

Technische Universität München
Institut für Energietechnik

Lehrstuhl für Thermodynamik

Einfluss der Turbulenz-Chemie Interaktion auf das Zündverhalten schwach stabilisierter Überschallflammen

Henrik Klaus Förster

Vollständiger Abdruck der von der Fakultät für Maschinenwesen der
Technischen Universität München zur Erlangung des akademischen Grades
eines

DOKTOR – INGENIEURS

genehmigten Dissertation.

Vorsitzender:

Univ.-Prof. Dr.-Ing. habil. Boris Lohmann

Prüfer der Dissertation:

1. Univ.-Prof. Dr.-Ing. Thomas Sattelmayer

2. Univ.-Prof. Dr.-Ing. Manfred Aigner,
Universität Stuttgart

Die Dissertation wurde am 30.06.2009 bei der Technischen Universität München eingereicht
und durch die Fakultät für Maschinenwesen am 02.11.2009 angenommen.

Danksagung

Die vorliegende Arbeit entstand am Lehrstuhl für Thermodynamik der Technischen Universität München. Sie war eines der Teilprojekte im Graduiertenkolleg 1095/1 *Aero-thermodynamische Auslegung eines Scramjet-Antriebssystems für zukünftige Raumtransportsysteme*, welches durch die Deutsche Forschungsgemeinschaft gefördert wurde.

Mein besonderer Dank gilt Herrn Professor Dr.-Ing. Thomas Sattelmayer für die Betreuung dieser Dissertation und das mir entgegengebrachte Vertrauen. Bei den gemeinsamen Diskussionen zeigte er mir die Richtung auf, wodurch ich die Freiräume zur selbstständigen wissenschaftlichen Arbeit und zur Umsetzung eigener Ideen bekam.

Für die Übernahme des Koreferates danke ich Herrn Professor Dr.-Ing. Manfred Aigner und Herrn Professor Dr.-Ing. habil. Boris Lohmann für den Vorsitz der mündlichen Prüfung.

Ich möchte mich auch recht herzlich bei Herrn Professor Dr.-Ing. habil. Rainer Friedrich für die Unterstützung und ausführlichen Erläuterungen bei diffizilen Fragen zum Thema Turbulenz bedanken. Desweiteren möchte ich mich bei Professor Dr. Cheng, Chung Hua University, dafür bedanken, dass er so freundlich war seine experimentellen Daten in einem von mir benötigten Format zur Verfügung zu stellen.

Ein großes Dankeschön geht an das *Centre for Hypersonics* in Brisbane, wo ich bei einem mehrmonatigen Aufenthalt viele interessante Eindrücke sammeln durfte. Besonders seien hier Dr. Peter Jacobs und Dr. Rowan Gollan erwähnt.

Ein herzlicher Dank geht auch an meine Kolleginnen und Kollegen, mit denen ich in den letzten Jahren innerhalb und außerhalb des Lehrstuhls viel erlebt habe. In freundschaftlicher Atmosphäre wurden wissenschaftliche Fragen und Probleme untereinander besprochen und gelöst, sei es bei den vielen fachlichen Diskussionen am Arbeitsplatz, in der Kaffeeküche oder auch in der Freizeit. Besonders in Erinnerung bleiben mir auch die am Lehrstuhl organisierten Aktivitäten wie unter anderem die Fußballmannschaft oder der

alljährliche Skiausflug.

Ganz besonders möchte ich meiner lieben Frau Claudia danken. Durch ihre dauernde Unterstützung konnte ich mich auf die Anfertigung meiner Dissertation konzentrieren. Vielen Dank auch für ihre Geduld und das Verständnis, dass so viele Wochenenden geopfert werden mussten. Zu guter Letzt möchte ich mich recht herzlich bei meinen Eltern für das Interesse an meiner Arbeit und die Unterstützung während meiner langjährigen Ausbildungszeit bedanken.

München, im Februar 2010

Henrik Förster

Inhaltsverzeichnis

Nomenklatur	vii
1 Einleitung	1
2 Grundlagen	7
2.1 Reaktionskinetik	7
2.2 Eigenschaften der Überschallströmung	9
2.3 Turbulente Strömungen	11
2.3.1 Charakteristiken der Turbulenz	11
2.3.2 Navier-Stokes Gleichungen	15
2.3.3 Reynolds-Mittelung und Turbulenzmodelle	17
2.3.4 Der chemische Quellterm	20
2.4 Turbulente Verbrennung	22
2.4.1 Vorgemischte Verbrennung	22
2.4.2 Nicht-vorgemischte Verbrennung	29
2.4.3 Verbrennungsmodelle für nicht-vorgemischte Flammen .	33
2.5 Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion	36
2.5.1 Eindimensionale Verteilung	36
2.5.2 Multivariate Verteilung	39
2.5.3 Dirac-Funktion	40
2.5.4 Gauß-Verteilung	41
2.5.5 Beta-Verteilung	42
3 Das assumed-PDF Verbrennungsmodell	45
3.1 Implementierung	46
3.2 Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion der Temperatur	47
3.3 Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion der Spezies	50

3.3.1	Beschreibung der multivariaten Spezies-PDF	51
3.3.2	Transportgleichung der Speziesvarianz	54
3.3.3	Analytische Lösbarkeit	56
3.3.4	Physikalische Plausibilität	57
3.4	Untersuchungen zum assumed-PDF Ansatz	60
3.4.1	Einfluss der Temperatur- und Speziesschwankungen . . .	60
3.4.2	Entmischung der Luft	66
3.4.3	Statistische Abhängigkeit der fluktuierenden Variablen .	67
4	Tabellierung	73
4.1	Grundidee	73
4.2	Tabelleninhalt	75
4.2.1	Thermo-chemische Variablen	75
4.2.2	Konstant-Volumen Reaktor	76
4.3	Tabellenstruktur	77
4.3.1	Koordinaten in hoher Dimension	80
4.3.2	Hybrider Ansatz	81
4.4	Datenextraktion	82
4.4.1	Interpolation	83
4.4.2	Extrapolation	85
4.5	Genauigkeit	87
4.5.1	Operator Splitting	88
4.5.2	Approximation	89
4.6	Implementierung in FLUENT	97
5	Ergebnisse und Diskussion	101
5.1	Überschallverbrennung im Borghi-Diagramm	101
5.2	Simulation der Diffusionsflamme von Cheng et al.	106
6	Zusammenfassung und Ausblick	125
A	Reaktionsmechanismus	128
	Literaturverzeichnis	135

Nomenklatur

Lateinische Buchstaben

a	Schallgeschwindigkeit [m/s]
a_i	partielle Ableitung [-]
A	Spezies [-]
A	Querschnittsfläche [m ²], Integralfläche [-]
A_r	Frequenzfaktor der Arrhenius-Gleichung [mol, m ³ , s, K]
b	Konstante im EDC-Modell [-]
B	Spezies [-]
c	Fortschrittsvariable [-]
c	Konzentration [mol/m ³]
c_p, c_v	spezifische Wärmekapazitäten [J/(kg K)]
C	Konstante [-]
C	Spezies [-]
C_xH_y	Kohlenwasserstoff-Verbindung [-]
\mathcal{E}^T	Quellterm in der Transportgleichung für σ_T
\mathcal{E}^Y	Quellterm in der Transportgleichung für σ_Y
d	Konstante im Modell der turbulenten Flammengeschwindigkeit [-]
D	Durchmesser [mm]
\mathcal{D}	Diffusionskoeffizient [m ² /s]
e	Exponentialfunktion [-]
e	spezifische innere Energie [J/kg]
E	spezifische totale Energie [J/kg]
E_a	Aktivierungsenergie [J/kmol]
E	spektrale Energie-Verteilungsdichte [m ³ /s ²]
f	entdimensionierte Geschwindigkeits-Korrelation [-]

f, g	allgemeine Funktion [-]
F	Schubkraft [N]
\mathcal{F}	Verteilungsfunktion [-]
g_0	Erdbeschleunigung [m/s ²]
G^0	molare Gibbs-Energie [J/mol]
h	spezifische Enthalpie [J/kg]
\bar{h}^0	Standard-Bildungsenthalpie [J/mol]
H	Heaviside-Funktion [-]
H	Wasserstoffatom [-]
H_2	Wasserstoff-Molekül [-]
H^0	molare Enthalpie [J/mol]
i	imaginäre Einheit [-]
I_s	spezifischer Impuls [s]
I_T	Intensität der Temperaturfluktuationen [-]
k	turbulente kinetische Energie [m ² /s ²]
k	Wellenzahl [rad/m]
$k_{f,b}$	Geschwindigkeitskoeffizient [mol, m ³ , s]
k_i	Koordinate [-]
K_c	Gleichgewichtskonstante [-]
l	Länge [m]
l_0	integrales Längenmaß [m]
\mathcal{L}	charakteristische Länge [m]
m, n	ganzzahlige Variable [-]
\dot{m}_T	Treibstoffmassenstrom [kg/s]
M	Molmasse [kg/kmol]
\mathcal{M}^T	Druckterm in der Transportgleichung für σ_T
\mathcal{M}	Mischungs- und Transportterm
n	Temperaturrexponent [-]
N	Anzahl [-]
O	Sauerstoffatom [-]
\mathcal{O}	Ordnung [-]
p	Druck [Pa]
P	Wahrscheinlichkeit [-]
\mathcal{P}	Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion [-]

\mathcal{D}^*	Randverteilung [-]
\mathcal{D}^T	Produktionsterm in der Transportgleichung für σ_T
\mathcal{D}^Y	Produktionsterm in der Transportgleichung für σ_Y
q_j	Komponente des spezifischen Wärmestroms [W/m^2]
Q	Reynolds-gemittelte turbulente Skalarenergie [-]
r	Radius [m]
R	Korrelation [-]
R	spezifische Gaskonstante [$\text{kJ}/(\text{kg K})$]
R_n	Restglied n-ter Ordnung [-]
\mathcal{R}	allgemeine Gaskonstante [$\text{kJ}/(\text{kmol K})$]
s	Standardabweichung [-]
s	Parameter im EDC-Modell [-]
\bar{s}^0	Standard-Entropie [$\text{J}/(\text{mol K})$]
S	Flammengeschwindigkeit [cm/s , m/s]
S_h	Wärmequelle [W/m^3]
S^0	molare Entropie [$\text{J}/(\text{mol K})$]
\mathcal{S}	chemischer Quellterm
t	Zeit [s]
t_j	Effektivität des Dreierstoß-Partners [-]
T	Temperatur [K]
$T_{i,f,b}$	Term in Gleichung für chemischen Quellterm
\mathcal{T}^T	Transportterm in der Transportgleichung für σ_T
\mathcal{T}^Y	Transportterm in der Transportgleichung für σ_Y
\mathcal{U}	charakteristische Geschwindigkeit [m/s]
u_i	Geschwindigkeitskomponente [m/s]
w_s	molare Bildungsgeschwindigkeit der Spezies s [$\text{kmol}/(\text{m}^3 \text{s})$]
x	Variable [-]
x_i	Ortskoordinate [m]
y^+	dimensionsloser Wandabstand [-]
Y	Massenbruch [-]
Y	stochastische Variable [-]
Z	Zustandsraumvariable [-]
\mathcal{Z}	Mischungsbruch [-]

Griechische Buchstaben

β	Formparameter [-]
γ	Adiabatexponent [-]
Γ	Gamma-Funktion [-]
δ	Dirac-Funktion [-]
δ_{ij}	Kronecker-Delta [-]
δ_l	laminare Flammendicke [m]
δ_s	Scherschichtdicke [m]
ε	Dissipationsrate [m^2/s^3]
ε^T	Dissipationsterm in der Transportgleichung für σ_T
ε^Y	Dissipationsterm in der Transportgleichung für σ_Y
η	Größe der Kolmogorov-Wirbel [m]
κ	Streckungsfaktor [1/s]
λ	Luftzahl [-]
λ	Wärmeleitfähigkeit [W/(m K)]
μ	dynamische Viskosität [kg/(m s)]
μ_t	turbulente Viskosität [kg/(m s)]
ν	kinematische Viskosität [m^2/s]
ν_t	turbulente Viskosität [m^2/s]
ν''	stöchiometrischer Koeffizient des Produktes [-]
ν'	stöchiometrischer Koeffizient des Reaktanden [-]
ξ	Variable [-]
π	Kreiszahl [-]
ρ	Dichte [kg/m^3]
σ	Varianz [-]
σ_T	Varianz der Temperatur [-]
σ_Y	Summe der Massenanteilvarianzen [-]
τ	Zeitmaß [s]
$\overline{\overline{\tau}}$	Spannungstensor [kg/(m s ²)]
ϕ	reagierendes Skalar [K,-]
χ	Dissipationsrate [1/s]
ψ	normierte Variable [-]
ω	turbulente Frequenz [1/s]

$\dot{\omega}_s$ Bildungsgeschwindigkeit der Spezies s [$\text{kg}/(\text{m}^3 \text{s})$]

Indizes

∞	Umgebung
0	Ausgangswert, Staupunkt
ad	adiabat
b	rückwärts (engl.: backwards)
b	verbrannt
Br	Brennstoff
c	chemisch
D	Diffusionsdicke
f	vorwärts (engl.: forward)
F	Mischungsbruch-Raum
i, j, k	Raumrichtung
l	laminar
max	Maximum
min	Minimum
Ox	Oxidator
P	Produkt
r	Reaktion
ref	Referenz
rel	relativ
rms	root mean square
s	Spezies
st	stöchiometrisch
t	turbulent
u	unverbrannt
u	Geschwindigkeitsvektor
z	Zelle
Z	Zündverzug

Kopfzeiger

ext extrapoliert
int interpoliert
* Zwischenzustand

Kennzahlen

$Da = \tau_0 / \tau_c$	Damköhler-Zahl
$Ka = \tau_c / \tau_\eta$	Karlowitz-Zahl
$Le = \lambda / (\rho c_p \mathcal{D})$	Lewis-Zahl
$Ma = u/a$	Mach-Zahl
$Pr = \mu c_p / \lambda$	Prandtl-Zahl
$Pr_t = \mu_t c_p / \lambda_t$	turbulente Prandtl-Zahl
$Re = \mathcal{U} \mathcal{L} / \nu$	Reynolds-Zahl
$Re_t = u'_{rms} l_0 / (\delta_1 S_l)$	turbulente Reynolds-Zahl
$Sc = \nu / \mathcal{D}$	Schmidt-Zahl
$Sc_t = \nu_t / \mathcal{D}_t$	turbulente Schmidt-Zahl

Abkürzungen

CFD	Computational Fluid Dynamics
DNS	Direkte Numerische Simulation
ILDm	Intrinsic Low-Dimensional Magnifold
LES	Large Eddy Simulation
ODE	Ordinary Differential Equation
PDF	Probability Density Function
RANS	Reynolds-Averaged Navier-Stokes
RSM	Reynolds-Spannungs-Modell
UDF	User Defined Function
URANS	Unsteady Reynolds-Averaged Navier-Stokes

Operatoren

$(\cdot)'$	Reynolds-Schwankungswert
$(\cdot)'$	erste Ableitung
$(\cdot)''$	Favre-Schwankungswert
$(\cdot)''$	zweite Ableitung
$(\cdot)!$	Fakultät
$\overline{(\cdot)}$	Reynolds-Mittelwert
$\widetilde{(\cdot)}$	Favre-Mittelwert
$ (\cdot) $	Betrag
$[(\cdot)]$	Abrundungsfunktion
$\langle \cdot \cdot \rangle$	bedingter Mittelwert
$\frac{\partial}{\partial(\cdot)}$	partielle Ableitung
Δ	Differenz
∇	Nabla-Operator

1 Einleitung

Der Begriff der Schallmauer galt in den 30er und 40er Jahren des letzten Jahrhunderts als unüberwindbare Geschwindigkeitsbarriere in der Luftfahrt, da der Luftwiderstand bei Erreichen der Schallgeschwindigkeit extrem stark ansteigt. Doch dies zu unrecht, da 1947 der erste Überschallflug eines bemannten Flugzeugs gelang. Während das Erreichen des Überschalls heute kein Problem mehr darstellt, hat sich die Geschwindigkeitsbarriere zum Hyperschall hin verschoben.

Das heutige Standard-Triebwerk in der zivilen und militärischen Luftfahrt ist der Turbofan-Antrieb. Dieser besteht aus Axialverdichtern zur Kompression der Luft und Axialturbinen, welche die Verdichter und den Schub produzierenden Turbofan antreiben. Seine Vorteile sind der weite Betriebsbereich von $0 \leq \text{Ma} \lesssim 3$ und der hohe spezifische Impuls, d.h. eine hohe Schubkraft bezogen auf den Treibstoffgewichtsdurchsatz:

$$I_s = \frac{F}{g_0 \dot{m}_T}. \quad (1.1)$$

Diese Triebwerke haben aber einen physikalisch begrenzten Einsatzbereich bis $\text{Ma} \approx 3$, weil die den Verdichter anströmende Luft auf Unterschall abgebremst werden muss. Diese Reduzierung der Mach-Zahl geschieht durch Verdichtungsstöße, welche gleichzeitig die statische Temperatur und den statischen Druck der Strömung auf ein für das Triebwerk zu hohes Niveau heben. Um höhere Geschwindigkeiten zu erreichen, ist ein anderes Triebwerkskonzept notwendig und zwar der sog. Ramjet. Diese verzichten auf die komplexen Baugruppen Fan, Verdichter und Turbine und erzeugen die notwendigen Temperaturen und Drücke am Brennkammer-Eintritt einzig und allein durch die gasdynamische Kompression der Verdichtungsstöße. Doch auch dieses Prinzip hat ein Geschwindigkeits-Limit, was sich mit der starken Verzögerung der Anströmung auf Unterschall erklären lässt. Dadurch wird die

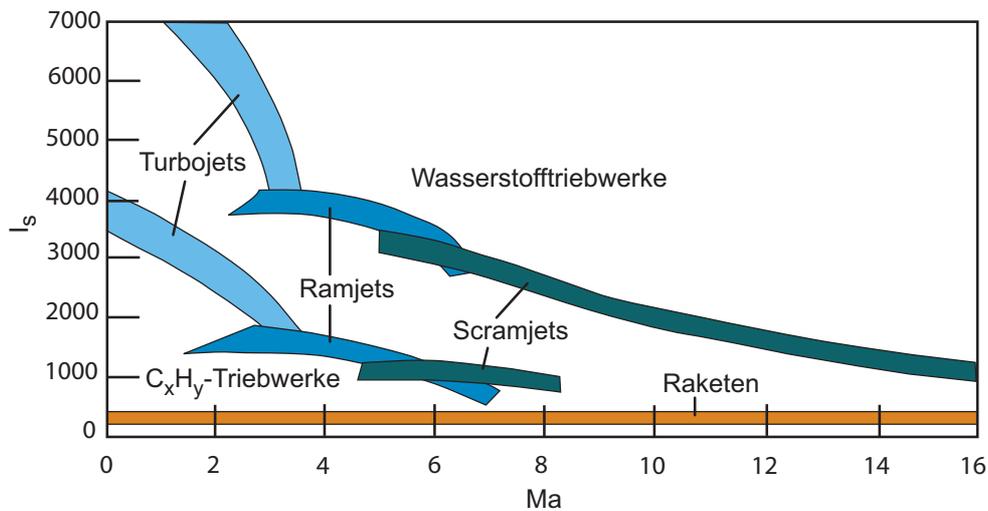


Abbildung 1.1: Spezifische Impuls Levels für verschiedene Antriebssysteme (nach [Alg93]).

hohe kinetische Energie abgebaut und weitestgehend in innere Energie und Entropie umgewandelt, womit Druck, Temperatur und Verluste ansteigen. Bei $Ma \approx 5$ ist der Temperaturanstieg so stark, dass es neben einer hohen thermischen Beanspruchung der Bauteile zur Dissoziation von Sauerstoff (und bei steigender Temperatur auch von Stickstoff) in der Brennkammer kommt [Hey93]. Diese endotherme Reaktion wandelt einen Teil der inneren Energie zurück in chemisch gebundene Energie. Da die Rekombinationsvorgänge langsam ablaufen sind dissoziierte Moleküle auch in der Schubdüse vorhanden. Somit wird weniger chemisch gebundene Energie in kinetische Energie umgewandelt, was sich negativ auf die Schuberzeugung auswirkt.

Diese Probleme werden vermieden, wenn die Brennkammer mit Überschall durchströmt wird, wie es bei Scramjets (engl.: supersonic combustion ramjet) der Fall ist. Dadurch sind Scramjets im Machzahlbereich theoretisch nicht beschränkt. Abbildung 1.1 zeigt die Geschwindigkeitsbereiche der verschiedenen Antriebskonzepte sowie deren spezifischen Impuls. Aufgrund des höheren spezifischen Heizwertes von Wasserstoff besitzen Wasserstofftriebwerke einen wesentlich höheren spezifischen Impuls als C_xH_y -Triebwerke. Während Ramjets heute vereinzelt im militärischen Bereich Anwendung finden, sind die technischen Probleme und physikalischen Fragestellungen bei Scramjets

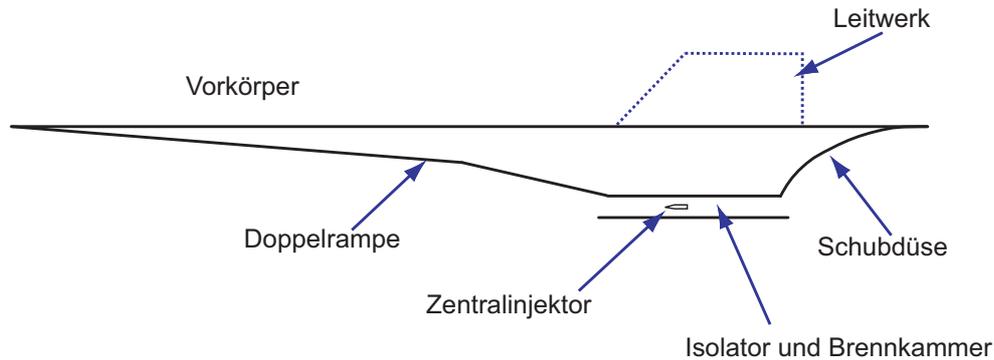


Abbildung 1.2: Grundkonzept des Scramjet-Antriebssystems des Graduiertenkollegs.

selbst nach drei Jahrzehnten der weltweiten Forschung noch nicht gelöst. Daher lag die Geschwindigkeitsbarriere für luftatmende Antriebe seit vielen Jahrzehnten bei $Ma \approx 5$. Erst im Jahr 2004 gelangen der NASA mit dem unbemannten Experimentalflugzeug X-43A zwei Flüge im Hyperschall [DW06]. Bei diesen Flügen mit $Ma = 6,8$ und $Ma = 9,6$, welche nur wenige Sekunden dauerten, konnte ein positiver Nettoschub nachgewiesen und somit das Prinzip des Hyperschallfluges mittels Scramjet bestätigt werden.

Das Graduiertenkolleg 1095 der Deutschen Forschungsgemeinschaft mit dem Titel *Aero-thermodynamische Auslegung eines Scramjet-Antriebssystems für zukünftige Raumtransportsysteme* befasst sich mit der Auslegung eines Scramjet-Antriebssystems für einen Betriebspunkt mit $Ma = 7$ bei einer Flughöhe von 30 km. Das Grundkonzept des Antriebssystems ist in Abbildung 1.2 dargestellt. Der Fokus dieser Forschungsgruppe liegt auf der aero- und thermodynamischen Untersuchung der wichtigsten Komponenten: Einlauf, Brennkammer und Schubdüse. Ziel dieses Graduiertenkollegs ist die Schaffung der technologischen Grundlagen zur Entwicklung eines neuen Raumtransportsystems.

Die Technologie des Raumtransports hat sich in den letzten 50 Jahren kaum verändert und basiert noch immer auf Raketen. Diese haben sich zwar als sehr zuverlässig erwiesen, besitzen aber den Nachteil, dass nicht nur der Brennstoff sondern auch der Oxidator mitgeführt werden muss. Aufgrund der ho-

hen Molmasse von Sauerstoff besteht der Anteil der Masse des Oxidators an der gesamten Startmasse des Systems bei weit über 50 % (Saturn V bei 70 % [Alg93]). Dies erhöht nicht nur die Masse des Gesamtsystems, sondern bedeutet gleichzeitig hohe Transportkosten.

Das neue zweistufige Raumtransportsystem¹ soll die Transportkosten senken, indem der schwere Oxidator nicht mehr mitgeführt wird. Stattdessen wird der Sauerstoff der Atmosphäre zur Verbrennung genutzt. Somit wird das Gesamtsystem leichter, was sich direkt auf die Transportkosten auswirkt. Außerdem liegt der spezifische Impuls bei luftatmenden Antrieben deutlich höher als bei Raketen, besonders wenn Wasserstoff als Treibstoff genutzt wird. Dies wird in Abbildung 1.1 verdeutlicht. Die hohen Geschwindigkeiten der zweiten Stufe sollen hier durch ein Scramjet-Antriebssystem realisiert werden.

Neben der hypersonischen Außenströmung ist die größte Herausforderung bei der Konstruktion eines Scramjet die stabile Verbrennung im Überschall. Die Überschallströmung in der Brennkammer ist aus oben genannten Gründen notwendig, wurde aber bis heute in keiner technischen Anwendung gebraucht. Ob in Bunsenbrenner, Ottomotor, Gasturbine oder Turbofan-Triebwerken – überall findet die Verbrennung mit einer deflagrativen Flammenausbreitung bei kleinen bis sehr kleinen Mach-Zahlen statt. Bei Scramjets wird also technologisches Neuland betreten, verbunden mit dem Problem, dass einerseits eine direkte Flugerprobung aufgrund der enormen Kosten ausscheidet und andererseits keine Tests am Boden unter realistischen Bedingungen möglich sind. Grund hierfür ist die hohe Enthalpie einer hypersonischen Strömung, welche in einem stationären Windkanal nicht erreicht werden kann. Stoßwindkanäle sind zwar im Stande, Hochenthalpieströmungen im Machzahlbereich von 6-10 zu erzeugen, haben aber den Nachteil extrem kurzer Messzeiten in der Größenordnung von 1-3 ms (siehe [Sur06]). Heute besteht aber die Möglichkeit, die unterschiedlichen Experimente mit den entsprechenden numerischen Simulationen zu begleiten, welche auf leistungsfähiger Hard- und Software basieren.

Die Aufgabe der Brennkammer besteht in der effektiven Verbrennung des

¹Eine horizontal startende und wiederverwendbare Unterstufe soll das Scramjet-Antriebssystem samt Nutzlast auf die notwendige Höhe und Geschwindigkeit befördern.

Brennstoffs. Hierfür müssen Brennstoff und Luft gut gemischt werden, was zur Folge hat, dass die Brennkammer lang genug sein muss, um gute Vermischung und vollständigen Ausbrand des Brennstoffs zu gewährleisten. Das Problem bei Scramjets ist nun, dass die Brennkammer mit extrem hohen Geschwindigkeiten ($\mathcal{O}(1000 \text{ m/s})$) durchströmt wird. Dennoch muss die Brennkammer möglichst kurz sein, damit Gewicht, Reibungswiderstand und Kühlung minimiert werden können (vgl. [Oda04]). Zudem muss die Flamme stabilisiert werden, da die Geschwindigkeit der Flammenausbreitung ($\mathcal{O}(10 \text{ m/s})$) sehr viel kleiner als die Strömungsgeschwindigkeit ist. Zur Stabilisierung einer Flamme in einer Überschallströmung existieren verschiedene Konzepte, wie die aerodynamische oder die reaktionskinetische Stabilisierung [Grü98, San03]. Flammenhalter wie z. B. Querstreben sichern zwar eine stabile Verbrennung in der Brennkammer, verursachen aber starke Verluste. Andere Konzepte, welche geringere Verluste produzieren, sind dagegen weniger geeignet für eine zuverlässige und effektive Verbrennung. Nach vielen Jahren der Scramjet-Forschung hat sich herausgestellt, dass es keinen Königsweg gibt, sondern dass das Brennkammerkonzept einen Kompromiss darstellt, welcher nur in einem iterativen Prozess gefunden werden kann. Die Simulation ist deshalb von besonderem Interesse, da ein realistischer Test unter Flugbedingungen am Boden nicht möglich ist.

Dieses Projekt baut auf der Arbeit von Lyubar [Lyu05] auf, der im Sonderforschungsbereich 255 *Transatmosphärische Flugsysteme* mitwirkte. Die theoretische Arbeit von Lyubar befasste sich mit der effizienten Modellierung der Überschallverbrennung für Scramjet-Antriebe. Als Verbrennungsmodell wurde ein detaillierter $\text{H}_2 - \text{O}_2$ -Reaktionsmechanismus verwendet. Dieser Ansatz ist nur dann gerechtfertigt, wenn in jeder Rechenzelle lokal gerührte Bedingungen vorliegen, was auch bei Überschallflammen höchstens näherungsweise der Fall ist. Die aufwendige Berechnung der detaillierten Chemie wurde umgangen, indem der komplette Reaktionsverlauf in einer hochdimensionalen Tabelle gespeichert wurde und in der Simulation nur noch ausgelesen werden musste.

Ziel dieser Arbeit ist die Weiterentwicklung des von Lyubar implementierten Modells für die Überschallverbrennung. Auf der Grundlage der effizienten Ta-

bellierung der Chemie soll ein Ansatz für die Turbulenz-Chemie Interaktion hinzugefügt und untersucht werden. Diese Untersuchung bezieht sich zum einen auf die Gültigkeit dieses Ansatzes für die Überschallverbrennung aus Sicht der Verbrennungs-Theorie und zum anderen auf die Verbesserung gegenüber dem Ansatz ohne Turbulenz-Chemie Interaktion. Es gilt die Frage zu beantworten, welches Verbrennungsmodell bei der Auslegung einer Scramjet-Brennkammer die besten Ergebnisse bei vertretbarem Aufwand produziert.

Die Arbeit ist wie folgt aufgebaut: In Kapitel 2 werden die Grundlagen erläutert, die notwendig zum Verständnis für die Verbrennungssimulation im Überschall sind. Das assumed-PDF Modell wird in Kapitel 3 vorgestellt. Es wird auf die physikalischen Grundlagen dieses Modells eingegangen und einige Eigenschaften aufgezeigt. Im folgenden Kapitel 4 wird das neu gestaltete Tabellierungs-Verfahren erklärt und auf die Vor- sowie Nachteile eingegangen. Schließlich findet in Kapitel 5 das Verbrennungsmodell bei der Simulation einer Überschallflamme Anwendung. Es wird außerdem gezeigt, welches Flammenregime im Überschall vorherrschend ist. Kapitel 6 fasst die wichtigsten Ergebnisse zusammen.

2 Grundlagen

2.1 Reaktionskinetik

Zur detaillierten Beschreibung der Verbrennung ist eine genaue Kenntnis der ablaufenden chemischen Vorgänge notwendig. Neben den Edukten und Produkten, mit denen das thermodynamische Gleichgewicht bestimmt werden kann, treten auch Radikale auf, die für die Dynamik der Reaktion eine wichtige Rolle spielen. Gleichung 2.1 zeigt eine Reaktionsgleichung aus einem $H_2 - O_2$ -Reaktionsmechanismus:



Hier reagiert das Hydroxyl-Radikal (OH) mit einem Wasserstoff-Molekül zu Wasser und einem Wasserstoff-Atom (H).

Die Gleichungen der Reaktionskinetik beschreiben die zeitliche Veränderung der Spezies in einer homogenen Gasphase, also eines Gasmisches ohne Gradienten in räumlicher Richtung. Die mathematische Formulierung der molaren Bildungsgeschwindigkeit der Spezies s aus einem Reaktionsmechanismus mit r Reaktionen ist gegeben durch:

$$w_s = \sum_{r=1}^{N_r} (v''_{sr} - v'_{sr}) \left(k_{fr} \prod_{i=1}^{N_s} \left(\frac{\rho Y_i}{M_i} \right)^{v'_{ir}} - k_{br} \prod_{i=1}^{N_s} \left(\frac{\rho Y_i}{M_i} \right)^{v''_{ir}} \right). \quad (2.2)$$

Darin sind k_{fr} und k_{br} die Geschwindigkeitskoeffizienten für Hin- (engl.: „forward“) bzw. Rückreaktion (engl.: „backward“). Der Quotient aus der Dichte ρ , dem Massenbruch Y_s und der Molmasse M_s ergibt die Konzentration der Spezies s , die mit ihrem stöchiometrischen Koeffizienten v' bzw. v'' gewichtet werden. Die Temperaturabhängigkeit der Geschwindigkeitskoeffizienten wird mit dem Ansatz von Arrhenius beschrieben:

$$k_{f,b} = A_r T^n \exp\left(\frac{-E_a}{\mathcal{R}T}\right). \quad (2.3)$$

Hier ist A_r der Frequenzfaktor der Gleichung r , der die Wahrscheinlichkeit einer Kollision der Reaktanden ausdrückt, T^n beschreibt dessen Temperaturabhängigkeit und \mathcal{R} ist die allgemeine Gaskonstante. Die Aktivierungsenergie E_a stellt eine Energieschwelle dar, die bei einer Kollision auf molekularer Ebene vorhanden sein muss, damit die chemische Reaktion stattfindet. Da die Temperatur ein Maß für die mittlere kinetische Energie der Teilchen ist, hat sie einen stark nichtlinearen Einfluss auf die Reaktionsrate. Die Bildungsgeschwindigkeit einer Spezies s ergibt sich aus deren molarer Bildungsgeschwindigkeit sowie der jeweiligen Molmasse zu:

$$\dot{\omega}_s = M_s w_s. \quad (2.4)$$

Da Elementarreaktionen wie Gleichung 2.1 prinzipiell reversibel sind, kann deren Hin- oder Rückreaktionsrate auch über das chemische Gleichgewicht bestimmt werden. Befindet sich eine Reaktion im Gleichgewicht, gilt $w_r = 0$, somit laufen Hin- und Rückreaktion gleich schnell ab. Dieser Zustand ist durch bestimmte Werte der Geschwindigkeitskoeffizienten gekennzeichnet, deren Quotient

$$K_c(T) = \frac{k_{fr}(T)}{k_{br}(T)} \quad (2.5)$$

die Gleichgewichtskonstante darstellt. Bei bekannter Gleichgewichtskonstante und gegebenem Geschwindigkeitskoeffizienten der Hinreaktion kann somit der Koeffizient der Rückreaktion berechnet werden.

Die Gleichgewichtskonstante lässt sich aus thermodynamischen Daten bestimmen, da die Reaktionsgleichung, als geschlossenes System betrachtet, sich auf maximale Entropie einstellt. Maximale Entropie führt zu minimaler Gibbs-Energie, woraus sich die Gleichgewichtskonstante wie folgt berechnen lässt:

$$K_c = \exp\left(-\frac{\Delta G_r^0(T)}{\mathcal{R}T}\right) \left(\frac{p_0}{\mathcal{R}T}\right)^{\sum_{s=1}^{N_s} (v''_{sr} - v'_{sr})}, \quad (2.6)$$

mit p_0 dem Druck der Standardatmosphäre (101325 Pa). Das Minimum des totalen Differentials der Gibbs-Funktion schreibt sich [Hir05]:

$$\frac{\Delta G_r^0(T)}{\mathcal{R}T} = \frac{\Delta S_r^0}{\mathcal{R}} - \frac{\Delta H_r^0}{\mathcal{R}T} = \sum_{s=1}^{N_s} (v''_{sr} - v'_{sr}) \left(\frac{\bar{s}_s^0}{\mathcal{R}} - \frac{\bar{h}_s^0}{\mathcal{R}T} \right), \quad (2.7)$$

mit \bar{s}_i^0 der Standard-Entropie und \bar{h}_i^0 der Standard-Bildungsenthalpie in molarer Form.

Die Produktionsrate einer Spezies aus Gleichung 2.4 kann als Quellterm in einer komplexen 3D-Simulation erscheinen, aber ebenso das zeitliche Verhalten in einem Null-dimensionalen Reaktor beschreiben. In beiden Fällen hat das zu lösende Gleichungssystem den Charakter einer Differentialgleichung.

Der hier verwendete $\text{H}_2 - \text{O}_2$ Mechanismus ist der gekürzte Jachimowski-Mechanismus [Jac88] mit seinen acht Spezies und 19 Reaktionen. Dieser Mechanismus wurde bei der NASA speziell für die Überschallverbrennung entwickelt und ist im Anhang angefügt.

2.2 Eigenschaften der Überschallströmung

Die Überschallströmung ist durch

$$Ma = \frac{u}{a} > 1 \quad (2.8)$$

definiert, was bedeutet, dass die lokale Geschwindigkeit u der Strömung größer als die lokale Schallgeschwindigkeit a ist. Eine Konsequenz daraus ist, dass sich Druckstörungen nicht mehr im gesamten Strömungsfeld auswirken können. Kleine Druckstörungen (Schallwellen) können sich nur innerhalb eines *Machschen Kegels* ausbreiten (vgl. [Sig08]). Vergleichbar ist das Einflussgebiet bei großen Druckstörungen, welche sich entlang von Charakteristiken ausbreiten. Dabei entstehen sog. Verdichtungsstöße, über denen sich die Strömungsgeschwindigkeit und der thermodynamische Gaszustand quasi sprunghaft¹ ändern. Zu den thermodynamischen Größen Druck, Dichte und Temperatur zählt auch die Entropie, welche ansteigt und somit einen Druckverlust im Strömungsfeld repräsentiert.

Diese sprunghaften Änderungen der thermodynamischen Variablen sind in Abbildung 2.1 dargestellt, wo ein keilförmiger Zentralkörper in einer Überschallströmung Verdichtungsstöße verursacht, welche wiederum an den Kanalwänden reflektiert werden. Dadurch wird ein Strömungsfeld mit abrupt

¹in Realität eine stetige Änderung der Zustandsgrößen innerhalb weniger freier Weglängen [Sig08]

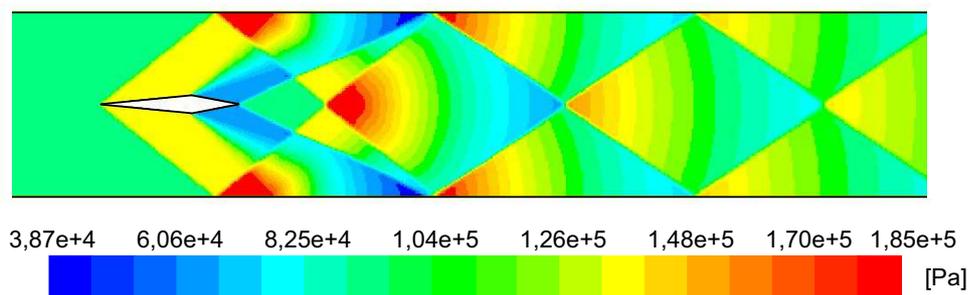


Abbildung 2.1: Druckverlauf in einer Kanalströmung mit $Ma=1,8$ (Anströmung von links) und reflektierten Verdichtungsstößen bei reibungsfreier Simulation.

wechselnden Variablen erzeugt, welches sich deutlich von einem subsonischen Strömungsfeld unterscheidet. Niedrige Geschwindigkeiten korrespondieren mit hohen Temperaturen, Drücken und Dichten und hohe Geschwindigkeiten mit niedrigen Werten. Entlang der Stromlinie sieht sich ein reagierendes Gasgemisch stark unterschiedlichen thermodynamischen Zuständen ausgesetzt, was im Fall von mehrfach reflektierten Stößen, wie in Abbildung 2.1, abwechselnd zu hohen und niedrigen Reaktionsraten und in speziellen Fällen sogar zum periodischen Zusammenbruch der Reaktionsrate führen kann. Diese Besonderheit hat sich Odam [Oda04] zunutze gemacht und die Produktion von Radikalen bzw. die Zündung in einer Scramjet-Brennkammer mit den Zonen hoher Temperatur gesteuert. Dieses Konzept wird mit *radical farming* bezeichnet.

Zusätzlich zu den nicht-viskosen Effekten treten im Überschall auch besondere viskose Effekte auf. Die mit steigender Mach-Zahl zunehmende Kompressibilität hat Auswirkungen auf die Turbulenz, welche heute aber noch nicht komplett verstanden werden (siehe [SD06]). Selbst die wesentlich einfacher zu beschreibende turbulente Scherschicht im Unterschall wirft noch Fragen auf. Einige Beobachtungen, gewonnen aus Experimenten und in zunehmenden Maß durch direkte numerische Simulation, beschreiben eine relative Abnahme turbulenter Geschwindigkeitsfluktuationen bei zunehmender Mach-Zahl. Der Strahlwinkel turbulenter Jets nimmt mit steigender Mach-Zahl ab, was eine schlechtere Vermischung bedeutet. Außerdem kann der

Temperaturanstieg aufgrund turbulenter Dissipation nicht mehr vernachlässigt werden. Im Gegensatz zu inkompressibler turbulenter Strömung steigen Druck-, Temperatur- und Dichte-Fluktuationen mit steigender Mach-Zahl an [LSF01] und können deshalb die Zündung eines sich im Überschall befindenden brennbaren Gasgemisches beeinflussen. Eine triviale aber wichtige Erkenntnis ist, dass die Aufenthaltszeit des reagierenden Gasgemischs extrem kurz ist. Da keine deflagrative Ausbreitung möglich ist, wird die Flamme durch Selbstzündung stabilisiert. Die Flammenstruktur wird durch die starke Turbulenz geprägt und unterscheidet sich deutlich von Flammen in konventionellen Anwendungen, die alle im Unterschall betrieben werden (siehe dazu Abschnitt 5.1).

2.3 Turbulente Strömungen

2.3.1 Charakteristiken der Turbulenz

Turbulente Strömungen zeichnen sich auf den ersten Blick dadurch aus, dass das Geschwindigkeitsfeld einen scheinbar chaotischen Charakter hat, da es in räumlicher Richtung als auch in zeitlicher Entwicklung fluktuiert. Tatsächlich besteht Turbulenz aus einer Überlagerung von Wirbeln verschiedener Größe. Wichtige Eigenschaften turbulenter Strömungen sind der effektivere Transport von Strömungseigenschaften (z.B. Impuls, Temperatur) und die wesentlich stärkere Mischung von Fluiden als es in laminaren Strömungen möglich ist [Pop00]. Ein wichtiger Parameter zur Beschreibung des Zustands einer Strömung ist die dimensionslose Reynolds-Zahl

$$Re = \frac{\mathcal{U} \cdot \mathcal{L}}{\nu}, \quad (2.9)$$

welche das Verhältnis aus Trägheitskräften zu Reibungskräften bildet. Diese Zahl wird mit einer charakteristischen Geschwindigkeit \mathcal{U} , einer charakteristischen geometrischen Länge \mathcal{L} des Problems und der kinematischen Viskosität ν des Fluids definiert. Turbulenz tritt nur bei großen Reynolds-Zahlen auf.

Das Auftreten eines breiten Spektrums von Wirbeln, die sich räumlich überla-

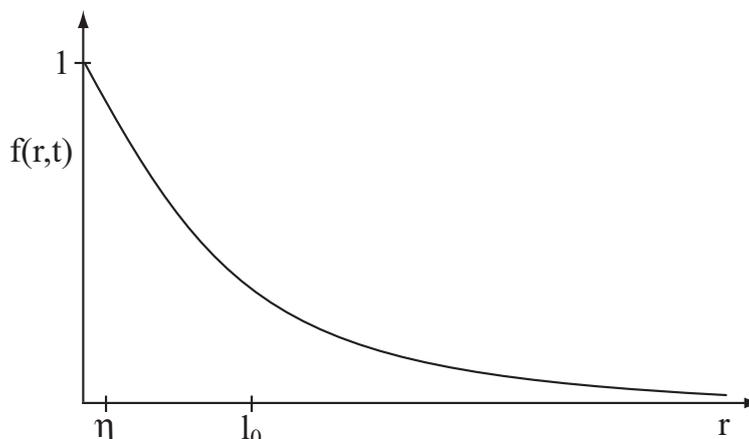


Abbildung 2.2: Zwei-Punkt Geschwindigkeits-Korrelation.

gern, kann wie folgt erklärt werden:

Die großen Wirbel werden durch Geschwindigkeitsgradienten in der Hauptströmung erzeugt und besitzen ungefähr die Abmessung des charakteristischen Längenmaßes \mathcal{L} . In dieser Wirbelklasse wird turbulente Energie produziert, wobei hier die Fluktuationen noch räumlich anisotrop sind, ausgerichtet an den verursachenden Geschwindigkeitsgradienten. Diese Wirbel zerfallen in einem kontinuierlichen Prozess in immer kleinere Wirbel, wobei der Transfer der turbulenten Energie immer von großen zu kleinen Wirbeln verläuft. Dieser Wirbelzerfall wird von Trägheitskräften bestimmt, welche die anfänglich anisotropen Fluktuationen räumlich hin zu isotroper Turbulenz umverteilen. Besitzt ein Wirbel der Abmessung l eine charakteristische Geschwindigkeit $u(l)$ und ein Zeitmaß $\tau(l) \equiv l/u(l)$, dann führt, nach den Hypothesen von Kolmogorov (1941), eine Absenkung von l zu einer kleineren Geschwindigkeit $u(l)$ und einem kleineren Zeitmaß $\tau(l)$ [Pop00]. Mit kleiner werdenden Wirbeln sinkt somit deren Reynolds-Zahl $Re_l = l \cdot u(l)/\nu$, bis bei ca. $Re_l \approx 1$ die viskosen Kräfte überwiegen. In dieser Klasse der kleinsten Wirbel, der sog. Kolmogorov-Wirbel, wird die turbulente Energie mit einer Dissipationsrate ε in innere Energie des Fluids umgewandelt.

Die Beschreibung der kontinuierlichen Wirbelverteilung kann mit Hilfe einer

Zwei-Punkt Geschwindigkeits-Korrelation durchgeführt werden:

$$R_{ij}(\vec{x}, \vec{r}, t) = \overline{u'_i(\vec{x}, t) u'_j(\vec{x} + \vec{r}, t)}. \quad (2.10)$$

Dabei werden gleichzeitig die Fluktuationen der Geschwindigkeitskomponenten an den Orten \vec{x} und $\vec{x} + \vec{r}$ bestimmt und deren Produkt zeitlich gemittelt. Überschreitet die Reynolds-Zahl einen bestimmten Wert, kann von isotroper Turbulenz ausgegangen werden. Für die homogene isotrope Turbulenz kann folgende entdimensionierte Korrelation mit dem Betrag $r = |\vec{r}|$ angeschrieben werden:

$$f(r, t) = R(r, t) / \overline{u'^2(r=0, t)}. \quad (2.11)$$

Ein qualitativer Verlauf dieser Funktion ist in Abbildung 2.2 dargestellt. Auf der Abszisse ist der Abstand r zwischen den zu korrelierenden beiden Orten aufgetragen, außerdem sind qualitativ zwei wichtige Wirbelgrößen des turbulenten Strömungsfeldes eingezeichnet. Das integrale Längenmaß l_0 eines solchen turbulenten Feldes ist definiert mit

$$l_0(t) = \int_0^\infty f(r, t) dr \quad (2.12)$$

und bestimmt die Abmessung der Wirbel mit der höchsten Energie. Neben l_0 ist auch die Größe η der oben erwähnten Kolmogorov-Wirbel eingezeichnet, welche die kleinstmöglichen Wirbel am Ende des Wirbelspektrums darstellen. Da die Turbulenz bei den kleinsten Skalen eine universelle Form hat, die nur von ν und ε abhängig ist, kann mittels einer Dimensionsanalyse deren Abmessung η und Zeitmaß τ_η wie folgt abgeschätzt werden.

$$\eta \equiv \left(\frac{\nu^3}{\varepsilon} \right)^{1/4} \quad (2.13)$$

$$\tau_\eta \equiv \left(\frac{\nu}{\varepsilon} \right)^{1/2} \quad (2.14)$$

Das Verhältnis der Längen- und Zeitskalen von integralen Wirbeln zu Kolmogorov-Wirbeln geben die Gleichungen 2.15 und 2.16 wieder. Hier wird deutlich, dass mit steigender Reynolds-Zahl die Kolmogorov-Wirbel kleiner werden.

$$\frac{l_0}{\eta} \propto Re^{3/4} \quad (2.15)$$

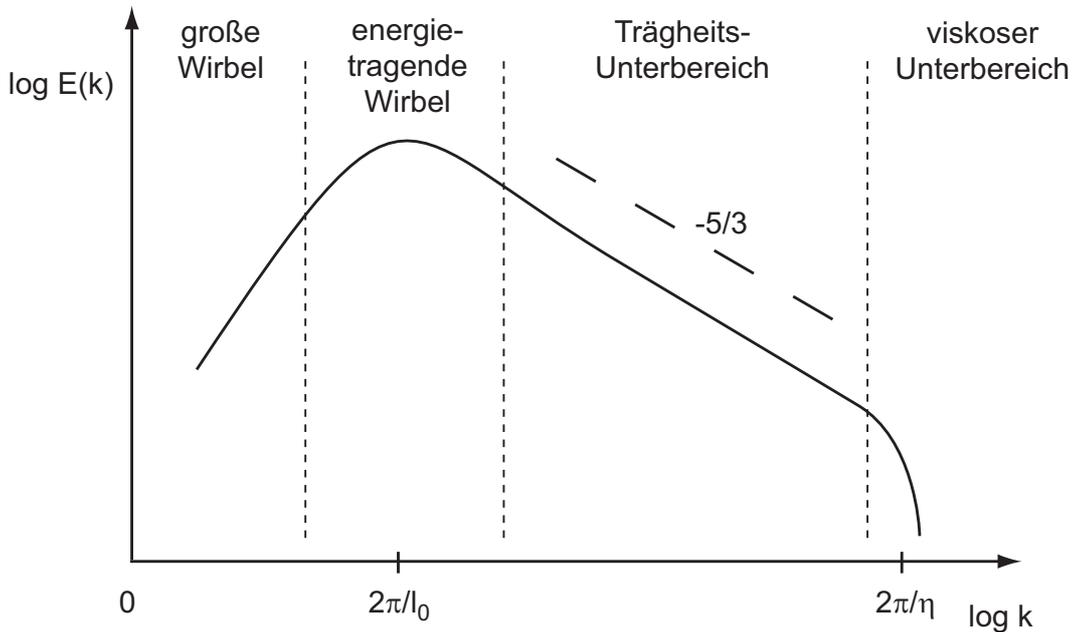


Abbildung 2.3: Qualitatives Energiespektrum in einem turbulenten Geschwindigkeitsfeld.

$$\frac{\tau_0}{\tau_\eta} \propto Re^{1/2} \quad (2.16)$$

Jedem Wirbel mit der charakteristischen Abmessung l kann eine Wellenzahl k mit $k = 2\pi/l$ zugeordnet werden. Eine räumliche Fourier-Transformation der Geschwindigkeits-Korrelation $R(r, t)$ liefert mit

$$E(k, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-i k r) R(r, t) dr \quad (2.17)$$

die spektrale Energie-Verteilungsdichte $E(k, t)$ von $\overline{u'u'}(t)$ im Wellenzahlraum. Diese Spektralfunktion ist in Abbildung 2.3 dargestellt. Das Integral $\int E dk$ stellt denjenigen Beitrag zur kinetischen Turbulenzenergie dar, der von den Wirbeln der Wellenzahl k mit $k^* < k < (k^* + dk)$ stammt. An diesem Spektrum ist zu erkennen, dass vereinzelte große Wirbel einen kleineren Beitrag zur Turbulenzenergie liefern, als Wirbel des integralen Längenmaßes l_0 . Ausgehend von der Annahme einer universellen und isotropen Form der Turbulenz und einer Dimensionsanalyse ergibt sich das Energiedichte-Spektrum im

Trägheits-Unterbereich zu

$$E(k) = C \varepsilon^{2/3} k^{-5/3}, \quad (2.18)$$

mit der universellen Konstante $C = 1,44 \pm 0,06$ [Fri00]. Der Energiefluss im Trägheits-Unterbereich von großen zu kleinen Wirbeln wird auch als Energiekaskade bezeichnet und entspricht in seinem Wert der Dissipationsrate ε .

2.3.2 Navier-Stokes Gleichungen

Die Gleichungen für die kompressible und reibungsbehaftete Strömung gehen zurück auf Navier und Stokes, die ein System partieller Differentialgleichungen an einem infinitesimal kleinen Fluidelement hergeleitet hatten. Unter der Annahme einer Kontinuumsströmung wurden die Erhaltungsgleichungen 2.19-2.21 bestimmt²:

Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j)}{\partial x_j} = 0 \quad (2.19)$$

Impulsgleichung

$$\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j u_i)}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} \quad (2.20)$$

Energiegleichung

$$\frac{\partial(\rho E)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(u_j(\rho E + p)) = \frac{\partial}{\partial x_j}(\tau_{ij} u_i + q_j) + S_h \quad (2.21)$$

Die Kontinuitätsgleichung ist eine Erhaltungsgleichung für die Masse, beschrieben durch die Dichte ρ und den Geschwindigkeitsvektor \vec{u} (u_i stellt die Geschwindigkeitskomponente in i -Richtung dar), t und \vec{x} sind zeitliche und räumliche Koordinaten. In der Impulsgleichung wird eine Bilanz über alle Kräfte gebildet, mit dem Druck p und dem Schubspannungstensor $\overline{\tau}$. Für Fluide, deren Viskosität unabhängig von der Schergeschwindigkeit ist, was bei allen Gasen zutrifft, wird der Ansatz von Newton verwendet:

$$\tau_{ij} = \mu(T) \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right). \quad (2.22)$$

²Es findet die Einsteinsche Summationskonvention Anwendung, d.h. es wird über gleiche Indizes summiert.

Die hier auftretende dynamische Viskosität μ hängt nicht vom Druck ab, ist aber proportional zur Wurzel aus der Temperatur (siehe [WMD01]). Die im Schubspannungstensor auftretenden Normalspannungen τ_{ii} sind bei Gasen sehr gering und können vernachlässigt werden.

Im Gegensatz zur Kontinuitäts- und Impulsgleichung kann die Energiegleichung verschiedene Formen besitzen, je nachdem welche Größe bilanziert und transportiert wird [PV05]. Neben der inneren Energie können auch die Anteile der kinetischen oder der chemischen Energie mit inbegriffen sein. Im verwendeten CFD-Löser *FLUENT 6.2* wird die totale Energie

$$E = h - \frac{p}{\rho} + \frac{|\vec{u}|^2}{2}, \quad (2.23)$$

bestehend aus innerer und kinetischer Energie, verwendet [Flu05]. Für ein Gasmisch, bestehend aus N Spezies mit den Massenbrüchen Y_i , schreibt sich die sensible Enthalpie

$$h = \sum_{s=1}^{N_s} Y_s h_s \quad \text{mit} \quad h_s = \int_{T_0}^T c_{p,s} dT. \quad (2.24)$$

Die Komponente q_j des Wärmestromvektors \vec{q} in Gleichung (2.21) steht für den Wärmestrom in Richtung x_j aufgrund von Wärmeleitung, welche nach dem Gesetz von Fourier berechnet wird:

$$q_j = -\lambda(T) \frac{\partial T}{\partial x_j}. \quad (2.25)$$

Die kinetische Gastheorie zeigt, dass die Wärmeleitfähigkeit λ zwar dichteunabhängig, aber ebenso wie die Viskosität proportional zu $T^{0,5}$ ist [Fro88]. Der Quellterm $\tau_{ij} u_i$ beschreibt die Umwandlung von kinetischer Energie in innere Energie aufgrund viskoser Reibung. Der Term S_h ist eine Wärmequelle, verursacht durch chemische Reaktion.

Um das Gleichungssystem schließen zu können, wird ein weiterer Zusammenhang benötigt. Dieser findet sich in der thermischen Zustandsgleichung

$$p = \rho RT. \quad (2.26)$$

Die Gleichungen 2.19-2.20 werden als Navier-Stokes Gleichungen bezeichnet. Damit lassen sich theoretisch alle Strömungsprobleme berechnen. Praktisch

ist dies aber nicht möglich, da alle Skalen des turbulenten Strömungsfeldes aufgelöst werden müssten und somit auch alle Vorgänge bis hinunter zum Kolmogorovschen Längenmaß η .

2.3.3 Reynolds-Mittelung und Turbulenzmodelle

Da die Lösung eines Strömungsproblems durch *direkte numerische Simulation* (DNS) nicht praktikabel ist, wird, statt die Turbulenz direkt zu berechnen, diese durch einen statistischen Ansatz modelliert. Diese Idee geht zurück auf Reynolds (1883), der die fluktuierenden Strömungsvariablen in einen Mittelwert und einen Schwankungswert aufteilte:

$$u_i = \overline{u_i} + u'_i. \quad (2.27)$$

Neben diesem statistischen Mittelwert ist bei kompressiblen Strömungen der von Favre (1969) vorgeschlagene massengewichtete Mittelwert

$$u_i = \tilde{u}_i + u''_i \quad \text{mit} \quad \tilde{u}_i = \overline{\rho u_i} / \overline{\rho} \quad (2.28)$$

von großer Bedeutung, da er zu einfacheren Gleichungen führt. Die Berücksichtigung der Fluktuation mittels der Aufspaltung in Mittelwert und Schwankungswert wird Momenten-Methode genannt, da der Mittelwert das erste Moment darstellt und aus dem Schwankungswert das zweite zentrale Moment berechnet wird [Hei03] (siehe Abschnitt 2.5).

Werden in den Navier-Stokes Gleichungen alle fluktuierenden Variablen durch die Reynolds-Mittelung (ρ und p) bzw. die Favre-Mittelung (u_i und E) ersetzt und diese Gleichungen anschließend zeitlich gemittelt, entstehen die *Reynolds Averaged Navier-Stokes* Gleichungen, auch RANS genannt. Im Gegensatz zur gemittelten Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial \overline{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial (\overline{\rho} \tilde{u}_j)}{\partial x_j} = 0, \quad (2.29)$$

die sich in ihrer Form nicht verändert, entstehen in der gemittelten Impuls- und Energiegleichung neue Terme höherer Ordnung:

$$\frac{\partial (\overline{\rho} \tilde{u}_i)}{\partial t} + \frac{\partial (\overline{\rho} \tilde{u}_j \tilde{u}_i)}{\partial x_j} = - \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\tau}_{ij} - \overline{\rho u''_i u''_j}) \quad (2.30)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\bar{\rho} \tilde{E})}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{E}) = \\ - \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho} \widetilde{u_j'' E''} - \bar{q}_i) - \bar{p} \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_j} - \overline{p' \frac{\partial u_j'}{\partial x_j}} + \overline{\tau_{ij} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j}} + \overline{\tau'_{ij} \frac{\partial u_i'}{\partial x_j}} + \bar{S}_h. \end{aligned} \quad (2.31)$$

In der gemittelten Impulsgleichung 2.30 erscheint ein zusätzlicher Term $\overline{\rho u_i'' u_j''}$, welcher *Reynoldsscher Spannungstensor* genannt wird. Die gemittelte Energiegleichung 2.31 enthält den *turbulenten Energiefluss* $\overline{\rho \widetilde{u_j'' E''}}$, die *Druckdilatation* $\overline{p' \partial u_j' / \partial x_j}$ und die *turbulente Dissipationsrate* $\overline{\tau'_{ij} \partial u_i' / \partial x_j}$. Um das Gleichungssystem zu schließen, müssen diese unbekanntenen Terme modelliert werden, was im Allgemeinen über algebraische Modelle oder Transportgleichungen dieser Terme geschieht [Fri00].

Der wichtigste Term für die Modellierung der Turbulenz ist der Reynoldssche Spannungstensor:

$$\overline{\rho u_i'' u_j''} = \bar{\rho} \widetilde{u_i'' u_j''} = \bar{\rho} \begin{pmatrix} \widetilde{u_1''^2} & \widetilde{u_1'' u_2''} & \widetilde{u_1'' u_3''} \\ \widetilde{u_2'' u_1''} & \widetilde{u_2''^2} & \widetilde{u_2'' u_3''} \\ \widetilde{u_3'' u_1''} & \widetilde{u_3'' u_2''} & \widetilde{u_3''^2} \end{pmatrix}. \quad (2.32)$$

Ausgehend von den Gleichungen 2.19 und 2.20 lässt sich für jedes Element des Spannungstensors eine Transportgleichung herleiten [Fri00]. Diese enthält nicht nur ungeschlossene Korrelationen 2. Ordnung, sondern auch eine Korrelation 3. Ordnung. Das bedeutet, dass die gemittelten Navier-Stokes Gleichungen nicht durch diesen Ansatz geschlossen werden können, da jede Transportgleichung eines ungeschlossenen Terms i. Ordnung einen Term (i+1). Ordnung enthält. Daraus folgt, dass diese Korrelationen modelliert werden müssen.

Das sog. *Reynolds-Spannungs-Modell* (RSM) berechnet oben genannten Spannungstensor, indem für die einzelnen Elemente die Transportgleichungen berechnet werden. Die ungeschlossenen Korrelationen 2. und 3. Ordnung werden modelliert. Da der Tensor symmetrisch ist ($\widetilde{u_1'' u_2''} = \widetilde{u_2'' u_1''}$), müssen nur sechs Transportgleichungen gelöst werden. Zusätzlich wird eine Transportgleichung für die turbulente Dissipation berechnet, womit das RSM-Modell aus sieben Gleichungen besteht.

Das RSM-Modell ist in der Lage, im Rahmen der Genauigkeit der Modellierung, anisotrope Turbulenz wiederzugeben. Es eignet sich u.a. für drallbehaftete Strömungen oder für Strömungen mit stark gekrümmte Stromlinien [Flu05, Fri00, Pop00].

Einen anderen Weg in der statistischen Turbulenz-Modellierung gehen die Wirbelviskositäts-Modelle, welche die Auswirkungen des Reynoldsschen Spannungstensors auf die Strömung betrachten und diesen dahingehend modellieren. Der Reynoldssche Spannungstensor wird in Analogie zur molekularen Viskosität über die Boussinesq-Approximation bestimmt:

$$-\bar{\rho} \widetilde{u''_i u''_j} = \mu_t \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \right) - \frac{2}{3} \delta_{ij} \bar{\rho} k. \quad (2.33)$$

Die Berechnung von μ_t kann über Nullgleichungs-, Eingleichungs- oder Zweigleichungsmodelle geschehen. Das am weitesten verbreitete statistische Turbulenzmodell ist das Zweigleichungsmodell von Jones und Launder (1972), das sog. $k - \varepsilon$ Modell. Die Summe der Diagonalelemente des Reynoldsschen Spannungstensors wird als turbulente kinetische Energie

$$k = \frac{1}{2} \frac{\overline{\rho u''_i u''_i}}{\bar{\rho}} \quad (2.34)$$

bezeichnet. Wenn in der Transportgleichung des Spannungstensors die Fluktuationen gleicher Geschwindigkeitskomponenten ($i=j$) eingesetzt werden, führt dies zu einer Transportgleichung für die turbulente kinetische Energie:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} k) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} k \tilde{u}_j) &= -\overline{\rho u''_i u''_j} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} \\ -\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{1}{2} \overline{\rho u''_i u''_i u''_j} + \overline{u'_j p'} - \overline{u'_j \tau'_{ij}} \right) &- \overline{u''_i} \left(\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} - \frac{\partial \overline{\tau'_{ij}}}{\partial x_j} \right) + \overline{p' \frac{\partial u'_j}{\partial x_j}} - \overline{\tau'_{ij} \frac{\partial u'_i}{\partial x_j}}. \end{aligned} \quad (2.35)$$

Auf der rechten Seite sind die Terme von links nach rechts: Produktion der Turbulenzenergie (P_k), turbulente Diffusion, Kompressibilitätseffekte und turbulente Dissipation. Wegen der herausragenden Bedeutung der turbulenten Dissipation in der Theorie der Turbulenz ist es sinnvoll diese Größe so genau wie

möglich zu berechnen. Eine Transportgleichung für die turbulente Dissipation kann hergeleitet werden, enthält aber zahlreiche schwer zu modellierende Terme. Daher haben Jones and Launder in ihrem k- ε Modell eine halbempirische Gleichung vorgeschlagen [Hof04, PV05]:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\varepsilon\tilde{u}_j) = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\bar{\rho}\left(\nu + \frac{\nu_t}{\sigma_\varepsilon}\right)\frac{\partial\varepsilon}{\partial x_j}\right) + C_{\varepsilon 1}\frac{\varepsilon}{k}P_k - C_{\varepsilon 2}\bar{\rho}\frac{\varepsilon^2}{k}. \quad (2.36)$$

Darin sorgt der erste Term der rechten Seite für die Diffusion, der mittlere für die Produktion und der rechte Term für eine Abnahme von ε . Mit Hilfe dieser beiden Transportgleichungen wird die Wirbelviskosität wie folgt abgeschätzt:

$$\mu_t = \bar{\rho}C_\mu\frac{k^2}{\varepsilon}. \quad (2.37)$$

2.3.4 Der chemische Quellterm

Bei Strömungsproblemen, die einen Transport verschiedener Spezies benötigen, wie zum Beispiel Mischungs- oder Verbrennungsvorgängen, erweitern sich die Navier-Stokes Gleichungen um Transportgleichungen für die Spezies. Werden die Speziesgleichungen in Massenbrüchen Y_s formuliert, sind für N Spezies (N-1) Transportgleichungen der Form

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{Y}_s)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{u}_j\tilde{Y}_s) = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\bar{\rho}\mathcal{D}_s\frac{\partial\tilde{Y}_s}{\partial x_j}\right) - \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\widetilde{u_j''Y_s''}) + \bar{\omega}_s \quad (2.38)$$

nötig, da für Massenbrüche $\sum_{s=1}^{N_s} Y_s = 1$ gilt. Der erste Term der rechten Seite beschreibt die molekulare Diffusion mittels eines vereinfachten Diffusionskoeffizienten \mathcal{D}_s , welcher nur die Diffusion der Spezies s in die Mischung berücksichtigt³. In Strömungen mit hohen Reynolds-Zahlen ist dieser Term klein und kann vernachlässigt werden [Pet00]. Der mittlere Term beschreibt den turbulenten Transport der Spezies s. Für diesen Term kann als Näherung die Gradienten-Transport-Annahme eingesetzt werden, mit

$$\widetilde{u_j''Y_s''} = -\mathcal{D}_t\frac{\partial\tilde{Y}_s}{\partial x_j} = -\frac{\nu_t}{Sc_t}\frac{\partial\tilde{Y}_s}{\partial x_j}. \quad (2.39)$$

³In diesem Fall wird über den Index s nicht summiert.

Die Schmidt-Zahl $Sc = \nu/\mathcal{D}$ ist das Verhältnis aus Viskosität zu Diffusion. Sie beschreibt den Impuls-Transport durch Diffusion bezogen auf den Spezies-Transport durch Diffusion [Pol04]. Die turbulente Schmidt-Zahl ist angelehnt an ihren laminaren Wert und wird darum standardmäßig abgeschätzt mit $Sc_t \approx 0,7$.

Die bis jetzt verwendeten Momenten-Methoden haben die Korrelationen stochastisch fluktuierender Strömungsvariablen in isotroper Turbulenz beschrieben. Der Quellterm $\bar{\omega}$ in Gleichung 2.38 besitzt eine funktionale Abhängigkeit von der Temperatur und der Spezies-Zusammensetzung (siehe Gleichungen 2.2 - 2.4). Diese Gleichungen besitzen einen exponentiellen Charakter und könnten daher nur über eine große Zahl höherer Momente modelliert werden [Pet00], was nicht praktikabel ist. Daher muss für diesen Term ein alternativer Schließungsansatz verwendet werden. Einer dieser Ansätze ist die Verwendung von angenommenen Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen, welcher Inhalt dieser Arbeit ist.

Wegen der Berücksichtigung reaktiver Spezies durch die oben beschriebene Transportgleichung kann, je nach Formulierung der Energiegleichung, ein zusätzlicher Quellterm darin auftauchen [PV05]. Im Fall der hier verwendeten Formulierung (Gleichung 2.23) tritt der folgende Quellterm auf der rechten Seite von Gleichung 2.31 auf:

$$\bar{S}_h = - \sum_{s=1}^{N_s} \frac{\bar{h}_s^0}{M_s} \bar{\omega}_s. \quad (2.40)$$

Dieser Quellterm verursacht keinen zusätzlichen Aufwand, da die Reaktionsraten der Spezies bereits in der Speziesgleichung berechnet wurden.

2.4 Turbulente Verbrennung

Bei der Verbrennungsmodellierung werden vier wesentliche Fälle unterschieden: vorgemischte und nicht-vorgemischte Verbrennung mit den jeweiligen Aufteilungen in laminare und turbulente Flammen. In der Praxis finden die laminaren Flammen in der Heiztechnik ihre Anwendung, während in vielen anderen technischen Anwendungen wie Kolbenmotoren, Gasturbinen, Raketentriebwerken oder Öfen turbulente Zustände herrschen. Um turbulente Flammen verstehen und beschreiben zu können, ist die Betrachtung der einfacheren, laminaren Flamme notwendig, da diese alle grundlegenden Prozesse enthält.

2.4.1 Vorgemischte Verbrennung

Unabdingbar für jede chemische Reaktion ist, dass die Reaktanten auf molekularer Ebene gemischt sind. Bei der vorgemischten Verbrennung werden Oxidator und Brennstoff vor der Brennkammer (oder Düse) zusammengeführt und vollkommen gemischt. Dies geschieht bei einer Temperatur die deutlich unterhalb der Temperatur der Selbstzündung liegt. Wird das Gasgemisch an einer Stelle gezündet, können Flammen durch dieses hindurch propagieren. Die Flammenfront kann sich auf drei wesentliche Arten räumlich fortpflanzen: durch laminare oder turbulente Flammenausbreitung (auch als Deflagration bezeichnet), sowie durch Detonation. Während sich bei der Detonation die Flamme mit einer Druckwelle ausbreitet, und dabei sehr hohe Geschwindigkeiten erreichen kann (mehr als 1000 m/s), bestimmen bei der Deflagration Transportprozesse die Ausbreitungsgeschwindigkeit ($\mathcal{O}(1 \text{ m/s})$).

Ein wichtiger Parameter der vorgemischten Verbrennung ist die laminare Flammengeschwindigkeit. Diese ist definiert als die Geschwindigkeit, mit der sich die ebene Flammenfront relativ zum anströmenden Frischgas bewegt. Die Ausbreitung der Flamme geschieht aufgrund folgender im Gleichgewicht stehenden Prozesse: Reaktion, Diffusion und Wärmeleitung. Die sich daraus ergebende Flammenstruktur ist in Abbildung 2.4 dargestellt. Durch die starken Gradienten an der Flammenfront wird die angrenzende Frischluft er-

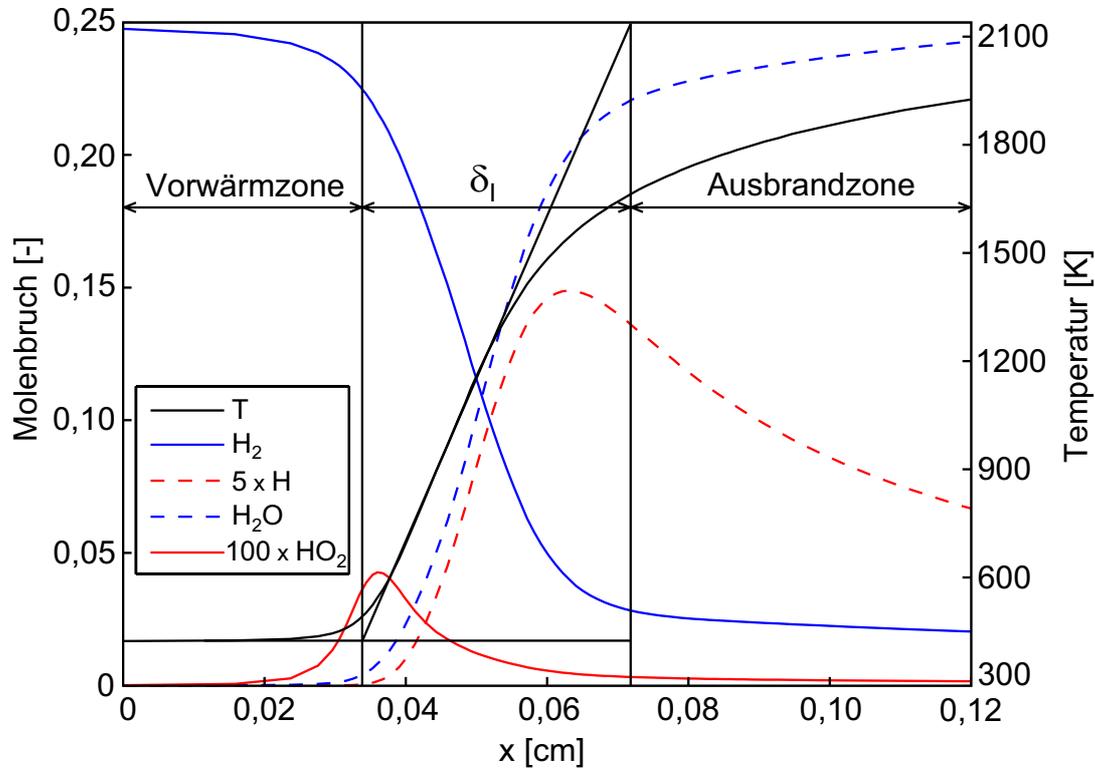


Abbildung 2.4: Eindimensionale Flammenstruktur einer stöchiometrischen H_2 -Vormischflamme.

wärmt und es diffundieren Radikale und Produkte in diesen Bereich. Dadurch startet die Reaktion vor der Flammenfront, so dass sich Wärmefreisetzung und Wärmeleitung überlagern. Die Geschwindigkeit dieses Vorgangs bzw. die daraus resultierende Flammengeschwindigkeit ist abhängig von Art des Brennstoffs, der Luftzahl, der Temperatur des Frischgases und des Umgebungsdruckes:

$$S_l^0 = f(\lambda, T, p), \quad (2.41)$$

was die Flammengeschwindigkeit damit zu einer Eigenschaft eines Gasgemisches macht. Die drei oben genannten Variablen haben qualitativ folgende Einflüsse auf eine Wasserstoff-Flamme [Pet94]:

- Die Flammengeschwindigkeit wird maximal in dem Bereich $\lambda \approx 0,8$ und

fällt für große oder kleine λ in Richtung Null ab.

- Die Druckabhängigkeit der Flammengeschwindigkeit hängt von der effektiven Reaktionsordnung der Verbrennungsreaktion ab. Bei Wasserstoff ist die Reaktionsordnung $n \approx 2$, was zu einem Abfall der Flammengeschwindigkeit mit $S_1 \sim p^{-0,5}$ führt.
- Der Einfluss der Temperatur des Frischgases ist sehr groß, da mit der Temperatur die laminare Flammengeschwindigkeit quadratisch ansteigt.

Verschiedene Kohlenwasserstoffe besitzen bei Standardbedingungen laminare Flammengeschwindigkeiten zwischen 40-80 cm/s (vgl. [WMD01]). Aufgrund der hohen Diffusivität von Wasserstoff lässt sich seine, im Vergleich zu Kohlenwasserstoffen, hohe laminare Flammengeschwindigkeit von ca. 300 cm/s erklären.

Neben thermodynamischen und chemischen Parametern, welche die Geschwindigkeit einer ebenen laminaren und somit eindimensionalen Flamme bestimmen, beeinflussen in realen zwei- und dreidimensionalen Flammen die Form der Flammenfront sowie deren zeitliche Veränderung die laminare Flammengeschwindigkeit. So kann die Flammenfront durch Scherschichten oder turbulente Wirbel verformt und dadurch gestreckt werden. Dieser Vorgang wird durch den Streckungsfaktor

$$\kappa = \frac{1}{A} \frac{dA}{dt} \quad (2.42)$$

beschrieben, welcher ein Maß für die relative zeitliche Änderung eines Elementes der Flammenoberfläche ist. Abhängig vom Verhältnis aus Temperaturleitfähigkeit und stofflicher Diffusion des Brennstoffs, welches mit der Lewis-Zahl

$$Le = \frac{\lambda}{\rho c_p \mathcal{D}} \quad (2.43)$$

ausgedrückt wird, ergibt sich mit einem steigenden Streckungsfaktor, zum Beispiel für eine magere H_2 -Luft Flamme ($Le < 1$), eine höhere Flammengeschwindigkeit. Dagegen sinkt die laminare Flammengeschwindigkeit mit steigendem κ für Brennstoffe mit $Le > 1$ [PV05]. In beiden Fällen führt ein

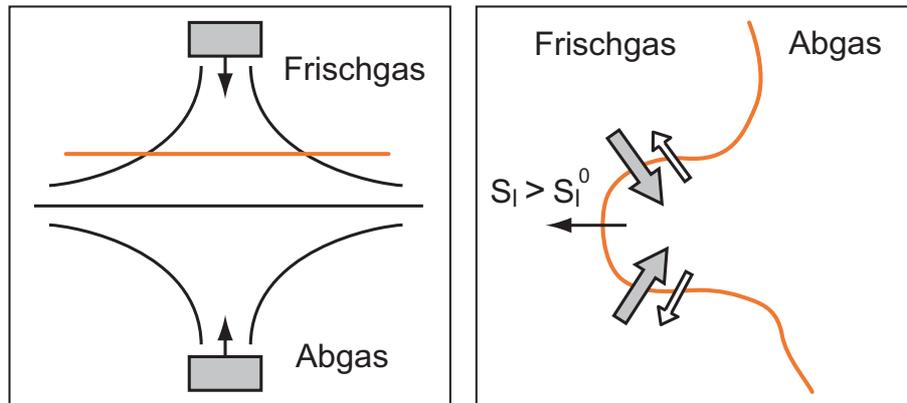


Abbildung 2.5: Beispiel einer gestreckten Flamme (links) und einer gekrümmten Flamme (rechts). Hier dominiert die Stoffdiffusion (graue Pfeile) die Wärmeleitung (weiße Pfeile), was zu einer neuen Flammengeschwindigkeit S_l führt.

zu starker Streckungsfaktor schließlich lokal zum Verlöschen der Flamme. Den häufig untersuchten Fall einer gestreckten laminaren Flamme in einer Gegenstrom-Brennerkonfiguration zeigt die linke Seite der Abbildung 2.5. Die Flammengeschwindigkeit wird außerdem durch die Krümmung der Flammenfront beeinflusst. Durch eine lokale Krümmung der Flammenfront ändert sich das Gleichgewicht aus Wärmeleitung bzw. Temperaturdiffusion und Stoffdiffusion, welches in einer ebenen Flamme eine bestimmte Geschwindigkeit S_l^0 zur Folge hatte. Liegt eine konvexe Krümmung in Richtung Frischgas vor, dann kann im Fall $Le < 1$ mehr Frischgas in die Reaktionszone diffundieren als Wärme zum kalten Frischgas abgeleitet wird. Dadurch steigt die Flammengeschwindigkeit (siehe Abbildung 2.5, rechts), wobei derselbe Mechanismus bei $Le > 1$ ein Sinken der Flammengeschwindigkeit verursacht. Bei einer Krümmung in Richtung Abgas verhalten sich die Geschwindigkeiten entgegengesetzt.

Für die Flammendicke existieren verschiedene Definitionen, was einsichtig ist, da die Flamme selbst keine klaren Grenzen hat. Eine auf den Temperaturverlauf in der Flammenfront zurückgehende Definition kann wie folgt ange-

geben werden [PV05]:

$$\delta_l = \frac{T_b - T_u}{\max\left(\frac{dT}{dx}\right)}. \quad (2.44)$$

Mit dieser Abschätzung ergibt sich zum Beispiel aus Abbildung 2.4 für eine laminare H_2 -Flamme eine Dicke von ca. 0,4 mm. Ähnlich der laminaren Flammengeschwindigkeit ist auch die Flammendicke keine Konstante, sondern abhängig von thermodynamischen Parametern sowie der Art des Brennstoffs [Boc01]. Für den Fall einer Wasserstoff-Flamme ergibt sich aus der vereinfachten thermischen Analyse⁴ mit einer Reaktionsordnung $n \approx 2$ folgende Beziehungen:

- Die Flammendicke nimmt mit steigender mittlerer Temperatur der Flammenzone ab.
- Es ergibt sich für alle Brennstoffe dass die Flammendicke bei steigendem Druck geringer wird. Für Wasserstoff gilt näherungsweise $\delta_l \sim p^{-1}$.
- Hohe Diffusionskoeffizienten ($Le < 1$) bewirken eine Zunahme der Flammendicke [Krö03]. Daher hat Wasserstoff im Vergleich zu Methan eine ähnliche Flammendicke, obwohl bei der Verbrennung von Methan wesentlich mehr Spezies involviert sind.

Die Eigenschaften der Flamme in einer turbulenten Strömung, wie Struktur, Ausbreitungsgeschwindigkeit und Dicke, unterscheiden sich deutlich von denen der laminaren Flamme. Denn die in einer turbulenten Strömung auftretenden Wirbelstrukturen können, je nach Stärke der Turbulenz, die laminare Flammenfront wellen, falten oder sogar verrühren. Das wichtigste Resultat dieses Vorgangs ist eine turbulente Flammengeschwindigkeit, die höher ist als die Flammengeschwindigkeit in einer entsprechenden laminaren Strömung. Heute existiert eine Vielzahl von empirischen Korrelationen für die turbulente Flammengeschwindigkeit. Eine häufig verwendete Formulierung ist

$$\frac{S_t}{S_l} = 1 + C \cdot \left(\frac{u'_{rms}}{S_l}\right)^d \quad (2.45)$$

⁴Mit Hilfe mehrerer Vereinfachungen, u.a. einer Einschrittkinetik und $Le = 1$, wird eine eindimensionale Bilanz der Flammenfront durchgeführt. Dabei wird über ein vorgegebenes, stückweise lineares Temperaturprofil integriert, um Aussagen über die laminare Flammengeschwindigkeit und Flammendicke zu erhalten [Boc01].

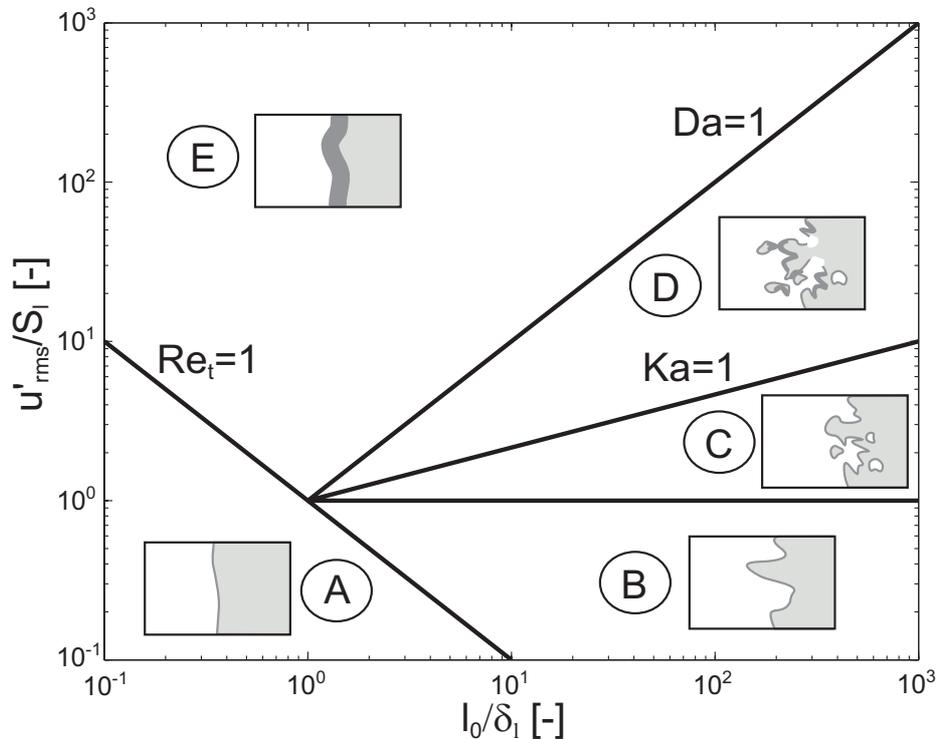


Abbildung 2.6: Flammenregime bei vorgemischter Verbrennung nach Borghi [WMD01].

mit den Konstanten C und d , deren Werte jeweils zwischen 0 und 1 liegen. Die turbulente Flammengeschwindigkeit wächst demnach nichtlinear mit der Turbulenzintensität an. Da der Exponent d kleiner Eins ist, wird die Zunahme von S_t mit steigender Turbulenzintensität geringer. Dies liegt an den lokalen Löschvorgängen, welche mit größer werdendem u'_{rms} zunehmen. Bei zu starken Geschwindigkeitsschwankungen wird die Flammenfront durch turbulente Mischung zerstört, mit der Folge der globalen Flammenlöschung.

Die turbulente Flammengeschwindigkeit ist also keine Eigenschaft des Gasgemisches, da sie zusätzlich zu den thermodynamischen und chemischen Eigenschaften des Gases auch noch durch den Charakter der turbulenten Strömung bestimmt wird. Die verschiedenen Regime, in denen sich eine turbulente und vorgemischte Flamme bewegen kann, sind in Abbildung 2.6 dargestellt. Auf der Abszisse ist der dimensionslose Quotient aus integralem Längenmaß

und laminarer Flammendicke aufgetragen, wobei die Flammendicke (Gleichung 2.44) durch eine Näherung aus der vereinfachten thermischen Analyse ersetzt wird:

$$\delta_l = \frac{\mathcal{D}}{S_l}. \quad (2.46)$$

Die Ordinate enthält einen dimensionslosen Wert, gebildet aus charakteristischen Geschwindigkeiten von Turbulenz und Flamme. Aus diesen Werten kann eine turbulente Reynolds-Zahl mit

$$Re_t = \frac{u'_{rms} l_0}{\delta_l S_l} \quad (2.47)$$

definiert werden, als auch die Damköhler-Zahl

$$Da = \frac{\tau_0}{\tau_c} = \frac{l_0 S_l}{\delta_l u'_{rms}}. \quad (2.48)$$

Die Damköhler-Zahl ist für die turbulente Verbrennung ein wichtiger Parameter, da sie das Verhältnis von chemischem zu integrelem turbulenten Zeitmaß wiedergibt. Eine ähnliche Aussage trifft die Karlovitz-Zahl, wobei hier statt des Zeitmaßes der großen Wirbel die kleinsten Wirbelstrukturen, also die Kolmogorov-Wirbel, auf das chemische Zeitmaß bezogen werden:

$$Ka = \frac{\tau_c}{\tau_\eta} = \frac{\delta_l}{S_l \tau_\eta}. \quad (2.49)$$

Das Borghi-Diagramm geht zurück auf die Theorie von Damköhler, welche besagt, dass großskalige Turbulenz die Flammenfront faltet, ohne die Flammenstruktur (siehe Abbildung 2.4) zu beeinflussen, wohingegen kleinskalige Turbulenz primär die Transportprozesse innerhalb der Flamme verändert [LW80]. Diese Idee wird in Abbildung 2.6 in einem doppelt logarithmischen Diagramm dargestellt. Das Borghi-Diagramm ist in fünf Bereiche unterteilt, in welche sich bei Kenntnis der vier Achsen-Parameter verschiedene Flammen eindeutig zuordnen lassen. In den Randbereichen, gekennzeichnet durch die Geraden $Da=1$, $Ka=1$, $Re_t = 1$ und $\frac{u'_{rms}}{S_l} = 1$, können sich die folgenden Effekte überlagern:

Der Bereich *A* kennzeichnet laminare Flammen und wird durch die Gerade mit $Re_t = 1$ begrenzt. Hier ist das Produkt der turbulenten Geschwindigkeit

und des integralen Längenmaßes kleiner als das Produkt der entsprechenden Größen der laminaren Flamme (S_l und δ_l), so dass die laminare Flamme durch turbulente Wirbel nicht beeinflusst wird. Solange $Ka < 1$ ist, sind die chemischen Zeitskalen kleiner als jede turbulente Zeitskala und die Flammendicke ist kleiner als die Kolmogorov-Skala. In diesem Regime ist die Flammenfront durch die Turbulenz gefaltet, besitzt aber lokal noch ihre laminare Struktur. Abhängig vom Geschwindigkeitsverhältnis kann dieses Regime noch in zwei Bereiche unterteilt werden: Wenn $u'_{rms} < S_l$ ist hat die Turbulenz keine weiteren Auswirkungen auf die gefaltete Flammenfront (Bereich *B*). Ist $u'_{rms} > S_l$ kann die Flammenfront so weit gefaltet werden, dass es zu Interaktionen verschiedener Flammenfronten kommt [PV05]. Das führt zu Inselbildungen verbrannten Gases oder Einschluss unverbrannten Gases (Bereich *C*). Im Bereich *D* ist die Flammendicke größer als die kleinsten Wirbel. Dies hat zur Folge, dass die Kolmogorov-Wirbel innerhalb der Flammenfront für turbulente Mischung sorgen und die laminare Struktur verloren geht. Es entstehen verdickte und aufgerissene Flammenfronten. Das Regime mit $Da < 1$ wird als idealer Rührreaktor bezeichnet, da alle turbulenten Zeitskalen kleiner sind als die chemische Zeitskala und somit starke turbulente Durchmischung vorliegt (Bereich *E*). Die Flammenfront ist in diesem Regime stark verbreitert. Die durch den turbulenten Transport verursachte Wärmeabfuhr aus der Flammenfront kann in diesem Bereich auch zur Löschung der gesamten Flamme führen⁵.

2.4.2 Nicht-vorgemischte Verbrennung

Neben der vorgemischten Verbrennung existiert als Gegensatz die nicht-vorgemischte Verbrennung. Hier werden Brennstoff und Oxidator erst am Ort der Verbrennung zusammengeführt, die Mechanismen Mischung und Verbrennung finden also gleichzeitig statt. Eine laminare nicht-vorgemischte Flamme besitzt folgende Eigenschaften [Pet00, PV05, WMD01]:

- An der Grenze zwischen Brennstoff und Oxidator diffundieren beide

⁵Prinzipiell kann es in jedem Flammenregime auch durch einen Kontakt der Flamme mit einer kalten Wand zur lokalen Löschung kommen.

Edukte ineinander. Die Reaktionszone bildet sich in einem Bereich, wo die Edukte in ausreichendem Maße vorhanden sind, also ungefähr bei stöchiometrischem Verhältnis. Die Reaktion wird aufrecht erhalten indem Brennstoff und Oxidator in die Reaktionszone diffundieren. Die Produkte der Verbrennungsreaktion sowie die dabei freigesetzte Wärme diffundieren wiederum aus der Reaktionszone hinaus in Richtung Brennstoff und Oxidator.

- Die Dicke einer nicht-vorgemischten Flamme ist stark vom lokalen Streckungsfaktor abhängig. Eine Streckung der Flamme tritt auf, weil das Zusammenbringen von Oxidator und Brennstoff lokal eine Strömungsform erzeugt, die einer Gegenstrom-Konfiguration entspricht.
- Nicht-vorgemischte Flammen besitzen keine charakteristische Ausbreitungsgeschwindigkeit. Eine Fortpflanzung normal zur Flammenfront ist nicht möglich, da die Reaktionszone von Gebieten flankiert wird, welche entweder zu mager oder zu fett zum Verbrennen sind.

Obwohl durch den zusätzlichen Mechanismus der Mischung die Vorgänge komplexer sind als bei der vorgemischten Verbrennung, kann durch die Annahme von unendlich schneller Chemie die Berechnung nicht-vorgemischter Flammen deutlich vereinfacht werden. Dieser Ansatz wird seit einigen Jahrzehnten bei Flammen benutzt, bei welchen die Mischung der limitierende Faktor ist.

Ein wichtiger Parameter der nicht-vorgemischten Verbrennung ist der Mischungsbruch \mathcal{Z} , der eine Information über den Ort der Flammenfront liefert. Dieses inerte Skalar kann über die Element-Massenbrüche definiert werden, oder den Massenbruch einer nichtreagierenden Spezies darstellen. Der Mischungsbruch hat demnach einen maximalen (bzw. minimalen) Wert am Rand der Brennstoff-Einströmung und einen minimalen (bzw. maximalen) Wert am Rand der Oxidator-Einströmung. Durch den linearen Zusammenhang mit den Speziesmassenbrüchen ist der Ort der stöchiometrischen Spezies-Zusammensetzung eindeutig mit einem Mischungsbruch \mathcal{Z}_{st} verbunden. Werden alle Diffusivitäten als gleich angenommen, kann der Mi-

schungsbruch durch die Erhaltungsgleichung

$$\rho \frac{\partial \mathcal{Z}}{\partial t} + \rho \vec{u} \cdot \nabla \mathcal{Z} = \nabla \cdot (\rho \mathcal{D} \nabla \mathcal{Z}) \quad (2.50)$$

beschrieben werden. Hier reicht es aus, am Rand der Brennstoff-Einströmung den Wert $\mathcal{Z} = 1$ und am Rand der Oxidator-Einströmung den Wert $\mathcal{Z} = 0$ zu definieren, um im gesamten Rechengebiet den Grad der Mischung zu bestimmen. Im Zusammenhang mit dem Mischungsbruch \mathcal{Z} ist dessen Dissipationsrate von großer Bedeutung. Diese ist definiert als

$$\chi = 2\mathcal{D} |\nabla \mathcal{Z}|^2. \quad (2.51)$$

Die skalare Dissipationsrate hat die Dimension [1/s] und repräsentiert ein inverses Diffusions-Zeitmaß [Pet00].

Auch für die nicht-vorgemischte Verbrennung wurden verschiedene Regime-Diagramme vorgeschlagen, wie zum Beispiel von Poinso, Borghi, Klimov als auch Williams und Peters, konnten sich aber wegen des zusätzlichen physikalischen Effektes der Mischung nicht so durchsetzen wie das klassische Borghi-Diagramm der vorgemischten Verbrennung. Ein Vorschlag zur Klassifizierung ist das Diagramm von Peters in Abbildung 2.7. Auf der Abszisse ist der Quotient aus kritischer Dissipationsrate, welche zur Flammenlöschung (engl.: *quenching*) führt, und Favre-gemittelter stöchiometrischer Dissipationsrate aufgetragen. Die Ordinate enthält das Verhältnis aus den Fluktuationen des Mischungsbruchs \mathcal{Z}'_{st} zur Diffusionsdicke $(\Delta \mathcal{Z})_F$. Hier ist die Abkürzung

$$\mathcal{Z}'_{st} = (\widetilde{\mathcal{Z}'^2})_{st}^{1/2} \quad (2.52)$$

der rms-Wert des mittleren Mischungsbruchs bei stöchiometrischer Mischung. Die Diffusionsdicke $(\Delta \mathcal{Z})_F$ erstreckt sich im \mathcal{Z} -Raum über die Reaktionszone sowie die beiden angrenzenden Diffusionszonen und entspricht daher der laminaren Flammendicke δ_l der vorgemischten Verbrennung [Pet00]. Für diese Diffusionsdicke wird eine Abschätzung

$$(\Delta \mathcal{Z})_F = |\nabla \mathcal{Z}|_{st} l_D \quad (2.53)$$

verwendet, welche die Diffusionsdicke l_D im physikalischen Raum mit dem Gradienten $|\nabla \mathcal{Z}|_{st}$ im Mischungsbruch-Feld verknüpft.

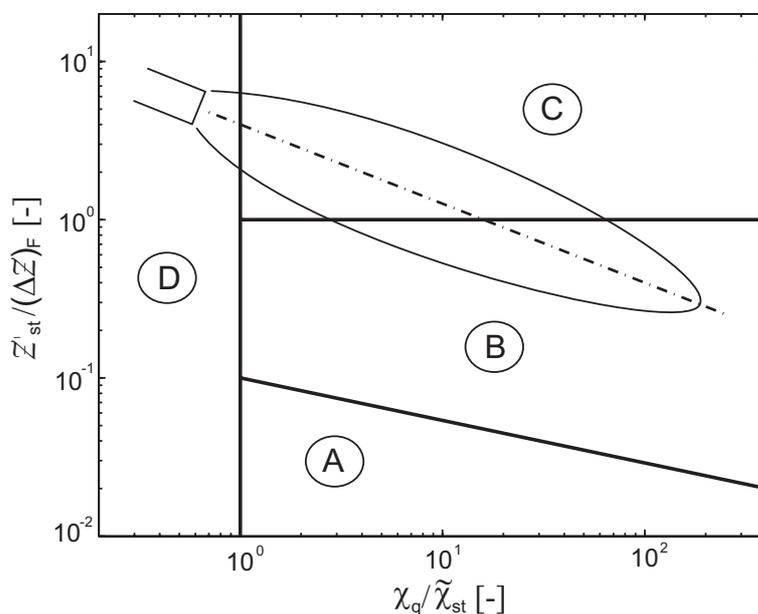


Abbildung 2.7: Flammenregime bei nicht-vorgemischter Verbrennung nach Peters [Pet00].

Im Diagramm ist der Umriss einer Diffusionsflamme⁶ dargestellt. Dieser zeigt zum einen, welche Flammenregime an welchem Ort in der Flamme vorkommen. Zum anderen wird deutlich, dass eine einzelne Flamme nicht durch einen Punkt repräsentiert wird, sondern durch ein relativ großes Gebiet, welches sich über mehrere Flammenregime erstreckt. In Bereich A sind die Fluktuationen des Mischungsbruchs sehr schwach. Diese Fluktuationen \mathcal{Z}'_{st} sind kleiner als die Reaktionszone im \mathcal{Z} -Raum, was zu zusammenhängenden Reaktionszonen in einem nahezu homogenen \mathcal{Z} -Feld führt. Die Grenzlinie zwischen den Bereichen A und B beschreibt den Ort, wo \mathcal{Z}'_{st} gerade so groß ist wie die Reaktionszone. Oberhalb dieser Linie sind die Reaktionszonen wegen zu hoher Schwankungen im Mischungsbruch schon voneinander getrennt, die wesentlich dickere Flammenfront ist aber noch verbunden. Anders ist das in Bereich C, wo der rms-Wert des Mischungsbruchs größer ist als die Diffusionsdicke $(\Delta\mathcal{Z})_F$, und somit voneinander getrennte Flamelets vorliegen. Der

⁶Wegen der notwendigen Diffusion von Brennstoff und Oxidator wird eine nicht-vorgemischte Flamme oft Diffusionsflamme genannt, obwohl diffusive Prozesse ebenso in vorgemischten Flammen eine zentrale Rolle spielen.

Bereich D wird durch die Turbulenz dominiert, die hier so stark ist, dass es zur Flammenlöschung kommt.

2.4.3 Verbrennungsmodelle für nicht-vorgemischte Flammen

Ebenso wie bei der vorgemischten Verbrennung existiert auch bei der nicht-vorgemischten Verbrennung eine Vielzahl von Verbrennungsmodellen. Die einfachsten dieser Modelle setzen unendlich schnelle Chemie in einer irreversiblen Ein-Schritt Reaktion voraus. Dies führt zu einer Lösung mit einer unendlich dünnen Flammenhaut mit der adiabaten Flammentemperatur T_{st} an der Stelle mit stöchiometrischem Mischungsbruch \mathcal{Z}_{st} . Außerhalb der Flammenhaut sind die Temperatur und die Massenbrüche von Brennstoff und Oxidator lineare Funktionen des Mischungsbruchs. Dieser Zusammenhang wurde erstmals von Burke und Schumann 1928 dargestellt (siehe Abbildung 2.8). Dieses sehr einfache Modell kann um den Zusatz der Mischungsbruch-Fluktuationen erweitert werden. Hier wird eine Transportgleichung für $\widetilde{\mathcal{Z}}''^2$ gelöst, mit deren Hilfe eine PDF für den lokalen Mischungsbruch abgeschätzt wird [PV05]. Eine weitere Möglichkeit besteht darin, die Flammenstruktur nicht mit einer irreversiblen Reaktion, sondern mit reversiblen Reaktionen zu bestimmen. Dies ergibt die adiabate Flammentemperatur für jedes beliebige \mathcal{Z} .

Die eben beschriebenen Verfahren modellieren die Flammenfront und leiten daraus die Temperatur und die Massenbrüche der Spezies ab. Ein weitverbreitetes Modell, welches ebenso diesem Gedanken folgt, ist der Flamelet-Ansatz von Peters (1980). Im Gegensatz zu den oben beschriebenen Modellen wird endlich schnelle Chemie vorausgesetzt, das heißt, dass Zündung und Verlöschung simuliert werden können. In der Nähe der stöchiometrischen Isofläche kann die reaktiv-diffusive Flammenstruktur mit der instationären Flamelet-Gleichung

$$\rho \frac{\partial \phi_i}{\partial t} = \frac{\rho}{Le_i} \frac{\chi}{2} \frac{\partial^2 \phi_i}{\partial \mathcal{Z}^2} + \dot{\omega}_i \quad (2.54)$$

beschrieben werden, mit ϕ_i als Vektor der reagierenden Skalare Y_s und T . Die Temperatur $T = T(\mathcal{Z}, \chi_{st})$ als auch die Speziesmassenbrüche $Y_s =$

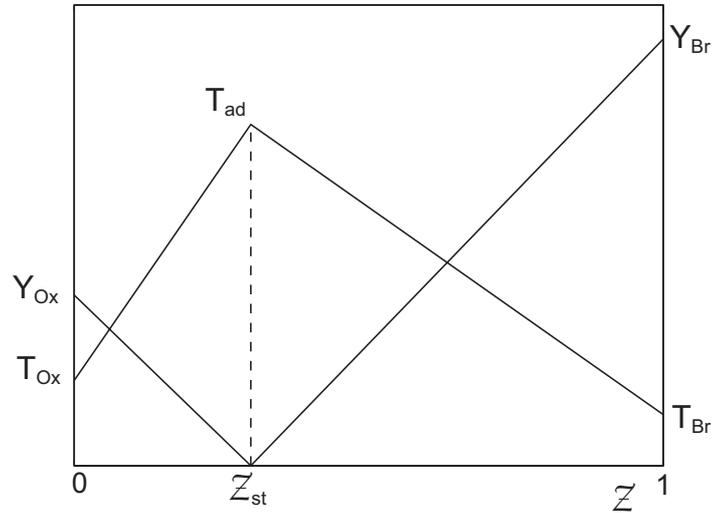


Abbildung 2.8: Flammenstruktur nach Burke und Schumann als Funktion des Mischungsbruchs.

$Y_s(\mathcal{Z}, \chi_{st})$ sind tabellierte Funktionen vom Mischungsbruch und der stöchiometrischen Dissipationsrate. Die gemittelten Variablen $\tilde{\phi}_i$ werden über eine PDF $\mathcal{P}(\mathcal{Z}, \chi_{st})$ bestimmt. Gleichung 2.54 ist sowohl für brennende Flamelets als auch für nicht-reagierende Schichten gültig und kann Übergänge zwischen beiden Zuständen durch den instationären Term beschreiben. Das Flamelet-Prinzip wurde von Peters (1993) auch für vorgemischte Verbrennung formuliert und ist heute in vielen Varianten anzutreffen.

Statt der Flammenfront kann auch die Reaktionsrate $\bar{\omega}_s$ modelliert werden. Ein einfacher Ansatz ist das *Eddy Dissipation Concept* (EDC) von Magnussen (1976), welches eine Erweiterung des *Eddy Break Up model* (EBU) von Spalding (1971) auf nicht-vorgemischte Verbrennung darstellt [PV05] und damit ebenso von unendlich schneller Chemie ausgeht:

$$\bar{\omega}_{Br} = C_{EDC} \rho \frac{1}{\tau_t} \min \left(\tilde{Y}_{Br}, \frac{\tilde{Y}_{Ox}}{s}, b \frac{\tilde{Y}_P}{(1+s)} \right). \quad (2.55)$$

Die Produktionsrate des Brennstoffs wird durch eine turbulente Mischungszeit bestimmt, die wie im EBU-Modell durch $\tau_t \approx k/\varepsilon$ approximiert wird. Ein limitierender Faktor für die chemische Umsetzung ist ein unzureichend vor-

kommendes Edukt. Der Fall der fehlenden Zündenergie wird durch einen zu geringen Produkt-Massenbruch beschrieben. C_{EDC} und b sind empirische Konstanten und der Parameter s ist das Verhältnis des Oxidator-Massenbruchs zum Brennstoff-Massenbruch bei Stöchiometrie.

Die Modellierung endlich schneller Chemie mit Hilfe der mittleren Reaktionsrate kann nicht mit Momenten-Methoden durchgeführt werden, da $\bar{\dot{\omega}}_i(T, Y_s)$ stark nichtlinear ist [Pet00]. Ein Ansatz ist, eine Verbund-PDF $\mathcal{P}(T, Y_s)$ zu erzeugen, welche intrinsisch alle höheren Momente enthält. Diese PDF kann zum einen abgeschätzt werden, d.h. deren Form wird durch die Mittelwerte und Varianzen der Variablen bestimmt. Diese als *assumed-PDF*⁷ bezeichneten Verfahren sind mit relativ geringem rechnerischen Aufwand realisierbar. Eine Schwierigkeit bei diesen Modellen besteht in der Vorhersage der physikalisch sinnvollen Form der PDF. Ein solches *assumed-PDF* Model findet in dieser Arbeit Anwendung und wird in Kapitel 3 genauer erläutert.

Im Gegensatz dazu beschreiben Verfahren, welche eine Transportgleichung für die PDF lösen, deren Form sehr genau. Diese Gleichung für die Verbund-PDF des Geschwindigkeitsvektors und der reagierenden Skalare schreibt sich [Pet00]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho \mathcal{P})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \mathcal{P}) + (\rho \vec{g} - \nabla \bar{p}) \cdot \nabla_u \mathcal{P} + \sum_{i=1}^{N_s+1} \frac{\partial}{\partial \phi_i} (\dot{\omega}_i \mathcal{P}) \\ = \nabla_u \cdot (\langle -\nabla \cdot \vec{\tau} + \nabla p' | \vec{u}, \vec{\phi} \rangle \mathcal{P}) - \sum_{i=1}^{N_s+1} \frac{\partial}{\partial \phi_i} (\langle \nabla \cdot (\rho \mathcal{D} \nabla \phi_i) | \vec{u}, \vec{\phi} \rangle \mathcal{P}). \end{aligned} \quad (2.56)$$

Die Ausdrücke in eckigen Klammern $\langle \cdot \rangle$ sind bedingte Mittelwerte für einen bestimmten Zustand $(\vec{u}, \vec{\phi})$. Während die Terme auf der linken Seite alle in geschlossener Form auftreten, müssen die beiden Terme auf der rechten Seite modelliert werden. Der erste ungeschlossene Term beschreibt den Transport der PDF \mathcal{P} im Geschwindigkeitsraum, hervorgerufen durch viskose Schubspannungen und Gradienten in den Druckfluktuationen. Der zweite Term repräsentiert den Transport von \mathcal{P} im Skalarenraum und steht für molekulare Mischung. Die physikalische Richtigkeit dieses Verbrennungsmodells hängt

⁷oft auch *presumed-PDF*

stark von der Modellierung dieser ungeschlossenen Terme ab. Aus numerischer Sicht stellt dieses Modell eine Besonderheit dar, denn durch die hohe Dimensionalität von Gleichung 2.56 kann es nicht mit Finite-Volumen oder Finite-Differenzen Verfahren gelöst werden [Pet00]. Stattdessen kommen sog. Monte-Carlo Methoden zum Einsatz, die durch eine große Anzahl N von Lagrange-Partikeln die PDF und deren Transport simulieren. Der Nachteil des Monte-Carlo Verfahrens ist, dass der statistische Fehler proportional zu $1/\sqrt{N_z}$ ist, wobei N_z die Zahl der Partikel pro Zelle ist. Somit ist aber dieses relativ genaue Verfahren durch die sehr hohe Anzahl der notwendigen Lagrange-Partikel auch sehr kostspielig.

2.5 Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion

2.5.1 Eindimensionale Verteilung

In turbulenten Strömungen transportierte Skalare verhalten sich, ähnlich dem Geschwindigkeitsvektor, wie stochastisch fluktuierende Variablen. Das Auftreten verschiedener Werte dieser Variablen kann durch deren Wahrscheinlichkeit charakterisiert werden. Bezeichnet Y eine stochastische Variable und Z deren Zustandsraumvariable, dann ist $\mathcal{F}(Z)$ die Wahrscheinlichkeit P , einen Wert zu finden, für den $Y < Z$ gilt. $\mathcal{F}(Z)$ ist die Verteilungsfunktion oder auch CDF (engl.: *cumulative probability function*) von Y mit den folgenden drei Eigenschaften:

$$\mathcal{F}(-\infty) = 0, \quad \mathcal{F}(\infty) = 1 \quad \text{und} \quad \mathcal{F}(Z_b) \geq \mathcal{F}(Z_a) \quad \text{mit} \quad Z_b > Z_a. \quad (2.57)$$

Die Wahrscheinlichkeit, einen bestimmten Wert Y in einem Intervall $Z_a \leq Y < Z_b$ zu finden, ist gegeben durch:

$$P(Z_a \leq Y < Z_b) = \mathcal{F}(Y < Z_b) - \mathcal{F}(Y < Z_a). \quad (2.58)$$

Die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion \mathcal{P} ist die Ableitung der entsprechenden Verteilungsfunktion:

$$\mathcal{P}(Z) \equiv \frac{d\mathcal{F}(Z)}{dZ}. \quad (2.59)$$

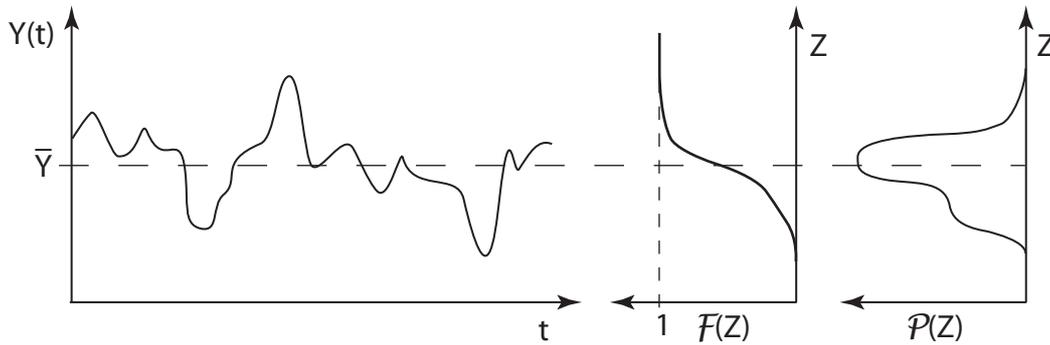


Abbildung 2.9: Zeitlich fluktuierende Variable Y mit entsprechender Verteilungsfunktion \mathcal{F} und Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion \mathcal{P} .

Da $\mathcal{F}(Y < Z)$ eine stetig steigende Funktion ist, gilt für $\mathcal{P}(Z) \geq 0$. Der Zusammenhang zwischen $\mathcal{F}(Z)$ und $\mathcal{P}(Z)$ ist in Abbildung 2.9 verdeutlicht. In Gleichung 2.59 ist erkennbar, woher die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion ihren Namen hat: Sie muss erst mit einem infinitesimalen Intervall dZ multipliziert werden, um die Wahrscheinlichkeit wiederzugeben die für $Z \leq Y < (Z+dZ)$ gilt. Daraus folgt eine für jede PDF gültige Eigenschaft:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{P}(Z) dZ = 1. \quad (2.60)$$

Dies bedeutet einerseits, dass die Variable Y sicher zwischen den Grenzen $-\infty$ und $+\infty$ gefunden wird, andererseits ist es auch die Normierungs-Bedingung für die Funktion \mathcal{P} .

Ist die PDF einer Variable bekannt, können aus dieser alle Momente der Variablen berechnet werden. Die Momente sind definiert durch⁸

$$\overline{Y^n} = \int_{-\infty}^{+\infty} Y^n \mathcal{P}(Y) dY. \quad (2.61)$$

Das erste Moment ($n=1$), welches identisch mit dem Mittelwert ist, wird berechnet mit

$$\bar{Y} = \int_{-\infty}^{+\infty} Y \mathcal{P}(Y) dY. \quad (2.62)$$

⁸Die Unterscheidung zwischen Zufallsvariable und deren Zustandsraumvariable wird zu Gunsten der einfacheren Lesbarkeit ab jetzt entfallen.

Statistische Schwankungen, die auf den Mittelwert bezogen werden, sind die sog. zentralen Momente, die wie folgt bestimmt werden:

$$\overline{(Y - \bar{Y})^n} = \int_{-\infty}^{+\infty} (Y - \bar{Y})^n \mathcal{P}(Y) dY. \quad (2.63)$$

Das erste zentrale Moment ist per Definition gleich Null. Das zweite zentrale Moment ist die Varianz σ und wird berechnet mit

$$\overline{(Y - \bar{Y})^2} = \sigma = \int_{-\infty}^{+\infty} (Y - \bar{Y})^2 \mathcal{P}(Y) dY. \quad (2.64)$$

Das dritte zentrale Moment ist die Schiefe. Diese beschreibt die Unsymmetrie der Verteilung. Weitere höhere Momente von Belang sind für $n=4$ die Flachheit (engl.: *flatness*) und $n=6$ die Superschiefe (engl.: *superskewness*) [Ger05]. Neben diesen zentralen Momenten wird häufig die Standardabweichung s mit

$$s = \sqrt{\sigma} \quad (2.65)$$

verwendet. Ähnlich wie die Varianz, enthält sie eine Aussage über die Stärke der mittleren Fluktuationen. Da sie aber dieselbe Einheit wie die fluktuierende Größe besitzt, ist die Standardabweichung leichter interpretierbar. Die Standardabweichung der Variablen Y ist identisch mit dem rms-Wert (engl.: *root mean square*) von Y' .

Im Allgemeinen enthält eine PDF keine Informationen über die räumliche und zeitliche Verteilung der fluktuierenden Variablen, weil sie als Ensemble-Mittelwert aus N Wiederholungen eines stochastischen Vorgangs ermittelt wird. Die Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung kann somit als *Ein-Punkt-Eine-Zeit-PDF* (engl.: *one point one time pdf*) beschrieben werden. Im Falle eines Experiments zur Messung einer Strömungsvariablen hieße das, dasselbe Experiment N mal durchzuführen, um am selben Ort und jeweils zur selben Zeit die Einzelereignisse zu messen. Dieses sehr aufwändige Verfahren ist in der Praxis nicht gebräuchlich. Stattdessen wird im selben Experiment N mal nacheinander gemessen, was auch aus Abbildung 2.9 hervorgeht. Somit ergibt sich eine Ein-Punkt PDF, welche für einen Ort \vec{x} zeitliche Schwankungen enthält.

2.5.2 Multivariate Verteilung

Im obigen Abschnitt wurden einige grundlegende Eigenschaften am Beispiel der PDF einer Variablen erläutert. PDFs sind aber nicht nur auf eine Dimension beschränkt, sondern können auch von mehreren stochastischen Variablen abhängig sein. Eine solche multivariate PDF wird auch JPDF⁹ (engl.: *joint probability density function*) genannt. Neben den oben aufgeführten grundlegenden Eigenschaften bringen JPDFs zusätzliche Zusammenhänge mit sich. Für eine zwei-dimensionale JPDF $\mathcal{P}(\mathbf{Y})$ sind die Funktionswerte, genau wie im eindimensionalen Fall, wie folgt begrenzt:

$$\mathcal{P}(\mathbf{Y}) = \mathcal{P}(Y_1, Y_2) \geq 0. \quad (2.66)$$

Das Integral über $\mathcal{P}(\mathbf{Y})$ ist ebenfalls Eins:

$$\int \int \mathcal{P}(Y_1, Y_2) dY_1 dY_2 = 1. \quad (2.67)$$

Außerdem gilt die folgende Gesetzmäßigkeit:

$$\int \int \mathcal{P}(Y_1, Y_2) dY_1 = \mathcal{P}^*(Y_2). \quad (2.68)$$

Gleichung 2.68 beschreibt eine sog. Randverteilung (engl.: *marginal pdf*). Diese beschreibt die Verteilung für die Variable Y_2 unabhängig von der Variablen Y_1 . Es kann also aus einer JPDF die Randverteilung jeder einzelnen Variablen bestimmt werden, oder allgemeiner: aus einer n-dimensionalen JPDF eine m-dimensionale JPDF mit $m < n$. Während eine Randverteilung das gesamte Auftreten einer Variablen wiedergibt, wird mit einer bedingten Wahrscheinlichkeitsverteilung (engl.: *conditional pdf*) $\mathcal{P}(Y_1|Y_2)$ das Auftreten des Ereignisses Y_1 mit der Nebenbedingung $Y_2 = \alpha$ beschrieben.

$$\mathcal{P}(Y_1, Y_2) = \mathcal{P}(Y_1|Y_2 = \alpha) \mathcal{P}^*(Y_2) \quad (2.69)$$

Gleichung 2.69 wird Bayes Theorem genannt. Sie gibt die Gesetzmäßigkeit wieder, dass eine JPDF als Produkt einer Randverteilung und einer entsprechenden bedingten PDF geschrieben werden kann.

⁹oder im Deutschen *Verbundwahrscheinlichkeitsdichte*

Eine wichtige Eigenschaft einer JPfD ist die statistische Abhängigkeit ihrer Variablen. Sind diese schwach oder stark korreliert, also voneinander abhängig, gilt Gleichung 2.69. Der einfachere Fall ist die statistische Unabhängigkeit beider Variablen. Hier ergibt sich die JPfD aus den Produkten der Randverteilungen:

$$\mathcal{P}(Y_1, Y_2) = \mathcal{P}^*(Y_1)\mathcal{P}^*(Y_2). \quad (2.70)$$

2.5.3 Dirac-Funktion

Die Heaviside-Funktion ist eine unstetige Funktion mit den folgenden Eigenschaften [Ger05]:

$$H(x) = \begin{cases} 0 & : x \leq 0 \\ 1 & : x > 0 \end{cases}. \quad (2.71)$$

Sie ist in Abbildung 2.10 auf der linken Seite dargestellt.

Die Dirac-Funktion $\delta(x)$ ist definiert als die Ableitung der Heaviside-Funktion:

$$\delta(x) = \frac{dH(x)}{dx}. \quad (2.72)$$

Durch die beiden folgenden Eigenschaften zeichnet sich die Dirac-Funktion als PDF aus:

$$\delta(x) = \begin{cases} 0 & : x \neq 0 \\ \infty & : x = 0 \end{cases} \quad (2.73)$$

und

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) dx = 1. \quad (2.74)$$

Aus Gleichung 2.74 folgt die für die praktische Anwendung wichtige Eigenschaft:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - a) f(x) dx = f(a). \quad (2.75)$$

Die Dirac-Funktion wird als ein Pfeil dargestellt (rechts in Abbildung 2.10), welcher die Singularität an dieser Koordinate symbolisiert.

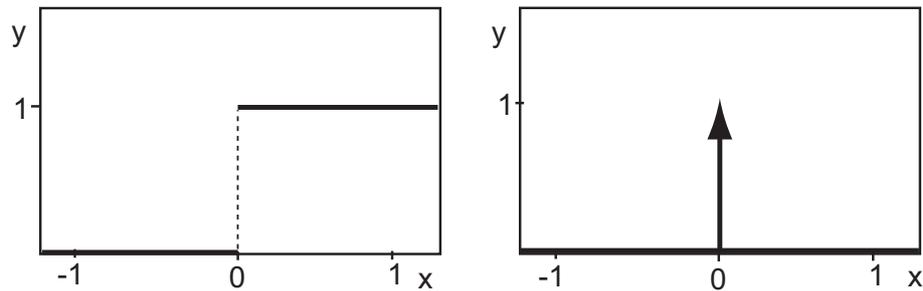


Abbildung 2.10: Während die Heaviside-Funktion eine Stufenform besitzt (links), kann der Verlauf der Dirac-Funktion nicht dargestellt, sondern nur angedeutet werden (rechts).

2.5.4 Gauß-Verteilung

Die Gauß-Verteilung (Gleichung 2.76), oder auch Normalverteilung, ist die am häufigsten anzutreffende Wahrscheinlichkeitsverteilung in den Ingenieur- und Naturwissenschaften. Ihre Form wird durch die zwei Parameter Mittelwert und Varianz σ bzw. Standardabweichung $s = \sqrt{\sigma}$ bestimmt. Das zentrale Moment 4. Ordnung ist 3 und das zentrale Moment 6. Ordnung ist 15. Da die Verteilung symmetrisch ist, sind alle ungeraden zentralen Momente gleich Null.

$$\mathcal{P}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} \exp\left[-\frac{(x - \bar{x})^2}{2\sigma}\right] \quad (2.76)$$

Der Definitionsbereich der Verteilung erstreckt sich von $-\infty \leq x \leq +\infty$, was bei den meisten Anwendungen nicht mit dem Definitionsbereich der fluktuierenden Variablen übereinstimmt. Da die Normalverteilung an den Rändern sehr schnell gegen Null abfällt, wird sie meistens nur innerhalb eines Vielfachen der Standardabweichungen ausgewertet (zum Beispiel liegen 99,73% aller Zustände innerhalb von drei Standardabweichungen vom Mittelwert). Alternativ kann die Gauß-Verteilung auch abgeschnitten werden, wenn ein nicht zu vernachlässigender Anteil der Verteilung außerhalb des Definitionsbereiches der Variablen liegt. Eine solche abgeschnittene Verteilung wird in Abschnitt 3.2 näher erläutert.

In Abbildung 2.11 sind mehrere Verteilungen mit unterschiedlichen Varianzen dargestellt. Die Gauß-Verteilung hat nicht die Formenvielfalt einer β -

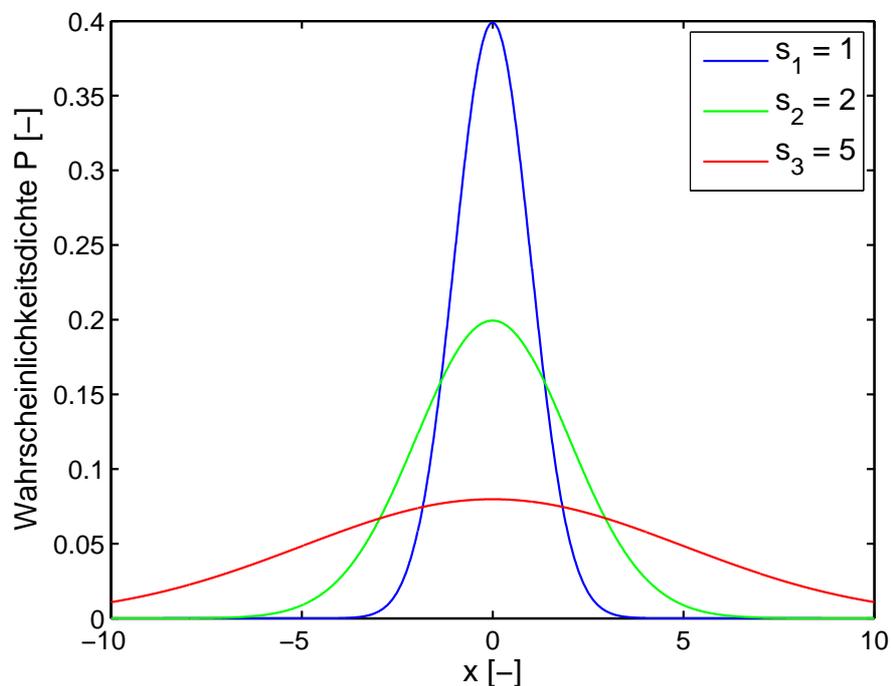


Abbildung 2.11: Gauß-Verteilungen mit dem Mittelwert Null und verschiedenen Standardabweichungen.

Verteilung (siehe Abschnitt 2.5.5), denn sie ist selbstähnlich.

2.5.5 Beta-Verteilung

Die β -Verteilung für eine Variable unterscheidet sich bei hoher Varianz in ihrer Form ganz wesentlich von der Gauß-Verteilung. Während die (nicht abgeschnittene) Gauß-Verteilung symmetrisch ist und sich von $-\infty$ bis $+\infty$ erstreckt, ist die β -Verteilung nur für $0 \leq x \leq 1$ definiert. Weiterhin kann die β -Verteilung einen unsymmetrischen Charakter besitzen und für große Varianzen in eine bimodale Form übergehen. Wie in Abbildung 2.12 gut zu erkennen ist, lassen sich mit dieser Funktion eine Vielzahl unterschiedlicher Verteilungsformen beschreiben. Die β -Funktion lautet:

$$\mathcal{P}(x) = \frac{\Gamma(\beta_1 + \beta_2)}{\Gamma(\beta_1)\Gamma(\beta_2)} x^{\beta_1-1} (1-x)^{\beta_2-1}, \quad (2.77)$$

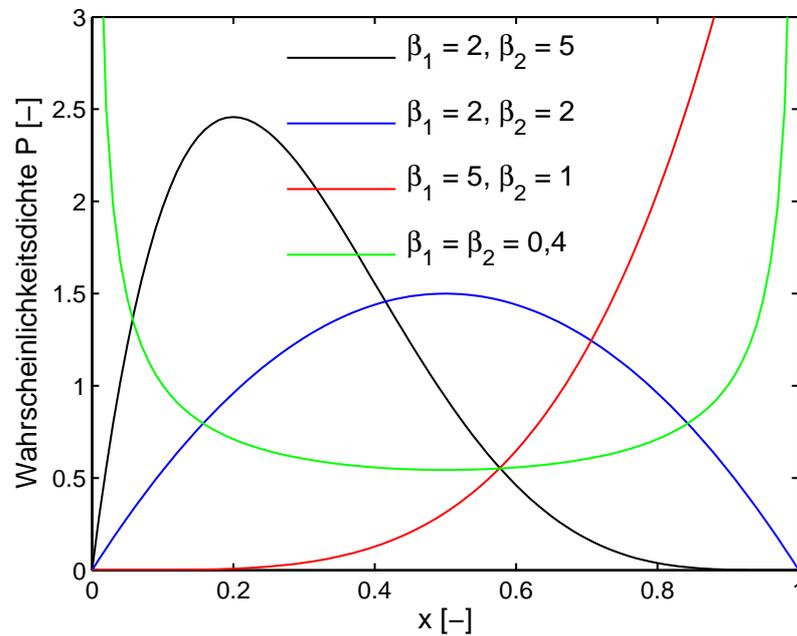


Abbildung 2.12: Beta-Verteilungen mit verschiedenen Formparametern und anderen höheren Momenten.

mit der Gamma-Funktion:

$$\Gamma(\beta) = \int_0^{\infty} x^{\beta-1} e^{-x} dx. \quad (2.78)$$

Die Gamma-Funktion erweitert die Fakultätsfunktion auf den Bereich positiver reeller Zahlen, so dass die Beziehung

$$\Gamma(x+1) = x\Gamma(x) \quad (2.79)$$

gilt. Der Mittelwert der β -Verteilung lässt sich aus den Formparametern gemäß

$$\bar{x} = \frac{\beta_1}{\beta_1 + \beta_2} \quad (2.80)$$

berechnen. Die Varianz ergibt sich aus

$$\sigma = \frac{\beta_1 \beta_2}{(\beta_1 + \beta_2)^2 (\beta_1 + \beta_2 + 1)}. \quad (2.81)$$

Die Parameter β_1 und β_2 bestimmen den Grad der Unsymmetrie sowie die Varianz. Für sehr kleine Werte der Varianz geht diese Verteilung in eine Gauß-Verteilung über [Gir91].

3 Das assumed-PDF Verbrennungsmodell

Die im Ingenieurbereich häufig verwendeten RANS-Gleichungen basieren auf der in Abschnitt 2.3.3 erläuterten Reynoldsschen Aufspaltung und bilden das Strömungsfeld zeitgemittelt ab. Die dabei erhaltene Lösung ist für viele Anwendungen ausreichend, z.B. bei der Druckverteilung umströmter Körper oder bei anderen stationären Problemen. Abbildung 3.1 zeigt qualitativ am Beispiel einer Scherströmung den Unterschied zwischen zeitlich gemittelter und momentaner Verteilung einer skalaren Größe. Diese kann die Dichte, ein Speziesmassenbruch oder die Temperatur sein. Der mit dem Kreuz markierte Ort im zeitgemittelten Strömungsfeld besitzt eine mittlere Temperatur \bar{T} , wohingegen am selben Ort in der „realen“ Strömung die Temperatur zeitlich stark variiert. Weil die Verbrennungsvorgänge durch Gleichungen (2.2 und 2.3) beschrieben werden, welche einen nichtlinearen Charakter haben, liefert die Verwendung der Mittelwerte von Temperatur und Speziesmassenbrüchen ein falsches Ergebnis. Das assumed-PDF Verfahren versucht nun, die lokalen Fluktuationen der Temperatur und der Massenbrüche aus deren Mittelwer-

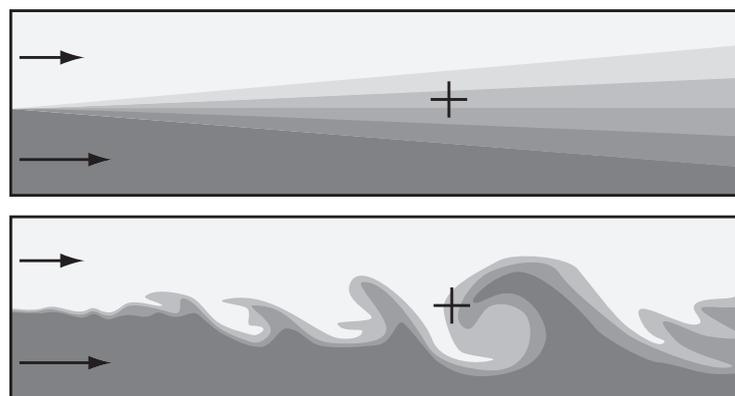


Abbildung 3.1: Skalare Größe in einer turbulenten Scherschicht zeitgemittelt (oben) und als Momentanfeld (unten).

ten und räumlichen Gradienten, sowie aus den Turbulenzvariablen k und ε zu rekonstruieren, um damit den gemittelten Spezies-Quellterm berechnen zu können.

In diesem Kapitel wird die Schließung des Quellterms aus Gleichung 2.38 beschrieben und die beiden verwendeten Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen werden im Detail erklärt. Die dafür notwendigen mathematischen Grundlagen sowie auch verschiedene PDFs wurden in Abschnitt 2.5 erläutert. Anschließend wird das verwendete assumed-PDF Modell analysiert, d.h. dessen Herleitung und physikalische Einordnung, die Modellierung der ungeschlossenen Terme und die Fehler, welche dem Modell innewohnen, werden erläutert.

3.1 Implementierung

Der gemittelte Quellterm der Spezies-Erhaltungsgleichung kann im Falle einer bekannten Einpunkt-Verbund-PDF $\mathcal{P}(T, c_1, \dots, c_N)$ mit

$$\bar{\dot{\omega}}_s = \int \dot{\omega}_s(T, c_1, \dots, c_N) \mathcal{P}(T, c_1, \dots, c_N) dT dc_1 \dots dc_N \quad (3.1)$$

bestimmt werden. Eine solche Verbund-PDF, die Korrelationen von Temperatur-, Dichte- und Speziesschwankungen enthält, ist aber nur schwer abzuschätzen. Ein gebräuchlicher Ansatz ist daher, diese unbekannt-ten Abhängigkeiten zu vernachlässigen [PB01, GNA05, BAH94]. Das in dieser Arbeit verwendete assumed-PDF Verfahren nimmt sowohl eine statistische Unabhängigkeit der Temperatur- und Speziesfluktuationen an, als auch eine nicht fluktuierende Dichte. Mit diesen Vereinfachungen schreibt sich die PDF

$$\mathcal{P}(T, c_1, \dots, c_N) = \mathcal{P}_T(T) \cdot \mathcal{P}_Y(Y_1, \dots, Y_N) \delta(\rho - \bar{\rho}). \quad (3.2)$$

In diesem Verbrennungsmodell wird die Interaktion von Turbulenz und Chemie modelliert, indem in den laminaren Ansatz aus den Gleichungen 2.2 und 2.3 Fluktuationen der Temperatur und Spezies in Form von Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen implementiert werden. Somit ergibt sich folgende Glei-

chung für den chemischen Quellterm:

$$\bar{\omega}_s = M_s \sum_{r=1}^{N_r} \left[(v''_{sr} - v'_{sr}) \left(\overline{k_{fr}} \prod_{i=1}^{N_s+1} \left(\frac{\bar{\rho} Y_i}{M_i} \right)^{v'_{ir}} - \overline{k_{br}} \prod_{i=1}^{N_s+1} \left(\frac{\bar{\rho} Y_i}{M_i} \right)^{v''_{ir}} \right) \right]. \quad (3.3)$$

Den Unterschied zur laminaren Gleichung 2.2 bilden die vier überstrichenen und damit statistisch gemittelten Terme, welche in den folgenden Abschnitten näher erläutert werden. Aus Gleichung 3.3 ist ersichtlich, dass die statistische Unabhängigkeit es ermöglicht, die gemittelten Terme getrennt voneinander zu berechnen. Im Vergleich zu statistisch abhängigen PDFs reduziert dies den numerischen Aufwand deutlich. Denn zum Einen müssen die Kovarianzen der Zufallsvariablen nicht berechnet werden und zum Anderen fließen die Kovarianzen nicht in die Integration der PDFs ein.

Der Mischungsbruch tritt in diesem Verbrennungsmodell nicht explizit auf¹, und auch die Flammenstreckung als Einflussgröße wird nicht benutzt. Dafür enthält das Modell skalare Dissipationsraten, welche die Abnahme der Temperaturfluktuationen (siehe Abschnitt 3.2) und die Abnahme der Speziesfluktuationen (siehe Abschnitt 3.3.2) beschreiben und dadurch die lokalen Varianzen der beiden Verteilungen mitbestimmen.

3.2 Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion der Temperatur

Mit Gleichung 2.3 für die Geschwindigkeitskoeffizienten einer Hin- oder Rückreaktion r und der Temperaturverteilung ergibt sich der mittlere Geschwindigkeitskoeffizient mit

$$\bar{k}_r = \int_{T_{min}}^{T_{max}} k_r(T) \mathcal{P}_T(T) dT. \quad (3.4)$$

Die Temperatur kann mit verschiedenen Verteilungen dargestellt werden. Gaffney et al. [GWG92] haben den Unterschied zwischen einer Gauß-Verteilung und einer β -Verteilung untersucht. Der Nachteil der β -Verteilung

¹Der Mischungsbruch kann zwar an jeder Stelle aus der Gaszusammensetzung berechnet werden, er besitzt aber keine Bedeutung.

sind die zusätzlichen Formparameter β_1 und β_2 , welche unbekannt sind. Daher hat sich die Gauß-Verteilung als Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion für die Temperatur durchgesetzt [Ger03, BAH94]. Der einzige Formparameter der Gauß-Verteilung (siehe Abschnitt 2.5.4) ist die Varianz. Die Varianz der Temperatur schreibt sich zu

$$\sigma_T = \widetilde{T}''^2. \quad (3.5)$$

Sie ist einer der wichtigsten Parameter dieses Verbrennungsmodells. Da sich die Gauß-Verteilung bis $\pm\infty$ erstreckt, müssen die Gebiete außerhalb des Gültigkeitsbereichs² der Temperatur bzw. der Geschwindigkeitskoeffizienten abgeschnitten werden. In Gleichung 3.6 ist eine Verteilung dargestellt, welche die Heaviside-Funktion H beinhaltet. Dadurch wird die PDF auf einen Bereich oberhalb von T_{\min} und unterhalb von T_{\max} begrenzt:

$$\mathcal{P}_T(T) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_T}} \exp\left[-\frac{(T - \widetilde{T})^2}{2\sigma_T}\right] [H(T - T_{\min}) - H(T - T_{\max})] + A_1\delta(T - T_{\min}) + A_2\delta(T - T_{\max}). \quad (3.6)$$

Die abgeschnittenen Flächen A_1 und A_2 werden an den Rändern durch eine Dirac-Funktion δ wieder hinzuaddiert. Dies ist in Abbildung 3.2 anhand der roten Kurve dargestellt, welche eine besonders hohe Standardabweichung besitzt. Die Mehrzahl der Kurven muss nicht abgeschnitten werden, da diese Verteilungen numerisch nur bis $\pm 4\sqrt{\sigma_T}$ berechnet werden und die Limits T_{\min} und T_{\max} nicht erreichen. Um die Temperaturverteilung bestimmen zu können, wird neben der gemittelten Temperatur \widetilde{T} die Varianz der Temperatur benötigt. Zur Berechnung dieser Varianz wird eine Transportgleichung für diese Größe gelöst. Prinzipiell ist es möglich σ_T auch aus anderen Energievariablen abzuleiten, z.B. aus Transportgleichungen der Varianz der spezifischen Enthalpie h oder der spezifischen inneren Energie e . Hierbei entstehen jedoch größere Probleme bei der Modellierung unbekannter Terme als bei der direkten Berechnung der Temperaturvarianz. Die von Gerlinger [Ger03] vor-

²Die Temperatur besitzt als Untergrenze den absoluten Nullpunkt, daher ist $T_{\min} = 0K$. Die Obergrenze in einer Hochenthalpie-Strömung mit Verbrennung kann grob mit $T_{\max} = 5000K$ abgeschätzt werden. Deutlich enger fallen die Grenzen aus, die durch den Reaktionsmechanismus vorgegeben werden. Diese Mechanismen sind oft nur in einem Bereich von ca. 800 K - 2000 K validiert [Ger08].

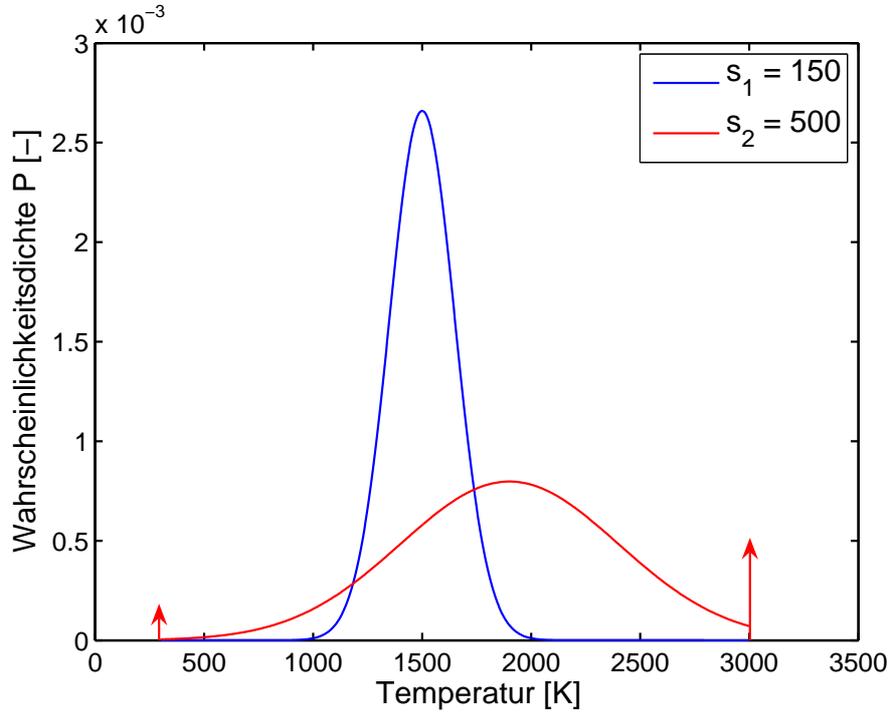


Abbildung 3.2: Temperaturverteilungen mit verschiedenen Mittelwerten und Standardabweichungen.

geschlagene Transportgleichung schreibt sich

$$\begin{aligned}
 & \frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\sigma_T) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{u}_j\sigma_T) - \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\gamma \frac{\mu}{Pr} + \frac{\mu_t}{Pr_t} \right) \frac{\partial \sigma_T}{\partial x_j} \right]}_{\mathcal{T}^T} \\
 & = \underbrace{2 \frac{\mu_t}{Pr_t} \left(\frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_j} \right)^2}_{\mathcal{P}^T} - \underbrace{C_T \gamma \bar{\rho} \sigma_T \frac{\varepsilon}{k}}_{\varepsilon^T} - \underbrace{2(\gamma - 1) \bar{\rho} \sigma_T \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_j}}_{\mathcal{M}^T} - \underbrace{\frac{1}{c_v} 2T'' \sum_{s=1}^{N_s} \dot{\omega}_s h_s^0}_{\mathcal{C}^T}, \quad (3.7)
 \end{aligned}$$

wobei zu beachten ist, dass bis auf die ersten zwei Terme der linken Seite und \mathcal{C}^T auf der rechten Seite alle anderen Terme modelliert sind. Diese ersten beiden Terme sind die zeitliche Änderung, sowie der konvektive Transport der Temperaturvarianz. \mathcal{T}^T ist durch einen Gradienten-Diffusions-Ansatz modelliert und beschreibt den Transport von Varianz aufgrund von Geschwindigkeits-Fluktuationen, Wärmeleitung und Diffusion. Der Produktionsterm \mathcal{P}^T ist die Hauptquelle von σ_T und wird von den Gradienten des

mittleren Temperaturfelds bestimmt. Die Hauptsenke dieser Transportgleichung ist die Dissipationsrate ε^T . Diese Dissipationsrate der Temperaturfluktuationen ist an die Dissipationsrate der Geschwindigkeitsfluktuationen bzw. an das inverse turbulente Zeitmaß $1/\tau = \varepsilon/k$ gekoppelt. Dieses Zeitmaß gibt die Zeit wieder, in welcher die turbulente kinetische Energie k durch eine Rate ε dissipiert wird. Für die dimensionslose Konstante C_T wird in der Literatur der Wert 2,0 vorgeschlagen [Ger03]. Die Korrelation der Temperaturfluktuation und des Druckes wird mit dem Druckterm \mathcal{M}^T modelliert. Der letzte Term \mathcal{C}^T beschreibt die Wechselwirkung von Temperaturfluktuationen mit den chemischen Umsatzraten und kann sowohl Quelle als auch Senke sein. Durch die bekannte PDF ist dieser Term prinzipiell berechenbar ohne modelliert werden zu müssen. Untersuchungen haben jedoch gezeigt, dass Terme, die Momente höherer Ordnung und chemische Reaktionen enthalten, falsche Ergebnisse liefern. Die Genauigkeit der geschätzten Temperatur-PDF reicht nicht dazu aus, auch nur das Vorzeichen dieses Terms korrekt zu bestimmen. Daher wird der Empfehlung [Ger03] gefolgt und dieser Term vernachlässigt.

Das Integral in Gleichung 3.4 wird numerisch mit der Rechteckregel gelöst. Da die Gauß-Verteilung nur eine Schätzung der wahren Temperaturverteilung ist, reicht dieses einfache Integrations-Verfahren an dieser Stelle aus.

3.3 Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion der Spezies

Girimaji [Gir91] hat die Gültigkeit eines assumed β -PDF Ansatzes für den Fall der inerten Mischung zweier Skalare untersucht. Die Gleichung dieser Verteilung und deren Eigenschaften wurden in Abschnitt 2.5.5 dargestellt. Zur Validierung diente ihm zum einen die aus verschiedenen Experimenten gewonnene Erkenntnis, dass die skalare PDF in der Endphase der Mischung die Form einer Gauß-Verteilung annimmt. Zum anderen wurde das Modell mit den Daten der DNS für die Mischung zweier Skalare in *statistisch stationärer isotroper Turbulenz* von Eswaran und Pope [EP88] verglichen. Girimaji konnte analytisch zeigen, dass die β -PDF für kleine Varianzen³ in eine Gauß-

³in der Endphase der Mischung geht die Varianz $\sigma \rightarrow 0$

Verteilung übergeht. Der Vergleich mit der DNS ergab eine sehr gute Übereinstimmung in allen Phasen der Mischung. Angefangen vom symmetrischen bimodalen Zustand bis zur Gauß-Verteilung als Endstadium wurden alle Übergangsformen sehr gut abgebildet. Ausgehend von diesen Ergebnissen wurde die PDF auf mehrere Skalare erweitert, was im folgenden Abschnitt beschrieben wird.

3.3.1 Beschreibung der multivariaten Spezies-PDF

Da zu diesem Zeitpunkt Girimaji zum Thema multiskalare Mischung weder experimentelle Daten noch direkte numerische Simulationen zur Verfügung standen, beruht das multiskalare Modell auf den Ergebnissen der Mischung zweier Skalare. Das von Girimaji vorgeschlagene Modell sollte folgende Eigenschaften besitzen:

1. Die mathematischen Eigenschaften einer PDF (siehe Abschnitt 2.5),
2. die Wiedergabe des Übergangs in eine multivariate Gauß-Verteilung bei kleiner Varianz.
3. Die Reduzierung auf die univariate β -PDF für den Fall von zwei Skalaren, sowie
4. die einfache Handhabung auch in komplexen Strömungssimulationen.

Es wurde folgende Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion für N Skalare vorgeschlagen

$$\mathcal{P}(Y_1, Y_2, \dots, Y_N) = \frac{\Gamma(\beta_1 + \beta_2 + \dots + \beta_N)}{\Gamma(\beta_1)\Gamma(\beta_2)\dots\Gamma(\beta_N)} Y^{\beta_1-1} Y^{\beta_2-1} \dots Y^{\beta_N-1}, \quad (3.8)$$

die sich in ihrer Struktur stark an die univariate β -PDF aus Gleichung 2.77 anlehnt. Die Form dieser multivariaten Verteilung ist exemplarisch für N=3 in Abbildung 3.3 dargestellt. Dazu gehört der Mittelwert

$$\bar{Y}_s = \frac{\beta_s}{\beta_1 + \dots + \beta_N} \quad (3.9)$$

und die Varianz

$$\sigma_s = \overline{Y'_s Y'_s} = \frac{\overline{Y_s} - \overline{Y_s}^2}{\beta_1 + \dots + \beta_N + 1}. \quad (3.10)$$

Damit das Modell physikalisch plausibel ist, müssen für die N Parameter $\beta_1 \dots \beta_N$ bestimmte Momente der Verbund-PDF bestimmt werden. Inspiriert durch das k- ϵ Modell werden nur die Momente niedriger Ordnung betrachtet. Die N Parameter sind demnach die N-1 unabhängigen Massenbrüche und die *turbulente Skalarenergie* Q mit

$$Q = \sum_{s=1}^{N_s} \sigma_s = \sum_{s=1}^{N_s} \overline{Y'_s Y'_s}, \quad (3.11)$$

welche die Summe aller Speziesvarianzen ist. Die turbulente Skalarenergie Q ist somit vergleichbar mit der turbulenten kinetischen Energie k, die aus der Summe der Diagonalelemente des Reynoldsschen Spannungstensors besteht und näherungsweise den lokalen Zustand der turbulenten Geschwindigkeits-Schwankungen beschreibt. Aus diesen N-1 mittleren Speziesmassenbrüchen und der turbulenten Skalarenergie lassen sich alle Parameter β_s wie folgt berechnen:

$$\beta_s = \overline{Y_s} \left(\frac{1 - \sum_{s=1}^N \overline{Y_s}}{Q} - 1 \right). \quad (3.12)$$

Neben den notwendigen mathematischen Eigenschaften konnte Girimaji auch zeigen, dass für kleine Werte von Q die multivariate β -Verteilung in eine multivariate Normalverteilung übergeht. Physikalische Rechtfertigung erfährt diese Verteilung außerdem durch die Betrachtung ihrer Randverteilungen. Girimaji zeigte allgemein, dass im Fall der isotropen Turbulenz die Transportgleichungen der Randverteilungen alle dieselbe Form haben. Die multivariate β -Verteilung besitzt nun eben diese Eigenschaft, da alle Randverteilungen stets β -PDFs sind.

Aus der JPDE, definiert durch die oben beschriebenen Parameter, lassen sich alle Einzelvarianzen und Kovarianzen berechnen (siehe Abschnitt 3.3.4), ohne dass dafür zusätzliche Transportgleichungen gelöst werden müssen. Dies ist einer der großen Vorteile dieses Ansatzes. Denn unabhängig von der Anzahl der Skalare bzw. der Dimensionalität der PDF muss nur eine einzige zusätzliche Transportgleichung für die Variable Q berechnet werden. Diese Gleichung wird im folgenden Abschnitt näher erläutert.

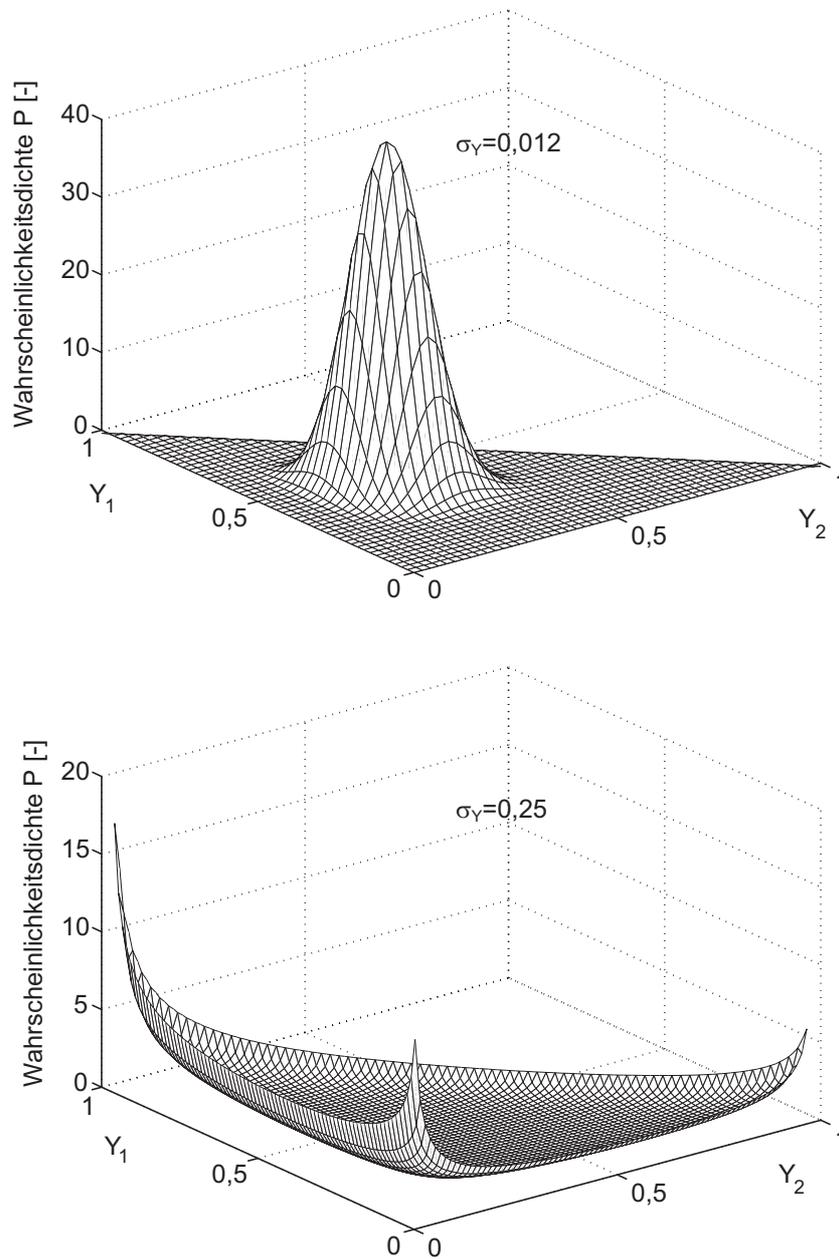


Abbildung 3.3: β -Verteilungen für drei Spezies mit unterschiedlichen Varianzen. Der Massenbruch Y_3 ergibt sich aus der Bedingung $\sum_{s=1}^{N_s} Y_s = 1$.

3.3.2 Transportgleichung der Speziesvarianz

Da die meisten CFD-Codes Favre-gemittelte Erhaltungsgleichungen lösen, muss der Parameter Q , der mit Reynolds-gemittelten Massenbrüchen definiert ist, modelliert werden. Aus Mangel an einem überzeugenden Modell für Q wurde in den Arbeiten, in welchen die von Girimaji vorgeschlagene PDF Anwendung findet [BAH94, BG03, GNA05], der Unterschied zwischen Reynolds-gemittelten und Favre-gemittelten Speziesfluktuationen ignoriert und die Summe der Speziesvarianzen mit

$$\sigma_Y = \sum_{s=1}^{N_s} \widetilde{Y_s''^2} \quad (3.13)$$

bezeichnet. Dieses σ_Y wird ebenso als turbulente Skalarenergie interpretiert und ersetzt nun in Gleichung 3.12 den Parameter Q .

Folgende Transportgleichung für σ_Y kann, ausgehend von der Transportgleichung der Favre-gemittelten Speziesmassenbrüche, hergeleitet werden [Ger05]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho} \sigma_Y}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \sigma_Y \tilde{u}_i}{\partial x_i} = & \underbrace{-2\bar{\rho} \sum_{s=1}^{N_s} \widetilde{u_i'' Y_s''} \frac{\partial \tilde{Y}_s}{\partial x_i}}_{\mathcal{P}^Y} + \underbrace{2 \sum_{s=1}^{N_s} \overline{\dot{\omega}_s Y_s''}}_{\mathcal{C}^Y} + \\ & \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_i} \left[\bar{\rho} \mathcal{D} \frac{\partial \sigma_Y}{\partial x_i} - \bar{\rho} \sum_{s=1}^{N_s} \widetilde{u_i'' Y_s''^2} \right]}_{\mathcal{T}^Y} - \underbrace{2 \sum_{s=1}^{N_s} \overline{\rho \mathcal{D}_s \frac{\partial Y_s}{\partial x_i} \frac{\partial Y_s''}{\partial x_i}}}_{\varepsilon^Y}. \end{aligned} \quad (3.14)$$

Der erste Term der rechten Seite, \mathcal{P}^Y , repräsentiert die Produktion der turbulenten Skalarenergie. Hauptursache für die Produktion von σ_Y sind Gradienten im mittleren Speziesfeld. Der zweite Term der rechten Seite ist eine Quelle bzw. Senke aufgrund der Wechselwirkung von Speziesfluktuationen mit der Chemie. Der Term \mathcal{T}^Y steht für den Transport durch Diffusion und Geschwindigkeits-Fluktuationen und ε^Y ist die Dissipation der turbulenten Skalarenergie σ_Y .

Bis auf \mathcal{C}^Y sind die Terme der rechten Seite von Gleichung 3.14 ungeschlossen und müssen daher modelliert werden. Die meisten dieser Terme werden mit dem Gradienten-Diffusions-Ansatz approximiert, welcher auf die

Mischungsweg-Hypothese von Prandtl (1925) zurückgeht. Dies ist die einfachste Art, turbulente Terme zu modellieren, unterliegt aber der Annahme, dass sich der Wert des transportierten Skalars während des Transports nicht ändert [Pop79]. Diese Voraussetzung gilt nicht in reagierenden Strömungen. Weiterhin haben Experimente und direkte numerische Simulationen eine Diskrepanz aufgezeigt, welche zwischen der tatsächlichen Richtung des turbulenten Transports und der Richtung des mittleren Gradienten besteht [PV05, Pop00]. Dabei wurde sogar vereinzelt die Diffusion entgegen des Gradienten (engl.: *counter-gradient diffusion*) beobachtet. Trotzdem findet der Gradienten-Diffusions-Ansatz sehr oft Anwendung, da dieser Ansatz einfach zu implementieren ist.

Mit Hilfe des Gradienten-Diffusions-Ansatzes

$$\sum_{s=1}^{N_s} \bar{\rho} \overline{u_i'' Y_s''^2} \approx -\bar{\rho} \mathcal{D}_t \frac{\partial \sigma_Y}{\partial x_i} \quad \text{und} \quad \bar{\rho} \overline{u_i'' Y_s''} \approx -\bar{\rho} \mathcal{D}_t \frac{\partial \tilde{Y}_s}{\partial x_i} \quad (3.15)$$

ergeben sich der Produktionsterm

$$\mathcal{P}^Y \approx 2 \sum_{s=1}^{N_s} \bar{\rho} \mathcal{D}_t \frac{\partial \tilde{Y}_s}{\partial x_i} \frac{\partial \tilde{Y}_s}{\partial x_i} \quad (3.16)$$

sowie der Transportterm

$$\mathcal{T}^Y \approx \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\left(\frac{\mu}{Sc} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \frac{\partial \sigma_Y}{\partial x_i} \right]. \quad (3.17)$$

Der Dissipationsterm ε^Y kann umgeformt und vereinfacht werden, so dass er einen Bezug zum Zeitmaß der Geschwindigkeitsfluktuationen enthält [Ger05]:

$$\varepsilon^Y \approx 2 \sum_{s=1}^{N_s} \overline{\mathcal{D}_s \rho \frac{\partial Y_s''}{\partial x_i} \frac{\partial Y_s''}{\partial x_i}} \approx C_Y \bar{\rho} \sigma_Y \frac{\varepsilon}{k}. \quad (3.18)$$

Dieser bewirkt eine Abnahme der einzelnen Komponentenfluktuationen durch molekulare Diffusion und charakterisiert das Zeitmaß feinskaliger Mischung. Da es keinen Hinweis in der Literatur gibt, dass eine Transportgleichung einen genaueren Wert für die Dissipationsrate liefert, ist die gebräuchlichste Annahme, dass die Zeitskala der Verringerung der skalaren Fluktuationen proportional zur Verringerung der Fluktuationen der Geschwindigkeit ist.

Wie in der Transportgleichung für σ_T wird für die inverse turbulente Zeitskala $1/\tau = \varepsilon/k$ verwendet, und der lineare Zusammenhang zur skalaren Dissipationsrate mit einem Faktor C_Y abgeschätzt. Für diese Konstante wird der Wert $C_Y = 2,0$ empfohlen, sie kann aber lokal in einem Intervall von $0,5 - 2,0$ liegen [Di 07].

Entsprechend dem Term \mathcal{C}^T in Gleichung 3.7 benötigt der Senken- bzw. Quellterm \mathcal{C}^Y eigentlich keine Modellierung, da er aus der bekannten PDF eindeutig bestimmt werden kann. Dennoch wird auch dieser Term zu Null gesetzt, da die PDF nur in erster Näherung korrekt ist. Untersuchungen zur Genauigkeit der Form der multivariaten β -Verteilung werden in Abschnitt 3.3.4 beschrieben.

3.3.3 Analytische Lösbarkeit

Neben dem Vorteil, nur eine einzige zusätzliche Transportgleichung zu benötigen, hat der Ansatz noch einen weiteren Vorteil: Es existiert eine analytische Lösung für das Integral dieser multivariaten PDF. Die Speziesfluktuationen werden mit der in Gleichung 3.8 dargestellten multivariaten β -Verteilung beschrieben und haben durch den Term in Gleichung 3.19 Einfluss auf die Reaktionskinetik. Auch hier entfällt die Unterscheidung zwischen Hin- und Rückreaktion. Es gilt:

$$\overline{\prod_{s=1}^{N_s+1} \left(\frac{\bar{\rho} Y_s}{M_s} \right)^{v_{sr}}} = \prod_{s=1}^{N_s} \left(\frac{\bar{\rho}}{M_s} \right)^{v_{sr}} \int c_{N_s+1r}^{v_{N_s+1r}} \prod_{s=1}^{N_s} \hat{Y}_s^{v_{sr}} \mathcal{P}_Y(\hat{Y}_1, \dots, \hat{Y}_N) d\hat{Y}_1 \dots d\hat{Y}_N. \quad (3.19)$$

Die eventuell an der Reaktion teilnehmenden inerten Drittstoßpartner werden durch deren Konzentration c_{N_s+1r} berücksichtigt. Bei einer Zweier-Reaktion entfällt dieser Ausdruck, da sein Exponent gleich Null gesetzt wird. Das Integral lässt sich in ein Produkt von Gamma-Funktionen umwandeln und ist somit analytisch lösbar. Mit der Beziehung 2.79 kann dieser Term noch vereinfacht werden, so dass sich alle Gamma-Funktionen herauskürzen. Eine genaue Herleitung ist bei Gerlinger [Ger05] zu finden. Danach ergibt sich für den gesamten chemischen Quellterm folgende Vorschrift:

$$\bar{\omega}_s = M_s \sum_{r=1}^{N_r} (v''_{sr} - v'_{sr}) (T_{1f} T_{2f} T_{3f} T_{4f} - T_{1b} T_{2b} T_{3b} T_{4b}) \quad (3.20)$$

mit

$$T_{1f,b} = \overline{k_r} \quad (3.21)$$

$$T_{2f,b} = \bar{\rho}^{m_r} \prod_{s=1}^{N_s} \left(\frac{1}{M_s} \right)^{v_{sr}} \quad (3.22)$$

$$T_{3f,b} = \frac{\prod_{s=1}^{N_s} \prod_{l=1}^{v_{sr}} (\beta_s + v_{sr} - l)}{\prod_{j=1}^{m_r} (B + m_r - j)} \quad (3.23)$$

$$T_{4f,b} = \left[\sum_{s=1}^{N_s} \frac{t_s}{M_s} (\beta_s + v_{sr}) \right]^{v_{N_s+1r}}. \quad (3.24)$$

In obiger Gleichung ist $B = \sum_{s=1}^{N_s} \beta_s$ und $m_r = \sum_{s=1}^{N_s+1} v_{sr}$ bezeichnet die Summe der Stöchiometriekoeffizienten einer Hin- oder Rückreaktion inklusive eines Dreierstoß-Partners mit der Effektivität t_s . Der Faktor $T_{4f,b}$ ist nur bei einer Dreierstoß-Reaktion ungleich Eins.

3.3.4 Physikalische Plausibilität

Da sich aus einer gegebenen PDF alle höheren Momente extrahieren lassen, kann die oben beschriebene multivariate β -Verteilung auf die Richtigkeit dieser Momente untersucht werden. Nach Girimaji [Gir91] ergibt sich folgender Zusammenhang:

$$\widetilde{Y''_{\alpha} Y''_{\beta}} = \sigma_Y \frac{\tilde{Y}_{\alpha} \delta_{\alpha\beta} - \tilde{Y}_{\alpha} \tilde{Y}_{\beta}}{1 - \sum_{s=1}^{N_s} \tilde{Y}_s^2}, \quad (3.25)$$

mit dem sich die einzelnen Varianzen ($\alpha = \beta$), als auch die Kovarianzen ($\alpha \neq \beta$) der Speziesfluktuationen, berechnen lassen. Notwendig für einen solchen Nachweis ist entweder eine DNS oder ein Experiment, aus welchem die Varianzen hervorgehen.

Auch ohne einen Vergleich mit realen Fluktuationen lässt sich aus Gleichung 3.25 qualitativ das Verhalten ableiten. Durch die gemittelten Spezies-Massenbrüche im Zähler wird die Varianz einer bestimmten Spezies gewichtet, d.h. die Varianz steigt mit dem Massenbruch bis zum Maximum bei $\tilde{Y} = 0,5$ an und fällt bei höheren Massenbrüchen wieder ab. Dies gilt unter zwei Bedingungen: Keine der Spezies besitzt den Massenbruch $\tilde{Y} = 1$ und die

turbulente Skalarenergie bewegt sich innerhalb der physikalischen Schranken

$$0 \leq \sigma_Y \leq \sum_{s=1}^{N_s} \tilde{Y}_s (1 - \tilde{Y}_s). \quad (3.26)$$

Während das Verhalten der Varianzen physikalisch plausibel erscheint, gilt dies nicht für die Kovarianzen, welche nach Gleichung 3.25 alle negativ korreliert sind.

Auf der Basis eines Vergleichs mit dem Experiment von Cheng et al. [CWP⁺94], genauer untersucht in Abschnitt 5.2, ist eine gute Analyse möglich. Baurle et al. [BAH94] haben die β -PDF von Girimaji mit Hilfe dieses Experiments intensiv untersucht. Aus den gemessenen Mittelwerten und Varianzen der Spezies bestimmten sie die Gültigkeit von Gleichung 3.25, indem sie aus der Summe der Varianzen auf die einzelnen Speziesvarianzen zurückrechneten. Es hat sich gezeigt, dass bei einigen Spezies die Übereinstimmung sehr gut war, bei anderen Spezies wurde nur die Größenordnung getroffen. Aus dieser Unsicherheit der einzelnen Speziesvarianzen lässt sich auch die Fehleranfälligkeit der Terme \mathcal{C}^T und \mathcal{C}^Y aus den Transportgleichungen 3.7 bzw. 3.14 erklären, da diese sensitiv auf die Genauigkeit der höheren Momente reagieren. Somit wird das Vorgehen bestätigt, diese Terme gleich Null zu setzen.

Ebenfalls am Experiment von Cheng et al. haben Gerlinger et al. [GNA05] die Richtigkeit der Form der PDF untersucht. Dies geschah an drei ausgewählten Punkten im Strömungsfeld, wo Mittelwerte und Schwankungsgrößen der thermo-chemischen Variablen aus 2000 Lasershots ermittelt wurden. Gerlinger untersuchte ein- und zweidimensionale Randverteilungen, welche aus Gleichung 3.8 durch Integration aller restlichen Variablen gewonnen werden können. Eindimensionale Randverteilungen der Spezies O₂, H₂O und OH wurden an verschiedenen Punkten des Strömungsfeldes berechnet und mit den experimentellen Daten verglichen. Es zeigte sich, dass die β -PDF alle wesentlichen Formen der Randverteilung gut beschreibt, die entweder aus einem Maximum zwischen den Rändern oder zwei Maxima auf den Rändern besteht.

Abweichungen entstehen dagegen, wenn die betreffenden Mittelwerte, welche vom CFD-Löser geliefert werden, oder die Varianz nicht korrekt sind. Die einzelnen Varianzen ergeben sich aus Gleichung 3.25 und werden maßgeblich

durch die Summe der Speziesvarianzen σ_Y bestimmt, was bedeutet, dass die Transportgleichung für σ_Y einen großen Einfluss auf die korrekte Form der PDF hat.

Gleiches gilt für die Temperaturverteilung, die durch eine Gauß-Kurve approximiert wird. Auch hier konnte die Form der Temperaturverteilung durch die PDF gut getroffen werden. Die Unterschiede zwischen Experiment und Numerik stammten hauptsächlich aus den leicht unterschiedlichen ersten und zweiten Momenten.

Ein Vergleich der zweidimensionalen Randverteilungen gibt Auskunft, inwieweit die Korrelation zweier Speziesfluktuationen mit dem Experiment übereinstimmt. Die aus Gleichung 3.25 ableitbaren stets negativen Korrelationen bei unterschiedlichen Spezies lassen eine ungenaue Übereinstimmung erwarten. Trotzdem beschreibt Gerlinger die strukturelle Übereinstimmung zwischen gemessenen und simulierten Randverteilungen als überraschend gut. Grund hierfür ist, dass nur die Randverteilungen der im Experiment positiv korrelierten Spezies stark von der Randverteilung der β -PDF abweichen. Dagegen werden physikalisch negativ korrelierte Speziesfluktuationen oder Korrelationen nahe Null relativ gut wiedergegeben.

Baurle und Girimaji [BG03] haben untersucht, ob die angenommene statistische Unabhängigkeit zwischen Temperatur- und Speziesfluktuationen korrigiert werden kann. Betrachtet man eine einfache Reaktion



lässt sich die mittlere Produktionsrate $\overline{\dot{\omega}}_C(\rho_A, \rho_B, T)$ von Spezies C in zwei Funktionen aufspalten

$$\overline{f_\rho(\rho_s) f_T(T)} = \overline{f_\rho(\rho_s)} \overline{f_T(T)} + C_l [\overline{f_\rho'^2(\rho_s)} \overline{f_T'^2(T)}]^{1/2}, \quad (3.28)$$

deren Varianzen über den Korrelations-Koeffizienten C_l verknüpft sind. Dieser Koeffizient bewegt sich in den Grenzen $[-1;1]$ und ist für exotherme Reaktionen positiv und endotherme Reaktionen negativ. Unter der Annahme, dass sich die Reaktionsvariablen entlang einer sog. *Intrinsic Low-Dimensional Manifold* (ILDM) bewegen, wurde ein linearer Zusammenhang zwischen der Änderung der Spezies und der Änderung der Temperatur hergestellt, um den Korrelationskoeffizienten zu bestimmen.

Dieser Ansatz birgt eine Reihe von Nachteilen. Einerseits wird durch die Anwendung eines ILDM-Verfahrens zwar die Dimensionalität eines Reaktionsmechanismus verkleinert, damit gehen aber die Informationen über sehr schnell ablaufende Einzelreaktionen verloren, welche für eine exakte Wiedergabe der Zündverzugszeit notwendig sind. Außerdem wird bei dieser Kopplung von Temperatur- und Speziesfluktuationen Wärmefreisetzung vorausgesetzt. Diese tritt aber immer erst in der Endphase der Zündung auf, womit dieser Ansatz in der Startphase der Zündung keine Auswirkungen hat. Gerade aber diese Startphase hat in einer Überschallbrennkammer große Auswirkungen auf die Zündverzugslänge. Schließlich ist Gleichung 3.28 einfach anwendbar bei einer einzelnen Reaktionsgleichung, bei einem größeren Reaktionsmechanismus mit gleichzeitig auftretenden exothermen und endothermen Reaktionen sind die Koeffizienten allerdings nicht mehr eindeutig bestimmbar.

Wegen der Unsicherheit der Ergebnisse und dem hohen numerischen Aufwand findet dieses Verfahren noch keine breite Anwendung.

3.4 Untersuchungen zum assumed-PDF Ansatz

3.4.1 Einfluss der Temperatur- und Speziesschwankungen

Wie Gleichung 2.45 zeigt, kann die turbulente Flammengeschwindigkeit als Funktion der laminaren Flammengeschwindigkeit und der turbulenten Geschwindigkeitsschwankungen beschrieben werden. Dieses Modell gibt in sehr guter Näherung den Einfluss der Turbulenz bei vorgemischter Verbrennung wieder, was im Borghi-Diagramm anschaulich dargestellt wird. Die Turbulenz verursacht indirekt eine höhere Reaktionsrate, was sich direkt als größere Flammengeschwindigkeit äußert. Der Parameter u'_{rms} hat somit einen eindeutigen Einfluss auf die Verbrennung.

Im Gegensatz zu einem einzelnen Parameter u'_{rms} , welcher die turbulenten Geschwindigkeitsschwankungen beschreibt, gehen in den hier verwendeten assumed-PDF Ansatz zwei Turbulenz-Parameter ein. Diese sind, in Form von Varianzen, die Temperaturschwankung T'' und die Speziesschwankun-

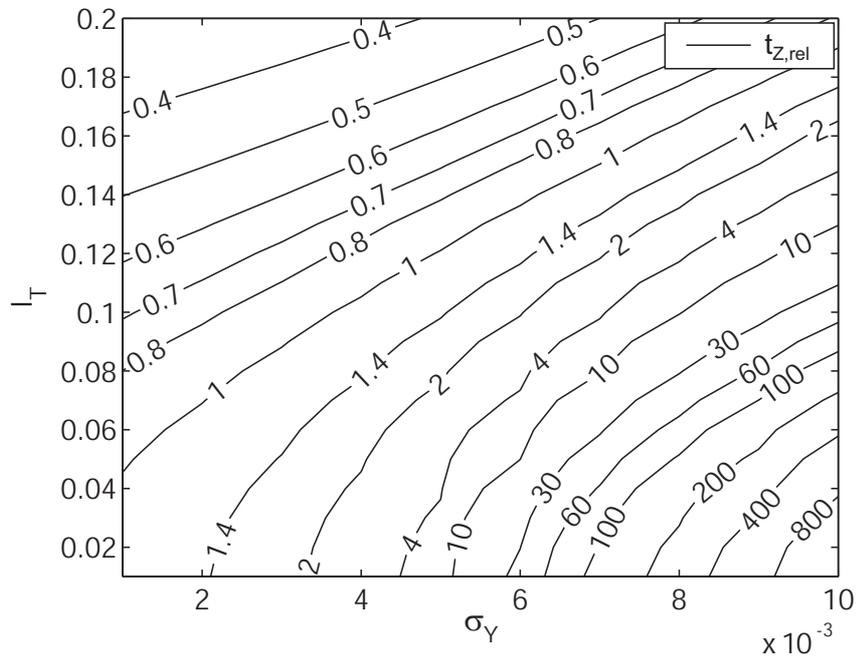


Abbildung 3.4: Fluktuations-Diagramm bei einer Vorwärmtemperatur von 1000 K.

gen Y_i'' . Es stellt sich nun die Frage, welche Bedeutung diese Parameter für das Verbrennungsmodell besitzen bzw. welche Auswirkung sie auf das zugrunde liegende rein reaktionskinetische Modell haben. Dazu wurden Rechnungen durchgeführt, welche die Zündverzugszeiten des detaillierten Mechanismus mit assumed-PDF Modell in einem Null-dimensionalen Konstant-Volumen Reaktor berechnen (siehe Abschnitt 4.2.2).

Die durch das assumed-PDF Modell beeinflusste Zündverzugszeit wird mit der eigentlichen Zündverzugszeit, also ohne fluktuierende Variablen, verglichen. Mit der turbulenten Zündverzugszeit $t_{Z,t}$ und der Referenzzeit $t_{Z,ref}$ wird eine relative Zündverzugszeit $t_{Z,rel}$ mit

$$t_{Z,rel} = \frac{t_{Z,t}}{t_{Z,ref}} \quad (3.29)$$

gebildet. Diese relative Zündverzugszeit ist in Abhängigkeit der beiden Schwankungsgrößen in Abbildung 3.4 dargestellt. Da die Temperaturvarianz sehr große und dadurch schwer interpretierbare Werte annehmen kann, wird

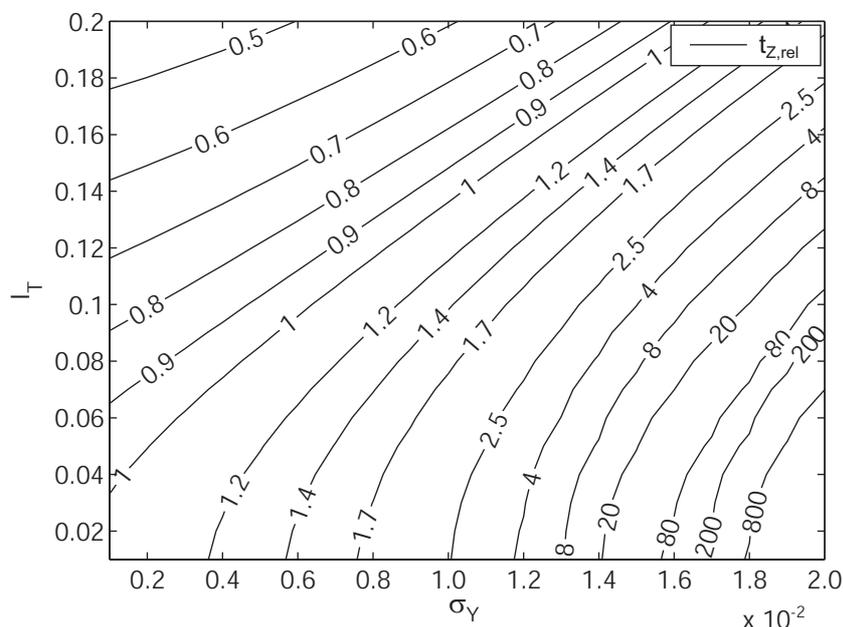


Abbildung 3.5: Fluktuations-Diagramm bei einer Vorwärmtemperatur von 1100 K.

die Varianz durch die Intensität der Temperaturfluktuationen ersetzt:

$$I_T = \frac{\sqrt{\sigma_T}}{\tilde{T}}. \quad (3.30)$$

Werte kleiner Eins im Diagramm bedeuten eine durch turbulente Schwankungen beschleunigte Chemie. Bei Werten größer Eins wirken sich die Temperatur- und Speziesfluktuationen dämpfend auf die chemische Produktionsrate aus, was eine längere turbulente Zündverzugszeit zur Folge hat. Die in Abbildung 3.4 gezeigten Werte beziehen sich auf eine stöchiometrische H₂-Luft Mischung mit T₀=1000 K. Dieses Diagramm deckt einen Wertebereich von 1% bis 20% Temperaturfluktuationen und moderaten Speziesfluktuationen ab (reale Temperatur- und Speziesfluktuation zeigt Abbildung 5.11). Am ausgedehnten Gebiet mit $t_{Z,rel} > 1$ ist erkennbar, dass offensichtlich turbulente Fluktuationen nicht gleichzeitig schnellere Chemie bedeuten. Hier ist ein Unterschied zu diversen Modellen für die turbulente Flammgeschwindigkeit zu erkennen, bei welchen die Turbulenz, charakterisiert durch u'_{rms} , stets beschleunigend⁴ auf die chemische Umsatzrate bzw. Flammgeschwindigkeit

⁴unter der Voraussetzung, dass in der Anströmung keine Luftzahlschwankungen existieren

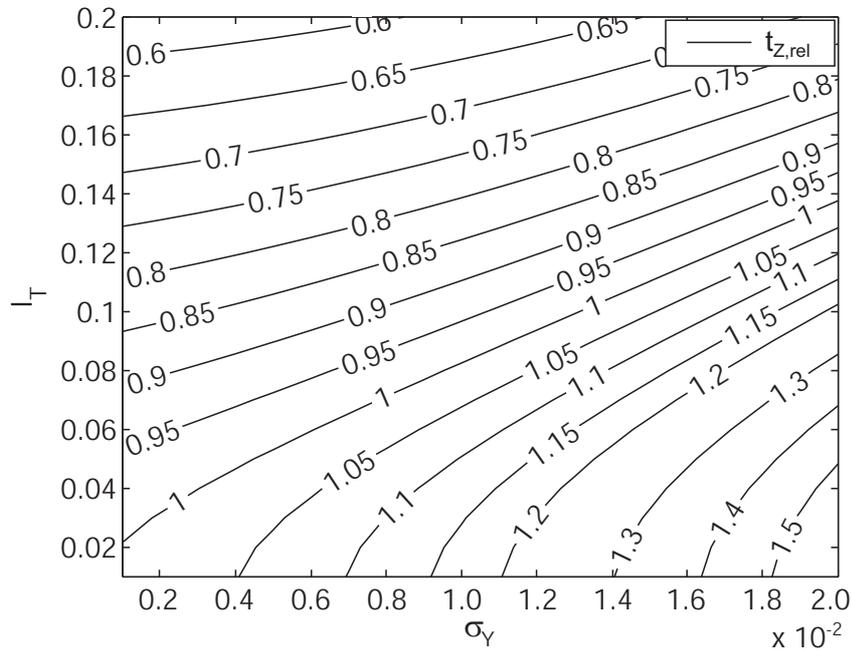


Abbildung 3.6: Fluktuations-Diagramm bei einer Vorwärmtemperatur von 1300 K.

keit wirkt (siehe Gleichung 2.45). Dieser eindeutige Einfluss der Turbulenz ist bei diesem assumed-PDF Verbrennungsmodell nicht zu beobachten. Weiterhin ist zu erkennen, dass in jedem Punkt des Diagramms eine partielle Ableitung in Richtung der Temperaturfluktuationen einen negativen Wert besitzt, d.h. mit zunehmenden Temperaturschwankungen wird die relative Zündverzugszeit kleiner. Dagegen ist in jedem Punkt des Diagramms die partielle Ableitung in Richtung der Speziesfluktuationen positiv, was zur Folge hat, dass die relative Zündverzugszeit größer wird. Der Einfluss der Temperaturfluktuationen ist mit den Verläufen der Geschwindigkeitskoeffizienten $k_f(T)$ erklärbar. Einige wenige dieser Funktionen sind stetig fallend, die meisten Geschwindigkeitskoeffizienten steigen aber mit der Temperatur nichtlinear an. Dies hat zur Folge, dass eine symmetrische Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion, wie in diesem Fall die Gauß-Verteilung, bei nichtlinear anwachsenden Funktionen stets den Geschwindigkeitskoeffizienten erhöht:

$$k_f(\bar{T}) < \int k_f(T) \mathcal{P}(T) dT. \quad (3.31)$$

Der Geschwindigkeitskoeffizient der wichtigsten Ketteneinleitungsreaktion (Elementargleichung 9, Anhang A) besitzt einen stark exponentiellen Charakter, ebenso die Koeffizienten der Kettenfortpflanzungs- und Kettenverzweigungsreaktionen (Elementarreaktionen 1 – 4, Anhang A). Da diese erste Phase der Zündung maßgeblich die Zündverzugszeit bestimmt, können die Auswirkungen der Elementargleichungen, deren Geschwindigkeitskoeffizient mit steigender Temperatur fällt, für die Zündverzugszeit vernachlässigt werden. Das bedeutet, dass mit wachsenden Temperaturfluktuationen die chemische Umsatzrate stets erhöht wird. Dagegen bewirken wachsende Speziesfluktuationen eine breitere Verteilung im Zustandsraum, d.h. es sind mehr chemisch ungünstige Zustände in der JPDF enthalten. Diese Zunahme der Zustände ist deutlich in Abbildung 3.3 erkennbar.

In den Diagrammen in Abbildung 3.5 und 3.6 ist die relative Zündverzugszeit bei stöchiometrischer Mischung und unterschiedlichen Vorwärmtemperaturen dargestellt. Auch bei diesen höheren Temperaturen haben die Fluktuationen einen solchen Einfluss. Desweiteren ist eine Zunahme des Gebietes mit $t_{Z,rel} < 1$ festzustellen.

Im Fall einer Mischung deren Mittelwert stöchiometrisch ist, bedeutet jede Speziesfluktuation eine Abweichung vom Optimum und infolgedessen eine Erhöhung der Zündverzugszeit. Dagegen erstreckt sich der Wertebereich einer PDF, deren Mittelwert nicht stöchiometrisch ist, auch in Gebiete mit einer stärker reagierenden Spezies-Zusammensetzung. Dieser Effekt wurde untersucht und ist in den Abbildungen 3.7 und 3.8 dargestellt. Die Startbedingungen mit $\lambda=0,75$ und $\lambda=1,4$ zeigen nur geringe Unterschiede zum stöchiometrischen Fall. Besonders die oben beschriebenen qualitativen Auswirkungen von Temperatur- und Spezies-Schwankungen sind auch hier zu beobachten.

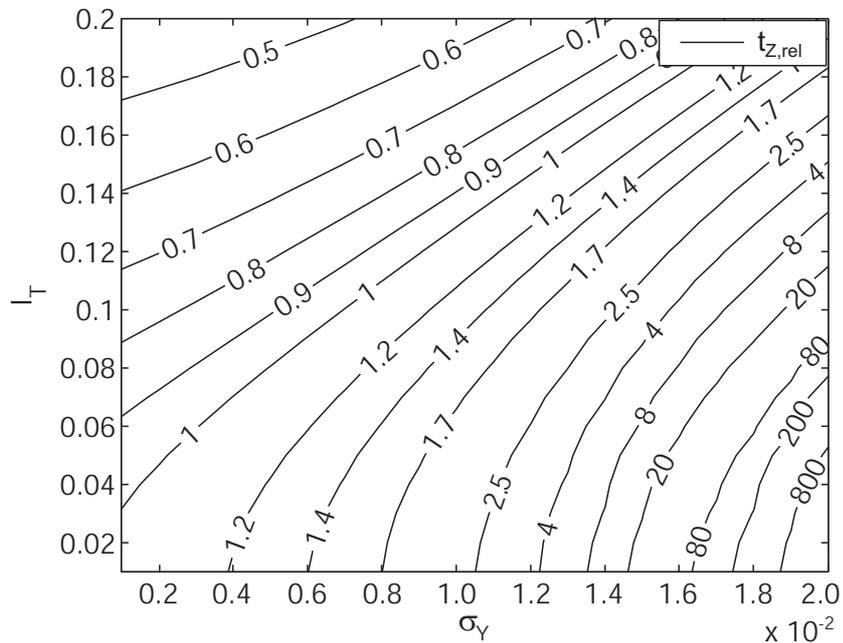


Abbildung 3.7: Fluktuations-Diagramm bei $\lambda = 0,75$ und einer Vorwärmtemperatur von 1100 K.

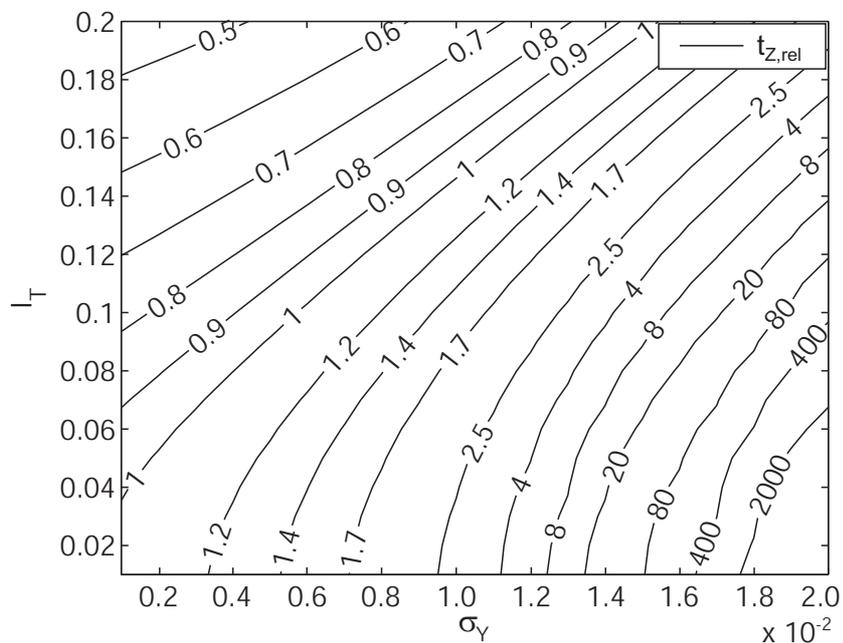


Abbildung 3.8: Fluktuations-Diagramm bei $\lambda = 1,4$ und einer Vorwärmtemperatur von 1100 K.

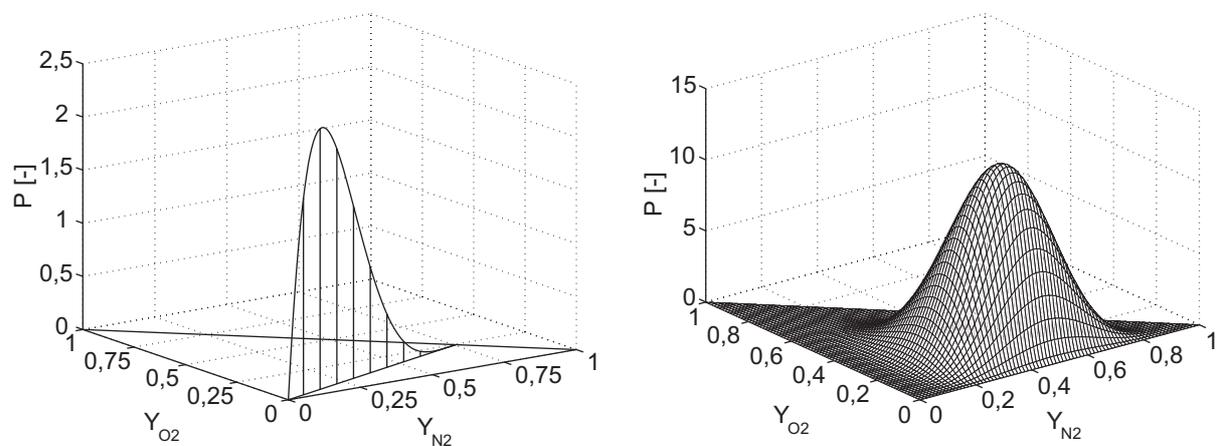


Abbildung 3.9: Unterschied zwischen realer (links) und modellierter (rechts) PDF für den Fall der Mischung einer Spezies mit Luft.

3.4.2 Entmischung der Luft

Der Vorteil, alle Speziesfluktuationen über nur einen Parameter zu beschreiben, kann zu Ungenauigkeiten in den Varianzen und Kovarianzen der einzelnen Spezies führen (siehe Abschnitt 3.3.4). Desweiteren treten auch Fluktuationen auf, welche physikalisch gar nicht existieren. So verhält sich zum Beispiel die reine Mischung aus Luft und Wasserstoff in der Realität anders, als durch das Modell beschrieben. Wird Wasserstoff in eine Luftströmung eingedüst, kann die Mischung über eine PDF beschrieben werden. Obwohl hauptsächlich die drei Spezies N_2 , O_2 und H_2 vorhanden sind, hat die PDF einen zweidimensionalen Charakter, da N_2 und O_2 bereits perfekt mit einem Verhältnis von ca. 75,5 Massenprozent Stickstoff und 24,5 Massenprozent Sauerstoff vermischt sind. Eine solche physikalisch korrekte Verteilung zeigt Abbildung 3.9 auf der linken Seite, während auf der rechten Seite dieselbe Gas Mischung mit einer β -PDF dreier Speziesmassenbrüche beschrieben wird. Der dreidimensionale Charakter dieser PDF bedeutet quasi eine „Entmischung“ von Stickstoff und Sauerstoff.

Um den Einfluss dieses Vorgangs auf die Verbrennung zu untersuchen, wurden die resultierenden Zündverzugszeiten zweier Konstant-Volumen Reaktoren verglichen. Hierbei ist der erste ein herkömmlicher Reaktor ohne fluktuierende Temperatur und ohne fluktuierende Spezies. Im zweiten Reaktor wur-

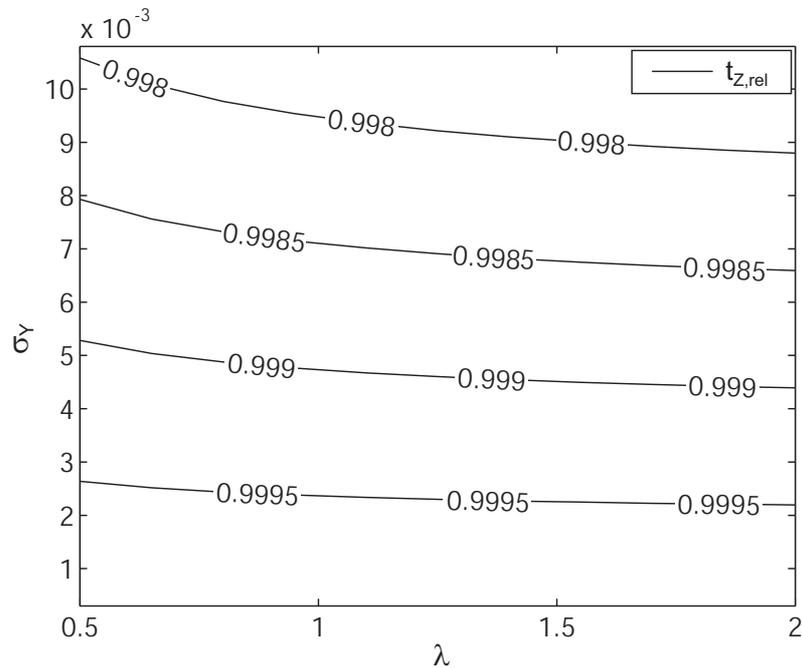


Abbildung 3.10: Relative Zündverzugszeit als Funktion der Luftzahl und der Speziesvarianz.

de eine einfache PDF, bestehend aus fünf Dirac-Funktionen, implementiert, welche nur eine Schwankung von Sauerstoff und Stickstoff bewirkte. Der Effekt der Entmischung der Luft hat nur einen geringen Einfluss, wie Abbildung 3.10 verdeutlicht. Die hier dargestellte, relative Zündverzugszeit zeigt zwar eine Abnahme mit steigender Varianz, die aber sehr gering ausfällt. Die kürzere Zündverzugszeit liegt an dem höheren Sauerstoffgehalt in einem Teilbereich der PDF, welcher sich stärker als der höhere Stickstoffgehalt im anderen Teilbereich auswirkt.

3.4.3 Statistische Abhängigkeit der fluktuierenden Variablen

Wie in Abschnitt 3.1 dargestellt, sind in dem hier verwendeten assumed-PDF Verbrennungsmodell die Spezies- und Temperaturfluktuationen statistisch unabhängig. Wie schon beschrieben, wurde der Ansatz aus den folgen-

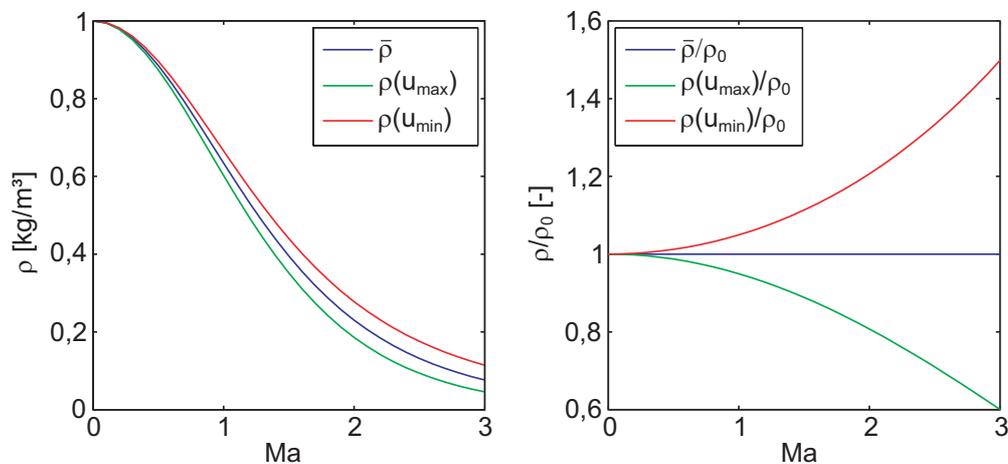


Abbildung 3.11: Isentrope Dichtefluktuationen bei relativen Geschwindigkeitsfluktuationen von 5%.

den Gründen trotzdem verwendet:

- Eine zuverlässige Korrelation ist nicht vorhanden, weshalb das Modell von Baurle und Girimaji [BG03] (beschrieben in Abschnitt 3.3.4) nicht implementiert wurde.
- Die statistische Unabhängigkeit bedeutet eine einfache Multiplikation der beiden Integrale der unterschiedlichen Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen, wobei dadurch der numerische Aufwand stark reduziert werden kann.

Während Spezies- und Temperaturfluktuationen modelliert werden, wird die Dichte als konstant angenommen (Gleichung 3.2). Dies ist eine Vereinfachung, da

- die kompressible Turbulenz,
- die Wärmefreisetzung durch chemische Reaktion,
- akustische Wellen und
- turbulente Mischung verschiedener Stoffe

in der Realität zu Dichtefluktuationen führen. In Abbildung 3.11 sind Dichtefluktuationen in Abhängigkeit der Mach-Zahl dargestellt. Die Dichte fluktuiert aufgrund von Schwankungen in der Geschwindigkeit, welche um 5% von der mittleren Geschwindigkeit abweichen. Daraus resultiert eine minimale Dichte bei $u_{max} = 1,05\bar{u}$ und eine maximale Dichte bei $u_{min} = 0,95\bar{u}$. Es wird angenommen, dass bei diesen Geschwindigkeitsfluktuationen die Totaltemperatur konstant bleibt. Es werden die Isentropen-Beziehungen der Gasdynamik [Wag98] für die Dichte und die Temperatur verwendet, wodurch keine Verluste auftreten. Die Dichte-Beziehung schreibt sich mit

$$\rho = \rho_0 \frac{1}{\left(1 + \frac{\gamma-1}{2} Ma^2\right)^{\frac{1}{\gamma-1}}} \quad (3.32)$$

und die Mach-Zahl kann als Funktion der Geschwindigkeit dargestellt werden:

$$Ma = \frac{u}{\sqrt{\gamma RT_0 - \frac{\gamma-1}{2} u^2}}. \quad (3.33)$$

Da die Annahme einer konstanten Totaltemperatur eine starke Vereinfachung bedeutet, bringt der Verlauf der Dichtefluktuationen nur eine qualitative Aussage. Das linke Diagramm zeigt die isentrope Änderung der Dichte entlang der Mach-Zahl (blaue Kurve), zusätzlich die maximale (rote Kurve) und minimale (grüne Kurve) Dichte hervorgerufen durch Geschwindigkeitsfluktuationen. Das rechte Diagramm enthält dieselbe Information, hier aber normiert mit $\bar{\rho}(Ma)$. Dadurch wird deutlich, dass die relativen Dichtefluktuationen mit zunehmender Mach-Zahl stark ansteigen. Wie zu erwarten ist, kann im inkompressiblen Bereich ($Ma \lesssim 0,3$) die Dichtefluktuation vernachlässigt werden. Dagegen sind Dichteschwankungen im Überschall deutlich ausgeprägt. In der turbulenten und kompressiblen Strömung eines zündfähiges Gasgemisches können Dichteschwankungen somit prinzipiell die Reaktionskinetik beeinflussen.

Während die Korrelation zwischen Spezies- und Temperaturschwankungen nur näherungsweise und unter Verwendung vieler Modellannahmen zu bestimmen ist [BG03], ist der Zusammenhang zwischen Dichte- und Temperaturschwankungen weniger komplex. Kompressible turbulente Scherschichten wurden von Mahle [Mah05] mittels direkter numerischer Simulation (DNS)

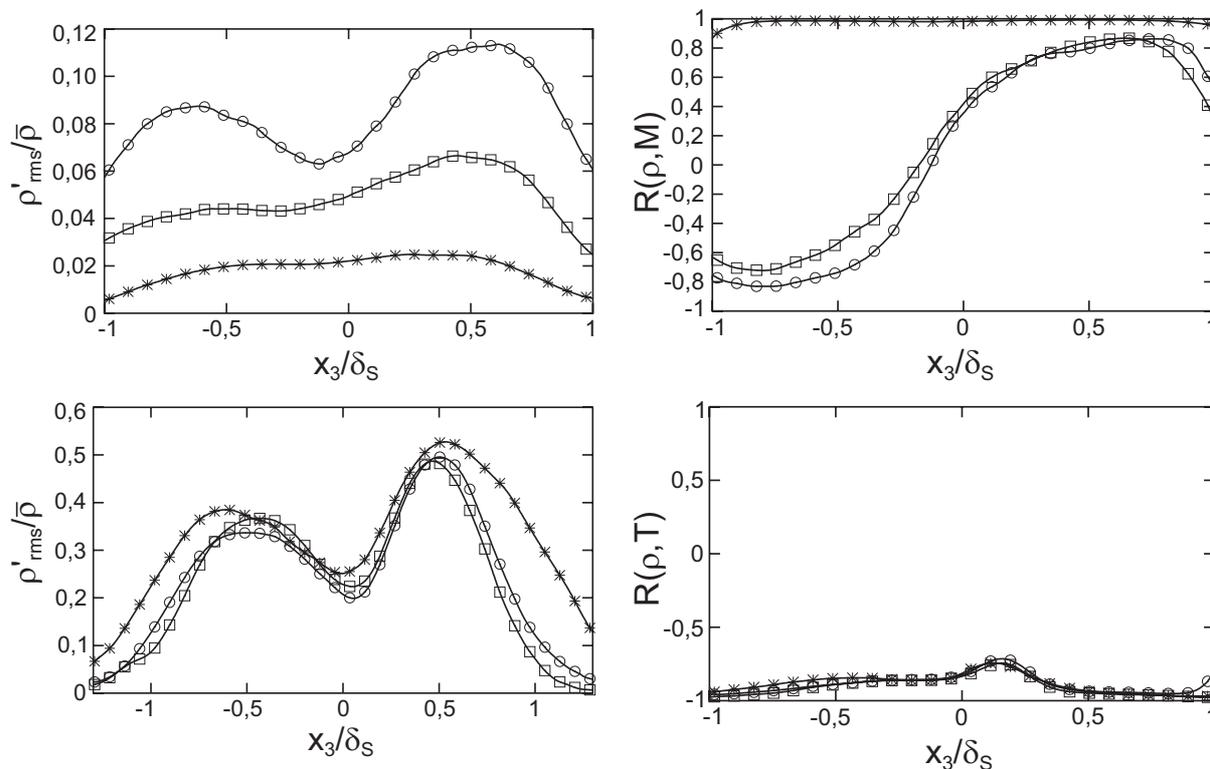


Abbildung 3.12: Dichte-Fluktuationen in einer inerten (oben) und einer reagierenden Scherschicht (unten) bei verschiedenen Mach-Zahlen: $Ma=0,15$ (*), $Ma=0,7$ (\square) und $Ma=1,1$ (\circ) (aus [Mah05]).

untersucht. Dabei wurde die Kompressibilität durch unterschiedliche Mach-Zahlen variiert und deren Einfluss auf turbulente Strömungen mit und ohne Verbrennung untersucht. In der ausführlichen Analyse der Simulationsdaten wurden unter anderem auch einige Aussagen über die Dichtefluktuationen getroffen. Diese Ergebnisse sind in Abbildung 3.12 dargestellt. Hier ist x_3 die Koordinate normal zur ebenen Scherschicht und δ_S eine charakteristische Dicke der Scherschicht. Alle Größen sind Mittelwerte in der $x_1 - x_2$ Ebene. Die beiden oberen Abbildungen zeigen Ergebnisse der inerten Scherschicht. Hier bestätigt das linke Bild den oben gezeigten Anstieg der Dichtefluktuationen mit der Mach-Zahl. Das rechte Bild zeigt den dominanten Mechanismus, welcher bei inkompressibler Scherschicht ($Ma=0,15$) die Dichtefluktuationen erzeugt. Hier ist die Korrelation zwischen Dichte und Molmasse des Gasmis-

ches

$$R(\rho, M) = \frac{\overline{\rho' M'}}{\rho'_{rms} M'_{rms}} \approx 1,0, \quad (3.34)$$

was bedeutet, dass der Mechanismus der Mischung dominiert. Bei höheren Mach-Zahlen zeigt sich eine verstärkte Dichte-Druck und Dichte-Temperatur Korrelation. Die unteren Abbildungen stellen einige Zusammenhänge in der mit unendlich schneller Chemie reagierenden Scherschicht dar. Die Wärme-freisetzung erzeugt einerseits wesentlich höhere Dichtefluktuationen (und auch Temperaturfluktuationen) als im inerten Fall und andererseits eine starke Dichte-Temperatur-Korrelation.

Der Zusammenhang zwischen Dichte- und Temperaturfluktuationen wird mit den thermodynamischen Fluktuationen begründet. Diese lassen sich aus der Zustandsgleichung des idealen Gases herleiten und schreiben sich (unter Vernachlässigung der Terme höherer Ordnung) als

$$\frac{\rho'}{\bar{\rho}} = \frac{p'}{\bar{p}} - \frac{T'}{\bar{T}} + \frac{M'}{\bar{M}}. \quad (3.35)$$

Eine Analyse der einzelnen Terme ergab, dass für den Fall der reagierenden Scherschicht die Fluktuationen des Druckes und der Molmasse M des Gasgemisches vernachlässigbar sind. Das führt zu der Beziehung

$$\frac{\rho'}{\bar{\rho}} \approx -\frac{T'}{\bar{T}}, \quad (3.36)$$

welche durch die Auswertung der DNS-Daten in sehr guter Näherung bestätigt werden konnte.

Die Auswirkungen der Korrelation aus Gleichung 3.36 auf die Produktionsraten verschiedener Spezies wurden berechnet. Das negative Vorzeichen in der Korrelation bedeutet, dass ein Zustand hoher Temperatur einhergeht mit niedriger Dichte und vice versa. Wie schon in Abschnitt 3.4.1 gezeigt, beschleunigen reine Temperaturfluktuationen die Reaktion. Zusätzlich negativ korrelierte Dichtefluktuationen wirken dämpfend auf diesen Effekt. Die qualitative Auswirkung der Temperaturfluktuationen auf die Reaktionskinetik bleibt erhalten, nur fällt diese, wegen der Dichtefluktuationen, weniger stark

aus. Eine Implementierung dieses Ansatzes benötigt keinen zusätzlichen Parameter, da ρ' direkt an T' gekoppelt ist. Vorteile der Korrelation 3.36 sind zum einen deren einfache Struktur und zum anderen, dass sie keine Modellierung benötigt. Allerdings ist der Gültigkeitsbereich beschränkt: Bei Mahle [Mah05] gilt sie in der reagierenden Scherschicht, bei Lechner et al. [LSF01] tritt diese Korrelation auch in der Wandgrenzschicht eines mit Überschall durchströmten Kanals auf. Die Gleichung 3.36 ist somit nicht im gesamten Strömungsfeld anwendbar und muss für den Zündbereich angepasst werden.

Dieser Abschnitt hat gezeigt, dass eine Korrelation zwischen Temperatur- und Dichtefluktuationen existiert, welche wesentlich einfacher aufgebaut ist als die von Baurle und Girimaji [BG03] vorgeschlagene Temperatur-Spezies-Korrelation. Im Gegensatz zur Temperatur-Spezies-Korrelation wird die physikalische Richtigkeit der Temperatur-Dichte-Korrelation durch DNS-Ergebnisse bestätigt. Ausgehend davon kann in Zukunft ein Modell entwickelt werden, welches die Temperatur-Dichte-Korrelation auch für den, für die Überschallverbrennung wichtigen, Zündbereich modelliert. Nur die exakte Kenntnis der Temperaturfluktuationen rechtfertigt die Anwendung dieser Korrelation, da der numerische Aufwand, durch die nun nicht mehr voneinander unabhängigen Spezies- und Temperatur-PDF, stark ansteigt.

4 Tabellierung

4.1 Grundidee

Schon im 15. Jahrhundert wurden von Astronomen Tabellen genutzt, um Werte trigonometrischer Funktionen, welche sehr umständlich zu berechnen waren, auf einfache Weise abzufragen. Verbreitete Anwendung erfuhren mathematische Tabellen in allen Bereichen der Wissenschaft und des Ingenieurwesens, bis sie durch elektronische Rechner abgelöst wurden. Ein Beispiel einer tabellierten Funktion ist die Exponentialfunktion in Gleichung 4.1, welche als Potenzreihe aus unendlich vielen Summanden besteht.

$$e^x = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} x^n \quad (4.1)$$

Schon die Berechnung der ersten Terme dieser Potenzreihe war sehr mühsam, so dass eine Wiederverwendung einmal berechneter Werte sinnvoll erschien (siehe Abbildung 4.1).

Die Exponentialfunktion ist eine nichtlineare Funktion einer Variablen und kann daher in einer eindimensionalen Tabelle abgelegt werden. Die Abfrage der Tabelle kann prinzipiell auf zwei Arten geschehen: Entweder wird der nächstgelegene Tabellenwert gewählt oder zwischen den Tabellenwerten interpoliert. Zu beachten ist, dass der Aufwand für die Extraktion der Daten aus der Tabelle heraus deutlich geringer sein sollte als die direkte Berechnung. Andernfalls würde die Tabellierung ihren Sinn verlieren.

Seit dem Einzug der Computer ist die Tabellierung von Daten eine gebräuchliche Anwendung. In der Informatik wird eine Tabelle zum Speichern und wieder Auslesen von Daten als *look-up* Tabelle bezeichnet. Die allgemeine Aufgabe besteht darin, Rechenzeit einzusparen. Das ist auch in dieser Arbeit der zentrale Gedanke, da die numerische Berechnung detaillierter Chemie einen enormen zusätzlichen Zeit- und somit Kostenaufwand innerhalb einer CFD-

x	e^x	$\text{Log}_{10}(e^x)$	e^{-x}
2.00	7.3891	0.86859	0.135335
2.01	7.4633	.87293	.133989
2.02	7.5383	.87727	.132655
2.03	7.6141	.88162	.131336
2.04	7.6906	.88596	.130029
2.05	7.7679	0.89030	0.128735
2.06	7.8460	.89465	.127454
2.07	7.9248	.89899	.126186
2.08	8.0045	.90333	.124930
2.09	8.0849	.90768	.123687
2.10	8.1662	0.91202	0.122456
2.11	8.2482	.91636	.121238
2.12	8.3311	.92070	.120032
2.13	8.4149	.92505	.118837
2.14	8.4994	.92939	.117655

Abbildung 4.1: Auszug aus einer Tabelle mit Exponentialfunktionen aus einem mathematischen Tabellenwerk von 1941 [Hod41].

Simulation darstellt. Die Verwendung einer look-up Tabelle bringt neben dem Vorteil der Einsparung von Rechenzeit immer zwei mehr oder weniger relevante Nachteile mit sich. Zum einen der dabei entstehende Näherungsfehler und zum anderen der für die Tabelle notwendige Speicherplatz.

Während das Thema Speicherplatz für viele Anwendungen unkritisch ist, benötigt die in dieser Arbeit verwendete hochdimensionale Tabelle einen nicht unerheblichen Teil des Arbeitsspeichers und steht damit in Konkurrenz zum parallel laufenden CFD-Verfahren. Zusammenfassend kann die Verwendung einer look-up Tabelle wie folgt beschrieben werden: Es wird der Vorteil der kürzeren Rechenzeit gegen den Nachteil des höheren Speicherplatzes getauscht, wobei eine größere Tabelle¹ einen kleineren Fehler der Näherungslösung bedeutet.

¹durch eine größere Anzahl von Stützstellen

4.2 Tabelleninhalt

4.2.1 Thermo-chemische Variablen

Die hier verwendete hochdimensionale Tabelle für die Wasserstoffverbrennung enthält den thermo-chemischen Zustand $\vec{\phi}(t + \Delta t)$ nach einem Zeitschritt Δt , wobei der thermo-chemische Zustand durch folgende Variablen beschrieben wird:

$$\vec{\phi} = (T, c_{O_2}, c_{N_2}, c_{H_2}, c_{H_2O}, c_O, c_H, c_{OH}, c_{HO_2}, c_{H_2O_2}). \quad (4.2)$$

Darin sind T die statische Temperatur und c_X die molare Konzentration der Spezies X . Der Zeitschritt entspricht dem physikalischen Zeitschritt des CFD-Lösers. Dieser neue Zustand zum Zeitpunkt $t + \Delta t$ entspricht der realen Änderung des Gasgemisches². Diese Änderung wird in einem nulldimensionalen Konstant-Volumen Reaktor berechnet (siehe Abschnitt 4.2.2), da das betrachtete Gasgemisch auf ein *Finites Volumen* begrenzt ist und dieses in der vom CFD-Löser entkoppelten Verbrennungsberechnung auch nicht verlassen werden kann. Der Druckausgleich mit der Umgebung findet in den darauf folgenden Iterationen des CFD-Lösers statt.

Der neue thermo-chemische Zustand ist eine Funktion des alten thermo-chemischen Zustands und der Fluktuationen der thermo-chemischen Variablen:

$$(\vec{\phi}(t), \sigma_T, \sigma_Y) \mapsto \vec{\phi}(t + \Delta t). \quad (4.3)$$

Genau genommen ändert sich der neue Zustand $\vec{\phi}(t + \Delta t)$ auch mit dem Zeitschritt Δt . Da dieser Zeitschritt aber pro Tabelle nur einen konstanten Wert besitzt, ist er auch nicht als Variable auf der linken Seite von Beziehung 4.3 aufgeführt.

Die Tabellierung der Massenbrüche statt der Spezies würde zwar auf den ersten Blick eine Dimension einsparen (die Summe aller Massenbrüche ist Eins), jedoch schließt die Verwendung aller Konzentrationen dafür indirekt den Druck mit in die Tabelle ein. Da der Druck für die detaillierte Chemie ein

²im Rahmen der Genauigkeit des verwendeten Reaktionsmechanismus

wichtiger Parameter ist, besonders in kompressiblen Strömungen, findet er Eingang in die Tabelle über die Konzentrationen der Spezies.

Die Methode, den thermo-chemischen Zustand $\vec{\phi}(t + \Delta t)$ zu tabellieren, wurde das erste Mal von Pope [Pop97] angewendet und als *reaction mapping* bezeichnet. Dabei wurde dieses Verfahren in einer Monte-Carlo Simulation verwendet, um den Reaktionsfortschritt der zahlreichen Partikel effizient zu beschreiben.

Prinzipiell könnten auch die Quellterme der Erhaltungsgleichungen von Spezies und Energie in einer Tabelle abgelegt werden. Die Tabelle hätte in diesem Fall dieselbe Anzahl an Dimensionen und auch dieselbe Struktur. Diese Methode wäre aber zweifelsfrei langsamer als das hier angewandte *reaction mapping*, da der CFD-Löser bei jeder inneren Iteration (pro Zeitschritt ca. 5 - 10) in der Energiegleichung 2.21 und allen Speziesgleichungen 2.38 einen nichtlinearen Quellterm berücksichtigen müsste.

4.2.2 Konstant-Volumen Reaktor

Um die zeitliche Entwicklung eines chemisch reagierenden Gasmischtes zu beschreiben, wird ein Konstant-Volumen Reaktor verwendet. Dieser basiert auf der momentanen Spezies-Produktionsrate aus Gleichung 2.2 bzw. der durch das assumed-PDF Modell modifizierten Gleichung 3.3. Dieser Reaktor wird durch folgendes gekoppelte Differentialgleichungs-System erster Ordnung beschrieben [Tur00]:

$$\frac{dT}{dt} = \frac{\mathcal{R}T \sum_{s=1}^{N_s} w_s - \sum_{s=1}^{N_s} (h_s M_s w_s)}{\sum_{s=1}^{N_s} (c_s (c_{p,s} - \mathcal{R}))} \quad (4.4)$$

$$\frac{dc_s}{dt} = w_s. \quad (4.5)$$

Die Gleichungen 4.4 und 4.5 des Konstant-Volumen Reaktors werden mit der Methode von Rosenbrock [PTVF92] gelöst, welches ein mehrstufiges Runge-Kutta Verfahren enthält, das für steife chemische Gleichungs-Systeme geeignet ist.

Rein formal ist die Anwendung eines solchen Reaktors auf ein PDF Modell zwar widersprüchlich, da der thermodynamische und chemische Zustand per Definition räumlich konstant sein muss, eine Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion aber (unendlich) viele unterschiedliche Zustände abbildet. Mathematisch betrachtet ändert sich aber das zugrunde liegende Differentialgleichungs-System nicht, lediglich der Betrag der Produktionsraten - ähnlich als würde ein anderer Reaktionsmechanismus implementiert. Um dennoch auf den formalen Unterschied hinzuweisen, wäre die Bezeichnung *Pseudo-Konstant-Volumen Reaktor* präziser.

4.3 Tabellenstruktur

Wie schon oben erwähnt, besitzt die Tabelle für eine Exponentialfunktion nur eine Dimension, da nur eine Variable den Wert der Exponentialfunktion bestimmt. Die Tabellierung einer Funktion mehrerer Variablen bedeutet daher auch eine mehrdimensionale Tabelle. Diese kann rechnerintern als Array oder auch als Baumstruktur [Pop97] abgelegt werden. Die hier verwendete Tabelle besitzt 12 Dimensionen: die zehn Variablen des thermo-chemischen Zustands aus Gleichung 4.2 plus den zwei Parametern σ_Y und σ_T , welche die turbulenten Fluktuationen von Spezies und Temperatur beschreiben.

Diese hohe Anzahl der Dimensionen macht eine direkte Ablage in einem 12-dimensionalen Array nicht mehr möglich, da dies Speicheranforderungen im Terra-Byte Bereich bedeuten würde. Dieses Problem kann umgangen werden, indem nur die physikalisch sinnvollen Zustände tabelliert werden. Dieser realisierbare Bereich ist ein kleiner Unterraum im gesamten 12-dimensionalen Gebiet [Lyu05].

Die Bestimmung und Tabellierung des physikalisch sinnvollen Unterraums ist nicht trivial und kann mit verschiedenen Ansätzen erfolgen. Als Beispiel sei wieder die tabellierte Exponentialfunktion erwähnt, deren Tabelle nur einmal erstellt wird und immer wieder verwendet werden kann. Die Erstellung erfolgt somit vor dem Verwendungsprozess, also im sog. *preprocessing*. Eine mit einem Preprozessor erstellte Tabelle des physikalischen Unterraums der H_2 - O_2 -Verbrennung wurde von Lyubar [Lyu05] implementiert. Trotz der anspruchs-

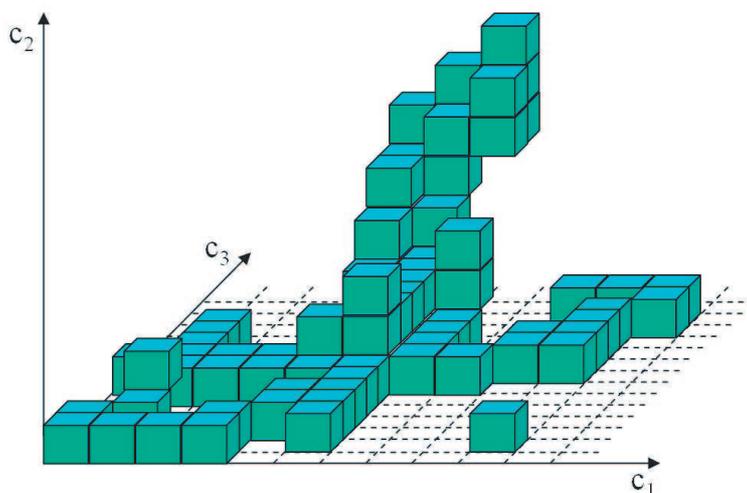


Abbildung 4.2: Dreidimensionale *in situ* Tabelle mit äquidistanten Stützstellen.

vollen Algorithmen enthielt die Tabelle nicht alle von der Simulation benötigten Daten³, da eine vorherige Abschätzung des später benötigten physikalischen Unterraums sich nicht als hundertprozentig zuverlässig erwies. Der Preprozessor berechnete aus einem plausiblen Feld von thermo-chemischen Startzuständen deren zeitliche Entwicklung mittels reaktionskinetischer Gleichungen. Die durch Transportvorgänge (Diffusion und Konvektion) in einer mehrdimensionalen, komplexen Strömung erzeugten Zustände, zum Beispiel eine lokale Mischung aus verbranntem und unverbranntem Gas, konnten dabei nicht erfasst werden.

Die Alternative zum Preprozessor ist die sog. *in situ* Tabellierung. Dabei ist zu Beginn der Berechnung, in diesem Fall der CFD-Simulation, die Tabellenstruktur vorhanden, die Tabelle selbst ist aber noch leer. Sie wird erst während der Rechnung mit Daten gefüllt. Dadurch wird vor allem sicher gestellt, dass wirklich alle auftretenden thermo-chemischen Zustände tabelliert werden. Zudem werden nur die Daten gespeichert, die tatsächlich in der Simulation benötigt werden, womit die Tabelle die kleinstmögliche Größe annimmt. Abbildung 4.2 zeigt ein Beispiel einer dreidimensionalen *in situ* Tabelle⁴. Die

³die Quote der fehlenden Tabelleneinträge war < 1%

⁴hoch-dimensionale Tabellen stellen in der algorithmischen Umsetzung kein Problem dar, wohl aber in der

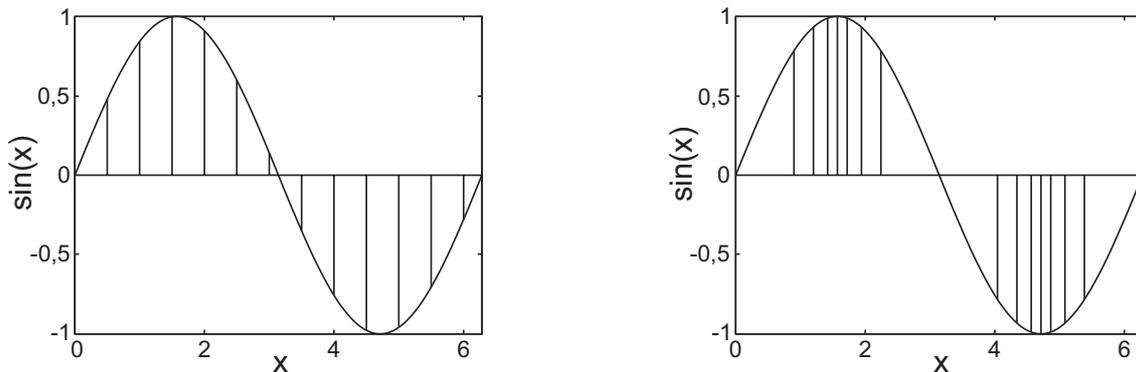


Abbildung 4.3: Äquidistante versus nicht-äquidistante Diskretisierung.

Quader stellen den Bereich dar, innerhalb welchem Daten tabelliert wurden. Jeder Quader begrenzt einen Bereich im Zustandsraum, in welchem ein Tabelleneintrag seine Gültigkeit besitzt. Da diese Tabelle nur schwach besetzt ist, enthält sie nur einen Bruchteil der kompletten Tabellendaten und reduziert damit den Speicherplatz.

Für die Aufteilung der Stützstellen in einer Tabelle gibt es verschiedene Ansätze. Die einfachste Variante sind äquidistante Stützstellen. Eine weitere Möglichkeit sind variable Schrittweiten, die an die Krümmung der Funktion angepasst sind. So kann zum Beispiel eine Sinus-Funktion an den Stellen der Extremwerte kleinere Schrittweiten aufweisen und somit den Fehler durch Interpolation verringern (siehe Abbildung 4.3). Ein unstrukturiertes und anspruchsvolles Tabellierungs-Verfahren wurde von Pope [Pop97] implementiert. Statt äquidistanter Stützstellen wurden multidimensionale Sphären kreiert, deren Ausdehnung automatisch durch den lokalen Interpolationsfehler bestimmt wurden. Dieser elegante Ansatz hatte aber den Nachteil, dass ein bestimmter Punkt im Zustandsraum nur durch aufwendige Matrix-Operationen der entsprechenden Sphäre zugeordnet werden konnte, was den Zugriff auf die Tabellendaten wieder verlangsamt hat. Dieser Nachteil wird in der hier verwendeten Tabelle umgangen, indem die multidimensionale Tabelle in äquidistante bzw. bereichsweise äquidistante Zellen zerlegt wird. Abbildung 4.4 zeigt ein Beispiel einer zweidimensionalen Tabelle, in welcher ein

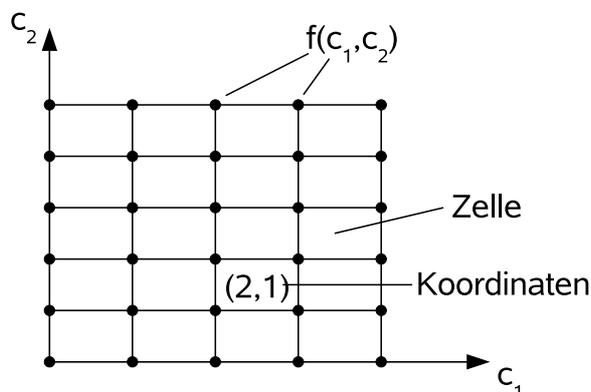


Abbildung 4.4: Zweidimensionale äquidistante Tabelle.

Funktionswert abhängig von den Konzentrationen c_1 und c_2 tabelliert wird. Jedem Bereich zwischen vier Eckpunkten, hier Zelle genannt, können auf einfache Weise seine Koordinaten zugordnet werden, so dass er schnell und eindeutig wiedergefunden werden kann. Die c_1 -Koordinate wird mit

$$k_1 = \left\lfloor \frac{c_1 - c_{1,0}}{\Delta c_1} \right\rfloor \quad (4.6)$$

bestimmt, wobei Δc_1 der Abstand der Stützstellen auf der c_1 -Achse ist und $c_{1,0}$ einen optionalen Minimalwert darstellt, welcher den Wert der Koordinate nach unten begrenzt. Dieser Quotient wird auf den nächsten ganzzahligen Wert abgerundet, was der Koordinate der gesuchten Zelle entspricht. Während mit der ganzzahligen Koordinate der richtige Tabelleneintrag gesucht wird, werden die verbleibenden Nachkommastellen dazu verwendet, in der betreffenden Zelle den präzisen Wert auszulesen (siehe Abschnitt 4.4).

4.3.1 Koordinaten in hoher Dimension

Die Verwendung von Koordinaten zum Wiederfinden von Zellen ist eine schnelle, eindeutige und stabile Vorgehensweise, hat aber bei höheren Dimensionen folgendes Problem: Die zweidimensionale Tabelle aus Abbildung 4.4 besitzt wegen ihrer 5x6 Stützstellen insgesamt 30 Funktionswerte sowie $(5-1) \times (6-1)$ Zellen. Wird nun eine weitere Dimension benutzt und die Diskre-

tisierung der Tabelle auf 11 Stützstellen pro Achse erhöht, ergibt dies 1000 Zellen bzw. 1000 mögliche Koordinaten. Allgemein kann die Anzahl N aller Zellen bei m Stützstellen pro Achse (zur Vereinfachung sei angenommen, dass jede Achse gleich diskretisiert ist) und beliebiger Dimension n gemäß $N = (m - 1)^n$ berechnet werden. Dies ergibt bei den hier notwendigen 12 Dimensionen und angenommenen 10 Stützstellen pro Achse eine Anzahl von $2,8 \cdot 10^{11}$ möglichen Koordinaten.

Die direkte Implementierung einer solchen Tabelle als multidimensionales Array ist unmöglich, da diese einen prohibitiv hohen Speicherplatz belegen würde. Dies erkannte auch Pope [Pop97] und entwickelte aus dieser Erkenntnis heraus zur Tabellierung eine binäre Baumstruktur, welche theoretisch auch für sehr hohe Dimensionen anwendbar ist ($n > 50$). Die Umsetzung dieser Idee erwies sich aber als nicht unproblematisch. Einen anderen Ansatz verfolgte Lyubar [Lyu05]. Er argumentierte, dass jeder Punkt im Zustandsraum auf einer Trajektorie liegt, entlang derer er mit direkt angrenzenden Nachbarzellen verbunden ist. Wenn jede Zelle ihre $2 \times n$ Nachbarn kennt (verbunden durch *Pointer*), kann man sich entlang dieser Trajektorie bis zur gesuchten Zelle bewegen. Dies hat den Vorteil, dass auch bei höheren Dimensionen kein speicherintensives Array benutzt wird. Aber auch dieser Ansatz hatte Nachteile: Die Ermittlung aller Nachbarn einer neu kreierten Zelle war aufwendig und teilweise nicht eindeutig. Außerdem ist eine solche Tabelle nicht konvex, sondern enthält „Löcher“, welche für den Such-Algorithmus schwierig zu umgehen sind.

Aus diesem Grund wurde eine neue Tabellenstruktur entwickelt, welche in folgendem Abschnitt beschrieben wird.

4.3.2 Hybrider Ansatz

Die Tatsache, dass der physikalisch sinnvolle Bereich bei Verbrennungsvorgängen nur ein kleiner Unterraum des gesamten Zustandsraumes ist [Pop97], führt zu folgendem Ansatz:

Angenommen wird, dass in einem hochdimensionalen, durch kartesische Koordinaten einteilbaren Raum nur ein paar Dutzend Zustände vorkommen.

Um diese Zustände abzufragen, bedarf es keiner ausgeklügelten Tabelle, sondern es reicht, deren Koordinaten in einer Liste festzuhalten und bei jeder Tabellenabfrage die Liste zu durchsuchen bis die gewünschten Koordinaten mit dem entsprechenden Funktionswert gefunden sind.

Enthält die Tabelle nun mehrere (Hundert-)Tausend Einträge, ist der Aufwand, die nun sehr lange Liste zu durchsuchen enorm hoch. Hier kommt nun der Vorteil eines Arrays ins Spiel: obwohl für Dimension $n \geq 10$ als unbrauchbar bewertet, kann es für $n \leq 5$ angewendet werden und seine Schnelligkeit ausspielen. Die Idee ist also, die Vorteile der Liste und die Vorteile des Arrays zu kombinieren. Bei einer Anzahl von 12 Dimensionen werden zum Beispiel die ersten zwei Koordinaten in einem Array abgelegt und die restlichen zehn Koordinaten stehen in den oben beschriebenen Listen, wie in Abbildung 4.5 dargestellt. Dies verkürzt den zeitlichen Aufwand der Tabellenabfrage, da statt einer sehr langen Liste nun eine sehr viel kürzere Liste durchsucht werden muss. Die Kosten dieses Verfahrens sind lediglich der Speicherplatzbedarf für das Pointer-Array, welches je nach Implementierung zwischen zwei und fünf Dimensionen haben kann.

Auch an dieser Stelle ist ein Kompromiss zwischen Speicherplatz und Rechenzeit einzugehen. Je höher die Dimensionalität des Pointer-Arrays (und damit dessen Bedarf an Arbeitsspeicher), desto kürzer sind die zu durchsuchenden Listen. Werden in einem dreidimensionalen Array die Koordinaten durch unabhängige⁵ Variablen wie T , c_{O_2} und c_{H_2} belegt, entsteht eine optimale Ausnutzung des Arrays. Bei einer in situ erzeugten Tabelle kann gezeigt werden, dass durch diesen Algorithmus eine Gesamtzahl von etwa 30000 Zellen in eine durchschnittliche Listenlänge von 10 Einträgen umgesetzt wird.

4.4 Datenextraktion

Es gibt eine Vielzahl von Methoden, Näherungswerte aus einer Tabelle zu extrahieren. Bei der einfachsten Methode wird direkt der nächstliegende Tabellenwert verwendet, was einer Genauigkeit 0. Ordnung ent-

⁵Alle Radikale können als voneinander abhängige Variablen betrachtet werden, da sie meistens in einem bestimmten Verhältnis zueinander auftreten.

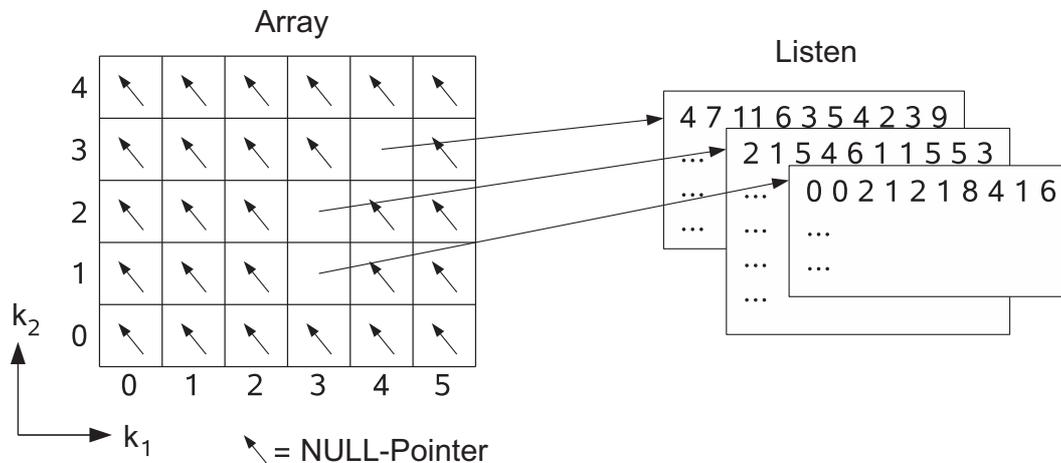


Abbildung 4.5: Struktur einer 12-dimensionalen Tabelle, deren Koordinaten in zwei Array- und zehn Listen-Koordinaten aufgeteilt sind.

spricht. Dieser schnellen aber ungenauen Vorgehensweise stehen anspruchsvollere und exaktere Varianten in beliebiger Ordnung gegenüber. Da Interpolations-Schemata höherer Ordnung, wie die Lagrange- oder die Hermite-Interpolation, sehr komplex sind und diese Verfahren in zwei Dimensionen schon einen beachtlichen Aufwand bedeuten [HH94], kommen diese Verfahren in diesem Fall nicht in Frage. In den folgenden Abschnitten werden zwei unterschiedliche Verfahren 1. Ordnung beschrieben und auf ihre Vor- und Nachteile in Bezug auf eine hochdimensionalen Tabelle untersucht.

4.4.1 Interpolation

Hier soll der einfachste Interpolations-Ansatz, die lineare Interpolation, beschrieben werden, welche eine Genauigkeit 1. Ordnung besitzt. Diese liefert, wie in Abschnitt 4.5.2 gezeigt werden wird, auch für die hier verwendete hochgradig nichtlineare Funktion sehr gute Ergebnisse. Während bei der linearen Interpolation in einer Dimension lediglich die Funktionswerte der „linken“ und „rechten“ Stützstelle benötigt werden, werden bei allgemeiner Dimension n alle 2^n Eckpunkte eines n -dimensionalen *Hyperwürfels* (hier als *Zelle* bezeichnet) verwendet. Die dabei entstehende Hyperfläche (im dargestellten

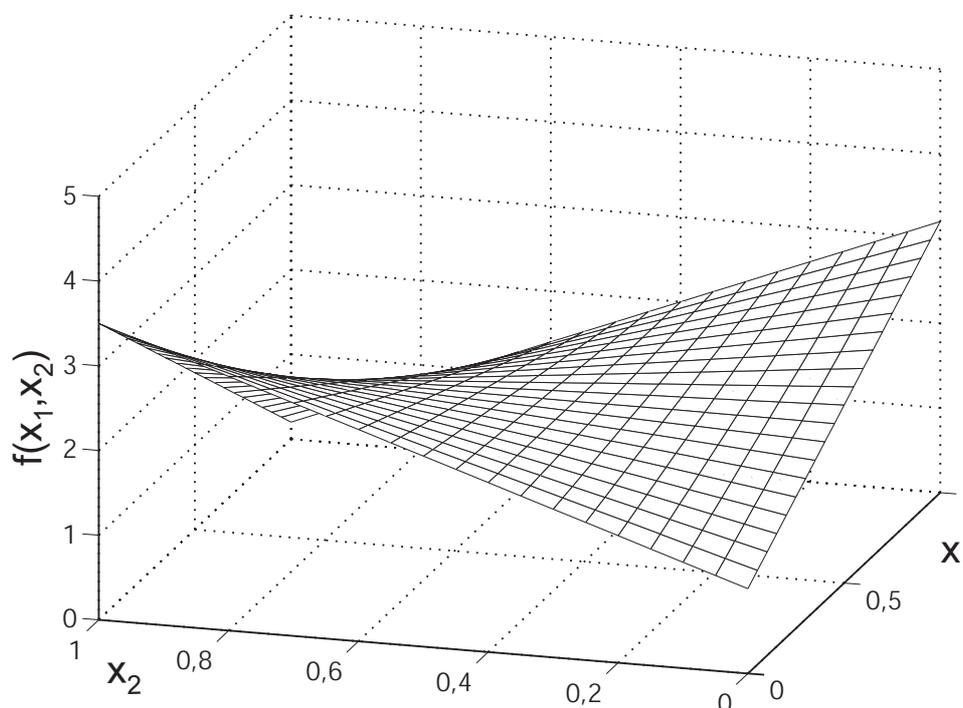


Abbildung 4.6: Approximierter Funktionsverlauf bei einer 2D-Interpolation.

2D-Beispiel auch als Oberfläche interpretierbar) ist in Abbildung 4.6 an einer 2D-Interpolation mit vier Eckpunkten bzw. Stützstellen zu sehen. Obwohl diese Fläche durch vier Geraden berandet ist, besitzt sie dennoch eine Krümmung und ist wesentlich flexibler bei der Approximation einer Funktion als eine einfache Ebene. Mit der multilinearen Interpolation ergibt sich folgende Formel für den interpolierten Funktionswert $f^{int}(\vec{x})$ [Lyu05]:

$$\begin{aligned}
 f^{int}(\vec{x}) = f(\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n) = & a_0 + \sum_{i=1}^n a_i \psi_i + \\
 & \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^n a_{i,j} \psi_i \psi_j + \sum_{i=1}^{n-2} \sum_{j=i+1}^{n-1} \sum_{k=j+1}^n a_{i,j,k} \psi_i \psi_j \psi_k + \dots
 \end{aligned} \quad (4.7)$$

Hier wurden die Variablen der Funktion $f(\vec{x})$ in lokale, normierte Zell-Variablen $\vec{\psi}$ überführt, mit $0 \leq \psi_i < 1$. Der Wert a_0 ist der Aufpunkt der Zelle und besitzt den Funktionswert von $f(\vec{\psi} = \vec{0})$. Alle anderen Koeffizienten sind partielle Ableitungen, die aus den Funktionswerten in den Eckpunkten der

Zelle gebildet werden. Dabei können höhere Ableitungen durch Ableitungen niedrigerer Ordnung substituiert werden:

$$a_i = \frac{\partial f}{\partial \psi_i} = \frac{f(\psi_i = 1) - f(\psi_i = 0)}{\Delta \psi_i} \quad \text{mit} \quad \Delta \psi_i \equiv 1 \quad (4.8)$$

$$a_{i,j} = \frac{\partial^2 f}{\partial \psi_i \partial \psi_j} = \frac{\partial f}{\partial \psi_i} \Big|_{\psi_j=1} - \frac{\partial f}{\partial \psi_i} \Big|_{\psi_j=0}. \quad (4.9)$$

Dieses Verfahren liefert ein Polynom mit 2^n Monomen. Jedes dieser Monome besitzt die oben beschriebenen Koeffizienten, welche aus den Funktionswerten an den Stützstellen der Zelle berechnet werden. Um den Vorgang der Datenextraktion zu beschleunigen, werden in der Tabelle statt der 2^n Funktionswerte die 2^n Koeffizienten abgelegt, so dass deren rekursive Berechnung nur einmal durchgeführt werden muss.

Durch die exponentielle Zunahme der Terme mit der Anzahl der Dimensionen ist die multilineare Interpolation allerdings für hohe Dimensionen nicht mehr praktikabel. Denn durch den hohen Aufwand beim Auslesen der Daten verletzt sie die eingangs erwähnte Grundvoraussetzung für die Anwendbarkeit der Tabellierung. Werden bei $n=5$ noch 32 Monome addiert und dabei 80 Multiplikationen durchgeführt, sind es bei $n=10$ schon 1024 Monome und 5120 Multiplikationen pro auszulesender Variablen. Dieser Rechenaufwand liegt durchaus im Bereich der direkten Berechnung mittels ODE-Solver.

4.4.2 Extrapolation

Wie im obigen Abschnitt gezeigt wurde, ist die multilineare Interpolation nur für niedrige Dimensionen sinnvoll anwendbar, da der numerische Aufwand exponentiell mit der Anzahl der Dimensionen steigt. Eine Alternative ist die Vernachlässigung der höheren gemischten Ableitungen aus Gleichung 4.7, was aber gleichzeitig die Genauigkeit dieses Verfahrens herab setzt. Dieses Problem kann durch die Verwendung der linearisierten Extrapolation behoben werden. Diese sei am eindimensionalen Fall kurz erklärt: Anstatt zwischen zwei Funktionswerten $f(x_1)$ und $f(x_2)$ zu interpolieren, werden von einem Aufpunkt $f(x_0)$ aus mit Hilfe der ersten Ableitung $f'(x_0)$ die umgeben-

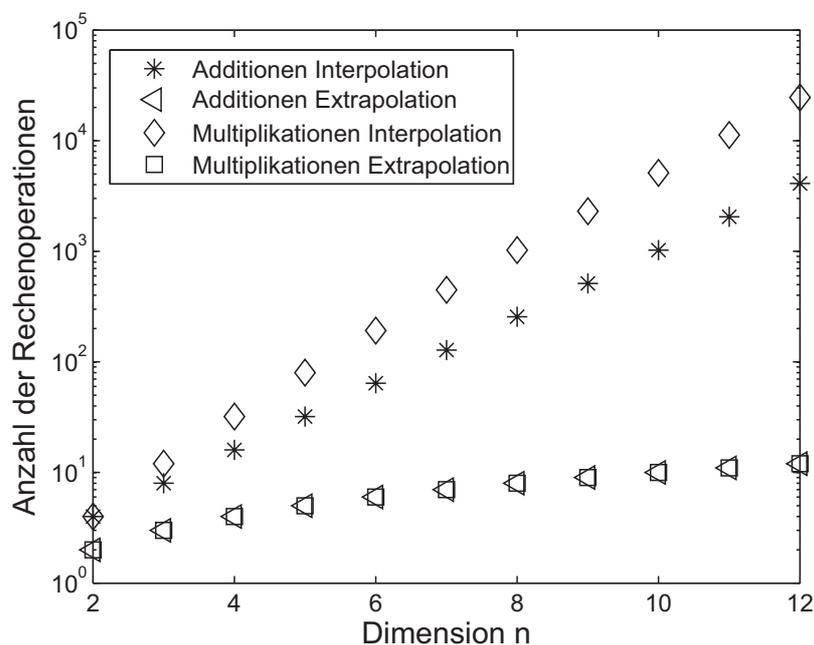


Abbildung 4.7: Vergleich des numerischen Aufwandes für die multilineare Interpolation und das linearisierte Extrapolations-Verfahren.

den Funktionswerte extrapoliert. In Abbildung 4.9 ist erkennbar, dass die Extrapolation in der Umgebung des Aufpunkts wesentlich genauer ist als die Interpolation. Dieses auf dem lokalen Gradienten basierte Verfahren wurde auch von Pope [Pop97] auf Verbrennungsprobleme angewendet. Hier steigt der Aufwand nur linear mit der Anzahl der Dimensionen, was folgende Gleichung zeigt:

$$f^{ext}(\vec{x}) = f(\vec{x}_0) + \frac{\partial f}{\partial x_i} \Delta x_i. \quad (4.10)$$

Durch diese Linearisierung ist eine schnellere Berechnung bzw. Approximation des gesuchten Wertes möglich, was in Abbildung 4.7 zu erkennen ist. Die notwendige Nähe zum Aufpunkt bedeutet aber kleinere Hyperwürfel in der multidimensionalen Tabelle. Dies hat zur Folge, dass mehr Zellen für das Extrapolationsverfahren benötigt werden. Bei hohen Dimensionen bedeutet das eine sehr hohe Anzahl an Zellen. Um die Anzahl der Zellen in handhabbaren Grenzen zu halten, wurde die Tabelle physikalisch sinnvoll nicht-äquidistant verändert. Dies ist in Abbildung 4.8 dargestellt. Dabei wurden

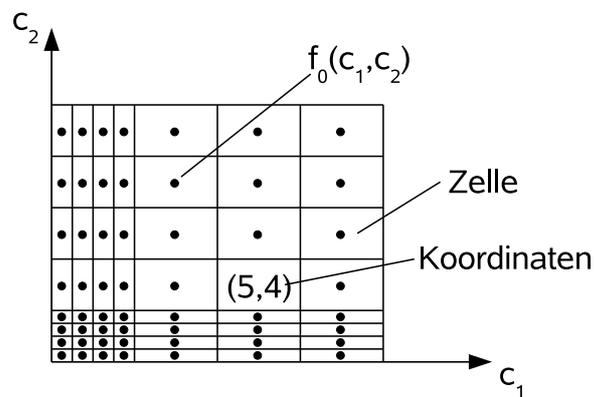


Abbildung 4.8: Zweidimensionale nicht-äquidistante Tabelle für das Extrapolationsverfahren.

mehrere Koordinaten-Achsen so aufgeteilt, dass diese dann zwei äquidistante Bereiche mit verschiedener Schrittweite besitzen. Die höhere Diskretisierung der Tabelle liegt im sensiblen Bereich der Zündung (Temperatur relativ niedrig, Radikale nicht vorhanden). Im Bereich der gröberen Diskretisierung ist die Konzentration der Radikale ausreichend hoch, so dass sich ein Approximationsfehler nicht mehr so stark auf die Zündverzugszeit auswirken kann.

Auch bei diesen zwei verschiedenen Verfahren der Datenextraktion wurde Rechenzeit gegen Speicherplatz getauscht, denn das Extrapolationsverfahren ist deutlich schneller, benötigt aber dafür eine höhere Diskretisierung im Zustandsraum.

4.5 Genauigkeit

In dem hier implementierten Tabellierungsverfahren entstehen zwei unterschiedliche Arten von Fehler. Der erste Fehler wird verursacht durch die Aufspaltung des Gleichungssystems für reaktive Strömungen, d.h. die Lösung von Strömung und Verbrennung findet nacheinander und nicht gleichzeitig statt. Der zweite Fehler entsteht durch die Verwendung der Tabelle und der durch Interpolation bzw. Extrapolation entstehenden Approximation der Lösung.

4.5.1 Operator Splitting

Der Ansatz, die Verbrennungs-Berechnung von der Strömungs-Berechnung zu entkoppeln und in zwei aufeinander folgenden Schritten zu lösen, wird *operator splitting* genannt. Gleichungen 2.21 und 2.38 können wie folgt vereinfacht dargestellt werden:

$$\frac{d\vec{\phi}(t)}{dt} = \mathcal{S}(\vec{\phi}(t)) + \mathcal{M}(t). \quad (4.11)$$

Der thermo-chemische Zustand $\vec{\phi}(t)$ erfährt eine zeitliche Änderung aufgrund von Strömungsprozessen zum einen und chemischer Reaktion zum anderen. Der Term $\mathcal{M}(t)$ steht für Mischungs- und Transportprozesse und der Term $\mathcal{S}(\vec{\phi}(t))$ ist der chemische Quellterm. All diese Prozesse werden durch ein gekoppeltes, partielles Differentialgleichungs-System beschrieben, welches im Normalfall durch den CFD-Löser berechnet wird.

Beim hier angewendeten *operator splitting* wird Gleichung 4.11 zuerst vom CFD-Löser ohne den chemischen Quellterm gelöst. Dabei ergibt sich, ausgehend vom Startzustand $\vec{\phi}(t_0)$, ein Zwischenzustand $\vec{\phi}(t^*)$. Nachdem die Strömungsprozesse für diesen Zeitschritt berechnet worden sind, kann aus dem Zwischenzustand mit der Gleichung

$$\frac{d\vec{\phi}(t^*)}{dt} = \mathcal{S}(\vec{\phi}(t^*)) \quad (4.12)$$

der thermo-chemische Endzustand nach dem Zeitschritt berechnet werden. Gleichung 4.12 beschreibt ein gekoppeltes gewöhnliches Differentialgleichungs-System für den sog. Konstant-Volumen-Reaktor (siehe dazu Gleichungen 4.4 und 4.5). Der berechnete Endzustand wird dem Strömungslöser übergeben, d.h es werden die neue Spezies-Zusammensetzung und die Temperatur in die jeweilige Gitterzelle zurückgeschrieben.

Nach Yang und Pope [YP98] besitzt dieser Ansatz einen Fehler 1. Ordnung im Zeitschritt. Da im Fall einer Überschallströmung aufgrund der hohen Geschwindigkeiten die Zeitschritte sehr klein gewählt werden müssen ($\mathcal{O}(10^{-7} s)$), hat dieser Fehler aber einen zu vernachlässigenden Einfluss.

Je nach Formulierung der Energie-Gleichung 2.21 des verwendeten CFD-Solvers muss die Temperaturerhöhung durch Reaktion unterschiedlich be-

handelt werden. Ist die Energie-Gleichung mit der Enthalpie formuliert, reicht es aus, die Spezies zurückzuschreiben, aus welchen eine neue Temperatur resultiert. Unter Umständen kann es auch notwendig sein, den Quellterm in der Energie-Gleichung zu aktualisieren. Im hier verwendeten CFD-Solver von FLUENT muss bei kompressiblen Strömungen, wie oben beschrieben, die Temperatur zurückgeschrieben werden. Details über die Vorgehensweise können bei Lyubar [Lyu05] gefunden werden.

4.5.2 Approximation

Die zwei verwendeten Möglichkeiten zur Extraktion der Daten besitzen jeweils einen Approximationsfehler. Dieser fällt bei Interpolation anders aus als bei der Extrapolation, was Betrag und Vorzeichen betrifft. Dies wird in Abbildung 4.9 deutlich. In beiden Fällen spielt die Diskretisierung der Tabelle für den Betrag der Abweichung eine wichtige Rolle.

Interpolation

Der Fehler bei Verwendung einer eindimensionalen Lagrange-Interpolation ist gegeben durch

$$f(x) - g(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \prod_{j=0}^n (x - x_j), \quad (4.13)$$

wobei $f(x)$ die Funktion mit den Stützstellen x_j ist, die durch eine Funktion $g(x)$ der Ordnung n interpoliert wird. Diese Formel ergibt für eine Interpolations-Funktion 1. Ordnung:

$$f(x) - g(x) = \frac{f''(\xi)}{2} (x - x_a)(x - x_b), \quad (4.14)$$

mit $x_a < \xi < x_b$. Hier ist erkennbar, dass der Fehler mit steigender Krümmung der Funktion $f(x)$, als auch mit wachsendem Abstand $x_b - x_a$, zunimmt. Diese Folgerungen gelten auch in guter Näherung für die multidimensionale lineare Interpolation, obwohl Gleichung 4.13 nur für eine Dimension angeschrieben ist. Für die Tabelle bedeutet das, dass ein größerer Abstand der Stützstellen einen größeren Fehler verursacht.

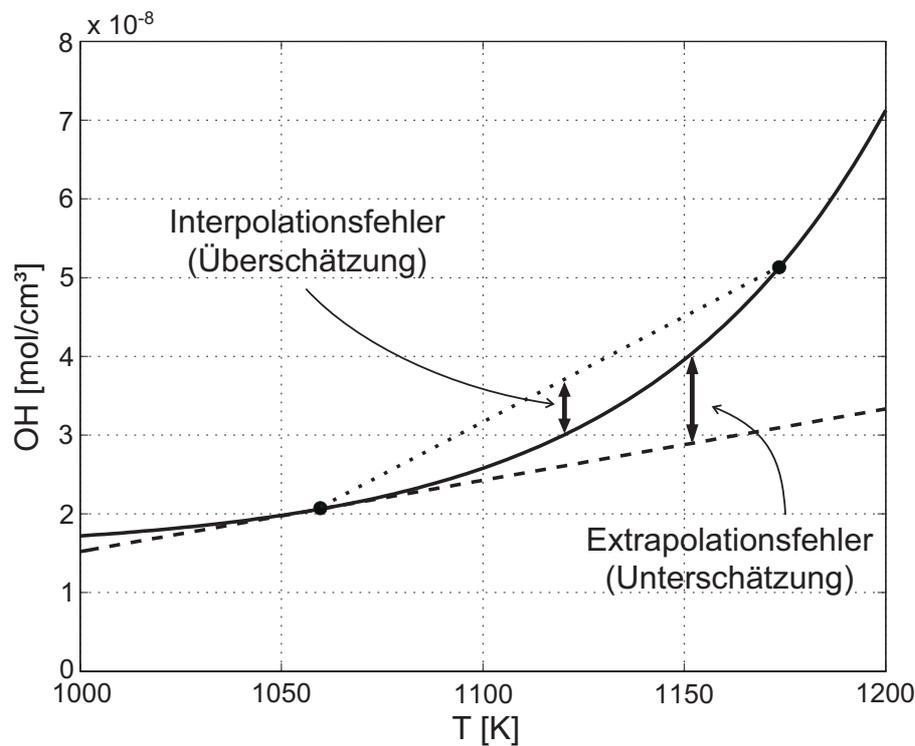


Abbildung 4.9: Qualitativer Unterschied zwischen dem Interpolations- und Extrapolationsfehler dargestellt an einer Exponentialfunktion.

Dieser Fehler kann besonders gut untersucht und illustriert werden, indem ein Zündvorgang in einem nulldimensionalen Reaktor berechnet wird, einmal direkt und einmal mittels einer Tabelle. Dazu werden, ähnlich der Anwendung mit einem CFD-Solver, sehr kleine Zeitschritte gewählt. Bei der direkten Berechnung ist der thermo-chemische Zustand zum Zeitpunkt ($t_0 + \Delta t$) gleich dem Zustand t_0 des darauffolgenden Zeitschritts. Bei der Berechnung mittels Tabelle wird für den Startzustand der entsprechende Hyperwürfel berechnet und darin so viele Zeitschritte interpoliert, bis eine Variable den Gültigkeitsbereich dieses ersten Tabellenelements verlässt und ein neuer Hyperwürfel erzeugt werden muss. Dies geschieht solange, bis die Produkte einen stationären Zustand erreichen.

Da der Zündprozess in den meisten thermo-chemischen Variablen eine exponentiellen Zunahme bedeutet, ist bei der Interpolation ein Fehler mit positivem Vorzeichen zu erwarten, was in Abbildung 4.9 anschaulich gezeigt wird.

Dies ist auch in Formel 4.14 zu erkennen, denn die zweite Ableitung ist in diesem Fall positiv. Eine Überschätzung beinahe aller Variablen⁶ bedeutet eine kürzere Zündverzugszeit. Diese theoretische Betrachtung wird eindrucksvoll in Abbildung 4.10 bestätigt: alle interpolierten Reaktionsverläufe zeigen eine schnellere Reaktion als der korrekte Verlauf. Außerdem besitzt die Tabelle mit der größten Diskretisierung (siehe Tabelle 4.11) die größte Abweichung.

Die Wahl der Diskretisierung ist von großer Bedeutung, was den Speicherplatzbedarf und die Genauigkeit der Tabelle betrifft. Eine gleichmäßig bessere Diskretisierung aller 12 Achsen würde zwar die Genauigkeit erhöhen, allerdings auch den Speicherplatzbedarf der ohnehin großen Tabelle exponentiell anwachsen lassen. Da die unterschiedlichen Variablen mit verschiedener Sensitivität auf das Ergebnis reagieren, ist es sinnvoll, die Diskretisierung den jeweiligen Variablen anzupassen. Als wichtigste Variablen haben sich die Temperatur und die Radikale H, O und OH erwiesen, weshalb auf diesen Achsen eine höhere Anzahl an Stützstellen gewählt wurde. Dieses Vorgehen gilt auch für die im folgenden Abschnitt beschriebene Extrapolation.

Extrapolation

Die lineare Extrapolation in einer Dimension geht aus einer abgeschnittenen Taylor-Reihe hervor. Die (eindimensionale) Taylor-Reihe lautet:

$$f(x) = f(x_0) + \frac{f'(x_0)}{1!}(x - x_0) + \frac{f''(x_0)}{2!}(x - x_0)^2 + \dots + \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!}(x - x_0)^n + R_n(x). \quad (4.15)$$

Das Restglied $R_n(x)$ stellt den Fehler für eine an n-ter Ordnung abgeschnittene Reihe dar

$$R_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}(x - x_0)^{(n+1)}, \quad (4.16)$$

mit einer zwischen x und x_0 gelegenen Zahl ξ . Wird die Reihe nach dem Term mit der ersten Ableitung abgeschnitten, entsteht ein Fehler-Term 2. Ordnung:

$$R_2(x) = \frac{f''(\xi)}{2!}(x - x_0)^2. \quad (4.17)$$

Der Fehler wächst demnach quadratisch mit dem Abstand $(x - x_0)$, wird aber auch bei kleinem Abstand quadratisch kleiner. Dieses Verhalten ist deutlich in

⁶nicht bei den Edukten O₂, H₂ und N₂

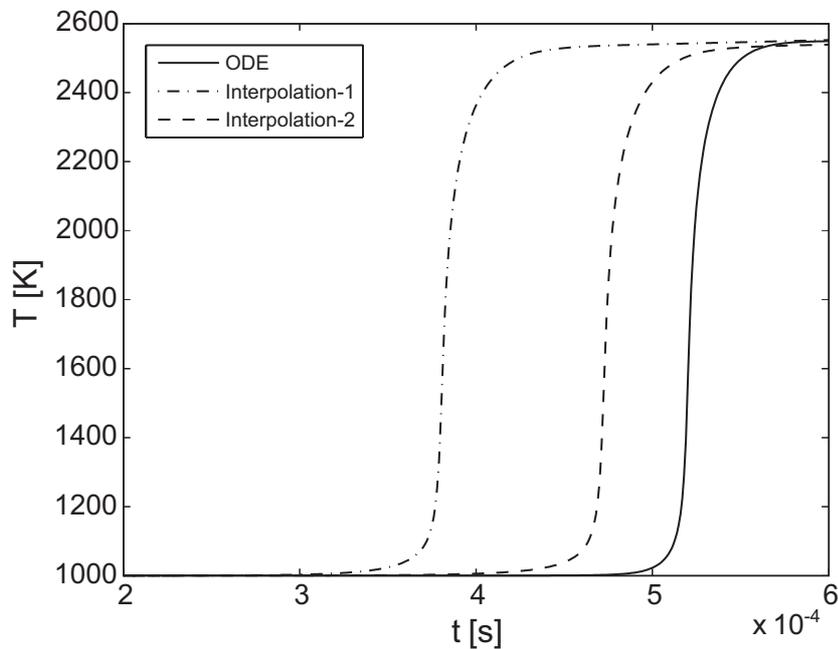


Abbildung 4.10: Temperaturverläufe für verschiedene Diskretisierungen bei Verwendung der Interpolation.

	Interpolation-1	Interpolation-2
ΔT [K]	70	50
ΔO_2 [mol/cm ³]	4×10^{-7}	4×10^{-7}
ΔH [mol/cm ³]	4×10^{-8}	3×10^{-8}
ΔOH [mol/cm ³]	3×10^{-8}	3×10^{-8}
ΔO [mol/cm ³]	3×10^{-8}	3×10^{-8}
ΔH_2 [mol/cm ³]	5×10^{-7}	5×10^{-7}
ΔH_2O [mol/cm ³]	2×10^{-7}	2×10^{-7}
ΔN_2 [mol/cm ³]	1.5×10^{-6}	1.5×10^{-6}
ΔI_T [-]	0.05	0.05
$\Delta \sigma_Y$ [-]	0.01	0.01

Abbildung 4.11: Äquidistante Weiten der Stützstellen für unterschiedliche Interpolationstabellen.

Abbildung 4.9 sichtbar: Für kleine Abweichungen vom Aufpunkt ist der Fehler deutlich geringer als bei der Interpolation, wohingegen der Fehler für große Abweichungen stark anwächst, und dort die Interpolation ihre Vorteile hat. Wie oben bereits erläutert, wachsen bei einem Zündprozess Temperatur und die meisten der Spezies exponentiell an. Dies führt in Gleichung 4.17 zu einem positiven Restglied, d. h. die lineare Extrapolation unterschätzt den realen Funktionsverlauf, was wiederum in Abbildung 4.9 gut zu erkennen ist.

Abbildung 4.12 zeigt einen Vergleich zwischen der direkten Berechnung des Temperaturverlaufs und Temperaturverläufen, welche aus verschiedenen Tabellen extrapoliert wurden. Durch die Unterschätzung der Variablen tendiert die Extrapolation zu einer Überschätzung der Zündverzugszeit. Auch hier wird wieder deutlich, dass eine bessere Diskretisierung eine kleinere Abweichung vom wirklichen Funktionsverlauf bewirkt. Die Sensitivität der Diskretisierung der verschiedenen Variablen ist in Tabelle 4.13 zu erkennen. Während in *Extrapolation-1* die Spezies sehr fein diskretisiert werden, ist die Temperatur mit 15 K relativ grob diskretisiert, was eine relativ große Abweichung bedeutet. Dagegen wird in *Extrapolation-2*, trotz der starken Vergrößerung auf allen Spezies-Achsen, ein deutlich kleinerer Fehler erzielt, was mit der besseren Diskretisierung der Temperatur-Achse möglich ist. Darin wird der exponentielle Einfluss der Temperatur deutlich.

Im Folgenden soll gezeigt werden, welchen Einfluss die nicht-äquidistante Tabelle auf Genauigkeit und Speicherbedarf hat. Hierfür wurden Vergleichsrechnungen durchgeführt, einmal mit hoher Diskretisierung und äquidistanter Tabelle und zum anderen mit niedriger Diskretisierung bei nicht-äquidistanter Tabelle. In Abbildung 4.14 sind die Temperaturverläufe zu erkennen, welche bei der Zündung einer stöchiometrischen Mischung mit $T_0 = 1000\text{K}$ entstehen. Die dazugehörigen Weiten der Stützstellen sind in Tabelle 4.15 zu sehen. Dort ist *Extrapolation-non* die Tabelle mit nicht-äquidistanten Stützstellen auf der Temperatur-Achse und auf den Achsen der Radikale H, OH und O. Wie in Abbildung 4.8 dargestellt, wurde die Tabelle am Startpunkt der Zündung feiner diskretisiert, d.h. die Temperatur im Bereich $800\text{K} - 1100\text{K}$ und die drei Radikale von $0\text{ mol/cm}^3 - 1 \times 10^{-8}\text{ mol/cm}^3$. Am Temperaturverlauf von *Extrapolation-non* ist zu erkennen, dass dieser praktisch identisch ist zu sei-

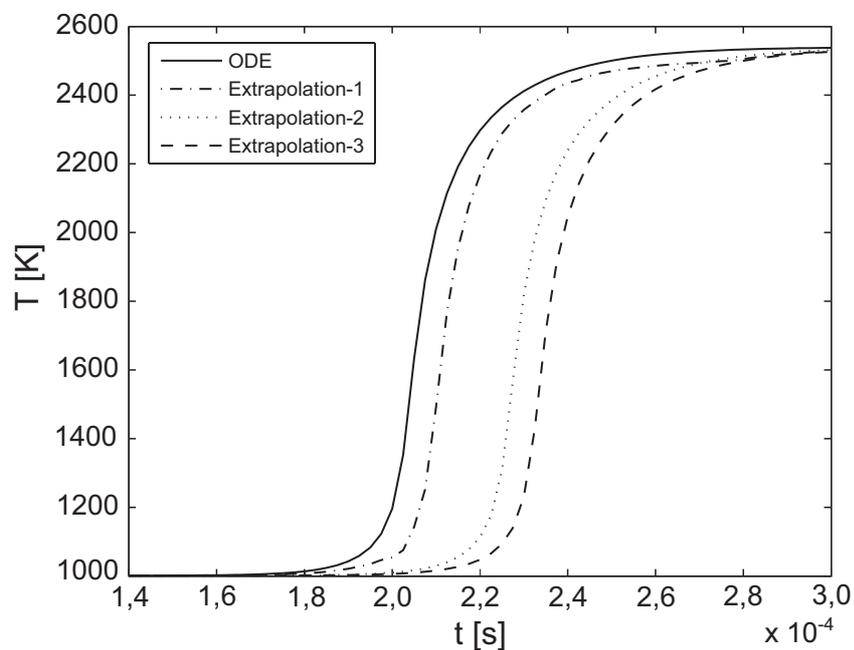


Abbildung 4.12: Temperaturverläufe für verschiedene Diskretisierungen bei Verwendung der Extrapolation.

	Extrapolation-1	Extrapolation-2	Extrapolation-3
ΔT [K]	15	2	15
ΔO_2 [mol/cm ³]	2×10^{-8}	2×10^{-7}	1×10^{-7}
ΔH [mol/cm ³]	1×10^{-10}	1×10^{-7}	1×10^{-8}
ΔOH [mol/cm ³]	1×10^{-10}	1×10^{-7}	1×10^{-8}
ΔO [mol/cm ³]	1×10^{-10}	1×10^{-7}	1×10^{-8}
ΔH_2 [mol/cm ³]	5×10^{-8}	5×10^{-7}	1×10^{-7}
ΔH_2O [mol/cm ³]	1×10^{-9}	1×10^{-7}	1×10^{-8}
ΔN_2 [mol/cm ³]	1×10^{-7}	1×10^{-7}	1×10^{-7}
ΔHO_2 [mol/cm ³]	1×10^{-12}	1×10^{-9}	1×10^{-10}
ΔH_2O [mol/cm ³]	1×10^{-13}	1×10^{-9}	1×10^{-10}
ΔI_T [-]	0.02	0.02	0.02
$\Delta \sigma_Y$ [-]	0.01	0.01	0.01

Abbildung 4.13: Äquidistante Weiten der Stützstellen für unterschiedliche Extrapolationstabellen.

nem Pendant von *Extrapolation-fein*.

Der Nutzen für die damit verbundene Reduzierung der Tabellengröße wurde mit Hilfe einer Schar von Trajektorien bestimmt, welche durch minimale Variationen am stöchiometrischen Ausgangszustand $\phi(t_0)$ erzeugt wurden. Für diese 36 im Zustandsraum nahe beieinander liegenden Trajektorien war die Tabellengröße für *Extrapolation-fein* 6561 Hyperwürfel groß, während die Diskretisierung *Extrapolation-non* nur 1834 Hyperwürfel gebraucht hat.

Die Auswirkungen der nicht-äquidistanten Diskretisierung sind also durchweg positiv, wobei die genaue Weite der Stützstellen sicher noch optimiert werden kann.

Während bei der Interpolation das Gebiet der Approximation eindeutig beschränkt ist, und damit auch der Fehler, kann bei der Extrapolation der Fehler sehr groß werden (siehe Abbildung 4.9). Dies geschieht bei zu großen Stützstellen und führt zu unphysikalischen Lösungen. Mit den in Tabelle 4.13 und 4.15 beschriebenen Weiten der Stützstellen ist aber eine stabile Rechnung gewährleistet.

Sowohl bei der Interpolation als auch bei der Extrapolation zeigt sich eine leichte Fehlerabhängigkeit von der Temperatur. Im niedrigen Temperaturbereich, wo die Reaktion langsam abläuft und die Trajektorie der Reaktion sich sehr lange innerhalb eines Hyperwürfels aufhält, ist der Fehler größer. Das liegt an der Fehlersummation bei wiederholten Approximationen innerhalb eines Hyperwürfels. Dieser Effekt wird durch die abweichenden Zündverzugszeiten in Abbildung 4.16 erkennbar, wo mit derselben Tabelle, aber unterschiedlichen Anfangstemperaturen gerechnet wurde.

Zusammenfassend kann gesagt werden, dass die Extrapolationsmethode deutlich mehr Tabelleneinträge erzeugt als die multilineare Interpolation, was das Finden des richtigen Hyperwürfels etwas erschwert. Obwohl der einzelne Tabelleneintrag im Fall der Interpolation deutlich mehr Daten enthält, benötigt die gesamte Tabelle (bei vergleichbarer Genauigkeit) weniger Speicher als bei der Extrapolation. Dafür ist der numerische Aufwand für das Auslesen der Daten aus der Tabelle bei der Extrapolationsmethode um Größenordnungen geringer, wodurch diese Methode insgesamt den besseren Ansatz darstellt.

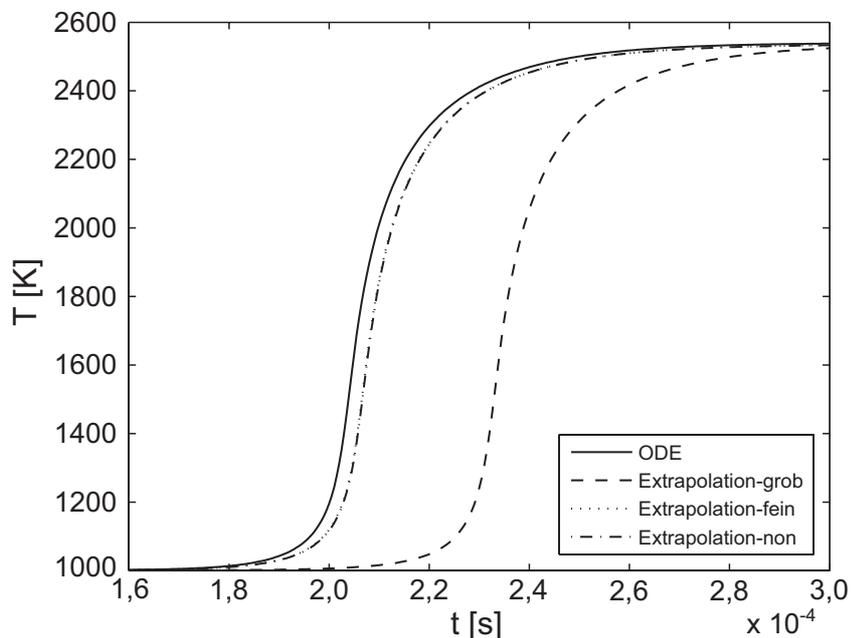


Abbildung 4.14: Vergleich der Temperaturverläufe von äquidistanter und nicht-äquidistanter Diskretisierung.

	Extrapolation-fein	Extrapolation-non	Extrapolation-grob
ΔT [K]	2	2/15	15
ΔO_2 [mol/cm ³]	2×10^{-8}	2×10^{-7}	1×10^{-7}
ΔH [mol/cm ³]	1×10^{-10}	$1 \times 10^{-10} / 1 \times 10^{-8}$	1×10^{-8}
ΔOH [mol/cm ³]	1×10^{-10}	$1 \times 10^{-10} / 1 \times 10^{-8}$	1×10^{-8}
ΔO [mol/cm ³]	1×10^{-10}	$1 \times 10^{-10} / 1 \times 10^{-8}$	1×10^{-8}
ΔH_2 [mol/cm ³]	5×10^{-8}	5×10^{-7}	1×10^{-7}
ΔH_2O [mol/cm ³]	1×10^{-9}	1×10^{-7}	1×10^{-8}
ΔN_2 [mol/cm ³]	1×10^{-7}	1×10^{-7}	1×10^{-7}
ΔHO_2 [mol/cm ³]	1×10^{-12}	1×10^{-9}	1×10^{-10}
ΔH_2O [mol/cm ³]	1×10^{-13}	1×10^{-9}	1×10^{-10}
ΔI_T [-]	0.02	0.02	0.02
$\Delta \sigma_Y$ [-]	0.01	0.01	0.01

Abbildung 4.15: Äqui- und nicht-äquidistante Weiten der Stützstellen für unterschiedliche Extrapolationstabellen.

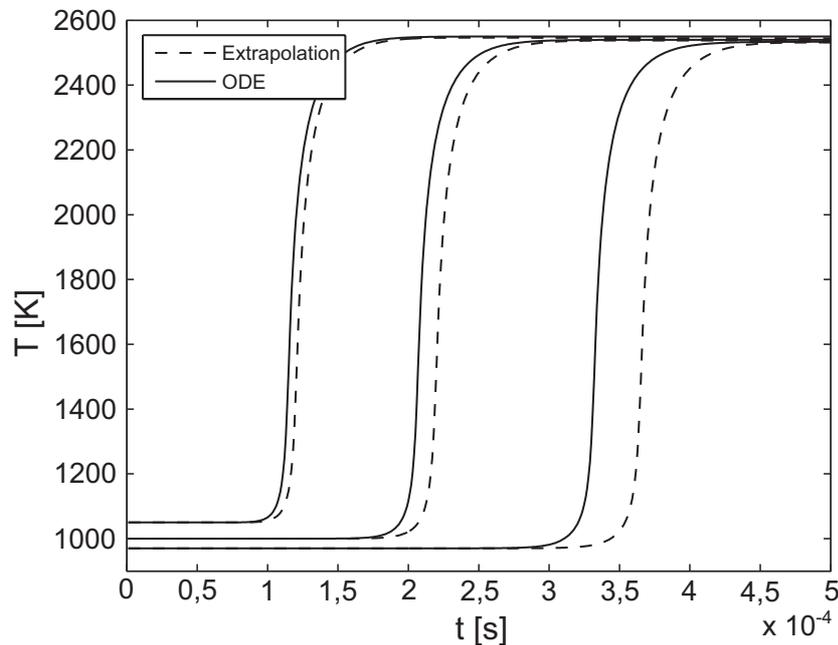


Abbildung 4.16: Zündverläufe stöchiometrischer Mischungen bei $T_0 = 970\text{K}$, 1000K und 1050K .

4.6 Implementierung in FLUENT

Der CFD-Löser FLUENT bietet dem Nutzer einige Modelle zur vorgemischten und nicht-vorgemischten Verbrennung an, aber nicht das hier verwendete assumed-PDF Verbrennungsmodell. Dieses Modell musste daher über eine UDF (engl.: *user defined function*) eingebunden werden. Eine UDF ist ein beliebig komplexes Programm, welches in der Programmiersprache C geschrieben ist und dessen kompilierte Bibliothek dem FLUENT-Code hinzugefügt wird. Für eine numerisch effiziente Berechnung wurde das Verbrennungsmodell mit dem oben beschriebenen Tabellierungsverfahren gekoppelt. Das Auslesen der Daten erfolgt über die Extrapolationsmethode auf einem bereichsweise. Durch die Entkopplung von Strömung und Verbrennung berechnet der CFD-Löser nur die „kalte“ Strömung, das heißt die Konvektion und Diffusion von Masse, Impuls und Energie, weiterhin die Turbulenz und die Verteilung aller Spezies. Mit der UDF wird der chemische Reaktionsfort-

schritt in jedem finitem Volumen bestimmt. Dieser ist abhängig vom thermo-chemischen Zustand. Dieser Zustand wird durch die Mittel- und Schwankungswerte von Temperatur und Spezies beschrieben. Nach jedem Zeitschritt Δt des CFD-Lösers wird die UDF aufgerufen. Diese führt nacheinander für jede Zelle des Simulationsgebietes die Berechnung der chemischen Reaktion durch. Die Funktionsweise der UDF ist in Abbildung 4.17 verdeutlicht. Nachdem die thermo-chemischen Variablen eingelesen sind, werden diese in diskrete Tabellenkoordinaten umgerechnet. Diese Koordinaten bezeichnen einen Hyperwürfel in der 12-dimensionalen Tabelle, welcher den aus der Zelle ausgelesenen thermo-chemischen Zustand enthält bzw. den Reaktionsfortschritt dieser Zusammensetzung für den Zeitschritt Δt . Ist dieser Hyperwürfel vorhanden, wird das Ergebnis extrahiert und die neuen Werte dem CFD-Löser übergeben. Ist dieser Tabelleneintrag noch nicht vorhanden, werden mittels eines ODE-Lösers und den Gleichungen für den Konstant-Volumen Reaktor (siehe Abschnitt 4.2.2) die Daten für einen neuen Hyperwürfel berechnet und damit die in-situ Tabelle erweitert. Die zeitliche Entwicklung des reagierenden Strömungsfeldes ist in Abbildung 4.18 noch einmal dargestellt. Der CFD-Löser berechnet das gekoppelte Gleichungssystem, ohne direkte Berücksichtigung der chemischen Reaktion, für die Strömung von der Zeit t_{n-1} bis zum Zwischenzustand t_n^* . Am Ende des Zeitschrittes liest die UDF den thermo-chemischen Zwischenzustand aus dem Strömungsfeld und berechnet daraus den neuen thermo-chemischen Zustand zum Zeitpunkt t_n . Der Reaktionsfortschritt geschieht mit demselben Zeitschritt Δt , den der CFD-Löser verwendet.

Die Effizienz der in diesem Kapitel beschriebenen Tabellierung wird am Beispiel der Simulation einer Überschallflamme (siehe dazu Abschnitt 5.2) erläutert. Die potenzielle Reduzierung der Rechenzeit ist in Abbildung 4.19 zu erkennen, wo der zeitliche Aufwand für vier verschiedene Simulationen verglichen wird. Alle Simulationen wurden auf dem in Abschnitt 5.2 beschriebenen Gitter für 50 Zeitschritte mit $\Delta t = 1,0e^{-7}$ s durchgeführt. In allen Rechnungen wurden die neun Spezies des Jachimowski-Mechanismus transportiert und ein Zweigleichungs-Turbulenzmodell verwendet. Der orange Balken zeigt als Referenz-Wert eine FLUENT-Rechnung ohne Verbrennung, d.h. die Strömung ohne chemische Reaktion berechnet. Den relativen zeit-

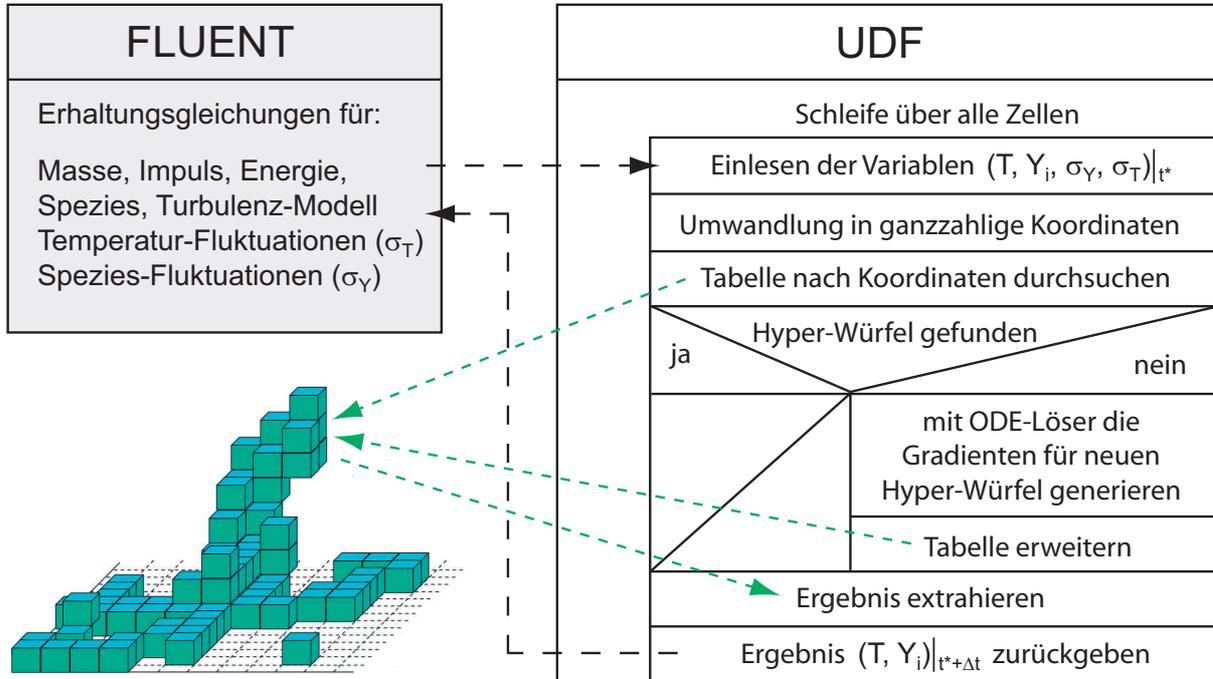


Abbildung 4.17: Einbindung des tabellierten assumed-PDF Modells in FLUENT.

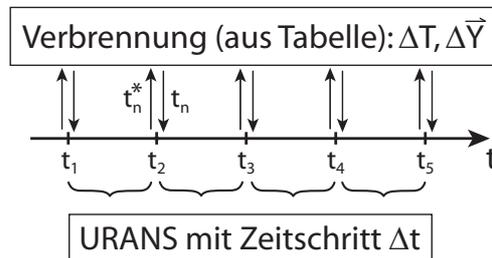


Abbildung 4.18: Abwechselnde Berechnung von Strömung und Verbrennung.

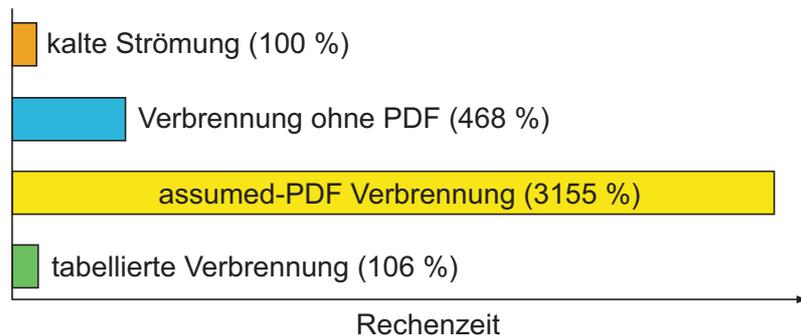


Abbildung 4.19: Relativer zeitlicher Aufwand für unterschiedliche Einstellungen der Simulation.

lichen Aufwand für eine detaillierte Verbrennungsrechnung ohne Fluktuationen zeigt der blaue Balken. Hier wurde der Jachimowski-Mechanismus mit seinen neun Spezies und 19 Reaktionsgleichungen in FLUENT implementiert. Das Lösen der zusätzlichen Reaktionsgleichungen lässt die Rechenzeit stark ansteigen. Der wesentlich höhere numerische Aufwand, welcher für die Berechnung der PDF notwendig ist, wird am gelben Balken deutlich. Da ein solches Modell in FLUENT nicht verfügbar ist, ist die zusätzliche Rechenzeit mit einem Faktor 8,3 abgeschätzt. Dieser zeitliche Faktor wurde aus Reaktionsreaktor-Rechnungen ermittelt (Reaktor siehe Abschnitt 4.2.2) welche mit dem assumed-PDF Verbrennungsmodell durchgeführt wurden und zum Vergleich mit einem Arrhenius-Ansatz ohne Fluktuationen. Der grüne Balken zeigt den zeitlichen Bedarf des mittels Tabellierung implementierten assumed-PDF Verbrennungsmodells, wobei hier vom idealen Fall einer voll entwickelten Tabelle ausgegangen wird. Nach jedem Zeitschritt des CFD-Lösers wird der thermo-chemische Zustand ausgelesen, der neue Zustand extrapoliert und wieder zurück auf die FLUENT-Variablen geschrieben. Dieser Vorgang erhöht die Rechenzeit der CFD-Simulation nur um 6% und ist damit sogar deutlich schneller als die detaillierte Verbrennung ohne Fluktuationen.

5 Ergebnisse und Diskussion

Im folgenden Abschnitt wird das in Kapitel 3 beschriebene assumed-PDF Verbrennungsmodell in Kombination mit der in Kapitel 4 beschriebenen Tabellierung an einer nicht-vorgemischten Überschallflamme getestet. Zuvor aber wird die Überschallverbrennung in einem Flammenregime-Diagramm eingeordnet und gezeigt, dass der in der Literatur beschriebene Bereich kritisch betrachtet werden muss.

5.1 Überschallverbrennung im Borghi-Diagramm

Wie in den Abschnitten 2.4.1 und 2.4.2 beschrieben, existieren Flammenregime-Diagramme für die vorgemischte und nicht-vorgemischte Verbrennung. In der Praxis haben sich aber nur Diagramme durchgesetzt, welche die vorgemischte Verbrennung abbilden. Dies geht auf die schon vorher erwähnten Schwierigkeiten mit den Parametern der nicht-vorgemischten Verbrennung zurück, welche nur schwer abschätzbar sind. In der Literatur sind nur sehr wenige Vermerke zum Thema Überschallverbrennung im Flammenregime-Diagramm zu finden. Einer dieser Hinweise ist ein oft zitierter Artikel von Libby und Williams [LW94], wo in einem Borghi-äquivalenten Diagramm ein *wahrscheinlicher Bereich* für Überschallverbrennung gekennzeichnet ist. Dieser Bereich ist in Abbildung 5.1 in ein Borghi-Diagramm transformiert und rot umrandet dargestellt. Obwohl in den meisten Überschall-Brennkammern der Treibstoff direkt eingedüst wird, und somit nicht-vorgemischte oder zumindest teilweise vorgemischte Verbrennung herrscht, wird trotzdem ein Borghi-Diagramm wie bei vorgemischter Verbrennung verwendet [LW94, Gab96, Oev00, IB06]. Borghi [Bor88] argumentiert wie folgt: Obwohl die laminare Flammengeschwindigkeit und -dicke hier keine Bedeutung haben, werden lokal Brennstoff und Oxidator durch tur-

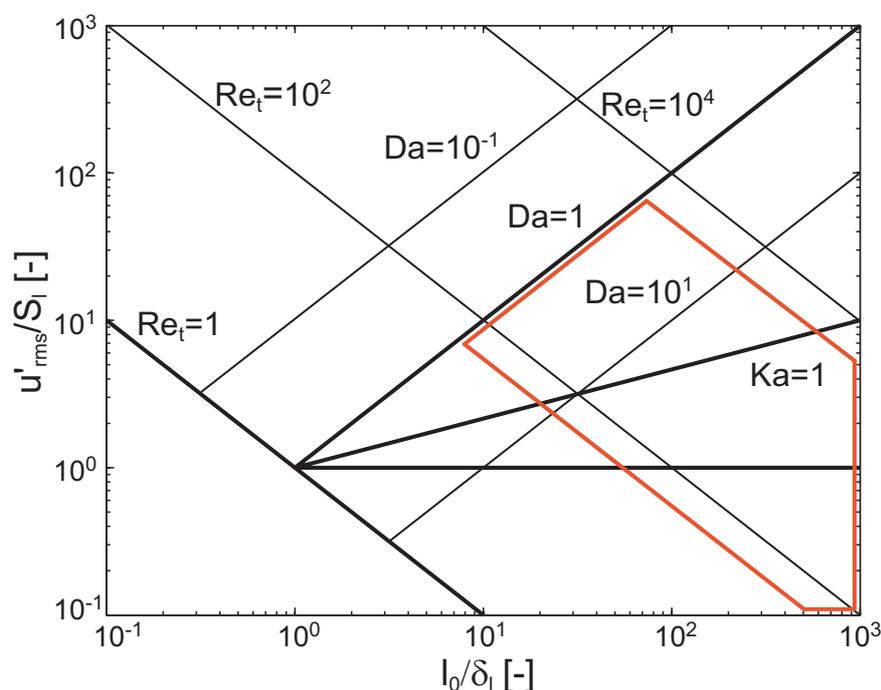


Abbildung 5.1: Borghi-Diagramm mit wahrscheinlichem Bereich für Überschallverbrennung nach [LW94].

bulenten oder diffusiven Transport gemischt und die Verbrennung findet in einer stöchiometrischen Schicht statt. Dieser wiederum kann näherungsweise die charakteristische Geschwindigkeit S_1 und die charakteristische Länge δ_1 zugeordnet werden. Durch diese Abschätzung verlieren die Grenzlinien $Da = 1$ und $Ka = 1$ ihre Schärfe und sind nur noch als grobe Trennungslinien zwischen den verschiedenen Flammenregimen zu verstehen.

Der ursprünglich von Balakrishnan [Bal92] beschriebene Bereich für Überschallverbrennung wird begrenzt durch die Linien $Da = 1$ und einem wahrscheinlichen Spektrum an turbulenten Reynolds-Zahlen mit $50 \lesssim Re_t \lesssim 5000$. Im folgenden Abschnitt soll gezeigt werden, dass dieser Bereich nicht ganz korrekt ist. Anhand von einfachen Überlegungen wird eine Erweiterung dieses Bereichs vorgeschlagen. Während die fluidmechanischen Grenzen, also die turbulenten Reynolds-Zahlen, ein sinnvolles Gebiet abdecken, sind die Grenzen für die Flammenstruktur falsch gewählt. Die Damköhler-Zahl $Da = \tau_0/\tau_c$,

welche, wie schon in Abschnitt 2.4.1 beschrieben, das Verhältnis aus turbulenten zu chemischen Zeitmaß darstellt, kann mittels Gleichung 2.48 abgeschätzt werden. Das chemische Zeitmaß τ_c wird mit der Gleichung

$$\tau_c = \frac{\delta_l}{S_l} \quad (5.1)$$

berechnet, mit den Werten $\delta_l \approx 0.3\text{mm}$ und $S_l \approx 30\text{m/s}^1$ einer laminaren Wasserstoff-Flamme. Das turbulente Zeitmaß der makroskopischen Wirbel kann mit der Näherung [Hir05]

$$\tau_0 = \frac{1}{4,98} \frac{k}{\varepsilon} \quad (5.2)$$

abgeschätzt werden. Die Werte für k und ε kommen aus dem Strömungsfeld der Überschallflamme, die im folgenden Abschnitt genauer beschrieben wird. Das daraus resultierende sehr kleine turbulente Zeitmaß kann mit dieser alternativen Abschätzung bestätigt werden:

$$\tau_0 \approx \frac{l_0}{u'_{rms}}, \quad (5.3)$$

in welcher die gemessenen Werte ($l_0 \approx 3,4\text{mm} - 7,9\text{mm}$; $u'_{rms} \approx 200\text{m/s}$) aus dem Experiment von Cheng et al. eingesetzt werden. Damit ergibt sich eine Damköhler-Zahl von

$$0,4 < Da < 5. \quad (5.4)$$

Diese Damköhler-Zahl liegt deutlich unter dem Wert Eins, und das trotz der sehr hohen laminaren Flammengeschwindigkeit. Betrachtet man die Verbrennung von Kohlenwasserstoffen, zum Beispiel von Methan, können aufgrund der vergleichbaren Flammendicke δ_l aber der viel niedrigeren Flammengeschwindigkeit S_l (circa eine Größenordnung geringer) auch noch kleinere Damköhler-Zahlen auftreten. Dieser Bereich mit $Da < 1$ ist bei der Deflagration im Unterschall ein Problem (zum Beispiel bei Magermotoren [WMD01]), da es dort durch die starke Turbulenz zur Zerstörung der Flammenstruktur und damit zu lokaler oder globaler Flammenlöschung kommen kann. Bei der Überschallverbrennung spielt diese Grenze $Da = 1$ keine Rolle. Denn das brennbare Gasgemisch, welches durch die Turbulenz stark verrührt

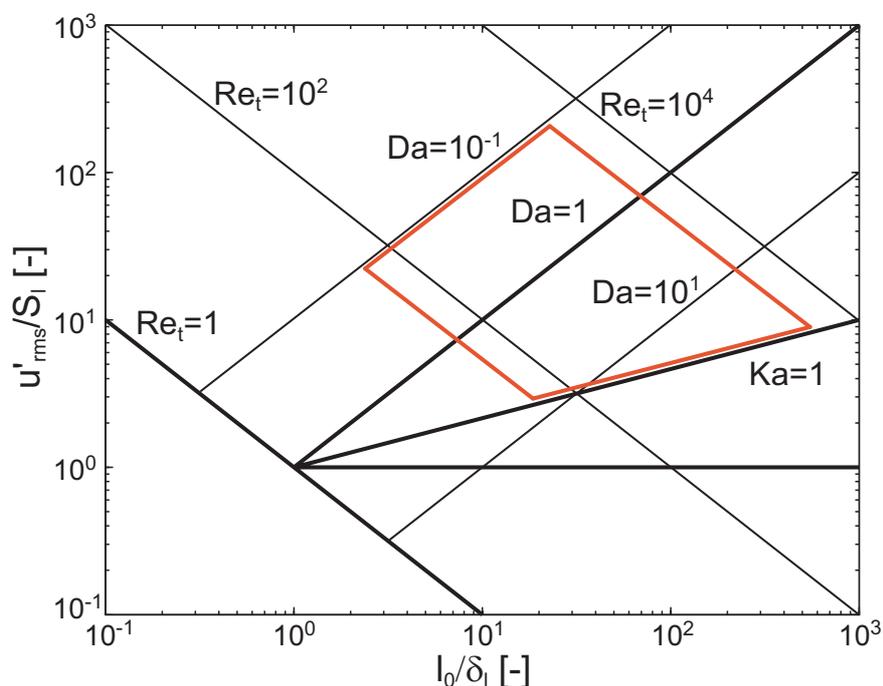


Abbildung 5.2: Borghi-Diagramm mit korrigiertem Bereich für Überschallverbrennung.

ist, befindet sich in einem thermodynamischen Zustand, in dem die Selbstzündung zum Tragen kommt. Somit ist ein Verlöschen durch turbulenten Einfluss nicht möglich. Dafür besteht im Überschall aber die Möglichkeit, dass aufgrund der Gasdynamik eine Flamme erlischt: Befindet sich die Flamme in einer expandierenden Strömung, kann sie durch die damit verbundene Absenkung der statischen Temperatur verlöschen.

Neben der Abgrenzung hin zur stark gerührten Flammenfront bedarf die Abgrenzung zur schwach gestörten Flammenfront ebenfalls einer Änderung. Wie in Abbildung 5.1 zu sehen ist, erstreckt sich der vorgeschlagene Bereich weit unterhalb der Linie $Ka = 1$ und sogar noch bis zum Bereich laminar gewinkelter Flammenfronten. Mit folgender Überlegung wird deutlich, dass die-

¹Die relativ hohe Flammengeschwindigkeit ergibt sich nach [Pet94] aus der Annahme einer Vorheiztemperatur von 800K.

se Grenze unwahrscheinlich ist. Mit der Beziehung [Hir05]

$$\frac{\tau_0}{\tau_\eta} \propto Re_t^{1/2} \quad (5.5)$$

für das Verhältnis der turbulenten Zeitskalen ergibt sich mit den Gleichungen 2.49 und 2.48 folgender Ausdruck für die Karlovitz-Zahl:

$$Ka = \frac{Re_t^{1/2}}{Da}. \quad (5.6)$$

Mit den oben erwähnten hohen turbulenten Reynolds-Zahlen und der Abschätzung für die Damköhler-Zahl führt dieser Ausdruck zu einer Karlovitz-Zahl von $Ka \geq 1$. Die Längenverhältnisse der turbulenten Skalen können mit

$$\frac{l_0}{\eta} = Re_t^{3/4} \quad (5.7)$$

angegeben werden [Hir05]. Mit einem integralen Längenmaß einer Überschall-Brennkammer von $3\text{mm} \lesssim l_0 \lesssim 7\text{mm}$ [CWP⁺94] ergeben sich Kolmogorov-Wirbel, die deutlich kleiner sind als die Dicke der laminaren Flamme. Diese Abschätzung wird wiederum durch die Angaben von Cheng ($\eta \approx 0,01\text{mm}$) bestätigt, was bedeutet, dass die Größe der Kolmogorov-Wirbel deutlich geringer ist als die laminare Flammendicke. Damit wird ersichtlich, dass die Flammenfront keinen pseudo-laminaren Charakter mehr besitzen kann. Der modifizierte Bereich für Überschallflammen ist in Abbildung 5.2 eingezeichnet.

Durch diese Modifikation entfällt der für die Flamelets gültige Bereich unterhalb der Linie $Ka = 1$. Flamelet-Modelle eignen sich somit nicht für die Beschreibung der Überschallverbrennung. Diese Erkenntnis deckt sich mit den Erfahrungen von Oevermann [Oev00] und Berglund et al. [BWF05]. In diesen Arbeiten wurde dieselbe Scramjet-Konfiguration untersucht. Während Oevermann RANS-Gleichungen und ein laminares Flamelet-Modell benutzte, wurde bei Berglund et al. eine *Large Eddy Simulation* mit einem dafür angepassten Flamelet-Modell durchgeführt. Beide Autoren kommen zu dem Schluss, dass die Berechnung der Überschallverbrennung mittels eines Flamelet-Ansatzes nicht funktioniert.

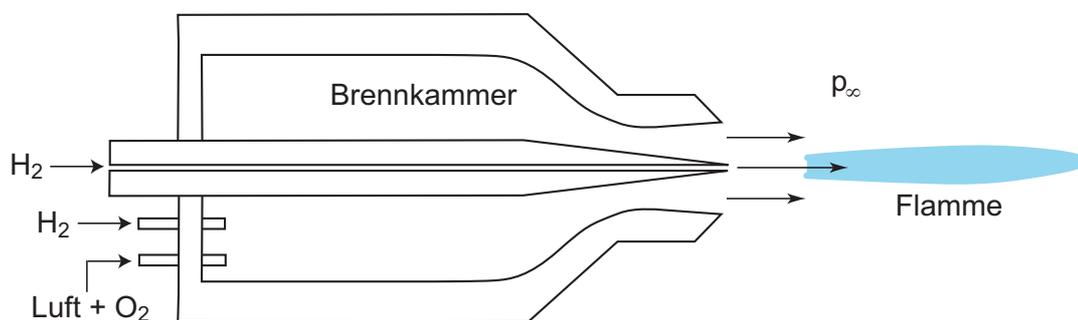


Abbildung 5.3: Schematischer Aufbau des Überschall-Brenners von Cheng.

5.2 Simulation der Diffusionsflamme von Cheng et al.

Anfang der 90er Jahre, nach Jahrzehnten der Scramjet-Forschung [Sma07], gab es noch einen Mangel an aussagekräftigen experimentellen Daten zum Thema Überschallverbrennung, da solche Experimente eine sehr anspruchsvolle Messtechnik benötigen. Es bestand aber ein großer Bedarf an einem besseren physikalischen Verständnis der Überschallverbrennung, da trotz langjähriger Scramjet-Forschung einige der wesentlichen Fragen noch nicht zuverlässig beantwortet werden konnten. Dies lag u.a. an der Erkenntnis, dass die Brennkammer einen wesentlichen Anteil des gesamten Reibungswiderstandes² verursacht und deshalb eine kurze Brennkammer eine wichtige Zielgröße darstellt. Daraus folgt eine effektive Mischung und Verbrennung von Luft und Brennstoff auf möglichst kurzer Distanz. Zusätzlich ergab sich die Frage zur Zündung und Flammenstabilisierung bei möglichst geringen Druckverlusten. Aufwendige Experimente mit detaillierten Messungen zur turbulenten Überschallverbrennung waren notwendig, um die physikalischen Vorgänge besser verstehen zu können. Außerdem wurden diese Experimente für einen damals noch jungen Zweig der Wissenschaft interessant: der numerischen Strömungsmechanik. Dort wurden diese Daten zur Validierung von Verbrennungsmodellen benötigt.

Im Experiment von Cheng et al. [CWP⁺94] wurden die Mischung und Reaktion

²Die Geschwindigkeit in der Brennkammer ist nur wenige Prozent geringer als die Anströmgeschwindigkeit [Oda04], allerdings ist die Dichte in der Brennkammer wesentlich höher als in der Außenströmung.

Austrittsbedingungen	Innere Düse	Äußere Düse
Mach-Zahl	1	2
Temperatur [K]	545	1250
Druck [kPa]	112	107
Geschwindigkeit [m/s]	1780	1420
\tilde{Y}_{O_2}	0,0	0,245
\tilde{Y}_{N_2}	0,0	0,58
\tilde{Y}_{H_2O}	0,0	0,175
\tilde{Y}_{H_2}	1,0	0,0

Tabelle 5.1: Zustände am Austritt des Brenners nach [CWP⁺94].

in einer axialsymmetrischen H₂-Luft Diffusionsflamme im Überschall untersucht. Es ist das erste Experiment in dem mit einem berührungslosen Verfahren Temperatur und Spezieskonzentrationen in einer Überschallflamme simultan gemessen wurden. Aufgrund der sehr guten Messergebnisse wurde dieser Versuch zur Validierung von Verbrennungsmodellen und Reaktionsmechanismen in mehreren Arbeiten herangezogen [BG03, GNA05, Di 07, Ger08]. Der Versuchsaufbau ist in Abbildung 5.3 skizziert. In der Brennkammer wird durch Wasserstoffverbrennung ein Heißgasgemisch aus Luft und Wasserdampf erzeugt, welches in der angeschlossenen Laval-Düse auf Ma = 2 beschleunigt wird. In diesem Jet aus heißen Verbrennungsabgasen befindet sich ein koaxialer Wasserstoff-Jet mit einem Innendurchmesser der Düse von D = 2,36mm und den Austrittsbedingungen Ma = 1 und Re = 15 600. Die chemischen Zusammensetzungen sowie die Strömungsparameter beider Freistrahlen sind in Tabelle 5.1 beschrieben. Durch die Kombination von Ramanstreuung und laserinduzierter Prädissoziations-Fluoreszenz wurden in der Diffusionsflamme simultan die Temperatur, die Konzentrationen der häufigsten Spezies (H₂, O₂, N₂, H₂O) und die Konzentration des Radikals OH quantitativ bestimmt. Die Messungen wurden in mehreren radialen Profilen stromab der Düsen vorgenommen. An jedem einzelnen Profilverpunkt wurden 500 Lasermessungen durchgeführt, aus welchen die Profile zeitlicher Mittelwerte, als auch die Profile der Standardabweichung der o.g. skalaren Größen, berechnet werden konnten. Somit ist ein sehr guter Einblick in den thermo-chemischen Zustand im Strömungsfeld möglich. So existieren nicht nur detaillierte Daten

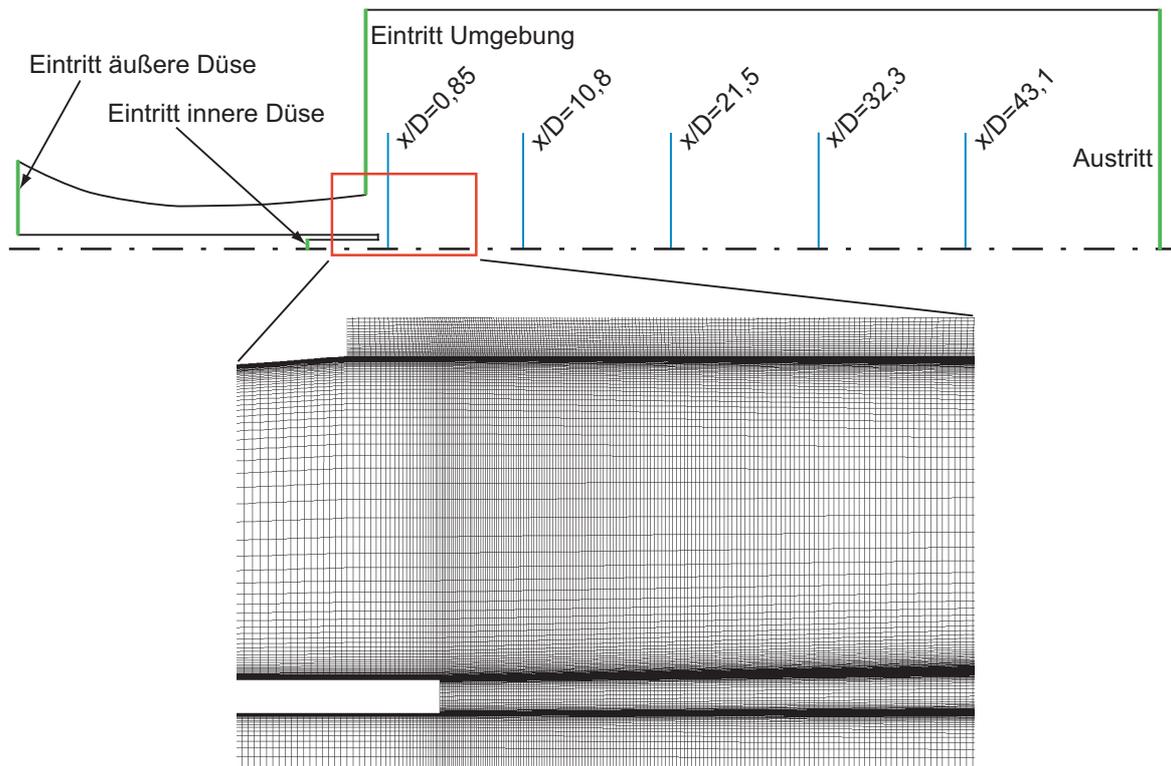


Abbildung 5.4: Gitter der Simulation mit den Messebenen des Experiments (blaue Linien).

über Temperatur, Produkte und Edukte, sondern mit dem OH-Radikal eine wichtige Spezies, welche in der Verbrennungszone entsteht. Das Geschwindigkeitsfeld dieser Konfiguration wurde nicht im selben Experiment untersucht, sondern es wurden die Daten aus früheren Experimenten herangezogen [Dan96]. Dies war möglich, da bei beiden Messungen dieselben Randbedingungen verwendet wurden. Allerdings sind die Ergebnisse der Geschwindigkeitsmessung mit gewissen Unsicherheiten behaftet [CWP⁺94, Dan96]. Grund hierfür sind die Partikel, welche für das laseroptische Messverfahren der Strömung zugesetzt wurden. Diese konnten den hohen Beschleunigungen³ in der Strömung nicht folgen. Dadurch ist das Strömungsfeld nur näherungsweise bekannt.

Das zweidimensionale, rotationssymmetrische Gitter in der Nähe der Düsen

³von 0 m/s auf 1300 m/s innerhalb von 5 cm (siehe [Dan96])

Randbedingungen	Innere Düse	Äußere Düse
Totaltemperatur [K]	654	1980
Totaldruck [kPa]	212	708
turb. Intensität [%]	3	10
int. Längenmaß [mm]	0,5	4
\tilde{Y}_{O_2}	0,0	0,245
\tilde{Y}_{N_2}	0,0	0,58
$\tilde{Y}_{\text{H}_2\text{O}}$	0,0	0,175
\tilde{Y}_{H_2}	1,0	0,0

Tabelle 5.2: Randbedingungen der Simulation.

ist in Abbildung 5.4 dargestellt. Das gesamte Rechengebiet besteht aus einem strukturierten Gitter mit 175 500 Zellen. Die Auflösung des Gitters basiert einerseits auf einer Studie (siehe [Fra08]), in welcher die Parameter Temperatur- und Speziesvarianz auf Gitterabhängigkeit untersucht wurden. Andererseits spielt die Darstellbarkeit von Verdichtungsstößen eine wichtige Rolle, sowie eine möglichst genaue Berechnung der Wandgrenzschicht in den Düsen. Für das verwendete *low-Reynolds-number* Turbulenzmodell wurde deshalb die Düsenkontur mit einem entdimensionierten Wandabstand von $y^+ \approx 1$ vernetzt [Flu05, Wil06]. Ein weiterer Beitrag des Turbulenzmodells ist die Modellierung der turbulenten Viskosität, die zur Abschätzung von turbulenten Impuls- und Stofftransport benötigt wird. Zusätzlich wird in den Transportgleichungen der Varianzen ein turbulentes Zeitmaß benötigt. Es hat sich gezeigt, dass ein Reynolds-Spannungs-Modell, trotz des größeren Aufwandes für dessen Modellierung, keine wesentlich besseren Ergebnisse liefert. Neben dem Nachteil der sieben zu lösenden Transportgleichungen hat sich dieses Modell auch als instabil erwiesen. Deshalb wurde mit dem $k-\omega$ Modell ein Zweigleichungsmodell verwendet. Durch dieses Modell ergibt sich nach Wilcox [Wil06] für das inverse turbulente Zeitmaß die Beziehung:

$$\frac{\varepsilon}{k} = 0,09 \cdot \omega, \quad (5.8)$$

welche in die Transportgleichungen für σ_Y (über Gleichung 3.18 in Gleichung 3.14) und σ_T (Gleichung 3.7) einzusetzen ist. Die in der Simulation verwendeten Randbedingungen sind in Tabelle 5.2 aufgelistet. Als Be-

dingungen am Austritt des Rechengebietes wurden Standardbedingungen ($p_0 = 1\text{bar}$, $T_0 = 300\text{K}$) angegeben. Die Randbedingungen für die Größen σ_Y und σ_T sind an den Düsenentritten Null und werden erst kurz vor Düsenaustritt durch einen lokalen und über den Düsenquerschnitt konstanten Quellterm auf den gewünschten Wert gesetzt. Das Kriterium für korrekt eingestellte Varianzen war eine Übereinstimmung der rms-Werte⁴ von Temperatur und H_2O mit den experimentellen Daten in Ebene $x/D=0,85$. Dieses Vorgehen ist notwendig, da andernfalls beide⁵ Variablen entlang den Düsen stark dissipieren würden. Ein wesentlicher Punkt bei der Berechnung dieses Experimentes ist die Berücksichtigung der Radikale im heißen Abgasstrahl, weil diese Radikale einen stark nichtlinearen Einfluss auf die Zündverzugszeit haben [LSS02, Ger08]. Diese Radikale werden aber nicht am Eintritt der äußeren Düse festgelegt (die Randbedingung dieser Spezies ist Null), denn es stellt sich automatisch, durch den detaillierten Reaktionsmechanismus, ein Gleichgewicht aller Spezies entlang der Laval-Düse ein.

Die folgenden Abbildungen zeigen einen Vergleich aller relevanten gemessenen Profile mit den Werten der Simulation. Es werden die Mittel- und rms-Werte der Temperatur und der Massenbrüche von H_2 , OH und H_2O dargestellt. Um die rms-Werte der Spezies von Experiment und Simulation vergleichen zu können, wurden alle Messergebnisse in Massenbrüche umgerechnet [Che08].

Die in Abbildung 5.5 dargestellte Ebene $x/D=0,85$ liegt stromab in der Nähe der Düse und zeigt primär, dass alle verfügbaren Strömungsvariablen korrekt vorgegeben wurden. Wichtig ist hier sowohl ein genaues Temperatur-Profil, als auch eine genaue Vorgabe der Radikale, welche durch den Massenbruch von OH abgeschätzt werden. Obwohl hier nur das OH-Profil verglichen wird, enthält der Abgasstrahl aufgrund der detaillierten Berechnung der Chemie alle weiteren Radikale (H, O, HO_2) sowie das Zwischenprodukt H_2O_2 . Im Diagramm für den mittleren OH-Wert ist eine starke Unsymmetrie der experimentellen Daten erkennbar. Diese Unsymmetrie ist in fast allen Diagrammen vorhanden und wird von den Experimentatoren mit Schwierigkeiten am Ver-

⁴außerhalb der Scherschicht

⁵In der inneren Düse treten nur Temperaturfluktuationen auf, da in reinem Wasserstoff keine Speziesfluktuationen vorkommen können.

suchsaufbau begründet. Während die Temperaturfluktuationen in sehr guter Übereinstimmung sind, besitzen die Speziesfluktuationen einen lokalen Maximalwert, der bei H_2 etwas und bei H_2O deutlich über dem experimentell gemessenen rms-Werten liegt. Die Ursache ist in der räumlichen Verteilung der Variablen σ_Y zu finden, welche nahe dem Punkt maximal wird, wo der Produktionsterm \mathcal{P}^Y (aus Gleichung 3.14) seinen höchsten Wert erreicht. Dieser Term hat seinen maximalen Wert am Ort des höchsten Speziesgradienten, also in der Scherschicht des Wasserstoffstrahls kurz nach Düsenaustritt (siehe Abbildung 5.15). Die oben erwähnte Unsymmetrie in den experimentellen Daten wirkt sich am deutlichsten im OH-Profil aus, weshalb ein Unterschied zwischen Experiment und Simulation unvermeidbar ist.

Abbildung 5.6 zeigt die Ebene $x/D=10,8$, welche sich ca. 25 mm stromab der Düse befindet. Am Temperaturprofil ist zu erkennen, dass dort weder im Experiment noch in der Simulation eine Verbrennung stattfindet. Während die Temperaturfluktuationen weniger stark anwachsen als die gemessenen Werte, sind die Maximalwerte der Speziesfluktuationen immer noch höher als im Experiment. Zwischen den Temperatur-, H_2 - und H_2O -Profilen des assumed-PDF Modells und dem Arrhenius-Ansatz besteht praktisch kein Unterschied, nur im OH-Profil ist erkennbar, dass mit dem assumed-PDF Modell etwas mehr Radikale erzeugt werden.

Die erste Messebene bei welcher im Experiment ein deutlicher Temperaturanstieg gemessen wurde liegt bei $x/D=21,5$ (siehe Abbildung 5.7). In dieser Ebene zeigt auch das assumed-pdf Modell eine maximale Temperatur von ca. 2000 K. Der Temperaturanstieg ist in der Simulation auf eine schmale reaktive Schicht beschränkt, wohingegen im Experiment ein breiterer Bereich zu reagieren scheint. Dieses Phänomen wurde auch in anderen Arbeiten beobachtet [BG03, Ger08] und scheint auf das Turbulenzmodell zurückzuführen zu sein, da eine höhere turbulente Viskosität eine stärkere Verteilung der Verbrennungsgase bewirken würde. Die einsetzende Verbrennung ist auch im H_2 -Profil zu erkennen. Das H_2 -Profil des assumed-PDF Modells besitzt zwar den gleichen Maximalwert wie das Profil des Arrhenius-Ansatzes, es ist aber schmaler, da die Verbrennung im stöchiometrischen Bereich ($Y_{H_2} \approx 0,02$) stattfindet. Die Produktion von Wasser stimmt gut mit den experimentellen Daten überein. Dagegen ist die Produktion von OH stärker ausgeprägt als im

Experiment, was sich direkt auf die rms-Werte von OH auswirkt⁶.

In den Ebenen $x/D=32,3$ und $x/D=43,1$ (siehe Abbildungen 5.8 und 5.9) zeigen der Arrhenius-Ansatz als auch das assumed-PDF Modell eine ausgeprägte Verbrennung. Der Unterschied zwischen beiden Verfahren ist deutlich geringer als in den vorherigen Ebenen. Eine gute Übereinstimmung mit dem Experiment ist in den Temperatur- und H_2O -Profilen erkennbar, außerdem besitzen die OH-Profile ein ähnliches Niveau wie im Experiment. Der Wasserstoff ist in beiden Simulationen in der letzten Ebene praktisch komplett verbrannt, während im Experiment noch eine geringe Menge nachgewiesen werden konnte. Dadurch fallen die rms-Werte des Wasserstoffs auch in dieser Ebene zu gering aus. Die Temperaturfluktuationen stimmen relativ gut mit den Messungen überein.

Die Fluktuationen aller Spezies werden maßgeblich durch die turbulente Skalarenergie σ_Y bestimmt. In Abbildung 5.10 ist die Entwicklung von realer und modellierter turbulenter Skalarenergie dargestellt. Die experimentell gemessenen Werte besitzen in den Ebenen ohne Verbrennung ($x/D = 0,85$ und $x/D = 10,8$) bei $\sigma_Y \approx 0,023$ einen fast identischen Maximalwert, was bedeutet, dass die Speziesfluktuationen relativ konstant sind. Dagegen existiert in der Simulation bei Ebene $x/D = 0,85$ ein sehr hoher Maximalwert ($\sigma_Y \approx 0,08$), welcher, wie oben schon erläutert, auf den starken Speziesgradienten zurückzuführen ist. Dieser Maximalwert ist die Ursache für die lokalen Spitzen in den rms-Profilen aller Spezies in Abbildung 5.5. Anders als im Experiment verändert sich in der Simulation die turbulente Skalarenergie entlang der Strömungsrichtung, denn in Ebene $x/D = 10,8$ beträgt der Maximalwert nur noch $\sigma_Y \approx 0,015$. Dieser Abbau wird durch flachere Speziesgradienten im Strömungsfeld verursacht, wodurch der Produktionsterm \mathcal{P}^Y kleiner wird und der Dissipationsterm ε^Y einen stärkeren Einfluss gewinnt (Gleichung 3.14). Ein konstanter Maximalwert in den σ_Y -Profilen wurde auch in den Ebenen $x/D = 21,5$ – $x/D = 43,1$ experimentell ermittelt, also innerhalb der Flamme. Die in diesen Ebenen berechnete Stärke der turbulenten Skalarenergie entspricht in sehr guter Näherung den experimentellen Werten, wobei auch hier eine leichte Abnahme der Maximalwerte entlang der Strömungsrichtung zu

⁶Die rms-Werte wachsen mit den Mittelwerten bis $\tilde{Y} = 0,5$, siehe dazu Gleichung 3.25.

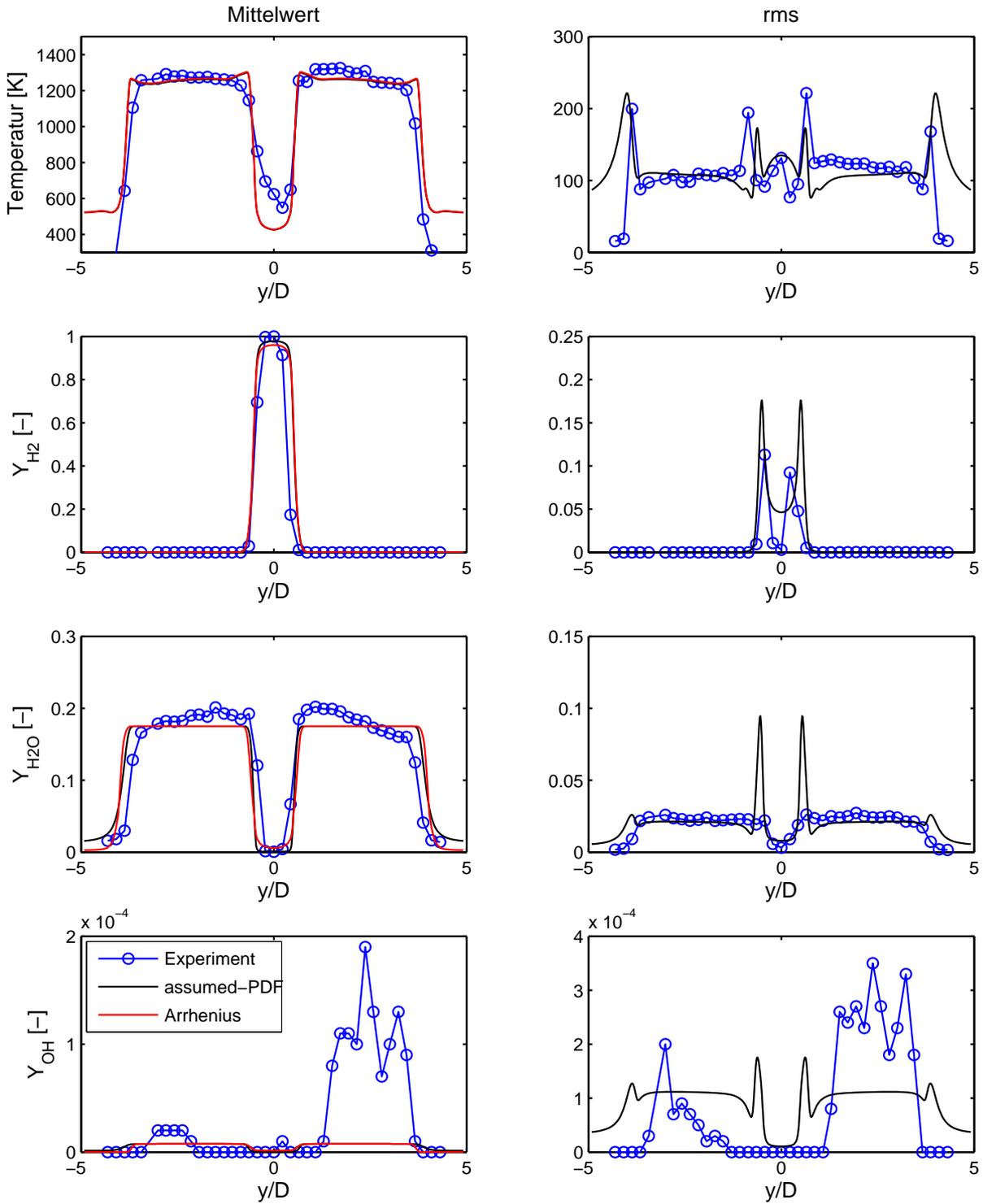


Abbildung 5.5: Mittelwerte und rms-Werte an der Position $x/D=0,85$.

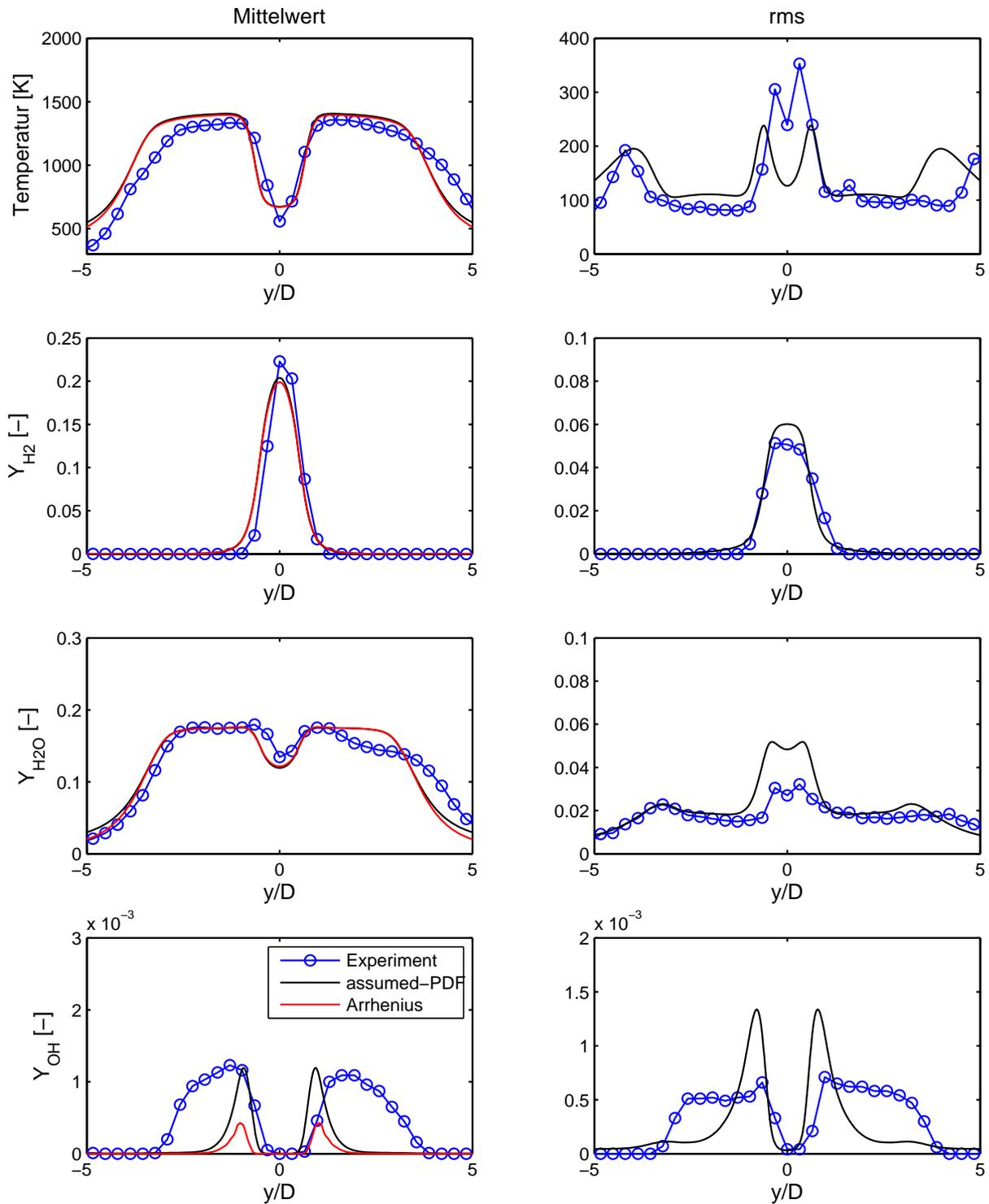


Abbildung 5.6: Mittelwerte und rms-Werte an der Position $x/D=10,8$.

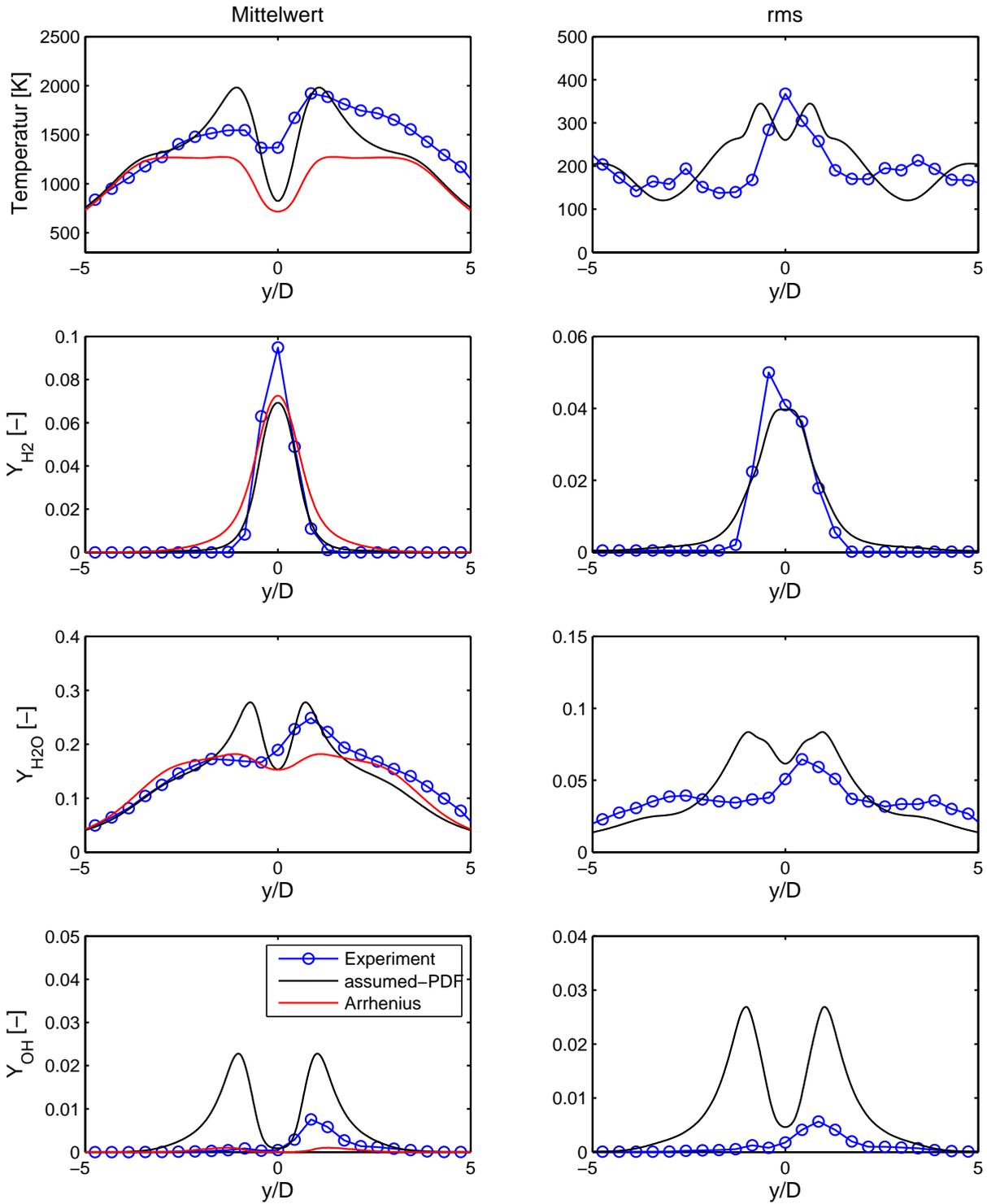


Abbildung 5.7: Mittelwerte und rms-Werte an der Position $x/D=21,5$.

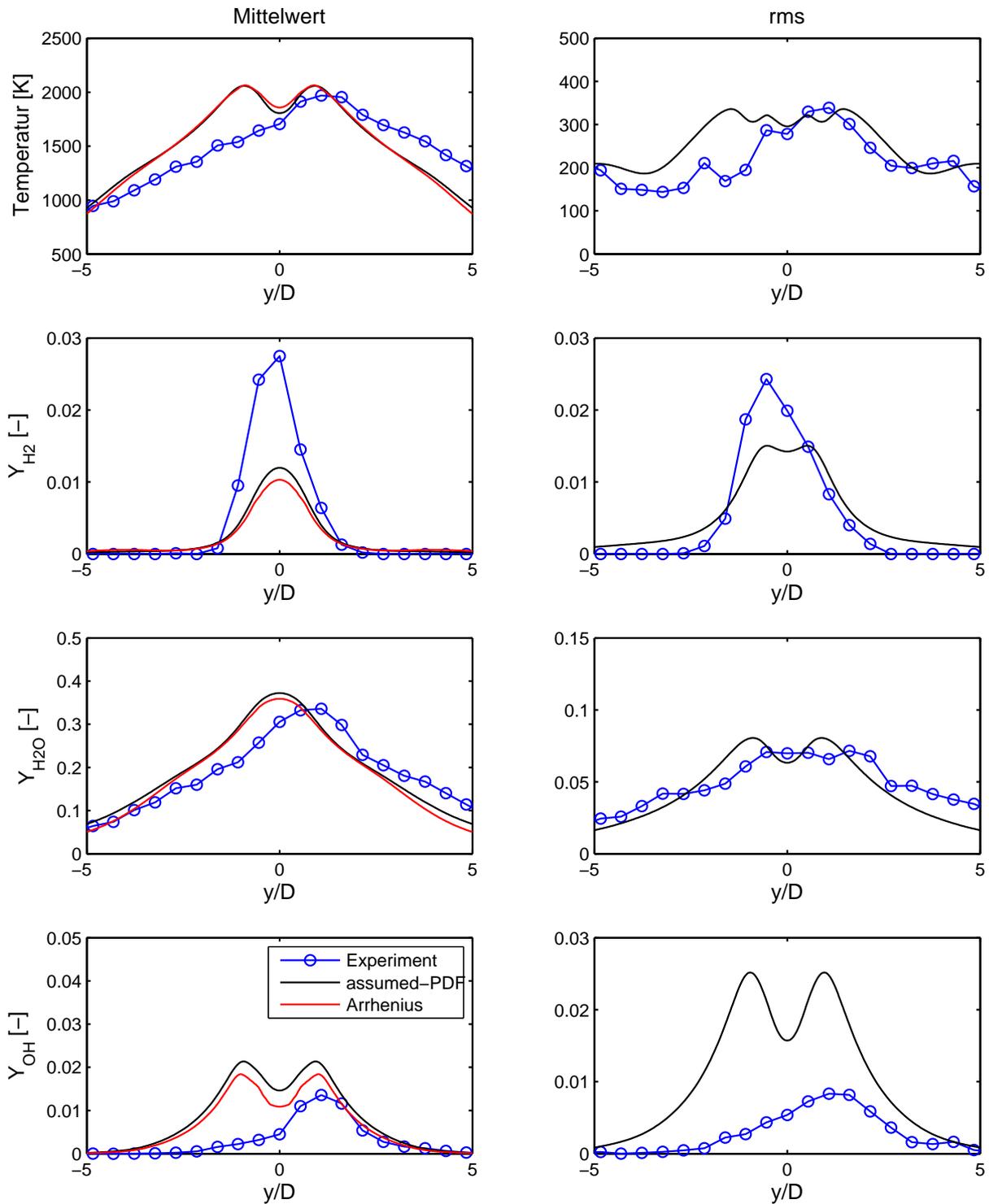


Abbildung 5.8: Mittelwerte und rms-Werte an der Position $x/D=32,3$.

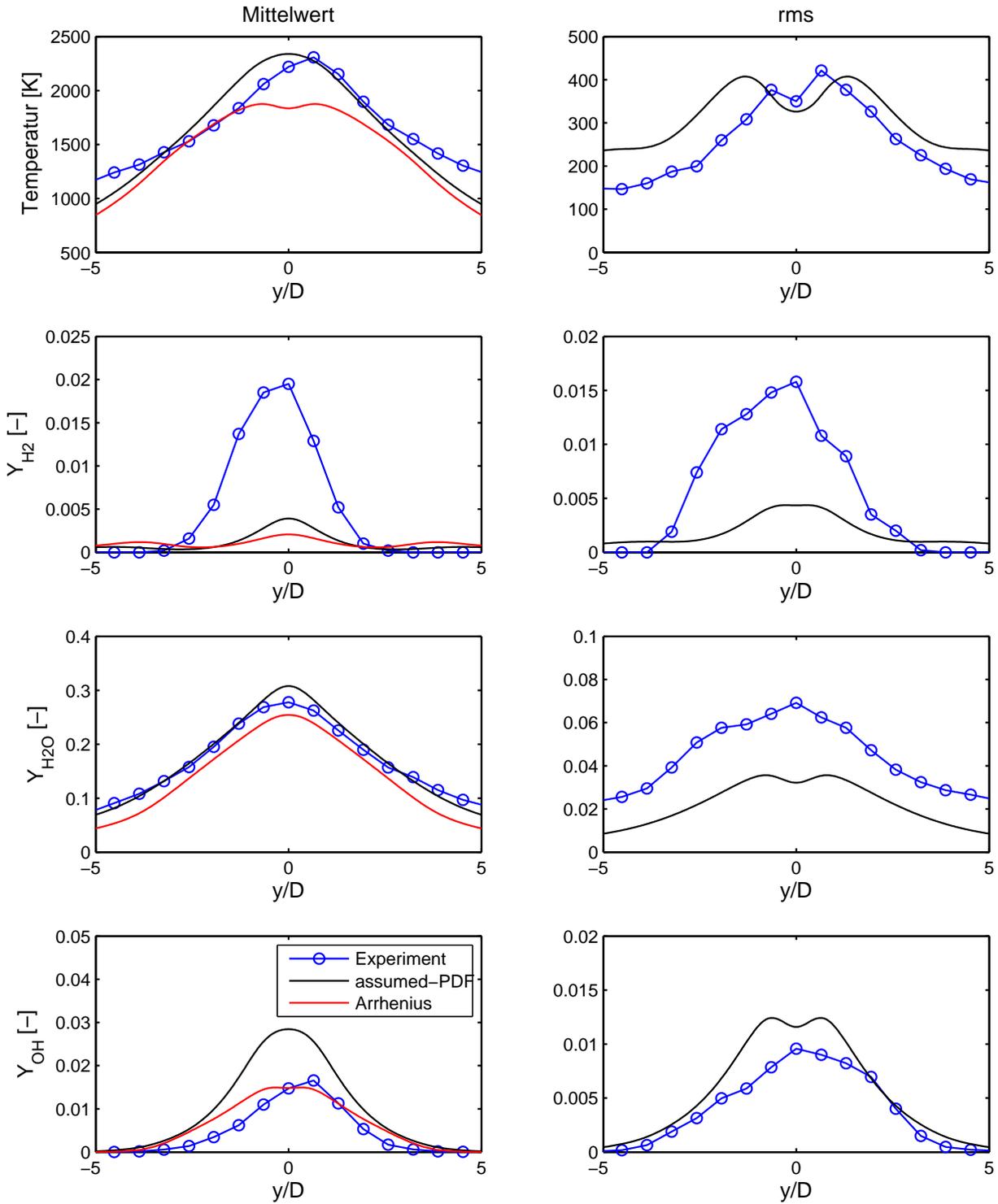


Abbildung 5.9: Mittelwerte und rms-Werte an der Position $x/D=43,1$.

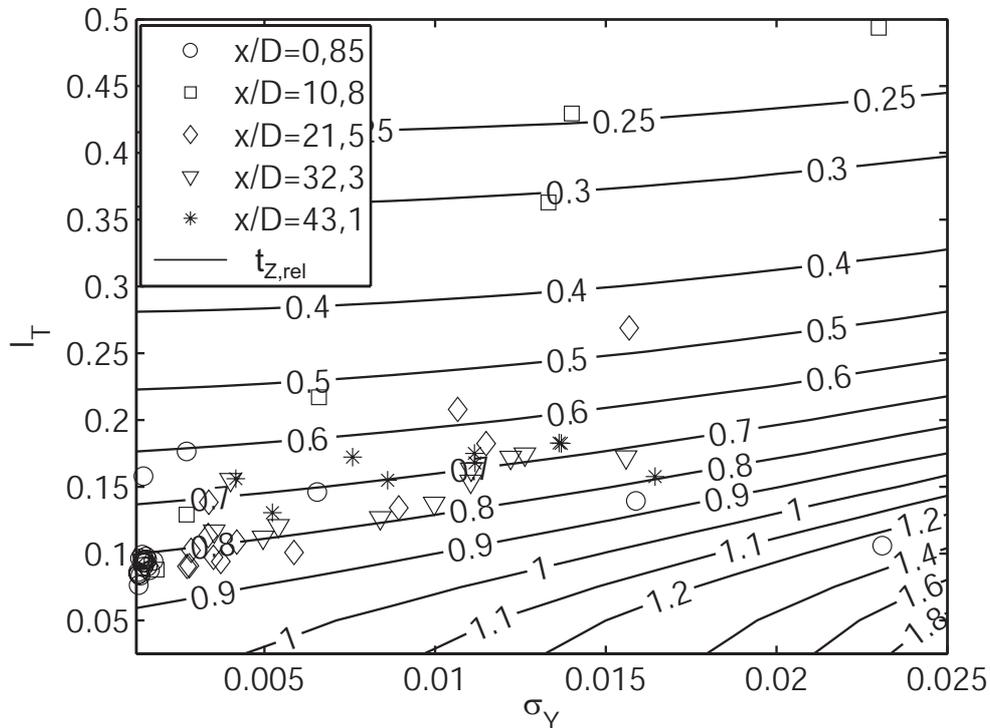


Abbildung 5.11: Lokale Temperatur- und Speziesfluktuationen im Experiment von Cheng et al. und deren Auswirkungen auf die Zündverzugszeit.

bedeuten würde. Den stärksten Einfluss haben die relativ hohen Temperaturfluktuationen im Profil $x/D = 10,8$. Genau hier zeigt das assumed-PDF Modell in der Simulation den deutlichsten Unterschied, da die Verbrennung eher einsetzt als beim Arrhenius-Ansatz.

Dies wird auch noch einmal im Vergleich der Temperaturfelder beider Simulationen in Abbildung 5.12 deutlich: Durch das assumed-PDF Modell findet die Zündung wesentlich früher statt. Beide Verbrennungsmodelle erzeugen aber eine abgehobene Flamme. Das Druckfeld ist in beiden Simulationen nahezu identisch. Eine durch die Überschallströmung bedingte Stoßstruktur zeichnet sich nicht nur im Druckfeld ab, sondern ist auch für die im Temperaturfeld erkennbaren Regionen mit abwechselnd höherer und niedriger Temperatur verantwortlich. In Abbildung 5.13 werden das Edukt O_2 und das Produkt H_2O

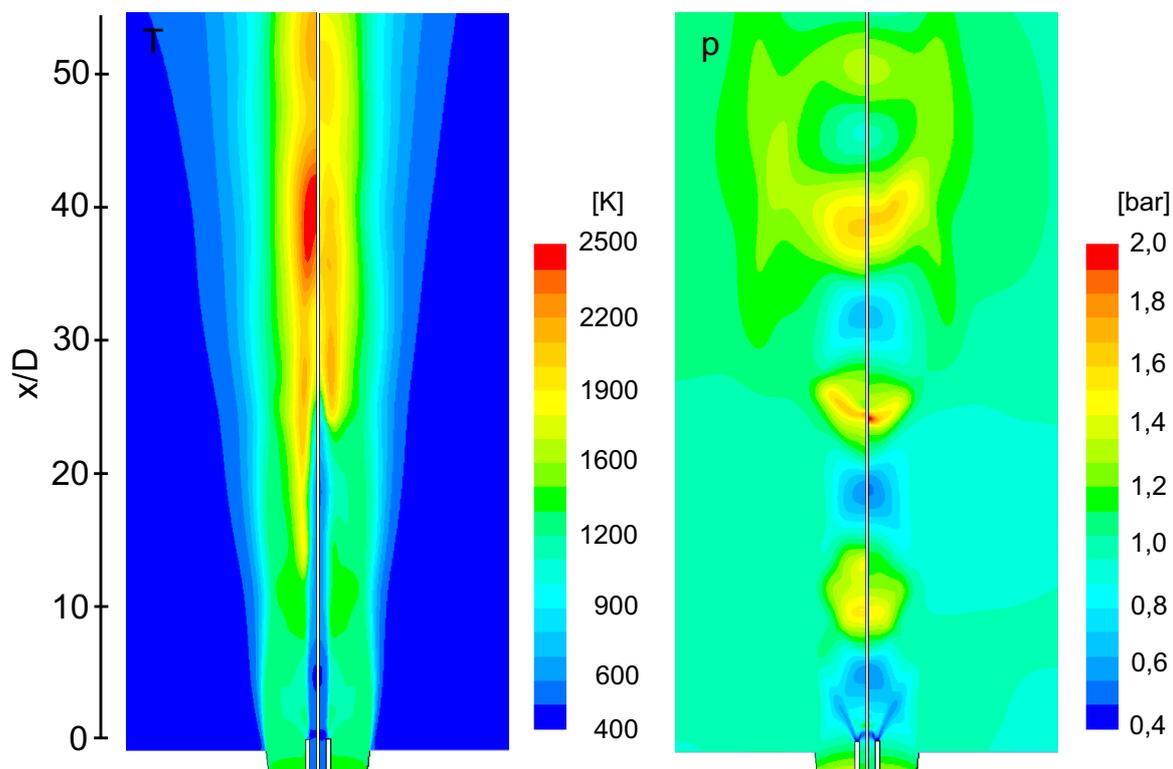


Abbildung 5.12: Vergleich der Temperatur- und Druckfelder zwischen assumed-PDF Modell (jeweils links) und Arrhenius-Ansatz (jeweils rechts).

verglichen. Die komplette chemische Umsetzung der Edukte in das Produkt findet beim Arrhenius-Ansatz auf einem kürzeren Weg statt, die Flamme beim assumed-PDF Modell (und auch im Experiment) ist deutlich länger. Die Verteilung des Radikals OH und des Zwischenprodukts H_2O_2 ist in Abbildung 5.14 dargestellt. Abgesehen von der räumlichen Verteilung der Spezies (hervorgehoben durch die verschiedenen Zündpunkte) besteht kein wesentlicher Unterschied im Auftreten und im Niveau dieser Speziesmassenbrüche. Schließlich zeigt Abbildung 5.15 die Verteilungen der Variablen σ_Y und σ_T im Strömungsfeld. Die turbulente Skalarenergie σ_Y besitzt ihren Maximalwert am Austritt des Wasserstoffstrahls, welcher in Strömungsrichtung stark dissipiert wird. Im Zündbereich ist eine leichte Zunahme der turbulenten Skalarenergie zu beobachten, mit einer anschließenden leichten Abnahme von σ_Y stromab. Die räumliche Verteilung der Temperaturvarianz besitzt einen anderen Charakter:

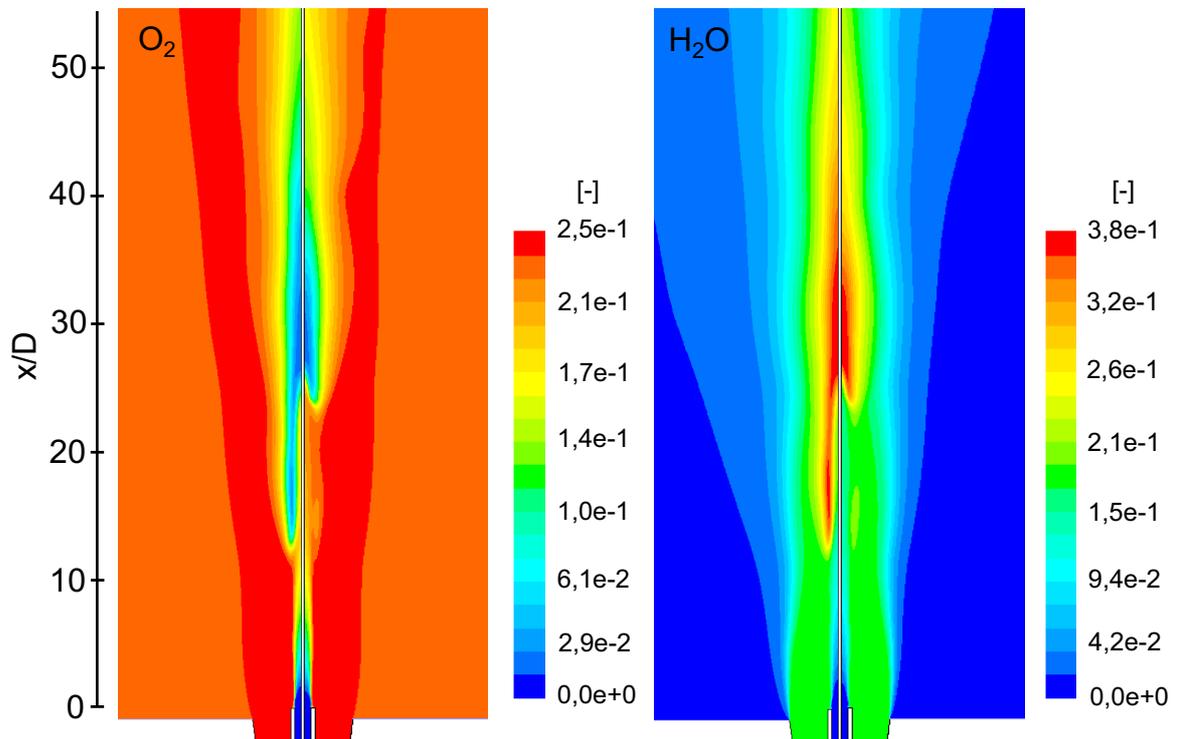


Abbildung 5.13: Vergleich der O_2 - und H_2O -Felder zwischen assumed-PDF Modell (jeweils links) und Arrhenius-Ansatz (jeweils rechts).

An den Düsenaustritten bildet sich in beiden Scherschichten Temperaturfluktuationen aus, die in Strömungsrichtung leicht anwachsen. Im Zündbereich und auch innerhalb der Flamme, also an den Stellen mit hohen Temperaturgradienten, nehmen die Temperaturfluktuationen zu und werden im oberen Bereich der Flamme maximal.

In der in diesem Abschnitt durchgeführten Simulation einer Überschallflamme wurden die Auswirkungen der Temperatur- und Speziesfluktuationen eines assumed-PDF Modells untersucht. Als Vergleichsmodell wurde ein einfacher Arrhenius-Ansatz ohne Fluktuationen herangezogen. Dieser Ansatz ist in einer Überschallströmung insofern denkbar, wenn von einem *lokal gerührten* Zustand ausgegangen wird. In diesem Zustand existieren idealerweise keine räumlichen Spezies- oder Temperaturgradienten. Somit findet die Reaktion gleichmäßig verteilt im Kontrollvolumen statt. Der Vergleich zwischen den Verbrennungsmodellen (in beiden Fällen wurde mit dem selben Reak-

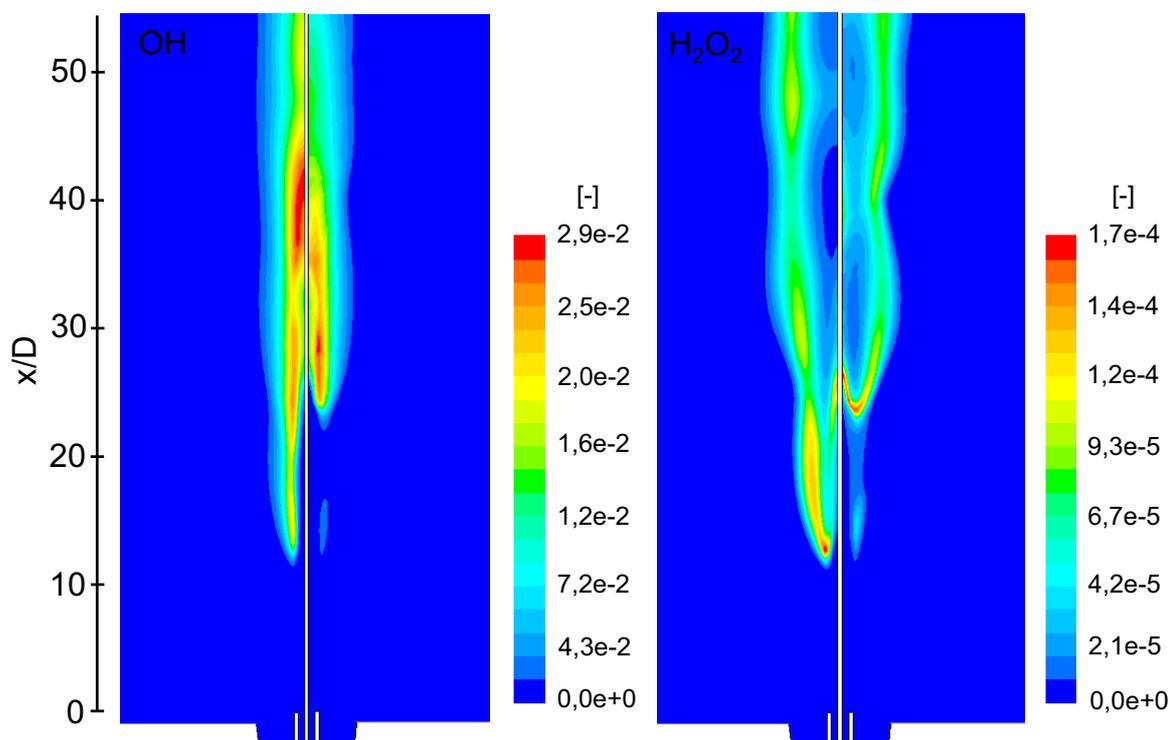


Abbildung 5.14: Vergleich des Radikals OH und H_2O_2 zwischen assumed-PDF Modell (jeweils links) und Arrhenius-Ansatz (jeweils rechts).

tionsmechanismus von Jachimowski [Jac88] gerechnet) hat ergeben, dass in der wichtigen Frage des Zündzeitpunktes das assumed-PDF Modell deutlich besser abgeschnitten hat. Zündzeitpunkt und auch die Stärke aller Fluktuationen sind allerdings abhängig von mehreren zusätzlichen Freiheitsgraden, welches das assumed-PDF Verbrennungsmodell mit sich bringt. Daher ist eine Übertragbarkeit der guten Ergebnisse auf andere Konfigurationen, zu welchen keine extrem detaillierten Messungen wie im Experiment von Cheng et al. vorhanden sind, eher nicht zu erwarten. Als einer dieser Freiheitsgrade kann auch der in der Simulation verwendete Reaktionsmechanismus angesehen werden. Eine Untersuchung am oben beschriebenen Experiment hat gezeigt [Ger08], dass die Lösung stark von der Qualität (Anzahl der Spezies und Reaktionsgleichungen) des Mechanismus abhängt. Selbst vergleichbar detaillierte Mechanismen ergeben leicht unterschiedliche Lösungen. Dennoch bildet ein detaillierter Reaktionsmechanismus die Grundlage für die Modellierung der Überschallverbrennung. Die Reaktionskinetik muss betrachtet wer-

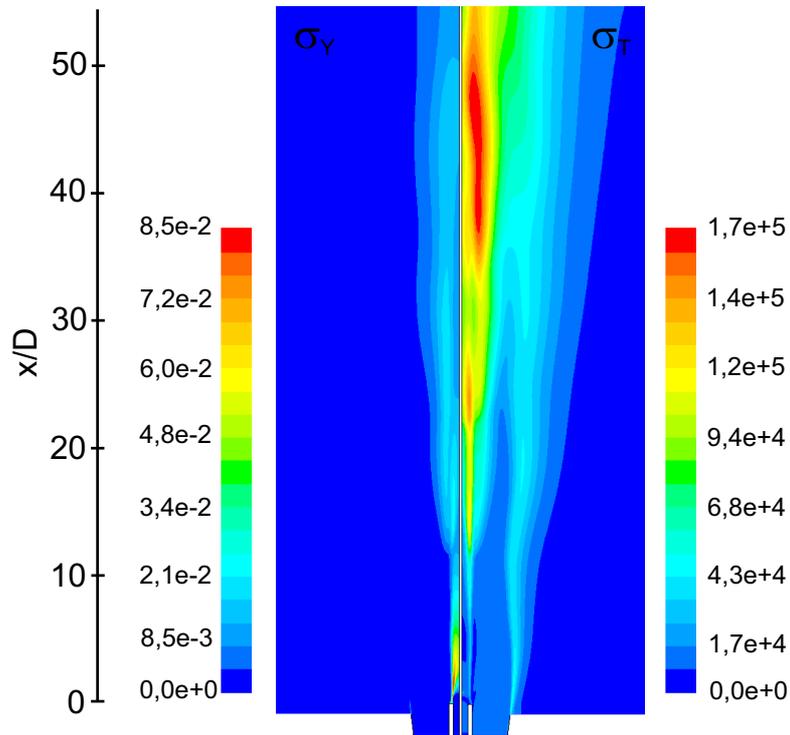


Abbildung 5.15: Räumliche Verteilung der Parameter σ_Y (links) und σ_T (rechts) des assumed-PDF Verbrennungsmodells.

den, weil die Zündverzugszeit, welche stark nichtlinear von den Variablen Druck, Temperatur und Gemischzusammensetzung abhängt, darüber entscheidet, ob und wie eine Flamme im Reaktionsgebiet brennt.

6 Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit wurde ein Modell erstellt, welches eine effiziente Berechnung der Turbulenz-Chemie Interaktion in einem detaillierten Reaktionsmechanismus erlaubt. Dieses Modell basiert auf einer hochdimensionalen Tabelle, mit welcher effizient die thermo-chemischen Zustände in einer CFD-Simulation ein- und ausgelesen werden können. Weiterhin wurde die Modellierung der Überschallverbrennung untersucht, indem ein für die Anwendung einsatzbereites assumed-PDF Verbrennungsmodell bewertet wurde. Dieses Verbrennungsmodell besitzt die Fähigkeit, die detaillierten chemischen Vorgänge nicht nur aus den Mittelwerten von Temperatur und Gaszusammensetzung zu bestimmen, sondern auch deren Schwankungswerte in die Berechnung mit einzubeziehen. Zur Beurteilung dieses Verfahrens wurde das zu Validierungszwecken durchgeführte Experiment von Cheng et al. [CWP⁺94] herangezogen, in welchem exakte Messungen von Mittel- und rms-Wert der reaktiven Variablen in einer Überschall-Jetflamme vorgenommen worden waren.

Der Mechanismus der Flammenstabilisierung in einer Überschallströmung ist die Selbstzündung. Die Zündverzugszeit bzw. die Zündlänge hängen dabei stark von der Temperatur, dem Druck sowie der Gemischzusammensetzung ab, weshalb die detaillierte Betrachtung der Chemie unerlässlich ist. Kleine Veränderungen der reaktiven Variablen haben einen starken Einfluss und verändern spürbar die Zündlänge. Weil Schwankungen von Temperatur und Speziesmassenbrüchen sich in nichtlinearer Weise auf die Reaktion auswirken, muss eine Berechnung, die nur auf zeitlichen Mittelwerten dieser Variablen basiert, zu Fehlern führen. Somit ist die Turbulenz-Chemie Interaktion ein wichtiger Mechanismus bei schwach stabilisierten Flammen im Überschall. Für die genaue Berechnung der Zündlänge ist die alleinige Betrachtung der zeitgemittelten Temperatur ungenügend, weil dadurch die meisten Geschwindigkeitskoeffizienten im Reaktionsmechanismus einen deutlich zu

kleinen Wert besitzen. Die Verwendung von mittleren Speziesmassenbrüchen geht von einem lokal gerührtem Zustand aus und vernachlässigt den Effekt, dass Brennstoff und Oxidator lokal in ungemischtem Zustand vorliegen können. Der verwendete assumed-PDF Ansatz kann diese beiden Unzulänglichkeiten eines Ansatzes ohne thermo-chemischer Fluktuationen umgehen, da eben diese Temperatur- und Speziesfluktuationen modelliert werden. Dieser Ansatz besitzt daher ein Potential für die Verbesserung der Simulation der Selbstzündung in turbulenten Strömungen.

Das Potential des Verbrennungsmodells wird durch die Berechnung der detaillierten Chemie in Kombination mit je einer Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion für die Temperatur und die Gaszusammensetzung erreicht, was numerisch sehr aufwendig ist. Aus diesem Grund wurde eine bestehende Tabellierungsmethode für hoch-dimensionale Tabellen weiterentwickelt und auf die Bedürfnisse des assumed-PDF Modells angepasst. Dafür wurde ein neuer Such-Algorithmus entwickelt und eine alternative Methode für einen wesentlich schnelleren Datenzugriff implementiert. Das Programm verfügt über eine Schnittstelle zum CFD-Löser *FLUENT*, konnte aber erfolgreich auch auf weitere CFD-Löser portiert werden.

Die Untersuchung des Einflusses der Turbulenz-Chemie Interaktion dieses assumed-PDF Ansatzes ergab eindeutige Auswirkungen der Fluktuationen von Temperatur und Spezies. Mit steigenden Temperaturfluktuationen wird die Zündverzugszeit verkürzt und mit steigenden Speziesfluktuationen wird diese verlängert. Beide Variablen haben demnach einen entgegengesetzten Effekt und schwächen sich gegenseitig in ihrer Wirkung ab. Zur korrekten Beschreibung des lokalen thermo-chemischen Zustands gehören die exakten Werte von Temperatur- und Speziesvarianz, da sie sich sensitiv auf die lokale Produktion von Wärme und Spezies auswirken. Diese Varianzen, deren genauer Betrag essentiell für die korrekte Berechnung der Verbrennung ist, werden durch jeweils eine Transportgleichung bestimmt. Bei der Simulation des Experiments von Cheng et al. musste eine Modellkonstante innerhalb einer Transportgleichung leicht angepasst werden, um eine bestmögliche Übereinstimmung mit den experimentellen Daten der turbulenten Skalarenergie σ_Y zu erzielen. Mit Hilfe dieser Variablen σ_Y können alle lokalen Speziesvarian-

zen und -kovarianzen bestimmt werden. Die Richtigkeit dieser multivariaten Verteilung wurde bereits in früheren Arbeiten untersucht [BAH94, GNA05]. Anhand der Entmischung der Luft konnte in dieser Arbeit aber auch gezeigt werden, dass die Speziesfluktuationen nicht immer einen physikalisch korrekten Hintergrund besitzen.

Für die nicht-vorgemischte Überschallverbrennung, die praktisch nur in Scramjet-Antrieben relevant ist, wurde ein Bereich im Flammenregime-Diagramm vorgeschlagen. Dieser Vorschlag ist eine Modifikation des Überschallbereiches im Diagramm von Balakrishnan [Bal92], dessen Arbeit als eine der ganz wenigen zum Thema Flammenregime von Scramjets gilt. Im modifizierten Flammenregime-Diagramm ist der für die Anwendung von Flamelets gültige Bereich nicht mehr enthalten, was sich mit den Erfahrungen aus Simulationen anderer Überschall-Konfigurationen deckt [Oev00, BWF05].

Durch die zahlreichen Koeffizienten in den Transportgleichungen der Varianzen ist eine universelle Gültigkeit nicht zu erwarten. Da dies den Schwachpunkt dieses assumed-PDF Verfahrens darstellt, ist hier eine Weiterentwicklung notwendig. Einen Quantensprung in der Vorhersage von zeitlichen Fluktuationen aller Variablen des Strömungsfeldes liefert die *Large Eddy Simulation*. Durch die rasante Verbesserung der Hardware rückt dieses Verfahren zunehmend in den Fokus. Eine Wahrscheinlichkeitsverteilung muss nur noch, wenn überhaupt, auf der Subgrid-Ebene bereitgestellt werden, da die großen turbulenten Strukturen viele wichtige Effekte, wie zum Beispiel die Intermitenz, beschreiben. Von Vorteil wäre auch in diesem Fall die in-situ Tabellierung, da sie besonders gut für instationäre Verfahren wie die LES geeignet ist.

A Reaktionsmechanismus

Der in dieser Arbeit verwendete Mechanismus mit seinen acht Spezies und 19 Reaktionen (siehe Tabelle (A.2)) basiert auf dem Wasserstoff-Luft-Mechanismus von Jachimowski [Jac88] mit 13 Spezies und 32 Reaktionen und wurde dem Buch von Gerlinger entnommen [Ger05]. Da auf die Berechnung von Stickoxiden verzichtet wurde, genügten die ersten 19 Reaktionsgleichungen der ursprünglich 32 Reaktionen für die Simulation der Verbrennung. Die passive Spezies N_2 tritt in den ersten 19 Reaktionen nicht explizit auf, sondern ist Teil des inerten Dreierstoß-Partners M. Die Effektivitäten bestimmter Stoßpartner zeigt Tabelle (A.1), alle anderen Effektivitäten sind eins. Die Effektivitäten der einzelnen Spezies treten als Parameter t_s in Gleichung 3.24 auf.

Dreierstoß-Partner	Reaktionsgleichungen				
	(5)	(6)	(7)	(8)	(18)
M= H_2	1,0	2,0	1,0	2,0	1,0
M= H_2O	6,0	6,0	5,0	16,0	15,0

Tabelle A.1: Effektivität der inerten Stoßpartner in den betreffenden Dreierstoß-Reaktionen.

	Reaktion		A_r [mol,cm ₃]	n_r [-]	E_r [J/mol]
(1)	H + O ₂	\rightleftharpoons OH + O	$2,60 \cdot 10^{14}$	0	16800
(2)	O + H ₂	\rightleftharpoons OH + H	$1,80 \cdot 10^{10}$	1,00	8900
(3)	OH + H ₂	\rightleftharpoons H ₂ O + H	$2,20 \cdot 10^{13}$	0	5150
(4)	OH + OH	\rightleftharpoons H ₂ O + O	$6,30 \cdot 10^{12}$	0	1090
(5)	H + OH + M	\rightleftharpoons H ₂ O + M	$2,20 \cdot 10^{22}$	-2,00	0
(6)	H + H + M	\rightleftharpoons H ₂ + M	$6,40 \cdot 10^{17}$	-1,00	0
(7)	H + O + M	\rightleftharpoons OH + M	$6,00 \cdot 10^{16}$	-0,60	0
(8)	H + O ₂ + M	\rightleftharpoons HO ₂ + M	$2,10 \cdot 10^{15}$	0	-1000
(9)	H ₂ + O ₂	\rightleftharpoons HO ₂ + H	$1,00 \cdot 10^{14}$	0	56000
(10)	HO ₂ + H	\rightleftharpoons OH + OH	$1,40 \cdot 10^{14}$	0	1080
(11)	HO ₂ + H	\rightleftharpoons H ₂ O + O	$1,00 \cdot 10^{13}$	0	1080
(12)	HO ₂ + O	\rightleftharpoons O ₂ + OH	$1,50 \cdot 10^{13}$	0	950
(13)	HO ₂ + OH	\rightleftharpoons H ₂ O + O ₂	$8,00 \cdot 10^{12}$	0	0
(14)	HO ₂ + HO ₂	\rightleftharpoons H ₂ O ₂ + O ₂	$2,00 \cdot 10^{12}$	0	0
(15)	H + H ₂ O ₂	\rightleftharpoons H ₂ + HO ₂	$1,40 \cdot 10^{12}$	0	3600
(16)	O + H ₂ O ₂	\rightleftharpoons OH + HO ₂	$1,40 \cdot 10^{13}$	0	6400
(17)	OH + H ₂ O ₂	\rightleftharpoons H ₂ O + HO ₂	$6,10 \cdot 10^{12}$	0	1430
(18)	H ₂ O ₂ + M	\rightleftharpoons OH + OH + M	$1,20 \cdot 10^{17}$	0	45500
(19)	O + O + M	\rightleftharpoons O ₂ + M	$6,00 \cdot 10^{13}$	0	-1800

Tabelle A.2: Gekürzter Reaktionsmechanismus von Jachimowski.

Literaturverzeichnis

- [Alg93] ALGERMISSEN, J.: *Grundlagen der Überschallverbrennung*. 2nd Space Course on Low Earth Orbit Transportation, 31:1–20, 1993.
- [BAH94] BAURLE, R. A., G. A. ALEXOPOULOS und H. A. HASSAN: *Assumed Joint Probability Density Function Approach for Supersonic Turbulent Combustion*. Journal of Propulsion and Power, 10(4):473–484, 1994.
- [Bal92] BALAKRISHNAN, G.: *Studies of hydrogen-air diffusion flames and of compressibility effects related to high speed propulsion*. Doktorarbeit, University of California, San Diego, 1992.
- [BG03] BAURLE, R.A. und S.S. GIRIMAJI: *Assumed PDF turbulence-chemistry closure with temperature-composition correlations*. Combustion and Flame, 134:131–148, 2003.
- [Boc01] BOCKHORN, H.: *Grundlagen der Verbrennungstechnik II*. Vorlesungs-Manuskript, Engler-Bunte-Institut, Universität Karlsruhe, 2001.
- [Bor88] BORGHI, R.: *Turbulent Combustion Modelling*. Prog. Energy Combust. Sci., 14:245–292, 1988.
- [BWF05] BERGLUND, M., N. WIKSTRÖM und C. FUREBY: *Numerical Simulation of Scramjet Combustion*. Technischer Bericht 1650-1942, Swedish Defence Research Agency, 2005.
- [Che08] CHENG, T.S.: *private Kommunikation*, 2008.

- [CWP⁺94] CHENG, T.S., J.A. WEHRMEYER, R.W. PITZ, O. JARRET und G.B. NORTHAM: *Raman Measurement of Mixing and Finite-Rate Chemistry in a Supersonic Hydrogen-Air Diffusion Flame*. *Combustion and Flame*, 99:157–173, 1994.
- [Dan96] DANCEY, C.L.: *The turbulent flow field downstream of an axisymmetric Mach 2 supersonic burner - LDA measurements*. 32nd Joint Propulsion Conference and Exhibit, 1996. Lake Buena Vista, FL.
- [Di 07] DI DOMENICO, M.: *Numerical Simulation of Soot Formation in Turbulent Flows*. Doktorarbeit, Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt, Institut für Verbrennungstechnik, Stuttgart, 2007.
- [DW06] DAVIS, M.C. und J.T. WHITE: *Flight-Test-Determined Aerodynamic Force and Moment Characteristics of the X-43A at Mach 7.0*. 14th AIAA/AHI International Space Planes and Hypersonic Systems and Technologies Conference, (AIAA-2006-8028), 2006. Canberra, Australia.
- [EP88] ESWARAN, V. und S.B. POPE: *Direct numerical simulation of the turbulent mixing of a passive scalar*. *Physics of Fluids*, 31(3):506–520, 1988.
- [Flu05] FLUENT INC.: *FLUENT 6.2 Documentation*, 2005.
- [Fra08] FRANZE, R.: *Untersuchung zu einem Assumed-PDF Verbrennungsmodell*. Semesterarbeit, Lehrstuhl für Thermodynamik, TU München, 2008.
- [Fri00] FRIEDRICH, R.: *Grundlagen turbulenter Strömungen*. TU München, Vorlesungs-Manuskript, 2000.
- [Fro88] FROHN, A.: *Einführung in die kinetische Gastheorie*. AULA-Verlag Wiesbaden, 1988.
- [Gab96] GABLER, W.: *Gemischbildung, Flammenstabilisierung und Verbrennung in einer gestuften Überschallbrennkammer*. Doktorarbeit, Lehrstuhl für Thermodynamik, Fakultät für Maschinenwesen, TU München, 1996.

- [Ger03] GERLINGER, P.: *Investigation of an assumed PDF approach for finite-rate chemistry*. Combust. Sci. and Tech., 175:841–872, 2003.
- [Ger05] GERLINGER, P.: *Numerische Verbrennungssimulation*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York, 2005.
- [Ger08] GERLINGER, P.: *Investigation of Hydrogen-Air Reaction Mechanisms for Supersonic Combustion*. In: *American Institute of Aeronautics and Astronautics*, Nummer 2008-4682, 2008.
- [Gir91] GIRIMAJI, S. S.: *Assumed β -pdf Model for Turbulent Mixing: Validation and Extension to Multiple Scalar Mixing*. Combustion Science and Technology, 78:177–196, 1991.
- [GNA05] GERLINGER, P., B. NOLL und M. AIGNER: *Assumed PDF modelling and PDF structure investigation using finite-rate chemistry*. Progress in Computational Fluid Dynamics, 5:334–344, 2005.
- [Grü98] GRÜNIG, C.: *Gemischbildung und Flammenstabilisierung bei Pylon-Einblasung in Überschallbrennkammern*. Doktorarbeit, Lehrstuhl für Thermodynamik, Fakultät für Maschinenwesen, TU München, 1998.
- [GWG92] GAFFNEY, R. L., J.A. WHITE und S.S. GIRIMAJI: *Modeling turbulent/chemistry interactions using assumed PDF methods*. AIAA/SAE/ASME/ASEE 28th Joint Propulsion Conference and Exhibit, (92-3638), 1992.
- [Hei03] HEINZ, S.: *Statistical mechanics of turbulent flows*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York, 2003.
- [Hey93] HEYNATZ, J. T.: *Hyperschallströmungen - Grundlagen und Hinweise*. Verlag Dieter Thomas, 1993.
- [HH94] HÄMMERLIN, G. und K. H. HOFFMANN: *Numerische Mathematik*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York, 4. Auflage, 1994.
- [Hir05] HIRSCH, C.: *Technische Verbrennung - Einführung in Theorie und Anwendung technischer Verbrennungssysteme*. TU München, Vorlesungs-Manuskript, 2005.

- [Hod41] HODGMAN, C. D.: *Mathematical Tables from handbook of chemistry and physics*. Chemical Rubber Publishing Co., Cleveland, Ohio, 1941.
- [Hof04] HOFFMANN, A.: *Modellierung turbulenter Vormischverbrennung*. Doktorarbeit, Fakultät für Chemieingenieurwesen, Universität Karlsruhe (TH), 2004.
- [IB06] INGENITO, A. und C. BRUNO: *Turbulent Supersonic Combustion: Modelling and Simulation*. 14th AIAA/AHI International Space Planes and Hypersonic Systems and Technologies Conference, (2006-8035), 2006.
- [Jac88] JACHIMOWSKI, C.L.: *An Analytical Study of the Hydrogen-Air Reaction Mechanism with Application to Scramjet Combustion*. NASA Technical Paper, (2791), 1988.
- [Krö03] KRÖNER, M.: *Einfluss lokaler Löschvorgänge auf den Flammrückschlag durch verbrennungsinduziertes Wirbelaufplatzen*. Doktorarbeit, Lehrstuhl für Thermodynamik, Fakultät für Maschinenwesen, TU München, 2003.
- [LSF01] LECHNER, R., J. SESTERHENN und R. FRIEDRICH: *Turbulent supersonic channel flow*. Journal of Turbulence, 2:1–25, 2001.
- [LSS02] LYUBAR, A., T. SANDER und T. SATTELMAYER: *Einfluss des Vorheizerausbrands auf die Flammenstabilisierung in einer Überschallbrennkammer*. Seminar des Sonderforschungsbereichs 255, TU München, 2002.
- [LW80] LIBBY, P.A. und F.A. WILLIAMS: *Turbulent Reacting Flows*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York, 1980.
- [LW94] LIBBY, P.A. und F.A. WILLIAMS: *Turbulent Reacting Flows*. Academic Press, 1994.
- [Lyu05] LYUBAR, A.: *Numerisch effiziente Modellierung von Überschallbrennkammern mit detaillierter Kinetik*. Doktorarbeit, Lehrstuhl

- für Thermodynamik, Fakultät für Maschinenwesen, TU München, 2005.
- [Mah05] MAHLE, I.: *Direct and large-eddy simulation of inert and reacting compressible turbulent shear layers*. Doktorarbeit, Fachgebiet Strömungsmechanik, Fakultät für Maschinenwesen, TU München, 2005.
- [Oda04] ODAM, J.: *Scramjet Experiments using Radical Farming*. Doktorarbeit, Department of Mechanical Engineering, University of Queensland, 2004.
- [Oev00] OEVERMANN, M.: *Numerical investigation of turbulent hydrogen combustion in a Scramjet using flamelet modeling*. *Aerospace Science Technology*, 4:463–480, 2000.
- [PB01] PIRES DA CRUZ, A. und T.A. BARITAUD: *Self-Ignition and Combustion Modeling of Initially Nonpremixed Turbulent Systems*. *Combustion and Flame*, 124:65–81, 2001.
- [Pet94] PETERS, N.: *Turbulente Brenngeschwindigkeit*. Abschlussbericht zum Forschungsvorhaben Pe 241/9-2, RWTH Aachen, 1994.
- [Pet00] PETERS, N.: *Turbulent Combustion*. Cambridge University Press, 2000.
- [Pol04] POLIFKE, W.: *Wärme- und Stoffübertragung*. TU München, Vorlesungs-Manuskript, 2004.
- [Pop79] POPE, S.B.: *The Statistical Theory of Turbulent Flames*. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*, 291(1384):529–568, 1979.
- [Pop97] POPE, S.B.: *Computationally efficient implementation of combustion chemistry using in situ adaptive tabulation*. *Combust. Theory Modelling*, 1:41–63, 1997.
- [Pop00] POPE, S.B.: *Turbulent Flows*. Cambridge University Press, 2000.

- [PTVF92] PRESS, W.H., S.A. TEUKOLSKY, W.T. VETTERLING und P.F. FLANNERY: *Numerical recipes in C: The art of scientific computing*. Cambridge University Press, 1992.
- [PV05] POINSOT, T. und D. VEYNANTE: *Theoretical and Numerical Combustion*. R.T. Edwards, 2. Auflage, 2005.
- [San03] SANDER, T.: *Verlustarme Pilotierung von Überschallflammen durch gasdynamisch optimierte Nebenstrom-Injektoren*. Doktorarbeit, Lehrstuhl für Thermodynamik, Fakultät für Maschinenwesen, TU München, 2003.
- [SD06] SMITS, A.J. und J.P. DUSSAUGE: *Turbulent Shear Layers in Supersonic Flow*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York, 2006.
- [Sig08] SIGLOCH, H.: *Technische Fluidmechanik*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York, 6. Auflage, 2008.
- [Sma07] SMART, M.: *Scramjets*. The Aeronautical Journal, 10:605–619, 2007.
- [Sur06] SURAWEERA, M. V.: *Reduction of skin friction drag in hypersonic flow by boundary layer combustion*. Doktorarbeit, Department of Mechanical Engineering, University of Queensland, 2006.
- [Tur00] TURNS, S. R.: *An introduction to combustion - concepts and applications*. McGraw-Hill Inc., 2 Auflage, 2000.
- [Wag98] WAGNER, S.: *Strömungslehre*. Universität Stuttgart, Vorlesungs-Manuskript, 1998.
- [Wil06] WILCOX, D. C.: *Turbulence Modeling for CFD*. DCW Industries, Inc., 3. Auflage, 2006.
- [WMD01] WARNATZ, J., U. MAAS und R. W. DIBBLE: *Verbrennung*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York, 3. Auflage, 2001.
- [YP98] YANG, B. und S.B. POPE: *An Investigation of the Accuracy of Manifolds Methods and Splitting Schemes in the Computational Implementation of Combustion Chemistry*. Combustion and Flame, 112:16–32, 1998.