

Lagrange-Monte-Carlo-PDF Simulation zur  
Beschreibung turbulenter, reaktiver  
Brennkammerströmungen

Vom Fachbereich Maschinenbau  
der Helmut-Schmidt-Universität / Universität der Bundeswehr Hamburg  
zur Erlangung des akademischen Grades eines Doktor-Ingenieurs  
genehmigte

Dissertation

vorgelegt von

Sebastian Harder  
aus Wismar

Hamburg 2007

Tag der mündlichen Prüfung: 19.02.2007

Erster Gutachter: Univ.-Prof. Dr.-Ing. F. Joos

Zweiter Gutachter: Univ.-Prof. Dr. rer. nat. habil. U. Maas

## Danksagung

Die vorliegende Arbeit entstand während meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Laboratorium für Strömungsmaschinen an der Helmut-Schmidt-Universität Hamburg.

Mein besonderer Dank gilt Herrn Professor Dr.-Ing. F. Joos, der mir die Arbeit am Institut überhaupt erst ermöglichte, seinem entgegengebrachten Interesse und der gewährten Unterstützung für diese Arbeit. Bei Herrn Professor Dr. rer. nat. U. Maas bedanke ich mich für das gezeigte Interesse sowie der Übernahme und Erstellung des Zweitgutachtens.

Herrn Dr. rer. nat. D. Schmidt danke ich für die Bereitstellung der notwendigen ILDM-Tabellen und seiner hilfsbereiten Unterstützung bei fachlichen Fragen. Außerdem danke ich Herrn Dipl.-Ing. H. Eickenbusch für die Hilfestellung bei der Implementierung des Programmcodes in ANSYS CFX 10.0.

Bei allen Kollegen möchte ich mich für die gute Zusammenarbeit, den fachlichen Diskussionen und vielen gemeinsamen Aktivitäten bedanken, die mir in guter Erinnerung bleiben werden. Besonders hervorheben möchte ich auch die vielen fruchtbaren Diskussionen mit meinem Zimmerkollegen und Freund Herrn Dipl.-Ing. C. Wächter. Darüber hinaus gilt mein Dank den Studien- und Diplomarbeitern für ihre geleistete Arbeit. Für die administrative Unterstützung und Entlastung bedanke ich mich recht herzlich bei Frau M. Gerds.

Meinen Eltern danke ich für die unbeschwerte Kindheit, ihre Unterstützung sowie dem gewährten Rückhalt. Meiner Frau Viviane für ihr Verständnis und die Durchsicht des Manuskripts.

Hamburg, Dezember 2006

Sebastian Harder

Gedruckt mit Unterstützung der Helmut-Schmidt-Universität/ Universität der  
Bundeswehr Hamburg

<b>Nomenklatur</b> .....	<b>I</b>
<b>Abstract</b> .....	<b>II</b>
<b>1 Einleitung</b> .....	<b>1</b>
1.1 Allgemeiner Überblick über Berechnungsmethoden und Problemstellung .....	2
1.2 Stand der Forschung.....	4
1.3 Zielsetzung und Vorgehen .....	11
<b>2 Phänomenologische Beschreibung turbulenter, reaktiver     Strömungen</b> .....	<b>13</b>
2.1 Turbulente Strömung .....	13
2.2 Turbulente Mischung.....	17
2.3 Vormischflammen .....	18
2.4 Nicht-vorgemischte Flammen .....	23
2.5 Turbulenz-Chemie-Interaktion.....	25
<b>3 Grundlagen</b> .....	<b>27</b>
3.1 Erhaltungsgleichungen.....	27
3.2 Reaktionskinetik und Mischungsbruch .....	29
3.3 Mittelung .....	32
3.4 Turbulenzmodelle.....	35
3.4.1 Algebraische Modelle.....	36
3.4.2 Reynolds-Spannungsmodelle .....	38
<b>4 Stochastische Beschreibung turbulenter Strömungen</b> .....	<b>41</b>
4.1 Definitionen .....	41
4.2 PDF-Transportgleichung – stochastisches System.....	43
4.3 PDF-Transportgleichung – Fluidsystem .....	45

4.4	Turbulente Konvektion.....	47
4.5	Skalare Diffusion im Zustandsraum.....	47
4.5.1	IEM-Modell .....	50
4.5.2	Modifiziertes Curl-Modell.....	51
4.5.3	EMST-Modell.....	52
4.5.4	Weitere Mischungsmodelle .....	53
4.6	Chemie Modelle .....	56
4.6.1	Fünf-Schritt-Chemimechanismus .....	57
4.6.2	ILDM.....	57
<b>5</b>	<b>Monte-Carlo Lösungsverfahren.....</b>	<b>61</b>
5.1	Diskrete Darstellung der PDF .....	61
5.2	Teilschrittverfahren .....	62
5.3	Konvektion.....	63
5.4	Mischung .....	64
5.4.1	IEM-Modell .....	64
5.4.2	Modifiziertes Curl-Modell.....	65
5.4.3	EMST-Modell.....	65
5.5	Reaktion .....	66
5.5.1	Fünf-Schritt-Mechanismus .....	66
5.5.2	ILDM.....	67
5.6	Koppelung .....	67
5.6.1	FV-Verfahren.....	67
5.6.2	Koppelung der Teilmodelle.....	68
5.7	Weitere Unterprogramme .....	69
5.7.1	Zeitschritt.....	69

5.7.2	Interpolation .....	70
5.7.3	Partikelsuchalgorithmus .....	71
5.7.4	Klonen der stochastischen Partikel .....	73
5.7.5	Randbedingungen.....	73
<b>6</b>	<b>Validierung und Anwendung .....</b>	<b>75</b>
6.1	Validierungsrechnung an einer turbulenten Scherschicht .....	75
6.1.1	Testproblem.....	75
6.1.2	Ergebnisse.....	77
6.2	Pilotierte Freistrahlf Flamme .....	79
6.2.1	Experiment.....	79
6.2.2	Numerische Modellbildung.....	81
6.2.3	Berechnung der Flamme C.....	84
6.2.4	Berechnung der Flamme F .....	99
6.3	Staukörperstabilisierte CH <sub>4</sub> /Luft Flamme .....	113
6.3.1	Experiment.....	113
6.3.2	Numerische Modellbildung.....	114
6.3.3	Ergebnisse.....	116
6.4	Konventionelle Rohrbrennkammer.....	125
6.4.1	Experiment.....	126
6.4.2	Numerische Modellbildung.....	129
6.4.3	Ergebnisse .....	131
<b>7</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick .....</b>	<b>145</b>
	<b>Anhang.....</b>	<b>149</b>
A	PDF-Transportgleichung .....	149
A1	Herleitung .....	149

A2	Äquivalente Darstellung des molekularen Mischungsterms	150
A3	Zusammenhang zwischen Lagrange-PDF $f_L$ und MDF $\mathcal{F}$	151
B	Vergleich von Mischungsmodellen .....	153
	<b>Literaturverzeichnis .....</b>	<b>154</b>

# Nomenklatur

## Lateinische Symbole

Symbol	Einheit	Bezeichnung
$a_i$		Driftkoeffizient
$A_r$		präexponentieller Faktor
$b_r$		Temperaturexponent
$b_{ij}$		Diffusionskoeffizient
$c_\alpha$	$[\text{mol m}^{-3}]$	Konzentration von $\alpha$
$c_p$	$[\text{J Kg}^{-1} \text{K}^{-1}]$	spezifische Wärmekapazität
$c_\varphi$		Proportionalität zw. $t_t$ u. $t_\varphi$
$D$	$[\text{m}^2 \text{s}^{-1}]$	Diffusionskoeffizient
$Da$		Damköhlerzahl
$e$	$[\text{J kg}^{-1}]$	turbulente Energiedichte
$e_\varphi$	$[\text{J kg}^{-1}]$	turbulente Energiedichte von $\varphi$
$f_\varphi$	$[\text{kg kg}_\alpha^{-1}]$	Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion v. $\varphi$
$f$		allgemeine Funktion
$\mathcal{F}$	$[\text{kg}^2 \text{kg}_\alpha^{-1}]$	Massendichtefunktion
$F$		Verteilungsfunktion
$g$	$[\text{m s}^{-2}]$	Erdbeschleunigung
$\Delta G_r$	$[\text{J mol}^{-1}]$	molare Gibbs Energie
$h$	$[\text{J kg}^{-1}]$	spezifische Enthalpie
$j_\alpha$	$[\text{kg}_\alpha \text{s}^{-1} \text{m}^{-2}]$	Diffusionsstrom von $\alpha$
$J$		Jacobimatrix
$k$	$[\text{J kg}^{-1}]$	turbulente kinetische Energie
$k_{f,r}$		Geschwindigkeitskonstanten, Hin/Rück
$K_{c,r}$		Gleichgewichtskonstante der Reaktion r
$K_r$		Gleichgewichtskonstante der Reaktion r (bez. auf Partialdücke)
$Ka$		Karlovitzzahl
$l_t$	$[\text{m}]$	integrales Längenmaß
$l_k$	$[\text{m}]$	Kolmogorov Längenmaß
$l_F$	$[\text{m}]$	Flammenfrontdicke
$m^{(n)}$		numerische Partikelmasse
$M_\alpha$	$[\text{kg mol}^{-1}]$	molare Masse $\alpha$
$N$		Partikelzellzahl
$n_\alpha$	$[\text{mol}_\alpha]$	Stoffmenge $\alpha$
$p$	$[\text{N m}^{-2}]$	Druck
$P$		Parametrisierungsmatrix
$\dot{q}_{Str}$	$[\text{J m}^{-3} \text{s}^{-1}]$	Enthalpiequellterm
$Q$		beliebige Größe
$\mathbf{R}$		Tensor der Ortskorrelation
$R_0$	$[\text{J K}^{-1} \text{mol}^{-1}]$	universelle Gaskonstante

$R_r$	$[\text{mol}_\alpha \text{m}^{-3} \text{s}^{-1}]$	Reaktionsrate der Reaktion r
$Re$		Reynoldszahl
$S_\alpha$	$[\text{kg}_\alpha \text{kg}^{-1} \text{s}^{-1}]$	chemischer Quellterm der Spezies $\alpha$
$s$	$[\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}]$	spezifische Entropie
$Sc_T$		turbulente Schmidtzahl
$t_k$	[s]	Kolmogorov Zeitmaß
$t_t$	[-]	integrales Zeitmaß
$t_\varphi$	[s]	integrales Zeitmaß von $\varphi$
$t_F$	[s]	chemisches Zeitmaß
$t_\alpha$		Dreierstoßeffektivität
$T$	[K]	Temperatur
$u_i$	$[\text{m s}^{-1}]$	Geschwindigkeitskomponente in i
$u_k$	$[\text{m s}^{-1}]$	Kolmogorov Geschwindigkeitsmaß
$V$	$[\text{m}^3]$	Volumen
$W_k$	$[\text{s}^{1/2}]$	k-te Komponente d. Wiener Prozesses
$x_i$	[m]	Ortskoordinate in Richtung i
$Y_\alpha$	$[\text{kg}_\alpha \text{kg}^{-1}]$	Massenbruch der Spezies $\alpha$
$Z_s, Z_f$		Eigenvektorraum (slow, fast)
$Z_\gamma$		Elementmassenbruch von $\gamma$

## Griechische Symbole

Symbol	Einheit	Bezeichnung
$\beta$		Konstante in mod. Curl-Modell
$\varepsilon$	$[\text{m}^2 \text{s}^{-3}]$	Dissipationsrate turb. kin. Energie
$\varepsilon_\alpha$	$[\text{kg}_\alpha^2 \text{kg}^{-2} \text{s}^{-1}]$	Skalardissipationsrate von $\alpha$
$\zeta$		normalverteilte Zufallszahl
$\theta$		Koordinate im reduzierten System
$\kappa$	$[\text{m}^{-1}]$	Kreiszahl
$\Lambda_l$	$[\text{m s}^{-1}]$	laminare Flammgeschwindigkeit
$\lambda$	$[\text{W m}^{-2} \text{K}^{-1}]$	Wärmeleitfähigkeit
$\lambda$		Eigenwerte
$\mu$	$[\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-1}]$	dynamische Viskosität
$\mu_T$	$[\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-1}]$	turbulente Viskosität
$\xi$		Mischungsbruch
$\nu$	$[\text{m}^2 \text{s}^{-1}]$	kinematische Viskosität
$\nu_T$	$[\text{m}^2 \text{s}^{-1}]$	kinematische Wirbelviskosität
$\nu', \nu''$		Stöchiometriekoeffizienten, Hin/Rück R.
$\rho$	$[\text{kg m}^{-3}]$	Dichte
$\tau_{ij}$	$[\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-2}]$	Schubspannungskomponente
$\Phi$	$[\text{J m}^{-3} \text{s}^{-1}]$	Dissipationsfunktion
$\varphi$		Skalar
$\Phi$		Zustandsraumvektor, Zufallsgrößen
$\Psi$		unabhängiger Stichprobenvektorraum

## Mathematische Symbole

### Symbol

$\langle \dots \rangle$   
 $\langle \dots | \dots \rangle$   
 $\sim$   
 $\delta()$   
 $\frac{\partial}{\partial t}, \frac{\partial}{\partial x_i}$

### Bezeichnung

Erwartungswert, zeitliches Mittelung  
 bedingter Erwartungswert  
 Favre Mittelung  
 Dirac'sche Deltafunktion  
 partielle Zeit-, Ortsableitung

## Indizes

### Symbol

$i, j, k$   
 $L$   
 $*$   
 $''$   
 $'$   
 $(n)$   
 $\wedge$   
 $0$   
 mol

### Bezeichnung

räumliche Koordinatenrichtungen  
 Lagrange  
 stochastische Größe  
 Fluktuation bei Favre-Mittelung  
 Fluktuation bei Reynolds-Mittelung  
 n-tes stochastisches Partikel  
 momentane Größe  
 Referenzzustand  
 molare Größe

## Abkürzungen

### Symbol

CFD  
 CFL  
 DNS  
 EDM  
 EMST  
 Exp  
 FDS  
 FLL  
 Fkt  
 FVV  
 GD  
 GT  
 IEM  
 ILDM  
 LES  
 MC  
 MDF  
 PDF  
 RANS  
 URANS

### Bezeichnung

Computational Fluid Dynamics  
 Courant Friedrich Levy Zahl  
 Direkte Numerische Simulation  
 Eddy Dissipation Model  
 Eulidean Minimum Spanning Tree  
 Experiment  
 Filter Density Function  
 Flamelet  
 Funktion  
 Finite Volumen Verfahren  
 Gradienten-Diffusion  
 Gradienten-Transport  
 Interaction by Exchange with the Mean  
 Intrinsic Low Dimensional Manifolds  
 Large Eddy Simulation  
 modifiziertes Curl  
 Massendichtefunktion  
 Probability Density Function  
 Reynolds Average Navier Stokes  
 Unsteady Reynolds Average Navier Stokes

## **Abstract**

Turbulent flows are characterized by continuous fluctuations of velocity. When combustion processes take place, the resulting fluctuations of scalars lead to complex interactions between the turbulent flow field and the chemical reaction, which can only insufficiently be described with a deterministic approach.

In this paper a hybrid Probability Density Function method is presented. The PDF model is based on the transported composition PDF equation, coupled with a commercial three dimensional CFD solver. A stochastic particle system in a Lagrangian framework is used to solve the pdf equation. The chemistry is described by an ILDM approach.

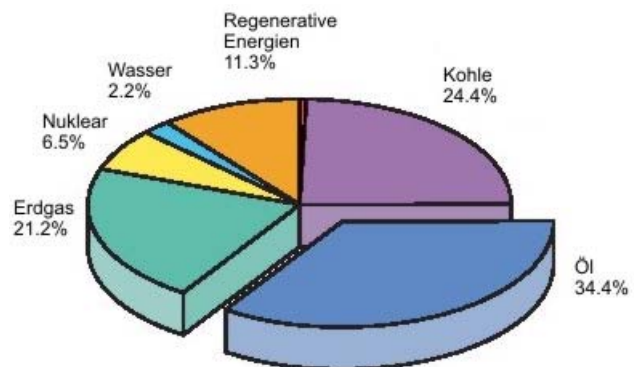
In recent years, PDF methods have shown their great potential to describe turbulent generic flames, whereas the central subject of this paper is the simulation of a typical can combustor of an industrial gas turbine. As an intermediate step, calculations of generic flames like jet- or bluff body stabilized flames are compared with experimental data and the Flamelet- as well as the EDM combustion model. Thereby, different mixing models, eg. IEM-, modified Curl- or EMST-Model, together with different models for the unclosed turbulent convection term are used and discussed.

Calculations of the can combustor delivered qualitatively good results in all used combustion models. But beyond that, only the PDF model was able to predict the quantitative values of the experimental data.

# 1 Einleitung

Die zunehmende Globalisierung, massives Wirtschaftswachstum – vor allem in den Schwellenländer – und ein steigender Lebensstandard bedingen einen stark steigenden Energiebedarf. Die Umwandlung der dafür benötigten Primärenergie geschieht zu über 90% (vgl. Bild 1.1) durch Verbrennung.

Es ist unumstritten, dass die hieraus entstehenden Emissionen ( $H_2O$  freigesetzt in der oberen Atmosphäre,  $CO_2$ ,  $CO$ ,  $NO_x$ ,  $SO_x$ , UHC, Ruß) einen erheblichen Anteil an der globalen Erderwärmung, dem sauren Regen und allen daraus resultierenden Folgen, wie z.B. dem Gletscherschmelzen, der



**Bild 1.1:** Prozentualer Anteil einzelner Energieträger; Stand 2003 (IEA, 2005)

zunehmenden Häufigkeit an Wirbelstürmen oder dem Waldsterben besitzen. Gerade diese direkt sicht- und spürbaren Folgen führten in den letzten Jahren zu verschärften Emissionsgrenzwerten, wie beispielsweise dem Bundes-Immissionsschutzgesetz (BImSchG) und daraus abgeleiteten Verordnungen, sowie zu den Richtlinien der International Civil Aviation Organization (ICAO) für die Emissionsgrenzwerte des Luftverkehrs oder dem Kyoto-Abkommen (1997). Vor diesem ökologischen sowie auch ökonomischen Hintergrund ist es nicht verwunderlich, dass die Optimierung von Verbrennungsprozessen eine große Bedeutung besitzt.

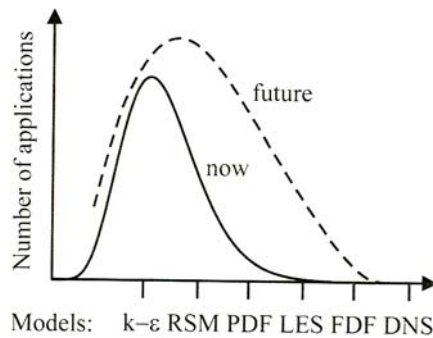
Das Verständnis über die physikalischen Vorgänge während der Verbrennung wird zum einen durch Grundlagen- und Validierungsexperimente, zum anderen durch numerische Simulationen stetig verbessert, wobei beide Verfahren unterschiedliche Vor- und Nachteile besitzen und sich im Idealfall ergänzen.

Allerdings ist der Zeit- und Kostenaufwand bzw. die Zugänglichkeit für Messungen bei Verbrennungsexperimenten derart hoch bzw. erschwert, dass aktuell große Anstrengungen unternommen werden, mathematische Modelle und numerische Simulationen zu entwickeln, um turbulente, reagierende Strömungen in komplexen technischen Konfigurationen - unter Berücksichtigung von Emissionen - zu beschreiben. Die vorliegende Arbeit soll aus der zuvor dargestellten Gesamtproblematik ein Teilgebiet, das die Interaktion der turbulenten Strömung mit dem chemischen Umsatz und deren numerischer Simulation beschreibt, behandeln.

## **1.1 Allgemeiner Überblick über Berechnungsmethoden und Problemstellung**

Technische Verbrennungsprozesse verlaufen fast ausschließlich turbulent. Um diese turbulenten, reagierenden Strömungen zu simulieren, gibt es theoretisch drei Möglichkeiten, die sich durch ihre räumliche Strömungsauflösung unterscheiden. Je nach Anwendungsfall und Problemstellung liegt die Wahl bei der Direkten Numerischen Simulation (DNS), der Large Eddy Simulation (LES) oder der Reynolds Average Navier Stokes (RANS) Methode. Die ein newtonsches Fluid beschreibenden Navier Stokes Gleichungen werden bei der DNS ohne zusätzliche Modelle, bei der LES mit Modellen für die kleinskaligen Strukturen und direkter Lösung der großskaligen Wirbel und bei der RANS durch Mittelung und vollständiger Modellierung der turbulenten Fluktuationen gelöst. Die DNS ist wichtig zum physikalischen Verständnis und zur Modellentwicklung, aber aufgrund ihrer enormen Rechenzeit ungeeignet zur Anwendung an realen technischen Konfigurationen, wie sie in dieser Arbeit simuliert werden sollen. Aktuell ist ein Trend in Richtung LES Berechnungen auszumachen, allerdings ist der Rechenaufwand für reagierende Strömungen derart hoch, dass bislang nur einfache zweidimensionale Laborflammen berechnet wurden (Duwig et al., 2006). Eine Alternative zur vollständigen LES besteht in der Koppelung zwischen LES und RANS. Dabei werden Gebiete mit großen Wirbelstrukturen mit LES und Gebiete mit geringer Wirbelstärke mit RANS berechnet. Problematisch ist allerdings ein konsistenter Übergang zwischen LES und RANS.

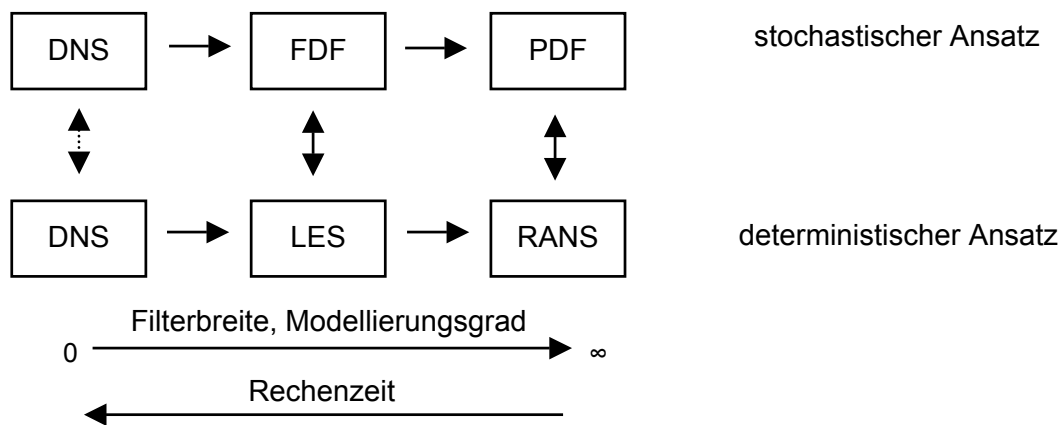
Die erwartete zukünftige Entwicklung von Berechnungsmethoden für die nächsten 20 Jahre bei industriellen Anwendungen wird nach (Pope, 1999) in Bild 1.2 gezeigt.



**Bild 1.2:** Heutige und zukünftige Entwicklung von Berechnungsverfahren industrieller Anwendung – Prognose (Pope, 1999)

Industriell wird z.Zt. die RANS Methode mit dazugehörigen Turbulenzmodellen, wie dem k-ε oder dem Reynolds-Stressmodell, zur Strömungssimulation angewandt. Bei reagierenden Strömungen treten aufgrund der starken Nichtlinearität Schließungsprobleme bei der Bestimmung der mittleren chemischen Umsatzraten auf. Dieser Umstand führte zur Erweiterung der RANS Methode auf die Wahrscheinlichkeitsdichte Methode (PDF-probability density function), die in dieser Arbeit zur Simulation turbulenter, reagierender Strömungen zur Anwendung kommt. Für industrielle Anwendungen sind derzeit FDF- (filter density function, ähnlich der PDF bei RANS) und DNS- Methoden bedeutungslos. Interessanterweise erwartet Pope zukünftig keine einfache Verschiebung zugunsten der LES-Methode, sondern eher ein stetiges Anwachsen der Anwendungen mit PDF-, LES- oder FDF-Ansatz. Die Hauptanwendung könnte weiterhin bei den RANS-Methoden liegen.

Bild 1.3 zeigt schematisch die Zusammenhänge zwischen den deterministischen Berechnungsmethoden inerter Strömungen (unten) und ihren jeweiligen „stochastischen Erweiterungen“ zur Simulation reagierender Fluide. Dabei lassen sich auch reaktive Strömungen mit LES und RANS berechnen, allerdings werden die Einflüsse der turbulenten Schwankungen auf den chemischen Umsatz vernachlässigt. Für die Filterweite 0 geht die FDF bzw. LES in die DNS über.



**Bild 1.3:** Zusammenhang zwischen den verschiedenen Berechnungsansätzen

Die technisch meist erwünschte Turbulenz bewirkt eine bessere Vermischung von Brennstoff und Oxidator, einen erhöhten chemischen Umsatz und somit einen verbesserten Ausbrand. Dies ermöglicht beispielsweise kompaktere Brennräume, spart Kosten und senkt die Maschinenabmessungen. Der Grund, warum LES und RANS reaktive Strömungen nur unzureichend beschreiben können, liegt in dem starken nichtlinearen Einfluss turbulenter Schwankungen auf den chemischen Umsatz. Dabei hängt die Reaktionsgeschwindigkeit exponentiell von der momentanen Temperatur und potentiell von der momentanen Zusammensetzung ab. Die Vernachlässigung der momentanen Temperaturen und Zusammensetzung auf den mittleren chemischen Quellterm führt zu unphysikalischen Ergebnissen und lässt keine Bestimmung von Nebenspezies wie NO<sub>x</sub> oder Ruß zu. Somit ist die Approximation  $\widetilde{S_\alpha(\varphi)} \approx S_\alpha(\tilde{\varphi})$  stark fehlerbehaftet. Die in dieser Arbeit verwendete PDF-Methode, die in den kommenden Kapiteln ausführlich beschrieben wird, beschreibt den chemischen Quellterm exakt ohne zusätzliche Modelle, und ist bei Verwendung komplexer Chemiemechanismen in der Lage Nebenspezies und Temperaturen hinreichend genau wiederzugeben.

## 1.2 Stand der Forschung

Der im Folgenden präsentierte Überblick soll lediglich einen Eindruck von den unternommenen Forschungsanstrengungen auf dem Gebiet der Verbrennung

geben. Die verwendeten Begriffe und Zusammenhänge werden in den späteren Kapiteln diskutiert.

Bis Mitte der 80iger Jahre wurden große Anstrengungen unternommen, turbulente, inerte Strömungen durch Mittelung der Bilanzgleichungen und Modellierung des entstehenden Reynolds-Stresstensors zu beschreiben. Dazu wurden die bis heute gebräuchlichen  $k$ - $\epsilon$ ,  $k$ - $\omega$  oder Reynolds-Spannungsmodelle entwickelt. Parallel dazu sind im Bereich der Verfahrenstechnik sehr detaillierte Analysen über den zeitlichen Verlauf (Reaktionskinetik) technisch interessierender Reaktionen (z.B. Methanoxidation) durchgeführt worden. Die Modellierung der Umsätze fand im Rührkessel unter Ausschluss von konvektiver Strömung statt. Es entstanden dabei Reaktionsmechanismen mit mehreren 100 Reaktionen und über 30 beteiligten Spezies (Warnatz et al., 2001). Die Kombination dieser detaillierten Chemiemechanismen mit einem turbulenten Strömungsfeld (z.B. zur Simulation der Ottomotorischen Verbrennung) war mit der damaligen Rechenleistung unmöglich und ist mit den heutigen Hochleistungsrechnern praktisch noch nicht durchführbar.

Die ersten Verbrennungsmodelle, die im Zusammenspiel mit dem turbulenten Strömungsfeld eingesetzt wurden, sind heute noch wegen ihrer Robustheit sehr beliebt. Diese sogenannten Wirbelzerfallsmodelle, Eddy-Breakup (Spalding, 1976) und Eddy-Dissipations-Model (Magnussen et al., 1976) führen die Verbrennung auf die turbulente Vermischung zurück („gemischt=verbrannt“). Hierbei werden das turbulente Strömungsfeld und die chemische Umsetzung weitestgehend getrennt voneinander betrachtet. In Verbindung mit einem Ein-Schritt-Chemiemechanismus erlauben diese Modelle die Vorhersage der Hauptspezies  $H_2O$ ,  $CO_2$  und der Temperatur. Ist man hingegen an Nebenspezies wie  $CO$ ,  $NO_x$  oder Russ interessiert, so muss man zum einen eine höherwertige Chemiebeschreibung und zum anderen die Wechselwirkung zwischen turbulentem Strömungsfeld und chemischer Reaktion beschreiben.

Eine bedeutsame Rolle spielen in diesem Zusammenhang die Gruppe der Flamelet-Modelle (Peters, 1987). Im Falle sehr großer Damköhler-Zahlen sind die Reaktionsgeschwindigkeiten sehr viel kleiner als die turbulente Mischungszeit,

daher kann man für diesen Grenzfall eine Skalenseparation vornehmen. Die Grundidee bei der Flamelet Behandlung besteht in der Trennung von chemischer Dynamik und dem turbulenten Strömungsfeld. Dies ermöglicht es, die turbulente Flamme in viele, kleine laminare und eindimensionale Flamelets aufzuteilen und getrennt von den physikalischen Prozessen zu berechnen. Die nunmehr laminaren Flammen können mit detaillierter Reaktionskinetik berechnet und tabelliert als Sub-Modell einer CFD-Rechnung beigefügt werden. Die dann von einem CFD-Programm zu lösenden, unabhängigen Koordinaten sind meist der Mischungsbruch, seine Varianz und die Streckungsrate der Flammenfront, wodurch Nichtgleichgewichtszustände berücksichtigt werden können. Die Koppelung zwischen chemischen Umsatz und turbulentem Strömungsfeld kann einerseits durch Formannahme einer Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (presumed-PDF), andererseits durch Lösung einer Transportgleichung für die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (transported-PDF) erfolgen. Letzteres wird in dieser Arbeit verwendet, wobei allerdings keine Flamelet-Chemie zur Anwendung kommt. Experimentelle LIF Messungen bestätigen die Flamelet Struktur bei nicht-vorgemischter Verbrennung (Becker et al., 1991). Ein Hauptanwendungsgebiet der Flamelet-Modelle ist die motorische Verbrennung (Steiner, 2004).

In realen Verbrennungskonfigurationen ist allerdings meist ein Spektrum von kleinen bis sehr hohen Damköhler-Zahlen anzutreffen, so dass das Flamelet-Modell nur in teilbereichen Gültigkeit besitzt.

Ein Modell, das ohne Gültigkeitsbeschränkungen bezüglich der Damköhler-Zahl einsetzbar ist, für nicht-vorgemischte, partiell-vorgemischte und vorgemischte Konfigurationen und den chemischen Umsatz exakt ohne zusätzlichen Modellierungsaufwand beschreibt, ist das in dieser Arbeit verwendete PDF-Transportgleichungsmodell. Ist man an dem Erwartungswert einer beliebigen Funktion, wie beispielsweise dem chemischen Quellterm, interessiert, so erhält man diesen aus der Summation aller möglichen Funktionswerterealisationen (Stichproben) gewichtet mit der Wahrscheinlichkeit ihrer Realisierung. Bezogen auf den chemischen Quellterm bedeutet dies, dass die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion in Abhängigkeit der thermochemischen Variablen Temperatur und der

an der Reaktion beteiligten Spezies zu jedem Zeitpunkt an einem bestimmten Ort im Strömungsfeld gesucht ist.

Als einer der Ersten löste (Lundgren, 1969) eine PDF-Transportgleichung für die Geschwindigkeiten und vermied dadurch die üblichen Reynolds-Stress-Schließungen durch einfache Relaxationsmodelle. In den 70iger Jahren wurden mit Skalar-PDF-Ansätzen erfolgreich turbulente, reagierende Strömungen simuliert. Im Gegensatz zu den herkömmlichen Momentenmethoden konnte so der mittlere chemische Quellterm exakt dargestellt werden (Dopazo und O'Brien, 1974). Problematisch war allerdings die numerische Lösung dieser hochdimensionalen Transportgleichung mit Finite-Differenzen-Methoden, so dass erst durch Einführung eines stochastischen Monte-Carlo-Lösungsverfahrens (Sobol, 1971) durch Pope eine effiziente Lösung der Transportgleichung möglich war (Pope, 1981). Bei der im Kapitel 4 noch ausführlich beschriebenen Monte-Carlo-Methode wird über ein leicht zu berechnendes stochastisches System mittels sogenannter stochastischer Partikel die PDF-Transportgleichung gelöst. Dies ist möglich, da unterschiedliche stochastische Prozesse die gleichen Verteilungsfunktionen wie das reale Fluidsystem besitzen können. Diese effiziente Lösungsmethode machte es möglich, neben den Stoffkonzentrationen und der Temperatur auch die Geschwindigkeiten als unabhängige Variable in die PDF-Transportgleichung mit aufzunehmen (Pope, 1985). Einen umfassenden Überblick über Theorie, Herleitung und Lösung der sogenannten Joint-PDF liefert (Pope, 1985, 2000).

In der Folgezeit etablierten sich verschiedene PDF Varianten. Dabei kann man die Komplexität der PDF von der „einfachen“ Skalar-PDF, über die Joint-Velocity-Skalar-PDF bis hin zur Stand-Alone-PDF durch die Anzahl der unabhängigen Variablen steigern. Benötigt man bei der Skalar-PDF Informationen über das Geschwindigkeits- und Turbulenzfeld, so ist man bei der Stand-Alone-PDF unabhängig von zusätzlichen Informationen aus herkömmlichen Finite-Volumen-Berechnungen. Allerdings hat eine gekoppelte PDF-Finite-Volumen-Simulation entscheidende Vorteile. Man besitzt einen numerisch stabilen Finite-Volumen-Solver für die Kontinuitäts-, Impuls- und Turbulenzgleichungen und verwendet für die Spezies- und Energiegleichung die PDF-Formulierung mit

exakter Behandlung des chemischen Quellterms. Weitere Probleme bereitet die Bestimmung des mittleren Druckgradienten aus dem Partikelgeschwindigkeitsfeld der Joint- bzw. Stand-Alone-PDF aufgrund des statistischen Rauschens, so dass der Druckgradient meistens aus einer Finiten-Volumen-Simulation in iterativer Koppelung mit der PDF bereitgestellt wird (Nau, 1997), (Möbius, 2001). Allerdings entstehen bei diesen Formulierungen z.T. doppelte Felder, da z.B. die PDF und die Impulsgleichungen ein mittleres Geschwindigkeitsfeld als Ergebnis hervorbringen. Diese Konsistenzfragen sind in jüngsten Arbeiten von (Muradoglu et al., 1999, 2002) und (Jenny et al., 2001, 2001) untersucht worden. Ein guter Kompromiss aus numerischer Stabilität, Konsistenz (Vermeidung doppelter Felder) und numerischem Rechenaufwand ist die in dieser Arbeit verwendete klassische Koppelung zwischen Skalar-PDF und Finite-Volumen-Methode über die mittlere Dichte.

Zur Lösung der PDF wird das schon angesprochene Monte-Carlo-Verfahren mit sogenannten stochastischen Partikel verwendet. Dabei können die Partikel entsprechend der Euler'schen Betrachtungsweise diskreten Zellgitterpunkten zugeordnet werden (Scheurlen, 1992). Der räumliche Austausch erfolgt aufgrund des konvektiven und diffusiven Flusses in bzw. aus der Zelle, wobei sich entsprechend die Partikelanzahl pro Gitterpunkt ändert. Laxander und Hinz berechneten mit derartigen Ansätzen Jetflammen (Laxander, 1996) bzw. eine Versuchsbrennkammer unter Berücksichtigung von Strahlungseffekten (Hinz, 2000). Im Gegensatz dazu wird in dieser Arbeit die Lagrange Betrachtungsweise verwendet, bei dem sich einzelne Partikel durch das Strömungsgebiet bewegen. Dieser Ansatz bietet den Vorteil der einfachen Erweiterung auf eine Joint-Velocity-PDF bzw. eine Erweiterung zur Beschreibung der Tropfenverteilung mittels einer PDF für heterogene Verbrennung. Einen Überblick über die verschiedenen PDF-Formulierungen, Lösungsansätze und ihre Anwendung auf Überschallverbrennung gibt (Möbius, 2001).

Neben dem hohen numerischen Aufwand besitzt die PDF-Methode aufgrund ihrer Ein-Punkt-Formulierung einen weiteren Nachteil. Die erforderlichen räumlichen Gradienten zur Schließung der molekularen Mischung fehlen, so dass dieser Term modelliert werden muss. Es existieren zahlreiche Mischungsmodel-

le (u.a. IEM, Curl, EMST), allerdings gibt es keinen physikalisch validierten Ansatz für turbulente, reagierende Strömungen.

In einer Vielzahl von Veröffentlichungen wird die PDF-Methode auf nicht-vorgemischte Flammen, seltener auf vorgemischte Flammen (Bender, 2003) angewendet. Eine experimentelle Datenbasis zur Validierung schaffte (Barlow und Frank, 1998, 2003) durch das Vermessen pilotierter Freistrahlfammen.

Chen und Kollmann berechneten turbulente Propan/Luft Freistrahlfammen mit einem Skalar-PDF-Ansatz und Vier-Schritt-Chemie (Chen und Kollmann, 1988). Das Turbulenzfeld wird mit einem Reynolds-Stressmodell berechnet, wodurch der turbulente Transport mit einem Gradienten-Transport-Ansatz geschlossen werden kann. Dieses Schließungsmodell soll auch in der vorliegenden Arbeit untersucht werden. Qualitativ wurden gute Übereinstimmungen mit dem Experiment erzielt, jedoch konnte ein Flammenlöschen nur unzureichend wiedergegeben werden.

Nau berechnete Freistrahlfammen mit einer Joint-Velocity-Skalar-PDF (Nau, 1996) und ILDM-Chemie (Maas, 1993), während (Laxander, 1996) und (Hinz, 2000) einem Euler Skalar-PDF-Ansatz mit Vier-Schritt- bzw. ILDM-Chemie verwendeten. Dabei konnte vor allem das Flammenlöschen in weiten Bereichen zufriedenstellend wiedergegeben werden. Nooren et al. verglich mit einer Joint-PDF-Simulation den Einfluss verschiedener Mischungsmodelle auf die Vorhersage der Temperaturen und Stoffkonzentrationen (Nooren et al., 1997). Dabei wurde der große Einfluss des Mikromischens auf den kleinen Skalen für die Vorhersagen betont. Weitere Veröffentlichungen u.a. von Pope auf dem (TNF6, 2002) und dem (TNF7, 2004) zeigten ähnliche Schwierigkeiten speziell bei der Vorhersage von Flammenlöschen und Wiederezünden. Es wurden wiederum verschiedene Mischungsmodelle mit DNS Daten verglichen, wobei jedes Modell verschiedene Vor- und Nachteile besitzt und letztlich die Notwendigkeit eines neuen, physikalisch validierten Mischungsmodells aufgestellt wurde.

Darüber hinaus gibt es zahlreiche Veröffentlichungen über die Simulationen von Jetflammen mit alternativen Verbrennungsmodellen, wie z.B. (Ferreira, 1996) mit Flamelet-Modellen oder (Landenfeld, 1999) mit presumed-PDFs.

Im Gegensatz zu den Freistrahlfammen besitzen reale Brennkammern ein ausgeprägtes Rezirkulationsgebiet zur Stabilisierung der Flammenfront. Ein ähnliches Rezirkulationsgebiet erhält man durch staukörperstabilisierte Flammen. Über diese Flammenkonfiguration liegt eine umfangreiche experimentelle Datenbank vor (Bluff-Body Flows & Flame Database). Wouters verglich in diesem Zusammenhang die Konsistenz zwischen Turbulenzmodellen 2. Ordnung (RSM) von Finiten-Volumen-Methoden mit den vergleichbaren stochastischen Modellen (simplified oder generalized Langevin Modell) für die Reynolds-Stressberechnung auf Basis der Joint-PDF-Methode (Wouters, 1996). Dabei waren die RSM Modelle den einfacheren  $k-\epsilon$  Turbulenzmodellen bei der Wiedergabe der Rezirkulationszone überlegen. Liu simulierte mit einem Joint-PDF-Ansatz und Neun-Schritt-Chemiemechanismus staukörperstabilisierte Flammen (Liu, 2004). Er konnte die Rechenzeit durch Verwendung einer adaptiven Chemietabellierung (Pope, 1997) erheblich verringern. Die Übereinstimmung mit den experimentellen Daten war hoch, lediglich bei der NO Vorhersage gab es erhebliche Abweichungen.

Die zuvor beschriebenen generischen Modellflammen sind als Zwischenschritt zur Simulation komplexer Geometrie zu verstehen. Es gibt derzeit kaum Veröffentlichungen über den Einsatz von Transport-PDF-Modellen zur Simulation von nicht-vorgemischten oder vorgemischten Brennkammern. Hinz berechnet mit einem Euler-PDF-Ansatz und ILDM-Chemie den sogenannten TECFLAM Drallbrenner, der eine thermische Leistung von 150 kW besitzt (Hinz, 2000). Diese halb-technische Konfiguration wird mit handelsüblichem Erdgas betrieben, ist mittels Raman/Rayleigh Spektroskopie und LDA vermessen und wurde durch Hinz zweidimensional modelliert. Die erhaltenen Ergebnisse wurden mit einer zweiten Rechnung, unter Berücksichtigung von Strahlungseffekten und Gleichgewichtschemie, verglichen. Es zeigten sich bei beiden Rechnungen deutliche Abweichungen zum Experiment bei den Spezies und der Temperatur. Großschmidt et al. simulierte mit einem Lagrangschen Skalaren-PDF-Ansatz einen vorgemischten Bunsenbrenner mit einer 2-Domain 1-Schritt Chemiekinetik (Großschmidt et al., 2006). Wetzel und Zarzalis berechneten eine Versuchsdrallbrennkammer mit einem presumed-PDF-Ansatz und der zuvor genannten

Reaktionskinetik unter Berücksichtigung von Wärmeverlusten durch Strahlung und Konvektion (Wetzel und Zarzalis, 2006). Ein weiterer Anwendungsfall für die Transport-PDF ist die Berechnung einer dreidimensionalen, instationären Zylinderinnenströmung eines Verbrennungsmotors durch (Haworth und Tahry, 1990). Die Berechnung erfolgte allerdings für das inerte Strömungsfeld und ist als Zwischenschritt für eine turbulente, reagierende Strömung zu sehen.

Industrieller Standard zur Berechnung von Brennkammern sind derzeit das EDM Verbrennungsmodell (Syed et al., 2004) bzw. auch presumed-PDF-Methoden (Pixner und Krebs, 2004).

### **1.3 Zielsetzung und Vorgehen**

Das Ziel dieser Arbeit ist die Untersuchung der Einsatzmöglichkeit der Transport-PDF-Methode zur Beschreibung der Wärmefreisetzung in einer realen Brennkammer und deren Vergleich mit etablierten Verbrennungsmodellen, wie dem EDM- oder Flamelet-Modell. Als Zwischenschritt hierfür werden generische Freistrah- und staukörperstabilisierte Flammen berechnet. Dabei gilt es unterschiedliche Mischungs- und turbulente Transportmodelle einzusetzen und zu bewerten.

Aus der zuvor beschriebenen Vielfalt der PDF-Transportgleichungs-Ansätze kommt aufgrund der numerischen Stabilitätseigenschaften, der verhältnismäßig geringen Rechenzeiten und des reduzierten Speicherbedarfs nur die Skalar-PDF-Methode mit reduzierten Chemiemechanismen in Betracht. Das erstellte Programm zur Lösung der PDF-Transportgleichung bekommt die erforderlichen Geschwindigkeits- und Turbulenzfelder aus einem kommerziellen CFD-Programm (ANSYS CFX 10.0), während die chemischen Umsätze aus einer tabellierten ILDM- (Schmidt, 1996) bzw. einem 5-Schritt-Mechanismus (Chen, 1996) stammen.

Nachdem im Kapitel 2 eine phänomenologische Beschreibung der Strömungs- und Verbrennungsvorgänge erfolgt, behandelt Kapitel 3 die theoretischen Grundlagen zur Beschreibung turbulenter, reaktiver Fluide. Kapitel 4 stellt die Herleitung und Beschreibung der PDF-Gleichung dar. Das numerische Lö-

sungsverfahren wird in Kapitel 5 vorgestellt. Die Anwendung und Validierung der Numerik erfolgt an pilotierten Freistrah- und staukörperstabilisierten Flammen. Die Simulationsergebnisse werden in Hinblick auf unterschiedliche Mischungs- und turbulenter Transportmodelle diskutiert. In Kapitel 6 erfolgt die Berechnung einer stationären Gasturbinenbrennkammer sowie ein Vergleich mit experimentellen Daten.

## 2 Phänomenologische Beschreibung turbulenter, reaktiver Strömungen

Bevor in Kapitel 3 die mathematische Herleitung der zugrunde gelegten Gleichungen erfolgt, sollen in diesem Abschnitt die turbulenten Strömungs- und Flammenstrukturen diskutiert werden. Die Einteilung von Flammen in bestimmte Bereiche vereinfacht die Entwicklung von „lokal“ gültigen Modellen. Dabei dienen Kennzahlen zur Charakterisierung von Verbrennungs- und Strömungsprozessen. Es werden im Folgenden zunächst getrennt die Strömungs- und Flammenstruktur erläutert und danach die Interaktion beider Prozesse beschrieben.

### 2.1 Turbulente Strömung

Zwar ist die Mehrzahl aller Strömungen turbulent, dennoch bereitet die exakte, prägnante Definition von Turbulenz erhebliche Schwierigkeiten. Rotta (1972) charakterisiert Turbulenz durch 3 Eigenschaften:

1. Turbulente Strömungen verlaufen unregelmäßig in Ort und Zeit.
2. Turbulente Strömungen sind Wirbelströmungen.
3. Turbulente Strömungen sind dreidimensional und instationär.

Aufgrund von Punkt 1, kann man turbulente Strömungen als stochastischen Prozess auffassen. Turbulenz bildet sich typischer Weise bei hohen Reynoldszahlen:

$$\text{Re} = \frac{ul}{\nu} \quad (2.1)$$

aus, d.h. die Massenträgheitskräfte mit  $u$  als Strömungsgeschwindigkeit werden durch die Reibungskräfte mit  $\nu$  als kinematische Viskosität nicht ausreichend gedämpft.

Nach (Taylor, 1935) besitzt eine turbulente Strömung ein breites Spektrum von Wirbeln unterschiedlicher Abmessungen. Die charakteristischen Wirbelabmes-

sungen ergeben sich aus zueinander korrelierten Geschwindigkeitsschwankungen. Phänomenologisch kann man sich Turbulenz als Interaktion von Elementen unterschiedlicher Größe, die jeweils im unterschiedlichen Maße an der gesamten kinetischen Energie beitragen, vorstellen. So speisen Strömungsgradienten Energie in sogenannte große Wirbelballen der Länge  $l_t$ . Diese instabilen Wirbel werden gestreckt bzw. aufgerollt, wodurch ein Energietransfer von der Hauptströmung zu kleineren Wirbeln stattfindet. Vernachlässigt man Reibungskräfte, so folgt aus der Drehimpulserhaltung mit abnehmenden Wirbeldurchmesser eine Erhöhung der Wirbelgeschwindigkeit. Schließlich wird der Durchmesser so gering, dass durch die viskosen Kräfte die kinetische Energie in Wärme umgewandelt wird. Turbulente Austauschvorgänge finden zwischen unterschiedlichen Wirbelelementen statt.

Da sich Turbulenz durch ein Spektrum verschiedener Längen- und Zeitskalen auszeichnet, ist die Fourier-Analyse ein geeignetes Mittel zur mathematischen Strömungsanalyse. So kann aus der räumlichen Korrelation der Geschwindigkeitsschwankungen mit  $R$  als Tensor zweiter Stufe:

$$R_{ij}(\mathbf{x}, \mathbf{r}, t) = \langle u_i'(\mathbf{x}, t) \cdot u_j'(\mathbf{x} + \mathbf{r}, t) \rangle \quad (2.2)$$

eine räumliche Fouriertransformation in den Kreiszahlraum  $\kappa=2\pi/\lambda$ :

$$e_{ij}(\mathbf{x}, \mathbf{\kappa}, t) = \frac{1}{(2\pi^3)} \iiint_{-\infty}^{+\infty} \exp(-i\mathbf{\kappa} \circ \mathbf{r}) R_{ij}(\mathbf{x}, \mathbf{r}, t) d\mathbf{r} \quad (2.3)$$

erfolgen. Wird diese spektrale Verteilungsdichte im Wellenzahlenraum aufintegriert, so erhält man die gesamte turbulente kinetische Energie an einem Ort  $\mathbf{x}$  zur Zeit  $t$ :

$$k(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{2} \langle u_i' u_i' \rangle = \frac{1}{2} \iiint_{-\infty}^{+\infty} e_{ii}(\mathbf{x}, \mathbf{\kappa}, t) d\mathbf{\kappa}. \quad (2.4)$$

Für den Spezialfall der homogenen isotropen Turbulenz kann man statt der Integration von  $e_{ij}$  über den Vektor der Kreiszahl, über eine Kugeloberfläche mit dem Betrag  $\kappa = |\mathbf{\kappa}|$  integrieren und erhält eine Energiedichte  $e(\kappa, t)$ :

$$e(\kappa, t) = \iiint_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{2} \cdot e_{ii}(\mathbf{\kappa}, t) \cdot \delta(|\mathbf{\kappa}| - \kappa) d\mathbf{\kappa} \quad (2.5)$$

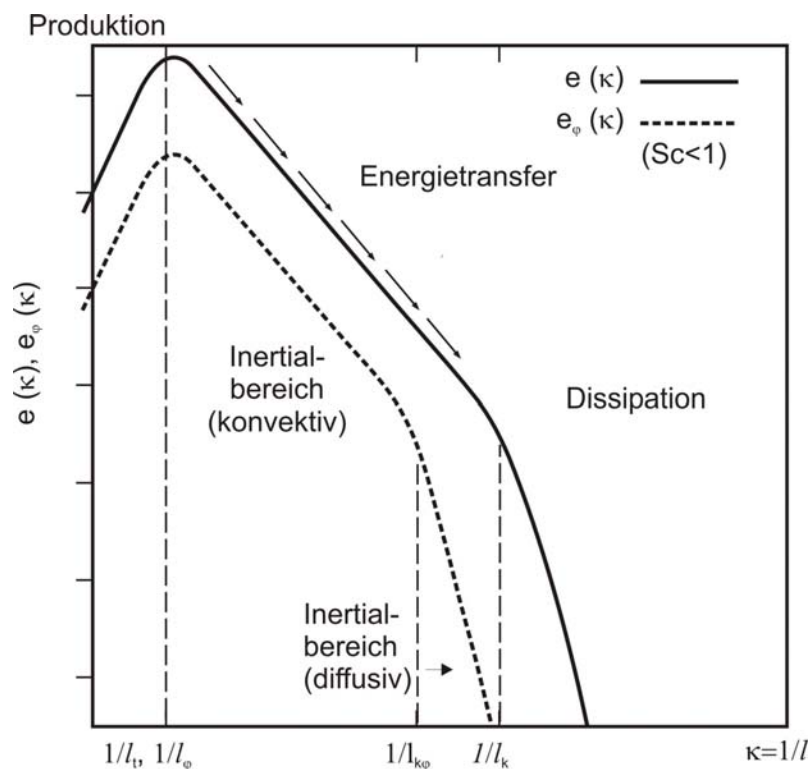
Die dynamische Entwicklung dieses Energiespektrums ist gegeben durch eine Umverteilungs- und eine Dissipationsfunktion. Der Umverteilungsterm beschreibt den Transport turbulenter kinetischer Energie von den energiereichen Wirbeln der Größe  $l_t$  zum Dissipationsbereich. Dieser ist gegeben durch:

$$D(\kappa, t) = 2\nu\kappa^2 e(\kappa, t) \quad (2.6)$$

und beschreibt die Umwandlung von kinetischer Energie in Wärmeenergie. Das integrale Längenmaß kann über die Autokorrelationsfunktion  $R_{11}$  zu:

$$l_t \equiv \frac{1}{\langle u_1'^2 \rangle} \int_0^\infty R_{11} dr_1 \quad (2.7)$$

definiert werden. Die kinetische Energie und die Dissipationsrate erhält man bei homogener, isotroper Turbulenz aus der Integration der Energiedichte bzw. des Dissipationsterms über die Wellenzahl  $\kappa$ .



**Bild 2.1:** Darstellung des turbulenten Energiespektrums und der Skalarspektren (inert) für  $Sc < 1$  (Gase) in dreidimensionaler, homogener, isotroper Turbulenz

Bild 2.1 zeigt die spektrale Verteilung der Energiedichte  $e(\kappa, t)$  und der Skalarvarianz  $e_\varphi(\kappa, t)$  für homogene, isotrope Turbulenz. Der von (Kolmogorov, 1941)

hergeleitete Zusammenhang im Inertialbereich  $e(\kappa) \sim \kappa^{-5/3}$  ist deutlich erkennbar (doppelt logarithmische Auftragung von  $\kappa$  und  $e$ ).

Mit der ersten lokalen Ähnlichkeitshypothese von Kolmogorov kann man die entsprechenden Kolmogorov-Skalen, unterhalb derer keine turbulenten Prozesse mehr stattfinden, ableiten. Danach gilt bei hohen Reynoldszahlen für bestimmte Wirbelklassen lokale Isotropie, d.h. das Energiespektrum hängt einzig von der kinematischen Viskosität  $\nu$  [ $\text{m}^2/\text{s}$ ] und der Dissipationsrate  $\varepsilon$  [ $\text{m}^2/\text{s}^3$ ] ab. Somit lässt sich die Kolmogorov- Länge, -Zeit und -Geschwindigkeit:

$$\begin{aligned} l_k &= (\nu^3 / \varepsilon)^{1/4} \\ t_k &= (\nu / \varepsilon)^{1/2} \\ u_k &= (\varepsilon \nu)^{1/4} \end{aligned} \quad (2.8)$$

für die kleinsten dissipativen Skalen ableiten. Die zweite lokale Ähnlichkeitshypothese von Kolmogorov besagt, dass in einem Inertialbereich der Energietransport von Wirbeln der Größen  $l_t < l < l_k$  unabhängig von der kinematischen Viskosität  $\nu$  ist, und einzig über die Dissipationsrate  $\varepsilon$  bestimmt wird. Die turbulente kinetische Energie wird somit von den großen produzierenden Skalen  $l_t$  spektral in den Dissipationsbereich  $l_k$  transportiert. Diese Überlegungen führen zu der schon angesprochenen Proportionalität  $e(\kappa) \sim \varepsilon^{2/3} \kappa^{-5/3}$ .

Analog zur Energiekaskade der turbulenten kinetischen Energie kann man die spektrale Verteilung der Skalarvarianz  $e_\varphi(\kappa, t)$ , ausgehend von der Skalarkorrelation (siehe (2.5)), darstellen. Bild 2.1 zeigt den Verlauf  $e_\varphi(\kappa, t)$  für Schmidtzahlen  $Sc = \nu/D < 1$  (Gase) in inerter Strömung. Analog zur Geschwindigkeitsskala kann ein turbulentes Makrozeitmaß  $t_\varphi$ , das die turbulente Mischungszeit repräsentiert, und eine molekulare Mischungszeit  $t_{k\varphi}$  abgeleitet werden. Integriert man die skalare Dissipationsfunktion über alle Kreiszahlen  $\kappa$ , so erhält man die skalare Dissipationsrate:

$$\varepsilon_\varphi = D \left\langle \frac{\partial \varphi'}{\partial x_i} \frac{\partial \varphi'}{\partial x_i} \right\rangle. \quad (2.9)$$

Somit ist die integrale Mischungszeit für den Inertialbereich durch:

$$t_\varphi = \frac{1}{2} \frac{\langle \varphi'^2 \rangle}{\varepsilon_\varphi}, \quad (2.10)$$

mit  $\langle \varphi'^2 \rangle$  als Skalarvarianz gegeben.

Eine ausführliche Beschreibung turbulenter Strömungen ist in (Rotta, 1972), (Pope, 2000) zu finden.

## 2.2 Turbulente Mischung

Der Vorgang der turbulenten Mischung erstreckt sich über ein Spektrum von Längen- und Zeitskalen – beginnend mit Wirbeln im integralen Längenmaß bis hin zu den kleinsten Wirbeln im Kolmogorov-Längenmaß. Um letztlich eine chemische Reaktion zwischen zwei Spezies herbeizuführen, müssen sich die Moleküle durch Diffusion zueinander bewegen, denn selbst die kleinsten Skalen konvektiven Transports sind noch viel größer als die freie Molekülweglänge.

In laminaren Strömungen gibt es klar getrennte Isoflächen über die ein Massenfluss aufgrund eines Konzentrationsgradienten erfolgt (Ficksches Gesetz):

$$j_\alpha = -\rho D_\alpha \frac{\partial Y_\alpha}{\partial x_i} \quad \text{in} \left[ \frac{\text{kg}_\alpha}{\text{s} \cdot \text{m}^2} \right] \quad (2.11)$$

Auch in turbulenten Strömungen wird letztlich die Mischung durch (2.11) beschrieben. Allerdings gibt es nun keine klar getrennten Isoflächen mehr. Es kommt durch turbulenzbedingte Streckungs- und Faltungsprozesse zu einer Flächenvergrößerung und somit zu einer (technisch meist erwünschten) Beschleunigung der Vermischung. Stellt man sich beispielsweise einen Würfel der Kantenlänge  $l$  mit der Fläche  $A=6l^2$  vor und unterteilt diesen nach jeder Umdrehung in 8 gleich große kleinere Würfel (turbulente Energiekaskade), so hat sich die Oberfläche nach  $N$ -Umdrehungen auf  $A=2^N 6l^2$  erhöht. Die Ursache der Streckung und Faltungsbewegung von Isoflächen liegt somit in dem konvektiven Wirbeltransport bzw. dessen Zerfallsprozessen. Große Wirbel sind relativ stabil und können homogene Fluidteile über weite Strecken an unterschiedliche Orte transportieren. Dies bewirkt eine Skalenreduktion und hohe Skalargradienten die zusätzlich zur Flächenvergrößerung die molekulare Mischung beschleunigen.

nigen. Letztlich assoziiert der Begriff turbulente Mischung in dieser Arbeit folgende Vorgänge (Ferreira, 1996):

1. Turbulenzbedingter konvektiver Wirbeltransport.
2. Reduzierung großskaliger Wirbel und Umverteilung zusammenhängender Wirbelballen.
3. Durch turbulente Rotationsbewegungen der Wirbelballen hervorgerufene Streckung und Faltung vergrößern sich die sogenannten Isoflächen und die lokalen Skalargradienten.
4. Dadurch hervorgerufene Erhöhung der molekularen Diffusion nach (2.11), eventuell verbunden mit einer chemische Reaktion.

Obengenannte Prozesse spielen sich auf unterschiedlichen Zeitskalen ab. Wirbel entstehen auf einer integralen Zeitskala, Diffusionsvorgänge sind charakteristisch im Bereich der Kolmogorov-Zeit. Demnach ist offensichtlich, dass zur Beschreibung dieses Kaskadenprozesses eine Zeitskala nach (2.10) benötigt wird.

### **2.3 Vormischflammen**

Bei der turbulenten Verbrennung lassen sich grundsätzlich zwei idealisierte Flammenarten unterscheiden. Obwohl der Schwerpunkt dieser Arbeit bei den nicht-vorgemischten Flammen liegt, wird zunächst die Vormischflamme behandelt, bei der eine eindeutige Zuordnung in unterschiedliche Verbrennungsbereiche möglich ist.

Wird der Brennstoff und Oxidator schon vor der eigentlichen Verbrennung zu einem homogenen Gemisch zusammengebracht, so breitet sich die Flammenfront mit der Flammengeschwindigkeit in Richtung des unverbrannten Gemisches aus. Die PDF des Mischungsgrads (Mischungsbruch) ist demnach eine Delta-Funktion. Anwendung findet die Vormischverbrennung beispielsweise bei dem saugrohreinspritzenden Ottomotor oder bei stationären Gasturbinen.

Die Struktur einer Vormischflamme soll zunächst an einer laminaren Methan/Luft Flamme erklärt werden. Grundsätzlich kann man dabei eine

Vorwärm-, eine Reaktions- und eine Ausbrandzone unterscheiden. Dies zusammengenommen bildet die Flammenfront, die sich mit der laminaren Flammengeschwindigkeit  $\Lambda_l$  fortpflanzt. In der Vorwärmzone findet ein Stoff- und Wärmetransport vorwiegend durch Konvektion, Diffusion und Wärmeleitung statt, so dass sich ein Gleichgewicht zwischen Konvektion und Diffusion/Wärmeleitung einstellt. Die dadurch auf Zündbedingungen aufgeheizten Edukte reagieren unter Wärmefreisetzung in der Reaktionszone in erster Näherung zu CO, H<sub>2</sub> und entsprechenden Radikalen. Eine Oxidation von CO und H<sub>2</sub> zu den Verbrennungsprodukten CO<sub>2</sub> und H<sub>2</sub>O erfolgt in der Ausbrandzone.

Löst man die zugrunde liegenden Erhaltungsgleichungen, so erhält man vereinfachend eine charakteristische laminare Flammengeschwindigkeit, mit der sich die ebene Flammenfront relativ zur Anströmgeschwindigkeit ausbreitet, als Eigenwert dieser Gleichungen (Zeldovich und Frank-Kamenteskii, 1938):

$$\Lambda_l = \left( \frac{\lambda}{\rho c_p} \frac{1}{t_F} \right)^{1/2}, \quad (2.12)$$

mit  $\lambda/(\rho c_p)$  als thermische Leitfähigkeit und mit  $t_F$  als charakteristische Reaktionszeit. Hieraus ergibt sich die laminare Flammenfrontdicke zu:

$$l_F = t_F \Lambda_l. \quad (2.13)$$

Eine andere Abschätzung der Flammenfrontdicke erhält man über den Temperaturgradienten am Ort der Zündung:

$$l_F = (T_b - T_u) / (\partial T / \partial x)_{ig}. \quad (2.14)$$

Die Dicke der Reaktionszone für Methan/Luft Flammen beträgt näherungsweise unter Standardbedingungen 1/10 der Flammenfrontdicke (Hoffmann, 2004).

Auf die Beschreibung der laminaren Flamme aufbauend, soll nun die Einteilung der turbulenten Vormischflamme in verschiedene Bereiche erfolgen. Dazu hat Borghi 1988 ein Diagramm vorgeschlagen, das auf den Vergleich der charakteristischen Zeitskalen von turbulenter Mischung  $t_t$  und chemischer Kinetik  $t_F$  in dimensionslosen Geschwindigkeits- und Längenmaßen beruht. Ist die Schmidtzahl  $Sc = \nu/D$ , die das Verhältnis von kinematischer Viskosität zum Diffusions-

koeffizienten der Mischung beschreibt gleich eins, so kann die turbulente Reynoldszahl mit dem turbulenten Längenmass  $l_t$  zu:

$$\text{Re}_t = \frac{u' l_t}{\nu} = \frac{u'}{\Lambda_l} \frac{l_t}{l_F} \quad (2.15)$$

definiert werden. Die turbulente Damköhlerzahl beschreibt das Verhältnis aus der integralen Zeitskala der turbulenten Strömung zur charakteristischen Zeitskala der laminaren Flamme, abgeschätzt über die Flammenfrontdicke und Flammengeschwindigkeit als:

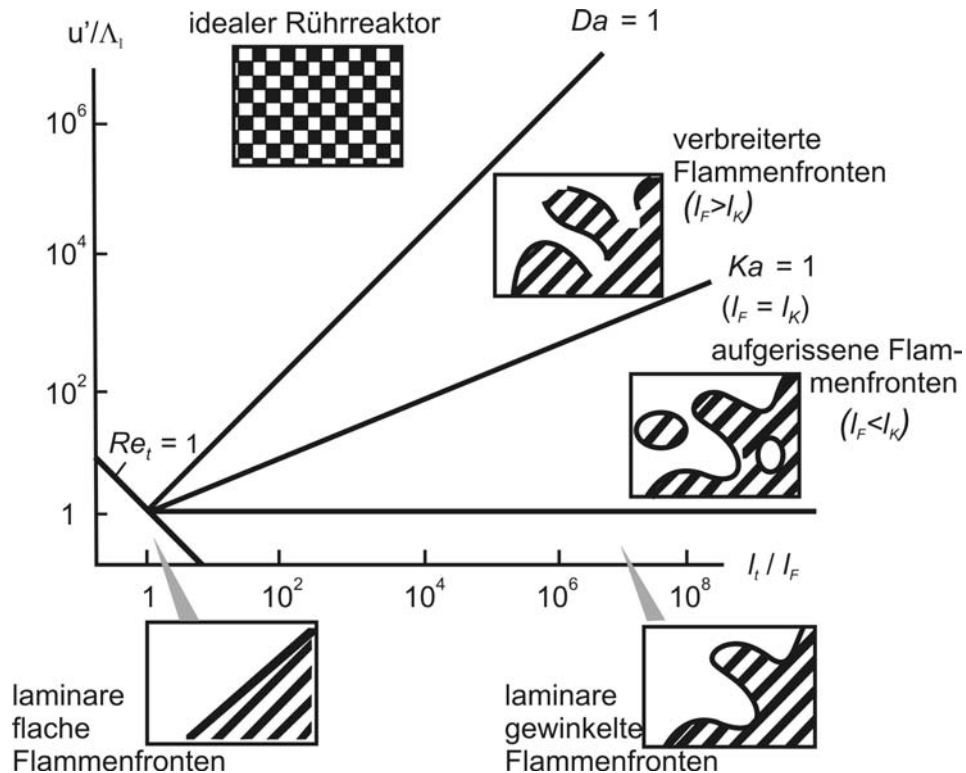
$$\text{Da} = \frac{t_t}{t_F} = \frac{\Lambda_l}{u_t} \frac{l_t}{l_F} \quad (2.16)$$

Die Damköhlerzahl teilt Verbrennungsvorgänge in Mischungskontrollierte ( $\text{Da} > 1$ ) und reaktionskinetisch dominierte ( $\text{Da} < 1$ ) Prozesse ein. Setzt man die Zeitskala der laminaren Flamme mit der dissipativen Kolmogorovskala ins Verhältnis, so erhält man die Karlovitzzahl:

$$\text{Ka} = \frac{t_F}{t_K} = \left( \frac{u'}{\Lambda_l} \right)^{3/2} \left( \frac{l_t}{l_F} \right)^{-1/2} \quad (2.17)$$

Letztere Beziehung erhält man durch die Proportionalitäten der integralen Turbulenzgrößen. Die Karlovitzzahl beschreibt den Grad der Interaktion zwischen dissipativen Wirbeln mit der Flammenfront. Eine Definition der Karlovitzzahl auf Basis der Reaktionszonendicke ist ebenfalls möglich (Hoffmann, 2004), soll hier aber nicht weiter verfolgt werden.

Es ist nun möglich die zuvor genannten dimensionslosen Kennzahlen in das von Borghi (Borghi, 1988) vorgeschlagene Diagramm doppellogarithmisch einzutragen. Somit kann man je nach Wechselwirkung des turbulenten Strömungsfelds mit der turbulenten Flammenfront die Vormischverbrennung in verschiedene Bereiche einteilen.



**Bild 2.2:** Borghi-Diagramm für vorgemischte Flammen (Warnatz et al., 2001)

Bild 2.2 zeigt die 5 Bereiche des Borghi-Diagramms. Für  $Re_t < 1$  handelt es sich um *laminare Vormischverbrennung*. Das bedeutet, es findet keine Beeinflussung der Flamme durch das turbulente Strömungsfeld statt. Unterhalb der Geraden  $Ka=1$  ist die charakteristische Zeitskala der Flamme kleiner als die Kolmogorov-Zeitskala. Da nach Kolmogorov turbulente Wirbel bei  $l_K$  dissipiert werden, liegen lokal laminare Vormischflammen, die in das turbulente Strömungsfeld eingebettet sind, vor. Die im Gegensatz zu den turbulenten Wirbelabmessungen dünne Flammenfront wird vom Strömungsfeld verzerrt und durch konvektive Prozesse transportiert (Borghi, 1988). In diesem sogenannten *Flamelet-Bereich* liegen viele technische Verbrennungsvorgänge wie die motorische Verbrennung oder auch teilweise die Gasturbinenverbrennung. Je nach der Turbulenzintensität wird der Flamelet-Bereich noch weiter unterteilt.

Im Bereich der *gewinkelten Flammenfronten* sind die turbulenten Schwankungsgeschwindigkeiten kleiner als die laminare Flammengeschwindigkeit. Dies führt lediglich zu einer Faltung und Streckung der Flammenfront und schließt eine Interaktion der Flammenfronten untereinander aus. In der momentanen

Betrachtung sind laminare Flammenfronten erkennbar, die aufgrund der Fluktuation als mittlere Flammenfronten dicker erscheinen. Laser Lichtschnittmessungen geben den gewinkelten Charakter der Flammenfronten wieder (Becker, 1991).

Übersteigt die turbulente Geschwindigkeit die laminare Flammengeschwindigkeit, so kommt es zur Interaktion zwischen benachbarten Flammenfronten. Die nunmehr energiereichen Wirbel dehnen und krümmen die Flamme zusehens. Es kann zur Taschenbildung von Frischgas im Abgas und umgekehrt kommen. Dieses Gebiet wird als Bereich *aufgerissener Flammenfronten* bezeichnet. Die beiden zuvor genannten Bereiche gehören zum Flamelet-Bereich. Eine direkte Interaktion der Wirbel mit der Flammenfront geschieht nicht. Die Flamme ist über eindimensionale laminare Flamelets beschreibbar.

Eine weitere Erhöhung der Turbulenz führt nun zur Verkleinerung der Kolmogorov Länge. Die kleinsten Wirbelstrukturen können nun die laminare Flammenfront direkt beeinflussen, mit dieser interagieren und sie verdicken. Man bezeichnet den Bereich zwischen dem *idealen Rührreaktor* und dem *Flamelet-Bereich* deshalb auch als *Gebiet verbreiteter Flammenfronten*. Somit interagieren die schnellen turbulenten Schwankungen direkt mit der Flammenfront. Das bedeutet bei  $l_F > l_k$  ( $Ka > 1$ ) muss die *Turbulenz-Chemie-Interaktion* bei der Beschreibung turbulenter Flammen berücksichtigt werden. In diesem Bereich beobachtete Verlöschungen können durch das Überschreiten der Flammenstreckung  $1/t_k$ , die größer als der Kehrwert einer charakteristischen Reaktionszeit  $1/t_F$  ist, erklärt werden. DNS Berechnungen von (Poinsot, 1991) zeigen Flammenlöschungen bei:

$$\left( \frac{u_t}{\Lambda_t} \right) \left( \frac{l_t}{l_F} \right) > 250 . \quad (2.18)$$

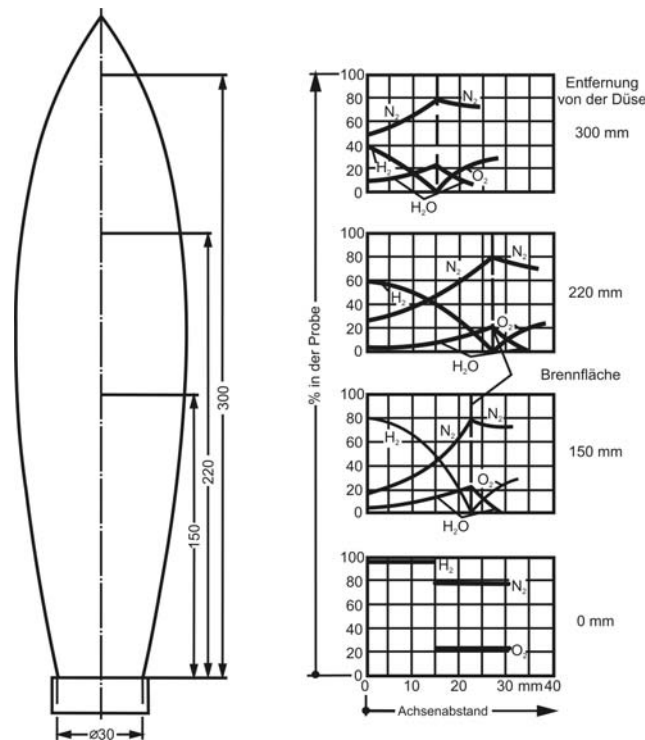
Durch weiteres steigern der Turbulenz wird schließlich die Gerade  $Da=1$  überschritten und man befindet sich im Bereich der *homogenen Reaktion*. Die turbulente Mischung ist kleiner als die charakteristischen Zeiten der chemischen Reaktion, so dass ein idealer Rührreaktor entsteht. Eine Flammenfront im herkömmlichen Sinne existiert in diesem Bereich nicht. Als Beispiel für eine lang-

same Reaktion gegenüber den Mischprozessen kann die Zeldovich-NO Bildung angesehen werden.

## 2.4 Nicht-vorgemischte Flammen

Im Gegensatz zur Vormischverbrennung werden bei den nicht-vorgemischten Flammen der Brennstoff und der Oxidator getrennt dem Brennraum zugeführt. Diese diffusionsgesteuerten Flammen (daher der oft gebräuchliche Name Diffusionsflamme) sind sicherheitstechnisch besser kontrollierbar und werden z.B. bei Fluggasturbinenbrennkammern, Dieselmotoren oder direkt einspritzenden Ottomotoren angewandt.

Im Gegensatz zur eindimensional flachen Vormischflamme bilden sich bei den Diffusionsflammen wenigstens zweidimensionale Strukturen aus (Ausnahme: Gegenstromdiffusionsflamme). Im Folgenden soll an einer Wasserstoffflamme die nicht-vorgemischte Verbrennung phänomenologisch erklärt werden, um dann in Analogie zur Vormischverbrennung unterschiedliche Verbrennungsbereiche einteilen zu können.



**Bild 2.3:** Reaktionsverlauf in einer Wasserstoffflamme (Günther, 1984)

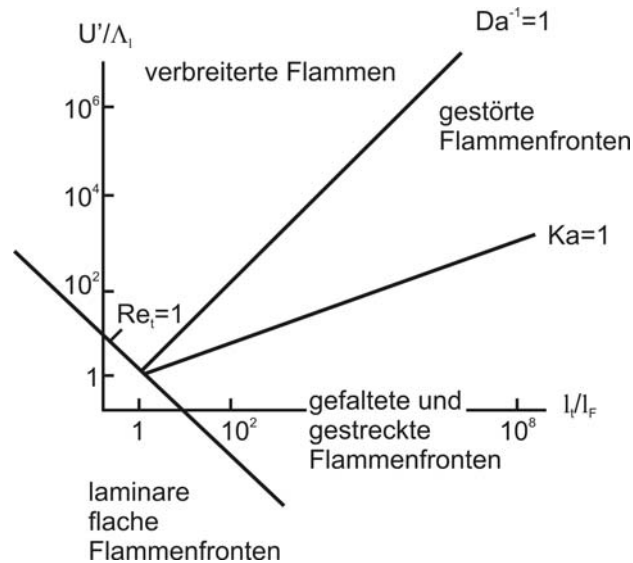
Eine gedachte unendlich dünne Reaktionsfront trennt eine innere Diffusions-Konvektionszone, bestehend aus dem Brennstoff und den Produkten, von einer äußeren Diffusions-Konvektionszone, bestehend aus Oxidator und Produkten, voneinander ab. Vergleicht man die charakteristischen Längen und Zeitskalen verschiedener Querschnitte in Abhängigkeit der axialen Länge miteinander, so stellt man unterschiedliche Skalen fest (Bild 2.3). Somit besitzen Diffusionsflammen auch keine einheitliche Flammengeschwindigkeit. Sie sind mit unterschiedlichen Anströmgeschwindigkeiten stabilisierbar.

In Analogie zu den turbulenten Vormischflammen lassen sich nun die turbulenten nicht-vorgemischten Flammen unter gewissen Voraussetzungen in das Borghi-Diagramm einordnen. Obwohl die laminaren Referenzgrößen wie Flammengeschwindigkeit und Flammendicke nicht eindeutig festgelegt sind, können sie zur Normierung benutzt werden, wenn sie sich auf den nahe stöchiometrischen Bereich beziehen (Borghi, 1988). Das Borghi-Diagramm für nicht-vorgemischte Verbrennung lässt sich in 4 Bereiche unterteilen.

Unterhalb der Geraden  $Re_t=1$  liegen *laminare Flammen* vor. Im Bereich  $Ka < 1$  werden die Flammen durch die turbulenten Strömungsbewegungen lediglich *gestreckt und gefaltet*. Die Flamme kann somit in Abhängigkeit eines Streckungsparameters durch eindimensionale, gestreckte „Diffusionsflämmchen“ (Flamelets) beschrieben werden.

Nimmt die turbulente Schwankung weiter zu, so kann es zum lokalen Aufreißen der Flammenfronten, zur Interaktion zwischen Flammenfronten, zum lokalen Löschen ( $1/t_K > 1/t_F$ ) und Wiederezünden kommen. Man nennt den Bereich oberhalb einer kritischen Karlovitzzahl deshalb auch *Bereich der gestörten Flammenfronten*.

Überschreitet die chemische Zeitskala die Mischungszeit, so werden lokal Verloschene Flammen nicht wiedergezündet und der Mischungsvorgang wird zusätzlich zur turbulenzbedingten Mischung erhöht. Wird die Turbulenz weiter erhöht und somit die Mischungszeit  $t_t$  erniedrigt, so nähert sich die nicht-vorgemischte Flamme einer vorgemischten Flamme an.



**Bild 2.4:** Borghi-Diagramm für nicht-vorgemischte Flammen (Borghi, 1988)

Neben den beiden idealisierten Grenzfällen der vor- und nicht-vorgemischten Flammen gibt es auch die Möglichkeit der partiell-vorgemischten Flamme. Beispiele für partiell-vorgemischten Flammen sind Brennstoff/Luft – Luft Systeme oder auch lokale Flammenlösungen in nicht-vorgemischter Verbrennung, wodurch eine partielle Brennstoff/Luft Mischung entstehen kann.

Reale Verbrennungssysteme können meistens nicht eindeutig einem Verbrennungsbereich zugeordnet werden (vgl. Bild 2.4). Zudem kann sich je nach Betriebspunkt die Flamme in unterschiedlichen Bereichen befinden. Daher sollte es das Ziel sein, ein möglichst für alle Bereiche gültiges und ein auf vorgemischte und nicht-vorgemischte Verbrennung anwendbares Modell zu entwickeln. In Anlehnung an (Kunz, 2000) sollen in dieser Arbeit die untersuchten Flammen dem Borghi-Diagramm zugeordnet werden.

## 2.5 Turbulenz-Chemie-Interaktion

Wurden im Abschnitt 2.1 die Prozesse in einer turbulenten Strömung beschrieben und in Abschnitt 2.3 und 2.4 die reaktionskinetischen Vorgänge, so treten bei der Beschreibung turbulenter, reagierender Strömungen zusätzlich noch die Wechselwirkungen zwischen Turbulenz und Chemie auf. Die Stärke der Interaktion hängt entscheidend von der Überschneidung der jeweiligen Zeitskalen ab. Wie im Borghi Diagramm (Bild 2.4) ersichtlich, führt die Beeinflussung turbu-

lenter Wirbel im Bereich der gestörten Flammenfronten zum Aufreißen, Löschen/Wiederzünden und zur Interaktion zwischen den Flammenfronten. Dieses Verhalten ist analytisch nicht darstellbar und wird in dieser Arbeit mit Hilfe statistischer Ansätze modelliert. Dazu werden die Erwartungswerte einer beliebigen Funktion  $Q$ , wie z.B. der mittlere chemische Umsatz über die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion  $f(\boldsymbol{\psi}; \mathbf{x}, t)$ :

$$\langle Q(\mathbf{x}, t) \rangle = \int Q(\boldsymbol{\psi}) f(\boldsymbol{\psi}; \mathbf{x}, t) d\boldsymbol{\psi} \quad (2.19)$$

bestimmt, wobei der Vektor  $\boldsymbol{\psi}$  den unabhängigen Stichprobenraum und  $d\boldsymbol{\psi}$  die Integration über  $(d\psi_1 \dots d\psi_N)$  bezeichnet. Die Bestimmung der unbekannt PDF über eine Transportgleichung ist Thema der folgenden Kapitel.

### 3 Grundlagen

Nach der qualitativen Beschreibung von turbulenten Strömungen und Flammen soll nun die Formulierung der wichtigsten Gleichungen der Strömungsmechanik und der Reaktionskinetik erfolgen.

#### 3.1 Erhaltungsgleichungen

Die Erhaltungsgleichungen können auf unterschiedliche Art und Weise hergeleitet werden. Zum einen kann eine Bilanzierung der ein- und austretenden Flüsse interessierender Größen am Volumenelement erfolgen (Oertel und Laurien, 2003), zum anderen kann, um im Kontext dieser Arbeit zu bleiben, die Herleitung über stochastische Modelle geschehen (Heinz, 2003). Die Kontinuitäts-, Impuls-, Speziesmassen-, und Energie-Erhaltungsgleichung werden für einphasige Strömungen in kartesischen Koordinaten aufgestellt:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i) = 0 \quad (3.1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_i u_j) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + \rho g_i \quad (3.2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_\alpha) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i Y_\alpha) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( D \rho \frac{\partial Y_\alpha}{\partial x_i} \right) + \rho S_\alpha \quad (3.3)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i h) = \frac{\partial p}{\partial t} + u_i \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \frac{\lambda}{c_p} \frac{\partial h}{\partial x_i} \right) + \Phi + \dot{q}_{Str}, \quad (3.4)$$

wobei  $\rho$  die Fluidichte,  $u_i$  die Geschwindigkeitskomponente in Richtung  $x_i$  und  $p$  den Druck darstellt. Sofern nicht anders ausgeführt, gilt die Einstein'sche Summenkonvention. Bei Newton'schen Fluiden gilt ein linearer Zusammenhang zwischen Schubspannung und Geschwindigkeitsgradienten:

$$\tau_{ij} = \mu \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) \quad (3.5)$$

In der Speziesgleichung (3.3) wird die Änderung des Massenbruchs  $Y_\alpha$  [ $\text{kg}_\alpha/\text{kg}$ ] der Spezies  $\alpha$  infolge chemischer Reaktion über den Quellterm  $S_\alpha$  [ $\text{kg}_\alpha/(\text{kg}\cdot\text{s})$ ]

und die molekulare Mischung unter Vernachlässigung von differentieller Diffusion mit dem Diffusionskoeffizienten  $D=D_\alpha$  berücksichtigt. Zusätzliche Diffusionseffekte durch Druck- und Temperaturgradienten (Soret-Effekt) werden aufgrund der hohen Reynoldszahlen in turbulenten Strömungen vernachlässigt. Folglich werden auch Thermodiffusionseffekte (Dufour-Effekt) durch Konzentrationsgradienten in der Energiegleichung (3.4), aufgestellt für die statische Enthalpie  $h=u+p/\rho$ , nicht berücksichtigt. Die Dissipationsfunktion  $\Phi$ :

$$\Phi = \tau_{ji} \frac{\partial u_j}{\partial x_i}, \quad (3.6)$$

beschreibt die pro Zeit durch molekulare Reibung irreversibel in Wärme umgewandelte kinetische Energie. Unter der Annahme, dass die Lewis-Zahl  $Le=\lambda/(\rho c_p D)=1$  ist, gilt in (3.3), (3.4) zusätzlich  $\lambda/c_p=\rho D$ .

Die Schließung des Gleichungssystems (3.1)-(3.4) erfolgt über die ideale Gasgleichung:

$$p = \rho R_0 T \sum_{\alpha}^{N_{sp}} \frac{Y_{\alpha}}{M_{\alpha}}, \quad (3.7)$$

mit  $R_0$  als universeller Gaskonstante und  $M_{\alpha}$  als molarer Masse der Spezies  $\alpha$ . Die Erhaltungsgleichungen sind im wesentlichen über den Druck gekoppelt. Da die in dieser Arbeit betrachteten Strömungen im Bereich niedriger Machzahlen ( $\text{div}(\mathbf{u})=0$ ) mit nahezu konstantem Druck verlaufen, kann eine Entkoppelung der Kontinuitäts- und Impulsgleichung (3.1), (3.2) von der Energiegleichung erfolgen (Heinz, 2003). Durch die Aufspaltung des Druckes:

$$p(\mathbf{x}, t) = p_0(t) + \Delta p(\mathbf{x}, t) \quad (3.8)$$

in einen räumlich konstanten Referenzdruck  $p_0$  und einen Fluktuationsanteil  $\Delta p$  kann über eine Taylor-Reihenentwicklung gezeigt werden, dass die Dichte  $\rho(Y_{\alpha}, h, p_0)$  und der chemische Quellterm  $S_{\alpha}(Y_{\alpha}, h, p_0)$  nur vom Referenzdruck, nicht aber von der Druckfluktuation abhängig sind. Auf den Druckgradienten in der Impulsgleichung hat die Aufteilung (3.8) keinen Einfluss, wodurch eine Entkoppelung erreicht wird. Zudem soll der Strahlungseinfluss  $\dot{q}_{str}$  bei nicht rußenden Flammen und die Dissipationsfunktion  $\Phi$  bei niedrigen Mach Zahlen ver-

nachlässigt werden. Da der Referenzdruck  $p_0$  in dieser Arbeit zeitlich konstant ist, gilt zusätzlich in (3.4) (Pope, 1985):

$$\frac{\partial p}{\partial t} + u_i \frac{\partial p}{\partial x_i} \approx \frac{dp_0}{dt} = 0 . \quad (3.9)$$

Durch die getroffenen Annahmen ergibt sich, dass die Kontinuitäts- und Impulsgleichung mit der Energiegleichung vorwiegend über die Dichte und nur im geringen Maße über die Viskosität  $\mu$  gekoppelt sind. Diese Tatsache ist für die Lösung der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion von entscheidender Bedeutung.

Die thermochemischen Eigenschaften in (3.3), (3.4) können nun in einer gemeinsamen Transportgleichung für  $\phi$  ( $\phi_\alpha = Y_\alpha$ ,  $\alpha=1, \dots, N_{sp}$ ;  $\phi_{N_{sp}+1} = h$ ) zusammengefasst werden:

$$\rho \frac{\partial \phi_\alpha}{\partial t} + \rho u_i \frac{\partial \phi_\alpha}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \rho D \frac{\partial \phi_\alpha}{\partial x_i} \right) + \rho S_\alpha , \quad (3.10)$$

mit der Enthalpie  $h$ :

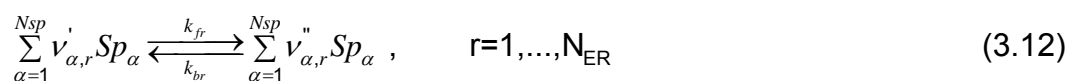
$$h = \sum_{\alpha=1}^{N_{sp}} \left( h_{0\alpha} + \int_{T_0}^T c_{p\alpha} dT \right) \cdot Y_\alpha , \quad (3.11)$$

und  $h_{0\alpha}$  als Bildungsenthalpie bei  $T_0$  sowie  $c_{p\alpha}$  als temperaturabhängiger Wärmekapazität des Stoffes  $\alpha$ .

## 3.2 Reaktionskinetik und Mischungsbruch

Wurde in der Teilchengleichung (3.3) der chemischen Quellterm lediglich als  $S_\alpha(Y_\alpha, h, p_0)$  dargestellt, so soll in diesem Abschnitt der funktionale Zusammenhang zwischen chemischer Reaktion und Quellterm beschrieben werden.

Chemische Reaktionssysteme lassen sich ganz allgemein über einen Satz von  $N_{ER}$  Elementarreaktionen der Form:



darstellen. Hierbei sind  $\nu'_{\alpha,r}$  und  $\nu''_{\alpha,r}$  die stöchiometrischen Koeffizienten der Hin- und Rückreaktion der Spezies  $Sp_\alpha$ . Es sei angemerkt, dass die folgenden

Ausführungen zur Bestimmung der Reaktionsraten sich auf Elementarreaktionen beschränkt. Im Gegensatz zu Globalreaktionen verlaufen diese auf molekularer Ebene wie es die Reaktionsgleichung (3.12) beschreibt. Mit den Geschwindigkeitskoeffizienten der Hin- und Rückreaktion  $k_{fr}$  bzw.  $k_{br}$  folgt die sogenannte Reaktionsrate  $R$  einer volumenneutralen Reaktion  $r$  zu:

$$R_r = k_{f,r}(T) \prod_{\alpha}^{N_{sp}+1} c_{\alpha}^{v'_{\alpha}} - k_{b,r}(T) \prod_{\alpha}^{N_{sp}+1} c_{\alpha}^{v''_{\alpha}}, \quad (3.13)$$

mit  $c_{\alpha} = \rho Y_{\alpha} / M_{\alpha}$  [mol/m<sup>3</sup>] als Spezieskonzentration und  $\Pi$  als Produkt über die Stoffkonzentrationen zuzüglich eventueller Stoßpartner (vgl. (3.15)). Die netto Umsatzrate eines Stoffes  $\alpha$  folgt schließlich über die Summe der einzelnen Elementarreaktionen:

$$S_{\alpha} = \frac{dY_{\alpha}}{dt} = \frac{M_{\alpha}}{\rho} \sum_{r=1}^{N_{ER}} (v''_{\alpha,r} - v'_{\alpha,r}) \cdot R_r, \quad (3.14)$$

Die Umsatzänderung durch zusätzliche Stoßpartner wird durch:

$$c_{N_{sp}+1,r} = \sum_{\alpha=1}^{N_{sp}} t_{\alpha,r} c_{\alpha} \quad (3.15)$$

mit  $t_{\alpha,r}$  als individuelle Effektivitäten berücksichtigt. Der Geschwindigkeitskoeffizient für die Hinreaktion ergibt sich aus dem Arrhenius-Ansatz:

$$k_{f,r} = A_r T^{b,r} \exp\left(-\frac{E_{A,r}}{R_0 T}\right), \quad (3.16)$$

mit  $A_r$  als präexponentiellen Faktor unter Berücksichtigung der Temperaturabhängigkeit  $T^{b,r}$  und mit  $E_{A,r}$  als Aktivierungsenergie. Für die Rückreaktion ergibt sich der Geschwindigkeitskoeffizient zu:

$$k_{b,r} = k_{f,r} / K_{c,r}, \quad (3.17)$$

mit der auf die Konzentrationen  $c_{\alpha}$ :

$$c_{\alpha} = n_{\alpha} / V = p_{\alpha} / (R_0 T) \quad (3.18)$$

bezogenen Gleichgewichtskonstante  $K_{c,r}$ :

$$K_{c,r}(T) = \left(\frac{p_0}{R_0 T}\right)^{\sum_{\alpha} (v''_{\alpha} - v'_{\alpha})} \cdot K_r(T, p_0), \quad (3.19)$$

wobei sich die Gleichgewichtskonstante  $K_r$  (bezogen auf die Partialdrücke) zu:

$$K_r(p_0, T) = \exp\left(-\frac{\Delta_R \bar{G}_r^0(T, p_0)}{R_0 T}\right), \quad (3.20)$$

mit  $\Delta_R \bar{G}_r^0$  als molare Gibbs-Energie:

$$\Delta_R \bar{G}_r^0 = \sum_{\alpha=1}^{N_{sp}} (\nu_{\alpha}'' - \nu_{\alpha}') (h_{mol, \alpha} - T s_{mol, \alpha}) \quad (3.21)$$

ergibt.

Die Gesamtheit aller Elementarreaktionen wird als detaillierter Reaktionsmechanismus bezeichnet. Bei der Methanoxidation besteht solch ein Mechanismus aus ca. 300 Elementarreaktionen mit 40 Spezies (vgl. GRI-Mechanismus). Die unumgängliche Reduktion eines detaillierten Chemiemechanismus auf wenige Fortschrittsvariablen wird in Kapitel 4.6 beschrieben.

Die zentrale Größe bei der Beschreibung von Diffusionsflammen ist der Mischungsbruch. Unter Annahme gleicher Diffusivität aller Spezies und der Lewis-Zahl  $Le=1$  wird der Mischungsbruch  $\xi$  über die Enthalpie  $h$  bzw. den Elementmassenbruch  $Z_{\gamma}$ :

$$\xi \equiv \frac{h - h_0}{h_1 - h_0} \equiv \frac{Z_{\gamma} - Z_{\gamma,0}}{Z_{\gamma,1} - Z_{\gamma,0}} \quad (3.22)$$

definiert. Dabei folgt der Elementmassenbruch zu:

$$Z_{\gamma} = \frac{m_{\gamma}}{m} = \sum_{\alpha} \mu_{\alpha\gamma} \frac{M_{\gamma}}{M_{\alpha}} Y_{\alpha}, \quad (3.23)$$

wobei  $m_{\gamma}$  die Masse des Elements  $\gamma$  und  $\mu_{\alpha\gamma}$  die Anzahl der Atome vom Element  $\gamma$  im Stoff  $\alpha$  ist. Gleichung (3.22) gilt für ein Zweistromproblem mit  $Z_{\gamma,0}$  ( $h_0$ ) als Elementmassenbruch von Strom 0 (Luft) und entsprechend  $Z_{\gamma,1}$  ( $h_1$ ) als Elementmassenbruch von Strom 1 (Brennstoff). Durch Ableitung einer Transportgleichung:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \xi) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i \xi) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( D \rho \frac{\partial \xi}{\partial x_i} \right) \quad (3.24)$$

erhält man den Mischungsbruch in Abhängigkeit vom Ort. Aufgrund der Elementerhaltung ist (3.24) quelltermfrei und gilt sowohl in inerten wie auch in reagierenden Strömungen. Durch Kenntnis des Mischungsbruchs sind die Massenbrüche und die Enthalpie für ein reines Mischungsproblem somit eindeutig festgelegt.

In reagierenden Strömungen kann der Bezug zwischen Mischungsbruch und Spezies durch die Annahme unendlich schneller Chemie hergestellt werden. Im Burke-Schumann Modell (Burke und Schumann, 1928) findet die Umsetzung anhand der globalen Ein-Schritt Reaktion  $\nu'_F F + \nu'_{Ox} Ox \rightarrow \nu''_P P$  statt. Entsprechend der häufig genannten Bezeichnung „gemischt=verbrannt“ erfolgt nach der Mischung von Brennstoff und Oxidator der sofortige Umsatz in Produkte. Eine vollständige Umsetzung geschieht beim stöchiometrischen Mischungsbruch  $\xi_{stöch}$ , bei dem die Flammenfront lokalisiert ist. Die Spezies (Enthalpie) ergeben sich dann als lineare Funktion des Mischungsbruchs:

$$Y_\alpha = Y_\alpha(\xi) . \quad (3.25)$$

Weiterhin berechnet sich das lokale Äquivalenzverhältnis  $\phi$  aus:

$$\phi = \frac{\xi}{(1-\xi)} \frac{(1-\xi_{stöch})}{\xi_{stöch}} . \quad (3.26)$$

Im Gegensatz zum Burke-Schumann Modell können bei Annahme von chemischem Gleichgewicht Mehr-Schritt Reaktionen mit zusätzlichen Spezies berücksichtigt werden. Die Berechnung der Gleichgewichtszusammensetzung in Abhängigkeit des Mischungsbruchs (Elementzusammensetzung):

$$Y_\alpha = Y_\alpha^e(\xi) \quad (3.27)$$

erfolgt zumeist durch Minimierung der freien Gibbs-Energie (vgl. (3.21)).

### 3.3 Mittelung

Das Gleichungssystem (3.1) - (3.4) erlaubt eine exakte Beschreibung von turbulenten, reagierenden Strömungen. Allerdings ist die direkte numerische Simulation (DNS) dieses Gleichungssystems, unter Auflösung aller turbulenten Zeit- und Längenskalen, mit der heutigen Rechenleistung kaum möglich. Durch die

Abhängigkeit der Gitterpunktanzahl zur turbulenten Reynoldszahl in dreidimensionaler Strömung  $N \sim Re_t^{3/4}$  ist ersichtlich, dass DNS-Berechnungen sich auf sehr einfache Geometrien mit niedrige Reynoldszahlen beschränken. Dennoch geben DNS Studien wichtige Einblicke in separierte physikalische Teilprobleme und sind daher unverzichtbar bei der Erstellung und Validierung von Modellen (vgl. Kap. 4.5).

Für die Berechnung technischer Strömungen sind in der Regel Mittelwerte bzw. Varianzen für eine ingenieurmäßige Betrachtung ausreichend. Nach (Reynolds, 1895) teilt man den Momentanwert  $Q(\mathbf{x},t)$ :

$$Q(\mathbf{x},t) = \langle Q(\mathbf{x}) \rangle + Q'(\mathbf{x},t) \quad (3.28)$$

in einen zeitlichen Mittelwert:

$$\langle Q(\mathbf{x}) \rangle = \lim_{\Delta t \rightarrow \infty} \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} Q(\mathbf{x},t) dt \quad (3.29)$$

und seine Fluktuation  $Q'(\mathbf{x},t)$  auf. Gleichung (3.29) gilt dabei für stationäre Strömungen, kann aber durch die Wahl eines geeigneten Mittelungsintervalls auch auf instationäre Prozesse angewandt werden. Oft definiert man einen für die Messtechnik besser erfassbaren Ensemble-Mittelwert:

$$\langle Q(x) \rangle_N = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N Q^n(x) , \quad (3.30)$$

der nach dem Zentralem Grenzwerttheorem für  $N \rightarrow \infty$  in den mathematischen Erwartungswert:

$$\langle Q(\mathbf{x},t) \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N Q^n(\mathbf{x},t) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(\psi; \mathbf{x},t) \cdot \psi d\psi \quad (3.31)$$

übergeht. Demnach ist die Berechnung eines beliebigen Erwartungswerts bei Kenntnis der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion  $f(\psi; \mathbf{x},t)$  durch Integration über den Stichprobenraum  $\psi$  möglich. Der gängigen Literatur folgend, werden die Orts- und Zeikoordinate von den Zufallsvariablen der PDF durch ein Semikolon getrennt.

Aufgrund der signifikanten Dichteschwankungen in turbulenten Strömungen führen dichtegewichtete Mittelwerte (Favre-Mittlung), im Gegensatz zur Rey-

nolds-Mittelung (3.28) zu einer wesentlich kompakteren Schreibweise. Die Zerlegung einer momentanen Zufallsgröße  $Q(\mathbf{x})$  führt dann zu:

$$Q(\mathbf{x},t) = \tilde{Q}(\mathbf{x}) + Q''(\mathbf{x},t) , \quad (3.32)$$

mit dem Favre-Mittelwert:

$$\tilde{Q}(\mathbf{x}) = \frac{\langle Q\rho \rangle}{\langle \rho \rangle} \quad (3.33)$$

und der Schwankung  $Q''(\mathbf{x},t)$ . Zwischen beiden Mittelwerten gilt die Beziehung:

$$\tilde{Q} = \langle Q \rangle + \frac{\langle \rho' Q' \rangle}{\langle \rho \rangle} , \quad (3.34)$$

wobei  $\langle \rho Q'' \rangle = 0$  bzw.  $\langle Q' \rangle = 0$  gilt.

Die Favre-Mittlung angewandt auf die momentanen Erhaltungsgleichung (3.1) - (3.4) liefert die gemittelten Transportgleichungen:

$$\frac{\partial \langle \rho \rangle}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\langle \rho \rangle \tilde{u}_i) = 0 \quad (3.35)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\langle \rho \rangle \tilde{u}_i) + \langle \rho \rangle \tilde{u}_j \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} = - \frac{\partial \langle p \rangle}{\partial x_i} + \frac{\partial \langle \tau_{ij} \rangle}{\partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_j} (\langle \rho \rangle \widetilde{u_i'' u_j''}) + \langle \rho \rangle g_i \quad (3.36)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\langle \rho \rangle \tilde{Y}_\alpha) + \langle \rho \rangle \tilde{u}_i \frac{\partial \tilde{Y}_\alpha}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \langle \rho \rangle D \frac{\partial \tilde{Y}_\alpha}{\partial x_i} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} (\langle \rho \rangle \widetilde{u_i'' Y_\alpha''}) + \langle \rho \rangle \tilde{S}_\alpha \quad (3.37)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\langle \rho \rangle \tilde{h}) + \langle \rho \rangle \tilde{u}_i \frac{\partial \tilde{h}}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} (\langle \rho \rangle D \frac{\partial \tilde{h}}{\partial x_i}) - \frac{\partial}{\partial x_i} (\langle \rho \rangle \widetilde{u_i'' h''}) . \quad (3.38)$$

Es sei angemerkt, dass es sich bei den in dieser Arbeit präsentierten Ergebnissen um Favre-gemittelte Größen handelt. Ein Vergleich mit experimentellen Datensätzen sollte folglich ebenfalls Favre-gemittelt sein bzw. eine geringe Korrelation zwischen Dichte und Skalarfluktuationen aufweisen (vgl. (3.34)).

Neben den mittleren Größen in (3.35) - (3.38) treten nun zusätzliche Terme der Form  $\langle \rho \rangle \widetilde{u_i'' u_j''}$  oder  $\langle \rho S_\alpha \rangle$  auf. Für die Schließung dieser unbekanntenen Korrelationen sind eine Vielzahl von Modellen in Gebrauch. Erfolgt die Schließung der sogenannten turbulenten Scheinspannungen  $\langle \rho \rangle \widetilde{u_i'' u_j''}$  in den Navier-Stokes-

Gleichungen (3.36) durch Turbulenzmodelle zufriedenstellend, so ist die Berechnung des mittleren chemischen Quellterms  $\langle \rho S_\alpha \rangle$  in Gl. (3.37) aus mittleren Größen  $\langle \rho S_\alpha \rangle = \langle \rho \rangle S(\tilde{Y}_{\alpha..Nsp}, \tilde{T})$  stark fehlerbehaftet. Die Vernachlässigung der turbulenten Schwankungen in den chemischen Umsatzraten wird oft auch als „laminare Chemie“ bezeichnet. Eine Reihenentwicklung um die mittlere Temperatur in der Geschwindigkeitskonstante des Arrhenius-Ansatzes (3.16) ist aufgrund der hohen Temperaturschwankungen in turbulenten Verbrennungsvorgängen ebenfalls nicht praktikabel (Warnatz et al, 2001).

Legt man jedoch die Definition des mathematischen Erwartungswerts zu Grunde (3.31), so ergibt sich eine Favre-gemittelte skalare Größe  $\tilde{\varphi}$  aus der Integration der Favre-gemittelten PDF  $\tilde{f}(\psi; \mathbf{x}, t)$  über alle möglichen Realisierungen  $\psi$ . Der große Vorteil dieser Formulierung besteht in der geschlossenen Darstellung des mittleren chemischen Quellterms. Allerdings muss hierzu die PDF-Transportgleichung bekannt sein. Die Herleitung und Lösung von  $\tilde{f}(\psi; \mathbf{x}, t)$  ist Thema von Kapitel 4 und 5.

Da in der hier beschriebenen Skalar-PDF keine Geschwindigkeitsinformationen enthalten sind, müssen zusätzlich Turbulenzgleichungen für Korrelationen der Form  $\langle \rho \rangle \widetilde{u_i u_j}$  bzw.  $\langle \rho \rangle \widetilde{u_i \varphi}$  gelöst werden.

### 3.4 Turbulenzmodelle

Im Folgenden soll ein Überblick über Ansätze der Turbulenzmodellierung und die verwendeten Turbulenzmodelle gegeben werden. Für detailliertere Betrachtungen sei auf (Rotta, 1972), (Oertel, 2003), (Grunert, 2000), (Haag, 2003), (Heinz, 2003) verwiesen.

Zunächst ist es naheliegend für die unbekanntenen Reynoldsspannungen wiederum Transportgleichungen abzuleiten. Allerdings entstehen hierbei neue, unbekannte Korrelationen höherer Ordnung, die ebenfalls modelliert werden müssen. Es ist demnach nicht möglich mit einem System von Transportgleichungen höherer Ordnung die Gleichungen (3.35) - (3.38) zu schließen. Modelle die für Momente zweiter und höherer Ordnung Transportgleichungen lösen, bezeich-

net man als Reynolds-Spannungsmodelle (RSM) oder auch Differentielle Modelle, Modelle die die Reynoldsspannungen als Funktion des Gradienten der mittleren Geschwindigkeit modellieren bezeichnet man als Algebraische Modelle.

Eine andere Möglichkeit der Turbulenzschließung besteht in der Ableitung eines stochastischen Turbulenzmodells und der anschließenden Formulierung einer entsprechenden Varianztransportgleichung. Bei diesem Vorgehen ist die Konsistenz zwischen der Geschwindigkeits-Skalar-PDF und der Entwicklung der zugehörigen Momente sichergestellt (Heinz, 2003).

### 3.4.1 Algebraische Modelle

Algebraische Turbulenzmodelle parametrisieren die Turbulenzvorgänge über ein charakteristisches Längen- und Zeitmaß in Abhängigkeit des mittleren Geschwindigkeitsgradienten über einen funktionellen Ansatz der Form:

$$\langle \rho \rangle \widetilde{u_i u_j} = \text{Fkt} \left( \langle \rho \rangle \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j}, t_t, l_t \right), \quad (3.39)$$

wobei  $t_t = \tilde{k} / \tilde{\varepsilon}$  das turbulente Zeitmaß und  $l_t = \tilde{k}^{3/2} / \tilde{\varepsilon}$  das turbulente Längenmaß darstellen. Diese beiden Parameter werden häufig zu einem neuen Parameter, der sogenannten Wirbelviskosität zusammengefasst. Daher werden Algebraische Turbulenzmodelle auch oft als Wirbelviskositätsmodelle bezeichnet.

Ausgehend von (3.39) kann eine allgemeine Gleichung für die Reynolds-Spannung abgeleitet werden, wobei deren einfachste Form auch als Boussinesq-Ansatz:

$$\langle \rho \rangle \widetilde{u_i u_j} = \frac{2}{3} \langle \rho \rangle \tilde{k} \delta_{ij} - \mu_T \left( \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) \quad (3.40)$$

bekannt ist. Diese Formulierung ist analog zum laminaren Gradientenansatz für Newtonschen Fluide (3.5) mit der turbulenten Viskosität  $\mu_T$  als unbekannte Fluideigenschaft. Der erste Term in (3.40) stellt den turbulenten Druck proportional der turbulenten kinetischen Energie dar (Oertel, 2003). Die skalare turbulente

Viskosität  $\mu_T$  (Wirbelviskosität) ist richtungsunabhängig und somit nur unter der Annahme isotroper Turbulenz gültig.

Sinngemäß ergibt sich der turbulente Transport eines Skalars proportional zu seinem mittleren Gradienten:

$$\langle \rho \rangle \widetilde{u_i \varphi_\alpha} = - \frac{\mu_T}{Sc_T} \frac{\partial \widetilde{\varphi_\alpha}}{\partial x_i} \quad \text{mit } Sc_T = \frac{\nu_T}{D_T} = 0.7 \dots 0.9 . \quad (3.41)$$

Problematisch bei diesem Ansatz ist neben der alleinigen Berücksichtigung von isotropen Turbulenzeffekten, das Versagen beim Erfassen von Transportvorgängen entgegen dem mittleren Gradienten der Strömung (Veynante, 1997). Dieses Phänomen, das meist in Flammen niedriger Reynoldszahlen auftritt, wird in Kapitel 4.4 beschrieben.

Die Berechnung von  $\mu_T$  kann über Nullgleichungs-, Eingleichungs- und Zweigleichungsmodelle erfolgen, wobei letzteres als Stand der Technik bei der Berechnung von turbulenten Strömungen bezeichnet werden kann. Aus dimensionsanalytischen Betrachtungen folgt für die kinematische Wirbelviskosität  $\nu_T$  [m<sup>2</sup>/s]:

$$\nu_T = \frac{\mu_T}{\langle \rho \rangle} \sim u_t l_t \quad \text{mit } u_t = \left( \frac{2}{3} \widetilde{k} \right)^{1/2}, \quad (3.42)$$

wobei die Festlegung eines Längenmaßstabs nicht einheitlich definiert ist. Darüber hinaus gibt es auch nichtlineare Algebraische Turbulenzmodelle höherer Ordnung, die auf der Boussinesq-Approximation (3.40) aufbauen. In diesen Modellen wird die Abhängigkeit vom mittleren Strömungsgradienten in Potenzen höherer Ordnung ausgedrückt.

Das k- $\varepsilon$  Turbulenzmodell, als das wohl bekannteste lineare Zweigleichungsmodell, bestimmt die turbulente Viskosität (3.42) durch Lösung je einer Transportgleichung für die turbulente kinetische Energie  $k$  und der Dissipationsrate  $\varepsilon$  zu:

$$\nu_T = C_\mu \frac{\widetilde{k}^2}{\widetilde{\varepsilon}} . \quad (3.43)$$

Die Transportgleichung für  $\langle \rho \rangle \tilde{k} = 1/2 \langle \rho \widetilde{u_i'' u_i''} \rangle$  ergibt sich formal aus der Multiplikation der Reynolds-Gleichungen mit der entsprechenden Geschwindigkeitschwankung, Aufsummierung und anschließender Mittelung zu:

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle \rho \rangle \tilde{k} + \frac{\partial}{\partial x_i} \langle \rho \rangle \tilde{u}_i \tilde{k} = \underbrace{\mu_T \left( \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} + \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} \right) \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i}}_{P_k} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_T}{\sigma_k} \right) \frac{\partial \tilde{k}}{\partial x_i} \right] - \langle \rho \rangle \tilde{\varepsilon} . \quad (3.44)$$

Die Dissipationsrate:

$$\tilde{\varepsilon} = \frac{\nu}{\langle \rho \rangle} \left\langle \rho \frac{\partial u_i''}{\partial x_j} \frac{\partial u_i''}{\partial x_j} \right\rangle , \quad (3.45)$$

ergibt sich unter Einbeziehung von Modellannahmen (Launder und Spalding, 1974) zu:

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle \rho \rangle \tilde{\varepsilon} + \frac{\partial}{\partial x_i} \langle \rho \rangle \tilde{u}_i \tilde{\varepsilon} = C_{\varepsilon 1} \frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{k}} P_k - C_{\varepsilon 2} \frac{\tilde{\varepsilon}^2}{\tilde{k}} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_T}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \tilde{\varepsilon}}{\partial x_i} \right] , \quad (3.46)$$

mit den empirischen Konstanten:

$$c_\mu = 0.09 \quad \sigma_k = 1.0 \quad \sigma_\varepsilon = 1.3 \quad \sigma_{\varepsilon 1} = 1.44 \quad \sigma_{\varepsilon 2} = 1.92 . \quad (3.47)$$

Die Koeffizienten (3.47) definieren mit den Gleichungen (3.44) und (3.46) das Standard k-ε Modell. Es gibt eine Vielzahl von Erweiterungen für das ursprüngliche Modell, wie beispielsweise das k-ω Modell, das statt der Dissipationsrate ε eine turbulente Frequenz  $\omega = \varepsilon/k$  zur Bestimmung der Wirbelviskosität benutzt. Hiermit konnte die Überschätzung der Wirbelviskosität in Wandnähe und damit das Verhindern von Ablösungen unterbunden werden. Menter kombinierte die Vorteile des k-ω Modells in Wandnähe und des k-ε Modells im Freistromgebiet durch Gewichtungsfunktionen im BSL - bzw. SST – Turbulenzmodell (Menter, 1994).

### 3.4.2 Reynolds-Spannungsmodelle

Reynolds-Spannungsmodelle (Differentielle Modelle) leiten für die unbekanntenen Reynolds-Spannungen Transportgleichungen (Grunert, 2000):

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} \langle \langle \rho \rangle \widetilde{u_i'' u_j''} \rangle + \frac{\partial}{\partial x_k} \langle \langle \rho \rangle \widetilde{u_i'' u_j'' u_k''} \rangle &= \langle \rho \rangle \underbrace{\left( -\widetilde{u_i'' u_k''} \frac{\partial \widetilde{u_j''}}{\partial x_k} - \widetilde{u_j'' u_k''} \frac{\partial \widetilde{u_i''}}{\partial x_k} \right)}_{P_{ij}} - 2\mu \underbrace{\frac{\partial u_i''}{\partial x_k} \frac{\partial u_j''}{\partial x_k}}_{\widetilde{\varepsilon}_{ij} = 2/3 \widetilde{\varepsilon} \delta_{ij}} \\
+ \underbrace{\left\langle \dot{p} \frac{\partial u_i''}{\partial x_j} \right\rangle + \left\langle \dot{p} \frac{\partial u_j''}{\partial x_i} \right\rangle}_{\Pi_{ij}} &+ \frac{\langle \dot{\rho} u_j'' \rangle}{\langle \rho \rangle} \frac{\partial \langle p \rangle}{\partial x_i} + \frac{\langle \dot{\rho} u_i'' \rangle}{\langle \rho \rangle} \frac{\partial \langle p \rangle}{\partial x_j} \\
+ \frac{\partial}{\partial x_k} \left[ \nu \frac{\partial \langle \langle \rho \rangle \widetilde{u_i'' u_j''} \rangle}{\partial x_k} - \underbrace{\left( \langle \langle \rho \rangle \widetilde{u_i'' u_j'' u_k''} \rangle + \langle \dot{p} u_i'' \rangle \delta_{jk} + \langle \dot{p} u_j'' \rangle \delta_{ik} \right)}_{C_{ijk}} \right] & \quad , (3.48)
\end{aligned}$$

ohne einschränkende Annahmen ab. Damit können im Gegensatz zu den Algebraischen Modellen unterschiedliche Normalspannungskomponenten bei verschwindenden Scherraten vorhergesagt werden. Zusätzlich werden Terme berücksichtigt, die beispielsweise den Einfluss von Stromlinienkrümmung auf die Turbulenz berücksichtigen.

In (3.48) bezeichnen  $P_{ij}$ ,  $\varepsilon_{ij}$ ,  $\Pi_{ij}$  und  $C_{ijk}$  den Produktions-, den Dissipations-, den Umverteilungs- und den turbulenten Transport-Term der Reynolds-Spannungen. Außer dem Produktions- und Diffusionsterm (1. Term der eckigen Klammer) müssen alle anderen Ausdrücke modelliert werden. Dabei unterscheiden sich Reynolds-Spannungsmodelle in der Modellierung der Druckscherkorrelation  $\Pi_{ij}$ , die eine Umverteilung der Reynolds-Spannungen bewirkt. Da die Dissipation nur in den kleinen Skalen auftritt, wird der Dissipationstensor  $\varepsilon_{ij}$  als isotrop angenommen und für die skalare Größe formuliert (Rotta, 1972):

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \langle \langle \rho \rangle \widetilde{\varepsilon u_j''} \rangle = -C_{\varepsilon 1} \langle \rho \rangle \frac{\widetilde{\varepsilon}}{\widetilde{k}} P_k - C_{\varepsilon 2} \langle \rho \rangle \frac{\widetilde{\varepsilon}^2}{\widetilde{k}} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \left( C_\varepsilon \langle \rho \rangle \frac{\widetilde{k}}{\widetilde{\varepsilon}} \widetilde{u_k'' u_l''} \right) \frac{\partial \widetilde{\varepsilon}}{\partial x_l} \right), \quad (3.49)$$

mit  $P_k$  als Produktionsterm und den empirischen Konstanten:

$$c_{\varepsilon 1} = 1.45 \quad c_{\varepsilon 2} = 1.83 \quad c_\varepsilon = 0.18. \quad (3.50)$$

Der turbulente Transportterm  $C_{ijk}$  folgt nach einem Gradientenansatz von (Daly und Harlow, 1970) zu:

$$C_{ijk} = C_s \frac{\widetilde{k}}{\widetilde{\varepsilon}} \langle \rho \rangle \widetilde{u_k'' u_l''} \frac{\partial \widetilde{u_i'' u_j''}}{\partial x_l}, \quad C_s = 0.22. \quad (3.51)$$

Entsprechend folgt für den turbulenten Transport eines Skalars:

$$\langle \rho \rangle \widetilde{u_i \varphi_\alpha} = -C_s \frac{\widetilde{k}}{\widetilde{\varepsilon}} \langle \rho \rangle \widetilde{u_i u_j} \frac{\partial \widetilde{\varphi_\alpha}}{\partial x_j} , \quad C_s = 0.22 . \quad (3.52)$$

Obige Formulierung ist analog zu dem Gradienten-Diffusionsansatz in (3.41) auf Basis von Wirbelviskositäts-Modellen und wird in Kap. 4.4 noch diskutiert werden.

Der bedeutendste ungeschlossene Term in (3.48), der Druck-Scher Korrelationsensor  $\Pi_{ij}$ , bewirkt eine Umverteilung von turbulenter kinetischer Energie innerhalb der Normalkomponenten in (3.48) bis hin zu einer Gleichverteilung. Das heißt die anisotropen Spannungszustände werden reduziert. Die Modellierung erfolgt ausgehend von der Poisson-Gleichung der Druckfluktuationen mit der Aufspaltung in einen sogenannten Rapid-Term  $\Pi_{ij}^r$  (proportional dem mittleren Geschwindigkeitsgradienten) und einen Return-Term  $\Pi_{ij}^s$  (Relaxation der Turbulenz). Das in dieser Arbeit verwendete SSG-Modell (Speziale, Sarkar und Gatski, 1991) benutzt hierfür einen nichtlinearen Ansatz, der wegen seines Umfangs hier nicht im einzelnen wiedergegeben werden soll. Eine Diskussion und vollständige mathematische Darstellung kann u.a. in (Grunert, 2000) gefunden werden.

## 4 Stochastische Beschreibung turbulenter Strömungen

Turbulente Strömungen können vollständig durch die deterministischen Navier-Stokes-Gleichungen beschrieben werden. Allerdings ist die hierfür notwendige räumliche und zeitliche Auflösung derart hoch, dass es unmöglich ist, praxisrelevante Strömungsprobleme zu berechnen. Eine Alternative bietet die im Folgenden dargestellte stochastische Strömungsbeschreibung.

### 4.1 Definitionen

Um die in Kapitel 3.3 eingeführten mittleren Strömungsgrößen berechnen zu können, muss die zugehörige Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion bekannt sein.

Die unabhängigen Stichprobenvektoren  $\boldsymbol{\psi}$ :

$$\boldsymbol{\psi} = (\psi_1, \dots, \psi_{N_{sp}-1}, \psi_{h=\sigma}) , \quad (4.1)$$

spannen den  $\sigma$ -dimensionalen Zustandsraum auf, der alle skalaren Zufallsgrößen  $\boldsymbol{\varphi}$ :

$$\boldsymbol{\varphi} = (Y_1, \dots, Y_{N_{sp}-1}, h) \quad (4.2)$$

enthält. Die gemeinsame Verteilungsfunktion  $F(\boldsymbol{\psi}; \mathbf{x}, t)$  gibt dann die Wahrscheinlichkeit an, dass am Ort  $\mathbf{x}$  zur Zeit  $t$  der Zufallsvektor  $\boldsymbol{\varphi}$  die Bedingung  $\boldsymbol{\varphi} < \boldsymbol{\psi}$  erfüllt. Es gilt somit:

$$F(\boldsymbol{\psi}; \mathbf{x}, t) = \text{Prob}(\boldsymbol{\varphi}(\mathbf{x}, t) < \boldsymbol{\psi}) . \quad (4.3)$$

Die Ableitung der Verteilungsfunktion definiert die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (PDF):

$$f(\boldsymbol{\psi}; \mathbf{x}, t) = \frac{\partial^\sigma}{\partial \boldsymbol{\psi}} F(\boldsymbol{\psi}; \mathbf{x}, t) , \quad (4.4)$$

mit der Wahrscheinlichkeit  $f(\boldsymbol{\psi}; \mathbf{x}, t) d\boldsymbol{\psi}$ , dass das Ereignis:

$$\boldsymbol{\psi} < \boldsymbol{\varphi}(\mathbf{x}, t) < \boldsymbol{\psi} + d\boldsymbol{\psi} \quad (4.5)$$

eintritt. Jede PDF muss folgende Eigenschaften erfüllen:

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{+\infty} f(\boldsymbol{\psi}) d\boldsymbol{\psi} &= F(+\infty) - F(-\infty) = 1 \\
f(-\infty) &= f(+\infty) = 0 \\
f &\geq 0
\end{aligned} \tag{4.6}$$

Die PDF wird charakterisiert über die sogenannten statistischen Momente. Im eindimensionalen Fall ergibt sich für einen Skalar der mathematische Erwartungswert für  $n=1$ :

$$\langle \varphi^n \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^n f(\psi) d\psi \tag{4.7}$$

Die Fluktuationen um den Erwartungswert  $\varphi' = \varphi - \langle \varphi \rangle$  werden durch die Varianz:

$$\langle \varphi'^n \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} (\psi - \langle \varphi \rangle)^n f(\psi) d\psi \tag{4.8}$$

für  $n=2$  charakterisiert. Gleichung (4.8) stellt die allgemeine Form der zentralen Momente dar. Das 3. zentrale Moment ist die sogenannte Schiefe, die die Asymmetrie der PDF beschreibt. Die Wölbung, als 4. zentrales Moment gibt die Abweichung einer beliebigen PDF zur Gaußverteilung an. Die Schiefe und die Wölbung werden dimensionslos auf die Varianz bezogen. Die PDF kann aus ihren Momenten über charakteristische Funktionen berechnet werden (Fisz, 1980). Analog zu (4.7) folgen die statistischen Momente für eine Funktion  $Q(\varphi)$  in Abhängigkeit des Zufallsvektors  $\boldsymbol{\varphi}$ :

$$\langle Q(\boldsymbol{\varphi}, \mathbf{x}, t)^n \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} Q^n(\boldsymbol{\psi}) f(\boldsymbol{\psi}; \mathbf{x}, t) d\boldsymbol{\psi} \tag{4.9}$$

Neben den vollständigen Wahrscheinlichkeitsfunktionen nach (4.4) spielen innerhalb der PDF-Methoden die bedingten Wahrscheinlichkeiten eine wichtige Rolle. Sie geben die Wahrscheinlichkeit für ein Ereignis A an, unter der Bedingung das ein Ereignis B schon eingetreten ist. Entsprechend dieser Definition ergibt sich die skalare Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion konditioniert auf die Geschwindigkeit zu:

$$f_{\boldsymbol{\varphi}|\mathbf{U}}(\boldsymbol{\psi} | \mathbf{V} = \mathbf{U}) = \frac{f_{\boldsymbol{\varphi}\mathbf{U}}(\boldsymbol{\psi}, \mathbf{V})}{f_{\mathbf{U}}(\mathbf{V})} \tag{4.10}$$

Mit der bedingten Wahrscheinlichkeit folgt der Erwartungswert einer beliebigen Funktion  $Q(\boldsymbol{\varphi}, \boldsymbol{\varepsilon})$  zu:

$$\langle Q(\boldsymbol{\varphi}, \boldsymbol{\varepsilon}) \rangle = \int_{\boldsymbol{\psi}} \langle Q(\boldsymbol{\varphi}, \boldsymbol{\varepsilon}) | \boldsymbol{\varphi} = \boldsymbol{\psi} \rangle f(\boldsymbol{\psi}) d\boldsymbol{\psi} \quad , \text{ mit:} \quad (4.11)$$

$$\langle Q(\boldsymbol{\varphi}, \boldsymbol{\varepsilon}) | \boldsymbol{\varphi} = \boldsymbol{\psi} \rangle = \int_{\boldsymbol{\varepsilon}} f_{\boldsymbol{\varepsilon}|\boldsymbol{\varphi}}(\hat{\boldsymbol{\varepsilon}} | \boldsymbol{\varphi} = \boldsymbol{\psi}) Q(\boldsymbol{\psi}, \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}) d\hat{\boldsymbol{\varepsilon}} \quad . \quad (4.12)$$

Der obere Zusammenhang wird häufig verwendet, wenn ungeschlossene Ausdrücke (in diesem Fall  $f(\boldsymbol{\psi}, \hat{\boldsymbol{\varepsilon}})$ ) in Abhängigkeit bekannter Funktionen dargestellt werden müssen.

## 4.2 PDF-Transportgleichung – stochastisches System

In Abgrenzung zum Fluidsystem werden rein stochastische Größen mit \*) bezeichnet. Ausgehend von der PDF in Form von Delta-Funktionen (Delta-Distributionen):

$$f^*(\boldsymbol{\psi}; t) = \prod_{\alpha=1}^{\sigma} \langle \delta(\boldsymbol{\psi}_{\alpha} - \boldsymbol{\varphi}_{\alpha}^*(t)) \rangle = \langle \delta(\boldsymbol{\psi} - \boldsymbol{\varphi}^*(t)) \rangle \quad , \quad (4.13)$$

erhält man durch Reihenentwicklung die Kramers-Moyal Gleichung als allgemeinste Form einer PDF-Transportgleichung. Da Strömungen kontinuierliche Prozesse darstellen, kann die Reihenentwicklung von Gleichung (4.13) nach dem 2. Glied abgebrochen werden (Heinz, 2003). Nimmt man weiterhin an, dass der Zustand zum Zeitpunkt  $t+\Delta t$  nur vom jetzigen Zustand  $t$  und nicht von der früheren Entwicklungsgeschichte abhängt, d.h. der betrachtete Prozess über Markov-Eigenschaften verfügt, so erhält man die Fokker-Planck-Gleichung:

$$\frac{\partial f_{\boldsymbol{\varphi}}^*(\boldsymbol{\psi}, t)}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\psi}_i} \left[ a_i(\boldsymbol{\psi}, t) f_{\boldsymbol{\varphi}}^*(\boldsymbol{\psi}, t) \right] + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \boldsymbol{\psi}_i \partial \boldsymbol{\psi}_j} \left[ b_{ik}(\boldsymbol{\psi}, t) b_{jk}(\boldsymbol{\psi}, t) f_{\boldsymbol{\varphi}}^*(\boldsymbol{\psi}, t) \right] \quad . \quad (4.14)$$

Allgemeine Lösungen der Fokker-Planck-Gleichung sind stochastische Differentialgleichungen der Form:

$$d\boldsymbol{\varphi}_i^* = a_i(\boldsymbol{\varphi}^*, t) dt + b_{ik}(\boldsymbol{\varphi}^*, t) dW_k \quad , \quad (4.15)$$

wobei  $\varphi_i^*$  die i-te Komponente des Zufallsvektors  $\boldsymbol{\varphi}^*$ ,  $a_i$  den deterministischen Driftkoeffizienten und  $b_{ik}$  den deterministischen Diffusionskoeffizienten bezeichnen. Der Term  $dW_k$  stellt die k-te Komponente eines vektoriellen Gaußprozesses, den sogenannten Wiener-Prozess, dar.

In Anlehnung an die momentanen Erhaltungsgleichungen (3.1-3.3) sei nun beispielhaft folgender stochastischer Prozess definiert:

$$d\mathbf{X}^*(t) = \mathbf{U}^*(t)dt, \quad d\boldsymbol{\varphi}^*(t) = \boldsymbol{\Theta}^*(t)dt, \quad (4.16)$$

wobei  $\mathbf{X}^*$ ,  $\boldsymbol{\varphi}^*$  die Zufallsvektoren des momentanen Ortes und der Zusammensetzung und  $\mathbf{U}^*$ ,  $\boldsymbol{\Theta}^*$  die jeweiligen zeitlichen Änderungsraten sind. Die zu (4.16) korrespondierende Fokker-Planck-Gleichung lautet dann entsprechend:

$$\frac{\partial f_L^*(\boldsymbol{\psi}, \mathbf{x}; t)}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial x_i} \left[ \langle U_i | \boldsymbol{\psi}, \mathbf{x} \rangle f_L^*(\boldsymbol{\psi}, \mathbf{x}; t) \right] - \frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} \left[ \langle \theta_\alpha | \boldsymbol{\psi}, \mathbf{x} \rangle f_L^*(\boldsymbol{\psi}, \mathbf{x}; t) \right] \quad (4.17)$$

Ist der Zusammenhang zwischen  $\boldsymbol{\psi}$  und  $\mathbf{U}$ ,  $\boldsymbol{\theta}$  unbekannt, so kann dies durch bedingte Erwartungswerte (4.11) ausgedrückt werden. Dabei handelt es sich bei  $f_L^*(\boldsymbol{\psi}, \mathbf{x}; t)$  um die Lagrangesche-PDF, die die Wahrscheinlichkeit einer bestimmten Zusammensetzung  $\boldsymbol{\varphi}$  am Ort  $\mathbf{x}$  wiedergibt. Wie (Pope, 1985) zeigt, ist die Lagrangesche-PDF konditioniert auf einen Anfangszustand und Anfangsort zur Zeit  $t_0$   $f_L^*(\boldsymbol{\psi}, \mathbf{x}; t | \boldsymbol{\psi}_0, \mathbf{x}_0)$  gerade eine sogenannte Übergangsdichte. Diese Übergangswahrscheinlichkeit integriert über den gesamten Zustands- und Ortsraum zum Zeitpunkt  $t_0$  gewichtet mit allen möglichen Anfangswahrscheinlichkeiten zum Zeitpunkt  $t_0$  ergibt die Massendichtefunktion zum Zeitpunkt  $t$ :

$$\mathcal{F}^*(\boldsymbol{\psi}, \mathbf{x}; t) \equiv \rho(\boldsymbol{\psi}) f^*(\boldsymbol{\psi}, \mathbf{x}, t) = \langle \rho \rangle \tilde{f}^*(\boldsymbol{\psi}, \mathbf{x}, t), \quad (4.18)$$

wobei sich die zugehörige Transportgleichung entsprechend (4.17) ergibt (vgl. Anhang A3). Wie später gezeigt wird, ist die Lagrangesche-PDF konditioniert auf einen bestimmten Ort gleich der gesuchten Favre-PDF.

Angemerkt sei, dass es sich bei Gleichung (4.17) um eine deterministische Formulierung handelt, da die Dynamik von (4.17) ausschließlich durch bedingte Erwartungswerte beeinflusst wird. Es gibt nun eine Vielzahl von stochastischen

Prozessen, deren Zufallsvariablen die gleichen Erwartungswerte besitzen und somit die PDF-Transportgleichung  $f(\boldsymbol{\psi}; x, t)$  im realen, fluiden System erfüllen:

$$\rho(\boldsymbol{\psi})f(\boldsymbol{\psi}; x, t) = \langle \rho(\mathbf{x}, t) \rangle \cdot \tilde{f}(\boldsymbol{\psi}; x, t) = \mathcal{F}^*(\boldsymbol{\psi}, \mathbf{x}; t) \quad (4.19)$$

Ziel ist es, ein numerisch leicht zu berechnendes stochastisches System der Form (4.15) abzuleiten, das als Ergebnis die im folgenden Kapitel hergeleitete PDF-Transportgleichung für einen skalaren Zustandsvektor  $\boldsymbol{\varphi}$  nach (3.10) erfüllt. Die Konstruktion eines Gleichungssystems nach (4.15) ist ein eleganter Weg zur effizienten Lösung der PDF-Transportgleichung.

### 4.3 PDF-Transportgleichung – Fluidsystem

Die PDF-Transportgleichung für einen Skalar, der durch (3.10) eindeutig bestimmt ist, kann u.a. durch die Bildung des Erwartungswertes über die momentanen Erhaltungsgleichungen (Pope, 1986) oder über die momentane Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion nach (4.13) erfolgen. Der Ansatz über die momentane PDF  $\hat{f}(\boldsymbol{\psi})$  führt nach zeitlicher Differenzierung von (4.13) und entsprechenden Umformungen (vgl. Anhang A) auf:

$$\frac{\partial \hat{f}_\varphi(\boldsymbol{\psi})}{\partial t} = - \sum_{\alpha=1}^{\sigma} \frac{\partial \varphi_\alpha}{\partial t} \frac{\partial \hat{f}_\varphi(\boldsymbol{\psi})}{\partial \psi_\alpha}. \quad (4.20)$$

Setzt man in (4.20) die momentane skalare Erhaltungsgleichung Gl (3.10) ein und führt die Favre-Mittlung nach (4.18) durch, so ergibt sich nach einigen Umformungen (Laxander, 1996) die Favre-gemittelte Skalar-PDF-Transportgleichung:

$$\underbrace{\langle \rho \rangle \frac{\partial \tilde{f}_\varphi}{\partial t}}_{\text{zeitl. Änderung}} + \underbrace{\langle \rho \rangle \tilde{u}_i \frac{\partial \tilde{f}_\varphi}{\partial x_i}}_{\text{mittlere Konvektion im phys. Raum}} + \underbrace{\langle \rho \rangle \frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} (S_\alpha \tilde{f}_\varphi)}_{\text{chemische Reaktion im skalaren Zustandsraum}} = \underbrace{- \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \langle \rho \rangle \langle u_i'' | \boldsymbol{\varphi} = \boldsymbol{\psi} \rangle \tilde{f}_\varphi \right)}_{\text{turbulente Konvektion im phys. Raum}} - \underbrace{\langle \rho \rangle \frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} \left( \left\langle D \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \frac{\partial \varphi_\alpha}{\partial x_i} \right) \middle| \boldsymbol{\varphi} = \boldsymbol{\psi} \right\rangle \tilde{f}_\varphi \right)}_{\text{mol. Diffusion im skalaren Zustandsraum ("turb. Mischung")}}, \quad (4.21)$$

wobei die Summe über gleiche Indizes aus (4.20) weggelassen wurde. Die zeitliche Änderung der PDF ist bestimmt durch ihren mittleren und turbulenten kon-

vektiven Transport im physikalischen Raum und der Änderung im skalaren Zustandsraum durch chemische Reaktion und skalare Diffusion. Im Gegensatz zu der mittleren skalaren Transportgleichung tritt in (4.21) der chemische Quellterm geschlossen als Skalartransport im Zustandsraum mit der Geschwindigkeit  $S$  in Richtung der Gleichgewichtszusammensetzung auf. Demnach ist der chemische Quellterm in allen Verbrennungsregimen (vgl. Borghi-Diagramm, Bild 2.2 und 2.4) geschlossen darstellbar. Es sei angemerkt, dass aufgrund der limitierten Rechenleistung der chemische Reaktionsmechanismus reduziert werden muss (vgl. Abschnitt 4.6).

Terme die bedingte Erwartungswerte enthalten (rechte Seite von (4.21)) müssen modelliert werden. Im Gegensatz zur Joint-PDF enthält die Skalar-PDF keine statistischen Informationen über das Geschwindigkeitsfeld, so dass der turbulente konvektive Transport in Abhängigkeit des skalaren Zustands modelliert werden muss. Der zweite ungeschlossene Ausdruck, die molekulare Diffusion im Zustandsraum, tritt aufgrund fehlender statistischer Zwei-Punkt-Korrelationen, die zur Ableitung von Gradienten benötigt werden, auf. Häufig wird der molekulare Mischungsterm auch in Abhängigkeit der skalaren Dissipationsrate (vgl. Anhang A) geschrieben:

$$\begin{aligned} \langle \rho \rangle \frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} \left( \left\langle D \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \frac{\partial \varphi_\alpha}{\partial x_i} \right) \middle| \boldsymbol{\varphi} = \boldsymbol{\psi} \right\rangle \tilde{f} \right) = \\ \langle \rho \rangle \frac{\partial^2}{\partial \psi_\alpha \partial \psi_\beta} \left( \left\langle D \frac{\partial \varphi_\alpha}{\partial x_i} \frac{\partial \varphi_\beta}{\partial x_i} \middle| \boldsymbol{\varphi} = \boldsymbol{\psi} \right\rangle \tilde{f} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \langle \rho \rangle D \frac{\partial \tilde{f}}{\partial x_i} \right), \end{aligned} \quad (4.22)$$

wobei der zweite Term auf der rechten Seite die molekulare Diffusion im physikalischen Raum wiedergibt und bei hohen Reynoldszahlen vernachlässigbar ist.

Die zur Modellierung der ungeschlossenen Ausdrücke benötigten Geschwindigkeits- und Turbulenzfelder werden aus einem Finite-Volumen-Code bereitgestellt (siehe Kap. 5.6)

Das im Kapitel 5 vorgestellte Lösungsverfahren für die PDF-Transportgleichung erfolgt über stochastische Differentialgleichungen der Form (4.15).

## 4.4 Turbulente Konvektion

Die Modellierung der turbulenten skalaren Flüsse  $\langle \rho \rangle \widetilde{u_i'' \varphi_\alpha''}$  in den gemittelten Erhaltungsgleichungen erfolgt über Gradientenansätze (vgl. (3.41)). In Analogie hierzu wird die turbulente Konvektion modelliert (Pope, 1985):

$$\langle \rho \rangle \langle u_i'' | \boldsymbol{\varphi} = \boldsymbol{\psi} \rangle \tilde{f} \cong - \frac{\mu_T}{Sc_T} \frac{\partial \tilde{f}}{\partial x_i} \quad , \quad Sc_T = 0.7..0.9 \quad . \quad (4.23)$$

Es ist leicht zu sehen, dass die Multiplikation von (4.23) mit  $\boldsymbol{\psi}$  und anschließender Integration über den Zustandsraum den gewöhnlichen Gradientenansatz nach (3.41) ergibt. Die turbulente Viskosität  $\mu_T$  folgt aus dem k- $\varepsilon$  Modell. Der Gradienten-Diffusionsansatz nach (4.23) basiert auf dem k- $\varepsilon$  Turbulenzmodell und ist demzufolge für isotrope Turbulenz gültig.

Sind bei Verwendung eines Reynolds-Spannungsmodells die einzelnen Reynolds-Spannungen bekannt, so lautet der zu (3.52) analoge Gradienten-Transport-Ansatz:

$$\langle \rho \rangle \langle u_i'' | \boldsymbol{\varphi} = \boldsymbol{\psi} \rangle \tilde{f} \cong -C_s \langle \rho \rangle \frac{\tilde{k}}{\tilde{\varepsilon}} \widetilde{u_i'' u_j''} \frac{\partial \tilde{f}}{\partial x_j} \quad , \quad C_s = 0.22 \quad . \quad (4.24)$$

Im Gegensatz zu (4.23) erlaubt der Gradienten-Transport-Ansatz auch den turbulenten Transport entgegen dem mittleren Gradienten, d.h. die Berücksichtigung von sogenannten „counter-gradient diffusion“ Effekten. Dieses Phänomen wurde numerisch (Veynante, 1997) und experimentell (Frank, 1999) für vorge-mischte Verbrennung nachgewiesen. Eine Ursache sind die unterschiedlichen Beschleunigungen von verbrannten bzw. noch nicht verbrannten Fluidelementen.

## 4.5 Skalare Diffusion im Zustandsraum

Den wohl größten Kritikpunkt an den PDF-Methoden stellt der ungeschlossene Mischungsterm dar, welcher molekulare Diffusionsprozesse beschreibt. Unter der Annahme nur eines Skalars schreibt sich der Mischungsterm in Abhängigkeit von bedingten Erwartungswerten der skalaren Dissipation bzw. der skalaren Diffusion zu:

$$\frac{\partial \tilde{f}}{\partial t} = -\frac{\partial^2}{\partial \psi_\alpha \partial \psi_\alpha} \left\langle D \frac{\partial \varphi_\alpha}{\partial x_i} \frac{\partial \varphi_\alpha}{\partial x_i} \middle| \varphi = \psi \right\rangle \tilde{f} = -\frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} \left\langle D \frac{\partial^2 \varphi_\alpha}{\partial x_i^2} \middle| \varphi = \psi \right\rangle \tilde{f}. \quad (4.25)$$

Gleichung (4.25) beschreibt den skalaren Transport im Zustandsraum, der eine Reduzierung der Varianzen bzw. Kovarianzen zur Folge hat. Aus diesem Grund wird (4.25) oft auch als turbulenter Mischungsterm bezeichnet. Ein Überblick und Vergleich gängiger Mischungsmodelle ist in (Subramaniam und Pope, 1999) zu finden.

Die Darstellung des Mischungsterms in Abhängigkeit der Zwei-Punkt-PDF  $\tilde{f}_{\varphi\varphi}(\psi', \psi; x', x)$ :

$$\frac{\partial \tilde{f}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial \psi} \lim_{x_i \rightarrow x_i'} \left( D \frac{\partial}{\partial x_i'} \frac{\partial}{\partial x_i} \int \psi' \tilde{f}_{\varphi\varphi}(\psi', \psi; \mathbf{x}', \mathbf{x}) d\psi' \right), \quad (4.26)$$

mit  $\tilde{f}_{\varphi\varphi}(\psi', \psi; \mathbf{x}', \mathbf{x}) d\psi' d\psi$  als Wahrscheinlichkeit, dass sich  $\varphi'(\mathbf{x}', t)$  im Intervall  $\psi' - d\psi'/2$  und  $\psi' + d\psi'/2$  sowie zur gleichen Zeit sich  $\varphi(\mathbf{x}, t)$  im Intervall  $\psi - d\psi/2$  und  $\psi + d\psi/2$  befindet, verdeutlicht die Schließungsproblematik die sich durch die fehlenden räumlichen Gradienten (4.25) bzw. durch die unbekannte Zwei-Punkt-PDF (4.26) ergibt. Die Formulierung einer Zwei-Punkt-PDF ist allerdings kaum praktikabel und besitzt neue unbekannte Korrelationen (Eswaran et al., 1989).

Die chemischen Umsatzraten werden maßgeblich durch die molekulare Diffusion von Brennstoff und Oxidator, hervorgerufen durch lokale Gradienten, beeinflusst. Entsprechend dieser großen Bedeutung gibt es zahlreiche Ansätze zur Mischungsmodellierung, von denen hier nur die wichtigsten Modelle und deren Grundlagen dargelegt werden sollen. Aus physikalischen Überlegungen und mathematischen Randbedingungen heraus, sollten Mischungsmodelle folgende Eigenschaften erfüllen:

- Erhalt des Mittelwerts eines inerten Skalars in isotroper Turbulenz
- Abnahme der Skalarvarianz
- Begrenztheit der Skalare

- Relaxation eines inerten Skalars in homogener Turbulenz zu einer Gaußverteilung bei  $t \rightarrow \infty$
- Lokal im Zustandsraum
- Reynolds- und Skalenabhängigkeit.

Die Abnahme der Varianz in homogener Turbulenz ist für einen passiven Skalar gegeben durch:

$$\frac{1}{2} \frac{d \langle \varphi'^2 \rangle}{dt} = -D \left\langle \frac{\partial \varphi'}{\partial x_i} \frac{\partial \varphi'}{\partial x_i} \right\rangle = -\varepsilon_\varphi . \quad (4.27)$$

Um (4.27) schließen zu können, führt man analog zur Zeitskala der Geschwindigkeitsfluktuationen (2.10) eine integrale Mischungszeit  $t_\varphi = \langle \varphi'^2 \rangle / 2\varepsilon_\varphi$  ein. Die Lösung von (4.27) ergibt dann einen exponentiellen Varianzabfall gemäß:

$$\langle \varphi'^2(\mathbf{x}, t) \rangle = \langle \varphi'^2(\mathbf{x}, t_0) \rangle \exp(-\Delta t / t_\varphi) . \quad (4.28)$$

Die Bestimmung der skalaren Dissipationsrate kann durch Ableitung einer entsprechenden Transportgleichung (Borghi, 1988) oder wie in den meisten Fällen durch Annahme einer direkten Proportionalität zwischen  $t_t$  und  $t_\varphi$ :

$$t_\varphi = t_t / c_\varphi , \quad (4.29)$$

erfolgen. Experimentelle Untersuchungen ergaben für inerte Strömungen Werte für  $c_\varphi$  zwischen 0.6 und 3.1 (Warhaft, 1984). Aus DNS Berechnungen für die Mischung eines passiven Skalars leitete (Overholt et al., 1996) folgende Beziehung für  $c_\varphi$  in Abhängigkeit der Taylor-Reynoldszahl  $Re_\lambda$  her:

$$c_\varphi = \frac{c_\varphi(\infty)}{1 + 1.7 c_\varphi(\infty) Re_\lambda^{-1}} , \quad c_\varphi(\infty) = 2.5 . \quad (4.30)$$

Um die Begrenztheit der Skalare zu garantieren, muss der Zustandsraum konvex geformt sein und mit der Zeit abnehmen. Die Relaxation beliebiger Anfangsverteilungen zu einer Gaußverteilung in homogener Turbulenz wurde aus Experimenten (Warhaft, 1984) und aus DNS - Berechnungen (z.B. Pope, 1988) abgeleitet. Während Mapping-Closure-Modelle, das PSP-Modell (Meyer und Jenny, 2006) und rein stochastische Modelle (Heinz, 2003) die geforderte Relaxation sehr gut nachbilden können, ergeben sich hierbei teilweise Probleme bei

der Übertragung auf mehrere Skalare (siehe Mapping-Closure-Modell). Für den praxisnahen Fall der anisotropen Turbulenz verliert die geforderte Relaxation zu einer Gauß-PDF an Bedeutung, zumal die Gaußverteilung nicht beschränkt ist.

Da molekulare Mischungsvorgänge lokal im physikalischen Raum ablaufen, sollte dies auch auf den Zustandsraum übertragbar sein. Die geforderte Lokali-tätsbedingung, die vom EMST-Modell erfüllt wird, ist im Bereich der schnellen Flameletverbrennung von Bedeutung. Mit zunehmender Reynoldszahl schwächt sich die Lokali-tätsforderung ab.

Der Varianzabfall während der Mischung ist abhängig von den anfänglichen Längenskalen des Skalarfeldes. Je kleiner die Anfangslängenskala ist, desto schneller ist der Mischungsvorgang bzw. der Varianzabbau (Subramaniam und Pope, 1999). Mischungsmodelle sollten daher Informationen über die Längen-skalen enthalten.

In Strömungen hoher Reynoldszahl laufen Mischungsvorgänge von den großen integralen Skalen bis hin zu den kleinsten dissipativen Skalen ab. Da Informati-onen über das Skalarspektrum fehlen, wird die Mischungsrate deshalb proporti-onal zur turbulenten Wirbelfrequenz ( $\omega_t=1/t_t$ ) angenommen. Die mittlere Wirbel-frequenz sollte idealerweise in Abhängigkeit eines Zeitspektrums gebildet wer-den (Gonzalez und Borghi, 1991). Die Proportionalitätsannahme ist aber nur er-füllt, wenn der Gradientenaufbau durch das turbulente Strömungsfeld erfolgt. Erfolgt der Gradientenaufbau durch schnelle chemische Reaktion, beispielswei-se im Flamelet-Bereich, müssen Mischungsvorgänge auf den kleinsten Skalen berücksichtigt werden.

#### 4.5.1 IEM-Modell

Dieses von (Dopazo, 1975) vorgeschlagene Modell:

$$\frac{\partial \tilde{f}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial \psi} \left[ \frac{1}{2} \frac{1}{t_\varphi} (\psi - \langle \varphi \rangle) \tilde{f} \right], \quad (4.31)$$

beschreibt in einfacher Weise den Mischungsvorgang als Bewegung aller Rea-lisierungen  $\psi$  in Richtung des gemeinsamen Erwartungswertes  $\langle \varphi \rangle$ . Daher leitet sich auch der Name „Interaction by Exchange with the Mean“ ab. Der Vorfaktor

$\frac{1}{2} t_\phi^{-1}$  ergibt die Abnahme der Varianz nach (4.27). Das deterministische IEM-Modell wird wegen seiner Einfachheit und dem stetigem Verlauf hinsichtlich des Mischungsprozesses häufig benutzt. Da aber in (4.31) keine Informationen über die Form der PDF enthalten sind, werden beliebige Anfangsverteilungen nicht zu einer Gaußverteilung relaxiert. Darüber hinaus wird die Lokalitätsbedingung verletzt.

Anhang B zeigt die PDF für den zeitlichen Verlauf eines passiven Skalars in isotroper Turbulenz bei einer symmetrischen Doppel-Delta Anfangsverteilung  $f(\psi;0)=0.5(\delta(\psi)+\delta(\psi-1))$ . Man erkennt deutlich, dass die ursprüngliche Verteilungsform zu allen Mischungszeitpunkten beibehalten wird und somit keine Gaußverteilung entstehen kann. Trotz allen genannten Nachteilen, ergibt das IEM-Modell für den praxisrelevanten Fall der anisotropen Turbulenz gute Ergebnisse, da hier der turbulente Mischungsvorgang überwiegt.

#### 4.5.2 Modifiziertes Curl-Modell

Das ursprünglich von (Curl, 1963) hergeleitete Modell zur Beschreibung von Tropfenmischung, ist im Gegensatz zum deterministischen IEM Ansatz ein stochastisches Partikel-Interaktions-Modell.

Beim Curl-Modell werden entsprechend einer Mischungswahrscheinlichkeit  $P_{\text{Mix}}$  Paare zur Mischung ausgewählt und ihnen ihre gemeinsame mittlere Eigenschaft zugewiesen. Da somit aus zwei Anfangszuständen nur ein gemeinsamer mittlerer Zustand erreicht werden kann, entwickelten (Janicka et al, 1979) bzw. (Dopazo,1979) unabhängig voneinander eine modifizierte Variante des ursprünglichen Curl Modells:

$$\frac{\partial \tilde{f}}{\partial t} = \iint_{\mathbb{R}} \frac{\beta}{t_\phi} \tilde{f}(\psi') \tilde{f}(\psi'') K(\psi', \psi'', \psi) d\psi' d\psi'' - \frac{\beta}{t_\phi} \tilde{f}(\psi) \quad (4.32)$$

wobei  $K(\psi', \psi'', \psi)$  die Übergangswahrscheinlichkeit für das Ereignis, dass der Zustand  $\psi'$  mit  $\psi''$  interagiert und die Zustände  $\psi$  bzw.  $\psi'+\psi''-\psi$  entstehen. Die Übergangswahrscheinlichkeit ist nach (Pope, 1981) durch:

$$K(\psi', \psi'', \psi) = \int_0^1 A(\gamma) \delta(\psi - (1-\gamma)\psi' - 1/2\gamma(\psi'+\psi'')) d\gamma \quad (4.33)$$

gegeben. Für die kontinuierliche PDF  $A(\gamma)$  wird gewöhnlich eine Gleichverteilung mit  $A(\gamma)=1$  und dem Mischungsgrad  $\gamma \in [0;1]$  (Janicka, 1978) angenommen. Um die korrekte Abnahme der Varianz sicherzustellen wird  $\beta=3$  gesetzt. Das ursprüngliche Curl-Modell folgt für  $\gamma=1$ ,  $\beta=2$ ,  $A(\gamma)=\delta(1-\gamma)$  und  $K=\delta(\psi-1/2(\psi'+\psi''))$ . Damit nur physikalisch sinnvolle Mischungszustände entstehen, muss der Integrationsraum  $\mathfrak{R}$  konvex geformt sein mit  $\psi \in [\psi', \psi'']$ . Gleichung (4.32) repräsentiert die allgemeine Form für stochastische Partikel-Interaktions-Modelle mit  $K$  als Übergangswahrscheinlichkeit und angepassten Koeffizienten, um die korrekte Varianzabnahme sicherzustellen.

Anhang B stellt die PDF für den zeitlichen Verlauf eines passiven Skalars in isotroper Turbulenz dar. Im Gegensatz zum IEM-Modell werden beim Curl-Modell zufällige Anfangsverteilungen zu einer gaußähnlichen Verteilung relaxiert. Allerdings weist ein Vergleich der geraden und ungeraden Momente deutliche Unterschiede zur Gaußverteilung auf. Modifikationen von (Pope, 1981) konnten teilweise die Abweichungen zur Gaußverteilung verringern. Allerdings sollte die Gaußrelaxation für den praxisrelevanteren Fall der inhomogenen Turbulenz nicht überbewertet werden.

Auch das Curl-Modell verletzt die Lokalitätsbedingung, was gerade im Flamelet-Bereich zu unphysikalischen Ergebnissen führen kann. Somit können Mischungsvorgänge über die Reaktionsgrenzen hinweg auftreten, ohne dass es zur Reaktion kommt.

### 4.5.3 EMST-Modell

Dieses von (Subramaniam und Pope, 1997) entwickelte Modell gehört zur Klasse der stochastischen Partikel-Interaktions-Modelle. Das EMST-Modell erfüllt die Lokalitätsbedingung im Zustandsraum und stellt die Erweiterung zu den ursprünglichen Mapping-Closure-Modellen (vgl. Kap. 4.5.4) für Mehr-Komponenten-Mischung dar. Die Idee dabei ist, die unbekanntes Zufallsfelder durch bekannte Referenzfelder (z.B. Gaußfelder) über eine Abbildungsvorschrift (Mapping) auszudrücken. Damit diese „Mapping“ Funktion eindeutig existiert, muss die Verteilungsfunktion  $F(\psi, t)$  zwischen 0 und 1 streng monoton steigend

sein, d.h. die Zustandswerte müssen entsprechend  $\varphi_1 \leq \varphi_2 \dots \varphi_N$  sortiert werden. Im eindimensionalen Zustandsraum wird somit die Lokalitätsbedingung einfach erreicht. Es ist leicht einzusehen, dass diese Definition im mehrdimensionalen Fall unbrauchbar ist. Beim „Euclidian Minimum Spanning Tree“ (EMST) Modell werden nun die Zustände derart zu einer Baumstruktur verbunden, dass die Summe der Euklidischen Norm von benachbarten Zuständen innerhalb der Baumstruktur minimal ist. Damit im homogenen Fall die Mischung nicht ständig zwischen gleichen Partikelpaaren stattfindet, unterliegen alle Partikel einem Alterungsprozess, der linear zwischen Mischungs- und nicht-Mischungszustand unterscheidet. Es wird demnach ein „Euclidian Minimum Spanning Tree“ zwischen Partikeln im Zustand „Mischung“ gebildet, und dann zwischen benachbarten Partikeln gemischt. Die Mischungsrate ist abhängig von der Position in der Baumstruktur, d.h. sie ist umso höher je näher man sich im Mittelpunkt befindet. Ähnlich dem Curl- oder auch dem IEM- Modell sorgt ein Vorfaktor für die korrekte Abnahme der Varianz nach (4.27). Anhang B zeigt die Entwicklung der PDF für einen passiven Skalar. Wie schon beim modifizierten Curl-Modell wird eine gaussähnliche Form erreicht.

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass ausgehend von der Mapping-Closure Formulierung auf Partikelbasis (Pope, 1992), ergänzt durch eine zusätzliche Variable die den Mischungszustand charakterisiert und der Bildung des sogenannten „Euclidean Minimum Spanning Tree“, das EMST-Modell abgeleitet worden ist. Aufgrund des hohen numerischen Aufwands ist der Einsatz des EMST-Modells in Monte-Carlo-PDF-Methoden relativ gering. Bei Berechnungen von staukörperstabilisierten Flammen (Liu, 2004) und Vergleichen zwischen DNS- und PDF- Berechnungen mit IEM-, Curl-, bzw. EMST-Modell (Mitarai, 2005) zeigte sich das EMST-Modell gegenüber den anderen Modellen meist überlegen.

#### 4.5.4 Weitere Mischungsmodelle

Die zuvor gezeigten Mischungsmodelle werden häufig in der Literatur zitiert und beschrieben. In jüngster Zeit wurden allerdings neue Mischungsmodelle (mit

Ausnahme des Mapping-Closure-Modells) entwickelt, die weniger bekannt sind und im Folgenden kurz beschrieben werden.

#### 4.5.4.1 Mapping-Closure-Modell

Dieses erstmals von (Kraichnan, 1989) vorgestellte Modell führt die unbekannt-ten Zufallsfelder (4.25) über eine Abbildungsvorschrift auf bekannte Referenzfelder zurück (Mapping). Es gilt:

$$\underbrace{\theta \xrightarrow{X(\theta,t)} \varphi}_{\text{physikalischer Raum}}, \quad \underbrace{\eta \xrightarrow{X(\eta,t)} \psi}_{\text{Stichprobenraum}}, \quad \underbrace{F[X(\eta,t),t] = B(\eta,t)}_{\text{Verteilungsfunktionen}} \quad (4.34)$$

wobei  $X$  die Abbildungsvorschrift und  $\theta, \eta$  der zugehörige Zufallsvektor bzw. der Stichprobenraum des bekannten Referenzfeldes mit der zugehörigen Verteilungsfunktion  $B(\eta,t)$  ist. Die Idee hinter diesem Ansatz ist die Abbildung der unbekannt-ten Korrelationen durch Zufalls(referenz)felder, deren Mehrpunktstatistik bekannt ist. Als Referenzfeld wird meist ein Gauß- bzw.  $\beta$ -Skalarfeld (Sharath und Girimaji, 1992) angenommen, da zum einen die Mehrpunktstatistik bekannt ist und zum anderen DNS-Berechnungen von (Eswaran und Pope, 1988) ebenfalls auf Gaußverteilungen führen. Ziel ist es somit die unbekannt-ten Korrelationen  $\chi(\psi)$  durch die bekannte Statistik eines Referenzfeldes  $\chi(\eta)$  auszudrücken. Für ein zeitabhängiges Gauß-Referenzfeld leiteten (Sharath und Girimaji, 1992) folgende Entwicklungsgleichung für die Abbildungsfunktion  $X(\eta, \tau_\varepsilon)$  her:

$$\frac{\partial X(\eta, \tau_\varepsilon)}{\partial \tau_\varepsilon} = \langle \theta'^2(t=0) \rangle \frac{\partial^2 X(\eta, \tau_\varepsilon)}{\partial \eta \partial \eta}, \quad (4.35)$$

mit  $\tau_\varepsilon$  als eine auf die Skalardissipation  $\varepsilon_0(t)$  skalierte Zeit. Die exakte Lösung von (4.35) (eindimensionale Wärmeleitungsgleichung) ergibt:

$$X(\eta, \tau_\varepsilon) = \frac{1}{2 \langle \theta_0'^2 \rangle (\pi \tau_\varepsilon)^{1/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} X(\kappa, 0) \exp\left(-\frac{(\kappa - \eta)^2}{4 \langle \theta_0'^2 \rangle \tau_\varepsilon}\right) d\kappa, \quad (4.36)$$

mit  $X(\kappa, 0)$  als Anfangsbedingung. Durch differenzieren des letzten Ausdrucks in (4.34) nach  $X$  folgt die Bestimmungsgleichung für die unbekannt-ten PDF  $f(\psi, t)$ :

$$f(\psi, t) = b(\eta, t) \frac{\partial \eta}{\partial X}. \quad (4.37)$$

Für die Anfangsbedingung einer Doppel-Delta-PDF leitete (Gao, 1991) eine analytische Beziehung für  $f(\psi, \tau_\varepsilon)$  her:

$$f(\psi, \tau_\varepsilon) = \left(\frac{1-r}{r}\right)^{1/2} \exp \left[ -\frac{\eta^2}{2\langle\theta_0'^2\rangle} \left(\frac{1-2r}{r(1-r)}\right) - \frac{\eta\alpha}{\langle\theta_0'^2\rangle(1-r)} + \frac{\alpha^2}{2\langle\theta_0'^2\rangle(1-r)} \right], \quad (4.38)$$

mit  $r=1-2\tau_\varepsilon$  und  $B(\alpha,0)=1-\langle\varphi\rangle$ .

Das Mapping-Closure-Modell ist lokal im Zustandsraum und ergibt sehr gute Übereinstimmungen mit DNS Berechnungen passiver Skalare in homogener Turbulenz (Sharath und Girimaji, 1992). Der hohe numerische Aufwand und eine problematische Übertragbarkeiten auf Mehr-Komponenten-Mischung erschweren den Einsatz von klassischen Mapping-Closure-Mischungsmodellen in praxisrelevanten Simulationen. Die partikelbasierte Formulierung von (4.34) (Pope, 1992) indes bildet die Grundlage für das EMST-Mischungsmodell (Subramaniam und Pope, 1997).

#### 4.5.4.2 PSP-Modell

Das von (Meyer und Jenny, 2006) vorgeschlagene PSP-Modell verallgemeinert das ursprüngliche IEM-Modell. Es basiert auf der Parametrisierung von eindimensionalen sinusförmigen Skalarprofilen (parameterized scalar profiles - PSP), die eine Lösung der allgemeinen Teilchendiffusionsgleichung als auch des IEM-Modells darstellen. Die Mischung eines Skalars erfolgt dann entsprechend (4.31), wobei jeder Partikel eine individuell turbulente Frequenz (bzw. Wellenlänge) und einen individuellen Mittelwert besitzt. Die turbulente Wirbel-frequenz wird über eine stochastische Differentialgleichung beschrieben (Pope, 1995), der Teilchenmittelwert folgt aus der Mittelung von oberen- und unteren Profilverganzwert.

Die Validierung des Modells mit DNS-Mischungsberechnungen von (Pope, 1996) zeigten eine sehr gute Übereinstimmung. Anwendungsrechnungen in reagierenden Strömungen liegen indes noch nicht vor.

#### 4.5.4.3 RIEM/SIEM - Modell

Diese von (Heinz, 2003) vorgeschlagenen Modelle beruhen auf einer rein mathematischen Vorgehensweise, ausgehend von den allgemeinen stochastischen Differentialgleichungen für einen passiven Skalar in statistisch homogenen Geschwindigkeits- und Skalarfeldern. Grenzwertbetrachtungen von beiden Modellen führen zum bekannten IEM-Modell. Somit stellen das RIEM („refined interaction by exchange with the mean“) - bzw. das SIEM („stochastic interaction by exchange with the mean“) – Modell ebenfalls Verallgemeinerungen des IEM- Modells dar. Die Validierung mit DNS-Berechnungen (Pope, 1996) zeigten hohe Übereinstimmungen. Außer diesen eher theoretischen Anwendungen liegen z.Zt. kaum Erfahrungen im Umgang mit diesen Mischungsmodellen vor.

### 4.6 Chemie Modelle

Zwar ist der chemische Quellterm in (4.21) geschlossen darstellbar, dennoch ist die Auswertung eines detaillierten Chemiemechanismus aus Rechen- und Speicherplatzgründen nicht möglich. Aus diesem Grund ist es unumgänglich Reduktionsstrategien anzuwenden, die die Dimension des skalaren Zustandsraums von ca.  $O(50)$  Spezies für einen detaillierten  $\text{CH}_4$  Mechanismus auf ca.  $O(3)$  bis  $O(15)$  Spezies für einen reduzierten Mechanismus begrenzen. Betrachtet man die PDF-Gleichung unter alleiniger Berücksichtigung der Chemie im Zustandsraum, so ergibt sich mit der Forderung (4.18):

$$\langle \rho \rangle \frac{\partial \tilde{f}_\varphi^*}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} \left[ \langle \rho \rangle \langle S_\alpha(\boldsymbol{\varphi}) | \boldsymbol{\psi} \rangle f_\varphi^*(\boldsymbol{\psi}; t) \right] = - \frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} \left[ \langle \rho \rangle S_\alpha(\boldsymbol{\psi}) f_\varphi^*(\boldsymbol{\psi}; t) \right]. \quad (4.39)$$

Man erhält durch (4.15) sofort den Zusammenhang für den zu lösenden stochastischen Partikelprozess in Form eines gewöhnlichen Differentialgleichungssystems:

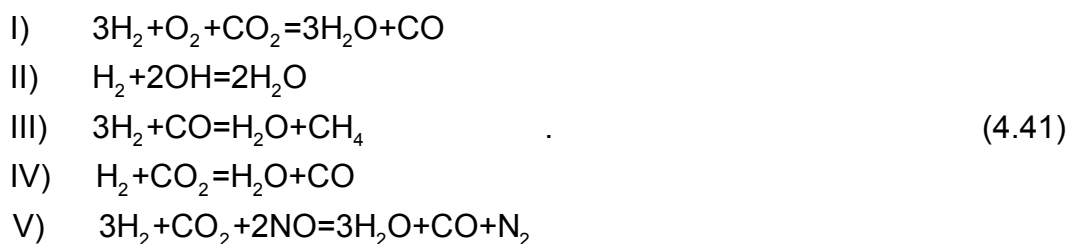
$$\frac{d\boldsymbol{\varphi}^*}{dt} = S(\boldsymbol{\varphi}^*, t) \quad \text{mit} \quad \boldsymbol{\varphi}^*(t_0) = \boldsymbol{\varphi}(t_0). \quad (4.40)$$

Wobei der Zustandsvektor  $\boldsymbol{\varphi}$  im Falle des detaillierten Chemiemechanismus bis zu  $O(50)$  Spezies enthalten kann. Wie später gezeigt wird, erfolgt die Lösung der PDF-Transportgleichung über ein stochastisches Monte-Carlo-

Verfahren mit stochastischen Partikeln  $\varphi^{*(n)}$ . Es ist sofort einsehbar, dass es bei einer Anzahl von bis zu  $4 \cdot 10^6$  Partikeln und einer typischen Schrittweite von  $dt=10^{-5}$  unmöglich ist, (4.40) in angemessener Zeit zu integrieren. Einen Überblick über Reduktionsstrategien bietet (Warnatz, Maas, Dibble, 2001) oder (Joos, 2006).

#### 4.6.1 Fünf-Schritt-Chemimechanismus

Auf Basis des detaillierten GRI 2.11 Mechanismusses generierte (Chen et al., 1996) durch Sensitivitätsanalysen und Quasistationaritätsannahmen einen auf mager, vorgemischter Verbrennung optimierten 5-, 6-, 7- und 9-Schritt  $\text{CH}_4$ /Luft-Mechanismus unter Berücksichtigung von NO. Es werden dabei folgende drei NO-Pfade berücksichtigt: thermisches NO, promptes NO und über Distickstoffdioxid erzeugtes NO. Der Mechanismus ist optimiert für mager, vorgemischte Gasturbinenbrennkammern (DLE) unter Drücken bis zu 30bar. In der vorliegenden Arbeit wird folgender 5-Schritt-Mechanismus verwendet:



#### 4.6.2 ILDM

Die Reduzierung eines chemischen Mechanismusses erfordert viel Erfahrung und ist auf bestimmte Reaktionspfade bzw. Zustandsbedingungen optimiert. Beispielsweise ist der in Kapitel 4.6.1 beschriebene globale Fünf-Schritt-Mechanismus für ein mageres Gemisch abgeleitet worden.

Im Gegensatz hierzu haben Maas und Pope mit der ILDM-Methode (engl. intrinsic low-dimensional manifold) eine rein mathematische Reduktionsmethode auf Grundlage einer Eigenwertanalyse der lokalen Jacobimatrix vorgeschlagen. Hierdurch lassen sich lokale Gleichgewichtsbedingungen formulieren. Im Folgenden sollen die grundsätzlichen Überlegungen kurz dargelegt werden. Für einen umfassenden Überblick sei auf (Maas, 1993), (Schmidt, 1996), (Blasenbrey, 2000) verwiesen.

Wie schon erwähnt wurde, variieren die chemischen Zeitskalen um mehrere Größenordnungen. Mit den physikalischen Zeitskalen hingegen überschneiden sie sich nur in einem kleinen Bereich. Somit können die schnellen chemischen Prozesse als relaxiert (angeglichen) und damit als entkoppelt vom System angesehen werden. Es zeigt sich, dass ein chemisches Reaktionssystem für verschiedene Anfangsbedingungen nach kurzer Zeit in eine einzige Trajektorie mündet, die schließlich bis zum Gleichgewichtspunkt läuft. Somit kann der Zustand des gesamten  $n$ -dimensionalen Systems als Bewegung auf der Trajektorie - einer niedrigdimensionalen Mannigfaltigkeit mit beispielsweise nur noch zwei Koordinaten beschrieben werden. Das bedeutet die gesamte Dynamik wird über die langsamen Zeitskalen entsprechend der Bewegung auf der niedrigdimensionalen Mannigfaltigkeit bestimmt. Somit kann das  $n$ -dimensionale Reaktionssystem:

$$\frac{\partial \boldsymbol{\psi}}{\partial t} = \mathbf{F}(\boldsymbol{\psi}) \xrightarrow{\text{Reduzierung}} \frac{\partial \boldsymbol{\theta}}{\partial t} = \mathbf{S}(\boldsymbol{\theta}) \quad (4.42)$$

auf ein System mit nur noch wenigen (meist zwei bis drei) Koordinaten  $\boldsymbol{\theta}$  und  $\mathbf{S}$  als chemischen Umsatz in einen niedrigdimensionalen Unterraum reduziert werden. Die Informationen über die zu entkoppelnden Zeitskalen liefert eine lokale Eigenwertanalyse der Jacobimatrix  $\mathbf{J}$  von  $\mathbf{F}$ . Die hieraus gewonnenen  $n$  Eigenwerte sind umgekehrt proportional zur Zeitskala der zugehörigen Reaktion. Nach einer Sortierung der Eigenwerte ( $\lambda^{\text{real}}(\mathbf{N}_s) > \lambda^{\text{real}}(\mathbf{N}_f)$ ) erfolgt die Aufteilung der zugehörigen Eigenvektoren in die langsamen Unterräume  $Z_s$  und die schnellen Unterräume  $Z_f$ . Die Zerlegung der Jacobimatrix  $\mathbf{J}$  ergibt:

$$\begin{pmatrix} \tilde{\mathbf{Z}}_s \\ \tilde{\mathbf{Z}}_f \end{pmatrix} \mathbf{J}(\mathbf{Z}_s, \mathbf{Z}_f) = \begin{pmatrix} \mathbf{N}_s & 0 \\ 0 & \mathbf{N}_f \end{pmatrix}, \quad (4.43)$$

$$\begin{pmatrix} \tilde{\mathbf{Z}}_s \\ \tilde{\mathbf{Z}}_f \end{pmatrix} = (\mathbf{Z}_s, \mathbf{Z}_f)^{-1}$$

mit  $\mathbf{N}_s$  und  $\mathbf{N}_f$  als Untermatrizen der langsamen bzw. der schnellen Eigenwerte (Zeitskalen)  $\lambda$  und  $\tilde{\mathbf{Z}}$  als den sogenannten linken Eigenvektoren. Nimmt man an, dass alle schnellen Prozesse relaxiert sind, folgt als Bedingung für die Mannigfaltigkeit das  $n_f$ -dimensionale Gleichungssystem:

$$\tilde{\mathbf{Z}}_r \mathbf{F}(\boldsymbol{\psi}) = 0 . \quad (4.44)$$

Die zur Schließung von (4.44) benötigten  $n-n_f$  Gleichungen erhält man über eine Parametrisierung  $\mathbf{P}$ :

$$\mathbf{P}(\boldsymbol{\psi}) = 0 , \quad (4.45)$$

die im adiabaten isobaren Fall das Druckniveau, die Elementerhaltung (Mischungsbruch), die Enthalpie sowie die unabhängigen Koordinaten (Reaktionsfortschrittvariablen) enthält. Durch (4.44) und (4.45) ist die Mannigfaltigkeit vollständig bestimmt und kann numerisch gelöst werden. Die interessierenden Größen (Dichte, Spezies, Temperatur, Umsatz) werden dann in Abhängigkeit der reduzierten Koordinaten  $\boldsymbol{\theta}$  tabelliert. Dabei bedarf es einer eindeutigen Abbildung  $\boldsymbol{\psi}=\boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{\theta})$  auf die Mannigfaltigkeit, was einer Projektion der Mannigfaltigkeit auf die Koordinaten entspricht. In dem verwendeten ILDM-Mechanismus werden neben dem Mischungsbruch die spezifischen Molzahlen von Kohlendioxid und Wasser verwendet. Mit der Anzahl der zu entkoppelnden Zeitskalen kann im Grenzfall zwischen detaillierter Chemie (keine Entkoppelung) und unendlicher schneller Chemie (Mischungsbruchbeschreibung) variiert werden. Je nach Anwendung müssen demnach die Gültigkeitsvoraussetzungen für eine Entkoppelung der Zeitskalen gegeben sein. Ein guter Kompromiss aus Rechen- und Speicheraufwand zum Auslesen der ILDM-Tabellen und die Abdeckung eines großen Bereiches des interessierenden Zustandsraums, kann bei der Verbrennung von Kohlenwasserstoffen durch Verwendung von zwei langsamen Zeitskalen ( $n_s=2$ ) erreicht werden. Die Beschreibung von Niedertemperaturbereichen bzw. Zündprozessen sollte jedoch mit höherdimensionalen ILDM erfolgen.

Wird das ILDM-Verfahren auf die PDF-Transportgleichung (4.21) angewandt, erfolgt die Beschreibung im niedrig dimensionalen Unterraum  $\boldsymbol{\theta}$ :

$$f(\boldsymbol{\psi}) \xrightarrow{\text{Reduzierung}} f(\boldsymbol{\theta}) . \quad (4.46)$$

Im Gegensatz zu den langsamen chemischen Reaktionen, die tangential auf der ILDM verlaufen, können physikalische Störungen den Zustand von der ILDM wegbewegen. Die direkte Anwendung der reduzierten Koordinaten auf die Mischungsmodelle vernachlässigt die Wechselwirkungen zwischen Mischung

und den schnellen chemischen Zeitskalen, so dass chemische Zustände erzeugt werden können, die sich nicht auf der ILDM befinden. Aus diesem Grund hat (Bender, 2003) die Mischungsmodelle bei der Beschreibung von turbulenten Vormischflammen auf den gesamten Zustandsraum  $\psi$  angewendet und anschließend eine Projektion auf den reduzierten Unterraum  $\theta$  durchgeführt. Allerdings ist die Wechselwirkung zwischen turbulenter Mischung und Reaktion bei nicht-vorgemischter Verbrennung ( $Da \gg 1$ ) deutlich geringer als im vorgemischten Fall und wird daher in der Regel vernachlässigt, zumal der numerische Aufwand aufgrund des zweifachen Tabellenzugriffs fast doppelt so hoch ist. Es sei angemerkt, dass physikalische Störungen durch Konvektion den chemischen Zustand nicht von der ILDM wegführen. Dies ist leicht einzusehen, wenn man berücksichtigt, dass in der Lagrangeschen Beschreibung nur der Ort eines Volumenelementes sich ändert und nicht dessen Zusammensetzung.

## 5 Monte-Carlo Lösungsverfahren

Während Kapitel 4 die Grundlagen einer stochastischen Strömungsbeschreibung liefert, soll im folgenden Kapitel das Vorgehen in dieser Arbeit zur Lösung der PDF-Transportgleichung (4.19) dargestellt werden. Dazu wird auf die alternative Beschreibung in einem stochastischen System, mittels eines partikelbasierten Monte-Carlo-Verfahrens in einer Lagrangeschen Betrachtungsweise, zurückgegriffen (vgl. Kap. 4.2). Es gilt  $\mathcal{F}^* = \mathcal{F}$ , wobei  $\mathcal{F}^*$  über stochastische Partikel repräsentiert wird. Aus Gründen der besseren Darstellung gilt im weiteren für stochastische Partikel  $\varphi^* = \varphi$  und für ihren Aufenthaltsort  $\mathbf{x}^* = \mathbf{x}$ .

### 5.1 Diskrete Darstellung der PDF

Da es sich bei der PDF um eine hochdimensionale Funktion mit den unabhängigen Koordinaten Raum, Zeit und Spezies handelt, ist ein konventionelles Finite-Volumen-Verfahren zur Lösung der PDF-Transportgleichung unpraktikabel. Steigt bei diesem Verfahren die Rechen- und Speicherzeit exponentiell mit der Zahl der unabhängigen Koordinaten, so besitzen Monte-Carlo-Verfahren nur einen linearen Anstieg. Dem gegenüber stehen langsame Konvergenzraten und die Abnahme des statistischen Fehlers mit  $N^{-1/2}$  (Pope, 1985). Aus diesem Grund sollte die Partikelanzahl bei der diskreten PDF  $f_N$  möglichst hoch sein. Die für den inhomogenen, Dichte variierenden Fall gesuchte diskrete Massendichtefunktion  $\mathcal{F}_N(\boldsymbol{\psi}, \mathbf{x}; t) \equiv \rho(\boldsymbol{\psi}) f_N(\boldsymbol{\psi}; \mathbf{x}, t) = \langle \rho \rangle \tilde{f}_N(\boldsymbol{\psi}; \mathbf{x}, t)$  folgt zu:

$$\mathcal{F}_N = \sum_{n=1}^N \left[ m^{(n)} \prod_{\alpha=1}^{N_{sp}-1} \delta(\psi_\alpha - \varphi_\alpha^{(n)}) \prod_{i=1}^3 \delta(x_i - x_i^{(n)}) \right], \quad (5.1)$$

wobei  $\varphi_{\alpha..N_{sp}-1}^{(n)}, x_i^{(n)}$  das n'te von N stochastischen Partikeln mit der Eigenschaft  $(Y_\alpha^{(n)} \dots Y_{N_{sp}-1}^{(n)}, x_{1..3}^{(n)})$  und der individuellen Masse  $m^{(n)}$  für eine bestimmte Zelle des Rechengebietes darstellt.

Wie (Pope, 1985) zeigt, folgt der diskrete Favre-Mittelwert einer beliebigen Funktion  $Q(\boldsymbol{\psi})$  analog zu (4.7) für die Favre-gemittelte PDF  $\langle \rho \rangle \tilde{f}_N(\boldsymbol{\psi}; \mathbf{x}, t)$ :

$$\tilde{Q} = \left( \sum_{n=1}^N m^{(n)} \right)^{-1} \cdot \sum_{n=1}^N m^{(n)} Q(\boldsymbol{\varphi}^{(n)}) . \quad (5.2)$$

Die mittlere Dichte, die die wesentliche Koppelungsgröße zwischen Monte-Carlo-Partikel-Code und Finite-Volumen-Code darstellt (vgl. Kap. 5.6) ergibt sich zu:

$$\langle \rho \rangle_k = \left[ \frac{1}{M} \sum_{n=1}^N \frac{m^{(n)}}{\rho(\boldsymbol{\varphi})} \right]^{-1} . \quad (5.3)$$

Da die Partikel sich durch das diskrete Rechengitter bewegen, muss der Einfluss jedes Partikels auf die umliegenden Knoten der Rechenzelle zusätzlich (zur Massenwichtung (5.2)) noch durch eine Abstandswichtung erfasst werden.

## 5.2 Teilschrittverfahren

Die Massendichtefunktion kann verkürzt in Operatorenschreibweise mit  $\mathbf{K}$  für den konvektiven Transport,  $\mathbf{M}$  für die Mischung und  $\mathbf{R}$  für die Reaktion geschrieben werden:

$$\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial t} = (\mathbf{K} + \mathbf{M} + \mathbf{R}) \cdot \mathcal{F} . \quad (5.4)$$

Die zeitliche Diskretisierung und anschließende Faktorisierung von (5.4) liefert:

$$\mathcal{F}(t + \Delta t) = (\mathbf{I} + \Delta t \mathbf{K})(\mathbf{I} + \Delta t \mathbf{M})(\mathbf{I} + \Delta t \mathbf{R}) \cdot \mathcal{F}(t) , \quad (5.5)$$

mit einer Genauigkeit von  $O(\Delta t)$ . Durch die Faktorisierung wird es möglich alle Prozesse sequentiell, d.h. nacheinander auf dem vorherigen Teilergebnis aufbauend, zu beschreiben:

$$\begin{aligned} \mathcal{F}^{(1)}(t + \Delta t) &= (\mathbf{I} + \Delta t \mathbf{K}) \mathcal{F}(t) \\ \mathcal{F}^{(2)}(t + \Delta t) &= (\mathbf{I} + \Delta t \mathbf{M}) \mathcal{F}^{(1)}(t + \Delta t) . \\ \mathcal{F}(t + \Delta t) &= (\mathbf{I} + \Delta t \mathbf{R}) \mathcal{F}^{(2)}(t + \Delta t) \end{aligned} \quad (5.6)$$

Im Folgenden werden die einzelnen Teilschritte der Konvektion, der Mischung und der Reaktion näher beschrieben.

### 5.3 Konvektion

Im Teilschritt der Konvektion ändert jedes einzelne Partikel gemäß der stochastischen Differentialgleichung (vgl. 4.15):

$$dx_i^{(n)} = a_i dt + b_{ik} dW_k, \quad (5.7)$$

seinen individuellen Ort im Rechengitter. Erfolgt die Schließung des turbulenten Transportterms über einen Gradienten-Diffusions-Ansatz (4.23), so lautet die zugehörige Massendichtefunktion im physikalischen Raum:

$$\frac{\partial \mathcal{F}_\varphi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} [\tilde{u}_i \mathcal{F}_\varphi] - \frac{\partial}{\partial x_i} \left[ \frac{\mu_T}{Sc_T} \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \frac{\mathcal{F}_\varphi}{\langle \rho \rangle} \right) \right] = 0. \quad (5.8)$$

Ein Koeffizientenvergleich mit der entsprechend umgeformten Fokker-Plank-Gleichung (Produktregel im Diffusionsterm von 4.14):

$$\frac{\partial \mathcal{F}_\varphi^*}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[ a_i - \frac{1}{2} \frac{\partial b_{ii}^2}{\partial x_i} \right] \mathcal{F}_\varphi^* - \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_i} b_{ii}^2 \frac{\partial \mathcal{F}_\varphi^*}{\partial x_i} = 0,$$

liefert die gewünschten Koeffizienten zu:

$$b_{ii}^2 = 2 \frac{\mu_T}{Sc_T \langle \rho \rangle}, \quad a_i = \tilde{u}_i + \frac{1}{\langle \rho \rangle} \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \frac{\mu_T}{Sc_T} \right). \quad (5.9)$$

Unter der Voraussetzung, dass die Diffusionskoeffizienten  $b_{ik}$  unkorreliert sind, d.h.  $b_{ik} = b_{ii}$ , folgt der neue Partikelort durch Integration von (5.7):

$$x_i^{(n)}(t + \Delta t) = x_i^{(n)}(t) + \Delta t \left( \tilde{u}_i + \frac{1}{\langle \rho \rangle} \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \frac{\mu_T}{Sc_T} \right) \right)_{\mathbf{x}(t)} + \sqrt{\left( 2 \frac{\mu_T}{Sc_T \langle \rho \rangle} \Delta t \right)_{\mathbf{x}(t)}} \cdot \zeta_i, \quad (5.10)$$

wobei für das Inkrement des Wiener-Prozesses  $dW_i(t) = dt^{1/2} \zeta_i$  gilt und  $\zeta_i$  eine unabhängige, normalverteilte Zufallszahl darstellt. Diese isotrope Bewegungsgleichung kann durch Verwendung eines Gradienten-Transport-Ansatzes (4.24) für den anisotropen Fall formuliert werden. Dabei ergeben sich die Koeffizienten von (5.7) zu:

$$b_{ik} b_{kj} = 2C_s \frac{\tilde{\mathbf{k}}}{\tilde{\varepsilon}} \widetilde{u_i u_j}, \quad a_i = \tilde{u}_i + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( C_s \frac{\tilde{\mathbf{k}}}{\tilde{\varepsilon}} \widetilde{u_i u_j} \right), \quad C_s = 0.22. \quad (5.11)$$

Die Diffusionskoeffizienten  $b_{ik}$  bestimmen sich aus:

$$B = T \begin{pmatrix} \sqrt{\lambda_1} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{\lambda_2} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{\lambda_3} \end{pmatrix} T^{-1}, \quad (5.12)$$

wobei  $T$  die Eigenvektoren und  $\lambda$  die Eigenwerte des Tensors mit den Elementen  $2C_s \tilde{k} / \tilde{\varepsilon} \tilde{u}_i \tilde{u}_j$  sind.

Somit lautet die Bewegungsgleichung bei Verwendung des Gradienten-Transport-Ansatzes:

$$x_i^{(n)}(t + \Delta t) = x_i^{(n)}(t) + \Delta t \left( \tilde{u}_i + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( C_s \frac{\tilde{k}}{\tilde{\varepsilon}} \tilde{u}_i \tilde{u}_j \right) \right)_{\mathbf{x}(t)} + b_{ik} \sqrt{t} \cdot \zeta_k \quad (5.13)$$

Da die mittleren Geschwindigkeiten und die Turbulenzgrößen nur an den Gitterknotenpunkten vorliegen, erfolgt eine Interpolation bzw. Gradientenbildung durch lineare Formfunktionen auf den momentanen Partikelort  $\mathbf{x}^{(n)}(t)$  (vgl. Kap. 5.7.2).

Die räumliche Diskretisierung von (5.7) mit einem einfachen expliziten Euler Schema ist ungeachtet der Ordnung von  $\tilde{u}_i$  1. Ordnung  $O(\Delta t)$ . Eine höhere räumliche Genauigkeit erhält man, wenn (5.7) in zwei Teilschritten integriert wird. Diese Verfahren ähnelt dem Prediktor-Korrektor-Verfahren und ist im allgemeinen ( $b_{ik} \neq 0$ ) von schwacher 1. Ordnung. Einen Vergleich unterschiedlicher Diskretisierungsmethoden bei stochastischen Differentialgleichungen gibt (Pope, 2003). Aufgrund des numerischen Mehraufwands, durch eine zweimalige Partikelsuche (vgl. Kap. 5.7.3) wurde hier das explizite Ein-Schritt Euler-Verfahren verwendet.

## 5.4 Mischung

Während der Mischung erfolgt eine Interaktion mit anderen stochastischen Partikeln bzw. dem gemeinsamen Mittelwert, wobei es zum Abbau der Varianz bei gleichzeitigem Erhalt des Mittelwerts kommt. Die Mischung stellt hierbei eine skalare Diffusion im Zustandsraum dar.

### 5.4.1 IEM-Modell

Das IEM-Modell für den stochastischen Partikelprozess lautet (siehe (4.29)):

$$\frac{d\boldsymbol{\varphi}^{(n)}}{dt} = -\frac{1}{2t_{\varphi}}(\boldsymbol{\varphi}^{(n)} - \langle \boldsymbol{\varphi} \rangle) . \quad (5.14)$$

Hieraus ergibt sich die Mischungsvorschrift für ein Partikel:

$$\boldsymbol{\varphi}^{(n)}(t + \Delta t) = \langle \boldsymbol{\varphi} \rangle + (\boldsymbol{\varphi}^{(n)}(t) - \langle \boldsymbol{\varphi} \rangle) \cdot \exp(-\Delta t / (2t_{\varphi})) . \quad (5.15)$$

Der Erwartungswert  $\langle \boldsymbol{\varphi} \rangle$  wird durch Ensemblemittelung in einer Zelle bestimmt.

#### 5.4.2 Modifiziertes Curl-Modell

Beim modifiziertem Curl-Modell werden  $N/2$  Partikelpaare  $(p), (q)$  in einer Zelle gebildet, die mit einer bestimmten Mischungswahrscheinlichkeit (Möbus, 2001):

$$\text{Prob}_{p,q} = \beta c_{\varphi} \frac{\Delta t}{t_i} \frac{N(m^{(p)} + m^{(q)})}{2 \sum_{n=1}^N m^{(n)}} , \quad (5.16)$$

an der Mischung teilnehmen. Dieses Auswahlkriterium kann numerisch einfach umgesetzt werden, indem ein Paar zur Mischung ausgewählt wird, wenn die Summe einer gleichverteilten Zufallszahl  $\gamma$   $[0;1]$  mit der Mischungswahrscheinlichkeit  $\text{Prob}_{p,q}$  größer als 1 ist. Erfüllt ein Partikelpaar diese Forderung, so ändert es seinen skalaren Zustand:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\varphi}^{(p)}(t + \Delta t) &= \boldsymbol{\varphi}^{(p)}(t) + \frac{m^{(q)}}{m^{(p)} + m^{(q)}} \gamma (\boldsymbol{\varphi}^{(q)}(t) - \boldsymbol{\varphi}^{(p)}(t)) \\ \boldsymbol{\varphi}^{(q)}(t + \Delta t) &= \boldsymbol{\varphi}^{(q)}(t) + \frac{m^{(p)}}{m^{(p)} + m^{(q)}} \gamma (\boldsymbol{\varphi}^{(p)}(t) - \boldsymbol{\varphi}^{(q)}(t)) \end{aligned} . \quad (5.17)$$

Für die korrekte Abnahme der Varianz nach (4.26) muss  $\beta=3$  sein. Das ursprüngliche Curl-Modell folgt für  $\gamma=1$ ,  $\beta=2$  und  $m^{(p),(q)}=1$ .

#### 5.4.3 EMST-Modell

Beim EMST-Modell besitzen alle Partikel als zusätzliche Eigenschaft ein Partikelalter. Während der zeitlichen Simulation, wechselt ein Partikel entsprechend einem Alterungsprozess (Subramaniam, 1998) seinen Zustand zwischen Mischung und keiner Mischung. Wie in Abschnitt 4.5.3 beschrieben formen die zur Mischung ausgewählten Partikel eine Baumstruktur, so dass deren Länge nach der Euklidischen Norm minimal ist. Ist ein Partikelpaar  $p,q$  durch die  $v$ 'te Ecke in

der Baumstruktur miteinander verbunden, so ändern beide Partikel in dem Intervall  $\Delta t$  ihren skalaren Zustand:

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\varphi}^{(p)}(t + \Delta t) &= \boldsymbol{\varphi}^{(p)}(t) + \frac{\alpha B_v \Delta t}{m^{(p)}} \left( \boldsymbol{\varphi}^{(q)}(t) - \boldsymbol{\varphi}^{(p)}(t) \right) \\ \boldsymbol{\varphi}^{(q)}(t + \Delta t) &= \boldsymbol{\varphi}^{(q)}(t) + \frac{\alpha B_v \Delta t}{m^{(q)}} \left( \boldsymbol{\varphi}^{(p)}(t) - \boldsymbol{\varphi}^{(q)}(t) \right)\end{aligned}\quad (5.18)$$

Der Koeffizient  $B_v$  ist eine lineare Funktion des Eckengewichts, das durch die Partikelmassen des zugehörigen Partikelbaums bestimmt ist. Der Parameter  $\alpha$  führt zum Varianzabbau nach (4.26) und wird zu jedem Zeitschritt neu bestimmt.

## 5.5 Reaktion

### 5.5.1 Fünf-Schritt-Mechanismus

Die Änderung des skalaren Zustands aufgrund chemischer Reaktion ist durch:

$$\frac{d\boldsymbol{\varphi}}{dt} = S(\boldsymbol{\varphi}, t) \quad (5.19)$$

gegeben, wobei  $S$  den chemischen Quellterm des 5-Schritt-Mechanismusses darstellt. Da es sich bei (5.19) um ein steifes Differentialgleichungssystem handelt, erfolgt eine effiziente Integration durch ein implizites BDF-Verfahren (NAG-Fortran Library).

Die Temperatur berechnet sich bei adiabater Reaktionsführung aus:

$$c_{p,m} \frac{dT}{dt} = - \sum_{\alpha=1}^{N_{sp}} h_{\alpha} S_{\alpha} \quad , \quad (5.20)$$

bzw. in einer expliziten diskretisierten Darstellung:

$$T^{(n)}(t + \Delta t) = T^{(n)}(t) - \frac{1}{c_{p,m}} \sum_{\alpha=1}^{N_{sp}} h_{\alpha}^n \cdot \left( \varphi_{\alpha}^n(t + \Delta t) - \varphi_{\alpha}^n(t) \right) \quad . \quad (5.21)$$

Die spezifische isobare Wärmekapazität  $c_{p,m}$  für das ideale Gasgemisch ergibt:

$$c_{p,m}(T) = \sum_{\alpha=1}^{N_{sp}} Y_{\alpha} \cdot c_{p,\alpha}(T) \quad ,$$

mit  $c_{p,\alpha}$  und  $h_{\alpha}$  ausgedrückt über die NASA- Polynome:

$$\begin{aligned}
 c_{p,\alpha}(T) &= \frac{R_0}{M_\alpha} (a_1 + a_2 T + a_3 T^2 + a_4 T^3 + a_5 T^4) \\
 h_\alpha(T) &= \frac{R_0}{M_\alpha} (a_1 T + \frac{a_2}{2} T^2 + \frac{a_3}{3} T^3 + \frac{a_4}{4} T^4 + \frac{a_5}{5} T^5 + a_6)
 \end{aligned}
 \tag{5.22}$$

Die direkte Integration des chemischen Quellterms mit anschließender Temperaturbestimmung erlaubt es, unterschiedliche chemische Reaktionsmechanismen einzubinden. Diese Flexibilität hat seinen Preis in sehr langen Rechenzeiten.

### 5.5.2 ILDM

Ist die Mannigfaltigkeit vollständig bestimmt, so kann sie in tabellarischer Form abgelegt werden. Während der Simulation erfolgt dann ein Tabellenaufruf und der neue Zustand für ein Partikel ergibt sich zu:

$$\boldsymbol{\varphi}^{(n)}(t + \Delta t) = (\boldsymbol{\varphi}^{(n)}(t), \Delta t)_{\text{ILDM-Tabelle}}
 \tag{5.23}$$

Es ist somit der komplette Zustand  $\boldsymbol{\psi}(Y_{\alpha..Nsp}, T, \rho)$  auf einem unstrukturierten Gitter in Abhängigkeit der Koordinaten Mischungsbruch  $\xi$ , und den spezifischen Molzahlen von Kohlendioxid  $\phi_{\text{CO}_2}$  und Wasser  $\phi_{\text{H}_2\text{O}}$  abgespeichert. Die Quellterme der reaktiven Spezies von  $\text{CO}_2$  und  $\text{H}_2\text{O}$  sind vorintegriert für 8 verschiedene Zeitinkremente abgelegt. Die Tabelle ist um den stöchiometrischen Mischungsbruch  $\xi_{\text{stöch}}$  verfeinert. Einzelheiten zur Tabellierung können (Schmidt, 1996) entnommen werden.

## 5.6 Koppelung

Da die Skalar-PDF keine Geschwindigkeits- und Turbulenzgrößen enthält, ist es notwendig das PDF-Lösungsverfahren mit einem Finite-Volumen-Verfahren (FVV) zu koppeln. Alternativ dazu kann auch ein entsprechender FEM-Solver verwendet werden (Laxander, 1996).

### 5.6.1 FV-Verfahren

Zur Lösung der mittleren Kontinuitäts-, Impuls- und Turbulenzgleichungen (3.36), (3.37), (3.46), (3.48) bzw. (3.50), (3.51) wird in dieser Arbeit das kommerzielle CFD-Programm CFX-7.1 bzw. 10.0 verwendet (ANSYS CFX Manuel,

2005). Es basiert auf einer Finite-Volumen Formulierung mit einem LU-Lösungsalgorithmus. Die Diskretisierung erfolgt an den Zelleckpunkten, wodurch das Integrationsvolumen nicht mit dem Zellvolumen übereinstimmt. Die Bestimmung der ein- und austretenden Flüsse über das Integrationsvolumen erfolgt an mehreren Punkten mit Hilfe linearer Formfunktionen über die angrenzenden Zelleckpunkte. Ein Datenaustausch und eine Koppelung mit externen Programmen wird über Fortran Schnittstellen realisiert.

### **5.6.2 Koppelung der Teilmodelle**

Wie schon in Kapitel 1.2 erwähnt, geben (Muradoglu et al. 1999) und (Jenny et al. 2001) einen umfassenden Überblick über Koppelungsstrategien. Hierbei stehen vor allem Konsistenzfragen, Korrekturalgorithmen und Fehlerabschätzungen im Mittelpunkt der Betrachtungen.

In dieser Arbeit stellt die mittlere Dichte die zentrale Koppelungsgröße zwischen den beiden Teilprogrammen dar. Dabei erfolgt eine iterative Rückkoppelung zwischen PDF- und FV-Programm, wobei die Teilchenerhaltung und Energiegleichung im PDF-Teil und die Kontinuitäts-, Impuls- und Turbulenzgleichungen im FV-Teil gelöst werden. Somit wird aus beiden Unterprogrammen die maximale Information verarbeitet, doppelte Felder werden vermieden und der numerische Aufwand erheblich reduziert. Zudem wird bei dieser Formulierung der Bias Fehler durch die Verwendung der rauschfreien Geschwindigkeitsfelder aus dem FV-Code verringert.

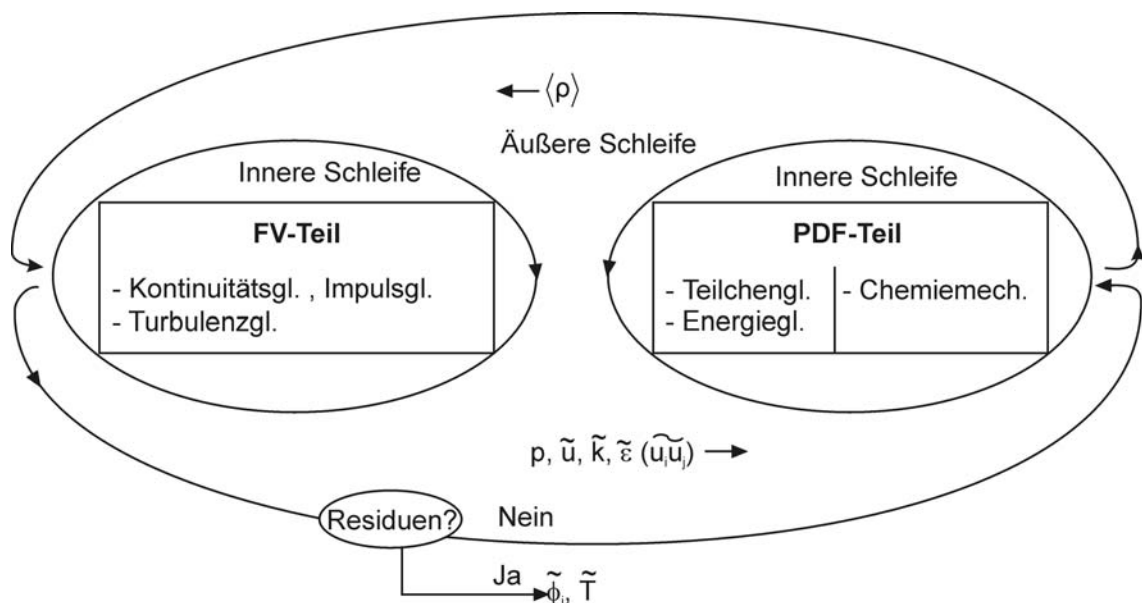
Beide Teilmodelle sind wie folgt miteinander gekoppelt: Nach der Initialisierung wird das mittlere Geschwindigkeits- und Turbulenzfeld an das PDF-Programm übergeben. Dieses löst für einen oder mehrere Zeitschritte die PDF-Transportgleichung und übergibt als Ergebnis die mittlere Dichte an das FV-Programm. Diese Iterationsschleife erfolgt so lange, bis beide Teilmodelle auskonvergiert sind. Dabei zeigte sich eine enge Koppelung zwischen beiden Teilprogrammen, d.h. im Extremfall nur jeweils eine PDF-Iteration, für den Konvergenzverlauf von Vorteil. Aufgrund der stochastisch motivierten Dichteschwankungen (endliche Partikelanzahl) wurde die mittlere Dichte aus dem PDF-Programm z.T. nur stark unterrelaxiert an das FV-Programm übergeben. Ein

gängiges Verfahren den stochastischen Fehler zu senken, besteht in einer fortlaufenden Mittelung über mehrere Zeitschritte bei eingetretener Konvergenz (statistische Stationarität):

$$\tilde{\varphi}^{n+1} = \left( \frac{K-1}{K} \right) \tilde{\varphi}^n + \frac{1}{K} \tilde{\varphi}^{n+1} \quad , \quad K \geq 1, n \geq 0 \quad , \quad (5.24)$$

wobei  $n$  und  $n+1$  den alten und neuen Wert bezeichnen und  $K$  der momentane Mittelungsschritt ist.

Bild 5.1 zeigt schematisch das Gesamtmodell.



**Bild 5.1:** Ablaufschema einer hybriden FV/PDF-Rechnung

## 5.7 Weitere Unterprogramme

### 5.7.1 Zeitschritt

Die Berechnung des Zeitschritts orientiert sich an der Bedingung, dass die Partikelbewegung durch konvektive und diffusive Prozesse nach (5.10) bzw. (5.13) auf die angrenzenden Nachbarzellen beschränkt wird. Somit ergibt sich z.B. bei Verwendung von (5.10):

$$\Delta t = \frac{\text{CFL}}{\frac{1}{\Delta x_i} \left[ \left| \tilde{u}_i + \frac{1}{\langle \rho \rangle} \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \frac{\mu_T}{Sc_T} \right) \right| + \frac{2\mu_T}{\Delta x_i \Delta x_i \cdot Sc_T \langle \rho \rangle} \right]} \quad , \quad (5.25)$$

wobei die CFL-Zahl (Courant-Friedrich-Levy-Zahl) zwischen 0 und 1 liegt. Allerdings können sich einzelne Partikel aufgrund des stochastischen Wiener Prozesses über mehrere Zellen bewegen. Alle Rechnungen wurden mit CFL=0.8 durchgeführt.

Bei gegebener Geschwindigkeit wird der Zeitschritt maßgeblich durch die Zellabmessungen bestimmt. Wird der Gesamtzeitschritt durch das Minimum von (5.25) über alle Zellen hinweg festgelegt, so schreitet die Simulation in weiten Bereichen des Rechengitters zu langsam voran. Eine Methode zur Konvergenzbeschleunigung bei statistisch stationären Strömungen ist daher die Verwendung eines zellabhängigen, lokalen Zeitschritts. Ausführliche Untersuchungen zum lokalen Zeitschritt führte (Laxander, 1996) durch.

Da nun der Zeitschritt umliegender Zellen für den Partikel- bzw. Massenzufluss der betrachteten Zelle innerhalb von  $\Delta t$  verantwortlich ist, wird ein Masseausgleich:

$$m^{(n)}(t + \Delta t) = m^{(n)}(t) \frac{\Delta t(\mathbf{x}^{(n)}(t + \Delta t))}{\Delta t(\mathbf{x}^{(n)}(t))} \quad (5.26)$$

durchgeführt (Möbius, 2001). Die Minimierung der Rechenzeit durch Verwendung eines lokalen Zeitschritts ist Voraussetzung für die Berechnung komplexer dreidimensionaler Strömungen.

### 5.7.2 Interpolation

Da beim verwendeten FV-Verfahren die berechneten Geschwindigkeits- und Turbulenzfelder diskret an den Zelleckpunkten vorliegen, muss eine Interpolation dieser Größen auf den spezifischen Partikelort innerhalb der Zelle erfolgen.

Unter Benutzung von trilinearen Ansatzfunktionen  $\Phi$  ergibt sich z.B. für eine Hexaederzelle die Geschwindigkeit  $\tilde{u}$  am Partikelort der lokalen Koordinaten  $p, q, r$  zu:

$$\tilde{u}^{(n)} = \sum_{i=1}^8 \tilde{u}_i \Phi_i(p, q, r) , \quad (5.27)$$

wobei  $\tilde{u}_i$  die Geschwindigkeiten an den 8 Elementknoten und  $\Phi_i$  die entsprechenden Ansatzfunktionen sind (Allievi und Bermejo 1997). Die für das betrach-

tete Element lokalen Koordinaten  $p, q, r$  können mittels eines Newton-Verfahrens und dem Partikel- bzw. Elementkoordinaten berechnet werden:

$$\begin{pmatrix} p^{(n)} \\ q^{(n)} \\ r^{(n)} \end{pmatrix}_{k+1} = \begin{pmatrix} p^{(n)} \\ q^{(n)} \\ r^{(n)} \end{pmatrix}_k - J^{-1}(p, q, r)_k \begin{pmatrix} x^{(n)} - \sum_{i=1}^8 x_i \Phi_i(p, q, r)_k \\ y^{(n)} - \sum_{i=1}^8 y_i \Phi_i(p, q, r)_k \\ z^{(n)} - \sum_{i=1}^8 z_i \Phi_i(p, q, r)_k \end{pmatrix}, \quad (5.28)$$

wobei  $J^{-1}$  die inverse Jacobimatrix des rechten Klammersausdrucks von (5.28) darstellt. Befinden sich alle lokalen Koordinaten im Intervall der definierten Formfunktionen, ist hiermit gleichzeitig die momentane Partikelauenthaltszelle gefunden. Ein Partikelsuchalgorithmus basierend auf der Bestimmung lokaler Koordinaten ist allerdings sehr rechenintensiv (vgl. Kap. 5.7.3).

Sind zusätzlich noch räumliche Gradienten, wie beispielsweise der Gradient der turbulenten Wirbelviskosität (vgl. (5.10)) gesucht, so erfolgt die Berechnung nach:

$$\begin{pmatrix} \partial \mu_T(p, q, r) / \partial x^{(n)} \\ \partial \mu_T(p, q, r) / \partial y^{(n)} \\ \partial \mu_T(p, q, r) / \partial z^{(n)} \end{pmatrix} = J(p, q, r) \cdot \begin{pmatrix} \partial \mu_T^{(n)}(p, q, r) / \partial p \\ \partial \mu_T^{(n)}(p, q, r) / \partial q \\ \partial \mu_T^{(n)}(p, q, r) / \partial r \end{pmatrix}, \quad (5.29)$$

wobei  $J$  die Jacobimatrix der lokalen Koordinaten abgeleitet nach den räumlichen Koordinaten darstellt.

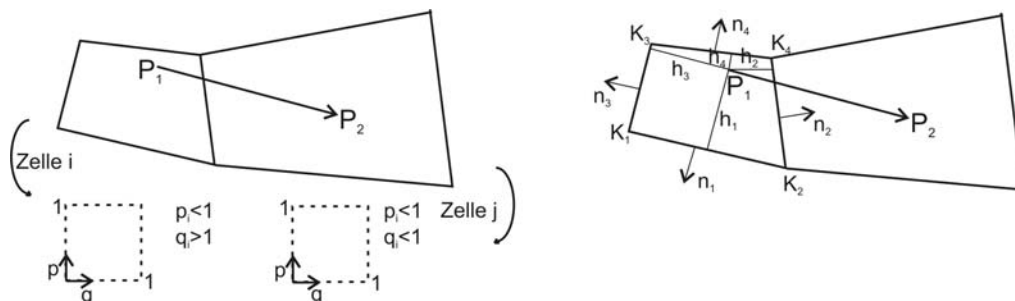
### 5.7.3 Partikelsuchalgorithmus

Neben der Partikelbewegung im skalaren Zustandsraum (Mischung, Reaktion), erfolgt nach (5.10) bzw. (5.13) auch eine Bewegung im Ortsraum  $\mathbf{x}$  des diskreten Rechengitters. Hierdurch können Partikel ihre individuelle Aufenthaltszelle verlassen und sich eine oder mehrere Zellen weiterbewegen, wobei der Zeitschritt die Bewegung auf eine Nachbarzelle beschränkt. Allerdings kann durch stochastische Fluktuationen auch Partikeltransport über mehrere Zellen hinweg stattfinden. Die Kenntnis des aktuellen Aufenthaltsortes ist beispielsweise notwendig zum „Update“ der Partikeleigenschaften (z.B. mittlere Geschwindigkeiten) durch Interpolation von den Zelleckpunkten oder auch zur Durchführung der Mischung.

Die Suche der momentanen Aufenthaltszelle ist nach dem Teilschritt der Reaktion die CPU intensivste Anwendung. Aufgrund der hohen Partikelanzahl (bis zu  $4 \cdot 10^6$ ) ist deshalb ein effizienter Partikelsuchalgorithmus notwendig.

Häufig werden Verfahren eingesetzt, die eine beliebig geformte Tetraeder- oder Hexaederzelle auf einen Einheitstetraeder oder -quader abbilden (Allievi und Bermejo 1997). Sind die in das lokale Koordinatensystem umgerechneten Partikelkoordinaten  $(p,q,r) < 1$ , so ist die aktuelle Aufenthaltszelle gefunden, andernfalls muss die Suche entsprechend des Vorzeichens von  $p,q,r$  in den angrenzenden Zellen fortgesetzt werden. Die Berechnung der lokalen Koordinaten ist nur bei zweidimensionalen Dreieckszellen analytisch möglich. Ein numerisches Lösungsverfahren ist sehr zeit- und speicherintensiv, da es bei zweidimensionalen Viereckszellen schon 8 mögliche Nachbarzellen und im dreidimensionalen sogar bis zu 27 Nachbarzellen zu berücksichtigen gibt.

Aus diesem Grund wird in dieser Arbeit ein analytisches Verfahren, basierend auf geometrischen Zellparametern verwendet (Li und Modest, 2001). Bild 5.2 zeigt die Gegenüberstellung zwischen beiden Suchalgorithmen.



**Bild 5.2:** Gegenüberstellung von Partikelsuchalgorithmen; links: Koordinatentransformation, rechts: geometrisches Verfahren

Bewegt sich beispielsweise ein Partikel von  $P_1$  nach  $P_2$ , so ergibt sich beim geometrischen Suchverfahren die neue Aufenthaltszelle, wenn das Verhältnis der Strecke  $\overline{P_1P_2}$  projiziert auf den jeweiligen Normalenvektor und dem entsprechenden Seitenlot  $h_{1..4}$  zu Punkt  $P_1$ :

$$\frac{\overline{P_1P_2} \circ \vec{n}_1}{|\vec{h}_1|}, \frac{\overline{P_1P_2} \circ \vec{n}_2}{|\vec{h}_2|}, \frac{\overline{P_1P_2} \circ \vec{n}_3}{|\vec{h}_3|}, \frac{\overline{P_1P_2} \circ \vec{n}_4}{|\vec{h}_4|}, \quad (5.30)$$

größer als 1 und maximal ist. Dieses Verfahren ist numerisch sehr effektiv, da die Auswertung von (5.30) analytisch erfolgt und die benötigten Elementinformationen (Normalenvektoren, Elementverbindungen) bei einem statischen Gitter nur einmal berechnet werden müssen.

#### 5.7.4 Klonen der stochastischen Partikel

Da bei unstrukturierten bzw. axialsymmetrischen Gittern die Zellvolumen stark variieren, kann es während der Berechnung vorkommen, dass sich die Zellpartikelzahlen um mehrere Zehnerpotenzen unterscheiden. Um den statistischen Fehler gering zu halten, darf die Zellpartikelzahl eine vorgegebene Untergrenze nicht unterschreiten. Andererseits darf aus Speicherplatzgründen eine Partikelzahlobergrenze nicht überschritten werden.

Die dynamische Partikelzahlanpassung basiert auf der Idee, dass schwere Partikel in mehrere leichte Partikel mit identischen Eigenschaften geklont und viele leichte Partikel zu schweren Partikel verschmelzen. Dabei müssen die stochastischen Momente vor und nach der Partikelzahlanpassung identisch sein.

So werden z.B. beim Unterschreiten einer minimalen Partikelzellzahl aus dem schwersten Partikel  $p$  der Masse  $m_p$  zwei Partikel  $q, r$  mit der Masse  $m_p/2$  und den Eigenschaften von  $p$  gebildet. Beim Überschreiten einer maximalen Partikelanzahl verschmelzen zwei Partikel  $q, r$  mit der Masse  $m_q, m_r$  zu einem Partikel der Masse  $m_q+m_r$ , der massengemittelten Position  $(m_q x_q + m_r x_r)/(m_q + m_r)$  und den skalaren Eigenschaften entsprechend der Wahrscheinlichkeit  $P_q = m_q/(m_q + m_r)$  und  $P_r = m_r/(m_r + m_q)$ .

#### 5.7.5 Randbedingungen

##### Einlass

Die Anzahl der eintretenden Partikel in die Zelle  $j$  ergibt sich aus vorgelagerten Dummy-Zellen:

$$N_{ein,j} = \text{int} \left( \frac{\dot{m}_{D,ein} \Delta t_j}{m_D} N_D \right), \quad (5.31)$$

wobei  $N_D$  eine konstante Dummy-Partikelanzahl,  $\dot{m}_{D, \text{ein}}$  die einströmende Masse und  $m_D$  die in der Dummy-Zelle enthaltene Masse ist. Die Partikeleigenschaften entsprechen den physikalischen Randbedingungen mit der Masse  $m^{(n)} = \dot{m}_{D, \text{ein}} \Delta t / N_{\text{ein}}$ .

### Wand/ Symmetrierand

Partikel die eine feste Wand oder einen Symmetrierand verlassen, werden unter Beibehaltung aller sonstigen Eigenschaften elastisch reflektiert:

$$\begin{pmatrix} x_{\text{refl}}^{(n)} \\ y_{\text{refl}}^{(n)} \\ z_{\text{refl}}^{(n)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1^{(n)} \\ y_1^{(n)} \\ z_1^{(n)} \end{pmatrix} - 2 \left[ \frac{\Delta t - \Delta t_{SP}}{\Delta t} \begin{pmatrix} x_1^{(n)} - x_0^{(n)} \\ y_1^{(n)} - y_0^{(n)} \\ z_1^{(n)} - z_0^{(n)} \end{pmatrix} \circ \begin{pmatrix} n_x \\ n_y \\ n_z \end{pmatrix} \right] \circ \begin{pmatrix} n_x \\ n_y \\ n_z \end{pmatrix}, \quad (5.32)$$

mit  $\Delta t_{SP}$  als Zeitschritt bis zum Erreichen der Zellwand (Schnittpunkt),  $n_{x,y,z}$  als die Komponenten des Normalenvektors der Reflektionswand und  $\mathbf{x}_1$  als Endkoordinate der ursprünglichen Bewegung bis  $\Delta t$ .

### Auslass

Partikel die eine Auslasswand überschreiten werden aus der Simulation gelöscht.

## **6 Validierung und Anwendung**

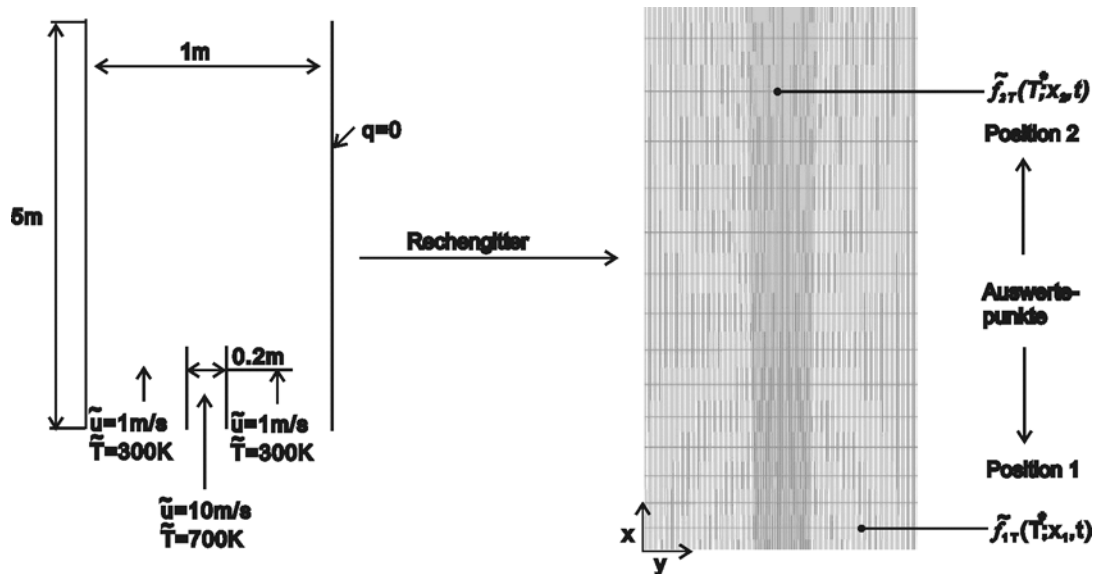
Der im vorherigen Kapitel beschriebene Lösungsweg für die PDF-Transportgleichung wird auf ein Modellproblem angewandt und mit einer FV-Lösung verglichen. Insbesondere die Algorithmen zur Interpolation, der Partikelsuche und des lokalen Zeitschritts sollen dabei untersucht werden. Ziel der Anwendungsrechnungen ist es, eine industrielle Rohrbrennkammer zu berechnen. Als Vorstufe hierzu werden zunächst gut dokumentierte und experimentell vermessene Freistrahlfammen berechnet. Der Übergang von gerichteter Jetströmung zu brennkammerrelevanten, rezirkulierenden Strömungen wird anhand von Berechnungen staukörperstabilisierter Flammen vollzogen.

### **6.1 Validierungsrechnung an einer turbulenten Scherschicht**

Die Validierung des PDF-Modells erfolgt an einem einfachen zweidimensionalen Wärmeausgleichsproblem. Dabei dient eine FV-Lösung zweiter Ordnung als Referenz. Der Vergleich bezieht sich auf eine inerte Strömung, da unterschiedliche Verbrennungsmodelle in beiden Teilprogrammen das Ergebnis verfälschen würden. Im Idealfall sollten sich die berechneten Temperaturfelder nicht unterscheiden, da das PDF- und das FV-Verfahren auf den Navier-Stokes-Gleichungen basieren. Etwaige Abweichungen sind dem stochastischen Fehler aufgrund einer endlichen Partikelanzahl und dem Mischungsmodell zuzuschreiben. Darüber hinaus dient das variierende Zellvolumen der Validierung des Interpolations- und Partikelsuchalgorithmusses sowie der lokalen Zeitschrittsteuerung.

#### **6.1.1 Testproblem**

Als Testproblem wird ein zweidimensionaler Kanal mit einer heißen Jetströmungen, umgeben von einer kalten Außenströmung betrachtet. Die Wände sind dabei adiabatisch. Die Kontur und die Randbedingungen können Bild 6.1 entnommen werden.



**Bild 6.1:** Modellproblem mit dazugehörigem Rechengitter

Für die FV-Lösung wurden neben den gemittelten Navier-Stokes-Gleichungen die mittlere Skalar-Transportgleichung für  $\tilde{\varphi} = \tilde{T}$  gelöst. Die PDF-Transportgleichung wird ebenfalls für die skalare Zufallsgröße  $\varphi = T$  berechnet. Als Turbulenzmodell wird bei beiden Simulationen das Standard k- $\epsilon$  Modell verwendet. Die diskrete Darstellung der PDF erfolgt über 125 stochastische Partikel pro Rechenzelle, die sich in einer Lagrangeschen Betrachtungsweise vom Eintritt bis zum Austritt entsprechend der Bewegungsgleichung (5.10) durch das Rechengitter bewegen. Jedes Partikel besitzt dabei die individuellen Eigenschaften:

$$\boldsymbol{\varphi}^{(n)} = (x_1^{(n)}, x_2^{(n)}, T^{(n)}, m^{(n)}) \quad (6.1)$$

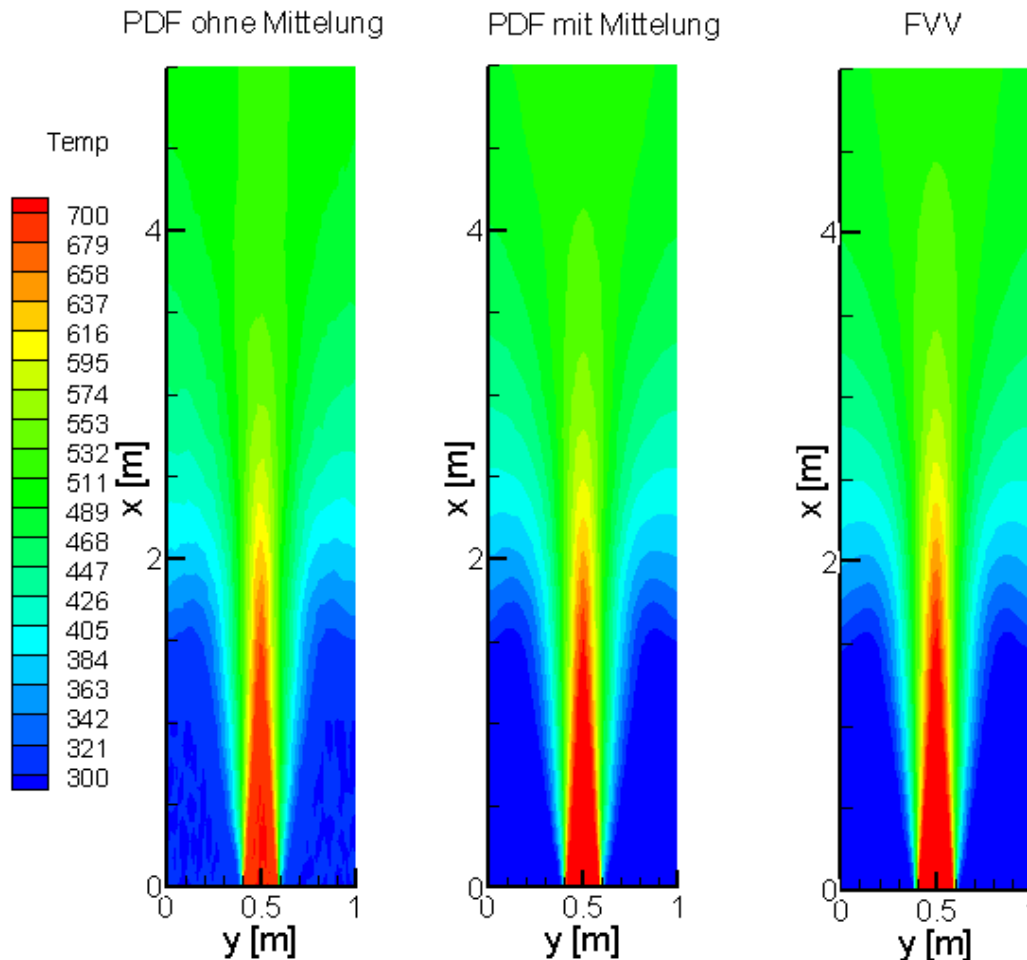
und durchläuft die Prozesse der Konvektion und Mischung (IEM) pro Iterationszeitschritt. Die Partikelrandbedingungen für den Eintritt lauten:

$$F_{T=Kalt,Hei\beta} = m^{(n)} \cdot \delta(\mathbf{x}^{(n)} - \mathbf{x}_{Kalt,Hei\beta}) \delta(T^{(n)} - T_{300K,700K}) . \quad (6.2)$$

Eine stationäre Lösung stellte sich nach 600 Partikeliterationen ein. Zur weiteren Minimierung des stochastischen Fehlers fand zusätzlich eine zeitliche Mittelung über mehrere Iterationen statt.

### 6.1.2 Ergebnisse

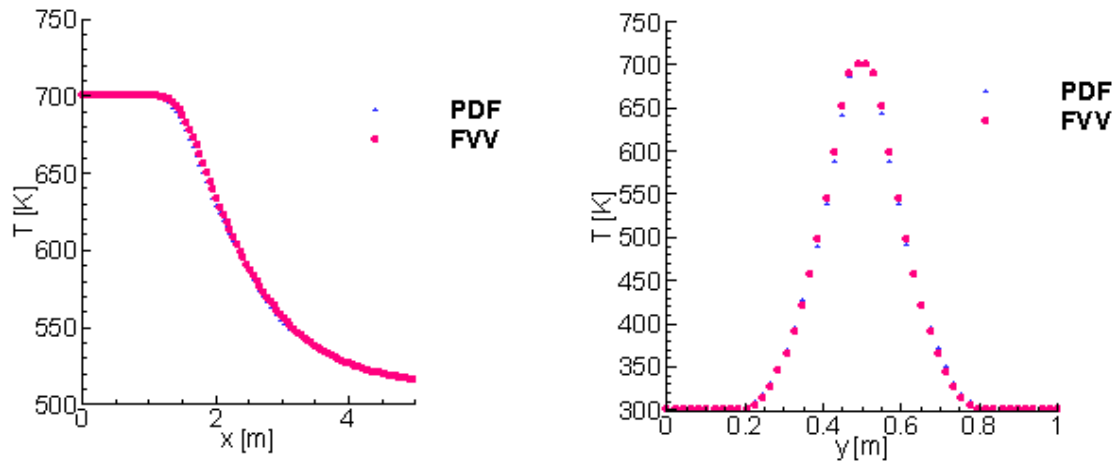
Bild 6.2 zeigt einen qualitativen Vergleich der Temperaturfelder zwischen PDF- und FV-Verfahren. Bei der PDF-Berechnung mit Mittelung erfolgte bei eingetretener Konvergenz eine fortlaufende Mittelung über 100 Iterationen.



**Bild 6.2:** Vergleich der Temperaturfelder; links: PDF ohne Mittelung, Mitte: PDF mit zusätzlicher Mittelung, rechts: FVV

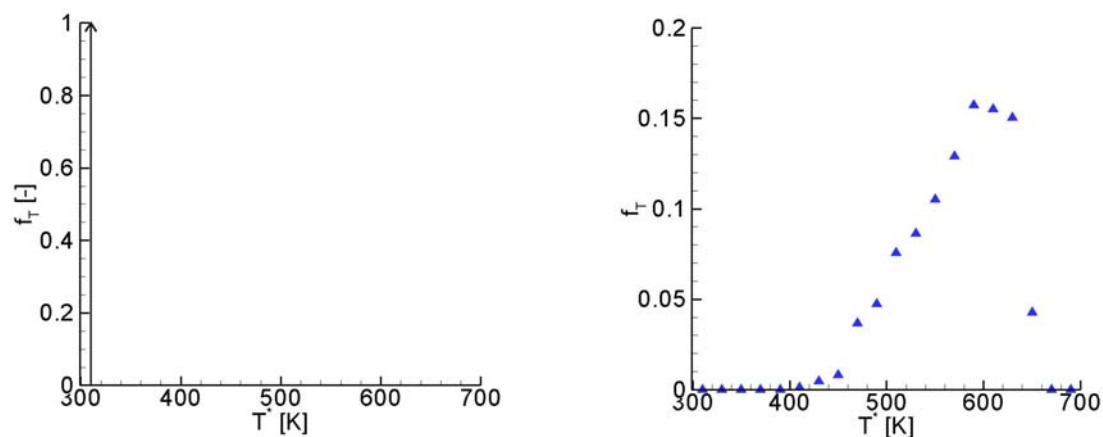
Der qualitative Vergleich der Temperaturfelder zwischen PDF- und FV-Verfahren lässt kaum Unterschiede erkennen. Dies unterstreicht zum einen die mathematische Exaktheit der Wahrscheinlichkeitsdichte-Methode (vgl. Kap. 4) in turbulenten Strömungen, die Exaktheit der modellierten Teilmodelle und des Lösungsalgorithmus. Bei letzterem diente dieses einfache Testproblem zur Validierung von Interpolations- und Partikelsuchalgorithmus sowie der lokalen Zeitschrittsteuerung. Das FV-Verfahren konvergierte mit 250 Iterationen während für eine stationäre PDF-Lösung 600 Iterationen benötigt wurden. Bild 6.3

zeigt einen quantitativen Vergleich der Temperatur entlang der Symmetrieachse bei  $y=0.5\text{m}$  und entlang der Line  $x=1\text{m}$ . Die Temperaturverläufe beider Rechnungen sind nahezu identisch.



**Bild 6.3:** Temperaturprofile: links:  $y=0.5\text{m}$ ; rechts:  $x=1\text{m}$

Um das PDF-Verfahren noch einmal deutlich von den FV-Methoden abzugrenzen, zeigt Bild 6.4 die berechneten Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen an den in Bild 6.1 dargestellten Positionen. Im kalten Zulauf am Auswertepunkt 1 ist die Wahrscheinlichkeit dafür, dass Zustände von  $T=300\text{K}$  auftreten, gleich eins, während sich im weiteren Mischungsverlauf an der Position 2 eine Wahrscheinlichkeitsverteilung mit einer wahrscheinlichsten Temperatur von ca.  $T=600\text{K}$  einstellt. Das FV-Verfahren berechnet an jeder Position im Strömungsfeld nur eine mittlere Temperatur.



**Bild 6.4:** Vergleich der PDF's: links: Position 1; rechts: Position 2 (vgl. Bild 6.1)

## 6.2 Pilotierte Freistrahlfamme

Die von (Barlow und Frank, 1997) vermessene Serie von pilotierten Freistrahlfammen C-F bilden einen idealen Testfall zur detaillierten Validierung des PDF-Transportgleichungsmodells. Durch Variation der Brennstoffeintrittsgeschwindigkeit können Flammen partiell erlöschen und stromab wiederzünden. In der Vergangenheit wurden diese Konfiguration schon häufiger untersucht (Nau, 1996), (Hinz, 2000), (TNF6, 2002), (TNF, 2004), wobei meistens Mischungs- und Chemie-Modelle miteinander verglichen wurden. Ziel dieser Arbeit ist zum einen ein Vergleich des EMST-Mischungsmodells mit IEM- und modifiziertem Curl-Modell. Um die Einflüsse von Chemiemechanismus und Mischungsmodell besser unterscheiden zu können, wird neben der ILDM-Chemie (Maas, 1993) noch ein Fünf-Schritt-Mechanismus (Chen, 1996) eingesetzt.

Zum anderen soll die Beschreibung des Turbulenzfeldes mit einem Reynolds-Stressmodell und die Schließung der turbulenten Konvektion durch einen Gradienten-Transport-Ansatz (5.13) erfolgen, um zu prüfen ob hierdurch eine höhere Genauigkeit im Vergleich zum  $k-\varepsilon$  Modell mit Gradienten-Diffusions-Ansatz (5.10) erreicht werden kann.

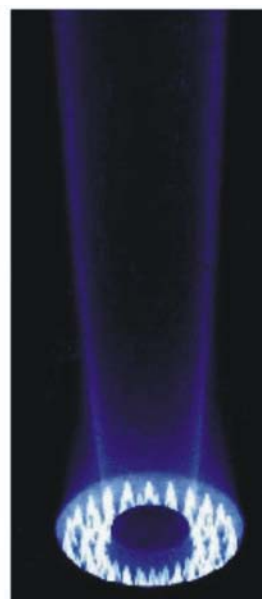
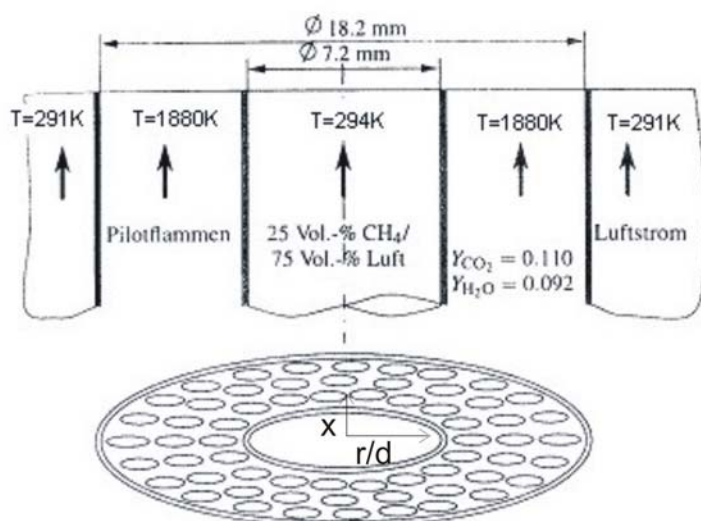
### 6.2.1 Experiment

Am SANDIA Forschungszentrum wurde ein Satz Freistrahldiffusionsflammen mit steigender Reynoldszahl definiert (Flamme C-F) und untersucht. Die experimentellen Daten sind als Teil des „*International Workshop on Measurement and Computation of Turbulent Nonpremixed Flames (TNF)*“ im Internet frei zugänglich. Die zugehörigen Geschwindigkeitsprofile wurden an der TU Darmstadt von (Schneider et al., 2003) vermessen und für diese Arbeit zu Verfügung gestellt.

Aus dem gesamten Flammensatz wurde die Flamme mit der geringsten Reynoldszahl (Flamme C,  $Re=13.400$ ) und diejenige mit der höchsten Reynoldszahl (Flamme F,  $Re=44.800$ ), welche nahe der Verlöschgrenze brennt, ausgewählt.

Das Brennstoffgemisch mit 25vol% CH<sub>4</sub> und 75vol% Luft strömt durch eine zentrale Düse. Die partielle Vormischung reduziert die Russbildung und verkürzt die Flammenlänge. Aufgrund der hohen Mischungsraten brennen die Flammen trotz Vormischung diffusionsgesteuert mit einer Reaktionszone nahe des stöchiometrischen Mischungsbruchs (Frank und Barlow, 2003). Zur Stabilisierung der Flamme ist um die Brennstoffdüse eine ringförmige Halteflamme angeordnet. Die Zusammensetzung des Pilotgemisches ist so gewählt, dass sich die Abgaszusammensetzung am Brennerausgang bezüglich Enthalpie und Elementmassenverteilung nur unwesentlich (ca. 5%) von der Zusammensetzung eines Methan-Luft-Gemisches mit dem Äquivalenzverhältnis  $\phi=0.77$  unterscheidet. Somit ist das Gesamtsystem als Zweistoff-System beschreibbar. Eingebettet ist die gesamte Anordnung in einem Luftstrom niedriger Geschwindigkeit, um die Flamme von äußeren Strömungseinflüssen abzuschirmen. Die Messung der Zusammensetzung und der Temperatur erfolgten mit Raman und LIF, die Geschwindigkeitsmessungen mit LDA.

Bild 6.5 zeigt schematisch die Brenneranordnung. Die experimentellen Randbedingungen für Flamme C und F sind Tabelle 6.1 und Tabelle 6.2 zu entnehmen. Für die Auswertung wird die radiale Richtung  $r$  auf den Düsendurchmesser  $d=7.2\text{mm}$  bezogen.



**Bild 6.5:** links: Brennerskizze mit Randbedingungen; rechts: Fotoaufnahme der Sandia Flamme (Barlow und Frank, 2003)

**Tabelle 6.1:** Anströmgeschwindigkeiten für Jet-, Pilot- und Coflow-Strömung

	$U_{\text{Jet}}$ [m/s]	$U_{\text{Pilot}}$ [m/s]	$U_{\text{Coflow}}$ [m/s]
<b>Flamme C</b>	29.7	6.8	0.9
<b>Flamme F</b>	99.2	22.8	0.9

**Tabelle 6.2:** Experimentelle Randbedingungen Flamme C und F

	T [K]	$\lambda$ [-]	$\chi_i$ [vol %]
<b>Jet</b>	294	0.315	25% CH <sub>4</sub> , 75% Luft
<b>Pilot</b>	1880	1.29	siehe (Frank,Barlow)
<b>Coflow</b>	291	0	100% Luft

### 6.2.2 Numerische Modellbildung

Um die Vorhersage der experimentellen Daten zu verbessern und etwaige Abweichungen besser erklären zu können, wurden verschiedene Chemie-, Mischungs- und Turbulenzmodelle untersucht.

**Tabelle 6.3:** Verwendete Teilmodelle

Modell	Varianten
<b>Chemie</b>	ILDm, 5-Schritt
<b>Mischung</b>	IEM, modifiziertes Curl-Modell, EMST
<b>Turb. Konvektion</b>	Gradienten-Diffusions-Modell (GD), Gradienten-Transport-Modell (GT)
<b>Turbulenz</b>	k- $\epsilon$ , RSM (Speziale, Sakar, Gatzki, 1991)

### Rand- und Anfangsbedingungen

Da für die Flamme C keine Geschwindigkeitsmessungen vorlagen, wurde am Brennstoffeintritt ein Blockprofil mit mittlerer Geschwindigkeit vorgegeben. Untersuchungen mit dem Profil einer ausgebildeten Rohrströmung ergaben keinen signifikanten Einfluss auf die Gesamtströmung. Die Turbulenzintensität wurde zu 5% angenommen.

Bei der Flamme F wurde zum einen mit Blockprofil, zum anderen mit den gemessenen Eintrittsprofilen der Geschwindigkeiten und der kinetischen Energie gerechnet. Bei Verwendung des Blockprofils wurden die Geschwindigkeiten im Düsenbereich unterschätzt, was aber auf die Verbrennungsrechnung kaum Einfluss hatte.

Die Dissipationsrate wird im Eintritt nach:

$$\varepsilon = c_{\mu}^{3/4} k^{3/2} / (0.25D) \quad , \quad c_{\mu} = 0.09 \quad (6.3)$$

bestimmt (Bender, 2003). Die Eigenschaften der Skalare sind entsprechend des Experiments für alle Partikel pro Zelle gleichverteilt im Einlass.

Am Ausströmrund werden gemäß der Neuman-Randbedingung für alle Größen die Gradienten zu null gesetzt und Umgebungsdruck angenommen. Die äußere Begrenzung der Luftströmung wurde einmal als offene Randbedingung, die das Einsaugen von Umgebungsluft gestattet, simuliert, zum anderen als Wand ohne Haftbedingungen. Unterschiede zwischen beiden Randbedingungen konnten im Ergebnis nicht festgestellt werden.

Da die Strömung rotationssymmetrisch ist, wurde das Rechengitter zweidimensional ausgeführt. Für die Achse und die Seitenflächen wurden Symmetrierandbedingungen (Neumann-Bedingung) gesetzt.

**Tabelle 6.4** Randbedingungen; Werte in (..) geben den Mischungsbruch auf Element C und H bezogen an, Wert in (\*) gilt für Flamme F

	Jet	Pilot	Coflow
<b>Temperatur T [K]</b>	294	1880	291
<b>Druck p [bar]</b>	1	1	1
<b>Strömungsgeschwindigkeit u [K]</b>	29,7 (99,2 *)	6,8 (22,8 *)	0,9
<b>Massenbruch <math>Y_{CH_4}</math> [-]</b>	0,156	0	0
<b>Massenbruch <math>Y_{O_2}</math> [-]</b>	0,1965	0,0540	0,233
<b>Massenbruch <math>Y_{CO_2}</math> [-]</b>	0	0,1098	0
<b>Massenbruch <math>Y_{H_2O}</math> [-]</b>	0	0.0942	0
<b>Mischungsbruch <math>\xi</math> [-]</b>	1 (0,156)	0,2746 (0,043)	0

Das Rechengitter besteht aus 1500 Zellen (Fünf-Schritt-Chemie) bzw. 3000 Zellen (ILDLM). Bei der Untersuchungen der Gitterunabhängigkeit mit 6000 Zellen wurden vernachlässigbare Abweichungen festgestellt.

Die turbulente Schmidt-Zahl  $Sc_T$  im Wirbelviskositätsansatz wurde zu 0.8 gesetzt, die Konstanten des Reynolds-Stressmodells sind Kap. 3.42 zu entnehmen. Für die Proportionalitätskonstante in den Mischungsmodellen wird  $c_\phi=2$  gesetzt.

Für alle Rechnungen wurden auskonvergierte EDM- bzw. Flamelet-Lösungen als Startwerte vorgegeben, um die Konvergenz zu beschleunigen. In der Regel reichten 1500 bis 2000 Iterationen im PDF Modul, um Residuen in der Größenordnung von  $O(10^{-3})$  zu erhalten (Flamme F bis 3000 Iterationen). Bei eingetretener Stationarität erfolgte eine zusätzliche Mittelung.

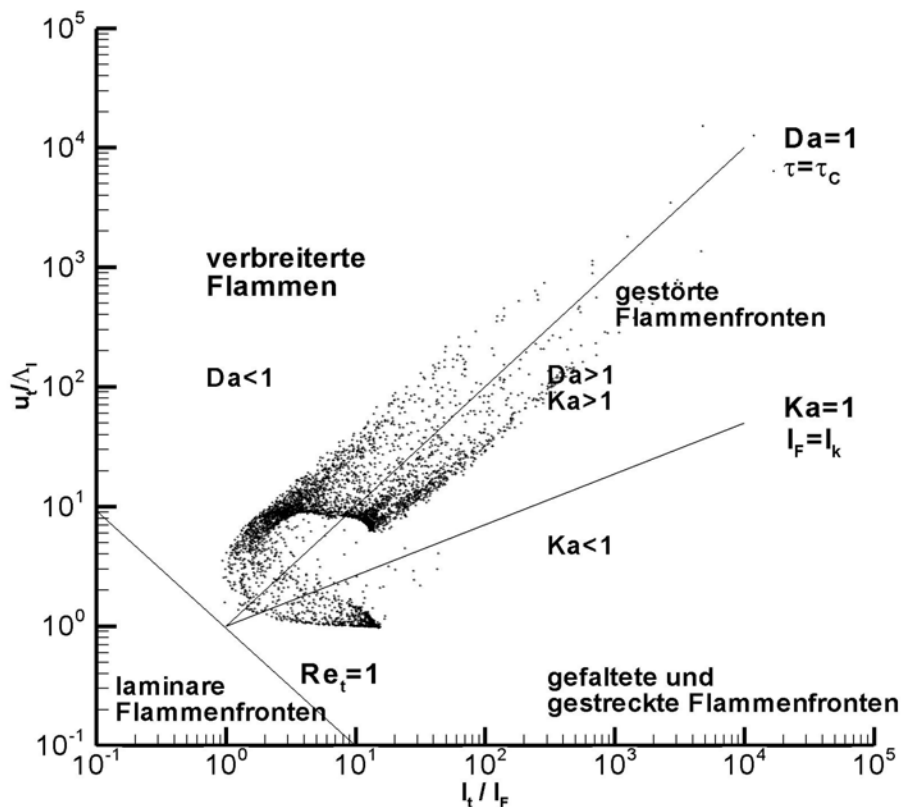
Alle Simulationen sind auf einem Pentium 4 mit 2.8GHz und 2GB RAM durchgeführt worden und benötigten jeweils ca. 36 CPU Stunden.

Die im Folgenden präsentierten Ergebnisse werden vergleichend noch einer EDM-2-Schritt- und einer Flamelet-Rechnung (FLL) gegenübergestellt. Beim Flamelet-Modell wird aufgrund der partiellen Vormischung noch eine Gleichung für den Reaktionsfortschritt gelöst. Problematisch ist dabei die Bestimmung der turbulenten Flammengeschwindigkeit. So konnte die Flamme F bei der Flamelet-Rechnung nur mit einer konstanten laminaren Flammengeschwindigkeit von  $\Lambda_l=0.42$  m/s stabilisiert werden. Das Flamelet-Modell errechnet die chemischen Umsatzraten durch Lösung einer Transportgleichung für den Mischungsbruch und seiner Varianz. Die einzelnen Spezies werden dann in Abhängigkeit zuvor genannter Größen und der skalaren Dissipationsrate durch Integration über eine angenommene  $\beta$ -PDF aus einer Tabelle ausgelesen.

### 6.2.3 Berechnung der Flamme C

Um einen allgemeinen Überblick über die Flamme zu erhalten, werden zunächst Rechnungen mit PDF- und IEM-Mischungsmodell präsentiert. Danach folgt ein Vergleich verschiedener Mischungsmodelle und ein Vergleich von Schließungsansätzen für den turbulenten Transport.

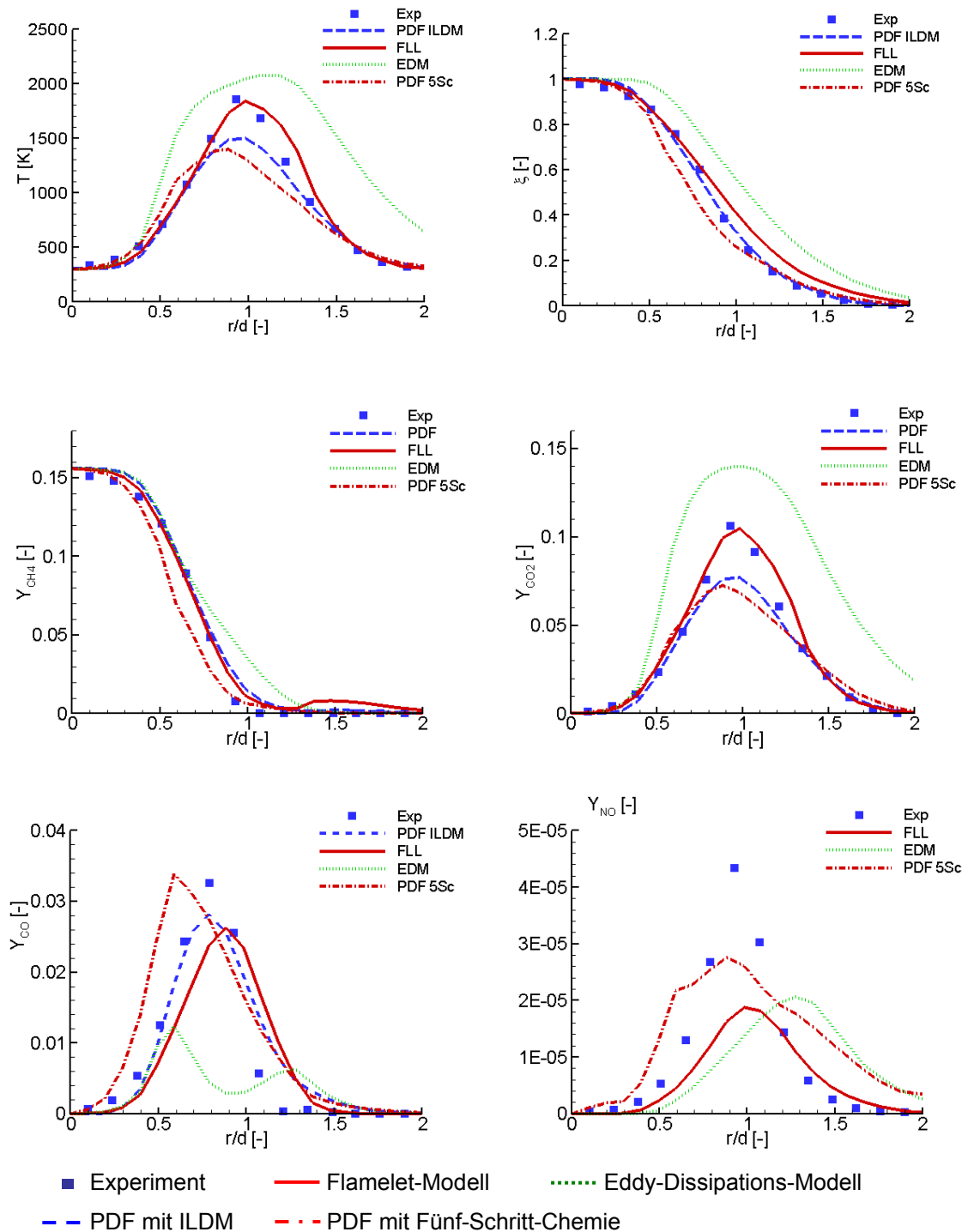
#### 6.2.3.1 Ergebnisse



**Bild 6.6:** Einordnung der Flamme C ins Borghi-Diagramm

Bild 6.6 zeigt, dass die Flamme C sich trotz der relativ geringen Anströmungsgeschwindigkeit nur zu einem kleinen Teil im Bereich der gefalteten und gestreckten Flamelets befindet und hauptsächlich den Bereich zwischen den gestörten und verbreiterten Flammen abdeckt. Für die Einordnung ins Borghi-Diagramm wurden die Geschwindigkeits- und Längenmaße stochastischer Partikel entlang der Gerade  $x=7\text{mm}$  im nahe stöchiometrischen Bereich entnommen. Darüber hinaus dient die Darstellung einer groben Klassifizierung der untersuchten Flamme in einzelne Verbrennungsbereiche (vgl. Kap. 2.3).

Da ein Vergleich zwischen Rechnung und Experiment mit allen Messebenen den Rahmen dieser Arbeit sprengen würde, werden nur die für die Diskussion markantesten Ebenen gezeigt. Die radiale Richtung wurde mit  $d_{\text{Düse}}=7.2\text{mm}$  normiert.



**Bild 6.7:** Flamme C: radiale Profile  $x/d=7.5$

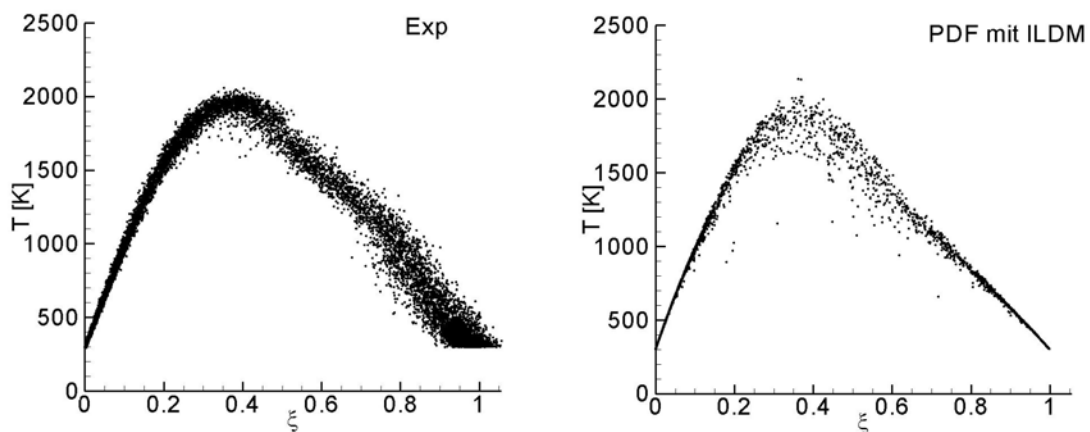
Bild 6.7 zeigt die radialen Profile der Flamme C in der Ebene  $x/d=7.5$ . Deutlich zu erkennen, ist die Unterschätzung des Temperaturmaximums um 350K von ILDM- und Fünf-Schritt-Mechanismus. Dies deutet zunächst darauf hin, dass mögliche Abweichungen nicht im Chemiemechanismus an sich, sondern eher in der Mischungsbeschreibung zu suchen sind. Zumal das Flamelet-Modell, bei dem das Gleichgewicht zwischen Mischung und Chemie auf den laminaren Skalen exakt abgebildet wird, hier eine hervorragende Übereinstimmung mit der Messung zeigt.

Trotz hoher Abweichung bei den Temperaturen und den Spezies stimmt der Mischungsbruch nahezu exakt mit dem Experiment überein. Dieser scheinbare Widerspruch zeigt die unterschiedlichen Anforderungen eines Mischungsmodells für inerte bzw. reagierende Skalare. So werden aufgrund der Reaktion die Skalargradienten erhöht, was die Mischung intensiviert. Diesen Prozess können Mischungsmodelle die lokal im Zustandsraum sind (EMST) besser wiedergeben. Eine ausführliche Modelluntersuchung erfolgt in Kap. 6.2.3.2.

Da die Temperatur mit dem Mischungsbruch korreliert, weist dies auf eine Verbrennung nahe dem Gleichgewicht hin (vgl. Bild 6.8). Scheinbar produziert die PDF Lösungen die deutlich vom Gleichgewicht entfernt sind, unabhängig vom verwendeten Chemie-Mechanismus. Aus der zu niedrig berechneten Temperatur folgen entsprechend auch zu geringe Konzentrationen an  $\text{CO}_2$ . Die CO Konzentration zeigt bei der Flamelet- und ILDM Lösung gute Übereinstimmungen. Der Fünf-Schritt-Mechanismus, hergeleitet für magere Bedingungen, weist in den eher fetten Gemischbereichen zu erwartende Schwächen auf. Allerdings zeigen sich deutliche Vorteile bei der NO Beschreibung. Das Flamelet-Modell verwendet zur Beschreibung von NO zwei zusätzliche Transportgleichungen für den NO Massenbruch und die Temperaturfluktuationen (ANSYS CFX 10.0, 2005). Die Koppelung mit dem turbulenten Strömungsfeld erfolgt über eine  $\beta$ -PDF. Im Gegensatz zum Fünf-Schritt-Mechanismus werden hierbei nur das prompte und das thermische NO berücksichtigt. Die experimentelle Messung wird über 50% unterschätzt.

Das EDM-Modell mit der Annahme unendlich schneller Chemie („gemischt ist gleich verbrannt“) kann trotz des verwendeten 2-Schritt-Mechanismusses (Berücksichtigung der CO-Bildung) die Temperatur und auch die Spezieskonzentrationen nur unzureichend wiedergeben. Das thermische NO wird indirekt über ein partielles Gleichgewicht zwischen  $O_2$  und O berechnet (ANSYS CFX 10.0, 2005).

Ein Vorteil von PDF Berechnungen ist die detaillierte Auswertung des Reaktionsvorgangs anhand von diskreten Partikelrepräsentationen der PDF. Bild 6.8 zeigt vergleichend mit dem Experiment einen Scatterplot der Temperatur in Abhängigkeit vom Mischungsbruch in der Ebene  $x/d=7.5$ .

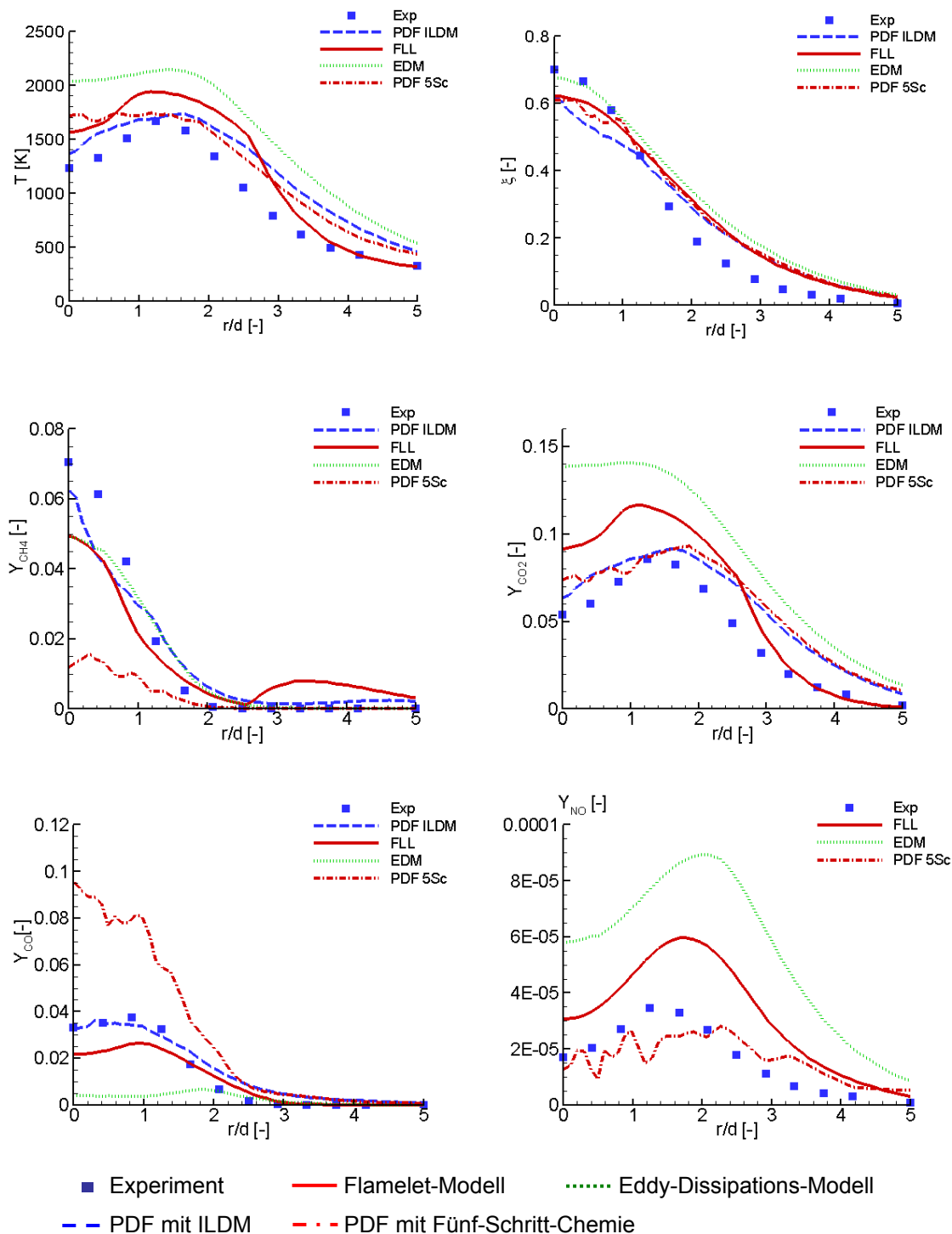


**Bild 6.8:** Scatterplot der Temperatur bei  $x/d=7.5$ ; Proben: Experiment ca. 11000, PDF ca. 7000

Deutlich erkennbar im Experiment ist die Reaktion entlang der Gleichgewichtslinie. Wie schon angesprochen korreliert in dieser Ebene der Mischungsbruch sehr gut mit der Temperatur, was auch die sehr guten Ergebnisse der Flameletlösung unterstreichen. Ein deutlich anderes Verhalten hingegen zeigt sich in der PDF-Simulation. Hier sind viele Partikel nahe dem stöchiometrischen Mischungsbruch deutlich vom Gleichgewichtszustand entfernt.

Im Flamelet-Modell wird die molekulare Mischung exakt abgebildet, wo hingegen in PDF-Methoden die Mischung den größten Schwachpunkt darstellt. Im Kapitel 6.2.3.2 und 6.2.3.3 soll untersucht werden, inwieweit die Temperaturdiscrepanzen durch die ungeschlossene turbulente Konvektion bzw. durch das turbulente Mischungsmodell entstehen. Es sei angemerkt, dass die Turbulenz-

modellierung und die Mischungsmodellierung sich natürlich stark beeinflussen, wie am turbulenten Zeitmaß einfach ersichtlich ist.



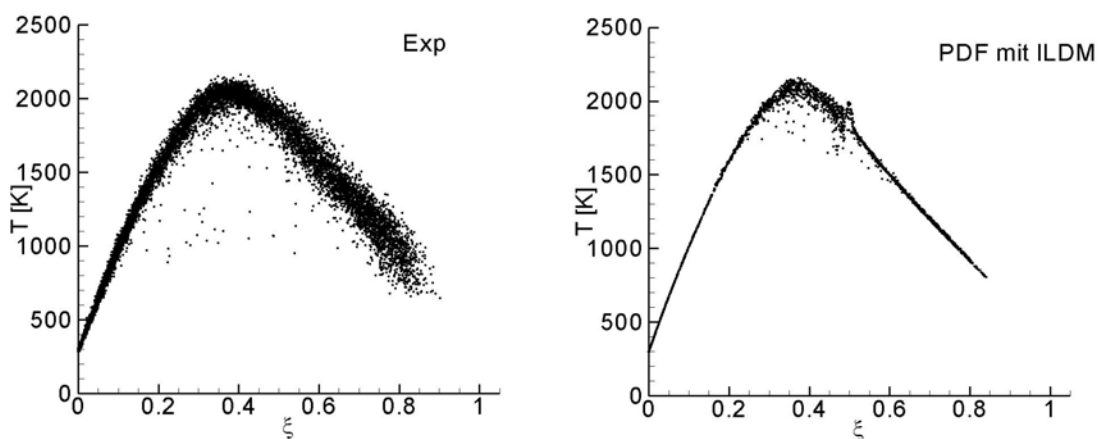
**Bild 6.9:** Flamme C: radiale Profile  $x/d=30$

Bild 6.9 zeigt die radialen Profile der Ebene  $x/d=30$ . Hier zeigt sich eine hohe Übereinstimmung zwischen PDF mit ILDM-Chemie und dem Experiment. Der

Mischungsbruch wird von allen Modellen auf der Achse unter- und am Außenrand überschätzt. Dies deutet auf zu niedrige axiale bzw. zu hohe radiale Geschwindigkeiten hin, kann aber aus Mangel an experimentellen Daten hier nicht näher quantifiziert werden. Abweichungen aufgrund unterschiedlicher Turbulenzmodellierung und ihre Auswirkungen beispielsweise auf den Mischungsbruch werden in Kap. 6.2.3.2 diskutiert.

Die Flamelet- und EDM-Lösungen für Temperatur und Spezies weichen zum Teil deutlich ab. Der Fünf-Schritt-Mechanismus verbraucht im Bereich der Achse zuviel Methan, was an den erhöhten Temperaturen deutlich wird. Hieraus resultiert auch die Überschätzung des Massenbruchs CO durch Dissoziationsprozesse. In fetten Gemischen läuft die Methanoxidation über den Reaktionspfad des Ethans unter geringer CO Produktion, wohingegen unter stöchiometrischen und mageren Bedingungen das Methan eher direkt über das Radikal  $\text{CH}_3$  oxidiert wird. Somit wirkt sich das Fehlen des fetten Reaktionspfades negativ im Fünf-Schritt-Mechanismus aus. Die NO Vorhersage ist wiederum sehr gut und damit dem Flamelet- und EDM-Modell deutlich überlegen.

Um das Überschätzen der Temperatur vom EDM- bzw. Flamelet-Modell besser erklären zu können, zeigt Bild 6.10 einen Scatterplot bei  $x/d=30$ .



**Bild 6.10:** Scatterplot der Temperatur bei  $x/d=30$ ; Proben: Experiment ca. 10000, PDF ca. 3600

Im Vergleich zur Ebene  $x/d=7.5$  zeigen sich bei  $x/d=30$  im Experiment vereinzelte Zustände lokalen Flammenlöschens. In der PDF- Simulation wird dieser

Zustand im Bereich des stöchiometrischen Mischungsbruchs gut wiedergegeben.

Als eine erste Schlussfolgerung ergibt sich, dass das Flamelet-Modell im Brennnahbereich sehr gute Ergebnisse bei der Temperatur und den Spezies erreicht. Mit zunehmendem Abstand vom Brenner verschlechtert sich allerdings die Vorhersage. Über die gesamte Flammenlänge liefert das PDF-Modell mit ILDM-Chemie die besten Ergebnisse. Der Fünf-Schritt-Mechanismus ist für magerere vorgemischte Flammen bis zu einem Druck von 30bar optimiert. Unter diesem Hintergrund gesehen, sind die erzielten Ergebnisse durchaus akzeptabel, zumal die NO Vorhersage eine sehr hohe Übereinstimmung mit dem Experiment zeigt. Ist man nur an qualitativen Verläufen interessiert, so ist der Einsatz des EDM-Modells durchaus gerechtfertigt.

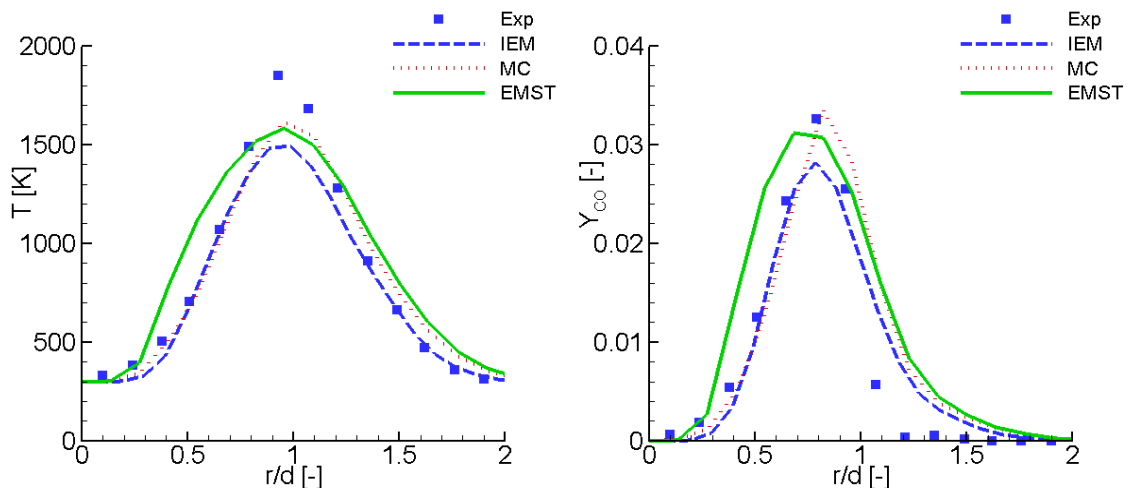
Da die Abweichungen im Brennnahbereich unabhängig vom gewählten Chemiemechanismus bei den PDF-Rechnungen auftritt, das Flamelet Modell hier aber die besten Ergebnisse liefert, liegt der Schluss nahe, dass Fehler in der Mischungsmodellierung in diesem Bereich dominierend sind.

### 6.2.3.2 Vergleich der Mischungsmodelle

In der Ebene  $x/d=7.5$  treten sowohl bei der ILDM- als auch beim Fünf-Schritt-Mechanismus Abweichungen, insbesondere bei der Temperatur von bis zu 350K auf. Die Ursachen hierfür sollen im Folgenden näher untersucht werden. Da das Flamelet-Modell, in dem die molekulare Mischung exakt beschrieben wird, in dieser Ebene kaum Abweichungen zum Experiment erkennen lässt, liegt die Vermutung nahe, dass die modellierte Mischung die physikalischen Wirklichkeit nur unzureichend wieder gibt. Die gemessenen Temperaturen korrelieren in diesem Bereich sehr gut mit dem Mischungsbruch, was auf eine vollständige Verbrennung nahe dem Gleichgewicht schließen lässt. In diesem sogenannten Flamelet-Bereich spielt sich die Mischung lokal im Bereich der Kolmogorov-Länge ab. Daher ist die Flamme C und speziell die Ebene  $x/d=7.5$  geeignet, um Mischungsmodelle auf ihre Tauglichkeit im Flamelet-Bereich (kleine Skalen) zu testen. Zunächst sollen die Mischungsmodelle bei konstantem Proportionalitätsfaktor  $c_\varphi = t_i/t_\varphi$ , wie in Kap. 4.5 Gleichung (4.29) vorgestellt, mitein-

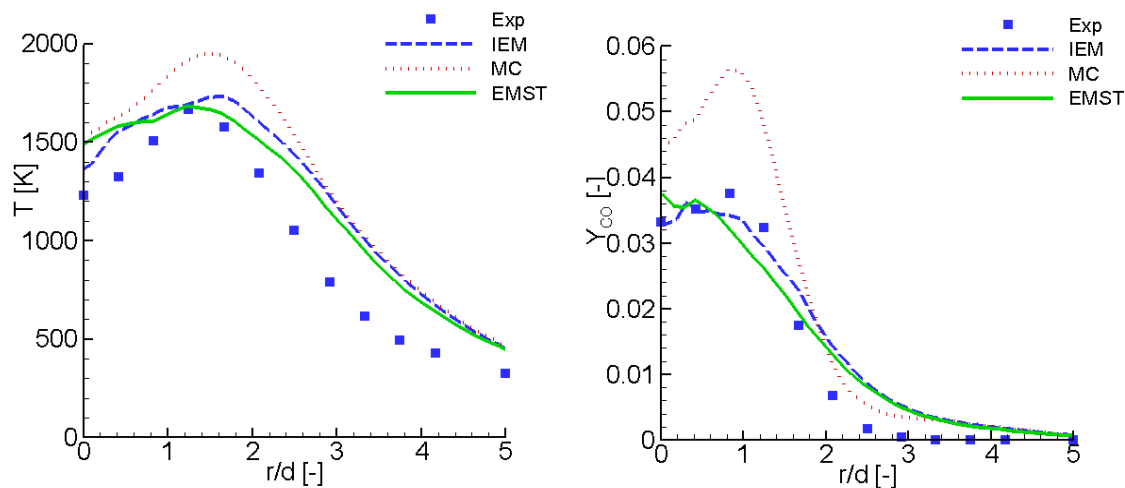
ander verglichen werden. Häufig wird in PDF-Simulationen  $c_\phi=2$  verwendet, obwohl in experimentellen Untersuchungen  $c_\phi$  zwischen 0.6 und 3.1 variiert (Warhaft, 1984).

Bild 6.11 zeigt den Vergleich von IEM-, MC- und EMST-Mischungsmodell mit  $c_\phi=2.0$  exemplarisch für die Temperatur und für die Nebenspezies  $Y_{CO}$ .



**Bild 6.11:** Vergleich von IEM-, MC- und EMST-Mischungsmodell bei  $x/d=7.5$

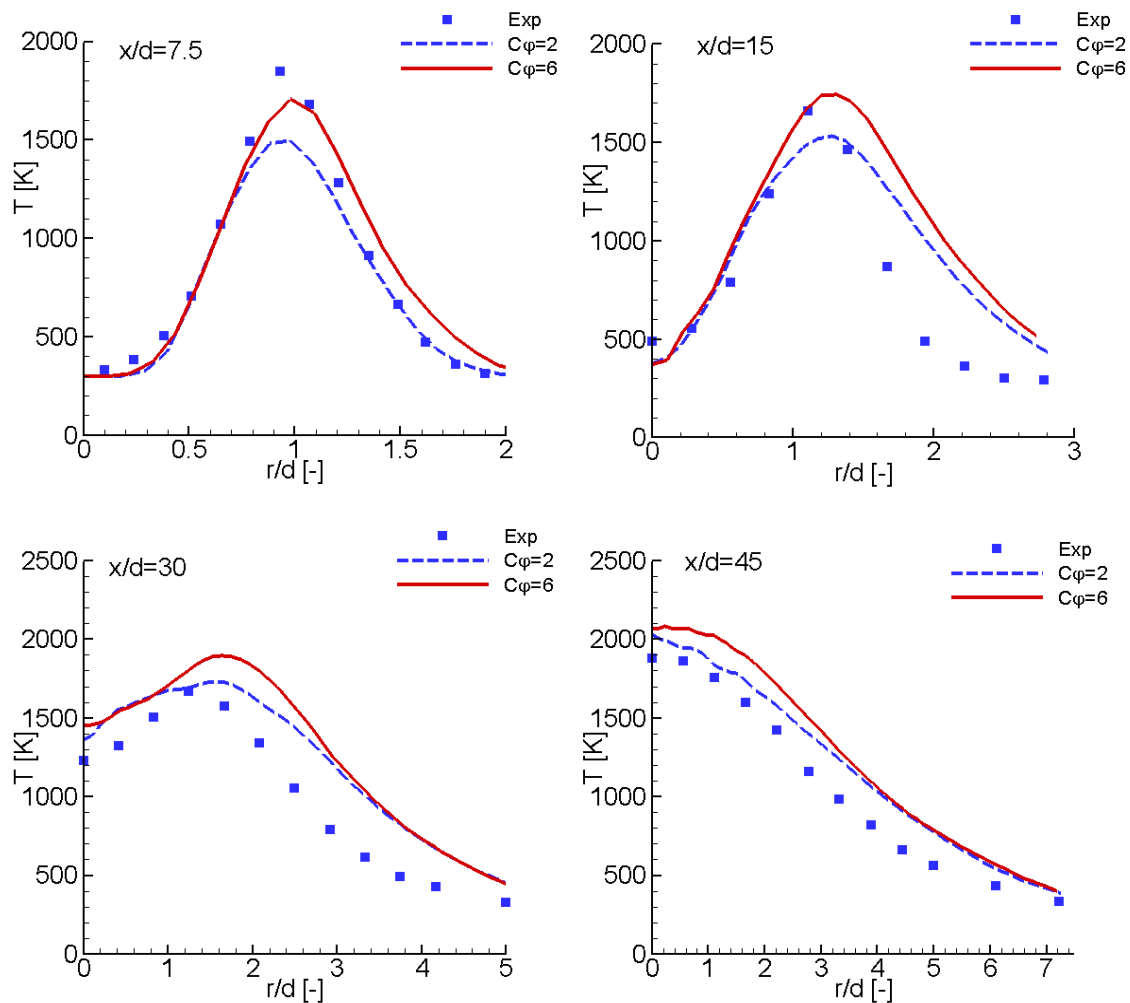
Das MC- und das EMST- Modell bewirken im Vergleich zum IEM-Mischungsmodell eine Temperaturerhöhung im Maximum um ca. 120K. Auffällig am EMST-Modell ist, dass zu den Messwerten ein deutlich verbreitertes Profil bei der Temperatur und  $Y_{CO}$  vorliegt. Vor allem das MC-Modell kommt den Spezies (hier exemplarisch  $Y_{CO}$ ) am nächsten. Im Gegensatz zum IEM unterliegen die Partikel beim EMST- und MC-Modell einem stochastischen Mischungsprozess. Der Hauptunterschied zwischen MC- und EMST-Modell liegt in der im Kapitel 4.5 beschriebenen Beachtung der Lokalitätsbedingung. Man erkennt allerdings keine Vorteile zugunsten des EMST-Modells in dieser Ebene. Zur besseren Bewertung der Mischung soll nun noch einmal die Ebene  $x/d=30$ , die leichte Verlöschungsanzeichen wiedergibt, verglichen werden.



**Bild 6.12:** Vergleich von IEM-, MC- und EMST- Mischungsmodell bei  $x/d=30$

Das MC-Modell, das in der vorherigen Ebene noch die besten Ergebnisse zeigte, weicht bei  $x/d=30$  am stärksten ab. Gute Übereinstimmungen mit dem Experiment zeigt das IEM- und das EMST-Modell. Zusammenfassend lässt sich sagen, dass das EMST-Modell über den gesamten Flammenlängenbereich die besten Ergebnisse liefert. Allerdings werden die Profile meist zu breit vorhergesagt. Nachteilig ist der hohe numerische Aufwand. Einen sehr guten Kompromiss stellt das IEM-Modell dar.

In einer zweiten Rechnung wird der Einfluss auf das Ergebnis durch Variation der Proportionalitätskonstanten  $c_\varphi$  (vgl. Kapitell 4.5) untersucht. Die Resultate werden exemplarisch für die Temperatur vorgestellt. Bild 6.13 zeigt einen Temperaturvergleich in vier axialen Ebenen für das IEM-Mischungsmodell mit  $c_\varphi=2$  bzw.  $c_\varphi=6$ .



**Bild 6.13:** Vergleich von  $T$  für  $c_\phi=2$  bzw.  $c_\phi=6$  in verschiedenen Ebenen

Eine Erhöhung von  $c_\phi$  führt ganz allgemein zu einer schnelleren Relaxation der Partikel auf ihren Mittelwert, wodurch die Mischungsrate erhöht wird. Diese erhöhte turbulente Mischung führt zwar in der Ebene  $x/d=7.5$  zu einer deutlich verbesserten Übereinstimmung mit den experimentellen Werten, allerdings geschieht dies auf Kosten der hinteren Ebenen. Dabei werden die Temperaturmaxima im Durchschnitt um ca. 200K angehoben. Dieses Ergebnis unterstreicht den hohen Einfluss der Mischungsfrequenz auf die Temperatur- und Speziesberechnung. Wahrhaft zeigte an umfangreichen Mischungsexperimenten in innerer Strömung, dass  $c_\phi$  keine Konstante darstellt (Wahrhaft, 1984), während Kraft bei PDF-Berechnungen von chemischen Reaktoren  $c_\phi$  von 1-12 variierte und das Ergebnis mit experimentellen Messwerten verglich (Kraft, 1998). Auch Nooren erhöht  $c_\phi$  bei der Berechnung von pilotierten Freistrahlfammen im

Brenner nahen Bereich und erniedrigte  $c_\varphi$  stromab (Nooren, 1997). Bei der Berechnung staukörperstabilisierter Flammen veränderte Liu  $c_\varphi$  zwischen 2 und 4 (Liu, 2004).

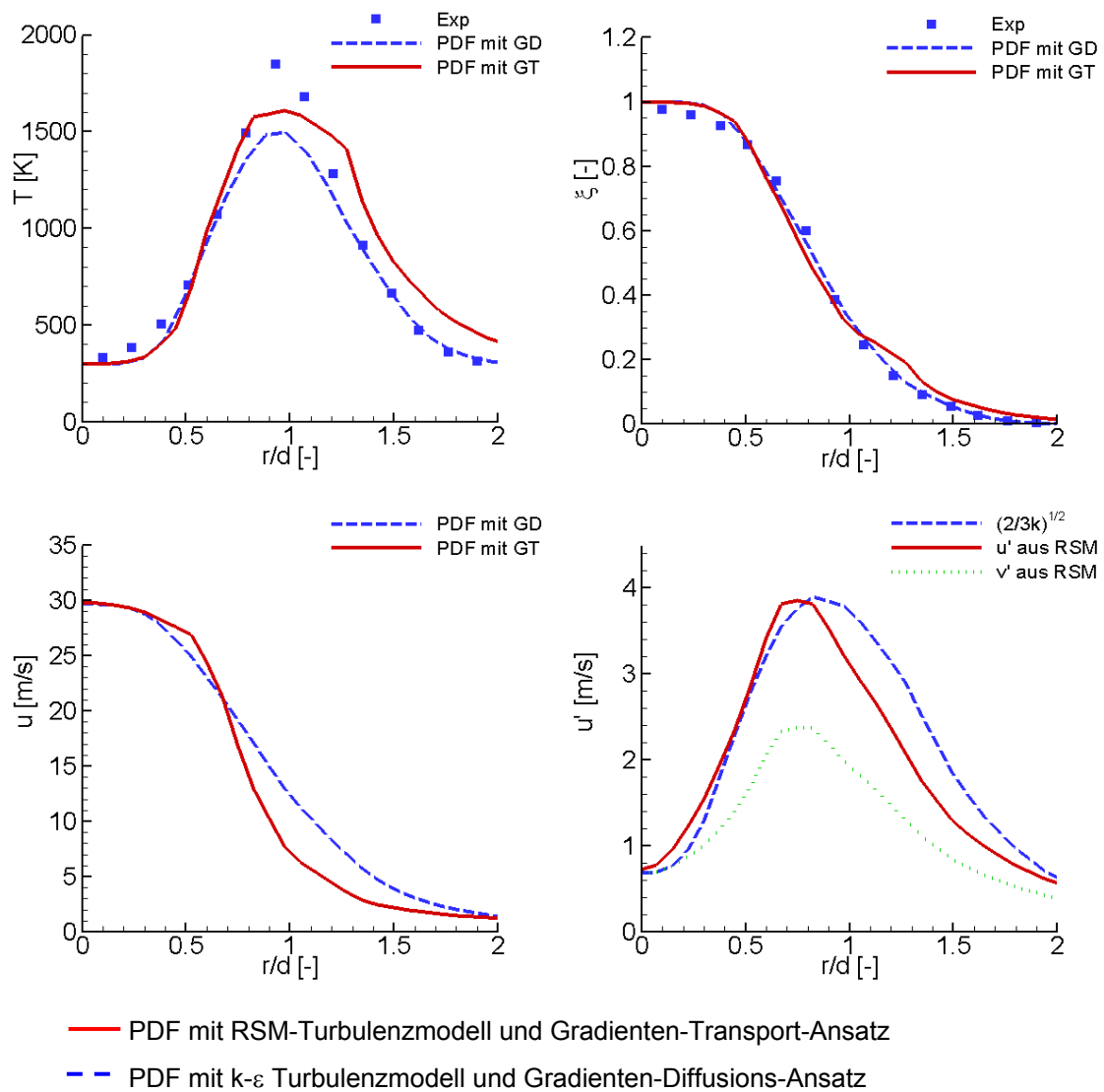
Nach (Fox, 1995) sind drei Voraussetzungen notwendig, damit die Proportionalität zwischen den Zeitskalen erfüllt ist: Die Geschwindigkeits- und Skalarfluktuationen müssen durch das gleiche integrale Spektrum erzeugt werden. Das Spektrum muss voll ausgebildet sein und die Mischungsrate wird von der Rate der Skalarvarianzerzeugung in den großen Skalen bestimmt. Da diese Voraussetzungen nur z.T. bzw. lokal im Strömungsfeld vorliegen, ist die Konstanz von  $c_\varphi$  fraglich, zumal in reagierenden Strömungen das Skalarfeld maßgeblich durch den chemischen Umsatz auf Zeitskalen entsprechend den Elementarreaktionen beeinflusst wird. Somit können die turbulente Zeit- und die skalare Zeitskala nicht eindeutig durch eine universelle Konstante in Beziehung stehen. Alternativ zu einer zeitlich konstanten Mischungsfrequenz wäre ein von (Gonzalez und Borghi, 1991) vorgeschlagenes turbulentes Zeitskalenspektrum oder die Ableitung einer Transportgleichung für  $\varepsilon_\varphi$  (Borghi, 1988) denkbar. Allerdings ist die Bestimmung einer geeigneten turbulenten Zeitskala  $t_\varphi$  kein alleiniges Problem der Mischungsmodellierung, sondern auch der Turbulenzmodellierung.

### 6.2.3.3 Vergleich von turbulenten Transport-Modellen

Neben dem Mischungsmodell tritt in skalaren PDF-Methoden noch der turbulente Transport (vgl. Kap. 4.4) als ungeschlossener Term auf. Dieser Ausdruck bestimmt maßgeblich die Geschwindigkeit, mit der Brennstoff und Oxidator zusammentreffen. Fast ausschließlich wird in Verbindung mit einem  $k$ - $\varepsilon$  Turbulenzmodell zur Schließung des turbulenten Transports ein Gradienten-Diffusions-Ansatz (GD) gewählt. Dieser Ansatz vermag allerdings nur den Transport in Richtung des Gradienten zu beschreiben. Sind hingegen bei Verwendung eines RSM-Turbulenzmodells die einzelnen Reynolds-Spannungen bekannt, so kann man mit einem Gradienten-Transport-Ansatz (GT) auch Phänomene wie den turbulenten Transport entgegen den Mittelwertgradienten (*counter gradient diffusion*) berücksichtigen. Experimentell (Frank, 1999) und auch numerisch (Veynante, 1997) wurde in Vormischflammen in Abhängigkeit

der Turbulenzfluktuationen ein Transportprozess entgegen dem Gradienten festgestellt. Dieser ist umso stärker, je niedriger die Fluktuationen sind. Bei steigender Turbulenz treten die Erscheinungen in den Hintergrund und der Transport verläuft in Richtung des Gradienten. Ursache hierfür ist die unterschiedliche Beschleunigung von kalten (hohe Dichte) und warmen Fluidteilchen (Veynante, 1997).

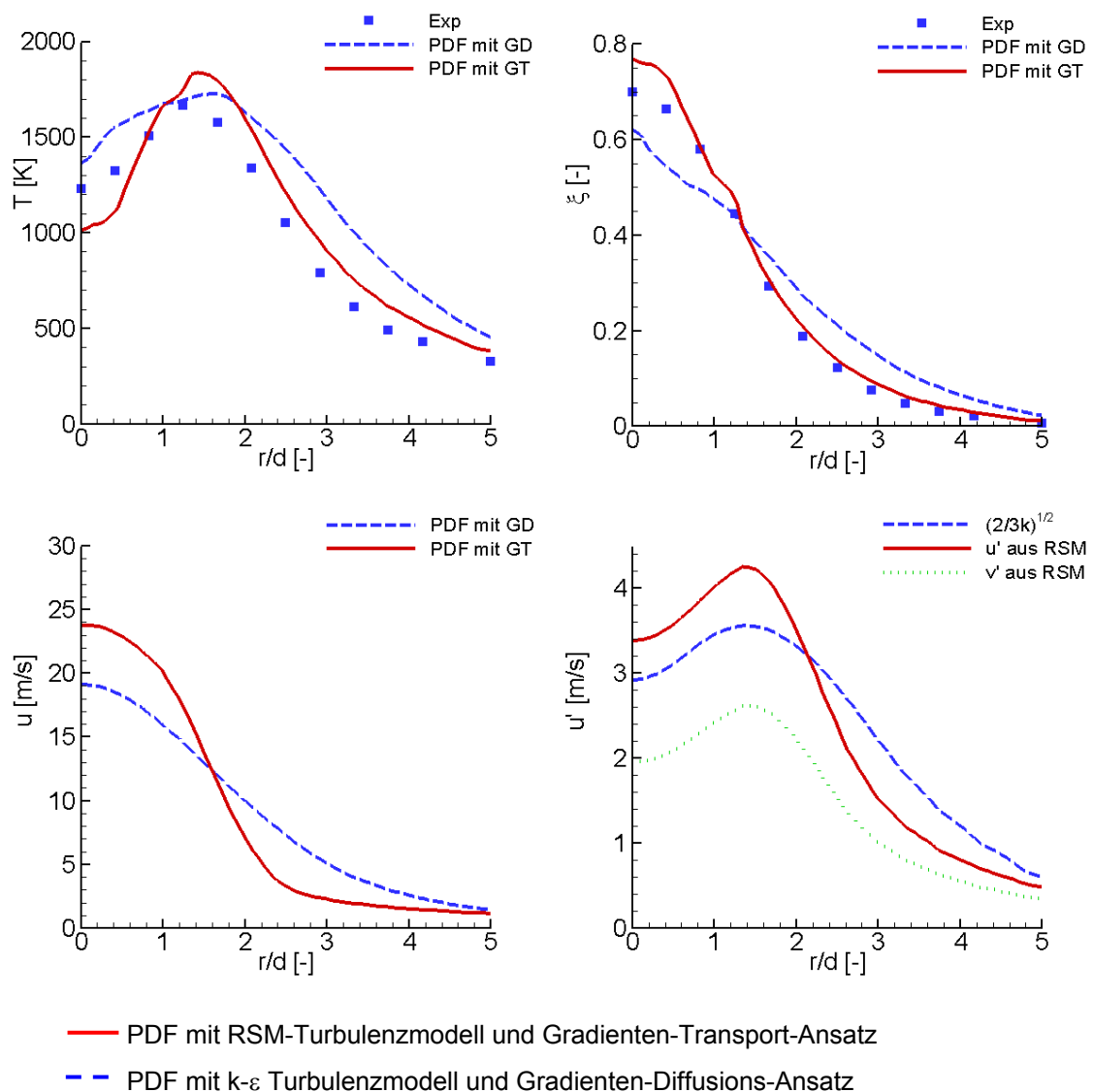
Im Folgenden werden Rechnungen mit  $k-\varepsilon$  Turbulenzmodell und GD-Ansatz, Rechnungen mit RSM-Turbulenzmodell und GT-Ansatz gegenübergestellt. Dabei wurde das IEM-Mischungsmodell mit ILDM-Chemie verwendet.



**Bild 6.14:** oben: Temperaturprofil und Mischungsbruch im Vergleich; unten: Axial- und Schwankungsgeschwindigkeiten im Vergleich bei  $x/d=7.5$

Bild 6.14 (oben) zeigt die Temperaturen und den Mischungsbruch in der Ebene  $x/d=7.5$ . Da die Spezies im Vergleich zur Temperatur konsistente Verläufe ergeben, sollen sie an dieser Stelle nicht weiter betrachtet werden.

Zunächst erkennt man eine Temperaturerhöhung um 100K bei Benutzung des GT-Ansatzes. Dabei wird der Mischungsbruch in Achsnähe überschätzt. Die Ursache hierfür liegt in einer zu hohen Axialgeschwindigkeit in Achsnähe. Allerdings wirkt das Profil bei Verwendung eines RSM-Modells deutlich ausgeprägter und weniger ‚verschmiert‘ als das vom  $k-\varepsilon$ -Modell (Bild 6.14 unten links). Die Schwankungsgeschwindigkeiten werden beim  $k-\varepsilon$ -Modell in radialer und axialer Richtung gleich angenommen, das RSM-Modell zeigt hier eine deutliche Differenzierung (Bild 6.14 unten rechts), was auch das ausgeprägte Geschwindigkeitsprofil erklärt. Die Ursache für die Temperaturerhöhung liegt in der geringeren turbulenten Querdiffusion beim RSM-Modell. Dieses führt zu einer reaktiveren Zusammensetzung in der Flammenfront.



**Bild 6.15:** oben: Temperaturprofil und Mischungsbruch im Vergleich; unten: Axial- und Schwankungsgeschwindigkeiten im Vergleich bei  $x/d=30$

Bild 6.15 zeigt die Messebene  $x/d=30$ . Der Temperaturverlauf liegt beim GT-Modell deutlich näher an den experimentellen Messwerten. Lediglich auf der Achse sind die Temperaturen zu niedrig. Ein ähnliches Verhalten zeigt der Mischungsbruch. Der Grund für das Überschätzen des Mischungsbruchs bzw. der zu niedrig berechneten Temperatur im Bereich der Achse liegt in einer zu hohen Axialgeschwindigkeit. Die Fluktuations- und Geschwindigkeitsprofile sind mit RSM-Turbulenzmodell deutlich ausgeprägter.

Auch ohne quantitativen Vergleich mit experimentellen Geschwindigkeitsmesswerten zeigen sich vor allem stromab deutlich ‚klarere‘ Profile bei den Tempera-

turen und den Spezien. Der Grund liegt in der Berechnung einzelner Reynolds-Spannungen, wodurch in Kombination mit dem GT-Modell die Turbulenzauflösung deutlich verbessert wird.

Abschließend unterstreicht dieses Ergebnis den großen Einfluss der Turbulenzmodellierung auf die Verbrennungsrechnung. In Strömungen mit starker Stromlinienkrümmung (z.B. Staukörperflammen) lässt die Verwendung von PDF mit RSM-Turbulenzmodell und GT-Ansatz eine deutlich verbesserte Flammenbeschreibung erwarten.

#### 6.2.3.4 Fazit

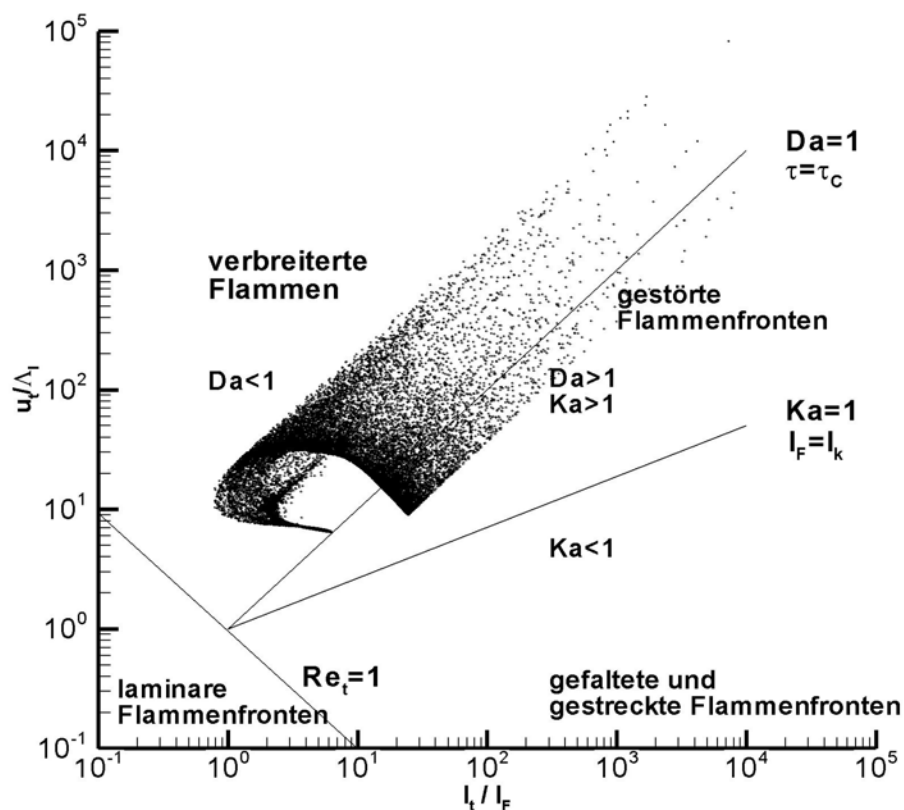
Für die Berechnung der pilotierten Freistrahlf Flamme C wurde ein hybrides FV-PDF-Verfahren mit unterschiedlichen Mischungs- und Turbulenzmodellen eingesetzt. Dabei zeigten sich:

- Eine hohe Übereinstimmung mit dem Experiment für die PDF-Rechnung mit ILDM- und 5-Schritt-Chemie-Mechanismus in allen Ebenen – mit Ausnahme des Bereiches  $x/d=7.5$ .
- Eine bessere Vorhersage des Flamelet-Modells in der brennernen Ebene bei  $x/d=7.5$ , welche sich stromab zugunsten des PDF-Modells verschlechterte.
- Verbesserte Übereinstimmung durch Verwendung von EMST- und MC-Mischungsmodell in der brennernen Ebene gegenüber dem IEM-Modell, wobei über den gesamten Flammenbereich EMST- und IEM-Modell zu bevorzugen sind.
- Die Erhöhung der turbulenten Mischung durch Anhebung von  $c_\phi$  (hier: von 2 auf 6) führt zu einer globalen Temperaturerhöhung, wodurch sich die Ergebnisse im brennernen Bereichen zugunsten der Ebenen stromab verbessern.
- Bei Benutzung des RSM Turbulenzmodells mit GT-Ansatz ergibt sich eine verbesserte Übereinstimmung zum Experiment mit deutlich differenzierteren Skalarprofilen im Vergleich zum GD-Ansatz.

### 6.2.4 Berechnung der Flamme F

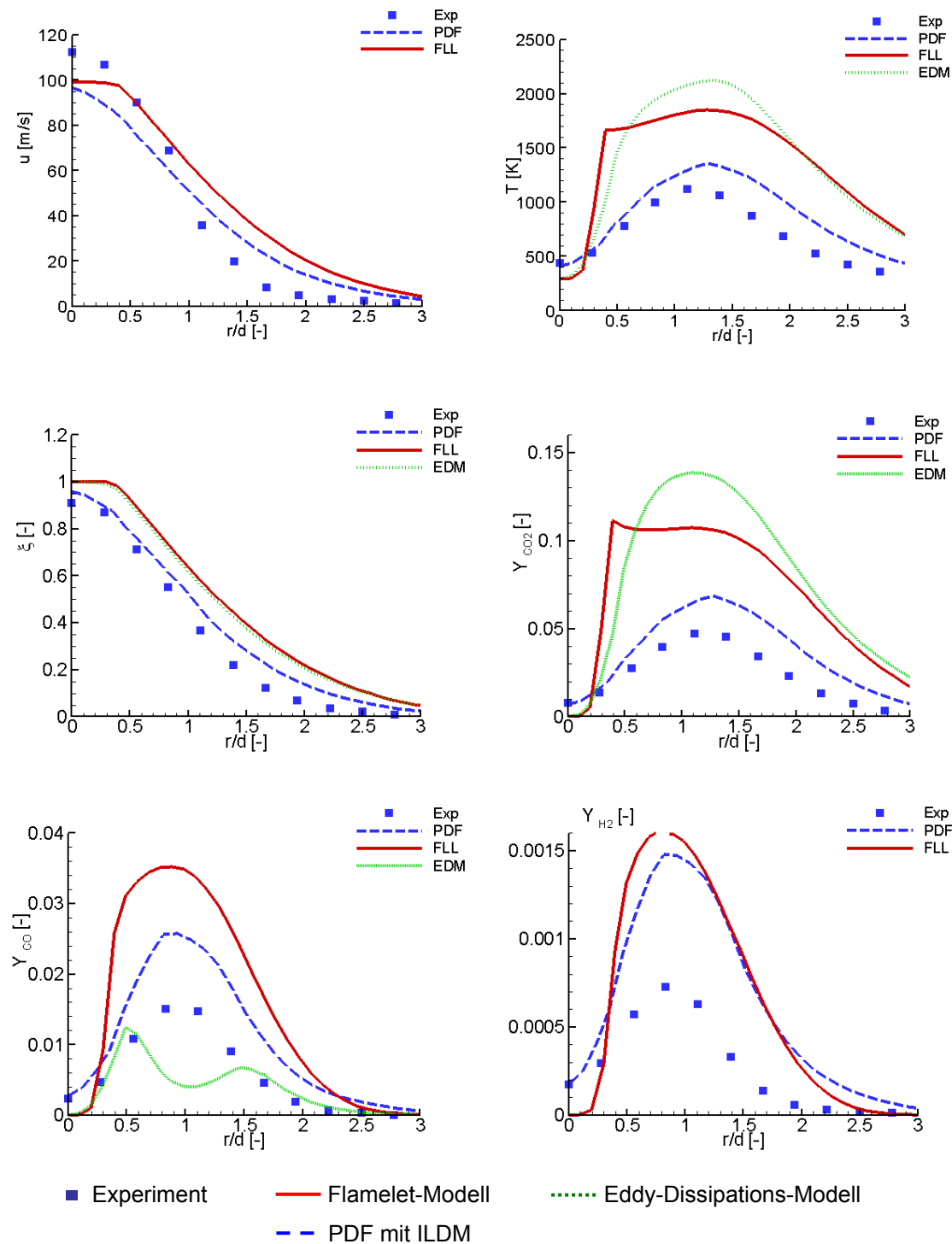
Die Erhöhung der Brennstoffeintrittsgeschwindigkeit von 29.7m/s (Flamme C) auf 99.2m/s (Flamme F) führt zu einer Flammenkonfiguration, die im brenner-nahen Bereich an der Verlöschgrenze brennt und stromab wiederzündet. Um die Flamme zu stabilisieren, wird die Geschwindigkeit des Pilotstroms auf  $u_{\text{Pilot}}=22.8\text{m/s}$  erhöht. Verlösch- und Wiederzündvorgänge sind gekennzeichnet durch eine hohe Turbulenz-Chemie-Interaktion. Somit stellt die Flamme F einen idealen Testfall für das PDF-Verfahren dar.

#### 6.2.4.1 Ergebnisse



**Bild 6.16:** Einordnung der Flamme F ins Borghi-Diagramm

Bild 6.16 zeigt die Einordnung der Flamme F in das Borghi-Diagramm. Deutlich zu erkennen ist, dass die Flamme F einen Streifen im Bereich der verbreiterten Flammen einnimmt. Dabei erstreckt sich die höchste Punktdichte in der Zone der „gestörten Flammenfronten“ und dem Bereich der „verbreiterten Flammen“.



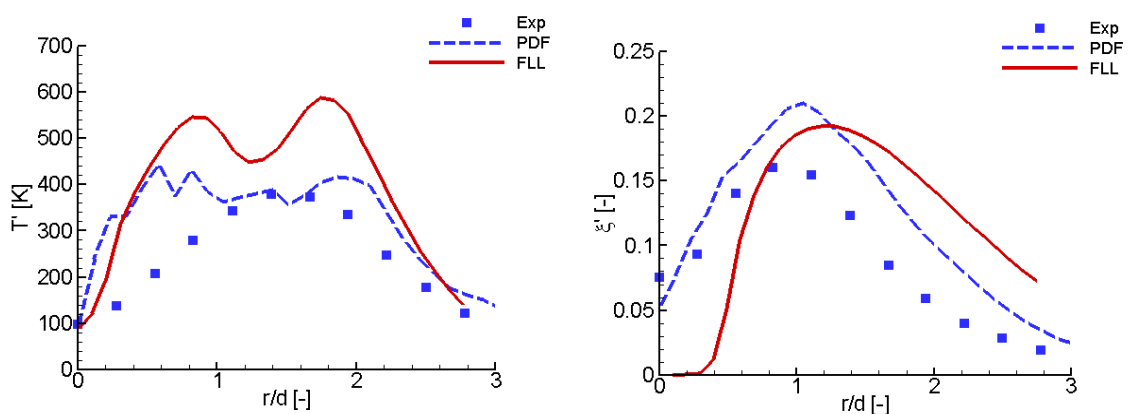
**Bild 6.17:** Flamme F: radiale Profile bei  $x/d=15$

Da die Ebenen  $x/d=7.5$  und  $x/d=15$  prinzipiell eine ähnliche Charakteristik aufweisen, soll hier nur die Ebene  $x/d=15$  diskutiert werden. Der Fünf-Schritt-Mechanismus konnte für die Flamme F nicht verwendet werden, weil dieser nur mit  $c_\varphi > 12$  eine stabile, brennende Flamme zeigte. Dies deckt sich mit den Er-

gebnissen von (Hinz, 2000), der zur Flammenstabilisierung in der Ebene  $x/d=7.5$  ILDM-Chemie und stromab einen Vier-Schritt-Mechanismus verwendete. In der Ebene  $x/d=15$  treten deutliche Abweichungen bei den Maximalgeschwindigkeiten im Bereich der Symmetrieachse auf. Diese Abweichungen sollten allerdings nicht überbewertet werden, denn wichtiger als die Geschwindigkeiten sind deren Gradienten als charakteristischer Streckungsfaktor. Zumal die Abweichungen im Bereich der Flammfront bei  $x/d=1$  gering sind. Die Temperaturen sind aufgrund der hohen Streckungsraten und turbulenten Fluktuationen im Experiment nahe der Verlöschgrenze bei  $T=1120\text{K}$ . Das bedeutet die chemische Reaktion läuft zu langsam im Vergleich zur turbulenten Strömung ab - die Flamme erlischt partiell.

Diese physikalischen Vorgänge werden zufriedenstellend vom PDF-Modell wiedergegeben, allerdings ist die Maximaltemperatur mit  $T=1360\text{K}$  um  $240\text{K}$  zu hoch. Sowohl das Flamelet- als auch das EDM-Modell können diesen Trend nicht wiedergeben und überschätzen die Temperatur deutlich. Alle übrigen relevanten Größen wie beispielsweise der Mischungsbruch und der Massenbruch  $\text{CO}_2$  werden vom PDF-Modell gut wiedergegeben. Größere Diskrepanzen sind hingegen beim  $\text{CO}$  und  $\text{H}_2$  festzustellen.

Bild 6.18 zeigt die Standardabweichung des Mischungsbruchs und der Temperatur.

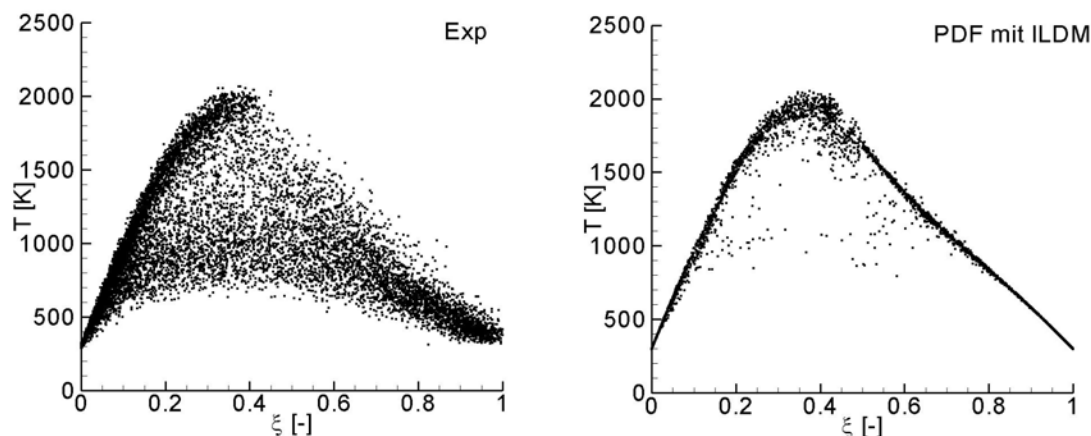


**Bild 6.18:** links: Standardabweichung der Temperatur; rechts: Standardabweichung des Mischungsbruchs

Das PDF Modell gibt den quantitativen Verlauf der Mischungsbruchschwankungen wieder. Lediglich die Maximalschwankungen werden um 25% überschätzt. Das Flamelet-Modell, in dem in Abhängigkeit des Mischungsbruchs, seiner Varianz und der Streckungsrate die Umsätze bestimmt werden, muss zum Lösen der Mischungsbruchvarianz die skalare Dissipationsrate mit dem Ansatz  $\tilde{\chi} = C_{\chi} \tilde{\varepsilon} / \tilde{k} \langle \xi'^2 \rangle$  ( $C_{\chi}=2$ ) modellieren. Der Verlauf ähnelt dem der PDF-Berechnung, lediglich auf der Symmetrieachse ist die Schwankung beim Flamelet-Modell null. Bei den Temperaturschwankungen zeigt das Flamelet-Modell deutliche Abweichungen (50%) zum Experiment und zur PDF-Lösung.

Einer korrekten Modellierung der Schwankungsgrößen kommt in sofern eine hohe Bedeutung zu, da beispielsweise nicht die mittleren Temperaturen, sondern die Temperaturspitzen entscheidenden Anteil bei der Schadstoffbildung oder auch für die Materialermüdung haben. Gleiches gilt für Konzentrationschwankungen.

Einen guten Einblick, der Bereiche hohen Flammenlöschens zeigt, bietet Bild 6.19 mit einem T- $\xi$  –Scatterplot.

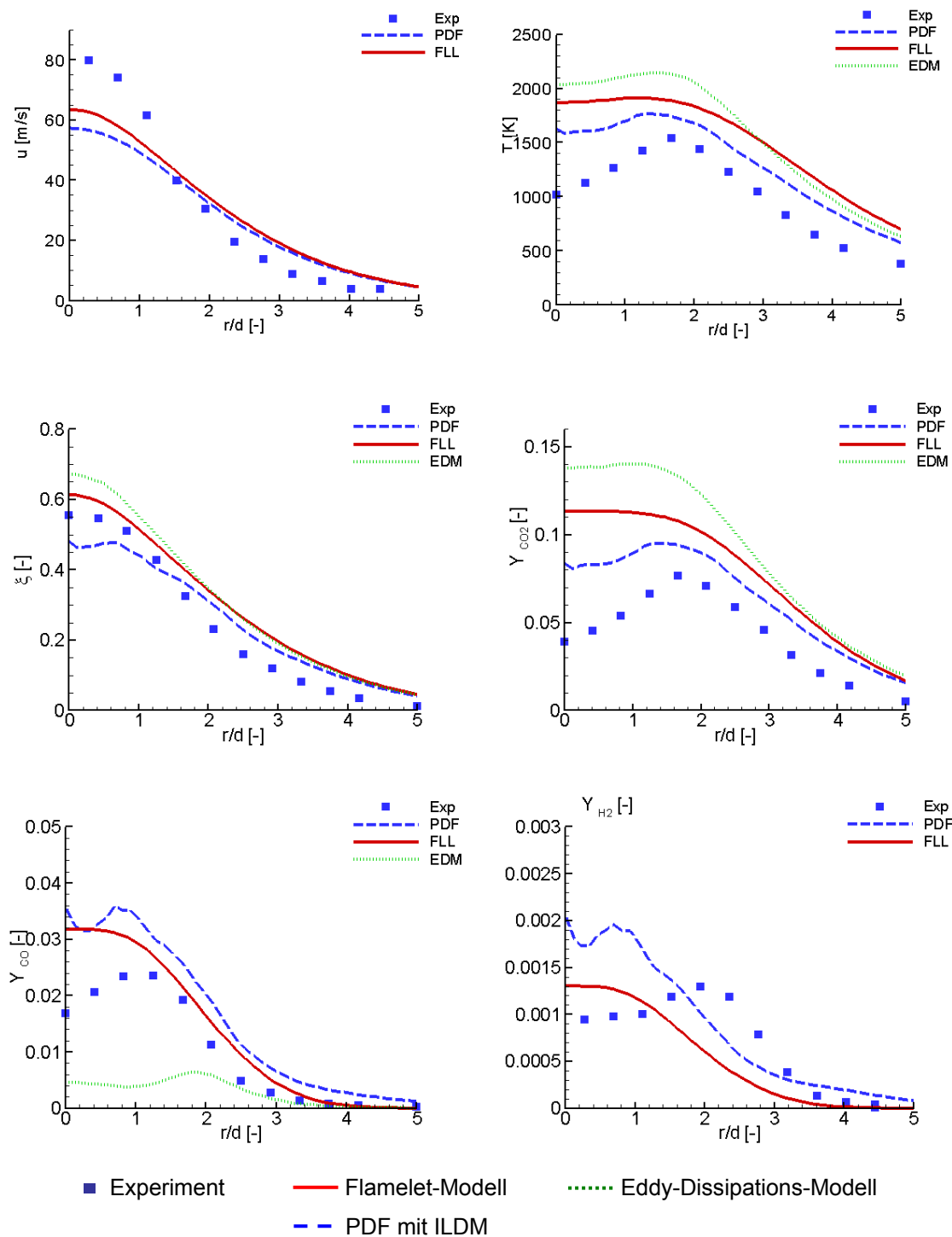


**Bild 6.19:** Scatterplots bei  $x/d=15$ ; Proben: Experiment ca. 11000; PDF ca. 6000

Im Experiment erstreckt sich ein Streifen zwischen 600K und 1300K mit gleicher Punktdichte, d.h. Wahrscheinlichkeit über nahezu den gesamten Mischungsbruchbereich. Dies ist ein Zeichen hoher Mischung und unterentwickelter bzw. unvollständiger Reaktion. Ansatzweise wird dieser gleichverteilte Streifen in der PDF-Simulation wiedergegeben. Eine zweite auffällige Verdichtung

der Punktdichten erfolgt entlang der Gleichgewichtslinie bei mageren Mischungsbrüchen bis hin zum stöchiometrischen Mischungsbruch. Hier treten hohe Temperaturen auf, was auf eine vollständige Reaktion schließen lässt. Dieser Bereich ist in der Simulation am ausgeprägtesten und folglich werden die Temperaturen in der Rechnung überschätzt. Eine dritte Verdichtung im fetten Bereich ist bei  $\xi > 0.8$  ersichtlich. Diese intensive Vermischung von Abgas bzw. Brennstoff wird von der Simulation wiedergegeben.

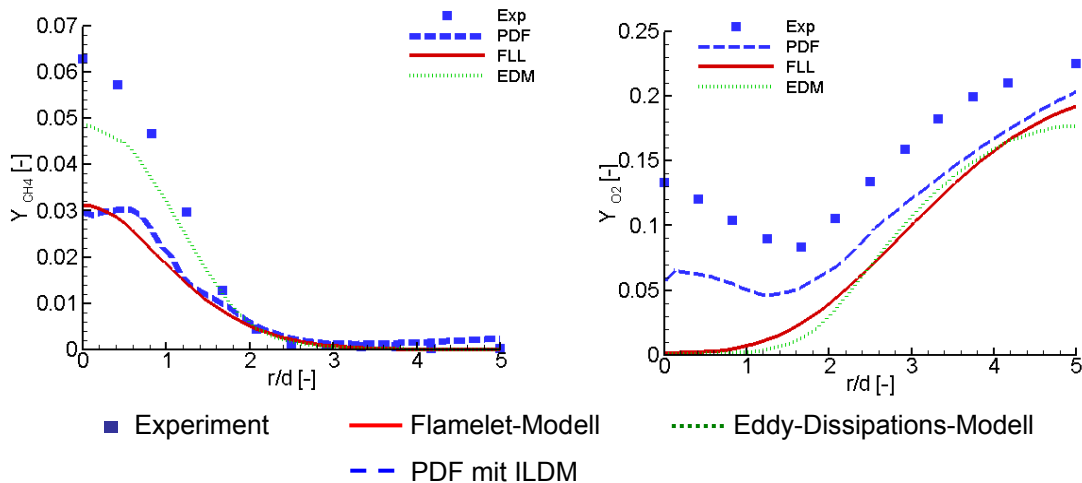
Es bleibt die Frage offen, warum das PDF-Modell den reaktiven Bereich entlang der Gleichgewichtslinie im mageren Gebiet zugunsten des Mischungsstreifens zwischen  $T=800\text{K}$  bis  $1300\text{K}$  überschätzt. Ein Vergleich von Mischungs- und Turbulenzmodellen soll speziell bei  $x/d=15$  im weiteren noch folgen und diskutiert werden.



**Bild 6.20:** Flamme F: radiale Profile bei  $x/d=30$

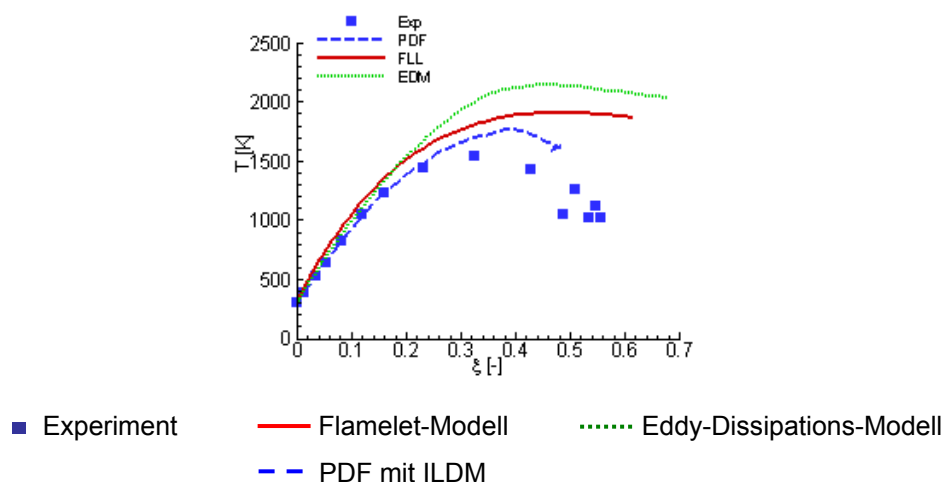
In der Ebene  $x/d=30$  stabilisiert sich die Flamme und die Temperaturen steigen auf  $T=1500\text{K}$  an. Das bedeutet, die in der Ebene  $x/d=15$  z.T. erloschenen Partikel bzw. noch gar nicht gezündeten Partikel können sich mit dem Oxidator vermischen und reagieren. Die immer noch relativ niedrigen Temperaturen bele-

gen, dass die Reaktion jedoch noch unvollständig ist. Alle Verbrennungsmodelle überschätzen die Temperaturen auf der Symmetrieachse deutlich. Bild 6.21 zeigt dies anhand des überschätzten Brennstoff- und Sauerstoffverbrauchs in der Rechnung.



**Bild 6.21:**  $CH_4$  und  $O_2$  bei  $x/d=30$

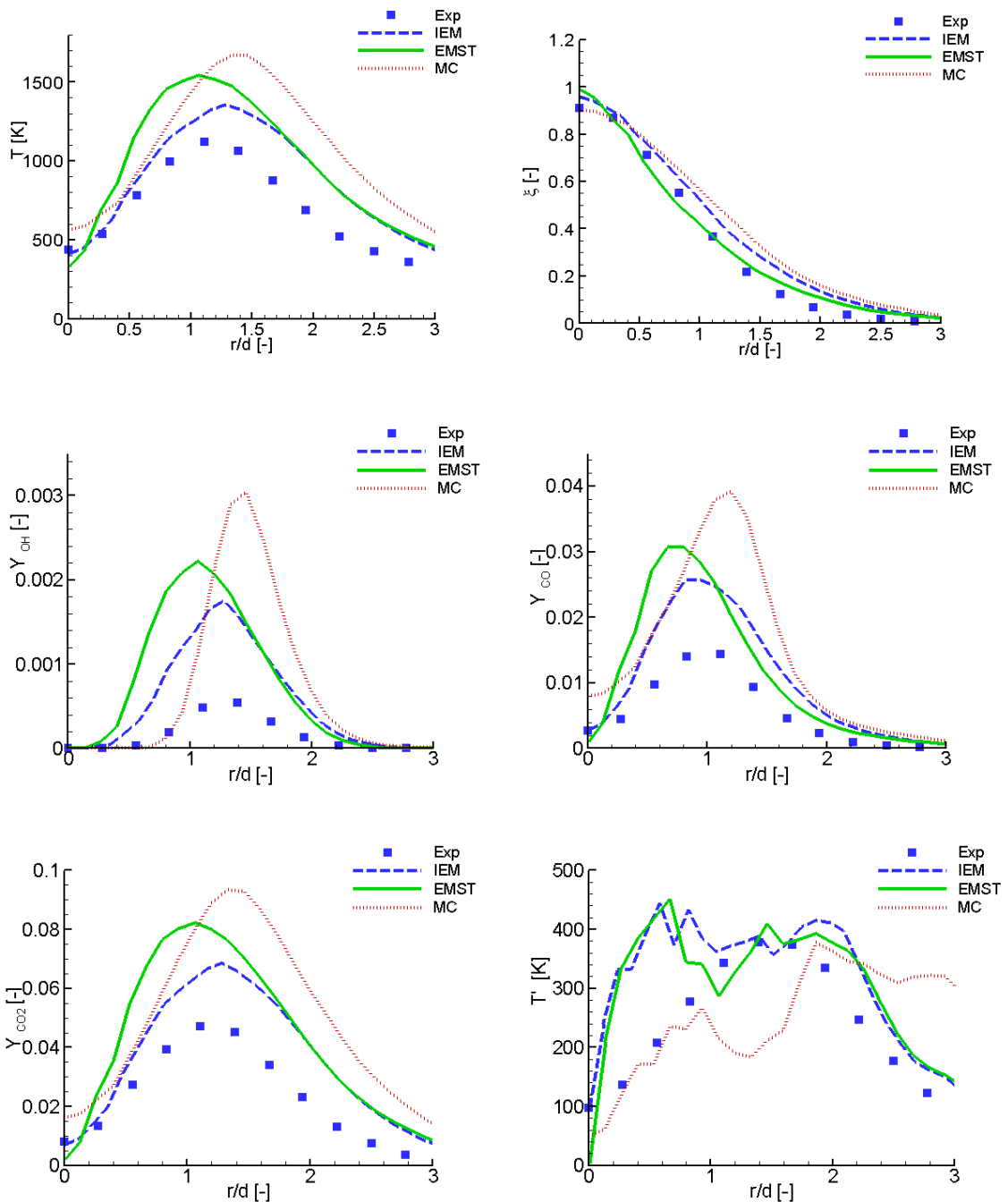
Es ist somit kein Modell in der Lage den Zündverzug auf der Achse korrekt wiederzugeben. Offensichtlich steigen die Temperaturen im nahe stöchiometrischen Bereich auf 1500K, wohingegen die Mischung im fetten Bereich (Brennerachse) erst nahe der Zündgrenze bei 1000K liegt. Bild 6.22 verdeutlicht den Zusammenhang noch einmal in der konditionierten Darstellung der Temperatur über dem Mischungsbruch. Deutlich zu sehen ist, dass die PDF-Methode die Temperaturen im mageren Bereich gut wiedergibt ( $\xi_{\text{stöch}}=0.35$ ). Eine Überschätzung findet dann allerdings ab  $\xi=0.35$ , also im beginnenden fetten Bereich statt. Die Ursachen hierfür werden in Bild 6.20 (oben links) ersichtlich. Da die Axialgeschwindigkeit deutlich gegenüber dem Experiment unterschätzt wird, ist auch die Mischungsbruchkonzentration mit  $\xi_{\text{PDF}}=0.5$  zu  $\xi_{\text{Exp}}=0.57$  zu niedrig. Somit ist die Simulation deutlich näher am stöchiometrischen Mischungsbruch und die Wahrscheinlichkeit reaktiver Zustände steigt.



**Bild 6.22:** Temperatur im Mischungsbruchraum bei  $x/d=30$

### 6.2.4.2 Vergleich der Mischungsmodelle

Im Folgenden werden das IEM-, das modifizierte Curl (MC)- und das EMST-Mischungsmodell miteinander verglichen ( $c_\varphi=2$ ). Im Gegensatz zur Flamme C soll hier die Ebene  $x/d=15$  untersucht werden, in der lokales Erlöschen beobachtet wurde. Spielten in der Flamme C Mischungseffekte im sogenannten Flamelet-Bereich eine Rolle, so befinden wir uns hier eher in dem großskaligen, hochturbulenten Mischungsbereich. Die Lokalitätsbedingung, die das EMST-Modell als einziges erfüllt, tritt in diesen Bereich eher in den Hintergrund.

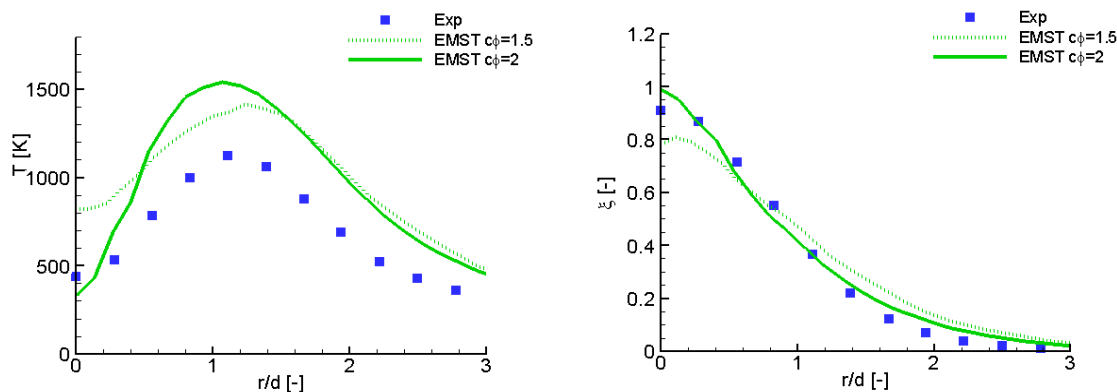


**Bild 6.23:** Vergleich der Mischungsmodelle bei  $x/d=15$  ( $c_\phi=2$ )

Bild 6.23 zeigt deutliche Unterschiede zwischen den einzelnen Mischungsmodellen. So berechnet das MC-Modell die Temperatur ca. 300K höher als das IEM-Modell. Das EMST-Modell liegt mit ca. 150K ebenfalls über dem IEM-Modell. Eine mögliche Ursache für die überschätzten Temperaturen könnte der stochastische Charakter von MC- und EMST-Modell sein. Hierdurch erhöht sich die Reaktionswahrscheinlichkeit und somit die Temperaturen. Den

inerten Mischungsbruch gibt hingegen das EMST-Modell am besten wieder. Die zuvor beschriebenen Abweichungen bei der Temperatur treten qualitativ auch bei den Spezies OH, CO, CO<sub>2</sub> und bei der Temperaturfluktuation auf.

Bild 6.24 zeigt die Auswirkung einer Veränderung des turbulenten Zeitmaßes durch Absenken der Proportionalitätskonstanten  $c_\varphi$  beim EMST-Modell auf  $c_\varphi=1.5$ . Konsistent zu der Diskussion in Abschnitt 6.2.3.2 wird bei Verringerung der turbulenten Mischung ( $c_\varphi=1.5$ ) die Temperatur erniedrigt. Es wird deutlich, wie sensitiv die Wahl des turbulenten Zeitmaßes sich auf das Simulationsergebnis niederschlägt.



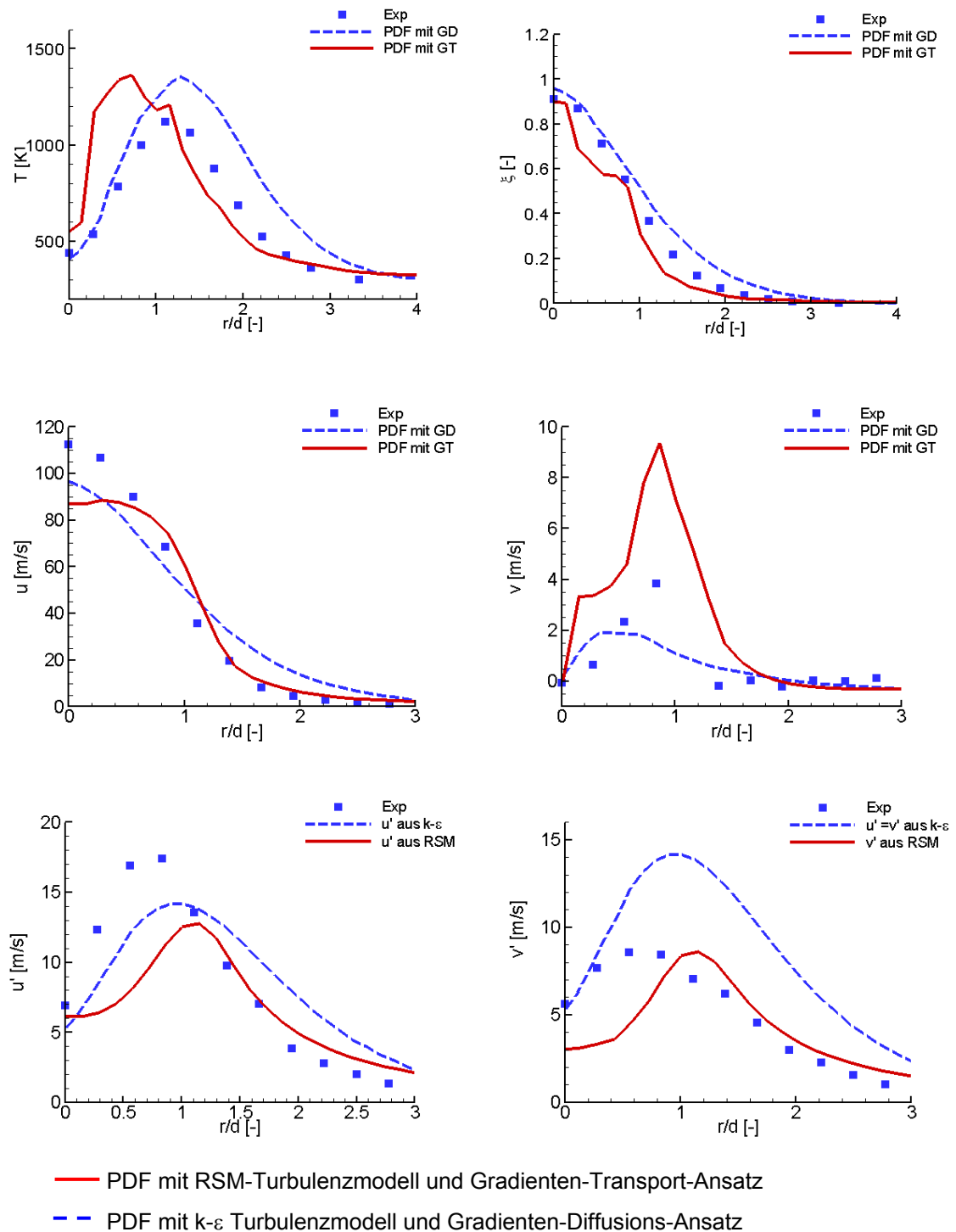
**Bild 6.24:** Vergleich der Temperatur und Mischungsbruch bei  $c_\varphi=1.5$  und  $c_\varphi=2$

Die turbulente kinetische Energie ist proportional der skalaren Mischungszeit  $t_\varphi$ , die eine zentrale Größe in den Mischungsmodellen darstellt. Daher ist neben der Untersuchung von Mischungsmodellen ein Vergleich der Turbulenzmodelle bzw. der Modelle für den turbulenten Transport notwendig.

### 6.2.4.3 Vergleich von turbulenten Transport- Modellen

Wie schon in Abschnitt 6.2.3.3 soll auch an der Flamme F untersucht werden, ob die Benutzung eines RSM-Turbulenzmodells mit Gradienten-Transport-Ansatz (GT) eine verbesserte Beschreibung der Flamme erlaubt.

Bild 6.25 zeigt den Vergleich zwischen PDF mit  $k-\varepsilon$  Modell und GD- zu PDF-Berechnung mit RSM-Modell und GT-Ansatz in der Ebene  $x/d=15$ .



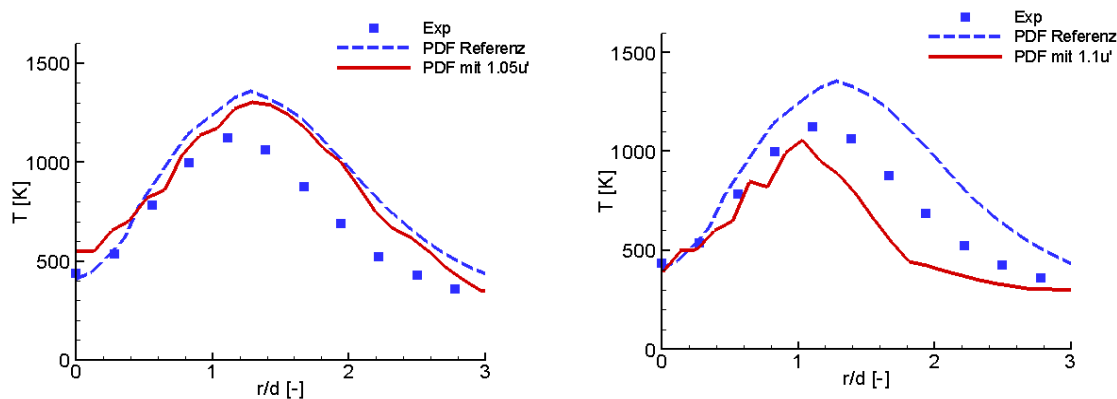
**Bild 6.25:** Vergleich von PDF mit GD- und PDF mit GT-Ansatz bei  $x/d=15$

Der Temperaturverlauf ist beim GT-Ansatz in Richtung der Brennerachse verschoben. Konsistent hierzu wird der Mischungsbruch unterschätzt. Auffällig ist die zu geringe Axialgeschwindigkeit in Achsnähe. Ab  $r/d=1$  stimmt der Verlauf sehr gut mit der experimentell bestimmten Geschwindigkeit überein. Eine mög-

liche Ursache für die unterschätzte Axialgeschwindigkeit ist die zu hohe Radialgeschwindigkeit bei  $r/d=1$ . Ähnlich wie bei den Geschwindigkeiten stimmen die Fluktuationen in Bereichen größer  $r/d=1$  sehr gut mit der Messung überein.

Die aus dem  $k$ - $\varepsilon$ -Modell berechnete Geschwindigkeitsschwankung  $u'=v'=(2/3k)^{1/2}$  ist in allen Raumrichtungen konstant (isotrop). Bild 6.25 (unten rechts) zeigt eine deutliche Überschätzung des turbulenten Querrauschens, was indirekt zu einer Erniedrigung der Temperatur führt. Allerdings sorgt die zu niedrig berechnete axiale turbulente Schwankung für eine Temperaturerhöhung. Eine genaue Quantifizierung ist hier nicht möglich. Das  $k$ - $\varepsilon$  Modell überschätzt somit deutlich das turbulente Querrauschen. Dies erklärt die im Gegensatz zum Experiment deutlich verbreiterten Profile der Spezies (vgl. Bild 6.18 und Bild 6.21).

Durch Verwendung des RSM-Turbulenzmodells werden beim GT-Ansatz die Schwankungen in  $x$  - und  $r$ -Richtung aufgelöst. Dabei ist die Übereinstimmung ab  $r/d=1$  mit dem Experiment sehr hoch, wobei auch hier die axialen turbulenten Schwankungen deutlich unterschätzt werden. Um dies zu verdeutlichen zeigt Bild 6.26 eine Rechnung mit künstlich erhöhter turbulenter Schwankung von 5% bzw. 10% ( $u'^*=1.1u'$ ) in der Ebene  $x/d=15$ .



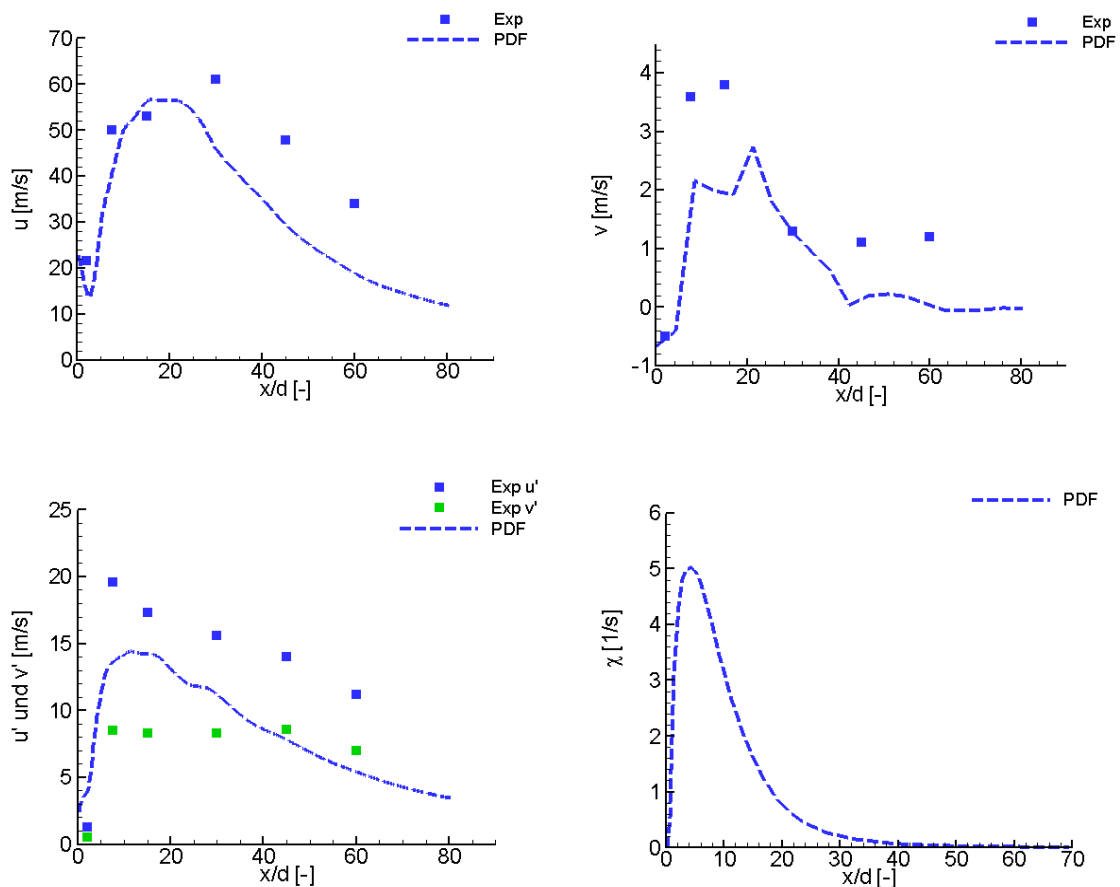
**Bild 6.26:** Temperaturverlauf bei künstlicher Erhöhung der Turbulenzintensität bei  $x/d=15$ ; links: 5%, rechts 10%

Man erkennt einen deutlichen Rückgang der Temperatur bei Erhöhung der Turbulenz. Dieses Beispiel zeigt den prinzipiellen Zusammenhang zwischen Turbulenzintensität und Flammenlöschen auf.

Abschließend lässt sich sagen, dass der Einsatz des GT-Modells nur vorteilhaft ist, wenn die Reynolds-Spannungen korrekt bzw. besser als beim  $k-\varepsilon$  Modell vorhergesagt werden. Aufgrund des hohen numerischen Rechenaufwands und den z.T. schlechteren Ergebnissen im Vergleich zum  $k-\varepsilon$ -Modell, erweist sich der Einsatz des RSM-Modells für die Flamme F als nachteilig.

#### 6.2.4.4 Ursachen des Flammenlöschens

Um die Ursachen des Flammenlöschens in den Ebenen  $x/d=7.5$  und  $x/d=15$  näher zu quantifizieren, ist in Bild 6.27 der axiale Verlauf der Geschwindigkeiten, der turbulenten Schwankungen und der skalaren Dissipationsrate  $\chi$  entlang der axialen Achse  $r/d=1$  ausgewertet worden. Die Rechnungen erfolgten mit dem  $k-\varepsilon$  Modell und GD-Ansatz.



**Bild 6.27:** axiale Verlauf der Geschwindigkeiten, turbulenten Schwankungen und der Dissipationsrate entlang der Achse  $r/d=1$

Man erkennt, dass die maximale Geschwindigkeit bei  $x/d=30$  auftritt (Bild 6.27 oben links), hingegen die maximalen turbulenten Schwankungen bei  $x/d=7.5$  (Bild 6.27 unten links).

Durch die zunehmende Turbulenz nehmen Konzentrationsgradienten und somit Diffusionsprozesse zu. Ist nun die Entstehung von Produkten und Reaktionswärme durch die Reaktion geringer als der diffusive Stoffabtransport, so sinkt die Temperatur und letztlich die Reaktionsgeschwindigkeit, was schließlich zum Erlöschen der Flamme führt. Eine Voraussetzung für die korrekte Wiedergabe von Flammenlöschen sollte daher eine möglichst exakte Berechnung der Reynolds-Spannungen sein.

Bild 6.27 (unten rechts) zeigt die skalare Dissipationsrate. Wie schon bei den Geschwindigkeitsschwankungen liegt das Maximum bei  $x/d=10$  mit  $\chi=5s^{-1}$ . Die skalare Dissipationsrate stellt anschaulich eine Flammenstreckung dar und es ist somit offensichtlich, dass die Flamme im Bereich von  $x/d=10-15$  die höchste Löschwahrscheinlichkeit besitzt.

#### 6.2.4.5 Fazit

Die Berechnung der Flamme F mit einem Skalar-PDF-Verfahren unter Verwendung von verschiedenen Mischungs- und Turbulenzmodellen zeigten:

- Der PDF-Ansatz mit ILDM-Chemie kann im Gegensatz zum Flamelet- und EDM-Modell das partielle Verlöschen in der Ebene  $x/d=15$  wiedergeben.
- Alle Modelle unterschätzen die Axialgeschwindigkeiten auf der Brennerachse, was u.a. in der Ebene  $x/d=30$  zu deutlichen Abweichungen bei der Temperatur und den Skalaren führt.
- EMST- und MC-Mischungsmodell zeigen höhere Abweichungen zum Experiment als das IEM-Modell in der Ebene  $x/d=15$ , in der es zur partiellen Verlöschung der Flamme kommt.
- Das RSM-Turbulenzmodell mit GT-Ansatzes besitzt keine Vorteile gegenüber dem  $k-\varepsilon$  Modell mit GD-Ansatz, da die Reynolds-Spannungen aus dem RSM zu große Abweichungen aufzeigen.

## 6.3 Staukörperstabilisierte CH<sub>4</sub>/Luft Flamme

Nachdem im vorherigem Kapitel eine Freistrahlf Flamme ausführlich untersucht worden ist, soll im Folgenden eine staukörperstabilisierte (engl. bluff body) Flamme berechnet werden. Das ausgeprägtes Rezirkulationsgebiet dieser Flamme ähnelt dem einer industriellen Brennkammer. Daher ist diese Validierung auch als Vorstufe zur Berechnung einer realen Brennkammer zu sehen.

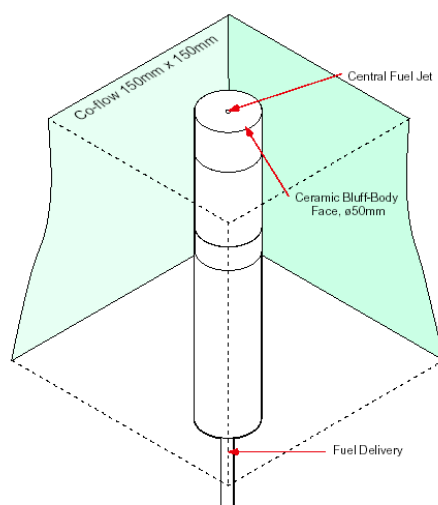
Masri et al. untersuchte eine ganze Serie staukörperstabilisierter Flammen. Die experimentellen Untersuchungen erstreckten sich von kalten Geschwindigkeits- und Mischungsbruchmessungen bis hin zu heißen Messungen mit lokalem Flammenlöschen und Wiederzünden (Masri et al., 1992). Ziel war es eine detaillierte Datenbank zu erstellen, um diese zur Validierung numerischer Verfahren zu nutzen. Die Flammen sind als Modellflammen im „International Workshop on Measurement and Computation of Turbulent Nonpremixed Flames (TNF)“ ausgewählt worden. Sämtliche Daten sind im Internet verfügbar.

Es existieren eine Vielzahl von Veröffentlichungen über diesen Flammentyp. Bei den PDF-Berechnungen seien hier (Nau, 1996), (Wouters, 1996) und (Liu 2004) hervorgehoben. Dabei führte Liu die wohl ausführlichsten Untersuchungen mit Joint-PDF-Ansatz und einem 15-Schritt-Chemiemechanismus (ARM2) durch. Er verglich u.a. EMST- und IEM-Mischungsmodell miteinander und variierte dabei die Proportionalitätskonstante  $c_p$ .

### 6.3.1 Experiment

Masri et al. veränderten bei ihren systematischen Untersuchungen an staukörperstabilisierten Flammen die Eintrittsgeschwindigkeiten von 50m/s bis 500m/s bei inerten bzw. brennenden Konfigurationen. Die unten beschriebene Anordnung gilt deshalb als Benchmark für Turbulenz- und Verbrennungsmodellierung.

Im Experiment ist ein Freistrah von einer Stauscheibe umgeben, um die wiederum ein Luftstrom (Coflow) strömt. Der Stauscheibendurchmesser beträgt bei der inerten Untersuchung  $d_b=50\text{mm}$  (heiß  $d_b=38\text{mm}$ ), der des Jets  $d_j=3,6\text{mm}$  (heiß  $d_j=2\text{mm}$ ). Bild 6.28 zeigt den schematischen Aufbau.



**Bild 6.28:** schematischer Aufbau der untersuchten Flamme (Masri, 1992 )

Das Strömungsverhalten wird durch das Impulsstromverhältnis von Jet- zu Coflow bestimmt. Bei einer Coflow dominierten Strömung ist der Jetstrom eingeschlossen in der Rezirkulationszone. Bei Erhöhung der Jetgeschwindigkeit folgt nach der Rezirkulationszone ein Einschnürungsgebiet. Weiter stromabwärts bildet sich eine freistrahllähnliche Zone aus. Als Brennstoff sind verschiedene Stoffe untersucht worden, wobei hier nur Methan betrachtet wird. Die Geschwindigkeitsfelder sind mit LDA, die Skalarfelder sind mit Raman/Rayleigh-Spektroskopie und LIF vermessen worden.

### 6.3.2 Numerische Modellbildung

Es liegen einzelne experimentelle Datensätze der Mischungsbruchfelder und der heißen Strömungen vor. Aus diesem Grund werden nacheinander die Randbedingungen für die kalten Mischungsbruch- und die heißen Rechnungen dargestellt.

Da der Mischungsbruch als zentraler Parameter in Verbrennungsrechnungen angesehen werden kann, kommt dessen exakte Berechnung eine hohe Bedeutung zu.

Die mittlere Eintrittsgeschwindigkeit des Methanstrahls beträgt 50m/s, was einer Reynoldszahl von 13000 entspricht. Die genauen Geschwindigkeits- und Turbulenzprofile können anhand experimenteller Daten vorgegeben werden. Aller-

dings führte die experimentelle Geschwindigkeitseintrittsverteilung zu deutlich geringeren Mischungsbruchwerten auf der Brennerachse, so dass ein Blockprofil mit mittlerer Geschwindigkeit vorgegeben wurde.

Der Coflow-Luftstrom wird umgeben von einer Wand ohne Haftbedingung (engl. free slip). Partikel die gegen die Wand treffen, werden reflektiert ohne ihre Eigenschaften zu ändern.

Am Austritt herrscht Umgebungsdruck. Partikel die über die Austrittsebene gelangen, werden aus der Simulation entfernt.

Die rotationssymmetrische Strömung wird zweckmäßigerweise zweidimensional modelliert. Daher wird ein Gitter mit 80x50 Zellen verwendet. Die Gitterunabhängigkeit wurde mit einem Gitter 120x70 Zellen getestet und ergab keine signifikanten Unterschiede. Die Partikelanzahl pro Zelle wurde zum einen mit N=27, zum anderen mit N=125 Partikel gewählt. Tabelle 6.5 und Tabelle 6.6 zeigen die verwendeten Randbedingungen.

Die Residuen lagen in der Größenordnung von  $O(10^{-3})$  bei ca. 2000 durchgeführten Iterationen. Alle Ergebnisse sind bei eingetretener Stationarität zusätzlich gemittelt worden. Die Simulationen erfolgten auf einem Pentium 4 mit 2.8GHz und 2GB RAM und benötigten ca. 36 CPU Stunden pro Rechnung.

**Tabelle 6.5:** Randbedingungen für inerte Berechnungen

	Mittlere Axialgeschwindigkeit	turbulente. kinetische Energie	Dissipationsrate	skalare Eigenschaft
Brennstoff	$\tilde{u}_1 = 50 \text{ m/s}$ $\tilde{u}_2 = 0 \text{ m/s}$ $\tilde{u}_3 = 0 \text{ m/s}$	$\tilde{k}$ (Exp. Bilger) $\widehat{u_i u_i} = 1/3 \tilde{k}$ $\widehat{u_i u_j} = 1/2 \widehat{u_i u_i}$	nach (6.3)	$\tilde{Y}_{CH_4} = 1.0$ $\tilde{Y}_{O_2} = 0$ $\tilde{\xi} = 1.0$
Luft	$\tilde{u}_1 = 20 \text{ m/s}$ $\tilde{u}_2 = 0 \text{ m/s}$ $\tilde{u}_3 = 0 \text{ m/s}$	$\tilde{k}$ (Exp. Bilger) $\widehat{u_i u_i} = 1/3 \tilde{k}$ $\widehat{u_i u_j} = 1/2 \widehat{u_i u_i}$	nach (6.3)	$\tilde{Y}_{CH_4} = 0$ $\tilde{Y}_{O_2} = 0.23$ $\tilde{\xi} = 0$

**Tabelle 6.6:** Randbedingungen für Verbrennungsrechnung

	mittlere Axialgeschwindigkeit	turbulente kinetische Energie	Dissipationsrate	skalare Eigenschaft
Brennstoff	$\tilde{u}_1 = 67 \text{ m/s}$ $\tilde{u}_2 = 0 \text{ m/s}$ $\tilde{u}_3 = 0 \text{ m/s}$	$\tilde{k}$ (Exp. Bilger) $\widehat{u_i u_i} = 1/3 \tilde{k}$ $\widehat{u_i u_j} = 1/2 \widehat{u_i u_i}$	nach (6.3)	$\tilde{Y}_{H_2O} = 0$ $\tilde{Y}_{CO_2} = 0$ $\tilde{\xi} = 1.0$
Luft	$\tilde{u}_1 = 15 \text{ m/s}$ $\tilde{u}_2 = 0 \text{ m/s}$ $\tilde{u}_3 = 0 \text{ m/s}$	$\tilde{k}$ (Exp. Bilger) $\widehat{u_i u_i} = 1/3 \tilde{k}$ $\widehat{u_i u_j} = 1/2 \widehat{u_i u_i}$	nach (6.3)	$\tilde{Y}_{H_2O} = 0$ $\tilde{Y}_{CO_2} = 0$ $\tilde{\xi} = 0$

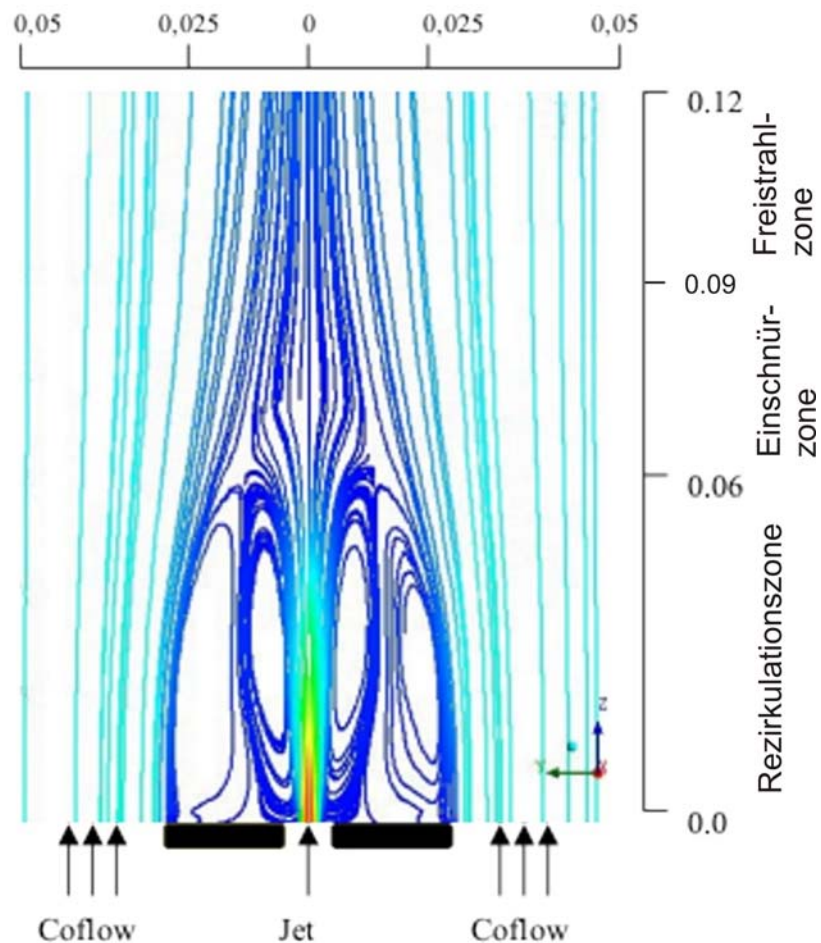
In Ergänzung zu den Gitteruntersuchungen im zweidimensionalen wurde bei der heißen Konfiguration auch ein Vollzylinder mit Hexaedern (40.000 Elemente) untersucht. Dies ergab keine signifikanten Abweichungen zum zweidimensionalen Gitter. Aufgrund von Konvergenzproblemen bei Benutzung des Reynolds-Stressmodells wurde anstatt des zweidimensionalen Gitters ein Vollzylinder verwendet.

### 6.3.3 Ergebnisse

Um einen Eindruck von der Strömung zu erhalten, soll zunächst das kalte Geschwindigkeitsfeld diskutiert werden. Hierzu lagen keine experimentellen Geschwindigkeitsdaten vor.

#### 6.3.3.1 Inerte Strömung

Bild 6.29 zeigt die mit einem RSM-Turbulenzmodell berechnete Stromlinienverteilung (Ausschnitt aus der Rechendomain).



**Bild 6.29:** Stromlinienplot des kalten Geschwindigkeitsfeldes, Längen in [m]

Deutlich erkennbar im Stromlinienplot sind die Rezirkulationszone, ein sich anschließendes Einschnürungsgebiet und ein freistrahllähnlicher Auslauf. Die Rezirkulationszone besteht aus einem inneren Wirbelkern und einem äußeren Wirbel. Mit steigender Jetgeschwindigkeit bewegt sich der innere Wirbelkern stromab, bis er sich auflöst.

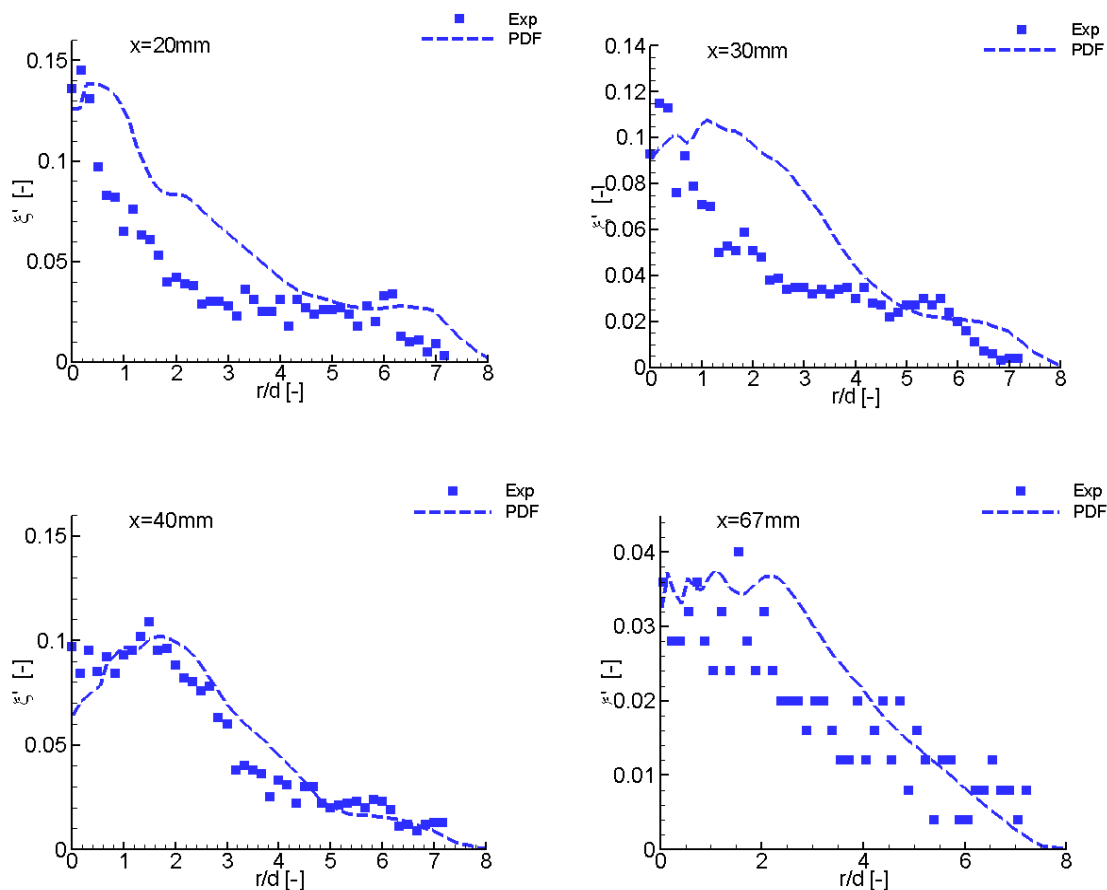
Nach der Rezirkulationszone folgt ein Einschnürungsgebiet. Bei entsprechend hohen Jetgeschwindigkeiten, ist dies die Zone lokalen Flammenlöschens. Diese Region ist ideal zum studieren der Turbulenz-Chemie-Interaktion.

### 6.3.3.2 Mischungsbruchvergleich

In diesem Abschnitt erfolgt ein Vergleich der Mischungsbrüche zwischen Experiment und PDF-Rechnung ( $k-\varepsilon$  Turbulenz- und EMST-Mischungsmodell). Die Unterschiede zwischen den Mischungsmodellen im inerten Fall sind dabei nur

minimal, da alle Modelle den Mittelwert konstant lassen und die Varianz mit gleicher Frequenz abbauen.

Die korrekte Vorhersage des Mischungsbruchs ist von großer Bedeutung, da bei fast allen Verbrennungsmodellen der Mischungsbruch die bzw. eine unabhängige Variable darstellt.

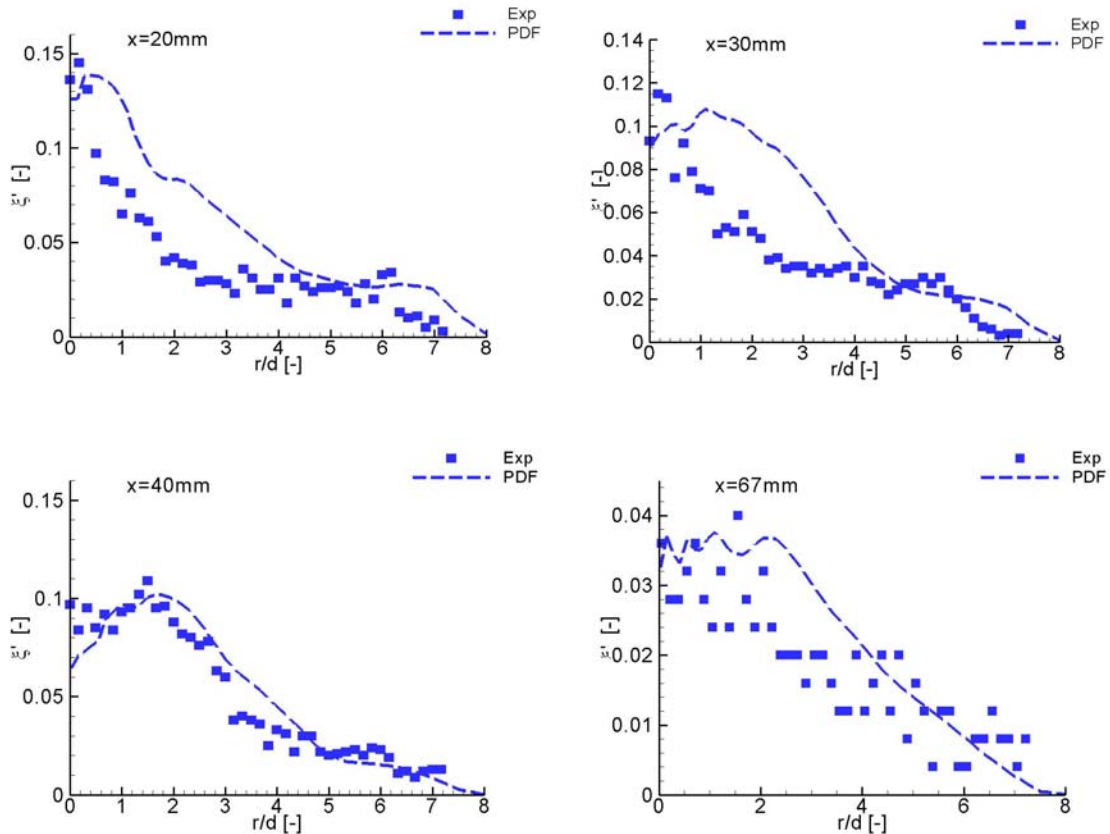


**Bild 6.30:** Mischungsbruchvergleich in verschiedenen Ebenen

Bild 6.30 zeigt die radialen Profile des Mischungsbruchs in verschiedenen axialen Ebenen, wobei die radiale Richtung jeweils mit dem Jetdurchmesser  $d_j$  normiert ist. Über alle Ebenen hinweg ist die Übereinstimmung mit dem Experiment sehr gut. Dies lässt zunächst zwei Schlüsse zu: Erstens die Mischungsmodelle liefern im inerten Anwendungsfall akzeptable Ergebnisse. Zweitens ist die Turbulenzbeschreibung mit dem  $k$ - $\varepsilon$ -Turbulenzmodell in der Lage, Strömungen mit starker Stromlinienkrümmung wiederzugeben.

In der Ebene  $x=20\text{mm}$  wird der Mischungsbruch in Achsnähe unterschätzt, da die axiale Geschwindigkeit zu stark abfällt. Das durch die Rezirkulationszone

hervorgerufene Plateau wird durch die Rechnung wiedergegeben. Im weiteren axialen Verlauf bei  $x=30$  sind die Übereinstimmungen mit dem Experiment hoch. Ähnlich gute Ergebnisse zeigen die Ebenen  $x=40\text{mm}$  und  $x=60\text{mm}$ .



**Bild 6.31:** Mischungsbruchfluktuationen in verschiedenen axialen Ebenen

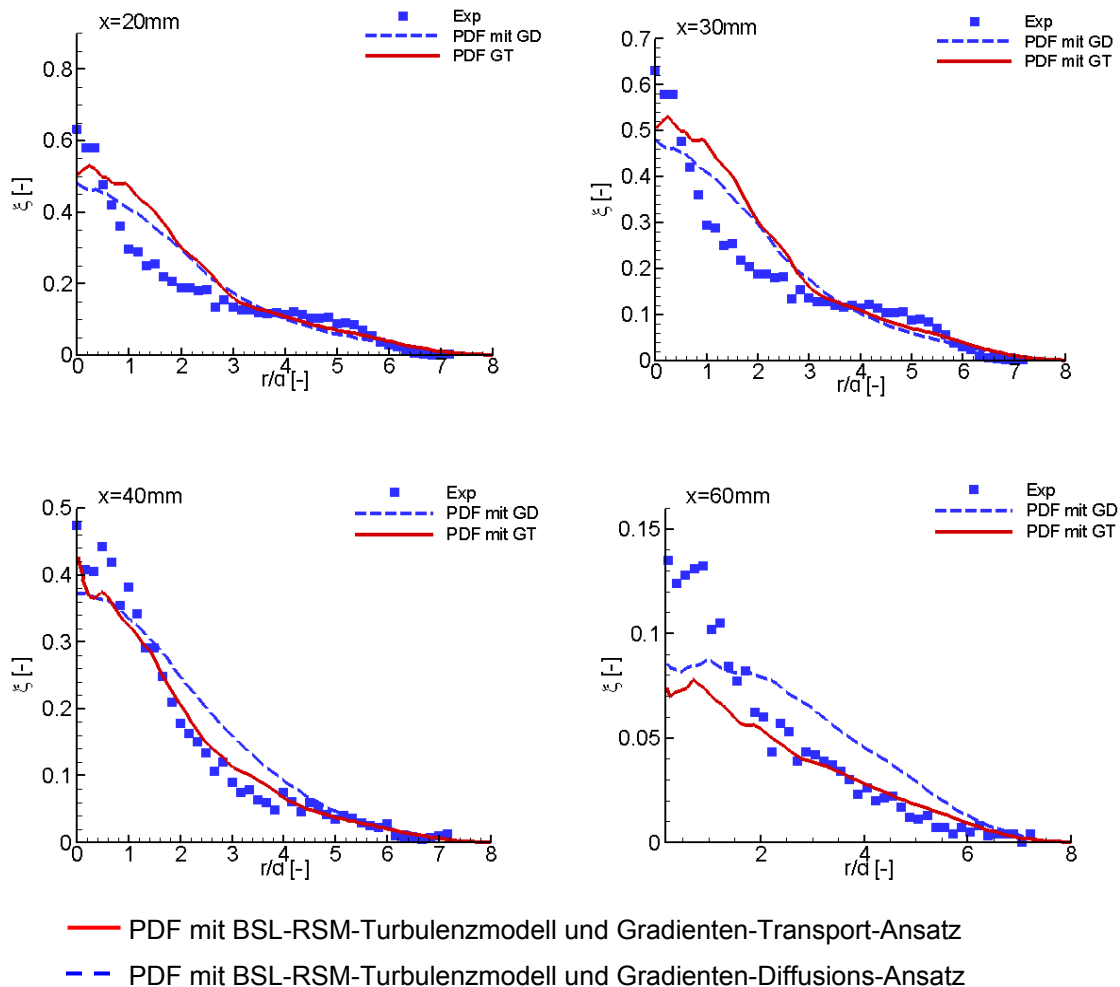
Bild 6.31 zeigt die Fluktuationen des Mischungsbruchs. Diese Profile sind aufschlussreich, da sie ein Maß für die Mischungsintensität sind. Aufgrund der sich einstellenden Wirbelzonen – eine Innere angetrieben vom Jetstrom und eine Äußere angetrieben durch die Coflow-Strömung – stellen sich Zonen erhöhter Mischung ein.

Die Trends werden in allen Schnitten gut wiedergegeben.

### 6.3.3.3 Vergleich von turbulenten Transport-Modellen

Wie schon im Kapitel 6.2.3.3 und 6.2.4.3 soll auch hier ein Vergleich der turbulenten Transport-Modelle durchgeführt werden. Alle Rechnungen sind mit einem BSL-Reynolds-Stressmodell (Menter, 1994), das in Abhängigkeit zum

Wandabstand entweder eine RSM- $\omega$  oder eine RSM- $\varepsilon$  Formulierung benutzt, durchgeführt worden.

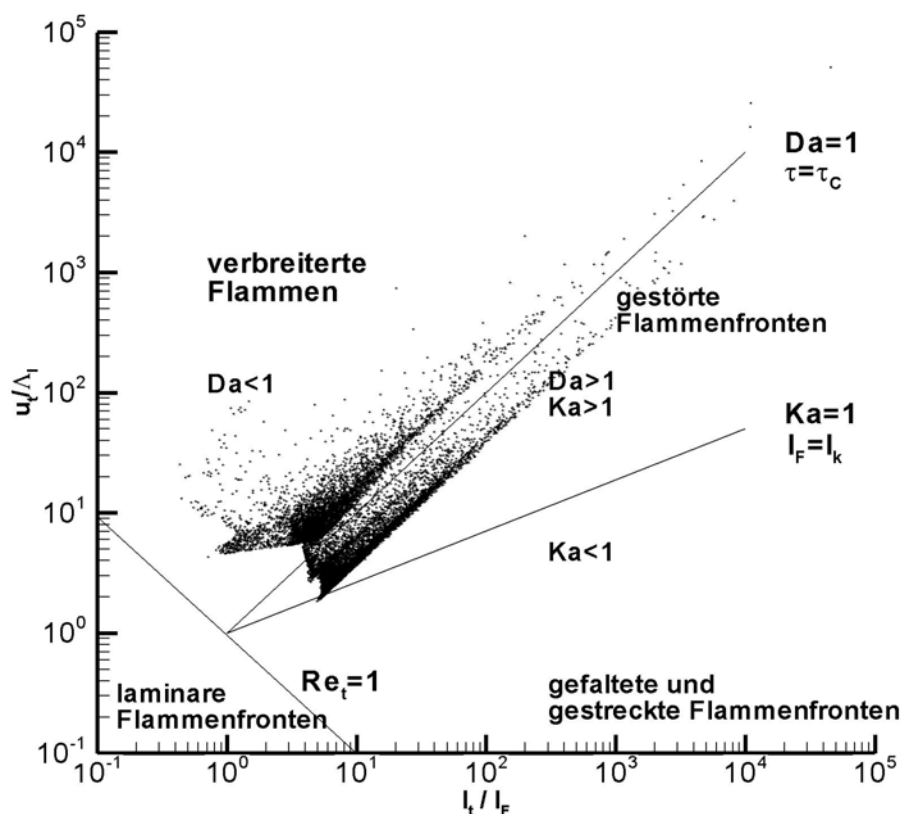


**Bild 6.32:** Vergleich von turbulenten Transport-Modellen

Man erkennt über alle Ebenen hinweg, eine bessere Übereinstimmung bei Verwendung des GT-Modells. Gerade das Plateau, hervorgerufen durch den äußeren Wirbelkern, wird genauer wiedergegeben. Im Bereich der Mittelachse verschlechtern sich bei beiden Modellen die Vorhersagen zum Experiment. Die Gründe hierfür liegen in einer Unterschätzung der turbulenten Geschwindigkeitsschwankungen im Achsbereich bzw. einer Überschätzung der radialen Schwankungen. Aufgrund fehlender experimenteller Geschwindigkeitsdaten können hier keine genaueren Aussagen für die starken Abweichungen im Achsbereich gemacht werden. Ebenfalls bemerkenswert ist eine im Vergleich zum  $k$ - $\varepsilon$  Modell (Bild 6.30) verschlechterte Vorhersage des Mischungsbruchs.

### 6.3.3.4 Reaktive Strömung – Temperatur- und Speziesvergleich

Nachdem im inerten Strömungsfeld der Mischungsbruch berechnet wurde, soll im Folgenden das PDF-Verfahren an einer staukörperstabilisierten CH<sub>4</sub>/Luft-Flamme angewendet werden.

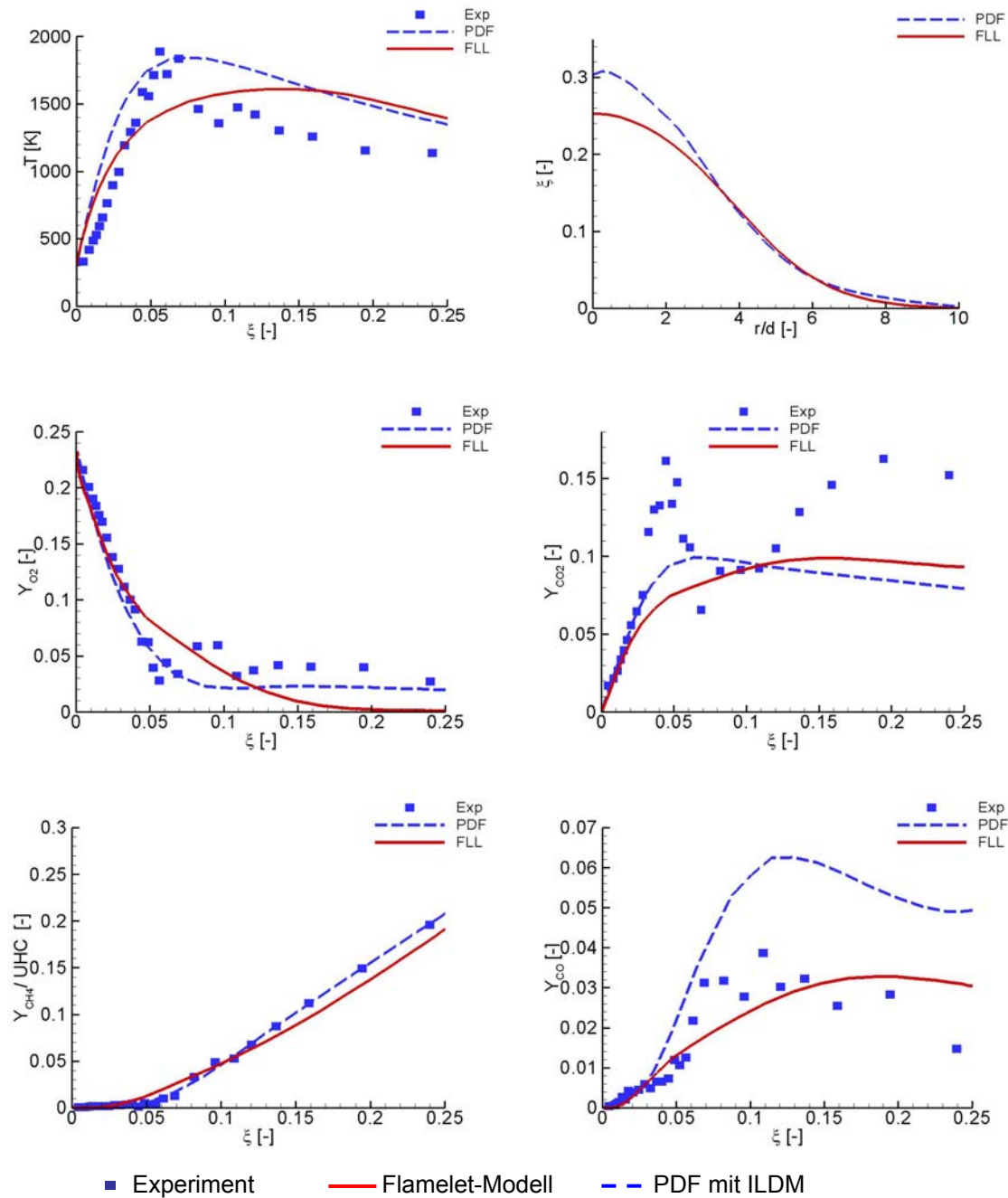


**Bild 6.33:** Einordnung der Flamme ins Borghi-Diagramm

Die Darstellung im Borghi-Diagramm zeigt die höchste Punktdichte beiderseits der Linie  $Da=1$  und dient hier zur qualitativen Zuordnung in einzelne Flammenbereiche.

Für die Simulation wird ähnlich zu (Liu, 2004) als Startlösung der PDF-Rechnung eine auskonvergierte Flamelet-Lösung verwendet. Dies ergab hinreichend genaue Werte zur Initialisierung der beiden Fortschrittsvariablen CO<sub>2</sub> und H<sub>2</sub>O und führte darüber hinaus zu einer Konvergenzbeschleunigung. In der Regel benötigte eine auskonvergierte Rechnung 2500 Iterationen. Als Turbulenzmodell wurde das  $k$ - $\epsilon$ -Modell mit GD-Ansatz, als Mischungsmodell das EMST-Modell mit  $c_\phi=12$  gewählt. Durch diese Erhöhung der turbulenten Mischung konnte die Flamme stabilisiert werden. Dies bedeutet, dass das be-

rechnete Rezirkulationsgebiet zu schwach war, um genügend Wärme und Radikale (bzw. bei der ILDM von  $Y_{CO_2}$  und  $Y_{H_2O}$ ) in den Düsenbereich strömen zu lassen. Um die Flamme dennoch zu stabilisieren, wurde die Mischung über die Anhebung von  $c_\varphi$  intensiviert. Zum besseren Vergleich der Verbrennungsmodelle wird zusätzlich noch eine Flameletlösung betrachtet. Experimentelle Daten liegen für die Ebene  $x/d_{b,body}=2$  (bzw.  $x=76\text{mm}$ ) vor.

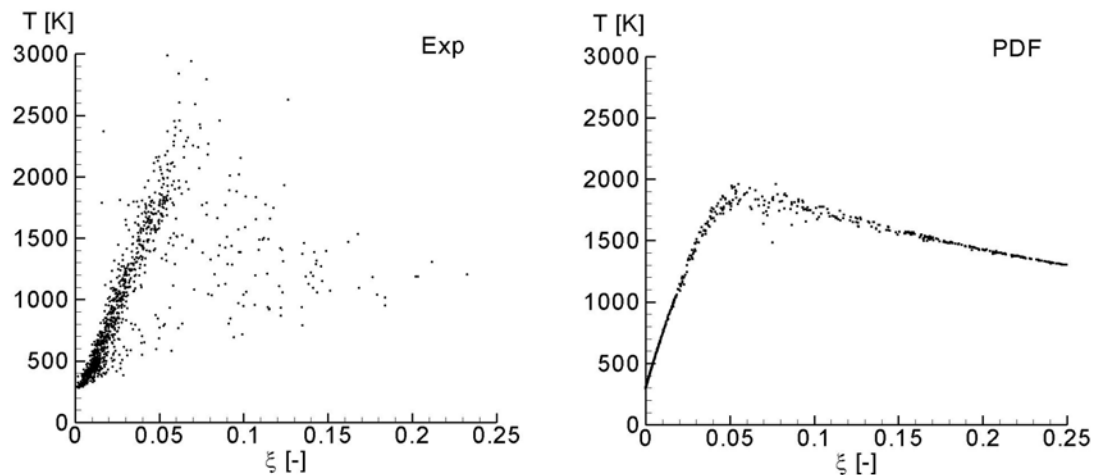


**Bild 6.34:** radiale Profile bei  $x=76\text{mm}$  im Mischungsbruchraum

Bild 6.34 zeigt einen Temperatur- und Speziesvergleich der Ebene  $x=76\text{mm}$ . Die PDF-Rechnung erreicht fast das Temperaturmaximum von  $1880\text{K}$  in der Nähe des stöchiometrischen Mischungsbruchs von  $\xi=0.05$ . Im fetten Bereich folgt ein rascher Temperaturabfall deutlich unter eine gedachte Gleichgewichtslinie. Diese unvollständige Chemie wird von keinem der untersuchten Modelle wiedergegeben. Betrachtet man sich den Mischungsbruch in Abhängigkeit vom Radius (Bild 6.34, rechts oben), so erkennt man, dass sich der fette Bereich bis  $r/d_{\text{jet}}=5$  erstreckt. In dieser Zone sagen alle Modelle zu hohe Temperaturen voraus, bzw. können die unvollständige Reaktionskinetik nicht wiedergeben. Eine mögliche Ursache kann, wie schon bei der Flamme F gezeigt, das Unterschätzen der Jetgeschwindigkeit im Achsennahbereich sein. Die Übereinstimmung beim Sauerstoff ist bis auf die Abweichungen im fetten Bereich sehr gut. Die zu geringe Sauerstoffkonzentration in der Rechnung ist konsistent mit dem Überschätzen der Temperatur im fetten Bereich. Die maximalen  $\text{CO}_2$  Massenbrüche werden vom PDF-Modell deutlich unterschätzt. Der experimentelle Anstieg von  $\text{CO}_2$  im fetten Bereich scheint dagegen weniger plausibel und ist auf Fehler in der Messung zurückzuführen.

Bei den unverbrannten Kohlenwasserstoffen ist die Übereinstimmung zwischen Experiment und Rechnung sehr gut, obwohl vereinfachend  $Y_{\text{CH}_4}$  aus der Rechnung zum Vergleich herangezogen wurde. Ungenauigkeiten beim Chemiemechanismus führen auf die deutlichen Abweichungen bei den  $\text{CO}$  Massenbrüche (bis zu 100%).

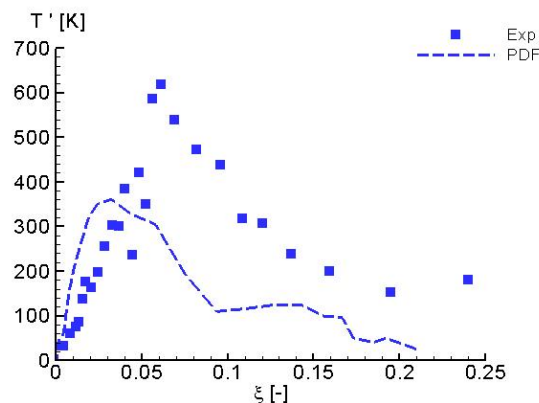
Bild 6.35 zeigt vergleichend die Streubilddarstellung der Temperatur im Mischungsbruchraum.



**Bild 6.35:** Scatterplot der Temperatur bei  $x=76\text{mm}$ ; Proben: Exp. Ca. 10000; PDF: ca. 3000

Im Experiment steigt die Temperatur linear bis zum stöchiometrischen Mischungsbruch an, gefolgt von einer breiten Streuung im fetten Bereich. Die Vielzahl der erloschenen Zustände in diesem Bereich erklärt den starken Temperaturabfall im Experiment. Diese unvollständige Verbrennung wird von den Rechnungen nicht wiedergegeben. Hier zeigt sich eine Temperaturstreuung nur um den stöchiometrischen Mischungsbruch, nicht aber in fetten Flammenbereichen.

Zum Abschluss der Untersuchungen ist in Bild 6.36 die Standardabweichung der Temperatur aufgetragen. Die gemessenen Temperaturschwankungen variieren in der Spitze um ca. 600K. Dieses unterstreicht die fluktuierende, unvollständige Verbrennung, die die Rechnung so nicht wiedergeben kann.



**Bild 6.36:** Temperaturfluktuationen

### 6.3.3.5 Fazit

Die Untersuchungen der staukörperstabilisierten Strömungskonfiguration ergaben:

- Das verwendete PDF-Verfahren ermöglicht die Simulation einer rezirkulierenden, reagierenden Strömung, wobei gute Übereinstimmungen bei der Temperatur und der Spezies Vorhersage erzielt wurden.
- Bei der inerten Strömung ist die Übereinstimmung des Mischungsbruchs mit dem  $k$ - $\varepsilon$  Turbulenzmodell und GD-Ansatz sehr hoch.
- Beim Vergleich zwischen den turbulenten Transport-Modellen zeigte sich eine verbesserte Beschreibung des Mischungsbruchs bei Benutzung des GT-Ansatzes (vgl.6.3.3.3).
- Die Verwendung des RSM-Turbulenzmodells bringt bei der Berechnung des Mischungsbruchs im inerten Fall keinen Vorteil gegenüber dem  $k$ - $\varepsilon$  Modell.

Für die reagierende Strömung wurde keine konvergente Lösung mit dem RSM-Turbulenzmodell erzielt.

## 6.4 Konventionelle Rohrbrennkammer

Als praxisrelevanter Anwendungsfall wird im Folgenden eine typische konventionelle Rohrbrennkammer, wie sie beispielsweise in Flugtriebwerken oder stationären Kraftwerken zum Einsatz kommt, simuliert. Es handelt sich dabei um die Rohrbrennkammer einer stationären Gasturbinenanlage der Wellenleistung  $P=12\text{MW}$ . Im Gegensatz zu den vorherigen Modellflammen ist die Berechnung einer kompletten Brennkammer mit erheblichen Schwierigkeiten verbunden. Zum einen erschwert der komplexe Aufbau die messtechnischen Untersuchungen und zum anderen sind die Randbedingungen und die Nachbildung der komplexen Geometrie für die Rechnung mit einigen Unsicherheiten behaftet. Wie bereits in Kapitel 1.1 erwähnt, sind Modellbrennkammern u.a. von (Pixner et al., 2004), (Kunz, 2003), (Wetzel et al., 2006) berechnet worden. Dabei erfolgte die Modellierung der Turbulenz-Chemie-Interaktion mit sogenannten pre-

sumed-PDF-Ansätzen und mit ILDM- (Pixner) bzw. mit 1-Schritt-Chemie (Kunz) für den Modellbrennstoff  $C_{12}H_{23}$ . Kunz konnte globale Geschwindigkeits- und Temperaturverteilung im Mittenschnitt der Brennkammer gut wiedergeben, wobei die höchsten Temperaturübereinstimmungen mit der Gleichgewichtschemie erzielt wurde. Komplette Brennkammern wurden u.a. von (Syed et al., 2004) berechnet, der das Brennkammerwirbelsystem näher untersuchte und für die Verbrennungsmodellierung ein EDM-Modell nutzte.

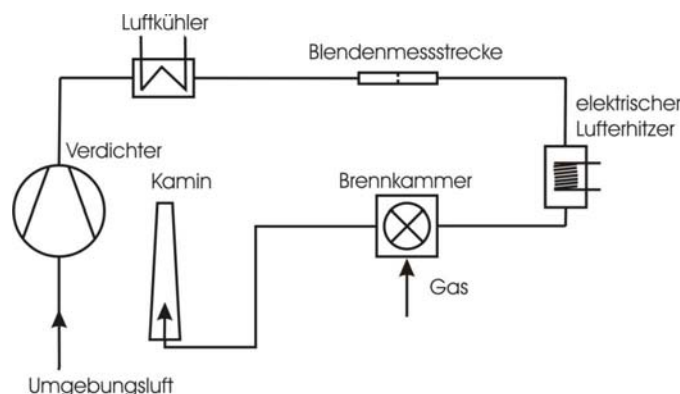
Komplette Brennkammerberechnungen mit Transport-PDF-Modell konnten in der Literatur nicht gefunden werden. Ein Schwerpunkt dieser Arbeit liegt daher in der Anwendung des PDF-Verfahrens auf industrielle Brennkammern und dem Vergleich mit experimentellen Messwerten sowie mit herkömmlichen Verbrennungsmodellen. Ziel dieser Untersuchungen ist:

- Die Anwendung von PDF-Methoden auf die Berechnung reaktiver Strömungen in kompletten Brennkammern.
- Der Vergleich zwischen PDF-Modell mit Flamelet- bzw. EDM-Modell.

Bezugnehmend auf die aktuellen mager vorgemischten Verbrennungskonzepte, erfolgt die Festlegung des Betriebspunktes im Experiment bewusst mager, um die eingesetzten Verbrennungsmodelle nahe der mageren Verlöschgrenze besser beurteilen zu können. Zur  $NO_x$  Minimierung werden schadstoffreduzierte Brennkammern nahe der mageren Löschgrenze betrieben.

#### 6.4.1 Experiment

Bild 6.37 zeigt schematisch den Brennkammerversuchsaufbau.

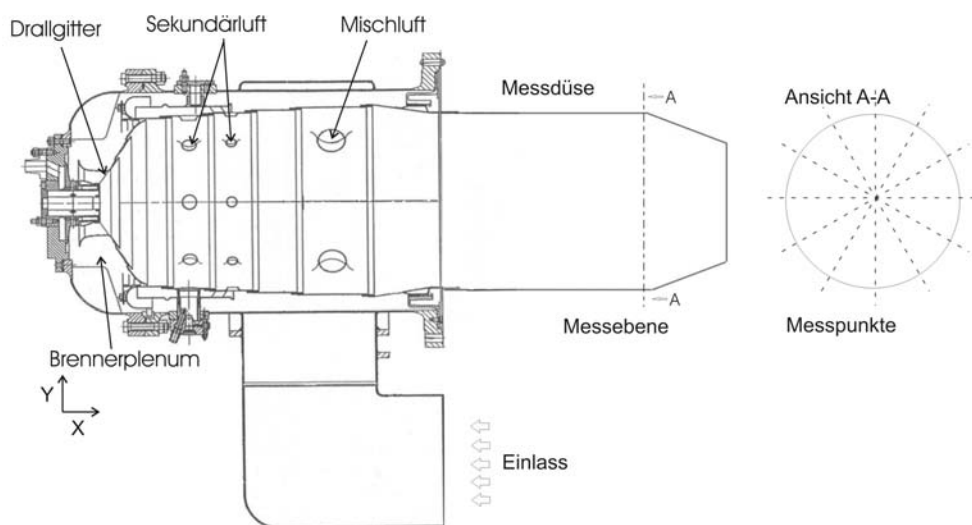


**Bild 6.37:** Versuchsaufbau

Die experimentellen Untersuchungen wurden am Brennkammerprüfstand der Helmut-Schmidt-Universität Hamburg durchgeführt. Dieser Versuchsstand ist für den atmosphärischen Betrieb mit einer maximal möglichen Brennkammer-eintrittstemperatur von 700°C konzipiert. Eintrittstemperaturen über 80°C werden durch einen elektrischen Lufterhitzer realisiert.

Der benötigte Luftmassenstrom wird über einen Radialverdichter gefördert. Ein nachgeschalteter Wärmetauscher kühlt die geförderte Luft auf die gewünschte Eintrittsbedingung ab. Wie schon erwähnt kann der Luftmassenstrom zusätzlich durch einen Luftvorwärmer auf typische Eintrittstemperaturen für Gasturbinenbrennkammern erhitzt werden. Die Brenngaszuführung erfolgt über das öffentliche Gasnetz mit Erdgas. Während des Versuches betrug die Zusammensetzung ca. 93vol% Methan, 3vol% Ethan, 1vol% Propan, 1.3vol% Stickstoff und 0.6vol% Kohlendioxid. Vereinfachend wird in der Simulation mit 100vol% CH<sub>4</sub> gerechnet, was aufgrund des höheren Heizwertes von Methan bei vollständiger Reaktion einer Temperaturerhöhung von ca. 60K entspricht. Um den Einzug von Umgebungsluft in den Brennkammeraustritt zu verhindern, ist hinter der Brennkammer eine Messdüse angebracht. Bild 6.38 zeigt die gesamte Brennkammer mit der Messebene. Mit Hilfe einer Traverse werden im Abstand von jeweils 30 Grad je 30 Messpunkte aufgenommen. Eine Keramiksonde schützt dabei ein Thermoelement Pt/Rh(90/10)-Pt vom Typ S und minimiert den Strahlungsaustausch mit der Düsenwand. Zusätzlich werden Abgase zur weiteren Analyse abgesaugt. Die Bestimmung der Konzentrationen erfolgt mit konventionellen Messmethoden (Flammen-Ionisations-Detektor für UHC, Infrarotanalytiker für CO<sub>2</sub>, CO und paramagnetischen Analysator für O<sub>2</sub>). Die Messunsicherheit der Temperaturbestimmung liegt bei 0.75% und die der Konzentrationen <1%. Da die querempfindlichen O<sub>2</sub>, CO und CO<sub>2</sub> Konzentrationen im getrockneten Abgas gemessen wurden, erfolgt eine entsprechende Umrechnung auf das wasserbeladene Abgas. Es sei angemerkt, dass es sich bei den Messwerten um Reynolds-gemittelte Größen handelt. Ein Vergleich mit den Favre-gemittelten Rechnungen ist dennoch vertretbar, da die Standardabweichung von Dichte- und Skalaren in der Messebene sehr gering ist (vgl. (3.34)). Bei

einer Mittelung über 60s pro Messpunkt betrug die maximale Standardabweichung der Temperatur 3K.



**Bild 6.38:** Rohrbrennkammer mit Messebene

Die Abmessungen der Brennkammer betragen in der Länge ca. 0.8m (mit Messdüse 1.4m) bei einem Flammrohrdurchmesser von ca.  $d=0.4\text{m}$ .

Der gesamte Brennkammermassenstrom teilt sich auf in den Primär-, Sekundär-, und Mischluftmassenstrom. Der Primärmassenstrom gelangt über ein äußeres und inneres Drallgitter des Brenners in die Primärzone. Zwischen beiden Drallgittern befindet sich ein Düsenring über den der Brennstoff (Erdgas) eingebracht wird, um in der Primärzone in einem weiten Betriebsbereich ein zündfähiges Gemisch zu erhalten. Aufgrund der Drallströmung entsteht ein Unterdruckgebiet auf der Achse, was zur Rezirkulation heißer Abgase und damit zur Stabilisierung der Flamme führt. Die sich anschließende Sekundärzone, mit je 8 Sekundärlöchern angeordnet in 2 hintereinander liegenden Reihen, unterstützt zum einen die Rezirkulation und führt zum anderen zur vollständigen Oxidation von  $\text{CO}$  und  $\text{H}_2$  zu den Produkten  $\text{CO}_2$  und  $\text{H}_2\text{O}$ . Zusätzliche Mischluft gelangt über die drei Mischluftlöcher in das Flammenrohr und führt zu einer Homogenisierung des Temperaturfeldes bzw. einer Temperaturanpassung an die Einsatzanforderungen der 1.Turbinenstufe. Über insgesamt 7 Kühlringe erfolgt die Filmkühlung der Flammrohrwand. Während des Anfahrens wird Pilotgas an der seitlich angebrachten Zündlanze zugeführt.

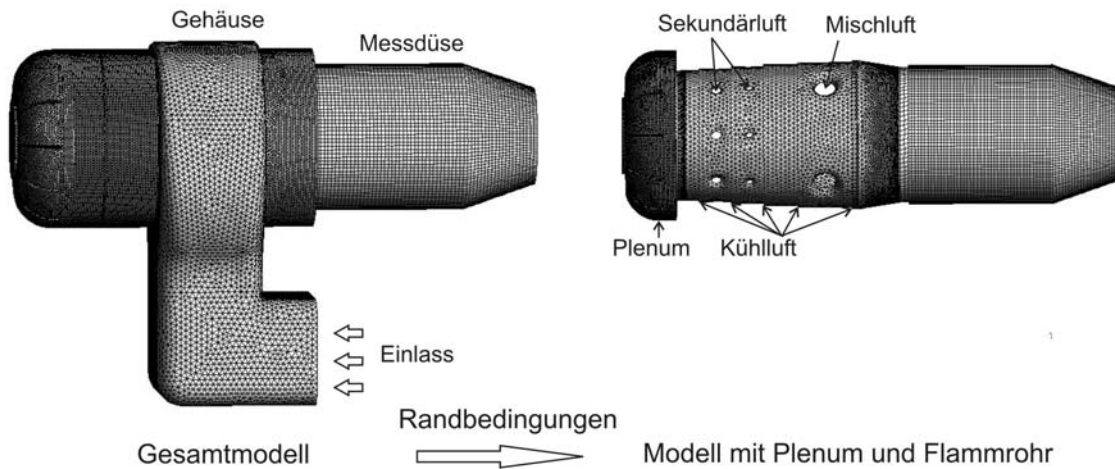
Die Versuchsrandbedingungen orientieren sich an dem Vollastpunkt der Originalausführung. Unter Beachtung der Machähnlichkeit wurde der Luftmassenstrom so eingestellt, dass der relative Brennkammerdruckabfall erhalten blieb. Durch die im Vergleich zum Originalbetriebspunkt mageren Bedingungen der Primärzone mit  $\lambda_{Pz}=1.5$  soll eine bessere Beurteilung der Verbrennungsmodelle unter den Gesichtspunkten einer mageren Vormisch-Verbrennung gewährleistet werden. Die Versuche finden unter atmosphärischen Bedingungen statt.

**Tabelle 6.7:** Versuchsrandbedingungen

	mittlere Eintrittstemperatur	Zusammensetzung in vol%
Brennstoff	289K	93% CH <sub>4</sub> , 3% C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> , 1% C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> , 1.3% N <sub>2</sub>
Luft	298K	79% N <sub>2</sub> , 21%O <sub>2</sub>

#### 6.4.2 Numerische Modellbildung

Ein zweigeteiltes Vorgehen ermöglichte die Anwendung der rechen und Speicher intensiven PDF-Methode auf die Berechnung einer kompletten Brennkammer. Dazu wurde in einem 1. Schritt ein Gesamtbrennkammermodell mit 3.400.000 Hexaeder- und Tetraederzellen erstellt. Anschließend durchgeführte Simulationen mit dem Flamelet-Verbrennungsmodell dienten der Bestimmung von Randbedingungen für ein kleineres Rechengitter, bestehend aus Drall-erzeuger und Flammrohr. Dieses Gitter enthielt 550.000 Elemente, wobei auf das eigentliche Flammrohr 200.000 Hexaederzellen entfallen. Als Randbedingungen wurden der Primärluftmassenstrom, der Brennstoffmassenstrom, 5 Kühlluftströme, je 12 Sekundärluftmassenströme und drei Mischluftmassenströme zuzüglich der Turbulenzgrößen  $k, \varepsilon$  vorgegeben. Durch die flexible Programmierung des PDF-Submoduls ist es möglich, die für das Monte-Carlo-Lösungsverfahren notwendigen stochastischen Partikel am Interface vom Drallerzeugeraustritt und an den entsprechenden Kühl-, Sekundär- und Mischlufteinlässen zuzugeben. Bild 6.39 zeigt abschließend das Brennkammergesamtmmodell und das daraus abgeleitete Modell mit Brennerplenum und Flammrohr.



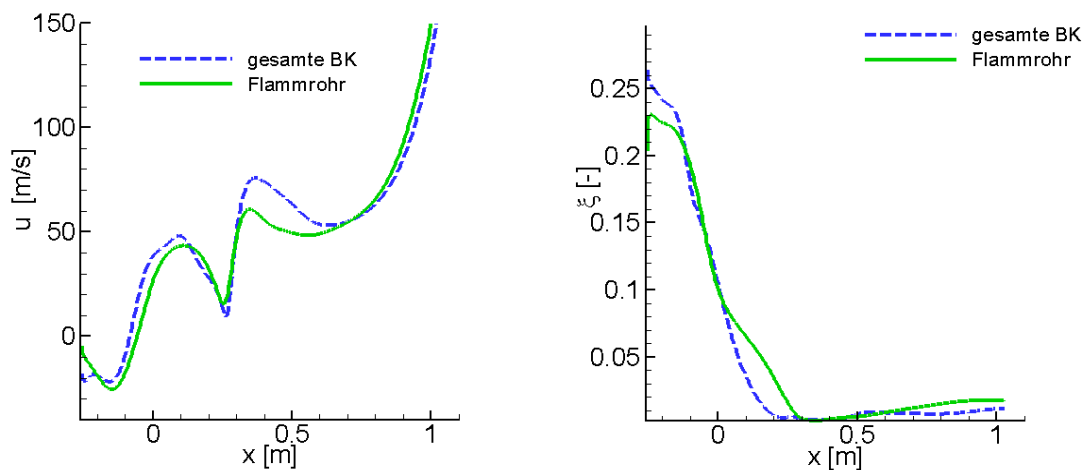
**Bild 6.39:** Gesamt- und Teilmodell der Brennkammer zur effizienten Berechnung mit PDF-Verbrennungsmodell

Tabelle 6.8 gibt die Randbedingungen des Gesamtmodells wieder. Die Dissipationsrate  $\varepsilon$  wurde mit  $\varepsilon = \rho c_{\mu} k^2 / \mu_t$ ,  $c_{\mu} = 0.09$  und die turbulente kinetische Energie mit einem Turbulenzgrad von 5% abgeschätzt. Als Brennstoff wurde vereinfachend mit Methan gerechnet. Die Brennkammer wird als adiabat angenommen.

**Tabelle 6.8:** Randbedingungen des Gesamtmodells

	k	$\varepsilon$	Zusammensetzung
Brennstoff	$\langle u \rangle / u' = 0.05$	$\varepsilon = 42000 \text{ m}^2/\text{s}^3$	$Y_{\text{CH}_4} = 1$
Luft	$\langle u \rangle / u' = 0.05$	$\varepsilon = 2700 \text{ m}^2/\text{s}^3$	$Y_{\text{O}_2} = 0.23, Y_{\text{N}_2} = 0.77$

Um die Gitterunabhängigkeit zwischen Gesamt- und Teilmodell zu bewerten, wurde entlang der Brennkammerachse die Axialgeschwindigkeit und der Mischungsbruch ausgewertet. Bild 6.40 zeigt den Vergleich zwischen der Gesamt- und der Teilmodellrechnung jeweils mit Flamelet-Verbrennungsmodell. Die Abweichungen sind insgesamt als gering zu bewerten. Somit stellt in Hinblick auf Rechengeschwindigkeit und Speicherplatzbegrenzung das 200.000 Zellen große Flammrohrgitternetz einen guten Kompromiss dar.



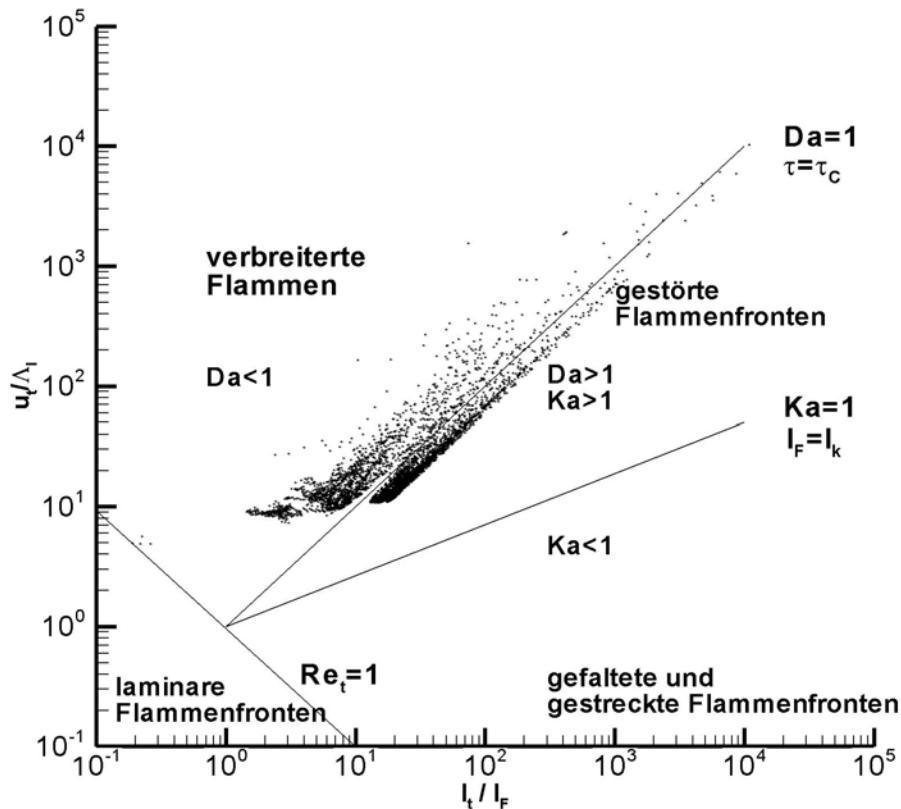
**Bild 6.40:** Gittervergleich zwischen Gesamt- und Teilmodell:  
links: Axialgeschwindigkeit; rechts: Mischungsbruch

Zur Initialisierung der PDF-Rechnungen wurden auskonvergierte Flamelet- bzw. EDM- Lösungen vorgegeben. Die Berechnung des Mischungsbruchs erfolgt im FV-Teil, die Fortschrittsvariablen für  $\text{CO}_2$  und  $\text{H}_2\text{O}$  wurden im PDF-Modul berechnet. Dieses Vorgehen ergab wesentlich stabilere Residuenverläufe, weil stochastisch bedingte Schwankungen des Mischungsbruchs vermieden wurden. Aus Speicherplatzrestriktionen musste die Zellpartikelzahl auf 27 begrenzt werden. Alle Rechnungen sind mit dem Standard  $k-\varepsilon$  Turbulenzmodell durchgeführt worden. Als Chemiemechanismus wurde bei der PDF-Rechnung ILDM-Chemie und bei der EDM-Rechnungen ein Zwei-Schritt-Mechanismus mit CO-Kinetik vorgegeben (Westbrook, 1981). Die Residuen der auskonvergierten Flamelet- und EDM-Lösungen lagen unter  $O < 1^{-4}$ , die der PDF-Rechnung bei  $O \sim 1^{-4}$ . Alle Berechnungen erfolgten auf einem AMD Opteron 64bit 2.6GHz mit 4GB Hauptspeicher und benötigten jeweils ca. 168 CPU Stunden.

Die im weiteren gezeigten Rechnungen und Modellvergleiche beziehen sich ausschließlich auf das Flammrohrmodell mit Brennerplenum.

### 6.4.3 Ergebnisse

Wie schon in den vorangegangenen Kapiteln soll auch für die Berechnung der Brennkammer eine Einteilung ins Borghi-Diagramm erfolgen (Bild 6.41).



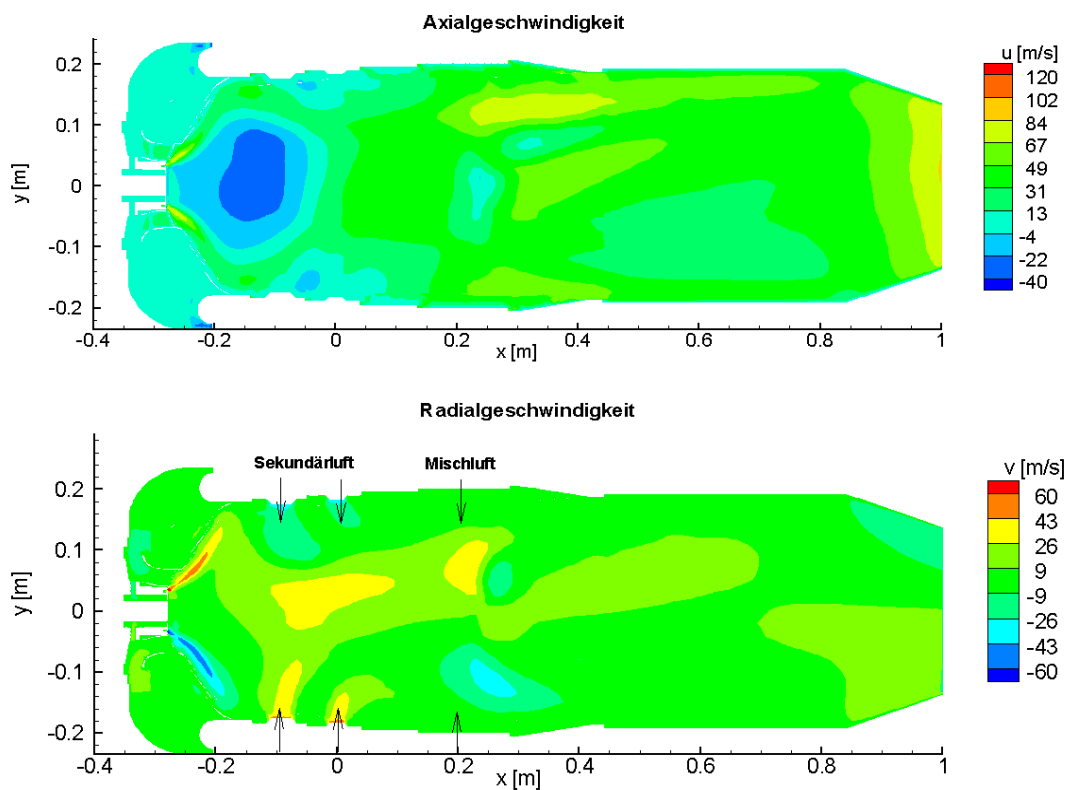
**Bild 6.41:** Einteilung der Verbrennungsbereiche im Borghi-Diagramm

Für eine Klassifizierung des Verbrennungsvorgangs werden die dimensionslosen Geschwindigkeits- und Längenmaße aus den Eigenschaften der Partikel, die sich entlang der Brennkammerachse befinden, entnommen. Da der Brennstoff und die Luft der Primärzone getrennt zugeführt werden, handelt es sich um eine nicht-vorgemischte Verbrennung. Bild 6.41 zeigt, dass eine Einteilung der Flamme in die klassischen Verbrennungsregime nicht möglich ist. Unter den gegebenen Randbedingungen befindet sich die Flamme im Bereich der gestörten und verbreiterten Flammen, wobei sich die höchste Punktdichte zwischen 10 und 40 auf der Geschwindigkeitsskalen und zwischen 3 und 200 auf der Längenskala befindet. Dieser Bereich liegt außerhalb des Flamelet-Bereichs, welcher sich unterhalb der Linie  $Ka=1$  befindet. Ist die Karlowitz Zahl größer als 1, können die kleinsten turbulenten Wirbel in die Flammenfront eindringen, was zur Verbreiterung der Flammenfront und zum lokalen Erlöschen führen kann. Eine weitere Erhöhung der Turbulenz führt zur Intensivierung der Mischung und im Vergleich dazu langsamen Reaktionsraten ( $Da < 1$ ). Der durch das Borghi-Diagramm charakterisierte Verbrennungsprozess zeigt eine starke Interaktion

zwischen turbulentem Strömungsfeld und Reaktionskinetik. Die Beschreibung derartiger Prozesse ist deterministisch nicht möglich und sollte idealerweise mit stochastischen Methoden erfolgen.

### 6.4.3.1 Vergleich der Mittelebene ( $z=0\text{m}$ )

Um einen ersten Überblick über das Strömungs- und Temperaturfeld zu erhalten, werden zunächst Geschwindigkeiten, Mischungsbruch und Temperatur in der  $x$ - $y$  Ebene bei  $z=0$  präsentiert. Alle Berechnungen erfolgen mit PDF-Verbrennungsmodell.

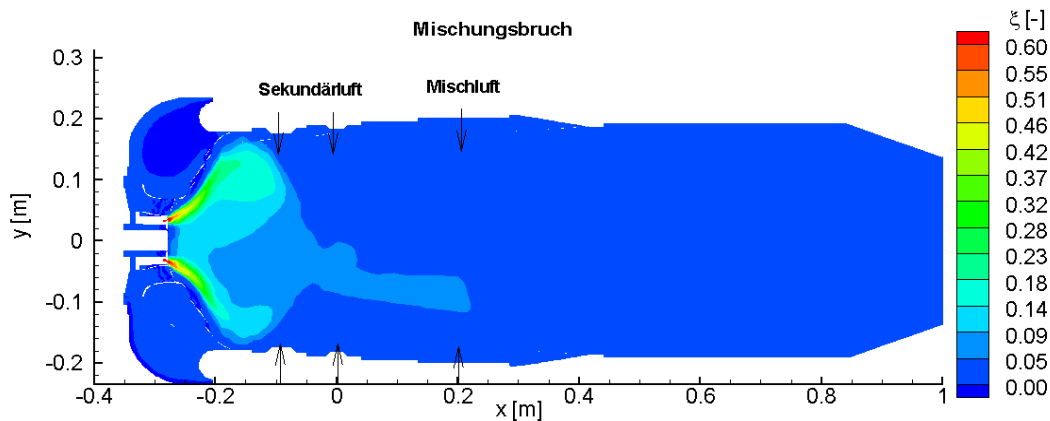


**Bild 6.42:** Berechnete Axial- und Radialgeschwindigkeiten in der Ebene  $z=0$

Bild 6.42 zeigt die berechneten Axial- und Radialgeschwindigkeiten. Zur besseren Orientierung sind in Bild 6.42 unten die eintretenden Sekundär- und Mischluftmassenströme gekennzeichnet. Deutlich erkennbar ist die ausgeprägte Rezirkulationszone bei den Axialgeschwindigkeiten in der Primärzone, hervorgerufen durch das Drallfeld und der damit verbundenen Druckabsenkung auf der Brennkammerachse. Im anschließenden Bereich der Sekundärzone wird das Fluid aufgrund der Wärmefreisetzung und der verringerten Dichte beschleunigt.

Die inhomogene Geschwindigkeitsverteilung ab  $x=0.2\text{m}$  folgt aus der radial einströmenden Mischluft. Eine weitere Beschleunigung erfährt das Fluid durch die Messdüse bei  $x=0.9\text{m}$ .

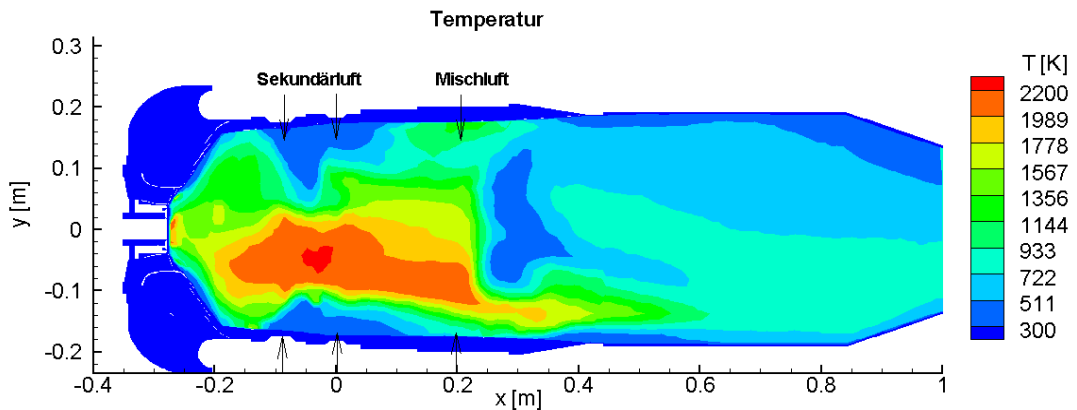
Die Darstellung der Radialgeschwindigkeiten (Bild 6.42 unten) zeigt eine durch den Drallerzeuger aufgeprägte Beschleunigung am Brenneraustritt. Weiterhin sichtbar ist das ungleiche Eindringverhalten der Sekundärluft, als ein Ergebnis der Brennkammerberechnung mit Gehäuse und Zulauf. Der Mischlufteintritt ist in der dargestellten Abbildung nicht erkennbar, da die Mischluftlöcher außerhalb der dargestellten Schnittebene liegen. Lediglich die Sekundärströmung im Bereich  $x=0.25\text{m}$ ,  $y=0.1\text{m}$  deutet auf die Zuströmung der oberen beiden Mischluftstrahlen hin.



**Bild 6.43:** Mischungsbruch in der Ebene  $z=0$

Bild 6.43 stellt den Mischungsbruch in der Ebene  $z=0$  dar. Die Verteilung des Mischungsbruchs resultiert aus den zuvor diskutierten Geschwindigkeitsfeldern. In der Primärzone tritt die höchste Mischungsbruchkonzentration auf, da sich hier die Rezirkulationszone befindet. Die ungleiche Verteilung folgt aus dem unterschiedlichen Eindringverhalten der Sekundärluft, hervorgerufen durch die radiale Luftzuführung in die Brennkammer (vgl. Bild 6.39). Während die obere Sekundärluft die Rezirkulation unterstützt und somit zu einer hohen Primärkonzentration führt, ist die untere Sekundärluft schwächer und entsprechend geringer ist auch die Konzentration in der unteren Primärzone. In der dargestellten Ebene liegt der Mischungsbruch in der Primärzone über dem stöchiometrischen Mischungsbruch von  $\xi_{St}=0.05$ . Dies deutet auf ein partiell fettes Gemisch mit

geringeren Temperaturen und hohen CO Konzentrationen hin. In der Sekundärzone ist ein Bereich mit nahezu stöchiometrischen Mischungsbruch erkennbar. Hier sind die höchsten Temperaturen zu erwarten.

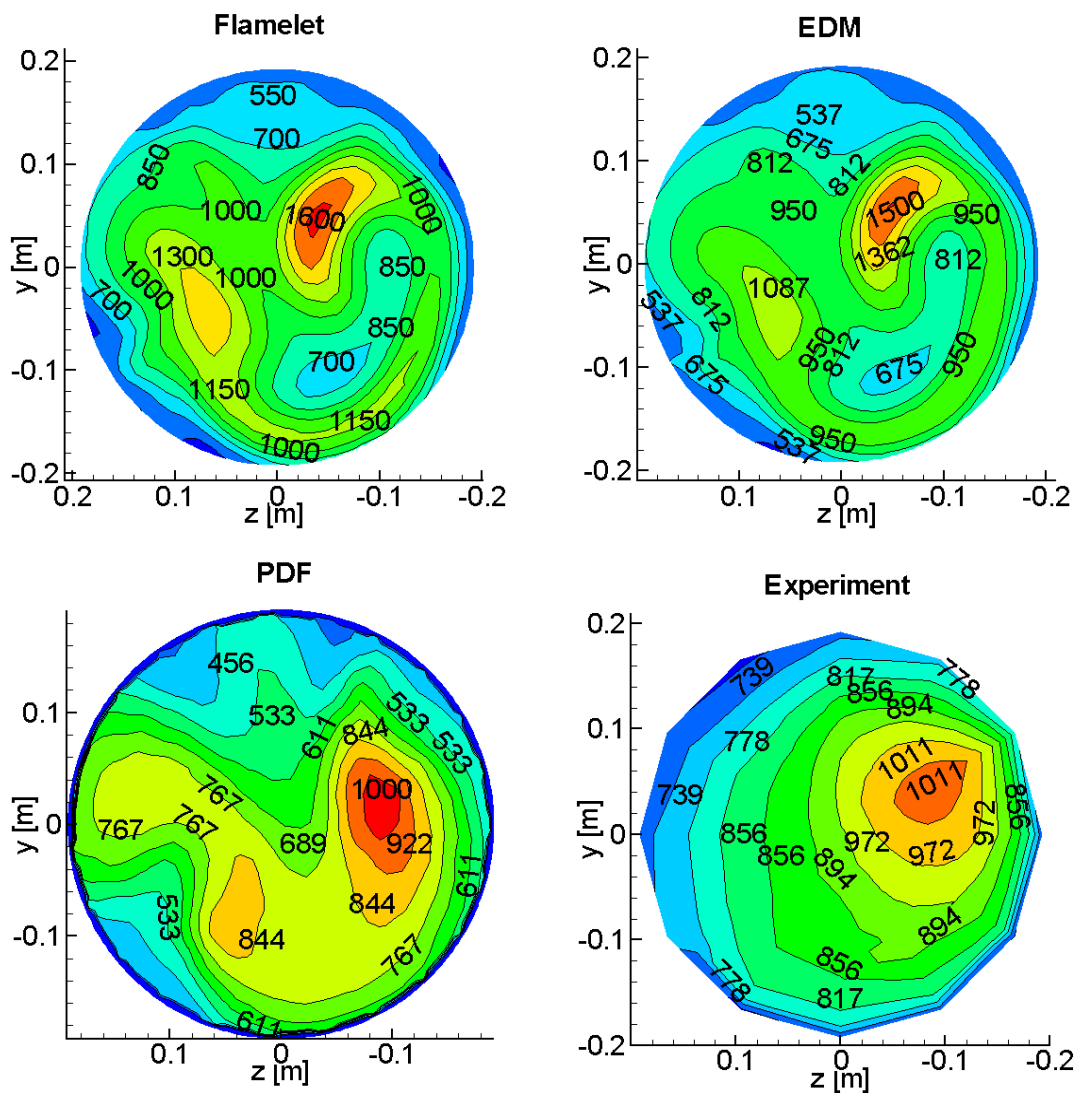


**Bild 6.44:** Temperatur in der Ebene  $z=0$

Die Verteilung des Mischungsbruchs bestimmt sowohl im Flamelet- als auch im PDF-Modell maßgeblich die Temperatur- und Speziesberechnung. Bild 6.44 zeigt die mittlere Temperatur bei Verwendung des PDF-Modells. Analog zur ungleichen Verteilung des Mischungsbruchs (Bild 6.43) in der Primärzone ist auch die Temperatur im oberen Bereich deutlich niedriger bei ca. 1500K, während der untere Teil Temperaturen von ca. 2000K aufweist. In der sich anschließenden Nachreaktionszone tritt ein breites Hochtemperaturgebiet mit ca. 2100K auf. Dieses ist durch die unsymmetrische Zuströmung der Sekundärluft, bedingt durch die ungleiche Druckverteilung umfangsseitig zwischen Gehäuse und Flammrohr, nach unten abgelenkt. Das Eintreten der Mischluft bei  $x=0,2\text{m}$  führt zu einer raschen Abkühlung und dem Herausbilden einer heißen Abgassträhne (unterer Bildbereich), als Folge der unsymmetrischen Zuströmung aus den 3 Mischluftlöchern. Im weiteren axialen Verlauf dreht sich dieser heiße Temperaturkern aufgrund des in positiver x-Achse wirkenden Drehimpulses in den oberen, rechten Bildausschnitt der Messebene (vgl. Bild 6.45).

#### 6.4.3.2 Vergleich der Messebene

Nachdem im vorherigen Abschnitt ein allgemeiner Überblick über die Strömungs- und Temperaturfelder erfolgte, soll nun ein Vergleich zwischen Rechnung und Experiment in der Messebene erfolgen.

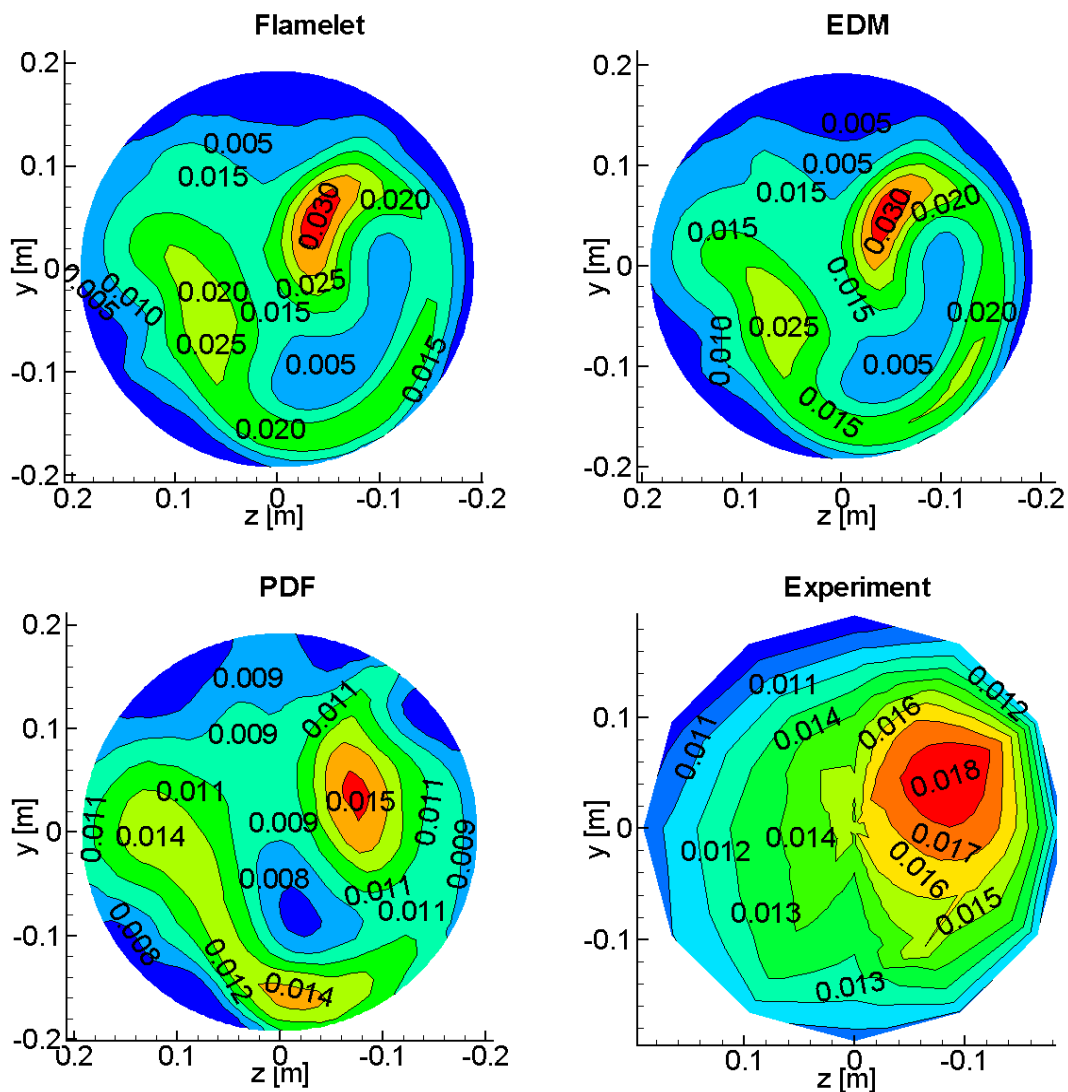


**Bild 6.45:** Temperaturvergleich in der Messebene,  $T$  in [K]

Bild 6.45 zeigt die Temperaturverteilung in der Messebene. Insgesamt ist die qualitative Übereinstimmung der einzelnen Verbrennungsmodelle mit dem Experiment hoch. Die Lage des Temperaturmaximums wird richtig wiedergegeben. Dies lässt auf eine hohe Übereinstimmung der berechneten Sekundärströmung in der Brennkammer und speziell in der Messebene schließen. Die insgesamt sehr inhomogene Temperaturverteilung ist eine Folge der ungleichen Luftzuführung über die 3 Mischluftlöcher. Die Überschätzung des Misch- und Kühlluftmassenstroms führt zur Unterschätzung der Temperatur in den wandnahen Bereichen.

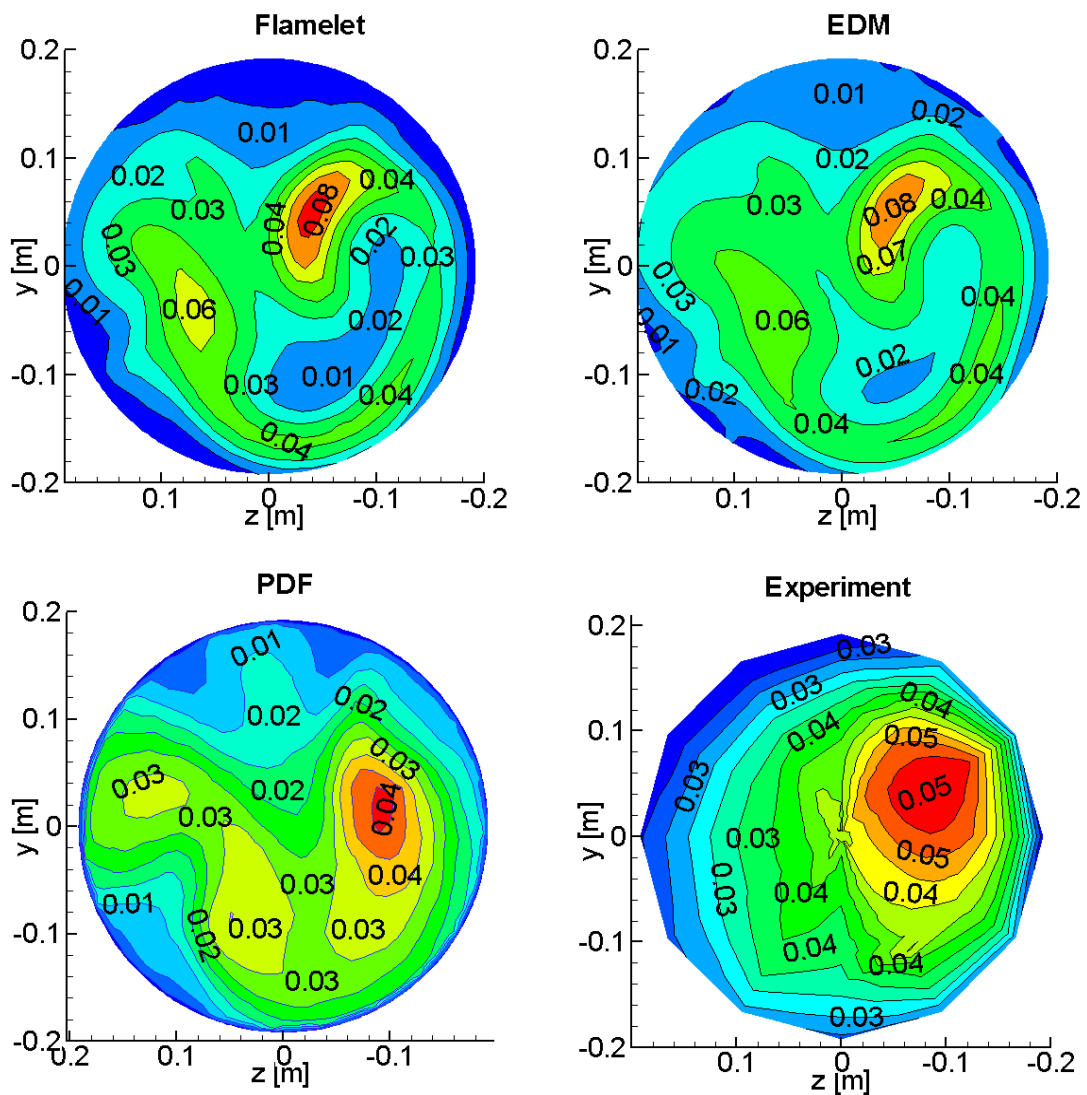
Im quantitativen Vergleich weichen das Flamelet- und das EDM- Modell mit ca. 1600K bzw. 1500K um 60% bzw. 50% von der gemessenen Temperatur ab, während der PDF-Ansatz das Temperaturmaximum gut wiedergibt. Hier zeigen sich die Vorteile der PDF-Formulierung, die für alle Bereiche des Borghi-Diagramms anwendbar ist. Eine Skalenseparation zwischen chemischer- und turbulenter- Zeitskala, welche eine fundamentale Voraussetzung für das Flamelet-Modell darstellt, ist für die hier untersuchte Flamme nicht in allen Bereichen erfüllt (vgl. Bild 6.41).

So ist nach (Peters, 1992) die Gültigkeitsvoraussetzung bei turbulenten Diffusionsflammen in den Einströmgebieten durch kleine turbulente Zeitskalen (intensive Mischung) und im Bereich der Flammenspitze durch sinkende Temperaturen (verlangsamte Reaktion) nicht gegeben. Vergleicht man die Simulationsergebnisse zwischen Flamelet- und PDF-Modell, so erklären sich auch unter diesen Gesichtspunkten die deutlichen Temperaturabweichungen im Bereich der Messebene. Wie schon bei der Berechnung der Freistrahlf Flamme F (vgl. Kapitel 6.2.4), kann das Flamelet-Modell Gebiete, die sich nahe der Verlöschgrenze befinden, nur unzureichend wiedergeben. Führt bei der Flamme F die hohe Anströmgeschwindigkeit (Flammenstreckung) zu einer partiellen Verlöschung, so sind hier im Bereich der Mischungszone bzw. der Messdüse die chemischen Zeitskalen aufgrund der langsamen Reaktionsraten größer als die Kolmogorov-Zeitskala. Dies führt zu einer geringeren Wärmefreisetzung.



**Bild 6.46:** Mischungsbruchvergleich in der Messebene

Vergleicht man im Bild 6.46 den Mischungsbruch, so ergibt sich auch hier eine deutliche Überschätzung beim Flamelet- und EDM-Modell. Während beide Modelle mit  $\xi=0.03$  den Messwert ( $\xi=0.018$ ) um über 60% überschätzen, liegt das PDF-Modell mit  $\xi=0.015$  ca. 15% unter der Messung. Dabei wurde der experimentelle Mischungsbruch über eine Kohlenstoffbilanz ( $Z_C$ ) bestimmt. Effekte durch differentielle Diffusion werden bei der Auswertung der Messung, wie auch bei der numerischen Berechnung, vernachlässigt. Experimentell sind vor allem in  $H_2/CO_2$  Flammen in fetten Bereichen größere Diskrepanzen durch differentielle Diffusion nachgewiesen worden, so dass die Fehler in der hier untersuchten  $CH_4$ /Luft Flamme als gering einzuschätzen sind.

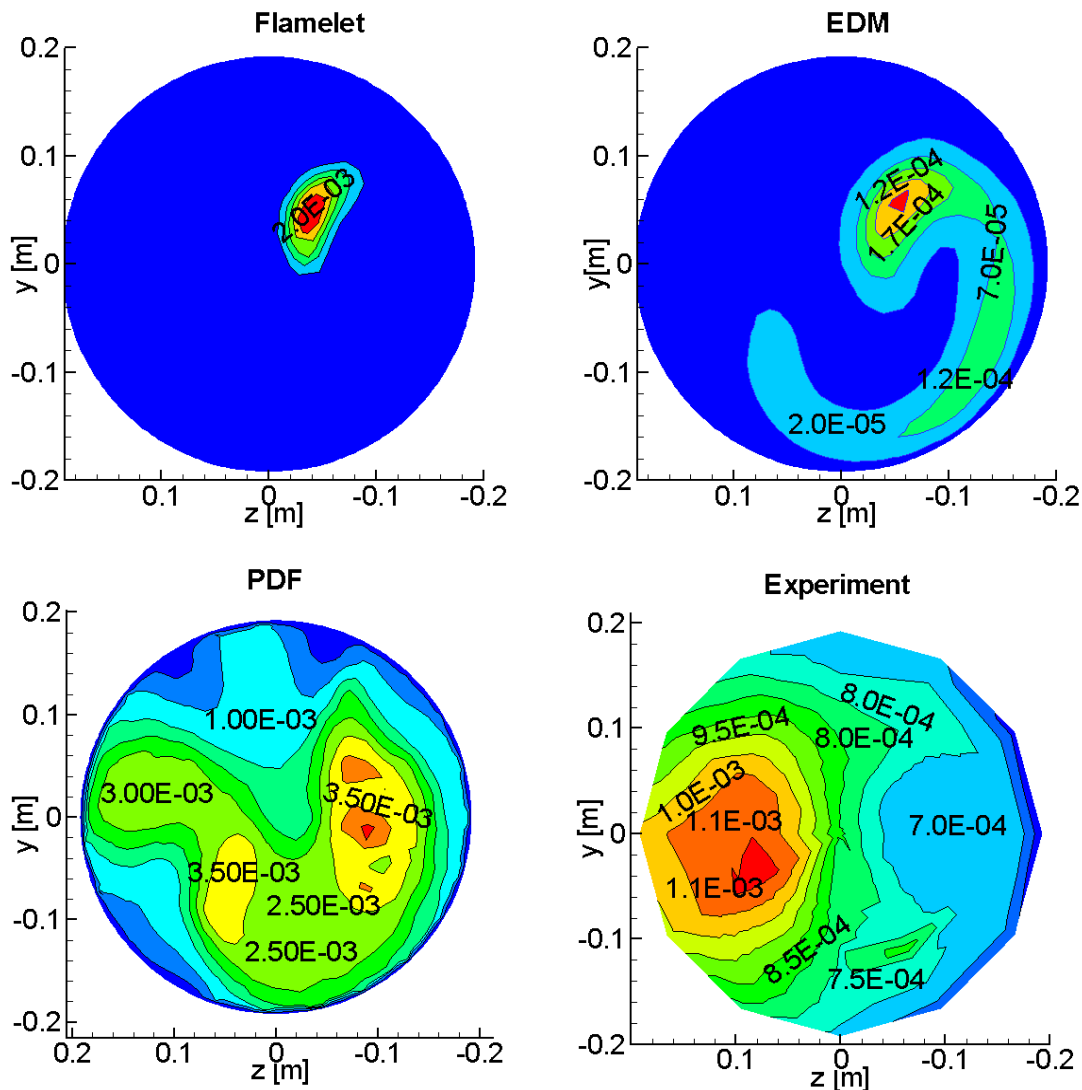


**Bild 6.47:**  $Y_{CO_2}$  in der Messebene

Die in Bild 6.47 dargestellte CO<sub>2</sub> Massenbruchverteilung zeigt wiederum eine deutliche Überschätzung bei Flamelet- und EDM-Modell. Die Verläufe sind insgesamt konsistent zur Temperatur- und Mischungsbruchverteilung. Das PDF-Modell unterschätzt ähnlich wie schon beim Mischungsbruch auch die CO<sub>2</sub> Massenbrüche.

Bild 6.48 zeigt die CO Massenbruchverteilung in der Messebene. Aufgrund der geringen Temperaturen treten im Experiment die höchsten CO Werte mit  $Y_{CO}=0.11$  bei ca.  $z=0.1\text{m}$  und  $y=0\text{m}$  auf. Diese hohen CO Anteile sind Folge eines schlechten Ausbrands, der durch die hier gewählten mageren Betriebsbedingungen auftritt. Die Flamelet- und EDM-Rechnungen können diesen

Trend nicht wiedergeben. Vielmehr resultiert das in den heißen Verbrennungsgebieten



**Bild 6.48:**  $Y_{CO}$  in der Messebene

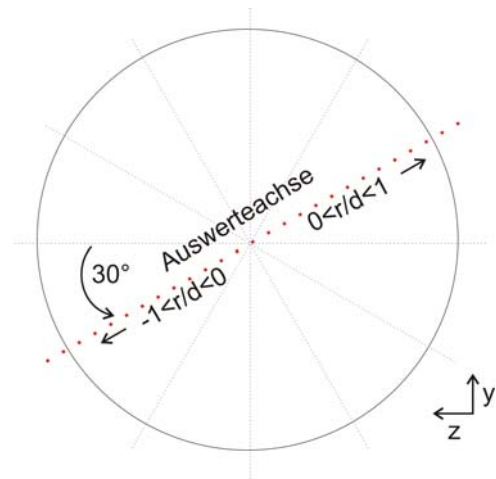
gebildete CO aus Dissoziationsgleichgewichtsreaktionen mit  $CO_2$ , welche bei ca. 1500K auftreten. Das PDF-Verbrennungsmodell gibt zwei Bereiche erhöhter CO-Konzentrationen wieder, wobei sich insgesamt eine deutliche Überschätzung zum Experiment zeigt. Zu einem ähnlichen Ergebnis kommt (Schmidt, 1996) bei der Berechnung laminarer Methan/Luft Flammen mit ILDM-Chemie unter mageren Bedingungen. In den Bereichen langsamer Reaktionskinetik und niedriger Temperatur zeigen sich die Anwendungsgrenzen der verwendeten ILDM-Chemie mit nur zwei Fortschrittsvariablen. Andererseits würde die Erwei-

terung der Kinetik auf eine dritte Fortschrittsvariable den Rechen- und Speicheraufwand für die ILDM-Tabellen derart erhöhen, dass ohne Parallelisierung die Simulation der Brennkammer nicht möglich wäre.

Die qualitativen Unterschiede zwischen PDF- und Flamelet- bzw. EDM-Modell verdeutlichen nochmals die Notwendigkeit zur Berücksichtigung der Turbulenz-Chemie-Interaktion. Während das einfache EDM-Modell mit der Annahme „gemischt=verbrannt“ ohne Berücksichtigung reaktionskinetischer Vorgänge nur eine CO Bildung im nahe stöchiometrischen Bereich wiedergeben kann, berechnet das PDF-Modell über die gesamte Messebene eine CO Verteilung. Auch das Flamelet-Modell kann CO Anteile ausschließlich in der Hochtemperaturzone wiedergeben, da nur hier die Gültigkeitsvoraussetzung einer schnellen Reaktionskinetik gegeben ist.

Abschließend zeigt Bild 6.50 einen quantitativen Vergleich zwischen Experiment und Flamelet- bzw. PDF-Verbrennungsmodell. Dabei wurden die entsprechenden Werte der in Bild 6.49 gezeigte Achse, die das experimentelle Temperaturmaximum und -minimum repräsentiert, entnommen. Entlang dieser Auswertechse traten die größten Abweichungen zum Experiment auf. Insgesamt

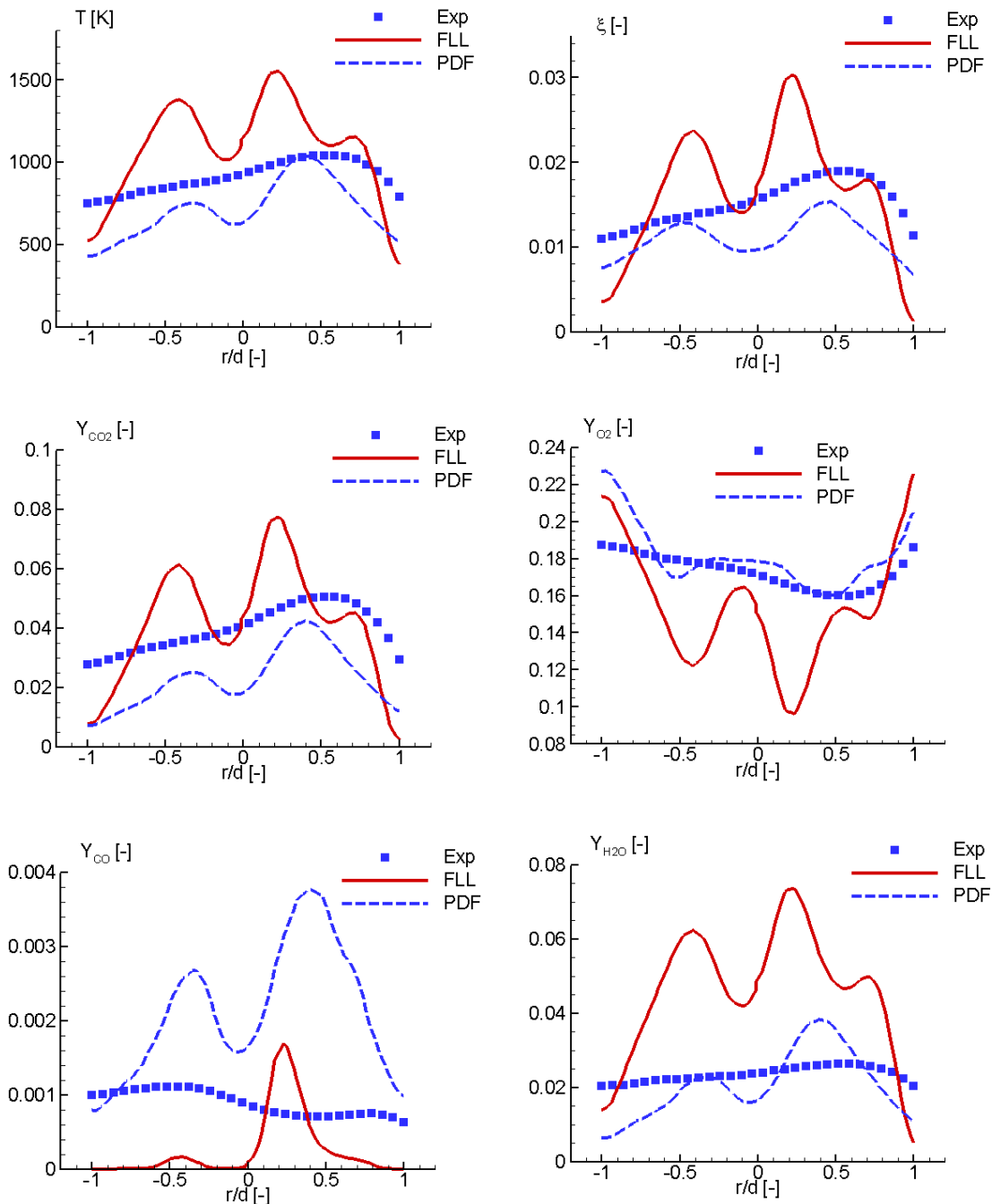
zeigt sich, dass das PDF-Modell die Temperatur, den Mischungsbruch, den Sauerstoff- und Wassermassenbruch zufriedenstellend wiedergeben kann, während der Kohlendioxidanteil deutlich unterschätzt wird. Die größten Diskrepanzen zum Experiment treten beim Kohlenmonoxid auf. Aufgrund der niedrigen Temperaturen in der Messdüse und der damit verbunden langsamen Reaktionsraten stößt die Beschreibung der Chemie mit nur zwei Fortschrittsvariablen in diesem Bereich an seine Grenzen. Die Probleme der ILDM im Niedertemperaturbereich versucht die Methode der Flamelet-Generated-Manifold (FGM) von (Oijen, 2002), eine Kombination aus Flamelet- und ILDM-Chemie, auszuglei-



**Bild 6.49:** Auswertechse für qualitativen Modellvergleich

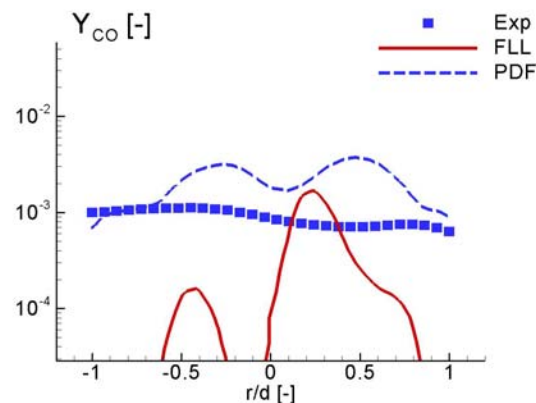
chen. Dabei wird der chemische Zustand in den Flamelets zur Konstruktion einer Manigfaltigkeit - ähnlich der ILDM - benutzt.

Die berechnete Temperaturabsenkung bei  $r/d=0$  im Bereich der Brennerachse deutet auf die Überschätzung der eingebrachten Mischluft bzw. der Kühlluftfilme hin. Das Flamelet-Modell kann die gemessenen Temperaturen und Spezies nur unzureichend wiedergeben.



**Bild 6.50:** Quantitativer Vergleich entlang der 30° Auswertachse (Bild 6.49)

Bei logarithmischer Darstellung der CO Verteilung (Bild 6.51) zeigt sich, dass das PDF-Modell die Größenordnung der CO Konzentration richtig wiedergibt, während beim Flamelet-Modell keine Übereinstimmung zum Experiment erkennbar ist.



**Bild 6.51:** Logarithmische Darstellung der CO Verteilung

#### 6.4.3.3 Fazit

Die PDF-Methode konnte erfolgreich angewandt werden, um eine industrielle Brennkammer zu simulieren. Im einzelnen zeigt sich:

- Die Temperaturen und Spezies werden vom PDF-Modell qualitativ richtig wiedergeben, wobei die experimentellen Werte quantitativ unterschätzt werden. Der Überschätzung des CO Massenbruchs in der Messebene zeigt die Anwendungsgrenzen der zweidimensionalen ILDM auf.
- Das Flamelet-Modell überschätzt das Temperaturmaximum um über 50% und ist deshalb nicht in der Lage die Wechselwirkung zwischen Turbulenz und Reaktion in der Mischzone/Messdüse richtig wiederzugeben. Gleiches gilt für das EDM-Modell.

Das  $k-\varepsilon$  Turbulenzmodell gibt das qualitative Strömungsverhalten wieder, während die Anwendung eines RSM-Turbulenzmodells z.T. unphysikalische Lösungen produzierte und daher nicht praktikabel war. Durchgeführte Rechnungen mit dem modifiziertem Curl-Mischungsmodell wiesen in allen Bereichen des Flammrohrs deutlich zu geringe Temperaturen auf.



## 7 Zusammenfassung und Ausblick

Nachdem Pope 1985 eine umfassende Beschreibung über den Einsatz der PDF-Monte-Carlo Methoden zur Berechnung turbulenter, reagierender Strömungen vorstellte, erfolgten bis zum jetzigen Zeitpunkt eine Vielzahl von Veröffentlichungen, die das hohe Potenzial für die Simulation reagierender Strömungen aufzeigten. Dabei beschränkten sich die Berechnungen fast ausschließlich auf zweidimensionale generische Flammentypen, wobei das Berechnungsprogramm oftmals nur für einfache, strukturierte Rechengitter ausgelegt ist.

In dieser Arbeit erfolgt die Anwendung der PDF-Methoden auf den praxisrelevanten Fall einer dreidimensionalen Brennkammerströmung. Dazu wird ein kommerzielles Finite-Volumen-Verfahren (ANSYS CFX 10.0), das den Einsatz flexibler, unstrukturierter Rechengitter erlaubt, mit einem Lagrangeschen PDF-Algorithmus gekoppelt. In Hinblick auf Rechengeschwindigkeit und Stabilität bzw. hohe Konvergenzraten wird ein skalares PDF-Verfahren eingesetzt. Die Beschreibung der Reaktionskinetik erfolgt mit Hilfe einer reduzierten ILDM-Chemie über die Fortschrittsvariablen  $\text{H}_2\text{O}$  und  $\text{CO}_2$  sowie des Mischungsbruchs. Die ILDM lag in tabellierter Form vor und führte somit zu einer Rechenzeitersparnis, die es erst ermöglichte brennkammerrelevante Strömungen zu simulieren. Der hybride Lösungsalgorithmus wurde zunächst auf zweidimensionale Freistrahlfammen und auf rezirkulierende, staukörperstabilisierte Flammen angewendet. Dabei sind unterschiedliche Mischungsmodelle (IEM, MC, EMST) und Schließungsmodelle für den turbulenten Transport (Gradienten-Diffusion und Gradienten-Transport) miteinander verglichen worden.

Bei der Untersuchung unterschiedlicher Teilmodelle, erschweren eine Vielzahl von Wechselwirkung zwischen turbulenten Strömungsfeld und Reaktionskinetik die exakte Quantifizierung von einzelnen Abweichungen zum Experiment. Daher muss in Kapitel 6 oftmals auf eine phänomenologische Argumentation zurückgegriffen werden.

Die nach Masri definierte Freistrahlf Flamme C zeigte im Brennernahbereich bei  $x/d=7.5$  deutliche Abweichungen zum Experiment und zur Flamelet-Lösung. Da ILDM- und ein Fünf-Schritt-Chemimechanismus ähnliche Abweichungen produzierten, die Flamelet-Lösung jedoch sehr gute Übereinstimmungen zeigte, wurde die Modellierung der turbulenten Mischung näher untersucht. Im Vergleich zum IEM-Modell führten der Einsatz vom EMST- und MC-Modell zu einer Temperaturerhöhung um 6% im Vergleich zum IEM-Modell. Die Abweichungen zum Experiment wurden indessen kaum reduziert. Das MC-Modell verschlechterte sogar deutlich die Vorhersage stromab der Flamme zugunsten von IEM- und EMST-Modell. Zwar bietet das EMST-Mischungsmodell insgesamt leichte Vorteile gegenüber dem IEM-Modell, allerdings sind die Unterschiede nur gering. Trotz neuer aufwendiger Modelle, wie dem EMST Ansatz, ist die Modellierung der turbulenten Mischung nach wie vor unbefriedigend und ungelöst. Dies zeigt auch die sensitive Abhängigkeit von einem integralen turbulenten Zeitmass  $t_{\phi}$ . So führt die Erhöhung von  $c_{\phi}$ , und damit die Erhöhung der turbulenten Mischung, zur Erhöhung der Temperatur bzw. entsprechend die Erniedrigung zur Absenkung der Temperatur. Wie an der Flamme C gezeigt, werden Schwächen in der Ebene  $x/d=7.5$  behoben, allerdings führt die globale Temperaturerhöhung zur Verschlechterung der hinteren Ebenen. Ungeachtet der zuvor diskutierten Schwächen, erwies sich das PDF-Modell bei der Flamme C gegenüber dem Flamelet- und dem EDM-Modell, vor allem in den stromab gelegenen Ebenen, als deutlich überlegen.

Bei der Simulation der Freistrahlf Flamme F, die sich lokal nahe der Verlöschgrenze befand, zeigte sich das hohe Potential der Wahrscheinlichkeitsdichtemethoden. Während das Flamelet- und EDM-Modell in der Ebene  $x/d=15$  Lösungen nahe dem chemischen Gleichgewicht produzierte, konnte das PDF-Modell die experimentell gemessenen Zustände nahe der Verlöschungsgrenze gut wiedergeben. Wie schon bei der Flamme C zeigten sich auch in den hinteren Ebene deutliche Vorteile zugunsten der PDF-Formulierung. Die Abweichungen im Bereich der Symmetrieachse werden auf Unzulänglichkeiten in der Strömungsberechnung zurückgeführt. Für die durchgeführten Mischungsuntersuchungen gelten die zuvor bei der Flamme C gemachten Aussagen.

Die Verwendung des Gradienten-Transport-Ansatzes, der bisher kaum (Kollmann, 1991) eingesetzt und in dieser Arbeit näher quantifiziert wurde, erwies sich immer dann vorteilhaft, wenn in Verbindung mit einem RSM-Modell die Strömungsvorhersage verbessert wurde. So war insbesondere bei der inerten Stauscheibenumströmung das  $k$ - $\varepsilon$  Turbulenzmodell der Reynolds-Stress-Formulierung überlegen, wodurch die Berechnung mit GD-Ansatz in diesem Fall eine höhere Übereinstimmung erzielte. Problematisch sind oftmals auch die numerischen Stabilitätsprobleme der RSM-Modelle, die den Einsatz bei der reagierenden Stauscheibenumströmung und der Brennkammerströmung verhinderten.

Das Hauptziel dieser Arbeit, die Berechnung einer industriellen nicht-vorgemischten Brennkammer mit PDF-Methoden, erfolgte im Abschnitt 6.4. Zwar lagen experimentelle Vergleichswerte nur in beschränkter Form im Bereich der Messdüse vor, allerdings erwies sich hier der PDF-Ansatz den alternativen Verbrennungsmodellen als deutlich überlegen. Bedenkt man die Komplexität der untersuchten Brennkammer, mit diversen Sekundär-, Mischluft- und Kühlluft-einlässen, so sind die erzielten Ergebnisse als durchaus gut zu bewerten. Bei entsprechender Parallelisierung des Programmalgorithmusses ist eine industrieller Einsatz von PDF-Methoden durchaus vorstellbar, zumal die Rechenzeiten es in naher Zukunft nicht erlauben werden, eine komplette Brennkammer mit LES-Methoden zu berechnen.

Unabhängig von der immer noch ungelösten Mischungsproblematik in PDF-Methoden, zeigten gerade die Untersuchungen der generischen Flammen, dass die Unzulänglichkeiten in der turbulenten Strömungsbeschreibung für einen grossteil der Abweichungen bei der Temperatur- und Speziesberechnung verantwortlich sind. Dabei müssen meistens nur kleine, lokale Bereiche, wie z.B. der Brennernahbereich oder Rezirkulationsgebiete, besser aufgelöst werden. In diesem Zusammenhang versprechen neue hybride Berechnungsmethoden zwischen LES und RANS oder das von (Menter und Egorov, 2005) entwickelte SAS-Modell (Scale-Adaptive Simulation) als Erweiterung der URANS-Methode eine verbesserte Strömungsauflösung, welche in Verbindung mit PDF-

Methoden die Vorhersagen in turbulenten, reagierenden Strömung nochmals verbessern sollten.

# Anhang

## A PDF-Transportgleichung

### A1 Herleitung

Zur Herleitung der PDF-Transportgleichung soll hier der erstmals von (Lundgren, 1996) vorgeschlagene Weg über eine momentane Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion erfolgen. Ziel ist es, die momentane Teilchenerhaltungsgleichung der Spezies  $\varphi_\alpha$  (3.10) in den Ausdruck der momentanen PDF (4.20) einzusetzen, um dann die gemittelte PDF-Transportgleichung abzuleiten.

Für die momentane PDF:

$$\hat{f}(\boldsymbol{\psi}; \mathbf{x}, t) = \prod_{\alpha=1}^{\sigma} \delta(\varphi_\alpha - \psi_\alpha) , \quad (\text{A.1})$$

folgt nach zeitlicher Differenzierung:

$$\frac{\partial \hat{f}}{\partial t} = - \sum_{\alpha=1}^{\sigma} \frac{\partial \delta(\varphi_\alpha - \psi_\alpha)}{\partial \psi_\alpha} \frac{\partial \varphi_\alpha}{\partial t} \prod_{\substack{\beta=1 \\ \beta \neq \alpha}}^{\sigma} \delta(\varphi_\beta - \psi_\beta) , \quad (\text{A.2})$$

wobei von der Beziehung:

$$\frac{\partial \delta(\varphi_\alpha - \psi_\alpha)}{\partial \varphi_\alpha} = - \frac{\partial \delta(\varphi_\alpha - \psi_\alpha)}{\partial \psi_\alpha} , \quad (\text{A.3})$$

gebrauch gemacht wurde, da eine Änderung von  $\varphi$  in  $d\varphi$  gleich der Änderung von  $\psi$  in  $d\psi = -d\varphi$  ist. Die Zusammenfassung von (A.2) unter Berücksichtigung von (A.1) ergibt die Beziehung (4.20):

$$\frac{\partial \hat{f}_\varphi}{\partial t} = - \sum_{\alpha=1}^{\sigma} \frac{\partial \varphi_\alpha}{\partial t} \frac{\partial \hat{f}_\varphi}{\partial \psi_\alpha} = - \sum_{\alpha=1}^{\sigma} \frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} \left( \frac{\partial \varphi_\alpha}{\partial t} \hat{f}_\varphi \right) , \quad (\text{A.4})$$

wobei letzteres aus der Unabhängigkeit zwischen  $\partial \varphi_\alpha / \partial t$  und  $\psi_\alpha$  folgt. Gleichung (A.4) mit  $\rho(\varphi)$  multipliziert und einsetzen von (3.10) ergibt:

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial \hat{f}_\varphi}{\partial t} = & - \sum_{\alpha=1}^{\sigma} \frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} \left( -\rho u_i \frac{\partial \varphi_\alpha}{\partial x_i} \hat{f}_\varphi \right) - \sum_{\alpha=1}^{\sigma} \frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} \left( \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \rho D \frac{\partial \varphi_\alpha}{\partial x_i} \right) \hat{f}_\varphi \right) \\ & - \sum_{\alpha=1}^{\sigma} \frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} \left( \rho S_\alpha \hat{f}_\varphi \right) \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

Der Konvektionsterm kann analog zu (A.4) (Ableitung nach  $x_i$  statt  $t$ ):

$$\sum_{\alpha=1}^{\sigma} \frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} \left( -\rho u_i \frac{\partial \varphi_\alpha}{\partial x_i} \hat{f}_\varphi \right) = \rho u_i \frac{\partial \hat{f}_\varphi}{\partial x_i}, \quad (\text{A.6})$$

umgeformt werden. Abschließen wird (A.5) gemittelt. Dazu kann mit der Formulierung der bedingten Wahrscheinlichkeiten nach (4.11) folgende Beziehung abgeleitet werden (vgl. auch Pope, 1986):

$$\langle \rho Q \hat{f} \rangle = \langle \rho \rangle \langle Q | \boldsymbol{\varphi} = \boldsymbol{\psi} \rangle \tilde{f}(\boldsymbol{\psi}). \quad (\text{A.7})$$

Somit lautet die gemittelte PDF-Transportgleichung:

$$\begin{aligned} \langle \rho \rangle \frac{\partial \tilde{f}_\varphi}{\partial t} + \langle \rho \rangle \tilde{u}_i \frac{\partial \tilde{f}_\varphi}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \langle \rho \rangle \langle u_i'' | \boldsymbol{\varphi} = \boldsymbol{\psi} \rangle \tilde{f}_\varphi \right) = \\ - \frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} \left( \left\langle \rho D \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \frac{\partial \varphi_\alpha}{\partial x_i} \right) \middle| \boldsymbol{\varphi} = \boldsymbol{\psi} \right\rangle \tilde{f}_\varphi \right) - \langle \rho \rangle \frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} \left( S_\alpha \tilde{f}_\varphi \right), \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

wobei

$$\langle S_\alpha(\boldsymbol{\varphi}) | \boldsymbol{\varphi} = \boldsymbol{\psi} \rangle = S_\alpha(\boldsymbol{\psi}), \quad S_\alpha = f(\boldsymbol{\varphi}) \quad (\text{A.9})$$

und

$$\langle \tilde{u}_i | \boldsymbol{\varphi} = \boldsymbol{\psi} \rangle = \tilde{u}_i, \quad \tilde{u}_i \neq f(\boldsymbol{\varphi}) \quad (\text{A.10})$$

gilt.

## A2 Äquivalente Darstellung des molekularen Mischungsterms

Es soll nun der molekularen Mischungsterm aus (A.5) in die häufig benutzte Form von (4.22) überführt werden. Vertauschen der Differentiale und Anwendung der Produktregel führt auf:

$$\sum_{\alpha=1}^{\sigma} \left( \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \rho D \frac{\partial \varphi_\alpha}{\partial x_i} \right) \frac{\partial \hat{f}_\varphi}{\partial \psi_\alpha} \right) = \sum_{\alpha=1}^{\sigma} \left( \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \rho D \frac{\partial \varphi_\alpha}{\partial x_i} \frac{\partial \hat{f}_\varphi}{\partial \psi_\alpha} \right) \right) - \sum_{\alpha=1}^{\sigma} \left( \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \frac{\partial \hat{f}_\varphi}{\partial \psi_\alpha} \right) \rho D \frac{\partial \varphi_\alpha}{\partial x_i} \right). \quad (\text{A.11})$$

Der 1. Summand von (A.11) kann entsprechend mit (A.4) zu:

$$\sum_{\alpha=1}^{\sigma} \left( \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \rho D \frac{\partial \varphi_{\alpha}}{\partial x_i} \frac{\partial \hat{f}_{\varphi}}{\partial \psi_{\alpha}} \right) \right) = - \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \rho D \frac{\partial \hat{f}_{\varphi}}{\partial x_i} \right) \quad (\text{A.12})$$

umgeformt werden. Die Vereinfachung des 2. Summanden von (A.11) führt durch vertauschen der Differentiale und entsprechender Anwendung von (A.4) auf:

$$- \sum_{\alpha=1}^{\sigma} \left( \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \frac{\partial \hat{f}_{\varphi}}{\partial \psi_{\alpha}} \right) \rho D \frac{\partial \varphi_{\alpha}}{\partial x_i} \right) = \sum_{\alpha=1}^{\sigma} \sum_{\beta=1}^{\sigma} \left( \frac{\partial}{\partial \psi_{\alpha}} \frac{\partial}{\partial \psi_{\beta}} \left( \rho D \frac{\partial \varphi_{\alpha}}{\partial x_i} \frac{\partial \varphi_{\beta}}{\partial x_i} \right) \hat{f}_{\varphi} \right). \quad (\text{A.13})$$

Zusammenfassen der Teilergebnisse und Mittelung unter Beachtung von (A.7) führt auf die Form (4.22):

$$\begin{aligned} & \sum_{\alpha=1}^{\sigma} \frac{\partial}{\partial \psi_{\alpha}} \left( \left\langle \rho D \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \frac{\partial \varphi_{\alpha}}{\partial x_i} \right) \middle| \boldsymbol{\varphi} = \boldsymbol{\psi} \right\rangle \tilde{f} \right) = \\ & - \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \langle \rho \rangle D \frac{\partial \tilde{f}}{\partial x_i} \right) + \sum_{\alpha=1}^{\sigma} \sum_{\beta=1}^{\sigma} \frac{\partial}{\partial \psi_{\alpha}} \frac{\partial}{\partial \psi_{\beta}} \left( \left\langle \rho D \frac{\partial \varphi_{\alpha}}{\partial x_i} \frac{\partial \varphi_{\beta}}{\partial x_i} \middle| \boldsymbol{\varphi} = \boldsymbol{\psi} \right\rangle \tilde{f} \right) \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

### A3 Zusammenhang zwischen Lagrange-PDF $f_L$ und MDF $\mathcal{F}$

Im Folgenden soll der Zusammenhang zwischen der Lagrange-PDF, hergeleitet aus der Fokker-Planck-Gleichung bzw. aus der momentanen PDF und der Massendichtefunktion (MDF) aufgezeigt werden, um die Äquivalenz zwischen stochastischen und fluiden System zu verdeutlichen.

Bei Strömungen mit variabler Dichte muss statt der PDF  $f(\boldsymbol{\psi}; x, t)$  die sogenannte MDF  $\mathcal{F}(\boldsymbol{\psi}; x, t) = \rho(\boldsymbol{\psi})f(\boldsymbol{\psi}; x, t)$  gelöst werden. Dabei gilt:

$$\int \mathcal{F}(\boldsymbol{\psi}; \mathbf{x}, t) d\boldsymbol{\psi} = \langle \rho(\mathbf{x}, t) \rangle. \quad (\text{A.15})$$

Von zentraler Bedeutung ist die Darstellung der MDF über die konditionierte Lagrange-PDF (vgl. Pope, 1986):

$$\mathcal{F}(\boldsymbol{\psi}, \mathbf{x}; t) = \iint f_L(\boldsymbol{\psi}, \mathbf{x}; t | \boldsymbol{\psi}_0, \mathbf{x}_0) \cdot \mathcal{F}(\boldsymbol{\psi}_0, \mathbf{x}_0; t_0) d\boldsymbol{\psi}_0 d\mathbf{x}_0, \quad (\text{A.16})$$

wobei  $f_L$  auch als Übergangswahrscheinlichkeit für ein Ereignis zum Zeitpunkt  $t$ , das durch den Übergang zum Zeitpunkt  $t_0$  gewichtet mit allen möglichen

Wahrscheinlichkeiten bei  $t_0$  ( $F(\boldsymbol{\psi}_0, \mathbf{x}_0; t_0)$ ) zustande kommt, bezeichnet wird. Für die Gleichheit zwischen stochastischen und physikalischen System muss gelten:

$$F(\boldsymbol{\psi}, \mathbf{x}; t) = F^*(\boldsymbol{\psi}, \mathbf{x}; t) \quad (\text{A.17})$$

Zeitliche Differenzierung von (A.16) unter Beachtung von (A.17) und der Beziehung (4.17) führt auf:

$$\begin{aligned} \frac{\partial F^*}{\partial t} = & \iint \left\{ -\frac{\partial}{\partial x_i} \left[ \langle U_i | \mathbf{x}_0, \boldsymbol{\psi}_0 \rangle f_L^*(\boldsymbol{\psi}, \mathbf{x}; t | \boldsymbol{\psi}_0, \mathbf{x}_0) \right] \right. \\ & \left. - \frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} \left[ \langle \theta_\alpha | \mathbf{x}_0, \boldsymbol{\psi}_0 \rangle f_L^*(\boldsymbol{\psi}, \mathbf{x}; t | \boldsymbol{\psi}_0, \mathbf{x}_0) \right] \right\} F^*(\boldsymbol{\psi}_0, \mathbf{x}_0; t_0) d\boldsymbol{\psi}_0 d\mathbf{x}_0 \end{aligned} \quad (\text{A.18})$$

wobei sich die konditionierte PDF  $f^*(\boldsymbol{\psi}, \mathbf{x}; t | \boldsymbol{\psi}_0, \mathbf{x}_0)$  aus (4.17) durch entsprechende Wahl der Anfangsbedingungen ergibt:

$$f^*(\boldsymbol{\psi}, \mathbf{x}; t_0) = \delta(\boldsymbol{\psi} - \boldsymbol{\psi}_0) \cdot \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) . \quad (\text{A.19})$$

Da die Ableitungen in (A.18) unabhängig von  $d\boldsymbol{\psi}_0$  und  $d\mathbf{x}_0$  sind, können sie vor das Integral geschrieben werden. Weiterhin gilt analog zur momentanen PDF (A.7) für die MDF bei Multiplikation mit einer beliebigen Funktion  $Q(\mathbf{x}, t)$ :

$$\langle Q \hat{F} \rangle = \langle Q \rho(\boldsymbol{\psi}) \hat{f}(\boldsymbol{\psi}) \rangle = \langle Q(\mathbf{x}, t) | \boldsymbol{\varphi} = \boldsymbol{\psi} \rangle F(\boldsymbol{\psi}, \mathbf{x}; t) \quad (\text{A.20})$$

Andererseits ist (vgl. Pope, 1986):

$$\langle Q \hat{F} \rangle = \iint \langle Q | \mathbf{x}_0, \boldsymbol{\psi}_0 \rangle f_L(\boldsymbol{\psi}, \mathbf{x}; t | \boldsymbol{\psi}_0, \mathbf{x}_0) \cdot F(\boldsymbol{\psi}_0, \mathbf{x}_0; t_0) d\boldsymbol{\psi}_0 d\mathbf{x}_0 . \quad (\text{A.21})$$

Der Vergleich von (A.20) und (A.21) zeigt:

$$\langle Q(\mathbf{x}, t) | \boldsymbol{\varphi} = \boldsymbol{\psi} \rangle F(\boldsymbol{\psi}, \mathbf{x}; t) = \iint \langle Q | \mathbf{x}_0, \boldsymbol{\psi}_0 \rangle f_L(\boldsymbol{\psi}, \mathbf{x}; t | \boldsymbol{\psi}_0, \mathbf{x}_0) F(\boldsymbol{\psi}_0, \mathbf{x}_0; t_0) d\boldsymbol{\psi}_0 d\mathbf{x}_0 \quad (\text{A.22})$$

Zusammenfassen der Teilergebnisse und Anwendung auf (A.18) führt zu:

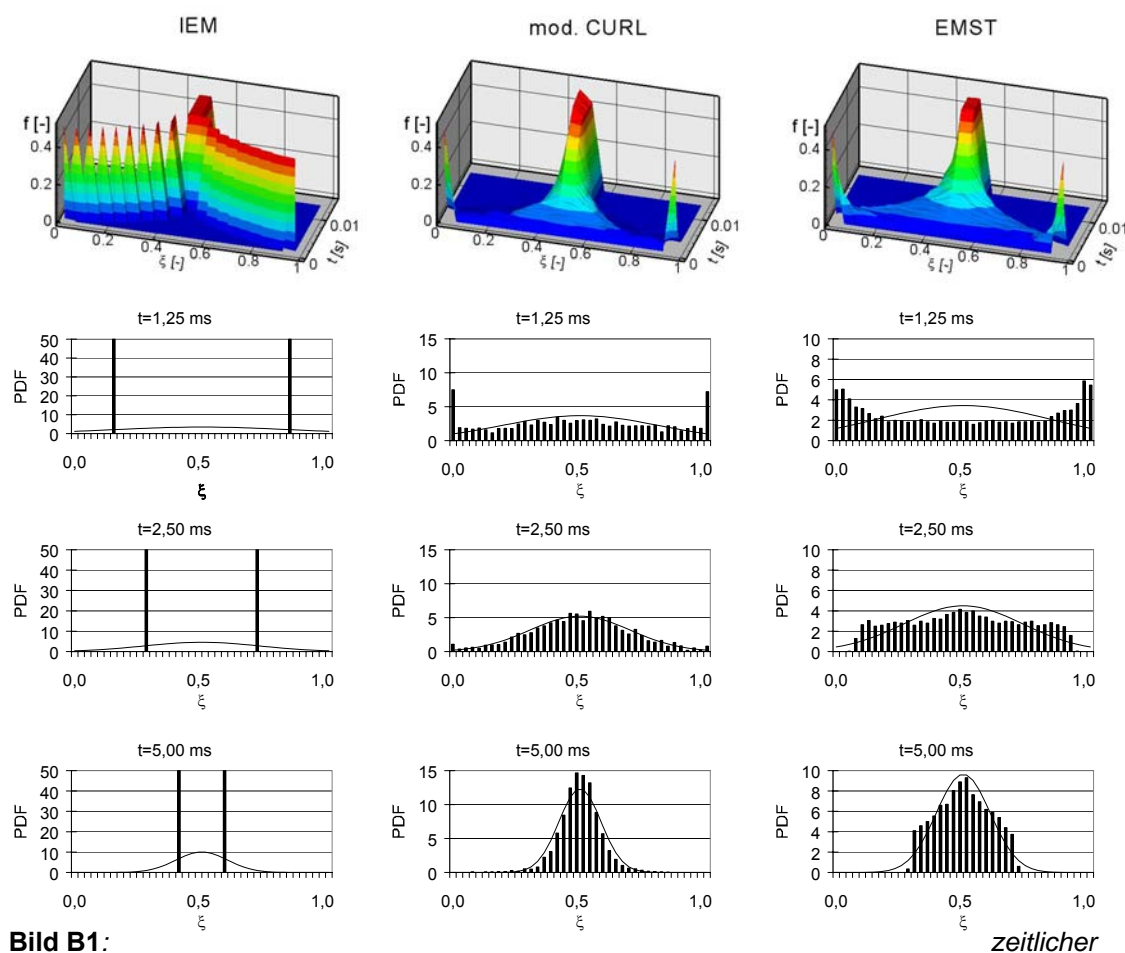
$$\frac{\partial F^*(\boldsymbol{\psi}, \mathbf{x}; t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x_i} \left[ \langle U_i | \boldsymbol{\psi} \rangle F^*(\boldsymbol{\psi}, \mathbf{x}; t) \right] - \frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} \left[ \langle \theta_\alpha | \boldsymbol{\psi} \rangle F^*(\boldsymbol{\psi}, \mathbf{x}; t) \right] \quad (\text{A.23})$$

Somit kann die aus dem stochastischen System abgeleitete Entwicklungsgleichung (4.17) für die Lagrange PDF  $f^*(\boldsymbol{\psi}, \mathbf{x}; t)$  in die äquivalente Gleichung der

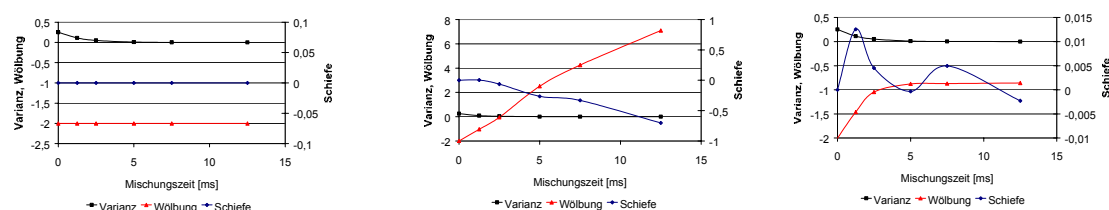
MDF (A.23) überführt werden, die wiederum das physikalische System über (A.17) beschreibt.

## B Vergleich von Mischungsmodellen

In Ergänzung zum Kapitel 4.5 sollen der zeitliche Verlauf und die Varianz, die Schiefe und die Wölbung von IEM-, modifiziertem Curl- und EMST-Modell gegenübergestellt werden. Ausgangspunkt bildet eine Doppel-Delta-Anfangsverteilung  $f(\psi;0) = 0.5(\delta(\psi) + \delta(\psi - 1))$  von 2000 stochastischen Partikeln mit  $t_i = 3 \cdot 10^{-3}$ .



**Bild B1:** Verlauf der PDF bei reiner Mischung (durchgezogene Linie entspricht einer Gaußverteilung)



**Bild B.2:** zeitlicher Verlauf von Varianz, Schiefe und Wölbung

## Literaturverzeichnis

- Allievi, A., Bermejo, R.: A Generalized Particle Search-Locate Algorithm for Arbitrary Grids. In: Journal of Physics, Vol. 132 (1997), pp. 157-166.
- ANSYS CFX 10.0: Manual. ANSYS, Inc. (2005).
- Barlow, R.S., Frank, J.H.: Effects of Turbulence on Species Mass Fractions in Methane/Air Jet Flames. In: Proc. Comb. Inst., Vol. 27 (1998), pp. 1087.
- Barlow, R.S., Frank, J.H.: Piloted CH<sub>4</sub>/Air Flames C,D,E,F – Release 2.0 [online]. erhältlich im Internet unter: <http://www.ca.sandia.gov/TNF> [Stand 07.10.06].
- Becker, H., Monkhouse, P.B., Wolfrum, J., Cant, R.S., Bray, K.N.C., Maly, R., Pfister, W., Stahl, G., Warnatz, J.: Investigation of Extinction in Unsteady Flames in Turbulent Combustion by 2D-LIF of OH Radicals and Flamelets Analysis. In: Proc. Comb. Inst., Vol. 23 (1991), pp. 817.
- Bender., R.: Modellierung der Koppelung von chemischer Reaktion und turbulenter Mischung bei turbulenten Vormischflammen. Dissertation, Universität Stuttgart, (2003).
- Blasenbrey, T.: Entwicklung und Implementierung automatisch reduzierter Reaktionsmechanismen für die Verbrennung von Kohlenwasserstoffen. Dissertation, Universität Stuttgart, (2000).
- Bluff-Body Flows & Flame Database [online]. erhältlich im Internet unter: [http://www.aeromech.usyd.edu.au/thermofluids/main\\_frame.htm](http://www.aeromech.usyd.edu.au/thermofluids/main_frame.htm).
- Borghini, R.: Turbulent Combustion Modelling. In: Prog. Energy Combust. Sci., Vol. 14 (1988), pp. 245-292.
- Burke, S.P., Schumann, T.E.W.: Diffusion Flames. In: 1<sup>th</sup> Symposium (International) on Combustion/The Combustion Institute, (1928), pp. 2-11.
- Chen, J.Y., Kollmann, W.: PDSF Modeling of Chemical Nonequilibrium Effects in Turbulent Nonpremixed Hydrocarbon Flames. In: 22<sup>th</sup> Symposium (International) on Combustion/The Combustion Institute, (1988), pp. 645-653.

- Chen, J.Y., Mallampalli, H.P., Fletcher, T.H.: Evaluation of CH<sub>4</sub>/NO<sub>x</sub> Global Mechanisms Used for Modeling Lean Premixed Turbulent Combustion of Natural Gas [online]. (1996), erhältlich im Internet unter: <http://www2.et.byu.edu/~tom/Papers/Hemant-WSS96/WSS.html>.
- Curl, R.L.: Dispers phase mixing: I. Theory and effects in simple reactors. In: AIChE Journal, Vol. 9 (1963), pp175-181.
- Daly, B.J., Harlow, F.H.: Transport Equations in Turbulence. In: Physics of Fluids, Vol. 13 (1970), pp. 2634-2649.
- Dally, B.B., Masri, A.R., Barlow, R.S., Fiechtner, G.J.: Instantaneous and Mean Compositional Structure of Bluff-Body Stabilized Nonpremixed Flames. In: Combustion and Flame, Vol. 114 (1998), pp. 119-148.
- Dopazo, C., O'Brien, E.E.: An Approach to the Autoignition of a Turbulent Mixture. In: Acta Astronaut., Vol. 1 (1974), pp. 1239-1266.
- Dopazo, C.: Probability density function approach for a turbulent axisymmetric heated jet. Centerline evolution. In: Physics of Fluids, Vol. 18, No.4 (1975), pp. 397-404.
- Dopazo, C.: Relaxation of initial probability density functions in the turbulent convection of scalar fields. In: Physics of Fluids, Vol. 22, No. 1 (1979), pp. 20-30.
- Duwig, C., Szasz, R.Z., Fuchs, L.: Modelling of Flameless Combustion Using Large Eddy Simulation. ASME Paper GT2006-90063, (2006).
- Eswaran, V., O'Brien, E.E., Deckert A.: The modeling of the Two-Point-Probability Density Function of a Reacting Scalar in Isotropic Turbulence. In: Combust. Sci. and Tech., Vol. 65 (1989), pp.1-18.
- Frank, J.H., Kalt, P.H.M., Bilger R.W.: Measurements of Conditional Velocities in Turbulent Premixed Flames by Simultaneous OH PLIF and PIV. In: Combustion and Flame, Vol. 116 (1999), pp. 220-232.
- Ferreira, J.C.: Flamelet Modelling of Stabilization in Turbulent Non-Premixed Combustion. Dissertation, ETH Zürich, 1996.
- Fox, R.O.: The spectral relaxation model of the scalar dissipation rate in homogeneous turbulence. In: Phys. Fluids, Vol.7 (1995), pp. 1082-1094.

- Gao, F.: Mapping closure and non-Gaussianity of scalar probability density functions in isotropic turbulence. In: Phys. Fluids, A 3 (1991).
- Girimaji, S.S.: A mapping closure for turbulent scalar mixing using a time-evolving reference field. In: Phys Fluids, Vol. A 4(12), (1992).
- Gonzalez, M., Borghi, R.: A Lagrangian Intermittent Model for Turbulent Combustion; Theoretical Basis and Comparison with Experiments. In: Turbulent Shears Flows, Vol. 7 (1991), pp. 293-311.
- GRI-Mech 3.0: Gregory P. Smith, David M. Golden, Michael Frenklach, Nigel W. Moriarty, Boris Eiteneer, Mikhail Goldenberg, C. Thomas Bowman, Ronald K. Hanson, Soonho Song, William C. Gardiner, Jr., Vitali V. Lissianski, and Zhiwei [online]. erhältlich im Internet unter: [http://www.me.berkeley.edu/gri\\_mech/](http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/).
- Großschmidt, D.H., Habisreuther, P., Bockhorn, H.: Transported scalar PDF Modeling of a Turbulent, Premixed Methane/Air Bunsen-Type Flame. ASME Paper GT2006-90257, (2006).
- Grunert, K.: Untersuchung zur Turbulenzmodellierung und Berechnung verdrallter Innenströmungen. Dissertation, TU Berlin, (2000).
- Günther, R.: Verbrennung und Feuerung. 1. Aufl., Berlin, Heidelberg, New York: Springer-Verlag, (1974).
- Haag, O.; Studie zur Anwendung von Turbulenzmodellen in Gasturbinenbrennkammern. Dissertation, Universität Darmstadt, (2003).
- Haworth, D.C., EL Tahry, H.: Probability Density Function Approach for Multidimensional Turbulent Flow Calculations with Application to In-Cylinder Flows in Reciprocating Engines. In: AIAA Journal, Vol. 29, No.2 (1990), pp. 209-218.
- Heinz, S.: Statistical Mechanics of Turbulent Flows. 1. Aufl., Berlin, Heidelberg, New York: Springer-Verlag, (2003)-ISBN: 3-540-40103-2.
- Hinz, A.: Numerische Simulation turbulenter Methandiffusionsflammen mittels Monte Carlo PDF Methoden. (Dissertation Darmstadt) Düsseldorf: VDI Verlag,(2000).
- Hoffmann, A.B.: Modellierung turbulenter Vormischverbrennung. Dissertation, Universität Karlsruhe, (2004).

- International Energy Agency (IEA): Key World Energy Statistics 2005 [online].  
erhältlich im Internet unter: <http://www.iea.org>.
- Janicka, J., Kolbe, W., Kollmann, W.: Closure of the Transport Equation for the Probability Density Function of Turbulent Scalar Fields. In: Journal of Non-Equilibrium Thermodynamics, Vol. 4 (1979), pp. 47-66.
- Jenny, P., Pope, S.B., Muradoglu, M., Caughey, D.A.: A Hybrid Algorithm for the Joint PDF Equation of Turbulent Reactive Flows. In: Journal of Computational Physics, Vol. 166 (2001), pp. 218-252.
- Jenny, P., Muradoglu, M., Liu, K., Pope, S.B., Caughey, D.A.: PDF Simulations of a Bluff-Body Stabilized Flow. In: Journal of Computational Physics, Vol. 169 (2001), pp.1-23.
- Joos, F.: Technische Verbrennung, 1. Aufl., Berlin, New York, Heidelberg: Springer-Verlag, (2006).-ISBN 10-3-540-34333-4.
- Kraichnan, R.H.: Closures for probability distributions. In: Bull. Am. Phys. Soc. Vol. 34 (1989).
- Kolmogorov, A.: The Local Structure of Turbulence in Incompressible Viscous Fluid for Very Large Reynolds' Numbers. In: Comptes Rendus (Doklady) de l'Academie des Sciences de l'URSS, XXX(4) (1941), pp. 301-305.
- Kunz, O.: PDF-Simulation von Verbrennungsvorgängen in praxisnahen Brennkammern. Dissertation, Universität Stuttgart, 2003.
- Kraft, M.: Stochastic Modeling of Turbulent Reactive Flow in Chemical Engineering. (Dissertation Karlsruhe) Düsseldorf: VDI Verlag,(1998).
- Launder, B.E., Spalding, D.B.: The numerical computation of turbulent flow. In: Comp. Meth. Appl. Mech. and Eng., Vol. 3 (1974), pp.269–289.
- Landenfeld, T. Numerische Beschreibung turbulenter Methandiffusionsflammen mit Schließungsmodellen zweiter Ordnung und angenommenen Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen. (Dissertation Darmstadt) Düsseldorf: VDI Verlag,(1999).
- Laxander, A.: Numerische Simulation von turbulenten Diffusionsflammen mit einem PDF-Transportgleichungsmodell. Dissertation, Universität Stuttgart, (1996).

- Li, G., Modest, M.F.: An Effective Particle Tracing Scheme on Structured/Unstructured Grids in Hybrid Finite Volume/PDF Monte Carlo Methods. In: Journal of Physics, Vol. 173 (2001), pp.187-207.
- Liu, K.: Joint-Velocity-Turbulence Frequency-Composition Probability Density Function (PDF) Calculations of Bluff Body Stabilized Flames. Dissertation, Cornell University, (2004).
- Lundgren, T.S.: Model Equation for non Homogeneous turbulence. In: Phys. Fluids, Bd. 12, (1969), pp. 485-497.
- Maas, U.: Automatische Reduktion von Reaktionsmechanismen zur Simulation reaktiver Strömungen. Habilitationsschrift, Universität Stuttgart, (1993).
- Magnussen, B., Hjertaager, B.: On mathematical models of turbulent combustion with special emphasis on soot formation and combustion. In: 16<sup>th</sup> Symposium on Combustion, The Combustion Institute, (1976), pp. 719.
- Masri, A.R., Dibble, R.W. and Barlow, R.S.: Raman-Rayleigh Measurements in Bluff Body Stabilised Flames of Hydrocarbon Fuels. 24<sup>th</sup> Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, (1992), pp. 317-324.
- Menter, F.R.: Two-equation eddy-viscosity turbulence models for engineering applications: In: AIAA-Journal., Vol. 32(8) (1994).
- Menter, F.R., Egorov, Y.: A scale-adaptive simulation model using two-equation models. AIAA paper 2005-1095, (2005).
- Meyer, D.W., Jenny, P.: A mixing model for turbulent flows based on parameterised scalar profiles. In: Physics of Fluids, Vol. 18 (2006).
- Mitarai, S., Riley, J.J., Kosaly, G.: Testing of mixing models for Monte Carlo probability density function simulations. In: Physics of Fluids, Vol. 17 (2005).
- Muradoglu, M., Jenny, P., Pope, S.B., Caughey, D.A.: A Consistent Hybrid Finite-Volume/Particle Method for the PDF Equations of Turbulent Reactive Flows. In: Journal of Computational Physics, Vol. 154 (1999), pp. 342-371.

- Muradoglu, M., Pope, S.B., Caughey, D.A.: A Hybrid Method for the PDF Equations of Turbulent Reactive Flows: Consistency Conditions and Correction Algorithms. In: Journal of Computational Physics, Vol. 178 (2002), pp. 260.
- Möbius, H.: Euler- und Lagrange-Monte-Carlo-PDF-Simulation turbulenter Strömungs-, Mischungs- und Verbrennungsvorgänge. (Dissertation Stuttgart) Düsseldorf: VDI Verlag, (2001).
- NAG MK20: NAG Fortran Library Mark 20.
- Nau, M.: Berechnung turbulenter Diffusionsflammen mit Hilfe eines Verfahrens zur Bestimmung der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion und automatisch reduzierten Reaktionsmechanismen. Dissertation, Universität Stuttgart, (1997).
- Nooren, P.A., Wouters, H.A., Peeters, T.W.J., Roekaerts, D., Maas, U., Schmidt, D.: Monte Carlo PDF Modelling of a turbulent natural-gas diffusion flame. In: Combustion Theory and Modelling, Vol. 1, No.1, (1997), pp. 79-96.
- Oertel jr., H., Laurien, E.: Numerische Strömungsmechanik, 2., neu bearb. Aufl., Braunschweig/Wiesbaden: Vieweg-Verlag, (2003).-ISBN 3-528-03936-1
- Overholt, M.R., Pope, S.B.: Direct Numerical Simulation of a Passive Scalar with Imposed Mean Gradient in Isotropic Turbulence. In: Phys. Fluids, Vol. 8 (1996), pp. 3128-3148.
- Pixner P., Krebs, W., Prade, B.: Advanced combustion modeling in gas turbines with ILDM approach. ASME Paper GT2004-53836, (2004).
- Poinsot, T., Veynante, D., Candel, S.: Quenching Processes and Premixed Turbulent Combustion Diagrams. In: Journal of Fluid Mechanics, Vol. 228 (1991), pp. 561-606.
- Pope, S.B.: A Monte Carlo Method for the PDF Equation of Turbulent Reactive Flow. In: Combustion Science and Technology, Vol. 25, (1981), pp. 159-174.
- Pope, S.B.: An Improved Mixing Model. In: Combustion Science and Technology, Vol. 28, (1981), pp. 131-135.

- Pope, S.B.: PDF Methods for Turbulent Flows. In: Prog. Energy Combustion Sci., Vol. 11, (1985), pp. 119-192.
- Pope, S.B.: Mapping Closure for Turbulent Mixing and Reaction. In: Theoret. Comput Fluid Dynamics, Vol. 2 (1992), pp. 255-270.
- Pope, S.B.: A Perspective on Turbulence Modeling. In: Modeling Complex Turbulent Flows, Salas, M.D., Hefner, J.N., Sakell, L. (Hrsg.), (1999), pp. 53-76.
- Pope, S.B.: Computationally efficient implementation of combustion chemistry using *in situ* adaptive tabulation. In: Combust. Theory Modelling, Vol. 1 (1997), pp. 41-63.
- Pope, S.B.: Turbulent Flows. 1. Aufl., Cambridge: Cambridge University Press, (2000).-ISBN 0-521-59125-2
- Peters, N.: Laminar flamelet concepts in turbulent combustion. In: Proc Comb Inst, Vol. 21, (1987), pp. 1231.
- Rotta, J.C.: Turbulente Strömungen. 1. Aufl., Stuttgart: B.G. Teubner, (1972).- ISBN 3-519-02316-4.
- Speziale, C.G., Sarkar, S. and Gatski, T.B.: Modelling the pressure-strain correlation of turbulence: an invariant dynamical systems approach. J. Fluid Mechanics, Vol. 227 (1991), pp. 245-272.
- Scheurlen, M.: Über den Einsatz von Monte-Carlo-Verfahren zur Berechnung von Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen in reagierenden Brennkammerströmungen. Dissertation, Universität Karlsruhe, (1992).
- Schmidt, D.: Modellierung reaktiver Strömungen unter Verwendung automatisch reduzierter Reaktionsmechanismen. Dissertation, Universität Heidelberg, (1996).
- Schmidt, D.: Private Mitteilung, (2004).
- Schneider, Ch., Dreizler, A., Janicka, J., Hassel, E.P.: Flow field measurements of stable and locally extinguishing hydrocarbon-fuelled jet flames. In: Combustion and Flame, Vol. 135 (2003), pp. 185-190.
- Sobol, I.M.: Die Monte-Carlo-Methode. 4., überarb. und erw. Aufl., Berlin: Dt. Verlag der Wissenschaften, (1991).- ISBN 3-326-00635-7

- Spalding, D.: Development of the Eddy break-Up Model for Turbulent Combustion. In: 16<sup>th</sup> Symposium (International) on Combustion/The Combustion Institute, (1976), pp. 1657-1663.
- Speziale, C.G., Sarkar, S., Gatski, T.B.: Modelling the pressure-strain correlation of turbulence: an invariant dynamical systems approach. In: Journal of Fluid Mechanics, Vol. 277 (1991), pp. 245-272.
- Steiner, R.: Modellbildung und strömungsmechanische Simulation der dieselmotorischen Verbrennung. Dissertation, Universität Karlsruhe, (2004).
- Subramaniam, S., Pope, S.B.: A Mixing Model for Turbulent reactive Flows based on Euclidean Minimum Spanning Trees. In: Combustion and Flame, Vol. 115 (1998), pp.487-514.
- Subramaniam, S., Pope, S.B.: Comparison of Mixing Model Performance for Nonpremixed Turbulent Reactive Flow. In: Combustion and Flame, Vol. 117 (1999), pp. 732-754.
- Syed, K.J., Buchanan, E., Turell, M.D., Stopford, P.J.: CFD Simulation of the Flow Within and Downstream of a High Swirl Lean Premixed Gas Turbine Combustor. ASME Paper GT2004-5311, (2004).
- Taylor, G.I.: The Spectrum of Turbulence. In: Proceedings of the Royal Society of London, A 151 (1935), pp. 421-454.
- TNF6: Sixth International Workshop on Measurement and Computation of Turbulent Nonpremixed Flames. Sapporo, Japan, (2002).
- TNF7: Seventh International Workshop on Measurement and Computation of Turbulent Nonpremixed Flames. Chicago, USA, (2004).
- Veynante, D., Trounev, A., Bray, K.N.C., Mantel, T.: Gradient and counter-gradient scalar transport in turbulent premixed flames. In: Journal of Fluid Mechanics, Vol. 332 (1997), pp. 263-293.
- Wetzel, F., Habisreuther, P., Zarzalis, N.: Numerical Investigation of Lean Blow Out of a Model Gas Turbine Combustion Chamber Using a presumed JPDF-Reaction Model by Taking Heat Loss Processes Into Account. ASME Paper GT2006-90062, (2006).
- Warhaft, Z.: The interference of thermal fields from line sources in grid turbulence. In: J. Fluid Mech., Vol. 144 (1984), pp. 363-387.

- Warnatz, J., Maas, U., Dibble, R.: *Verbrennung*, 3. Aufl., Berlin, Heidelberg, New York: Springer-Verlag, (2001).
- Westbrook, C.K., Dryer, F.L.: Simplified Reaction Mechanisms for the Oxidation of Hydrocarbon Fuels in Flames. In: *Combustion Science and Technology*, Vol. 27 (1981), pp. 31-43.
- Wouters, H.A., Nooren, P.A., Peeters, T.W.J., Roekaerts, D.: Simulation of a Bluff-Body-Stabilized Diffusion Flame Using Second-Moment Closure and Monte-Carlo Methods. In: 26<sup>th</sup> Symposium on Combustion, The Combustion Institute, (1996), pp. 177-185.
- Zeldovich, Y.B., Frank-Kamenetskii, D.A.: The theory of thermal propagation of flames. In: *Zh Fiz Khim*, Vol. 12 (1938).

## Lebenslauf

Name: Sebastian Harder  
geboren am: 13.04.1977  
in: Wismar  
Staatsangehörigkeit: deutsch  
Familienstand: ledig

### Schulbildung:

1983 – 1990 Polytechnische Oberschule (POS) in Rostock  
1990 – 1995 Gymnasium in Rostock

### Hochschulbildung:

10/1998 – 06/2002 Maschinenbaustudium an der Universität der  
Bundeswehr Hamburg;  
Vertiefungsrichtung: Schiffsmaschinenbau  
Abschluß: Diplom-Ingenieur

### Berufstätigkeit:

07/1995 – 07/1998 Ausbildung zum Instandsetzungsoffizier  
09/2002 – 12/2002 Leiter Technische Einsatzführung 2./InstBtl 142  
01/2003-09/2003 Eingesetzt als KpChef 2./InstBtl 142 und beauf-  
tragt zur Aufstellung des Regionalen Instand-  
setzungszentrums Karow (MV)  
10/2003-09/2006 Wissenschaftlicher Mitarbeiter am Laboratorium  
für Strömungsmaschinen an der Helmut-  
Schmidt-Universität/ Universität der Bundes-  
wehr Hamburg  
seit 10/2006 Instandsetzungsoffizier/ S3 Offizier an der  
Gruppe Weiterentwicklung TSH/FSHT Aachen