div} \mathbf{j}_k = \dot{\rho}_k^c \quad (2.23)$$

und erfüllt bei Aufsummierung über alle Spezies Gl.(2.20).

2.2.3 Impulsbilanz

Bei der Betrachtung des Impulses ist $F_{i\dots j}$ durch die Impulsdichte $\rho \mathbf{u}$ gegeben. Eine Änderung des Impulses wird durch die Summe aller angreifenden äußeren Kräfte auf das Volumenelement hervorgerufen, welche sich aus Oberflächen- und Volumenkräften zusammensetzen. Oberflächenkräfte bewirken eine Impulsänderung aufgrund von Druck- und Reibungskräften. Weiterhin treten Körper- bzw. Volumenkräfte, z.B. durch Gravitation, auf. Es gibt keine Quellterme. Die Gleichung für den Impuls lautet somit:

$$\frac{\partial (\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \operatorname{div} (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = \operatorname{div} \mathbf{p} + \rho \mathbf{f} \quad (2.24)$$

Der konvektive Anteil der Änderung ist durch die Impulsstromdichte $\rho \mathbf{u} \mathbf{u}$ gegeben. In Gl. (2.24) sind \mathbf{f} einwirkende Körperkräfte und \mathbf{p} der Drucktensor, der die Impulsänderung durch Druck- und Reibungskräfte beschreibt und sich zusammensetzt aus [Schl65]

$$\mathbf{p} = -p \boldsymbol{\delta} + \boldsymbol{\sigma} \quad , \quad (2.25)$$

wobei p den hydrostatischen Druck, $\boldsymbol{\delta}$ das Kronecker Symbol und $\boldsymbol{\sigma}$ den Spannungstensor, d.h. den viskosen Anteil beschreiben. Gl.(2.24) wird dann zu

$$\frac{\partial (\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \operatorname{div} (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\operatorname{grad} p + \operatorname{div} \boldsymbol{\sigma} + \rho \mathbf{f} \quad (2.26)$$

2.2.4 Energiebilanz

Die Erhaltung der spezifischen Gesamtenergie e ergibt sich aus einer getrennten Betrachtung von potentieller, kinetischer und innerer Energie. $F_{i\dots j}$ ist durch die Gesamtenergiedichte ρe gegeben:

$$\rho e = \underbrace{\rho I}_{(\text{innere Energie})} + \underbrace{1/2 \rho \mathbf{u}^2}_{(\text{kinetische Energie})} + \underbrace{\rho G}_{(\text{potentielle Energie})} \quad (2.27)$$

wobei G das Potential der Energie und I die spezifische innere Energie ist. Analog zur Impulsstromdichte setzt sich die Energiestromdichte \mathbf{J}_e aus einem konvektiven Anteil (1), einem Anteil (2) für die Energieänderung durch die an der Oberfläche des Volumenelementes verrichtete Arbeit durch Druck- und Reibungskräfte sowie einem durch Wärmeleitung (3) bedingten Anteil zusammen:

$$\mathbf{J}_e = \underbrace{\rho e \mathbf{u}}_{(1)} + \underbrace{\mathbf{p} \mathbf{u}}_{(2)} + \underbrace{\mathbf{j}_q}_{(3)} \quad (2.28)$$

Dabei wird \mathbf{j}_q auch als Wärmestromdichte bezeichnet. Daraus folgt eine Gleichung für die spezifische Gesamtenergie:

$$\frac{\partial(\rho e)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho e \mathbf{u} + \mathbf{j}_q) = -p \operatorname{div} \mathbf{u} + \boldsymbol{\sigma} : \operatorname{grad} \mathbf{u} + \dot{Q}^c + \dot{Q}^r \quad (2.29)$$

Die chemisch gebundene Energie wird in Gl. 2.29 als Quelle \dot{Q}^c in der Bilanz berücksichtigt ebenso Fernwirkung, z.B. in Form von Strahlung \dot{Q}^r . Aus Gl.(2.27) eingesetzt in Gl.(2.29) lässt sich eine Gleichung formuliert für die spezifische innere Energie herleiten. Der kinetische Anteil kann dabei unter Einbeziehung der Impulsgleichung ersetzt werden [VM95]:

$$\frac{\partial(\rho I)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u} I) = -p \operatorname{div} \mathbf{u} + \boldsymbol{\sigma} : \operatorname{grad} \mathbf{u} - \operatorname{div} \mathbf{j}_q + \dot{Q}^c + \dot{Q}^r + \rho \mathbf{u} \mathbf{f} \quad (2.30)$$

Der erste Term auf der rechten Seite steht für die Änderung aufgrund von Dilatation, der zweite Term berücksichtigt den Einfluss der Reibung. Mit $h = I + p/\rho$ lässt sich Gl. 2.30 in eine Gleichung für die spezifische Enthalpie h umformen [VM95]:

$$\frac{\partial(\rho h)}{\partial t} - \frac{\partial p}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u} h) = \operatorname{div}(\mathbf{p} \mathbf{u}) - p \operatorname{div} \mathbf{u} + \boldsymbol{\sigma} : \operatorname{grad} \mathbf{u} - \operatorname{div} \mathbf{j}_q + A \quad (2.31)$$

mit $A = \dot{Q}^c + \dot{Q}^r + \rho \mathbf{u} \mathbf{f}$.

2.2.5 Die Bilanzgleichungen mit Hilfe der substantiellen Ableitung

Im Vergleich zu den Gleichungen in Abs. 2.2.1. - 2.2.4 für ein raumfestes Volumen ändern sich jetzt seine lokalen Koordinaten. Die nachfolgenden Gleichungen sollen zeigen, dass eine Lagrangesche Betrachtung auch für finite Volumen anwendbar ist. Die substantielle Ableitung einer auf die Masse bezogenen Größe $F_{i\dots j}$ wird nach Gl.(2.19) zu

$$\rho \frac{DF_{i\dots j}}{Dt} = \rho \left(\frac{\partial F_{i\dots j}}{\partial t} + u_k \frac{\partial F_{i\dots j}}{\partial x_k} \right) = \rho \left(\frac{\partial \Phi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \operatorname{grad} \Phi \right) \quad (2.32)$$

Diese Formulierung beschreibt die Änderungsrate einer Größe Φ , einem Volumenelement folgend, wobei $\partial/\partial t$ den lokalen instationären Anteil und $\mathbf{u} \cdot \operatorname{grad}$ den konvektiven Anteil der Änderung bezeichnet. Angewendet auf Gl.(2.20) ergibt sich für die Kontinuitätsgleichung

$$\frac{D\rho}{Dt} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \operatorname{grad} \rho = -\rho \operatorname{div} \mathbf{u} \quad (2.33)$$

Die Anwendung der Produktregel auf die linke Seite der Eulerschen Bilanzgleichungen liefert:

$$\frac{\partial \rho \Phi}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u} \Phi) = \rho \left(\frac{\partial \Phi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \operatorname{grad} \Phi \right) + \Phi \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}) \right) = \rho \frac{D\Phi}{Dt} \quad (2.34)$$

Da $\partial \rho / \partial t + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u})$ Gl.(2.20) genügt, folgt mit $\Phi = Y_k$ und Quellterm:

$$\rho \frac{DY_k}{Dt} = -\operatorname{div} \mathbf{j}_k + \dot{\rho}_k^c \quad (2.35)$$

Für den Impuls folgt:

$$\rho \frac{D \mathbf{u}}{Dt} = -\text{grad } p + \text{div } \boldsymbol{\sigma} + \rho \mathbf{f} \quad (2.36)$$

und für die spezifische innere Energie

$$\rho \frac{D I}{D t} = -p \text{div } \mathbf{u} + \boldsymbol{\sigma} : \text{grad } \mathbf{u} - \text{div } \mathbf{j}_q + \dot{Q}^c + \dot{Q}^r + \rho \mathbf{u} \mathbf{f} \quad (2.37)$$

bzw. für die spezifische Enthalpie

$$\rho \frac{D h}{D t} = \frac{D p}{D t} + \boldsymbol{\sigma} : \text{grad } \mathbf{u} - \text{div } \mathbf{j}_q + \dot{Q}^c + \dot{Q}^r + \rho \mathbf{u} \mathbf{f} \quad (2.38)$$

Mit der substantiellen Ableitung wird auch die Bewegung von Materie beschrieben. Diese setzt sich aus Translation, Rotation und Deformation (Dilatation + Distorsion) zusammen. Der konvektive Anteil der substantiellen Ableitung beschreibt gerade die durch die Bewegung des Fluids erfahrene Änderung der Größe Φ . Wird die substantielle Form numerisch diskretisiert, führt vor allem die Distorsion an einem Volumenelement zu numerischen Problemen [FOB81]. Allerdings hat diese Vorgehensweise einen gewichtigen Vorteil gegenüber der Bilanzierung der zeitlichen und räumlichen Ableitungen, welche durch die substantielle Ableitung ersetzt werden: Das Volumenelement bewegt sich mit der Materie, die es transportiert, so dass der konvektive Fluss in der Diskretisierung von D/Dt bereits berücksichtigt ist und in einem sich anschließendem Schritt [ARB89],[Scha70] berechnet werden kann. Das entkoppelt u.a. die konvektiven Flüsse der Spezies- und Energiegleichung von der Impulsgleichung und ist eine Stärke dieser Vorgehensweise. Aufgrund der Formulierung der substantielle Ableitung kann die Diskretisierung nur instationär sein. Das bedingt einen höheren Rechenaufwand, hat aber den Vorteil, stärker physikalisch orientiert zu sein. Die Deformation an Volumenelementen führt, wie bereits erwähnt, zu numerischen Problemen. Deshalb wird dieses Vorgehen im Zusammenspiel mit einer Eulerschen Kontrollvolumen-Methode angewandt und ist als ALE (Arbitrary Lagrangien-Eulerien) - Methode bekannt, wie sie z.B. im KIVA-Code zum Einsatz kommt [ARB89]. Obwohl hier eine Lagrangesche Betrachtung zu Grunde gelegt wird, basiert das Verfahren auf finiten Kontrollvolumen. Im Gegensatz zu einem Lagrangeschen Partikelverfahren ist der Raum des Fluides durch Diskretisierungselemente vollständig ausgefüllt. In den Partikelgleichungen in Abs. 5.2 wird dieser Nachteil detaillierter erörtert.

2.3 Die phänomenologischen Gleichungen

Die Bilanzgleichungen in Abs. 2.2 sind erst geschlossen, wenn der viskose Spannungstensor $\boldsymbol{\sigma}$, die Wärmestromdichte \mathbf{j}_q , die Diffusionsstromdichte \mathbf{j}_k sowie die Reaktionsquellterme $\dot{\rho}_k^c$ bzw. \dot{Q}^c als Funktion der abhängigen Variablen bekannt sind. Quellterme resultierend aus chemischen Reaktionen werden in Abs. 2.4 ausführlicher behandelt. Außerdem ist eine Zustandsgleichung erforderlich, die den Zusammenhang zwischen Druck, Temperatur und Konzentration beschreibt. Die im folgenden beschriebenen Gesetze sind rein empirisch². Strahlung soll hier nicht weiter betrachtet werden.

² deshalb auch die Bezeichnung als phänomenologische Gleichungen

2.3.1 Newtonscher Spannungsansatz

Die viskosen Eigenschaften eines Fluides werden mit einem Materialgesetz beschrieben. Da sich die meisten Fluide wie Newtonsche Fluide verhalten, gehorchen sie dem Newtonschen Spannungsansatz, der besagt, dass sich die auf ein Oberflächenelement einwirkenden Scherkräfte proportional zu den Geschwindigkeitsgradienten verhalten [Schl65]. Für den Spannungstensor $\boldsymbol{\sigma}$ gilt:

$$\boldsymbol{\sigma} = \mu \left[\text{grad } \mathbf{u} + (\text{grad } \mathbf{u})^T \right] - \left(\frac{2}{3} \mu - \mu_d \right) (\text{div } \mathbf{u}) \boldsymbol{\delta} \quad (2.39)$$

Hier bezeichnet μ die dynamische Viskosität des Gasgemisches, μ_d die Druckzähigkeit, die z.B. durch Reibungseffekte bei der Expansion des Fluids hervorgerufen wird. Die Druckzähigkeit kann gegenüber der dynamischen Viskosität vernachlässigt werden [Ger05].

2.3.2 Ficksches Diffusionsgesetz

Der konvektive Transport einer Spezies ist an die Strömungsgeschwindigkeit gekoppelt, wogegen der diffusive Transport auf Gradienten in der Verteilung der Spezies beruht. Dieser basiert meist auf dem Fickschen Gesetz, welches allerdings nur für binäre Gasgemische ohne Druck- und Temperaturgradienten gültig ist:

$$\mathbf{j}_k = -\rho D_k \text{grad}(\rho_k/\rho) \quad (2.40)$$

Hier ist D_k der Diffusionskoeffizient der Spezies k , der aus den binären Diffusionskoeffizienten bestimmbar ist [PPC01]. Der diffusive Stofftransport wird nicht nur durch Konzentrationsgradienten verursacht sondern auch durch Thermo-, Druck-, und Massenkraftdiffusion der Spezies, die in turbulenten Strömungen allerdings eine untergeordnete Rolle spielen [Ger05].

2.3.3 Fouriersches Wärmeleitungsgesetz

Die Wärmestromdichte setzt sich aus verschiedenen Anteilen zusammen, wobei Wärmeleitung (Fouriersches Gesetz) und Transport von Enthalpie aufgrund von Diffusion auftreten. Unter Vernachlässigung des Dufour-Effekts (Diffusionswärmeleitung) genügt sie folgendem empirischen Ansatz [HCB]

$$\mathbf{j}_q = \underbrace{-\lambda \text{grad } T}_{\text{Wärmeleitung}} - \rho \underbrace{D_k \sum_k h_k \text{grad}(\rho_k/\rho)}_{\text{Wärmestrom durch Diffusion}} \quad (2.41)$$

mit dem Wärmeleitfähigkeitskoeffizienten λ , der Temperatur T sowie den spezifischen Enthalpien h_k einer Spezies.

2.3.4 Transportkoeffizienten und thermodynamische Beziehungen

Da in der vorliegenden Arbeit reagierende Strömungen im Vordergrund stehen, müssen weitere Gleichungen zur Verfügung gestellt werden, die z.B. Temperatur- und Druckabhängigkeit von Transportkoeffizienten, wie μ , λ oder D_k berücksichtigen. In turbulenten Strömungen spielen sie jedoch eine untergeordnete Rolle, weshalb auf sie hier nicht weiter eingegangen werden soll. Zudem sind aus der Thermodynamik sowohl thermische als auch kalorische Zustandsgleichungen für die Berechnung erforderlich. Eine wichtige thermische Zustandsgleichung ist die ideale Gasgleichung, die Druck, Temperatur und Dichte miteinander verknüpft:

$$p = R_0 T \sum_{i=1}^N \rho_k / W_k \quad (2.42)$$

R_0 ist die allgemeine Gaskonstante und W_k die molare Masse der Spezies. Das ideale Gasgesetz setzt die Vernachlässigung zwischenmolekularer Kräfte voraus. Erst bei sehr hohem Druck ($> 100\text{bar}$) ist diese Voraussetzung nicht mehr erfüllt und es gelten die Gesetze des realen Gases, wo Van-der-Waals Kräfte wirksam werden. Für ein ideales Gas gelten die kalorischen Zustandsgleichungen, die eine Verknüpfung von innerer Energie bzw. Enthalpie mit den thermodynamischen Zustandsgrößen herstellen:

$$dU = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_{V, n_k} dT + \left(\frac{\partial U}{\partial V} \right)_{T, n_k} dV + \left(\frac{\partial U}{\partial n_k} \right)_{T, V, n_j \neq n_k} dn_k \text{ sowie} \quad (2.43)$$

$$dH = \left(\frac{\partial H}{\partial T} \right)_{p, n_k} dT + \left(\frac{\partial H}{\partial p} \right)_{T, n_k} dp + \left(\frac{\partial H}{\partial n_k} \right)_{T, p, n_j \neq n_k} dn_k \quad (2.44)$$

Unter vorgeschriebenen Bedingungen lassen sich aus Gl.2.43 bzw. Gl.2.44 weitere Beziehungen ableiten. Für $V = \text{konstant}$ und $dn_k = 0$ folgt aus Gl.2.43

$$dU = C_v dT \text{ bzw. } dI = c_v dT \text{ mit } I = U/m \text{ und } c_v = C_v/m \quad (2.45)$$

und aus Gl.2.44 für $p = \text{konstant}$ und $dn_k = 0$ folgt

$$dH = C_p dT \text{ bzw. } dh = c_p dT \text{ mit } h = H/m \text{ und } c_p = C_p/m \quad (2.46)$$

Mit Hilfe tabellierter Werte [BGR93] für die temperaturabhängigen Größen $c_{p,k}$ und $c_{v,k}$ kann für ein Mehrkomponentengemisch die Wärmekapazität berechnet werden:

$$c_p(T) = \sum_{k=1}^N Y_k c_{pk}(T) \text{ bzw. } c_v(T) = \sum_{k=1}^N Y_k c_{vk}(T) \quad (2.47)$$

Gleiches gilt für die spezifischen Größen von Enthalpie und innerer Energie:

$$h(T) = \sum_{k=1}^N Y_k h_k(T) \text{ bzw. } I(T) = \sum_{k=1}^N Y_k I_k(T) \quad (2.48)$$

Zwischen spezifischer innerer Energie und Enthalpie gilt folgender Zusammenhang:

$$h_k(T) = I_k(T) + R_0 T / W_k \quad (2.49)$$

Unter Berücksichtigung der chemisch gebundenen Energie durch die Bildungsenthalpien $\Delta h_{f,k}^{ref}$ der Spezies bei $T = T_{ref}$ lassen sich I_k bzw. h_k der einzelnen Spezies berechnen:

$$h_k(T) = \int_{T=T_{ref}}^T c_{pk} dT + \Delta h_{f,k}^{ref} \text{ bzw. } I_k(T) = \int_{T=T_{ref}}^T c_{pk} dT - \frac{R_0 T}{W_k} + \Delta h_{f,k}^{ref} \quad (2.50)$$

Wird die Bildungsenthalpie $\Delta h_{f,k}^{ref}$ in Gl.(2.50) nicht berücksichtigt, muss in Gl.(2.30) ein Quellterm aufgrund chemischer Reaktionen angegeben werden. Aus in der Temperatur tabellierten Daten kann aus I oder h bei einer gegebenen Zusammensetzung die Temperatur mittels Newton-Iteration für jeden Zeit- oder Iterationsschritt ermittelt werden.

2.4 Chemische Reaktionen

Chemische Reaktionen werden in den Bilanzgleichungen in den Quelltermen berücksichtigt. Bei Verbrennungsprozessen können sie durch komplexe Reaktionsmechanismen beschrieben werden, die aus einer Vielzahl von Elementarreaktionen und Reaktionspartnern bestehen. Chemische Reaktionen laufen auf einem sehr weiten zeitlichen Spektrum ab. In Mehrkomponentensystemen werden sie in Form ihrer Elementarreaktionen dargestellt

$$\sum_{k=1}^N a_{kr} \chi_k \rightarrow \sum_{k=1}^N b_{kr} \chi_k, \quad (2.51)$$

wobei χ_k das chemische Zeichen, z.B. $\chi_k = CO_2$, der k -ten Spezies kennzeichnet, a_{kr} und b_{kr} sind die stöchiometrischen Koeffizienten von k in Reaktion r . Die N Spezies werden durch chemische Reaktionen entweder neu gebildet oder verbraucht. Bei Verbrennungsvorgängen können daran mehrere 1000 Reaktionen beteiligt sein. Der chemische Quellterm in Gl.(2.21) ist die Folge aus der Bildung und dem Verbrauch von Stoff k aufgrund verschiedener Reaktionsschritte R :

$$\dot{\rho}_k^c = \dot{\omega}_k = W \sum_{r=1}^R (b_{kr} - a_{kr}) \dot{\omega}_r \quad (2.52)$$

wobei eine Reaktion durch die Reaktionsrate $\dot{\omega}_r$ bestimmt wird, die sich aus einer Vorwärts- und Rückwärtsreaktion zusammensetzt:

$$\dot{\omega}_r = k_r^f \prod_{k=1}^N c_k^{a_{kr}} - k_r^b \prod_{k=1}^N c_k^{b_{kr}} \quad \text{mit} \quad c_k = \frac{\rho_k}{W_k} \quad (2.53)$$

Das Produkt der Konzentrationen c_k beschreibt die Wahrscheinlichkeit, mit der Moleküle zusammenstoßen und eine Reaktion eingehen können. Die Fähigkeit miteinander zu reagieren wird über die Koeffizienten k_r^f und k_r^b für die Hin- und Rückreaktion beschrieben und mit dem Arrhenius Ansatz modelliert:

$$k_r = \underbrace{A_r T^{n_r}}_{s_1} \underbrace{\exp(-E_r^a / RT)}_{s_2} \quad (2.54)$$

Hier ist A_r ein vorexponentieller Faktor entsprechend einer Kollisionsfrequenz der Moleküle, n_r ein Temperaturexponent und E_r^a die Aktivierungsenergie. Diese Parameter werden in der chemischen Reaktionskinetik bestimmt und sind meist nur innerhalb eines aufgestellten Reaktionsmechanismus unter definierten Bedingungen gültig. Der Arrhenius Ansatz bildet somit für die auf molekularer Ebene ablaufenden chemischen Reaktionen einen Berechnungsansatz mit Hilfe makroskopischer Größen. Bei der Mehrheit der Reaktionen müssen oft nur die Parameter der Hinreaktion und somit k_r^f bekannt sein. Wenn Hin- und Rückreaktion gleich schnell ablaufen, ist chemisches Gleichgewicht erreicht. Dann kann aus der Gleichgewichtskonstanten der Koeffizient der Rückreaktion k_r^b berechnet werden [Sch75]. Das ist deshalb zulässig, da sich das Gleichgewicht der Reaktion im Vergleich zur Änderung der Strömung sehr schnell einstellt. Im Gleichgewicht gilt folgender Zusammenhang:

$$K_r^c(T) = \prod_{k=1}^N c_k^{(b_{kr} - a_{kr})} \quad (2.55)$$

Der Arrheniuskoeffizient der Rückreaktion lässt sich dann über die Gleichgewichtskonstante $K_r^c(T)$ und dem Koeffizienten der Hinreaktion berechnen aus:

$$k_r^b = k_r^f / K_r^c(T) \quad (2.56)$$

Wie bereits erwähnt, sind die Datensätze für A_r , n_r und E_r^a nur für bestimmte Bedingungen gültig und werden permanent aktualisiert bzw. erweitert. Für die numerische Simulation werden evaluierte Reaktionsmechanismen eingesetzt. Deshalb sollte keine Mischung der Elementarreaktionen aus verschiedenen Literaturquellen erfolgen. Der Quellterm in der Energiegleichung wird aus der Reaktionsrate berechnet. Die Wärmefreisetzung ist:

$$\dot{Q}^c = \dot{\omega}_h = \sum_{r=1}^R q_r \dot{\omega}_r \quad \text{wobei} \quad q_r = \sum_{k=1}^N (b_{kr} - a_{kr}) (\Delta h_{f,k}^{ref}) \quad (2.57)$$

Hier ist $\Delta h_{f,k}^{ref}$ die Bildungsenthalpie von k bei einer Referenztemperatur T^{ref} . Die Anwendung einer detaillierten Reaktionskinetik ist die Basis für die Berechnung chemischer Reaktionen in Verbrennungsprozessen. Um den rechnerischen Aufwand zu minimieren, werden reduzierte Mechanismen eingesetzt, die trotz ihrer Reduzierung eine detaillierte Kinetik abbilden können und somit kinetische Effekte berücksichtigen. Dies ist für die Berechnung der Schadstoffbildung von Bedeutung, da sie von den verschiedensten Radikalen und Zwischenprodukten abhängig ist und ein großes zeitliches Spektrum aufweist. Einen Sonderfall stellt das chemische Gleichgewicht bei unendlich schneller Reaktionskinetik dar.

3 Turbulenz und gemittelte Erhaltungsgleichungen

Die in Abs. 2.2 aufgestellten Bilanzgleichungen sind allgemein formuliert und besitzen sowohl für laminare als auch für turbulente Strömungen Gültigkeit. Bei der Berechnung turbulenter Strömungen müssen jedoch unterschiedlichste Zeit- und Längenskalen aufgelöst werden, die bei reagierenden Strömungen um chemische Prozesse erweitert wird. Weiter kommt hinzu, dass die kleinsten chemischen Skalen oft niedriger sind als die kleinsten physikalischen Zeitskalen (s. Abb. 3.1), was die Annahme unendlich schnell ablaufender Reaktionen bedingt. In praktischen Anwendungen können sowohl nicht alle zeitlichen als auch räumlichen Strukturen aufgelöst werden, so dass sich deren direkte Berechnung meist auf akademische Fragestellungen beschränkt. Für die Berechnung turbulenter Strömungen in praxisnahen Anwendungen können deshalb nicht die allgemeinen Gleichungen verwendet werden; eine Mittelung der Gleichungen ist dann erforderlich. Es sollen zunächst einige grundlegende Betrachtungen zu turbulenten Strömungen angestellt und anschließend Methoden zur Mittelung der Gleichungen vorgestellt werden.

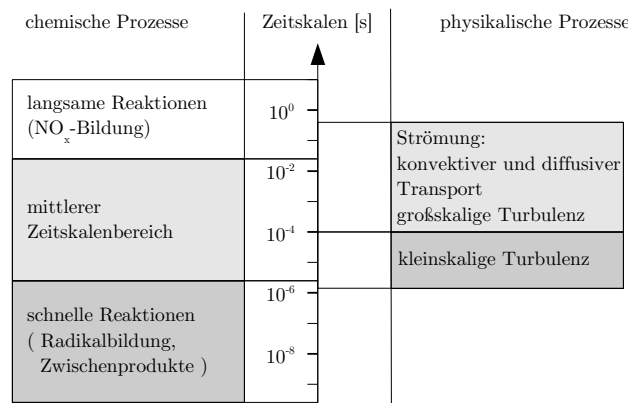


Abbildung 3.1: Chemische und physikalische Zeitskalen in einer turbulenten Strömung ([Por03])

3.1 Laminare und turbulente Strömungen

Strömungen sind dadurch charakterisiert, ob sie sich laminar oder turbulent verhalten. Der Übergang von laminarer zu turbulenter Strömung erfolgt, wenn ein kritisches Verhältnis von Trägheitskräften zu viskosen Kräften, der Reynoldszahl (Re-Zahl)

$$Re = \frac{UL}{\nu} \quad (3.1)$$

überschritten wird, wobei U eine charakteristische Geschwindigkeit und L eine charakteristische Länge der Strömung kennzeichnet. Als stoffliche Eigenschaft geht die kinematische Viskosität ν ein. In laminaren Strömungen strömt das Fluid näherungsweise in parallelen Schichten, einen Queraustausch zwischen den Schichten gibt es nur aufgrund molekularen Austausches. In turbulenten Strömungen wird diese Schichtung aufgehoben und es kommt zu einem Austausch von Stoff, Impuls und Energie senkrecht zur Strömungsrichtung, der sich makroskopisch scheinbar zufällig und chaotisch darstellt. Turbulente Strömungen sind grundsätzlich dreidimensional, zeitabhängig und räumlich inhomogen, während laminare Strömungen auch eindimensional und stationär sein können. Im Vergleich zur laminaren Strömung besitzen turbulente Strömungen eine stark erhöhte effektive Diffusivität, Viskosität und Wärmeleitung, was eine gute Mischung gewährleistet und in technischen Anwendungen vorteilhaft ausgenutzt wird. Ein weiteres Merkmal ist das dissipative Verhalten einer turbulenten Strömung, d.h. die Erhöhung der inneren Energie aufgrund der Umwandlung turbulenter kinetischer Energie.

3.2 Charakterisierung der Turbulenz

Eine turbulente Strömung weist ein großes Spektrum unterschiedlich großer Wirbel auf. Je nach Größe wird ihnen eine bestimmte räumliche Ausdehnung l und Geschwindigkeit u zugeordnet. Die Wirbelabmessung l wird nach einem Vorschlag von Taylor [Tay35] als die Größe eines Fluidballens gedeutet, dessen Geschwindigkeitsschwankungen korreliert sind. Die Bewegungsenergie der Wirbel stammt aus den Zonen des Strömungsfeldes mit großen Geschwindigkeitsgradienten in Normalenrichtung zu den Stromlinien. Sie wird innerhalb der Wirbel bis auf die kleinsten Skalen übertragen, wobei dem Strömungsfeld stetig Energie entzogen wird. Es bildet sich nach den sogenannten Kolmogorov-Hypothesen eine Turbulenzkaskade [Kol41] aus, die einen Transfer der kinetischen Energie der Hauptströmung bis auf den molekularen Bereich bewirkt. Entspricht die Wirbelgröße dem Kolmogorovschen Längensmaß l_η in Gl. (3.2), wird die übertragene Energie in unkorrelierte Molekülbewegungen (innere Energie des Fluids) überführt. Kleinere Wirbel sind nicht möglich; die viskosen Effekte nehmen zu. Entscheidend für den Energietransfer ist nach Kolmogorov die Annahme, dass die von den größeren auf die kleineren Wirbel pro Zeiteinheit übertragene turbulente kinetische Energie in erster Näherung gleich bleibt. Unter Vernachlässigung von Transport- und Speichereffekten herrscht somit in einer stationären turbulenten Strömung ein energetisches Gleichgewicht, wobei die auf den größten Skalen produzierte turbulente kinetische Energie auf den kleinsten Längenskalen dissipiert wird. Bei genügend großer Re-Zahl sind die kleinsten Skalen in ihrem Verhalten eher isotrop, während die großen Skalen anisotropen Charakter besitzen. Für die Dissipation in den kleinsten Skalen ist die kinematische Viskosität ν verantwortlich. Von der Dissipationsrate ε und ν hängen dann die kleinsten Turbulenzskalen ab. Mittels einer Dimensionsanalyse kann das kleinste Längensmaß l_η , Zeitmaß τ_η und Geschwindigkeitsmaß u_η durch

$$l_\eta \approx (\nu^3/\varepsilon)^{1/4}, \quad u_\eta \approx (\nu\varepsilon)^{1/4}, \quad \tau_\eta \approx (\nu/\varepsilon)^{1/2} \quad (3.2)$$

abgeschätzt werden [Kol41]. In Richtung der großen Skalen wird die Längenskala durch das Makrolängensmaß l_{max} bestimmt. Dieses liegt im Bereich der maximalen Geometrieabmessung, z.B. dem maximaler Brennkammerdurchmesser. Zwischen Turbulenz erzeugenden und dissipativen Wirbelelementen gibt es eine Gruppe mit $l_{max} > l > l_\eta$. Wie bereits ausgeführt, ist der Energietransport in die kleinen Skalen nur von ε bestimmt und unabhängig von ν . Daraus lassen sich folgende charakteristische Geschwindigkeiten und Zeiten ableiten:

$$u(l) = (\varepsilon l)^{1/3}, \quad \tau(l) = l/u(l) = (l^2/\varepsilon)^{1/3} \quad (3.3)$$

Mit Hilfe einer Spektralanalyse lässt sich eine Untersuchung des Kaskadenprozesses anstellen [Wil93]. Dazu wird das Integral $E(\kappa) d\kappa$ eingeführt, das die turbulente kinetische Energie k im Bereich zwischen den Wellenzahlen κ und $\kappa \pm d\kappa/2$ beschreibt, wobei $E(\kappa)$ die Energiedichte darstellt. Die Wellenzahl entspricht dem reziproken Wert der Abmessung des jeweiligen Wirbels $\kappa = 1/l$. Detaillierte Betrachtungen finden sich in [Hin75] sowie [TL72]. Für die in der Gesamtheit aller Wirbelbewegungen gespeicherte Energie k gilt dann:

$$k = \int_0^{\infty} E(\kappa) d\kappa \quad (3.4)$$

Die Energiekaskade kann in drei große Bereiche aufgeteilt werden: Produktionsbereich, Trägheitsbereich und viskoser Bereich. Wirbel mit kleinen Wellenzahlen beinhalten den überwiegenden Anteil der turbulenten kinetischen Energie und kennzeichnen den Produktionsbereich. Im sich anschließenden Trägheitsbereich entstehen keine neuen Wirbel direkt aus der Hauptströmung. Die Energie aus der Rotationsbewegung der Wirbel wird durch die Impulserhaltung von den größeren auf die kleineren Wirbel übertragen. Dissipationseffekte spielen in beiden Bereichen nur eine unbedeutende Rolle. Der viskose Bereich ist durch einen sehr schnellen Zerfall der Wirbel gekennzeichnet, die wie schon erwähnt in der Größenordnung von l_η sind. Die Dissipation ε von Turbulenzenergie erfolgt durch molekulare Reibungskräfte. Um Turbulenz mit einer rechnerischen Methode erfassen zu können, wird eine statistische Betrachtungsweise angewandt (s. Abs. 3.4) und der Momentanwert einer Strömungsgröße in einen zeitlichen Mittelwert und den zugehörigen Schwankungswert zerlegt. Zur Charakterisierung der Geschwindigkeitsfluktuationen wird als Maß oft die quadratische Abweichung vom Mittelwert bzw. der RMS³ Wert verwendet. Für die u-Komponente der Geschwindigkeit gilt:

$$u_{rms} = U' = \sqrt{u'^2} \quad (3.5)$$

Analog können V' und W' für die anderen Richtungen im Raum bestimmt werden. Da die in ihnen gespeicherte kinetische Energie der turbulenten kinetischen Energie k entspricht, gilt

$$k = \frac{1}{2}(U'^2 + V'^2 + W'^2), \quad (3.6)$$

wobei mit Annahme isotroper Turbulenz $U'^2 = V'^2 = W'^2$ folgt:

$$U' = \sqrt{\frac{2}{3}k} \quad (3.7)$$

U' kann hierbei als mittlere Tangentialgeschwindigkeit der großen Energie tragenden Wirbel interpretiert werden. Diese sind durch das turbulente integrale Längenmaß l_t repräsentiert, welches sowohl für die Turbulenzmodellierung (s. Abs. 3.6) als auch zur Definition von Kennzahlen in turbulenten Strömungen verwendet wird. Eine Re-Zahl kann für jede Längenskala l definiert werden:

$$Re(l) = \frac{u(l) l}{\nu} \quad (3.8)$$

Für die kleinsten (Kolmogorov) als auch für die integralen Skalen ergibt sich für die Re-Zahl:

$$Re_\eta = Re(l_\eta) = \frac{u_\eta l_\eta}{\nu} = \frac{\varepsilon^{1/3} l_\eta^{4/3}}{\nu} = 1 \quad \text{bzw.} \quad Re_t = Re(l_t) = \frac{U' l_t}{\nu} \quad (3.9)$$

3 engl.: root mean square, RMS

Mit zunehmender Re-Zahl wächst das Verhältnis von kleinsten Längen- und Zeitskalen zu deren integralen Skalen mit

$$l_\eta/l_t \propto Re_t^{-3/4}, \quad u_\eta/U' \propto Re_t^{-1/4}, \quad \tau_\eta/\tau_t \propto Re_t^{-1/2}, \quad (3.10)$$

was einen Anstieg der Stützstellen bei der Berechnung zur Folge hat, wenn dort alle Strukturen vollständig aufgelöst werden sollen.

3.3 Numerische Simulation der Turbulenz

Für die Berechnung einer turbulenten Strömung müssen die kleinsten und auch die größten der physikalischen Längen- und Zeitskalen aufgelöst werden. Dies ist dann gegeben, wenn sie von der Größe des Rechnernetzes erfasst werden. Die Größe des Rechnernetzes sollte ein Mehrfaches des integralen Längenmaßes l_t betragen. Die kleinsten Skalen werden durch das Kolmogorov Längenmaß angegeben. Das führt zu der Bedingung

$$l_t/l_\eta < N \quad \text{entsprechend} \quad Re_t^{3/4} < N \quad \text{bzw.} \quad Re_t < N^{4/3} \quad (3.11)$$

mit N Anzahl an erforderlichen Gitterpunkten in jede Raumrichtung. Gleichung (3.11) bestimmt die Anzahl der Gitterpunkte in jede Richtung bei gegebener turbulenter Re-Zahl. Das bedeutet für die Berechnung, dass nicht immer alle turbulenten Skalen aufgelöst werden können und alternative Methoden gefunden werden müssen. Dabei wird zwischen drei verschiedenen Methoden unterschieden.

DNS. Bei der direkten numerischen Simulation werden die stochastischen Strömungsvorgänge zeitlich und örtlich vollständig aufgelöst und müssen nicht modelliert werden. Selbst mit den heute zur Verfügung stehenden Rechnern stellt dies noch immer sehr hohe Anforderungen an die Rechnerleistung. Zu Forschungszwecken wird sie daher auch nur für Probleme mit vergleichsweise niedrigen Re-Zahlen eingesetzt. Bei instationären Verbrennungsvorgängen mit $Re \approx 10^6$ ist die DNS praktisch nicht möglich [PV01]. Die Bedeutung der DNS liegt daher eher bei der detaillierten Analyse turbulenter Verbrennung und daraus resultierender Modellentwicklung für RANS und LES.

LES. Eine praktikablere Möglichkeit der Berechnung bietet die Large Eddy Simulation [Sag01],[Frö06]. Durch die Anwendung von Filterfunktionen wird das Gleichungssystem so umgewandelt, dass die Strömungsgrößen in den großen Wirbelstrukturen berechnet und gleichzeitig die der kleinskaligen Wirbel modelliert werden. Da die Anwendung von LES jedoch die Auflösung des integralen Längenmaßes und darunter erfordert, bleibt sie in Bezug auf den Rechenaufwand ebenfalls ein aufwendiges Verfahren. LES wird noch vorwiegend in der akademischen Forschung angewandt, steht aber auch in kommerziellen Codes (FLUENT, CFX) zur Verfügung. Als eine Alternative zur reinen LES bieten sich hybride Verfahren an, die LES mit URANS-Verfahren kombinieren. Dazu zählen DES (Detached Eddy Simulation) [Spa97] sowie SAS (Scale-Adaptive Simulation) [ME04],[ME05].

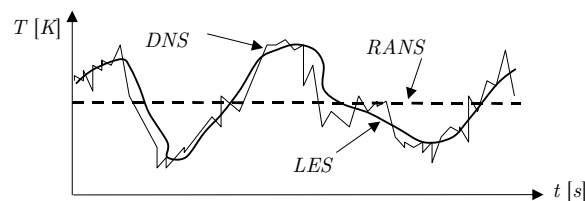


Abbildung 3.2:

Auflösung von Zeitskalen in der numerischen Simulation

RANS/URANS⁴. Um Berechnungen von realen Anwendungen zügig durchführen zu können, bleibt letztlich nur die Anwendung statistischer Methoden, bei denen der geringere Rechenaufwand zu Gunsten eines erhöhten Modellierungsaufwandes in Kauf genommen werden muss. Das Gleichungssystem wird so umgeformt, dass zeitliche oder Ensemble Mittelwerte der Strömungsgrößen berechnet werden [No93]. Der Wert einer Strömungsgröße, z.B. der Temperatur, an einem bestimmten Ort berechnet mit RANS/URANS Methoden, liefert einen Wert, der dem statistisch mittleren Wert dieser Größe entspricht (s. Abb. 3.2).

3.4 Statistische Modellierung turbulenter Strömungen

Für die Berechnung in technischen Anwendungen werden die stochastischen Eigenschaften turbulenter Strömungen genutzt und eine Mittelung der physikalischen Größen durchgeführt. Dies ist möglich, da trotz der stochastisch fluktuierenden Bewegung der Strömung Gesetzmäßigkeiten bezüglich ihres zeitlichen Verlaufs gegeben sind. Dabei wird der zeitabhängige Wert der betrachtenden fluktuierenden Größe zerlegt und in einen Mittelwert und einen fluktuierenden Anteil aufgespalten. Bei der Art der Zerlegung kann zwischen der Reynolds- und der Favre-Zerlegung unterschieden werden.

3.4.1 Reynolds-Zerlegung

Die Reynolds-Zerlegung wird direkt mit der fluktuierenden Größe gebildet. Die Darstellung des zeitabhängigen Wertes einer Strömungsgröße erfolgt durch

$$\bar{\Phi} = \bar{\Phi} + \Phi' \quad \text{mit} \quad \bar{\Phi}' = 0, \quad (3.12)$$

wobei $\bar{\Phi}$ den Mittelwert und Φ' den fluktuierenden Anteil kennzeichnet. Die Reynolds Zerlegung findet vorrangig Anwendung bei inerten Strömungen mit konstanter Dichte.

3.4.2 Favre-Zerlegung

Hier wird die zeitabhängige Größe ebenfalls in ihren Mittelwert $\tilde{\Phi}$ und den fluktuierenden Anteil Φ'' aufgespalten, wobei die Zerlegung mit der Dichte gewichteten Mittelwerten erfolgt:

$$\bar{\Phi} = \tilde{\Phi} + \Phi'' \quad \text{mit} \quad \tilde{\Phi} = \overline{\rho \Phi} / \bar{\rho} \quad \text{bzw.} \quad \bar{\rho} \tilde{\Phi} = \overline{\rho \Phi} \quad (3.13)$$

Bei der Favre-Zerlegung [Fav69] gilt im Gegensatz zur Reynolds-Zerlegung, dass

$$\overline{\Phi''} \neq 0 \quad \text{aber} \quad \overline{\rho \Phi''} = 0 \quad (3.14)$$

Die Favre-Mittelung ist zunächst aus reinen mathematischen Gesichtspunkten heraus entstanden, da dann in den gemittelten Gleichungen viele Terme der Art $\overline{\rho \Phi''} = 0$ auftreten und sich somit die Anzahl der ungeschlossenen Korrelationen reduziert. Viele Messverfahren basieren jedoch auf Favre-Mittelwerten, so dass diese Art der Mittelung von Bedeutung ist. Die Favre-Zerlegung wird angewendet, wenn sich die Dichte aufgrund des Druckes oder der Temperatur, wie es in Verbrennungsprozessen der Fall ist, ändert.

3.4.3 Mittelwerte

Im Anschluss an die Zerlegung müssen die Gleichungen gemittelt werden. Die Mittelwertbildung unterscheidet zwischen zeitlicher Mittelung, Ensemble-Mittelung und räumlicher Mittelung. Das zeitliche Mittel wird durch Integration über einen ausreichend langen Zeitraum t_{end} gebildet:

4 engl.: Reynolds Averaged Navier Stokes bzw. Unsteady RANS

$$\bar{\Phi}(x_i, t) = \frac{1}{t_{end} - t_0} \int_{t_0}^{t_0 + t_{end}} \Phi(x_i, t) dt \quad (3.15)$$

Gl.(3.15) basiert auf der Reynolds-Zerlegung von Φ . Für eine nach Favre zerlegte Größe gilt analog unter Einbeziehung der Dichte:

$$\tilde{\Phi}(x_i, t) = \frac{1}{\bar{\rho}(x_i, t)} \frac{1}{t_{end} - t_0} \int_{t_0}^{t_0 + t_{end}} \rho(x_i, t) \Phi(x_i, t) dt \quad (3.16)$$

Für instationäre Strömungen lassen sich zeitliche Mittelwerte festlegen, wenn die zeitlichen Fluktuationen sehr schnell gegenüber der zeitlichen Änderung des Mittelwertes sind:

$$\bar{\Phi}(x_i, t') = \frac{1}{t_2 - t_1} \int_{t_1}^{t_1 + t_2} \Phi(x_i, t) dt \quad \text{mit} \quad t_1 \leq t' \leq t_2 \quad (3.17)$$

Bei der Ensemble-Mittelung gilt für die Reynolds-Zerlegung der Zufallsvariable $\bar{\Phi}(x_i, t)$

$$\bar{\Phi}(x_i, t) = \langle \Phi(x_i, t) \rangle_N = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \Phi^j(x_i, t) \quad (3.18)$$

mit N voneinander unabhängigen Realisierungen und dem Wert jeder Realisierung Φ^j . Mit $N \rightarrow \infty$ geht $\langle \Phi(x_i, t) \rangle_N$ in den Erwartungswert⁵ über [Hä74]. Im Gegensatz zur zeitlichen, ist die Ensemble-Mittelung bei instationären Vorgängen von keinem Zeitintervall abhängig. Die Ensemble-Mittel können eine beliebige Funktion der Zeit sein, setzen aber eine ausreichend hohe Anzahl an Realisierungen voraus.

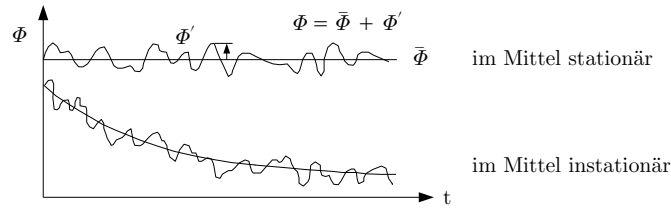


Abbildung 3.3: Meßwerte einer physikalischen Größe in einer turbulenten Strömung

Bei der Favre-Zerlegung muss Gl.(3.17) entsprechend mit der Dichte gewichtet werden. Die Zerlegung der Strömungsgrößen und die anschließende Mittelung der Gleichungen führt zur Verringerung des Rechenaufwandes für turbulente Strömungen. Mit der Mittelung gehen aber Informationen verloren, die besonders bei reagierenden Strömungen in Form von Spezies- und Temperaturverteilungen von Interesse sind. Bei der Verbrennungssimulation ist daher nur die Kenntnis der Mittelwerte nicht ausreichend (s. Abs. 3.6.5).

3.5 Mittelung der Gleichungen

Aus den vorangegangenen Betrachtungen ergeben sich die gemittelten Bilanzgleichungen erster Momente. Die Dichte und der Druck sind nicht Favre gemittelt. Auf einer Mittelung der Gleichungen basieren alle RANS-, URANS- und LES- Verfahren. Aus Gl.(2.20) wird für die Gesamtmasse:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \text{div}(\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}}) = 0 \quad (3.19)$$

Für die Spezies k mit $\rho_k = \rho Y_k$ ergibt sich aus Gl.(2.23):

⁵ Der Erwartungswert ist ein Begriff der Stochastik und jener Wert einer Zufallsvariablen, der sich bei mehrmaligem Wiederholen des zugrunde liegenden Experiments als Mittelwert der Ergebnisse ergibt.

$$\frac{\partial(\bar{\rho} \tilde{Y}_k)}{\partial t} + \text{div}(\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \tilde{Y}_k + \bar{\rho} \overline{\mathbf{u}'' Y_k''}) = \text{div} \bar{\mathbf{j}}_k + \bar{\rho}^c \quad (3.20)$$

Die Impulsgleichung ist dann formuliert mit:

$$\frac{\partial(\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}})}{\partial t} + \text{div}(\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \tilde{\mathbf{u}} + \bar{\rho} \overline{\mathbf{u}'' \mathbf{u}''}) = -\text{grad} \bar{p} + \text{div} \tilde{\boldsymbol{\sigma}} + \bar{\rho} \bar{\mathbf{f}} \quad (3.21)$$

und die Energiegleichung lautet ohne Strahlungsterm:

$$\frac{\partial(\bar{\rho} \tilde{I})}{\partial t} + \text{div}(\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \tilde{I} + \bar{\rho} \overline{\mathbf{u}'' I''}) = -\bar{p} \text{div} \tilde{\mathbf{u}} + \tilde{\boldsymbol{\sigma}} : \text{grad} \tilde{\mathbf{u}} - \bar{\mathbf{j}}_q + \bar{Q}^c + \bar{\rho} \mathbf{u} \mathbf{f} \quad (3.22)$$

Die Mittelung erfolgt für alle Gleichungen, so dass auch für die ideale Gasgleichung

$$\bar{p} = R_0 \tilde{T} \sum_{k=1}^N \bar{\rho} \tilde{Y}_k / W_k + R_0 \sum_{k=1}^N (\overline{\rho T'' Y_k''}) / W_k \quad (3.23)$$

gilt, wobei der zweite Term in Gl.(3.23) schwer bestimmbar und im Vergleich zum ersten Term deutlich kleiner ist. Deshalb wird überwiegend nur der erste Term berücksichtigt [Ger05]. Die Spezies-Temperatur Fluktuationen dürfen das Molgewicht des Gemisches allerdings nicht beeinflussen. Die nach Favre als auch nach Reynolds gemittelten Gleichungen enthalten Korrelationen, die fluktuierende Größen enthalten. In den gemittelten Gleichungen treten neue Terme der allgemeinen Form

$$\bar{\rho} \overline{\mathbf{u}'' \boldsymbol{\Phi}''} \quad (3.24)$$

auf, die den Einfluss der Turbulenz auf die mittleren Strömungsgrößen zum Ausdruck bringen und nicht direkt berechnet werden können. In den Impulsgleichungen handelt es sich um den Reynolds-Spannungs-Tensor, der den Einfluss der Turbulenz auf das Geschwindigkeitsfeld widerspiegelt. In den Speziesgleichungen werden diese Terme als Reynolds-Komponentenflüsse bezeichnet, die den turbulenzbedingten Fluss eines Stoffes zum Ausdruck bringen und Größenordnungen über dem molekularen Stofftransport liegen. Des Weiteren treten Reynolds-Energieflüsse auf. Bei sehr geringen Auswirkungen auf die Lösung können diese Terme teilweise vernachlässigt werden. Ansonsten besteht die Möglichkeit der direkten Modellierung mittels algebraischer Beziehungen basierend auf den Erwartungswerten (Schließungsansatz erster Ordnung) oder des Lösen neuer Transportgleichungen für die Momente 2. Ordnung, die wiederum unbekannte Terme enthalten und damit keine endgültige Schließung der Gleichungen zulassen [Ger05]. Das setzt sich bei Gleichungen noch höherer Ordnung fort und es kommt zum sogenannten Schließungsproblem bei der Beschreibung turbulenter Strömungen. Zudem steigt der Rechenaufwand deutlich an. Die Modellierung von physikalischen Gesetzmäßigkeiten zur Schließung der Terme sind bei Momenten ab 2. Ordnung nur über eine statistische Beschreibung möglich.

3.6 Turbulenzmodellierung

Die unbekanntenen Korrelationen der Schwankungsgrößen aus Abs. 3.5 müssen mit Turbulenzmodellen geschlossen werden. Im Wesentlichen wird eine Modellierung mittels eines Gradientenansatzes durchgeführt, es können aber auch weitere Transportgleichungen für die unbekanntenen Korrelationen formuliert werden.

3.6.1 Reynolds-Spannungen

Die Reynolds-Spannungen sind die ungeschlossenen Terme der gemittelten Impulsgleichung. Sie werden häufig mit dem linearen Wirbelviskositätsansatz, der auf Boussinesq [Hin75] zurückgeht, beschrieben. Der turbulente Spannungstensor $\boldsymbol{\sigma}_t$, der sich aus dem Ansatz für Newtonsche Fluide aus Gl.(2.39) ergibt, wird zur Wirbelviskosität μ_t in Bezug gesetzt mit

$$\boldsymbol{\sigma}_t := \tilde{\boldsymbol{\sigma}} = \bar{\rho} \overline{\mathbf{u}'' \mathbf{u}''} \approx \mu_t \left(\text{grad } \tilde{\mathbf{u}} + (\text{grad } \tilde{\mathbf{u}})^T \right) - \frac{2}{3} (\mu_t \text{div } \mathbf{u} + \rho k) \boldsymbol{\delta} \quad , \quad (3.25)$$

wobei im Gegensatz zu Gl.(2.39) der Term $2/3 \bar{\rho} k \boldsymbol{\delta}$ hinzu kommt. Um bei Summation der Reynolds-Normalspannungen die turbulente kinetische Energie aus dem Boussinesq-Ansatz zu erhalten, wurde dieser Term hinzugefügt. k liefert einen Ausdruck für die turbulente kinetische Energie, die sich aus der Summe der Normalspannungen ergibt

$$k = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 \overline{u_i'' u_i''} \quad (3.26)$$

Es stellt sich die Frage nach der Bestimmung von μ_t , die keine echte Stoffeigenschaft angibt und modelliert werden muss (Wirbelviskositätsmodelle). Die Wirbelviskosität ist eine skalare und richtungsunabhängige Größe und spiegelt isotrope Turbulenz wieder. Damit ist auch deren wesentliche Einschränkung festgelegt. Verbreitet sind bei der Modellierung algebraische Ansätze, die in Null-, Ein- oder Zwei-Gleichungsmodellen⁶ klassifiziert werden [AH04].

Das k - ε Modell

Ein sehr verbreitetes Modell ist das k - ε -Modell, welches den Zwei-Gleichungsmodellen zugeordnet ist. Während k den gesamten momentanen Energiegehalt der Wirbelkaskade beschreibt, ist ε die Dissipationsrate (s. Abs. 3.2). Ausgehend von diesen beiden Größen wird ein Ansatz für die Wirbelviskosität hergeleitet, der auf B.E. Launder und D.B. Spalding [LS72] zurück geht

$$\mu_t = \bar{\rho} C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad , \quad (3.27)$$

wobei zwei zusätzliche Transportgleichungen für die turbulente kinetische Energie k und die Dissipationsrate ε gelöst werden müssen:

$$\frac{\partial(\bar{\rho} k)}{\partial t} + \text{div}(\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} k) = -\text{div} \left(\boldsymbol{\mu} \text{grad } k + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \text{grad } k \right) + P_k - \bar{\rho} \varepsilon \quad (3.28)$$

$$\frac{\partial(\bar{\rho} \varepsilon)}{\partial t} + \text{div}(\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \varepsilon) = -\text{div} \left(\boldsymbol{\mu} \text{grad } \varepsilon + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \text{grad } \varepsilon \right) + C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} P_k - C_{\varepsilon 2} \bar{\rho} \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (3.29)$$

mit dem Quellterm P_k

$$P_k = -\bar{\rho} \overline{\mathbf{u}'' \mathbf{u}''} \cdot \text{grad } \tilde{\mathbf{u}} \quad (3.30)$$

und den Modellkonstanten $C_\mu = 0.09$, $\sigma_k = 1.0$, $\sigma_\varepsilon = 1.3$, $C_{\varepsilon 1} = 1.44$ und $\tau_t = k/\varepsilon$, die aus experimentellen Ergebnissen angepasst wurden. Aus k und ε lassen sich ein turbulentes Geschwindigkeits-, Längen- und Zeitmaß bestimmen, die aufgrund der breiten Turbulenzstrukturen als integrale Größen anzusehen sind, mit $u_t = (2/3 k)^{1/2}$ sowie $l_t = k^{3/2}/\varepsilon$. Ein Zeitmaß ist gegeben mit $\tau_t = k/\varepsilon$. Ebenfalls ergibt sich mit $\sqrt{\varepsilon/\nu}$ das Kolmogorov Längenmaß. Das k - ε Modell ist aufgrund seiner Einfachheit sehr verbreitet und es können damit viele Strömungsprobleme gut beschrieben werden. Der isotrope Ansatz von

⁶ Das Kriterium sind die Anzahl an zusätzlich zu lösenden Gleichungen für die Modellierung der Wirbelviskosität

μ_t liefert wie bei allen Wirbelviskositätsmodellen allerdings ein erhebliches Defizit hinsichtlich der Beschreibung komplexerer Austauschmechanismen. Dazu zählen die Modellierung von Ablösevorgängen unter Einfluss eines positiven Druckgradienten, krümmungsinduzierte Variation turbulenter Schubspannungen sowie generell überall dort, wo der anisotrope Charakter der Strömung zum Tragen kommt. Durch Anpassung der Konstanten lässt sich die Genauigkeit der Lösung für einen speziellen Fall zwar verbessern, Allgemeingültigkeit geht dadurch aber verloren. Der große Vorteil ist die numerische Stabilität, Robustheit, Einfachheit und Effizienz. Wegen seiner fehlenden Genauigkeit wurden viele Modifizierungen des k - ε Modells vorgenommen, besonders in der ε Gleichung; das RNG k - ε Modell von Yakhot V. und Orszag S.A. [YO86] sowie das Realizable k - ε Modell von Shih et al. [Sh95]. In diesen Modellen werden zusätzliche Terme in den Transportgleichungen für k und ε berücksichtigt, andere Koeffizienten verwendet sowie Änderungen bei der Berechnung der Wirbelviskosität vorgenommen. Sowohl das RNG als auch das Realizable Modell zeigen substantielle Verbesserungen gegenüber dem Standard- k - ε Modell, bei dem die Charakteristik der Strömung durch starke Stromlinienkrümmung, Verwirbelungen und Rotation geprägt ist. Studien zeigen [Fluent], dass das RNG-Modell gegenüber allen modifizierten k - ε Modellen die größte Leistungsfähigkeit für verschiedene Validierungsfälle aufweist. Da das k - ε Modell zu den Modellen für hohe Re-Zahlen zählt, kann die Berechnung in den wandnahen Bereichen bei unzureichender Auflösung der viskosen Unterschicht zu falschen Ergebnissen führen [Fluent]. Einen verbesserten Ansatz liefert hier das im Folgenden vorgestellte k - ω -Modell.

Das k - ω Modell

Als ein weiteres Wirbelviskositätsmodell ist hier das k - ω -Modell von Wilcox [Wil93] zu nennen. Anstelle der Dissipationsrate ε wird für die spezifische Dissipationsrate ω , die nach Kolmogorov [Kol42] ebenfalls als ein charakteristisches Turbulenzmaß angesehen werden kann, eine Transportgleichung gelöst. Die spezifische Dissipationsrate ist als inverses Zeitmaß der energietragenden Wirbel interpretiert:

$$\omega = \frac{1}{C_\mu} \frac{\varepsilon}{k} \quad (3.31)$$

Die Transportgleichung für ω lautet:

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\omega)}{\partial t} + \text{div}(\bar{\rho}\tilde{\mathbf{u}}\omega) = -\frac{\partial}{\partial x_i} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\omega} \right) \frac{\partial \omega}{\partial x_i} \right] + (C_{\varepsilon 1} - 1) \frac{\omega}{k} P_k - C_\mu (C_{\varepsilon 2} - 1) \omega^2 \quad (3.32)$$

mit den Standardmodellkonstanten $C_\mu=0.09$, $\sigma_k=2.0$, $\sigma_\omega=2.0$, $C_{\varepsilon 1}=1.55$ und $C_{\varepsilon 2}=1.83$. Die turbulente Viskosität ist gegeben durch

$$\mu_t = \frac{k}{\omega} \quad (3.33)$$

Der Vorteil des k - ω -Modell liegt darin, den semi-viskosen und voll-turbulenten Bereich der Wandgrenzschicht konsistent zu beschreiben. Es enthält Modifikationen für Strömungen bei niedrigen Re-Zahlen, bei Kompressibilität sowie bei Scherströmungen. Dagegen ist es jedoch sehr sensitiv gegenüber den Zuströmrandbedingungen der Längenmaße. Daraus haben sich Kombinationen von k - ε und k - ω -Modellen entwickelt, z.B. das Baseline-Modell von Menter [Men94].

Reynoldsspannungsmodelle

Besonders die starke Anisotropie verlangt in komplexen Strömungen einen veränderten Modellierungsansatz. Eine Möglichkeit ist die Formulierung von Transportgleichungen für die Reynolds-Spannungen und führt zum Reynolds-Spannungs-Modell⁷ von Launder et al [LRR75]. Beim RSM-Modell werden zur Bestimmung des Spannungstensors die Transportgleichungen für die sechs Reynoldsspannungen gelöst [FLL87],[JM88]. In diesen Transportgleichungen treten Tripelkorrelationen auf, die modelliert werden müssen, wobei die Zuverlässigkeit des Modells stark von den getroffenen Schließungsannahmen abhängt, und experimentelle Daten für höhere Korrelationen nicht verfügbar sind. Modellierungsansätze sind deshalb schwierig zu finden. Mit steigender Anzahl zu lösender Gleichungen, steigt zudem auch die Rechenzeit und der Speicherbedarf im Vergleich zum Standard k - ε bzw. k - ω -Modell. Aufgrund dessen hat sich das RSM Modell in der Anwendung nicht richtig durchsetzen können. In RANS Simulationen liefert es zudem im Vergleich zu seinen höheren Rechenzeiten oft keine überzeugenden besseren Ergebnisse.

3.6.2 Komponentenflüsse

Für die Modellierung kann ein Gradienten-Diffusionsansatz verwendet werden. Analog zu den diffusiven Transporttermen werden die turbulenten Mischungsvorgänge proportional zu dem Gradienten der Favre-gemittelten Strömungsgröße definiert:

$$\bar{\rho} \overline{u'' Y_k''} \approx -\bar{\rho} D_t \text{grad } \tilde{Y}_k = \frac{\mu_t}{Sc_t} \text{grad } \tilde{Y}_k \quad (3.34)$$

Gl.(3.34) stellt einen relativ einfachen Ansatz dar, der zwar die Rechenzeiten minimiert, aber eine Diskrepanz zu den realen physikalischen Vorgängen aufweisen kann. Es können Abweichungen zwischen der Richtung des mittleren Gradienten und der Richtung des realen turbulenzbedingten Stofftransports auftreten, wobei im extremen Fall auch ein turbulenter Transport entgegen die Richtung des Gradienten⁸ vorkommen kann [Mos79], [LB81]. Dies gilt insbesondere für Verbrennungsprozesse mit hohen Dichtegradienten. Je nach Richtung des relativen Druck- und Geschwindigkeitsgradienten wird der turbulente Transport einer skalaren Größe verstärkt oder vermindert. Ein erweiterter Ansatz ist deshalb die tensorielle Notierung des turbulenzbedingten Diffusionskoeffizienten D_t , der Flüsse in beliebige Raumrichtungen ermöglicht [Ger05]. Auch hier kann eine Transportgleichung für die Komponentenflüsse aufgestellt werden, auf die nicht näher eingegangen werden soll. Die molekulare Diffusion $\bar{j}_{k,i}$ in Gl.(3.20) muss ebenfalls modelliert werden, Unter Vernachlässigung turbulenter Fluktuationen auf die Diffusionskoeffizienten folgt [Ger05]:

$$\bar{j}_k \approx -\bar{\rho} D_k \text{grad } \tilde{Y}_k \quad (3.35)$$

Mit D_{eff} kann ein effektiver Austauschkoefizient eingeführt werden, der sich aus dem molekularen und turbulenten Anteil zusammensetzt:

$$D_{eff} = D_t + D_k \quad (3.36)$$

Bei stark turbulenten Strömungen übersteigt der turbulente Transport den molekularen Transport um Größenordnungen. Dadurch können im Gleichungssystem die molekularen Transportterme vernachlässigt werden.

⁷ engl.: RSM - Reynolds Stress Model

⁸ engl.: counter-gradient diffusion

3.6.3 Energieflüsse

Auch hier ist eine Modellierung mittels Gradienten-Ansatz mit

$$\bar{\rho} \overline{\mathbf{u}' T'} \approx -\frac{\lambda_t}{c_v} \text{grad } \tilde{T} = -\frac{\mu_t}{Pr_t} \text{grad } \tilde{T} \quad (3.37)$$

möglich, wobei der Reynolds-Energiefluss zum Gradienten des mittleren Energie über die turbulenzbedingte Wärmeleitfähigkeit λ_t in Bezug gesetzt wird. Er unterliegt ähnlichen Einschränkungen wie bei Gl.(3.34) erwähnt. Auch für die Reynolds-Energieflüsse kann eine Transportgleichung aufgestellt werden. Der mittlere Energiefluß wird mit

$$\bar{\mathbf{j}}_q \approx -\lambda \text{grad } \tilde{T} - \bar{\rho} \sum_{k=1}^N D_k \tilde{h}_k \text{grad } \tilde{Y}_k \quad (3.38)$$

approximiert, wobei turbulente Fluktuationen auf λ und D_k hier nicht berücksichtigt sind. Bei stark turbulenten Strömungen ist dieser Term aufgrund des vielfach höheren Anteils von Gl. (3.37) vernachlässigbar.

3.6.4 Turbulente Transportkoeffizienten

Die Transportkoeffizienten μ_t , D_t und λ_t werden aus Kennzahlen ermittelt; für den Stofftransport ist dies die turbulente Schmidt-Zahl Sc_t und analog für den Wärmetransport die turbulente Prandtl-Zahl Pr_t :

$$D_t = \frac{\mu_t}{\bar{\rho} Sc_t}, \quad \lambda_t = \frac{\mu_t c_v}{Pr_t} \quad (3.39)$$

μ_t wird aus dem Turbulenzmodell zur Verfügung gestellt. Alle Größen mit Index t sind keine Stoffwerte. Die dimensionslosen Kennzahlen Sc_t und Pr_t können in gewissen Fällen näherungsweise als Konstanten angesehen werden. Beide bewegen sich in der Größenordnung zwischen 0.7 - 1.0 und werden meist mit demselben Wert angegeben. Lokale Variationen werden dann nicht erfasst.

3.6.5 Mittlerer chemischer Quellterm

Die Favre-Mittelung führt auch zu einem Schließungsproblem des mittleren chemischen Quellterms $\bar{\omega}_k$. Grund dafür ist die starke nicht-lineare Abhängigkeit der Reaktionsrate von Variablen, die in turbulenten Strömungen großen Schwankungen unterworfen sind. Anhand einer irreversiblen bimolekularen Reaktion $A + B \rightarrow C$ kann dies veranschaulicht werden. Unter Vernachlässigung von Dichtefluktuationen wird zunächst aus Gl.(2.52)

$$\bar{\omega}_A = \frac{\bar{\rho}^2}{W_A W_B} (\bar{k}_f^r + k_f^{r'}) (\bar{Y}_A + Y'_A) (\bar{Y}_B + Y'_B) \quad (3.40)$$

Nach Ausmultiplizieren von Gl.(3.40) entstehen neue unbekannte Korrelationen. Für trimolekulare Reaktionen vergrößert sich nochmals die Anzahl der Korrelationen. Zudem hängt der Geschwindigkeitskoeffizient k_f^r sehr stark von der Temperatur ab. Seine beiden nichtlinearen Anteile s_1 und s_2 in Gl.(2.54)

$$s_1 = A_r (\bar{T} + T')^{n_r} \quad \text{sowie} \quad s_2 = \exp\left(-\frac{E_r^a}{R \bar{T}}\right) \exp\left(\frac{E_r^a}{R \bar{T}} \frac{T' / \bar{T}}{1 + T' / \bar{T}}\right) \quad (3.41)$$

müssen aufgrund von Potenzen fluktuierender Anteile in Potenzreihen entwickelt werden:

$$s_1 = A \bar{T}^n \left[1 + \sum_{\alpha=1}^{\infty} Q_{\alpha} \left(\frac{T'}{\bar{T}} \right)^{\alpha} \right] \quad \text{sowie} \quad s_2 = \exp \left(-\frac{E_r^r}{R \bar{T}} \right) \left[1 + \sum_{\alpha=1}^{\infty} P_{\alpha} \left(\frac{T'}{\bar{T}} \right)^{\alpha} \right], \quad (3.42)$$

wobei sich die Anteile von Q_{α} und P_{α} wie folgt definieren

$$Q_{\alpha} \equiv \frac{n(n-1)\dots(n-\alpha+1)}{\alpha!}, \quad P_{\alpha} \equiv \sum_{\beta=1}^{\alpha} (-1)^{\alpha-\beta} \frac{(\alpha-1)!}{[(\beta-1)!]^2 (\alpha-\beta)! \beta} \left(\frac{E_r^r}{R \bar{T}} \right)^{\beta} \quad (3.43)$$

Unter Anwendung der Favre Mittelung [Bor78] ergibt sich ein komplexer Zusammenhang für die mittlere Reaktionsrate der Spezies A:

$$\bar{\omega}_A = -A_r \frac{\bar{\rho}^2}{W_A W_B} \tilde{T}^{n_r} \tilde{Y}_A \tilde{Y}_B \exp \left(\frac{E_r^a}{R \tilde{T}} \right) \left[1 + \frac{\overline{Y_A'' Y_B''}}{\tilde{Y}_A \tilde{Y}_B} + C \right] \quad (3.44)$$

$$C = (P_1 + Q_1) \left(\frac{\overline{Y_A'' T''}}{\tilde{Y}_A \tilde{T}} + \frac{\overline{Y_B'' T''}}{\tilde{Y}_B \tilde{T}} \right) + (P_2 + Q_2 + P_1 Q_1) \left(\frac{\overline{Y_A'' T''^2}}{\tilde{Y}_A \tilde{T}^2} + \frac{\overline{Y_B'' T''^2}}{\tilde{Y}_B \tilde{T}^2} \right) + ..$$

mit den Reihen P_n und Q_n [Ger05]. P_n und Q_n werden bereits nach wenigen Gliedern abgebrochen, was für Q_n mit steigendem n zulässig ist, während die Reihe P_n auch bei höheren Korrelationen einen großen Beitrag liefert. Werden nur wenige Terme berücksichtigt, entsteht ein großer Abbruchfehler. Somit ist die komplexe Form von Gl.(3.44) nur auf eine einfache irreversible Reaktion anwendbar und schwer auf große chemische Systeme übertragbar. Für perfekt gemischte Zustände wird die Reaktionsrate häufig mit den mittleren Größen berechnet, was auch als „quasi laminare Kinetik“ bezeichnet wird [CK94]. Es wird dabei vorausgesetzt, dass chemische Zeiten sehr groß im Vergleich zu den turbulenten Zeitskalen sind ($Da \ll 1$ s. Abs. 4.1.3). Eine erste einfache Näherung für die mittlere Reaktionsrate einer Ein-Schritt Reaktion erhält man, wenn alle Effekte aufgrund der Turbulenz vernachlässigt werden und aus Gl.(3.44) nur der erste Term aus der Reihenentwicklung berücksichtigt wird:

$$\bar{\omega}_F = \omega_F(\bar{\rho}, \tilde{Y}_F, \tilde{Y}_O, \tilde{T}) = -A_r \bar{\rho}^2 \tilde{T}^{n_r} \tilde{Y}_F \tilde{Y}_O \exp \left(-\frac{E_r^a}{R \tilde{T}} \right) (1 + \alpha_s) \quad (3.45)$$

Hier ist $\alpha_s = \overline{Y_F'' Y_O''} / \tilde{Y}_F \tilde{Y}_O$ der Segregationsfaktor, der die Mischung zwischen Brennstoff und Oxidator angibt und von Chen und Kollmann zur Beschreibung von Diffusionsflammen [CK89] eingeführt wird. Für $\alpha_s = 0$ liegt eine perfekte Mischung vor, bei $\alpha_s = -1$ sind beide Komponenten vollständig voneinander getrennt. Für $-1 < \alpha_s < 0$ muss α_s modelliert werden. Dieser Ansatz wird auch verwendet, wenn chemische Zeiten im Gegensatz zu denen der Strömung nicht vernachlässigt werden können. Er ist nur für eine äußerst einfache Analyse in speziellen Anwendungsfällen zu verwenden [VCP92].

4 Turbulenz-Chemie Interaktionen

Neben den bereits auftretenden herausfordernden Aufgaben der Turbulenzmodellierung muss auch der chemische Quellterm im Zusammenwirken mit den turbulenten Eigenschaften der Strömung mit einem geeigneten Ansatz modelliert werden. Gl.(3.44) kann aufgrund der vielen unbekanntenen Korrelationen für dessen Berechnung nicht herangezogen werden. In einer turbulenten Strömung treten sowohl räumlich als auch zeitlich große Schwankungen der physikalischen Größen auf. Davon sind sowohl die chemische Zusammensetzung als auch die Temperatur beeinflusst. Da beide wesentlich die Reaktionsrate bestimmen, ist zu erwarten, dass auch deren Schwankungen stark zur Berechnung der erforderlichen mittleren Reaktionsrate beitragen. Aufgrund der starken Nichtlinearitäten im Arrheniusansatz aus Abs. 2.4, ist es nicht möglich, den mittleren Quellterm für die Größe k aus den mittleren skalaren Größen zu ermitteln. Es gilt daher in den allermeisten Fällen

$$\bar{\omega}_k \neq \dot{\omega}_k(\bar{\rho}_i, \tilde{T}) \quad \text{mit} \quad i = 1, \dots, N, \quad (4.1)$$

wobei N die Anzahl der beteiligten Spezies angibt. Auch für die Dichte gilt

$$\bar{\rho} \neq \rho(\bar{\rho}_i, \tilde{T}) \quad (4.2)$$

Der turbulente Transport und damit die Mischung auf mikroskopischer Ebene von Spezies als auch Energie spielt bei der Berechnung des mittleren chemischen Quellterms eine wichtige Rolle und kann in diesem Zusammenhang nicht vernachlässigt werden.

4.1 Spezifizierung von Verbrennungsprozessen

Für die Modellierung der Turbulenz-Chemie Interaktionen sollen zunächst einige theoretische Betrachtungen zu Eigenschaften turbulenter Flammen erfolgen. Grundsätzlich wird bei der Modellierung zwischen Vormisch- und Diffusionsflammen unterschieden. Diese unterscheiden sich voneinander, ob die Reaktionspartner schon vor der Reaktion bis zur molekularen Ebene als Mischung vorliegen oder ob Mischung und Verbrennung gleichzeitig ablaufen. Die Übergänge sind allerdings fließend und können in den meisten Fällen nicht voneinander getrennt betrachtet werden. Meist ist eine Kombination aus Beiden in der Praxis anzutreffen, die auch als partiell vorgemischte Flammen bezeichnet werden. Aufgrund unterschiedlicher Einflüsse müssen verschiedene Parameter zur Beschreibung der physikalischen Phänomene herangezogen werden.

4.1.1 Die turbulente Verbrennung

Im Gegensatz zu einer laminaren Strömung kommt es in turbulenten Strömungen zu starken Interaktionen zwischen turbulenter Bewegung und chemischen Reaktionen. Die auftretenden Vorgänge sind eng miteinander gekoppelt und es kommt hinzu, dass chemische Reaktionen

stark nicht-linear sind. Die Strömung verändert sich bei der Verbrennung aufgrund der freigesetzten Wärme durch Veränderung der Dichte ρ , die sich wiederum mit der Temperatur ändert. Für die Dichte erfolgt die Änderung im Verhältnis 1:8 bis 1:10 je nach verwendetem Brennstoff sowie herrschender Betriebsbedingungen [PV01], gleiches gilt für die kinematische Viskosität μ und andere Stoffgrößen. Diese Veränderungen können Turbulenz hervorrufen (Flame Generated Turbulence) oder auch abschwächen (Relaminarisierung) [LL92]. Um eine quantitative Aussage über die Produktion von Turbulenz direkt durch die Flammenfront zu erhalten, haben Videto und Santavicca [VS90] Messungen an einer Freistrahlf Flamme durchgeführt. Gemessen wurde die Änderung der Turbulenzenergie über der Flammenfront, wobei sich die Normalkomponente der Turbulenzintensität um das fünf- bis sechsfache, die Parallelkomponente um das zwei- bis dreifache erhöhte. Auch das integrale Längenmaß der Turbulenz wurde durch die Flammenfront beeinflusst und wuchs in Normalenrichtung zur Flamme auf den zweifachen Wert, parallel zur Flammenfront auf den eineinhalbfachen Wert, verglichen mit der Strömung im unverbrannten Gas vor der Flamme, an. Hier wird deutlich, dass die getroffene Annahme von isotroper Turbulenz (s. Abs. 3.6) bei der Modellierung turbulenter reaktiver Strömungen eine nicht zutreffende Vereinfachung darstellt. Andererseits verändert die Turbulenz die Flammenstruktur, beeinflusst chemische Reaktionen, kann diese unterdrücken und sogar zur Verlöschung führen. Ein wesentlicher Effekt auf die chemischen Reaktionen sind im Vergleich zu einer laminaren Strömung die dramatische Erhöhung der effektiven Diffusionsraten der Spezies (Abs. 3.6.2) und der Energie (Abs. 3.6.3). Ursache dafür ist die Mischung in den großen und kleinen Wirbelstrukturen, die zu einem Anstieg in der effektiven Austauschfläche und zur Erhöhung der Gradienten beiträgt. Mit experimentellen Untersuchungen an einer vorgemischten Flamme konnte gezeigt werden, dass Turbulenz einen beschleunigenden Effekt auf die Reaktionsraten ausübt [THH86]. Gleiche Beobachtungen konnten auch für Diffusionsflammen gemacht werden: In einem Experiment von Lewis und Von Elbe [LE87] wurde die Flammenlänge in Abhängigkeit der Reynolds-Zahl (Re-Zahl) gemessen, die im laminaren Bereich mit der Re-Zahl linear ansteigt. Bei ausreichend hoher Re-Zahl wird die Strömung turbulent; die Flammenlänge nimmt wieder ab, bis sie sich auf einen konstanten Wert einstellt, der unabhängig von der Re-Zahl ist. Die Reaktionsrate pro Volumeneinheit steigt somit aufgrund turbulenter Effekte. Die Verbrennung wird effizienter bis schließlich ein Abheben der Flamme bis hin zum Verlöschen (Blow-Off) stattfindet. Durch das breite Zeit- und Längenskalenspektrum ist es für komplexe Anwendungen nicht möglich, alle Vorgänge in einer turbulenten Flamme direkt aufzulösen und somit zu berechnen. Der Einfluss der in RANS/URANS sowie teilweise LES Verfahren gewöhnlich nicht aufgelösten turbulenten Fluktuationen muss aufgrund der Nichtlinearität in der Arrheniusgleichung (s. Abs. 3.6.5) bei der Berechnung einer mittleren Reaktionsrate Berücksichtigung finden. Die Entwicklung eines verlässlichen Modells ist daher Ziel der Modellierung der Chemie-Turbulenz Interaktion, um Vorhersagen, z.B. in Bezug auf Schadstoffbildung, treffen zu können. Die Kenntnis über die turbulenten Fluktuationen der einzelnen Größen des Strömungsfeldes spielt dabei eine zentrale Rolle.

4.1.2 Diffusionsflammen

Bei einer Diffusionsflamme sind Brennstoff und Oxidator⁹ beim Eintritt in die Verbrennungszone noch nicht gemischt und es muss durch konvektiven und diffusiven Transport ein zündfähiges Gemisch hergestellt werden. Die Mischung kann damit zum bestimmenden Vorgang werden und kontrolliert dann das Verhalten des gesamten Verbrennungssystems. Die Verbrennung findet dann in Gebieten statt, wo Brennstoff und

⁹ in technischen Anwendungen handelt es sich hier vorwiegend um Luft

Oxidator entsprechend gemischt vorliegen. Die Flamme ist der Turbulenz des umliegenden Strömungsfeldes ausgesetzt, wobei die Diffusionsgeschwindigkeiten stark durch die turbulenten Strukturen beeinflusst werden. Der turbulente Transport kontrolliert entscheidend die Mischung und somit auch den Reaktionsfortschritt. Eine Freistrahlfamme kann als Beispiel für eine Diffusionsflamme genannt werden. (s. Abs. 6.1). Die Verbrennung in Flugzeugtriebwerken findet ebenfalls im Diffusionsflammenbetrieb statt. Diffusionsflammen breiten sich nicht gegen die Strömung aus. Die Position der Reaktionszone ist dort gegeben, wo sich Brennstoff und Oxidator befinden. Ein Grund warum sie in Bezug auf sicherheitsrelevante Aspekte und damit auch im Brennerdesign einen Vorteil gegenüber den Vormischflammen besitzen. Außerdem muss keine Vormischung mit einem bestimmten Brennstoff-Luft Verhältnis erfolgen. Wie bereits erwähnt limitiert die Mischungsrate den Reaktionsfortschritt und damit auch die Effizienz der Verbrennung. Ein großer Nachteil dieses Verbrennungstyps ist, dass aufgrund auftretender hoher Temperaturen die thermische NO_x -Bildung nicht reduziert werden kann. Der Brennstoff kann zwar mit Stickstoff oder Abgasen verdünnt werden, jedoch ist die maximale Verbrennungstemperatur immer im Bereich stöchiometrischer Mischung, wo sich die größte NO_x -Bildungsrate befindet, zu erwarten. Für die Modellierung sind die in Diffusionsflammen vorkommenden Phänomene von Bedeutung und können auch im Kontext partiell vorgemischter Flammen angewendet werden. Die einfachste Beschreibung für die Modellierung einer Diffusionsflamme lässt sich mit Hilfe des Mischungsbruches z ausdrücken, bei der zudem zwei weitere Annahmen getroffen werden können: gleiche Diffusionskoeffizienten aller Spezies sowie gleiche Wärmekapazitäten der Spezies und deren Unabhängigkeit von der Temperatur. Der Mischungsbruch ist wie folgt definiert [WMD97], [Wil85]:

$$z_i = \frac{Z_i^F - Z_i^O}{Z_i^F - Z_i^O} \quad \text{mit} \quad Z_i = \sum_k a_{ki} \frac{W_i}{W_k} Y_k, \quad i = C, H, O, N \quad (4.3)$$

Hierbei ist Z_i der Massenanteil eines chemischen Elementes i an der Gesamtmasse. Z_i^F und Z_i^O sind die Massenbrüche des Elements i im Brennstoff- bzw. Oxidatorstrom. z_i wird auf Elementenbasis gebildet, da bei chemischen Reaktionen die Spezies gebildet oder verbraucht werden. Die Elemente bleiben erhalten und z ist somit konservative Größe. a_{ik} beschreibt die Elementen-Komponenten Matrix. Für den Fall einer irreversiblen Einschrittreaktion, die viel schneller als die Mischung abläuft, ist $z_i = z$ für alle möglichen Element-Massenbrüche. Im Brennstoffstrahl nimmt z den Wert z gleich Eins und im Oxidatorstrom den Wert z gleich Null an. Wird zusätzlich die Lewis-Zahl gleich Eins angenommen, so kann auch die Temperatur mit z beschrieben werden. Die kinetische Energie der Strömung wird vernachlässigt. Für z kann eine Bilanzgleichung formuliert werden, die keine Quellterme besitzt:

$$\frac{\partial(\rho z)}{\partial t} + \text{div}(\rho \mathbf{u} z) = \text{div} \mathbf{j}_z \quad \text{mit} \quad \mathbf{j}_z = -\rho D_z \text{grad} z \quad (4.4)$$

In einer idealisierten Diffusionsflamme ohne Strahlungswärmeverluste sowie gleichgroßen Enthalpieströmen im Eintritt, sind Spezieszusammensetzung, Temperatur und Dichte nur eine Funktion von z . Es lassen sich daraus lineare Abhängigkeiten dieser Größen und des Mischungsbruchs, z.B. mit $Y_k = Y_k(z)$ ableiten. Werden unterschiedliche Enthalpieströme berücksichtigt, kann die Abhängigkeit um die Enthalpie erweitert werden $Y_k = Y_k(z, h)$. Der Mischungsbruch allein ist besonders dann sehr aussagekräftig, wenn sich das untersuchte System im chemischen Gleichgewicht befindet und Reaktionen nicht durch kinetische Effekte kontrolliert werden. Bei endlicher Chemie mit komplexen Reaktionsmechanismen sind diese linearen Abhängigkeiten nicht mehr gegeben, der Mischungsbruch kann dann zur

Charakterisierung in Verbindung mit weiteren Parametern, z.B. der Streckungsrate verwendet werden [WMD97]. Die Modellierung einer Diffusionsflamme unter Verwendung des Mischungsbruchs gliedert sich im Wesentlichen in zwei Teilprobleme [PV01]: Zum einen in ein Mischungsproblem, um ein Aussage über $z(x_i, t)$ zu erhalten, zum anderen in ein Flammenstrukturproblem, aus dem mit Hilfe des Mischungsbruchs z lineare Abhängigkeiten von $\Phi = \Phi(z)$ mit $\Phi = Y_k, T, \rho$ konstruiert werden, um daraus $\Phi = \Phi(x_i, t)$ zu gewinnen. In Diffusionsflammen sind die Flammendicken von den Strömungsbedingungen abhängig. Zur Charakterisierung der Flammenfront können verschiedene Längenskalen eingeführt werden, wobei zwei für die Modellierung relevant sind. Zum einen ist das die Diffusionsschichtdicke l_d , die als Dicke der Zone definiert ist, in der sich der Mischungsbruch ändert und die Mischung mit $0 < z < 1$ definiert ist. Brennstoff und Oxidator co-existieren in dieser Region und werden mit den Reaktionsprodukten vermischt. Zum anderen wird eine Reaktionszonendicke l_r definiert, in der die Reaktionsrate verschieden von Null ist. Sie hat die Dicke $(\Delta z)_r$ und liegt in der Umgebung der stöchiometrischen Isolinie $z = z_{st}$. Diese beiden Skalen variieren unabhängig voneinander und hängen stark von der Zeit und den Strömungsbedingungen ab. Die Abschätzung einer Flammendicke in Abhängigkeit relevanter Parameter muss bestimmt werden. Einige Beziehungen sind nachfolgend zusammengestellt [PV01]:

$$\text{Diffusionsschicht:} \quad l_d \approx \sqrt{D_{st}/\tilde{\chi}_{st}} \quad \tau_f \approx 1/\tilde{\chi}_{st} = l_d^2/D_{st} \quad u_d = l_d/\tau_f \quad (4.5)$$

$$\text{Reaktionsschicht:} \quad l_r = l_d(Da^fl)^{-1/a} \quad \tau_c = 1/Da^fl \tilde{\chi}_{st} \quad u_r = l_r/\tau_c \quad (4.6)$$

und beschreiben Längen- (l_d, l_r) und Zeitskalen (τ_f, τ_c) sowie Geschwindigkeiten einer Diffusionsflamme. Da^fl ist die Da-Zahl der lokalen Flamme, D_{st} der molekulare Diffusionskoeffizient an der stöchiometrischen Oberfläche und $\tilde{\chi}_{st}$ die mittlere skalare Dissipationsrate (Definition s. Gl.(4.54)) von z bei $z = z_{st}$. Um turbulente nicht-vorgemischte Flammen in einem Diagramm zu klassifizieren, werden die charakteristischen Skalen der Diffusionsschicht zu den turbulenten Skalen in Bezug besetzt. Die Flammenfront wird gefaltet und von der Turbulenz beeinflusst. Unter der Annahme homogener und isotroper Turbulenz, werden die maximalen Streckungsraten sowie die kleinsten turbulenten Zeiten auf Kolmogorovskalen zurückgeführt

$$l_d \approx l_\eta \quad \text{und} \quad \tau_d = \frac{1}{\tilde{\chi}_{st}} \approx t_\eta \quad (4.7)$$

Das integrale Längenmaß l_t liegt in der Größenordnung der Dicke der mittleren Mischungszone l_z und wird aus dem Gradienten des mittleren Mischungsbruchs gebildet:

$$l_t \approx l_z \approx \frac{1}{|\text{grad } \tilde{z}|} \quad (4.8)$$

Die Struktur der Flamme und die Verbrennung hängen von der charakteristischen chemischen Zeit ab. Bei schneller Reaktionskinetik ist die Flammenfront sehr dünn $l_r \ll l_d \approx l_\eta$ und kann als laminares Flammenelement (s. Flamelet-Modell) identifiziert werden. Die laminare Struktur der Flammenfront wird durch die Turbulenz nicht zerstört. Für größere chemische Zeiten wird $l_r \approx l_\eta$. Bei sehr kleinen Da-Zahlen kommt es zur Verlöschung; der Stoff- und Wärmetransport aus der Reaktionszone verläuft schneller als die Wärmeproduktion durch chemische Reaktionen. Die Analysen für Diffusionsflammen sind nur sehr schwierig in einem Diagramm wie bei der vorgemischten Verbrennung darstellbar.

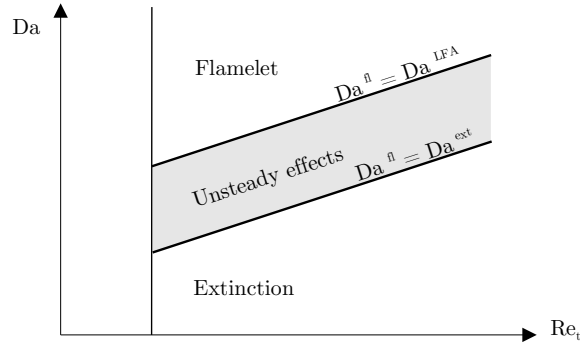


Abbildung 4.1: Regime in Diffusionsflammen als Funktion der Da-Zahl Da und der turbulenten Re-Zahl Re_t [PV01]

In einem log-log Diagramm in Abb.4.1 werden die verschiedenen Bereiche aufgrund ihrer Da-Zahl sowie der turbulenten Re-Zahl dargestellt:

$$Da = \tau_t / \tau_c \approx 2\sqrt{Re_t} Da^{fl} \quad \text{und} \quad Re_t^{3/4} \approx l_t / l_d \quad (4.9)$$

Die näherungsweise horizontalen Linien entsprechen konstanten Da^{fl} . Bei $Da^{fl} \geq Da^{LFA}$ ist eine laminare Flammenstruktur (Flamelet) zu erwarten, wohingegen unterhalb $Da^{fl} \leq Da^{ext}$ Flammenverlöschen auftritt. Flammendicke und Flammengeschwindigkeit hängen stark von den vorherrschenden Strömungsverhältnissen ab. Innerhalb einer Flamme wechseln räumliche Zonen mit Flameletcharakter sowie Gebiete nahe der Verlöschung. In der Literatur wird darauf verwiesen, dass die Klassifizierung einer nicht-vorgemischten Flamme sehr unterschiedlich geführt wird, was zu verschiedenen Diagrammen mit jeweils anderen Parametern führt [Bor88] sowie [LW94]. In einem Diagramm von Peters [Pet00] werden Flammen-Wirbel-Regime in Abhängigkeit der Da-Zahl und der Streckungsrate dargestellt.

4.1.3 Vormischflammen

Bei vorgemischten Flammen ist die Verbrennung durch komplexe Interaktionen zwischen Flammenfront und Strömungsfeld gekennzeichnet. Im Gegensatz zu einer Diffusionsflamme sind Brennstoff und Oxidator bereits vor der Zündung des Gemisches auf molekularer Ebene homogen vermischt. In der Flammenfront einer Vormischflamme finden signifikante Änderungen, z.B. von Temperatur und Zusammensetzung statt. Die Flammenfront besteht aus einer Vorwärmzone, in der die Diffusion von Energie und Masse sehr intensiv ist sowie einer Reaktionszone, in der chemische Reaktionen dominieren. Gemeinsam bilden sie die Flammendicke δ . Die Reaktionszone ist durch hohe Temperaturen charakterisiert, die sich in der Nähe von T_{max} befinden. Die Flammenfront schreitet in Richtung der Reaktanden mit der Geschwindigkeit s voran. Aus Betrachtungen für laminare Vormischflammen lässt sich eine Ausbreitungsgeschwindigkeit der Flammenfront im Gemisch der Reaktanden definieren. Eine ungestreckte laminare Flammenfront bewegt sich dann mit einer Geschwindigkeit s_L^0 mit einer Dicke δ_L^0 . Unter dem Einfluss des Strömungsfeldes kann diese gestreckt, gefaltet oder gekrümmt werden, was eine Bestimmung von s_L und δ_L deutlich erschwert. In einer turbulenten Strömung interagiert die Flammenfront mit den turbulenten Wirbelstrukturen, wobei sich die Flammengeschwindigkeit als auch die Flammendicke stark vergrößern. Einen großen Effekt auf die Eigenschaften der Flammenfront hat auch die Faltung, die nach Damköhler [Da40] den Hauptmechanismus darstellt. Es wird eine turbulente Flammengeschwindigkeit s_T definiert, die mit der Geschwindigkeit s_L^0 ins Verhältnis gesetzt wird:

$$\frac{s_T}{s_L^0} = \frac{A_T}{A} \quad (4.10)$$

Eine Erhöhung von s_T gegenüber s_L^0 ist Folge der Erhöhung der turbulenten Flammenoberfläche A_T , die eine erhöhte Umsetzungsrate im Vergleich zu einer gegebenen Querschnittsfläche A erlaubt. Das Verhältnis von tatsächlicher Flammenoberfläche zu ihrer Projektion in Hauptausbreitungsrichtung auf der rechten Seite von Gl.(4.10) kennzeichnet den Faltungsfaktor, welcher mit der Re-Zahl zunimmt und somit auch s_T . Modelle, für die mit steigenden RMS-Werten der Geschwindigkeiten auch eine Erhöhung von A_T/A beschreiben, liefern physikalisch vernünftige Ergebnisse, sind jedoch nur eine einfache akademische Betrachtung [Gou96]. Eine universelle Beziehung zwischen s_T und den RMS-Werten der Geschwindigkeit ist nur von geringem Interesse für die Modellierung von Vormischflammen, da Korrelationen zwischen s_T und den RMS-Werten von vielen Parametern beeinflusst werden [PV01]. Die Turbulenz wird ebenfalls durch die Verbrennung beeinflusst. Es kommt zur lokalen Beschleunigung der Strömung, die das turbulente Strömungsfeld verändert und zur Wirbelerzeugung führt (flammenerzeugte Turbulenz). Der turbulente Austausch wird beeinflusst. Diese Vorgänge in einem physikalischen Modell zu erfassen ist besonders dann schwierig, wenn es um die Definition einer RMS Geschwindigkeit in der Grenzschicht von verbranntem und unverbranntem Gas geht [BML84/1]. Solche Modelle sind zudem sehr komplex, um sie z.B. in RANS Simulationen einzusetzen. Zur Klassifizierung einer Vormischflamme werden durch eine physikalischen Analyse der verschiedenen Längen- und Zeitskalen unterschiedliche Verbrennungsbereiche in turbulenten Verbrennungsdiagrammen definiert, die mit Hilfe von dimensionslosen Kennzahlen voneinander abgegrenzt werden. Ausgehend von definierten Turbulenzcharakteristika zeigen die Diagramme Bereiche für sehr dünne Reaktionszonen (Flamelets; auch: laminare Flämmchen), eingeschlossene Bereiche (Pockets) oder versprengte Reaktionszonen an. Für die einzelnen Gebiete gibt es unterschiedliche Modelle. Die Ableitung der Diagramme basiert auf Annahmen isotroper homogener¹⁰ Turbulenz, bei der die Fluktuationen durch einen RMS-Wert und der integralen Längenskala l_t charakterisiert sind. Wie bereits diskutiert, ist k zur Bestimmung der RMS-Geschwindigkeiten eine lokale Größe, und aufgrund ihrer Definition lassen sich daraus nur wenige Informationen über die tatsächlichen Geschwindigkeitsverhältnisse in der Flamme gewinnen. Dennoch kann k in vielen Modellen zur Abschätzung eines turbulenten Zeitmaßes bei RANS Simulationen herangezogen werden.

Als Kennzahlen werden die Damköhler und Karlovitz Zahl eingeführt [PV01]. Die Damköhler Zahl (Da-Zahl) liefert Informationen zu Flamme-Turbulenz Interaktionen und wird aus dem Verhältnis eines integralen turbulenten Zeitmaßes zum Zeitmaß der laminar kinetischen Flamme gebildet. Die Karlovitz Zahl (Ka-Zahl) beschreibt das Verhältnis des chemischen Zeitmaßes zu dem der kleinsten Wirbelstrukturen nach Kolmogorov (s. Abs. 3.2):

$$Da = Da(l_t) = \frac{\tau_t}{\tau_c} = \frac{l_t / u'(l_t)}{\delta / s_L^0} \quad Ka = \frac{1}{Da(l_\eta)} = \frac{\tau_c}{\tau_\eta} = \frac{u'(l_\eta) / l_\eta}{s_L^0 / \delta} \quad (4.11)(4.12)$$

Bei großer Da-Zahl $Da \gg 1$ sind chemische Reaktionszeiten klein gegenüber der Lebenszeit eines Wirbels und die Turbulenz ist nicht in der Lage, die Flamme zu beeinflussen. Diese ist dann nahezu laminar (Flamelet), kann aber durch turbulente Bewegungen gefaltet werden. Aus kleinen Werten für die Da-Zahl folgen relativ lange Reaktionszeiten und damit starker Turbulenzeinfluss auf die Flamme, wobei kleine Wirbel in die Flammenfront eindringen können. Die Rate wird kontrolliert durch chemische Reaktionen, wobei Reaktanden und

¹⁰ Alle statistischen Größen sind invariant gegen eine räumliche Translation. Sie ist das räumliche Analogon zur statistischen Stationarität, bei der alle Größen invariant gegenüber Verschiebungen in der Zeit sind

Produkte durch turbulente Bewegung gemischt werden. Der Grenzfall $Da \ll 1$ ist nicht einfach zu modellieren, da dann die Mischungszeit kleiner als die chemische Zeit und die mittlere Rate stark chemisch kontrolliert ist. Flammenverlöschungen können hierbei auftreten. In technischen Anwendungen ist somit keine stabile Verbrennung gewährleistet. Für Da-Zahl und Ka-Zahl gilt folgender formaler Zusammenhang:

$$\frac{u'}{s_L^0} = \frac{1}{Da} \frac{l_t}{\delta} \quad \text{und} \quad \frac{u'}{s_L^0} = Ka^{2/3} \left(\frac{l_t}{\delta} \right)^{-1/3}, \quad (4.13)$$

wobei die Größen u'/s_L^0 und l_t/δ in einem Diagramm logarithmisch dargestellt werden und Zonen verschiedener Verbrennungsregime abgrenzen. Eine häufig verwendete Darstellung ist das Borghi Diagramm in Abb. 4.2a) [Bor88]. Hier wird eine Unterteilung in Flamelets (gewellt oder gefaltet) für $Ka < 1$ ($Da \gg 1$), aufgedickte Flammen bei $Ka > 1$ ($Da \gg 1$), auch bezeichnet als getrennte Reaktionszonen, und dem perfekt durchmischten Reaktor mit $Da \ll 1$ vorgenommen. Der Bereich der laminaren Flamme wird $Re_t < 1$ zugeordnet.

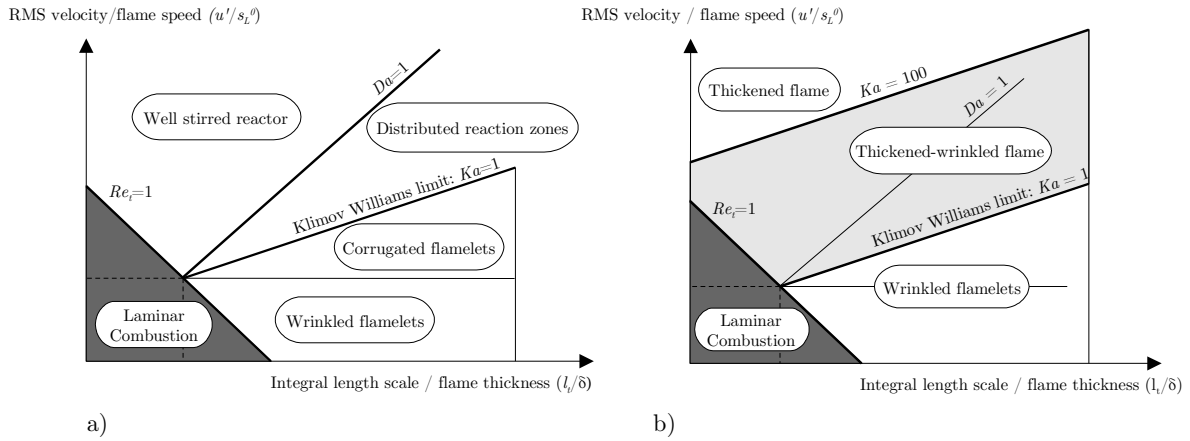


Abbildung 4.2: Borghi Diagramm a) und modifiziertes Borghi-Diagramm b) [PV01]

Peters [Pet99] nimmt in seiner Darstellung in Abb. 4.2b) eine andere Einteilung vor: Im Gegensatz zu Borghi teilt er die Flammendicke in zwei Gebiete auf: die Flammendicke δ und die Reaktionszonendicke δ_r mit $\delta_r \ll \delta$. Es ergibt sich eine weitere Grenze mit $Ka_r \approx 100$, die beschreibt, inwieweit Kolmogorov-Skalen in δ_r eindringen und zur Aufdickung der Reaktionszone führen. Mit $\delta_r = l_\eta$ ist

$$Ka_r = \left(\frac{\delta}{l_\eta} \right)^2 = \left(\frac{\delta}{\delta_r} \right)^2 \quad (4.14)$$

Es wird jetzt zwischen dünnen ($1 < Ka < Ka_r$) und aufgebrochenen Reaktionszonen ($Ka > Ka_r$) unterschieden. In der dünnen Reaktionszone bleibt die Flammenstruktur unbeeinflusst vom Strömungsfeld. Mit zunehmender Turbulenz treten Wirbel auf, die kleiner als die Reaktionszone sind. Eine Veränderung findet dann durch turbulente Transportvorgänge statt. Die verstärkte Vermischung von unverbranntem Gas mit heißem, in Reaktion befindlichem Gas kann die Reaktion lokal unterbrechen, bereits gebildete Zwischenprodukte werden abtransportiert und können an einem anderen Ort zu einem erneuten Zünden führen. Somit ist keine klar definierte Reaktionsfront oder Flammenstruktur mehr erkennbar. Ist selbst τ_t bei starker Turbulenz kleiner als das chemische Zeitmaß, können auch große Wirbel mögliche Reaktionspartner trennen, was zum Löschen der Flamme führen kann. Es stellt sich eine Homogenität in großen Bereichen des reaktiven Strömungsfeldes ein, die nach Borghi mit $Da \ll 1$ identifiziert und als eigenes Regime des

perfekt durchmischten Reaktors bezeichnet wird. Die Mischung erfolgt hier sehr schnell. Das Regime des homogenen Reaktors wird auch als Bereich der langsamen Chemie oder als chemisch limitierter Bereich bezeichnet. Weitere Betrachtungen können für noch detailliertere Wirbel-Flammen Interaktionen aufgestellt werden, die z.B. Verlöschung oder instationäre Phänomene berücksichtigen. Ein wichtiger Parameter für die externe Beeinflussung der Flamme ist der Streckungsfaktor χ oder auch skalare Dissipationsrate (vgl. Abs. 4.2.4) [MM82], [CP90]. Mit ihm werden die Effekte berücksichtigt, die z.B. bei Flammenverlöschung die Reaktionsrate auf geringe Werte reduziert und in bestimmten Fällen zur Unterdrückung der Verbrennung führen. Aufgrund der Zeitabhängigkeit turbulenter Strömungen existiert ein großes Spektrum an Zeit- und Längenskalen, welches nur mit Hilfe einer Definition für die kleinsten bzw. größten Wirbel erfasst wird. Es werden sogenannte Spektraldiagramme aufgestellt, die diesen Anforderungen mehr Rechnung tragen. Zudem erlaubt DNS die Definition weiterer Diagramme. Ein Überblick findet sich in [PV01].

4.1.4 Partielle Vormischflammen

In technischen Verbrennungssystemen kommen Vormisch- oder auch Diffusionsflammen in ihrer reinen Form sehr selten vor. Es ist eine Kombination aus beiden Flammentypen, die die sogenannten partiellen Vormischflammen bilden, wie sie z.B. in einer abgehobenen Diffusionsflamme vorkommen. Die Mischung von Brennstoff und Oxidator ist nicht länger das einteilende Kriterium. Das Brennstoff/Luft Verhältnis FAR ¹¹ des unverbrannten Gases in unmittelbarer Nähe der Flammenfront befindet sich innerhalb der Zündgrenzen, kann aber wie bei Vormischflammen a priori nicht angegeben werden. Grund hierfür ist ein noch vor oder während der Verbrennung stattfindender zusätzlicher Mischungsprozess. Dieses Verhältnis verändert sich und beeinflusst den Prozess der Flammenausbreitung. Variiert es nur in mageren Gebieten ($FAR < 1$ bzw. $z < z_{st}$), erfolgt der gesamte Brennstoffverbrauch in der Flammenfront. In fetten Gebieten wird die vorgemischte Flamme durch eine Diffusionsflamme begleitet, in der verbliebener Brennstoff oxidiert. Bei der abgehobenen Diffusionsflamme wird mit zunehmender Geschwindigkeit am Düsenaustritt die Diffusionsflammenstruktur zerstört. Die Flamme wird gestreckt und führt schließlich zum Aufbrechen der Flamme. Die Flamme hebt ab und die Reaktanden mischen sich oberhalb des Düsenaustritts ohne dabei miteinander zu reagieren. Eine Vormischflamme stabilisiert sich stromab innerhalb des Jets an einer Stelle, wo Gleichgewicht zwischen Strömungs- und Flammengeschwindigkeit erreicht wird. In Gebieten mit fetter Mischung stabilisiert sich eine fette Vormischflamme, während sich in Gebieten mit magerer Mischung eine magere Vormischflamme stabilisiert. Unverbrannter Brennstoff diffundiert durch die Flamme in eine Nachbrennzone, in der er oxidiert und sich eine zusätzliche Diffusionsflamme entlang der stöchiometrischen Mischungsoberfläche ausbildet. Diese Art Flammen werden auch als „Tripleflames“ bezeichnet. In realen Brennkammern sind die Strömungsverhältnisse oft noch komplexer, indem verschiedenen Rezirkulationszonen sowie Gradienten in unterschiedliche Richtungen vorkommen und aufgrund von Verbrennung sich gegenseitig beeinflussen. Deshalb ist deren numerische Berechnung und damit auch Auslegung ein interessantes Arbeits- und Forschungsgebiet.

11 engl.: FAR – Fuel Air Ratio

4.2 Modelle zur Berechnung des chemischen Quellterms

Bei einer turbulenten Verbrennungsrechnung macht man sich die Charakteristika von Vormisch- und Diffusionsflammen zu Nutze und versucht, mit möglichst wenigen Variablen den Verbrennungsablauf abzubilden. Wie bereits erwähnt wurde, reichen die Mittelwerte dabei zur Berechnung nicht aus. Eine verlässliche Simulation turbulenter reagierender Strömungen erfordert es, die statistische Verteilung der beteiligten Größen zu beschreiben. Die Verteilung einer turbulenten Mischung lässt sich mathematisch mit Hilfe von Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen (PDF¹²) ausdrücken. Da deren exakte Berechnung sehr aufwendig ist, wird in einfachen Modellen deren Form angenommen. Die Annahme reicht von sehr einfachen Doppel-Delta-Funktionen bis hin zu komplexen abgeschnittenen Gauß- oder β -Funktionen, deren Struktur aus zusätzlichen Transportgleichungen berechnet wird. Mit der Einführung von PDF-Transportgleichungen können die Form als auch Weite oder Schiefe der PDF aus physikalischen Ansätzen ermittelt werden. Die Monte-Carlo Methode erlaubt die Lösung der mehrdimensionalen Gleichungen (s. Abs. 4.3). Spalding [Spa01] fügt ein weiteres Modell, das Multi-Fluid-Modell (MFM), für die Lösung der PDF-Transportgleichung ein. Letzterer Ansatz soll hier aber nicht weiter vertieft werden. In vielen Modellen dominiert die Annahme unendlich schneller Chemie, was die Anwendung tabellierter Gleichgewichtswerte z.B. in Abhängigkeit des Mischungsbruchs erlaubt. Der Einfluss endlicher chemischer Kinetik kann über eine weitere Größe, der skalaren Dissipationsrate erfolgen und erlaubt so die Abweichungen vom Gleichgewicht. Weitere Modelle, wie z.B. das Eddy Dissipation Konzept (s. Abs. 4.2.2) beschreiben die chemische Kinetik mittels Arrheniusansatz.

4.2.1 Die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion

Der stochastische Charakter turbulenter Strömungen legt eine statistische Betrachtung des Problems nahe. In einem solchen stochastischen oder probabilistischen System können nur Wahrscheinlichkeiten für das Eintreten eines Ereignisses angegeben werden. Wird die statistische Information einer Variable an einem Ort zu einer bestimmten Zeit gesucht, kann eine stochastische Variable (Zufallsvariable) definiert werden, deren statistische Information durch ihre zugehörige Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion $p(\psi)$ beschrieben wird. Diese enthält keine Informationen zur räumlichen und zeitlichen Verteilung der stochastischen Variable, weshalb sie auch als Ein-Punkt-PDF bezeichnet wird. $p(\psi)d\psi$ gibt dann die Wahrscheinlichkeit an, mit der die betrachtete Zufallsvariable Φ Werte zwischen ψ und $\psi+d\psi$ annehmen kann:

$$p(\psi) d\psi = Prob(\psi \leq \Phi \leq \psi + d\psi) \quad (4.15)$$

Eine PDF muss die Normierungsbedingung im Intervall $[-\infty, +\infty]$ erfüllen sowie negative Werte ausschließen:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} p(\psi) d\psi = 1 \quad , \quad p(\psi) \geq 0 \quad (4.16)$$

Aus der in der PDF enthaltenen Information über die Fluktuationen der thermochemischen Variablen können alle statistischen Momente der Verteilung durch Integration der mit der PDF gewichteten Größe über den Zustandsraum berechnet werden. Für den Mittelwert $\bar{\Phi}$ (1. statistisches Moment oder Erwartungswert $\langle \Phi \rangle$) gilt

$$\bar{\Phi} \equiv \langle \Phi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi p(\psi) d\psi \quad (4.17)$$

¹² engl.: Probability Density Function

Die quadratische Abweichung vom Mittelwert $\overline{\Phi''^2}$ (2. statistisches Moment oder Varianz $\langle \Phi''^2 \rangle$) kann auch unmittelbar aus der PDF berechnet werden:

$$\overline{\Phi''^2} \equiv \langle \Phi''^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} (\psi - \langle \Phi \rangle)^2 p(\psi) d\psi \quad (4.18)$$

Da turbulente Strömungen durch eine Vielzahl unterschiedlicher Variablen beschrieben werden, gibt die PDF eine Funktion des Zufallsvektors $\Phi = (\Phi_1, \dots, \Phi_M)^T$ im Zustandsraum $\psi = (\psi_1, \dots, \psi_M)^T$ an, die dann als Verbund-PDF bezeichnet wird. Analog zu Gl.(4.15) gilt dann

$$p(\psi_1, \dots, \psi_M) d\psi_1 \dots d\psi_M = \text{Prob}[(\psi_1 \leq \Phi_1 \leq \psi_1 + d\psi_1) \dots (\psi_M \leq \Phi_M \leq \psi_M + d\psi_M)] \quad (4.19)$$

Für eine Verbund-PDF ist ebenfalls die Normierungsbedingung entsprechend Gl.(4.16) gültig. Die Größen ψ_1, \dots, ψ_M bezeichnen thermochemische Variablen wie Dichte, Massenbrüche und Temperatur. Pope [Pop85],[Pop90] als auch Dopazo [Dop94] fügen zusätzlich die Geschwindigkeitskomponenten in die Verbund-PDF ein. Der Mittelwert jeder zu bestimmenden Größe, wie z.B. der Reaktionsrate $\bar{\omega}_k$ ist dann

$$\bar{\omega}_k = \int_{\psi_1=-\infty}^{+\infty} \dots \int_{\psi_M=-\infty}^{+\infty} \dot{\omega}_k(\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_M) p(\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_M) d\psi_1 d\psi_2 \dots d\psi_M \quad (4.20)$$

womit unter Voraussetzung der Kenntnis der PDF die mittleren Reaktionsraten direkt aus den Reaktionsraten der Zufallsgrößen ermittelt werden. Weitere Erwartungswerte und Varianzen können entsprechend Gl.(4.17) und Gl.(4.18) berechnet werden. Die Schwierigkeiten dieses Ansatzes liegen in der Bestimmung der Verbund-PDF, die sich an jedem Punkt in der Strömung ändert. Ist an einem Punkt die PDF bekannt, lassen sich die Mittelwerte der lokalen Eigenschaften berechnen, wobei die Art der Mittelung einer Ensemble-Mittelung entspricht. Sie erfolgt mit einer genügend großen Anzahl verschiedener Ereignisse.

4.2.2 Presumed - PDF

Die Form der PDF anzunehmen ist eine Möglichkeit das turbulente Spektrum aus mittleren und fluktuierenden Größen des Strömungsfeldes zu berechnen. Die Form der PDF wird angenommen und wird nicht direkt berechnet, wie es im z.B. PDF Transportansatz der Fall ist. Die Form der PDF ist über eine begrenzte Anzahl an Parametern festgelegt. Die Parameter werden aus den statistischen Momenten der Strömungsgröße bestimmt. Die ersten statistischen Momente sind aus den Transportgleichungen bekannt, während für die Varianz entweder eine Transportgleichung gelöst oder sie mit einem Gradientenansatz modelliert werden muss. Einfachste Ansätze sind zwei- oder dreifache Dirac-Funktionen. Die Doppel-Delta PDF ist gegeben mit

$$p(\psi) = a\delta(\Phi - \psi_1) + b\delta(\Phi - \psi_2) \quad (4.21)$$

In einer bimodalen Verteilung werden z.B. nur zwei Zustände unterschieden. Solche Verteilungen implizieren nur diskrete Zustände. Kontinuierliche Verteilungen sind dagegen weit verbreitet. Die populärste unter ihnen ist die β -Verteilung, da sich aus numerischen Untersuchungen von Girimaji [Gir91] zeigte, dass sie die Mischung zweier Skalare sehr gut wiedergibt und somit für die Berechnung von reinen Mischungsvorgängen in Gasen geeignet ist. Die PDF ist

$$p(\psi) = \frac{\Gamma(a+b)}{\Gamma(a)\Gamma(b)} \psi^{a-1} (1-\psi)^{b-1} \quad (4.22)$$

mit der in Bibliotheken tabellierten Γ -Funktion und ihren beiden Parametern a und b

$$\Gamma(x) = \int_0^{+\infty} e^{-t} t^{x-1} dt, \quad a = \bar{\Phi} \left[\frac{\bar{\Phi}(1 - \bar{\Phi})}{\bar{\Phi}''^2} - 1 \right], \quad b = \frac{a}{\bar{\Phi}} - a, \quad (4.23)$$

die aus den statistischen Momenten berechnet werden können. Die PDF ist in $0 \leq \psi \leq 1$ definiert und über diesen Bereich sehr flexibel. Sie kann asymmetrische Verteilungen bilden. Für $a = b = 0$ treten an den Rändern unendlich große Maxima auf, die bei der Berechnung des Integrals durch numerische Integration zu berücksichtigen sind. Als weitere Form der PDF kann auch eine abgeschnittene Gaußfunktion verwendet werden [LN75]. Sie ist definiert mit

$$p(\psi) = \frac{1}{\sigma \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(\psi - \mu)^2}{2\sigma^2}\right) + A \delta(\Phi - \psi_a) + B \delta(\Phi - \psi_b) \quad (4.24)$$

Da die Gaußfunktion im Intervall $-\infty, +\infty$ größer Null ist, muss sie für Verbrennungsanwendungen auf einen endlichen Bereich $[a, b]$ zugeschnitten werden. Der Bereich der Gaußfunktion, der außerhalb des Gültigkeitsbereiches liegt, wird durch Deltafunktionen an den Rändern ersetzt. Eine Erweiterung auf mehrere Größen ist im Presumed PDF Ansatz nicht so leicht möglich, da statistische Unabhängigkeit nicht mehr gegeben ist. Er kann gut angewendet werden, wenn die Verteilung einer einzigen Variable benötigt wird, um die chemischen Reaktionen zu erfassen, z.B. die einer Fortschrittsvariablen c oder des Mischungsbruches z . Kommen mehrere gekoppelte Variablen (Spezies und Temperatur) hinzu, muss die schwierigere Verbund-PDF einer mehrdimensionalen Verteilung aufgestellt werden (Lockwood und Naguib [LN75], Pope [Pop85] sowie Gutheil [Gut88]). Häufig wird ein Ansatz, der zwar sehr einfach, streng genommen jedoch oft falsch ist, herangezogen. Die physikalischen Größen werden dabei als statistisch unabhängig angenommen und die Verbund-PDF als Produkt der einzelnen PDF berechnet aus

$$p(\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_M) \approx p(\psi_1) p(\psi_2) \dots p(\psi_M) \quad (4.25)$$

wobei jede einzelne PDF z.B. als β -Funktion angenommen wird. In der turbulenten Verbrennung variieren die Formen der PDF stark mit der Position der Flamme. Spalding [Spa-URL] argumentiert, dass einfache Modelle oft nützlicher sind, da sie physikalische Sichtweisen stärker unterstützen als die komplexen Modelle einer angenommenen PDF.

4.2.3 Modelle mit Presumed-PDF-Ansatz

In diesem Abschnitt werden Modelle vorgestellt, die ebenfalls auf Annahme einer PDF-Form basieren. Es wird die Wahrscheinlichkeit betrachtet, mit der verbranntes und unverbranntes Gas innerhalb des gleichen Wirbels umgesetzt werden. Welcher Anteil dann tatsächlich in chemischen Reaktionen umgesetzt wird, hängt von den vorherrschenden Bedingungen ab, die z.B. mit Hilfe turbulenter Längen- und Zeitskalen bestimmt werden. Der Wirbelzerfall spielt hierbei eine wichtige Rolle und gibt die Wahrscheinlichkeit an, mit der sich Brennstoff und Oxidator umsetzen. In Vormischflammen liegen Brennstoff und Oxidator in den gleichen Wirbeln vor, die an die heißen Verbrennungsprodukte grenzen. Für die Modellierung kann dann eine gemittelte Fortschrittsvariable \tilde{c} definiert werden, z.B. die normierte Brennstoffkonzentration:

$$\tilde{c} = \tilde{Y}_F / \tilde{Y}_F^0 \quad (4.26)$$

\tilde{Y}_F^0 ist der Massenanteil des Brennstoffs im unverbrannten Gas, während \tilde{Y}_F den Massenanteil im verbrannten Gas beschreibt. Für unverbranntes Gas gilt $\tilde{c} = 1$ und für vollständig verbranntes Gas gilt $\tilde{c} = 0$. Wird die Verbrennung vollständig durch \tilde{c} beschrieben, muss neben den Impulsgleichungen sowie den Gleichungen für das Turbulenzmodell nur noch eine zusätzliche Transportgleichung für \tilde{c} gelöst werden:

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{c})}{\partial t} + \text{div}(\bar{\rho}\tilde{\mathbf{u}}\tilde{c}) = \text{div}(\bar{\rho}D\text{grad}\tilde{c} - \rho\overline{c''\mathbf{u}''}) + \bar{\omega}(\tilde{c}) \quad (4.27)$$

Die mittlere Reaktionsrate ist dann nur eine Funktion von \tilde{c} mit

$$\bar{\omega}(\tilde{c}) = C \frac{1}{\tau_t} F(\tilde{c}) \quad (4.28)$$

in der die Mischungsintensität durch ein charakteristisches Zeitmaß τ_t bestimmt ist. In Gl. (4.28) steht $F(\tilde{c})$ für eine bestimmte Funktion der Fortschrittsvariable, die unter den Bedingungen $\tilde{c} = 0$ und $\tilde{c} = 1$ den Wert Null annimmt. C ist eine Modellkonstante. \tilde{c} kann z. B. auch als reduzierte Temperatur definiert werden:

$$\tilde{c} = \frac{(\tilde{T} - \tilde{T}_u)}{(\tilde{T}_b - \tilde{T}_u)} \quad (4.29)$$

T_u ist die Temperatur im unverbrannten und T_b die Temperatur im verbrannten Gas. Daraus folgt im verbrannten Gas $\tilde{c} = 1$ sowie $\tilde{c} = 0$ im unverbrannten Gas.

a) Eddy-Break-Up Modell (EBU)

Für den Fall, dass der betrachtete Verbrennungsprozess in den gewellten oder gefalteten Flamelet-Bereich fällt, wird die Reaktionsrate hauptsächlich durch turbulente Mischungsvorgänge bestimmt [Spa71/1]. Chemische Kinetik spielt dann keine Rolle mehr, während die turbulenten Strukturen, die Reaktionsrate kontrollieren. Das Modell repräsentiert die Verteilung im Gas über zwei Zustände: An jedem Ort wird die Gasmischung bestehend aus verbrannten und unverbrannten Fluidbereichen angesehen, die durch turbulente Wirbel beeinflusst wird. In den Grenzbereichen der unterschiedlichen Pakete, die die effektive Flammenoberfläche repräsentieren, findet eine im Vergleich zur Durchmischung sehr schnelle Reaktion statt. Die Gesamtumsatzrate des Brennstoffs wird somit durch die effektive Flammenoberfläche bestimmt und ist von der Mischungsintensität abhängig („mixed-is-burnt“). $F(\tilde{c})$ wird über Temperaturschwankungen [Spa76/1] nach Gl.(4.29) Ausgedrückt¹³:

$$\bar{\omega}_{ebu} = C_{ebu} \bar{\rho} \frac{1}{\tau_t} \sqrt{\overline{c''^2}} \equiv C_{ebu} \bar{\rho} \frac{\varepsilon}{k} \tilde{c} (1 - \tilde{c}) \quad (4.30)$$

In Bereichen schneller Chemie wird hier davon ausgegangen, dass die Varianz $\overline{c''^2}$ der maximal möglichen Varianz entspricht:

$$\overline{c''^2} = \overline{c''^2}_{max} = \tilde{c} (1 - \tilde{c}) \quad (4.31)$$

Das Zeitmaß wird mit $1/\tau_t \approx \varepsilon/k$ modelliert mit $C_{ebu} = 0.35$. Die Konstante ist nicht universell gültig und muss von Fall zu Fall angepasst werden. Das EBU Modell ist dadurch attraktiv, da es mit einem sehr geringen Aufwand brauchbare Ergebnisse liefert und oft als

¹³ Aufgrund physikalischer und mathematischer Probleme ist die Wurzel in der Formulierung ungünstig. Dies kann durch die Kolmogorov-Petrovski-Piskunov-Analyse nachgewiesen werden, aus der die rechte Seite in Gl. 4.31 resultiert.

Initialisierung für detailliertere Modelle verwendet wird. Sein großer Nachteil liegt in der Vernachlässigung chemischer Kinetik, so dass die Rate in Gebieten mit relativ hoher Mischungsrate zu stark von der Mischung bestimmt ist.

b) Bray-Moss-Libby Modell (BML)

Einen universelleren Ansatz stellt das BML Modell [BML85] dar, da der Vorfaktor C in Gl. (4.28) aus der Struktur der laminaren Flammenfront bestimmt wird. Für die Fortschrittsvariable \tilde{c} der Temperatur (s. Gl.(4.29)) muss Gl.(4.27) gelöst werden, um die Zustände im gesamten Gas zu beschreiben. Ausgehend von einem PDF-Ansatz zeigt Bray [Bra80], dass sehr große Varianzen zu einer Vereinfachung des PDF-Ansatzes führen, wobei für die Varianz der Fortschrittsvariable Gl.(4.31) gilt. Aus der Annahme, dass der Druck konstant bleibt, folgt für die Dichte

$$\bar{\rho} = \frac{\rho_u}{1 + \tau \tilde{c}} \quad \text{mit} \quad \tau = \frac{\tilde{T}_b}{\tilde{T}_u} - 1 \quad (4.32)$$

Die mittlere Reaktionsrate wird aus dem Produkt der Flammenoberflächendichte Σ_f und der lokalen Rate pro Flammenoberfläche $\rho_u s_L$ berechnet

$$\bar{\omega}_{bml} = \rho_u s_L \Sigma_f, \quad (4.33)$$

wobei für die laminare Flammengeschwindigkeit ihr ungestreckten Wert verwendet werden kann [Mal03], aber auch verfeinerte Ansätze zum Einsatz kommen [BL94]:

$$s_L \approx s_L^0 \quad (4.34)$$

Mit einer Formulierung für die Flammenoberflächendichte, mit der die Faltung der Flammenfront erfasst wird

$$\Sigma_f = C_{bml}^{-2/3} \frac{\varepsilon}{k (\varepsilon \nu)^{1/4}}, \quad (4.35)$$

folgt für die Reaktionsrate

$$\bar{\omega}_{bml} = C_{bml}^{-2/3} \bar{\rho}_u s_L^0 \frac{\varepsilon}{k (\varepsilon \nu)^{1/4}} \tilde{c} (1 - \tilde{c}) \quad (4.36)$$

Für die empirische Konstante C_{bml} kann kein allgemeingültiger Wert angegeben werden. Lindstedt [LV99] schlägt eine empirische Abhängigkeit von der turbulenten Re-Zahl vor, der mit $C_{bml} = 0.41$ ab $Re_t > 50$ angegeben wird. Das BML-Modell und EBU Modell haben somit sehr ähnliche Ansätze, wie anhand Gl.(4.30) und Gl.(4.32) zu erkennen ist. Verglichen mit dem EBU Modell berücksichtigt das BML Modell verstärkt die Struktur der Flamme, wie z.B der Flammenfront mit Hilfe von Gl.(4.33).

c) Turbulent Flame Speed Closure (TFC)

Zimont et al. [ZL95] schlagen basierend auf Gl.(4.27) ein Modell vor, das $\bar{\omega}_{tfc}$ auf Basis eines empirischen Ansatzes der turbulenten Flammengeschwindigkeit in Vormischflammen berechnet:

$$\bar{\omega}_{tfc} = \bar{\rho}_u s_T |\text{grad } \tilde{c}| \quad (4.37)$$

Hier ist $\bar{\rho}_u$ die Dichte der unverbrannten Mischung und s_T die turbulente Flammengeschwindigkeit. $s_T(\varepsilon, k, s_L, \delta_L)$ ist eine Korrelation für die turbulente Flammengeschwindigkeit, die experimentell oder aus theoretischen Überlegungen bestimmt

werden kann [DF00]. Experimentell bestimmte laminare Flammgeschwindigkeiten liefern die Basis zur Bestimmung von s_T und können somit leicht in das Modell implementiert werden.

d) Eddy-Dissipation Model (EDM)

Das EDM von Magnussen und Hjertager [MH76] ist ein sehr weit verbreitetes und oft eingesetztes Modell im Falle unendlich schneller Chemie. Die Mischung auf molekularer Ebene dominiert auch hier den Verbrennungsvorgang. Der Zustand des reagierenden Gases wird im Gegensatz zum EBU Modell im EDM durch drei Bedingungen charakterisiert: Die mittlere Brennstoffumsatzrate wird aus den mittleren Massenanteilen von Brennstoff \tilde{Y}_F , Oxidator \tilde{Y}_O und den Produkten \tilde{Y}_P ermittelt, deren Umsatz von der turbulenten Mischungszeit $\tau_t \approx k/\varepsilon$ und damit dem Wirbelzerfall abhängen:

$$\bar{\omega}_F = C_{edm_1} \bar{\rho} \frac{1}{\tau_t} \min \left(\tilde{Y}_F, \frac{\tilde{Y}_O}{s}, C_{edm_2} \frac{\tilde{Y}_P}{(1+s)} \right) \quad \text{mit} \quad s = \frac{m_F/m_O}{(m_F/m_O)_{st}} \quad (4.38)$$

C_{edm_1} sowie C_{edm_2} sind Modellkonstanten und s ist das Brennstoff-Oxidator Verhältnis zum stöchiometrischen Brennstoff-Oxidator Verhältnis [WMD97]. Die Rate wird limitiert durch die am wenigsten vorhandene Spezies. Ist C_{edm_2} ungleich Null, kann die Rate auch aus den Produkten stammen und das Vorhandensein heißer Abgase berücksichtigen. Die beiden Konstanten sind für den jeweiligen Fall anzupassen. Auch das EDM ist ein sehr einfaches Modell und berücksichtigt keine chemische Reaktionskinetik, da es dem Ansatz gemischt gleich verbrannt folgt. Das Modell ist es auf globale Ein-Schritt Reaktionen, maximal Zwei-Schritt Reaktionen reduziert, da Zwischenprodukte nicht berücksichtigt werden können, ohne ihre statistische Unabhängigkeit zu verlieren. Der rechnerische Aufwand ist wie beim EBU Modell gering. Im Vergleich zum EBU Modell werden bei EDM Brennstoff und Oxidator separat voneinander betrachtet, was die Anwendung in Diffusionsflammen ermöglicht.

e) Eddy-Dissipation Concept (EDC)

Ein Modell mit komplexer Reaktionskinetik ist das EDC-Modell von Magnussen [MH76], [Mag81]. Es basiert auf der Annahme, dass innerhalb einer Rechenzelle chemische Reaktionen nur in einem Volumen ξ^{*3} , den sogenannten feinen Strukturen, ablaufen können, in welchen die Reaktanden auf molekularer Ebene homogen miteinander vermischt sind. Die Länge der feinen Skalen werden modelliert als

$$\xi^* = C_\xi \left(\frac{\nu \varepsilon}{k^2} \right)^{1/4}, \quad (4.39)$$

wobei $*$ die feinen Strukturen markiert. C_ξ ist eine Modellkonstante mit $C_\xi = 2.1377$. Die Spezies reagieren in den feinen Strukturen über eine Zeitskala

$$\tau^* = C_\tau \left(\frac{\nu}{\varepsilon} \right)^{1/2} \quad (4.40)$$

mit $C_\tau = 0.4082$. Die feinen Strukturen werden als ideale Rührkessel behandelt, so dass sich die Lösung auf ein System gewöhnlicher Differenzialgleichungen reduziert. Im Gegensatz zu EBU erlaubt das EDC Modell die Berücksichtigung chemischen Reaktionskinetik. Die mittlere Reaktionsrate ergibt sich dann mit

$$\bar{\omega}_k = \frac{\rho(\xi^*)^2}{\tau^* [1 - (\xi^*)^3]} (Y_k^* - Y_k) \quad (4.41)$$

Auch das EDC Modell geht von der Annahme aus, dass nur zwei mögliche Zustände vorliegen können: In einer Zelle wird angenommen, dass die Mischung aus dem Mittelwert und den feinen Strukturen besteht. Ihr Verhältnis variiert lokal entsprechend den Strömungsverhältnissen. Die turbulenten Bewegungen bewirken einen Massenaustausch zwischen den beiden Fluidbereichen, der sich proportional zur lokalen Scherkraft der mittleren Geschwindigkeiten verhält. Chemische Kinetik kontrolliert den Umsatz der Reaktionen in den feinen Strukturen und damit die Reaktivität der mittleren Größen. Das EDC Modell ist sowohl für Vormisch-, Diffusions- als auch partielle Vormischflammen anwendbar [Fluent].

f) Partially Stirred Reactor Modell (PaSR)

Einen ähnlichen Ansatz liefert das PaSR-Modell von Golovitchev und Nordin [GN99], [Nor01], welches ebenfalls den Einfluss der chemischen Kinetik auf die mittlere Rate nicht vernachlässigt. Die zu bildende mittlere Konzentration wird über eine lineare Beziehung ausgedrückt:

$$\bar{c}_k = (1 - \kappa^*) c_k^N + \kappa^* c_k^R \quad \kappa^* \in [0,1] \quad (4.42)$$

Der Index R kennzeichnet den reaktiven bzw. N den nicht reaktiven Teil des Gebietes. κ^* ist der Feinstrukturanteil. Gl.(4.42) kann als zeitlicher Prozess betrachtet werden mit der Ausgangskonzentration c_k^N . Die mittlere Konzentration \bar{c}_k stellt sich dann während des betrachteten Zeitraums ein. Der reaktive Teil wird durch den Ablauf molekularer Diffusion sowie turbulenter Diffusion gebildet. Dieser Vorgang kann als zwei parallel ablaufende Prozesse angesehen werden: Zunächst vermischt sich die Anfangskonzentration in κ^* und ändert sich von c_k^N zu c_k^R . Die reaktive Zone verhält sich dann wie ein perfekt gemischter Reaktor (PSR - Perfectly Stirred Reactor) vergleichbar mit dem Ansatzes aus dem EDC – Modell aus Punkt e). Anschließend wird sich dieser Teil durch Turbulenz mit dem nicht-reagierenden Anteil $1 - \kappa^*$ mischen, das zur mittleren Konzentration \bar{c}_k führt. Um den Anteil in der reaktiven Zone zu bestimmen, wird angenommen, dass sich κ proportional zu τ (= molekularen Diffusion), als auch proportional zur turbulenten Mischung mit $1 - \tau_{mix}$ verhält (= turbulente Diffusion). Bei gleicher Proportionalität folgt aus Gl.(4.42):

$$\frac{\bar{c}_k - c_k^N}{\tau} = \frac{c_k^R - \bar{c}_k}{\tau_{mix}} \equiv \dot{\omega}_k^R \quad \text{mit} \quad \kappa^* = \frac{\tau}{\tau + \tau_{mix}} \quad (4.43)$$

Die Bildungsrate $\dot{\omega}_k^R$ der Spezies k für die Feinstrukturen muss nun entsprechend gemittelter Größen formuliert werden. Dies geschieht durch Tayler-Reihenentwicklung [Nor01]. Umformungen führen zu nachfolgender Beziehung

$$\frac{\bar{c}_k - c_k^N}{\tau} = \kappa \dot{\omega}_k \quad \text{mit} \quad \kappa = \frac{\tau_c}{\tau_c + \tau_{mix}}, \quad (4.44)$$

wobei κ nach Schütz et al. [Sch06] auch in einem anderen Zusammenhang wie folgt dargestellt werden kann:

$$\kappa := \frac{1}{1 + Da(l_t)} \quad \text{mit} \quad Da(l_t) = \frac{\tau_{mix}}{\tau_c} \quad (4.45)$$

Anhand Gl.(4.43) wird deutlich, dass innerhalb des PaSR-Modells die turbulente Da-Zahl als Verhältnis der nicht reagierenden groben Strukturen der Strömung zu den reagierenden feinen Strukturen interpretiert werden kann. Die Mischungszeit τ_{mix} lässt sich u.a. aus dem integralen Zeitmaß nach Taylor τ_t bestimmen [KBH00]. Dabei ist $\tau_{mix} = C_{PaSR} \tau_t$ mit

$C_{PaSR} = 0.001 - 0.3$ je nach Fall anzupassen. Weitere charakteristische turbulente Mischungszeiten werden in der Literatur bei Karlsson et al. [KC95] sowie Byggestøy et al. [BM85] angegeben. Das PaSR Modell erreicht mit geringem Modellierungsaufwand über den Faktor κ , eine Beeinflussung der Reaktionsraten entsprechend dem Anteil der feinen Strukturen sowie der lokalen Strömungsverhältnisse. Verlöschung aufgrund der Turbulenz kann mit dem Modell erfasst werden. Im Bereich hoher Da-Zahl muss das Modell aber immer zur Verlöschung führen; der Bereich getrennter Reaktionszonen bis hin zu Flamelets wird damit nicht erfasst.

4.2.4 Der Presumed PDF-Ansatz für Diffusionsflammen

Für die Modellierung in einer Diffusionsflamme wird der in Kapitel 4.1.2 eingeführte Mischungsbruch herangezogen. Die Gleichung für den mittleren Mischungsbruch lautet

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{z})}{\partial t} + \text{div} (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \tilde{z}) = \text{div} \left(\bar{\rho} D \text{grad} \tilde{z} - \bar{\rho} \overline{\mathbf{u}'' z''} \right), \quad (4.46)$$

wobei der erste Term der rechten Seite gegenüber der turbulenten Diffusion vernachlässigt werden kann. In Gl.(4.46) tritt der turbulente Mischungsterm $\bar{\rho} \overline{\mathbf{u}'' z''}$ auf, der z.B. mit einem Gradientenansatz (s. Gl.(3.34)) modelliert werden muss. Bei der Modellierung werden gemittelte Größen für die Beschreibung der Flamme als Funktion des Mischungsbruchs in Form konditionierter Ausdrücke angegeben, da sie von unterschiedlichsten Parametern abhängen. Neben der Zusammensetzung und der Temperatur kann auch die Reaktionsrate als Funktion des Mischungsbruchs ausgedrückt werden. Die Bestimmung von Mittelwerten für die thermochemischen Größen erfordert neben \tilde{z} auch höhere Momente von z , wenn möglich die vollständiger PDF von z :

$$\bar{\rho} \tilde{Y}_k = \int_0^1 (\overline{\rho Y_k | z^*}) p(z^*) dz^*, \quad \bar{\rho} \tilde{T} = \int_0^1 (\overline{\rho T | z^*}) p(z^*) dz^* \quad (4.47)$$

$$\bar{\omega}_k = \bar{\rho}_k^c = \int_0^1 (\overline{\dot{\rho}_k^c | z^*}) p(z^*) dz^*. \quad (4.48)$$

$\overline{Q | z^*}$ mit $Q = \{ \rho T, \rho Y_k, \dots \}$ kennzeichnet das konditionierte Mittel von Q bei einem gegebenen Mischungsbruch $z = z^*$. Für die Berechnung von $\bar{\rho} \tilde{Y}_k$, $\bar{\rho} \tilde{T}$ und $\bar{\omega}_k$ ist z allein nicht mehr ausreichend. Es muss $p(z)$ bekannt sein. Da $p(z)$ schwer zu bestimmen ist, wird im presumed PDF Ansatz die Form von p angenommen. Mit \tilde{z} ist ein Parameter der PDF bereits bekannt, die Abweichungen vom Mittelwert als zweiten Parameter müssen mit einer zusätzlichen Transportgleichung für die Fluktuationen $\overline{z''^2}$ berechnet werden. Die neue Zusammensetzung wird dann aus der „mixed-is-burnt“ Annahme berechnet. Bei der Modellierung wird zwischen zwei Vorgehensweisen, der „primitiven Variablen Methode“ sowie dem „Reaktionsratenansatz“ unterschieden [PV01]. In der primitiven Variablen Methode werden konditionierte Größen für $\overline{\rho Y_k | z^*}$ und $\overline{\rho T | z^*}$ entweder aus Flamelet-Bibliotheken oder mit Hilfe von Bilanzgleichungen (CMC - Conditional Moment Closures) ermittelt. Bei Verwendung von Flamelet-Bibliotheken werden für die Spezies und die Temperatur keine Bilanzgleichungen gelöst und der chemische Quellterm muss nicht modelliert werden. Dagegen sind Bilanzgleichungen für \tilde{z} und $\overline{z''^2}$ erforderlich. Dieser Ansatz ist nur unter sehr restriktiven Annahmen gültig (adiabate Bedingungen), hat aber den Vorzug einer sehr schnellen Berechnung. Das CMC-Modell dagegen löst auf den Mischungsbruch konditionierte Speziestransportgleichungen und ist dadurch wiederum sehr rechenintensiv. Beim Reaktionsratenansatz werden Bilanzgleichungen für die Spezies und die Energie gelöst. Reaktionsraten müssen, basierend auf Gl.(4.48), modelliert und laminare

Flammenbibliotheken können für $\overline{\dot{\omega}_k | z^*}$ benutzt werden. Zusätzliche Effekte wie Kompressibilität, Überschall oder Wärmeverluste können mit dem Reaktionsratenansatz berücksichtigt werden. Beide Vorgehensweisen sind nicht äquivalent und führen zu verschiedenen Ergebnissen, da z.B. mit dem Reaktionsratenansatz die Spezies sowie die Temperatur aus den Transportgleichungen berechnet und dadurch deren turbulente Flüsse mit in Betracht gezogen werden. Zur weiteren Klassifizierung der Modelle wird in beiden Ansätzen für die chemische Umsetzung zwischen unendlich schnellen und kinetisch kontrollierten Reaktionen unterschieden.

a) Das Flamelet Konzept

Bei endlich schneller Chemie reicht es nicht aus, das System nur in Abhängigkeit von z zu beschreiben. Bei Erhöhung der Mischungsgeschwindigkeit werden die chemischen Prozesse aus dem Gleichgewicht gebracht. Das erfolgt so lange bis die Zeitskalen der Reaktionen die Zeitskalen der Mischung erreichen. Eine zu starke Abweichung vom chemischen Gleichgewicht kann zur Verlöschung führen. Es werden also Parameter benötigt, die das Abweichen vom Gleichgewicht beschreiben. Ein wichtiger Parameter ist die Streckung, die bereits in Abs. 4.1.2 erläutert wurde. Eine turbulente Flamme wird dann als ein Ensemble vieler kleiner laminarer Flämmchen abgebildet, die alle die gleiche skalare Dissipationsgeschwindigkeit χ besitzen. Das Konzept des Flamelets erfährt eine Erweiterung, indem eine Verteilung der Dissipationsgeschwindigkeit eingeführt wird, da Wirbel das Geschwindigkeitsfeld der Flamme verändern. Peters [Pet87] und Bilger [Bil80] leiten die Flamelet-Gleichung her, in der für eine skalare Dissipationsgeschwindigkeit, die Massenbrüche an jedem Ort der Flamme durch eindeutige Funktionen von z beschrieben sind (s. Gl.(4.55)). Über Mittelung erhält man dann eine mittlere Reaktionsgeschwindigkeit, was in Punkt b) und c) detaillierter beschrieben wird.

b) Modelle mit Hilfe eines primitiven Variablenansatzes

Unter Annahme unendlich schneller Chemie sind Y_k und T direkt an den Mischungsbruch z geknüpft. Die Flammenstruktur wird dann durch das chemische Gleichgewicht bestimmt und ist nur noch vom Mischungsbruch abhängig. Bei einer Lewis-Zahl von Eins und adiabater Verbrennung wird das konditionierte Mittel in Gl.(4.47) mit

$$\overline{(\rho Y_k | z^*)} = \overline{\rho(z^*) Y_k(z^*)} \quad , \quad \overline{(\rho T | z^*)} = \overline{\rho(z^*) T(z^*)} \quad (4.49)$$

angegeben. Für die mittleren Massenanteile und die Temperatur erhält man:

$$\bar{\rho} \tilde{Y}_k = \int_0^1 \rho Y_k(z) p(z) dz \quad \text{sowie} \quad \bar{\rho} \tilde{T} = \int_0^1 \rho \tilde{T}(z) p(z) dz \quad (4.50)$$

Die PDF $p(z)$ muss dabei bestimmt werden. Sie kann mit einer Presumed-PDF (s. Abs. 4.2.2) oder einer Transportgleichung für $p(z)$ berechnet werden, wobei der Presumed Ansatz einen deutlich geringeren Aufwand erfordert. Die Form der PDF wird nur durch zwei Parameter beschrieben, dem Mittelwert \tilde{z} und der Varianz \tilde{z}'^2 . Dies stellt eine Einschränkung dar, weil es sich bei der Chemie-Turbulenz-Interaktion um sehr komplexe Zusammenhänge handelt. \tilde{z}'^2 wird in RANS/URANS-Simulationen aus der Lösung einer Transportgleichung gewonnen [Spa71/2] mit

$$\begin{aligned}
\frac{\partial (\bar{\rho} \widetilde{z''^2})}{\partial t} + \operatorname{div} (\bar{\rho} \widetilde{\mathbf{u}} z''^2) = & - \underbrace{\operatorname{div} (\bar{\rho} \widetilde{\mathbf{u}'' z''^2})}_{\text{turb. Transport}} - \underbrace{2 \bar{\rho} \widetilde{\mathbf{u}'' z''^2} \cdot \operatorname{grad} \tilde{z}}_{\text{Produktion}} - \underbrace{2 \bar{\rho} D \operatorname{grad} z'' \cdot \operatorname{grad} z''}_{\text{Dissipation}} \\
& + \underbrace{\operatorname{div} (\bar{\rho} D \operatorname{grad} \widetilde{z''^2}) + 2 \widetilde{z''} \operatorname{div} (\bar{\rho} D \operatorname{grad} \tilde{z})}_{\text{molekulare Diffusion}}
\end{aligned} \tag{4.51}$$

wobei die skalare Dissipationsrate $\tilde{\chi}_p$ der Schwankungen von \tilde{z} gegeben ist durch

$$-\bar{\rho} \tilde{\chi} = -2 \bar{\rho} D \operatorname{grad} z'' \cdot \operatorname{grad} z'' \tag{4.52}$$

und beschreibt den Zerfall von $\widetilde{z''^2}$. Die ungeschlossenen Terme in Gl.(4.51) werden teilweise vernachlässigt (molekulare Diffusion) oder mit Gradientenansätzen beschrieben. Die skalare Dissipationsrate wird in Analogie zur Dissipationsrate ε der kinetischen Energie behandelt und deshalb für deren Modellierung die turbulente Mischungszeit $\tau_t = k/\varepsilon$ herangezogen:

$$\tilde{\chi} = \frac{C}{\tau_t} \widetilde{z''^2} = C \frac{\varepsilon}{k} \widetilde{z''^2} \tag{4.53}$$

Ein Ansatz mit unendlich schneller Chemie ist in vielen Fällen nicht gerechtfertigt und ein einfacher Ansatz wie in Gl.(4.49) nicht möglich. Brennstoff und Oxidator können sich zunächst mischen und die Zündung setzt erst an einem weiter stromab gelegenen Punkt (abgehobene Flammen) ein. Dadurch ist eine verstärkte Abhängigkeit von turbulenten Zeitskalen gegeben, und es sind zusätzliche Informationen über die Flammenstruktur notwendig. Eine Möglichkeit ist die Annahme, dass kleine instationäre Flammenelemente in einer turbulenten Strömung die Struktur einer laminaren Flamme besitzen (Flamelets) und damit sehr große Damköhler Zahlen erreichen. Um dieses Flamelet in seiner turbulenten Umgebung zu modifizieren, müssen zusätzliche Parameter für die Diffusionsflamme definiert werden. Dabei handelt es sich um Größen wie Streckung, Krümmung oder seine Lebensdauer, die jeweils die Komplexität eines solchen Ansatzes ausmachen. Ein möglicher Parameter ist auch hier die skalare Dissipationsrate bei stöchiometrischen Bedingungen $\tilde{\chi}_{st}$ zur Beschreibung der Flammenstreckung, die Streckungseffekte sowie Verlöschung berücksichtigen kann. Mit Funktionen von $T(z, \chi_{st})$ und $Y_k(z, \chi_{st})$ ist die Flammenstruktur gegeben, die in stationären als auch in instationären Flamelet-Bibliotheken abgelegt werden kann. Die mittleren Speziesmassen und die Temperatur hängen dann von zwei Variablen ab:

$$\begin{aligned}
\bar{\rho} \tilde{Y}_k &= \int_0^{+\infty} \int_0^1 \rho Y_k(z, \chi_{st}) p(z, \chi_{st}) dz d\chi_{st} \\
\bar{\rho} \tilde{T} &= \int_0^{+\infty} \int_0^1 \rho T(z, \chi_{st}) p(z, \chi_{st}) dz d\chi_{st}
\end{aligned} \tag{4.54}$$

die der Lösung von

$$\rho \frac{\partial Y_k}{\partial t} = \dot{\omega}_k + \frac{1}{2} \rho \chi \frac{\partial^2 Y_k}{\partial z^2} \quad \text{und} \quad \rho \frac{\partial T}{\partial t} = \dot{\omega}_T + \frac{1}{2} \rho \chi \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \tag{4.55}$$

für laminare Diffusionsflammen mit $\partial Y_k / \partial t = 0$ und $\partial T / \partial t = 0$ entstammen. In Gl.(4.54) wird statistische Unabhängigkeit¹⁴ von z und χ_{st} mit $p(z, \chi_{st}) = p(z)p(\chi_{st})$ angenommen. Zusätzlich zu z ist eine PDF für χ_{st} erforderlich. Eine Dirac-Funktion wird bei unveränderter

¹⁴ Ein wichtiges Merkmal in der Statistik ist, ob zwei oder mehrere Ereignisse voneinander abhängig oder unabhängig sind, d.h. ob das Zustandekommen eines Ereignisses durch ein anderes begünstigt wird. Stochastisch unabhängig sind zwei Ereignisse A und B dann, wenn gilt $p(B|A) = p(B)$. Dabei versteht man mit $p(B|A)$ die Wahrscheinlichkeit, für das Eintreten von B unter der Voraussetzung, dass A bereits eingetreten ist (bedingte Wahrscheinlichkeit). A ist das komplementäre Ereignis von A . Gilt $p(B|A) \neq p(B)$, sind die Ereignisse stochastisch abhängig. Für unabhängige Ereignisse folgt $p(B|A) = p(B)$ sowie $p(A|B) = p(A)$.

Dissipationsrate in der Flammenfront von Pietsch und Peters [PP98] angenommen, während ein mehr physikalischer Ansatz von Effelsberg und Peters [EP88] mit einer logarithmischen Normalverteilung herangezogen wird. Die kinetischen Effekte aus den chemischen Reaktionen werden mit Hilfe der skalaren Dissipationsrate $\tilde{\chi}_{st}$ ermittelt und müssen mit vorhandenen Größen korreliert werden. Wie bereits erwähnt, können die konditionierten Größen auch über Bilanzgleichungen bestimmt werden, wie sie von Klimenko [Kli90] und Bilger [Bil93] vorgeschlagen wurden. Dies erfordert weiterführende Modellierungsansätze, die mit einem hohen Aufwand verbunden sind.

c) Modelle mit Hilfe eines Reaktionsratenansatzes

Wie bereits bei den Ansätzen für die primitiven Variablen herausgearbeitet, ist der Ansatz bei endlicher Chemie auch auf die mittleren Reaktionsraten durch die Anwendung von Flamelet-Bibliotheken übertragbar. Anstelle der primitiven Variablen wird nun $\dot{\omega}_k(z, \chi_{st})$ in der Bibliothek abgespeichert und eine PDF Formulierung angewandt:

$$\bar{\omega}_k = \int_0^1 \int_0^{+\infty} \dot{\omega}_k(z, \chi_{st}) p(z, \chi_{st}) dz d\chi_{st} \quad (4.56)$$

Es wird ebenfalls statistische Unabhängigkeit mit $p(z, \chi_{st}) = p(z)p(\chi_{st})$ angenommen. Für $p(z)$ wird die β -Funktion sowie die Logarithmische Normalverteilung für $p(\chi_{st})$ benutzt. Eine weitere Möglichkeit ist die Anwendung von Flamelet-Bibliotheken unter Einbeziehung der Flammenoberflächendichte. Die mittlere Reaktionsrate berechnet sich dann aus

$$\bar{\omega}_k = \overline{\dot{\Omega}_k(\chi_{st})} \Sigma_f, \quad (4.57)$$

wobei $\overline{\dot{\Omega}_k(\chi_{st})}$ die integrale gemittelte Reaktionsrate entlang der Flammenoberfläche und Σ_f die Flammenoberflächendichte angeben. Letztere definiert sich als:

$$\Sigma_f = \left(\overline{|\nabla z|} \Big|_{z=z_{st}} \right) p(z_{st}) \quad (4.58)$$

Für $\overline{\dot{\Omega}_k(\chi_{st})}$ wird $\overline{\dot{\Omega}_k(\chi_{st})} \approx \dot{\Omega}_k(\tilde{\chi}_{st})$ angenommen und in Flamelet-Bibliotheken abgelegt. Detaillierte Ausführungen finden sich bei Pope [Pop88], Vervisch et al. [Ver95] sowie Van Kalmthout und Veynante [KV97]. Bei der Nutzung der Flammenoberflächendichte wird keine Bilanzgleichungen für \tilde{z} und \tilde{z}'^2 gelöst, dafür aber für alle vorkommenden Spezies und die Energiegleichung. Als nachteilig stellt sich auch hier die Bestimmung der PDF dar, da deren Form angenommen werden muss.

4.2.5 Die PDF Transportgleichung

Die zweite Möglichkeit, eine Verbund-PDF zu bestimmen, ist die Lösung einer Transportgleichung für p , die auf Lundgren [Lun67] zurückgeht. Die Form der PDF wird nicht mehr angenommen sondern direkt berechnet. Zunächst sollen grundlegende Begriffe eingeführt werden [Ger05].

a) Momentane oder „Fine Grained“ PDF

Die momentane PDF beschreibt die Wahrscheinlichkeit des Eintreffens eines Ereignisses, wenn nur eine einzelne Realisierung betrachtet wird. Sie ist als Produkt von δ -Funktionen definiert:

$$p_{FG}(\boldsymbol{\psi}; \mathbf{x}, t) \equiv \delta(\boldsymbol{\Phi}(\mathbf{x}, t) - \boldsymbol{\psi}) = \prod_{i=1}^M \delta(\Phi_i(\mathbf{x}, t) - \psi_i) \quad (4.59)$$

Diese Definition bildet die Basis für die Herleitung der PDF-Transportgleichung [Lun67]. Zwischen p_{FG} und p besteht folgender Zusammenhang

$$\langle p_{FG}(\boldsymbol{\psi}; \mathbf{x}, t) \rangle = \langle \delta(\boldsymbol{\Phi}(\mathbf{x}, t) - \boldsymbol{\psi}) \rangle = p(\boldsymbol{\psi}; \mathbf{x}, t) , \quad (4.60)$$

nach der p aus dem Erwartungswert der momentanen PDF gebildet wird. Der Erwartungswert von p_{FG} kann dann eine kontinuierliche Verteilung darstellen.

b) Bedingte PDF

Sie gibt die Verteilung einer Zufallsgröße unter eingeschränkten Bedingungen an:

$$p_{c|\boldsymbol{\Phi}} = p_{c|\boldsymbol{\Phi}}(c^* | \boldsymbol{\Phi}(\mathbf{x}, t) = \boldsymbol{\psi}) \quad (4.61)$$

$p_{c|\boldsymbol{\Phi}}$ ist die Wahrscheinlichkeit für das Eintreten von c^* unter der Bedingung $\boldsymbol{\Phi} = \boldsymbol{\psi}$ und hat damit die Einführung eines bedingten Erwartungswerts zur Folge:

$$\langle c | \boldsymbol{\Phi} \rangle = \int_{c^*=-\infty}^{\infty} c^* p_{c|\boldsymbol{\Phi}} d c^* \quad (4.62)$$

In der PDF-Transportgleichung müssen diese Terme immer modelliert werden [Ger05], [Pop85].

c) Rand-PDF

Sie folgt aus Integration von p über den Zustandsraum, mit Ausnahme einiger oder auch nur einer einzelnen Größe, z.B. für die Zufallsvariable Φ_n :

$$p_{\Phi_n}(\psi_n) = \int_{-\infty}^{+\infty} p(\boldsymbol{\psi}) d\psi_1 \dots d\psi_{n-1} d\psi_{n+1} \dots d\psi_M \quad (4.63)$$

Sie gibt die Wahrscheinlichkeit für die Verteilung von Φ_n an, wenn alle übrigen Variablen beliebig verteilt sein dürfen.

d) Favre-gemittelte PDF

Ist die Dichte $\rho^* = \rho(\boldsymbol{\psi}; \mathbf{x}, t)$ eine Funktion des Zufallsvektors $\boldsymbol{\Phi}$, ist

$$\tilde{p}(\boldsymbol{\psi}) \equiv \frac{\rho(\boldsymbol{\psi})}{\langle \rho \rangle} p(\boldsymbol{\psi}) \quad (4.64)$$

mit der die Favre gemittelten Größen ohne Integration über ρ berechnet werden können:

$$\tilde{\Phi}_i = \frac{\langle \rho \Phi_i \rangle}{\langle \rho \rangle} = \int_{\boldsymbol{\psi}} \psi_i \tilde{p}(\boldsymbol{\psi}) d\boldsymbol{\psi} \quad \text{bzw.} \quad \frac{\langle \rho \Phi_i'^n \rangle}{\langle \rho \rangle} = \int_{\boldsymbol{\psi}} (\psi_i - \tilde{\Phi}_i)^n \tilde{p}(\boldsymbol{\psi}) d\boldsymbol{\psi} \quad (4.65)$$

Ist dagegen ρ eine unabhängige Zufallsvariable mit $p = p(\rho^*, \boldsymbol{\psi})$ folgt:

$$\tilde{p}(\boldsymbol{\psi}) \equiv \frac{1}{\langle \rho \rangle} \int_{\rho^*=0}^{\infty} \rho^* p(\rho^*, \boldsymbol{\psi}) d\rho^* \quad (4.66)$$

Gemittelte Größen werden gemäß Gl.(4.65) gebildet.

e) Massendichtefunktion

Für Fluide mit inhomogener und variabler Dichte führt Pope [Pop85] die Verwendung der Massendichtefunktion MDF¹⁵ ein

$$f(\boldsymbol{\psi}, \mathbf{x}; t) \equiv \rho(\boldsymbol{\psi}) p(\boldsymbol{\psi}; \mathbf{x}, t) = \langle \rho \rangle \tilde{p}(\boldsymbol{\psi}; \mathbf{x}, t) , \quad (4.67)$$

15 engl.: Mass Density Funktion

die ebenfalls alle Eigenschaften einer PDF erfüllen muss, wobei $\rho = \rho(\boldsymbol{\psi})$ eine Funktion unabhängiger Variablen darstellt. Es gilt:

$$\int f(\boldsymbol{\psi}, \boldsymbol{x}; t) d\boldsymbol{\psi} = \langle \rho \rangle, \quad \int \frac{f(\boldsymbol{\psi}, \boldsymbol{x}; t)}{\rho(\boldsymbol{\psi})} d\boldsymbol{\psi} = 1 \quad (4.68)$$

$$\int Q(\boldsymbol{\psi}, \boldsymbol{x}, t) f(\boldsymbol{\psi}, \boldsymbol{x}; t) d\boldsymbol{\psi} = \langle \rho Q \rangle = \langle \rho \rangle Q$$

Die MDF spielt eine wichtige Rolle bei der Lösung der PDF-Transportgleichung mittels Lagrangescher Partikelverfahren (s. Abs. 4.3).

f) Lagrangesche PDF

Die Darstellung der PDF kann auch über eine Lagrangesche Betrachtungsweise (s. Abs. 4.3) erfolgen. Es werden dazu Partikel eingeführt, die ihren Trajektorien im physikalischen Raum als auch im Zustandsraum folgen. Der Lagrangesche Zustandsvektor $\boldsymbol{\Phi}^L = (\boldsymbol{u}^L, \boldsymbol{Y}^L, h^L, \boldsymbol{x}^L)^T$ eines Partikels ist dann ebenfalls ein Zufallsvektor. Mit den Eulerschen Größen gilt folgender Zusammenhang (s. Abs.2.1.4):

$$\boldsymbol{\Phi}^L(\boldsymbol{x}_0, t) = \boldsymbol{\Phi}(\boldsymbol{x}^L(\boldsymbol{x}_0, t), t) \quad (4.69)$$

Durch den Erhalt der Masse eines Partikels verhält sich dessen Volumen umgekehrt proportional zur Änderung der Dichte. Für die Lagrangesche PDF lässt sich auch eine bedingte PDF angeben

$$p_L = p_L(\boldsymbol{\psi}, \boldsymbol{x}; t | \boldsymbol{\Phi}_0, \boldsymbol{x}_0) = \frac{\langle p_{L,FG}(\boldsymbol{\psi}, \boldsymbol{x}; t | \boldsymbol{x}_0) p_{FG}(\boldsymbol{\psi}; \boldsymbol{x}, t) \rangle}{p(\boldsymbol{\psi}_0; \boldsymbol{x}_0, t_0)}, \quad (4.70)$$

die die Verbund-PDF des Partikels zum Zeitpunkt t mit den Eigenschaften zum Zeitpunkt t_0 konditioniert. $p_{L,FG}$ ist die momentane Lagrange PDF

$$p_{L,FG}(\boldsymbol{\psi}, \boldsymbol{x}; t | \boldsymbol{x}_0) \equiv \delta(\boldsymbol{\Phi}^L(\boldsymbol{x}_0, t) - \boldsymbol{\psi}) \delta(\boldsymbol{x}^L(\boldsymbol{x}_0, t) - \boldsymbol{x}), \quad (4.71)$$

die bezüglich \boldsymbol{x}_0 und t_0 konditioniert ist. $p_{L,FG}$ ist die Übergangsdichte der MDF:

$$f(\boldsymbol{\psi}, \boldsymbol{x}; t) = \int_{\boldsymbol{\psi}_0} \int_{\boldsymbol{x}_0} p_L(\boldsymbol{\psi}, \boldsymbol{x}; t | \boldsymbol{\psi}_0, \boldsymbol{x}_0) f(\boldsymbol{\psi}_0, \boldsymbol{x}_0; t_0) d\boldsymbol{\psi}_0 d\boldsymbol{x}_0 \quad (4.72)$$

g) Herleitung der Transport PDF-Gleichung

Für die Herleitung der Transport PDF-Gleichung wird die Transportgleichung von p_{FG} in kartesischer Koordinatenschreibweise herangezogen [Ger05]:

$$\rho \frac{\partial p_{FG}}{\partial t} + \rho u_i \frac{\partial p_{FG}}{\partial x_i} = - \frac{\partial p_{FG}}{\partial \psi_j} \frac{D \Phi_j}{D t} \quad (4.73)$$

Unter Einbeziehung der Kontinuitätsgleichung sowie anschließender Mittelung folgt:

$$\left\langle \frac{\partial(\rho p_{FG})}{\partial t} \right\rangle + \left\langle \frac{\partial(\rho u_i p_{FG})}{\partial x_i} \right\rangle = - \frac{\partial}{\partial \psi_j} \left\langle \rho \frac{D \Phi_j}{D t} p_{FG} \right\rangle \quad (4.74)$$

In Gl.(4.74) tritt das Produkt von p_{FG} mit einer Funktion auf und die Transportgleichung von p lautet dann:

$$\frac{\partial}{\partial t} [\langle \rho | \boldsymbol{\Phi} = \boldsymbol{\psi} \rangle p(\boldsymbol{\psi})] + \frac{\partial}{\partial x_i} [\langle \rho u_i | \boldsymbol{\Phi} = \boldsymbol{\psi} \rangle p(\boldsymbol{\psi})] = - \frac{\partial}{\partial \psi_j} \left\langle \rho \frac{D \Phi_j}{D t} p_{FG} \right\rangle \quad (4.75)$$

Die physikalischen Informationen fließen über $\rho D\Phi_j/Dt$ in Gl.(4.75) ein, welche die substantielle Ableitung darstellt. Mit der substantiellen Ableitung werden die entsprechenden momentanen Bilanzgleichungen für vektorielle als auch skalare thermochemische Größen in die PDF Gleichung eingeführt. Dopazo und O'Brian [DB74] sowie Pope [Pop76], [Pop85] wandten dieses Verfahren erstmals auf reaktive turbulente Strömungen an. Die Transportgleichung von p beschreibt die Wahrscheinlichkeit, einen bestimmten Zustand des turbulent schwankenden Fluides im thermochemischen Zustandsraum anzutreffen. Bei einer thermochemischen PDF wird dieser Raum von den Massenanteilen und der Enthalpie aufgespannt. Für ein System, mit $\Phi = (\Phi_1, \dots, \Phi_M)^T$ als Vektor der Zufallsgröße lautet die Favre gemittelte thermochemische PDF $\tilde{p}_{TC} = \tilde{p}_{TC}(\psi_1, \dots, \psi_M)^T$ mit $\psi_1, \dots, \psi_{M-1} = Y_k^*$ und $\psi_M = h^*$ folgt:

$$\begin{aligned}
& \underbrace{\langle \rho \rangle \frac{\partial \tilde{p}_{TC}}{\partial t}}_{\text{zeitliche Änderung}} + \underbrace{\langle \rho u_i \rangle \frac{\partial \tilde{p}_{TC}}{\partial x_i}}_{\text{mittlere Konvektion}} + \underbrace{-\frac{\partial}{\partial x_i} [\langle \rho \rangle \langle u_i'' | \Phi = \Psi \rangle \tilde{p}_{TC}]}_{\text{turbulente Konvektion}} - \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\langle \rho \rangle D \frac{\partial \tilde{p}_{TC}}{\partial x_i} \right)}_{\text{molekulare Diffusion}} = \\
& \underbrace{-\langle \rho \rangle \sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^M \frac{\partial}{\partial \psi_m} \frac{\partial}{\partial \psi_n} \left[\left\langle D \frac{\partial \Phi_m}{\partial x_i} \frac{\partial \Phi_n}{\partial x_i} \middle| \Phi = \Psi \right\rangle \tilde{p}_{TC} \right]}_{\text{molekulare Mischung}} \\
& \underbrace{-\langle \rho \rangle \sum_{k=1}^{M-1} \frac{\partial}{\partial Y_k^*} (\omega_k(Y_1^*, \dots, Y_{M-1}^*) \tilde{p}_{TC})}_{\text{chemische Reaktionen}} \\
& \underbrace{-\langle \rho \rangle \frac{\partial}{\partial h^*} \left[\left\langle \frac{\partial p}{\partial t} + u_i \frac{\partial p}{\partial x_i} + \sigma_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_i} + \rho u_i f_i \middle| \Phi = \Psi \right\rangle \frac{\tilde{p}_{TC}}{\rho} \right]}_{\text{Kompressibilität, Dissipation, externe Massenkräfte}}
\end{aligned} \tag{4.76}$$

Die Auswirkungen lokaler Druckschwankungen auf die Dichte werden vernachlässigt, so dass $\langle \rho | \Phi = \Psi \rangle = \rho(\Psi) = \rho$ sowie auch $\langle \rho u_i | \Phi = \Psi \rangle = \rho(\Phi) \langle u_i | \Phi = \Psi \rangle = \rho \langle u_i | \Phi = \Psi \rangle$ in Gl. (4.75) zu setzen ist. In Gl.(4.76) muss der mittlere konvektive Transport nicht modelliert werden. Wird keine Geschwindigkeits-PDF gelöst, ist die turbulente Konvektion eine zu modellierende Größe, da sie durch mit den Skalaren konditionierten Geschwindigkeitsfluktuationen hervorgerufen wird. Der Einfluss der molekularen Diffusion ist gegenüber dem des molekularen Mischungsterms meist sehr gering. Letztgenannter beschreibt den kleinskaligen diffusiven Transport auf molekularer Ebene (Mikromischung) und muss modelliert werden. Da Brennstoff und Oxidator nur auf molekularer Ebene reagieren, spielt seine Modellierung eine wichtige Rolle (s. Abs. 4.3.4). Einen Vergleich zur Modellierung des turbulenten Mischungsterm liefern Pope und Subramaniam [SP97]. Der chemische Quellterm ist in der PDF-Gleichung geschlossen, so dass er nicht modelliert werden muss. Dies resultiert daher, dass die Quelle keine Informationen über zeitliche und räumliche Verteilungen besitzt (Ein-Punkt-PDF) und chemische Reaktionen nur von der lokalen Zusammensetzung abhängen. Der geschlossene Quellterm in Gl.(4.76) ist ein Vorteil der Transport-PDF. Zeit- und Längenskalen der Turbulenz sind nicht aus der PDF zu gewinnen, weshalb auch hier ungeschlossene Terme zu finden sind. Vor allem trifft das auf Terme zu, die räumliche Gradienten (Mehrpunkt-Informationen für bedingte Erwartungswerte oder Erwartungswerte mit Fluktuationen) enthalten. Die unbekanntenen Terme für Kompressibilität, Dissipation und externe Massenkräfte sind jeweils unter bestimmten Bedingungen vernachlässigbar, ansonsten bedürfen sie einer Modellierung, wie u.a. in Haworth und Pope [HP86]. Modellierungsansätze

werden in [Ger05] und [Fox04] ausführlich behandelt. $\langle \rho \rangle$, $\langle p \rangle$, $\langle \rho u_i \rangle$ sowie k und ε müssen zur Lösung von Gl.(4.76) bekannt sein. Die thermochemische PDF reicht in Verbrennungsvorgängen meist nicht aus, da Interaktionen mit dem turbulenten Geschwindigkeitsfeld einen wesentlichen Einfluss auf die skalaren Größen haben. Es kann eine Verbund-PDF \tilde{p} des Geschwindigkeitsvektors und der thermochemischen Skalare aufgestellt werden:

$$\begin{aligned}
& \langle \rho \rangle \frac{\partial \tilde{p}}{\partial t} + \langle \rho \rangle u_i^* \frac{\partial \tilde{p}}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\langle \rho \rangle D \frac{\partial \tilde{p}}{\partial x_i} \right) = \\
& \langle \rho \rangle \frac{\partial}{\partial u_i^*} \left[\left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial \langle p \rangle}{\partial x_i} - f_i \right) \tilde{p} \right] + \langle \rho \rangle \frac{\partial}{\partial u_i^*} \left[\left(\frac{\partial p'}{\partial x_i} - \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_i} \Big|_{\Phi = \Psi} \right) \frac{\tilde{p}}{\rho} \right] \\
& - \langle \rho \rangle \sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^M \frac{\partial}{\partial \Psi_m} \frac{\partial}{\partial \Psi_n} \left[\left(D \frac{\partial \Phi_m}{\partial x_i} \frac{\partial \Phi_n}{\partial x_i} \Big|_{\Phi = \Psi} \right) \tilde{p} \right] \\
& - \langle \rho \rangle \sum_{k=1}^{M-1} \frac{\partial}{\partial Y_k^*} (\omega_k(Y_1^*, \dots, Y_{M-1}^*) \tilde{p}) \\
& - \langle \rho \rangle \frac{\partial}{\partial h^*} \left[\left(\frac{\partial p}{\partial t} + u_i \frac{\partial p}{\partial x_i} + \sigma_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_i} + \rho u_i f_i \Big|_{\Phi = \Psi} \right) \frac{\tilde{p}}{\rho} \right]
\end{aligned} \tag{4.77}$$

In Gl.(4.77) kommen neue ungeschlossene Terme vor, die aus der Impulsgleichung resultieren. Dagegen ist der konvektive Transport auf der linken Seite geschlossen. Zur Lösung müssen der Druck $\langle p \rangle$ sowie die Dissipationsrate ε bereitgestellt werden. Eine wichtige Eigenschaft der PDF-Transportgleichung ist, dass sich über mathematische Umformung, die Transportgleichungen beliebiger Momente der Zufallsvariablen gewinnen lassen [Ger05], da \tilde{p} alle statistischen Informationen von Enthalpie-, Spezies- und Impulsgleichung enthält. Die PDF-Transportgleichung wird nicht über ein Finites Volumen- oder Differenzenverfahren gelöst, da die PDF gewöhnlich sehr hohe Dimensionen besitzt. Die PDF ist nicht nur in Raum und Zeit, sondern auch in den Variablen, deren stochastisches Verhalten sie beschreibt, zu diskretisieren, was den Rechenaufwand überproportional ansteigen lässt. Die Alternative dazu sind Partikelmethoden, die aus einem Ensemble stochastischer Partikel die PDF-Gleichung approximieren.

4.3 Partikelmodell der PDF-Transportgleichung

Wie bereits erwähnt, können mit Hilfe diskreter Partikelverfahren die sehr komplexen PDF Transportgleichungen gelöst werden. Demnach wird die Entwicklung der kontinuierlichen PDF durch eine relativ große Anzahl diskreter Partikel beschrieben, die als stochastische Partikel eingeführt werden. Es kommen sowohl Eulersche als auch Lagrangesche Verfahren zum Einsatz. Letztere gehen auf Pope [Pop81], [Pop85], [Pop94] zurück. In einem Lagrangeschen Verfahren muss die PDF der Partikel die PDF-Transportgleichung erfüllen und Massenerhaltung gewährleistet sein. Im Euler-Verfahren wird die PDF lediglich durch die Partikel repräsentiert [Ger05]. Auf Eulersche Partikelverfahren soll im Folgenden nicht näher eingegangen werden, da sich die Arbeit vordergründig mit Lagrangeschen Methode befasst.

4.3.1 Grundlage diskreter Partikelverfahren

Für ein Partikelensemble von $p = 1, \dots, P$ der Masse m^p mit den Eigenschaften Φ^p und der Dirac-Funktion δ lässt sich die diskrete PDF für einen Ort und eine Zeit wie folgt aufstellen:

$$p_D(\boldsymbol{\psi}) \equiv \frac{1}{\sum_{p=1}^P m^p} \sum_{p=1}^P m^p \delta(\Phi^p - \boldsymbol{\psi}) \quad (4.78)$$

Im Fall einer Verbund-PDF skalarer und vektorieller Größen sind die Eigenschaften des Partikels definiert durch

$$\Phi^p = u_i^p, h^p, Y_k^p \quad \text{mit} \quad i = 1, 2, 3, \quad k = 1, \dots, N, \quad (4.79)$$

woraus folgt:

$$p_D(u_i^*, h^*, Y_k^*) \equiv \frac{1}{\sum_{p=1}^P m^p} \sum_{p=1}^P \left\{ m^p \left[\prod_{i=1}^3 \delta(u_i^p - u_i^*) \right] \delta(h^p - h^*) \left[\prod_{k=1}^N \delta(Y_k^p - Y_k^*) \right] \right\} \quad (4.80)$$

Eine solche Schreibweise ist erforderlich, da auch für $P \rightarrow \infty$ die diskrete PDF nicht in die kontinuierliche PDF p übergeht, weil p_D nur aus Delta-Funktionen besteht. Es ist aber möglich, Ensemble-Mittel beliebiger Funktionen der Zufallsgröße zu bilden, die mit einem stochastischen Fehler behaftet, für $P \rightarrow \infty$ in den Erwartungswert übergehen:

$$\langle Q(\Phi) \rangle_D = \int Q(\boldsymbol{\psi}) p_D(\boldsymbol{\psi}) d\boldsymbol{\psi} = \frac{1}{\sum_{p=1}^P m^p} \sum_{p=1}^P m^p Q(\Phi^p) \quad (4.81)$$

Diese Beziehung wurde von Pope [Pop79] hergeleitet und gilt als fundamental für die Anwendung von Monte Carlo Methoden zur Lösung der PDF-Transportgleichung. Steigt P gegen unendlich, dann strebt im Fall homogener Turbulenz die Partikeldichteverteilung gegen die PDF $p_{TC}(\boldsymbol{\psi})$:

$$\frac{\partial p_{TC}(\boldsymbol{\psi})}{\partial t} + \sum_{i=1}^M \frac{\partial}{\partial \psi_i} \left[\langle S_i(\boldsymbol{\psi}) \rangle + \langle D_i(\boldsymbol{\psi}) \rangle \right] = 0 \quad (4.82)$$

$\langle D_i(\boldsymbol{\psi}) \rangle$ repräsentiert den Fluss von $p_{TC}(\boldsymbol{\psi})$ mit

$$\langle D_i(\boldsymbol{\psi}) \rangle = \sum_{j=1}^M \frac{\partial}{\partial \psi_j} \left[\left(D \frac{\partial \Phi_i}{\partial x_k} \frac{\partial \Phi_j}{\partial x_k} \Big|_{\Phi = \boldsymbol{\psi}} \right) p_{TC}(\boldsymbol{\psi}) \right] \quad (4.83)$$

in Folge der Mischung auf molekularer Ebene, der modelliert werden muss. Der mittlere chemische Quellterm tritt mit $\langle S_i(\boldsymbol{\psi}) \rangle = \dot{\omega}_i(\psi_1, \dots, \psi_M) p_{TC}(\boldsymbol{\psi})$ geschlossen auf. Pope [Pop79] leitete eine mathematische Beziehung von Φ^p in Abhängigkeit von $\boldsymbol{\psi}$ und $p_{TC}(\boldsymbol{\psi})$ her, indem er eine eindeutige Funktion zu $\boldsymbol{\psi}$ mit der inversen Transformation $\boldsymbol{\psi}^*$ im Transformationsraum η mit $\boldsymbol{\psi} = \boldsymbol{\psi}^*(\eta, t)$ aufstellt. Unter der Bedingung, dass Gl.(4.81) erfüllt ist, führt das zu einer Lagrangeschen Gleichung für $\Phi^p(t)$:

$$\frac{d \Phi_i^p}{dt} = \dot{\omega}_i(\Phi_1^p, \dots, \Phi_M^p) + \frac{D_i(\Phi_1^p, \dots, \Phi_M^p)}{p(\Phi_1^p, \dots, \Phi_M^p)} \quad (4.84)$$

Die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion $p(\Phi_1^p, \dots, \Phi_M^p)$ ist in der Formulierung für das Partikel-Ensemble explizit nicht bekannt, kann aber als lokale Partikeldichte interpretiert werden. Gl. (4.84) stellt einen Satz gewöhnlicher Differenzialgleichungen dar und kann anstelle der Gl. (4.82) für ein Partikel-Ensemble gelöst werden. Auch für das Partikelmodell muss

$D_i(\Phi_1^p, \dots, \Phi_M^p)$ modelliert werden (s. Abs. 4.3.4). Bei Berücksichtigung aller möglichen Partikel-Interaktionen steigt der rechnerische Aufwand; dennoch überwiegen die Vorteile der Partikel-Form als Lösung der PDF. Für den Fall inhomogener Turbulenz trifft diese direkte Herleitung auf Schwierigkeiten: Ein Ensemble von Partikeln wird nicht entlang einer einzigen mittleren Stromlinie verändert, sondern jedes Partikel verändert sich entlang einer bedingten Stromlinie. Das Ensemble sprengt auseinander und kann nicht mehr die PDF in einem Punkt repräsentieren, was im Fall homogener Turbulenz keinen Einfluss hat. Durch die Einführung konditionierter stochastischer Partikel, gelingt Pope [Pop85] der Übergang zur Lösung der thermochemischen sowie der Verbund-PDF Gleichung (s. Abs. 4.3.2.). Für eine Strömung mit variabler Dichte, wie es bei Verbrennungsvorgängen der Fall ist, ist die Verteilung der Partikel nicht als homogen anzusehen und muss durch die diskrete Massendichtefunktion berücksichtigt werden:

$$f_D(\boldsymbol{\psi}, \boldsymbol{x}; t) \equiv \sum_{p=1}^P m^p \delta(\boldsymbol{\Phi}^p - \boldsymbol{\psi}) \delta(\boldsymbol{x}^p - \boldsymbol{x}) \quad (4.85)$$

Aus Gl.(4.67) folgt

$$\rho_D(\boldsymbol{\psi}) = M_P \sum_{p=1}^P \delta(\boldsymbol{x}^p - \boldsymbol{x}) \quad , \quad (4.86)$$

wobei M_P die Gesamtmasse aller Partikel darstellt. Die mittlere Massendichte an einem Punkt \boldsymbol{x} ist direkt proportional zur Anzahl der sich in diesem Punkt befindlichen Partikel:

$$\langle \rho_D \rangle = \frac{M_P}{P} \sum_{p=1}^P \delta(\boldsymbol{x}^p - \boldsymbol{x}) \quad (4.87)$$

4.3.2 Lagrangesche Partikelverfahren zur Lösung der PDF

Die Entwicklung der PDF wird mit stochastischen Partikeln gelöst. Die Lösung von Gl. (4.76) bzw. Gl.(4.77) erfolgt durch sequentielles Abarbeiten der sonst gleichzeitig ablaufenden Vorgänge während eines Zeitschritts Δt mittels Faktorisierung [DD92], [Per93] (fractional step method):

$$\frac{\partial \tilde{p}}{\partial t} = \left(\underbrace{T_T}_{\text{physikalischer Transport}} + \underbrace{T_M}_{\text{Mischung}} + \underbrace{T_R}_{\text{chemische Reaktionen}} + \underbrace{T_D}_{\text{Dissipation, Kompressibilität}} \right) \tilde{p} \quad (4.88)$$

In einem Lagrangeschen Verfahren wird ein System von Partikelgleichungen gelöst, welches stochastisch zu p bzw. f äquivalent ist. Der Ansatz geht auf Pope [Pop85] zurück, der dazu konditionierte Partikel einführt, deren Zustand sich entsprechend der bedingten Erwartungswerte der Änderungen fluider Partikel entwickelt. Zur Beschreibung wird hier die Massendichtefunktion MDF herangezogen. Die gesuchte MDF lässt sich zu beliebigen Zeitpunkten durch eine große Zahl konditionierter Partikel approximieren als

$$f_D(\boldsymbol{\psi}, \boldsymbol{x}, t) \approx f(\boldsymbol{\psi}, \boldsymbol{x}, t) \quad , \quad (4.89)$$

wobei f_D die diskrete MDF der konditionierten Partikel darstellt. Es werden die Zustände aller konditionierten Partikel bestimmt. Die Erwartungswerte müssen dann mit stochastischen Ansätzen modelliert werden, d.h. mit stochastischen Partikeln mit $\boldsymbol{\Phi}^{*p}(t) = (\boldsymbol{u}^{*p}(t), h^{*p}(t), \boldsymbol{Y}^{*p}(t), \boldsymbol{x}^{*p}(t))$. Diese verhalten sich physikalisch nicht mehr wie fluide oder konditionierte Partikel, da $\boldsymbol{\Phi}^{*p}(t)$ den Zustand $\boldsymbol{\Phi}(t)$ nicht direkt modelliert. Dagegen modelliert die PDF p^* der stochastischen Partikel die gesuchte PDF p . Die Gleichungen für konditionierte stochastische Partikel lauten:

$$\begin{aligned}
dx_i^{p^*} &= u_i^{p^*} dt, \quad du_i^{p^*} = \left(\frac{A_i}{\varrho} \mid \mathbf{u}^{p^*}, h^{p^*}, \mathbf{Y}^{p^*} \right) dt + \Theta_{u_i}, \\
dh^{p^*} &= \left(\frac{B}{\varrho} \mid \mathbf{u}^{p^*}, h^{p^*}, \mathbf{Y}^{p^*} \right) dt + \Theta_h, \quad dY_k^{p^*} = \left(\frac{C_k}{\varrho} \mid \mathbf{u}^{p^*}, h^{p^*}, \mathbf{Y}^{p^*} \right) dt + \Theta_{Y_k}
\end{aligned} \tag{4.90}$$

Die Koeffizienten A_i , B und C_k entsprechen den rechten Seiten der Gl.(2.35)-(2.37). Die zusätzlichen Terme Θ dienen zur Kontrolle der PDF. Änderungen der Partikeleigenschaften $\Phi^{p^*} = u_i^{p^*}, h^{p^*}, Y_k^{p^*}$ werden durch eine stochastische DGL beschrieben mit

$$d\Phi^{p^*} = \mathbf{A}(\Phi^{p^*}, t) dt + \mathbf{B}(\Phi^{p^*}, t) d\mathbf{W}(t), \tag{4.91}$$

die zu einem nicht reproduzierbaren Verhalten der Partikel führt. $d\mathbf{W}(t)$ bezeichnet einen Wiener-Prozess¹⁶ und \mathbf{B} eine Matrix mit Elementen b_{ij} . Zusammen bilden sie einen Term der Gleichung, der als stochastische Kraft bezeichnet wird. Gl.(4.91) erzeugt eine konditionierte Lagrange-PDF $p_L^* = p_L^*(\mathbf{u}^*, h^*, \mathbf{Y}_k^*, \mathbf{x}, t \mid \mathbf{u}_0, h_0, \mathbf{Y}^*, \mathbf{x}_0)$, die sich gemäß der Fokker-Planck-Gleichung entwickelt:

$$\frac{\partial p_{La}^*}{\partial t} + u_i^* \frac{\partial p_{La}^*}{\partial t} = \frac{\partial [a_i(\Phi^*, \mathbf{x}, t) p_{La}^*]}{\partial \Phi_i^*} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 [c_{ij}(\Phi^*, \mathbf{x}, t) p_{La}^*]}{\partial \Phi_i^* \partial \Phi_j^*} \tag{4.92}$$

Gehorchen die stochastischen Prozesse einem Markov-Prozess¹⁷, muss sich die unkonditionierte PDF genauso entwickeln wie die konditionierte PDF p_{La}^* . Die dazugehörige MDF f^* entwickelt sich nach der gleichen Transportgleichung wie p_{La}^* und somit kann f^* durch viele Partikel approximiert werden. Dann muss gewährleistet sein, dass für die diskreten PDF's gilt:

$$f_D^* \approx f^* \quad \text{und} \quad p_D^* \approx p^* \tag{4.93}$$

Stimmen f^* und f sowie p^* und p überein gilt für die konditionierte Verbund-PDF:

$$p^*(\mathbf{u}^*, h^*, \mathbf{Y}^*; t \mid \mathbf{x}^{p^*} = \mathbf{x}) = \frac{f^*(\mathbf{u}^*, h^*, \mathbf{Y}^*; \mathbf{x}; t)}{\langle \rho(\mathbf{x}, t) \rangle} = \tilde{p}(\mathbf{u}^*, h^*, \mathbf{Y}^*; \mathbf{x}; t) \tag{4.94}$$

Die Momente der Zufallsvariablen zu einer Zeit an einem Ort in Eulerscher Formulierung gehen mit

$$\langle Q(\mathbf{u}, h, \mathbf{Y}) \rangle = \langle Q(\mathbf{u}^{p^*}, h^{p^*}, \mathbf{Y}^{p^*} \mid \mathbf{x}^{p^*} = \mathbf{x}) \rangle \tag{4.95}$$

aus den konditionierten Lagrangeschen Momenten hervor. Ein wichtiges Kriterium ist, dass sich die Masse der stochastischen Partikel proportional zur Fluidmasse verhalten muss. Bei identischen Massen der Partikel sind in kleinen Zellen nur wenige Partikel anzutreffen, was den statistischen Fehler erhöht. Als Folge daraus kann u.a. eine Spaltung der Partikelmassen die Teilchenzahl erhöhen bzw. bei zu vielen Partikeln eine Partikellöschung oder die Anhebung der individuellen Massen eine Korrektur bewirken [Ger05]. Die Darstellung der PDF durch stochastische Partikel erfordert erheblich weniger Aufwand als die mehrdimensionale Diskretisierung der PDF-Transportgleichung. Eine Zunahme der unabhängigen Variablen führt bei konstanter Partikelzahl nur zu einem linearen Anstieg von Speicherbedarf und Rechenzeit. Obwohl der Aufwand beim Partikelverfahren gering ist, bleibt es noch immer sehr rechenintensiv, da sich ein statistisch abgesichertes Verhalten erst

¹⁶ Für Wiener Prozesse (Diffusionsprozesse) gilt $\langle dW_i(t) \rangle = 0$ und $\langle dW_i(t) dW_j(t) \rangle = \delta_{ij} dt$ ist ein Markov-Prozess

¹⁷ Der Markov-Prozess beschreibt Prozesse, bei denen der Zustand zum neuen Zeitpunkt nur vom gegenwärtigen Zustand abhängt und nicht von weiter zurückliegenden.

für eine sehr große Anzahl von Partikeln einstellt. Der statistische Fehler für einen mit der diskreten PDF gebildeten Erwartungswert, geht bei ansteigender Partikelanzahl P nur mit $1/\sqrt{P}$ zurück, so dass dessen Reduzierung eine deutliche Erhöhung von P erfordert. Mittelung über zuletzt berechnete Zeitschritte (bei statistisch stationären Strömungen) oder die Verwendung von Gewichtungsfunktionen reduzieren den Fehler. Partikelverfahren werden weitgehend in Kombination mit einem FV- oder FD-Verfahren angewandt (Hybrid-Verfahren), da zur Lösung der thermochemischen PDF-Transportgleichung weitere Größen wie $\bar{\rho}$, \tilde{u}_i , \bar{p} sowie k und ε benötigt werden. Es sind beim Lagrangeschen Verfahren aber auch PDF Ansätze möglich, die vollkommen ohne ein FV-FD-Verfahren auskommen, jedoch noch zu ungenauer Gradientenberechnung durch zu geringe Partikelanzahl zulassen. Deshalb werden auch in dieser Arbeit die Partikelverfahren mit FV-FD-Verfahren gemeinsam gelöst.

4.3.3 Modellierung der Teilprozesse der PDF-Partikelgleichung

In der thermochemischen Lagrange-MDF wird der Transport der stochastischen Partikel im physikalischen Raum T_T nach Gl.(4.91) wie folgt entwickelt [Fox04]

$$d\mathbf{x}^{p*} = \left(\tilde{\mathbf{u}} + \frac{1}{\langle \rho \rangle} \frac{\partial (\langle \rho \rangle D_{eff})}{\partial \mathbf{x}} \right) dt + \sqrt{2D_{eff}} d\mathbf{W}, \quad (4.96)$$

wobei $\tilde{\mathbf{u}}$ die Geschwindigkeit am Partikelort darstellt und aus den Eulerschen Größen gewonnen wird. Der chemische Quellterm T_R wird nicht modelliert, da er direkt berechnet werden kann:

$$\frac{dY_k^{p*}}{dt} = \frac{1}{\langle \rho \rangle} \omega_k \quad (4.97)$$

Dissipation und Kompressibilität T_D können bei niedrigen Strömungsgeschwindigkeiten vernachlässigt werden, spielen jedoch in kompressiblen Strömungen eine Rolle. Der Mischungsterm erfordert intensive Betrachtung und wird in Abs. 4.3.4 behandelt. Für die Verbund-Lagrange-MDF muss der Transport im physikalischen Raum T_T wie folgt formuliert werden:

$$\begin{aligned} d\mathbf{x}^{p*} &= \mathbf{u}^{p*} dt \\ du_i^{p*} &= \left(-\frac{1}{\rho^{p*}} \frac{\partial \langle p \rangle}{\partial x_i} + f_i + G_{ij}(u_j^{p*} - \tilde{u}_j) \right) dt + \sqrt{C_0 \varepsilon} dW_i \end{aligned} \quad (4.98)$$

Die konditionierte Beschleunigung wird mit dem vereinfachten Langevin-Modell [HP86] geschlossen:

$$G_{ij} = -\left(\frac{1}{2} + \frac{3}{4} C_0 \right) \frac{\varepsilon}{k} \delta_{ij} \quad \text{und} \quad C_0 = 2.1 \quad (4.99)$$

4.3.4 Mischungsmodelle auf Partikelebene

Die Modellierung der Mischung $\langle D_i(\Phi) \rangle$ bzw. T_M bei Partikelmethoden zur Lösung der PDF Transportgleichung erfordert Modelle auf Partikelebene. Sie beinhaltet die Beschreibung der Entwicklung stochastischer Partikel im Zustandsraum, die u.a. die Änderung fiktiver fluider Partikel aufgrund der Mischung in einer turbulenten Strömung markiert.

LMSE. Ein einfaches Modell ist das LMSE-Modell (Linear Mean Square Estimation) von Lundgren [Lun67] und Dopazo und O'Brien [DB74]. Es resultiert jedoch in der selben Gleichung wie das IEM Modell, was noch vorgestellt werden soll (s. Abs. 4.4.2), stammt aber

von einem anderen physikalischen Konzept ab. Die Entwicklung des LMSE Modells ist direkt aus einem probabilistischen Ansatz für die Schließung der molekularen Mischung in der PDF-Transportgleichung entstanden:

$$\frac{d \Phi_i^p}{dt} = -\frac{1}{2\tau_\phi} (\Phi_i^p(t) - \langle \Phi_i^p(t) \rangle) \quad \text{mit} \quad \tau_\phi = \frac{\tau}{C_\phi} \quad \text{und} \quad C_\phi \approx 2.0 \quad (4.100)$$

Der Ansatz bewirkt eine über die Zeitskala τ_ϕ gesteuerte lineare Annäherung der Partikel an den Erwartungswert. Neben dem LMSE/IEM Modell haben sich im Wesentlichen zwei weitere Modelle etabliert: das modifizierte Curl-Modell (MC) von Janicka et al. [JKK79] sowie das Euclidean Minimum Spanning Tree Mischungsmodell (EMST) von Subramaniam und Pope [SP98]. In Beiden wird die molekulare Partikeldiffusion mit stochastischen Prozessen von Partikel-Interaktionen beschrieben.

MC. Das MC-Modell basiert auf dem Partikel Coalescence/Redispersions Modell von Curl [Cu63], bei dem es zu Wechselwirkungen zwischen Partikelpaaren kommt. Eine Vereinfachung des Curl Modells wird durch das LMSE/IEM Modell erreicht. Willkürlich ausgewählte Partikelpaare interagieren miteinander und nehmen einen Endzustand mit

$$\Phi_i^{p=n}(t + \Delta t) = \Phi_i^{p=m}(t + \Delta t) = \frac{m^n \Phi_i^n(t) + m^m \Phi_i^m(t)}{m^n + m^m} \quad (4.101)$$

ein, der den massegewichteten Mittelwerten beider Anfangszustände entspricht. Damit lassen sich nur diskrete Punkte im Zustandsraum erreichen. Nicht ausgewählte Partikel bleiben unverändert. Im MC-Modell können es beliebige Punkte sein, indem eine gleichverteilte Zufallsvariable $\alpha[0,1]$ eingeführt wird, um die Endzustände entsprechend

$$\begin{aligned} \Phi_i^{p=n}(t + \Delta t) &= \Phi_i^n(t) + \frac{m^m}{m^n + m^m} \alpha (\Phi_i^m(t) - \Phi_i^n(t)) \\ \Phi_i^{p=m}(t + \Delta t) &= \Phi_i^m(t) + \frac{m^n}{m^n + m^m} \alpha (\Phi_i^n(t) - \Phi_i^m(t)) \end{aligned} \quad (4.102)$$

zu berechnen. Die Zufallszahl bewirkt, dass die Endzustände beliebig zwischen Ausgangs- und Endpunkten des ursprünglichen Modells positioniert sein können. An ein Mischungsmodell werden verschiedene Kriterien gestellt, die es zu erfüllen hat [SP98]. Das betrifft für isotrope homogene Turbulenz auch ohne chemische Reaktionen 1.) die Erhaltung des Mittelwertes (bleibt durch Mischung unbeeinflusst), 2.) die zeitliche Abnahme der Varianzen, 3.) die Einhaltung der Grenzbedingungen, Linearität und statistische Unabhängigkeit, 4.) ein zeitlich asymptotischer Übergang in eine multivariante Gauß-Verteilung, 5.) bei hoher Re-Zahl keine Korrelation mit den Geschwindigkeitsfluktuationen und 6.) das Konzept der Lokalität (Begrenzung der Änderung auf die direkte Umgebung). Während das LMSE/IEM sowie MC Modell die ersten drei Punkte erfüllen, werden der Übergang zur Gauß-Verteilung und eine Begrenzung auf die lokale Umgebung nicht erfüllt. Die Geschwindigkeitsfluktuationen üben keinen Einfluss auf das Mischungsmodell aus.

EMST. Das EMST Modell ist ein Modell, welches durch die Berücksichtigung des Konzeptes der Lokalität einen der Nachteile der bisher vorgestellten Modelle aufhebt, ist aber auch am komplexesten und sehr aufwendig. Neben der Partikelzusammensetzung wird eine weitere Zustandsvariable $B_n(t)$ eingeführt. Das Modell besteht aus drei Stufen: Zunächst werden basierend auf der Zustandsvariablen „lebende“ Partikel für die Mischung ausgewählt. Im nächsten Schritt wird ein Euklidischer Baum (Euclidean Minimum Spanning Tree)

aufgespannt, der die ausgewählten Partikel so miteinander verbindet, dass die Länge der zu verbindenden Punkte ein Minimum wird. Letztlich werden die Partikelpaare gemischt, die an einem gemeinsamen Knotenpunkt des Baumes hängen.

Mitarai et al. [MRK05] untersuchten die LMSE/IEM, MC und EMST Modelle sowohl für RANS als auch LES Berechnungen, die mit DNS Ergebnissen verglichen wurden. Generell schneidet dabei das EMST Modell am Besten ab. In RANS liefert EMST vernünftige und übereinstimmende Vorhersagen der Mittelwerte, während LMSE/IEM und MC dazu tendieren, diese unterzubestimmen. Das Eintauchen sowie Herauslösen kalter Partikel in bestimmte Regionen, die lokale Verlöschung als auch Zündung ermöglichen, konnte mit keinem Modell realistisch beschrieben werden. Das LMSE Modell versagt in der Vorhersage des korrekten physikalischen Verhaltens und wird nicht als gutes Modell für die Mischung bezeichnet. Während die PDF im LMSE und MC Modell symmetrisch um ihren Mittelwert verläuft, führt das EMST Modell zu einer asymmetrischen Verteilung. Grund für dieses Verhalten ist die Beeinflussung des Mischungsbruchs durch die Temperatur. In LES zeigt das EMST Modell gegenüber allen anderen bessere Vorhersagen, u.a. erfasst es auch Verlöschung und Zündung. LMSE/IEM und MC weisen zu viele Partikel in kalten Regionen auf. Durch die Einführung lokaler Interaktionen (bessere räumliche Auflösung in LES) in allen Modellen ist eine verbesserte physikalische Beschreibung möglich, die deutlich im LMSE und EMST sowie teilweise im MC-Modell gegenüber der RANS Berechnung zu erkennen ist. In [MRK05] wird spekuliert, dass die guten Vorhersagen aus der Literatur mit den einfachen Modellen (LMSE, MC) durch Anpassung der Modellkonstante (turbulente Austauschrate) erreicht worden sind.

4.4 Lagrangesche Ansätze für den chemischen Quellterm

Eine erste Möglichkeit, eine Lagrangesche Beschreibung der Strömungsverhältnisse zu nutzen, wurde mit dem stochastischen Lagrangeschen Partikelverfahren zur Lösung der PDF-Transportgleichung vorgestellt. Daneben existieren auch Ansätze, die als Lagrangesche Modelle bezeichnet werden. Diese orientieren sich an der Beschreibung der physikalischen Verhältnisse, die nur durch eine reine zeitliche Abhängigkeit der physikalischen Größen gegeben ist. Einen umfassenden Überblick findet man in [Bor88]. Ein Merkmal ist auch hier die Verfolgung von Fluidpartikeln oder Fluidstrukturen über ihre Lebenszeit entlang ihrer Trajektorien im Zustandsraum. Dies erfordert Lagrangesche Formulierungen, die in Partikelsystemen Anwendung finden und meist in Kopplung mit einem Eulerverfahren stehen. Das Lagrangesche Partikelverfahren mit einem Eulerschen Volumenverfahren zu koppeln, wird wie auch im PEUL+-Modell, durch die Übergabe von Quelltermen realisiert. Das ist notwendig, da keine mathematische Formulierung existiert, die eine direkte Umformung der mathematischen Gleichungen von Lagrangescher Partikelformulierung zu Eulerscher Formulierung finiter Volumen und umgekehrt ermöglicht.

4.4.1 Der CRE Ansatz

Ihren Ursprung haben Lagrangesche Modelle, wie sie in der Fluidodynamik verwendet werden, in der Modellierung und Planung von Reaktoren im Chemieingenieurwesen, dem sogenannten „Chemical-Reaction-Engineering Approach“ (CRE). Dieser Ansatz zur Modellierung chemischer Reaktoren basiert auf Stoff- und Energiebilanzen, jedoch eines sehr idealisierten Strömungsmodells, welches die Mischungseffekte zu berücksichtigen hat. Aufgrund der Vermeidung detaillierter Strömungsmodelle müssen unbekannte Modellparameter eingeführt werden, die die Austauschraten zwischen verschiedenen Sub-

Regionen innerhalb des Reaktors wiedergeben. Das Fluid wird als Ansammlung einzelner Fluidelemente betrachtet, die sich im physikalischen Zustandsraum durch das System bewegen. Deren Interaktionen basieren normalerweise auf der genauen Beschreibung des zugrunde liegenden Strömungsfeldes. Das hat zur Folge, dass einzelne Fluidelemente nicht in jedem Fall als individuelle Reaktoren behandelt werden können. Die Konzentrationen am Reaktorausstritt sind unter realistischen Strömungsbedingungen nicht nur von den Anfangskonzentrationen sondern auch dem chemischen Umsatz sowie der Verweilzeitverteilung im Reaktor abhängig. Eine detaillierte Beschreibung verschiedener Reaktormodelle findet sich in [Fox04]. Die notwendigen Strömungsgrößen, wie z.B. die Geschwindigkeitskomponenten oder turbulente kinetische Energie sind für den CRE Ansatz nur schwer zugänglich, meist empirisch oder durch Lösung von CFD Turbulenzmodellen ermittelbar. Werden CFD Modelle herangezogen schlägt [Fox04] vor, CRE Modelle in Ansätze für Transportgleichungen zu überführen und diese mit dem CFD Modell zu koppeln. Dies geschieht, wenn beide Methoden in Ausdrücken geeigneter stochastischer Ansätze formuliert werden.

4.4.2 Das IEM Modell

Ein sehr einfaches Lagrangesches Modell ist mit Hilfe des IEM Modell (Intermediate Exchange by the Mean) von C. Aubry und J. Villiermaux [AV75] formuliert und entstammt einem CRE Ansatz. Ziel des Modells ist die Beschreibung des molekularen Mischungsterms mit Hilfe eines konstanten Mittelwertes in jedem Punkt des Reaktors. Im Reaktor laufen zudem chemische Reaktionen ab. Durchgeführte Experimente an einem Reaktor zeigen eine gute Übereinstimmung mit dem angenommenen IEM Modell und damit seiner Anwendbarkeit zur Auslegung chemischer Reaktoren bei unvollkommener Mischung auf den kleinen Skalen. Das Modell stellt eine Vereinfachung des Coalescence-Redispersion Ansatzes von Curl [Cu63] aus Abs. 4.3.4 dar. Die Idee des Modells basiert auf der Annahme, den Zustandsraum mit einzelnen Partikeln zu beschreiben, die miteinander über ihren Mittelwert interagieren. Für jedes Fluidpartikel kann mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit angenommen werden, dass es sich an einem bestimmten Ort im Reaktor befindet. In einigen Fällen ist diese Wahrscheinlichkeit festgelegt, sie kann sich aber auch aufgrund von Interaktionen zwischen den Fluidpartikeln verändern. Das IEM Modell wird durch die Einführung der Lebenszeit t eines Fluidpartikels mit einer Lagrangeschen Differenzialgleichung formuliert. Die Lebenszeit ist dabei die Zeit, die das Partikel seit seinem Eintritt innerhalb des Reaktors verbracht hat. Für einen nicht vorgemischten Reaktor gilt für die Konzentration c_k als Funktion ihrer Lebenszeit in einem Fluidpartikel

$$\frac{d c_k}{d t} = \underbrace{h(\bar{c}_k - c_k)}_{\text{IEM-Modell}} + \omega_k \quad \text{mit} \quad h = \frac{1}{b\tau_{mix}} \quad (4.103)$$

mit der zeitlich mittleren Konzentration \bar{c}_k . Der erste Term der rechten Seite in Gl.(4.103) beschreibt die molekulare Mischung, welche die Austauschrate der Fluidpartikel mittels einer einfachen linearen Funktion beschreibt. Dabei ist τ_{mix} eine charakteristische Austauschzeit und b eine Konstante der Mikromischung, welche für jeden Reaktor anzupassen ist. h bezeichnet die Austauschrate der Mikromischung. ω_k ist der chemische Quellterm, der aus der zeitabhängigen Größe bestimmt werden kann. Die mittlere Konzentration ergibt sich unter der Annahme, dass der Reaktor auf den großen Skalen homogen gemischt ist. Sie erhält man nach Wichtung über die Lebenszeitverteilung:

$$\bar{c}_k = \frac{1}{\tau_{mix}} \int_0^\infty c_k(t) E(t) dt = \frac{1}{\tau_{mix}} \int_0^\infty c_k(t) \exp(-t/t_a) dt \quad (4.104)$$

Die Lebenszeitverteilungsfunktion $E(t)$ wird als Exponentialfunktion angenommen. Die mittlere Aufenthaltszeit $t_a = \rho V_R / \dot{m}_R$ im Reaktor wird aus dem Reaktorvolumen V_R und dem Reaktormassenstrom \dot{m}_R gebildet. Für die Makromischung wird angenommen, dass die mittlere Konzentration an jedem Punkt des Reaktors konstant ist. In [AV75] werden zwei Eintrittsstöme E_1 und E_2 betrachtet. Bei reiner Mischung wird die Konstante b über die Varianz der normierten Konzentration u im Reaktor bestimmt:

$$\sigma_u^2 = \int_0^{1/a} (u-1) df = \frac{1-a}{a(1+2b)} \quad \text{und} \quad u = \frac{c_k - c_{k,E1}^0}{a(c_{k,E2}^0 - c_{k,E1}^0)} \quad (4.105)$$

Dabei ist $a = \dot{m}_2 / (\dot{m}_1 + \dot{m}_2)$ das Verhältnis der Eintrittsmassenströme für E_2 , $c_{k,E1}^0$ bzw. $c_{k,E2}^0$ die Anfangskonzentration der Spezies k . Da das IEM Modell eine gute Makromischung voraussetzt, vermeidet es die Berechnung der lokalen mittleren Geschwindigkeiten und zusätzlicher Turbulenzgrößen. Der Parameter τ_{mix} vereinnahmt alle Informationen des Strömungsfeldes und ist daher nicht einfach zu bestimmen. Aufgrund seiner einfachen mathematischen Form, kann der Ansatz leicht auf Mehrkomponentensysteme angewendet werden, wie in den folgenden Abschnitten noch gezeigt wird.

4.4.3 Das ESCIMO Modell

Als ein erstes Modell für die Beschreibung der Turbulenz-Chemie Interaktionen mit Hilfe eines Lagrangeschen Ansatzes soll zunächst das ESCIMO Modell vorgestellt werden, das von Spalding et al. entwickelt [Spa76/2], [Spa79], [Tam81], [No80], [Sun82] wurde. Das Akronym ESCIMO steht für Engulfment, Stretching, Coherence, Interdiffusion, Moving Observer und kombiniert „biographische“ (Lagrangesche Betrachtung) sowie „demographische“ (Eulersche Betrachtung) Aspekte miteinander. Im Mittelpunkt der Betrachtung stehen die sogenannten „Folds“¹⁸ [Spa76/2] [Spa77], die aus dem Verrollen, der Verformung und der Kohärenz von Schichten unterschiedlich konstituierter Fluidgebiete resultieren. Die daraus folgende gegenseitige Durchdringung (= Interdiffusion) wird dann in Lagrangeschen Koordinaten (=Moving Observer) errechnet. Die Berechnungen stellen eine komplette und quantitative Theorie der „Fold“ - Biographie bereit und erlauben dabei die Einbeziehung chemischer Reaktionen von Mehrkomponentensystemen. Im Anschluss daran wird in einer demographischen Betrachtung die Verteilung der Population von Fluidpaketen (=Folds) unterschiedlichen Alters berechnet.

Engulfment ist der Vorgang, der am Rand eines turbulenten Jets auftritt. „Fluidzungen“ aus dem Jet werden in das den Jet umgebende Fluid gedrängt. Dort umhüllen sich die Fluidzungen mit dem frei strömenden Fluid und ziehen es in das Innere des Jets. „Folds“ werden gebildet. Spalding postuliert die Bildungsrate der „Folds“ als Funktion der zeitlich gemittelten Schergeschwindigkeit, ihrer Anfangsdicke, der Zusammensetzung der zwei „Foldkomponenten“ sowie des Massendurchsatzes der „Foldkomponenten“

Stretching beschreibt die Verformung oder auch Alterung der gebildeten Fluidpakete, was eine kontinuierliche Reduzierung der Fluidpaketdicke L verursacht:

$$\frac{DL}{Dt} = -sL \quad (4.106)$$

¹⁸ Spalding beschreibt sie wie folgt: „The „folds“ are idealisations of the various „wisps“, „streamers“, „coils“, „islands“ and other metaphorically titled manifestations of the interspersion of one fluid in another.“

s beschreibt die Streckungsrate, die sich zur Flammendicke δ und den lokalen Geschwindigkeiten des unverbrannten Fluids u_u und des verbrannten Fluids u_b wie folgt verhält:

$$s = C(u_b - u_u)/\delta \quad (4.107)$$

Kohärenz weist in der ESCIMO-Theorie darauf hin, dass der Jet sowie das umgebende Fluid nicht getrennt werden können. Es wird nur ein kleiner Abschnitt der aneinander grenzenden Fluidpakete betrachtet, welcher zur Hälfte aus einer Schicht des Jets und zur anderen Hälfte aus einer Schicht des umgebenden Fluids besteht.

Interdiffusion beschreibt die molekularen Vorgänge der Durchdringung der beiden zusammenhängenden Fluide unter Berücksichtigung chemischer Reaktionen. Diffusion, Wärmeleitung als auch chemische Reaktionen unterliegen den Gesetzmäßigkeiten einer laminaren Strömung.

Moving Observer beschreibt den Lagrangeschen Ansatz. Die Vorgänge sind transient und eindimensional, so dass sie deshalb simultan durch parabolische Differenzialgleichungen leicht gelöst werden können.

Während sich der biographische Teil von ESCIMO mit der Entstehung und dem Zerfall der Fluidpakete beschäftigt, befasst sich der demographische Teil mit der Statistik der Population kohärenter Pakete, d.h. wie viele davon entstehen, wohin sie sich bewegen und welchen äußeren Bedingungen sie ausgesetzt sind. Dadurch ist es möglich, Informationen darüber bereit zu stellen, welche Population an kohärenten Strukturen an irgendeiner Stelle des Gebietes oder auch Zeit wahrscheinlich ist und welchen physikalischen und chemischen Zustand dieser „Fold“ einnimmt. Die Beschreibung der einzelnen Population erfordert eine PDF der Form:

$$\frac{\partial p_k}{\partial t} + \mathbf{u} \text{ grad } p_k = \frac{1}{\rho} [\text{div} (\Gamma \text{ grad } p_k)] + S_k \quad (4.108)$$

p_k bezeichnet die Wahrscheinlichkeit, dass ein Ort im Gebiet der Strömung von einem Fluidpaket der Gruppe k besetzt ist, Γ ist ein turbulenter Austauschkoefizient und S_k die lokale Produktionsrate der Population k . Um die Lösung von Gl.(4.108) zu vereinfachen, schlägt Spalding die Methode der „Limited Migration“ vor [Spa82]. Es wird für Gl.(4.108) nur ein Set an Gleichungen für p_a gelöst, d.h. der Wahrscheinlichkeit Fluidpakete der Altersgruppe a vorzufinden, die unabhängig von ihrem Entstehungsort sind. Die Kopplung von biographischem und demographischem Ansatz ermöglicht die Berechnung der gemittelten Quellterme aus der Verteilung der Population mit

$$\bar{\omega}_k = \int_0^\infty \tilde{\omega}_k(a) p_a da, \quad (4.109)$$

wobei $\tilde{\omega}_k(a)$ den gemittelten Quellterm der Gruppe a darstellt. Im ESCIMO Modell gestaltet sich die genaue Beschreibung der Entstehungs- sowie Zerfallsorte der Fluidpakete als schwierig, aber auch die stoffliche Zusammensetzung der entstandenen neuen Strukturen innerhalb eines Mehrkomponentensystems. Wie auch im IEM Modell werden im ESCIMO-Modell die chemischen Prozesse von der Dynamik der turbulenten Strömung entkoppelt. Ein dem ESCIMO Modell verwandtes Modell ist das „Four Environment Model“ [MT83], welches mehrere Typen (> 2) von Fluidpaketen unterscheidet, die sich räumlich untereinander und ihrer Umgebung austauschen.

4.4.4 Das IEM Modell von Borghi

Homogene Turbulenz. Borghi und Pourbaix [BP81], [Pou82] schlagen die Verwendung des IEM Modells zur Schließung des chemischen Quellterms in den RANS Gleichungen vor. Innerhalb eines homogenen Verbrennungsraums wird vorausgesetzt, dass idealerweise der Mittelwert an jedem Punkt gleich groß sowie zeitlich konstant ist. Die Anwendung des IEM Modells besteht aus dem Ersetzen der rechten Seite entsprechend der substantiellen Ableitung, z.B. für die Spezies:

$$\frac{d Y_k}{d t} \left(= \frac{\partial Y_k}{\partial t} + u_j \frac{\partial Y_k}{\partial x_j} \right) = \dot{\omega}_k + \frac{\tilde{Y}_k - Y_k}{\tau_{iem}} \quad (4.110)$$

Die Austauschzeit τ_{iem} wird proportional zum integralen turbulenten Zeitmaß mit $\tau_{iem} \propto \tau_t$ modelliert. Dieser Ansatz leitet sich auch aus der PDF-Gleichung für den Mischungsterm von Dopazo und O'Brien ab, die eine Gauß-Verteilung für die Schließung der molekularen Mischung annehmen. Im Fall homogener Turbulenz ist die bereits modellierte Gl.(4.110) identisch mit Gl.(4.84), die sich im Fall homogener Turbulenz aus der PDF-Transportgleichung (4.82) ableiten lässt (s. Abs. 4.3.1). Das IEM Modell in Gl.(4.110) stellt eine Verallgemeinerung der gewöhnlichen Eulerschen Modellierung der kleinskaligen Mischung dar, beinhaltet jedoch kein Modell für den konvektiven Term. Wie mit dem IEM Modell die mehrdimensionale PDF in jedem Punkt einer komplexen Strömung approximiert werden kann, soll im Folgenden beschrieben werden. Borghi [Bor88] betrachtet einen einfachen Verbrennungsraum mit zwei separaten Einlässen E_1 und E_2 und nimmt an, dass die Zusammensetzung sowie die Temperatur der eintretenden Ströme nicht fluktuieren. An jeder Stelle im Brennraum besitzt der Zustandsvektor $\mathbf{Y} = Y_1, Y_2, \dots, Y_N$ einen Mittelwert und Fluktuationen. Die Fluktuationen sind maßgeblich, um die mittleren Reaktionsraten zu bestimmen. Die Verwendung eines Mittelwertes, z.B. \tilde{Y}_k aus den Eulerschen Bilanzgleichungen in Kombination mit der Lagrangeschen Gleichung für Y_k liefert die Verbund-PDF der Fluktuationen. Diese werden durch die Anwesenheit verschiedener Fluidpartikel unterschiedlicher Lebenszeiten, welche sich in der Nähe des betrachteten Ortes befinden, hervorgerufen. Der zeitabhängige Wert $Y_k(t)$ eines Partikels kann mit Gl.(4.110) berechnet werden, wobei \tilde{Y}_k und τ_{iem} Eigenschaften des betrachteten Ortes sind. Die Integration von Gl.(4.110) liefert $Y_k(t, (\mathbf{Y})_{E1})$ für Partikel aus E_1 und $Y_k(t, (\mathbf{Y})_{E2})$ für Partikel aus E_2 und wird durch zwei Trajektorien im Y_1 - Y_k Zustandsraum mit $k \neq 1$ wiedergegeben, wobei Y_1 einen inerten Tracer angibt, der sowohl in E_1 als auch E_2 zugeführt wird.

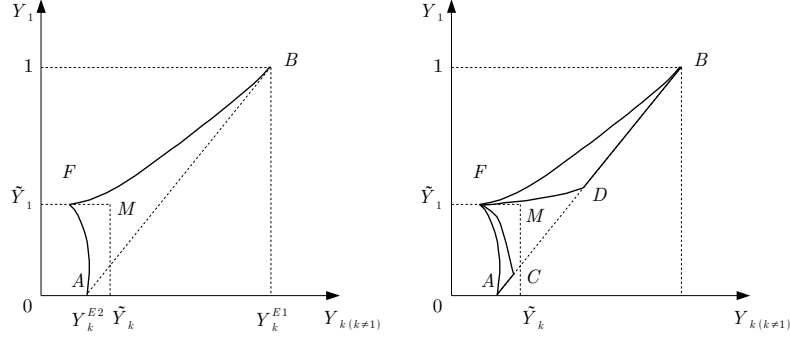


Abbildung 4.3: Trajektorien im Zustandsraum mit Hilfe des IEM Modells, links: homogene Turbulenz, rechts: nicht-homogene Turbulenz

Die Trajektorie AF bildet sich aus $Y_k(t, (\mathbf{Y})_{E2})$ mit $Y_1(t, 0)$, während die Trajektorie BF mit $Y_k(t, (\mathbf{Y})_{E1})$ unter der Bedingung $Y_1(t, 1)$ entsteht. In Abb. 4.3 ist Punkt F erreicht, wenn $t \rightarrow \infty$ oder $dY_k/dt = 0$. In der Umgebung eines betrachteten Ortes werden sich viele Partikel mit unterschiedlichen Lebenszeiten aufhalten, d.h. viele Partikel werden durch einen Punkt auf AF oder BF repräsentiert. Sie liefern eine zweidimensionale PDF von Y_1 und den Schwankungen Y_k nur entlang AFB, die auf den mehrdimensionalen Raum übertragbar ist mit

$$\tilde{p}(\mathbf{Y}) = \tilde{p}_1(Y_1) \prod_{k \neq 1} \delta(Y_k - Y_k^{AFB}(Y_1)) \quad (4.111)$$

Die PDF des inerten Tracers $\tilde{p}_1(Y_1)$ bestimmt mit Gl.(4.111) die PDF $\tilde{p}(\Phi)$. Ein einziger nicht-reagierender Skalar repräsentiert damit das Verhalten mehrerer reagierender Skalare. In Verbindung mit einem Eulerschen Verfahren schlägt Borghi vor: Es werden die Eulerschen Gleichungen für $\tilde{Y}_k \forall k \neq 1$ und \tilde{Y}_1 gelöst. Die Form der PDF des Tracers kann über eine angenommene PDF aus \tilde{Y}_1 sowie durch eine zusätzliche Bilanzgleichung für $\overline{Y_1''^2}$ gewonnen werden (s. Abs. 4.2). In jeder Rechenzelle wird Gl.(4.110) mit den Anfangsbedingungen $(\mathbf{Y})_{E1}$ und $(\mathbf{Y})_{E2}$ gelöst und $Y_k^{AFB}(Y_1), \forall k \neq 1$ bestimmt. Daraus folgt

$$\bar{\omega}_k = \int_0^1 \dot{\omega}_k(Y_k^{AFB}(Y_1)) \tilde{p}_1(Y_1) dY_1 \quad (4.112)$$

Für diese Vorgehensweise muss keine statistische Unabhängigkeit von Y_k und Y_1 angenommen werden. Alle zufälligen Variablen sind stark aneinander gekoppelt, da $Y_k = Y_k^{AFB}(Y_1)$ immer erfüllt ist. Ein ähnlicher Ansatz findet sich auch beim Flamelet-Modell für Diffusionsflammen wieder, bei dem die Spezies in Abhängigkeit von z und der skalaren Dissipationsrate χ_{st} mit $Y_k(z, \chi_{st})$ bestimmt werden. Beim Flamelet Ansatz wird diese Beziehung mit der internen Struktur des Flamelets begründet, die nicht von äußeren Wirbeln durchdrungen wird, während beim IEM Ansatz $Y_k^{AFB}(Y_1)$ explizit vom turbulenten Austausch mit der Umgebung abhängt. Die Lagrangesche Gleichung zu integrieren ist mathematisch einfacher, als eine mehrdimensionale PDF zu lösen und ist ein Vorteil der beschriebenen Methode.

Nicht-homogene Turbulenz. Eine Erweiterung der soeben vorgestellten Methode stellt das PEUL Modell dar, welches zunächst von Borghi als „Programme Eulerien-Lagrangien“ bezeichnet wird. Für eine nicht-homogene Strömung ist eine Äquivalenz zwischen PDF-Transportgleichung und der vorgestellten Partikelmethode wie in Abs. 4.3.1 anhand von Gl. (4.85) gezeigt, nicht mehr gültig und es ist schwieriger die Form der mehrdimensionalen PDF

zu konstruieren. Das IEM Modell in homogener Turbulenz setzt voraus, dass jedes Partikel den Großteil seiner Lebenszeit in der Umgebung eines Punktes P verbringt, der sich aber nicht notwendigerweise in der Nähe eines Eintrittsortes E_1 oder E_2 des Partikels befindet. Die korrekte Anwendung des IEM Modells würde dann die Integration von Gl.(4.110) entlang des tatsächlichen Weges im physikalischen Raum und damit auch eine Änderung von \tilde{Y}_k sowie τ_{iem} erfordern, die nun nicht mehr konstant sind. Um nicht die physikalischen Bahnlinien der Partikel berechnen zu müssen, wird zunächst ein Ansatz gewählt, der das IEM Modell lokal anwendet. Damit wird es möglich auch Partikel zu betrachten, die sich zwar in der Nähe von P befinden, aber nicht unmittelbar von E_1 oder E_2 kommen, trotzdem aber andere Startpunkte zulassen. Weitere Trajektorien werden hinzugefügt, die von ihren neuen Startpunkten im Zustandsraum initialisiert werden. Dies wird in Abb. 4.3 durch die Punkte C und D mit den Trajektorien ACF und BDF verdeutlicht. Es werden n -Paare neuer Trajektorien definiert, die n -Gewichte in der Form definieren, dass sich n -lineare Gleichungen mit n unbekanntem α_n ergeben:

$$\tilde{Y}_k = \sum_{j=1}^n \alpha_j \int_0^{Y_1} Y_k^j(\tilde{\mathbf{Y}}, Y_1) \tilde{p}_1(Y_1) dY_1 \quad (4.113)$$

Die gewählten neuen Startpunkte müssen sich auf den Rändern des erlaubten Gebietes für $\tilde{p}(\mathbf{Y})$ befinden und so gewählt sein, dass sie das Gebiet regelmäßig überziehen, was einen zusätzlichen Freiheitsgrad im Modell darstellt. Diese Vorgehensweise ist sowohl auf turbulente Vormischverbrennung als auch auf Diffusionsflammen anwendbar und wurde von E. Pourbaix [Pou82], [Pou83] ausgehend vom homogenen Fall sowie Borghi [BP83/2] entwickelt. Schwierig gestaltet sich die Approximation der mehrdimensionalen PDF, die sich in der Bestimmung der Gewichtsfaktoren α_j äußert [BP83/1]. Eine andere Erweiterung für nicht-homogene Turbulenz erfährt das IEM Modell im MIL Modell (Modele Intermittent Lagrangien) von Gonzales und Borghi [GB80]. Anstelle einer mittleren Austauschzeit wird eine zufällige Änderung der turbulenten Austauschzeit τ_{iem} eingeführt. Um den Effekt der Zufälligkeit zu verstärken sowie Rechenzeiten zu optimieren, wird die Verbrennung als sehr schnell angenommen. Neben einer Mischungslinie in einem Phasendiagramm, welches mit dem Massenanteil des Tracers Y_1 und dem Massenanteil des Brennstoffs Y_F aufgespannt wird, können sich Partikel auch auf Linien, die chemisches Gleichgewicht repräsentieren, dem finalen Punkt F nähern. Die schnelle Chemie bewirkt einen Sprung von einer reinen Mischungslinie auf die Gleichgewichtslinie. Im Fall inhomogener Turbulenz befinden sich die tatsächlichen Orte des Partikels im Phasendiagramm als Punktelwolke um diese Linien herum. Der Punktehaufen um die Mischungslinie ist dabei von geringer Bedeutung, da hier die Reaktionsrate sehr niedrig ist. Ziel ist die Ermittlung der Wahrscheinlichkeit, Partikel auf der Gleichgewichtslinie anzutreffen, die von der Wahrscheinlichkeit von Sprüngen von der Mischungslinie auf die Gleichgewichtslinie abhängt. Ein Sprung kann physikalisch als Zündung interpretiert werden und entspricht den unbekanntem Gewichten α :

$$\alpha = \int_{\tau_{ign}(Y_1)}^{\infty} p_{\tau}(\tau_{iem}) d\tau_{iem} \quad (4.114)$$

p_{τ} ist eine Verteilung von τ_{iem} . Ein Partikel mit einer Austauschfrequenz $1/\tau_{iem}$, die im Vergleich zur reziproken Zündzeit $1/\tau_{ign}$ sehr hoch ist, kann nicht gezündet werden. Die mittlere Reaktionsrate des Brennstoffs berechnet sich dann aus

$$\bar{\omega}_F = \int_0^1 \tilde{p}_1(Y_1) \int_{\tau_{ign}(Y_1)}^{\infty} \omega_F(\tau_{iem}) p_{\tau}(\tau_{iem}) d\tau_{iem} dY_1 \quad (4.115)$$

mit $\bar{\omega}_F = -\tilde{Y}_F/\tau_{iem}$ und ist durch die Mischung limitiert. Aufgrund schneller Chemie wird bei diesem Ansatz die Bildung von Zwischenprodukten verhindert. Auch das MIL-Modell benötigt Kenntnis über die PDF des Tracers. Die Verteilung $p_\tau(\tau_{iem})$ wird auf theoretischer sowie experimenteller Seite als eine Funktion von τ_t und τ_η angenommen, die einer logarithmischen Normalverteilung entspricht. $\tau_{ign}(Y_1)$ ist eine reine chemische Größe, und aus experimentellen Daten sowie Reaktionsmechanismen zu gewinnen.

4.4.5 Das PEUL Modell von Gilbank

Eine Erweiterung der Methode von Borghi und Pourpaix stellt der Ansatz von P. Gilbank dar [Gil89]. Im Gegensatz zu Borghi und Pourbaix, die die Integration von Gl.(4.110) entlang des tatsächlichen Weges im physikalischen Raum vermeiden, wird jetzt die Trajektorie infolge der Bewegung der Partikel eingeführt. Das wesentliche Merkmal dieses Ansatzes ist die Simulation der Effekte der turbulenten Bewegung der Partikel, wie sie auch in der Berechnung flüssiger Partikel in Zweiphasenströmungen Anwendung findet [Bor96]. Stochastische Modelle sind nötig, um die momentanen Partikelgeschwindigkeiten während der Bewegung durch das mittlere Strömungsfeld zu bestimmen. In diesem Ansatz wird ein Partikel in Form eines Fluidpartikels transportiert. Deren Trajektorien liefern dann Informationen über die Form der mehrdimensionalen PDF. Das neue Modell behält mit PEUL zwar seinen Namen, wird aber von nun an mit „Probabiliste-Eulerien-Lagrangien“ bezeichnet. Da Gl.(4.110) keine Informationen bezüglich der Geschwindigkeit der Partikel liefert, müssen Ausdrücke für den konvektiven Transport von Y_k^p bereit gestellt werden. Die Kräfte des Eulerschen Gasfeldes wirken direkt am Partikel oder Fluidballen, aus dem die zeitabhängige Geschwindigkeit des Partikels bestimmt wird. Sie muss mit Hilfe der gemittelten Eulerschen Größen \tilde{u}_i , k sowie ε berechnet werden. Die Bahnlinien der Partikel werden entsprechend der Lagrangeschen Gleichung

$$\frac{dx_i^p(t)}{dt} = u_i^p(x_i^p(t), t) \quad (4.116)$$

ermittelt, was die Bestimmung der neuen Position eines Partikels innerhalb eines Zeitschrittes ermöglicht. Die Geschwindigkeit u_i^p setzt sich zusammen aus der mittleren Geschwindigkeit des Eulerschen Gasfeldes am Partikelort und ihrem fluktuierenden Anteil:

$$u_i^p = \tilde{u}_i + u_i'' \quad (4.117)$$

In Gl.(4.117) muss u_i'' über eine statistische Verteilung modelliert werden, die sich in Abhängigkeit des Ortes und der Zeit ändert. Die Verteilung ist nicht bekannt und muss angenommen werden. Gilbank wählt einen Ansatz von Ormancey und Martinon [Orm84], [OM84] mit abgeschnittener Gaußverteilung als zugrunde gelegte Verteilungsfunktion, die im gesamten Gebiet gilt. Die Komponenten von u_i'' sind normal zentrierte zufällige Variablen mit $\overline{u_i''} = 0$. Die zeitliche Änderung der Fluktuationen wird entsprechend einer Wirbellebenszeit des Gases mit τ_e festgelegt. Im Modell wird τ_e , einem Poisson-Prozess¹⁹ folgend [Orm84], mit der gemittelten Wirbeländerungsrate $1/\tau_{La}$ bestimmt. Hier ist τ_{La} ein Lagrangesches integrales Zeitmaß. Die Wahrscheinlichkeit, dass es zu N Wirbeländerungen im Zeitintervall Δt kommt, erfolgt mittels einer Poisson²⁰ Verteilung. Soll dieser Prozess korrekt

19 Der Poisson-Prozess ist ein Erneuerungsprozess dessen Zuwächse unabhängig und poissonverteilt mit Parameter λ sind. λ wird auch als Intensität des Prozesses bezeichnet, da pro Zeiteinheit genau λ Sprünge erwartet (Erwartungswert der Poissonverteilung ist ebenfalls λ) werden.

20 Diskrete Wahrscheinlichkeitsverteilung, die beim mehrmaligen Durchführen eines Bernoulli-Experiments entsteht. Dieses ist ein Zufallsexperiment, das nur zwei mögliche Ergebnisse besitzt (z.B. „Erfolg“ und „Misserfolg“).

formuliert werden muss $\Delta t \ll \tau_{La}$ gelten. Eine neue Fluktuationsgeschwindigkeit wird bestimmt, wenn $\alpha < \Delta t / \tau_{La}$. Dabei ist α eine gleichverteilte Zufallszahl im Intervall $\alpha[0,1]$. Nach Saffman [Saf61] gilt für das Lagrangesche Zeitmaß

$$\tau_{La} = 0.4 \frac{L_e}{\sqrt{u_i'^2}} \quad \text{mit} \quad L_e = 0.8 \frac{k^2}{\varepsilon}, \quad (4.118)$$

wobei L_e ein Eulersches Wirbellängenmaß darstellt. Die Bestimmung der Bahnlinien ist die logische Fortführung der Gedanken aus den Modellen von Borghi und Pourbaix mit verstärktem physikalischen Hintergrund, es muss aber weiterhin auf wesentliche Größen aus der Eulerschen Lösung zurückgegriffen werden. Das gewählte Modell für u_i'' ist ein Random-Walk Modell [MB92], das implizit keine Kontinuität gewährleistet. Die Folge ist, dass einzelne Gebiete von den Bahnlinien der Partikel unterschiedlich stark erfasst werden. Es tritt das Phänomen der Turbophorese auf (s. Abs. 5.3.4). Zudem kommen in Rezirkulationsgebieten sehr wenige Partikel vor, die der Flammenstabilisierung dienen und somit besonders von Interesse sind. Gilbank löst dies, indem sie zusätzliche Startorte von Partikeln in diesen Gebieten wählt. Die mittleren Eulerschen Variablen dienen den Partikeln als Startwert. Für die Modellierung der molekularen Mischung wird das IEM Modell verwendet. Die Gleichungen können an jedem Punkt der Bahnlinie ausgewertet werden und liefern zeitabhängige Werte für Y_k^p , T sowie die Produktionsraten $\dot{\omega}_k^p$, aus der anschließend die zeitlich gemittelten Reaktionsraten des Partikel-Ensembles an jedem Punkt der Strömung resultieren. Für die Spezieskonzentrationen folgt

$$\frac{dY_k^p}{dt} = W_k \sum_{r=1}^R (a_{kr} - b_{kr}) \dot{\omega}_r^p(Y_1^p, \dots, Y_N^p, T^p) + \frac{\tilde{Y}_k - Y_k^p}{\tau_{iem}} \quad (4.119)$$

sowie für die Temperatur

$$\frac{dT^p}{dt} = \frac{1}{c_p} \left(\sum_{r=1}^R q_r \dot{\omega}_r^p(Y_1^p, \dots, Y_N^p, T^p) \right) + \frac{\tilde{T} - T^p}{\tau_{iem}} \quad (4.120)$$

Da die zeitabhängigen Quellterme bekannt sind, können die mittleren Produktionsraten $\bar{\omega}_k$ der Spezies für die Verwendung in den Eulerschen Gleichungen errechnet werden:

$$\bar{\omega}_k \equiv \langle \dot{\omega}_k \rangle_{La} = \frac{1}{P} \sum_{p=1}^P \left[\frac{\left(\sum_{m=1}^{M(p)} \dot{\omega}_k^{(p,m)} \Delta t^{(p,m)} \right)}{\left(\sum_{m=1}^{M(p)} \Delta t^{(p,m)} \right)} \right] \quad (4.121)$$

P ist die Anzahl von Partikeln, die die Zelle passiert haben. $M(p)$ repräsentiert die Anzahl der Zeitschritte, die sich ein Partikel p während seiner „Reise“ in dem Gebiet befindet, das die Abmessungen einer Rechenzelle innerhalb eines finiten Volumenverfahrens markiert. Somit repräsentiert der Index (p,m) den Wert der betrachteten Größe in Bezug auf das p -te Partikel innerhalb seines m -ten Zeitschrittes. Gl.(4.121) bezeichnet den zeitlichen Mittelwert von $\dot{\omega}_k$, der durch ein Partikel-Ensemble bestimmt wird. Gleiches gilt für $\dot{\omega}_h$. Für den Quellterm der Spezies bleibt

$$\sum_p \sum_k \dot{\omega}_k^p = \sum_k \bar{\omega}_k = 0 \quad (4.122)$$

erfüllt. Im PEUL Modell werden die mittleren Quellterme in die Eulerschen Transportgleichungen eingebunden. Da in die Eulerschen Gleichungen ein volumenbezogener Quellterm eingekoppelt wird, muss die mittlere Dichte $\bar{\rho}$ zur Umrechnung benutzt werden

$$\rho_k^p = Y_k^p \bar{\rho}, \quad (4.123)$$

so dass Konservativität gewährleistet ist. Die Partikel in den Zellen symbolisieren die groben Strukturen. Sie sind frei von numerischer Diffusion. Der turbulente konvektive Transport wird erfasst. Aufgrund der Lösung der Lagrangeschen Gleichungen der Partikel entlang ihrer physikalischen Bahnlinien wird im Gegensatz zu Abs. 4.4.4. die Approximation einer mehrdimensionalen PDF vermieden. Eine PDF bildet sich aufgrund des Partikel-Ensembles und wird durch die Berechnung der Bahnlinien transportiert. Die turbulente Austauschzeit τ_{iem} ist zwar an jedem Ort verschieden, bleibt aber eine mittlere Größe für alle Partikel:

$$\tau_{iem} = C_{iem} \tau_t = C_{iem} \frac{k}{\varepsilon} \quad (4.124)$$

C_{iem} ist eine Modellkonstante entsprechend b in Abs. 4.4.2, die angepasst werden muss. Alle Partikel einer Zelle besitzen damit die gleiche turbulente Austauschzeit, obwohl auch diese Größe ein breites Spektrum repräsentiert und fluktuiert. Zudem setzt die Verwendung eines einheitlichen τ_{iem} in Gl.(4.119), gleiche Diffusionskoeffizienten der Spezies sowie in Gl.(4.120) gleiche Prandtl- und Schmidt-Zahlen (\rightarrow Lewis-Zahl gleich Eins) voraus. Gilbank wendet dieses Verfahren auf eine im Mittel statistisch stationäre Strömung an. Eine konvergierte Lösung der Eulerschen Bilanzgleichungen für alle \tilde{Y}_k und \tilde{T} dient als Startlösung. Die mittlere Zusammensetzung der Spezies sowie die mittlere Wärmefreisetzung müssen zunächst mit einem einfachen Verbrennungsmodell, Gilbank wählt das EBU Modell, berechnet werden. Sie dienen dem IEM Modell als Eingangsgrößen. Eine ausreichend große Anzahl von Partikeln wird sequentiell vom Eintritt bis zum Austritt durch das Rechengebiet verfolgt, und die nach Gl.(4.121) errechneten mittleren Quellterme in die Euler-Gleichungen eingebunden. Das Strömungsfeld wird nun mit den Lagrangeschen Quelltermen neu berechnet. Dies wiederholt sich so lange, bis Konvergenz erreicht ist. Die Lösung hängt sehr stark von der Qualität der Startlösung mit dem EBU Modell sowie der Anzahl der verfolgten Partikel ab. Dieses Vorgehen ist in Abb. 4.4 dargestellt.

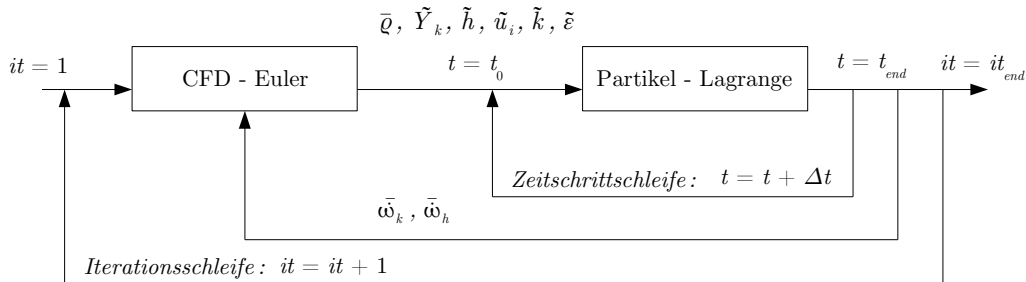


Abbildung 4.4: Vorgehensweise bei stationärer Kopplung von Strömungslöser und Partikelmodell

Es sollte gewährleistet sein, dass jede Zelle des Gebietes von Partikeln durchquert wird. Ist dies nicht der Fall, ergeben sich zwar keine numerischen Schwierigkeiten in der Kopplung mit dem Eulerschen Verfahren, die berechnete Reaktionsraten können jedoch statistisch gesehen zu schlecht abgesichert sein. Das kann zum lokalen Verlöschen der Flamme aufgrund zu geringer Partikelanzahl in einer Rechenzelle führen. Jedes Partikel wird individuell verfolgt und dabei nicht von seinen benachbarten Partikeln beeinflusst. Die Größe it bezeichnet den Iterationsschritt für die Kopplung beider Verfahren. Die Berechnung der Partikelbahnlinien erlaubt nun die lokale Anwendung des IEM Modells und ist ohne Restriktionen sowohl auf Vormischflammen als auch auf Diffusionsflammen anwendbar. Die Partikel erfordern einen rechnerischen Mehraufwand im Vergleich zu rein Eulerschen Ansätzen (s. Abs. 4.2). Dies kann durch den stärkeren physikalischen Aspekt der Lagrangeschen Berechnung chemischer Reaktionen in einer turbulenten Strömung, wie er zu Beginn der Arbeit in Abs. 1.3 erläutert

wurde, gerechtfertigt werden. Im Gegensatz zur Methode von Borghi [Bor88] , [GB80] muss keine PDF mehr angenommen werden. Das Modell von Gilbank findet Anwendung in einer zweidimensionalen Kanalströmung für eine vorgemischte Luft-Methan Verbrennung innerhalb zweier unterschiedlicher Konfigurationen [Gil89]. Eine weitere Anwendungen ist in der Literatur bei [Var99] zu finden.

4.4.6 Das PEUL+ Modell von Cailleau

Seine Fortsetzung findet die Entwicklung des PEUL Modells im PEUL+ Modell von P. Cailleau [Cai94], in dem Erweiterungen eingeführt werden. Dazu zählen der Ausbau des Dispersionsmodells auf den 3-D Fall, die Berücksichtigung momentaner turbulenter Austauschzeiten τ_{iem} für den Mischungsterm im Gegensatz zu einer einzigen mittleren Austauschrate sowie die Einführung des Prozesses der sukzessiven Iteration. Im Kern bleibt das Modell von Gilbank unverändert. Deshalb soll im Folgenden nur noch der Begriff PEUL+ verwendet werden. Für das Dispersionsmodell kommt wie bei Gilbank das Modell von Ormancey und Martinon zur Anwendung und soll hier nicht weiter betrachtet werden. Die turbulente Austauschzeit τ einer skalaren Größe Φ kann in Relation zu den Fluktuationen $\overline{\Phi'^2}$ und deren Dissipation formuliert werden:

$$\tau = \overline{\Phi'^2}/\varepsilon \quad \text{mit} \quad \varepsilon = D \left(\overline{\text{grad } \Phi'' \cdot \text{grad } \Phi''} \right) \quad (4.125)$$

Ein klassischer Ansatz besteht darin, τ mit dem integralen Zeitmaß $\tau_t = k/\varepsilon$ über $\tau = C \tau_t$ in Relation zu setzen (s. Gl.(4.124)). Die Konstante C ist nach Messungen von [WL78] und [LL73] im gesamten Gebiet gleich, ändert sich jedoch mit den spezifizierten Anfangsbedingungen. [BDL78] fanden dagegen heraus, dass sich C progressiv in den Zonen erhöht, wo die Produktion von k stark ist und demnach kein konstanter Wert für C angegeben werden kann. Der Wert von C wird in der Literatur in einer Spanne zwischen 0.2 und 3.33 angegeben. In der Arbeit von Gilbank ist $C = C_{iem}$ mit $C_{iem} = 0.2$ resultierend aus experimentellen Untersuchungen definiert. Im PEUL+ Modell setzt sich jetzt die charakteristische Zeit τ aus einem Spektrum verschiedener Zeitmaße zusammen. Für jeden neuen Zeitschritt Δt ermittelt man für jedes Partikel eine zufällige charakteristische Zeit, die sich im Bereich der kleinsten Zeitskalen $\tau_n = (\nu/\varepsilon)^{1/2}$ und dem äußeren Rand des Spektrums mit $\tau_{max} = l_{max}/u_{char}$ entsprechend den geometrischen Abmessungen und einer charakteristischen Geschwindigkeit bewegt. Im IEM-Modell ist damit die Austauschrate τ_{iem} nicht länger eine gemittelte Größe sondern ähnlich dem Ansatz im Dispersionsmodell für die Geschwindigkeit in Gl.(4.117) eine momentane Größe, die im zeitlichen Mittel τ_{iem} repräsentiert.

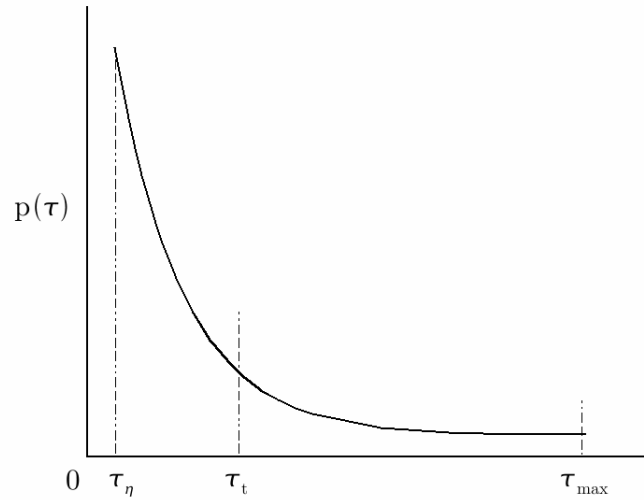


Abbildung 4.5: PDF für die charakteristische Austauschzeit

Die Verteilungsfunktion von τ entspricht einer exponentiellen Abnahme nach einem empirischen Ansatz von Bray [BML84/2]. Der Mittelwert wird mit $\tau_t = k/\varepsilon$ angegeben. Aus einem Ensemble gleichverteilter Zufallszahlen $\alpha[0,1]$ wird ein Wert gewürfelt. Mit Hilfe von α wird die zufällige charakteristische Zeit τ ermittelt, welche die geforderte Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion erfüllt:

$$p(\tau) = \frac{1}{\tau_t - \tau_\eta} e^{-\frac{\tau - \tau_\eta}{\tau_t - \tau_\eta}} \quad \text{und} \quad p(\tau) = 0, \forall \tau < \tau_\eta \quad (4.126)$$

Dabei ist:

$$\bar{\tau} = \int_{\tau_\eta}^{\infty} \tau p(\tau) d\tau = \tau_t \quad \text{und} \quad \int_{\tau_\eta}^{\infty} p(\tau) d\tau = 1 \quad (4.127)$$

Die turbulente Austauschrate wird aus $\tau_{iem} = C_{iem} \tau$ ermittelt. Die Annahme einer exponentiellen Funktion ist sinnvoll, da ein großer Wirbel in viele kleine Wirbel zerfällt. Numerische Untersuchungen von [Cai94] zeigen, dass mit zunehmendem zeitlichen Verlauf, der Einfluss der verschiedenen Zeitskalen verschwindet und man erneut eine Delta-PDF zentriert um den Mittelwert erhält. Während auf die Partikel beliebig viele Spezies angewendet werden können, berücksichtigt ein einfaches Verbrennungsmodell wie das EBU Modell nur eine begrenzte Anzahl an Reaktionen und Spezies. Es entsteht eine Diskrepanz zwischen den Spezies der Eulerschen und der Lagrangeschen Lösung. Der Austausch der Partikel über den Mittelwert stellt dann für die in den Eulerschen Gleichungen nicht transportierten Spezies ein Problem dar. Dies wird in [Cai94] gelöst, indem nach der ersten Euler-Lagrange-Iteration, die Mittelwerte aus der Lagrangeschen Lösung berechnet werden. Die Partikel werden innerhalb einer Euler-Lagrange Iteration ein zweites Mal verfolgt, wobei jetzt die Lagrangeschen Mittelwerte zur Verfügung stehen. Deren Berechnung erfolgt analog zu Gl.(4.121):

$$\tilde{Y}_k \equiv \langle Y_k \rangle_{La} = \frac{1}{P} \sum_{p=1}^P \left[\left(\sum_{m=1}^{M(p)} Y_k^{(p,m)} \Delta t^{(p,m)} \right) / \left(\sum_{m=1}^{M(p)} \Delta t^{(p,m)} \right) \right] \quad (4.128)$$

In diesem Fall müssen die Anforderungen an ein Mischungsmodell, wie in Abs. 4.3.4 beschrieben, erfüllt werden. Dazu zählt auch, dass die τ_{iem} für alle Partikel gleich groß sein muss²¹. Der Mittelwert in Gl.(4.128) wird nun auf Partikelebene gebildet. Diese Vorgehensweise ist für die Bestimmung von NO_x Bildungsraten geeignet, da deren Berechnung keine Rückwirkung auf die Strömung ausübt und somit gut im Postprocess berechnet werden kann. Varin [Var99] wendet das Modell auf die Berechnung von Ruß in einer Brennkammer an. Alternativ ist das PaSR Modell zur Generierung einer Startlösung geeignet. Die beschriebene Methode ist dann nicht notwendig, da alle Speziestransportgleichungen berücksichtigt werden. Cailleau bringt die PEUL+ Methode mit der Lösung der PDF-Transportgleichung in Verbindung. Während Gilbank die Partikel als fluide Partikel bezeichnet, werden sie im PEUL+ Modell als stochastische Partikel charakterisiert. Damit wird dem Modell ein PDF Ansatz zugewiesen, der mit einem Partikelverfahren gelöst wird. Das PEUL+ Modell führt durch die Einbeziehung der Partikelbewegung zu einer thermochemischen PDF. Es löst nicht die PDF-Transportgleichung aus Gl.(4.76) und ist damit ein praktikables Rechenverfahren für die fluktuierenden Anteile zur Bestimmung der gemittelten Reaktionsraten. Der Mittelwert im Mischungsmodell bindet den zeitabhängigen Wert der Partikel an die Eulersche Lösung und gewährleistet Konsistenz beider Verfahren.

4.4.7 Potential und Einschränkungen des PEUL+ Modells

Das PEUL+ Modell stellt Informationen über fluktuierende Größen auf relativ einfachem und realisierbarem Weg zur Verfügung. Durch die Verknüpfung mit den Mittelwerten über das IEM Modell sowie die Verwendung der mittleren Dichte $\bar{\rho}$ ist Konsistenz zwischen beiden Verfahren gewährleistet. Der für ein Partikelmodell vergleichsweise geringe Aufwand macht es für reale Anwendungsfälle interessant. Diffusionsvorgänge gegen den Gradienten, wie sie in turbulenten Strömungen auftreten, können mit dem Modell über die Bewegung der Partikel erfasst werden. Im PEUL+ Modell ist die Mischung auf den kleinen Skalen nur mit dem Mittelwert der Eulerphase möglich. Mischungsmodelle auf Partikelebene sind nur für Berechnungen im Post-Prozess anwendbar [Cai94]. Die Verwendung eines Mittelwertes im Mischungsmodell führt dazu, dass die Partikeleigenschaften vom Mittelwert beeinflusst werden und der individuelle Charakter der Partikel stark von der Eulerschen Lösung geprägt wird. Wie noch gezeigt wird, ist die Modellierung der Mischung wesentlich von einer Konstanten im IEM Modell abhängig. Deren Bestimmung ist nur aus Messungen möglich und stellt einen Nachteil des PEUL+ Verfahrens dar. Die in der Literatur veröffentlichten Einsatzgebiete des PEUL+ Modells wenden es auf eine im Mittel stationäre Strömung an. Partikel können nicht miteinander interagieren, was durch die sequentielle Abarbeitung jeder einzelnen Partikeltrajektorie über die gesamte Lebensdauer vom Eintritt in bis zu ihrem Austritt aus dem Rechengbiet festgelegt ist. Partikelwechselwirkungen können für die Bewegung der Partikel, z.B. in Form eines Kollisionsmodells von Interesse sein. Eine instationäre Kopplung zwischen der Fluidodynamik auf der einen und der Verbrennung auf der anderen Seite kann physikalischen Vorgänge wie Verlöschung oder Zündung besser widerspiegeln, erhöhen aber den rechnerischen Aufwand. Da Lagrangesche Gleichungen immer instationär formuliert sind, bietet sich auch eine instationäre Kopplung an. Diese Vorgehensweise wurde von Cailleau [Cai94] schon vorgeschlagen, jedoch nicht in seiner Arbeit realisiert. Die Partikel sind selbst nicht durch eine eigene Dichte charakterisiert. Ihre Berechnung erfordert die Lösung einer Kontinuitätsgleichung auf Partikelebene, was

²¹ Wird diese Bedingung nicht gewährleistet, so wird der Mittelwert nicht erhalten. In der Arbeit von Cailleau [Cai94] wird darauf nicht hingewiesen.

zusätzliche Konsistenzprobleme hervorruft und schwer zu realisieren ist. Um das zu vermeiden, werden im PEUL+ Modell die Partikel mit der Dichte aus Eulerschen Gleichungen verknüpft.

5 Das PEUL+ Modell bei instationärer Kopplung

Physikalische Vorgänge haben von Natur aus instationären Charakter, was ganz besonders auf turbulente Strömungen zutrifft. Eine instationäre Rechnung bedingt durch die zusätzliche zeitliche Diskretisierung nicht nur im Fall der Betrachtung diskreter Partikel einen deutlichen Mehraufwand. Sollen jedoch die physikalischen Vorgänge erfasst werden, ist eine zeitliche Auflösung notwendig und sinnvoll. Die Large Eddy Simulation, die eine instationäre Formulierung der Bilanzgleichungen voraussetzt, orientiert sich bereits in diese Richtung [Weg06].

5.1 Besonderheiten der instationären Kopplung

In dieser Arbeit wird das PEUL+ Modell auf eine instationäre Kopplung mit dem Eulerschen Strömungslöser erweitert und in einem Computerprogramm umgesetzt. Für die instationäre Kopplung ergibt sich, dass Interaktionen zwischen Partikeln, die sich innerhalb eines Zeitschritts am gleichen Ort befinden, ermöglicht werden. Innerhalb eines Euler-Zeitschrittes werden auch die Lagrangeschen Gleichungen den selben Zeitschritt lang gelöst und anschließend die mittleren Quellterme in die Euler-Gleichungen eingebunden. Das setzt voraus, mit jedem Zeitschritt neue Partikel in das Rechengebiet einzusetzen, so dass zu jedem Zeitpunkt an jedem Ort eine ausreichende Anzahl Partikel zur Berechnung der mittleren Größen zur Verfügung stehen. Dazu wird ein Kanal mit $k=1,\dots,K$ Zellen in Strömungsrichtung in Abb. 5.1 betrachtet.

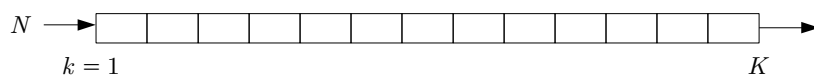


Abbildung 5.1: 1-D Rechengitter

Am Eintritt werden N Partikel gestartet, die bei der stationären Kopplung innerhalb eines Euler-Lagrange-Schrittes vom Eintritt bis zum Austritt entsprechend ihrer Lebenszeit verfolgt werden. Jede Zelle k wird dann von allen gestarteten Partikeln N durchquert werden. Im instationären Fall müssen, um ebenfalls N Partikel pro Zeitschritt in jeder Zelle zu gewährleisten, $N \cdot K$ Partikel gestartet werden. Dabei wird vorausgesetzt, dass sich in jedem neuen Zeitschritt das Partikel in der $k+1$ -ten Zelle befindet. Es werden dann um das K -fache mehr Partikel benötigt (s. Abb.5.1) [Cai94]. Innerhalb eines τ_{La} darf das Partikel nur über eine Zellengrenze hinweg verfolgt werden, um die Auflösung des zugrunde liegenden Rechnetzes vollständig zu erfassen. Bei der Verfolgung der Partikel kann sich deshalb der globale Zeitschritt Δt aus dem Euler-Verfahren vom lokalen Zeitschritt des Partikelverfahrens Δt^p unterscheiden. Es muss jedoch immer

$$\Delta t = \sum_{i=1}^N \Delta t_i^p \quad (5.1)$$

gelten, wobei N die Anzahl der Lagrangeschen Zeitschritte innerhalb eines Eulerschen Zeitschritts angibt. Daraus ist zu schlussfolgern, dass eine Verfeinerung des Rechnernetzes bei instationärer Kopplung zur Erhöhung der Partikelanzahl pro Zeitschritt führen müsste. Eine stärkere räumliche Auflösung bedeutet jedoch für die hier zugrunde gelegte Ensemble Mittelung, die nicht vom Zeitintervall abhängig ist, eine Minimierung der notwendigen Partikelanzahl, da das Gebiet bereits durch das Eulersche Netz aufgelöst wird. Es werden also nicht mehr Partikel benötigt. In Abb. 5.2 ist die Vorgehensweise der instationären Kopplung dargestellt.

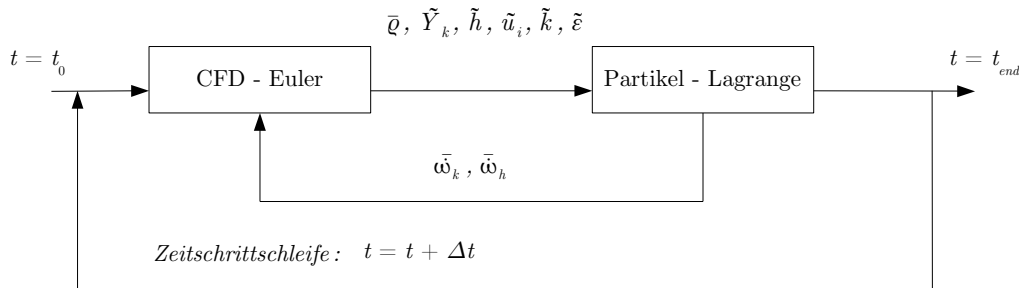


Abbildung 5.2: Vorgehensweise bei instationärer Kopplung von Strömungslöser und Partikelmodell

Die instationäre Kopplung ist aufwendiger, da sehr viele Partikel benötigt werden. Sie ermöglicht aber die Berechnung transienter Strömungen. Der Startwert für die Gesamtpartikelanzahl muss abgeschätzt werden (s. Abs. 5.3.1). Der Mittelwert des Partikelensembles für die Quellterme zu einem festen Zeitpunkt in einer Zelle ist dann durch die zeitabhängigen Werte jedes Partikels zum gleichen Zeitpunkt am gleichen Ort mit

$$\bar{\omega}_k \simeq \langle \omega_k \rangle_{La} = \frac{1}{P} \sum_{p=1}^P \omega_k^p \quad \text{sowie} \quad \bar{\omega}_h \simeq \langle \omega_h \rangle_{La} = \frac{1}{P} \sum_{p=1}^P \omega_h^p \quad (5.2)$$

berechenbar und entspricht einer Ensemble Mittelung (s. Abs. 3.4.3). Pope [Pop85] zeigt, dass auch dieser Mittelwert eine Favre gemittelte Größe darstellt, wenn alle Partikel eine identische Masse m^p besitzen. Die mittlere Dichte $\bar{\rho}$ soll dann direkt proportional zur Anzahl der Partikel der Zelle sein. Um diese Bedingung zu erfüllen, werden die Partikel in den Einlässen entsprechend ihrer jeweiligen Massenströme eingesetzt, was in Abs. 5.3.1 beschrieben wird. Im PEUL+ Modell wird die räumliche Auflösung nach wie vor durch das Eulersche Rechengitter bestimmt. Befinden sich keine Partikel in einer Zelle, muss die Berechnung des mittleren chemischen Quellterms aus den mittleren Strömungsgrößen erfolgen, da hier die turbulenten Schwankungen sehr gering sind. Der Zeitschritt für die Berechnung wird in allen Anwendungsfällen in Kapitel 6 mit 1.e-06 Sekunden gewählt. Ein kleiner Zeitschritt ist gewählt, da die Spezies Referenztechnik als semi-implizites Verfahren (s. Abs. 5.4.3) einen kleinen Zeitschritt erfordert. Die Stabilität des Verfahrens ist auch bei großen Zeitschritten gewährleistet, kann jedoch zu einem Verlust in der Rechengenauigkeit führen.

5.2 Das Partikelmodell

Partikelmodelle werden mit Lagrangeschen Gleichungen formuliert. Das PEUL+ Modell wendet sie zur Berechnung der mittleren chemischen Quellterme in Kombination mit den nach Euler formulierten Gleichungen an. Die Partikel können dabei als thermodynamisches System verstanden werden, wie sie auch für ideale Gase gelten. Dazu sollen zunächst einige grundlegende Betrachtungen angestellt und gezeigt werden, wie aus ihnen das Partikelmodell hergeleitet werden kann.

5.2.1 Die Lagrangeschen Gleichungen für diskontinuierliche Systeme

Werden extensive Größen nicht als Integral über eine Feldgröße geschrieben, können sie für diskontinuierliche Systeme wie Massenpunkte, starre Körper oder abgeschlossene Gasmengen angewendet werden. Die physikalischen Gesetze gelten auch unabhängig von der Verteilung der Materie innerhalb des Systems:

$$\frac{d F_{i..j}^p}{dt} = G_{i..j}^p \quad (5.3)$$

Gl.(5.3) beschreibt die Bilanz über einen materiellen Bereich, hier mit Index p gekennzeichnet, der nicht einer auf Kontinuen spezialisierten Form entspricht. In einem Lagrangeschen Bezugssystem sind physikalische Gesetze nur von der Zeit abhängig. Es gilt das Postulat für die Erhaltung der Masse (1), des Impulses (2) und der Energie (3) aus denen sich die in einem Eulerschen Bezugssystem formulierten Bilanzgleichungen für Kontinuen mit Hilfe der Reynoldsschen Transporttheoreme herleiten lassen (s. Abs. 2.1.3):

$$\frac{d m^p}{dt} = 0 \quad (1) \quad \frac{d \mathbf{I}^p}{dt} = \mathbf{F}^p \quad (2) \quad \frac{d(U^p + E^p)}{dt} = \dot{Q}^p + P^p \quad (3) \quad (5.4)$$

Gl.(5.4) bilden den Ausgangspunkt für alle differenziellen sowie integralen Formulierungen in finiten Volumenverfahren [Scha70]. Hier ist \mathbf{F} die Kraft, welche auf ein materielles Element der Masse m wirkt und eine Änderung des Impulses \mathbf{I} hervorruft. Die Energie setzt sich aus kinetischer Energie E und innerer Energie U zusammen, die gleich der Summe aus der Leistung P der äußeren Kräfte und der Wärmezufuhr Q definiert ist. Austauschvorgänge zwischen den Partikeln sind mit diesen Formulierungen nicht direkt vorgesehen. Da sie keine differenziellen Formulierungen enthalten, können räumliche Ableitungen von Feldgrößen nur über Partikel-Interaktionsmodelle beschrieben werden. Für ein Fluid sind die Lagrangeschen Gleichungen wie sie in der Newtonschen Mechanik gelten, nicht direkt übertragbar, es sei denn man betrachtet die einzelnen Molekülbewegungen und deren Wechselwirkungen. Bei einer Molekülanzahl von $6 \cdot 10^{23}$ Teilchen pro Mol ist diese Vorgehensweise nicht vorstellbar. Für ein Gas leitet die kinetische Gastheorie aus den molekularen Vorgängen makroskopische Gesetze ab. Beim idealen Gas handelt es sich z.B. um die Zustandsgleichung Gl.(2.42). Eine gegebene Masse ist dann durch drei Größen (T , p und V) beschrieben. Betrachtet man ein Partikel als ein thermodynamisches System können die zeitlichen Änderungen seiner thermochemischen Größen mit Lagrangeschen Gleichungen beschrieben werden. Die Partikel sind durch die Zustandsgrößen gekennzeichnet. Die Materie im Partikel wird als Kontinuum betrachtet und ist gleichmäßig verteilt. Der Index p soll dabei im Folgenden nicht weiter verwendet werden.

5.2.2 Energiebilanz

In einem hinsichtlich des Stoffaustausches geschlossenen System werden nur Wärme und Arbeit mit der Umgebung ausgetauscht. Wird dem Partikel von außen eine Wärmemenge ΔQ zugeführt, kann sie teilweise zu einer Arbeit $-\Delta W$ verbraucht werden. Der Rest führt zur Steigerung der inneren Energie U um ΔU mit $\Delta Q = \Delta U - \Delta W$. U kann Bewegungsenergie der Moleküle sein und zu einer Erwärmung führen. Bei reinen idealen Gasen ist dies die einzig mögliche Form innerer Energie. Die äußere Arbeitsleistung wird bei Gasen nur durch Druckarbeit $\Delta W = -p\Delta V$ geleistet. Die zeitliche Änderung der inneren Energie für ein ruhendes geschlossenes System wird im 1. HS der Thermodynamik formuliert:

$$dU = dQ - p dV \quad \text{mit} \quad dU = dQ \quad \text{bei} \quad V = \text{const} \quad (5.5)$$

Da chemische Prozesse oft bei konstantem Druck ablaufen, wird die Enthalpie H definiert:

$$H = Q + pV \quad \text{bzw.} \quad dH = dQ + p dV + V dp \quad (5.6)$$

Eingesetzt in Gl.(5.5) folgt daraus:

$$dH = dQ + V dp \quad \text{mit} \quad dH = dQ \quad \text{bei} \quad p = \text{const} \quad (5.7)$$

Mit dem 2. HS der Thermodynamik wird beschrieben, in welche Richtung der Wärmeaustausch stattfindet. Die Wärmemenge ist keine Zustandsfunktion, weshalb mit der Entropie S eine extensive Zustandsgröße eingeführt wird:

$$dS = dQ_{rev}/T \quad \text{bzw.} \quad dS > dQ_{irrev}/T \quad (5.8)$$

Einsetzen in Gl.(5.5) ergibt die Gibbssche Fundamentalgleichung einfacher Systeme:

$$dU = T dS - p dV \quad (5.9)$$

Steht das System im stofflichen Austausch mit der Umgebung kommt hinzu, dass sich die Anzahl der Teilchen ändert, wenn dem System Teilchen zu- oder abgeführt werden. Speziell in einem Mehrstoffsystem ändert sich die Teilchenanzahl auch durch chemische Reaktionen im Inneren des Systems, die sich durch Vorgänge des Stoffaustausches nachbilden lassen. Die Molmengen der Teilchen n_k werden jetzt als neue Austauschgrößen betrachtet und das System als offenes System definiert. Für Gemische wird Gl.(5.9) erweitert:

$$dU = \underbrace{T dS}_1 - \underbrace{p dV}_2 + \sum_k \underbrace{\mu_k dn_k}_3 \quad \text{mit} \quad \mu_k = H_k - T dS_k \quad (5.10)$$

μ_k ist das chemische Potential der Spezies k . Sie ist eine intensive Größe, die angibt, wie sich bei quasistatischer Zustandsänderung die innere Energie aufgrund von Materietransport erhöht, wenn ein Mol der Spezies k zugeführt wird. $H_k = H/n_k$ bzw. $S_k = S/n_k$ sind die partielle molare Enthalpie bzw. Entropie. Gl.(5.10) gilt für jede reversible und irreversible infinitesimale Zustandsänderung eines Bereiches, der durch die Variablen U (oder S), V und n_k gekennzeichnet ist. Die Ausdrücke der rechten Seite kennzeichnen die Änderung von U durch Energieaustausch mit der Umgebung, die 1.) durch die Änderung von S hervorgerufen wird, 2.) den Energieanteil darstellt, der über V in das System fließt und 3.) über die Teilchenanzahl n_k ausgetauscht wird. Der Unterschied zwischen den chemischen Potentialen erweist sich dabei als Triebkraft für den Stoffaustausch und wird in [Sch75] Bd. 2 ausführlich behandelt. In Gl.(5.10) kann die Entropieänderung dS sowie die Molmenge dn_k einer beliebigen Spezies in zwei Anteile gespalten werden:

$$dS = d_i S + d_a S \quad \text{und} \quad dn_k = d_i n_k + d_a n_k \quad (5.11)$$

Der Index „a“ kennzeichnet alle Wechselwirkungen mit der Umgebung (Wärme- und Stoffaustausch). Der Index „i“ berücksichtigt Entropieänderung und Änderung der Molmenge durch Vorgänge im Inneren, z.B. durch Reibung, Wärmeleitung, Stofftransport sowie Änderung der Molmenge durch chemische Reaktionen. Durch Wärmezufuhr dQ und Zunahme der Entropie $\sum S_k d_a n_k$ von zugeführter Materie ist:

$$T d_a S = dQ + T \sum_k S_k d_a n_k \quad (5.12)$$

Im Inneren kommt Dissipationsenergie $d\psi = T d_i S$ dazu, so dass

$$T dS = dQ + T \sum_k S_k d_a n_k + d\psi \quad (5.13)$$

Für Gl.(5.10) gilt unter Berücksichtigung von Gl.(5.11) und Gl.(5.13)

$$dU = dQ + T \sum_k S_k d_a n_k + T d_i S - p dV + \sum_k \mu_k d_i n_k + \sum_k \mu_k d_a n_k, \quad (5.14)$$

die unter Verwendung von $\mu_k = H_k - T dS_k$ übergeht in

$$dU = dQ + T d_i S - p dV + \sum_k \mu_k d_i n_k + \sum_k H_k d_a n_k \quad (5.15)$$

In einem geschlossenen System verschwindet der letzte Term in Gl.(5.15). Die Arbeit besteht dann aus einer reversiblen Änderung mit $dW_{rev} = -p dV$ und aus einer dissipierten Arbeit:

$$dW = -p dV + T d_i S + \sum_k \mu_k d_i n_k = dW_{rev} + dW_{diss} \quad (5.16)$$

Mit $d\psi = T d_i S$ folgt:

$$d\psi = dW_{diss} - \sum_k \mu_k d_i n_k \quad (5.17)$$

Die Dissipationsenergie besteht aus dissipierter Arbeit sowie der aufgrund der Änderung der Molmengen (chemischer Reaktionen) dissipierten Energie. Gl.(5.14) ist der 1. HS für Systeme mit veränderlicher Stoffmenge und grundlegend für Vorgänge mit veränderlicher Teilchenmenge, mit dem die dem System zugeführte Wärme berechnet werden kann. Diese Herleitung liefert die Änderungen innerhalb eines ruhenden Systems. Die innere Energie oder Enthalpie ist dann die einzige Energieform, die sich ändern kann. An einem bewegten Partikel muss die Energiebilanz am Partikel um die kinetische und potentielle Energie vervollständigt werden:

$$dU + dE_{kin} = dQ - p dV + dW_{diss} + \sum_k \mu_k dn_k + dW_g + dW_{rest} \quad (5.18)$$

dW_g ist die Arbeit, die die Gewichtskraft als Teil der potentiellen Energie am Partikel verrichtet und dW_{rest} die gesamte Arbeit, die aufgrund der Strömung am Partikel wirkt (Zug- und Druckkräfte etc.). Definiert man in der Impulsbilanz in Abs. 5.2.4 die Kräfte F_g sowie F_{rest} auf der rechten Seite von Gl.(5.22) und multipliziert Gl.(5.22) mit der Geschwindigkeit \mathbf{u} folgt:

$$dW_g + dW_{rest} = \mathbf{u} m d\mathbf{u} \equiv m d(\mathbf{u}^2/2) \quad (5.19)$$

Eingesetzt in Gl.(5.18) mit $dE_{kin} = d(m\mathbf{u}^2/2)$ führt dies wieder zur bekannten Gleichung

$$dU = dQ - p dV + dW_{diss} + \sum_k \mu_k dn_k \quad (5.20)$$

Die u.a. durch Reibung am Partikel dissipierte Arbeit zu berechnen ist sehr aufwendig und kompliziert. Es erfordert eine genaue Kenntnis der Vorgänge im System, was schlicht unmöglich ist. In der angewandten Thermodynamik behilft man sich mit mathematischen Ansätzen, deren Existenz nur experimentell überprüft werden kann [Sch75]. In turbulenten Strömungen kommt die dissipierte Energie in den gemittelten Bilanzgleichungen (s. Abs. 3.5) in Termen der ε Gleichung ebenfalls vor, indem Wirbel in umliegende Bereiche eindringen und dabei durch Reibungseffekte, Energie in Wärme dissipieren.

5.2.3 Stoffbilanz

In einem geschlossenen System ändert sich die Teilchenanzahl nur durch chemische Reaktionen, wobei in einem offenen System, wie in der Energiebilanz bereits gezeigt, Teilchen sowohl zu- oder abgeführt werden können. Dazu werden die Molmengen der Teilchen n_k betrachtet. Wie in Gl.(5.11) ändert sich die Molmenge im Inneren der Partikel durch chemische Reaktionen sowie durch Stoffaustausch mit der Umgebung:

$$dn_k = d_i n_k + d_a n_k \quad (5.21)$$

5.2.4 Impulsbilanz

Obwohl sie nicht direkt die thermodynamischen Eigenschaften der Partikel beschreibt, muss zur Vollständigkeit die Impulsbilanz hier mit aufgeführt werden. Die Änderung des Impulses ist gleich der Summe der von außen angreifenden Kräfte (Impulssatz oder 2. Newtonsches Gesetz):

$$\frac{d\mathbf{I}}{dt} = \frac{d(m\mathbf{u})}{dt} = \sum \mathbf{F}_i \quad (5.22)$$

Bleibt die Masse konstant, so gilt mit der Beschleunigung \mathbf{a} :

$$\frac{d\mathbf{u}}{dt} m = \mathbf{a} m = \sum_i \mathbf{F}_i \quad (5.23)$$

Die auf den Partikel wirkenden Kräfte müssen formuliert werden. Da die Partikel im Modell Teil der Gasphase sind, wird angenommen, dass sie sich mit ihr bewegen. Die Geschwindigkeit \mathbf{u} muss dann nicht aus der Impulsbilanz nach Gl.(5.23) ermittelt werden.

5.2.5 Ableitung der Partikelgleichungen

Mit der Definition der Enthalpie nach Gl.(5.6), wird Gl.(5.15) mit $p = const$ zu:

$$dH = dQ + T d_i S + \sum_k \mu_k d_i n_k + \sum_k H_k d_a n_k \quad (5.24)$$

In einem ersten Teilschritt sollen im Partikel chemische Reaktionen ablaufen. Dabei verhält sich der Partikel adiabat ($dQ = 0$) und lässt keinen Stoffaustausch mit der Umgebung ($d_a n_k = 0$) zu:

$$dH = T d_i S + \sum_k \mu_k d_i n_k \quad (5.25)$$

Wird die dissipierte Arbeit vernachlässigt, ist die zeitliche Änderung der Enthalpie:

$$\left(\frac{dH}{dt}\right)_R = \sum_k \mu_k \frac{d_i n_k}{dt} \quad (5.26)$$

Sie ist mit einer Zunahme oder Abnahme der Temperatur durch die Änderung des chemischen Potentials und falls berücksichtigt, dissipierter Arbeit, im Partikel verbunden. Der Index „R“ kennzeichnet den Teilschritt chemischer Reaktionen. Die sich einstellende Temperatur nach Ablauf chemischer Reaktionen kann iterativ aus tabellierten Größen der Enthalpie der Spezies berechnet werden. In der Stoffbilanz gilt in einem geschlossenen System:

$$dn_k = d_i n_k \quad (5.27)$$

Sie ist mit der Zunahme oder Abnahme der Molmenge durch chemische Reaktionen verbunden. Deren zeitliche Änderung folgt mit:

$$\left(\frac{dn_k}{dt}\right)_R = \frac{d_i n_k}{dt} \quad (5.28)$$

Im nächsten Schritt steht der Partikel im Austausch mit der Umgebung. Gl.(5.24) wird zu:

$$dH = dQ + \sum_k H_k d_a n_k \quad (5.29)$$

Die Umgebung ist durch benachbarte Partikel definiert, die untereinander im Stoff- und Energieaustausch stehen. Für die zeitliche Änderung folgt:

$$\left(\frac{dH}{dt}\right)_M = \frac{dQ}{dt} + \sum_k H_k \frac{d_a n_k}{dt} \quad \text{sowie} \quad \left(\frac{dn_k}{dt}\right)_M = \frac{d_a n_k}{dt} \quad (5.30)$$

Der Index „M“ steht hierbei für einen Mischungsvorgang. Die Gesamtheit aller so betrachteten Partikel können wieder als ein abgeschlossenes System aufgefasst werden, wie in Abb. 5.3 dargestellt ist. Die Partikel P_i liegen in mehreren Schichten ineinander, wobei der Austausch zwischen den Schichten abläuft. Entsprechend ihren lokalen Positionen innerhalb des Schichtmodells wird die Menge des Energieaustauschs bestimmt. Dabei muss gewährleistet sein, dass für die Enthalpie \bar{H} als auch die Teilchenanzahl \bar{n}_k des Partikelgemisches gilt:

$$d\bar{H} = 0 \quad \text{bzw.} \quad d\bar{n}_k = 0 \quad (5.31)$$

Dieser Austausch erfordert ein geeignetes Modell auf Partikelebene (s. Abs. 4.3.4).

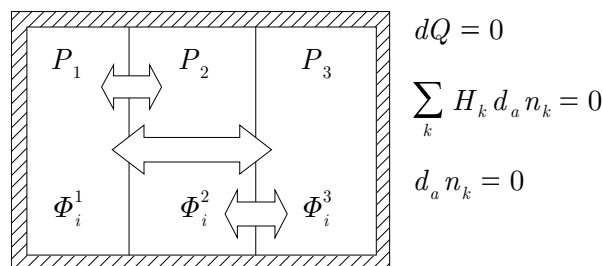


Abbildung 5.3: Partikelmodell des abgeschlossenen Systems

Für den Austausch kann auch das Kontrollvolumen eines FV-Verfahrens herangezogen werden, in dem sich das Partikel befindet. Das Modell besteht dann nur noch aus zwei Schichten: einer „Partikelschicht“ und einer im Vergleich zum Partikel unendlich ausgedehnten Umgebung, die durch die mittleren Größen $\tilde{\Phi}_i$ der Rechenzelle gekennzeichnet ist. Nur $\tilde{\Phi}_i$ bestimmt den Austausch mit dem Partikel. Die ausgetauschte Wärme bzw. der ausgetauschte Stoff sind in der partikelnahen Schicht der Umgebung nicht spürbar, da sich diese mit der unendlich ausgedehnten Umgebung austauscht (s. Abb. 5.4).

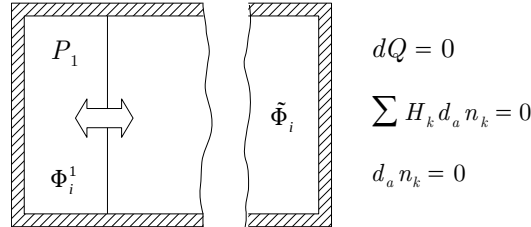


Abbildung 5.4: Partikelmodell in unendlich ausgedehnter Umgebung

Diese Überlegungen führen zu dem bereits vorgestellten Partikelmodell des PEUL+ Modells. Durch die Einführung spezifischer Größen $h = H/m$, $q = Q/m$, $h_k = H_k/W_k$ sowie $n_k = m_k/W_k$ folgt für Gl.(5.26) und Gl.(5.30):

$$\left(\frac{dh}{dt}\right)_R = \frac{1}{m} \sum_k \mu_k \frac{d_i n_k}{dt} \quad \text{und} \quad \left(\frac{dh}{dt}\right)_M = \frac{dq}{dt} + \frac{1}{m} \sum_k h_k \frac{d_a m_k}{dt} \quad (5.32)$$

Unter Anwendung des IEM – Modells für den rechten Term der Mischungsgleichung folgt:

$$\left(\frac{dh}{dt}\right)_{R,M} = \frac{\tilde{h} - h}{\tau_{iem}} \quad (5.33)$$

Gl.(5.28) und Gl.Fehler: Referenz nicht gefunden werden zu:

$$\left(\frac{dm_k}{dt}\right)_R = \frac{d_i m_k}{dt} \quad \text{und} \quad \left(\frac{dm_k}{dt}\right)_M = \frac{d_a m_k}{dt} \quad (5.34)$$

Mit $Y_k = m/m_k$ ist:

$$m \left(\frac{dY_k}{dt}\right)_{R,M} = m \frac{d_i Y_k}{dt} + m \frac{d_a Y_k}{dt} \quad (5.35)$$

Auch hier muss für den Mischungsterm das IEM – Modell herangezogen werden, um Inkonsistenz zu vermeiden:

$$\left(\frac{dY_k}{dt}\right)_{R,M} = \frac{d_i Y_k}{dt} + \frac{\tilde{Y}_k - Y_k}{\tau_{iem}} \quad (5.36)$$

Die Herleitung für das bezüglich des Stoffaustausches geschlossene System setzt zur Vereinfachung in der Energiebilanz $p = const$ voraus, was zu Gl.(5.26) führt. Tatsächlich dient eine zugeführte Wärmemenge zur Erhöhung der Enthalpie bzw. dehnt sich der Fluidballen aus und leistet dabei Volumenänderungsarbeit an der Umgebung, was seine innere Energie vermindert:

$$dH = Vdp + T d_i S + \sum_k \mu_k d_i n_k \quad \text{bzw.} \quad dU = -pdV + T d_i S + \sum_k \mu_k d_i n_k \quad (5.37)$$

Da das IEM Modell für die Mischung die mittlere Enthalpie der Eulerschen Lösung verwendet, wird dieser Anteil darin mit berücksichtigt. Die gleiche Annahme kann für die dissipierte Arbeit gemacht werden, so dass streng genommen gilt:

$$\left(\frac{dh}{dt}\right)_M = \frac{\tilde{h} - h}{\tau_{iem}} \equiv \frac{dq}{dt} + \frac{1}{m} \sum_k h_k \frac{d_a m_k}{dt} + Vdp + T d_i S \quad (5.38)$$

Der Anteil der dissipativen Arbeit wird ebenfalls über das IEM-Modell beschrieben, kann aber als vernachlässigbar angesehen werden. Der Term Vdp kommt dann zum Tragen, wenn die Strömung stark abgebremst wird, wie es im Staupunkt der Fall ist. In einem Mischungsmodell, welches rein auf Partikelebene (z.B. MC-Modell) basiert, ist es sinnvoll diesen Anteil in der Bilanz zu berücksichtigen. Im PEUL+ Modell ist ein Mischungsmodell auf Partikelebene nur für die Berechnung im Post-Prozess anwendbar, da die Eulersche sowie die Lagrangsche Lösung sich aufgrund ihres unterschiedlichen Ansatzes immer voneinander unterscheiden, d.h.

$$\tilde{Y}_i \neq \langle Y_i \rangle_{La} \quad \text{bzw.} \quad \tilde{h} \neq \langle h \rangle_{La} \quad (5.39)$$

gilt immer und stellt einen entscheidenden limitierenden Faktor dar.

5.3 Partikelrandbedingungen und Trajektorienberechnung

Grundlage des PEUL+ Modells ist die Berechnung der physikalischen Trajektorien der einzelnen Partikel. Ihre Berechnung und weitere wichtige Randbedingungen werden in diesem Abschnitt diskutiert. Die Berechnung der Trajektorien basiert auf einem Programmpaket zur Berechnung von Spray und Zerstäubung, SPRAYSIM [Ra07], welches in dieser Arbeit neben physikalischen Änderungen im Programm auch auf eine instationäre Kopplung mit dem verwendeten Strömungslöser (s. Abs. 5.5) verändert werden musste.

5.3.1 Partikelstartbedingungen

Wie bereits erwähnt, soll die mittlere Dichte $\bar{\rho}$ direkt proportional zur Anzahl der Partikel einer Zelle sein. Die Partikel werden in den Einlässen entsprechend der jeweiligen Massenströme eingesetzt. Dabei muss zwischen stationärer (1) und instationärer (2) Vorgehensweise unterschieden werden:

$$N_i = \frac{\dot{m}_i}{\dot{m}_{ges}} N \quad (1) \quad , \quad N_i = \frac{\dot{m}_i}{\dot{m}_{ges}} \dot{N} \Delta t \quad (2) \quad \text{mit} \quad \dot{m}_{ges} = \sum_{i=1}^E \dot{m}_i \quad (5.40)$$

E ist die Anzahl der Einlässe der Gesamtkonfiguration und \dot{m}_i kennzeichnet die einzelnen Eintrittsmassenströme. N definiert eine vom Anwender vorzugebende Partikelanzahl bzw. \dot{N} eine Partikelanzahl pro Zeiteinheit. Im stationären Fall legt $P = \sum N_i$ die Gesamtanzahl der Partikel pro Iterationsschritt fest. Im instationären Fall gibt N_i die Anzahl gestarteter Partikel pro Zeitschritt und Einlass an. Die Gesamtanzahl aller verfolgten Partikel wird dann ermittelt durch:

$$P = M \left(\sum_m N_i - \sum_m N_o \right) \quad (5.41)$$

Dabei gibt N_o die Partikel an, die während eines Zeitschrittes das Gebiet wieder verlassen haben. M ist die Anzahl aller Zeitschritte. Sowohl im stationären als auch instationären Fall ist N_i aufgrund gebrochener Massenströme keine natürliche Zahl. Im stationären Fall kann ohne Auswirkungen auf das Ergebnis auf- oder abgerundet werden. Im instationären Fall wird immer abgerundet und die verbleibenden Nachkommastellen werden in jedem Zeitschritt

aufsummiert. Übersteigt die Summe der Nachkommastellen den Wert Eins wird ein zusätzliches Partikel gestartet. Ist die Partikelanzahl für jeden Einlass festgelegt, werden die Partikel nun auf deren einzelne Flächen aufgeteilt. Da die Flächenelemente A_i eines Rechengitters i.d.R. nicht gleich groß sind, erfolgt eine Flächen gewichtete Aufteilung. Große Zellflächen müssen stärker berücksichtigt werden als kleine Zellflächen. Alternativ kann die Aufteilung auch entsprechend der Massenströme der Eintrittsflächenelemente vorgenommen werden, da $A_i \propto \dot{m}_i$ bei $\rho u_i = const$. Die Flächensummenfunktion ist bestimmt durch

$$S_j(A) = \sum_{i=1}^j A_i \quad \text{mit } j = 1, \dots, nf \quad (5.42)$$

und nf Anzahl der Einzelflächen. Bezogen auf ihren Maximalwert, welcher die Gesamtfläche repräsentiert, ergibt sich die normierte Flächensummenfunktion $s_j(A)$:

$$s_j(A) = \frac{S_j(A)}{S_{nf}(A)} = \frac{S_j(A)}{\sum A_i} \quad (5.43)$$

Für jedes Partikel wird eine gleichverteilte Zufallszahl α im Intervall $[0,1]$ generiert [ARB89] mit $s_{j-1} < \alpha \leq s_j$. Jedem Intervall ist die entsprechende Flächennummer der Netzgeometrie zugeordnet, die mit Hilfe der Methode der stufenweisen Intervallhalbierung herausgefunden wird. Dies gewährleistet, dass bei homogenen Eintrittsbedingungen die Partikeldichte annähernd gleich über die Gesamtfläche verteilt ist. Für die Partikelstartgrößen werden die Randbedingungen des Eulerschen Lösers übernommen. Im instationären Fall kann das Gebiet mit Partikeln initialisiert werden. Durch das Netz sind die Koordinaten der Zellen gegeben. Die Positionierung der Partikel erfolgt der Einfachheit halber in das geometrische Zellzentrum. Welche Zellen von wie vielen Partikeln initialisiert werden, wird durch einen Zufallsgenerator festgelegt. Anstelle der Flächensummenfunktion wird eine Summenfunktion über die Zellvolumina gebildet mit

$$S_j(V) = \sum_{i=1}^j V_i \quad \text{mit } j = 1, \dots, nc, \quad (5.44)$$

wobei nc die Anzahl der Zellen der Gesamtkonfiguration angibt. Die Anzahl an Initialisierungspartikeln wird über einen Parameter gesteuert. Da sich wenigstens ein Partikel in jeder Zelle befinden sollte, werden leere Zellen automatisch mit einem Partikel aufgefüllt. Gl.(5.41) wird dann zu:

$$P = M \left(\sum_m N_i - \sum_m N_o \right) + N_{i,init} \Big|_{m=1} \quad (5.45)$$

Für die Partikelgrößen werden die initialisierten Größen des Eulerschen Lösers gesetzt.

5.3.2 Partikeldichte

Jedes Partikel ist Träger einer Masse, die sich aus dem Eintrittsmassenstrom ergibt:

$$m^p = \frac{\dot{m}_i}{N_i} \Delta t \quad (5.46)$$

Da die Anzahl startender Partikel entsprechend der Eintrittsmassenströme aufgeteilt ist, besitzen alle Partikel eine identische Masse m^p . Die mittlere Dichte $\bar{\rho}$ soll direkt proportional zur Anzahl der Partikel in einer Zelle sein. Mit Hilfe der mittleren Dichte kann ein mittleres Volumen für die Partikel in einer Zelle bestimmt werden:

$$\bar{V} = \frac{m^p}{\bar{\rho}} \quad (5.47)$$

Gl.(5.47) summiert über alle Partikel in einer Zelle zum Zeitpunkt t und in Bezug gesetzt zum Volumen der Zelle liefert

$$n(t, x) = \frac{\sum \bar{V}}{V} \quad \text{bzw.} \quad n(t, x) = \frac{1}{\bar{\rho}} \frac{\sum m^p}{m} \quad (5.48)$$

und damit die lokale Partikeldichte $n(t, \mathbf{x})$ der Zelle. Für $n(t, x) = 1$ wird die Fluidmasse identisch durch die Partikel repräsentiert. Mit $0 \leq n(t, x) < 1$ befinden sich zu wenige Partikel im Gebiet, während $n(t, x) > 1$ eine Ansammlung an Partikeln bedeutet. Die Anzahl der Partikel in einer Zelle wird am Anfang eines jeden Zeitschritts bestimmt und innerhalb der Partikelschleife fortlaufend aktualisiert. In der stationären Vorgehensweise werden nach einem Euler-Lagrange-Schritt alle Zellen betrachtet, durch die jeweils ein Partikel gekommen ist. Diese Anzahl wird summiert.

5.3.3 Partikeltrajektorien

Die Bahnlinien der Partikel werden entsprechend der Lagrangeschen Gleichung

$$\frac{dx_i^p(t)}{dt} = u_i^p(x_i^p(t), t) \quad (5.49)$$

berechnet und die neuen Positionen der Partikel mit einem expliziten Euler-Schritt bestimmt:

$$x_i^p(t + \Delta t) = x_i^p(t) + u_i^p(x_i^p(t), t) \Delta t \quad (5.50)$$

Die momentane Geschwindigkeit u_i^p eines Partikels wird mit Gl.(4.117) berechnet, wobei der zeitliche Mittelwert \tilde{u}_i direkt den Eulerschen Bilanzgleichungen entnommen wird. Die Geschwindigkeitsfluktuationen u_i'' werden in RANS-Verfahren über die Reynoldsspannungen (s. Abs. 3.6.1) zur Verfügung gestellt. Sie werden nicht direkt sondern in Korrelationen der Form $\overline{u'' u''}$ berechnet. Im k - ε Modell ist daraus nur die Spur des Spannungstensors bekannt. Da u_i'' die zufälligen Schwankungen um den Mittelwert repräsentiert, können sie durch eine statistische Verteilung charakterisiert werden. Modelle dieser Art werden auch als Random Walk Modelle bezeichnet. Eine zweite Gruppe von Modellen löst eine stochastische Differenzialgleichung (Langevin Gleichung) zur Bestimmung der Partikelgeschwindigkeit u_i^p . In Bezug auf die Bewegung unterscheidet sich jedes Partikel in einer Rechenzelle durch eine eigenen Schwankungsgeschwindigkeit u_i'' . Dieser Effekt wird als turbulente Dispersion bezeichnet und muss modelliert werden.

5.3.4 Das Dispersionsmodell

Eine wichtige Annahme für die Anwendung des in der vorliegenden Arbeit verwendeten Dispersionsmodells basiert darauf, dass die Partikel nur keine Trägheit besitzen und damit der Gasströmung der Eulerschen Phase präzise folgen können, was auch als „Particle Tracer Limit“ bezeichnet wird [MB92]. Sind die Partikel in gleicher Weise wie die Fluidmasse verteilt, beschreiben sie die Strömungsverhältnisse am effektivsten und erfüllen die Kontinuitätsgleichung. In der vorliegenden Arbeit kommt ein Modell vom Typ Gosman-Ioannides [GI81] zur Anwendung, welches den „Random Walk“ Modellen zuzuordnen ist. In einer Arbeit von Blümcke [Blu92] wird gezeigt, dass eine Modifizierung des Dispersionsmodells keine signifikanten Verbesserungen aufweist, weshalb auf dieses einfache Modell zurückgegriffen wird. Es ist sehr zuverlässig, leicht zu implementieren und beschreibt

im Rahmen einer RANS-Rechnung die Verhältnisse ausreichend genau. Die Schwankungsgeschwindigkeit ist diskontinuierlich in der Zeit und das Modell wird deshalb den diskontinuierlichen Random-Walk Modellen zugeordnet (s. Abb. 5.5). Die Werte für u_i'' bleiben unverändert bis die Lebenszeit τ_e eines Wirbels verstrichen ist. Im Gegensatz dazu vermeiden kontinuierliche Modelle die zeitliche Diskontinuität. Sie korrelieren die Geschwindigkeiten des Partikels mit den vorangegangenen Geschwindigkeiten unter Einführung einer Lagrangeschen Autokorrelationsfunktion $R_L(\tau)$ [LR82], [BDG90], [ZL91]. Aus Untersuchungen in [MB92] wird jedoch darauf hingewiesen, dass eine Vermeidung der zeitlichen Geschwindigkeitsdiskontinuität keine signifikanten Verbesserung des Modells liefert. Für das diskontinuierliche Gosman-Ioannides Modell lässt sich zudem herleiten, dass zeitlich ebenfalls eine lineare Autokorrelationsfunktion zugrunde gelegt ist [Ra06]. Neben der zeitlichen Korrelation ist auch eine räumlichen Korrelation zu berücksichtigen. Sind die Partikel als Tracer der Strömung zu interpretieren, entfällt diese Korrelation.

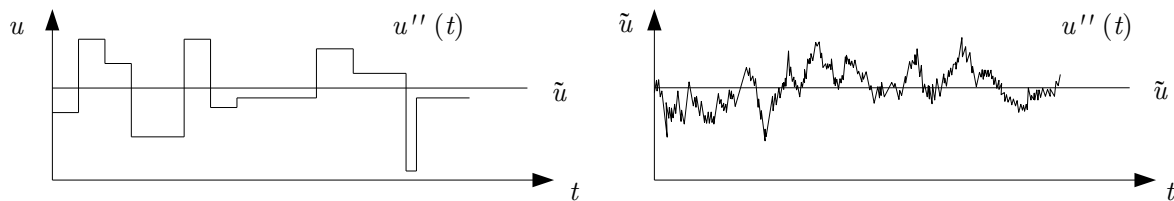


Abbildung 5.5: Geschwindigkeitsfunktion im kontinuierlichen (links) und diskontinuierlichen (rechts) Random Walk Modell

In der Eulerschen Bilanzgleichung werden die Reynolds-Spannungen mit dem k - ε Modell modelliert. Die turbulente Dispersion der Partikel muss aus den mittleren Transportgrößen k und ε abgeleitet werden. Die turbulenten Fluktuationen der Gasströmung werden durch eine stochastische Schwankungsgeschwindigkeit beschrieben und diese den zeitlich gemittelten Stromlinien überlagert. u_i'' wird mit Zufallszahlen nach einer Gauß-Verteilung generiert:

$$f(u_i'') = \frac{1}{\sigma_i \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2} \left[\frac{u_i'' - \mu}{\sigma_i}\right]^2\right) \quad \text{mit} \quad \mu = 0, \sigma_i = \sqrt{\frac{2}{3}k} \quad (5.51)$$

Unter der Annahme isotroper Turbulenz gilt:

$$\overline{u_1''^2} = \overline{u_2''^2} = \overline{u_3''^2} \quad (5.52)$$

Hier sei darauf hingewiesen, dass eine Gaußsche Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung zwar häufig in Messungen bestätigt ist [Ha94], in Scherschichten einer Drallströmung allerdings schiefe Verteilungen auftreten, die hier nicht berücksichtigt werden. In Abs. 5.3.5 und 5.3.6. werden die Konsequenzen daraus verdeutlicht und Modifizierungen vorgeschlagen. Um die Gaußfunktion nicht für jedes Partikel auswerten zu müssen, wird auf einen Algorithmus von E.W. Blümcke [Blu92] zurückgegriffen (Abb. 5.6). Ein Vektorfeld (RNDM) gaußverteilter Zufallszahlen wird einmal zu Beginn der Berechnung erzeugt und abgespeichert. Bei Bedarf werden dann die Zufallszahlen über ein Inkrement Δn^p abgegriffen, wobei n die laufende Nummer des Inkrements angibt. Dies erfolgt je Partikel p für jede Koordinatenrichtung x_i . Außerdem wird jedem Partikel ein Startwert $\xi_{anf}(i)$ zugeordnet, von dem aus das Inkrement auf den nächsten Eintrag zugreifen kann. Um die Anisotropie der Turbulenz zu berücksichtigen, unterscheidet sich auch der Startwert für jede Koordinatenrichtung. Die

Dimension des Vektorfeldes ist eine sehr große Primzahl, so dass möglichst alle erzeugten Elemente des Vektorfeldes während des Aufenthaltes der Partikel im Gebiet verwendet werden und keine Wiederholungen auftreten.

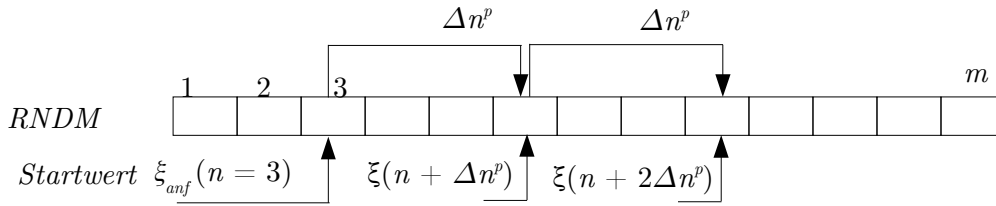


Abbildung 5.6: Feld des Zufallsvektors RNDM und das inkrementenweise Abgreifen einer neuen Zufallszahl

In der Modellvorstellung von [GI81] durchquert das Partikel auf seiner Bahn mehrere, turbulente Wirbel, die durch ein Längenmaß und eine Lebensdauer charakterisiert sind. Beide Größen bestimmen die Generierung einer neuen Schwankungsgeschwindigkeit, d.h. wenn die Lebensdauer eines Wirbels überschritten ist oder das Partikel den durchquerten Wirbelballen aufgrund seiner Relativgeschwindigkeit²² verlässt. Die Lebensdauer oder das integrale Zeitmaß der meisten Wirbel ist definiert mit

$$\tau_e = c_T \frac{k}{\varepsilon} \quad (5.53)$$

und einem empirischen Faktor c_T . In der Literatur finden sich verschiedene Angaben für Spraypartikel. Für ein Tracer Partikel soll dieser Wert mit c_T gleich Eins gesetzt werden. Die Lebenszeit des Wirbels τ_e wird an jedem Ort x_i für das Partikel berechnet. Mit dem Eintritt des Partikels in einen Wirbel wird ein Zeitzähler $\tau^0 = 0$ initialisiert und über die Zeitschritte summiert:

$$\tau = \sum_{m=1}^M (\tau^{m-1} + \Delta t^m) \quad (5.54)$$

Ist die Bedingung $\tau_e < \tau$ erfüllt, erfolgt die Berechnung einer neuen Schwankungsgeschwindigkeit mit Hilfe des neuen Zufallsvektors $\xi_i(n^p + \Delta n^p)$ wobei $\xi_1 \neq \xi_2 \neq \xi_3$:

$$u_i'' = \sigma_i \xi_i(n^p + \Delta n^p) \quad (5.55)$$

Diese Geschwindigkeit wirkt diskontinuierlich am Partikel. Das Lagrangesche Längenmaß L leitet sich unmittelbar aus dem Zeitmaß ab:

$$L = \tau_e u_{rms} \quad (5.56)$$

Es wird angenommen, dass sich das Partikel im Zentrum des Wirbels befindet. Da im PEUL+-Modell die Partikel keine Relativgeschwindigkeit zur Gasgeschwindigkeit besitzen, kann sich ein Partikel nicht aus dem Wirbelzentrum heraus bewegen. Das Kriterium der Wirbellänge spielt dann keine Rolle. Der Vorgang, dass ein Partikel das Wirbeleinflussgebiet verlässt, wird auch als „Crossing Trajectory Effekt“ bezeichnet. Es folgt daraus die Berechnung einer neuen Schwankungsgeschwindigkeit nach Gl.(5.55). Die ermittelten u_i'' wirken sowohl zeitlich als auch räumlich unkorreliert auf das Partikel ein. Eine Ausnahme bilden Zellen, die eine Wand des Kontrollvolumens abbilden. Die Vorstellung, dass das

²² im Falle eines Masse tragenden Spraypartikels

Partikel einen Wirbelballen verlässt, tritt z.B. an den Wänden der Brennkammer auf. Trifft ein Partikel auf eine feste Wand, wird die Struktur des Wirbels, in dem sich das Partikel befindet zerstört und mehrere neue Wirbel generiert. Das Partikel bekommt einen neuen Zufallsvektor zugewiesen und die Wirbellebenszeit beginnt von Neuem.

5.3.5 Modifiziertes Dispersionsmodell

Ein großes Defizit beinhalten alle unmodifizierten Random Walk Modelle: Im Bereich des Particle Tracer Limits reichern sich Partikel in Gebieten mit minimaler Turbulenzintensität (Randgebiete von Scherschichten) an. In Gebieten mit hoher Turbulenzintensität (Kern der Scherschicht) kommt es zu einer Verarmung an Partikeln. Dieser Effekt wird auch als Turbophorese bezeichnet. Im diskontinuierlichen Modell ist das vor allem darauf zurückzuführen, dass die Fluktuationen über die Wirbellebenszeit konstant bleiben. Bewegt sich ein Partikel aus einem Gebiet mit hoher Turbulenzintensität in ein Gebiet mit niedriger Intensität innerhalb einer einzigen Wirbellebenszeit, wird die Information direkt in dieses Gebiet übertragen und wirkt solange die Lebenszeit noch nicht beendet ist. Partikel können aufgrund der Turbulenz aus der Scherschicht transportiert werden, durch die geringe Turbulenzintensität jedoch nicht zurück. Partikeldichten sind bis zu sechs mal größer an den Rändern der Scherschicht und besitzen weniger als 40 Prozent des korrekten Niveaus im Kern der Scherschicht [MB92]. Sowohl diskontinuierliche als auch kontinuierliche Modelle weisen diese Phänomene auf. In Letzteren ist durch die kontinuierliche Anpassung von u_i'' an die lokalen Strömungsbedingungen die direkte Informationsübertragung nicht so signifikant, eine Partikelansammlung ist aber dennoch vorhanden. Im verwendeten diskontinuierlichen Modell wird dieser Erscheinung zunächst durch eine einfache Korrektur entgegengewirkt: Der gaußverteilte Zufallsvektor bleibt unverändert, wird aber in jedem Zeitschritt mit der lokalen Turbulenzintensität $\sigma_i(x_i, t)$ aus Gl.(5.51) multipliziert [MB92]:

$$u_i''(t) = \sigma_i(x_i, t)\xi_i(n^p) \quad (5.57)$$

Geschwindigkeitsschwankungen werden nun kontinuierlicher beschrieben, da für jeden neuen Zeitschritt auch die lokalen Geschwindigkeitsschwankungen am Partikelort herangezogen werden. Die numerische Behandlung an den Gebietsgrenzen (Wände, symmetrische und periodische Ränder) wird durch diese Modifikation beeinflusst (s. Abs. 5.3.7).

5.3.6 Dispersionsmodell unter Berücksichtigung der Partikeldichte

Das Ansammeln bzw. Abreichern von Partikeln ist auch mit vorgestellter Modifizierung nicht zu verhindern, da die Erfüllung der Kontinuitätsbedingung im Modell nicht eingefordert wird. Die Aufteilung der Partikel anhand der Eintrittsmassenströme (s. Abs. 5.3.1) kann die Proportionalität von Partikeldichte und mittlerer Fluidichte allein nicht erfüllen. Sie muss über die Verteilung der Partikel im gesamten Rechengebiet beschrieben werden. Dazu sind Informationen über die Partikeldichte innerhalb der einzelnen Rechenzellen erforderlich. Anreicherungen von Partikeln treten zudem an den Rändern des Gebietes, z.B. in der Nähe einer Wand von Rezirkulationsgebieten, auf. Random Walk Modelle betrachten einzelne Partikel unabhängig von ihren Nachbarpartikel. Werden alle Partikel gleichzeitig innerhalb eines Zeitschrittes verfolgt, sind Interaktionen von Partikeln vorstellbar. Ein Partikel, welches in eine Zelle mit hoher Partikeldichte transportiert wird, nimmt Einfluss auf die Bewegung anderer sich in der Zelle befindender Partikel. Gleiches gilt für Regionen, in denen die Partikeldichte sehr gering ist. Die Auswirkungen sind dann weniger stark ausgeprägt oder nicht vorhanden. Die Partikel können physikalisch auch als Platzhalter interpretiert werden, wonach sich an einem Ort x_i zur Zeit t streng genommen nur ein einziges Partikel befinden

darf. Mit Hilfe der Partikeldichte kann eine Aussage über die Partikelverteilung im Gebiet getroffen werden, dass die Bestimmung von u_i'' zusätzlich in Abhängigkeit der lokalen Partikeldichte erlaubt:

$$u_i''(t) = \sigma_i(x_i, t) \xi_i^*(n^p) \quad (5.58)$$

$\xi_i^*(n^p)$ stellt einen richtungsgewichteten Zufallsvektor dar, der noch zu bestimmen ist. Damit kann zusätzlich eine räumliche Korrelation im Modell berücksichtigt werden. Das Partikel wird mit hoher Wahrscheinlichkeit seinen Weg dorthin fortsetzen, wo die Partikeldichten gering sind. Dazu ist die Bestimmung seiner neuen Richtung notwendig. Wir betrachten ein Partikel zum Zeitpunkt t in Zelle x_i und definieren die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion dP_j/dx_j aller benachbarten Zellen x_j von x_i mit $i \neq j$. Ein Feld für alle Nachbarn jeder Zelle wird zu Beginn der Rechnung einmalig erzeugt und ist im Speicher abgelegt. Es werden alle Zellen ausgewertet, die einen gemeinsamen Knoten mit der betrachteten Zelle besitzen. Die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion ist als diskrete Verteilung von Delta-Funktionen mit Hilfe der normierten Partikelanzahldichte n_j^0 charakterisiert:

$$\delta_j = \frac{dP_j}{dx_j} = \frac{1/n_j^0}{\sum_j (1/n_j^0)} \quad \text{mit} \quad n_j^0 = \frac{n_j}{\sum_j n_j} \quad \text{für} \quad n_j > 0 \quad (5.59)$$

Für den Fall $n_j = 0$ soll $n_j = 1/N$ gelten.

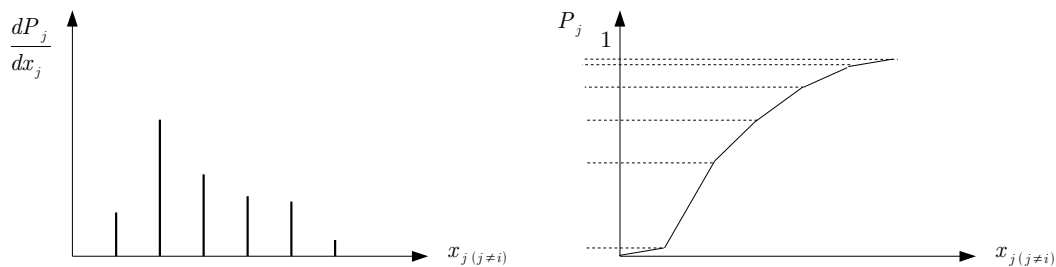


Abbildung 5.7: Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung sowie zugehörige Summenhäufigkeitsverteilung

Die Integration liefert die Summenhäufigkeitsverteilung (oder Wahrscheinlichkeit) P_j und ordnet jeder Nachbarzelle die Wahrscheinlichkeit $P_j(\alpha < x_j)$ zu. Dabei ist α eine gleich verteilte Zufallszahl im Intervall $[0,1]$. Die lokale Partikeldichte einer Zelle wird nach jedem Zeitschritt ermittelt. Mit der so gefundenen Nachbarzelle ist die neue wahrscheinlichste Richtung festgelegt. Im Folgenden muss der Zufallsvektor $\xi_i(n^p)$ modifiziert werden. Die Geschwindigkeit des Partikels setzt sich entsprechend Abb.5.8 aus \bar{u}_i und u_i'' zusammen.

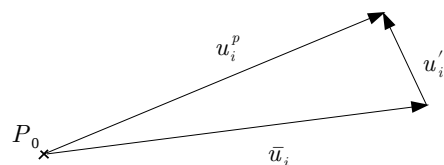


Abbildung 5.8: Zusammensetzung des Geschwindigkeitsvektors am Partikel

Da die mittleren Geschwindigkeiten aus den Eulergrößen vorgegeben sind, kann die Änderung nur durch die Modifizierung von u_i'' erfolgen. Entsprechend der Geschwindigkeiten setzt sich auch der Ortsvektor aus zwei Anteilen zusammen: Ein Anteil resultiert aus der mittleren Geschwindigkeit, der andere aus der Schwankungsgeschwindigkeit. Nur aufgrund von u_i'' wird ein Partikel innerhalb eines Zeitschrittes bewegt:

$$x_i'' = x_{i,0} + u_i'' dt \quad (5.60)$$

Den dabei zurückgelegten Weg wird nun das Partikel mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit in Richtung der Zelle mit einer geringen Partikeldichte zurücklegen. Die Richtung ist mit den Koordinaten des Zellmittelpunktes der gefundenen Nachbarzelle gegeben. Unter der Annahme, dass das Partikel den gleichen Weg (gleicher Betrag des Ortsvektors) auch in Richtung der Nachbarzelle zurücklegt, kann ein neuer Punkt $x_i^{*''}$ gefunden werden, aus dessen Koordinaten sich eine modifizierte Schwankungsgeschwindigkeit $u_i^{*''}$ angeben lässt:

$$u_i^{*''} = \frac{x_i^{*''} - x_{i,0}}{dt} \quad (5.61)$$

Die Koordinaten von $x_i^{*''}$ errechnen sich aus der Geradengleichung zwischen zwei Punkten:

$$x_i^{*''} = x_{i,0} + s(x_{i,1} - x_{i,0}) \quad \text{mit} \quad s = \frac{|x_i'' - x_{i,0}|}{|x_{i,1} - x_{i,0}|} \quad (5.62)$$

Aus dem Verhältnis

$$a = \frac{u_i^{*''}}{u_i''} \quad (5.63)$$

wird der modifizierte Zufallsvektor gebildet:

$$\xi_i^* = a \xi_i(n^p) \quad (5.64)$$

Im nächsten Zeitschritt wird $\xi_i^*(n^p)$ zur Berechnung von u_i'' herangezogen. Ob dem Partikel ein neuer Zufallsvektor zugeordnet wird, soll an zwei unterschiedlichen Kriterien diskutiert werden:

1.) Eine Modifikation hängt davon ab, ob die momentan eingeschlagene Richtung des Partikels und die wahrscheinlichste Richtung, d.h. in Richtung geringer Partikeldichte, voneinander abweichen oder nicht. Dazu erfolgt eine Abschätzung, in welche Zelle das Partikel im nächsten Zeitschritt mit unmodifizierter Schwankungsgeschwindigkeit bewegt werden wird. Es wird das skalare Produkt zwischen dem Ortsvektor des Partikels sowie jeweils allen Ortsvektoren der angrenzenden Zellmittelpunkte gebildet und der Ortsvektor j gesucht für den gilt:

$$(x_{i,1} - x_{i,0})_j \cdot (x_i^p - x_{i,0}) = \text{Maximum}, \quad j = 1, \dots, J \quad (5.65)$$

J ist die Anzahl aller benachbarten Zellen. Der mit Gl. (5.65) gefundene Ortsvektor kann einer bestimmten Nachbarzelle zugeordnet werden. Ist diese Zelle nicht identisch mit der Zelle der geringsten Partikeldichte wird eine Modifikation des Zufallsvektors vorgenommen. Ansonsten entfällt diese. Das Partikel behält solange die modifizierte Schwankungsgeschwindigkeit bei, bis es in eine neue Umgebung, d.h. in eine neue Rechenzelle trifft.

2.) Die Modifikation des Zufallsvektors erfolgt nur dann, wenn die maximale Partikeldichte der Zelle, in welcher sich das Partikel gerade befindet überschritten ist, ansonsten bleibt u_i unbeeinflusst. Das Partikel behält solange die modifizierte Schwankungsgeschwindigkeit bei, bis es in eine neue Umgebung, d.h. im einfachsten Fall in eine neue Rechenzelle trifft.

Partikel können in Gebiete mit hoher Partikeldichte bewegt werden, so dass Kriterium 2) sinnvoll ist. Durch Kollision ändert sich dann deren Partikelbahn.

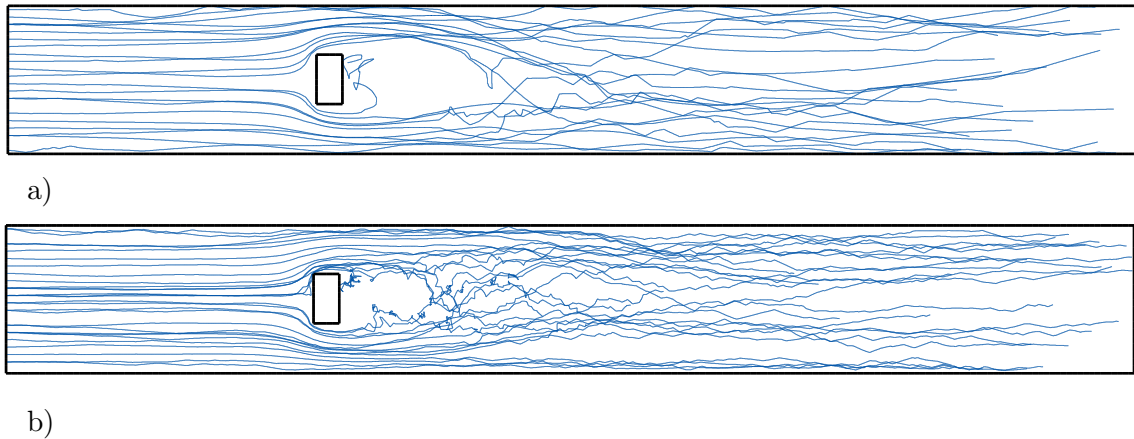


Abbildung 5.9: Partikeltrajektorien mit a) Dispersionsmodell und b) mit modifiziertem Dispersionsmodell

In Abb. 5.9 sind Trajektorien von Partikeln dargestellt, wobei in b) eine Modifizierung des Zufallsvektors vorgenommen wurde. Es handelt sich um den Fall einer rechteckigen Kanalströmung mit Flammenhalter. Am linken Rand strömt ein Brennstoff/Luft Gemisch mit ca. 8.0 m/s ein. Am Flammenhalter bildet sich ein Rezirkulationsgebiet aus. Im Vergleich mit Abb. 5.9a) weisen die Trajektorien in Abb. 5.9b) ein deutlich anderes Verhalten auf. Während in a) die Partikelbahnen relativ geraden Bahnlinien folgen, wird die Bewegung der Partikel durch Anwesenheit anderer Partikel gestört und ihr Verlauf durch zufällige Richtungsänderungen bestimmt. In Gebieten mit geringem Turbulenzeinfluss (im Bereich vor dem Flammenhalter) werden die Partikelbahnen kaum beeinflusst. Da für die Berechnung der zeitabhängigen Geschwindigkeit nur die Fluktuationen neu modelliert werden, ändert sich aufgrund geringer Turbulenz der Strömung dort die Partikelgeschwindigkeit kaum. Die stationäre Kopplung bedingt aufgrund ihrer Vorgehensweise einer anderen Regulierung. Gilbank hat bereits darauf hingewiesen, dass die Partikeldichte in Rezirkulationsgebieten sehr gering ist. Da diese oft der Grund für eine Flammenstabilisierung ist, spielt dort die Berechnung der chemischen Quellterme eine wichtige Rolle. Der statistische Charakter des PEUL+ Modells erlaubt es, die Partikelstartorte neu zu definieren. Nach jeder Euler-Lagrange-Iteration wird die Partikeldichte der Zellen ausgewertet. Im nächsten Lagrange-Schritt werden zusätzlich weitere Partikel N_{add} aus Zellen mit niedriger Partikeldichte gestartet mit $N = N_{add} + \sum N_i$ wobei $Y_{i,add}^p = \tilde{Y}_i$. Das Ende der Lebensdauer eines Partikels wird mittels einer maximalen Anzahl an Zeitschritten M_{max} gültig für alle Partikel festgelegt. Partikel, die das Rechengebiet noch nicht verlassen haben, werden nur bis zu M_{max} ausgewertet.

5.3.7 Partikellokalisierung

Da die Kopplung mit einem netzbasierten Euler-Verfahren erfolgt, müssen die Positionen der Partikel innerhalb der Netzgeometrie bekannt sein. Diese werden mit einem Tracing-Algorithmus nach Schütz [Sch00] ermittelt. Innerhalb eines Zeitschrittes wird die neue Position mit Gl.(5.50) bestimmt. Ein Partikel kann entweder 1.) in der Rechenzelle verbleiben, 2.) die Zelle durch eine interne Zellfläche verlassen, 3.) an einer Wand-, Symmetrie-, oder periodischen Fläche reflektiert werden und 4.) das Gebiet verlassen. In Abbildung 5.10 sind mögliche Partikelbewegungen durch das Rechengebiet und an Rändern dargestellt. Der Index n kennzeichnet die Position der Partikel zum Zeitpunkt t , während $n + 1$ die Position zum Zeitpunkt $t + \Delta t$ angibt. Der Index $*$ beschreibt einen intermediären Zustand.

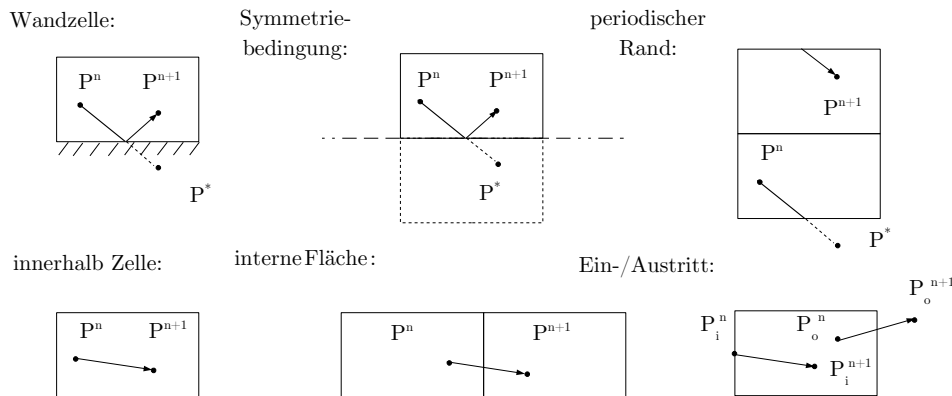


Abbildung 5.10: Partikelbehandlung an den Zellflächen

An Wänden sowie an Symmetriefflächen werden die Partikel am Normalenvektor der Fläche gespiegelt. An planar periodischen Rändern wird der Fußpunkt des Vektors verschoben. Im Falle eines rotationsperiodischen Randes (in Abb. 5.10 nicht dargestellt) ist darauf zu achten, dass neben der Verschiebung der Vektor zusätzlich um den Rotationswinkel gedreht werden muss. Interne Flächen sowie Eintritts- und Austrittsflächen erfordern keine weitere Ortsbestimmung für P^{n+1} . Ob ein Partikel in eine andere Zelle bewegt wurde, lässt sich durch das Kriterium des Durchstoßens einer Zellfläche bestimmen. Trifft ein Partikel auf ein Wandflächenelement, so wird es entsprechend der Ausrichtung des Normalenvektors der Zellfläche reflektiert. Der Betrag der momentanen Partikelgeschwindigkeit bleibt erhalten, die Richtung ändert sich (s. Abb. 5.10). Da der Zufallsvektor ξ_i oder auch sein modifizierter Wert ξ_i^* für die Geschwindigkeitskomponenten positive und negative Werte annehmen kann, muss auch dieser am Flächenelement reflektiert werden, um die gleiche Richtung wie für die Geschwindigkeitskomponenten zu erhalten.

5.3.8 Speichermanagement

Im instationären Fall müssen alle Partikelgrößen nach jedem Zeitschritt abgespeichert werden. Dadurch erhöht sich der Speicherbedarf im Vergleich zur stationären Berechnung deutlich. Da zu Beginn die sich im Gebiet einstellende Partikelanzahl P nicht bekannt ist, wird Speicher je nach Bedarf bereitgestellt. Im Programm ist ein Parameter vorzugeben, der eine maximale Speicherplatzgröße festlegt. Werden mehr Partikel als zunächst geschätzt verfolgt, wird zusätzlicher Speicher automatisch generiert. Innerhalb eines jeden Zeitschrittes verlassen Partikel in der instationären Betrachtung das Rechengebiet, idealerweise entsprechend der Summe der in allen Einlässen gestarteten Partikel. Wir setzen dabei voraus, dass alle Partikel das Gebiet nur im Austritt verlassen können. In seltenen Fällen ist auch ein

Partikelaustritt in den Einlässen des Gebietes möglich. Dann herrschen bereits starke turbulente Strukturen im Bereich einer Eintrittsbedingung vor. Verlässt ein Partikel das Rechengebiet, werden seine Speicherplätze zurückgesetzt und die beanspruchten Speicherfelder können im nächsten Zeitschritt von neu startenden Partikeln besetzt werden. Im stationären Fall vereinfacht sich die Vorgehensweise. Jedes Partikel wird einzeln vom Eintritt bis zum Austritt verfolgt. Ein Abspeichern des zeitlichen Verlaufs der Partikelgrößen ist nicht erforderlich und erspart ein komplexes Speicherplatzmanagement. Beim Überschreiten einer maximal vorgegebenen Lebenszeit, wird die Berechnung abgebrochen und das verfolgte Partikel „dissipiert“.

5.4 Die Lösung der Lagrangeschen Partikelgleichungen

Ausgehend von der Herleitung in Abs. 5.2.5 setzen sich die Änderungen am Partikel aufgrund chemischer Reaktionen sowie des Austausches mit der Umgebung (Mischung) zusammen. Die Lösung erfolgt auch hier durch sequentielles Abarbeiten der sonst gleichzeitig ablaufenden Vorgänge während eines Zeitschritts Δt mittels Faktorisierung (s. Abs.4.3.2). Der gesamte Prozess kann mit der fraktionalen Zeitschrittmethode wie folgt dargestellt werden:

$$\Phi^{(n)}(t) \rightarrow \text{Mischung} \rightarrow \Phi^{(n*)}(t + \Delta t) \rightarrow \text{Reaktion} \rightarrow \Phi^{(n)}(t + \Delta t) \quad (5.66)$$

Der Reaktionsschritt sollte am Schluss durchgeführt werden, [Fox04], und berücksichtigt, dass chemische Zeitskalen im Gegensatz zu denen der Strömung wesentlich kleiner sind.

5.4.1 Die Berechnung der Mischung

Vor dem Teilschritt chemischer Reaktionen tauscht das Partikel Wärme und Stoff mit seiner Umgebung entsprechend Gl.(5.30) und Gl.Fehler: Referenz nicht gefunden aus. Dieser Vorgang erfordert Modellierung:

$$\left(\frac{dh}{dt} \right)_M = \frac{\tilde{h} - h}{\tau_{iem}}, \quad \left(\frac{dY_k}{dt} \right)_M = \frac{\tilde{Y}_k - Y_k}{\tau_{iem}} \quad (5.67)$$

Gleichungen (5.67) sind gewöhnliche Dgl. 1.Ordnung mit konstanten Koeffizienten. Jede der Gleichungen genügt der allgemeinen Form mit

$$\frac{dy}{dt} = c_2 y + c_1 \quad \text{mit} \quad c_2, c_1 = \text{const}, \quad (5.68)$$

die eine analytische Lösung besitzt

$$y^*(t) = \left(y_o + \frac{c_2}{c_1} \right) \exp(c_2 t) - \frac{c_2}{c_1} \quad \text{für} \quad y_o = y(t=t_0) \quad (5.69)$$

mit $y^*(t)$ entsprechend $\Phi^{(n*)}$ aus Gl.(5.66) und

$$c_1 = \frac{\tilde{y}}{\tau_{iem}}, \quad c_2 = -\frac{1}{\tau_{iem}} \quad \text{und} \quad \tilde{y} = (\tilde{h}, \tilde{Y}_1, \dots, \tilde{Y}_N) \quad (5.70)$$

Die Verwendung des Mittelwertes setzt einen Austausch mit einer unendlich ausgedehnten Umgebung entsprechend Abb. 5.4 voraus. Die Austauschrate ist gegeben mit $1/\tau_{iem}$ und kann nach Gl.(4.124) bestimmt werden, wobei Schwankungen von τ_{iem} , wie in Abs. 4.4.6 bereits eingeführt, berücksichtigt werden. Das IEM Modell kann auch als Verzögerungsglied erster Ordnung (PT-1-Glied) wie es in der Regelungstechnik im Zusammenhang mit dem

Übertragungsverhalten eines Systems verwendet wird, interpretiert werden. Übertragungsfunktionen beschreiben dabei das dynamische Verhalten des Systems über lineare oder nicht-lineare Ein- und Ausgangsbeziehungen.

Übertragungsblock

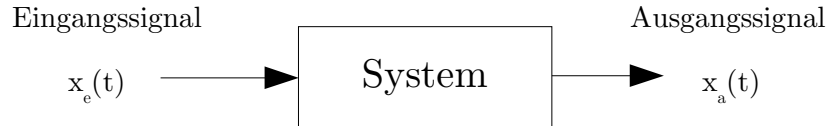


Abbildung 5.11: Darstellung des Übertragungsverhaltens eines Systems

Im Zeitbereich wird es über die lineare Differentialgleichung erster Ordnung mit konstanten Koeffizienten

$$a_1 \frac{dx_a}{dt} + a_0 x_a = b_0 x_e \quad (5.71)$$

und im Bildbereich durch seine Übertragungsfunktion beschrieben:

$$F(p) = \frac{x_a}{x_e} = \frac{K_p}{1 + pT} \quad \text{mit} \quad K_p = \frac{b_0}{a_0} \quad \text{und} \quad T = \frac{a_1}{a_0} \quad (5.72)$$

Dabei ist T eine Zeitkonstante und K_p ein proportionaler Übertragungsbeiwert. Die Lösung $x_a(t)$ bei einer bestimmten Eingangsgröße oder auch Testsignal $x_e(t)$ liefert das Antwortsignal des Systems für die Sprungfunktion $x_e(t) = x_{e,0}$, $t \geq 0$:

$$x_a(t) = K_p x_{e,0} - K_p x_{e,0} \exp^{-t/T} \quad (5.73)$$

Die Lösung der Dgl. setzt sich aus einem statischen Verhalten, welches vom Eingangssignal $K_p x_{e,0}$ erzwungen wird, und einem instationären Verhalten zusammen. Der instationäre Anteil wird vom Eigenverhalten des Systems bestimmt. In Übertragung auf das IEM Modell wird Gl.(5.67) zu

$$\tau_{iem} \frac{dh}{dt} + h = \tilde{h} \quad \text{mit} \quad a_1 = \tau_{iem} \quad \text{und} \quad a_0 = b_0 = 1 \quad (5.74)$$

sowie

$$\tau_{iem} \frac{dY_k}{dt} + Y_k = \tilde{Y}_k \quad \text{mit} \quad a_1 = \tau_{iem} \quad \text{und} \quad a_0 = b_0 = 1 \quad (5.75)$$

Der stationäre Teil in Gleichungen (5.74), (5.75) wird durch den Mittelwert und $K_p = 1$ festgelegt. Der dynamische Teil wird durch den Kennwert $T = \tau_{iem}$ bestimmt. Mit $\tau_{iem} = C_{iem} k / \varepsilon$ kann über die Konstante C_{iem} das Systemverhalten beeinflusst werden. Der Sonderfall des dynamischen Verhaltens folgt aus der Antwortfunktion $x_a(t)$ für $t \rightarrow \infty$

$$h = K_p \tilde{h} \quad \text{und} \quad Y_k = K_p \tilde{Y}_k \quad (5.76)$$

und gibt das statische Verhalten des Systems an. Für $\tau_{iem} \rightarrow \infty$ gibt das Partikel weder Stoff noch Wärme an seine Umgebung ab, während für $\tau_{iem} \rightarrow 0$ ein vollständiger Ausgleich mit der Umgebung stattfindet. In diesem Fall nehmen die Partikel die Größen der Eulerschen Lösung an, chemische Reaktionen sind dann als quasi laminar kinetisch anzusehen. Dies ist der Fall, wenn die turbulenten Strukturen bereits durch den Mittelwert vollständig aufgelöst werden und Spezies- sowie Temperaturfluktuationen nicht vorhanden sind. Die Verfolgung

von Partikeln entlang der Trajektorien wird nun nicht mehr gebraucht, da alle Partikel die Zusammensetzung der Rechenzelle besitzen. Die Rate $1/\tau_{iem}$ ist bei $K_p = 1$ der einzige Parameter für die Quantifizierung der Mischung im IEM-Modell. Abb. 5.12 zeigt die typischen Verläufe für unterschiedliche Zeitkonstanten.

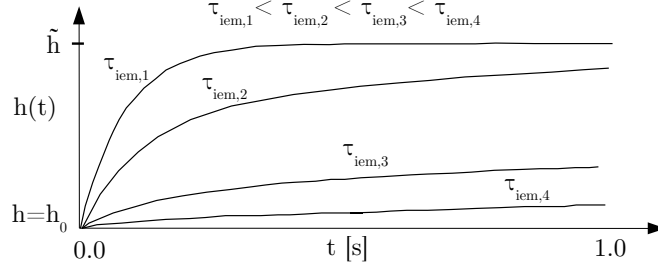


Abbildung 5.12: Darstellung des Übertragungsverhaltens bei unterschiedlichen Zeitkonstanten τ_{iem}

Alle Kurven nähern sich asymptotisch dem Mittelwert an. Ihr Verlauf ist allein durch τ_{iem} charakterisiert. Für die Lösung gilt, dass bei

$$\begin{aligned} t = 1\tau_{iem} & : & 63\%, \\ t = 3\tau_{iem} & : & 95\% \text{ sowie} \\ t = 5\tau_{iem} & : & 99\% \text{ des statischen Endwerts erreicht werden.} \end{aligned}$$

Damit ist τ_{iem} ein Maß für die Trägheit des Systems. Die Aufenthaltszeit t eines Partikels in einer Zelle bestimmt den Grad der Durchmischung und ist physikalisch sinnvoll. Der Wert von τ_{iem} ist durch k sowie ε festgelegt und muss mit C_{iem} kalibriert werden. Wird C_{iem} zu klein gewählt, werden die Schwankungen vollständig aufgehoben, bei zu großem C_{iem} findet ein zu schwacher Austausch statt, Abweichungen zum Eulerschen Mittelwert nehmen zu. Chemische Reaktionen in den Partikeln werden unterdrückt und können zur Verlöschung führen. Ein typischer Zeitschritt Δt für die instationäre Kopplung liegt in der Größenordnung zwischen $1.e-06$ bis maximal $5.e-06$ Sekunden. Das integrale turbulente Zeitmaß liegt in der Größenordnung von ca. $1.e-03$ Sekunden. Die Bestimmung von C_{iem} ist daher von großer Bedeutung und muss für jeden Fall angepasst werden. Durch die zufällige Variation der Austauschrate τ_{iem} entsprechend Gl.(4.126) und Gl.(4.127) wird die Breite der Verteilung im Gegensatz zur Verwendung einer konstanten Austauschrate erhöht [Cai94]. Nach Umstellung der Gleichungen folgt für τ_{iem} :

$$\tau_{iem} = \tau_{\eta} - \left[(\tau_t - \tau_{\eta}) \ln[p(\tau)(\tau_t - \tau_{\eta})] \right] \quad \text{mit} \quad p(\tau) = \alpha \frac{1}{(\tau_t - \tau_{\eta})} \quad (5.77)$$

Mit $p(\tau) = \alpha/(\tau_t - \tau_{\eta})$ wird für $\alpha = 1$, τ_{iem} auf τ_{η} begrenzt. Während der Mischung kann sich die Zusammensetzung der Partikel nur von einer Seite her an den Mittelwert annähern. Partikel können niemals Zustände annehmen, die den Eulerschen Mittelwert der Zelle über- bzw. unterschreiten:

$$\begin{aligned} \Phi_i^p(t=0) < \tilde{\Phi}_i & \text{ folgt } \Phi_i^p(t=t+\Delta t) \leq \tilde{\Phi}_i \quad \text{bzw. für} \\ \Phi_i^p(t=0) > \tilde{\Phi}_i & \text{ folgt } \Phi_i^p(t=t+\Delta t) \geq \tilde{\Phi}_i . \end{aligned} \quad (5.78)$$

Hat ein Partikel seinen Endwert erreicht, also eine sehr lange Aufenthaltszeit in der Zelle erfahren, spielt es für seinen weiteren Lebensweg keine Rolle mehr, von welchem Einfluss es anfänglich gestartet ist. Seine Historie wird nur noch von seinem letzten Aufenthaltsort bestimmt. Eulerscher Mittelwert und Lagrangescher Partikelwert sind identisch wenn, $C_{iem} \rightarrow 0$ und/oder $t \rightarrow \infty$ für Partikel p . Der Lagrangescher Mittelwert nähert sich dem

Eulerschen Mittelwert an, wenn sehr viele Partikel den statistischen Fehler minimieren. Mit dem IEM-Modell werden alle physikalischen Änderungen, die am Partikel wirksam werden, beschrieben. Diese beinhalten neben dem diffusiven Austausch von Stoff und Wärme unter der Berücksichtigung von $D_k = D$ sowie $Le = 1$ auch Kompressibilitätseffekte (Vdp), durch Reibung verrichtete Arbeit, die kinetische Energie in Wärme dissipiert (dW_{diss}) sowie externe Massenkraften. Kompressibilität und Dissipation können bei niedrigen Strömungsgeschwindigkeiten vernachlässigt werden [Wil85]. Der Massenkraftterm (z.B. Gravitation) ist in der Energiegleichung vernachlässigbar [Ger05]. Das Mischungsmodell im PEUL-Ansatz ist aufgrund der Komplexität der realen physikalischen Verhältnisse ein sehr einfacher Ansatz. Die Verwendung des Mittelwertes der Eulerlösung im IEM – Modell erlaubt, dass sich Partikel individuell innerhalb einer Rechenzelle entwickeln und dabei die Schwankungen um den Mittelwert nur innerhalb dieser Zelle repräsentieren. Die unterschiedlichen, den Mischungsprozess beeinflussenden Wirbelstrukturen werden über die Variation der Austauschrate zwar berücksichtigt, es ist jedoch immer eine Kalibrierung über die Konstante C_{iem} notwendig. Dies kann nur über experimentelle Untersuchungen erfolgen. Lokale feine Strukturen, z.B. eingeschlossene kalte oder heiße Gastaschen können mit dem Modell über eine Variation der Austauschrate besser erfasst werden. Im Fall der Anwendung von LES wird eine Verringerung des Modellierungsanteils und somit auch der Modellierung der Austauschrate möglich. Das PEUL-Modell bietet sich dann für die Modellierung der feinen Strukturen wie folgt an: Befinden sich Partikel in einer Rechenzelle, in der die Gleichungen nicht mehr modelliert werden müssen, nehmen alle Partikel die Zusammensetzung der betrachteten Zelle an. Chemische Reaktionen müssen dann nur an einem einzigen Partikel gelöst werden, welches den Zustand aller Partikel der Zelle repräsentiert. Befinden sich dagegen die Partikel in einer Zelle, die Modellierung erfordert, so ist wieder die Lagrangesche Gleichung (4.110) für jedes Partikel zu lösen.

5.4.2 Alternative Bestimmung der Austauschrate

Wie bereits erwähnt wird die Austauschrate τ_{iem} mit Hilfe einer Modellkonstanten C_{iem} kalibriert. In den Arbeiten von Gilbank als auch Cailleau wurde eine globale Konstante für das gesamte Rechengebiet festgelegt, die sich auf experimentelle Untersuchungen stützt. Für eine tatsächliche Vorhersage ist diese Methode jedoch nur bedingt geeignet. Eine vollkommen von Messungen unabhängige Methode zur Bestimmung einer lokalen Austauschrate soll mit Hilfe der Aufenthaltszeiten der Partikel bestimmt werden. Durch die instationäre Kopplung können die Aufenthaltszeiten t_a der Partikel in einer Zelle nach jedem Zeitschritt abgeschätzt werden. Wird jede Zelle als ein Reaktor betrachtet, so wird der zeitliche Verlauf des Partikels vom Eintritt bis zum Austritt (über die jeweiligen Zellflächen) aus der Zelle erfasst. Dieser ergibt sich durch Addition aller Zeitschritte während des Durchquerens der Zelle. Da die Aufenthaltszeit erst beim Verlassen der Zelle bestimmt werden kann, ist deren Abschätzung erforderlich. Die Aufenthaltszeiten sind wie die turbulenten Zeitmaße durch ein Spektrum gekennzeichnet, das sich aus der individuellen Bewegung der Partikel ergibt. Die kleinste Aufenthaltszeit wird durch das Partikel repräsentiert, welches die momentan geringste Aufenthaltszeit in der Zelle besitzt:

$$t_{a,min} = \text{Minimum} \left\{ t_a^p, p=1, \dots, P \right\} \quad (5.79)$$

Gleiches gilt für die maximale individuelle Aufenthaltszeit, die im Gegensatz zur minimalen Aufenthaltszeit exakt bestimmt werden kann:

$$t_{a,max} = \text{Maximum} \left\{ t_a^p, p=1, \dots, P \right\} \quad (5.80)$$

Eine mittlere Aufenthaltszeit lässt sich über den arithmetischen Mittelwert der momentanen Aufenthaltszeiten aller Partikel einer Zelle aus

$$\langle t_a \rangle_L = \frac{1}{P} \sum_{p=1}^P \sum_{m=1}^{M^*(p)} t_m^p \quad (5.81)$$

gewinnen, wobei $M^*(p)$ die Anzahl der Zeitschritte innerhalb einer Zelle markiert. Legt man für die Verteilungsfunktion von t_a ebenfalls eine exponentielle Funktion (s. Abs. 4.4.6) zu Grunde, kann ein zufälliges Spektrum von Aufenthaltszeiten generiert werden. Aus einem Ensemble gleichverteilter Zufallszahlen $\alpha[0,1]$ wird ein Wert gewürfelt und die zufällige charakteristische Zeit t_a ermittelt, die die geforderte Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion

$$p(t_a) = \frac{1}{\langle t_a \rangle_L - t_{a,min}} e^{-\frac{t_a - t_{a,min}}{\langle t_a \rangle_L - t_{a,min}}} \quad \text{mit} \quad p(t_a) = 0, \forall t_a < t_{a,min} \quad (5.82)$$

erfüllt. Außerdem muss gelten:

$$t_a = \text{Minimum} \left\{ t_a, t_{a,max} \right\} \quad (5.83)$$

Da die Aufenthaltszeiten direkt aus den Partikeln ermittelt werden können, wird auf eine Anpassung über eine Konstante C_{iem} verzichtet.

5.4.3 Die Berechnung des chemischen Quellterms

Nachfolgend sollen die Veränderungen im Partikel durch chemische Reaktionen entsprechend den Bedingungen in Gl.(5.26) bzw. Gl.(5.28) berücksichtigt werden. Chemische Reaktionen werden mit ihren Reaktionsgleichungen innerhalb eines Mechanismus dargestellt



Dieses System ist beschrieben durch die Lösung eines Systems gekoppelter Dgln. der Form

$$\frac{dc_k}{dt} = \sum_r \frac{dc_{kr}}{dt} = \sum_r F_{kr}(c_j) \quad (5.85)$$

mit F_{kr} entsprechend Gl.(2.52)

$$F_{kr}(c_j) = (b_{kr} - a_{kr}) \left(k_r^f \prod_{j=1}^N c_j^{a_{jr}} - k_r^b \prod_{j=1}^N c_j^{b_{jr}} \right) \quad (5.86)$$

Durch die verschiedenen chemischen Zeitskalen, ist Gl.(5.85) ein stark nicht-lineares System, das eine implizite Lösung mittels Newton-Iteration erfordert. Die Konzentration sowie die Enthalpie des Partikels wird aus dem Teilschritt der Mischung bestimmt

$$c_k = \bar{\rho} Y_k^* / W_k \quad h = h^* \quad (5.87)$$

Für die Berechnung der neuen Partikelkonzentrationen kann aber auch ein semi-implizites Lösungsverfahren – die sogenannte „Reference Species Technique“ [ARB89] – zur Anwendung kommen, wenn Gl.(5.85) in der Zeit diskretisiert wird. Gl.(5.85) wird dann für jede Reaktion in der Spezies $c_{ref\ r}$ linearisiert, für die innerhalb des Zeitschrittes die größte Gefahr besteht, negative Konzentrationen anzunehmen. Sie folgt aus der Bedingung:

$$c_{ref\ r} = \left\{ c_{kr} \left| \frac{1}{c_{kr}} \frac{dc_{jr}}{dt} = Minimum \right. \right\} \quad (5.88)$$

Eine Taylor-Reihenentwicklung von F_{kr} um F_{kr}^n , wobei der Index n den Zustand zu Beginn des Zeitschritts markiert, mit Abbruch nach dem ersten Glied, führt zu einer semi-impliziten Form von Gl.(5.85):

$$\frac{dc_k}{dt} = \sum_r \frac{dc_{kr}}{dt} \simeq \sum_r (b_{kr} - a_{kr}) \dot{\omega}_{ref\ r} \quad (5.89)$$

Das bedeutet, dass alle Ableitungen in der Jakobi-Matrix außer denen in der Referenzspezies $c_{ref\ r}$ vernachlässigt werden. Die Reaktionsrate lautet dann [Sch06]

$$\dot{\omega}_{ref\ r} = \frac{\Omega_r^{f\ n} - \Omega_r^{b\ n}}{1 + \Delta t (a_{ref\ r} - b_{ref\ r}) (a_{ref\ r} \Omega_r^{f\ n} - b_{ref\ r} \Omega_r^{b\ n}) (c_{ref\ r}^n)^{-1}} \quad (5.90)$$

mit

$$\Omega_r^{f\ n} = k_r^f \prod_{j=1}^N c_j^{a_{jr}} \quad \text{und} \quad \Omega_r^{b\ n} = k_r^b \prod_{j=1}^N c_j^{b_{jr}} \quad (5.91)$$

Die neuen Konzentrationen errechnen sich aus:

$$c_k^{n+1} = c_k^n + \sum_{r=1}^R (b_{kr} - a_{kr}) \dot{\omega}_{ref\ r} \Delta t \quad (5.92)$$

Die freigesetzte Wärmemenge ergibt sich entsprechend Gl.(2.57):

$$\frac{dQ}{dt} = - \sum_r \sum_k (b_{kr} - a_{kr}) (\Delta h_f^o)_k \dot{\omega}_{ref\ r} \quad (5.93)$$

Da die Reaktionen bei konstantem Druck ablaufen, kann aus der spezifischen Enthalpie der Partikel die Temperatur aus der neuen Zusammensetzung ermittelt werden

$$T^{n+1} = T(h^n, c_k^{n+1}) \quad (5.94)$$

In Gl.(5.36) sowie Gl.(5.33) müssen die spezifisch formulierten Größen in volumenbezogene Größen umgewandelt werden

$$\bar{\rho} \left(\frac{dh}{dt} \right)_{R,M} = \bar{\rho} \frac{\tilde{h} - h}{\tau_{iem}} \quad \bar{\rho} \left(\frac{dY_k}{dt} \right)_{R,M} = \bar{\rho} \frac{d_i Y_k}{dt} + \bar{\rho} \frac{\tilde{Y}_k - Y_k}{\tau_{iem}} \quad (5.95)$$

Mit $c_k = \rho_k / W_k$ kann die molare Konzentration ermittelt werden. Es wird angenommen, dass jedes Partikel die gleiche Dichte besitzt, die durch die Dichte $\rho = \bar{\rho}$ der Eulerschen Phase charakterisiert ist.

5.5 Der Strömungslöser

Das entwickelte Partikelmodell wird an einen externen CFD-Code gekoppelt. In dieser Arbeit handelt es sich dabei um das kommerzielle Programm FLUENT[®] Version 6.3.26 [Fluent]. Die Kopplung an einen beliebigen CFD-Code ist aufgrund des modularen Aufbaus des Partikellöser möglich. Der CFD-Code FLUENT[®] basiert auf einem finiten Volumenverfahren, in dem die in Kapitel 3 gemittelten Erhaltungsgleichungen gelöst werden. Die berechneten Quellterme aus dem Partikelmodell werden in die Erhaltungsgleichungen über eine vorgegebene Schnittstelle in den CFD-Code übertragen. Für die Berechnung wird

der instationäre Löser gewählt und die einzelnen Bilanzgleichungen sequentiell innerhalb eines Zeitschrittes abgearbeitet: Die Gleichungen für Masse, Impuls und Energie werden nacheinander gelöst. Alternativ bietet FLUENT® einen gekoppelten Löser an: die Gleichungen werden dann simultan behandelt. Die Lösung zusätzlicher Skalare, z.B. alle Turbulenzgrößen, erfolgt in beiden Fällen immer sequentiell. Der sequentielle Löser wurde u.a. deshalb gewählt, da er im Gegensatz zum gekoppelten Löser weniger speicherintensiv (bei hoher Anzahl transportierter Spezies) ist. Beim gekoppelten Löser tritt außerdem eine hohe Steifigkeit des Gleichungssystems im niedrigen Machzahlbereich auf, die zu einem schlechten Konvergenzverhalten führt.

5.6 Kopplung von Partikel- und Strömungslöser

5.6.1 Programmaufbau

Da das beschriebene Vorgehen ein hybrides Verfahren darstellt, müssen beide Programmteile miteinander gekoppelt werden. Die Kopplung erfolgt nach jedem Zeitschritt des Eulerschen Verfahrens. Eine definierte Schnittstelle im CFD-Code ermöglicht die externe Einbindung von Quelltermen in die jeweiligen Transportgleichungen. Für die Kommunikation des Eulerschen Löser mit externen Programmteilen stehen sogenannte „User Defined Functions“ (UDF) zur Verfügung. Da der Partikellöser in Fortran90 programmiert ist, wurde die Kopplung verschiedener Programmiersprachen (Multi-Language Programming) erforderlich. UDF unterstützen die Programmiersprache C. Das Hauptprogramm (UDF) ruft eine Fortran90 Routine auf, so dass die Kopplung von C nach Fortran 90 zu erfolgen hat. Die Übertragung von Daten wird über Parameterliste gesteuert. Die Kopplung von C und Fortran 90 hat zur Folge, dass die benötigten Datenfelder sowohl auf der C als auch der Fortran Ebene bereit gestellt werden müssen. Da es sich um sehr große Datenmengen handelt, ist ein vernünftiges Speichermanagement erforderlich. Um nicht unnötig doppelten Speicherplatz zum Zeitpunkt der Übertragung der Datenfelder bereit zu stellen, werden nicht alle Felder gleichzeitig, sondern sequentiell übertragen: Die Werte für das Temperaturfeld werden in einem Übertragungsfeld abgespeichert. Es erfolgt die Übergabe an das Fortran90 Programm des Partikellöser. Danach wird ein weiterer Datenblock, z.B. die u Komponente der Geschwindigkeit, übertragen u.s.w. Einen Überblick zur Programmstruktur liefert Abb. 5.13.

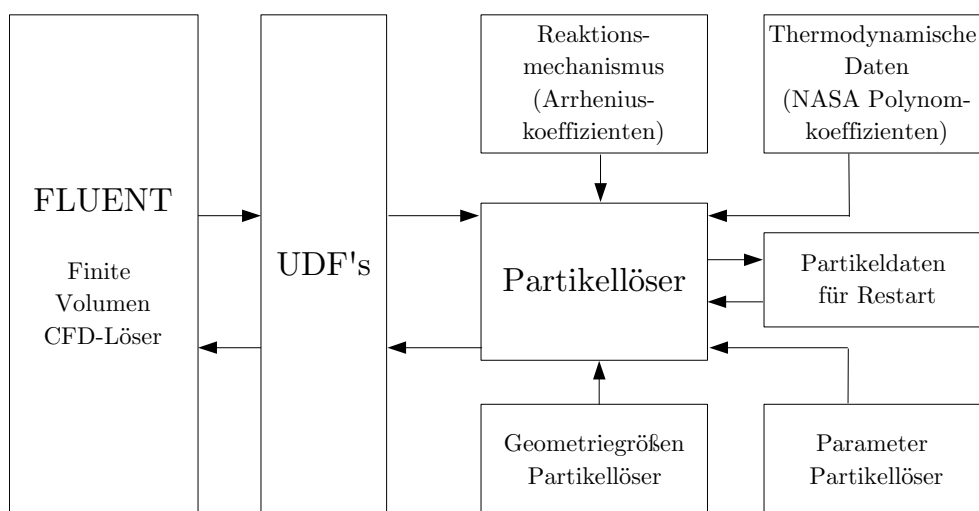


Abbildung 5.13: Organisation der Programmstruktur von CFD- und Partikellöser

Alle weiteren vom Partikellöser benötigten Daten werden über extern eingelesen Dateien (s. Abb. 5.13) zur Verfügung gestellt. Im instationären Fall ist die Bereitstellung einer Restart-Datei für Partikelgrößen erforderlich. Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurde die gesamte Struktur aufgebaut und steht als komplettes und vom verwendeten Strömungslöser unabhängiges Modul zur Verfügung. Aus dem Strömungslöser wird dabei nur auf zwei Funktionen zurückgegriffen, die im Folgenden beschrieben sind. Innerhalb des Partikelmoduls können die chemischen Quellterme auch aus den mittleren Größen des Gasfeldes der Zelle berechnet werden. Für die Berechnung des mittleren chemischen Quellterms steht für diesen Fall das PaSR-Modell zur Verfügung. Die Kopplung mit dem Strömungslöser erfolgt auf gleiche Weise wie beim Partikelmodell.

5.6.2 Die Funktion „Define_Adjust“

Zunächst müssen alle Größen, die das Partikelverfahren verwendet, bereitgestellt werden. Zu Beginn jedes neuen Zeitschritts wird die UDF „Define_Adjust“ aufgerufen, die den Zugriff auf Größen des Eulerschen Löser ermöglicht und diese an den Partikellöser übergibt. Dabei handelt es sich um physikalische Größen, wie

- thermochemische Größen: Y_k, T, ρ
- vektorielle Größen: u_i
- Größen zur Turbulenzmodellierung: k, ε, ν

Aus T und Y_k wird die Enthalpie h berechnet (s. Abs. 2.3.4). Für die Partikelstartbedingungen werden die Randbedingungen auf den Zellflächen übernommen

- Eintrittsmassenströme \dot{m}_i für $i=1 \dots$ Anzahl von Eintrittsrandbedingungen
- thermochemische Größen: Y_k, T

Es werden außerdem geometrische Größen übertragen, um die Gitterstrukturen des finiten Volumenverfahrens und des Partikelverfahrens zu synchronisieren

- Zellenanzahl N^V und Ortskoordinaten der Zellenmittelpunkte x_i^V
- Zellflächenanzahl N^F und Ortskoordinaten der Flächenmittelpunkte x_i^F für
- alle Flächen mit Eintrittsrandbedingung

Diese Informationen werden benötigt, um die Zuordnung der Zellennummern bzw. Zellflächennummern aus der Gitterstruktur des Strömungslöser mit denen der Struktur des Partikellöser zu gewährleisten. Es sei id^V die Zellenidentifikationsnummer des Volumenverfahrens und id^P die des Partikellöser, so gilt

- $x_i^V = x_i^P$ für $id^V = id^P$: identische Zellennummerierung
- $x_i^V \neq x_i^P$ für $id^V = id^P$: Suche einer zugehörigen id^{P*} erforderlich

Gleiches gilt für die Zellflächen der Eintrittszonen. Die Geometriedaten des Partikellöser werden in einem vorangehenden Preprozessschritt bereitgestellt. Für die automatisierte Kopplung bedarf es weiterer Informationen, wie

- Identifikationsnummern und -namen der verwendeten Spezies
- Zeitschritt Δt
- verschiedene Größen zur Bereitstellung von Speicherplatz für Feldelement

5.6.3 Die Funktion „Define_Source“

Mit dieser UDF werden die berechneten Quellterme in den Lösungsalgorithmus des Eulerschen Löser eingebunden. Der Aufruf für den Quellterm von CO₂ lautet

```
DEFINE_SOURCE(...) //
{
    real source; // (1)
    extern int isp_co2; // (2)
    if (cell == 0) fluent_getsrc ( &isp_co2, psor_species, psor_energy ); // (3)
    source = psor_species[cell]; // (4)
    dS [eqn] = 0.0; // (5)
    return source; } // (6)
```

In den Zeilen (1) und (2) werden Variablen deklariert. Zeile (3) ruft eine Fortran90 Routine auf, die die Identifikationsnummer von CO₂ sowie zwei Quelltermfelder übergibt, von denen hier nur „psor_species“ benötigt wird. Die Übergabe an den Strömungslöser erfolgt mittels der Funktion „source“ in Zeile (4). Zeile (5) enthält die Ableitung des Quellterms in Bezug zur abhängigen Variable der Transportgleichung und dient der Stabilisierung der Lösung [Fluent].

6 Anwendungsbeispiele

Die Modellierung der turbulenten Verbrennung mit dem vorgestellten Partikelmodell kommt in drei verschiedenen Konfigurationen zur Anwendung. Zum Einen handelt es sich um eine detailliert vermessene Jetflamme, d.h. eines Brennstoff-/Luftstrahls in ruhende Umgebungsluft. Ein weiterer Anwendungsfall einer Brennkammer wird für die FLOX[®]-Verbrennung vorgestellt. Dieses Konzept ermöglicht die Verbrennung auf einem sehr gleichmäßigen und niedrigen Temperaturniveau durch eine optimale Vermischung und Ausnutzung chemischer Nichtgleichgewichtseffekte. Ein dritter Anwendungsfall wird anhand der Synthesegasverbrennung vorgestellt. Hierbei wird ein Brennstoffgemisch aus H₂ und CO in einer Diffusionsflamme umgesetzt. Das PEUL+-Modell steht aber als eigenständiges Modul für den Anwender zur Verfügung und kann ggf. ausgebaut werden. Anhand der folgenden Anwendungsfälle wird die Funktionsweise des Partikelmodells dargestellt und untersucht.

6.1 Die turbulente CH₄/H₂/N₂ - Diffusionsflamme

6.1.1 Experimenteller Aufbau

An einer nicht eingeschlossenen turbulenten Jet-Diffusionsflamme wurden Messungen am Institut für Verbrennungstechnik im DLR Stuttgart, der Universität Darmstadt sowie am Sandia Forschungszentrum in den USA durchgeführt. Der Brenner besteht aus einem vertikal verstellbaren inneren Rohr für die Brennstoffzuführung mit einem inneren Durchmesser von $d = 8\text{mm}$ und einem dazu koaxial geführten Luftstrom bei einem Austrittsdurchmesser von $D = 140\text{mm}$. Eingesetzte Siebe garantieren die Vergleichmäßigung des Luftmassenstromes. In der Konstruktion sind mehrere Pilotbrenner um das innere Rohr angeordnet, um ein Abheben der Flamme zu verhindern.

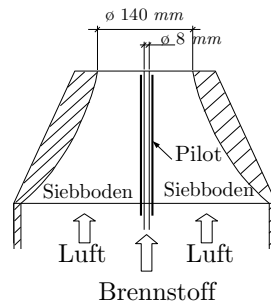


Abbildung 6.1: Schematische Darstellung des Diffusionsbrenners

Geschwindigkeitsmessungen wurden an der TU Darmstadt mit Hilfe eines Laser-Doppler-Velocimeters (LDV) entsprechend den Positionen der Messungen skalarer Größen sowie unmittelbar am Düsenaustritt von Schneider et al. [Sch03] durchgeführt. Bei Sandia erfolgten simultane Raman/Rayleigh/LIF Messungen von T , N_2 , O_2 , CO_2 , H_2O , H_2 , CO , OH sowie NO

mit einer räumlichen Auflösung von 0.75mm [MB00]. Planare Bildschnitte der Temperaturverteilung (mittels Rayleigh-Scattering) sowie *OH*-, *CH*- und *NO*-Verteilungen wurden im DLR Stuttgart von Bergmann et al. [Ber98] aufgenommen, welche Auskunft über die räumliche Struktur der Flamme ermöglichen. Das umfassende Datenmaterial ist unter <http://www.ca.sandia.gov/TNF/DataArch/DLRflames.html> im Internet zugänglich.

6.1.2 Betriebsbedingungen und numerische Simulation

Die Brennstoff-Luft-Zusammensetzung ist durch einen stoichiometrischen Mischungsbruch mit $z_{st}=0.167$ charakterisiert. Dieser Wert ist für die Berechnung nicht von Bedeutung. Für die weiteren Betriebsbedingungen sind nachfolgende Einstellungen gewählt, wobei experimentell zwei unterschiedliche Re-Zahlen realisiert wurden

Umgebungsdruck	[bar]	: $p = 0.953$
Eintrittstemperatur Luft	[K]	: $T_{air} = 292$
Eintrittstemperatur Brennstoff	[K]	: $T_{fuel} = 292$
Eintrittsgeschwindigkeit Luft	[m/s]	: $u_{air} = 0.3$
Eintrittsgeschwindigkeit Brennstoff	[m/s]	: $u_{fuel} = 42.2$ (Re = 15200)
	[m/s]	: $u_{fuel} = 63.2$ (Re = 22800)
Zusammensetzung Brennstoff	[Vol-%]	: $X_{CH_4} = 22.1, X_{H_2} = 33.2, X_{N_2} = 44.7$
Feuchtegehalt Luft	[Vol%]	: $X_{H_2O} = 0.8$

Diese Zusammensetzung resultiert in einen globalen Lambda-Wert von $\lambda = 0.7$, ohne die Berücksichtigung angesaugter Luftmengen aus der Umgebung des Jets, so dass nur die Massenströme des Brenners herangezogen werden. Der Feuchtegehalt der Luft wird in der Berechnung vernachlässigt und für die numerische Simulation die Flamme mit der niedrigeren Re-Zahl (Re = 15200) gewählt. Für die Einströmgeschwindigkeit des Brennstoffs darf nicht das Blockprofil der Geschwindigkeit von 42.2m/s angegeben werden, da die Strömung nicht durch die Brennstofflanze (s. Abb.6.1) berechnet wird. Bei einer Re-Zahl von ca. 15200 wird sich vielmehr das Profil einer turbulenten Rohrströmung ausbilden, für die gilt [Schl65]:

$$\frac{u}{u_{max}} = \left(\frac{r}{R} \right)^{1/n}, \quad r = R \quad \text{in Rohrmitte} \quad (6.1)$$

In [Schl65] ist der Exponent n in Abhängigkeit von der gegebenen Re-Zahl mit $n \approx 6.5$ angegeben. Die maximale Geschwindigkeit in der Rohrmitte kann aus

$$\frac{\bar{u}}{u_{max}} = \frac{2n^2}{(n+1)(2n+1)} \quad \text{mit} \quad \bar{u} = 42.2 \frac{m}{s} \quad (6.2)$$

berechnet werden. Das so berechnete Profil wird als Geschwindigkeitsrandbedingung vorgegeben. Bei der Wahl der Randbedingungen für die Turbulenzgrößen wird die turbulente Intensität I sowie ein turbulentes Längenmaß l gewählt. Beispielsweise kann für die Rohrströmung ein turbulentes Längenmaß mit

$$l = 0.07 L \quad (6.3)$$

abgeschätzt werden. L ist eine charakteristische Länge, die bei einem Rohr mit dem Durchmesser gegeben ist. Für $L = 8\text{mm}$ ergibt sich $l = 0.56\text{mm}$. Die turbulente Intensität kann mit ca. 10% abgeschätzt werden. Die Anordnung und Abmessungen für die Konfiguration 1) des Rechengebietes sind in Abb. 6.2 dargestellt. Es umfasst ein 1 Grad Segment eines rotations-symmetrisch angeordneten Gebietes. Die Darstellung erfolgt aus Platzgründen in horizontaler Lage. Trotz der zweidimensionalen Problemstellung wurde die dreidimensionale Anordnung gewählt, da das Partikelverfahren und die Kopplung des Chemielösers nur auf 3-D Geometrien anwendbar sind. Im Bereich des Brennstoff- und Lufteintritts ist das Gebiet fein aufgelöst. Mit zunehmendem Abstand von der Achse wird das Gitter immer gröber, die größten Zellen am Rand des Gebietes haben eine maximale Kantenlänge von ca. 10 mm.

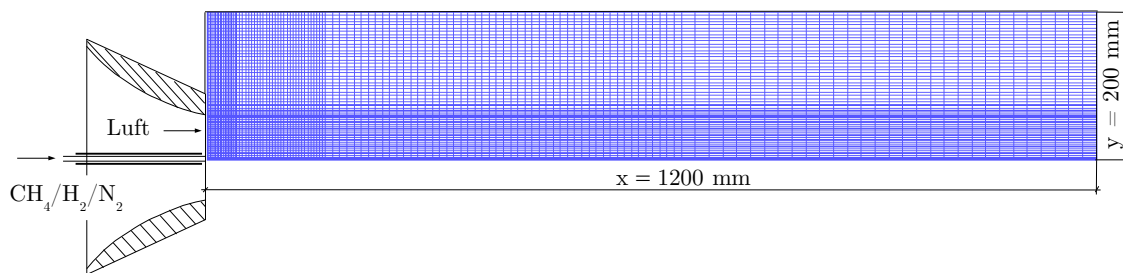


Abbildung 6.2: Anordnung und Abmessung des Rechnetzes für die Diffusionsflamme

Um das Rechengebiet festzulegen, wurden zunächst verschiedene Konfigurationen untersucht: In axialer Richtung entlang der Ausbreitungsrichtung des Jets wird das Gebiet bei $x = 1200\text{ mm}$ begrenzt und über eine Auslass-Druckrandbedingung spezifiziert. In radialer Richtung variieren die Längen von 1) $y = 200\text{ mm}$, 2) $y = 500\text{ mm}$, 3) $y = 1000\text{ mm}$ bis 4) $y = 3000\text{ mm}$, um den Einfluss der Umgebung auf den Jet zu untersuchen. Die Berechnungen zeigen, dass der Jet aufgrund der Größe des Gebietes unterschiedlich beeinflusst wird, jedoch der Einfluss auf den Strahl in allen Konfigurationen selbst gering ist und deshalb auf eine Ausdehnung von $y=200\text{ mm}$ zurückgegriffen wurde. Für die Berechnung des mittleren chemischen Quellterms wird der GRI2.11 Methanmechanismus mit 49 Spezies und 277 Gleichungen [Fre95] herangezogen, der eine komplexe NO_x -Kinetik enthält und für atmosphärische Bedingungen optimiert wurde. Die beschriebene Diffusionsflamme wurde ebenfalls von Kunz [Ku02] numerisch unter Anwendung eines PDF-Modells untersucht. In einer Variante dieses Modells hängt die mittlere Reaktionsrate nur vom Mischungsbruch z ab. Für seinen Mittelwert und seine Varianz wird entsprechend Abs. 4.2.4 je eine Transportgleichung gelöst. Die nichtlineare Mittelung beispielsweise über eine β -PDF ermöglicht dann die Bestimmung der mittleren Raten aus tabellierten chemischen Gleichgewichtszuständen.

6.1.3 Vorgehensweise für die Berechnung

Zu Beginn der Rechnung wird zunächst die Strömung des eindringenden Brennstoffstrahles sowie der Verbrennungsluft ohne chemische Reaktionen berechnet. Als Randbedingungen für die Simulation wurden die in Abs. 6.1.2. definierten Bedingungen gewählt. Als Turbulenzmodell kommen das realizable k - ϵ -Modell [LS72] als auch das k - ω Modell [Wil93] zum Einsatz. Nachdem die kalte Strömung berechnet ist, wird in einem definierten Bereich über dem Brenner die Zündung der Mischung initiiert: die Temperatur der Mischung entlang der Achse bei $x_{ign} = 0 - 20\text{ mm}$ sowie in radialer Richtung bei $y_{ign} = 0 - 20\text{ mm}$ wird einmalig mit einem Wert von $T_{ign} = 1500\text{K}$ beaufschlagt. Die chemischen Reaktionen werden dadurch

in Gang gesetzt und die Flamme breitet sich in axialer Richtung aus. Für diese Berechnung wird zunächst der Einfluss der Turbulenz auf den chemischen Quellterm nicht berücksichtigt und die Reaktionsraten aus den mittleren Größen des Strömungsfeldes berechnet. Im nächsten Schritt werden Partikel entsprechend der Massenströme aus den Einlässen für Brennstoff und Luft gestartet. Im Gegensatz zu einer räumlich abgeschlossenen Brennkammer ist das Gebiet um den Jet nicht durch eine feste Wand begrenzt. Hier ist es sinnvoll und auch notwendig ein anderes Kriterium für das Ende der Partikelverfolgung heranzuziehen. Das Kriterium wird in der Rechnung über räumliche Größen festgelegt: für $y \geq 74 \text{ mm} \geq d/2 + D/2$ sowie $x \geq 700 \text{ mm}$, was in etwa der beobachteten Flammenausdehnung entspricht, verlassen die Partikel das Rechengebiet. Weiterhin werden Partikel nur aus den beiden Einlässen für den Brennstoff sowie die Verbrennungsluft gestartet. Einflüsse aus der unmittelbaren Umgebung des Jets werden dabei nicht berücksichtigt. Die Anzahl initialisierter Partikel beträgt 100.000. Pro Sekunde werden 50.000.000 Partikel gestartet, davon im Brennstoffstrom ca. 14.280.000, im Luftstrom 35.720.000. Das entspricht bei einem Zeitschritt von $1 \cdot 10^{-6}$ Sekunden ca. 1.4 Partikel im Brennstoff- sowie ca. 3.6 Partikel im Luftenlass. Partikel werden nur aus den beiden Einlässen gestartet, so dass der Einfluss der Umgebungsluft nicht mit Partikeln simuliert wird.

6.1.4 Ergebnisse der numerischen Simulation

Zur Charakterisierung der Strömungsverhältnisse sind in Abb. 6.3 die gemessenen und berechneten Axialgeschwindigkeitsprofile in verschiedenen Höhen über dem Brenner dargestellt. Nur in unmittelbarer Nähe von $x/d = 5$ sowie in einem größeren Abstand bei $x/d = 80$ stimmen berechnete und gemessene Profile in etwa überein. Ansonsten werden die gemessenen Werte nur schlecht erreicht. Der Grund hierfür kann zum einen im errechneten Profil der ausgebildeten Rohrströmung liegen. Da in unmittelbarer Nähe bei $x/d = 0.125$ (in Abb. 6.3 nicht dargestellt) die Profile noch sehr gut übereinstimmen, können weitere Gründe für die Abweichung im Turbulenzmodell oder auch im Verbrennungsmodell liegen. Desweiteren ist die Wahl der Randbedingungen eine mögliche Ursache. Mit dem realizable $k-\varepsilon$ Modell wird ein sehr einfaches Modell herangezogen, das den anisotropen Charakter in der Scherschicht des Jets nicht erfasst. Der Austausch in radialer Richtung (Expansion des Jets) wird zu stark simuliert, was zu einem Abbau der axialen Komponente im Brennstoffstrahl führt. Aus Kontinuitätsgründen steigt die Geschwindigkeit im Luftstrahl an. Bei $r/d = 0.5$ für $x/d = 0$ treffen Brennstoff und Luft aufeinander. Mit zunehmender Höhe verändert sich diese Grenze. Alternativ wurden Berechnungen mit dem $k-\omega$ Modell von Wilcox [Wil93] durchgeführt. Der Vergleich mit den experimentellen Daten erfolgt in Abb. 6.3. Sowohl $k-\varepsilon$ als auch $k-\omega$ liefern sehr ähnliche Ergebnisse. Ein wesentlicher Unterschied besteht jedoch darin, dass beim $k-\omega$ Modell, die Geschwindigkeit des Jets weniger stark in radialer Richtung abgebaut wird. In Kunz [Ku02] wird an Stelle des $k-\varepsilon$ Modells das RSM für den 2-D Fall benutzt. Eine Verbesserung wird dabei nicht erreicht. Für die 3-D Konfiguration der vorliegenden Arbeit konnte mit dem RSM keine konvergierte Lösung erhalten werden.

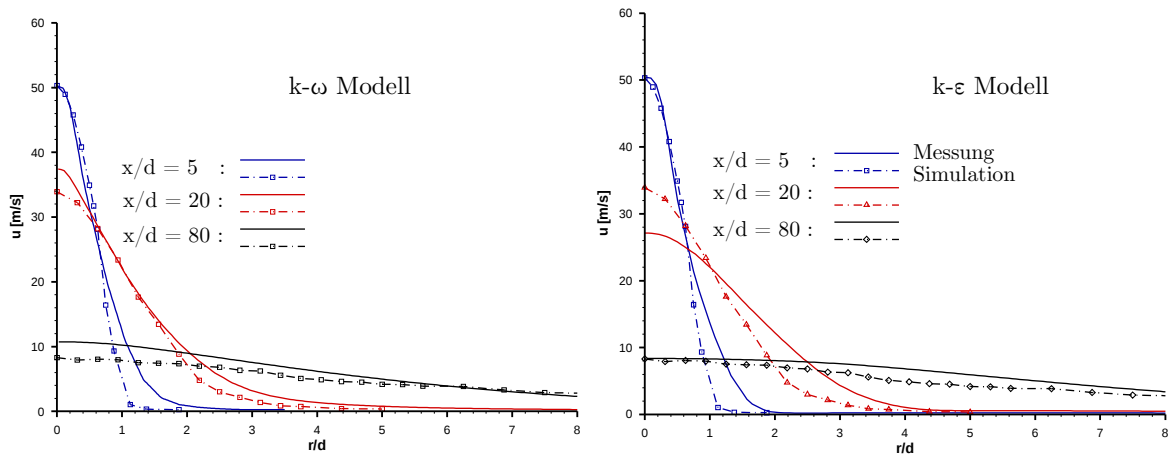


Abbildung 6.3: Vergleich gemessener und berechneter Axialgeschwindigkeiten in unterschiedlichen Höhen über dem Brenner mit $k-\omega$ sowie $k-\epsilon$ Turbulenzmodell

In der Berechnung zeigte sich, dass die Lösung stark von der Wahl der Randbedingungen des Turbulenzmodells abhängt. Während beim $k-\omega$ Modell das turbulente Längenmaß im Brennstoff- als auch im Lufterlass mit 0.4 mm abgeschätzt wurde, musste im $k-\epsilon$ Modell das Längenmaß auf 0.05 mm gesetzt werden, um die in Abb. 6.3 dargestellten Verläufe zu erhalten. Ein turbulentes Längenmaß von $l_t = 0.56$ mm im $k-\epsilon$ Modell führt bei $x/d = 20$ zu einer Axialgeschwindigkeit von ca. 15m/s auf der Mittelachse und liegt damit deutlich unter den gemessenen Werten. Im Vergleich mit den gemessenen Profilen konnte die Randbedingung so eingestellt werden, dass Messung und Simulation gut übereinstimmen. Das mit Gl.(6.3) angegebene Längenmaß liefert dagegen stark abweichende Ergebnisse. Der Einfluss von l ist sehr groß. Da l aus Messungen nicht bekannt ist, ist die vorgenommene Anpassung erforderlich. Abb. 6.4 zeigt die qualitative Ergebnisse der Berechnung thermochemischer Größen wie der Temperatur und ausgewählter Speziesmolenbrüche.

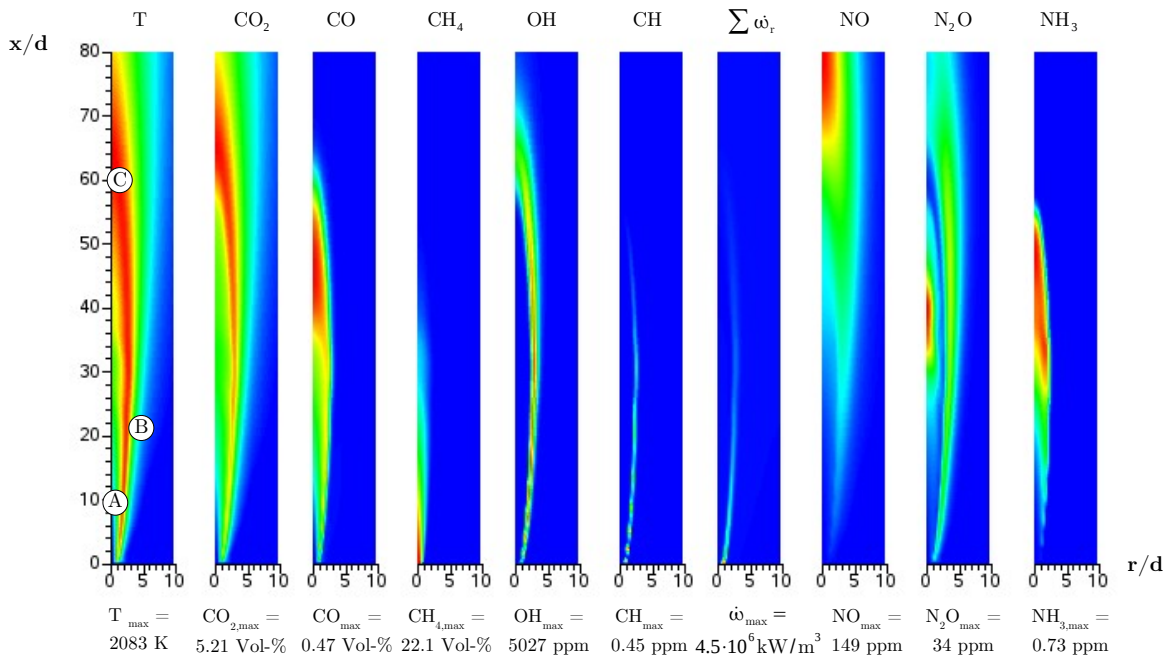


Abbildung 6.4: Mittlere Temperatur- und Speziesverteilung sowie deren Maximalwerte in der Diffusionsflamme mit PEUL+ - Modell, vertikale und horizontale Längen in mm

In Abb. 6.4 ist der Energiebetrag der Wärmefreisetzung $\Sigma\omega_r$ aufgrund chemischer Reaktionen dargestellt und markiert damit die Hauptreaktionszone, in der sich der Brennstoff mit der vorbeiströmenden Luft umsetzt. Der maximale Wert von ca. $4.5 \cdot 10^6$ kW/m³ befindet sich unmittelbar am Brenneraustritt. Ein Indikator für die Position der Reaktionszone kann mit der CH Konzentration angegeben werden. Die CH Konzentration ist in Gebieten hoher Wärmefreisetzung am stärksten. Bedingt durch hohe Temperaturen setzt die NO Bildung erst im oberen Teil der Flamme ein und hat dort ihr Maximum. Die Konzentrationen von N₂O sowie NH₃ sind sehr gering, zeigen aber ihr Vorhandensein an. Im Gegensatz zu N₂O wird NH₃ nach der Entstehung auch wieder vollständig abgebaut. Die Flamme setzt direkt am Brenneraustritt auf. Dies wurde auch im Experiment so beobachtet. Eine weitere Erhöhung der Re-Zahl führte letztlich zum Verlöschen der Flamme [Tel07]. Die hohe Reaktivität und die damit verbundene Zündung am Brenneraustritt ist durch den hohen Wasserstoffanteil gegeben. Abb. 6.5 zeigt die Entwicklung errechneter Konzentrationen in verschiedenen Höhen über dem Brenner. Einzelne Radikale wie O, H oder Zwischenprodukte wie CH₂O und CH₃ sind durch sehr geringe Konzentrationen gekennzeichnet. Gleiches gilt für NO und NO₂. Während sich NO₂ mit steigendem x/d Verhältnis nur wenig verändert nimmt der Anteil an NO zu. Der gesamte Brennstoff ist bei $x/d = 60$ fast vollständig umgesetzt. Ein Rest von H₂ ist noch zu erkennen. Dabei kann es sich jedoch auch um ein Zwischenprodukt aus der Methanverbrennung handeln. Geringe Mengen von O₂ im Bereich der Mittelachse sind bei $x/d = 20$ zu erkennen, verschwinden jedoch mit zunehmendem x/d -Verhältnis. Im Experiment wurden dort keine Sauerstoffkonzentrationen gemessen.

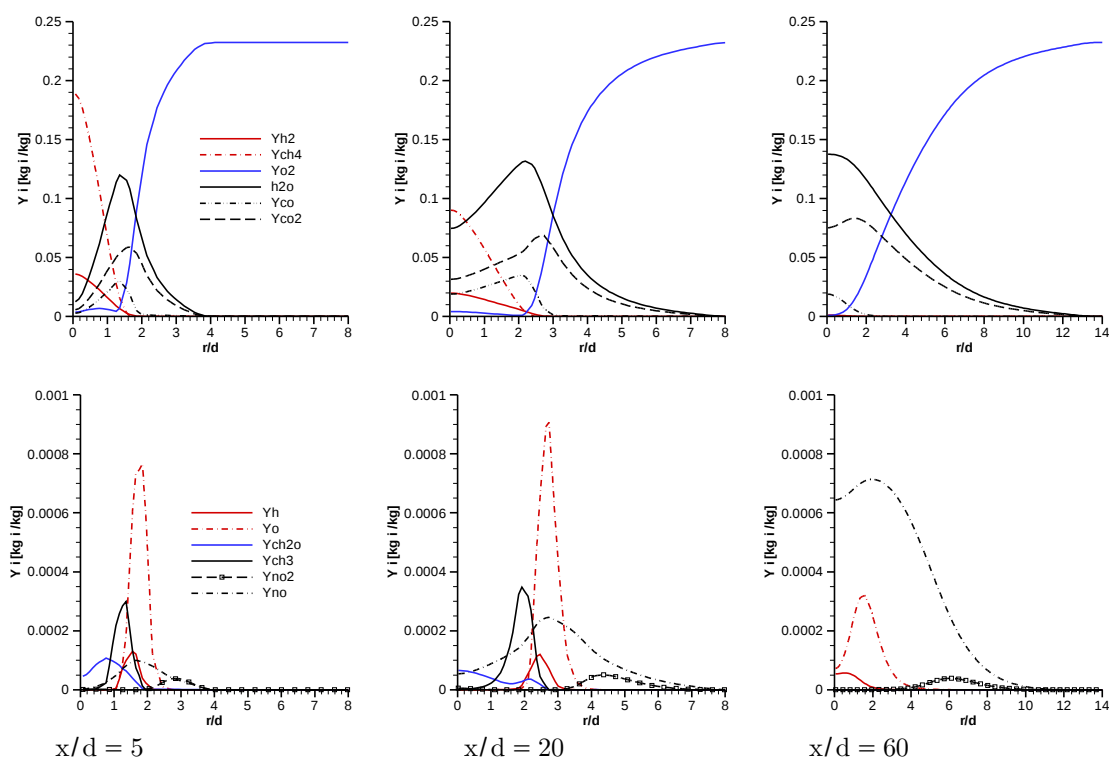


Abbildung 6.5: Verläufe berechneter Speziesmassenbrüche in verschiedenen Höhen über dem Brenner

Ein Vergleich zwischen gemessenen Temperaturen und der Simulation ist in Abb. 6.6 dargestellt. Der qualitative Verlauf wird gut abgebildet. Auffällig hierbei ist jedoch die räumliche Verschiebung zwischen den gemessenen und berechneten Profilen, wobei sich die Maximalwerte der Rechnung bis zur Messebene $x/d = 60$ bei einem größeren r/d Verhältnis

einstellen. Im oberen Teil der Flamme liegt das Maximum der mittleren Größen im Bereich der Mittelachse. Auch hier liegen Rechnung und Messung weit auseinander, was sich in einer zu hohen Temperatur mit einer Differenz bis zu 400 K äußert. Die Ursache für die im Mittel zu hoch berechneten Werte liegt in erster Linie an der Modellierung des chemischen Quellterms. Die Varianzen der Spezies und Temperatur sind im Modell gering und wirken sich auch in der Berechnung, wie an den Ergebnissen sichtbar, aus. Sehr wenige Partikel aus der umgebenden Luftströmung gelangen in die Verbrennungszone, so dass sie nicht zur Einmischung von kaltem Material beitragen und somit zu einer Reduktion der mittleren Flammentemperatur führt. An den Einzelmessungen wird dieser Effekt sichtbar, wie am RMS Wert für die Temperatur in Abb. 6.8 zu erkennen ist.

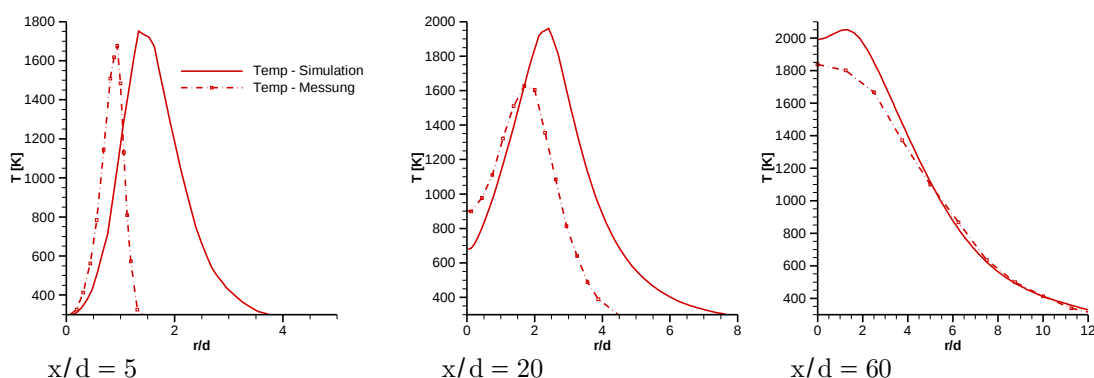


Abbildung 6.6: Gemessene und mit PEUL+ berechnete Temperaturverläufe bei $x/d = 5, 20$ und 60

Einen weiteren Einfluss hat aber auch die Modellierung der turbulenten Mischung mit Hilfe des Turbulenzmodells, welches sich auch auf den turbulenten Transport von Spezies- und Energieflüssen auswirkt. Die mittleren Spezieskonzentrationen als auch die innere Energie der Eulerlösung werden mit einem Gradientenansatz aus Gl.(3.34) modelliert, der die Anisotropie des Spannungstensor nicht berücksichtigt. Da sie wichtige Eingangsgrößen für das IEM-Modell darstellen, ist in ihnen bereits ein erster Modellierungsansatz enthalten. Die räumliche Verschiebung im unteren Bereich der Flamme sowohl für die Spezies- als auch die Temperaturverteilung kann unterschiedliche Ursachen haben: Randbedingungen am Brenneraustritt, isotrope Turbulenz im $k-\epsilon$ Modell sowie das Verbrennungsmodell selbst. In einer Diffusionsflamme können lokal stöchiometrische Gebiete auftreten, der Brennstoff wird dann mit der verfügbaren Luft nahezu vollständig umgesetzt. Dort treten auch Temperaturmaxima auf, wenn die Reaktionspartner ausreichend Zeit zur Reaktion haben. Unter diesen idealen Bedingungen stellt sich die maximale Temperatur bei $T = 2128\text{K}$ ein. Durch Turbulenz (z.B. durch die Einmischung kalter Luft oder bereits verbrannter Abgase) wird von diesem Zustand immer wieder abgewichen, was zu einer Absenkung des Temperaturniveaus durch die veränderte stoffliche sowie energetische Zusammensetzung führt. Da der Brennstoff neben Methan auch einen Anteil an Wasserstoff beinhaltet, kann unter Berücksichtigung der chemischen Kinetik die Umsetzung von H_2 sowie CH_4 unterschiedlich schnell ablaufen. In Abb. 6.7 sind die Verläufe der Massenbrüche aus berechneten und gemessenen Größen dargestellt.

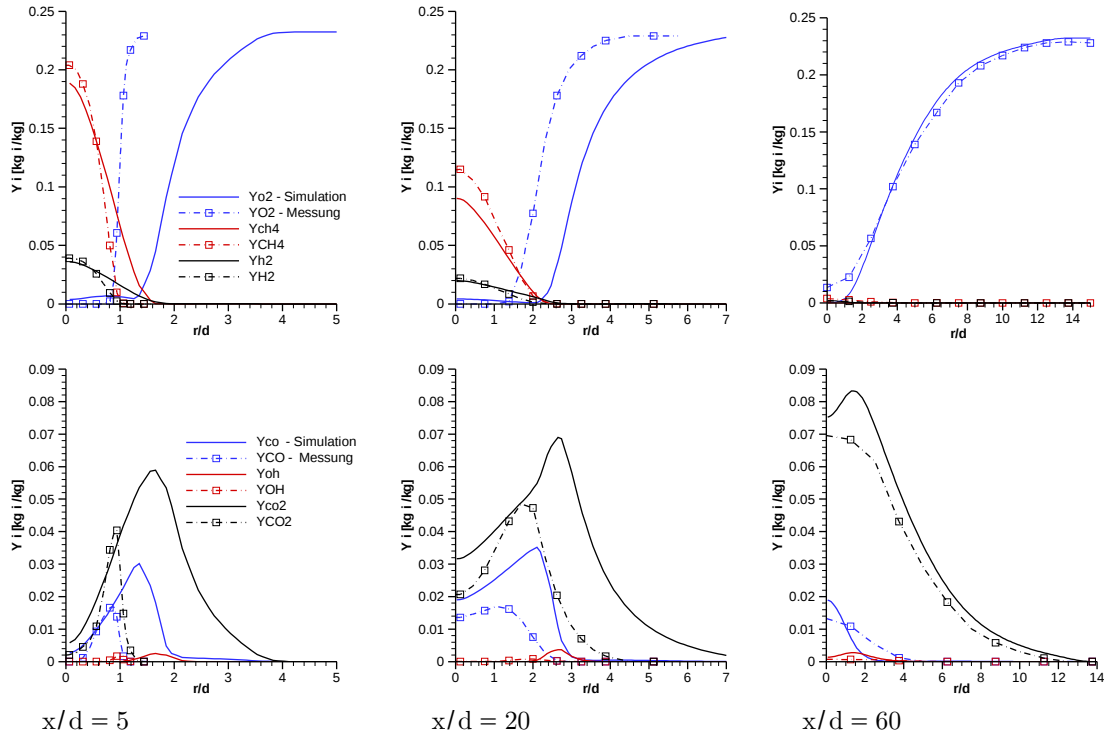


Abbildung 6.7: Gemessene und mit PEUL+ berechnete Speziesmassenbrüche bei $x/d = 5, 20$ und 60

Auch hier stimmen die qualitativen Verläufe überein. Quantitativ liegen Messung und Rechnung jedoch weit auseinander. Die Lage der Maxima verschiebt sich entsprechend denen der Temperaturprofile. Besonders deutlich ist dies am Verlauf von CO und CO₂ zu erkennen, da sie sich ähnlich mit der Temperatur verhalten. Mit Hilfe der Speziesprofile ist bereits bei $x/d = 5$ zu erkennen, dass bei der Messung Brennstoff und Luft stärkere räumliche Gradienten im Vergleich zur Simulation aufzeigen. Für die Simulation folgt daraus die Verschiebung der Reaktionszone in Richtung eines größeren r/d -Verhältnisses. Die Reaktionen werden demnach in der Simulation stark verzögert. Eine mögliche Ursache liegt in der bereits diskutierten Berechnung der turbulenten Mischung begründet, wobei der starke turbulente Austausch über die Scherschicht nicht erfasst wird. In den Einzelpulsmessungen sind nur selten Temperaturen mit $T > 2100\text{K}$ vorzufinden. Die Fluktuationen sind aber lt. experimentellen Daten sehr groß. Die mittleren Temperaturen in den verschiedenen Messebenen liegen deutlich unter den dort gemessenen Maximalwerten der Einzelmessungen. Unmittelbar aus den Partikelgrößen können die Fluktuationen direkt berechnet werden. Für die RMS-Werte der Temperatur sowie der Speziesmassenanteile gilt

$$\sigma_T = \sqrt{\frac{1}{\sum_{m=1}^M P} \sum_{m=1}^M \sum_{p=1}^P (\tilde{T} - T^{p,m})^2}, \quad \sigma_{Y_k} = \sqrt{\frac{1}{\sum_{m=1}^M P} \sum_{m=1}^M \sum_{p=1}^P (\tilde{Y}_k - Y_k^{p,m})^2} \quad (6.4)$$

P kennzeichnet die Anzahl der Partikel pro Zeitschritt in einer Zelle, M gibt die Anzahl der ausgewerteten Zeitschritte an. Der Vergleich der RMS-Werte aus den Einzelmessungen sowie den Partikeln für die Temperaturfluktuationen ist in Abb. 6.8 dargestellt.

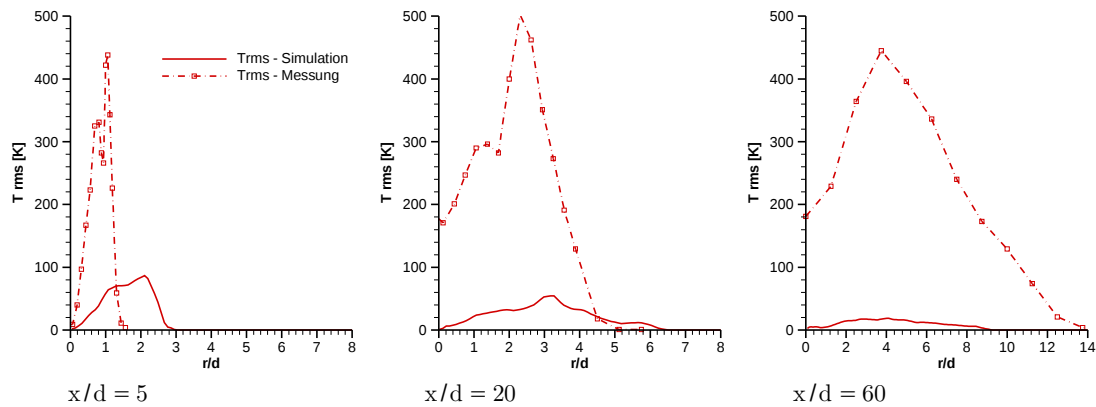


Abbildung 6.8: RMS-Werte der Temperatur in verschiedenen Höhen über dem Brenner

Es zeigt sich, dass die berechneten Schwankungen im Vergleich zu den gemessenen sehr gering sind. Dies erklärt auch die starken Abweichungen in den Mittelwerten zwischen Messung und den errechneten Größen in Abb. 6.6. Im Bereich der Mittelachse, d.h. im Zentrum des Jets werden Schwankungen mit dem PEUL+-Modell nicht wiedergegeben. Auch bei einem größeren r/d -Verhältnis an der Grenze zur Umgebung des Jets bleiben die Fluktuationen in der Simulation sehr niedrig. Ursache kann in der Vernachlässigung von Partikeln aus der Umgebungsluft des Jets liegen. Für die OH Konzentrationen fällt für die Simulation der Vergleich auf den ersten Blick etwas positiver aus (Abb. 6.9).

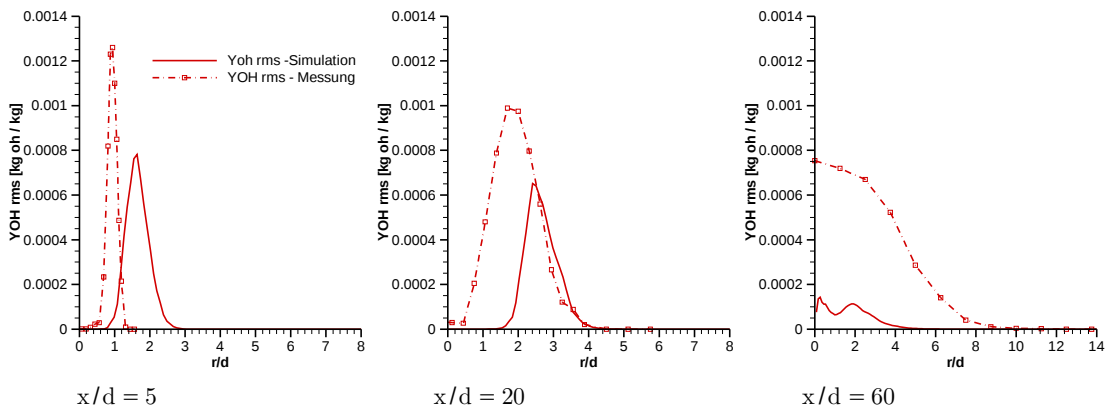


Abbildung 6.9: RMS-Werte des OH Massenanteils in verschiedenen Höhen über dem Brenner

Während sich die Temperaturfluktuationen im Maximum bis um den Faktor 20 unterscheiden, unterscheiden sich die OH Massenanteile der Schwankungen nur um den Faktor 4-5. Die niedrigen OH Konzentrationen wirken sich nicht auf die Temperatur der Mischung lt. Gl.(2.50) aus. Beim Vergleich der CH_4 -Fluktuationen werden im Bereich der Mittelachse ebenfalls keine Fluktuationen berechnet. Bei $x/d = 60$ werden überhaupt keine Fluktuationen in der Simulation registriert, da der Brennstoff bereits vollständig umgesetzt ist. Auch hier kann die Einmischung kalter Gase aus der Umgebung für eine RMS-Wert ungleich Null verantwortlich sein, der sich in der Rechnung nicht widerspiegelt. Zu wenige Partikel aus der Umgebung gelangen im oberen Teil der Flamme in die Reaktionszone, da diese bei der Definition der Randbedingungen nicht berücksichtigt wurden.

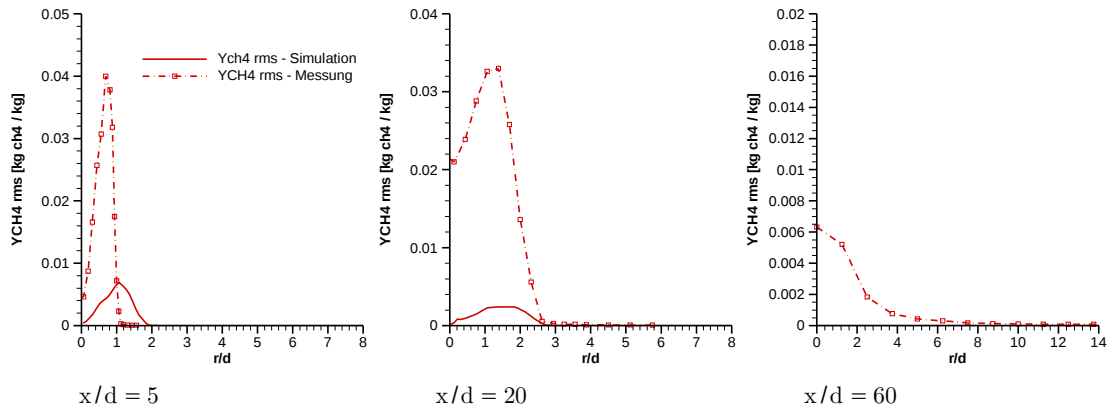


Abbildung 6.10: RMS-Werte des CH_4 Massenanteils in verschiedenen Höhen über dem Brenner

Anhand der PDF der Partikel wird der Unterschied noch stärker deutlich. An drei verschiedenen Positionen wurde die PDF der Partikel konstruiert. Ein erster Punkt A befindet sich in der Nähe des Brenners bei $x/d = 5$ im Brennstoffstrahl. Punkt B liegt in der Grenzschicht zwischen Umgebungsluft und äußerer Flammenfront. Ein weiterer Punkt C liegt in der Nähe der Mittelachse in großem Abstand vom Brenner bei $x/d = 60$. Die Lage aller Punkte ist in Abb. 6.4 angegeben. Mit dem Partikelverfahren wird die PDF generiert und muss nicht angenommen werden. Ihre Form hängt von der Bewegung der Partikel und in großem Maß von der Modellierung der turbulenten Mischung ab. Für die Konstruktion der PDF wurden Partikel über einen Zeitraum von $1 \cdot 10^{-4}$ Sekunden ausgewertet. Dabei wurden in den einzelnen Punkten zwischen 5000 und 8000 Partikel betrachtet. Für die Auswertung werden die Partikel über einen Wertebereich in zuvor definierten Größenklassen $\Delta \Phi_{bin}$ sortiert. Es ist zu erkennen, dass sich die PDF um den Mittelwert der Eulerschen Lösung bildet und sich dort die größte Anzahl aller betrachteten Partikel befindet. Es werden sehr große Schwankungen registriert, jedoch ist deren Eintreffen nur von geringer Bedeutung, so dass sie für die Mittelwertberechnung kein Gewicht haben. Die Verteilung ist sehr schmal. Aufgrund der Annahme gleicher Prandtl- sowie Schmidt-Zahl ist die Form der PDF für die Temperatur als auch aller Spezies identisch. Abb.6.11 zeigt die PDF der Temperatur sowie der Massenanteile von H_2O und OH -Konzentration für Punkt A (s. Abb. 6.5). Die Temperatur schwankt über einen Bereich von $\Delta T \approx 600 \text{ K}$, wobei jedoch nur ein kleiner Bereich von $\Delta T \approx 150 \text{ K}$ die meisten Ereignisse aufweist (s. Abb.6.11). Ähnliches gilt für die Spezieszusammensetzung.

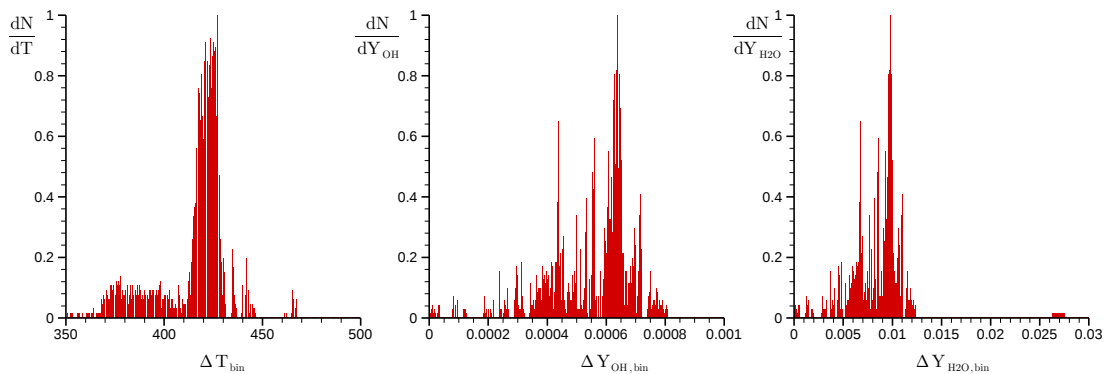


Abbildung 6.11: PDF der Temperatur, OH - und H_2O Massenanteile in Punkt A von Abb. 6.4

Die maximalen und minimalen Werte der Partikel im betrachteten Zeitintervall sowie der zeitliche Mittelwert des Gasfeldes aller untersuchten Punkte sind in nachfolgender Tabelle zusammengefasst. Da die Massenanteile von OH sehr gering sind, wird hier die molare Konzentration in ppm angegeben.

Ort	A	B	C
Temperatur [K]			
\bar{T}	1461	1081	2042
Min	1103	939	2011
Max	1744	1250	2059
OH-Molanteil [ppm]			
\bar{X}_{OH}	62.5	79.4	2760.0
Min	3.10	11.2	1550.0
Max	434.0	178.0	3370.0
H ₂ O-Massenanteil [kg _{H2O} /kg]			
\bar{Y}_{H_2O}	$8.30 \cdot 10^{-02}$	$5.04 \cdot 10^{-02}$	0.134
Min	$6.48 \cdot 10^{-02}$	$4.09 \cdot 10^{-02}$	0.129
Max	0.105	$6.10 \cdot 10^{-02}$	0.137

In Abb. 6.12 ist die PDF im Punkt C dargestellt. Es ist deutlich zu erkennen, dass die Verteilung nicht symmetrisch um den Mittelwert verläuft und eine schiefe Verteilung vorliegt. Das deutet darauf hin, dass relativ große Schwankungen den Mittelwert dominieren und sich demnach Partikel von unterschiedlichen Orten dem betrachteten Punkt nähern. Die Partikel kommen dann vorzugsweise aus einer bestimmten Richtung, zu der die Gradienten sehr groß sind. Die Breite der Verteilung ist allerdings sehr gering. Im Mittel sehr hohe Temperaturen (bis 300K s. Abb. 6.6) im Vergleich zur Messung sind die Folge.

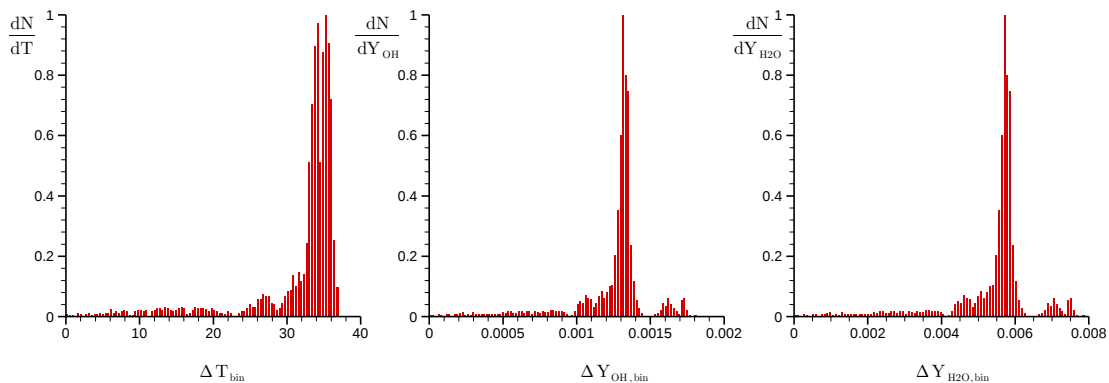


Abbildung 6.12: PDF der Temperatur, OH- und H₂O Massenanteile in Punkt C von Abb.6.4

Ein ähnliches Bild stellt sich auch im Punkt B dar. Die Schwankungen gruppieren sich für die Temperatur in einem Bereich von bis zu 250 K (Abb. 6.13). Eine deutlicher Peak ist nur für einem sehr kleinen Bereich zu erkennen, welcher in der Nähe des Eulerschen Mittelwertes zu finden ist. Die Auswertung der PDF in allen Punkten (A-C) zeigt, dass die Verteilung mit Hilfe des Partikelmodells nicht ausreichend abgebildet werden kann.

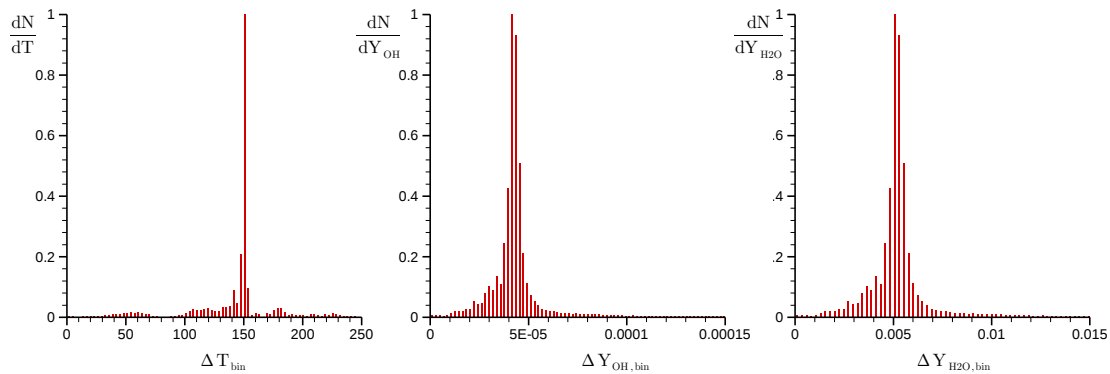


Abbildung 6.13: PDF der Temperatur, OH- und H₂O Massenanteile in Punkt B von Abb.6.4

Mit den Partikeln gelingt keine ausreichende Modellierung des mittleren chemischen Quellterms. Die erhoffte Verbesserung der Einmischung von Partikeln verschiedener Zusammensetzung über die Partikeltrajektorien wurde nicht erreicht. Dies äußert sich daran, dass im Bereich der Scherschicht zu wenig Partikel in den Brennstoffstrahl bzw. in den Luftstrahl transportiert werden. Die Modellierung der turbulenten Mischung mit Hilfe des IEM-Modells bestimmt die Breite der Verteilung, die wie anhand der RMS-Werte als auch der PDF zu erkennen ist, eine sehr geringe Breite aufweist. Grund hierfür ist die turbulente Mischung mit Hilfe des IEM-Modells. Eine Anpassung der Konstanten C_{iem} wurde nicht vorgenommen. Aufgrund der Rechnerkapazität bleibt die Anzahl der Partikel jedoch sehr beschränkt. Der Einfluss der Erhöhung der Partikelzahl wurde nicht untersucht. Um dies mit einem vertretbaren Aufwand zu realisieren, ist eine Parallelisierung des Partikelmodells notwendig.

6.2 Die FLOX[®]-Verbrennung

6.2.1 Das Konzept der FLOX[®]-Verbrennung

FLOX[®] ist ein registriertes Produkt der WS Wärmeprozessstechnik [WW97] und steht für **Flameless Oxidation** (Flammenlose Oxidation). Dieser Begriff wurde gewählt, da visuell keine ausgeprägte Flamme zu erkennen ist. Durch die gleichmäßige Temperaturverteilung im gesamten Brennraum findet z.B. Rußbildung, die ein typisches gelbes Leuchten verursacht, nicht statt. Experimentelle Untersuchungen am Brenner im DLR sind hinsichtlich des Betriebsverhaltens unter hohen Drücken ($p = 20 - 30$ bar) von Lückcrath et al. [Lü05] sowie Meier et al. [Mei00] durchgeführt worden. Das Verbrennungsverhalten ist auch bei geringen Luft-Brennstoff Verhältnissen noch gut. Durch die Vermeidung von Temperaturspitzen ist das Konzept von FLOX[®] bezüglich niedriger NO_x Emissionen sehr vorteilhaft.

6.2.2 Experimenteller Aufbau

Brenner und Brennraum sind durch eine sehr einfache Geometrie gekennzeichnet, die in Abb. 6.14 dargestellt ist. Eine Verdrallung der Massenströme durch konstruktive Einbauten ist nicht erforderlich. Die Ausbildung eines großen inneren Rezirkulationsgebietes ermöglicht eine gute Durchmischung bei hohen mittleren Verweilzeiten.

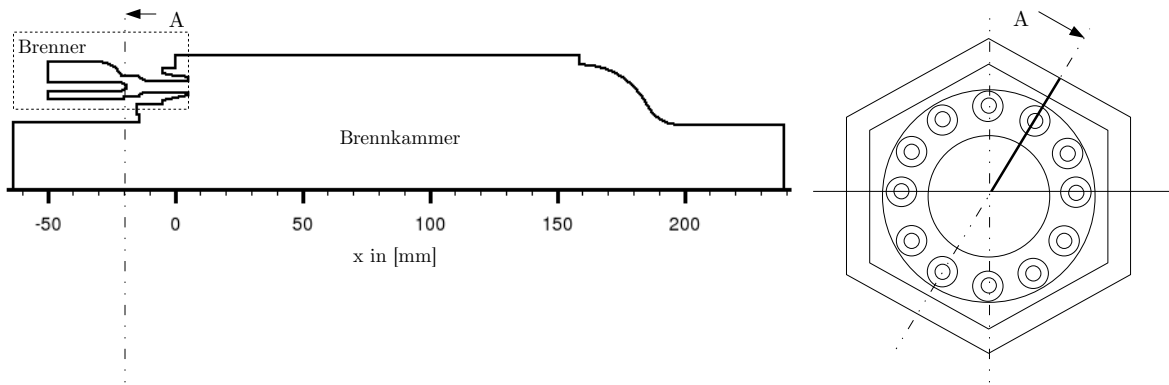


Abbildung 6.14: Schnitt durch Brenner und Brennkammer (links), Querschnitt des Brenners (rechts)

Luft- und Brennstoffzufuhr erfolgen separat. Der Luftstrom teilt sich auf zwei Einlässe auf, wobei der Hauptmassenstrom (ca. 97.3 Prozent) über den Brenner zugeführt wird. Der andere Teil wird unterhalb des Brenners innerhalb des Rückstromgebietes zugeführt und dient vorwiegend dem Zweck der Kühlung. Die Mischung innerhalb des Brenners erfolgt nicht vollständig, so dass chemische Reaktionen in Kombination mit den hohen Strömungsgeschwindigkeiten in der Düse nicht stattfinden können. Die maximale Methankonzentration am Eintritt in die Brennkammer liegt dann bei ca. 17 Vol-%. Die Expansion in der Brennkammer erzeugt Scherschichten um den eintretenden Brennstoff/Luft-Strahl, was zu einem erhöhten Queraustausch führt und wichtig für den Grad der Durchmischung ist. Ein stark ausgeprägtes inneres sowie äußeres Rezirkulationsgebiet transportiert permanent heißes Material in den relativ kalten teils vorgemischten Eintrittsjet. In Abb. 6.15 ist dieser Prozess schematisch dargestellt.

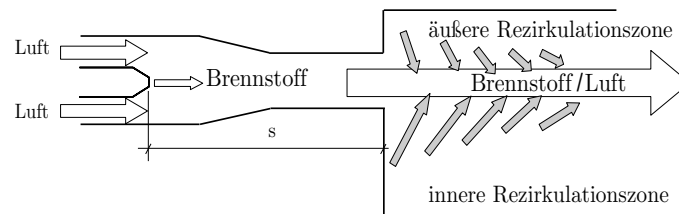


Abbildung 6.15: Darstellung der Mischung im FLOX® Brenner

Die Geschwindigkeit der Axialkomponente und ausgewählte Stromlinien aus der Simulation sind in Abb. 6.16 gezeigt. Die beiden Rezirkulationsgebiete sind deutlich zu erkennen. Die hohen Geschwindigkeiten des eintretenden Strahls werden in der Brennkammer abgebaut.

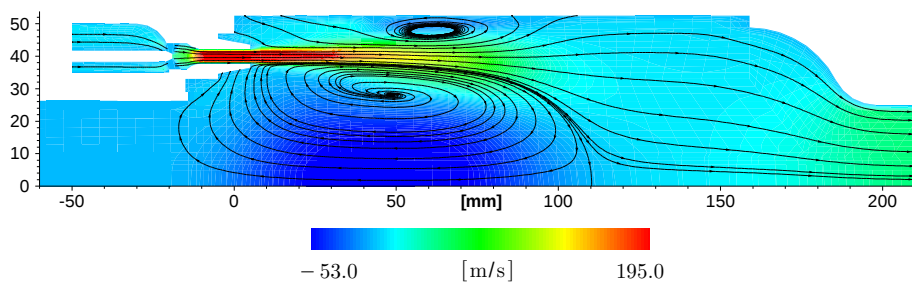


Abbildung 6.16: Axiales Geschwindigkeitsfeld mit Stromlinien im FLOX® Brenner

Kinetische Effekte der Verbrennung spielen dadurch in dieser Anwendung eine wichtige Rolle. Entlang der Einmischstrecke s innerhalb des Brenners finden keine Reaktionen statt, was durch das Verbrennungsmodell zu berücksichtigen ist. Verbrennungsmodelle, die chemisches Gleichgewicht zu Grunde legen, das aus dem Transport des Mischungsbruch abgeleitet wird (s. Abs. 4.2.4), führen schon zu chemischen Reaktionen in der Düse. Lokale Temperaturspitzen sind die Folge und es ist ein Anstieg der NO_x Konzentrationen zu erwarten. Auch ein Ansatz über das chemischen Gleichgewichts mittels Mischungsbruch und Varianz kann für diese Anwendung nicht herangezogen werden. Ein Verbrennungsmodell, dass die chemische Kinetik berücksichtigt, ist neben dem PEUL+-Modell mit dem PaSR-Modell (s. Abs. 4.2.3) gegeben.

6.2.3 Betriebsbedingungen und numerische Simulation

Für die Anwendung des PEUL+-Modells soll nur ein spezifischer Betriebszustand berechnet werden. Das globale Verhältnis von Luft und Brennstoff beträgt $\lambda = 2.16$. Weitere Betriebsbedingungen sind wie folgt gegeben

Umgebungsdruck	[bar]	: $p = 20.0$
Eintrittstemperatur Luft	[K]	: $T_{air} = 721$
Eintrittstemperatur Brennstoff	[K]	: $T_{fuel} = 352$
Gesamtmassenstrom Luft	[kg/s]	: $\dot{m}_{air} = 3.02 \cdot 10^{-1}$
Gesamtmassenstrom Brennstoff	[kg/s]	: $\dot{m}_{fuel} = 8.33 \cdot 10^{-3}$
Zusammensetzung Brennstoff	[Vol-%]	: $X_{\text{CH}_4} = 97.88, X_{\text{C}_2\text{H}_6} = 0.76$ $X_{\text{C}_3\text{H}_8} = 0.37, X_{\text{CO}_2} = 0.06, X_{\text{N}_2} = 0.9$

Für die Berechnung wird ein 15 Grad-Segment gewählt und die Brennkammergeometrie mit einem runden Querschnitt approximiert. Da es sich nicht um eine verdrallte Strömung handelt, können symmetrische Randbedingungen um eine Achse angegeben werden. Das Rechengitter ist mit ca. 8500 Zellen sehr grob aufgelöst. Im Rahmen eines EU-Projektes wurde die Konfiguration mit dem PaSR-Modell bereits von Schütz berechnet und die Ergebnisse in [Sch06] veröffentlicht. Die Rechnungen zeigen mit den experimentellen Daten eine sehr gute Übereinstimmung. Die Mittelwerte der NO-Emissionen konnten mit 1.6 ppm bezogen auf 15 Vol-% O_2 am Austritt der Brennkammer berechnet werden. Die experimentellen Daten ergeben eine NO-Konzentration von ca. 6.0 ppm. Mit einer Da-Zahl von $\text{Da} < 1$ fällt die Verbrennung in den Bereich des perfekt durchmischten Reaktors. Die Mischung ist im Vergleich zu den chemischen Reaktionen sehr schnell und die turbulente Rate wird von der Reaktionskinetik der Elementarreaktionen dominiert. Die Fluktuationen in der Scherschicht des eindringenden Luft/Brennstoff-Strahls am Rand des inneren und äußeren Rezirkulationsgebietes sind durch die hohen Geschwindigkeiten im Jet vernachlässigbar und müssen im Verbrennungsmodell nicht berücksichtigt werden, da die hohen Schergeschwindigkeiten keine Zündung in diesem Gebiet zulassen. Anhand der experimentell bestimmten zeitabhängigen OH-LIF Aufnahmen sind innerhalb des eintretenden Luft/Brennstoffstrahls dennoch geringe Konzentrationen an OH-Radikalen zu erkennen, die in der RANS Simulation nicht erfasst werden können. Die Ursache ist der turbulente Austausch in der Scherschicht, der permanent Material in den kalten Eintrittsstrom bzw. kaltes Material in die heiße Rezirkulationszone transportiert. Diese Zonen werden z.B. mit dem PaSR Modell nicht erfasst, da die gesamten zeitlichen turbulenten

Schwankungen im Modell keine Berücksichtigung finden. Für die Berechnung des chemischen Quellterms wird auch hier der detaillierte GRI2.11 Methanmechanismus mit 49 Spezies und 277 Gleichungen [Fre95] herangezogen.

6.2.4 Vorgehensweise für die Berechnung

Die Berechnung mit dem PEUL+-Modell erfolgt ähnlich wie in Abschnitt 6.1.3 beschrieben. Zunächst wird die mittlere Reaktionsrate aus den Mittelwerten berechnet, die dann als Startlösung dient. Als Turbulenzmodell wird das $k-\varepsilon$ Modell verwendet und die turbulente Intensität sowie das turbulente Längenmaß im Eintritt festgelegt. Die turbulente Intensität wird mit 10 Prozent, das Längenmaß mit 1 mm abgeschätzt. Im nächsten Schritt werden Partikel entsprechend der Massenströme aus den Einlässen gestartet. Die Brennkammer bildet nun ein abgegrenztes Gebiet mit einem definierten Volumen. Das Ende einer Partikelverfolgung ist dann erreicht, wenn das Partikel das Gebiet wieder verlassen hat. Durch das Kollisionsmodell in der Partikelverfolgung sammeln sich Partikel nicht in Teilgebieten mit sehr geringer mittlerer Geschwindigkeit und geringen RMS-Werten an. Das Gebiet wird mit 100.000 Partikeln initialisiert. Im Einlass werden pro Sekunde 20.000.000 Partikel gestartet; davon sind 1.300.000 Brennstoff- und 18.700.000 Luftpartikel. Bei einem Zeitschritt von $1 \cdot 10^{-6}$ Sekunden entspricht das je Zeitschritt ca. 1.3 Partikel im Brennstoff- sowie ca. 18.7 Partikel im Lufteinlass. Der Wert für die Anzahl an startenden Partikel von 20.000.000 ist abgeschätzt, so dass sich eine große Anzahl im Rechengebiet befindet.

6.2.5 Ergebnisse der numerischen Simulation

Mit der Verfolgung von Partikeln werden deren Trajektorien durch die Brennkammer gewonnen. Anhand der Trajektorien ist erkennbar, dass ein sehr großer Anteil in die Rezirkulation gelangt, was zu hohen Aufenthaltszeiten innerhalb der Brennkammer führt. In Abb. 6.17 sind beispielhaft Trajektorien innerhalb der Brennkammer dargestellt. Der Großteil der gestarteten Partikel durchquert die Rezirkulationszone und erreicht erst dann den Auslass.

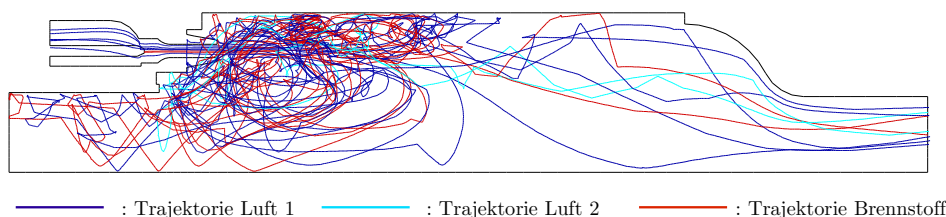


Abbildung 6.17: Ausgewählte Trajektorien durch Brenner und Brennkammer

Aus jedem Einlass werden Trajektorien betrachtet, die nach einem endlichen Zeitraum den Austritt erreichen. Sie sind vor allem durch lange Aufenthaltszeiten gekennzeichnet. Die mittlere Aufenthaltszeit von 20.000 Partikeln im Brenner sowie der Brennkammer wurde entsprechend Gl. (5.81) für das Gesamtgebiet mit $6.028 \cdot 10^{-2}$ Sekunden berechnet, davon $5.676 \cdot 10^{-2}$ Sekunden allein in der Brennkammer. Im Brenner selbst sind die Aufenthaltszeiten durch die starke Beschleunigung in der Düse gering im Vergleich zur Brennkammer, so dass diese auf die Gesamtzeit nur wenig Einfluss haben. Im Gegensatz zu einer mittleren Aufenthaltszeit kann ein Spektrum der einzelnen Aufenthaltszeiten betrachtet werden, welches in Abb. 6.18 dargestellt ist. Das Diagramm auf der linken Seite zeigt die

Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung der genormten Aufenthaltszeiten, während rechts die Summenhäufigkeit abgebildet ist. Die längste Aufenthaltszeit wurde mit 1.143 Sekunden bestimmt. Nur ca. 30 Prozent aller Partikel (ca. 7.000) besitzen demnach eine größere Aufenthaltszeit als die berechnete mittlere Aufenthaltszeit. Eine Erhöhung der Partikelanzahl in den Einlässen führte zu einem ähnlichen Ergebnis, so dass die berechnete Verteilung als repräsentativ angesehen werden kann.

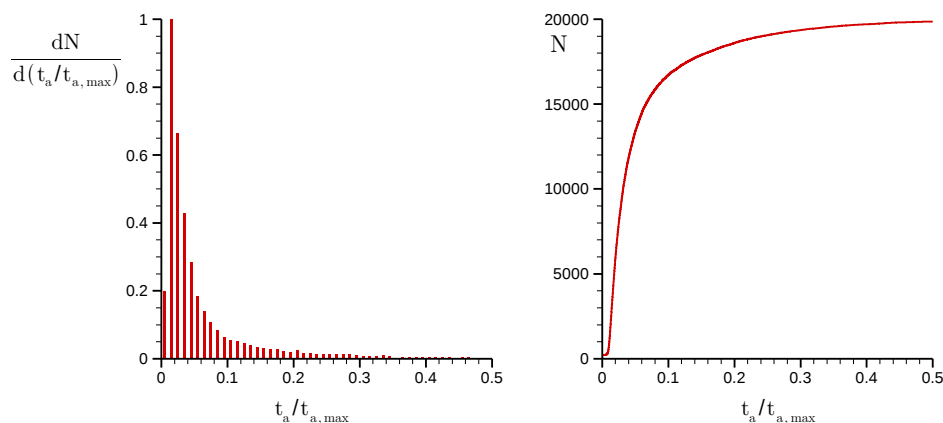


Abbildung 6.18: Verteilungsfunktion und Summenhäufigkeit der Verweilzeiten im FLOX[®]-Brenner für 20.000 gestartete Partikel

Die gute Durchmischung von Brennstoff und Luft entlang der Strecke s (s. Abb. 6.15) bis hinein in die Brennkammer als auch die hohen Aufenthaltszeiten innerhalb der Rezirkulationsgebiete führen zu einer Verbrennung, die durch eine besonders homogene Temperaturverteilung in der gesamten Brennkammer charakterisiert ist. Selbst sehr hohe Luft/Brennstoffverhältnisse ($\lambda \rightarrow 2.8$) garantieren den Betrieb des Brenners. In Abb. 6.19 ist die mittlere Temperaturverteilung aus dem PEUL+-Modell dargestellt.

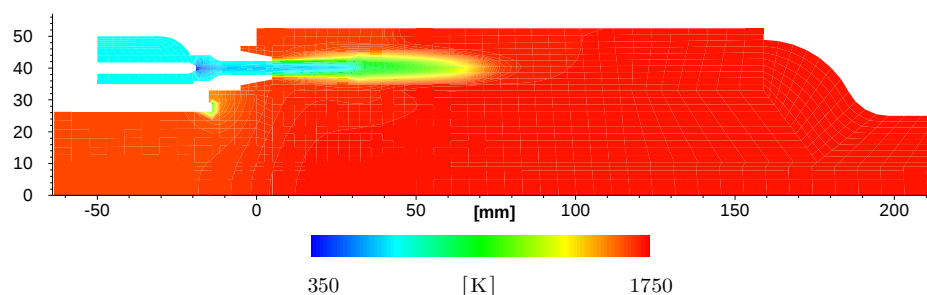


Abbildung 6.19: Mittlere Temperaturverteilung in der Brennkammer mit PEUL+-Modell

In weiten Teilen des Rechengebietes wird eine homogene Temperatur von ca. $T = 1741\text{K}$ erreicht, die bis zum Austritt aus der Brennkammer vorliegt. Unterhalb des Brenners ist der Einlass des zweiten Luftmassenstroms aufgrund seiner niedrigeren Temperatur zu erkennen. Über die Wand werden in der Rechnung keine Wärmeverluste zugelassen, so dass am Austritt die adiabate Gleichgewichtstemperatur für die ideale Mischung bei annähernd 100%igen Umsatz von 1748K erreicht ist. Die adiabate Temperatur wurde mit dem Gleichgewichtsprogramm Gaseq [Mor05] berechnet. Diese wird in der Simulation mit 1738K nicht erreicht. Die maximale Temperatur wird mit $T = 1745\text{K}$ im Bereich des eintretenden Jets berechnet. Aus OH LIF-Messungen wurden in der Rezirkulation Momentantemperaturen

zwischen $1498 < T < 1983 \text{ K}$ ermittelt, aus denen eine mittlere Temperatur von ca. 1719 K bestimmt wurde [Lü05]. Die errechnete mittlere Temperatur liegt mit ca. 20K über der gemessenen mittleren Temperatur. Das Partikelmodell ist nicht in der Lage die starken Temperaturfluktuationen der gemessenen Momentanwerte zu erfassen, was später noch zu sehen sein wird. Die Temperatur im Austritt wird im Experiment mit 1267 K bestimmt. Dieser Wert ist allerdings durch eintretende Kühlluft und aufgrund Verwendung adiabater Randbedingung der Wand in der Simulation für einen Vergleich nicht geeignet. Obwohl Brennstoff und Luft nicht vorgemischt zugeführt werden, wird die adiabate Gleichgewichtstemperatur an keiner Stelle der Brennkammer überschritten, so dass im zeitlichen Mittel das globale Lambda von 2.16, lokal in der Brennkammer nicht unterschritten wird. Dies lässt auf eine sehr gute Durchmischung von Brennstoff und Luft schließen. Durch die hohen Geschwindigkeiten in der Düse kann sich die Flamme nicht stabilisieren. Die Wärmefreisetzung erfolgt an den inneren und äußeren Scherschichten des eintretenden Brennstoff/Luft-Strahls, die an je einem Rezirkulationsgebiet angrenzen und endet bei ca. $x = 70 \text{ mm}$. In diesen Bereichen befindet sich auch die höchste OH-Konzentration (s. Abb. 6.20).

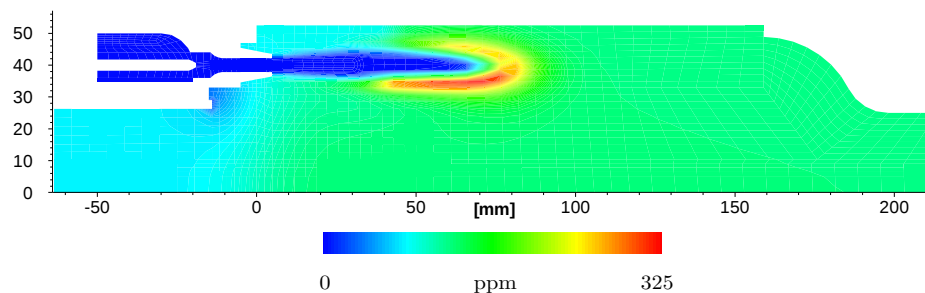


Abbildung 6.20: Mittlerer OH Molanteil in der Brennkammer mit PEUL+-Modell

Im Austritt werden noch 100 ppm an OH in der Simulation ermittelt. Die Bildung von CO ist in der Reaktionszone ebenfalls sehr hoch (ca. 5231 ppm im zeitgemittelten Maximum), sie wird jedoch bis zum Austritt auf ca. 2.3 ppm fast vollständig abgebaut (s. Abb. 6.21). Die Messungen ergeben einen CO Molanteil von $< 1 \text{ ppm}$. Dieser Wert bezieht sich auf 15 Vol-% O_2 im Abgas, auf den die berechneten Ergebnisse zum Vergleich ebenfalls umgerechnet wurden.

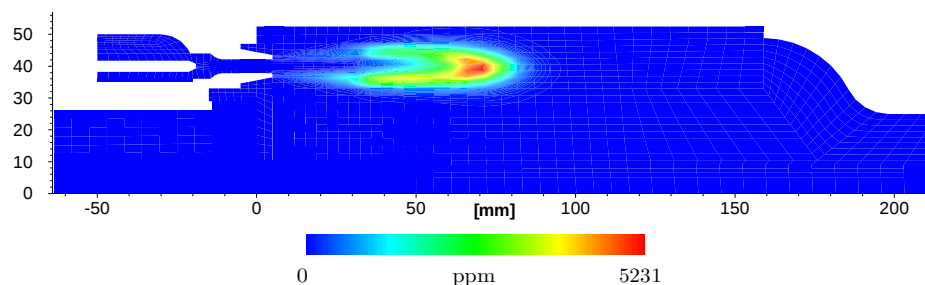


Abbildung 6.21: Mittlerer CO Molanteil in der Brennkammer mit PEUL+-Modell

Durch die in der gesamten Brennkammer niedrigen mittleren Temperaturen wird nur sehr wenig NO_x gebildet. Das Maximum von ca. 4.8 ppm in Abb. 6.22 in der linken unteren Ecke der Brennkammer ist auf den Vorgang der Zündung zurückzuführen. Bei der „numerischen Zündung“ des Gemisches mit ca. $T = 2000 \text{ K}$ bei $t = t_{ign}$ wird sehr viel NO_x gebildet, welches

erst nach und nach aus der Brennkammer abtransportiert wird. Im Austritt liegt eine NO_x Konzentration von ca. 2.8 ppm vor. Im Vergleich mit dem Experiment, in dem der NO_x Molanteil mit 6.2 ppm angegeben wird, liegt dieser Wert in der gleichen Größenordnung. Experimentelle Ergebnisse im Austritt der Brennkammer zur NO_x liegen nicht vor [Lü05].

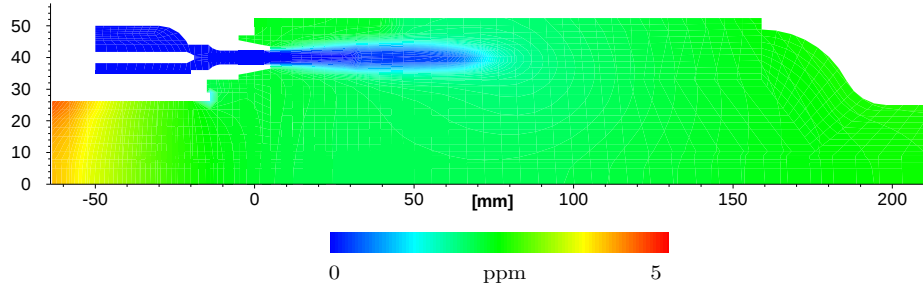


Abbildung 6.22: Mittlerer NO Molanteil in der Brennkammer mit PEUL+-Modell

Wie bereits erwähnt, wird unter den gegebenen Bedingungen eine sehr homogene Mischung bereits im Brenner realisiert, so dass mit dem Eintritt in die Brennkammer eine optimal vorgemischte magere Gaszusammensetzung vorliegt. In den Eintrittsstrahl können auch heiße Produkte eingemischt werden, die in einem auf Mittelwerten basierten Verbrennungsmodell nicht berücksichtigt werden und im Experiment lokal zu hohen Temperaturen und damit verbunden, verstärkter NO Bildung führen können. Wie bereits im Fall der Diffusionsflamme beschrieben, ist die Berechnung fluktuierender Größen in Form des RMS-Wert direkt aus den Partikeln möglich. In Abb. 6.23 ist der RMS-Wert der Temperatur dargestellt. In einem schmalen Bereich um den eintretenden Jet sind die höchsten RMS-Werte vorzufinden. Sie erreichen ein Maximum direkt am Eintritt in die Kammer mit bis zu $T_{RMS} = 250\text{K}$. Die Aufenthaltszeiten in diesem Teil der Brennkammer sind jedoch sehr gering, da im Bereich des Strahls die höchsten Strömungsgeschwindigkeiten herrschen. Aus diesem Grund haben die Temperatur- und Speziesfluktuationen keinen Einfluss auf die Bildung von NO_x , da sich deren Zeitskalen im Bereich weniger Zehntel bis Hundertstel Sekunden befinden (s. Abb. 3.1). Die RMS-Werte für die wichtigsten Spezies (NO , NO_2 sowie N_2O) sind ebenfalls in Abb. 6.23 dargestellt. Ihr Maximalwert liegt bei nur 0.3 ppm und ist vernachlässigbar gering. Mit dem Programm Gaseq [Mor05] zur Berechnung des chemischen Gleichgewichts wurden die Konzentrationen für NO , NO_2 sowie N_2O ermittelt. Unter Voraussetzung unendlich langer Reaktionszeiten ergeben sich mit $\text{NO}_{\text{eq}}=2540$ ppm sowie $\text{NO}_{2,\text{eq}}=22$ ppm vergleichsweise sehr hohe Konzentrationen im Gleichgewicht. Als Zwischenprodukt liegt $\text{N}_2\text{O}_{\text{eq}}$ mit 0.57 ppm im Bereich der berechneten Konzentration. Die maximalen Aufenthaltszeiten für die Partikel wurden mit ca. 1.1 Sekunde berechnet, wobei für den größten Teil der Partikel wesentlich geringere Aufenthaltszeiten ermittelt wurden (s. Abb. 6.18).

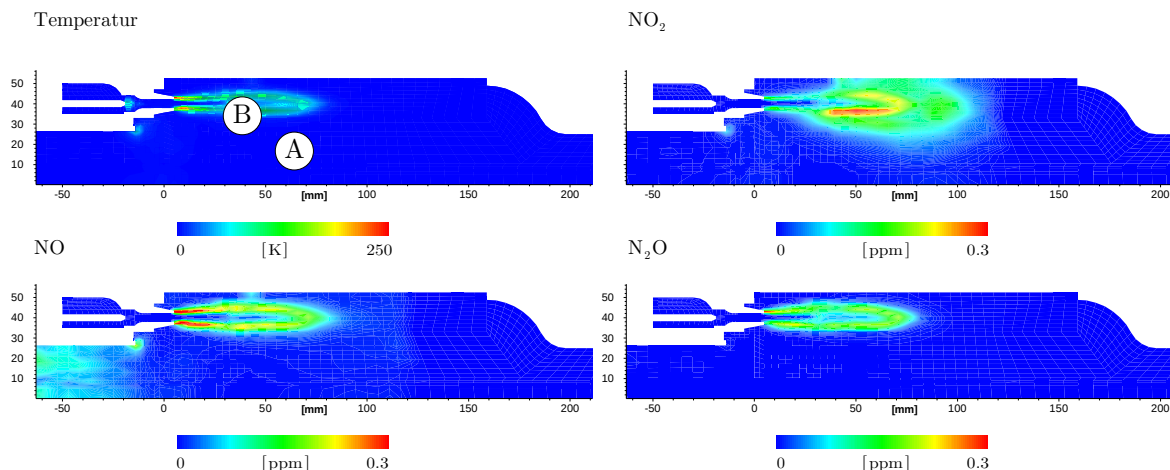


Abbildung 6.23: RMS-Werte der Temperatur, NO_x und N₂O Molanteile in der Brennkammer

Mit Hilfe der Partikel lassen sich wiederum die PDF von Temperatur- und Spezieskonzentrationen abbilden. Diese wird an zwei verschiedenen Punkten der Brennkammer aufgenommen, die in Abb. 6.23 mit A und B gekennzeichnet sind. Es werden die Partikel über einen Zeitraum von $1.0 \cdot 10^{-4}$ Sekunden eingesammelt. Punkt A befindet sich inmitten des inneren Rezirkulationsgebietes und ist durch besonders geringe Schwankungen gekennzeichnet, da hier und in unmittelbarer Umgebung eine sehr homogene Zusammensetzung vorliegt und sehr große Wirbelstrukturen dominieren. Punkt B liegt an der Grenze zwischen eindringendem Strahl und rezirkulierenden Verbrennungsprodukten. Hier finden sich relativ große Schwankungen wieder. Die PDF für die Temperatur und die OH-Verteilung in Punkt A ist in Abb. 6.24 dargestellt.

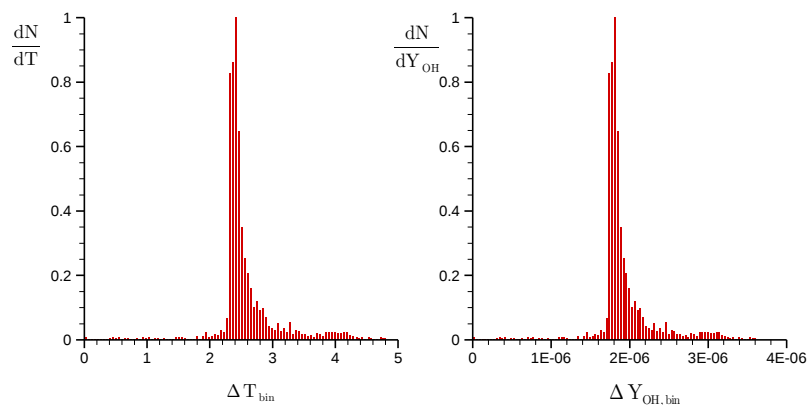


Abbildung 6.24: PDF der Temperatur und des OH Massenanteils in Punkt A von Abb. 6.23 der FLOX[®]-Brennkammer

Entgegen den Messungen treten hier nur extrem kleine Fluktuationen auf. Die mittlere Zusammensetzung sowie die Temperatur der Eulerlösung sind in diesem Gebiet bereits sehr homogen, so dass die Partikel die homogene Verteilung weiter transportieren und somit die Fluktuationen sehr gering bleiben. Der Mittelwert wird in der Simulation gut wiedergegeben. Auswirkungen haben die Schwankungen jedoch nur in der NO_x-Bildung, weil diese aufgrund hoher Temperaturen begünstigt wird. Da die Temperaturschwankungen so gering vorhergesagt werden, haben sie auch bei der NO_x Bildung keinen nennenswerten Einfluss (s.

Abb.6.26). In Abb. 6.25 ist die PDF in Punkt B abgebildet. Im Gegensatz zu Punkt A sind die Fluktuationen deutlich stärker. Das gilt sowohl für die Temperatur als auch OH-Verteilung. Es ist deutlich zu erkennen, dass Schwankungen mit großer Abweichung vom Mittelwert dominieren.

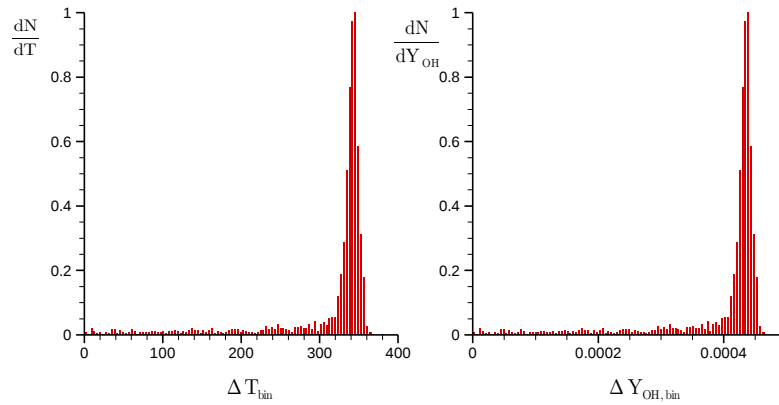


Abbildung 6.25: PDF der Temperatur und des OH Massenanteils in Punkt B von Abb. 6.23 der FLOX[®]-Brennkammer

Obwohl die Schwankungen sehr groß sind, liegt die maximale Temperatur eines Partikels mit $T = 1757\text{K}$ nur unwesentlich oberhalb des berechneten Mittelwertes von $T = 1741\text{K}$. In nachfolgender Tabelle sind die minimalen und maximalen Werte der Partikel sowie der Mittelwert aus der Eulerlösung einiger betrachteter Größen zusammengefasst. Für die NO sowie NO_2 Konzentration in Punkt A können keine minimalen und maximalen Werte angegeben werden, da diese nur sehr gering von ihrem zeitlichen Mittelwert abweichen. Für Punkt B ist außerdem die PDF für NO und NO_2 in Abb. 6.26 dargestellt, deren Form aufgrund gleicher Diffusionskoeffizienten und einer Lewis-Zahl von Eins der der Temperatur ähnelt. Die Speziesmassenbrüche sind auch hier in Molanteile überführt und zur besseren Übersicht in ppm angegeben.

	A	B		A	B
Temperatur			OH [ppm]		
\tilde{T}	1721	1691	\bar{X}_{OH}	112.0	260.0
Min	1718	1378	Min	95.8	2.14
Max	1723	1741	Max	128.0	467.0
NO [ppm]			NO ₂ [ppm]		
\bar{X}_{NO}	1.85	1.43	\bar{X}_{NO_2}	0.027	0.79
Min	-	0.51	Min	-	0.06
Max	-	1.76	Max	-	1.37

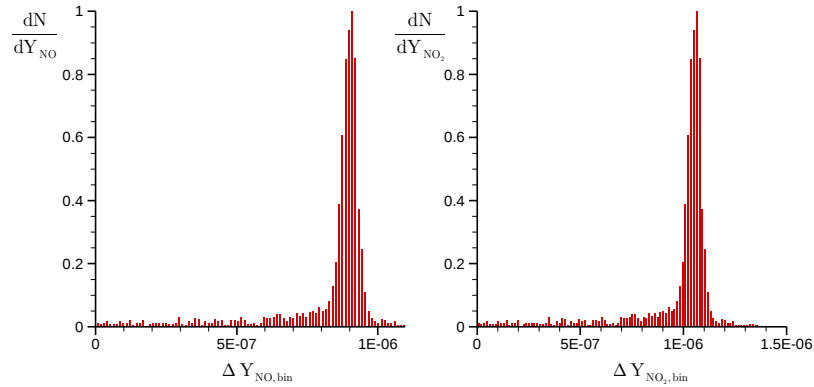


Abbildung 6.26: PDF der NO und NO₂ Massenanteile in Punkt B von Abb. 6.23 der FLOX[®]-Brennkammer

Mit der Definition des Mischungsbruchs z lassen sich für alle Partikel einzelne Partikelgrößen über z darstellen. Nach Bilger [Bil88] kann ein Mischungsbruch $z = f_B$ wie folgt definiert werden

$$f_B = \frac{2 Z_C / W_C + 0.5 Z_H / W_H + (Z_{O,air} - Z_O) / W_O}{2 Z_{C,fuel} / W_C + 0.5 Z_{H,fuel} / W_H + Z_{O,air} / W_O} \quad (6.5)$$

der eine Linearkombination von f_C , f_H und f_O darstellt. Z_i ist der Massenanteil der Elemente ($i = C, H, O$) und W_i die molare Masse. f_B hat den Vorteil gegenüber einer Definition nach Gl. (4.3) den stöchiometrischen Wert zu erhalten.

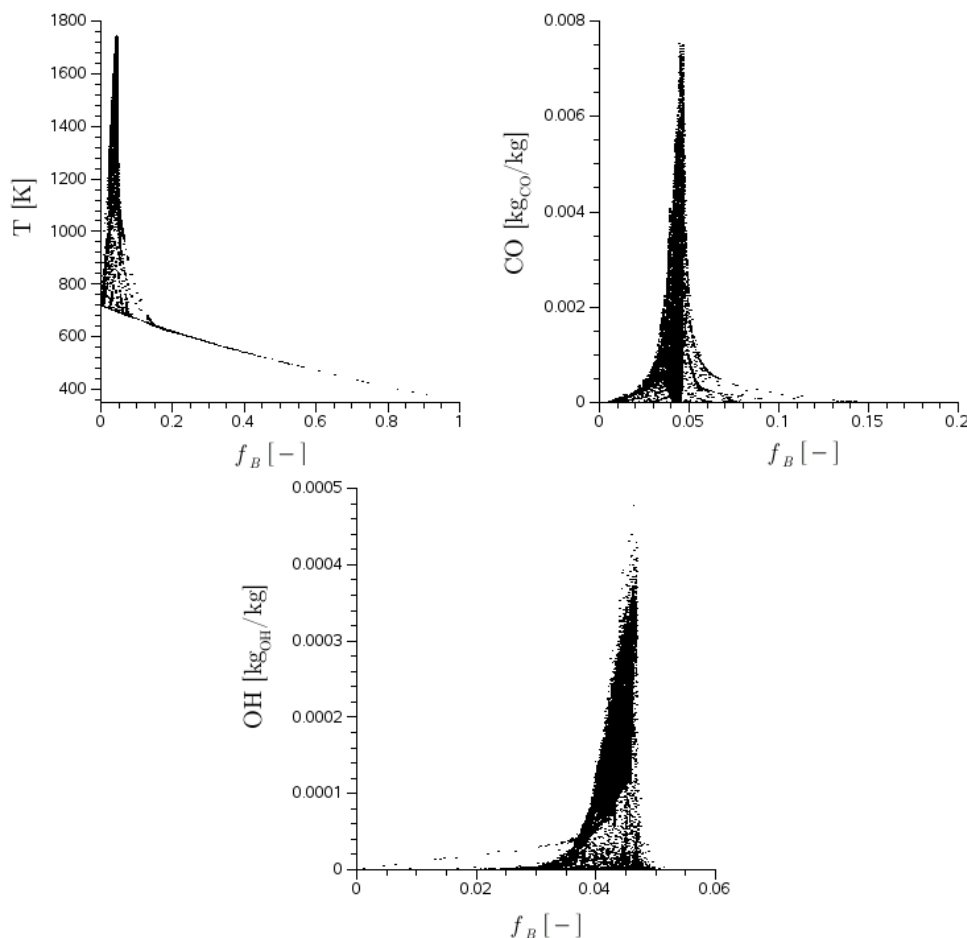


Abbildung 6.27: Scatterplots der berechneten Temperatur, CO- und OH Massenanteile über den nach Bilger definierten Mischungsbruch aufgetragen

Die Darstellungen zeigen, dass die Verbrennung in einem engen Spektrum abläuft. Die Wärmefreisetzung findet nur in einem sehr begrenzten Bereich ($z_B = 0 - 0.15$) statt und deutet auf einen gut vorgemischten Zustand von Brennstoff und Luft hin. Bei $z_B > 0.2$ finden keine chemischen Reaktionen statt. Zusammenfassend kann festgestellt werden, dass für den Fall der FLOX[®] Verbrennung das Partikelmodell Informationen liefert, mit denen die ablaufenden physikalischen Phänomene in der Brennkammer genauer zu verstehen sind. Insbesondere die langen Aufenthaltszeiten in der inneren Rezirkulation gewährleisten einen optimalen chemischen Umsatz. Der Austausch von rezirkulierendem Material mit dem Eintrittsjet führt zur Zündung des unverbrannten Gemisches. Die mit den Partikeln berechneten Fluktuationen sind im Bereich der Strahlkanten groß, während sie in der Rezirkulation gering sind. Gleiches gilt für den Bereich außerhalb der Rezirkulationsgebiete in Richtung Brennkammeraustritt. Die Rechenzeiten sind aufgrund der hohen Anzahl verfolgter Partikel sehr hoch. Im gesamten Gebiet stellt sich eine Partikelanzahl von ca. 430.000 Partikeln ein. Bei einer Zellenanzahl von ca. 8.500 entspricht dies allerdings nur einer mittleren Anzahl von ca. 50 Partikeln pro Rechenzelle. Die Rechenzeit liegt dann bei etwa 40 Sekunden pro Zeitschritt auf einem AMD Athlon 64 3400+ Prozessor. Trotz der geringen Partikelanzahl sind allerdings die Ergebnisse der Berechnung in guter Übereinstimmung mit den experimentell bestimmten Größen.

6.3 Verbrennung von Synthesegas

6.3.1 Die Synthesegasverbrennung

Die Verbrennung von Synthesegas²³ (Syngas) erfordert spezielle Anforderungen an die Auslegung eines Brenners. Zum Einen ist Syngas durch eine geringere Energiedichte im Vergleich zu Erdgas gekennzeichnet, hat aber aufgrund seines hohen H_2 - Gehalts eine hohe Reaktivität. Unter Vollast sind bei der Verwendung von Syngas demnach höhere Massenströme erforderlich, wiederum trägt H_2 nicht zu CO_2 -Emissionen bei. Das Verbrennungsverhalten von H_2 , wie z.B. hohe Flammentemperaturen und Geschwindigkeiten erhöhen das Risiko des Flammenrückschlagens sowie erhöhter NO_x -Emissionen. Aus diesem Grund helfen eine Verdünnung mit N_2 , CO_2 oder auch Wasserdampf, diese Risiken zu reduzieren.

6.3.2 Experimenteller Aufbau

In einem EU-Projekt (Hegsa – High Efficient Gas Turbine with Syngas Application) wurde ein generischer Laborbrenner auf die Anwendung verschiedener Syngas-Mischungen untersucht [BTK04]. Der Brenner wurde an der Universität Twente entworfen. Verbrennungsversuche wurden am DLR Stuttgart sowie thermo-akustische Untersuchungen an der Universität Twente durchgeführt. Eine schematische Darstellung des Brenners sowie der Brennkammer ist in Abb. 6.28 zu sehen. Die Kammer besitzt mit 90x90mm einen quadratischen Querschnitt auf einer Länge von 180mm und ist optisch zugänglich. Der Brennstoff wird durch einen axialen und die Luft durch einen radialen Drallkörper geführt. Beide treten vollkommen ungemischt in den Brennraum ein. Es wurden zwei verschiedene Brennstoffe hinsichtlich ihres Verbrennungsverhaltens bei einer Leistung von 10kW/bar und 20kW/bar experimentell untersucht: reines Syngas mit CO und H_2 als brennbare Komponenten sowie Synthesegas, bei dem 40% der thermischen Leistung durch CH_4 ersetzt wurde (auf reinem Syngas basierend). Aufgrund der hohen Reaktivität des Gemisches ist der Brennstoff mit N_2 verdünnt.

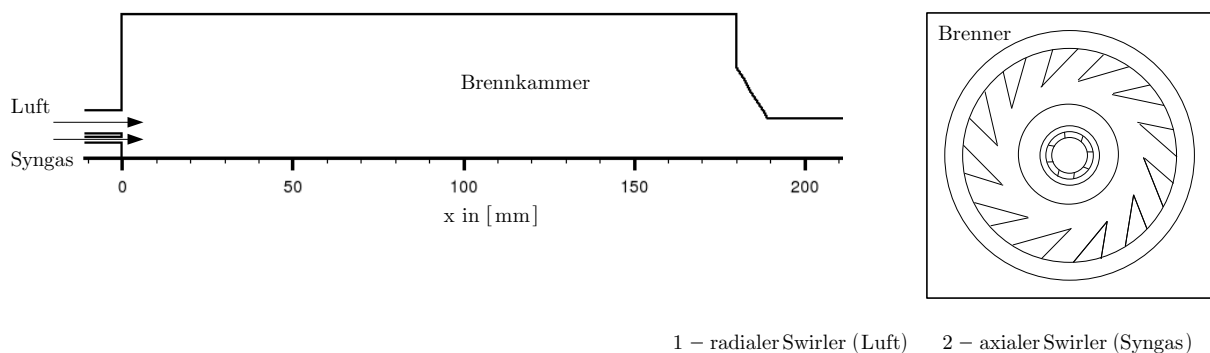


Abbildung 6.28: Schnitt durch Brenner und Brennkammer (links), Querschnitt des Brenners (rechts)

²³ Vergasungsprodukt aus Kohle, Abfall oder Biomasse

Ein Aufnahme des sich im Betrieb befindlichen Brenners ist in Abb. 6.29 zu sehen.

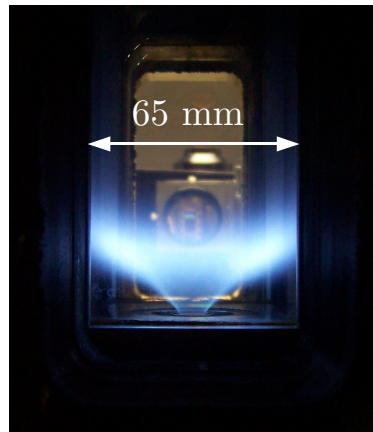


Abbildung 6.29: Fotografische Aufnahme des Brenners bei einer Leistung von 20 kW mit einer Syngas-Methan Brennstoffmischung (M. Tsurikov, DLR, Nov. 2004)

Die Flamme setzt unmittelbar am Brennermund an und bildet einen für verdrallte Flammen typischen sich zur Wand hin öffnenden Flammenkegel aus. Relativ hell leuchtende Gebiete sind am Rand des Kegels zu beiden Seiten, ca. 30 mm entfernt von der Mittelachse, zu erkennen.

6.3.3 Betriebsbedingungen und numerische Simulation

Für die Anwendung des PEUL+-Modells wird auch hier nur ein spezifischer Betriebszustand berechnet. Das globale Verhältnis von Luft und Brennstoff beträgt $\lambda = 2.0$. Weitere Betriebsbedingungen sind wie folgt gegeben

Umgebungsdruck	[bar]	: $p = 1.15$
Eintrittstemperatur Luft	[K]	: $T_{air} = 293$
Eintrittstemperatur Syngas	[K]	: $T_{fuel} = 293$
Gesamtmassenstrom Luft	[kg/s]	: $\dot{m}_{air} = 4.88 \cdot 10^{-3}$
Gesamtmassenstrom Syngas	[kg/s]	: $\dot{m}_{fuel} = 1.868 \cdot 10^{-3}$
Zusammensetzung Syngas	[Vol-%]	: CO = 25.92, H ₂ = 17.95, N ₂ = 56.13

Die numerische Untersuchung wird für eine Leistung von 10kW/bar durchgeführt. Als Brennstoff wird reines Synthesegas ohne CH₄ eingesetzt. Untersuchungen zu verschiedenen Brennstoffen wurden innerhalb des Projektes durchgeführt. Dabei wurde die Zusammensetzung des Syngases leicht variiert und durch einen entsprechenden Anteil von CH₄ ausgetauscht. Im Verlauf des Projektes konnte gezeigt werden, dass beide Brennstoffe ein sehr ähnliches Verhalten bezüglich ihrer Verbrennungseigenschaften besitzen [BTK04]. Bei Verwendung reinen Syngases sind stärkere mittlere OH-Intensitäten zu beobachten. Für die Berechnung wird ein 90 Grad-Segment ausgewählt, was aus dem quadratischen Querschnitt der Brennkammer resultiert. Aufgrund der komplexen Anordnung der Drallschaufeln kann kein kleineres Rechengebiet konstruiert werden. Das Rechengitter besteht aus Hexaedern und setzt sich aus ca. 160.000 Elementen zusammen. Als Reaktionsmechanismus kommt ein im Rahmen des Projekts entwickelter reduzierter Syngas-Mechanismus mit 11 Spezies und 22 Reaktionen zum Einsatz [SBF05].

6.3.4 Vorgehensweise für die Berechnung

Eine Startlösung wird ebenfalls aus den Mittelwerten der laminaren Kinetik berechnet. Als Turbulenzmodell wird das $k-\varepsilon$ Modell verwendet und die turbulente Intensität sowie das turbulente Längenmaß im Eintritt festgelegt. Deren Spezifizierung ist unkritisch, da die Strömung durch die Drallerzeuger berechnet wird, wo viel Turbulenz entsteht. Die turbulente Intensität als Verhältnis des RMS Wertes der Fluktuationen zur mittleren Geschwindigkeit wird mit 10 Prozent, das Längenmaß mit 1.0 mm abgeschätzt. Die Anzahl der initialisierten Partikel beträgt 100.000. Es werden pro Sekunde 20.000.000 Partikel gestartet, davon entfallen 6.000.000 auf den Brennstoff und 14.000.000 auf die Verbrennungsluft. Bei einem Zeitschritt von $1 \cdot 10^{-6}$ Sekunden entspricht das ca. 6 Partikel im Brennstoff- sowie ca. 14 Partikel im Luftenlassstrom.

6.3.5 Ergebnisse der numerischen Simulation

Aus experimentellen Untersuchungen an der Brennkammer liegen Geschwindigkeitsfeldmessungen für die kalte Strömung vor, die mit einem PIV-Verfahren (Particle Image Velocimetry) von Tsurikov et al. [TMG06] im DLR aufgenommen wurden. In einer longitudinalen Ebene genau durch die Mitte des Brennraums wurden die axialen sowie radialen Geschwindigkeitskomponenten erfasst. Die Messungen beginnen direkt am Austritt des Brenners und reichen bis 50 mm in die Brennkammer hinein. In Abb. 6.30 sind die Geschwindigkeitsfelder in drei verschiedene Höhen über dem Brenneraustritt aus der Messung und aus den berechneten Größen (durchgezogene Linien) gegenübergestellt. Am Austritt des Brenners sind die Messungen verzerrt und liegen außerhalb der Messebene. Das führt dazu, dass nur 70 Prozent der Geschwindigkeiten gemessen werden konnten. Das Strömungsfeld ist durch einen langen nach außen gerichteten Flammenkegel sowie eine um die Brennerachse liegende innere Rezirkulationszone charakterisiert, die aufgrund der verdrallten Brennstoff- und Luftzufuhr entsteht.

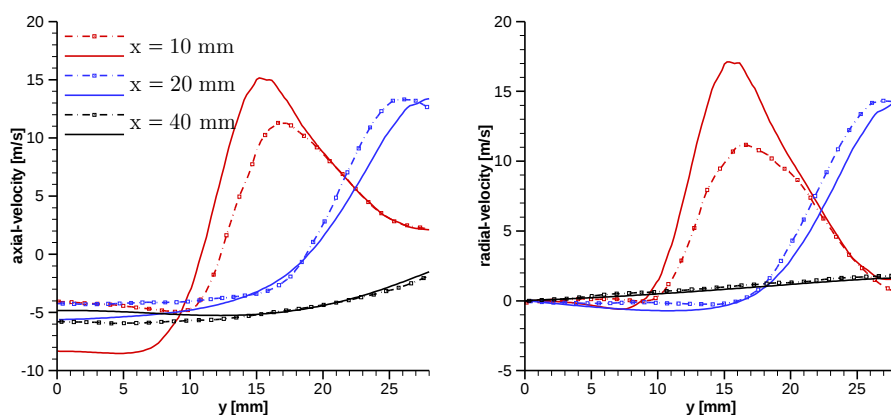


Abbildung 6.30: Axiale und radiale Geschwindigkeitsprofile aus experimentellen Untersuchungen (gestrichelte Linie) sowie der Simulation (durchgezogene Linie)

Eine sehr gute Übereinstimmung von gemessenen und berechneten Profilen ist nur im Bereich $x = 40$ mm festzustellen. Für $x = 20$ mm wird der Verlauf durch die Simulation auch noch gut abgebildet. Der Geschwindigkeitsverlauf in der Schnittebene $x = 10$ mm ist tendenziell erfasst, unterscheidet sich jedoch in der Lage des Maximalwertes und auch teilweise in seiner Position. Die axiale Komponente bei $x = 10$ mm wird in der Nähe der Brennerachse durch die Rechnung fast doppelt so hoch wie im Experiment bestimmt, d.h. die Rückströmung auf der Achse ist sehr stark. Das Maximum der Axial- sowie Radialgeschwindigkeit in dieser Ebene weicht ebenfalls von der Messung ab. Trotz der

erkennbaren Unterschiede ist jedoch festzuhalten, dass Rechnung und Messung im weitaus größten Teil der Brennkammer gut übereinstimmen. Das berechnete Temperaturfeld in einem Längsschnitt durch die Brennkammer ist in Abb. 6.31 dargestellt. Neben dem Partikelmodell wurden zwei weitere Modelle für die Berechnung und für einen Vergleich herangezogen. Zum Einen handelt es sich um das bereits beschriebene PaSR-Modell und zum Anderen um einen Presumed-PDF Ansatz für nicht-vorgemischte Flammen, der unter Annahme unendlich schneller Chemie die Reaktionsrate in Abhängigkeit vom Mischungsbruch und dessen Varianz beschreibt. Das PaSR-Modell ist im beschriebenen Partikelmodul integriert, während der Presumed-PDF Ansatz im verwendeten CFD-Code implementiert ist [Fluent]. Während mit dem PaSR Modell die maximale Temperatur in der Brennkammer mit $T = 1765\text{K}$ berechnet wird, liefern die beiden anderen Modelle eine Temperatur von etwa $T = 1812\text{K}$. Des Weiteren ist im PaSR-Modell ein sehr glatter Verlauf der Temperatur zu erkennen. Direkt am Eintritt in die Brennkammer kommt es zwischen eintretendem Brennstoff- und dem Luftstrahl nicht unmittelbar zur Wärmefreisetzung. Im Presumed PDF-Ansatz finden dagegen bereits erste Reaktionen statt, die Einfluss auf das gesamte Strömungsfeld ausüben und die Ausbildung eines anderen Flammenkegels bewirken. Das Partikelmodell liefert ein mit dem PaSR-Modell vergleichbares Ergebnis: die Reaktionen setzen erst weiter stromab in der Brennkammer ein und spiegeln eine stärkere Abweichung vom Gleichgewicht wider. Der im Temperaturverlauf auftretende Knick als auch das berechnete Temperaturmaximum unterscheiden beide Modelle.

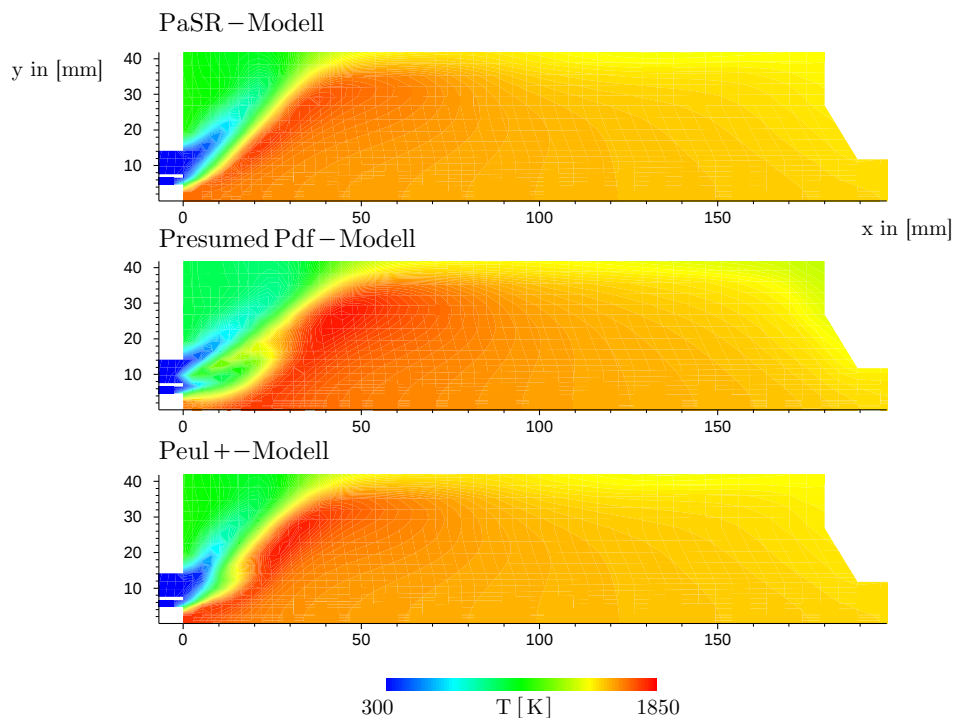


Abbildung 6.31: Mittlere Temperaturverteilung im Längsschnitt durch die Brennkammer für verschiedene Verbrennungsmodelle

In Abb. 6.32 sind die dazugehörigen Verteilungen der Massenanteile von H_2O und OH dargestellt. Die Abweichung zum chemischen Gleichgewicht wird besonders in der OH -Verteilung deutlich. Mit dem Presumed PDF-Modell wird ein um das zehnfache geringerer

OH-Molanteil bestimmt, dessen Maximum deutlich weiter stromab in der Brennkammer lokalisiert ist. Die berechneten maximalen Werte der einzelnen Modelle sind in nachfolgender Tabelle zusammengefasst.

	PaSR	Presumed-PDF	PEUL+
T_{\max} [K]	1765	1814	1812
$T_{\text{eq}, \lambda=1}$ [K]	1990		
$X_{\text{OH}, \max}$ [ppm]	2220	210	2280
$X_{\text{OH}, \text{eq}, \lambda=1}$ [ppm]	630		
$Y_{\text{H}_2\text{O}, \max}$ [kg _{H2O} /kg]	0.0545	0.0538	0.0576
$Y_{\text{H}_2\text{O}, \text{eq}, \lambda=1}$ [kg _{H2O} /kg]	0.0596		

Im Vergleich mit der photographischen Aufnahme bilden sowohl das PaSR- als auch das Partikelmodell die Position der Flamme gut ab.

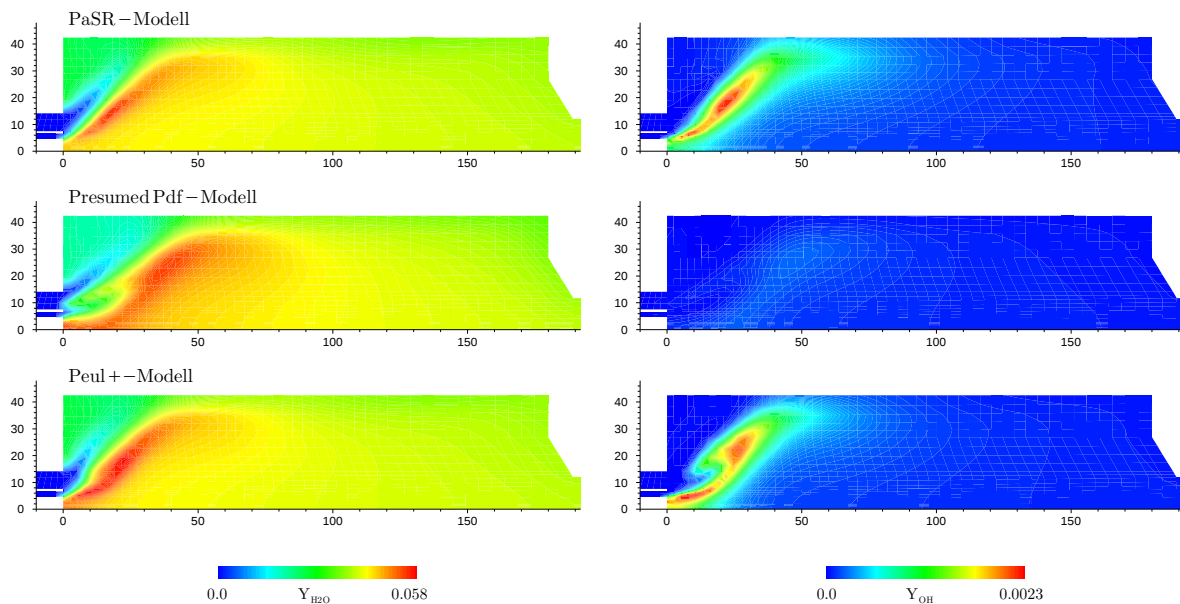


Abbildung 6.32: Mittlere Verteilung des H_2O und OH Massenanteils im Längsschnitt durch die Brennkammer für verschiedene Verbrennungsmodelle

Die Fluktuationen der Partikel nach Gl.(6.4) sind in Abb. 6.33 dargestellt. Durch die Zusammensetzung des Brennstoffs folgt der Pfad der H_2O -Bildung direkt aus dem Wasserstoffanteil, die CO_2 -Bildung erfolgt nur aufgrund von Oxidation des CO -Anteils nach



Im Bereich des Zusammentreffens von Luft und Brennstoff sind wie zu erwarten die Fluktuationen hoch, während diese im übrigen Teil der Brennkammer zu vernachlässigen sind. Sehr starke Schwankungen sind an der Grenze von Brennstoffeintritt und dem inneren Rezirkulationsgebiet zu erkennen, was auf eine intensive Interaktion von bereits heißen Verbrennungsprodukten und frischem Gas hin deutet. Im Vergleich dazu gibt es geringe Fluktuationen zwischen Brennstoff- und Luftstrahl direkt am Eintrittsbereich. An den OH-

Fluktuationen ist zu erkennen, dass sich diese auf zwei unterschiedliche Positionen aufteilen. Die experimentellen Ergebnisse in Abb. 6.34 liefern ein sehr ähnliches Bild und bestätigen die Ergebnisse aus der numerischen Simulation mit dem PEUL+-Modell.

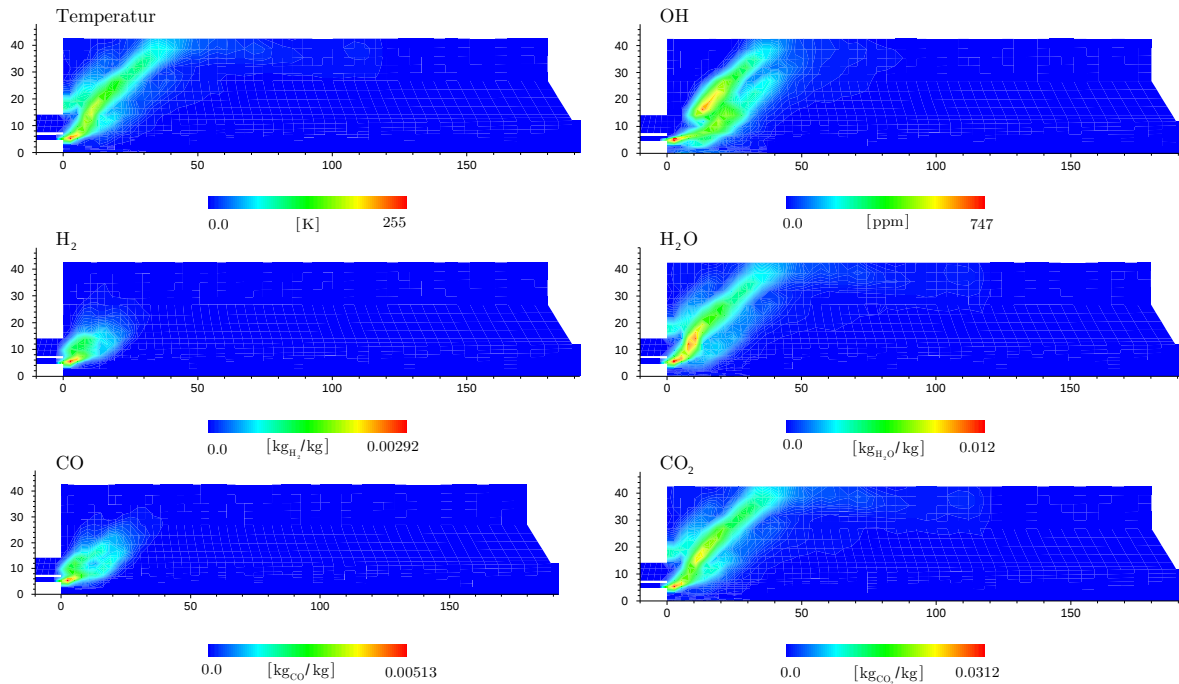


Abbildung 6.33: Darstellung der RMS-Werte aus Partikelgrößen

Messungen der OH-Verteilung wurden von Tsurikov et al. [TMG06] vorgenommen. Zwei Verfahren kamen in der experimentellen Anwendung zum Einsatz: Mit OH-PLIF wurden die mittlere OH-Intensität sowie die Fluktuationen der Intensität (RMS-Werte) bestimmt. OH*-Chemiluminescence zeigt die Bildungsrate von OH an. In [TMG06] wird darauf verwiesen, dass die höchste OH-Intensität der PLIF-Messungen wahrscheinlich von einem sogenannten Superequilibrium OH stammt, auch „junges“ OH, welches vorwiegend in der Reaktionszone gebildet wird. Im Vergleich zu den Rechenergebnissen zeigt sich eine gute Übereinstimmung bei der Lokalisierung der höchsten mittleren OH-Intensitäten sowohl mit dem PaSR als auch dem Partikelmodell. In den Rezirkulationsgebieten sowie zum Brennkammeraustritt hin, ist die OH-Intensität sehr gering. In Abb. 6.34 sind die Aufnahmen aus den Messungen dargestellt. In Klammern ist die Anzahl der Bildpunkte des aufgenommenen Bereichs in horizontaler und vertikaler Lage angegeben. Der gesamte optisch zugängliche und damit sichtbare Bereich beträgt 65mm x 90mm.

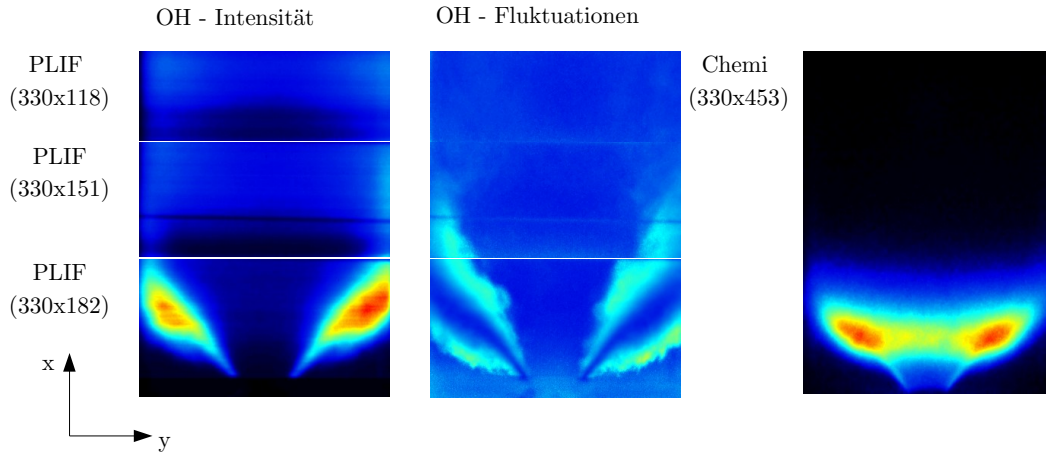


Abbildung 6.34: Mittlere OH-Intensität und deren Fluktuationen sowie OH-Chemiluminescence

Die PDF der Temperatur in verschiedenen Bereichen ist in Abb. 6.35 ausgewertet. Punkt A ist direkt zwischen dem Luft- und Syngaseintrittsstrom bei ca. $x=10\text{mm}$ in der Brennkammer gewählt. ΔT_{bin} gibt die Breite eines Temperaturbereiches an, in dem alle Partikel aufgefangen werden, die in diesen Bereich fallen. Bei $x = 10\text{mm}$ findet die Mischung zwischen Luft und Brennstoff statt, ebenfalls ist an dieser Stelle die Hauptreaktionszone lokalisiert. Punkt B befindet sich stromab im Gebiet bei $x = 100\text{mm}$ und ist ähnlich wie im Rezirkulationsgebiet der FLOX[®] Brennkammer durch geringe Schwankungen gekennzeichnet. Die Wärmefreisetzung ist hier bereits abgeschlossen und es liegen nur noch Verbrennungsprodukte vor.

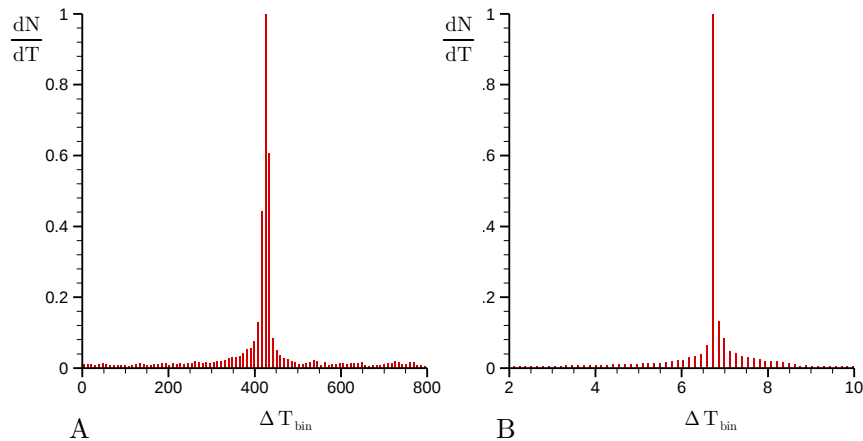


Abbildung 6.35: PDF der Temperatur an zwei verschiedenen Positionen in der Brennkammer

Für die einzelnen Spezies ergibt sich eine ähnliche Form der PDF. Am Brennkammeraustritt wird mit $T = 1475\text{K}$ bei allen verwendeten Modellen die mittlere Temperatur für die globale Mischung im chemischen Gleichgewicht berechnet. Auch hier werden an den Brennkammerwänden adiabate Bedingungen gesetzt und damit Wärmeverluste über die Wände nicht berücksichtigt. Für $\lambda = 1$ wurde die adiabate Flammentemperatur mit $T = 1990\text{K}$ mit Gaseq [Mor05] berechnet. Sie wird in der Simulation mit keinem Modell erreicht.

Aufgrund der Größe des Rechengebietes werden sehr viele Partikel benötigt, was sich in sehr hohen Rechenzeiten widerspiegelt. Im Gebiet stellt sich bei vorgegebener Partikelanzahl im Einlass, eine Gesamtpartikelanzahl von ca. 965.000 Partikeln ein. Die Maximale Anzahl an Partikeln pro Zelle lag in diesem Fall bei etwa 450 Partikel. Die Rechnung erfolgte wie bereits im FLOX[®] Fall auf einem AMD Athlon 64 Prozessor um umfasste aufgrund der Anwendung des kleiner Reaktionsmechanismus ca. 10 Sekunden für die Berechnung eines Zeitschrittes. Eine Parallelisierung der Berechnung ist derzeit nicht möglich. Um Rechenzeiten zu verkürzen, ist eine Parallelisierung jedoch dringend erforderlich und aufgrund für die Partikel ohne absehbare Schwierigkeiten zu realisieren.

7 Zusammenfassung und Ausblick

Ziel der Arbeit war die Programmierung und Validierung des PEUL+- Partikelmodells auf der Grundlage der Arbeiten von Gilbank [Gil89] und Cailleau [Cai94] zur Berechnung der mittleren chemischen Quellterme in den RANS gemittelten Bilanzgleichungen für turbulente reagierende Strömungen. Dabei wurde im Gegensatz zu den soeben genannten Arbeiten, eine instationäre Kopplung zwischen Partikelmodell und CFD-Löser umgesetzt und in drei verschiedenen Anwendungen getestet. Die Kopplung des in dieser Arbeit erstellten PEUL+- Modells erfolgte mit dem CFD-Code FLUENT[®]. Für die Kopplung wurde auf Funktionen des Strömungslösers FLUENT[®] zurückgegriffen und entsprechende Schnittstellen zur Datenübergabe genutzt [Fluent]. Prinzipiell lässt sich das in dieser Arbeit entstandene Verfahren aber auch mit anderen CFD-Codes koppeln. Damit liegt aus der vorliegenden Arbeit ein Programmpaket zur Berechnung der mittleren chemischen Quellterme vor, welches die chemische Reaktionskinetik der Verbrennung unter Verwendung einer beliebigen Anzahl von Spezies und Reaktionsgleichungen berücksichtigt. Es lassen sich damit sowohl reduzierte als auch detaillierte Reaktionsmechanismen einsetzen. Die Berechnung der mittleren chemischen Quellterme in den Speziestransportgleichungen sowie der Energiegleichung wird mit einem Lagrangeschen Partikelmodell realisiert. Es werden eine Vielzahl von Partikeln entlang ihren Trajektorien durch das gesamte Rechengebiet verfolgt und deren Interaktionen mit dem vom CFD-Löser berechneten Strömungsfeld betrachtet.

Die erforderliche Gesamtpartikelanzahl muss zu Beginn der Rechnung abgeschätzt werden. Im Verlauf der numerischen Simulation stellt sich eine Partikelanzahl im Gebiet ein, die gegebenenfalls angepasst werden muss. Die Lösung der Lagrangeschen Gleichungen liefert die fluktuierenden Größen von Zusammensetzung und Temperatur für die sich nach einem Zeitschritt in der Rechenzelle befindenden Partikel. Aus den fluktuierenden Größen lässt sich für jedes Partikel ein chemischer Quellterm aufgrund der Verbrennung berechnen. Die Ensemble Mittelung über alle Partikel innerhalb einer Zelle liefert dann den mittleren chemischen Quellterm, der in die Bilanzgleichungen des CFD-Lösers eingebunden wird. Für den Partikellöser wurde das DLR interne Programm SPRAYSIM [Ra07] so abgeändert, dass eine instationäre Kopplung mit dem verwendeten CFD-Löser FLUENT[®] ermöglicht wurde. Dazu zählen u.a. das erweiterte Speichermanagement sowie die Organisation der nun schrittweisen Trajektorienberechnung entsprechend dem vorgegebenen Zeitschritt des CFD-Verfahrens. Eine stationäre Kopplung kann mit dem vorliegenden Programmpaket ebenfalls angewendet werden. Da diese Vorgehensweise bereits in früheren Arbeiten vorgestellt wurde [Cai94],[Var99],[Gil89], kommt sie hier nicht zur Anwendung. Zudem bildet die instationäre Kopplung den Charakter einer turbulenten Strömung besser ab und ermöglicht ein breiteres Spektrum in der Anwendung, z.B. der Berechnung transienter Vorgänge. In den Partikelgleichungen wird nur die zeitliche Ableitung betrachtet, während bei einem Kontrollvolumen zusätzlich die räumlichen Ableitungen berücksichtigt werden. D.h. die

Lagrangesche sowie die die Eulersche Vorgehensweise bilden zwar den gleichen physikalischen Sachverhalt ab, kommen aber zu unterschiedlichen Lösungen für die physikalischen Größen, wie z.B. der Zusammensetzung oder der Temperatur.

Das neue Partikelmodell wurde in drei verschiedenen Konfigurationen getestet: einer turbulenten Freistrahldiffusionsflamme, in der FLOX[®]-Verbrennung sowie bei der Verbrennung von Synthesegas in einer Laborbrennkammer. Ein großer Vorteil des eingesetzten Verbrennungsmodells liegt darin, dass es sich für jeden Anwendungsfall eignet und aufgrund der Berechnung mit Hilfe des kinetischen Reaktionsverlaufes keinen Beschränkungen hinsichtlich des Flammentyps unterliegt. Dafür sind lange Rechenzeiten unvermeidlich. Bei der Berechnung der genannten Testfälle zeigte sich, dass die Partikelanzahl sowie die Verankerung von C_{iem} für die Modellierung der turbulenten Mischung einen wesentlichen Einfluss auf das Ergebnis haben. Im Modell von Cailleau [Cai94] muss das IEM-Modell vom Nutzer über C_{iem} an vorliegenden Messergebnissen kalibriert werden. Eine Verankerung von C_{iem} wurde aufgrund der in Abs. 5.4.2 vorgestellten alternativen Berechnung der turbulenten Austauschrate, die ein Spektrum aus den Einzelpartikeln darstellt, nicht durchgeführt und C_{iem} gleich Eins gesetzt. In den Ergebnissen hat sich herausgestellt, dass die Schwankungen der Partikelgrößen zwar in einem großen Bereich liegen, jedoch der RMS-Wert aller Fluktuationen sehr gering ist. Die Verwendung des Mittelwertes aus den gemittelten Bilanzgleichungen wirkt sich hier nachteilig aus. Wird die Mischung bereits mit den Eulerschen Gleichungen nicht ausreichend beschrieben, sind durch das Verbrennungsmodell keine besseren Ergebnisse zu erwarten. In allen drei Anwendungsfällen traten keine Konvergenzprobleme während der Kopplung mit dem Strömungslöser auf. Eine Ursache dafür liegt in der instationären Vorgehensweise, die eine andere numerische Behandlung der Gleichungen erfordert [Fluent]. Allerdings sind die Rechenzeiten im Vergleich zu einer stationären Rechnung hoch. Da turbulente Strömungen stark instationären Charakter zeigen, ist ein solches Vorgehen dennoch physikalisch gerechtfertigt. Aufgrund der zeitlicher Begrenzung der Arbeit und des enormen Aufwandes für die instationäre Kopplung des Partikelmodells wurden die Berechnungen mit sehr groben Rechengittern und relativ geringen Partikelanzahlen durchgeführt. Ziel war es vorrangig, das Partikelmodell numerisch zu implementieren, dessen Anwendbarkeit aufzuzeigen und es für die Simulation zu bewerten.

Die Bestimmung von Spezies- und Temperaturfluktuationen zur anschließenden Berechnung der gemittelten Quellterme ist mit dem hier vorgestellten Partikelmodell möglich. Dafür wird eine sehr große Partikelanzahl vorausgesetzt. Durch die hohe Anzahl an Partikeln sowie das instationäre Vorgehen in der vorliegenden Variante des PEUL+-Modells bietet sich auch die Berechnung mit Hilfe eines LES-Verfahrens (LES = Large Eddy Simulation) an. Eine Kombination von LES und Partikelverfahren ist jedoch durch weiter deutlich steigende Rechenzeiten gekennzeichnet. Für die numerisch aufgelösten großen Wirbelstrukturen in einer LES-Rechnung können die für das Partikelmodell notwendigen Größen für die Berechnung der Partikeltrajektorien direkt zur Verfügung gestellt werden, während die Auswertung der thermochemischen Verbund-PDF der Partikel weiterhin an allen Partikel erfolgen muss. Das PEUL+-Modell in Kombination mit einem RANS- oder URANS-Verfahren kann in nachfolgenden Arbeiten durch Parallelisierung in der Optimierung der Rechenzeit verbessert werden. Eine Parallelisierung ist für einzelne Partikelpakete von definierter Anzahl auf einem Cluster möglich. Nach jedem Zeitschritt müssen die momentanen chemischen Quellterme aus den Einzelprozessen zusammengeführt und auf einem Hostrechner ausgewertet werden.

Literaturverzeichnis

- [AH04]: Arne B. Hoffmann, "Modellierung turbulenter Vormischverbrennung", Uni Karlsruhe, Fakultät für Chemieingenieurwesen und Verfahrenstechnik, Engler-Bunte-Institut (EBI), Dissertaion, 2004
- [ARB89]: Amsden, A.A., O'Rourke, P.J. and Butler, T.D., "KIVA II: A Computer Program for Chemically Reactive Flows with Sprays", LA-11560-MS, 1989
- [AV75]: Aubry, Villermaux, J., "Representation d'un melange imparfait de deux courant de reactifs dans un reacteur agite continue", Chemical Engineering Science, Vol. 30, pp. 457-464, 1975
- [BDG90]: Berlemont, A.; Desjonqueres, P; Gouesbet, G., "Particle Lagranian simulation in turbulent flows", Int. J. Multiphase Flow , Vol. 16, p. 19ff., 1990
- [BDL78]: Beguier, C., Dekeyser, I., Launder, B.E., "Ratio of scalar and velocity dissipation time scales in shear flow turbulence", Physics of Fluids, Vol. 21, pp. 307-310, 1978
- [Ber98]: Bergmann, V., Meier, W., Wolff, D., Stricker, W., "Application of Spontaneous Raman and Rayleigh Scattering and 2D LIF for the Characterization of a Turbulent CH₄/H₂/N₂ Jet Diffusion Flame", Appl. Physics, B66, p. 489-502, 1998
- [BGR93]: Bride, B.J., Gordon, S. and Reno, M.A., "Coefficients for Calculating Thermodynamics and Transport Properties of Individual Species", NASA Report TM-4513, 1993
- [Bil80]: Bilger, R.W., "Turbulent flows with nonpremixed reactants." In: Libby P.A., Williams, F.A., (Ed.) "Turbulent reactive flows", Springer, New York, 1980
- [Bil88]: Bilger, R.W., 22nd Symp. (Int.) on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh, 1988, p.475, 1988
- [Bil93]: Bilger, R. W., "Conditional moment closure for turbulent reacting flow", Phys. Fluids, Vol. 5, p. 437, 1993
- [BKR88]: Brackbill, J.U.; Kothe, D.B.; Ruppel, H.M. , "FLIP: a low dissipation, particle-in-cell method for fluid flow", Comp. Phys. Commun., Vol. 48, p. 25ff., 1988
- [BL94]: Bray, K.N.C., Libby, P.A., In P.A. Libby and F.A. Williams, editors, "Turbulent Reacting Flows", pp. 115-151, Academic Press, London, San Diego, New York, 1994
- [Blu92]: Blümcke, E.W., "Turbulente Partikeldispersion in eingeschlossenen Drallströmungen", Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt, Köln, Ruhr-Universität Bochum, Dissertation, 1992
- [BM85]: Byggestøyl, S., Magnusson, B.F., "A Model for Flame Extinction in Turbulent Flow", 4th Symposium on Turbulent Shear Flows, pp. 381-395, 1985

- [BML84/1]: Bray, K.N.C., Libby, P.A., Moss, J.B., "Flamelet crossing frequencies and mean reaction rates in premixed turbulent combustion", *Combust. Sci. Tech.*, Vol. 41, pp. 143-172, 1981
- [BML84/2]: Bray, K.N.C., Moss, J.B., Libby, P.A. , "Scalar length scale variations in premixed turbulent flames", 20th Symp. (Int.) on Comb., pp. 421-427, 1984
- [BML85]: Bray, K. N. C, Libby, P. A., and Moss, J. B., "Unified modeling approach for premixed turbulent combustion—part i: General formulation", *Combust. and Flame*, Vol. 61, pp. 87-102, 1985
- [Bor78]: Borghi, R., "Reaction chimiques en milieu turbulente", PhD Thesis, Université Pierre et Marie Curie, Paris, 1978
- [Bor88]: Borghi, R., "Turbulent combustion modelling", *Prog. Energy Comb.*, Vol. 14, pp. 245-291, 1988
- [Bor96]: Borghi, R.P., "The Links between Turbulent Combustion and Spray Combustion and their Modelling", *Proceedings of the 8th International Symposium on Transport Phenomena in Combustion (ISTP-VIII)*, San Francisco, 16-20 July 1995, pp. 1-18, 1996
- [BP81]: Borghi, R., Pourbaix, E., "On the Coupling of Complex Chemistry with a Turbulent Combustion Model", *Physico-Chemical Hydrodynamics*, Vol. 2, pp. 65-77, 1981
- [BP83/1]: Borghi, R., Pourbaix, E., "Lagrangian Models on Turbulent Combustion", *Fourth Symposium on Turbulent Shear Flows*, Karlsruhe, Sept. 1983
- [BP83/2]: Borghi, R., Pourbaix, E., "Une methode eulerienne-lagrangienne pour la combustion turbulente", 3eme Conference International sur "Les Methodes Numeriques pour la Science de l'Ingenieur", 1983
- [BR86]: Brackbill, J.U.; Ruppel, H.M., "FLIP: a method for adaptively zoned, particle-in-cell calculations of fluid flows in two dimensions ", *J. Comput. Phys.*, Vol. 65, p. 314ff., 1986
- [Bra80]: Bray, K. N. C., "Turbulent flows with premixed reactants"; in: *Turbulent Reacting Flows*, P. A. Libby and F. A. Williams (Ed.), chapter 4, pp. 115–183, Academic Press, London, 1980
- [BTK04]: Braun-Unkhoff, M., Tsurikov, M., Kretschmer, T., Noll, B., "High Efficiency Gas Turbine with Syngas Application", FP5 Project NNE5-2001-00644, Period Jan-Dec 2004,
- [Cai94]: Cailleau, P. , "Lagrangien simulations of turbulent flames with non-infinitely fast chemistry", PhD Thesis, Université de Rouen, 1994
- [CK89]: Chen, J.Y., Kollmann, W., "Segregation parameters and pair-exchange mixing models for turbulent nonpremixed flames", *Twenty Third Symp. (Int) on Combustion*, The Combustion Institute, pp. 751-757, 1991
- [CK94]: Chen, J.Y., Kollmann, W., "Comparison of prediction and measurement in non-premixed turbulent flames", in "Turbulent Reacting Flows", Chapter 5, Libby, P. A., Williams, F. A. (Ed.), Academic Press Inc., pp. 211-308, 1994
- [CP90]: Candel, S., Poinot, T., "Flame stretch and the balance equation for the flame surface area", *Comb. Sci. Tech.*, Vol. 70, pp.1-15, 1990
- [CSS77]: Crowe, C.T., Sharma, M.P., Stock, D.E., "The Particle-Source-In Cell (PSI-Cell) model for gas-droplet flows", *Journal of Fluids Engineering*, Vol. 99, pp. 325 - 332, 1977
- [Cu63]: Curl, R.L., "Dispersed phase mixing: I. Theory and effects of simple reactors", *AIChE J.* 9, pp. 175-181, 1963

- [Da40]: Damköhler, G., "Der Einfluss der Turbulenz auf die Flammgeschwindigkeit in Gasgemischen", *Z.für Elektrochemie*, 46, S.601-652, 1940
- [DB74]: Dopazo, C., O'Brien, E.E., "An approach to the autoignition of a turbulent mixture", *Acta Astronautica* 1, pp. 1239-1266, 1974
- [DD92]: Dukovicz, J.K., Dvinsky, A.S., "Approximate factorization as a high order splitting for the implicit incompressible flow equations", *J. Comput. Phys.*, Vol. 102, pp. 336-347, 1992
- [DF00]: Dinckelacker F., Hölzler S., "Investigation of a turbulent flame speed closure approach for premixed flame calculations", *Combustion Science and Technology* 158: pp. 321-340, 2000
- [Dop94]: Dopazo, C., "Quasistationary probability density functions in the turbulent mixing of a scalar field", *Phys. Rev. Lett.*, Vol 72, pp. 3518-3521, 1994
- [Dzw02]: Dzwiniel, W., "Bridging Scales by using discrete-particles in modelling complex fluids", *Proceedings, NEPTIS, Kyoto*, 8-10 December, 2002
- [EP88]: Effelsberg, E., Peters, N., "Scalar dissipation rates in turbulent jets and jet diffusion flames", *22nd Int. Symp. on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh*, pp. 693-700, 1988
- [Fav69]: Favre, A., "Statistical Equations of Turbulent Gases, Problems of Hydrodynamics and Continuum Mechanics", *Society of Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia*, pp. 231-266, 1969
- [FLL87]: Fu, S., Launder, B.E., Leschziner, M.A., "Modelling strongly swirling recirculating jet flows with reynolds-stress transport closures", *In: Proc. of the 6th Symp. on Turbulent Shear Flows*, pp. 17-61, Toulouse, 1987
- [Fluent]: ANSYS, *Dokumentation FLUENT 6.3*, 2006
- [FOB81]: Fritts, M.J., Oran, E.S., Boris, J.P., "Lagrangian fluid dynamics for combustion modelling", *Naval Research Laboratory, Washington, DC, NRL Memorandum Report 4570*, 44 pages, July 1981
- [Fox04]: Fox, R.O., "Computational Models for Turbulent Reacting Flows", *Cambridge University Press*, 2004
- [Fre95]: Frenklach, M., Wang, H., Goldenberg, M., Smith, G.P., Golden, D.M., Bowman, C.T., Hanson, R.K., Gardiner, W.C., Lissianski, V., "An optimized detailed chemical reaction mechanism for methane combustion", *GRI Topical Report No. GRI-95/0058*, 1995
- [Frö06]: Fröhlich, J., "Large Eddy Simulation turbulenter Strömungen", *Teubner Verlag*, 2006, 2006
- [GB80]: Gonzales, M., Borghi, R., "A Lagrangian Intermittent Model for Turbulent Combustion, Theoretical Basis and Comparison with Experiments", *Post Conference Proceedings, Turbulent Shear Flows 7*, pp. 293-311, 1980
- [Ger05]: Gerlinger, P., "Numerische Verbrennungssimulation, Effiziente numerische Simulation turbulenter Verbrennung", *Springer Verlag Berlin Heidelberg*, ISBN 978-3-540-23337-4, 2005
- [GI81]: Gosman, A.D.; Ioannides, E., "Aspects of computer simulation of liquid-fuelled combustors", *AIAA Paper, No. 81-0323*, 1981
- [Gil89]: Gilbank, P., "Contribution a la modelisation de la combustion turbulente dans le cas d'une stabilisation par accroche flamme", *These de Doctorat de l'Universite Paris VI*, 1989

- [Gir91]: Girimaji, S. S., "Assumed β -pdf model for turbulent mixing: Validation and extension to multiple scalar mixing." *Combust. Sci. and Tech.*, Vol. 78, pp. 177–196, 1991
- [GN99]: Golovitchev, V.I., Nordin, N., "Detailed Chemistry Sub-Grid Scale Model of Turbulent Spray Combustion for the KIVA Code", Paper 99-ICE-237, ICE, Vol. 33(3), pp.17-25, 1999
- [Gou96]: Gouldin, F.C., "Combustion intensity and burning rate integral of premixed flames", 26th Symp. (Int.) on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh, pp. 381-388, 1996
- [Gut88]: Gutheil, E., "The effect of multidimensional PDFs on the turbulent reaction rate in turbulent reactive flows at moderate Damkohler numbers", *PhysicoChemical Hydrodynamics*, Vol. 9, pp. 525-535, 1988
- [Hä74]: Härtter, E., "Wahrscheinlichkeitsrechnung für Wirtschafts- und Naturwissenschaftler", Vandenhoeck & Ruprecht, Göttingen, 1974
- [Ha94]: Hassa, C., "Experimentelle Untersuchung der turbulenten Partikeldispersion in Drallströmungen", DLR Forschungsbericht 94-20, Deutsches Zentrum für Luft-und Raumfahrt, ISSN 0939-2963, Ruhr-Universität Bochum, Dissertation, 1994
- [HCB]: Hirschfelder, J.O., Curtiss, C.F., Bird, R.B., "Molecular theory of gases and liquids", Wiley, New York, 1964
- [HI93]: Hennecken, E.A.C.; Icke, V., "SPH faces Emery's jump", *Computer Physics Communications*, Vol. 74, pp. 239-246, 1993
- [Hin75]: Hinze, J. O., "Turbulence", 2nd Edition, McGraw-Hill Publishing Co., New York, 1975
- [HP86]: Haworth, D., C., Pope, S., B., "A generalized Langevin model for turbulent flows", *Phys. Fluids*, Vol. 29, pp. 387-405, 1986
- [JKK79]: Janicka, J.; Kolbe, W.; Kollmann, W., "Closure of the transport equation for the probability density function of turbulent scalar fields", *J. Non-Equilib. Thermodyn.*, Vol. 4, p. 47 ff., 1979
- [JM88]: Jones, W.P., Musonge, P., "Closure of Reynolds Stress and Scalar Flux Equations", *Physics of Fluids*, 31(12): pp. 3589-3604, 1988
- [KBH00]: Kjaldman, L., Brink, A. and Hupa, M., "Micro Mixing Time in the Eddy Dissipation Concept", *Combustion Science and Technology*, Vol. 154, pp. 207-227, 2000
- [KC95]: Karlsson, J.A.J., Chomiak, J. , "Chemical Effects in Diesel Spray Ignition", 21st Congress of CIMAC, Interlaken Switzerland, May 15-18, 1995
- [Kli90]: Klimenko, A. Y., "Multicomponent diffusion of various admixtures in turbulent flow", *Fluid Dynamics*, Vol. 25, pp. 327-334, 1990
- [Kol41]: Kolmogorov, A., "The Local Structure of Turbulence in Incompressible Viscous Fluid for Very Large Reynolds' Numbers", *Academy of Sciences, USSR*, XXX(4), 301-305, 1941
- [Kol42]: Kolmogorov, A., "Equation of Turbulent Motion od an Incompressible Fluid", In: *Physics Band 6*, Seiten 56-58, *Izvestia Academy of Sciens, USSR*, 1972
- [KTO95]: Koshizuka, S., Tamako, H., Oka, Y., "A particle method for incompressible viscous flow with fluid fragmentation", *Comp. Fluid Dynamics*, Vol. 4(1), pp. 29-46, 1995

- [Ku02]: Kunz, O., "PDF-Simulation von Verbrennungsvorgängen inpraxisnahen Brennkammern", Dissertation Universität Stuttgart, 2002
- [KV97]: Van Kalmthout, E., Veynante, D., "Analysis of flame surface density concepts in non-premixed turbulent combustion using direct numerical simulation", 11th Symp. on Turbulent Shear Flows, pp. 12-21, 21-27, 1997
- [LB81]: Libby, P.A., Bray, K.N.C., "Countergradient diffusion in premixed turbulent flames", AIAA Journal, Vol. 19(2), pp. 205-213, 1981
- [LE87]: Lewis, B., von Elbe, G., "Combustion, Flames and Explotions of gases", Academic Press, 1987
- [Lea01]: Leach, A., "Molecular Modelling: Principles and Applications." (2nd Edition) Prentice Hall, 2001
- [LJZ95]: Liu, W.K., Jun, S. and Zhang, Y. F., "Reproducing Kernel Particle Methods", Journal for Numerical Methods in Fluids 20, pp. 1081-1106, 1995
- [LL02]: Li, S. and Liu, W.K., "Meshfree and particle methods and its applications", ASME Appl. Mech. Rev. 55, pp. 1-34, 2002
- [LL73]: Lin, S.C., Lin S.C., "Study of strong temperature mixing in subsonic grid turbulence", Phys. Fluids, Vol. 16, pp. 1587-1598, 1973
- [LL92]: Liu, Y., Lenze, B., "Investigation of flame-generated turbulence in premixed flames at low and high burning velocities", Experimental Thermal and Fluid Science (ISSN 0894-1777), Vol. 5 (3), pp. 410-415, 1992
- [LN75]: Lockwood, F.C., Naguib, A.S., "The prediction of the fluctuations in the properties of free-round jet, turbulent diffusion flames", Combustion Flame, Vol. 24, pp. 109-124, 1975
- [LR82]: Legg, B.J., Raupach, M.R., "Markov-chain simulations of particle dispersion in inhomogeneous flows: The mean drift velocity induced by a gradient in Eulerian velocity variance", Boundary-Layer Meteorology, Vol. 24, pp. 3-13, 1982
- [LRR75]: Launder B., Reece G., Rodi W., "Progress in the Development of a Reynolds Stress Turbulence Closure", J. Fluid Mech., Vol. 68(3), pp. 537-566, 1975
- [LS72]: Launder B.E., Spalding D.B., "Lectures of Mathematical Models of Turbulence", Academic Press, England, 1972
- [Lü05]: Lückcrath, R., Schütz, H., Noll, B., Aigner, M., "Experimmental Investigations of FLOX-Combustion at High Pressure", Flameless Combustion Workshop, Lund, Sweden, June 19-21, 2005
- [Lun67]: Lundgren, T.S., "Distribution function in the statistical theory of turbulence", Phys. Fluids, Vol. 10, pp. 969-975, 1967
- [LV99]: Lindstedt, R.P., Vaos, E.M., "Modelling of premixed turbulent flames with second moment methods", Combustion and Flame, pp. 461-485, 1999
- [LW94]: Libby, P.A., Williams, F.A. , "Fundamental Aspects and a Review", in "Turbulent Reacting Flows", Chapter 1, Libby, P. A., Williams, F. A., Academic Press Inc., pp. 2-61, 1994
- [Mag81]: Magnussen, B.F., "On the Structure of Turbulence an a Generalized Eddy Dissipation Concept for Chemical Reactions in Turbulent Flow", 19th AIAA Meeting, St. Louis, 1981
- [Mal03]: Maltsev, A., "Towards the Development and Assessment of Complete CFD Models for the Simulation of Stationary Gas Turbine Combustion Processes", Dissertation, TU Darmstadt, Fachbereich Maschinenbau, 2003

- [MB00]: Meier, W., Barlow, R.S., Chen, J.-L., Chen, J.-Y. , "Raman/Rayleigh/LIF Measurements in a Turbulent CH₄/H₂/N₂ Jet Diffusion Flame: Experimental Techniques and Turbulence-Chemistry-Interaction", *Combust. Flame*, Vol. 123, pp. 326-343, 2000
- [MB92]: MacInnes, J.M.; Bracco, F.V., "Stochastic particle dispersion modeling and the tracer particle limit", *Phys. Fluids*, Vol. 4, 2809-2824, 1992
- [ME04]: Menter, F.R., Egorov, Y., "Re-visiting the turbulent scale equation", *Proc. IUTAM Symposium; One hundred years of boundary layer research*, Göttingen, 2004
- [ME05]: Menter, F.R., Egorov, Y., "A scal-adaptive simulation model using two equations", *AIAA Paper 2005-1095*, 2005
- [Mei00]: Meier, W., Wolff-Gaßmann, D. Stricker, W., "LIF-Imaging and 2D temperature Mapping in a Model Combustor at Elevated Pressure", *Aerosp. Sci. Technol.*, Vol. 4, pp. 403-414, 2000
- [Men94]: Menter, F.R., "Two-Equation Eddy-Viscosity Turbulence Models for Engineering Applications", *AIAA Journal*, 32(8): pp. 1598-1605, 1994
- [MG83]: Monaghan, J.J., Gingold, R.A., "Shock simulation by the particle method SPH", *J. Comput. Phys.*, Vol. 52, pp. 374-389, 1983
- [MH76]: Magnussen, B.F., Hjertager, B.M., "On mathematical modeling of turbulent combustion", *16th Symp. (Int.) on Combustion*, The Combustion Institute, Pittsburgh, pp. 719-727, 1976
- [MM82]: Matalon, M., Matkowsky, B.J., "Flames as gasdynamic discontinuities", *J. of Fluid Mechanics*, Vol. 124, pp. 239-259, 1982
- [Mor05]: Morley, C., *Gaseq version 0.79 - A Chemical Equilibrium Program for Windows*, <http://www.arcl02.dsl.pipex.com/>, 2005
- [Mos79]: Moss, J.B., "Simultaneous measurements of concentration and velocity in an open premixed turbulent flame" *Combust. Sci. and Tech.*, 22:115, 1979
- [MRK05]: Mitarai, S., Riley, J.J., Kosaly, G., "Testing of mixing models for Monte Carlo probability density function simulation", *Physics of Fluids*, Vol.17 (4), pp. 047101-047101-15, 2005
- [MT83]: Metha, R.V., Tarbell, J.M., "A Four Environment Model of Mixing and Chemical Reactions. Part II: Comparison with Experiments", *AIChE JI* 65, pp. 125-133, 1983
- [No80]: Noseir, M., "Application of the ESCIMO theory of turbulent combustion", *PhD Thesis*, London University, UK, 1980
- [No93]: Noll, B., "Numerische Strömungsmechanik", Springer Verlag, 1993
- [Nor01]: Nordin, P.A.N., "Complex Chemistry Modelling of Diesel Sprays", *PhD Thesis*, Chalmers University of Technology, Göteborg, 2001
- [OM84]: Ormancey, A., Martinon, J., "Prediction of particle dispersion in turbulent flows", *Phys. Chem. Hydrodyn.* Vol. 5, pp. 229-244, 1984
- [Orm84]: Ormancey, A., "Simulation du comportement de particule dans des écoulement turbulents", *These de doctorat de 3 eme cycle*, Paris, 1984
- [Per93]: Blair Perot, J. , "An analysis of the fractional step projection methode", *J. Comput. Phys.*, Vol. 108, pp. 51-58, 1993
- [Pet00]: Peters, N., "Turbulent Combustion", Cambridge University Press, 2000
- [Pet87]: Peters, N., "Laminar flamelet concepts in turbulent combustion", *2nd Symp. (Int) on Combustion*, The Combustion Institute, Pittsburgh, pp. 1231-1250, 1987

- [Pet99]: Peters, N. , "The turbulent burning velocity for large-scale and small-scale turbulence", *Journal of Fluid Mech.*, Vol. 384, pp. 107-132, 1999
- [PF97]: Peric,M., Ferziger, J.H. , "Computational Methods for Fluid Dynamics", Springer, 1997
- [Pop76]: Pope, S. B., "The probability approach to modeling of turbulent reacting flows", *Combust. Flame*, Vol. 27, pp. 299-312, 1976
- [Pop79]: Pope S.,B., "The Relationship Between the Probability Approach and Particle Models for Reaction in Homogeneous Turbulence", *Combust. Flame*, Vol. 36, pp. 41-45, 1979
- [Pop81]: Pope, S.B., "A Monte Carlo method for the PDF equations of turbulent reactive flow", *Combust. Sci. and Tech.*, Vol. 25, pp. 159-174, 1981
- [Pop85]: Pope, S.B., "PDF methods for turbulent reacting flows", *Prog. Energy Comb. Sci.*, Vol. 11, pp. 119-192, 1985
- [Pop88]: Pope, S.B., "The evolution od surface in turbulence", *Int. J. Engin. Sci.*, Vol. 26(5), pp. 445-469, 1988
- [Pop90]: Pope, S.B., "Computations of turbulent combustion: progress and challenges. Invited Plenary Lecture", in: 23rd Symp. on (Int.) Combustion, pp. 591-612, The Combustion Institute, Pittsburgh, 1990
- [Pop94]: Pope, S. B., "Lagrangian PDF-methods for turbulent reacting flows", *Ann. Rev. Fluid. Mech.*, Vol. 26, pp. 23-63, 1994
- [Por03]: Poruba, C., "Turbulente Flammenausbreitung in Wasserstoff-Luft Gemischen", Dissertation TU München, 2003
- [Pou82]: Pourbaix, E., "Prediction Numerique des Ecoulements Turbulents Multireactifs par une Methode Eulerienne-Lagrangienne", ONERA-rapport Technique Interne , Dec. 1982
- [Pou83]: Pourbaix, E., "Prediction Numerique des Ecoulements Turbulents Multireactifs par une Methode Eulerienne-Lagrangienne", ONERA, PhD Thesis, Universite de Poitiers, 1983
- [PP98]: Pietsch, H., Peters, N., "Unsteady flamelet modelling of turbulent hydrogen-air diffusion flames", 27th Int. Symp. on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh, pp.1056-1064, 1998
- [PPC01]: Poling Bruce E., Prausnitz John M., O'Connell John P., "The Properties of Gases & Liquids", 2001
- [PV01]: Poinot, T., Veynante, D., "Theoretical and Numerical Combustion",R.T. Edwards, Inc., 1st edition, 2001
- [Ra06]: Rachner, M., persönliches Gespräch vom 14.12.2006, 2006
- [Ra07]: Rachner, M., "SPRAYSIM, Programmpaket zur Simulation von Spray und Zerstäubung in Gasturbinenbrennkammer", DLR Institut für Verbrennungstechnik, Köln, 2007
- [Saf61]: Saffman, P.G., "An approximate calculation of the lagrangien auto-correlation coefficient for stationary homogeneous turbulence", *Appl. Sci. Res. Section A*, Vol. 11, 1961
- [Sag01]: Sagaut, P., "Large Eddy Simulation of Incompressible Flows. An Introduction", Springer Verlag, 2001
- [SBF05]: Slavinskaya, N., Braun-Unkhoff, M., Frank, P., "Reduced Reaction Mechanism for Methane and Syngas Combustion in Gas Turbines", ASME Turbo Expo 2005, Paper Number GT2005-68287, June 6-9, 2005, Reno-Tahoe, Nevada, USA, 2005

- [Sch00]: Schütz, H., "Partikeltracing-Algorithmus, 2000
- [Sch03]: Schneider, Ch., Dreizler, A., Janicka, J., "Flow Field Measurements of Stable and Locally Extinguishing Hydrocarbon Fueled Jet Flames", Combust. Flame, Vol. 135, pp. 185-190, 2003
- [Sch06]: Schütz, H., Lückerrath, R., Kretschmer, T., Noll, B., Aigner, M., "Analysis of the Pollutant Formation in the FLOX Combustion", Proceedings of GT 2006, GT2006-91041, ASME Turbo Expo, 8-11 May 2006, Barcelona, 2006
- [Sch75]: Schmidt, E., "Technische Thermodynamik - Grundlagen und Anwendungen", Elfte überarbeitete Auflage, K.Stephan, F. Mayinger, Heidelberg New York, Band 1 und 2, 1975
- [Scha70]: Schade H., "Kontinuumstheorie strömender Medien", Berlin [u.a.]: Springer, 1970
- [Schl65]: Schlichting, H., "Grenzschicht-Theorie", Verlag G. Braun, Karlsruhe, 5. Auflage, S. 552-555 , 1965
- [Schm96]: Schmitz, G., "Realisierung der Monte-Carlo Strahlungsmethode auf unstrukturierten Netzen und Anwendung in einer fett-mager gestuften Brennkammer (RQL)", Diplomarbeit RWTH Aachen, 1996
- [Sh95]: Shih, T., Liou W., Shabbir A., Zhu J., "A New k-epsilon Eddy Viscosity Model for High Reynolds Number Turbulent Flows", Computer Fluids, Vol. 24(3), pp. 227-238, 1995
- [SHL91]: Siegel, R., Howell, J.R., Lohrengel, J., "Wärmeübertragung durch Strahlung", Teil 1-3, Springer Verlag, 1991
- [SP97]: Subramaniam, S., Pope, S.B., "Comparison of mixing model performance for nonpremixed turbulent reactive flow", Technical Report FDA 97--03, Cornell University, 1997
- [SP98]: Subramaniam,S., Pope,S.B., "A mixing model for turbulent reactive flows based on Euclidean minimum spanning trees", Combust. Flame, Vol. 115, pp. 487-514, 1998
- [Spa-URL]: http://www.cham.co.uk/phoenics/d_polis/d_lecs/mfm/mfmlec95.htm
- [Spa01]: Spalding, B.D., "Multi-fluid models for simulating turbulent combustion", Concentration, Heat and Momentum, Ltd. Presentation at CODE Annual SEMINAR in Teraelahti, Finland, 3-4 October, 2001
- [Spa71/1]: Spalding, D.B., "Mixing and chemical reaction in steady confined turbulent flames", 13th Symp. (Int.) on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh, pp. 649-657, 1971
- [Spa71/2]: Spalding, D.B., "Concentration Fluctuations of a Round Turbulent Free Jet", Chemical Engineering Science, Vol. 26, pp. 95-107, 1971
- [Spa76/1]: Spalding, D.B., "Development of the Eddy-Break-Up model of turbulent combustion", 16th Symp. (Int.) on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh, pp. 1657-1663, 1976
- [Spa76/2]: Spalding, D.,B., "The ESCIMO Theory of Turbulent Combustion", Imperial College. London, Mech. Eng. Dept., Report No. HTS/76/13, 1976
- [Spa77]: Spalding, D.B., "A general Theory of Turbulent Combustion, the Lagrangien Aspects", AIAA Paper 77-141,15th Aerospace Sciences Meeting, Los Angeles, Jan. 24-26, 1977
- [Spa79]: Spalding, D.B., "The influences of laminar transport and chemical kinetics on the time-mean reaction rate in a turbulent flame", 17th International Symposium on Combustion, The Combustion Institute, pp. 431-440, 1979

- [Spa82]: D. B. Spalding, "Chemical reaction in turbulent fluids", CFD Unit, Imperial College of Science and Technology, London, 1982
- [Spa97]: Spalart, P.R., Jou, W.-H., Stretlets, M., and Allmaras, S.R., "Comments on the Feasibility of LES for Wings and on the Hybrid RANS/LES Approach", Advances in DNS/LES, Proceedings of the First AFOSR International Conference on DNS/LES, 1997
- [Sun82]: Sun, R.L.T., "Application of the ESCIMO theory to turbulent diffusion flames", PhD Thesis, London University, UK, 1982
- [Tam81]: Tam, L.T., "The theory of turbulent flow with complex chemical kinetics", PhD Thesis, London University, UK, 1981
- [TAP97]: Tannehill, J.C., Anderson, D.A., Pletcher, R.H., "Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer", Taylor&Francis, 2. Edition, 1997
- [Tay35]: Taylor, G.I., "The Spectrum of Turbulence", Proceedings of the Royal Society of London, A 151; pp. 421-454, 1935
- [Tel07]: Meier, Wolfgang, Telefongespräch vom 10.07.2007, 2007
- [THH86]: Tsuruda, T., Harayama, M., Hirano, T., "Growth of flame front turbulence", Journal of Heat Transfer, 108:877-881, 1986
- [TL72]: Tennekes, H., Lumley, J. L., "A First Course in Turbulence", The MIT Press, Cambridge, Massachusetts, 1972
- [TMG06]: Tsurikov, M., Meier, W., Geigle, K.P., "Investigations of a Syngas-Fired Gas Turbine Model Combustor by Planar Laser Techniques", ASME Turbo Expo 2006, GT2006-90344, May 8-11, Barcelona, Spain, 2006
- [UTM92]: Umegaki, K.; Takahashi, S.; Miki, K., "Numerical simulation of incompressible viscous flow using particle method", Suchi Kaiseki, Vol. 43(3), p. 17ff., 1992
- [Var99]: Varin, E., "Etude et developpement du modele de combustion turbulente PEUL. Application a la prediction de la formation des suies dans les foyer aeronautique", ONERA NT 1999-2, 1999
- [VCP92]: Villasenor, R., Chen, J.Y., Pitz, R.W., "Modelling ideally expanded supersonic turbulent jet flows with nonpremixed H₂-air combustion", AIAA Journal, Vol. 30, pp. 395-402, 1992
- [Ver95]: Vervisch, L., Bidaux, E., Bray, K.N.C., Kollmann, W., "Surface density function in premixed turbulent combustion modeling, similarities between probability density function and flame surface approaches", Physics of Fluids, Vol. 7(10), pp. 2496-2503, 1995
- [VM95]: Versteeg, H.K., Malalasekera, W., "An introduction to computational fluid dynamics - the finite volume method", Longman, ISBN 0-582-21884-5, 1995
- [VS90]: Videto, B.D., Santavicca, D.A., "Flame-turbulence interactions in a freely-propagating, premixed flame", Combust. Sci. and Tech., Vol. 70, pp. 43-73, 1990
- [Weg06]: Wegener, B., "Large Eddy Simulation of Flow, Mixing, and Combustion on a Generic Gas Turbine Combustor", TU Darmstadt, Fachbereich Maschinenbau, 121 S., 2006
- [Wil85]: Williams, F., "Combustion Theory, The Fundamental Theory of Chemically Reacting Flow Systems", The Benjamin/Cummings Publishing Company Inc., Menlo Park, 1985
- [Wil93]: Wilcox, D.C., "Turbulence Modeling for CFD", DCW Industries, La Canada, California, 1993

- [WL78]: Warhaft, Z., Lumley, J.L., "An experimental study of the decay of temperature fluctuations in grid-generated turbulence", *Journal Fluid Mech.*, Vol. 88(4), pp. 659-684, 1978
- [WMD97]: Warnatz, J., Maas, U., Dibble, R.W., "Verbrennung", 2.Auflage, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1997
- [WW97]: Wüning, J.A., Wüning, J.G., "Flameless Oxidation to Reduce Thermal NO Formation", *Progress in Energy and Combustion Science*, Vol. 23, pp. 81-94, 1997
- [YO86]: Yakhot V., Orszag S.A., "Renormalization Group Analysis of Turbulence: I. Basic Theory", *Journal of Scientific Computing*, Vol 1(1), pp. 1-51, 1986
- [ZL91]: Zhou, Q.; Leschziner, M.A., "A time-correlated stochastic model for particle dispersion in anisotropic turbulence", 8th Turbulent Shear Flow Symposium, Munich, 1991
- [ZL95]: Zimont, V.L. and Lipatnikov, A.N., "A numerical model of premixed turbulent combustion of gases", *Chem. Phys. Reports*, Vol. 14(7), pp. 993-1025, 1995