

Universität der Bundeswehr München
Fakultät für Luft- und Raumfahrttechnik
Institut für Thermodynamik

**Entwicklung und Evaluierung von
Verbrennungsmodellen für die Large Eddy Simulation
der Hochdruck-Vormischverbrennung**

Dipl.-Ing. Roman Keppeler

Promotionsausschuss:

Vorsitzender: Prof. Dr.-Ing. habil. Markus Klein

1. Berichterstatter: Prof. Dr. rer. nat. Michael Pfitzner

2. Berichterstatter: Prof. Wolfgang Polifke, Ph.D.

Tag der Prüfung: 16. April 2013

Mit der Promotion erlangter akademischer Grad:

Doktor der Ingenieurwissenschaften (Dr.-Ing.)

Neubiberg, den 07. Mai 2013

Vorwort

Die vorliegende Arbeit ist im Rahmen meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Thermodynamik der Universität der Bundeswehr München entstanden. Herrn Prof. Dr. rer. nat. Michael Pfitzner danke ich für die Möglichkeit diese Arbeit anzufertigen und sein Interesse an meiner Arbeit. Herrn Prof. Wolfgang Polifke, Ph.D. danke ich für die Übernahme des Koreferates und Herrn Prof. Dr.-Ing. habil. Markus Klein für die Übernahme des Vorsitzes des Promotionsausschusses.

Herrn apl. Prof. Dr.-Ing. habil. Hans Wengle, i.R. danke ich für die Unterstützung im Zusammenhang mit der Validierung der inkompressiblen LES Löser in OpenFOAM®.

Herzlich bedanken möchte ich mich bei allen Mitarbeitern des Instituts für die gute Stimmung und Zusammenarbeit. Besonders bedanken möchte ich mich bei meinen ehemaligen Bürokollegen Dr.-Ing. Daniel Kliche und Dipl.-Ing. Jan Veith für die fachlichen und interkulturellen Diskussionen sowie den Erörterungen zum Thema Anergie. Herrn Oberingenieur Dr.-Ing. Tobias Sander danke ich für seine Hilfsbereitschaft und Ratschläge in allen Belangen. Dr.-Ing. Eike Tangermann sei herzlich gedankt für die Bereitstellung diverser Löser und Auswerteroutinen und die bei Bedarf sofortige Unterstützung in der Clusteradministration. Dipl.-Ing. Josef Kranawetvogl danke ich für seinen Einsatz und seine Arbeit im Rahmen seiner Studien-, Bachelor- und Masterarbeit.

Meiner Familie und besonders meinen Eltern Irene und Dr.-Ing. Dirk Keppeler danke ich für den Rückhalt und die Unterstützung während dem Studium und der Zeit am Institut, die die vorliegende Arbeit erst ermöglichte.

Meiner Freundin Elisabeth Enghart danke ich für das Verständnis insbesondere im Urlaub und den Wochenenden vor der Fertigstellung der vorliegenden Arbeit.

Kurzzusammenfassung

Magere Vormischverbrennung wird in technischen Anwendungen wie stationären Gasturbinen und Verbrennungsmotoren eingesetzt, um eine Reduktion von Kohlenmonoxid-, Kohlenwasserstoff- und NO_x Emissionen zu erreichen. Numerische Simulationen der Verbrennungsprozesse unterstützen dabei in einem immer weiter zunehmenden Maße den Entwicklungsprozess und erfordern die Bereitstellung geeigneter Verbrennungsmodelle. Maßgebende Einflussgrößen auf die Verbrennung sind u.A. das Turbulenz- und das Druckniveau. Während Verbrennungsmodelle für die häufig verwendeten Reynolds gemittelten Navier-Stokes (RANS) Simulationen gut evaluiert sind, werden im Kontext der Large Eddy Simulation (LES) Verbrennungsmodelle bisher kaum bei unterschiedlichem Druck in Kombination mit variierendem Turbulenzniveau untersucht.

In der vorliegenden Arbeit wird ein algebraisches LES Verbrennungsmodell entwickelt, mit Fokus auf eine korrekte Vorhersage des Druckeinflusses bei unterschiedlichen Turbulenzniveaus. Da Hochdruckflammen durch hydrodynamische Instabilitäten beeinflusst werden können, wird ein Modell entwickelt, das den Einfluss von Landau-Darrieus und thermodynamischen Instabilitäten auf die laminare Flammengeschwindigkeit beschreibt. Ein Kriterium wird definiert, das die Transition von stabilen zu instabilen Flammen charakterisiert und in der LES verwendet werden kann. Da Wärmeverluste in Wandnähe die Verbrennung in technisch relevanten Konfigurationen beeinflussen, werden in der Literatur Modelle identifiziert, die als einfache Erweiterungen für algebraische LES-Verbrennungsmodelle den Einfluss von Wärmeverlusten auf die Reaktionsrate berücksichtigen.

Das Modell für hydrodynamische Instabilitäten wird anhand der LES von expandierenden Kugelflammen bei unterschiedlichen Drücken und dem Vergleich mit experimentellen Daten validiert. Das neue turbulente Verbrennungsmodell sowie zwei weitere Verbrennungsmodelle werden anhand einer turbulenten Bunsenflamme, die Betriebspunkte ottomotorischer Verbrennung abbildet, evaluiert. Dabei kann nur das in dieser Arbeit entwickelte Verbrennungsmodell bei erhöhtem Druck die experimentellen Daten reproduzieren. Dies zeigt, dass algebraische Verbrennungsmodelle bei erhöhtem Druck bereits bei gering bis moderat turbulenter Strömung eine deutliche Faltung der Flamme im Feinstrukturbereich vorhersagen müssen, um die ottomotorische Verbrennung korrekt simulieren zu können. LES einer turbulenten Strahl Flamme bei Betriebspunkten, die der Verbrennung in einer stationären Gasturbine entsprechen, ergeben für das neue Verbrennungsmodell sowie die zwei weiteren evaluierten Verbrennungsmodelle eine gute Übereinstimmung mit dem Experiment und eine gute Druckskalierung. Bei hoch turbulenten Flammen ist damit genügend Feinstruktur-Turbulenz vorhanden, um auch bei hohem Druck einen ausreichenden Einfluss der beiden zusätzlich evaluierten Verbrennungsmodelle vorherzusagen. Die Erweiterungen zur Berücksichtigung der Flamme-Wand Interaktion werden anhand von LES eines nichtadiabaten Dralldrallbrenners evaluiert. Charakteristische Wandabstände aus der Literatur für erste Wärmeverluste und thermisches Verlöschten können reproduziert werden. Zudem führt die Berücksichtigung der Flamme-Wand Interaktion zu einer verbesserten Übereinstimmung der Simulationsergebnisse mit dem Experiment, verglichen mit einer LES bei Vernachlässigung von Wärmeverlusten.

Abstract

To reduce carbon monoxide, hydrocarbon and NO_x emissions, lean premixed combustion is employed in technical applications like stationary gas turbines and internal combustion engines (ICE). Numerical simulations of the turbulence-combustion interaction support the process of development which requires a suitable modelling of the turbulent combustion. While Reynolds averaged Navier-Stokes simulations are state of the art, in the context of the new Large Eddy Simulation (LES) concept the evaluation of combustion models usually focuses on influence of turbulence, neglecting the pressure influence predicted by the combustion model.

Hence, in this work an algebraic premixed combustion model is derived with focus on a correct prediction of pressure scaling at varying turbulence levels. Since high pressure flames might be influenced by Landau-Darrieus and thermodiffusive instabilities, a model is derived which includes effects of these instabilities on the laminar flame speed. Finally, extensions are identified in the literature which allow to account for flame wall interaction effects.

The instability model is successfully validated against experimental data via LES of spherical expanding flames at different pressure levels. LES of a turbulent Bunsen flame, employing the new and two additional combustion models, at different pressure and turbulence levels is performed, to evaluate the models at conditions typical for ICEs. Only the new model can predict the pressure scaling of the experimental database, while the two additional models cannot predict an increased subgrid scale (sgs) flame wrinkling at moderate Reynolds number combustion at elevated pressure. LES of a highly turbulent jet flame employing the new and again two additional models, at conditions typical for stationary gas turbines, show a good performance of the three models compared with experimental data. This indicates, that at high turbulence levels and distinct shear layers, sufficient sgs turbulence is provided for the two additional models to predict a suitable sgs flame wrinkling. A non adiabatic swirl burner is simulated to evaluate the flame wall interaction models. A considerable improvement of the simulation results compared with experimental data is obtained, when effects of flame wall interaction on the combustion are included.

Inhaltsverzeichnis

Nomenklatur	V
1 Einleitung	1
1.1 Motivation	1
1.2 Übersicht zur Modellierung turbulenter Hochdruckverbrennung	2
1.2.1 Turbulenzmodellierung	2
1.2.2 Verbrennungsmodellierung im RANS Kontext	2
1.2.3 Verbrennungsmodellierung im LES Kontext	3
1.3 Gliederung der Arbeit	4
2 Grundlagen reaktiver Strömung	6
2.1 Erhaltungsgleichungen reaktiver Strömung	6
2.1.1 Massenerhaltung	6
2.1.2 Impulserhaltung	6
2.1.3 Spezieserhaltung	7
2.1.4 Energieerhaltung	7
2.1.5 Zustandsgleichungen und Stoffeigenschaften	8
2.2 Grundlagen turbulenter Strömung	9
2.2.1 Charakterisierung turbulenter Strömung	9
2.2.2 Beschreibung turbulenter Strömung	10
3 Berechnung turbulenter Strömung	13
3.1 Direkte Numerische Simulation	13
3.2 Reynolds gemittelte Navier Stokes Gleichungen	13
3.3 Large Eddy Simulation	14
3.3.1 Filterung	15
3.3.2 Grundgleichungen	15
3.3.3 Berechnung der aufgelösten Turbulenz	16
3.3.4 Schließungsmodelle	17
3.3.5 Wanddämpfungsfunktionen	18
3.3.6 Validierung der Feinstrukturmodelle für wandgebundene Strömung	19

4	Grundlagen vorgemischter Verbrennung	24
4.1	Laminare Vormischflammen	24
4.1.1	Beschreibung laminarer Vormischflammen	24
4.1.2	Einfluss von Streckeffekten auf die laminare Flammengeschwindigkeit	29
4.1.3	Landau-Darrieus und thermodiffusive Instabilitäten	31
4.2	Turbulente Vormischflammen	37
4.2.1	Beschreibung turbulenter Vormischflammen	37
4.2.2	Kennzahlen turbulenter Vormischverbrennung	39
4.2.3	Regimediagramme	40
5	Modellierung turbulenter Vormischverbrennung für die LES	44
5.1	Reaktionsfortschrittsvariable	44
5.2	Übersicht der Modellierungsansätze des Reaktionsquellterms	45
5.2.1	Methode der künstlich vergrößerten Flammendicke	45
5.2.2	Schließungsmodelle für die turbulente Flammengeschwindigkeit	46
5.2.3	Level Set Formulierung	47
5.2.4	Flammenoberflächendichte Formulierung	47
5.2.5	Flammenfaltungs Formulierung	53
5.2.6	Folgerungen für die Modellierung des Reaktionsquellterms	54
5.3	Modellierung des skalaren Flusses	54
5.4	Modellierung von Streckeffekten auf die laminare Flammengeschwindigkeit	55
5.5	Flamme-Wand Interaktion	56
5.5.1	Grundlagen der Flamme-Wand Interaktion	57
5.5.2	Modellierung der Flamme-Wand Interaktion	58
5.6	Modellierung kombinierter Landau-Darrieus und thermodiffusiver Instabilitäten	61
5.6.1	Numerische und experimentelle Untersuchungen	61
5.6.2	Zusammenfassung von Modellierungskonzepten	63
5.6.3	Folgerungen für die Modellierung hydrodynamischer Instabilitäten	67
6	Formulierung eines algebraischen, fraktalen Verbrennungsmodells	68
6.1	Modellierungsbasis	68
6.1.1	Auswahl der Modellierungsbasis	68
6.1.2	Fraktales Basismodell	69
6.2	Modellierung der größten Faltungslänge ϵ_0	69
6.3	Modellierung der kleinsten Faltungslänge ϵ_i	70
6.4	Modellierung der fraktalen Dimension	71
6.5	Modellierung der turbulenten Flammendicke	74
6.6	Zusammenfassende Formulierung des Verbrennungsmodells	75
7	Formulierung eines Modells für hydrodynamische Instabilitäten	77
7.1	Validierung der Dispersionsrelation	77
7.2	Modellierung der instabilen, laminaren Flammengeschwindigkeit	78
7.3	Modellierung kritischer Deformationsraten	81

7.4	Berücksichtigung von Landau-Darrieus Instabilitäten in turbulenter Verbrennung	82
8	Ergebnisse und Diskussion	83
8.1	Simulation einer 1-D Konfiguration	83
8.1.1	Numerische Diskretisierung	83
8.1.2	Simulation einer stationären Flamme	84
8.1.3	Simulation einer propagierenden Flamme	85
8.2	Evaluierung des Modells für hydrodynamische Instabilitäten	88
8.2.1	Beschreibung des Experiments	88
8.2.2	Modellierung und Simulation	89
8.2.3	Vergleich Simulation Experiment	92
8.2.4	Bewertung der Modelle zur Berücksichtigung hydrodynamischer Instabilitäten	97
8.3	Simulation einer turbulenten Bunsenbrennerflamme	98
8.3.1	Beschreibung des Experiments	98
8.3.2	Modellierung und Simulation	100
8.3.3	Evaluierung des neuen FSD Modells bei Variation der Filterweite	105
8.3.4	Untersuchung der turbulenten Flammengeschwindigkeit	111
8.3.5	Bewertung des neuen FSD Modells	117
8.3.6	Untersuchung des Einflusses von LD- und TD-Instabilitäten	118
8.4	Simulation einer turbulenten Jetflamme	120
8.4.1	Beschreibung des Experiments	120
8.4.2	Modellierung und Simulation	121
8.4.3	Vergleich Simulation-Experiment	123
8.5	Simulation eines nicht-adiabaten Drallbrenners	136
8.5.1	Beschreibung des Experiments	136
8.5.2	Modellierung und Simulation	136
8.5.3	Evaluierung der FWI-Modelle	138
8.5.4	Vergleich Experiment-Simulation	141
8.5.5	Bewertung der Modelle zur Berücksichtigung von Flamme-Wand Interaktion	143
9	Zusammenfassung	146
	Literaturverzeichnis	149
	Abbildungsverzeichnis	161
	Tabellenverzeichnis	168
A	Anhang	169
A.1	Zusammenfassung der formulierten Modelle	169
A.1.1	Algebraisches, fraktales Verbrennungsmodell	169
A.1.2	Modell für hydrodynamische Instabilitäten	169

A.2	Gleichungen zur Berechnung kugelförmiger Flammen	171
A.3	KPP-Analyse	172
A.4	Berechnung kritischer Streckraten	172

Nomenklatur

lateinische Buchstaben

A	m^2	Flammenoberfläche
\tilde{A}_{HL}	–	Wärmeverlustparameter
\mathcal{A}	–	entdimensionierte Amplitude einer Störung
b	–	Temperaturrexponent
B_k	$kg/(m^3s)$	Arrhenius Konstante
c	–	Reaktionsfortschrittsvariable
c_p	$J/(kgK)$	spezifische Wärmekapazität
C_k	–	Kolmogorov Konstante
C_R	–	Reaktionskonstante
C_s	–	Instabilitätsfaktor
C_S	–	Smagorinsky Konstante
D	–	fraktale Dimension
E	–	Effizienzfunktion im “Thickened Flame” Kontext
E_a	J/mol	Aktivierungsenergie
f	–	Instabilitätsfaktor für Bradley Modell
f_j	m/s^2	Volumenkraft
F	–	Filter
F_F	–	Aufdickungsfaktor
\mathcal{F}	–	Funktion zur Beschreibung der turbulenten Flammendicke
G	–	Indikator der Flammenfront
h	m^2/s^2	Enthalpie
i	m	Zellweite
I	%	turbulente Intensität
j	$kg/(m^2s)$	molekulare Speziesdiffusion
k	m^2/s^2	turbulente kinetische Energie
k_Λ	$1/m$	Wellenzahl
K	m^3/s^2	mittleres Energiespektrum
l	m	Längenmaß
l_F	m	laminare Flammendicke
L	m	Kantenlänge eines Kontrollvolumens
LES_IQ_k	–	Index für LES Qualität

La		Markstein Länge
m	kg	Gesamtmasse
\dot{m}	kg/s	Massenstrom
M	g/mol	molare Masse
Ma	–	Markstein Zahl
Ma_c	–	Markstein Zahl der Krümmung
Ma_s	–	Markstein Zahl der Deformationsrate
Ma_{sr}	–	Markstein Zahl der Deformationsrate für Brennrate
n_i	–	Normalenvektor
n_{sp}	–	sphärische Wellenzahl
p	$kg/(m^2)$	Druck
p_c	m	Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion
P_c	–	Wahrscheinlichkeitsfunktion
q_i	W/m^2	Energiefluss
$q_{i,h}$	W/m^2	Wärmediffusion
\dot{Q}	$kg/(m^3)$	Wärmequelle
r	m	Radius
\Re	$J/(molK)$	allgemeine Gaskonstante
s_d	m/s	Relativgeschwindigkeit Flamme-Strömung
s_L^0	m/s	ungestreckte laminare Flammgeschwindigkeit
s_L	m/s	gestreckte laminare Flammgeschwindigkeit
s_t	m/s	turbulente Flammgeschwindigkeit
S_{ij}	$1/s$	Schubspannungstensor
S_n	m/s	Ausbreitungsgeschwindigkeit der Flamme
t	s	Zeit
T	K	Temperatur
T_a	K	Aktivierungstemperatur
u'	m/s	turbulente Schwankung
u_i	m/s	Geschwindigkeit
u_τ	m/s	Schubspannungsgeschwindigkeit
U	m/s	mittlere Geschwindigkeit
V	m^3	Volumen
W	–	beliebige Größe
x_i	m	räumliche Koordinaten i
y	m	Wandabstand
y^+	–	Wandabstand
Y	–	Massenbruch
z	m	Flamennormalenrichtung
Ze	–	effektive Zel'dovich Zahl

griechische Buchstaben

α	m^2/s	Diffusionskoeffizient
β_{Zel}	–	Zel'dovich Zahl
γ	–	Wärmefreisetzungsfaktor
Γ	–	Effizienzfunktion
δ	m	halbe Kanalhöhe
δ_t	m	turbulente Flammendicke
Δ	m	Filterweite
Δ_t^+	–	Filterweite
ε	m^2/s^3	turbulente Dissipationsrate
ϵ	m	Faltungslänge
κ	$1/s$	Streckrate
κ_s	$1/s$	Deformationsrate
κ_c	$1/s$	Krümmungsrate
λ	$W/(mK)$	Wärmeleitfähigkeit
Λ	m	Wellenlänge
Λ_{sp}	–	sphärische Wellenlänge
μ	$kg/(ms)$	dynamische Viskosität
ν	m^2/s	kinematische Viskosität
ξ	–	entdimensionierte Flammennormalenrichtung
Ξ	–	Flammenfaltungsfaktor
φ	$^\circ$	Winkel
Φ	–	Äquivalenzverhältnis
ρ	kg/m^3	Dichte
σ	$1/s$	Wachstumsrate von Instabilitäten
σ_s	$1/s$	Wachstumsrate von Instabilitäten bei Deformation
Σ	m^2/m^3	Flammenoberflächendichte
τ_c	s	chemisches Zeitmaß
τ_{ij}	$kg/(ms^2)$	viskoser Anteil Scherspannungstensor
τ_t	s	turbulentes Zeitmaß
Ψ	–	Instabilitätsfunktion
$\dot{\omega}$	$kg/(m^3s)$	Reaktionsrate
Ω_V	m^3	beliebiger Raum

Indizes

ax	axiale Richtung
A	Oberfläche
b	verbrannt
B	Blint
c	chemisch bzw. Reaktionsfortschritt
cl	kritisch
eff	effektiv
exp	experimentell
G	Gibson
Geo	Geometrie
k	Spezies
i	kleinstes Maß
$Inst$	instabil
I	Einflusszone
l	größtes
LD	Landau Darrieus
m	mangelnd bzw. maximal
n	neutral
o	größtes Maß
OC	Obukhov-Corrsin
q	verlöschen
res	aufgelöst
s	kleinstes
t	turbulent
th	thermisch bzw. theoretisch
tot	total
u	unverbrannt
$ü$	überschüssig
w	Wand
Δ	Feinstrukturbereich

Operatoren

δ_{ij}	Kronecker Symbol
∇	Nabla Operator
$\langle \rangle$	Mittelung
$\bar{\quad}$	Reynolds Filterung/Mittelung
\sim	Favre Filterung/Mittelung

Kennzahlen

Co	$= u\Delta t/\Delta$	Courant/CFL Zahl
Da	$= \tau_t/\tau_c$	Damköhler Zahl
Ka	$= l_F^2/l_\eta^2$	Karlovitz Zahl
Le	$= \alpha_{th}/\alpha_k$	Lewis Zahl
Pe_r	$= r/l_F$	Peclet Zahl für den Radius
Pe_w	$= y/l_F$	Peclet Zahl für den Wandabstand
Pr	$= \mu c_p/\lambda$	Prandtl Zahl
Re	$= ul/\nu$	Reynolds Zahl
Re_t	$= u'l_t/\nu$	turbulente Reynolds Zahl
Re_t	$= u'l_t/(s_L^0 l_F)$	turbulente Reynolds Zahl bei Flammen
Sc	$= \mu/(\rho\alpha_k)$	Schmidt Zahl

Abkürzungen

CFD	numerische Strömungsmechanik
CFR	Regime gefalteter Flammen, “corrugated flamelet regime”
DNS	Direkte Numerische Simulation
FIST	Flamme-Wand Interaktionsmodell nach Poinso et al. [133]
FSD	Flammenoberflächendichte
FWI	Flamme-Wand-Interaktion
KPP	Kolmogorov-Petrvski-Piskunov
LD	Landau-Darrieus
LES	Large Eddy Simulation
PDF	Wahrscheinlichkeitsfunktion
PIV	Particle Image Velocimetry
PLIF	Planar Laser Induced Fluorescence
RANS	Reynolds gemittelte Navier-Stokes Gleichungen
TD	Thermodiffusiv
TRZ	Regime verdickt, gefalteter Flammenfront, “thin reaction zones regime”

1 Einleitung

1.1 Motivation

Der Anteil fossiler Brennstoffe am weltweiten Verbrauch von Primärenergie lag 2011 bei ca. 80% [1]. Szenarien zur Entwicklung des Primärenergieverbrauchs für 2035 gehen von einer weiteren Steigerung des Energieverbrauchs aus, bei gleichbleibendem Anteil fossiler Brennstoffe [1]. Vor dem Hintergrund einer zunehmenden Rohstoffknappheit erfordert dies die stetige Weiterentwicklung von effizienten Verbrennungssystemen wie Gasturbinen oder Verbrennungsmotoren. Aber auch Verbrennungskonzepte müssen weiterentwickelt werden, um NO_x und CO Emissionen zu reduzieren.

In einem immer weiter zunehmenden Maße begleiten numerische Simulationen den Entwicklungsprozess und erlauben detaillierte Untersuchungen des Verbrennungsprozesses. Der Einsatz von numerischen Simulationen stellt eine sowohl meist kostengünstige als auch zeitsparende Alternative zu experimentellen Prüfständen dar. Die Simulation der Verbrennung in technisch relevanten Konfigurationen erfordert allerdings die Bereitstellung von Modellen, die die Verbrennungsvorgänge geeignet beschreiben. In der Verbrennungsmodellierung wird dabei zwischen zwei idealisierten Verbrennungsprozessen unterschieden.

Bei den Diffusionsflammen, typischerweise in Fluggasturbinen oder Dieselmotoren werden Brennstoff und Oxidator separiert der Brennkammer zugeführt. Die Verbrennung ist dabei dominiert durch den Diffusionsprozess der Reaktanten.

Bei der Vormischverbrennung geht man davon aus, dass Brennstoff und Oxidator bereits vor Beginn des Verbrennungsprozesses perfekt vorgemischt sind. Dieses Verbrennungskonzept findet man in technischen Anwendungen wie stationären Gasturbinen und meist bei ottomotorischer Verbrennung.

Die vorliegende Arbeit beschäftigt sich mit der Modellierung und Simulation der Vormischverbrennung.

Eine charakteristische Eigenschaft der Verbrennung in Ottomotoren und stationären Gasturbinen, ist die Verbrennung mit turbulenter Flamme. Zudem ist die Verbrennung in Ottomotoren durch den variierenden Druck beeinflusst. Aber auch stationäre Gasturbinen können bei hohem Druck betrieben werden, um die Leistungsabgabe zu steigern. Im Hinblick auf die technische Anwendung sind damit wesentliche Einflussgrößen auf den Verbrennungsprozess der Turbulenzeinfluss und das Druckniveau in der Brennkammer. Den Einfluss beider Parameter muss ein Verbrennungsmodell unabhängig von der Konfiguration richtig wiedergeben können.

Die vorliegende Arbeit konzentriert sich daher auf die Entwicklung und Evaluierung von Verbrennungsmodellen im Kontext der Hochdruckverbrennung.

1.2 Übersicht zur Modellierung turbulenter Hochdruckverbrennung

1.2.1 Turbulenzmodellierung

Die Simulation technisch relevanter turbulenter Verbrennung erfordert zunächst die Bereitstellung geeigneter Turbulenzmodelle zur Beschreibung der Turbulenz des Strömungsfeldes. Zudem beinhalten Verbrennungsmodelle Turbulenz beschreibende Größen, die ebenfalls über Turbulenzmodelle bereitgestellt werden müssen. Hierbei werden RANS (Reynolds gemittelte Navier Stokes) Modelle verwendet, welche die Zeit- (Ensemble-) gemittelten Erhaltungsgleichungen des Strömungsfeldes lösen oder Grobstruktursimulationen (LES), die das gefilterte Geschwindigkeitsfeld lösen. Da RANS Simulationen deutlich weniger Rechenzeit benötigen, werden sie meist für technische Anwendungen eingesetzt. Nachteil der RANS ist, dass nur ein gemittelttes Strömungsfeld berechnet wird, während die turbulente Verbrennung ein hoch instationärer Prozess ist. In der RANS Simulation der Vormischverbrennung beschreibt beispielsweise die simulierte Temperaturverteilung nur die Wahrscheinlichkeit der Flammenposition. Dies hat mitunter zur Folge, dass die RANS kein kurzzeitiges Berühren der Wand durch die Flamme, verbunden mit einem hohen Wärmestrom vorhersagen kann, sondern nur eine Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Flamme in Wandnähe.

Grobstruktursimulationen lösen hingegen die dreidimensionale und instationäre Struktur der großen Skalen turbulenter Verbrennung auf und können die instantane, statistische Struktur und Position der Flamme vorhersagen. Die in den letzten Jahren stark gestiegene Rechenleistung unterstützt die Verwendung von LES. Allerdings sind Verbrennungssimulationen im LES Kontext immer noch Stand der gegenwärtigen Forschung [134]. Da die LES die mit der RANS verbundenen Unsicherheiten bzgl. der Beschreibung des turbulenten Strömungsfeldes minimiert, konzentriert sich diese Arbeit auf die LES turbulenter Verbrennung.

1.2.2 Verbrennungsmodellierung im RANS Kontext

Da für technische Anwendungen meist RANS Simulationen eingesetzt werden, sind die Verbrennungsmodelle bisher auch hauptsächlich im RANS Kontext entwickelt und evaluiert worden. Auch wenn der Großteil der Arbeiten in der Literatur RANS Verbrennungsmodelle hinsichtlich des Turbulenzeinflusses untersucht, konzentrieren sich einige Arbeiten auf eine Modellanalyse hinsichtlich des Druckeinflusses. So evaluieren Lipatnikov und Chomiak [106] sowie Pieringer et al. [130], das Verhalten von RANS Verbrennungsmodellen bzgl. Turbulenz- und auch Druckeinfluss. In [106] werden unter anderem das turbulente Flammengeschwindigkeitsmodell von Zimont [163], das fraktale Modell von Gouldin [63], eine Korrelation für die turbulente Flammengeschwindigkeit von Peters [127] sowie eine algebraische Formulierung aus einer KPP (Kolmogorov-Petrvski-Piskunov) Analyse des “Coherent Flame Modells” (CFM) aus Duclos et al. [47] experimentellen Daten gegenüber-

gestellt. Dabei werden die algebraischen Formulierungen der Modelle ausgewertet und keine numerischen Simulationen durchgeführt. Die Abschätzung zeigt, dass Verbrennungsmodelle zumeist den Turbulenzeinfluss gut wiedergeben können, den korrekten Druckeinfluss jedoch nur das Zimont Modell und die algebraische Formulierung des CFM Modells wiedergeben kann. RANS Simulationen im Kontext der turbulenten Hochdruckverbrennung werden von Brandl et al. [22] mit dem Lindstedt-Vaós Modell [105] sowie von Muppala et al. [121] mit einem modifizierten Lindstedt-Vaós Modell [105] durchgeführt. In [121] wird allerdings gezeigt, dass das verwendete Verbrennungsmodell eine explizite Druckkorrektur benötigt, um den experimentell beobachteten Druckeinfluss zu erreichen. Andererseits zeigen RANS Simulationen von Angelberger et al. [8] unter Verwendung des CFM-Modells sowie die Arbeit von Watkins et al. [154] unter Verwendung eines algebraischen Modells, dass die verwendeten Modelle zumindest den globalen Druckanstieg in einem Verbrennungsmotor gut reproduzieren können.

1.2.3 Verbrennungsmodellierung im LES Kontext

Auch wenn die LES aufgrund der stark gestiegenen Rechenleistung der letzten Jahre immer weiter verbreitet ist, werden LES Verbrennungsmodelle bezüglich ihres Verhaltens in Hochdrucksystemen kaum untersucht. In der kürzlich veröffentlichten Arbeit von Xiao et al. [159], wird die Entwicklung tulpenförmiger Flammen in einem geschlossenen Rohr simuliert. Verwendet wird ein algebraisches Modell von Molkov [117] das die Druckerhöhung in der Brennkammer von $1bar$ auf $5bar$ dem Experiment entsprechend für 1 Turbulenzniveau gut wiedergeben kann. Im Rahmen ottomotorischer Verbrennung evaluieren Richard et al. [139] ein Transportmodell zur Beschreibung der Turbulenz-Flamme Interaktion sowie ein modifiziertes algebraisches Modell von Boger et al. [14] um die Verbrennung in einem Motor im Druckbereich von $3 - 25bar$ zu simulieren. Der globale Druckverlauf eines Kolbenhubs über dem Kurbelwinkel liegt stets innerhalb der minimalen und maximalen Druckverläufe im Experiment, die allerdings bis zu $10bar$ auseinander liegen. Large Eddy Simulationen mehrerer Zyklen des Verbrennungsmotors mit dem Transportmodell wurde in Vermorel [149] veröffentlicht und zeigen eine große Variation der Druckverläufe pro Zyklus, die stets innerhalb des Druckbereichs des Experiments liegen. Die Evaluierung eines LES-Verbrennungsmodells für hohen Druck und für Gasturbinen typische Betriebspunkte ist in Duwig et al. [49] für 1 Turbulenzniveau zu finden.

Ein besseres Verständnis der Hochdruckverbrennung im LES Kontext erfordert die Simulation weiterer unterschiedlicher Konfiguration, bei einer großen Variation des Druck- und Turbulenzniveaus. Zudem muss ein Verbrennungsmodell hinsichtlich seiner Eignung sowohl für ottomotorische Verbrennung als auch Verbrennung in stationären Gasturbinen untersucht werden. Da die Arbeiten im RANS Kontext zeigen, dass Verbrennungsmodelle nicht grundsätzlich die korrekte Druckabhängigkeit vorhersagen, wird in dieser Arbeit ein algebraisches Modell entwickelt mit Fokus auf eine korrekte Vorhersage der Druckabhängigkeit. Ein weiteres bei Hochdruckverbrennung zu berücksichtigendes Phänomen sind hydrodynamische Instabilitäten. So zeigen Flammen bei hohem Druck die Tendenz durch Instabilitäten gefaltet zu werden und dadurch zelluläre Strukturen aufzuweisen, was den Verbrennungsprozess deutlich beeinflussen kann [68, 89, 90]. Während dieses Phänomen im RANS

Kontext in den Verbrennungsmodellen von Paul und Bray [125], Bychkov [28], Bradley et al. [22] und Kuznetsov [99] berücksichtigt wird, ist in der Literatur keine Modellierung der Instabilitäten im LES-Kontext zu finden. Ein Modell wird daher formuliert, das den Einfluss hydrodynamischer Instabilitäten auf die laminare Flammengeschwindigkeit berücksichtigt.

1.3 Gliederung der Arbeit

Laminare als auch turbulente Verbrennungsprozesse werden über die Erhaltungsgleichungen für Masse, Energie, Impuls und Spezies beschrieben. Diese werden in Kapitel 2 zusammengefasst und im Hinblick auf Verbrennungssimulationen diskutiert. Zudem werden Eigenschaften der technisch relevanten, turbulenten Strömung dargelegt.

Die Berechnung und Modellierung turbulenter Strömung wird in Kapitel 3 beschrieben. Da sich die Arbeit auf die Grobstruktursimulation konzentriert, wird dieser Ansatz ausführlicher diskutiert.

Die zum Verständnis der Modellierung turbulenter und laminarer Vormischverbrennung benötigten Grundlagen werden in Kapitel 4 beschrieben.

In Kapitel 5 werden Ansätze zur Modellierung der Vormischverbrennung im LES-Kontext diskutiert. Die Modellierung der laminaren Flammengeschwindigkeit wird beschrieben, sowie Modellierungsmöglichkeiten dargelegt, welche die Interaktion der Flamme mit einer Wand berücksichtigen. Zudem werden RANS Modelle zusammengefasst und Ansätze diskutiert, die hydrodynamische Instabilitäten bei turbulenter und laminarer Verbrennung berücksichtigen.

In dieser Arbeit werden algebraische, fraktale Verbrennungsmodelle als eine der geeignetsten Ansätze erachtet, um Verbrennungsprozesse im LES-Kontext zu beschreiben. Ein solches Modell wird in Kapitel 6 basierend auf theoretischen Analysen, experimentellen Daten und direkten numerischen Simulationen formuliert.

In Kapitel 7 wird ein Modell formuliert, das den Einfluss hydrodynamischer Instabilitäten auf die laminare Flammengeschwindigkeit berücksichtigt.

Die entwickelten Modelle werden in Kapitel 8 evaluiert. Das Modell zur Berücksichtigung hydrodynamischer Instabilitäten wird an experimentellen Daten expandierender, laminarer Kugelflammen validiert. Prinzipielle Eigenschaften des neuen turbulenten Verbrennungsmodells werden zunächst an einer 1D Konfiguration untersucht. Large Eddy Simulationen der Kobayashi Datenbank sowie dem Laborbrenner des Paul-Scherrer Instituts (PSI) werden schließlich unter Verwendung des neuen Verbrennungsmodells sowie zwei weiteren algebraischen Verbrennungsmodellen durchgeführt. Die Kobayashi Datenbank entspricht einer turbulenten Bunsenbrennerflamme bei unterschiedlichen Druck- und

1.3 Gliederung der Arbeit

Turbulenzniveaus, die typische Betriebspunkte ottomotorischer Verbrennung abbilden. Der PSI Brenner entspricht einer turbulenten Strahl-Flamme, deren Betriebspunkte der Verbrennung in stationären Gasturbinen entsprechen. Zur Evaluierung des neuen Modells an einer technisch relevanten Konfiguration sowie zur Untersuchung von Erweiterungen die die Flamme-Wand-Interaktion berücksichtigen, werden LES eines nichtadiabaten Drallbrenners durchgeführt.

Rückschlüsse aus den Simulationen sowie Empfehlungen für zukünftige Arbeiten sind in Kapitel 9 zusammengefasst.

2 Grundlagen reaktiver Strömung

2.1 Erhaltungsgleichungen reaktiver Strömung

Inkompressible, isotherme Strömungen können über die Erhaltungsgleichungen für die Masse und den Impuls beschrieben werden. Diese werden als Navier-Stokes Gleichungen bezeichnet. Für reaktive Strömungen müssen zudem die Spezieserhaltung als auch die Energieerhaltung berücksichtigt werden. Die Erhaltungsgleichungen können der Eulerschen Betrachtungsweise folgend, durch die Bilanzierung an einem infinitesimalen Kontrollvolumen formuliert werden.

2.1.1 Massenerhaltung

Aufgrund der Massenerhaltung kann in einem betrachteten System die Masse m weder generiert, noch abgebaut werden. Die Massenbilanz an einem Volumenelement zeigt, dass damit die zeitliche Änderung der Dichte in einem Kontrollvolumen dem konvektiven Transport der Masse entsprechen muss:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (2.1)$$

Als mathematische Schreibweise wird die Eulersche Summenkonvention verwendet.

2.1.2 Impulserhaltung

Neben dem konvektiven Transport müssen Oberflächenkräfte wie der Druck p oder die viskosen Spannungen τ_{ij} als auch Volumenkräfte f_j wie die Gravitation bei der Impulsbilanzierung an einem Kontrollvolumen berücksichtigt werden:

$$\frac{\partial \rho u_j}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j u_i}{\partial x_i} = \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_i} - \frac{\partial p}{\partial x_j} + \rho f_j \quad (2.2)$$

Die viskosen Spannungen werden dabei über das Newtonsche Gesetz modelliert:

$$\tau_{ij} = 2\mu S_{ij} - \frac{2}{3}\mu \delta_{ij} \frac{\partial u_m}{\partial x_m} \quad (2.3)$$

mit dem Scherspannungstensor

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (2.4)$$

der molekularen Viskosität μ und dem Kronecker-Delta δ_{ij} . Werden inkompressible Fluide betrachtet, wird der zweite Summand in Gleichung (2.3) zu Null.

2.1.3 Spezieserhaltung

Bei reaktiver Strömung wird das Gas als Mischung mehrerer Spezies der Anzahl N betrachtet. Jede Spezies ist charakterisiert durch ihren Massenbruch:

$$Y_k = \frac{m_k}{m} \quad (2.5)$$

wobei gilt:

$$\sum_{k=1}^N Y_k = \sum_{k=1}^N \frac{m_k}{m} = 1 \quad (2.6)$$

Bilanziert man Y_k an einem Kontrollvolumen, muss aufgrund lokaler Konzentrationsunterschiede molekulare Diffusion j_i^k als auch der Abbau oder Produktion von Y_k aufgrund der Reaktionsrate $\dot{\omega}_k$ berücksichtigt werden. Die Bilanzgleichung einer Spezies schreibt sich damit zu:

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i Y_k}{\partial x_i} = -\frac{\partial j_i^k}{\partial x_i} + \dot{\omega}_k \quad (2.7)$$

Aufgrund von Gleichung (2.6) müssen $N - 1$ Erhaltungsgleichungen der Spezies gelöst werden. Das Fick'sche Gesetz wird meist verwendet um die Diffusionsgeschwindigkeit zu modellieren.

$$j_i^k = -\rho \alpha_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_i} \quad (2.8)$$

mit dem Diffusionskoeffizienten der Spezies α_k . Das Verhältnis von Diffusion des Impulses zur Speziesdiffusion beschreibt die Schmidt Zahl:

$$Sc_k = \frac{\mu}{\rho \alpha_k} \quad (2.9)$$

2.1.4 Energieerhaltung

Die Energieerhaltung kann bilanziert werden über die totale Enthalpie (oder Energie), die Enthalpie (oder Energie), die "fühlbare" Enthalpie (oder Energie) sowie über die Temperatur. Poinot und Veynante [134] sowie Gerlinger [58] fassen die unterschiedlichen Erhaltungsgleichungen für die Energie zusammen. In dem in dieser Arbeit verwendeten CFD-Code OpenFOAM®-1.6 wird eine vereinfachte Erhaltungsgleichung der Enthalpie h gelöst. Eine ausführliche Enthalpiegleichung wird daher zunächst aufgeführt und mögliche Vereinfachungen werden diskutiert. Die Enthalpie h unterscheidet sich von der total Enthalpie h_{tot} über:

$$h = h_{tot} - \frac{u_i u_i}{2} \quad (2.10)$$

Unter Berücksichtigung der Erwärmung aufgrund viskoser Spannungen τ_{ij} , der Wärmestromdichte q_i , einer Wärmequelle \dot{Q} (z.B. Zündfunke oder Strahlung) sowie den Volumenkräften f_i bilanziert man h zu:

$$\frac{\partial \rho h}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i h}{\partial x_i} = \frac{Dp}{Dt} - \frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \dot{Q} + \rho u_i f_i \quad (2.11)$$

Die Wärmestromdichte q_i wird hauptsächlich durch die Wärmeleitung und die Diffusion dominiert:

$$q_i = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} - \sum_{k=1}^N h_k \rho \alpha_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_i} \quad (2.12)$$

mit dem Fourier'schen Gesetz für die Wärmeleitung und dem Fick'schen Gesetz (2.8) für die Speziesdiffusion. Der Zusammenhang von h und h_k wird in Gleichung 2.18 definiert. Häufig beschreibt man allerdings Gleichung (2.12) über den Gradienten der Enthalpie und damit über [58, 151]:

$$q_i = -\frac{\lambda}{c_p} \frac{\partial h}{\partial x_i} + \mu \sum_{k=1}^N \left(\frac{\lambda}{\rho c_p \alpha_k} - 1 \right) \frac{1}{Sc_k} h_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_i} \quad (2.13)$$

Der Term $\lambda/(\rho c_p \alpha_k)$ in Gleichung (2.13) wird als Lewis Zahl Le_k bezeichnet:

$$Le_k = \frac{\lambda}{\rho c_p \alpha_k} = \frac{\alpha_{th}}{\alpha_k} \quad (2.14)$$

und beschreibt das Verhältnis von Wärmediffusion zu Massen- bzw. Speziesdiffusion. Eine häufige Annahme in der Modellierung ist $Le_k = 1$, womit der zweite Term in Gleichung (2.13) entfällt. Nimmt man geringe Strömungsgeschwindigkeiten an, kann zudem der Einfluss viskoser Spannungen vernachlässigt werden [58]. Das Verhältnis von Impulsdiffusion zu Wärmetransport wird über die Prandtl Zahl beschrieben:

$$Pr = \frac{\mu c_p}{\lambda} \quad (2.15)$$

2.1.5 Zustandsgleichungen und Stoffeigenschaften

Die in den Erhaltungsgleichungen verwendeten Zustandsgrößen wie Druck, Temperatur und Dichte müssen geeignet beschrieben werden. Unter der Annahme von idealem Gas wird der Zusammenhang von Druck, Temperatur und Dichte über das ideale Gasgesetz beschrieben:

$$p = \rho \mathcal{R} T \sum_{k=1}^N \frac{Y_k}{M_k} \quad (2.16)$$

Der Zusammenhang von Temperatur und Enthalpie wird beschrieben über:

$$h_k = h_{k,0} + \int_{T_0}^T c_{p,k} dT \quad (2.17)$$

sowie

$$h = \sum_{k=1}^N Y_k h_k \quad (2.18)$$

2.2 Grundlagen turbulenter Strömung

Zudem müssen Funktionen bereitgestellt werden, um die Stoffgrößen in den Gleichungen (2.2 - 2.18) zu berechnen. Die spezifische Wärmekapazität wird in dieser Arbeit über ein Polynom berechnet:

$$c_{p,k} = \frac{\Re}{M_k} (a_4 T^4 + a_3 T^3 + a_2 T^2 + a_1 T + a_0) \quad (2.19)$$

Die Enthalpie ergibt sich über die Integration von Gleichung (2.19).

$$h_k = h_{k,0} + \frac{\Re}{M_k} \left(\frac{a_4}{5} T^5 + \frac{a_3}{4} T^4 + \frac{a_2}{3} T^3 + \frac{a_1}{2} T^2 + a_0 T \right) \quad (2.20)$$

Die Koeffizienten in den Gleichungen (2.19) und (2.20) werden über die sogenannten Janaf Tabellen bereitgestellt [124]. Die Temperaturabhängigkeit der molekularen Viskosität wird hier über das Sutherland Modell berechnet:

$$\mu = \frac{A_s T^{1/2}}{1 + T_s T^{-1}} \quad (2.21)$$

Für Luft beträgt $A_s = 1,485e - 6 \text{ kg}/(\text{smK}^{0,5})$ und $T_s = 110,4 \text{ K}$.

2.2 Grundlagen turbulenter Strömung

Technisch relevante Strömungen wie die Umströmung von Fahrzeugen sowie Verdichter- und Turbinendurchströmung sind turbulent. Auch bei technisch relevanten Verbrennungssystemen, wie ottomotorische Verbrennung oder Verbrennung in Gasturbinen, findet die Verbrennung mit turbulenter Flamme statt. Prinzipiell werden die turbulenten (reaktiven) Strömungen durch die Erhaltungsgleichungen in Kapitel 2.1 beschrieben. Aufgrund der technischen Relevanz als auch vor dem Hintergrund der Verbrennungsmodellierung und Strömungssimulation müssen grundlegende Eigenschaften turbulenter Strömungen erläutert werden.

2.2.1 Charakterisierung turbulenter Strömung

Im Vergleich zu einer laminaren Strömung mit einem "geschichteten" Strömungsfeld, das keinen konvektiven Impulsaustausch senkrecht zur Hauptströmungsrichtung aufweist, ist eine turbulente Strömung räumlich wie zeitlich chaotisch, ungeordnet und stets dreidimensional [52, 55, 136]. Die turbulenten Schwankungen normal zur Hauptströmungsrichtung führen zu einem erhöhten Massen- und Wärmeübergang, der als turbulente Diffusion bezeichnet wird. Zudem ist ein vergrößerter Impulsaustausch der Fluidteilchen im Strömungsfeld festzustellen. Die turbulente Diffusion ist dabei oft um Größenordnungen höher als die molekulare Diffusion. Der turbulente Impulsaustausch führt zu einer Verringerung der kinetischen Energie der Strömung, weshalb turbulente Strömungen als dissipativ bezeichnet werden. Turbulente Strömungen weisen einen großen Bereich gleichzeitig auftretender Längen- und Zeitskalen auf, die in Experimenten oder Simulationen über Kreuz- und Autokorrelationen im Strömungsfeld nachgewiesen werden. Die mehrskalige Struktur

turbulenter Strömungen wird über Wirbel unterschiedlicher Größe abgebildet. Die Klassifizierung einer Strömung als laminar oder turbulent kann über die Reynolds Zahl abgeschätzt werden, die das Verhältnis von Trägheitskräften zu Reibungskräften beschreibt:

$$Re = \frac{\rho|u|l_{Geo}}{\mu} \quad (2.22)$$

l_{Geo} entspricht einem charakteristischen Längenmaß der Geometrie. Strömungen oberhalb einer Reynolds Zahl von 3000 – 5000 sind meist turbulent. Instabilitäten oder Störungen, z.B. Temperaturfluktuation, Wandrauhigkeit oder Gitterdurchströmungen führen zur Transition eines Anfangs laminaren Strömungsfeldes zur turbulenten Strömung. So findet bei glatten Wänden, die Transition zur turbulenten Strömung bei höheren Reynolds Zahlen statt, während bei der Durchströmung eines Turbulenzgitters der Umschlag auch bereits bei $Re < 3000$ stattfinden kann.

2.2.2 Beschreibung turbulenter Strömung

Die als chaotisch charakterisierte, turbulente Strömung kann über Wirbel unterschiedlicher Größe l bzw. über Wirbel unterschiedlicher Wellenzahlen k_Λ beschrieben werden, wobei gilt:

$$k_\Lambda = \frac{2\pi}{l} \quad (2.23)$$

Einem Wirbel mit einer bestimmten Wellenzahl kann ein bestimmter “Energieinhalt” zugeordnet werden und damit das gesamte turbulente Strömungsfeld über ein Energiespektrum $K(k_\Lambda)$ beschrieben werden. Dabei lassen sich abhängig von der Wirbelgröße drei Bereiche unterscheiden.

Grobskaliger Bereich: Der Bereich der Turbulenz, dem große Wirbel zugeordnet werden, entsteht aufgrund großräumiger Schwankungen des Strömungsfeldes und ist charakterisiert durch die Geometrie und die Energiezufuhr aus dem Strömungsfeld. In diesem Bereich wird die Energie für die Wirbel kleinerer Wellenlängen bereitgestellt.

Inertialbereich: Hier wird angenommen, dass die Dissipation der turbulenten Schwankung gleich der zugeführten kinetischen Energie ist [55]. Wirbel geben damit im selben Maß Energie an kleinere Wirbel ab, wie sie Energie von größeren Strukturen übernehmen. Das Prinzip wird als Trägheit bezeichnet und der Bereich daher Trägheits- oder Inertialbereich genannt. Für isotrope und homogene Turbulenz sowie unter der Annahme einer statistisch stationären Strömung kann man basierend auf einer Dimensionsanalyse das Energiespektrum K über die sogenannte Kolmogorovsche Energiekaskade mathematisch beschreiben:

$$K(k_\Lambda) = C_k \varepsilon^{2/3} k_\Lambda^{-5/3} \quad (2.24)$$

mit der Kolmogorov Konstante $C_k \approx 1,5$ und der mittleren Dissipationsrate ε , die die Dissipation der Wirbel beschreibt und im Inertialbereich für alle Wirbel konstant ist.

Dissipationsbereich: Bei kleinen Wellenlängen dominiert die Dissipation der Turbulenz aufgrund der molekularen Viskosität und das Energiespektrum über der Wellenlänge klingt schneller ab als im Inertialbereich.

Abbildung 2.1 zeigt das Energiespektrum turbulenter Strömungen mit den unterschiedlichen Bereichen. Die Stärke der Turbulenz einer Strömung kann durch den Betrag

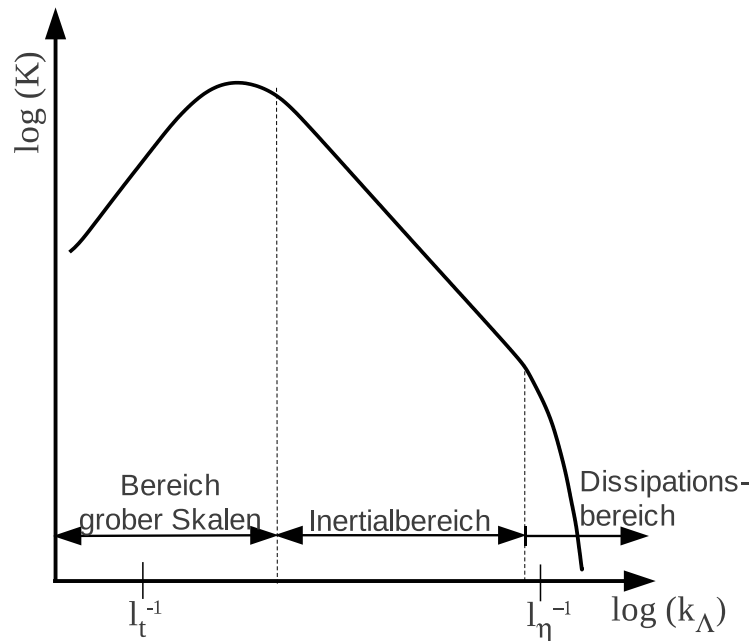


Abbildung 2.1: Energiespektrum turbulenter Strömung

der Fluktuation einer Größe des Strömungsfeldes quantifiziert werden. Man unterteilt dazu eine Größe des Strömungsfeldes, hier die Geschwindigkeit u_i in ihren Mittelwert \bar{u}_i und die Abweichung u'_i :

$$u_i = \bar{u}_i + u'_i \quad (2.25)$$

Damit lässt sich eine turbulente kinetische Energie definieren:

$$k = \frac{1}{2} \overline{u'_i u'_i} \quad (2.26)$$

Zudem kann jedem Wirbel der Größe l eine turbulente Schwankung $u'(l)$ sowie eine charakteristische Zeit zugeordnet werden:

$$\tau_t(l) = \frac{l}{u'(l)} \quad (2.27)$$

Als Dissipationsrate eines Wirbels der Größe l wird damit das Verhältnis seiner turbulenten kinetischen Energie zum zugehörigen Zeitmaß definiert:

$$\varepsilon = \frac{u'^2(l)}{\tau_t(l)} \quad (2.28)$$

wobei ε im Inertialbereich als konstant angenommen wird und damit unabhängig von l ist. Turbulente Strömungen werden zudem durch eine charakteristische Wirbelgröße der kleinsten Wirbel und der groben Skalen beschrieben. Um die kleinste Wirbellänge abzuschätzen, geht man davon aus, dass diese nur durch Viskositäts- und Dissipationsmechanismen dominiert wird [55]. Aus Dimensionsgründen definiert sich die sogenannte Kolmogorov Länge l_η zu:

$$l_\eta = \left(\frac{\nu^3}{\varepsilon} \right)^{1/4} \quad (2.29)$$

Die groben Skalen werden über die Energiezufuhr aus dem Strömungsfeld und die Dissipationsrate charakterisiert. Die Dimensionsanalyse unter Berücksichtigung der turbulenten kinetischen Energie und der Dissipationsrate führt zu [55]:

$$l_t = \frac{u'^3}{\varepsilon} \quad (2.30)$$

l_t wird als integrales Längenmaß bezeichnet, die zugehörige turbulente Schwankung $u' = u'(l_t)$ beschreibt ein Maß für die turbulente kinetische Energie der Strömung. Neben der globalen Reynolds Zahl in Gleichung (2.22) lässt sich für jede Wirbelgröße eine Reynolds Zahl definieren. Die sogenannte turbulente Reynolds Zahl wird mit dem integralen Längenmaß gebildet:

$$Re_t = \frac{u'(l_t)l(l_t)}{\nu} = \frac{u'l_t}{\nu} \quad (2.31)$$

Die Reynolds Zahl gebildet mit der Kolmogorov Länge ergibt sich zu [134]¹:

$$Re_\eta = \frac{u'(l_\eta)l(l_\eta)}{\nu} = \frac{\varepsilon^{1/3}l_\eta^{4/3}}{\nu} = 1 \quad (2.32)$$

¹Es sei bemerkt, dass sich die Kolmogorov Länge auch über $Re_t(l) = 1$ ableiten lässt.

3 Berechnung turbulenter Strömung

3.1 Direkte Numerische Simulation

Turbulente (reaktive) Strömungen werden durch die Erhaltungsgleichung in Abschnitt 2.1 beschrieben und können diskretisiert unter Verwendung numerischer Verfahren gelöst werden. Das in Abschnitt 2.2 beschriebene Mehrskalenproblem der turbulenten Strömung hat zur Folge, dass alle turbulenten Skalen und damit auch die kleinsten Wirbel l_η über die Diskretisierung aufgelöst werden müssen. Dieses Lösungsverfahren wird als direkte numerische Simulation bezeichnet und ist für technisch relevante Konfigurationen aufgrund des hohen Rechenaufwandes nicht umsetzbar.

3.2 Reynolds gemittelte Navier Stokes Gleichungen

Für technisch relevante Konfigurationen interessieren meist nur die mittleren Größen des Strömungsfeldes. Der Rechenaufwand lässt sich dabei deutlich durch die numerische Lösung der Zeit, bzw. Ensemble gemittelten Erhaltungsgleichungen reduzieren. Diese werden hergeleitet, in dem man die betrachtete Erhaltungsgröße (Geschwindigkeit, Druck, Spezies,...) in ihren Mittelwert und die Fluktuation aufteilt, vgl. Gleichung (2.25), und auf die Erhaltungsgleichungen anwendet. Bei kompressiblen oder reaktiven Strömungen entstehen durch die Mittelung Korrelationen aus der Dichtefluktuation und der Fluktuation der betrachteten Erhaltungsgröße, die in der CFD schwer zu berücksichtigen sind [134]. Aus diesem Grund wird eine Massen gewichtete Mittelung, die sogenannte Favre Mittelung, eingeführt die für eine beliebige Größe W definiert wird als:

$$\tilde{W} = \frac{\overline{\rho W}}{\bar{\rho}} \quad (3.1)$$

und damit

$$W = \tilde{W} + W' \quad \text{mit} \quad \widetilde{W'} = 0 \quad (3.2)$$

Gleichung (3.2) und (3.1) eingesetzt in die Erhaltungsgleichungen (2.1 - 2.11) ergeben die sogenannten "Favre gemittelten Navier-Stokes" Gleichungen die, entsprechend der Reynolds Mittelung für inkompressible Strömungen, in der Literatur trotzdem als RANS Gleichungen bezeichnet werden und sich für die Massen-, Impuls-, Spezies- und Energieerhaltung schreiben als:

Massenerhaltung:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial x_i} = 0 \quad (3.3)$$

Impulserhaltung:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{u}_i}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\bar{\tau}_{ij} - \bar{\rho} \widetilde{u'_i u'_j} \right) - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j} + \overline{\rho f_j} \quad (3.4)$$

In der Impulserhaltung führt die Mittelungsoperation einen zusätzlich Term, den Reynolds Spannungstensor $\widetilde{u'_i u'_j}$ ein, der den Einfluss der Turbulenz auf die Impulserhaltung beinhaltet. Der Reynolds Spannungstensor ist symmetrisch und beinhaltet sechs zusätzliche unbekannte Größen, die über ein Turbulenzmodell geschlossen werden müssen.

Spezieserhaltung:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_k}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{Y}_k}{\partial x_i} = - \frac{\partial \bar{j}_i^k}{\partial x_i} - \frac{\partial \bar{\rho} \widetilde{u'_i Y'_k}}{\partial x_i} + \bar{\omega}_k \quad (3.5)$$

Die Favre Mittelung der Spezieserhaltung ergibt einen turbulenten Fluss der Spezies $\widetilde{u'_i Y'_k}$ und muss ebenfalls durch ein Turbulenzmodell geschlossen werden.

Energieerhaltung:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{h}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{h}}{\partial x_i} = \frac{\overline{Dp}}{Dt} - \frac{\partial \bar{\rho} \widetilde{u'_i h'}}{\partial x_i} - \frac{\partial \bar{q}_i}{\partial x_i} + \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \bar{Q} + \overline{\rho u_i f_i} \quad (3.6)$$

Entsprechend der Spezieserhaltung wird in der Energieerhaltung ein turbulenter Fluss $\widetilde{u'_i h'}$ eingeführt, der den turbulenten Wärmestrom berücksichtigt.

In der Literatur z.B. [52,136] ist eine große Anzahl von Turbulenzmodellen zu finden, welche die Schließung der turbulenten Flüsse und Reynolds Spannungen ermöglichen. Die Modelle beinhalten aber auch einen großen Unsicherheitsfaktor. So können zwar durch RANS Simulationen Tendenzen richtig wiedergegeben werden, die Abweichungen des Simulationsergebnisses von der Realität können aber bei bis zu 20% liegen [52]. Wie in Kapitel 1.2 dargelegt, kann eine RANS Simulation auch nicht die hohe Instationarität der turbulenten Verbrennung reproduzieren sondern nur eine gemittelte Flammenform.

3.3 Large Eddy Simulation

Die Darstellung des Energiespektrums turbulenter Strömungen in Abbildung 2.1 zeigt, dass mit abnehmender Wirbelgröße auch der Energieinhalt der Wirbel abnimmt. Die Idee der Grobstruktur- oder Large Eddy Simulation ist daher, die grobskaligen, energietragenden turbulenten Strukturen der Strömung aufzulösen und nur die kleineren Strukturen, die ca. 20% der turbulenten kinetischen Energie enthalten, über eine Modellierung zu berücksichtigen. Im Gegensatz zu den groben Strukturen, die durch die Geometrie beeinflusst werden, sind die kleinen Strukturen universeller Natur und daher leichter zu modellieren.

3.3.1 Filterung

Die Separierung zwischen kleinen und großen Strukturen wird durch eine Tiefpassfilterung des Strömungsfeldes erreicht. Die Filterung einer beliebigen Größe W mit dem Filter F ist im Eindimensionalen definiert als:

$$\bar{W}(\vec{x}) = \int_{\Omega} W(\vec{x}'') F(\vec{x} - \vec{x}'') d\vec{x}'' \quad (3.7)$$

entsprechend der RANS kann man auch eine Massen gewichtete Favre Filterung definieren:

$$\bar{\rho}\tilde{W}(\vec{x}) = \int_{\Omega} \rho W(\vec{x}'') F(\vec{x} - \vec{x}'') dx'' \quad (3.8)$$

Mit

$$W = \tilde{W} + W' \quad \text{aber} \quad \widetilde{W'} \neq 0 \quad (3.9)$$

Bei der Auswahl der Filter müssen die unterschiedlichen Eigenschaften des Filters im physikalischen- und Frequenzraum beachtet werden. Formuliert man im Frequenzraum einen sogenannten Rechteckfilter:

$$F(k_{\Lambda}) = \begin{cases} 1 & \text{für } k_{\Lambda} \leq \pi/\Delta \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (3.10)$$

so entspricht dieser einem idealen Tiefpassfilter [55] der nur Wellenlängen oberhalb von 2Δ zulässt. Im physikalischen Raum werden aber Signale außerhalb der entsprechenden räumlichen Ausdehnung von Δ zugelassen. Für die CFD technisch relevanter Konfigurationen werden die Erhaltungsgrößen im physikalischen Raum gelöst und damit der Filter im physikalischen Raum formuliert. Der Rechteckfilter wird dann definiert über:

$$F(\vec{x}) = F(x_i) = \begin{cases} 1/\Delta^3 & \text{für } |x_i| \leq \Delta/2 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (3.11)$$

und entspricht einer Mittelung der Größe W im Bereich der Filterweite Δ . Dies entspricht allerdings keiner idealen Tiefpassfilterung bei einer bestimmten Wellenzahl $k_{\Lambda, \max}$ und hat zur Folge, dass auch Wellenzahlen oberhalb $k_{\Lambda, \max}$ zugelassen und in diesem Bereich sowohl negativ als auch positiv gewichtet werden können [55]. Der Gauss Filter

$$F(\vec{x}) = F(x_i) = \left(\frac{6}{\pi\Delta^2} \right)^{3/2} \exp \left(-\frac{6}{\Delta^2} (x_1^2 + x_2^2 + x_3^2) \right) \quad (3.12)$$

führt schließlich eine stets positive "Wichtung" der Größe W im physikalischen als auch im Frequenzbereich durch.

3.3.2 Grundgleichungen

Führt man eine Favre Filterung der Erhaltungsgleichungen in Kapitel 2.1 durch, führt dies zu einem neuen Satz gefilterter Gleichungen:

Massenerhaltung:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial x_i} = 0 \quad (3.13)$$

Impulserhaltung:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{u}_i}{\partial x_i} = -\frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} (\widetilde{u_i u_j} - \tilde{u}_i \tilde{u}_j)) + \frac{\partial \bar{\tau}_{ij}}{\partial x_i} - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j} + \overline{\rho f_j} \quad (3.14)$$

Die Filterungsoperation führt zu einem zusätzlich Term, dem Feinstruktur-Tensor $\widetilde{u_i u_j} - \tilde{u}_i \tilde{u}_j$, der den Einfluss der nicht aufgelösten Skalen auf die Impulserhaltung beinhaltet. Wie der Reynolds Spannungstensor ist der Feinstruktur-Tensor symmetrisch und führt sechs neue Unbekannte ein, die durch ein Turbulenzmodell geschlossen werden müssen.

Spezieserhaltung:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_k}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{Y}_k}{\partial x_i} = -\frac{\partial \bar{j}_i^k}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} (\widetilde{u_i Y_k} - \tilde{u}_i \tilde{Y}_k)) + \overline{\dot{\omega}_k} \quad (3.15)$$

$\widetilde{u_i Y_k} - \tilde{u}_i \tilde{Y}_k$ beschreibt den zu modellierenden Beitrag der nicht aufgelösten Skalen in der Spezieserhaltung und wird als turbulenter Fluss der Spezies bezeichnet. Durch die Filterung wird auch der Einfluss kleiner, turbulenter Skalen auf den Reaktionsquellterm unterdrückt, der über ein Verbrennungsmodell berücksichtigt werden muss.

Energieerhaltung:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{h}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{h}}{\partial x_i} = \frac{\overline{Dp}}{Dt} - \frac{\partial}{\partial x_i} ((\widetilde{u_i h} - \tilde{u}_i \tilde{h})) - \frac{\partial \bar{q}_i}{\partial x_i} + \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \bar{Q} + \overline{u_i f_i} \quad (3.16)$$

Entsprechend der Spezieserhaltung führt die Filterung zu einem turbulenten, nicht aufgelösten Wärmestrom $\widetilde{u_i h} - \tilde{u}_i \tilde{h}$, der über ein Turbulenzmodell geschlossen werden muss.

3.3.3 Berechnung der aufgelösten Turbulenz

In der Grobstruktursimulation wird der Hauptteil der turbulenten Schwankung einer Erhaltungsgröße aufgelöst. Die Zeit gemittelten aufgelösten, turbulenten Schwankungen u'_i und u'_{ij} sowie die mittleren, aufgelösten, turbulenten skalaren Flüsse der Spezies $u'_i Y'_k$ und der Energie $u'_i h'$ sowie die Schwankungen Y'_k bzw. h' werden wie folgt berechnet:

$$\langle u'_i \rangle = \langle (\bar{u}_i - \langle \bar{u}_i \rangle) (\bar{u}_i - \langle \bar{u}_i \rangle) \rangle^{0,5} \quad (3.17)$$

$$\langle Y'_k \rangle = \langle (\bar{Y}_k - \langle \bar{Y}_k \rangle) (\bar{Y}_k - \langle \bar{Y}_k \rangle) \rangle^{0,5} \quad (3.18)$$

$$\langle h' \rangle = \langle (\bar{h} - \langle \bar{h} \rangle) (\bar{h} - \langle \bar{h} \rangle) \rangle^{0,5} \quad (3.19)$$

$$\langle u'_{ij} \rangle = \langle (\bar{u}_i - \langle \bar{u}_i \rangle)(\bar{u}_j - \langle \bar{u}_j \rangle) \rangle \quad (3.20)$$

$$\langle u'_i Y'_k \rangle = \langle (\bar{u}_i - \langle \bar{u}_i \rangle)(\bar{Y}_k - \langle \bar{Y}_k \rangle) \rangle \quad (3.21)$$

$$\langle u'_i h' \rangle = \langle (\bar{u}_i - \langle \bar{u}_i \rangle)(\bar{h} - \langle \bar{h} \rangle) \rangle \quad (3.22)$$

$\langle \dots \rangle$ bezeichnet dabei die Mittelungsoperation der gefilterten Felder.

3.3.4 Schließungsmodelle

Der Beitrag der nicht aufgelösten Skalen in den gefilterten Erhaltungsgleichungen muss über ein Schließungsmodell bzw. Turbulenzmodell berücksichtigt werden. In Fröhlich [55] sind ein Großteil der bisher vorgeschlagenen Modelle zusammengefasst. Die bisher weiteste Verbreitung finden, wie in der RANS, die sogenannten Wirbelviskositätsmodelle. Hierbei wird angenommen, dass die nicht aufgelösten Skalen wie eine zusätzliche Viskosität wirken und daher über eine turbulente Viskosität ν_t modelliert werden können. Man kann hierbei zwischen dynamischen Modellen und nicht dynamischen Modellen unterscheiden. Bei dynamischen Modellen werden aufgrund einer Evaluierung des Strömungsfeldes auf unterschiedlichen Filterweiten dynamisch die Konstanten von Turbulenzmodellen berechnet. In dieser Arbeit werden nicht dynamische Modelle eingesetzt, da Validierungssimulationen kanonischer Strömungen in Keppeler et al. [82] sehr gute Ergebnisse im Vergleich mit DNS Daten zeigen. Zudem erfordern nicht dynamische Modelle im Vergleich zu den Dynamischen meist einen geringeren Rechenaufwand. Im Folgenden wird das in dieser Arbeit verwendete Eingleichungsmodell sowie das Smagorinsky Modell vorgestellt.

a) Modellierung des Feinstruktur Tensors ($\widetilde{u_i u_j} - \tilde{u}_i \tilde{u}_j$):

Eingleichungsmodell:

Die nicht aufgelösten, turbulenten Schwankungen werden über eine Transportgleichung für die nicht aufgelöste, turbulente kinetische Energie k_Δ berechnet.

$$\frac{\partial \bar{\rho} k_\Delta}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_i k_\Delta)}{x_i} = \frac{\partial}{x_i} \left(\bar{\rho} (\nu + \nu_t) \frac{\partial k_\Delta}{\partial x_i} \right) - \underbrace{\bar{\rho} \tau_{ij, mod} \tilde{S}_{ij}}_{\text{Produktion}} - \underbrace{\bar{\rho} \varepsilon_\Delta}_{\text{Dissipation}} \quad (3.23)$$

wobei der modellierte Feinstrukturtensor approximiert wird über:

$$\widetilde{u_i u_j} - \tilde{u}_i \tilde{u}_j = \tau_{ij, mod} \approx -2\nu_t \tilde{S}_{ij} + \frac{2}{3} k_\Delta \delta_{ij} \quad (3.24)$$

die turbulente Viskosität wird berechnet über:

$$\nu_t = c_k \Delta k_\Delta^{0,5} \quad (3.25)$$

und die turbulente Dissipationsrate der Feinstruktur turbulenz wird modelliert über:

$$\varepsilon_\Delta = c_e \Delta^{-1} k_\Delta^{3/2} \quad (3.26)$$

[55] zufolge werden in der Literatur folgende Werte für die Konstanten c_k und c_e verwendet: $0,048 < c_k < 0,1$ und $0,884 < c_e < 1,05$.

Smagorinsky Modell:

Das Smagorinsky Modell ist ein algebraisches Feinstrukturmodell und wie das Eingleichungsmodell strikt dissipativ. Im Gegensatz zum Eingleichungsmodell wird ein Gleichgewicht aus Produktion und Dissipation turbulenter kinetischer Energie auf Feinstrukturebene angenommen. Zudem wird nur der anisotrope Anteil des Feinstrukturtenors modelliert:

$$(\widetilde{u_i u_j} - \tilde{u}_i \tilde{u}_j) - \frac{\delta_{ij}}{3} (\widetilde{u_k u_k} - \tilde{u}_k \tilde{u}_k) = -2\nu_t \tilde{S}_{ij} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \tilde{S}_{kk} \quad (3.27)$$

der isotope Anteil wird meist mit dem Druck zu einem Pseudodruck zusammengefasst [55, 134]. Die turbulente Viskosität errechnet sich über:

$$\nu_t = (C_{S,k} \Delta)^2 \left(2\tilde{S}_{ij} \tilde{S}_{ij} \right)^{0,5} \quad (3.28)$$

Werte für die Smagorinsky Konstante $C_{S,k}$ variieren zwischen 0,065 und 0,24 für schwach turbulente Strömung.

b) Modellierung der turbulenten Flüsse $(\widetilde{u_i Y_k} - \tilde{u}_i \tilde{Y}_k)$, $(\widetilde{u_i h} - \tilde{u}_i \tilde{h})$:

Die turbulenten Flüsse der nicht aufgelösten feinen Strukturen werden meist über eine Gradientenannahme geschlossen:

$$\widetilde{u_i Y_k} - \tilde{u}_i \tilde{Y}_k = -\frac{\nu_t}{Sc_t} \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial x_i} \quad (3.29)$$

bzw:

$$\widetilde{u_i h} - \tilde{u}_i \tilde{h} = -\frac{\nu_t}{Pr_t} \frac{\partial \tilde{h}}{\partial x_i} \quad (3.30)$$

Entsprechend der nicht gefilterten Erhaltungsgleichungen in Kapitel 2.1 wird eine turbulenten Schmidt Zahl Sc_t und eine turbulente Prandtl Zahl Pr_t eingeführt, um die turbulente Spezies- und Enthalpiediffusion über die turbulente Viskosität beschreiben zu können. Die Werte von Sc_t und Pr_t beruhen auf Erfahrungswerten und werden i.d.R. zu 0,5–1 gewählt.

3.3.5 Wanddämpfungsfunktionen

Das Smagorinsky Modell sowie das Eingleichungsmodell sind strikt dissipativ und neigen dazu, die turbulente Viskosität in Wandnähe bei aufgelöster Wandgrenzschicht aufgrund der hohen Scherung zu überschätzen und damit turbulente Fluktuationen in Wandnähe zu stark zu dämpfen. Als Abhilfe werden Dämpfungsfunktionen wie die vanDriest'sche Dämpfungsfunktion verwendet, um die turbulente Viskosität in Wandnähe zu reduzieren.

$$\nu_{\tau,VD} = \nu_{\tau} \left(1 - e^{-y^+/A^+}\right) \quad (3.31)$$

mit $A^+ = 25$. Der entdimensionierte Wandabstand wird definiert über:

$$y^+ = \frac{u_{\tau}y}{\nu} \quad (3.32)$$

und die Schubspannungsgeschwindigkeit berechnet sich über:

$$u_{\tau} = \sqrt{\nu \frac{\partial u_n}{\partial n}} \quad (3.33)$$

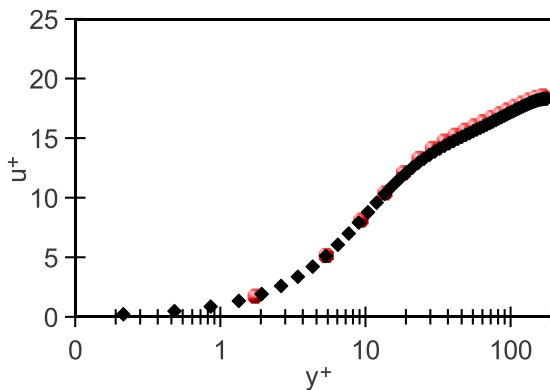
mit dem Wandnormalenvektor n .

3.3.6 Validierung der Feinstrukturmodelle für wandgebundene Strömung

Die LES von Verbrennungsvorgängen basiert auf einer korrekten Vorhersage des Strömungsfeldes. Validierungsrechnungen von Kanal-, Rohr- und Freistrahlsströmung mit und ohne passiven Skalartransport wurden von Keppeler et al. [82] durchgeführt, um die Eignung des verwendeten CFD-Lösers OpenFOAM®-1.6 für LES zu überprüfen. Die Hauptergebnisse der Validierungsrechnungen in [82] für wandgebundene Strömungen sind hier kurz zusammengefasst.

Das Geschwindigkeitsfeld der LES einer Kanalströmung mit Kanalhöhe 2δ bei einer Schubspannungs Reynolds Zahl $Re_{\tau} = u_{\tau}\delta/\nu = 180$ mit dem Eingleichungsmodell zur Modellierung der Feinstruktur ist in Abbildung 3.1 den DNS Daten von Moser et al. [118] gegenübergestellt. Das Geschwindigkeitsfeld in Abbildung 3.1a) wurde mit $u^+ = u/u_{\tau}$ entdimensioniert.

a)



b)

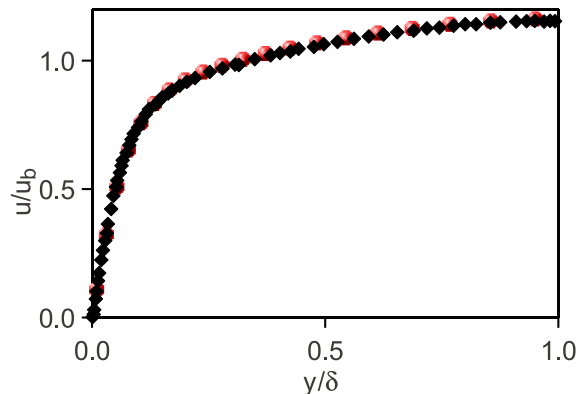


Abbildung 3.1: Geschwindigkeitsfeld einer Kanalströmung aus LES (rot) und DNS (schwarz); a) Geschwindigkeit und Wandabstand normiert mit u_{τ} ; b) Geschwindigkeit und Wandabstand normiert mit mittlerer Geschwindigkeit und Kanalhöhe

niert. Den Vergleich der Reynoldsspannungen zeigt Abbildung 3.2. Entdimensioniert wurde die Spur des Reynoldsspannungstensors mit u_τ^2 und die Schubspannung mit u_τ^+ . Das LES-

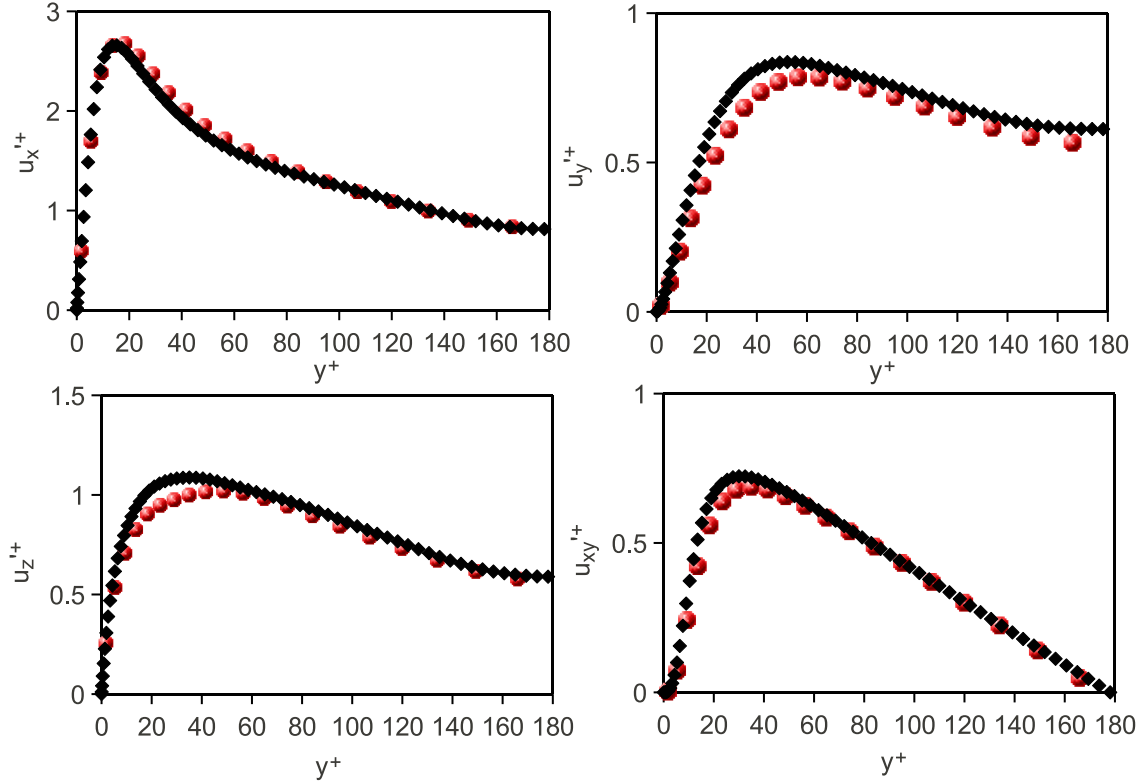


Abbildung 3.2: Reynoldsspannungen einer Kanalströmung aus LES (rot) und DNS (schwarz)

Modell kann den Geschwindigkeitsverlauf der DNS exakt reproduzieren. Der Vergleich der turbulenten Schwankung zeigt eine sehr gute Übereinstimmung mit den DNS-Daten. Die turbulenten Schwankungen in Hauptströmungsrichtung können exakt reproduziert werden, die weiteren turbulenten Schwankungen unterschätzen leicht die maximalen DNS-Daten. Um zu überprüfen, ob auch die skalaren Schwankungen und skalaren Flüsse durch die LES korrekt reproduziert werden können, werden Simulationen einer Kanalströmung mit Transport eines passiven Skalars c durchgeführt. Entsprechend der DNS von Debusscher und Rutland [44] wird die Prandtl Zahl für den diffusiven Transport von c zu $Pr = 0,7$ in der LES gewählt. Für die obere Kanalwand wird $c = 1$, für die untere Kanalwand $c = 0$ vorgegeben. Die Reynoldszahl der Schubspannung beträgt $Re_\tau \approx 180$, die Wandschubspannung des passiven Skalars beträgt $c_\tau = 0,024$, wobei:

$$c_\tau = \nu \left. \frac{\partial c}{\partial n_i} \right|_{y=0} \frac{1}{Pr u_\tau} \quad (3.34)$$

Die Ergebnisse für die mittlere Konzentration von c sowie die Schwankung c' wird den DNS-Daten [44] in Abbildung 3.3 gegenübergestellt. Das mittlere Konzentrationsfeld kann

3.3 Large Eddy Simulation

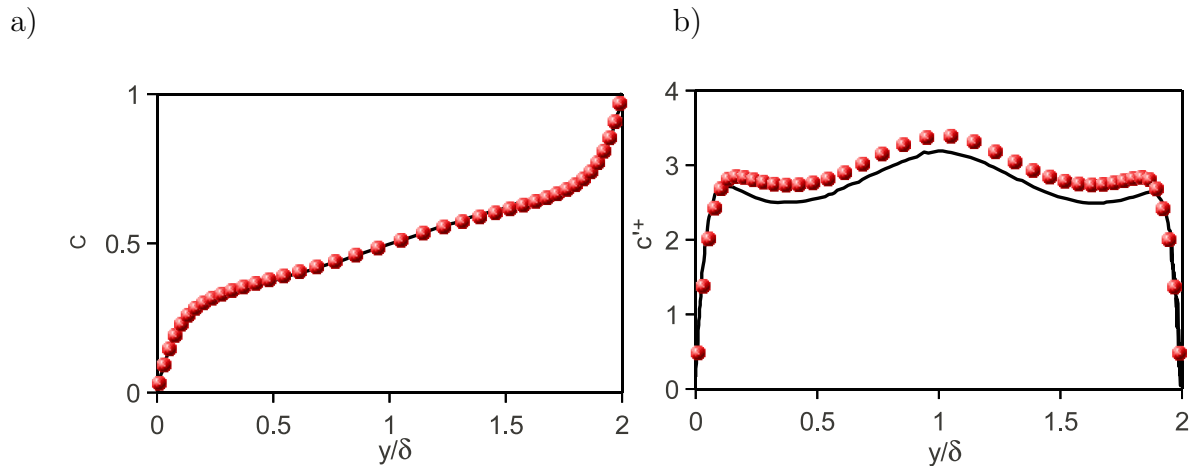


Abbildung 3.3: Simulation einer Kanalströmung mit Skalartransport; DNS (schwarz) LES (rot); a) mittleres Konzentrationsfeld von c ; b) mittlere turbulente Schwankung von c

dabei sehr gut wiedergegeben werden, die turbulenten Schwankungen ergeben nur gering höhere Werte im Vergleich mit der DNS.

Da in der Arbeit von Debusschere et al. [44] keine turbulenten skalaren Flüsse ausgewertet werden, die beispielsweise den konvektiven turbulenten Wärmeübergang beschreiben, werden für weitere Validierungen die DNS-Daten von Schwertfilm und Manhart [141] verwendet. In der DNS ist die Schubspannungs Reynolds Zahl $Re_\tau = 180$, die Schmidt Zahl $Sc = 1$ und die obere bzw. untere Wand werden zu $c = 1$ bzw. $c = -1$ vorgegeben. Den Vergleich des turbulenten skalaren Flusses in Hauptströmungs- und Wandnormalenrichtung normiert mit der mittleren Geschwindigkeit $|u|$ ist den DNS-Daten in Abbildung 3.4 gegenübergestellt. Der Vergleich von LES und DNS zeigt eine sehr gute Übereinstimmung

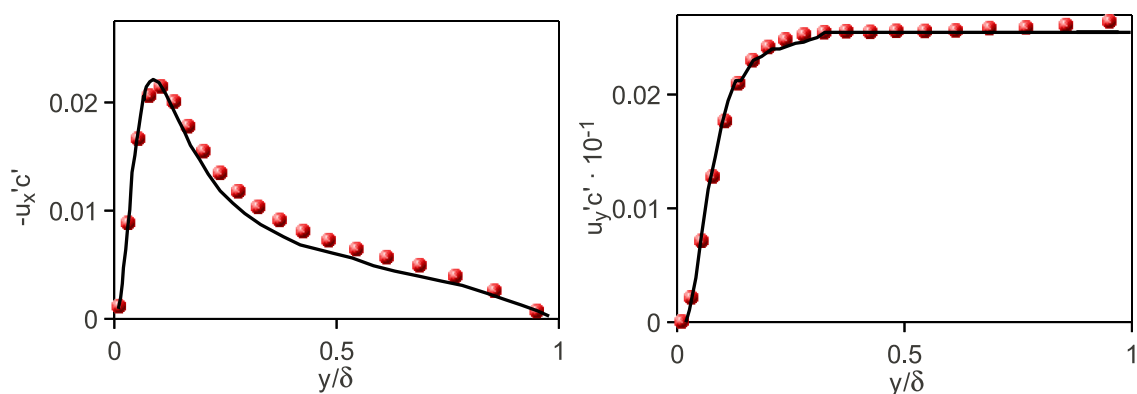


Abbildung 3.4: Turbulenter Fluss aus Simulation einer Kanalströmung mit Skalartransport DNS (schwarz) LES (rot)

und unterstützt damit bei der hier verwendeten Auflösung die Gradientenannahme in der

Modellierung des nichtaufgelösten skalaren Flusses.

LES mit systematischer Gittervariation in [82] erlauben eine Abschätzung der LES Qualität für wandgebundene Strömungen. Eine sehr gute Übereinstimmung mit der DNS lässt sich damit für $\Delta_x^+ \leq 50$, $\Delta_y^+ \leq 4$ sowie $\Delta_z^+ \leq 6$ erreichen, wobei x , y und z die Hauptströmungs-, Wandnormalen- sowie Spannweitenrichtung bezeichnet. Die entdimensionierte Filterweite ist definiert über:

$$\Delta_i^+ = \frac{u_\tau \Delta_i}{\nu} \quad (3.35)$$

Der Vergleich von LES mit einem O-Netz mit DNS einer Rohrströmung zeigt ähnlich gute Ergebnisse wie bei der Kanalströmung, bei Berücksichtigung der Qualitätskriterien für die Filterweite, insbesondere $\Delta_\varphi^+ \equiv \Delta_z^+ \leq 6$. Damit muss der innere Block des Netzes möglichst nah zur Rohrwand ausgedehnt werden. Allerdings wird gezeigt, dass sich im zeitlichen Mittel, die turbulente Viskosität am Netz orientiert, die bei einem O-Netz i.d.R. quadratisch ist, vgl. Abbildung 3.5. Um dies zu vermeiden, muss der äußeren Kante des inneren Blocks

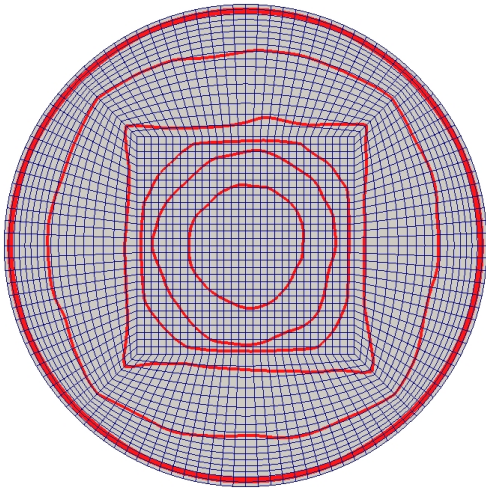


Abbildung 3.5: Netzeinfluss auf Feinstrukturviskosität bei geradem inneren Block, Konturlinien $\langle \nu_t \rangle$ (rot)

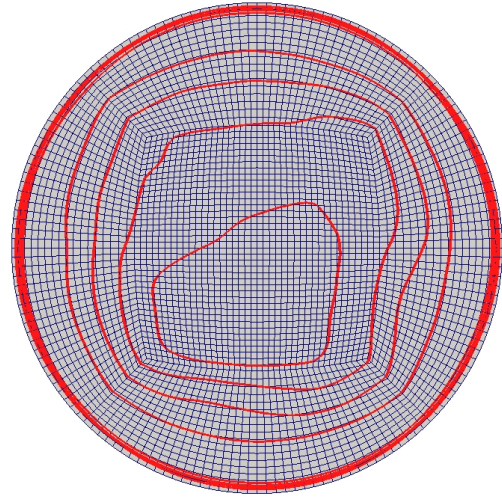


Abbildung 3.6: Netzeinfluss auf Feinstrukturviskosität bei abgerundetem inneren Block, Konturlinien $\langle \nu_t \rangle$ (rot)

ein Radius vorgegeben werden. $\langle \nu_t \rangle$ weist damit, wie in Abbildung 3.6 dargestellt, bei einem abgerundeten inneren Block eine deutlich physikalischere Struktur auf. Eine vollständige Symmetrie der Konturlinie lässt sich durch längere Mittelungszeiträume erreichen, worauf in [82] aus Rechenzeitgründen verzichtet wird. Für inkompressible Strömungen ist der Einfluss der Netzorientierung der turbulenten Viskosität als gering anzusehen. Diese tritt nur im Kernbereich der Strömung mit sehr niedrigen Werten auf, während die Viskosität im wandnahen Bereich wieder physikalische Strukturen annimmt und stärker das Strömungsfeld beeinflusst. Bei Verbrennungssimulationen, werden allerdings i.d.R. die Werte von ν_t

3.3 Large Eddy Simulation

oder k_Δ verwendet. Die simulierten Flammenformen könnten sich bei einem rechteckigen inneren Block damit ebenfalls am Gitter orientieren, sodass in dieser Arbeit bei Verbrennungssimulationen ein Rechennetz entsprechend Abbildung 3.6 verwendet wird.

Die dargestellten LES Ergebnisse sind in [137] zusätzlich für das Smagorinsky Modell ausgewertet.

4 Grundlagen vorgemischter Verbrennung

In diesem Kapitel werden grundlegende Eigenschaften perfekt vorgemischter, laminarer und turbulenter Vormischflammen beschrieben. Es bildet die Grundlage für die Modellierung von Vormischflammen in Kapitel 5, 6 und 7. Die Annahme, dass keine räumlichen und zeitlichen Fluktuationen des Brennstoffmassenbruchs im unverbrannten Gemisch auftreten, kann man als idealisierte Situation auffassen, die für ottomotorische Verbrennung und Verbrennung in stationären Gasturbinen gilt. Eine erste Verallgemeinerung dieses Konzepts besteht in der Annahme eines inhomogen vorgemischten Systems, mit räumlichen und zeitlichen Fluktuation des Brennstoff-Luft Verhältnisses bei $\Phi \leq 1$. Diese tritt beispielsweise bei perfekt vorgemischter Verbrennung in offener Umgebung auf, bei der die Flamme Umgebungsluft ansaugt. Modellierungen hierzu sind z.B. in [48] zu finden. Der allgemeinste Ansatz besteht in der Modellierung teils vorgemischter Systeme, mit mageren und fetten Bereichen, in denen neben Vormischflamme auch Diffusions- und sogenannte Tripelflammen auftreten können [128].

Im Rahmen der hier untersuchten perfekt vorgemischten Verbrennung, konzentriert sich Abschnitt 4.1 auf die Beschreibung laminarer Vormischflammen mit und ohne Berücksichtigung von Flammenstreckung sowie hydrodynamischen Instabilitäten. Abschnitt 4.2 beschreibt die Grundlagen turbulenter Vormischverbrennung.

4.1 Laminare Vormischflammen

Laminare Flammen bilden die Grundlage für viele turbulente Verbrennungsmodelle. So ist die Beschreibung turbulenter Flammen als ein Ensemble kleiner laminarer Flammen, sogenannter “flamelets”, ein in der Verbrennungsmodellierung gängiger Ansatz. Grundlagen zu laminaren Vormischflammen, die Berechnung laminarer Flammengeschwindigkeiten sowie die zu berücksichtigenden Phänomene wie Flammenstrecken und hydrodynamische Instabilitäten werden in diesem Abschnitt beschrieben.

4.1.1 Beschreibung laminarer Vormischflammen

Laminare Vormischverbrennung kann anhand der Erhaltungsgleichungen in Kapitel 2.1 beschrieben werden. Der Reaktionsquellterm $\dot{\omega}_k$ wird über ein System von Differentialgleichungen mit einem Arrhenius Ansatz für die Reaktionsrate geschlossen. Die Simulation laminarer Vormischflammen unter Berücksichtigung komplexer Chemie und den transienten Erhaltungsgleichungen in Kapitel 2.1 stellt allerdings einen großen numerischen Aufwand dar. So erfordert beispielsweise die Berechnung des $H_2 - O_2$ Mechanismus die Lösung der Transportgleichungen für 8 Spezies und 38 Reaktionen [80]. Die numerische Untersuchung und Berechnung laminarer Flammen mit komplexer Chemie wird daher meist nur in einer eindimensionalen, stationären Konfiguration durchgeführt.

Reaktionsquellterm laminarer Vormischverbrennung

Für die CFD wichtige Eigenschaften laminarer Flammen lassen sich auch über die Analyse einer 1-Schritt Chemie abschätzen, bei der sich der Gleichungssatz der Spezieserhaltung auf eine Gleichung für den Brennstoffmassenbruch Y_F reduziert. So lässt sich Poinsoot und Veynante [134] folgend der Reaktionsquellterm schreiben als:

$$\dot{\omega}_F = B_F Y_F \rho T^{\beta_{Zel}} e^{-T_a/T} \quad (4.1)$$

mit der Zel'dovich Zahl β_{Zel} und der Aktivierungstemperatur $T_a = \beta_{Zel} T_b^2 / (T_b - T_u)$. T_b und T_u bezeichnen die adiabate Verbrennungstemperatur bzw. die Temperatur im unverbrannten Gemisch. Der Vorfaktor lässt sich abschätzen über [134]:

$$B_F = \frac{(s_L^0 \beta_{Zel})^2 e^{\beta_{Zel} T_b / (T_b - T_u)}}{2 T_u^{\beta_{Zel}} \alpha_{th,u}} \quad (4.2)$$

Die laminare Flammgeschwindigkeit s_L^0 kann experimentellen Daten oder Korrelationen, vgl. Seite 26, entnommen werden. Unter Verwendung der Gleichungen (4.1) und (4.2) ist in Abbildung 4.1 der Verlauf der Reaktionsrate für eine stöchiometrische Methanflamme für den Umgebungsdruck $1bar$ und $5bar$ über dem Brennstoffmassenbruch aufgetragen. Für eine übersichtliche Darstellung ist die maximale Reaktionsrate auf 1 normiert. Die verwen-

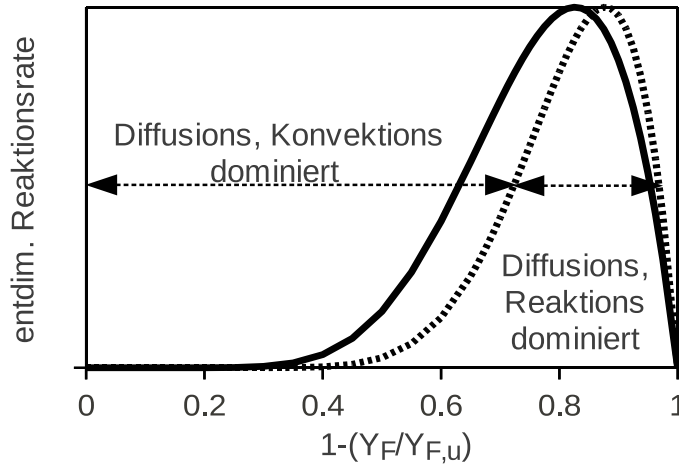


Abbildung 4.1: Normierte Reaktionsrate $\dot{\omega}_F / \max(\dot{\omega}_F)$ bei Einschnittchemie für $1bar$ (durchgezogene Linie) und $5bar$ (gepunktete Linie); dominierende Mechanismen sind für $5bar$ eingetragen

deten Stoffdaten sind Gu et al. [68] entnommen und in Tabelle 4.1 zusammengefasst. Der Verlauf zeigt, dass nur in einem kleinen Bereich, $(1 - 2/\beta_{Zel}) < (1 - Y_F / Y_{F,u})$, Reaktions- und Diffusionsmechanismen dominieren [134], während in einem deutlich größeren Bereich nur Diffusions- und Konvektionsmechanismen stattfinden. Mit zunehmendem Druck verringert sich zudem der reaktionsdominierte Bereich. Der Verlauf des Reaktionsquellterms

$p[\text{bar}]$	$T_u[\text{K}]$	$T_b[\text{K}]$	β_{Zel}	$s_L^0[\text{m/s}]$
1	301	2245	4.9	0,36
5	301	2275	7.3	0,2

Tabelle 4.1: Werte für β_{Zel}, T_u, T_b für eine stöchiometrische Methanflamme bei 1bar und 5bar zur Auswertung der Reaktionsrate in Gleichung (4.1)

zeigt zudem, dass es sich hierbei um ein steifes Problem handelt, welches den Einsatz spezieller numerischer Verfahren benötigt bzw. eine aufwendige Vernetzung im Bereich $(1 - 2/\beta_{Zel}) < (1 - Y_F/Y_{F,u}) < 1$ erfordert.

Laminare Flammengeschwindigkeit

Die laminare Flammengeschwindigkeit s_L^0 kann man als die Geschwindigkeit interpretieren, mit der sich eine frei propagierende Flamme in einem ruhenden, unverbrannten Gemisch fortbewegt. s_L^0 wird meist numerisch mit detaillierter Chemie an 1-D Flammen oder experimentell, beispielsweise an Bunsenbrennerflammen oder sich ausdehnenden Kugelflammen in Verbrennungsbomben bestimmt. Eine Übersicht zu Messmethoden für laminare Flammengeschwindigkeiten ist in Joos [79] aufgelistet. Abbildung 4.2 illustriert für eine stationäre, ebene Flamme und für eine stationäre, schräg angeströmte Flammenfront das Prinzip der laminaren Flammengeschwindigkeit. Während für die ebene stationäre Flamme

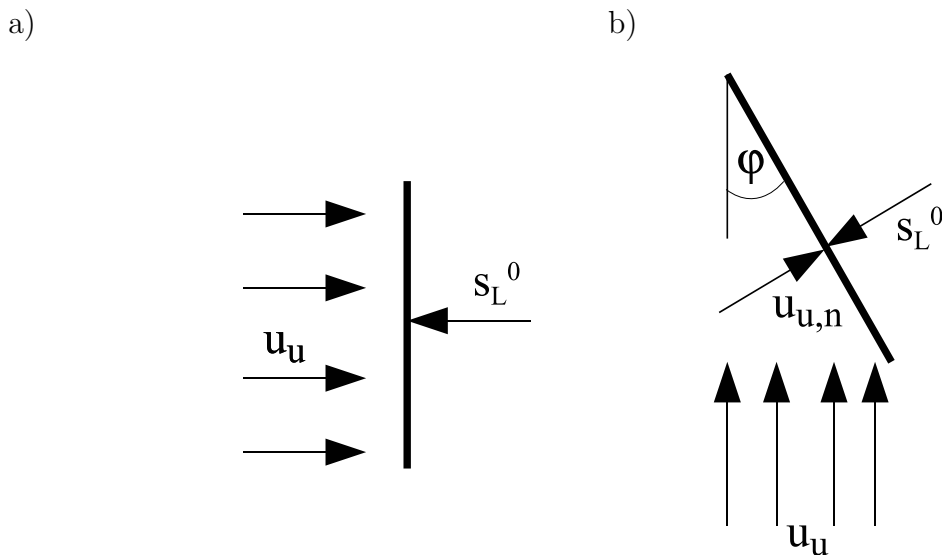


Abbildung 4.2: Laminare Flammengeschwindigkeiten; a) ebene stationäre Flamme; b) schräg angeströmte, stationäre Flamme

die laminare Flammengeschwindigkeit der Geschwindigkeit des unverbrannten Brennstoff-Luftgemischs u_u entspricht, errechnet sich für die schräg angeströmte Flamme s_L^0 aus:

4.1 Laminare Vormischflammen

$$s_L^0 = u_{u,n} = \sin(\varphi)u_u \quad (4.3)$$

Erste Korrelationen für die laminare Flammengeschwindigkeit wurden von Metgahalchi und Keck [115] anhand experimentell untersuchter, laminarer Flammen für unterschiedliche Brennstoff-Luft Gemische, Drücke und Temperaturen erstellt:

$$s_L^0 = s_{L,ref}^0 \left(\frac{T_u}{T_{u,ref}} \right)^{\gamma_{sl}} \left(\frac{p}{p_{ref}} \right)^{\beta_{sl}} \quad (4.4)$$

Gleichung (4.4) erlaubt zwei grundlegende Eigenschaften der laminaren Brenngeschwindigkeit abzuschätzen. (1) Da γ_{sl} für gängige Brennstoffluftverhältnisse immer positiv ist [68, 115], führt eine zunehmende Aufheizung des unverbrannten Gemischs zu einer Zunahme der laminaren Flammengeschwindigkeit. (2) Für magere Gemische, $\Phi < 0$, gilt $\beta_{sl} < 0$ [68, 115], so dass s_L^0 mit zunehmendem Druck abnimmt. Korrelationen zur Berechnung der laminaren Flammengeschwindigkeit bei magerer bis stöchiometrischer Verbrennung für einen umfangreichen Temperatur- und Druckbereich stellen Göttgens et al. [62], anhand numerischer Berechnungen stationärer, eindimensionaler Flammen unter Berücksichtigung von 82 Reaktionsmechanismen, für diverse Kohlenwasserstoffflammen bereit. s_L^0 lässt sich damit über einen analytischen Ausdruck berechnen [62]:

$$s_L^0 = FY_{F,u}^m \exp(-G/T^0) \frac{T_u}{T^0} \left(\frac{T_b - T^0}{T_b - T_u} \right)^n \quad (4.5)$$

Göttgens et al. [62] identifizieren eine “inner layer” Temperatur T^0 :

$$T^0 = -E \left(\ln \frac{p}{B} \right)^{-1} \quad (4.6)$$

in deren Bereich die Umsetzung des Brennstoffs in der laminaren Flamme stattfindet. Die Konstanten in den Gleichungen (4.5) und (4.6) für die Brennstoffe Methan und Propan sind in Tabelle 4.2 zusammengefasst. In Abbildung 4.3 ist der Verlauf der laminaren Flam-

Brennstoff	$B[bar]$	$E[K]$	$F[cm/s]$	$G[K]$	m	n
CH_4	3,1557e8	23873,0	22,176	-6444,27	0,565175	2,5158
C_3H_8	2,2501e6	17223,5	1274,89	-1324,78	0,582214	2,3970

Tabelle 4.2: Auflistung der Konstanten aus [62] zur Auswertung von Gleichung (4.5) und (4.6)

mengeschwindigkeit für variierende Methan-Luft Verhältnisse und Drücke, berechnet mit den Korrelationen in den Gleichungen (4.5) und (4.6), experimentellen Daten von Gu et al. [68] gegenübergestellt. Die laminare Flammengeschwindigkeit in [68] wurde anhand sich ausdehnender, kugelförmiger Flamme in einer Verbrennungsbombe bestimmt. Wie anhand von Gleichung (4.4) dargelegt, ergibt sich ein Potenzgesetz zwischen Druck und s_L^0 . Trotz unterschiedlicher Methoden in der Bestimmung der laminaren Flammengeschwindigkeit zeigt sich eine sehr gute Übereinstimmung der numerisch und experimentell bestimmten laminaren Flammengeschwindigkeit.

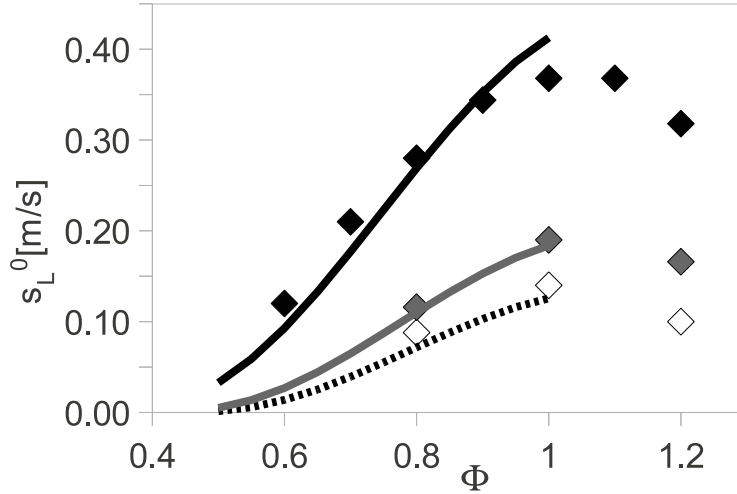


Abbildung 4.3: Laminare Flammgeschwindigkeit bei variierendem Druck und Äquivalenzverhältnis; Experiment von Gu et al. [68] (Rauten); Auswertung der Korrelationen von Göttgens et al. [62] (Linien); 1bar (schwarz), 5bar (grau), 10bar (weiß bzw. gestrichelt)

Laminare Flammendicke

Unter der Annahme, dass die laminare Flammendicke nur durch thermische Diffusion und die laminare Flammgeschwindigkeit beeinflusst wird, lässt sich eine laminare Flammendicke l_F abschätzen:

$$l_F = \frac{\alpha_{th,u}}{s_L^0} \quad (4.7)$$

l_F wird für $Le = 1$ als Zel'dovich Flammendicke bezeichnet und zumeist in verbrennungsspezifischen Kennzahlen als charakteristisches Längenmaß verwendet. Diese Definition erlaubt zudem die Abschätzung eines chemischen Zeitmaßes:

$$\tau_c = \frac{l_F}{s_L^0} = \frac{\alpha_{th,u}}{s_L^0{}^2} \quad (4.8)$$

Allerdings unterschätzt Gleichung (4.7) die tatsächliche Flammendicke in etwa um den Faktor 5 [134]. Eine genauere Definition der laminaren Flammendicke verwendet den Temperaturgradienten, bzw. den Gradienten des entdimensionierten Brennstoffmassenbruchs und wird als “maximale Gradientenmethode” bezeichnet:

$$l_{F,0} = \frac{T_b - T_u}{\max\left(\left|\frac{\partial T}{\partial x}\right|\right)} \quad (4.9)$$

Die Struktur einer laminaren Flamme sowie die “Gradientenmethode” anhand des Temperaturverlaufs einer eindimensionalen in x-Richtung propagierenden Flamme ist in Abbildung 4.4 dargestellt. Abgesehen von direkten numerischen Simulationen wird in der CFD die laminare Flammendicke nicht aufgelöst und Gleichung (4.9) kann nicht verwendet werden um die laminare Flammendicke zu bestimmen. Zudem kann $l_{F,0}$ nicht vorab

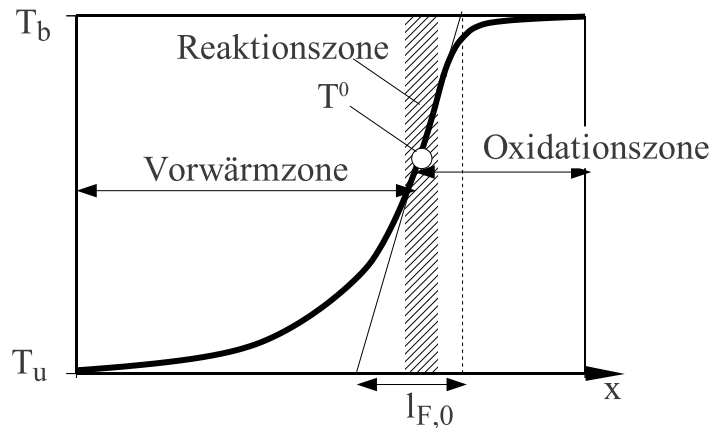


Abbildung 4.4: Temperaturverlauf einer laminaren in x-Richtung propagierenden Flamme mit dominierenden Mechanismen aus [129]

der Simulation, z.B. um Netzkriterien zu bestimmen, ausgewertet werden. Eine weitere Methode zur Abschätzung der laminaren Flammendicke wird von Blint [12] vorgeschlagen, die Poinot et al. [134] zu Folge eine sehr gute Übereinstimmung mit $l_{F,0}$ aufweist:

$$l_{F,B} = 2l_F \left(\frac{T_b}{T_u} \right)^{0,7} \quad (4.10)$$

Gleichung (4.10) kann verwendet werden, um das Verhältnis der “beobachteten” laminaren Flammendicke zur Gitterweite zu untersuchen.

Basierend auf einem 3-Schritt-Mechanismus untersuchen Peters und Williams [129] die Struktur einer stöchiometrischen Methan-Luftflamme und identifizieren entsprechend Abbildung 4.1 einen diffusions- und konvektionsdominierten Bereich, der als Vorwärmzone bezeichnet wird, siehe Abbildung 4.4, sowie einen Bereich in dem der Brennstoff sowie entstehende Radikale vollständig abgebaut werden. Der Bereich wird Reaktionszone genannt und es dominieren Diffusionsprozesse sowie chemische Reaktionen. Die Dicke der Reaktionszone $l_{F,R}$ wird in [134] definiert über:

$$l_{F,R} = \frac{l_{F,0}}{\beta_{Zel}} \quad (4.11)$$

Peters [128] schätzt die Reaktionszone für stoichiometrische, nicht vorgeheizte Verbrennung über $l_{F,R} = 0,1l_F$ ab und definiert damit die kleinst mögliche Flammendicke.

4.1.2 Einfluss von Streckeffekten auf die laminare Flammgeschwindigkeit

Die in Abschnitt 4.1.1 diskutierten Eigenschaften laminarer Flammen, insbesondere die laminare Flammgeschwindigkeit, sind gültig für frei propagierende, ebene Flammen. Ist die Flamme gekrümmt und Geschwindigkeitsgradienten tangential zur Flammenfront ausgesetzt, ändert sich die Flammenfläche und damit die laminare Flammgeschwindigkeit.

Diese Störungen der Flamme werden Streckeffekte κ genannt und sind definiert als die zeitliche Änderung der Flammenoberfläche A [29]:

$$\kappa = \frac{1}{A} \frac{dA}{dt} \quad (4.12)$$

Eine für numerische Anwendungen besser geeignete Beschreibung von Streckeffekten wurde von Candel und Poinot [29] für dünne, mehrdimensionale Flammen abgeleitet:

$$\kappa = \underbrace{(\delta_{ij} - n_i n_j)}_{\kappa_s} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \underbrace{s_d \frac{\partial n_i}{\partial x_i}}_{\kappa_c} \quad (4.13)$$

δ_{ij} bezeichnet das Kronecker-Delta, n_i den Normalen-Vektor der Flammenfront und s_d beschreibt den Versatz zwischen Strömungsgeschwindigkeit und Geschwindigkeit der Flammenfront. Der erste Term auf der rechten Seite, κ_s , beschreibt die Deformation der Flamme aufgrund von Geschwindigkeitsgradienten. Der zweite Term auf der rechten Seite, κ_c , beschreibt die Flammenkrümmung. Clavin [39] folgert anhand theoretischer Analysen, experimenteller Daten und Berücksichtigung von komplexer Chemie bei laminaren und turbulenten Vormischflammen einen linearen Zusammenhang zwischen der laminaren Flammengeschwindigkeit und der Streckung im Bereich kleiner Streckungsraten $\kappa \ll s_L^0 \alpha_{th,u}$ [106]. Der Einfluss von Streckeffekten auf die laminare Flammengeschwindigkeit kann damit berücksichtigt werden über:

$$s_L = s_L^0 - La \kappa = s_L^0 - Ma \kappa l_F \quad (4.14)$$

Der Proportionalitätsfaktor wird Markstein Länge La genannt. Die mit der Flammendicke l_F normierte Markstein Länge wird als Markstein Zahl Ma bezeichnet. Clavin und Joulin [38] schlagen vor, Deformations- und Krümmungseffekte separiert zu betrachten, womit Gleichung (4.14) sich schreibt als:

$$s_L = s_L^0 - (Ma_s \kappa_s + Ma_c \kappa_c) l_F \quad (4.15)$$

Verschiedene Ansätze zur Berechnung der Markstein Zahl sind in Lipatnikov und Chomiak [106, 107] und in [134] zusammengefasst. In dieser Arbeit wird die Formulierung von Müller et al. [120] verwendet, die auf der Arbeit von Göttgens et al. [62] aufbaut.

$$Ma_c = \frac{1 + \Pi}{\Pi} \left(\ln(1 + \Pi) + \frac{Ze Le - 1}{2 Le} \int_0^\Pi \frac{\ln(1 + x)}{x} dx \right) \quad (4.16)$$

mit $\Pi = (T^0 - T_u)/T_u$ sowie einer effektiven Zel'dovich Zahl:

$$Ze = 4 \frac{T_b - T_u}{T_b - T^0} \quad (4.17)$$

4.1.3 Landau-Darrieus und thermodiffusive Instabilitäten

Laminare Flammen können bei geringen Streckraten von dem linearen Zusammenhang in Gleichung (4.14) abweichen und zellulare Strukturen ausbilden, was zu einer Erhöhung der laminaren Flammengeschwindigkeit führt. Dieses Phänomen wird hydrodynamische Instabilität genannt und entsteht aus einer Kombination von Landau-Darrieus (LD) und thermodiffusiven (TD) Instabilitäten. Bei höheren Streckraten werden die Instabilitäten unterdrückt und man geht davon aus, dass tangentielle Geschwindigkeitsgradienten die zellularen Strukturen glätten [107]. Umfangreiche Untersuchungen und theoretische Grundlagen zu Instabilitäten finden sich in den Buchbeiträgen oder Überblicksartikeln von Lipatnikov und Chomiak [107], Bradley [16], Matalon [112] und Searby et al. [142]. Die folgende Zusammenfassung konzentriert sich auf Instabilitätseffekte bei global ebenen Flammen und auf die experimentell meist untersuchten expandierenden Kugelflammen. Weiterer Konfigurationen wie Stagnationsflammen werden in [110] analysiert.

Das Phänomen von LD- und TD Instabilitäten lässt sich anhand einer laminaren Flamme darstellen, die durch unverbranntes Gemisch propagiert. Treten im Strömungsfeld kleine, harmonische Störungen der Wellenlänge Λ auf, die in der Größenordnung der laminaren Flammendicke liegen, $l_F 2\pi/\Lambda \approx O(1)$, bilden sich kleine konkave und konvexe Bereiche aus [142]. Abbildung 4.5 illustriert das Prinzip.

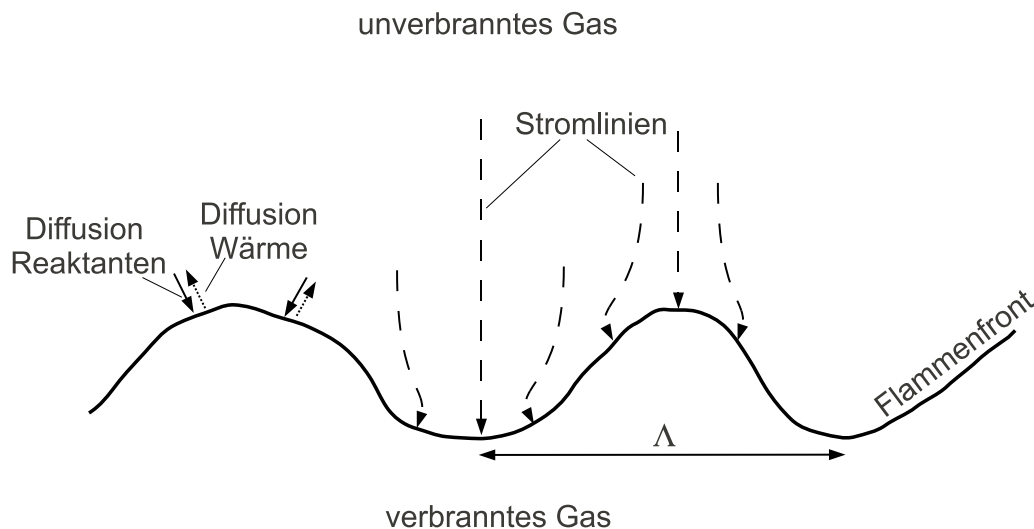


Abbildung 4.5: Prinzip von Landau-Darrieus und thermodiffusiven Instabilitäten

Landau-Darrieus Instabilitäten

Die Stromlinien des unverbrannten Gases in Abbildung 4.5 divergieren an der zum unverbrannten Gemisch hin konvexen Flammenfront. Dies führt zu einer Reduktion der Geschwindigkeit des unverbrannten Brennstoff-Luft Gemischs, die Flammenspitze kann weiter in das unverbrannte Gas propagieren und die Verwinklung prägt sich weiter aus. In der Flammensenke, konkav zum unverbrannten Gemisch, konvergieren die Stromlinien. Die

Strömungsgeschwindigkeit vergrößert sich und die Senke wird tiefer. Anhand von Stabilitätsanalysen kann gezeigt werden, dass eine unendlich dünne, laminare, global ebene Flamme, die konstant mit s_L^0 propagiert gegenüber Störungen jeder Wellenzahl $k_\Lambda = 2\pi/\Lambda$ instabil ist [107]. Die Wachstumsrate σ einer harmonischen Störung der Wellenlänge k_Λ auf der Flammenfront ergibt sich aus [107]:

$$\frac{\sigma}{k_\Lambda s_L^0} = \frac{\gamma}{\gamma + 1} \left(\sqrt{\frac{\gamma^2 + \gamma - 1}{\gamma}} - 1 \right) \quad (4.18)$$

mit dem Wärmefreisetzungsfaktor:

$$\gamma = \frac{T_b}{T_u} \quad (4.19)$$

Ist die Flammenfront lokalen Streckeffekten ausgesetzt, beschrieben durch Gleichung (4.12) und (4.15), propagiert die Flamme mit einer lokalen Flammgeschwindigkeit s_L und Stabilitätsanalysen zeigen [161], dass die Flammenfront stabil gegenüber Störungen ist, die oberhalb einer neutralen Wellenzahl $k_{\Lambda,n}$ liegen:

$$k_{\Lambda,n} = \frac{\gamma - 1}{2\gamma La} \quad (4.20)$$

Eine große Markstein Länge bedeutet damit eine stabile Flammenfront bereits bei kleineren Wellenzahlen, eine stets instabile Flammenfront ist durch negative Markstein Längen definiert.

Thermodiffusive Instabilitäten

Thermodiffusive Instabilitäten treten auf, wenn die Wärmediffusion kleiner als die Speziesdiffusion ist und damit $Le_k < 1$. An der Flammenspitze verläuft die Flammenfront konvex zum unverbrannten Gemisch, wodurch die Reaktionsenthalpie, in Form der Speziesdiffusion, schneller der Reaktionszone zugeführt als durch Wärmeleitung abgeführt wird. Daraus ergibt sich eine lokale Vergrößerung der Brenngeschwindigkeit und die Flammenspitze propagiert schneller in das unverbrannte Gas. Die Diffusionsmechanismen werden beschrieben durch die zweite Ableitung der Temperatur bzw. Spezies nach dem Ort, vgl. Gleichung (2.7) und (2.11). Damit diffundiert an der Senke der Flammenfront, die konkav zum unverbrannten Gemisch verläuft, die Wärme schneller von der Reaktionszone weg als Reaktionsenthalpie zugeführt wird. Die Flammenfront propagiert dort langsamer, die Flammensenke wird tiefer und die Flammenwinkelung vergrößert sich. Eine alleinige Betrachtung der TD-Instabilitäten zeigt, dass auch hier eine neutrale Wellenzahl $k_{\Lambda,n}$ existiert, oberhalb derer die Flamme stabil ist [107]:

$$k_{\Lambda,n} = \frac{1}{2l_F} \left(\frac{1}{2} \beta_{Zel} (1 - Le) - 1 \right)^{0,5} \quad (4.21)$$

Kombinierte LD- und TD-Instabilitäten bei ebenen Flammen

Theoretische Analysen der Wachstumsrate von harmonischen Störungen aufgrund des kombinierten Einflusses von LD- und TD-Instabilitäten bei ebenen Flammen führen zu diversen Dispersionsrelationen, die in Lipatnikov und Chomiak [107] zusammengefasst sind. So formulieren Matalon und Matowsky [111], Pelce und Clavin [126] oder Clavin und Garcia [37] lineare Dispersionsbeziehungen, die allerdings nur für $\beta_{Zel}(Le - 1) = O(1)$ und den Grenzbereich großer Wellenlängen, definiert durch $k_{\Lambda}l_F \ll 1$ sowie kleiner Amplituden der Verwinkelung, definiert durch $\sigma\tau_c \ll 1$ gültig sind. Der Vergleich der Dispersionsrelationen in [107] zeigt zudem deutliche Unterschiede in der Vorhersage der Wachstumsraten von Störungen. Eine äußerst umfangreiche Dispersionsrelation wurde von Class et al. [36] vorgeschlagen, die für beliebige Lewis Zahlen und auch kleine Wellenlängen der Störung gültig ist. Die Gegenüberstellung der verschiedenen Dispersionsrelationen von [36, 37, 111, 126] in [107] zeigt eine sehr gute Übereinstimmung der Beziehungen von Class et al. [36] und Matalon et al. [111]. Da diese Arbeit sich auf Bereiche $\sigma\tau_c \ll 1$ sowie $k_{\Lambda}l_F \ll 1$ konzentriert, wird aufgrund der übersichtlicheren Formulierung die Dispersionsrelation von Matalon et al. [111] diskutiert. Die Wachstumsrate einer Störung schreibt sich damit zu¹:

$$\sigma = s_L^0 \Psi_{LD} k_{\Lambda} - \alpha_{k,u} \Psi k_{\Lambda}^2 \quad (4.22)$$

mit

$$\Psi = \frac{\gamma}{2(\gamma - 1)} \frac{\beta_{Zel}(Le - 1) I(\gamma + \Psi_{LD})(1 + \Psi_{LD}) + (\gamma - 1)^2 + \gamma(\gamma + 1 + 2\Psi_{LD}) \ln \gamma}{\gamma + \Psi_{LD}(\gamma + 1)}$$

Das Integral I ist definiert über $I = \int_0^{\gamma-1} \frac{\ln(1+x)}{x} dx$, Ψ_{LD} entspricht der Landau-Darrieus Instabilität und damit der rechten Seite von Gleichung (4.18). Zudem wird generell bei Betrachtung eines 2-Reaktanten Gemischs Le durch eine effektive Lewis Zahl ersetzt [107, 112]:

$$Le_{eff} = 1 + \frac{(Le_{\ddot{u}} - 1) + (Le_m - 1)(1 + \beta_{Zel}(\max(\Phi, 1/\Phi) - 1))}{2 + \beta_{Zel}(\max(\Phi, 1/\Phi) - 1)} \quad (4.23)$$

wobei \ddot{u} den überschüssige und m den mangelnden Reaktant bezeichnet. Die neutrale Wellenzahl der Dispersionsrelation in Gleichung (4.22), oberhalb derer die Flamme stabil ist, ergibt sich für $\sigma = 0$ womit folgt:

$$k_{\Lambda,n} = \frac{\Psi_{LD}}{\Psi} \frac{1}{l_F} \quad (4.24)$$

Betrachtet man Gleichung (4.22), so beschreibt der erste Term auf der rechten Seite den Beitrag der LD-Instabilität zur Wachstumsrate, während der zweite Term auf der rechten Seite den kombinierten Einfluss von LD- und TD-Instabilitäten beschreibt [107]. Die

¹ $\alpha_{k,u}$ in Gleichung (4.22) bezieht sich auf die mangelnde Reaktantenkomponente und entspricht bei magerer Verbrennung damit der Diffusivität des Brennstoffs.

Formulierung von Ψ in Gleichung (4.22) zeigt, dass bei $Le > 1$ die Wachstumsrate einer Störung der Wellenlänge Λ reduziert wird, während bei $Le < 1$ die Wachstumsrate $\sigma(k_\Lambda)$ zunimmt. Die Auswertung von Gleichung (4.22) für unterschiedliche Lewis Zahlen in Abbildung 4.6 illustriert den Le Einfluss auf die Wachstumsrate von Störungen sowie den Stabilitätsbereich. Die Verbrennungsdaten zur Auswertung von Gleichung (4.22) entsprechen einer stöchiometrischen Methan-Luft Flamme. Die verwendeten Lewis Zahlen entsprechen einer stöchiometrischen Propan-Luft Flamme mit $Le = 1,64$ sowie einer mageren Wasserstoff-Luft Flamme mit $Le = 0,8$. Zudem ist die alleinige Auswertung der Landau-Darrieus Instabilität entsprechend Gleichung (4.18) eingezeichnet, die stets eine instabile Flamme vorhersagt.

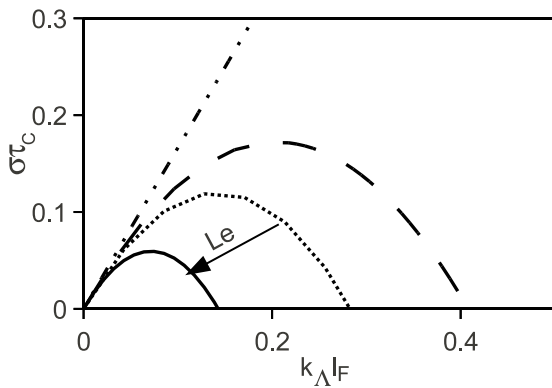


Abbildung 4.6: Entdimensionierte Wachstumsrate für unterschiedliche Lewis Zahl; $Le = 1,64$ (durchgezogen), $Le = 1$ (gepunktet), $Le = 0,8$ (gestrichelt), nur Landau-Darrieus Effekt (strich-punkt)

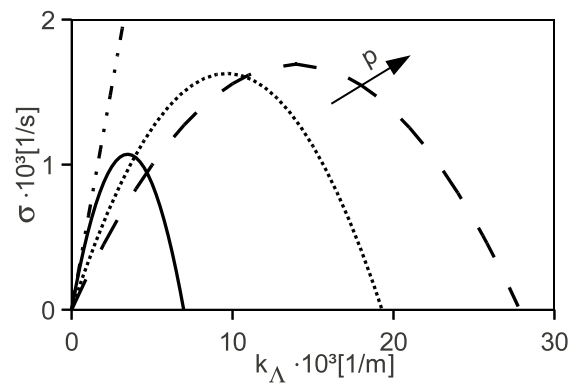


Abbildung 4.7: Entdimensionierte Wachstumsrate für unterschiedlichen Druck; $p = 1\text{bar}$ (durchgezogen), $p = 5\text{bar}$ (gepunktet), $p = 10\text{bar}$ (gestrichelt), nur Landau-Darrieus Effekt (strich-punkt)

Experimentelle Untersuchungen in [68, 89, 90] zeigen, dass LD- und TD-Instabilitäten vor allem bei Hochdruckverbrennung auftreten. Um den Druckeinfluss auf die Wachstumsrate von Instabilitäten in Gleichung (4.22) zu diskutieren, wird zunächst $Le = 1$ und damit $\Psi > 0$ angenommen. Zudem kann γ als druckunabhängig betrachtet werden. Da mit zunehmendem Druck s_L^0 abnimmt, verringert sich die Wachstumsrate zunächst mit zunehmendem Druck für kleine k_Λ , da LD-Instabilitäten linear mit k in Gleichung (4.22) eingehen. Zudem wird die Flamme dünner und damit instabiler. Die Flamme wird damit stabiler gegenüber Störungen großer Wellenlängen. Da $\alpha_{k,u}$ mit zunehmendem Druck sinkt² verringert sich der stabilisierende Einfluss der TD-Effekte und die Flamme wird bei erhöhtem Druck instabiler bei Störungen kleinerer Wellenlängen, da die TD-Instabilitäten mit k_Λ^2 skalieren. Die zunehmende Instabilität mit zunehmendem Druck erklärt sich auch durch die immer dünner werdenden Flammen. Für $Le < 1$ kann Ψ negativ werden. Da β_{Zel} mit dem Druck skaliert, führt dies zu einer weiteren Destabilisierung der Flamme bei hohem Druck. Abbildung 4.7 zeigt den destabilisierenden Einfluss mit zunehmendem Druck für

² für $Le = 1$ und $Sc = 1$ gilt $D_{d,u} = \nu \sim p^{-1}$

eine stöchiometrische Methan-Luft-Flamme. Da sich τ_c als auch l_F mit dem Druck ändern, wird die dimensionsbehaftete Darstellung gewählt.

Kombinierte LD- und TD-Instabilitäten bei kugelförmigen expandierenden Flammen

Die Dispersionsbeziehung in Gleichung (4.22) bezieht sich auf global ebene Flammen. Stabilisierende Streckeffekte und Konvektion entlang der Flamme werden nicht berücksichtigt. Experimentell werden LD- und TD-Instabilitäten in Kombination mit Streckeffekten häufig an expandierenden Kugelflammen untersucht. Diese sind meist kurz nach ihrer Zündung stabil, da sie anfangs aufgrund ihrer großen Ausdehnungsrate hohen Streckraten ausgesetzt sind. Mit zunehmendem Radius wird die Flammenkrümmung geringer, die stabilisierende Streckrate sinkt und die Flammen können instabil werden. Anhand theoretischer Analysen entwickeln Bechtold und Matalon [11] eine Dispersionsrelation welche die Entwicklung von LD- und TD-Effekten auf kugelförmige, expandierende Flammen, anhand des Flammenballradius r unter Berücksichtigung von Streckeffekten beschreibt. Die Theorie ermöglicht es, das Verhalten von expandierenden Kugelflammen mit einer potentiellen Transition einer glatten Flamme zu zellularen Strukturen zu beschreiben und den stabilisierenden Einfluss von Streckeffekten quantitativ abzuschätzen. Die folgende Dispersionsrelation ist Bechtold et al. [11] und und Bradley et al. [21] entnommen und enthält korrigierte Ausdrücke aus Bradley [15]. Für kugelförmige Flammen wird eine entdimensionierte, sphärische Wellenzahl n_{sp} definiert:

$$n_{sp} = \frac{2\pi Pe_r}{\Lambda/l_F} \quad (4.25)$$

der entdimensionierte Radius wird über eine Peclet Zahl beschrieben: $Pe_r = r/l_F$. Die entdimensionierte Amplitude \mathcal{A} einer Störung ist gegeben durch:

$$\mathcal{A} = \mathcal{A}_0 \left(\frac{r}{r_0} \right)^{\sigma_{LD,sp}(1+\Omega/Pe_r \ln(r/r_0))} \quad (4.26)$$

Die Zeitinformation der expandierenden Flamme in Gleichung (4.26) ist in Pe_r bzw. r enthalten. \mathcal{A}_0 bezeichnet die Amplitude der Störung zur Zeit $t = 0$. Die Wachstumsrate σ_{sp} einer Störung ergibt damit zu [15]:

$$\sigma_{sp} = \frac{d \ln(\mathcal{A}/\mathcal{A}_0)}{d \ln(Pe)} = \sigma_{LD,sp} \left(1 - \frac{\Omega}{Pe_r} \right) \quad (4.27)$$

$\sigma_{LD,sp}$ beschreibt den Beitrag der LD-Instabilität zur Wachstumsrate, $\sigma_{LD,sp}\Omega/Pe_r$ den Beitrag durch TD-Effekte. Für $Le = 1$ und unter der Annahme, dass der Wärmefreisetzungsparameter γ unabhängig vom Druck ist, geht der Druckeinfluss allein über die Peclet Zahl ein. Die Gleichungen zur Berechnung von Ω , σ_{sp} sind im Anhang A.2 zusammengefasst. Die Markstein Zahl in obiger Dispersionsrelation errechnet sich aus [15]:

$$Ma_{BM} = \frac{\gamma \int_1^\gamma \frac{\ln s}{s-1} ds}{2\gamma} \left[\beta_{Le} + \frac{2\gamma^2 \ln \gamma}{\gamma \int_1^\gamma \frac{\ln s}{s-1} ds (\gamma - 1)} \right] \quad (4.28)$$

β_{Le} beinhaltet den kombinierten Einfluss der Zel'dovich Zahl und der Abweichen der Lewis Zahl von $Le = 1$ und ist im Anhang A.2 gegeben. Die Auswertung der Dispersionsrelation σ_{sp} , sowie der Beitrag der LD-Instabilität $\sigma_{LD,sp}$ und TD-Instabilität $\sigma_{LD,sp}\Omega/Pe_r$ in Gleichung (4.27) für eine stöchiometrische Methan-Luft-Flamme mit $T_u = 300K$ und zwei unterschiedlichen Peclet Zahlen zeigt Abbildung 4.8. Für die dargestellte Flamme mit

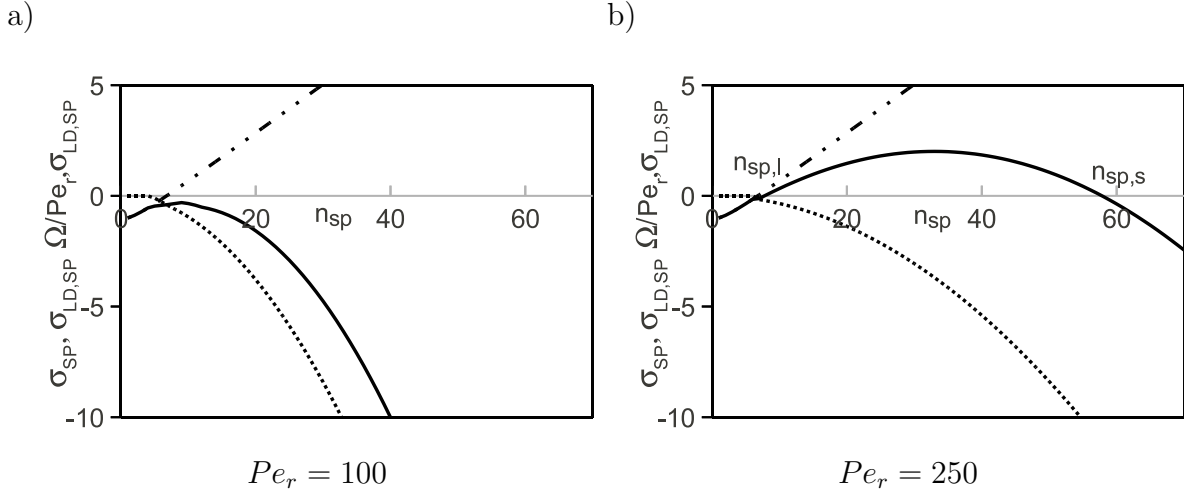


Abbildung 4.8: Auswertung der Dispersionsrelation Gleichung (4.27) für expandierende Kugelflammen; a) $Pe_r = 80$; b) $Pe_r = 250$; σ_{sp} (durchgezogene Linie), $\sigma_{LD,sp}$ (Strichpunktlinie), $\sigma_{sp}\Omega/Pe_r$ (gepunktete Linie)

$Pe_r = 100$ überwiegt für alle Wellenzahlen n_{sp} der stabilisierende Einfluss thermodynamischer Effekte und Streckeffekte die LD-Instabilität. Die Flamme ist für alle Wellenzahlen stabil. Das rechte Bild in Abbildung 4.8 mit $Pe_r = 250$ entspricht einer kugelförmigen Flamme, die sich um den Faktor 2,5 ausgedehnt hat. Mit zunehmendem Radius verringern sich die stabilisierenden Streckeffekte und die Flamme wird in einem Wellenzahlenbereich $n_{sp,l} < n < n_{sp,s}$ instabil. $n_{sp,l}$ entspricht der sphärischen Wellenzahl, bei der zuerst Instabilitäten auftreten, $n_{sp,s}$ kann als neutrale sphärische Wellenzahl interpretiert werden. Aufgrund der Definition $Pe_r = r/l_F$, kann $Pe_r = 250$ als Druckerhöhung von 1bar in Abbildung 4.8a) auf 5bar in Abbildung 4.8b) bei gleichem Radius interpretiert werden. Die Dispersionsbeziehung in Gleichung (4.27) beschreibt damit konsistent zur Dispersionsbeziehung von Matalon und Matkowsky [111] in Gleichung (4.22) eine zunehmende Instabilität der Flamme mit zunehmendem Druck.

Bevorzugte Diffusion

Der Vollständigkeit halber sei die bevorzugte Diffusion erwähnt. Bei mageren Gemischen, $\Phi < 1$, wenn der Brennstoff schneller zur Reaktionszone diffundiert als der Oxidator³ wird das Gemisch in der Reaktionszone an der Flammenspitze "stöchiometrischer" und

³fette Gemische, $\Phi > 1$ sind hingegen instabil, wenn der Oxidator schneller zur Reaktionszone diffundiert als der Brennstoff.

die Verwinklung erhöht sich. Unter der Annahme, dass der Massenbruch des Oxidators deutlich größer als der des Brennstoffs ist, kann dieser als konstant betrachtet [107], so dass die bevorzugte Diffusion im Weiteren vernachlässigt wird.

4.2 Turbulente Vormischflammen

4.2.1 Beschreibung turbulenter Vormischflammen

Die turbulente Verbrennung ist charakterisiert durch eine gegenseitige Wechselwirkung der Flamme mit den turbulenten Fluktuationen des Strömungsfeldes. So beeinflussen die chemischen Reaktionen der Verbrennung das Strömungsfeld durch eine Erhöhung der Temperatur und damit eine Erhöhung der Viskosität. Geschwindigkeitsschwankungen werden dadurch stärker gedämpft und die turbulente Strömung kann relaminarisieren. Andererseits führt die Wärmefreisetzung in der Flamme zu einer Verringerung der Dichte. Die damit verbundene Expansion führt zu einer Beschleunigung des Strömungsfeldes und zu einer Turbulenzproduktion. Der kombinierte Einfluss der Flamme auf die Turbulenz ist allerdings situationsabhängig [134]. Eine Einflussgröße ist beispielsweise die Größe der turbulenten Schwankung vor der Flammenfront.

Der Einfluss der Turbulenz auf die Flamme führt zu einer räumlichen und zeitlichen Schwankung der Flammenfront, was als Periodizität der Flamme bezeichnet wird. Die Dicke der Flamme im zeitlichen Mittel wird als turbulente Flammendicke δ_t bezeichnet. Aus der Periodizität der Flamme folgt eine Periodizität der thermischen Expansion, welche eine "Scheinturbulenz" einführt und die berechnete oder gemessene Turbulenz verfälscht. Zudem führt die Turbulenz in der Regel zu einer Vergrößerung der Brenngeschwindigkeit der Flamme. Damköhler [42] führt dies auf zwei unterschiedliche Mechanismen zurück. Im Grenzbereich großer Turbulenzskalen erhöht sich die Brenngeschwindigkeit aufgrund einer Verwinklung der Flammenfront durch die Turbulenz. Dadurch vergrößert sich eine anfangs glatte Flammenfront der Fläche A , auf eine turbulente Flammenfront der Fläche A_t , die lokal mit der laminaren Flammengeschwindigkeit propagiert. Abbildung 4.9 a) illustriert das Prinzip einer turbulent gefalteten Flammenfront.

Die globale, sogenannte turbulente Flammengeschwindigkeit s_t lässt sich durch Gleichsetzen des Massenstroms \dot{m} durch die turbulente Flammenfront mit dem Massenstrom durch die Projektionsfläche beschreiben:

$$\dot{m} = \rho_u s_L^0 A_t = \rho_u s_t A \quad (4.29)$$

Damit definiert sich die turbulente Flammengeschwindigkeit über [42]:

$$\frac{s_t}{s_L^0} = \frac{A_t}{A} \quad (4.30)$$

Unter der Annahme, dass im Bereich großer Turbulenzskalen die turbulente Flammengeschwindigkeit nur vom Betrag der turbulenten Schwankung abhängt, lässt sich diese abschätzen über:

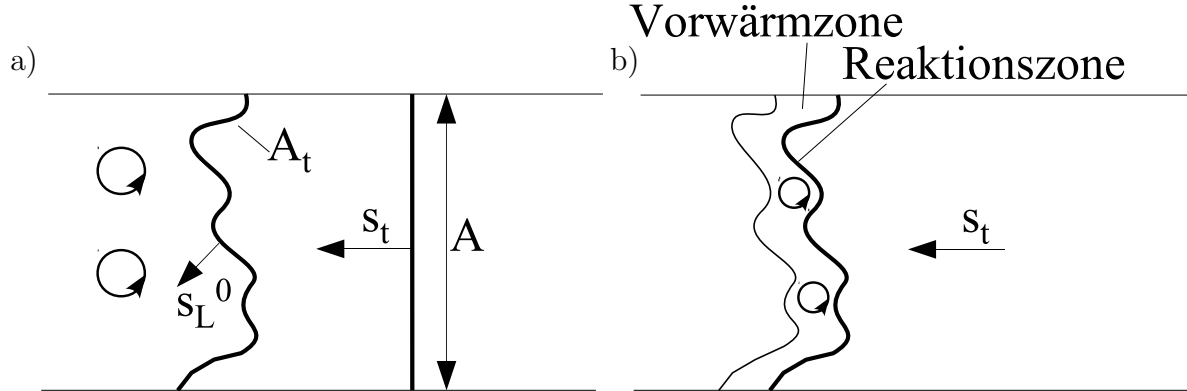


Abbildung 4.9: Von Damköhler [42] identifizierte Mechanismen bei turbulenter Vormischverbrennung; a) Grenzbereich grober Skalen; b) Grenzbereich kleiner Skalen

$$\frac{s_t}{s_L^0} \sim \frac{u'}{s_L^0} \quad (4.31)$$

Der zweite Mechanismus wird im Grenzbereich kleiner Turbulenzskalen beschrieben. Dabei ist die Energie kleinerer Skalen groß genug um in die Vorwärmzone der Flamme einzudringen. Ausgehend von der Skalierung der laminaren Flammgeschwindigkeit mit der Wärmediffusion:

$$s_L^0 \sim \left(\frac{\alpha_{th}}{\tau_c} \right)^{0,5} \quad (4.32)$$

argumentiert Damköhler [42], dass die turbulente Flammgeschwindigkeit in diesem Bereich mit einer turbulenten Diffusion skaliert:

$$s_t \sim \left(\frac{\alpha_t}{\tau_c} \right)^{0,5} \quad (4.33)$$

Gleichung (4.32) eingesetzt in Gleichung (4.33) zeigt, dass im Grenzbereich kleiner Turbulenzskalen die turbulente Flammgeschwindigkeit mit

$$\frac{s_t}{s_L^0} \sim \left(\frac{u' l_t}{s_L^0 l_F} \right)^{0,5} \quad (4.34)$$

skaliert, wobei man die turbulente Diffusivität über $\alpha_t \sim l_t u'$ und die laminare Diffusivität über $\alpha_{th} = s_L^0 l_F$ beschreibt. Experimentelle Arbeiten, z.B. zusammengefasst in Gülder [69] zeigen eine gute Übereinstimmung mit Damköhlers Analysen und die turbulente Flammgeschwindigkeit lässt sich allgemein beschreiben über [128]:

$$\frac{s_t}{s_L^0} = 1 + C \left(\frac{u'}{s_L^0} \right)^n \quad (4.35)$$

mit den Konstanten C und n . Peters [127] formuliert anhand theoretischer Überlegungen einen algebraischen Ausdruck für die turbulente Flammengeschwindigkeit:

$$s_t = s_L^0 \left[1 + \left(-\frac{0,39}{2} \frac{l_t}{l_F} + \left(\left(\frac{0,39}{2} \frac{l_t}{l_F} \right)^2 + 0,78 \frac{u' l_t}{s_L^0 l_F} \right)^{0,5} \right) \right] \quad (4.36)$$

Gleichung (4.36) wird im Grenzbereich großer Wirbel $l_t/l_F \rightarrow \infty$ zu $s_t = s_L^0 + 2u'$ und entspricht im Grenzbereich kleiner Wirbel $l_t/l_F \rightarrow 0$, $s_t = s_L^0 + s_L^0(\alpha_t/\alpha_{th})$. Die gute Übereinstimmung von Gleichung (4.36) mit experimentellen Daten in [127] unterstützt die Annahmen, dass die von Damköhler [42] beschriebenen Mechanismen die Realität korrekt beschreiben.

Einen schematischen Verlauf der turbulenten Brenngeschwindigkeit über die turbulente Schwankung zeigt Abbildung 4.10.

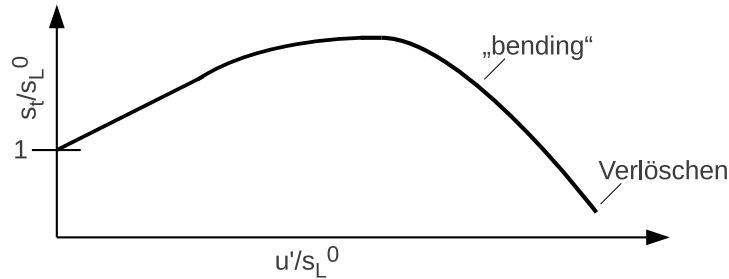


Abbildung 4.10: Prinzipielles Verhalten der turbulenten Flammengeschwindigkeit mit zunehmender Turbulenz [134]

Bei geringer Turbulenz folgt die turbulente Flammengeschwindigkeit einem linearen Verlauf, der interpretiert werden kann als ein durch grobskalige Turbulenz dominierter Bereich. Diesem folgt ein gekrümmter und schließlich ebener Verlauf, dem sich eine Reduzierung der turbulenten Flammengeschwindigkeit anschließt, was als “Bending” bezeichnet wird. Bei hoher Turbulenz tritt schließlich ein Verlöschen der Flamme auf. Der qualitative Verlauf orientiert sich an Poinsoot und Veynante [134] und sollte bis auf den Verlöschbereich durch Verbrennungsmodelle wiedergegeben werden können [134].

4.2.2 Kennzahlen turbulenter Vormischverbrennung

Ob die Flamme allein durch die Turbulenz gefaltet wird oder zusätzlich Wirbel die Vorwärmzone beeinflussen können, ist ein wichtiges Charakteristikum turbulenter Verbrennung. Kennzahlen werden daher eingeführt, um die Flammenstruktur zu charakterisieren. Die Kennzahlen stellen charakteristische Zeit- und Längenskalen der Verbrennung und der Turbulenz gegenüber. Während die Skalen der Verbrennung gut definiert sind, wird wie in Abschnitt 4.2.1 dargelegt, die Turbulenz durch die Verbrennung beeinflusst oder durch die Periodizität der turbulenten Flamme verfälscht. Daher werden meist die turbulenten Skalen des unverbrannten Gemischs am Brenneinlass bzw. bei Verbrennungsbomben kurz vor der Zündung verwendet sowie homogene und isotrope Turbulenz angenommen.

Das Verhältnis des turbulenten Zeitmaßes eines Wirbels der Größe l zum chemischen Zeitmaß, definiert eine Damköhler Zahl:

$$Da_l(l) = \frac{\tau_t(l)}{\tau_c} = \frac{l/u'}{l_F/s_L^0} \quad (4.37)$$

Eine große Damköhler Zahl $Da(l)$ bedeutet dabei, dass die charakteristische Zeit, bzw. das Längenmaß des Wirbels, zu groß ist um die innere Struktur der Flamme zu beeinflussen. Bei einer kleinen Damköhler Zahl kann hingegen die innere Struktur der Flamme durch den Wirbel der Größe l beeinflusst werden. Ungeklärt ist bisher, welche turbulenten Längenskalen die Flammenstruktur am stärksten beeinflussen können und damit am besten geeignet sind die Turbulenz-Chemie-Wechselwirkung zu charakterisieren [134]. Es werden daher zwei Kennzahlen eingeführt, die Damköhler Zahl für das integrale Längenmaß:

$$Da = Da_l(l_t) = \frac{\tau_t(l_t)}{\tau_c} = \frac{l_t/u'(l_t)}{l_F/s_L^0} \quad (4.38)$$

und die sogenannte Karlovitz Zahl welche das Verhältnis von chemischem Zeitmaß zum Zeitmaß eines Wirbels mit der Kolmogorov Größe beschreibt.

$$Ka = \frac{1}{Da(l_\eta)} = \frac{\tau_c}{\tau_t(l_\eta)} = \frac{u'(l_\eta)/l_\eta}{s_L^0/l_F} \quad (4.39)$$

Verwendet man die Gleichungen (2.28), (2.29) und (4.7), lässt sich die Karlovitz Zahl schreiben als [134]:

$$Ka = \left(\frac{l_t}{l_F}\right)^{-1/2} \left(\frac{u'}{s_L^0}\right)^{3/2} = \left(\frac{l_F}{l_\eta}\right)^2 \quad (4.40)$$

Zudem kann man unter Verwendung von $\nu = \alpha_{th,u} = s_L^0 l_F$ eine turbulente Reynolds Zahl für die Verbrennung definieren:

$$Re_t = \frac{u' l_t}{s_L^0 l_F} \quad (4.41)$$

anhand derer zwischen laminarer Verbrennung $Re_t < 1$ und turbulenter Verbrennung $Re_t > 1$ unterschieden werden kann.

4.2.3 Regimediagramme

Bereiche der vorherrschenden Flamme-Turbulenz Mechanismen bei turbulenter Verbrennung werden durch die Damköhler Zahl in Gleichung (4.38) und die Karlovitz Zahl charakterisiert:

Für $Ka < 1$ (und damit $Da > 1$) ist selbst das Zeitmaß des Kolmogorov Wirbels größer als das chemische Zeitmaß, bzw. der Kolmogorov Wirbel ist größer als die laminare Flammendicke, und kann die innere Struktur der Flamme nicht beeinflussen. Man folgert daraus, dass damit die innere Struktur der turbulenten Flamme der Struktur der

laminaren Flamme entspricht. Die turbulente Flammenoberfläche kann man in diesem Bereich beschreiben als eine Aneinanderreihung kurzer laminarer Flammen, sogenannten “flamelets”, die durch die Turbulenz gefaltet werden. Dieser Bereich wird daher “flamelet” Regime bezeichnet. Anhand der Größe der turbulenten Schwankung kann weiter unterteilt werden:

- (a) Für $u'/s_L^0 < 1$ nimmt man an, dass die turbulente Schwankung zu gering ist, um die Flamme zu falten und die Flamme wird nur leicht gewellt. Das Regime wird als “wrinkled flamelet” oder als Bereich “gewellter Flammenfront” bezeichnet.
- (b) Für $u'/s_L^0 > 1$, ist die Geschwindigkeit der Turbulenz groß genug um die Flamme so stark zu falten, dass die Flammenfronten miteinander interagieren können. Es kommt auch zur Inselbildung, mit Bereichen unverbrannten Gemischs innerhalb der Produkte. Der Bereich wird “corrugated flamelet” Regime bzw. Bereich “gefalteter Flammenfront” genannt und kann dem von Damköhler beschriebenen Grenzbereich großer Turbulenzskalen zugeordnet werden [128].

Gilt $Ka > 1$ & $Da > 1$ können die großen Turbulenzskalen die Flamme immer noch falten, die kleinsten Turbulenzskalen sind allerdings kleiner als die laminare Flammendicke und ändern die innere Struktur der Flamme, die damit nicht mehr die Struktur der laminaren Flamme aufweist. Der Bereich wird “thickened flame” Regime bzw. als “verdickte gefaltete Flammenfront” bezeichnet und kann als der von Damköhler beschriebene Grenzbereich kleiner Skalen identifiziert werden [128]. In diesem Bereich können zudem die kleinsten Wirbel so hohe Streckraten induzieren, dass die Flamme verlöscht [134].

Für $Da \ll 1$ läuft die turbulente Vermischung deutlich schneller ab als die chemische Reaktion und der Verbrennungsprozess ist damit durch die Reaktionsgeschwindigkeit limitiert. Flammenfronten können nicht mehr beobachtet werden und der Bereich wird als “well-stirred reactor regime” bzw. als “perfekt gerührter Reaktor” bezeichnet.

Die Klassifizierungen erlauben es, das in Abbildung 4.11 dargestellt Regime Diagramm nach Borghi zu erstellen. Man muss allerdings beachten, dass die Kennzahlen nur Größenordnungen wiedergeben und keiner exakten Quantifizierung der vorherrschenden Mechanismen entsprechen. So zeigt beispielsweise Driscoll [46] basierend auf der Auswertung experimenteller Daten, dass “flamelets” selbst oberhalb $Ka = 10$ existieren. Die Regimezuordnungen zeigen aber auch, welche physikalischen Prozesse bei welchen Kennzahlen dominieren und daher bei der Modellierung berücksichtigt werden müssen. Peters [128] schlägt vor den Bereich $Ka > 1$ unter Berücksichtigung der Dicke der Reaktionszone $l_{F,R}$ weiter zu unterteilen:

- (a) Für $l_\eta > l_{F,R}$ dringen die kleinsten Wirbel in die Vorwärmzone ein und beeinflussen deren Struktur. Die Reaktionszone kann aber nur gefaltet werden und ihre Struktur entspricht immer noch der einer laminaren Flamme. Das Regime wird “thin reaction zone” oder Bereich “dünner Reaktionszonen” genannt.

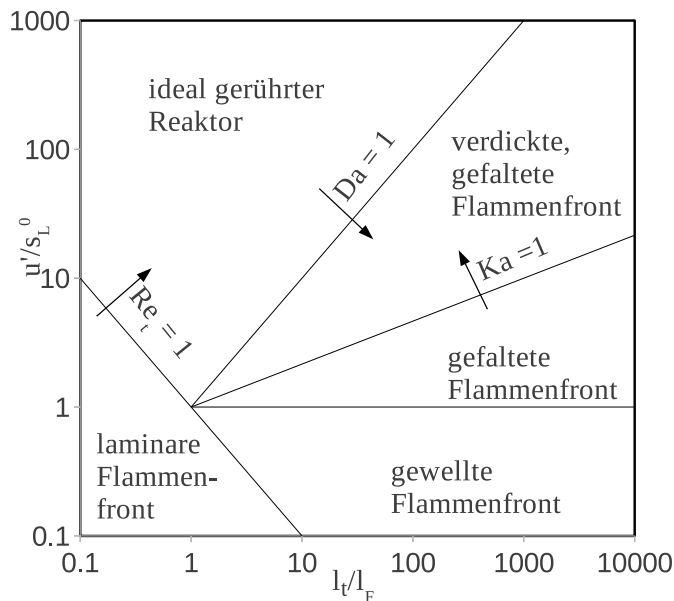


Abbildung 4.11: Regimediagramm nach Borghi in doppelt-logarithmischer Darstellung

- (b) Für $l_\eta < l_{F,R}$ können die kleinsten Wirbel die Struktur der Reaktionszone ändern, die gesamte Flammenstruktur entspricht damit nicht mehr der einer laminaren Flamme. Der Bereich wird “broken reaction zone” bzw. Bereich “zerrissener verteilter Flammen” genannt. Abgeschätzt wird dieser Bereich über $l_\eta = l_{F,R}$ und damit über $Ka = (l_F/l_{F,R})^2$. Geht man davon aus, dass $l_F/l_{F,R} \approx 10$ [128], beginnt dieser Bereich für $Ka > 100$.

Abbildung 4.12 zeigt das von Peters [128] modifizierte Verbrennungsdiagramm. Zusätzlich sind die Bereiche technischer Flammen, wie Gasturbinen und Ottomotoren eingezeichnet, wie sie von Hoffmann [77] identifiziert werden.

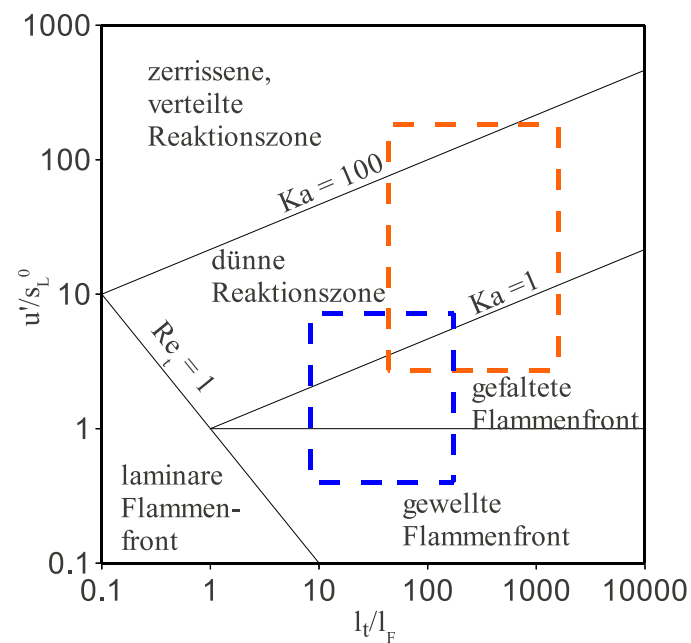


Abbildung 4.12: Verbrennungsdiagramm nach Peters [128] in doppelt-logarithmischer Darstellung; blauer Bereich kennzeichnet charakteristische Betriebspunkte ottomotorischer Verbrennung, oranger Bereich entspricht typischer Verbrennung in stationären Gasturbinen

5 Modellierung turbulenter Vormischverbrennung für die LES

In diesem Kapitel werden die für die LES von Vormischverbrennungssystemen benötigten Modellierungen zusammengefasst und diskutiert. Durch die Filterung der Erhaltungsgleichung der Spezies, Gleichung (3.15), wird der Einfluss der nicht aufgelösten, turbulenten Skalen auf die Faltung der Flamme vernachlässigt. Eine geeignete Modellierung des gefilterten Reaktionsquellterms $\overline{\dot{\omega}_k}$ ist die Hauptaufgabe der Verbrennungsmodellierung. Das Kapitel 5.2 fasst die in der LES generell verwendeten Ansätze zur Modellierung des gefilterten Reaktionsquellterms zusammen und diskutiert deren Eigenschaften. Da der Verbrennungsprozess den nicht aufgelösten, turbulenten skalaren Fluss $\widetilde{u_i Y_k} - \tilde{u}_i \tilde{Y}_k$ beeinflusst, wird die Eignung der Modellierung über eine Gradientenannahme in Abschnitt 5.3 diskutiert. Die Modellierung von Streckeffekten auf die laminare Flammengeschwindigkeit wird in Abschnitt 5.4 beschrieben. In Abschnitt 5.5 werden Ansätze zur Berücksichtigung von Wärmeverlusten sowie des Mechanismus der Flamme-Wand Interaktion zusammengefasst. Abschließend werden Modelle diskutiert, die den kombinierten Einfluss von Landau-Darrieus und thermodiffusiven Effekten auf die turbulente und die laminare Verbrennung berücksichtigen und damit die Grundlage bilden für die Modellierung von LD- und TD-Effekten in Kapitel 7.

5.1 Reaktionsfortschrittsvariable

Geht man von einer irreversiblen 1-Schritt Chemie aus, bei der das Brennstoff-Oxidator Gemisch zu Produkten umgesetzt wird:



reduziert sich die Bilanzierung der Spezies auf eine Erhaltungsgleichung, wobei man meist den Brennstoffmassenbruch Y_F bilanziert. Im LES Kontext schreibt sich diese zu:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_F}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{Y}_F}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\overline{\alpha_F \frac{\partial Y_F}{\partial x_i}} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\bar{\rho} \left(\widetilde{u_i Y_F} - \tilde{u}_i \tilde{Y}_F \right) \right) + \overline{\dot{\omega}_F} \quad (5.2)$$

Der mit dem Brennstoffmassenbruch im unverbrannten $Y_{F,u}$ und im verbrannten Gemisch $Y_{F,b}$ entdimensionierte Brennstoffmassenbruch:

$$\tilde{c} = \frac{\tilde{Y}_F - Y_{F,u}}{Y_{F,b} - Y_{F,u}} \quad (5.3)$$

wird als Fortschrittsvariable \tilde{c} bezeichnet. Gleichung (5.2) mit Gleichung (5.3) normiert, ergibt die Transportgleichung für \tilde{c} :

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{c}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{c}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} (\tilde{u}_i \tilde{c} - \tilde{u}_i \tilde{c})) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\alpha_c \frac{\partial \tilde{c}}{\partial x_i} \right) + \bar{\dot{\omega}}_c \quad (5.4)$$

Unter der Annahme von $Le = 1$ und der Vernachlässigung von Wärmeverlusten und konstantem Druck lässt sich die Reaktionsfortschrittsvariable auch durch eine normierte Temperatur beschreiben:

$$\tilde{c} = \frac{\tilde{T} - T_u}{T_b - T_u} \quad (5.5)$$

und Gleichung (5.4) kann als Erhaltungsgleichung der reduzierten Temperatur betrachtet werden. Unter der Annahme dünner Flammen, lässt sich ein einfacher Zusammenhang zwischen Favre und Reynolds gemittelter Reaktionsfortschrittsvariablen herleiten [134]:

$$\bar{c} = \frac{\gamma \tilde{c}}{1 + (\gamma - 1) \tilde{c}} \quad (5.6)$$

5.2 Übersicht der Modellierungsansätze des Reaktionsquellterms

Um den gefilterten Reaktionsquellterm in der LES zu modellieren, werden ähnlich wie in der RANS geometrische Beschreibungen der Flamme, wie die Flammenoberflächendichte Formulierung oder die “Level Set” Methode verwendet. Zudem werden auch LES Formulierungen der in der RANS verbreiteten Modellierung der turbulenten Flammengeschwindigkeit verwendet. PDF Modelle werden bisher in der LES von Vormischverbrennung wenig eingesetzt und sind hier nur der Vollständigkeit halber erwähnt. Übersicht und Anwendungen dazu sind beispielsweise in Kröger [72] zu finden. Eine in der LES häufig eingesetzte Methode, ist die Verwendung eines Arrhenius Ansatzes in Kombination mit einem künstlichen Aufdicken der Flamme.

5.2.1 Methode der künstlich vergrößerten Flammendicke

Wie in Kapitel 4.1.1 beschrieben, ist die laminare Flammendicke und die Reaktionszone in der CFD technisch relevanter Verbrennungssysteme deutlich kleiner als die Gitterweite. Verwendet man einen Arrhenius Ansatz um den Reaktionsquellterm $\bar{\dot{\omega}}_c$ zu beschreiben, würde dies aufgrund $\Delta > l_F$, zu numerischen Problemen und unphysikalischen Ergebnissen führen. Butler und O’Rourke [27] schlagen daher vor die laminare Flammendicke künstlich zu vergrößern. Betrachtet man eine Ein-Schrittreaktion¹ zeigt Gleichung (4.2) und (4.7), dass $s_L^0 \sim \sqrt{\alpha_{th,u} B}$ und $l_F^0 \sim \alpha_{th,u} / s_L^0$, wobei B den Vorfaktor des Arrhenius Ansatz in Gleichung (4.1) bezeichnet. Reduziert man den Vorfaktor im Arrhenius Ansatz um einen Aufdickungsfaktor F_F und erhöht die Diffusivität um den Faktor F_F bleibt die laminare Flammengeschwindigkeit konstant, während die laminare Flammendicke vergrößert wird

¹Das Konzept lässt sich auch für Mehrschrittreaktionen anwenden, vgl. [48].

und vom Rechenetz aufgelöst werden kann. Der Aufdickungsfaktor wird beispielsweise über $n\Delta/l_F^0$ berechnet, wobei n die Anzahl der Rechenzellen bezeichnet die zur Auflösung der Flamme gewünscht sind [34]. Verwendet man den Arrhenius Ansatz zur Schließung von $\overline{\dot{\omega}_c}$ wird die Erhaltungsgleichung der Fortschrittsvariablen \tilde{c} innerhalb des “Thickened Flame Approach” zu [34]:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{c}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{c}}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(F_F D_F \frac{\partial c}{\partial x_i} \right) + \frac{B}{F_F} \bar{\rho} (1 - \tilde{c}) \exp \left(-\frac{E_a}{\mathfrak{RT}} \right) \quad (5.7)$$

Durch die künstliche Verbreiterung der Flamme wird diese weniger stark durch die Flamme-Turbulenz Interaktion beeinflusst [134], was durch die Analyse der Damköhler Zahl $Da = (l_t/u')(s_L^0/l_F^0)$ gezeigt werden kann. Basierend auf der Auswertung von DNS Daten führt Colin et al. [40] daher eine Effizienz Funktion E ein:

$$E = \frac{s_{t,\Delta}}{s_L^0} \quad (5.8)$$

die den verringerten Einfluss der Turbulenz auf die Flammenfaltung korrigiert. Gleichung 5.7 unter Berücksichtigung von E schreibt sich zu [34]:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{c}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{c}}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(E F_F D_F \frac{\partial c}{\partial x_i} \right) + \frac{B}{F_F} E \bar{\rho} (1 - \tilde{c}) \exp \left(-\frac{E_a}{\mathfrak{RT}} \right) \quad (5.9)$$

Modelle für E werden in Colin et al. [40] sowie Charlette et al. [34, 35] vorgeschlagen. LES im “Thickened Flame” Kontext werden z.B. anhand einer turbulenten Bunsenbrennerflamme von Hernández-Peréz et al. [76] durchgeführt und von Wang et al [152] für eine turbulente Jet Flamme. LES mit einem lokalen Flammendickungsfaktor werden in z.B. in [48] durchgeführt.

5.2.2 Schließungsmodelle für die turbulente Flammengeschwindigkeit

Im RANS Kontext schlagen Zimont und Lipatnikov [163] vor, den Reaktionsquellterm $\overline{\dot{\omega}_c}$ zu beschreiben über:

$$\overline{\dot{\omega}_c} = \rho_u s_t |\nabla \tilde{c}| \quad (5.10)$$

die turbulente Flammengeschwindigkeit wird dabei modelliert über:

$$s_t = a_c u' \left(\frac{l_t}{u' \tau_c} \right)^{0,25} \quad (5.11)$$

Flohr und Pitsch [54] und später auch Zimont und Battaglia [162] formulierten eine direkte Übersetzung des Zimont Modells in den LES-Kontext:

$$s_{t,\Delta} = s_L^0 \left(1 + a_c u'_\Delta \left(\frac{\Delta}{u'_\Delta \tau_c} \right)^{0,25} \right) \quad (5.12)$$

wobei Flohr et al. [54] Gleichung (5.12) um s_L^0 erweitern, dass $s_{t,\Delta} \rightarrow s_L^0$ für $u'_\Delta \rightarrow 0$. Eine komplexere Formulierung für $s_{t,\Delta}$ die zwischen dem dünnen Reaktionszonen Regime und dem gefalteten Flammenfront Regime unterscheidet, wurde von Durand [48] vorgeschlagen. Evaluierungen der Modelle für $s_{t,\Delta}$ anhand einer Jet Flamme ist in [54] zu finden. LES von Flammenhalter stabilisierten Flammen und Freistrahlfammen finden sich in Zimont et al. [162] sowie in Durand [48] von Drallbrennern, Jetflammen und von Flammenhalter stabilisierten Flammen.

5.2.3 Level Set Formulierung

Die numerische Lösung der Speziestransportgleichung kann bei sehr dünnen Flammenfronten vernachlässigt werden, durch die Einführung eines passiven Skalarfelds G [84, 158]. Die Flammenfront wird durch die Fläche $G = G_0$ beschrieben. Der Bereich $G \neq G_0$ hat keine physikalische Bedeutung, allerdings beschreibt $G(x_i)$ i.d.R. den Abstand x_i zur Flammenfront [151]. Peters [128] verwendet $G_0 = 0$ und formuliert die sogenannte G-Gleichung im RANS Kontext zu [132]:

$$\rho \frac{\partial G}{\partial t} + \frac{\partial u_i G}{\partial x_i} = \rho s_L |\nabla G| - \rho \alpha_t \kappa |\nabla G| \quad (5.13)$$

Die Filterung der G-Gleichung führt schließlich zur G-Gleichung im LES-Kontext nach Pitsch [132]:

$$\bar{\rho} \frac{\partial \tilde{G}}{\partial t} + \bar{\rho} \frac{\partial \tilde{u}_i \tilde{G}}{\partial x_i} = \bar{\rho} s_t \left| \frac{\partial \tilde{G}}{\partial x_i} \right| - \bar{\rho} \alpha_t \tilde{\kappa} \left| \frac{\partial \tilde{G}}{\partial x_i} \right| \quad (5.14)$$

wobei die turbulente Flammengeschwindigkeit s_t und die skalare turbulente Diffusivität durch zusätzliche Modelle geschlossen werden müssen. Anwendungen der G-Gleichungen in der LES für eine Staukörperflamme ist in Moureau et al. [119] und für eine Jet Flamme in Knudsen et al. [87] zu finden. Bei Verwendung der G -Gleichung wird die Verbrennung nicht durch die Speziegleichung beschrieben, sondern durch die Konvektion des passiven Skalars G sowie seiner eigenen Propagation. Hauptproblem ist daher bei dieser Methode die Kopplung von G mit der Energie- und Spezieserhaltung. Zudem ist die numerische Lösung der G -Gleichung schwierig, da künstlich Diffusivität eingeführt werden muss, bzw. spezielle Diskretisierungsverfahren benötigt werden [134, 151] um Diskontinuitäten von G zu behandeln.

5.2.4 Flammenoberflächendichte Formulierung

Bei Verwendung einer Flammenoberflächendichte Formulierung (FSD) wird die Erhaltungsgleichung für die Reaktionsfortschrittsvariable gelöst. Beschreibt man die rechte Seite von Gleichung (5.4) bei turbulenter Verbrennung über:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\overline{\rho \alpha \frac{\partial c}{\partial x_i}} \right) + \overline{\dot{\omega}_c} = \overline{\rho s_d |\nabla c|} \quad (5.15)$$

verschiebt sich die Schließung der gefilterten Reaktionsrate auf die Modellierung der rechten Seite von Gleichung (5.15). Definiert man im LES Kontext die Oberflächendichte Σ^* einer Iso-Fläche c^* über [74]:

$$\Sigma^* = \overline{|\nabla c| \delta(c - c^*)} \quad (5.16)$$

wobei δ die Dirac Funktion bezeichnet und führt einen Oberflächenmittelungsoperator $\langle \dots \rangle_A$ ein, der im LES Kontext für eine beliebige Größe W sich definiert als:

$$\langle W \rangle_A = \overline{W \delta(c - c^*)} / \Sigma^* \quad (5.17)$$

lässt sich die rechte Seite von Gleichung (5.15) schreiben als:

$$\overline{\rho s_d |\nabla c|} = \int_0^1 \langle \rho s_d \rangle_A \Sigma^* dc^* \quad (5.18)$$

Σ^* gilt für dünne Flammen und wäre damit abhängig von c^* . Um dies zu umgehen, wird eine generische Flammenoberflächendichte Σ definiert [14, 134]:

$$\Sigma = \int_0^1 \Sigma^* dc^* \quad (5.19)$$

wobei für dünne Flammen $\Sigma^* \neq f(c^*)$ und damit $\Sigma^* \approx \Sigma$ gilt [14]. Mit Gleichung (5.19) lässt sich schließlich schreiben:

$$\overline{\rho s_d |\nabla c|} = \int_0^1 \langle \rho s_d \rangle_A \Sigma^* dc^* = \langle \rho s_d \rangle_A \Sigma \quad (5.20)$$

und die Kombination von gefilterter, molekularer Diffusion und dem Reaktionsquellterm in Gleichung (5.15) erfordert die Modellierung von s_d sowie der generischen Flammenoberflächendichte. In der Regel wird $\langle \rho s_d \rangle_A$ über $\rho_u s_L$ modelliert [14, 74]. Boger et al. [14] unterstützt diesen Ansatz anhand der Auswertung von DNS Daten und zeigt eine gute Übereinstimmung der Terme $\rho_u s_L \Sigma$ und $\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\overline{\rho \alpha \frac{\partial c}{\partial x_i}} \right) + \overline{\dot{\omega}_c}$. Die Flammenoberflächendichte Σ entspricht der Flammenoberfläche innerhalb der Filterweite Δ^3 und beinhaltet die nicht aufgelöste Interaktion der Flamme mit der Turbulenz innerhalb der Filterweite. Da die Information der chemischen Reaktion in s_L enthalten ist, gelingt damit eine Separierung von Turbulenz und Chemie [134]. Zudem zeigt Boger, dass durch Filterung des Strömungsfeldes, mit Δ größer als die Zellweite, \tilde{c} trotz der dünnen Flammenfront aufgelöst werden kann und keine künstliche Aufdickung der Flamme benötigt wird. Ein weiterer Vorteil des FSD Ansatzes ist, dass Σ aus experimentellen Daten extrahiert und mit Simulationsdaten verglichen werden kann. Damit können nicht nur Flammenform und das Strömungsfeld verglichen werden, sondern auch die Struktur der Flamme.

Führt man einen Flammenfaltungsfaktor $\Xi = s_t/s_L^0$ ein, lässt sich zudem zeigen, dass [134]:

$$\Xi = \frac{s_t}{s_L^0} = \frac{A_t}{A} = \frac{\Sigma}{|\nabla \tilde{c}|} \quad (5.21)$$

Modellierung von Σ über eine Transportgleichung

Die gefilterte, generische Flammenoberflächendichte Σ kann über eine Transportgleichung beschrieben werden [14, 74]:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \Sigma}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\tilde{u}_i \Sigma) = & \\
 - \frac{\partial}{\partial x_i} \underbrace{\left(\overline{\langle u_i \rangle_A} - \tilde{u}_i \right) \Sigma}_{\text{SGS Fluss von } \Sigma} + & \underbrace{\overline{\langle (\delta_{ij} - n_i n_j) \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \rangle_A}}_{\text{Deformation der Flammenoberfläche}} \Sigma - \frac{\partial}{\partial x_i} \underbrace{\left(\overline{\langle s_d n_i \rangle_A} \Sigma \right) + \overline{\langle s_d \frac{\partial n_k}{\partial x_k} \rangle_A}}_{\text{Propagation und Krümmung der Flammenoberfläche}} \quad (5.22)
 \end{aligned}$$

Die Flammenoberflächendichte innerhalb der Filterweite wird beeinflusst durch die Deformation der Flammenoberfläche aufgrund von Geschwindigkeitsgradienten sowie durch den kombinierten Einfluss der Propagation der Flammenfront und der Krümmung der Flammenoberfläche [74]. Im LES-Kontext tritt zusätzlich noch der Einfluss der Differenz von aufgelöster Geschwindigkeit zu gefilterter, Oberflächen gemittelter Geschwindigkeit auf, die als turbulenter Feinskalenfluss von Σ interpretiert wird. Die Terme auf der rechten Seite von Gleichung (5.22) erfordern eine umfangreiche Modellierung. Basierend auf physikalischen Überlegungen und DNS-Daten der Propagation einer generischen Flamme in einer Box schlagen Hawkes und Cant [73, 74] Schließungsterme für Gleichung (5.22) vor. Die Verwendung einer Transportgleichung für Σ berücksichtigt einen konvektiven Transport der Flammenfaltung sowie ein Ungleichgewicht von Produktion und Destruktion von *Sigma*. Dadurch kann eine laminare Flamme in turbulenter Strömung, die eine Transition zur turbulenten Flamme durchläuft, z.B. kurz nach der Zündung in einem Otto-Motor, beschrieben werden. Zudem kann der Einfluss der Geometrie stromauf der Flamme oder eine (theoretische) Propagation einer turbulenten Flamme in ein laminares Strömungsfeld, nur durch einen konvektiven Transport von Σ sowie einem Ungleichgewicht von Deformation sowie Krümmung und Propagation der Flammenfront durch Gleichung (5.22) richtig vorhergesagt werden. Diese Eigenschaft wird von Driscoll [46] gefordert, der basierend auf der Analyse experimenteller Daten der Flammenfaltung ein ‘‘Gedächtnis’’ attestiert. Die Lösung von Gleichung (5.22) bedeutet allerdings auch einen zusätzlichen numerischen Aufwand. Zudem beinhaltet die Schließung der Σ -Gleichung einen erhöhten Modellierungsaufwand, der mit zusätzlichen Unsicherheiten verbunden ist. Zwar kann Σ mit experimentellen Daten verglichen werden, die einzelnen Terme in Gleichung (5.22) könnten allerdings nur mit DNS-Daten akademischer Konfiguration bei geringer turbulenter Intensität verglichen werden. Validierungsrechnungen einer turbulenten Bunsenflamme unter Verwendung der geschlossenen Σ -Transportgleichung wurden von Hernández-Pérez et al. [76] durchgeführt. Weitere Modellierungsansätze sind in Richard et al. [139] und mit Berücksichtigung von Lewis Zahl Effekten auf die FSD in Chakraborty et al. [32] zu finden. LES mit einem Σ -Transportmodell einer Verbrennungsbombe sowie eines Kolbenmotors sind in [139] und [149] mit Berücksichtigung von Wärmeverlusten gezeigt.

Modellierung von Σ über eine algebraische Formulierung

Einen geringeren Rechenaufwand stellt die Verwendung von algebraischen Verbrennungsmodellen zur Beschreibung der Flammenoberflächendichte dar. Hierbei nimmt man implizit ein Gleichgewicht der Produktion und Destruktion von Σ in Gleichung (5.22) an. Da für die Modellierung der turbulenten Faltung Turbulenzgrößen wie u' verwendet werden, folgt daraus ein Gleichgewicht von Turbulenz und turbulenter Faltung der Flamme. Die Transition einer laminaren Flamme zur turbulent gefalteten Flamme in einem turbulenten Strömungsfeld kann daher nicht vorhergesagt werden². Auch wird kein konvektiver Transport von Σ und damit kein Geometrieinfluss stromauf in der Feinstrukturaltung der Flamme berücksichtigt. Zwar wird in der LES der Großteil der turbulenten Strukturen aufgelöst, Richard et al. [139] zeigen allerdings, dass bereits bei moderaten Reynolds Zahlen der Großteil der Flammenfaltung auf Feinstrukturebene stattfindet. Die praktische Anwendung zeigt allerdings, dass für Konfigurationen bei denen nur geringe Nichtgleichgewichtseffekte erwartet werden, sehr gute Simulationsergebnisse mit algebraischen FSD LES Modellen erzielt werden. So zeigt die LES einer ebenen Doppeljetflamme (ORACLES-Rig) sowie die Ausdehnung eines turbulenten Flammenballs in einer Verbrennungsbombe von Fureby [56] sehr gute Übereinstimmungen mit experimentellen Daten, trotz unterschiedlicher Geometrien. Weitere erfolgreiche LES unter Verwendung von algebraischen FSD Modellen finden sich z.B. in Ma et al. [108], Boger und Veynante [13], Tangermann et al. [146, 147] und Duwig et al. [49].

Für die Herleitung von algebraischen FSD Verbrennungsmodellen wird häufig angenommen, dass das Verhältnis der Fläche der turbulenten Flammenfront A_t zur projizierten Fläche in Ausbreitungsrichtung der Flammenfront A einem Potenzgesetz folgt. Die Basis bildet das Verhältnis der größten ϵ_0 zur kleinsten Faltungslänge ϵ_i der Flammenfront. Verwendet man Gleichung (5.21) folgt, dass auch Σ bzw. Ξ diesem Potenzgesetz folgen:

$$\frac{A_t}{A_0} = \frac{s_t}{s_L^0} = \Xi = \frac{\Sigma}{|\nabla c|} \sim \left(\frac{\epsilon_0}{\epsilon_i} \right)^{D-2} \quad (5.23)$$

Dieser Zusammenhang wurde bereits von Mandelbrot [109] anhand theoretischer Überlegungen zur Entwicklung der Oberfläche eines passiven Skalars in homogener, isotroper Turbulenz und unter Annahme einer Kolmogorov Energiekaskade hergeleitet. Die Flammenoberfläche weist damit innerhalb des Bereichs $\epsilon_i - \epsilon_0$ eine selbstähnliche Faltung auf und kann als Fraktal beschrieben werden. Der Exponent D wird daher auch als fraktale Dimension bezeichnet. Dieser fraktale Zusammenhang wird häufig in experimentellen Untersuchungen verwendet, um Flammen zu charakterisieren. Experimentelle Nachweise für das Potenzgesetz, bzw. fraktale Eigenschaften der Flammenfront findet man z.B. in North et al. [140], Yoshida et al. [160], Siewert [143] oder anhand der Auswertung von DNS-Daten in [75]. Abbildung 5.1 zeigt das fraktale Verhalten von Vormischflammen anhand experimenteller Messdaten aus [140] sowie der Auswertung von DNS-Daten [75]. Zusätzlich ist das theoretische Verhalten beschrieben durch Gleichung (5.23) eingezeichnet. Die DNS-Daten einer propagierenden Flamme in homogener Turbulenz zeigen in einem

²Vorausgesetzt, k_Δ durchläuft keine Transition.

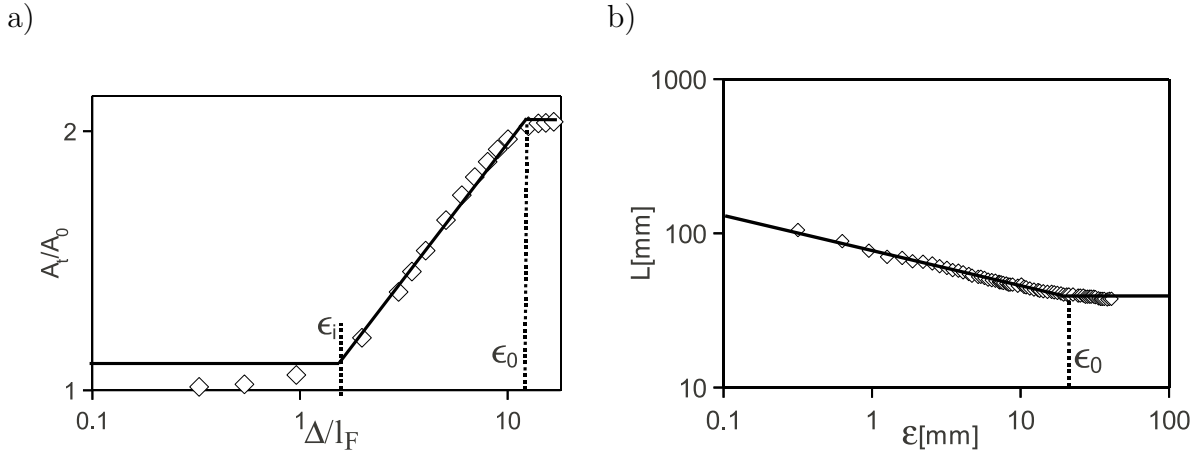


Abbildung 5.1: Fraktales Verhalten von turbulenten Flammen in einem doppelt-logarithmischen Diagramm; theoretischer Verlauf entsprechend Gleichung (5.23) ist als Linie dargestellt; a) Auswertung von DNS in [75]; b) Auswertung experimenteller Daten in [140];

großen Bereich im doppelt logarithmischen Diagramm einen linearen Zusammenhang der zu modellierenden Fläche der turbulenten Flammenfront mit zunehmender Filterweite im Bereich $\epsilon_i < \Delta/l_F < \epsilon_0$. Außerhalb des Bereichs gibt es einen glatten Übergang zu einer konstanten turbulenten Flammenoberfläche und damit geringe Abweichungen vom idealisierten Potenzgesetz. Die experimentellen Daten von North et al. [140] zeigen die 2D-Auswertung von Flammen und damit die zunehmende Flammenlänge L mit zunehmender Auflösung. Die kleinste Winkellänge wird aufgrund der limitierten Auflösung nicht gemessen. Die größte Faltungslänge der Flamme liegt im Bereich des integralen Längenmaßes [140]. Allerdings gibt es in diesem Bereich keinen scharfen Übergang, der dem idealisierten Potenzgesetz folgt.

Die ersten fraktalen Verbrennungsmodelle wurden von Gouldin [63] und Gouldin et al. [64] im RANS Kontext vorgeschlagen. Im LES-Kontext wird der Ansatz u.a. von Charlette et al. [34], Hawkes et al. [75], Chakraborty et al. [33] und Fureby [56] verwendet. In der Modellformulierung müssen dabei der Exponent $D - 2$ sowie das kleinste und größte nicht aufgelöste Faltungsmaß modelliert werden. Ein großer Vorteil des fraktalen Ansatzes ist, dass diese Parameter in DNS sowie in einer großen Anzahl von Messreihen untersucht und vermessen werden und damit gut definiert sind. In Ma et al. [108] werden einige dieser Modelle zusammengefasst und anhand von LES des ORACLES Brenners untersucht. Chakraborty und Klein [33] untersuchen eine große Zahl an Modellen anhand von a priori Analysen unter Verwendung von DNS Daten. In den Untersuchungen zeigt das Modell von Fureby [56] ein viel versprechendes Modellverhalten. Ein kürzlich von Hawkes et al. [75] vorgeschlagenes fraktales Modell, anhand von DNS Daten für den Bereich dünner Reaktionszonen kalibriert, ist bisher noch nicht in der CFD eingesetzt worden. Eine Beschreibung der Modelle von Fureby [56] und Hawkes et al. [75] soll beispielhaft die

Formulierung fraktaler Modelle zeigen.

Modell von Fureby: Die kleinste Faltungslänge ϵ_i wird über den Betrag der inversen, Oberflächen gemittelten Krümmung der Flamme modelliert:

$$\epsilon_i = \left| \left\langle \frac{\partial n_i}{\partial x_i} \right\rangle_A \right|^{-1} \quad (5.24)$$

Unter der Annahme eines Gleichgewichts von Produktion und Destruktion von Σ in Gleichung (5.22) wird gezeigt, dass die Oberflächen gemittelte Deformationsrate tangential zur Flamme den Krümmungseffekten entspricht $\langle \kappa_{s,t} \rangle_A = -s_L \langle \partial n_i / \partial x_i \rangle_A$. Die Deformationseffekte bei turbulenter Vormischverbrennung werden anhand der DNS von Meneveau und Poinso [114] untersucht und führen zu der sogenannten ITNFS Effizienz Funktion Γ . Fureby modelliert schließlich die Flammenoberflächendichte innerhalb der Filterweite zu:

$$\Sigma = \left(1 + \Gamma \left(\frac{u'_\Delta}{s_L^0} \right) \right)^{D-2} |\nabla \bar{c}| \quad (5.25)$$

In dieser Arbeit wird zusätzlich der Ausdruck in den Klammern um $1 + \dots$ erweitert, dass $\Sigma \rightarrow |\nabla \bar{c}|$ für $u' \rightarrow 0$. Die fraktale Dimension wird dabei über die auf Messdaten basierende heuristische Relation von North und Santavicca [140] berechnet:

$$D = \frac{2,05}{u'_\Delta/s_L^0 + 1} + \frac{2,35}{s_L^0/u'_\Delta + 1} \quad (5.26)$$

Γ wird modelliert entsprechend der ITNFS Funktion von [114]:

$$\Gamma = 0,75 \exp \left[-\frac{1,2}{(u'_\Delta/s_L^0)^{0,3}} \right] \left(\frac{\Delta}{l_F} \right)^{2/3} \quad (5.27)$$

Die Modelle von Angelberger et al. [9], Charlette et al. [34] und Colin et al. [40] verwenden eine ähnliche Formulierung wie in Gleichung (5.25). Unterschiede bestehen in einem konstanten Exponenten für $D - 2$, der Modellierung von Γ sowie einem Vorfaktor für Γ .

Modell von Hawkes: Ein neues Modell, kalibriert an DNS-Daten im Bereich dünner Reaktionszonen, wird von Hawkes et al. [75] vorgeschlagen. Als Ansatz wird Gleichung (5.23) verwendet:

$$\Sigma = \left(1 + \frac{\Delta}{\epsilon_i} \right)^\beta |\nabla \bar{c}| \quad (5.28)$$

mit der Filterweite Δ als größtes Längenmaß und dem zu bestimmenden Exponenten β . Unter Berücksichtigung des von Damköhler [42] vorgeschlagenen Verhaltens von s_t/s_L^0 im Grenzbereich kleiner Skalen und großer Skalen, vgl. Kapitel 4.2.1, wird eine unterschiedliche Skalierung für ϵ_i und D für den gefalteten Verbrennungsbereich sowie den Bereich dünner Reaktionszonen verwendet. D wird schließlich modelliert über:

$$D = \frac{7}{3} + \frac{1}{3} \frac{l_{OC}^4}{l_G^4 + l_{OC}^4} \quad (5.29)$$

Die kleinste Abschneidelänge wird beschrieben über:

$$\epsilon_i = (l_{OC}^4 + l_G^4)^{1/4} \quad (5.30)$$

mit dem Obukhov-Corrsin Längenmaß l_{OC} :

$$l_{OC} = 5,5 (\alpha_k^3 / \epsilon_\Delta)^{0,25} \quad (5.31)$$

ϵ_Δ bezeichnet die Dissipationsrate im Bereich der nicht aufgelösten Skalen und wird, wie bereits zur Schließung der Transportgleichung für k_Δ in Gleichung (3.23), über $\epsilon_\Delta = u'_\Delta{}^3 / \Delta$ modelliert. Die Diffusion der Spezies α_k wird zu ν für $Sc = 1$. In diesem Fall entspricht Gleichung (5.31) der Kolmogorov Länge. Das Gibson Längenmaß wird in [75] modelliert über:

$$l_G = 0,2 \left(\frac{s_L^0}{u'_\Delta} \right)^3 \quad (5.32)$$

wobei der Faktor 0,2 die beste Übereinstimmung mit DNS-Daten in [75] zeigt und das üblicherweise verwendete integrale Längenmaß, bzw. die Filterweite ersetzt.

5.2.5 Flammenfaltungs Formulierung

Über Gleichung (5.21) ist der Flammenfaltungsfaktor Ξ direkt mit der Flammenoberflächendichte Σ verknüpft. Algebraische Modelle für Σ und Ξ lassen sich daher direkt ineinander überführen. Unter Berücksichtigung konditionierter Mittelung schlägt Weller [155] im RANS-Kontext eine Transportgleichung für Ξ vor. Eine Erweiterung für den LES-Kontext wird von Weller et al. [156] vorgeschlagen. Wie die Transportgleichung für Σ erfordert auch die Schließung der Gleichung für Ξ einen großen Modellierungsaufwand. Unter der Annahme eines Gleichgewichts von Produktion und Destruktion von Ξ in der Transportgleichung schlägt Weller [155, 156] ein algebraisches Verbrennungsmodell vor:

$$\Xi = 1 + 2\tilde{c} \left(0,62 \sqrt{\frac{u'_\Delta}{s_L}} \frac{u'_\Delta}{(\varepsilon_\Delta^{1/4} \nu^{1/4})} \right) \quad (5.33)$$

Wobei $\varepsilon_\Delta = u'_\Delta{}^3 / \Delta$ entsprechend Gleichung (3.23) geschlossen wird. Validierungsrechnungen anhand von LES einer rückwärts gerichteten Stufe werden in [156] unter Verwendung des Ξ -Transportmodells sowie des algebraischen Modells gezeigt. LES einer Verbrennungsbombe mit dem Ξ -Transportmodell werden in Nwagwe und Weller et al. [123] durchgeführt.

5.2.6 Folgerungen für die Modellierung des Reaktionsquellterms

Folgt man der Definition von $s_{t,\Delta}/s_L^0 = \Xi = \Sigma/|\nabla\bar{c}|$ in Gleichung (5.21) sowie der Definition der Effizienzfunktion $E = s_{t,\Delta}/s_L^0$ in Gleichung (5.8), lassen sich die vorgestellten Modellierungsansätze für die turbulente Flammengeschwindigkeit, die Flammenfaltungsformulierung sowie das Konzept der künstlich verdickten Flammenfront direkt in eine Formulierung für die Flammenoberflächendichte überführen. Der Vorteil der FSD-Modellierung, die Struktur der Flamme mit Messdaten vergleichen zu können sowie die Entkoppelung der Chemie und Turbulenz-Flamme Interaktion lassen sich daher ebenso auf die genannten Modellierungsansätze anwenden. Ein entscheidender Vorteil der algebraischen, fraktalen Modelle ist allerdings, dass alle zu modellierenden Parameter durch physikalische Eigenschaften charakterisiert sind, einzeln mit DNS- oder experimentellen Daten verglichen werden können und damit gut zu modellieren sind. Als geeignetste Modellierungsmethode für ein neues Verbrennungsmodell wird daher der algebraische, fraktale Ansatz erachtet.

Die Evaluierung eines neuen Modells wäre auch im “Thickened Flame” Kontext möglich. In Hinblick auf die Untersuchung von Verbrennungsmodellen für variierende Drücke müsste allerdings vorausgesetzt werden, dass der Arrhenius Ansatz eines reduzierten oder Einzschritt Mechanismus, die Druckabhängigkeit korrekt wiedergeben kann. Gu et al. [68] zeigen aber anhand der Berechnung der laminaren Flammengeschwindigkeit mit einem reduzierten Vierschritt Mechanismus und dem Vergleich von s_L mit experimentellen Daten einer Hochdruckverbrennungsbombe, dass die Simulationsdaten von den experimentellen Daten bei hohem Druck deutlich abweichen und folgern Defizite der reduzierten Mechanismen bei hohen Drücken. Verwendet man algebraische FSD Modelle, kann s_L^0 aus experimentellen Daten entnommen oder wie in Kapitel (4.1.1) beschrieben, anhand von 1-D Simulationen unter Auflösung der laminaren Flammendicke und Berücksichtigung von 50 Reaktionsmechanismen berechnet werden. In dieser Arbeit wird folglich eine reine algebraische FSD Formulierung verwendet.

5.3 Modellierung des skalaren Flusses

Generell wird der turbulente skalare Fluss in Gleichung (5.4) entsprechend der molekularen Diffusion über eine Gradientenannahme modelliert, vgl. Gleichung (3.29):

$$\widetilde{u_i c} - \tilde{u}_i \tilde{c} = -\frac{\nu_t}{Sc_t} \frac{\partial \tilde{c}}{\partial x_i} \quad (5.34)$$

Allerdings können in der Vormischverbrennung auch Bereiche auftreten, bei denen der turbulente skalare Fluss einen Transport entgegen dem Gradienten aufweist. Der sogenannte “counter gradient” Transport wird in der DNS und in experimentellen Untersuchungen bei geringer Turbulenz beobachtet. Veynante et al. [150] definieren eine Bray Zahl N_B , welche die Bereiche Gradienten Fluss $N_B < 1$ und Gegengradiententransport $N_B > 1$ charakterisieren soll:

$$N_B = \frac{(\gamma - 1)s_L^0}{2\alpha_\Gamma u'} \quad (5.35)$$

α_Γ entspricht einer Effizienzfunktion mit $\mathcal{O}(1)$ die exponentiell von l_t/l_F abhängt und für $l_t/l_F \approx 40$ zu eins wird [151]. Eine verfeinerte Beschreibung des turbulenten Flusses im RANS Kontext würde die Lösung einer Transportgleichung für den turbulenten Fluss bedeuten. Allerdings werden dadurch zusätzliche, ungeschlossene Terme eingeführt, die eine Modellierung verlangen und dadurch zusätzliche Ungenauigkeiten einführen. Im RANS Kontext schlagen Veynante et al. [150] einen algebraischen Ausdruck zur Berücksichtigung eines potentiellen Transports entgegen der Gradientenrichtung vor:

$$\widetilde{u'_i c'} = \tilde{c}(1 - \tilde{c}) ((1 - \gamma)s_L^0 - 2\alpha_\Gamma u') \quad (5.36)$$

der allerdings nicht ohne weiteres im LES Kontext verwendet werden kann. Zudem reduzieren Modelle für einen Gegengradiententransport die Diffusion in Gleichung (5.4) was zu numerischen Instabilitäten führen kann.

Weiterhin kann argumentiert werden, dass eine korrekte Modellierung des turbulenten Flusses vor allem im RANS Kontext als kritisch erachtet wird. So zeigt die LES von Vormischverbrennungssystemen in Boger et al. [13], dass Gegengradientendiffusion aufgelöst werden kann. Auch zeigt Abbildung 3.4 anhand der LES nicht reagierender Strömungen, dass bei Berücksichtigung der in Kapitel 3.3.6 vorgestellten Netzkriterien der turbulente Fluss nahezu vollständig aufgelöst werden kann. In dieser Arbeit wird daher der nicht aufgelöste skalare Fluss über eine Gradientenannahme modelliert.

5.4 Modellierung von Streckeffekten auf die laminare Flammengeschwindigkeit

Verwendet man algebraische FSD Modelle, muss zusätzlich die laminare Flammengeschwindigkeit mit Berücksichtigung von Streckeffekten bereitgestellt werden. Wie in Kapitel 4.1.1 beschrieben, kann die ungestreckte laminare Flammengeschwindigkeit s_L^0 über Korrelationen aus Experimenten oder anhand von Simulationen mit detaillierter Chemie berechnet werden. In dieser Arbeit werden die Korrelationen von Göttgens et al. [62], die auf Simulationen mit detaillierter Chemie basieren, zur Berechnung von s_L^0 verwendet. Streckeffekte auf die laminare Flammengeschwindigkeit können ebenfalls über 1-D Simulationen laminarer Vormischflammen berücksichtigt werden. Liegen keine Korrelationen für s_L vor, muss der Zusammenhang von Streckung und s_L in Tabellen für die CFD hinterlegt werden. Diese Informationen für unterschiedliche Druckniveaus bereitzustellen, führt allerdings zu sehr umfangreichen Tabellen³. Ein einfaches Vorgehen, Streckeffekte bei der Berechnung der laminaren Flammengeschwindigkeit zu berücksichtigen, ermöglicht die lineare Theorie von Clavin [39], siehe Gleichung (4.14). Die zur Auswertung von Gleichung (4.14) benötigte Markstein Zahl Ma wird entsprechend den Korrelationen von Müller et al. [120], basierend auf Simulationen mit detaillierter Chemie, berechnet. Da Gleichung (4.14) bei hohen Streckraten $s_L < 0$ vorhersagen könnte⁴, wird hier zudem die Limitierung $s_{L,\min} = 0$ ein-

³ Eine kürzlich erschienene Arbeit von Mittal und Pitsch [116] beschäftigt sich mit der "flamelet" Modellierung für Verbrennungskonfigurationen mit variierendem Druck.

⁴wäre theoretisch bei sehr kleinen Radien möglich

geführt. Lipatnikov und Chomiak [106, 107] zu Folge gilt die lineare Theorie allerdings nur für den Bereich $\tau_c \kappa \ll 1$ und ist damit theoretisch nur für schwach turbulente Flammen anwendbar [106]. Allerdings ist die lineare Theorie einfach zu implementieren und wird daher in der Praxis häufig angewandt [106].

In einem CFD Code können Flammenkrümmung und Deformationsraten berechnet werden. Es kann jedoch gezeigt werden [134], dass der Einfluss von Krümmung auf die laminare Brenngeschwindigkeit über die Flammenfront gemittelt, vernachlässigt werden kann. Wie in Abschnitt 8.2.2 diskutiert wird, zeigen Auswertungen der berechneten Krümmung einer kugelförmigen Flamme, dass diese vom Winkel zwischen der Flammennormalen und Zellnormalen abhängt sowie in Kombination mit der verwendeten Numerik die tatsächliche Krümmung um ca. 20% überschätzt. In dieser Arbeit wird daher bei der LES turbulenter Flammen der Einfluss von Krümmungseffekten auf die laminare Flammengeschwindigkeit vernachlässigt, da man annimmt, dass dadurch ein kleinerer Fehler eingeführt wird als durch die Berücksichtigung von Krümmungseffekten aufgrund von fehlerbehafteten numerischen Approximationen. Der Einfluss von Deformationseffekten $\kappa_{s,\Delta}$ auf die laminare Flammengeschwindigkeit berechnet sich aus den Deformationseffekten des aufgelösten Strömungsfeldes $\kappa_{s,mean}$ und den Deformationseffekten der nicht aufgelösten Skalen $\kappa_{s,\Delta}$:

$$\kappa \approx \underbrace{(\delta_{ij} - n_i n_j) \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j}}_{\kappa_{s,mean}} + \Gamma \underbrace{\left(\frac{k_\Delta}{s_L^0}, \frac{l_F}{\Delta} \right)}_{\kappa_{s,\Delta}} \frac{\sqrt{k_\Delta}}{\Delta} \quad (5.37)$$

Letztere werden hier über eine modifizierte Effizienz Funktion Γ berechnet, die anhand von DNS Daten von Meneveau und Poinso [114] formuliert wird und für das Σ -Transport Modell von Hawkes et al. [73] verwendet wird:

$$\log_{10}(\Gamma) = -\frac{1}{s + 0,4} \exp(-(s + 0,4)) + (1 - \exp(-(s + 0,4))) (\zeta s - 0,11) \quad (5.38)$$

mit

$$s = \log_{10} \left(\frac{\Delta}{l_F} \right); \quad \zeta = \frac{2}{3} \left(1 - 0,5 \exp \left(- \left(\frac{u'_\Delta}{s_L^0} \right)^{1/3} \right) \right); \quad u'_\Delta = \left(\frac{2}{3} k_\Delta \right)^{0,5}$$

Die laminare Flammengeschwindigkeit für die Large Eddy Simulationen in dieser Arbeit wird schließlich berechnet über:

$$s_L = \max \left(s_L^0 - Ma(\kappa_{s,mean} + \kappa_{s,\Delta}) l_F, 0 \right) \quad (5.39)$$

5.5 Flamme-Wand Interaktion

Die Verbrennung in technisch relevanten Konfigurationen wie Ottomotoren oder stationären Gasturbinen findet auch in der Nähe von gekühlten Brennkammerwänden statt,

die aufgrund von Wärmeverlusten der Flamme und der Interaktion der Flamme mit der Wand die Verbrennung signifikant beeinflussen können. So wird eine turbulent gefaltete Flamme in Wandnähe geglättet. Gekühlte Wände führen zu einer Reduktion des Reaktionsquellterms und die Flamme kann schließlich aufgrund großer Wärmeverluste in direkter Wandnähe verlöschen. Zudem muss berücksichtigt werden, dass die Wand auch die Strömung selbst durch die Änderung der Längenskalen und die Generierung von Turbulenz beeinflusst. Während die Simulation wandnaher Strömung für RANS-Modelle einen zusätzlichen Modellierungsaufwand bedeutet, kann eine wandaufgelöste LES diese Effekte berücksichtigen. Dies zeigt Abbildung 3.2 anhand der wandaufgelösten LES einer Kanalströmung im Vergleich mit DNS-Daten von Moser et al. [118].

In den in Abschnitt 5.2 vorgestellten Verbrennungsmodellen wird generell der Einfluss der Flamme-Wand Interaktion (FWI) vernachlässigt. Interpretiert man die Reaktionsfortschrittsvariable \tilde{c} in Gleichung (5.4) als reduzierte Temperatur, wird bereits in der Erhaltungsgleichung eine adiabate Verbrennung angenommen. Zwar berücksichtigt der Arrhenius Ansatz in der Methode der künstlich aufgedickten Flammenfront den Einfluss von Wärmeverlusten auf die Reaktionsrate, die Effizienzfunktion beinhaltet aber keine Modellierung für die Flammenfaltung in Wandnähe. Das Verhalten der turbulenten Flamme in Wandnähe muss daher zusätzlich modelliert werden.

5.5.1 Grundlagen der Flamme-Wand Interaktion

Die Prozesse der FWI werden zunächst an laminaren Flammen untersucht, da Auswirkungen von Wärmeverlusten auf die laminare Flammengeschwindigkeit auch in der FSD Formulierung berücksichtigt werden müssen. Das Verhalten einer zur kalten Wand hin propagierenden Flamme wird in Poinso et al. [134] beschrieben. So weist die Flamme bei einem großen Wandabstand zunächst die adiabate laminare Flammengeschwindigkeit s_L auf. Verringert sich der Wandabstand, entzieht die kalte Wand der Flamme aufgrund von Wärmeübergang (Diffusion, Strahlung, Konvektion) Wärme. Dies reduziert die Reaktionsrate und damit die laminare Flammengeschwindigkeit. Bei einem Verlöschabstand y_q wird die chemische Reaktion schließlich gestoppt, die Flamme verlöscht und es gilt $s_L = 0$. Der Abstand der Flamme zur Wand wird über eine Peclet Zahl ausgedrückt:

$$Pe_w = \frac{y}{l_F} \quad (5.40)$$

Die Peclet Zahl für den Verlöschabstand definiert sich damit zu:

$$Pe_{w,q} = y_q/l_F \quad (5.41)$$

Eine Vielzahl von experimentellen, theoretischen und numerischen Arbeiten die z.B. in [134] oder von Al-Shalan [2] zusammengefasst werden, erhalten einen Wert der Peclet Zahl des Verlöschabstandes⁵ von $Pe_{w,q} \approx 3,4$. Da $Pe_{w,q}$ bzw. in direkter Umkehrung der maximale Wärmestrom der Flamme zur Wand nahezu unabhängig vom Brennstoff und der

⁵hierbei muss beachtet werden, dass unterschiedliche Definitionen von l_F den Wert von $Pe_{w,q}$ bis zu einer Größenordnung von $\mathcal{O}(10)$ verändern [2]

Wandtemperatur ist, folgern Poinsoot und Veynante [134], dass das Verlöschen ein thermisch kontrollierter Mechanismus ist. Es sei hier bemerkt, dass die Unabhängigkeit des Quenchabstandes von der Wandtemperatur nur bis zu einer bestimmten Wandtemperatur vorliegen kann. Diese liegt möglicherweise oberhalb von Wandtemperaturen typischer technisch relevanter Konfigurationen.

Betrachtet man turbulente Verbrennung, müssen Poinsoot und Veynante [134] zur Folge verschiedene Mechanismen berücksichtigt werden.

- Wie bei der laminaren Verbrennung kann die Flamme aufgrund von Wärmeverlusten verlöschen
- Die ausgeprägten, transienten turbulenten Strukturen in Wandnähe, können vor dem Verlöschen zu einem Berühren der Flamme mit der Wand führen, was zu kurzzeitigen großen Wärmeströmen führt
- Die Flammenfaltung wird in Wandnähe reduziert

Da die LES die transiente Struktur der grobskaligen Turbulenz auflöst, kann in diesem Skalenbereich ein kurzzeitiges Berühren der Wand durch die Flamme aufgelöst werden. Aufgrund von $\Delta > l_F$ wird allerdings nicht der exakte Berührungsbereich wiedergegeben. Die reduzierte Flammenfaltung in Wandnähe kann allerdings als keine direkte Folge der reduzierten Turbulenz in der viskosen Unterschicht, bei $y^+ < 5$ angesehen werden. So zeigen Bruneaux et al. [25] anhand von DNS turbulenter Verbrennung in Wandnähe, dass sich die Flammenoberflächendichte bereits bei $y^+ < 25$ verringert, wobei die Reynolds Spannungen in Abbildung 3.2 dort ein Maximum aufweisen und auch bei $y^+ < 25$ eine deutlich größere turbulente Schwankung aufweisen als in der Kernströmung. Die Reduktion der Flammenfaltung muss daher in der LES modelliert werden. Poinsoot et al. [133] werten DNS Daten einer turbulenten zur Wand propagierenden Flamme aus und identifizieren in Abhängigkeit vom Wandabstand Bereiche unterschiedlicher Mechanismen der Flammen-Wand Interaktion, die [133] folgend in Abbildung 5.2 schematisch dargestellt sind. In dem noch vollständig turbulenten Bereich findet die Verbrennung mit adiabater Flamme statt. Erreicht die Flamme die sogenannte Inhibitionszone, $y < y_{in}$, findet eine geringe Reduktion der Flammenfaltung aufgrund eines Ungleichgewichts von Produktion und Destruktion der Flammenoberflächendichte statt. Dieser Effekte kann durch ein algebraisches Modell nicht wiedergegeben werden, wird hier aber im Vergleich zu den FWI-Effekten in direkter Wandnähe als vernachlässigbar gering erachtet. Eine erste Reduktion der Flammenfaltung aufgrund von Wärmeverlusten erfährt die Flamme im sogenannten Einflussbereich der Wand, bei einem Wandabstand von y_I bzw. $Pe_{w,I}$. Poinsoot et al. [133] identifizieren eine Größenordnung von $Pe_{w,I} = \mathcal{O}(10)$ bzw. den Bereich der turbulenten Flammendicke $Pe_{w,I} \approx \delta_t/l_F$. Bruneaux et al. [25] folgern einen Wert von $Pe_{w,I} \approx 25$. Ein vollständiges Verlöschen findet, wie bei laminaren Flammen, bei $Pe_{w,q} \approx 3,4$ statt.

5.5.2 Modellierung der Flamme-Wand Interaktion

Neben der Analyse der Flamme-Wand Wechselwirkung wird in den Arbeiten von Bruneaux et al. [25] und Poinsoot et al. [133] eine Modifikation der Transportgleichung für die FSD

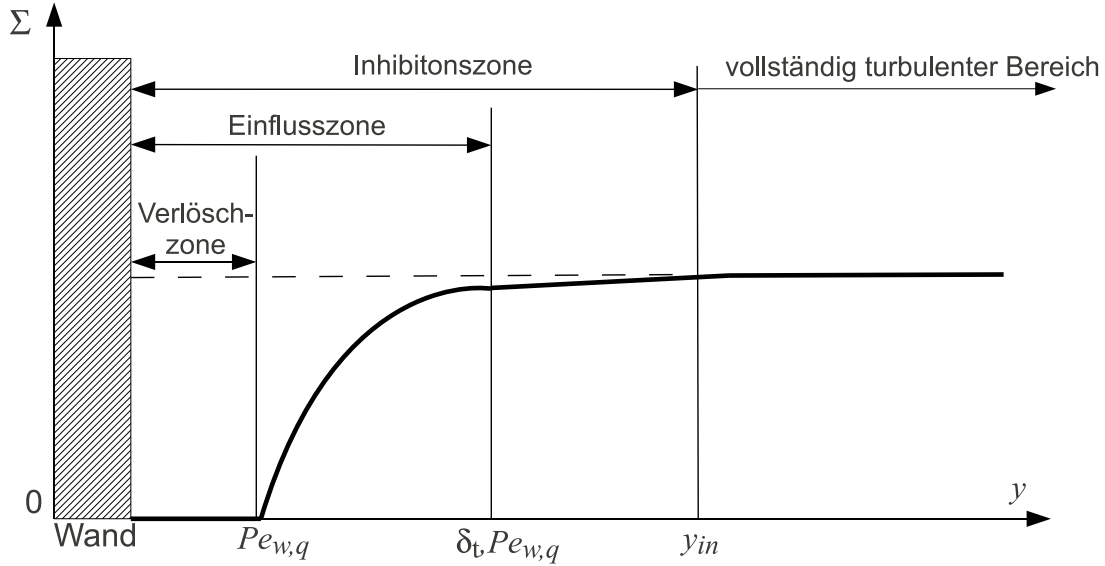


Abbildung 5.2: Schematisches Verhalten der Flammenoberflächendichte in Abhängigkeit des Wandabstands

im RANS Kontext vorgeschlagen. In den Arbeiten von Richard et al. [139] und Vermorel et al. [149] wird die Modellierung aus [25] bei Verwendung einer Σ -Transportgleichung im LES Kontext eingesetzt. Wenige Arbeiten befassen sich mit der Modellierung von FWI für algebraische Verbrennungsmodelle und die Arbeiten von [25, 133] erlauben keine umfassende Formulierung für algebraische Modelle. Watkins et al. [154] schlagen im RANS Kontext ein algebraisches Verbrennungsmodell vor, das Wärmeverluste berücksichtigt, allerdings wird der Turbulenzeinfluss und der Einfluss der Wärmeverluste kombiniert betrachtet und ein Wärmeverlustmodell kann nicht extrahiert werden. Eine mögliche Erweiterung die ein Verlöschen der Flamme vorhersagt, wenn ein bestimmter Wert der Reaktionsfortschrittsvariablen \tilde{c}_q unterschritten wird, formulieren Catlin und Lindstedt [30] basierend auf theoretischen Analysen. Diese Formulierung wird erfolgreich von Tangermann et al. [146] eingesetzt, wobei eine kritische Temperatur $\tilde{T}_q = \tilde{c}_q(T_b - T_u) + T_u$ als Verlöschkriterium verwendet wird. Das Modell von Catlin et al. [30] kann aber nur vollständiges Verlöschen und keine Reduzierung des Reaktionsquellterms in Wandnähe beschreiben und kann damit Abbildung 5.2 nicht reproduzieren. Zudem ist in dem Modell keine direkte Berechnung von Wärmeverlusten berücksichtigt.

Ein in der LES verwendbares Modell, das den Einfluss von Wärmeverlusten auf die laminare Flammengeschwindigkeit berücksichtigt, wird von Wichman und Bruneaux [157] anhand theoretischer Analysen zu Flammen, die frontal zu einer kalten Wand hin propagieren, untersucht. Dabei propagiert die laminare Flamme zunächst mit der ungestörten Flammengeschwindigkeit s_L^0 . In Wandnähe reduziert sich die Flammengeschwindigkeit und die Flamme verlöscht schließlich. Den Einfluss der Wärmeverluste auf eine adiabate laminare Flammengeschwindigkeit s_L^0 beschreiben Wichman et al. [157] schließlich über eine exponentielle Funktion, die Bruneaux et al. [25] in eine für die CFD verwendbare Formu-

lierung überführen:

$$s_{L,q} = s_L^0 \tilde{Q}_{SL} \quad (5.42)$$

Die Wärmeverlustfunktion wird definiert über

$$\tilde{Q}_{SL} = e^{-a_q \beta_{zel} \tilde{A}_{HL}} \quad (5.43)$$

die Konstante a_q wird anhand von DNS zu $a_q = 2$ bestimmt, der Wärmeverlustparameter \tilde{A}_{HL} wird definiert als [157]:

$$\tilde{A}_{HL} = \frac{h_u - \tilde{h}}{h_u - h_b} \quad (5.44)$$

und reduziert sich für eine 1-Schritt Chemie und magere Verbrennung zu [25]:

$$\tilde{A}_{HL} = \tilde{c}_Y - \tilde{c}_T \quad (5.45)$$

wobei hier \tilde{c}_Y und \tilde{c}_T der Definition der Reaktionsfortschrittsvariablen über den Brennstoffmassenbruch, Gleichung (5.3), und über die Temperatur, Gleichung (5.5), bezeichnen. Diese Formulierung wird in [25] angewendet um die laminare Flammgeschwindigkeit zu modellieren, wobei eine Transportgleichung für Σ gelöst wird. Gleichung (5.44) gilt nur für die in dieser Arbeit untersuchten isobaren Verbrennungskonfigurationen. Erweiterungen von Gleichung (5.44) z.B. für die Simulation von Verbrennungsmotoren finden sich in Angelberger et al. [8].

Ein weiteres in der LES verwendbares Modell, das die Reduktion der Flammenoberflächendichte bei Wärmeverlusten in Wandnähe beschreibt, wird anhand der DNS einer V-Flamme in einer Couette Kanalströmung von Al-Shaalan und Rutland [3] formuliert. Dabei wird die FSD der DNS mit der Vorhersage des Bray-Moss-Libby (BML) Modells verglichen. Ein Modell wird abgeleitet, das die Vorhersage des BML Modells auf das Ergebnis der DNS hin korrigiert. Das Modell entspricht einer direkten Modifikation der FSD und schreibt sich als:

$$\tilde{Q}_{FSD} = \left(1 + c_y \tilde{A}_{HL,w}\right) \exp \left[-\beta_{zel} \left(\frac{(\gamma - 1) \tilde{A}_{HL}}{(1 + (\gamma - 1) \tilde{c}_T)(1 + (\gamma - 1) \tilde{c}_Y)} \right)^{c_x} \right] \quad (5.46)$$

Al-Shaalan [2] folgend, kann man Wärmeverluste auf die FSD über

$$\Sigma_q = \Sigma \tilde{Q}_{FSD} \quad (5.47)$$

berücksichtigen. Die Konstanten c_x und c_y werden anhand der DNS zu 0, 25 und 48 bestimmt. A_w bezeichnet den Wärmeverlustparameter an der Wand. Dieser ist in nicht strukturierten CFD-Lösern schwer zu implementieren, so dass im Weiteren $\tilde{A}_{HL,w}$ über \tilde{A}_{HL} abgeschätzt wird. Gleichung (5.46) setzt damit unabhängig von der Konfiguration den Einfluss der Wand auf die FSD als vorab bekannt voraus. Dieses Prinzip wird bereits bei der Modellierung der turbulenten Viskosität durch die vanDriest Funktion in Gleichung (3.31) angewendet. Brennstoff- und Druckeinfluss auf die FWI werden in Gleichung (5.46)

über die Zel'dovich Zahl und den Wärmefreisetzungsfaktor γ berücksichtigt. Die Gleichungen (5.15) und (5.42) sowie das FWI Modell für die Σ -Transportgleichung von Bruneaux et al. [25] berücksichtigen Wandeffekte nur über einen Wärmeverlust, während das von Poinot et al. [133] vorgeschlagene FIST Modell zusätzlich explizit den Wandabstand der Flamme beinhaltet. Verwendet man die Modelle in Gleichung (5.46) und (5.42) kann allerdings die Vorhersage des Verlöschabstandes sowie der Abstand erster Wärmeverluste der Flamme in den Simulationen ausgewertet werden und die Vorhersage der Gleichungen (5.46) und (5.42) für beliebige Konfigurationen anhand von $Pe_{w,q}$ und $Pe_{w,I}$ aus DNS und experimentellen Daten validiert werden.

In den Studien von Bruneaux et al. [25] und Al-Shaalan et al. [3] zur FWI, wird eine sogenannte reaktive Flammenoberflächendichte verwendet, die sich definiert als:

$$\Sigma_R = \dot{\omega}_c / (\rho_u s_L^0 f) \quad (5.48)$$

wobei f einen Streckfaktor in [3] beschreibt bzw. den konstanten Brennstoffmassenbruch im unverbrannten Gemisch in [25]. Beide Faktoren beinhalten keine Wärmeverluste. Es kann damit argumentiert werden, dass die Berücksichtigung von Wandeffekten auf die Reaktionsrate über eine Modifikation nur von Σ oder s_L und damit über die Verwendung von Gleichung (5.46) oder (5.42) umgesetzt werden kann, was in dieser Arbeit verfolgt wird.

5.6 Modellierung kombinierter Landau-Darrieus und thermodiffusiver Instabilitäten

Die Mechanismen der in Kapitel 4.1.3 beschriebenen Landau-Darrieus und thermodiffusiven Effekte können selbst bei Verbrennung mit laminarer Flamme zu einer Faltung der Flammenfront führen, wodurch sich die Flammengeschwindigkeit um den Faktor 3 vergrößern kann [15]. In der LES können diese Effekte nicht aufgelöst werden, da die Flamme aufgrund von $l_F < \Delta$ in der Regel verdickt abgebildet wird und auch die Krümmung der Flammenfront vollständig aufgelöst werden muss. Der kombinierte Einfluss von LD- und TD-Instabilitäten werden zunächst an experimentellen und numerischen Untersuchungen diskutiert. Ein Überblick über bisherige Modellierungen im Rahmen laminarer und turbulenter Verbrennung wird abschließend dargelegt. Der Abschnitt 5.6.1 orientiert sich an dem Überblickartikel von Lipatnikov und Chomiak [107].

5.6.1 Numerische und experimentelle Untersuchungen

Eine große Anzahl experimenteller Untersuchungen weisen das Auftreten von hydrodynamischen Instabilitäten bei laminarer Verbrennung nach. So zeigen experimentelle Untersuchungen laminarer, expandierender Kugelflammen in Bradley et al. [20] für Iso-Oktan Flammen, in [19] für Wasserstofflammern und in Gu et al. [68] für Methanflammen ab einem kritischen Radius der Kugelflamme ein plötzliches Auftreten zellulärer Strukturen auf der Flammenoberfläche, verbunden mit einer Erhöhung der laminaren Flammgeschwindigkeit. Die beobachteten Instabilitäten treten verstärkt bei zunehmendem Druck auf. So

beobachten Gu et al. [68] eine Zunahme der laminaren Flammgeschwindigkeit um den Faktor 1,3 bei Auftreten von Instabilitäten. Searby et al. [142] und Truffaut et al. [148] können für fette Propan-Luftgemische an Flachbrennern und V-Flammen das Auftreten von LD- und TD-Effekten nachweisen. Aldrege et al. [4] beobachten anhand experimenteller Untersuchungen einer Taylor-Couette Konfiguration mit Methan als Brennstoff einen deutlichen Einfluss von LD-Instabilitäten bei laminarer Verbrennung. Numerische Nachweise eines Einflusses von LD-Instabilitäten unter Verwendung der G-Gleichung in Kombination mit Euler Gleichungen zur Beschreibung des Strömungsfeldes sind z.B. in Aldrege et al. [5] durchgeführt.

Bei turbulenter Verbrennung wird in Aldrege et al. [4] allerdings kein Einfluss von LD-Instabilitäten beobachtet. Kobayashi et al. [89, 90] vergleichen die Korrelation der kleinsten Faltungslängen turbulenter, magerer Methan-Flammen mit charakteristischen Wellenlängen von Dispersionsrelationen und der Kolmogorov Länge. Bei $T_u = 300K$ wird bei höheren Reynolds Zahlen ein konstanter Wert im Bereich charakteristischer Wellenlängen von Dispersionsrelationen festgestellt und als indirekter Nachweis von hydrodynamischen Instabilitäten interpretiert. Bei $T_u = 573K$ hingegen skaliert mit zunehmender Reynolds Zahl die kleinste Länge stets mit l_η , LD- und TD-Effekte können damit nicht nachgewiesen werden. Lipatnikov und Chomiak [107] zu Folge, weisen die untersuchten charakteristischen Längenmaße von Instabilitäten und Turbulenz der von Kobayashi untersuchten Flammen die selbe Größenordnung auf, dass eine genaue Zuordnung der Effekte nicht eindeutig ist. Die DNS von Boughanem und Trouvé [71] zeigt andererseits auch für $Le = 1$ bei abklingender Turbulenz eine Transition zu hydrodynamisch instabilen Verhalten der Flamme und eine damit verbundene Zunahme der Reaktionsrate um den Faktor 1,3–1,6. DNS turbulenter Verbrennung von Trouvé und Poinso [10] zeigt dem entgegen selbst für $0,8 < Le < 1,2$ nur geringen Einfluss von Instabilitäten auf die Flammenoberflächendichte. Eine deutliche Zunahme der Reaktionsrate wird bei $Le = 0,3$ festgestellt. Die numerische Lösung der nichtlinearen Michelson-Sivashinsky Gleichung zur Beschreibung der Wachstumsrate von Störungen bei Aufprägen einer turbulenten Störung in Cambray und Joulin [131] weist auf einen Einfluss von LD Instabilitäten bei zunehmender Turbulenz hin.

Die vorgestellten Arbeiten zeigen, dass der Einfluss von LD- und TD-Effekten bei laminarer Verbrennung direkt nachweisbar und gut quantifizierbar ist, bei turbulenter Verbrennung der Einfluss hydrodynamischer Effekte aber schwer zu quantifizieren ist. Lipatnikov und Chomiak [107] fassen weitere experimentelle und numerische Untersuchungen zu LD- und TD-Instabilitäten zusammen und schließen auf einen deutlichen Einfluss von Instabilitäten bei schwach turbulenter Verbrennung. Auch bei turbulenter Verbrennung müssen LD- und TD-Effekte berücksichtigt werden, allerdings kann nur in der DNS von [10] der Einfluss von LD- und TD-Effekten bei turbulenter Verbrennung direkt nachgewiesen werden [107]. Zudem argumentieren Lipatnikov und Chomiak [107], dass die bisherigen wenigen experimentellen Untersuchungen bei turbulenter Verbrennung zu stark streuen, um Folgerungen für die Modellierung ableiten zu können [107].

5.6.2 Zusammenfassung von Modellierungskonzepten

Modellierung turbulenter Flammen

Modellierungskonzepte zur Berücksichtigung von LD- und TD-Effekten bei turbulenter Vormischverbrennung sind bisher nur im RANS Kontext zu finden. Die Modelle werden beschrieben, um eine mögliche Überführung in den LES Kontext zu diskutieren. Da LD- und TD-Instabilitäten bei laminarer Verbrennung direkt nachweisbar sind, werden die Modelle zusätzlich auf das Verhalten bei laminarer Verbrennung untersucht.

Bradley et al. [17] verwenden ein algebraisches Modell, das hydrodynamische Effekte bei laminaren Kugelflammen beschreibt [15], um in “flamelet” Tabellen den Einfluss hydrodynamischer Instabilitäten auf den Reaktionsquellterm zu berücksichtigen. In [17] werden allerdings nur turbulente Flammen berücksichtigt. Die Wellenlängen der Störungen werden auf Bereiche unterhalb des integralen Längenmaßes begrenzt. Entsprechend dem Modell von Bradley [15] werden in den “flamelet” Tabellen hydrodynamische Instabilitäten erst unterhalb einer kritischen Streckrate berücksichtigt, die über eine Korrelation, basierend auf experimenteller Daten expandierender, kugelförmiger Flammen ausgewertet wird.

Weitere algebraische RANS Modelle die LD- und TD-Instabilitäten bei turbulenter Verbrennung berücksichtigen, werden in Lipatnikov et al. [107] vorgestellt und sind hier zusammengefasst. Das Modell von Kuznetsov, auch zusammengefasst in Kuznetsov und Sabel'nikovin [99], beschreibt die turbulente Flammengeschwindigkeit über:

$$s_t = u' \left(c_1 + c_2 \frac{s_L^0}{u'} \Psi_{LD} \ln \left(\frac{l_{Geo,max}}{\gamma l_F} \right) \right) \quad (5.49)$$

c_1 und c_2 entsprechen Modellkonstanten, $l_{Geo,max}$ entspricht der maximalen Länge einer Störung und ist durch die Brennergeometrie festgelegt. Ψ_{LD} entspricht der Landau-Darrieus Instabilität und wird durch die rechte Seite von Gleichung (4.18) beschrieben. Der Einfluss von Instabilitäten auf die turbulente Flammengeschwindigkeit in Gleichung (5.49), könnte direkt für die LES formuliert werden. Allerdings berücksichtigt Gleichung (5.49) immer hydrodynamische Instabilitäten unabhängig von der Streckungsrate oder der Turbulenz sowie keinen Einfluss von TD-Effekten. Im Grenzbereich laminarer Verbrennung würde damit stets ein Einfluss von LD- und TD-Instabilitäten vorhergesagt werden.

Bychkov [28] modelliert die turbulente Flammengeschwindigkeit unter Berücksichtigung von LD- und TD-Instabilitäten über:

$$s_t^2 = s_L^0 \left(\frac{k_{\Lambda,n} l_{max}}{2\pi} \right)^{2/3} + \frac{4}{3} c_1 u'^2 \ln \left(\frac{k_{\Lambda,n} l_t}{2\pi} \right) \quad (5.50)$$

In Gleichung (5.50) beschreibt $l_{Geo,max}$ auch die maximal mögliche Wellenlänge einer Störung und entspricht in [28] $l_{Geo,max} = O(l_t)$. Die Konstante c_1 entspricht der Ordnung $\mathcal{O}(1)$. Ein Kriterium für die Transition zu hydrodynamischen Instabilitäten wird nicht beschrieben. Im Grenzbereich von $u' \rightarrow 0$ beeinflussen damit stets Instabilitäten die laminare Brenngeschwindigkeit. Da der Instabilitäts- und der Turbulenzeinfluss gekoppelt sind, sind weder eine alleinige Beschreibung von Instabilitäten noch ein Übertrag in die LES möglich und sinnvoll.

Paul und Bray [125] verwenden als Basis für ein Verbrennungsmodell eine Transportgleichung für die Flammenoberflächendichte und führen einen zusätzlichen Produktionsterm aufgrund hydrodynamischer Instabilitäten ein. Eine Klassifizierungsfunktion:

$$\mathcal{H} = 1 - \exp\left(-0,2\frac{u'}{s_L^0}\right) \quad (5.51)$$

unterscheidet zwischen Instabilitätsbereich und turbulenten Bereich. Die Wahl des Wertes 0,2 wird nicht genauer diskutiert. Unter der Annahme eines Gleichgewichts von Produktion und Destruktion der Flammenoberflächendichte formulieren Paul und Bray [125] einen algebraischen Ausdruck für den Reaktionsquellterm:

$$\bar{\dot{\omega}}_c = \Gamma_0 \frac{\alpha_a}{\beta_a} \bar{c}(1 - \bar{c}) \rho_u \left[\underbrace{\mathcal{H} \frac{u'}{l_t}}_{\text{turbulenter Bereich}} + \underbrace{(1 - \mathcal{H}) \mathcal{G}(u'/s_L^0, \gamma^*, \frac{l_t}{\Lambda_n}) \frac{g_a \beta_a s_L^0}{\sigma_{y,a} \alpha_a \Lambda_n}}_{\text{instabiler Bereich}} \right] \quad (5.52)$$

Der Index a kennzeichnet Modellkonstanten, Γ_0 einen mittleren laminaren Streckungsfaktor. Die Funktion $\mathcal{G} = \Lambda_n/\Lambda_c$ beschreibt das Verhältnis der neutralen Wellenlänge einer Dispersionsrelation zu einer charakteristischen Wellenlänge der Flammenfaltung, die der mittleren instabilen Wellenlänge einer Flamme entspricht. \mathcal{G} wird ausgewertet über eine transzendente Funktion, die von Cambray und Joulin [131] vorgeschlagen wird und auf einer numerischen Lösung der nichtlinearen Michelson-Sivashinsky Gleichung basiert.

$$\mathcal{G}^{-5/4} \exp\left(\frac{-\pi}{2} \frac{1}{\mathcal{G}}\right) = b_k \frac{u' 2 / (1 + \gamma^{-1})}{s_t \Omega_{CJ}} \left[\frac{l_t / \Lambda_n \frac{1}{(1 + (l_t / \Lambda_n)^3)}}{0,5} \right]^{1/2} \quad (5.53)$$

mit der Modellkonstanten b_a und Ω_{CJ} als die positive Lösung von $(1 + 1/\gamma)\Omega_{CJ}^2 + 2\Omega_{CJ} + (1 - \gamma) = 0$. Λ_n wird über eine lineare Dispersionsrelation berechnet, z.B. Gleichung (4.22). Die Modellierung über (5.52) und (5.53) ist ein viel versprechender Modellansatz und kann als Erweiterung eines beliebigen RANS Modells verwendet werden. Zwar ist Gleichung (5.53) für $u' \rightarrow 0$ nicht auswertbar, aus [131] oder einer Dispersionsrelation könnte aber ein geeigneter Wert für \mathcal{G} bereitgestellt werden. Im LES Kontext müsste u' allerdings die gesamte turbulente Schwankung enthalten, die während einer Simulation schwierig auszuwerten ist. Zudem beruht die Herleitung von Gleichung (5.53) auf einer Langzeitlösung, wobei das Zeitmaß nicht quantifiziert wird. Zudem ist eine Quantifizierung von LD- und TD-Effekten über u'/s_L^0 anhand von bisherigen DNS- und experimentellen Daten nicht möglich.

Modellierung laminarer Flammen

Auf die Modellierung hydrodynamischer Instabilitäten bei laminarer Verbrennung konzentriert sich die Arbeit von Bradley [15] und wird hier ausführlicher diskutiert. In der vorangehenden Arbeit von Bradley und Harper [21] werden experimentelle Daten kugelförmiger, expandierender Propan-, Methan- und Wasserstoff-Luft Flammen mit der Dispersionsrelation für kugelförmige, expandierende Flammen von Bechthold und Matalon [11],

5.6 Modellierung kombinierter Landau-Darrieus und thermodiffusiver Instabilitäten

Gleichung (4.27), verglichen und eine gute qualitative Übereinstimmung von Theorie und experimentellen Daten festgestellt. Bradley [15] verweist auf [61] und [53] worin gefolgert wird, dass die Ausbildung zellulärer Strukturen einem Kaskadenprozess entspricht, der eine selbstähnliche Winklung der Flamme zur Folge hat. Das Verhältnis der Ausbreitungsgeschwindigkeit der Flamme S_n , beeinflusst durch Instabilitäten, zur ungestreckten Ausbreitungsgeschwindigkeit S_n^0 beschreibt damit Bradley [15] über ein Potenzgesetz:

$$\frac{S_n}{S_n^0} = \left(\frac{\Lambda_{sp,l}}{\Lambda_{sp,s}} \right)^{D-2} = \left(\frac{n_{sp,s}}{n_{sp,l}} \right)^{D-2} \quad (5.54)$$

mit $S_n/S_L^0 \approx s_L/s_L^0$ lässt sich schließlich schreiben [16]:

$$\frac{s_{L,Inst}}{s_L^0} = \left(\frac{\Lambda_{sp,l}}{\Lambda_{sp,s}} \right)^{D-2} = \left(\frac{n_{sp,s}}{n_{sp,l}} \right)^{D-2} \quad (5.55)$$

wobei Bradley [15] einen konstanten Wert für die fraktale Dimension von $D = 7/3$ annimmt. Die kleinste Faltungslänge $\Lambda_{sp,s}(Pe_r)$ und die größte Wellenlänge $\Lambda_{sp,l}(Pe_r)$ werden für $\sigma_{sp} = 0$ über Gleichung (4.27) berechnet. Abbildung 5.3 illustriert das Berechnungsprinzip für die kleinste und größte sphärische Wellenzahl. Die Wellenzahl mit der

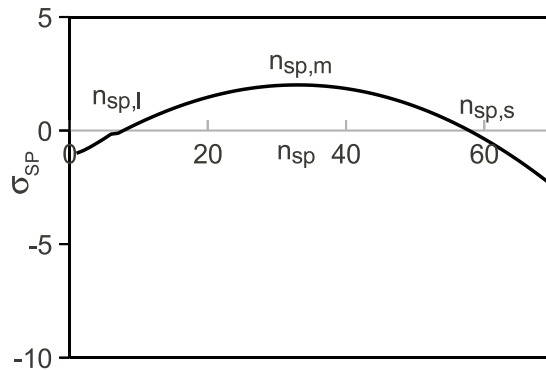


Abbildung 5.3: Berechnungsprinzip anhand der Auswertung der Dispersionsrelation in Gleichung (4.27) für $Pe_r = 250$

maximalen Wachstumsrate wird als $n_{sp,m}$ bezeichnet. Der Instabilitätsbereich wird über die Streckrate auf der Flammenoberfläche beschrieben und ist daher vom Flammenradius, Pe_r abhängig. Der Stabilitätsbereich in Abhängigkeit des entdimensionierten Flammenradius Pe_r für eine stöchiometrische Methan-Luft Flamme, mit $T_u = 300K$ und $p = 5bar$ zeigt Abbildung 5.4. Die kritische Peclet Zahl oberhalb derer Instabilitäten auftreten, entspricht dabei $Pe_{r,cl,th} = 97$, die zugehörige Wellenzahl ergibt sich zu $n_{cl,th} = 14$. Wie in [15] beschrieben, ist die kleinste instabile Wellenzahl $n_{sp,l}$ nahezu unabhängig von der Peclet Zahl, während die Störungen größter Wellenzahlen linear mit Pe_r zunehmen. Damit ist die kleinste Wellenlänge, bei der Instabilitäten auftreten, konstant. Bradley [15] folgert daraus, dass die kleinsten Wellenlängen mit hohen Streckraten verbunden sind, die LD- und TD-Effekte bei noch kleineren Wellenlängen unterdrücken.

Der Vergleich experimenteller Daten expandierender Flammen mit der Theorie von

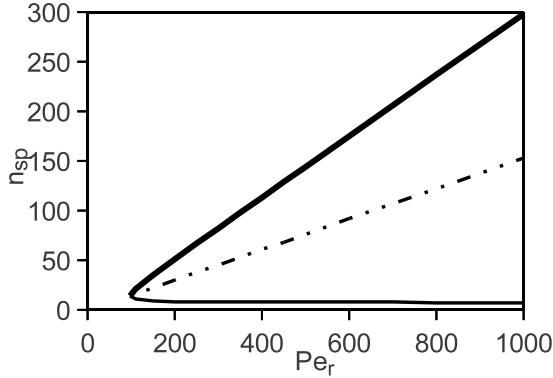


Abbildung 5.4: Instabilitätsbereich laminarer kugelförmiger Flammen anhand der Dispersionsrelation in Gleichung (4.27); durchgezogene dicke Linie: $n_{sp,s}$; durchgezogene dünne Linie: $n_{sp,l}$; Strichpunktlinie: $n_{sp,m}$;

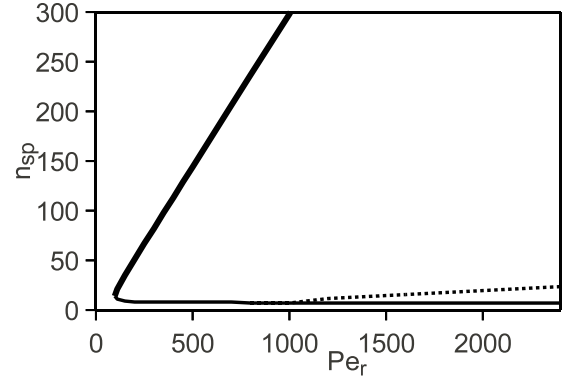


Abbildung 5.5: Instabilitätsbereich laminarer kugelförmiger Flammen anhand der Dispersionsrelation in Gleichung (4.27) mit Korrektur nach Bradley [15], Gleichung (5.56); durchgezogene dicke Linie: $n_{sp,s}$; durchgezogene dünne Linie: $n_{sp,l}$; gepunktete Linie: $f n_{sp,s}$

Bechthold und Matalon [11] in [15] und [21] zeigt, dass die Experimente eine Transition zu instabilen Flammen bei höheren Peclet Zahlen $Pe_{r,cl,exp}$ aufweisen, $Pe_{r,cl,exp} > Pe_{r,cl,th}$. Um in der Modellierung den Versatz zu berücksichtigen, führt Bradley [15] einen Korrekturfaktor $f < 1$ ein:

$$f \frac{n_{sp,s}}{n_{sp,l}} \Big|_{Pe_{r,cl,exp}} = 1 \quad (5.56)$$

um zu gewährleisten, dass Gleichung (5.55) erst oberhalb der experimentell bestimmten kritischen Peclet Zahl eine Flammenfaltung aufgrund von Instabilitäten vorhersagt. Gleichung (5.55) schreibt sich damit zu:

$$\frac{s_{L,Inst}}{s_L^0} = \left(\frac{f n_s}{n_l} \right)^{D-2} \quad (5.57)$$

Abbildung 5.5 illustriert das Prinzip für eine stöchiometrische Methan-Luftflamme, $T_u = 300K$, $p = 5bar$, wofür die Theorie von Bechthold et al. [11] eine kritische Peclet Zahl von $Pe_{r,cl,th} = 97$ vorhersagt, während Messungen in Gu et al. [68] einen Wert von $Pe_{r,cl,exp} = 1096$ ergeben. Wertet man $n_{sp,s}/n_{sp,l}$ bei $Pe_r = 1096$ aus, ergibt sich ein Korrekturfaktor von $f = 0,022$ und der Bereich von LD- und TD Instabilitäten verkleinert sich.

Die kritische Peclet Zahl im Experiment kann über eine Korrelation in Abhängigkeit der Markstein Zahl der Deformationsrate für die laminare Brennrate bestimmt werden:

$$Pe_{r,cl} = 177Ma_{sr} + 2177 \quad (5.58)$$

Gleichung (5.58) basiert auf einer linearen Regression der experimentellen Daten von $Pe_{r,cl}$ bei Iso-Oktanflammen von Bradley et al. [18] sowie Methanflammen von Gu et al. [68], dargestellt in Abbildung 5.6.

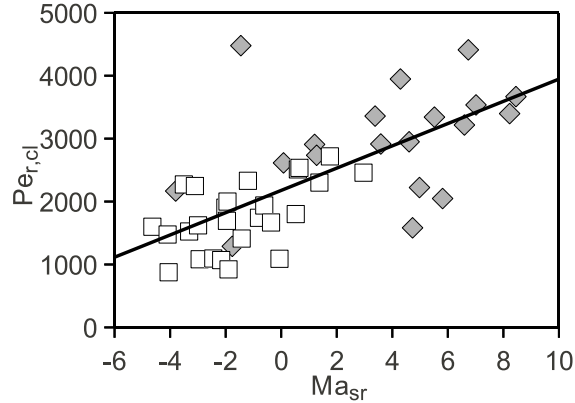


Abbildung 5.6: Zusammenfassung experimentell ermittelter kritischer Peclet Zahlen über der Markstein Zahl für die Deformationsrate, übernommen aus [68]; Quadrat: Methan [68]; Raute: Iso-Oktan [18]; Linie: lineare Regression der Daten

5.6.3 Folgerungen für die Modellierung hydrodynamischer Instabilitäten

Die Zusammenfassung numerischer und experimenteller Arbeiten zeigt, dass bisher nur bei laminaren Flammen der Einfluss von LD- und TD-Instabilitäten auf den Reaktionsquellterm quantifiziert werden kann. Die Arbeiten in [18, 68] zeigen zudem, dass sich ein hydrodynamisch instabiler Bereich über Streckeffekte auf der Flammenfront quantitativ gut beschreiben lässt. Eine Klassifizierung anhand von u'/s_L^0 lässt sich nicht ausreichend quantifizieren und ist zudem schwierig in der LES auszuwerten. Als geeigneter Modellierungsansatz für die Beschreibung von LD- und TD-Effekten wird daher eine Modellierung für die laminare Flammengeschwindigkeit erachtet, da dieses Modell validiert werden kann. s_L wird zudem in der FSD Formulierung bei turbulenter Verbrennung verwendet, sodass damit eine Berücksichtigung von Instabilitätseffekten bei turbulenter Verbrennung ermöglicht wird. Eine Klassifizierung stabil/instabil kann für die LES nur über eine Deformations- oder Streckrate umgesetzt werden, da diese instantan für den aufgelösten und den gefilterten Bereich berechnet werden kann. Das Modell von Bradley [15] würde diese Forderungen erfüllen, ist aber nur auf kugelförmige, expandierende Flammen anwendbar.

6 Formulierung eines algebraischen, fraktalen Verbrennungsmodells

Das in diesem Kapitel formulierte neue, fraktale Verbrennungsmodell entspricht wie viele algebraische LES Verbrennungsmodelle einer weiterentwickelten Modellformulierung aus dem RANS Kontext. Das RANS Modell als Modellierungsbasis wird in Abschnitt 6.1 beschrieben, in den folgenden Abschnitten werden die Modellierungen der kleinsten und größten Faltungslänge, der fraktalen Dimension sowie eine Abschätzung der turbulenten Flammendicke dargelegt.

6.1 Modellierungsbasis

6.1.1 Auswahl der Modellierungsbasis

Ein RANS Modell als Modellierungsbasis für ein neues LES Modell zu verwenden, ermöglicht es, die umfangreichen Untersuchungen und Bewertungen der RANS-Modelle in den Übersichtsartikeln von Lipatnikov und Chomiak [106], Veynante und Vervisch [151] sowie der Artikelreihe von Bray et al., z.B. [23] zu nutzen und prinzipielle Eigenschaften für das abgeleitete LES-Modell zu übernehmen. Wie in Abschnitt 5.2.6 argumentiert, wird in dieser Arbeit ein fraktales Verbrennungsmodell als geeignetste Modellierungsmethode in der LES erachtet. Ein in der RANS umfangreich evaluiertes fraktales Verbrennungsmodell ist das Lindstedt-Vaós Modell [105], das einer RANS Schließung des fraktalen Modells von Gouldin [64] entspricht. Eine algebraische Evaluierung des fraktalen Modells von Gouldin in Lipatnikov und Chomiak [106] zeigt viel versprechende Modelleigenschaften im Vergleich mit experimentellen Daten.

Bray, Champion und Libby [23] evaluieren u.a. das Lindstedt-Vaós Modell anhand von drei experimentell untersuchten Datenbanken von Flammen in wandnaher bzw. stagnierender Turbulenz¹.

Anhand von CFD Simulationen einer isochoren Kammer und einer Hochdruckflamme im RANS Kontext, zeigen Brandl et al. [22], dass das Lindstedt-Vaós Modell die Druckabhängigkeit im Vergleich zum Experiment gut wiedergeben kann. Muppala et al. [121] zeigen, dass eine einfache Druckkorrektur des Lindstedt-Vaós Modells eine sehr gute Übereinstimmung mit experimentellen Daten für Hochdruckflammen bei unterschiedlichen Turbulenzgraden aufweist. Ein gutes Modellverhalten zeigen Lindstedt et al. [105] anhand der Simulation von Gegenstromflammen und Flammenausbreitung in Rohren und bestätigen das Lindstedt-Vaós Modell bzw. das fraktale Modell von Gouldin et al. [64] als geeignete Modellierungsbasis für ein neues LES Modell.

¹zusätzlich werden ein CFM-Modell von Veynante und Vervisch [151] und das Zimont Modell [163] untersucht, wobei die besten Vorhersagen durch das Lindstedt-Vaós Modell bereitgestellt werden

6.1.2 Fraktales Basismodell

Wie in Abschnitt 5.2.4 dargelegt, zeigen theoretische Analysen [109] sowie experimentelle Daten und DNS, z.B. in [75, 140], dass die turbulent gefaltete Flammenfront innerhalb zweier Längenmaße ϵ_i und L fraktale Eigenschaften aufweist. Damit folgt s_t/s_L^0 in diesem Bereich einem Potenzgesetz und die aufgelöste Flammenoberfläche innerhalb eines Kontrollvolumens der Kantenlänge L lässt sich beschreiben über [64]:

$$\frac{A_t}{L^3} \sim \left(\frac{\epsilon_i}{L}\right)^{2-D} L^{-1} \quad (6.1)$$

Unter Berücksichtigung, dass die Flammenfront sich nicht zu jeder Zeit im Kontrollvolumen befindet, führen Gouldin et al. [64] eine Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion

$$p_c = C_p \tilde{c}(z) (1 - \tilde{c}(z)) L \quad (6.2)$$

ein, mit dem Abstand z zur Flammenfront entlang der Flammennormalen. Da die Flamme sich stets innerhalb der turbulenten Flammendicke befindet, muss das Integral von Gleichung (6.2) über die turbulente Flammendicke den Wert 1 annehmen. Damit ergibt sich die Konstante in Gleichung (6.2) als das Inverse der turbulenten Flammendicke:

$$P_c = \tilde{c}(1 - \tilde{c}) \frac{L}{\delta_t} \quad (6.3)$$

Führt man eine Reaktionskonstante C_R ein und ersetzt L durch eine maximale Faltungslänge ϵ_0 , kann man die Flammenoberflächendichte schreiben als [64]:

$$\Sigma = C_R \left(\frac{\epsilon_i}{\epsilon_0}\right)^{2-D} \frac{\tilde{c}(1 - \tilde{c})}{\delta_t} \quad (6.4)$$

Σ benötigt damit eine korrekte Modellierung der größten und kleinsten Faltungslänge L und ϵ_i , der fraktalen Dimension D und der turbulenten Flammendicke δ_t . Gleichung (6.4) beinhaltet keine Annahmen zur Turbulenzmodellierung und wurde von Lindstedt und Vaós als Basis des RANS Verbrennungsmodells verwendet.

6.2 Modellierung der größten Faltungslänge ϵ_0

Gouldin [63] und Lindstedt et al. [104] verwenden im RANS-Kontext das integrale Längenmaß l_t um die größte Faltungslänge der Flammenfront zu beschreiben. Es wird argumentiert, dass l_t nicht dem größten Wirbel, aber dem energiereichsten Wirbel entspricht. Experimentell wird diese Modellierung von North et al. [140] unterstützt. Fraktale LES-Modelle [33, 34, 56, 75] verwenden die Filterweite Δ um die größte Abschneidelänge zu modellieren. Hier wird dem Nyquist Kriterium folgend angenommen, dass 2, 2 Zellen benötigt werden, um im aufgelösten Bereich die kleinste Faltungslänge aufzulösen. Die größte nicht aufgelöste Faltungslänge wird daher modelliert über:

$$L = 2, 2\Delta \quad (6.5)$$

Geht man davon aus, dass die größte Faltungslänge im fraktalen Bereich dem integralen Längenmaß entspricht, muss damit in der Simulation sichergestellt werden, dass² $2, 2\Delta < l_t$. Dies wird hier jedoch nicht als Einschränkung des Modells verstanden, da in der LES gefordert wird, dass die Filterweite innerhalb des Inertialbereichs liegt [55], sodass $\Delta < l_t$ eingehalten werden muss. Zudem sollten ca. 80% der turbulenten kinetischen Energie aufgelöst werden, womit $\Delta \ll l_t$ gelten muss. So schlagen z.B. Celik et al. [31] eine Filterweite von $\Delta \approx l_t/8$ für eine LES vor.

6.3 Modellierung der kleinsten Faltungslänge ϵ_i

Lindstedt und Vaós [105] sowie Gouldin [63] modellieren die kleinste Faltungslänge über die Kolmogorov Länge l_η .

$$\epsilon_i = l_\eta = Ka^{-1/2}l_F \quad (6.6)$$

Anhand von theoretischen Analysen folgert Peters [128] hingegen, dass ϵ_i nur im Bereich dünner Reaktionszonen mit l_η skaliert und im gefalteten Flammenfrontregime mit der Gibson Länge skaliert:

$$\epsilon_i = l_G = \left(\frac{s_L^0}{u'}\right)^3 l_t \quad (6.7)$$

Auswertungen zweier DNS in Chakraborty und Klein [33] ergeben kleinste Faltungslängen im Bereich der verdichteten, gefalteten Flammenfront und dem gefalteten Flammenfrontregime, die sich nicht über eine Skalierung modellieren lassen. Dies kann als Bestätigung der Analysen von Peters interpretiert werden. Zudem ergeben die Auswertungen in [33], dass ϵ_i mit der laminaren Flammendicke skaliert. Chakraborty und Klein [33] verwenden daher das Gibson Längenmaß $l_G \sim Ka_\Delta^{-2}$ und die Kolmogorov Länge in Kombination mit einer Übergangsfunktion $\exp(-Ka_\Delta)$ zur Modellierung von ϵ_i :

$$\epsilon_i = l_F \left[0, 345 Ka_\Delta^{-2} \exp(-Ka_\Delta) + 6, 41 Ka_\Delta^{-1/2} (1 - \exp(-Ka_\Delta)) \right] \quad (6.8)$$

Die Formulierung ist ähnlich dem Hawkes Modell, Gleichung (5.30) in Abschnitt 5.2.4, für dessen Formulierung eine Kombination von l_G und l_η für $Sc = 1$ verwendet wird. Die von Poinot et al. [135] untersuchten DNS Daten zeigen hingegen die Skalierung $\epsilon_i \sim Ka^{-1/3}$. Die umfangreichste Untersuchung der kleinsten Faltungslänge unter Verwendung von DNS Daten und experimentellen Daten wird von Gülder und Smallwood [70] durchgeführt. Die Auswertungen zeigen, dass die entdimensionierte kleinste Faltungslänge ϵ_i/l_F nur mit der Karlovitz Zahl skaliert:

$$\frac{\epsilon_i}{l_F} \sim Ka^{-\beta} \quad (6.9)$$

mit $1/3 \leq \beta \leq 1/2$. Zudem zeigen die experimentellen Daten von ϵ_i , aufgetragen über der Karlovitz Zahl in [70], keine Änderung in der Skalierung für $Ka < 1$ oder $Ka > 1$ und damit keine Abhängigkeit vom Verbrennungsregime. Constantin et al. [41] untersuchen experimentell sowie anhand Lagrange'scher Berechnungsverfahren das Verhalten passiver

²bzw. in den fraktalen Modellen von [33, 34, 56, 75] muss gelten $\Delta < l_t$

Oberflächen in isothermer turbulenter Strömung und erhalten eine Skalierung von ϵ_i mit der Kolmogorov Länge. Auch zeigt die Auswertung von ϵ_i der Kobayashi Datenbank in [90] eine Skalierung mit $\epsilon_i \sim l_F Ka^{-1/2}$, wobei die untersuchten Bunsenbrennerflammen den Verbrennungsregimen der gewellten, der gefalteten Flammenfront und den dünnen Reaktionszonen zugeordnet werden können. Für das Regime der gewellten Flammenfronten wird zwar angenommen, dass die turbulenten Wirbel zu langsam sind, um die Flammenfront zu falten, vgl. Kapitel 4.2.3, experimentelle Daten von Smallwood [144] und Das [43], die von Gülder et al. [70] zusammengefasst werden, beinhalten die Bereiche geringer Turbulenz: $u'/s_L^0 < 1$, und zeigen die selbe Skalierung $\epsilon_i \sim l_F Ka^\beta$ in den drei unterschiedlichen Regimebereichen. Auch [90] zeigt die Skalierung $\epsilon_i \sim Ka^{-1/2}$ für den Bereich $u'/u_l^0 < 1$. Es muss allerdings beachtet werden, dass eine Zuordnung vorherrschender Mechanismen über Kennzahlen äußerst ungenau ist, vgl. Kapitel 4.2.3. Damit kann über Ka eine unterschiedliche Skalierung von ϵ_i , die auf unterschiedlichen dominierenden Mechanismen in den unterschiedlichen Regimen beruht, nicht exakt wiedergegeben werden. Basierend auf den experimenteller Datenbanken in [41, 70, 90] und um eine Skalierung von ϵ_i ähnlich dem RANS Lindsted-Vaós Modell [105] zu erhalten, wird die kleinste Faltungslänge modelliert über:

$$\epsilon_i \sim l_F Ka_\Delta^{-1/2} \quad (6.10)$$

l_F wird über Gleichung (4.7) berechnet, unter der Annahme $Sc = 1$. Da Gleichung (6.10) nur eine Skalierung von ϵ_i beschreibt, kann eine kleinste Faltungslänge berechnet werden, die kleiner als die laminare Flammendicke l_F ist. Experimentelle Daten die von Driscoll [46] zusammengefasst werden, zeigen allerdings eine kleinste Faltungslänge die stets größer ist als l_F . Die DNS Daten von Chakraborty und Klein [33] ergeben für das TRZ Regime $\epsilon_i = 1,84l_F$ und für das CFR Regime $\epsilon_i = 2,94l_F$, wobei aufgrund der geringen Reynolds Zahl, $Re_t = 47$ bzw. $Re_t = 56$ bei höherer Turbulenz kleinere Faltungslängen möglich wären. Zudem zeigen Kobayashi et al. [90], dass für Hochdruckflammen schon bei geringem Turbulenzniveau $u'/s_L^0 > 1,5$ eine konstante kleinste Faltungslänge erreicht wird. Folglich wird auch hier ϵ_i auf einen Wert von $2l_F$ limitiert³.

$$\epsilon_i = l_F \max \left(Ka_\Delta^{-1/2}, 2 \right) \quad (6.11)$$

Die Karlovitz Zahl wird im LES-Kontext berechnet über:

$$Ka_\Delta = \left(\frac{u'_\Delta}{s_L^0} \right)^{3/2} \left(\frac{\Delta}{l_F} \right)^{-1/2} \quad (6.12)$$

Im RANS-Kontext, geht u'_Δ in u' und Δ in l_t über.

6.4 Modellierung der fraktalen Dimension

Theoretische Überlegungen zeigen, dass die fraktale Dimension D einen minimalen Wert von 2 annimmt, wenn die nicht aufgelöste Fläche im Kontrollvolumen glatt ist, d.h. $\epsilon_i \geq \epsilon_o$

³Theoretisch wäre auch eine kleinste Abschneidelänge $\epsilon_{i,\min}$ im Bereich der Dicke der Reaktionszone $l_{F,R}$, vgl. Kapitel 4.2.3 möglich und damit $l_{F,R} < \epsilon_{i,\min} < l_F$. Allerdings wurde dafür kein experimenteller Nachweis gefunden und auch die DNS im TRZ Regime in [33] zeigt stets $\epsilon_i > l_F$

und einen theoretischen maximalen Wert von 3 annimmt, wenn die nicht aufgelöste Flamme so gefaltet wird, dass ihre Fläche das Volumen vollständig füllt. In der Verbrennungsmodellierung wird allerdings die fraktale Dimension meist als konstant angenommen. So verwenden Charlette et al. [34] einen Wert von $D = 2,5$, Lindstedt und Város [105], Tangermann et al. [146], Kerstein [84] sowie Muppala et al. [121] nehmen $D = 7/3$ an und Gouldin [63] empfiehlt, basierend auf experimentellen Daten, einen Wertebereich von $2,32 < D < 2,4$. Die experimentellen Daten für D in North und Santavicca [140], Kobayashi et al. [90] und Marayama [122] zeigen allerdings eine Abhängigkeit der fraktalen Dimension von u'/s_L^0 . Zudem zeigen experimentelle Daten von Goix et al. [60] einen Zusammenhang von D und dem Abstand der Flamme vom Brenneinlass. Die DNS Daten in Chakraborty et al. [33] zeigen eine Zunahme von D vom Regime gefalteter Flammen (CFR) zum Bereich dünner Reaktionszonen (TRZ). Die erhaltenen Werte für D in [33] sind zudem in guter Übereinstimmung mit der empirischen Korrelation von North und Santavicca [140]. Chakraborty et al. [33] schlagen daher vor die fraktale Dimension zu modellieren über:

$$D = 2 + (1/3)\text{erf}(2Ka_\Delta) \quad (6.13)$$

wobei ein Wert von $D = 2$ bei geringer Turbulenz im CFR Bereich erreicht wird und $D_{\max} = 7/3$ bei $Ka_\Delta \geq 1$ und damit im gesamten TRZ Bereich vorliegt. Folgt man Hawkes et al. [75] ist die fraktale Dimension - wie auch ϵ_i - ein physikalischer Parameter und darf nicht von der Netzauflösung abhängen. Beschreibt man D über eine Kennzahl, kann damit nur die Karlovitz Zahl verwendet werden, da theoretisch gilt $Ka = l_F^2/l_\eta^2$. Für die Formulierung der fraktalen Dimension im Modell von Hawkes et al. [75] wird von dem von Damköhler [42] postulierten Verhalten der Flammenfaltung im Grenzbereich kleiner und großer Turbulenzskalen ausgegangen. D im Hawkes Modell in Gleichung (5.29) beinhaltet schließlich eine Kombination der Gibson Länge und Kolmogorov Länge (für $Sc = 1$). Die Werte von D entsprechend der Modellierung von [75] variieren im CFR Bereich von $7/3$ für geringe Turbulenz bis $8/3$ im TRZ Bereich, wobei Werte $D > 7/3$ in messtechnischen Untersuchungen turbulenter Verbrennung bisher nicht beobachtet werden. Neben den empirischen, an experimentellen oder DNS Daten kalibrierten Modellen für D , wird von Giacomazzi et al. [26] ein theoretisches Modell für die fraktale Dimension vorgeschlagen. Abgeleitet wird es unter der Annahme einer Kolmogorov Energiekaskade in jeder Rechenzelle und beschreibt damit die Kolmogorov Kaskade im Grenzbereich isothermer Strömung. Eine modifizierte Version des Modells wird erfolgreich zur Simulation einer Hochdruck Bunsenbrennerflamme eingesetzt [83] und schreibt sich zu:

$$D = \min \left(1 + \frac{\ln(\pi^{-2/3} Re_\Delta (\nu_u/\nu_b))}{\ln(\pi^{1/6} Re_\Delta^{1/2} (\nu_u/\nu_b)^{1/2})}, 8/3 \right) \quad (6.14)$$

Die fraktale Dimension wird hier auf einen Wert von $8/3$ limitiert, da D aus der Formulierung von [26] für große Reynolds Zahlen einen unphysikalischen Wert von 3 annimmt. Das Verhältnis der kinematischen Viskosität im unverbrannten Gemisch zu der im verbrannten wird eingeführt, um den Einfluss der Wärmefreisetzung auf die Turbulenz in der Rechenzelle soweit möglich zu berücksichtigen. Die Erweiterung ist notwendig um die gute

Übereinstimmung von Experiment und Simulation in [83] zu ermöglichen. Da in Gleichung (6.14) die fraktale Dimension in Abhängigkeit der turbulenten Reynolds Zahl berechnet wird, ergibt sich daraus eine Abhängigkeit von der Filterweite, die wie oben argumentiert nicht zulässig ist. Um dies zu vermeiden, wird hier Gleichung (6.14) durch einen Ausdruck für D in Abhängigkeit der Karlovitz Zahl ersetzt⁴

$$D = \frac{8/3Ka_{\Delta} + 2c_D}{Ka_{\Delta} + c_D} \quad (6.15)$$

wobei sich die Konstante c_D zu 0,03 ergibt, um bei gleichem Turbulenz- und Druckniveau eine gute Übereinstimmung der Gleichungen (6.14) und (6.15) zu erhalten. Zudem beschreibt Gleichung (6.14) einen glatten Verlauf zwischen 2 und $8/3$ und benötigt keine Schranken. Der Wert $D_{\max} = 8/3$ entspricht dem selben maximalen Wert wie im Hawkes Modell, obwohl bisher keine experimentellen Messdaten vorgemischter Flammen den Wert bestätigen. Andererseits ergeben theoretische Analysen von Mandelbrot et al. [109] eine fraktale Dimension von $D = 8/3$ bei der Betrachtung passiver Oberflächen in homogener und isotroper Turbulenz sowie der Annahme der Kolmogorov Energiekaskade. Die Annahme fraktaler Eigenschaften sowie einem Verhalten von $s_{t,\Delta}/s_L^0$ entsprechend dem Postulat von Damköhler [42] führt auch in Hawkes et al. [75] zu $D_{\max} = 8/3$ und zeigt eine sehr gute Übereinstimmung mit DNS Daten in [75]. Constantin et al. [41] untersuchen messtechnisch als auch anhand Lagrange'scher Berechnungsverfahren die fraktale Dimension in einem isothermen Freistrahls und identifizieren Werte im Bereich von $D = 2,67$ im voll turbulenten inneren Bereich des Freistrahls und Werte von $D = 2,33$ in Bereichen, die hauptsächlich durch den Randbereich des Freistrahls beeinflusst werden. Schließlich folgert Klimenko [86], dass stromab der Flamme ein Kaskadenprozess mit $D = 7/3$ vorliegt, womit nicht ausgeschlossen werden kann, dass vor der Flamme die Kolmogorov Hypothese mit einer fraktalen Dimension von $D = 8/3$ entsprechend Mandelbrot [109] möglich ist⁵. Das Verhalten des Verbrennungsmodells abhängig von der Wahl für D_{\max} lässt sich in Hinblick auf die Simulation von Hochdruckflammen analytisch abschätzen. Im Grenzbereich von ebenen Flammen die in eingefrorener Turbulenz propagieren, erlaubt die KPP-Analyse, siehe Anhang A.3, das Modellverhalten in Form der vorhergesagten turbulenten Brenngeschwindigkeit der propagierenden Flamme abzuschätzen. Die turbulente Brenngeschwindigkeit unter Verwendung von Gleichung (A.2) für die kleinste Faltungslänge ergibt sich damit zu:

$$s_t = 2 \cdot \left(\left(\frac{\nu_t}{Sc_t} \right) \frac{C_R \cdot s_L^0}{\delta_t} \left(\frac{2, 2\Delta \cdot u'_{\Delta}}{\nu} \right)^{0,75 \cdot (D-2)} \right)^{0,5} \quad (6.16)$$

Die turbulente Diffusion über μ_t/Sc_t modelliert, hängt nur von der turbulenten Fluktuation und dem turbulenten Längenmaß ab [106]. Für eine weitere Diskussion von Gleichung (6.16)

⁴Implementiert wird i.d.R $Ka_{\Delta} = \left(\frac{u'_{\Delta}}{s_L} \right)^{3/2} \left(\frac{\Delta}{l_F} \right)^{-1/2}$, womit die Unabhängigkeit von Ka_{Δ} von der Filterweite über eine Netzstudie kontrolliert werden muss, bzw. das Feinstrukturmodell $\frac{\Delta_{fein}}{\Delta_{grob}} = \left(\frac{u'_{\Delta,fein}}{u'_{\Delta,grob}} \right)^3$ bereitstellen muss. Die Filterunabhängigkeit der Karlovitz Zahl sollte daher in der LES überprüft werden.

⁵Gedankt sei hier Alexander Klimenko für die aufschlussreiche Diskussion

wird zudem angenommen, dass die turbulente Flammendicke δ_t , wie von Lipatnikov und Chomiak [106] dargelegt, über die Taylor Theorie der turbulenten Diffusion beschrieben werden kann:

$$\delta_t \sim \begin{cases} u't & \text{für } t \ll l_t/u' \\ \sqrt{2u'l_t t} & \text{für } t \gg l_t/u' \end{cases} \quad (6.17)$$

und für den Zwischenbereich:

$$\delta_t \sim \sqrt{2u'l_t t \left[1 - \frac{l_t/u'}{t} \left(1 - \exp\left(-\frac{t}{l_t/u'}\right) \right) \right]} \quad (6.18)$$

l_t/u' wird hier verwendet um das Lagrange Zeitmaß zu beschreiben, l_t beschreibt das Lagrange turbulente Längenmaß. Die Gleichungen (6.17,6.18) zeigen, dass die Wachstumsrate von δ_t nur von der Zeit und/oder dem Abstand vom Brenneinlass sowie dem Turbulenzniveau abhängt. δ_t ist der Taylor Theorie folgend damit unabhängig von chemischen oder physikalischen Größen, die eine Druckabhängigkeit beinhalten können. Dies wird z.B. durch experimentelle Daten von Lee et al. [102] bestätigt, wobei gezeigt wird, dass die turbulente Flammendicke der untersuchten Bunsenbrennerflamme keine Korrelation mit dem Druck aufweist. Für die Diskussion von Gleichung (6.16) wird daher angenommen, dass δ_t keine Druckabhängigkeit zeigt. Verwendet man die Eigenschaft turbulenter, vorgemischter Methan-Luft Flammen, $s_t \neq f(p)$, [106, 143] sowie $s_L^0 \sim p^{-0,5}$ und $\nu \sim p^{-1}$, muss die fraktale Dimension einen Wert von $D_{\max} = 8/3$ annehmen, um im Bereich großer turbulenter Reynolds Zahlen und konstantem u'_Δ die korrekte Druckskalierung für die turbulente Brenngeschwindigkeit vorherzusagen.

6.5 Modellierung der turbulenten Flammendicke

Im RANS Kontext, kann die turbulente Flammendicke als proportional zum integralen Längenmaß angenommen werden. Dies wurde von Lindstedt und Sakthitharan [104] angewendet und stützt sich auf Simulationen mit Lösung einer pdf-Transportgleichung von Anand und Pope [7]. Im LES Kontext würde eine einfache Beschreibung der turbulenten Flammendicke durch die Filterweite die turbulente Flammendicke deutlich unterschätzen. Um dies zu umgehen, integrieren Tangermann et al. [146] die Wahrscheinlichkeitsdichte p_c in Gleichung (6.2) über die Filterweite:

$$P_{c,\Delta} = C_p \int_{c(z_0-\Delta/2)}^{c(z_0+\Delta/2)} \tilde{c}^* (1 - \tilde{c}^*) d\tilde{c}^* = \left[\frac{1}{2}\tilde{c}^{*2} - \frac{1}{3}\tilde{c}^{*3} \right]_{\tilde{c}(z_0-\Delta/2)}^{\tilde{c}(z_0+\Delta/2)} \quad (6.19)$$

Unter Verwendung einer linearen Approximation:

$$\tilde{c}(z_0 \pm \Delta/2) = \tilde{c}(z_0) \pm \left. \frac{\partial \tilde{c}}{\partial z} \right|_{z_0} \Delta/2 \pm (\dots) \quad (6.20)$$

erhalten Tangermann et al. [146] schließlich:

$$P_c = C_p \tilde{c} (1 - \tilde{c}) |\nabla \tilde{c}| \cdot \Delta \quad (6.21)$$

In dieser Arbeit wird δ_t in Gleichung (6.4) unter der Annahme einer a priori bekannten turbulenten Flammendicke untersucht. Die turbulente Flammendicke kann über die maximale Gradienten Methode [107] berechnet werden:

$$\delta_t^{-1} = \max \left(\frac{d\bar{c}}{dz} \right) \quad (6.22)$$

wobei z den Abstand normal zur Flamme beschreibt. Lipatnikov and Chomiak [107] zeigen im RANS-Kontext bzw. für experimentelle Daten, dass die Division des Abstands normal zur Flamme durch δ_t einen universellen Verlauf der Fortschrittsvariablen über dem normalisierten Flammenabstand ergibt. Der Verlauf lässt sich sehr gut über die komplementäre Fehlerfunktion erfc approximieren:

$$\bar{c} = 1 - \frac{1}{2} \text{erfc}(\xi\sqrt{\pi}) \quad (6.23)$$

wobei $\xi = z/\delta_t$ den normalisierten Abstand senkrecht zur Flamme bezeichnet. Die Ableitung von Gleichung (6.23) nach ξ ergibt die universelle Steigung von \bar{c} [24] über ξ :

$$\frac{d\bar{c}}{d\xi} = e^{-\pi\xi^2} \quad (6.24)$$

$d\bar{c}/d\xi$ kann man als Verlauf über \bar{c} darstellen. Hier wird $d\bar{c}/d\xi$ über ein Polynom $\mathcal{F}(\bar{c}) = a1 + a2(-0.5 + \bar{c})^2 + a3(\bar{c} - 0.5)^4$ mit den zugehörigen Konstanten $a1 = 0,995176$; $a2 = -2,81811$; $a3 = -4,30724$ und $\max|\mathcal{F}(\bar{c})| = 1$ beschrieben. Lipatnikov und Chomiak [106] zu Folge zeigen experimentelle Daten, dass Gleichung (6.23) auch bei Favre Mittelung gültig ist. Damit kann unter der Verwendung von Gleichung (6.22), δ_t über $|\nabla\bar{c}|/\mathcal{F}(\bar{c})$ approximiert werden, wenn man die turbulente Flammendicke als a priori bekannt voraussetzt und annimmt, dass die in der LES aufgelöste Flamme sich ähnlich der turbulenten Flammendicke verhält.

6.6 Zusammenfassende Formulierung des Verbrennungsmodells

Unter Berücksichtigung der Modellierungen in den Abschnitten 6.2 - 6.5 schreibt sich die Flammenoberflächendichte innerhalb der Filterweite zu:

$$\Sigma = C_R \left(\frac{2, 2\Delta}{\max(l_F K a_\Delta^{-1/2}, 2l_F)} \right)^{D-2} \tilde{c}(1 - \tilde{c})|\nabla\tilde{c}|\mathcal{F}(\tilde{c})^{-1} \quad (6.25)$$

mit D entsprechend Gleichung (6.15). Die besten Simulationsergebnisse im Vergleich mit experimentellen Daten in Kapitel 8 ergeben sich mit $C_R = 4, 5$. Prinzipiell muss ein FSD Modell im Grenzbereich $\Delta \rightarrow 0$ bzw. $u'_\Delta \rightarrow 0$ für die FSD $\Sigma = |\nabla\tilde{c}|$ vorhersagen. Zwar wird $D = 2$ für $u'_\Delta \rightarrow 0$, allerdings wird der kombinierte Ausdruck $[C_R\tilde{c}(1 - \tilde{c})/\mathcal{F}(\tilde{c})]$ in

Gleichung (6.25) zu 1, 125 bei $\tilde{c} = 0,5$ und würde dort geringfügig die laminare Flammengeschwindigkeit überschätzen.

Um sicherzustellen, dass $\lim_{w'_\Delta \rightarrow 0} \Sigma = |\nabla \tilde{c}|$ muss Gleichung (6.25) erweitert werden. I.d.R. wird die Formulierung von Σ um den Ausdruck $\dots + |\nabla \tilde{c}|$ erweitert, was allerdings im schwach turbulenten Bereich Σ überschätzt. Chakraborty und Klein [33] führen daher eine exponentielle Übergangsfunktionen ein. Das in dieser Arbeit in Kapitel 8 verwendete Modell schreibt sich damit zu:

$$\Sigma = \left\{ e^{\left(-\frac{2,2\Delta}{\epsilon_i}\Theta\right)} + \left(1 - e^{\left(-\frac{2,2\Delta}{\epsilon_i}\Theta\right)}\right) C_R \left(\frac{2,2\Delta}{\max(l_F \cdot Ka_\Delta^{-1/2}, 2l_F)} \right)^{D-2} \tilde{c}(1-\tilde{c})\mathcal{F}(\tilde{c})^{-1} \right\} |\nabla \tilde{c}| \quad (6.26)$$

wobei ϵ_i über Gleichung (A.2) berechnet wird. Ähnlich zu [33] wird die Konstante der Übergangsfunktion gewählt zu: $\Theta = 2,5$. Validierungssimulationen in Kapitel 8.3 zeigen, dass die Übergangsfunktion selbst bei geringem Re_Δ das Verbrennungsmodell nicht beeinflusst.

Abschließend sei bemerkt, dass der Vergleich von $[\bar{c}(1-\bar{c})]$, $[d\bar{c}/d\xi]$ und $[\bar{c}(1-\bar{c})/(d\bar{c}/d\xi)]$, in Abbildung 6.1 über \bar{c} aufgetragen, zeigt, dass die Kombination von $[\bar{c}(1-\bar{c})/(d\bar{c}/d\xi)]$ einen nahezu konstanten Wert von 0,22 über \bar{c} ergibt. Mit einem Wert für die Reakti-

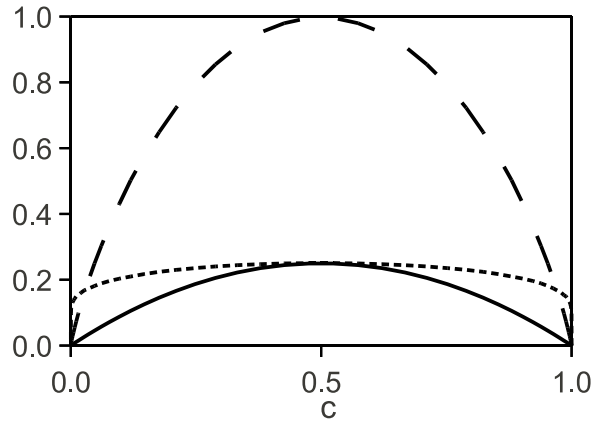


Abbildung 6.1: Auswertung von $\bar{c}(1-\bar{c})$ (durchgezogene Linie); $d\bar{c}/d\xi$ (gestrichelte Linie); $\bar{c}(1-\bar{c})/(d\bar{c}/d\xi)$ (gepunktete Linie)

onskonstante $C_R \approx 4,5$ in Gleichung (6.25) führt dies zu $[C_R \tilde{c}(1-\tilde{c})/\mathcal{F}(\tilde{c})] \approx 1$ und das Verbrennungsmodell kann als unabhängig von Reaktionskonstanten interpretiert werden. Für dieses vereinfachte, parameterfreie Modell wäre keine Korrekturfunktion wie in Gleichung (6.26) nötig, die besten Simulationsergebnisse im Vergleich mit experimentellen Daten ergeben sich allerdings mit Gleichung (6.26).

7 Formulierung eines Modells für hydrodynamische Instabilitäten

Da in der LES die Flamme i.d.R nicht aufgelöst und damit verbreitert abgebildet wird, werden potentielle LD-Instabilitäten unterdrückt. Selbst unter der Berücksichtigung unterschiedlicher Diffusivitäten für die Energie und die Spezies muss die lokale Flammenstruktur aufgelöst werden, um TD-Instabilitäten zu berücksichtigen. Zudem müsste ein Arrhenius Ansatz für die Schließung des Reaktionsquellterms verwendet werden. Damit können selbst die größten Längenskalen der Instabilitäten, die im Bereich der Flammenausdehnung liegen, nicht aufgelöst werden und LD- und TD-Instabilitäten müssen in der LES über Modelle berücksichtigt werden. Die Schlussfolgerungen der Analyse von LD- und TD-Instabilitäten in Kapitel 5.6.3 zeigen, dass Instabilitäten die turbulente Reaktionsrate beeinflussen, ein direkter experimenteller, quantitativ auswertbarer Nachweis aber nur für laminare Verbrennung vorliegt. Das Kapitel beschäftigt sich daher mit der Modellierung des Einflusses von LD- und TD-Instabilitäten auf die laminare Flammengeschwindigkeit. Das Modell von Bradley [15] in Gleichung (5.57) wird dabei als geeignetes Basismodell erachtet, um LD- und TD-Instabilitäten bei der Verbrennungssimulation im LES Kontext zu berücksichtigen. Allerdings kann Gleichung (5.57) nur für die CFD von kugelförmigen Flammen verwendet werden. Das Kapitel beschäftigt sich daher mit der Erweiterung des Modells auf beliebige Flammenformen unter Verwendung von Dispersionsrelationen für nominal planare Flammen. Die benötigte Dispersionsrelation wird zunächst validiert und eine entsprechende Formulierung von Gleichung (5.57) für ebene Flammen abgeleitet. Zudem wird ein Stabilitätskriterium unabhängig von der Flammenform definiert. Abschließend wird eine Implementierung für turbulente Flammen vorgeschlagen.

7.1 Validierung der Dispersionsrelation

Die in Lipatnikov und Chomiak [107] gegenübergestellten Dispersionsrelationen für global ebene Flammen zeigen z.T. deutlich voneinander abweichende Wachstumsraten von Störungen in Abhängigkeit der Wellenzahl. In dieser Arbeit wird die Dispersionsrelation von Matalon und Matowsky [111] verwendet, da diese in [107] die beste Übereinstimmung mit der allgemeinen Theorie von Class et al. [36] zeigt, womit das vorgeschlagene Modell nicht auf die Bereiche $\beta_{Zel}(Le - 1) = \mathcal{O}(1)$ sowie $\sigma\tau_c < 1$ limitiert wäre. Serby and Truffaut [142] validieren die Dispersionsrelation von Garcia und Clavin [37] anhand von Propan Flammen eines Flachbrenners sowie V-förmigen Propan Flammen. Um die Dispersionsrelation von Matalon et al. [111] zu validieren, werden ebenfalls die experimentellen Daten aus [142] für eine Propanflamme bei $\Phi = 1,05$ verwendet. Werte für die laminare Flammengeschwindigkeit und Flammendicke sind [142] entnommen. Die Gegenüberstellung der theoretischen Wachstumsrate mit experimentellen Daten von Searby et al. [142] zeigt Ab-

bildung 7.1. Im experimentell untersuchten Bereich überschätzt die Dispersionsrelation die

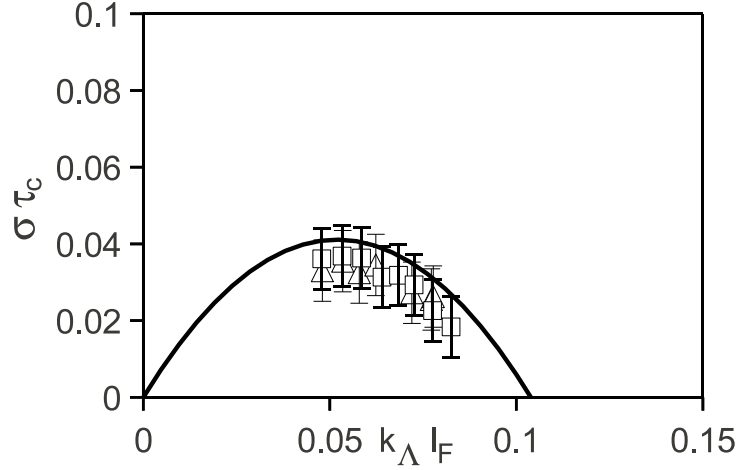


Abbildung 7.1: Gegenüberstellung der Dispersionsrelation, Gleichung (4.22), mit experimentellen Daten aus [142] für Propanflammen mit $\Phi = 1,05$

experimentell ermittelten Wachstumsraten von Störungen leicht, liegt jedoch stets im Bereich des Messfehlers. Die verwendete Dispersionsrelation, Gleichung (4.22), wird daher für frei propagierende Flammen als validiert betrachtet.

7.2 Modellierung der instabilen, laminaren Flammengeschwindigkeit

Folgt man Bradley [15] weisen durch LD- und TD-Instabilitäten gewinkelte Flammen fraktale Charakteristiken auf. Das Verhältnis der Flammengeschwindigkeit der durch Instabilitäten gefalteten Flammen zur ungestörten Flammengeschwindigkeit wird daher, wie in Bradley [15], über das Verhältnis der größten zur kleinsten instabilen Wellenlänge Λ_l bzw. Λ_s beschrieben:

$$\frac{s_{L,Inst}}{s_L^0} = \left(\frac{\Lambda_l}{\Lambda_s}\right)^{D-2} = \left(\frac{k_{\Lambda,s}}{k_{\Lambda,l}}\right)^{D-2} \quad (7.1)$$

Die fraktale Dimension für hydrodynamisch instabile Flammen muss geeignet modelliert werden. Bradley [15] schlägt einen konstanten Wert von $D = 7/3$ vor, der experimentell bei turbulenten Flammen beobachtet wird. Klimenko [86] untersucht theoretisch den Kaskadenprozess turbulenter Flammen und folgert für langsame, schwach gefaltete Flammen eine fraktale Dimension von $2,08\bar{3}$. Experimentelle Untersuchungen vorgemischter Flammen die gegen eine Stauplatte propagieren von Goix and Shepherd [59] ergeben für eine laminare Wasserstoffflamme mit $\Phi = 0,3$ eine fraktale Dimension von $2,06$. Kwon et al. [100] bestimmen einen Wertebereich von $2,2 \leq D \leq 2,25$ für expandierende laminare Kugel- flammen mit Propan und Wasserstoff als Brennstoff. Mangels allgemeiner Theorien oder

Korrelationen wird daher ein geeigneter Wert für D anhand von Simulationen mit den hier vorgeschlagenen Extremwerten $2,06 < D < 7/3$ in Kapitel 8.2 durchgeführt.

Zur geeigneten Modellierung von $k_{\Lambda,s}$ und $k_{\Lambda,l}$ kann das Kriterium $\sigma \geq 0$ der Dispersionsrelation in Abbildung 7.1 nicht verwendet werden, da damit der stabilisierende Einfluss von Streck- bzw. Deformationseffekten vernachlässigt wird. Unter der Annahme, dass Geschwindigkeitsgradienten tangential zur Flammenfront die Flamme glätten und Instabilitäten unterdrücken, schlagen Lipatnikov und Chomiak [107] vor den Einfluss von Deformationseffekten auf die Wachstumsrate von Störungen über ein einfaches phänomenologisches Modell zu beschreiben:

$$\frac{\partial \sigma_s}{\partial t} = (\sigma - C_s \kappa_s) \sigma_s \quad (7.2)$$

σ_s entspricht der Wachstumsrate von Störungen die durch Deformationseffekte beeinflusst werden. Hier wird zusätzlich noch eine Konstante C_s eingeführt, die den tatsächlichen Einfluss der Deformation auf die Wachstumsrate einer Störung der Wellenzahl k_Λ beinhaltet. Gleichung (7.2) beschreibt damit das Auftreten von Instabilitäten mit einer Wellenzahl k_Λ , wenn die zugehörige Wachstumsrate $\sigma(k_\Lambda)$ die korrigierte Deformationsrate $C_s \kappa_s$ überwiegt. $k_{\Lambda,s}$ und $k_{\Lambda,l}$ können aus einer Dispersionsrelation errechnet werden für $C_s \kappa_s = \sigma(k_{\Lambda,s})$ sowie $C_s \kappa_s = \sigma(k_{\Lambda,l})$, was im Allgemeinen zu einer Nullstellensuche der Dispersionsrelation führt. Die hier verwendete Dispersionsrelation, Gleichung (4.22), ist ein quadratisches Polynom und lässt sich einfach invertieren. $k_{\Lambda,s}$ und $k_{\Lambda,l}$ errechnen sich damit zu:

$$\begin{aligned} k_{\Lambda,s} &= \frac{s_L^0 \Psi_{LD} + \left[(s_L^0 \Psi_{LD})^2 - 4\alpha_{k,u} \Psi \sigma_s \right]^{0,5}}{2\alpha_{k,u} \Psi} \\ k_{\Lambda,l} &= \frac{s_L^0 \Psi_{LD} - \left[(s_L^0 \Psi_{LD})^2 - 4\alpha_{k,u} \Psi \sigma_s \right]^{0,5}}{2\alpha_{k,u} \Psi} \end{aligned} \quad (7.3)$$

$$\text{mit } \max \left(\left[(s_L^0 \Psi_{LD})^2 - 4\alpha_{k,u} \Psi \sigma_s \right], 0 \right)$$

Die durch die Deformationsrate beeinflusste Wachstumsrate σ_s wird beschrieben durch:

$$\sigma_s = C_s \kappa_s \quad (7.4)$$

In der Modellierung treten Instabilitäten zum ersten Mal auf, wenn die maximale Wachstumsrate von Störungen aus der Dispersionsrelation $\sigma_{max,th}$ einer kritischen Deformationsrate $\kappa_{s,cl}$ entspricht. Die Konstante C_s definiert sich damit über:

$$C_s = \frac{\sigma_{max,th}}{\kappa_{s,cl}} \quad (7.5)$$

Neben dem zu modellierenden stabilisierenden Einfluss von Deformationseffekten muss berücksichtigt werden, dass Dispersionsrelationen für ebene Flammen maximale Wellenlängen von Störungen vorhersagen können, welche die Flammenlänge überschreiten. Im

Rahmen turbulenter Verbrennungsmodellierung im RANS Kontext wird in Kuznetsov [99] daher eine charakteristische Brennergeometrie eingeführt, um die maximale Wellenlänge zu limitieren. Bychkov [28] führt eine obere Schranke für die Wellenlänge ein und verwendet als Größenordnung die integrale Wellenlänge turbulenter Flammen. Bradley et al. [17] verwenden ebenfalls für schwach turbulente Flamme das integrale Längenmaß als maximale instabile Wellenlänge. Hier wird argumentiert, dass die größte auftretende Wellenlänge mit der Flammenausdehnung korreliert. In der Implementierung wird daher die maximal mögliche Wellenlänge $\Lambda_{l,max}$ über den größten Abstand zweier Punkte der Flammenfront approximiert und Λ_l schreibt sich zu¹:

$$\Lambda_l = \frac{2\pi}{k_{\Lambda,l}} = \min(\Lambda_l, \Lambda_{l,FlamDist}) \quad (7.6)$$

Abbildung 7.2 zeigt schematisch das Modellierungsprinzip zur Beschreibung der charakteristischen Längenmaße in Gleichung (7.1) und (7.6). Ausgewertet ist dabei die validierte

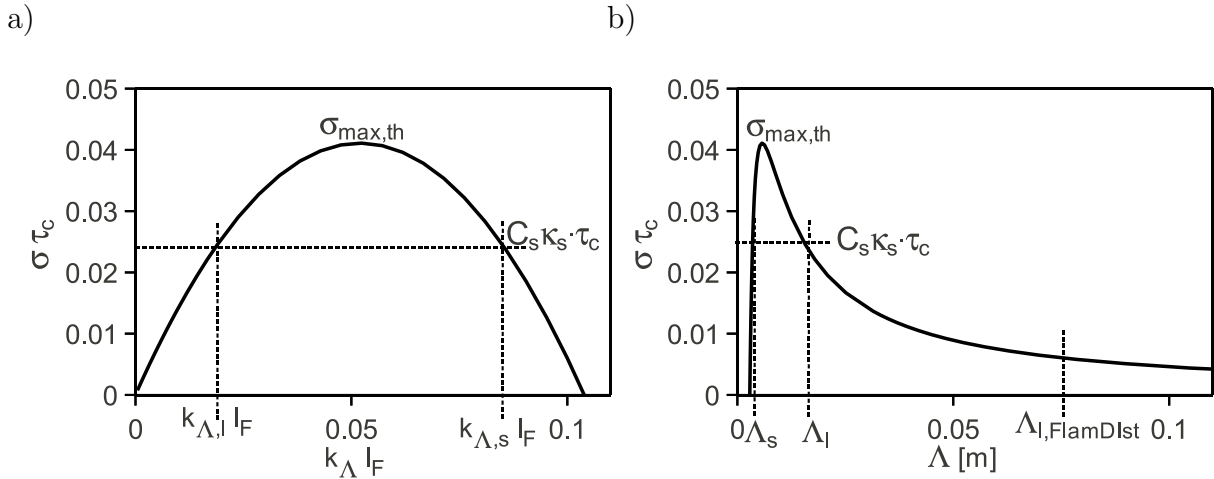


Abbildung 7.2: Modellierungsprinzip zur Berücksichtigung von Deformationseffekten auf die Wachstumsrate von Störungen; a) Dispersionsrelation aus Gleichung (4.22) über der Wellenzahl; b) Dispersionsrelation aus Gleichung (4.22) über der Wellenlänge

Dispersionsrelation von Matalon und Matowsky [111]. Bradley [15] beschreibt anhand der Theorie von Bechtold und Matalon [11], dass bei expandierenden Flammen das Längenmaß der kleinsten instabilen Strukturen bei der Expansion konstant bleibt und nur die großen instabilen Längenmaße weiter zunehmen. Abbildung 7.2b) zeigt, dass dies durch die verwendete Dispersionsrelation zumindest qualitativ gut wiedergegeben wird.

Wertet man Gleichung (7.1) in der CFD aus, liegt bei erstem Auftreten von Instabilitäten die ungestörte laminare Flammengeschwindigkeit vor. Wie experimentelle Daten in Gu et al. [68] zeigen, ist bei Gemischen mit negativer Markstein Zahl direkt vor dem Einsetzen von Instabilitäten die durch Streckung beeinflusste laminare Flammengeschwindigkeit

¹Für die Verwendung des Modells bei turbulenten Flammen sollte das integrale Längenmaß verwendet werden.

7.3 Modellierung kritischer Deformationsraten

größer als s_L^0 . Gleichung (7.1) würde damit beim ersten Auftreten von Instabilitäten eine Verringerung der Ausbreitungsgeschwindigkeit vorhersagen und wird daher wie folgt korrigiert:

$$s_{L,Inst} = \max \left(s_L^0 \left(\frac{k_{\Lambda,s}}{k_{\Lambda,l}} \right)^{D-2}, s_L \right) \quad (7.7)$$

7.3 Modellierung kritischer Deformationsraten

Kritische Deformationsraten $\kappa_{s,cl}$ unterhalb denen Instabilitäten auftreten, kann man aus der Auswertung der experimentellen Daten von Gu et al. [68] in Abhängigkeit der Markstein Zahl für die Deformationsrate bestimmen. Normiert man die Deformationsrate mit der ungestörten laminaren Flammgeschwindigkeit und der Flammendicke, lässt sich ein Karlovitz Faktor Ka_s für die Deformationsrate definieren.

$$Ka_s = \kappa_s \frac{l_F}{s_L^0} \quad (7.8)$$

Abbildung 7.3 zeigt die experimentellen Daten des kritischen Karlovitz Faktors $Ka_{s,cl}$ für die Deformationsrate über der Markstein Zahl für die Deformationsrate Ma_s sowie Ma_{sr}^2 . Die in dieser Arbeit durchgeführte Berechnung von $Ka_{s,cl}$ aus den experimentellen Daten von Gu et al. [68] ist im Anhang A.4 zusammengefasst. Wie in Kapitel 4.1.3 beschrieben,

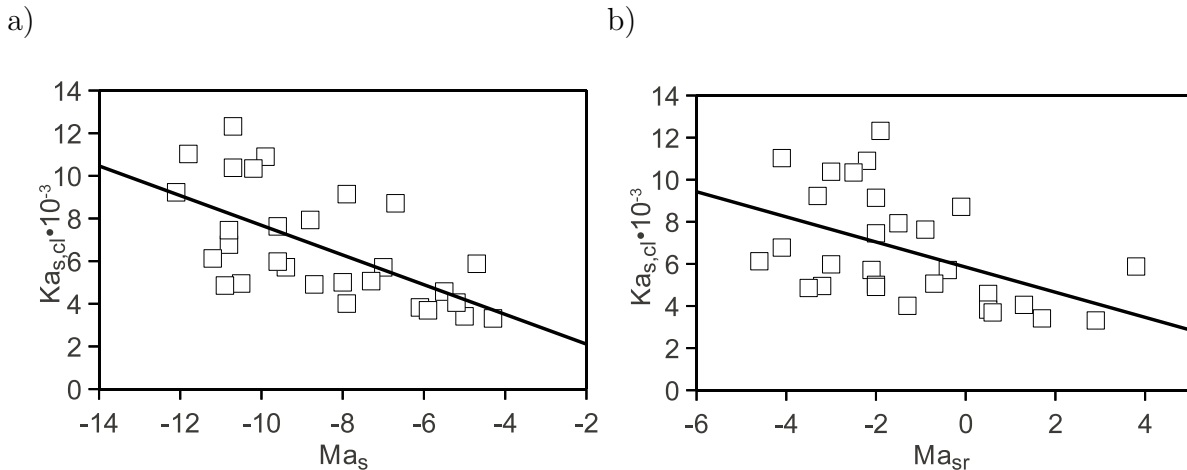


Abbildung 7.3: Auswertung des kritischen Karlovitz Faktors für die Deformationsrate; a) über Ma_s ; b) über Ma_{sr} ; Linie: lineare Regression der Daten

tendieren Flammen mit kleiner Markstein Zahl eher dazu instabil zu werden. Dementsprechend zeigt auch Abbildung 7.3, dass mit abnehmender Markstein Zahl Flammen bereits

² Ma_{sr} bezeichnet die Markstein Zahl zur Auswertung der laminaren Brennrate der gestreckten Flamme.

bei höheren Deformationsraten instabil werden. Eine Auswertung der Daten in Abbildung 7.3 über eine lineare Regression ergibt

$$Ka_{s,cl} = -6.964 \cdot 10^{-4} Ma_s + 7.1685 \cdot 10^{-4} \quad (7.9)$$

bzw.

$$Ka_{s,cl} = -5.9677 \cdot 10^{-4} Ma_{sr} + 5.8486 \cdot 10^{-3} \quad (7.10)$$

7.4 Berücksichtigung von Landau-Darrieus Instabilitäten in turbulenter Verbrennung

Die in dieser Arbeit verwendete Flammenoberflächendichte Formulierung erfordert die Modellierung der laminaren Brenngeschwindigkeit. Generell wird, wie in Kapitel 5.4 beschrieben, nur der stabilisierende Einfluss von Streckeffekten auf die laminare Flammgeschwindigkeit berücksichtigt. Gleichung (7.7) kann verwendet werden, um auch bei turbulenter Verbrennung den Einfluss von LD- und TD-Effekten auf die laminare Flammgeschwindigkeit zu berücksichtigen. Unter der Annahme, dass Geschwindigkeitsgradienten auf der Flammenoberfläche hydrodynamische Instabilitäten unterdrücken [107], kann auch bei turbulenter Verbrennung die Deformationsrate κ_s auf der Flammenoberfläche als Kriterium für das Einsetzen von Instabilitäten verwendet werden. Entgegen gängiger Kriterien, die den Einfluss von Instabilitäten über u'/s_L^0 klassifizieren, kann die Deformationsrate in der LES auch instantan über die aufgelöste $\kappa_{s,mean}$ und zu modellierende Deformationsrate $\kappa_{s,\Delta}$, vgl. Gleichung (5.37), berechnet werden. Wertet man allerdings die Deformationsrate lokal auf der Flammenoberfläche aus, können unphysikalische Flammen vorhergesagt werden, bei denen instabile und stabile Bereiche nebeneinander liegen. Wellenlängen von Instabilitäten die im Bereich der Flammenlänge liegen, wären damit schwer zu interpretieren. Es wird hier daher vorgeschlagen, κ_s nicht lokal auszuwerten, sondern als Oberflächen gemittelter Wert auf der Flammenfront, definiert als $\tilde{c} = 0,5$. Die Berechnung von σ_s für Gleichung (7.4) wird bei turbulenten Flammen ersetzt durch:

$$\langle \sigma_s \rangle_A = C_s \langle \kappa_s \rangle_A \quad (7.11)$$

Um $\langle \kappa_s \rangle_A$ in der Simulation auszuwerten, wird für jeden Zeitschritt zunächst die Flammenfront bestimmt, die hier über $\tilde{c} = 0,5$ definiert ist. In einem zweiten Schritt kann die Deformationsrate über alle Zellen mit $\tilde{c} = 0,5$ gemittelt werden. Die im FSD Kontext zu modellierende Kombination von gefilterter, molekularer Diffusion und gefilterter Reaktionsrate schreibt sich damit zu:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\overline{\rho \alpha \frac{\partial c}{\partial x_i}} \right) + \overline{\dot{\omega}_c} \approx \rho_u s_L \Sigma = \rho_u \max \left(s_L^0 \left(\frac{k_{\Lambda,s}}{k_{\Lambda,l}} \right)^{D-2}, s_L \right) \Sigma \quad (7.12)$$

8 Ergebnisse und Diskussion

Das vorliegende Kapitel umfasst die Validierung und Evaluation der in Kapitel 6 und 7 vorgestellten Modelle zur turbulenten Verbrennungsmodellierung und Berücksichtigung des kombinierten Einflusses von LD- und TD-Effekten auf die laminare Flammgeschwindigkeit. Die Modelle werden in den “open source” CFD-Löser OpenFOAM®-1.6 implementiert. Prinzipielle Eigenschaften des turbulenten Verbrennungsmodells, in Kombination mit der verwendeten Numerik für Bereiche turbulenter und laminarer Verbrennung, werden in Abschnitt 8.1 anhand einer 1-D Flamme untersucht, bei der die gesamte Turbulenz und Flammenfaltung im Feinstrukturbereich liegt. Zur Untersuchung der Modelle die LD- und TD-Instabilitäten berücksichtigen, werden in Abschnitt 8.2 die Simulationsergebnisse kugelförmiger, expandierender Flammen experimentellen Daten gegenübergestellt. Eine Evaluierung und Validierung des turbulenten Verbrennungsmodells für Betriebspunkte otomotorischer Verbrennung wird in Abschnitt 8.3 anhand einer turbulenten Hochdruck Bunsenbrennerflamme durchgeführt. Eine entsprechende Validierung für Betriebspunkte typisch für die Verbrennung in stationären Gasturbinen zeigt Kapitel 8.4 für eine Hochdruck Jet Flamme. Die Simulation eines nichtadiabaten Drallbrenners in Kapitel 8.5 evaluiert das Verbrennungsmodell sowie die FWI Modelle aus Kapitel 5.5.2 für technisch relevante Anwendungen.

8.1 Simulation einer 1-D Konfiguration

Um das prinzipielle Verhalten des in Abschnitt 6 formulierten Modells sowie die verwendete Kombination von Modell und Numerik zu untersuchen, werden Simulationen von 1-D Konfigurationen durchgeführt. Die gesamte turbulente kinetische Energie befindet sich dabei im Feinstrukturbereich. Anhand einer stationären Gegenstromflamme wird die turbulente Flammgeschwindigkeit ausgewertet. Zudem wird die Modellvorhersage anhand einer durch einen Kanal propagierenden Flamme untersucht. Um nur das in Kapitel 6 formulierte Modell zu untersuchen, wird s_L durch s_L^0 approximiert. Zudem wird turbulente Diffusion vernachlässigt. Die Filterweite Δ in Gleichung (6.26) wird als integrales Längenmaß interpretiert und zu $0,5mm$ angenommen.

8.1.1 Numerische Diskretisierung

Der konvektive Transport in der Impulserhaltung wird mit einem linearen Schema zweiter Ordnung diskretisiert. Der konvektive Transport der Fortschrittsvariablen sowie der Enthalpie wird mit einem linearen Verfahren zweiter Ordnung mit Flusslimitierung, bezeichnet als “limitedLinear” [78], diskretisiert, um potentielle Oszillationen aufgrund großer Gradienten an der Flammenfront zu vermeiden. Die Laplace Terme in den Erhaltungsgleichungen werden über ein lineares Verfahren zweiter Ordnung diskretisiert. Ein implizites

Zwei-Punktverfahren wird für die Zeitintegration gewählt. Um eine numerische Stabilität und Genauigkeit zu gewährleisten, wird die maximale Courant Zahl zu $Co \approx 0,3$ gewählt. Die Reaktionsrate geht explizit als Quellterm ein. Die Filterweite entspricht der Zellgröße.

8.1.2 Simulation einer stationären Flamme

Für die Simulation einer stationären Flamme wird diese in der Mitte des 1D Kanals der Länge $0,5m$ initialisiert. Das Geschwindigkeitsfeld sowie die Temperatur und die Fortschrittsvariable werden entsprechend der Initialisierung der Kugelflammen in Abschnitt 8.2.2 berechnet über:

$$\tilde{c} \sim \begin{cases} (1 - 1/\beta_{Zel}) e^{x/l_F} & \text{für } x < 0 \\ 1 - 1/\beta_{Zel} e^{(1-\beta_{Zel})x/l_F} & \text{für } x > 0 \end{cases} \quad (8.1)$$

dabei wird die Position $x = 0,25m$ als Ort der kritischen, reduzierten Temperatur $\tilde{c}_{cl} = 1 - 1/\beta_{Zel}$ vorgegeben. Die turbulente Flammendicke zu Beginn der Simulation wird über die laminare Flammendicke l_F angenähert, die künstlich vergrößert wird, um Startlösungen zwischen $l_{F,init} = 0,1\Delta$ und $l_{F,init} = 20\Delta$ zu generieren und damit die Abhängigkeit von s_t von der Startlösung zu überprüfen. Abbildung 8.1 zeigt einen Ausschnitt des Rechengebiets mit zwei unterschiedlich breit initialisierten Flammen. Die Temperatur wird über $\tilde{T}(x) =$

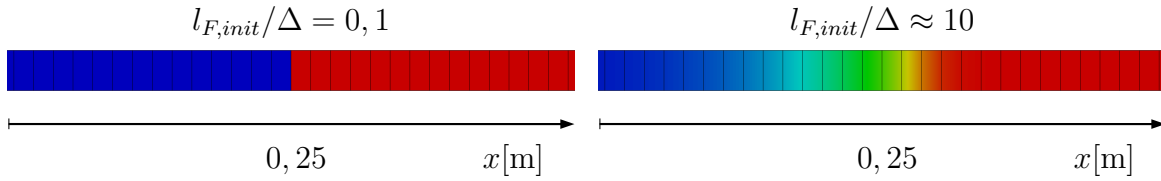


Abbildung 8.1: Initialisierung des Rechengebiets einer 1D Flamme

$\tilde{c}(T_b - T_u) + T_u$ und das Geschwindigkeitsfeld der Startlösung über:

$$\tilde{u}(x) = s_t + s_t(\tilde{T}/T_u - 1) \quad (8.2)$$

berechnet. Die turbulente Flammengeschwindigkeit wird für jeden Zeitschritt über:

$$s_t = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} \overline{\tilde{\omega}_c} dx}{\rho_u} \quad (8.3)$$

ausgewertet. Theoretisch ist die Berechnung von s_t über Gleichung (8.3) nur gültig, wenn die Geschwindigkeit der Reaktanten am Einlass des Rechengebiets der turbulenten Flammengeschwindigkeit entspricht. Zwar zeigen die Simulationen, dass s_t über Gleichung (8.3) ausgewertet, wenig sensitiv gegenüber der Einlassgeschwindigkeit ist, dennoch wird für jeden gerechneten Betriebspunkt eine Simulation mit beliebigen $\tilde{u}_{x,in}$ durchgeführt und in einer zweiten Simulation die berechnete s_t als Geschwindigkeit am Einlass vorgegeben. Ähnlich der in Abschnitt 8.3 simulierten Kobayashi Datenbank, werden Umgebungsdrücke zwischen $1bar$ und $20bar$ sowie Turbulenzgrade zwischen $0 \leq u'/s_L^0 \leq 20$ vorgegeben.

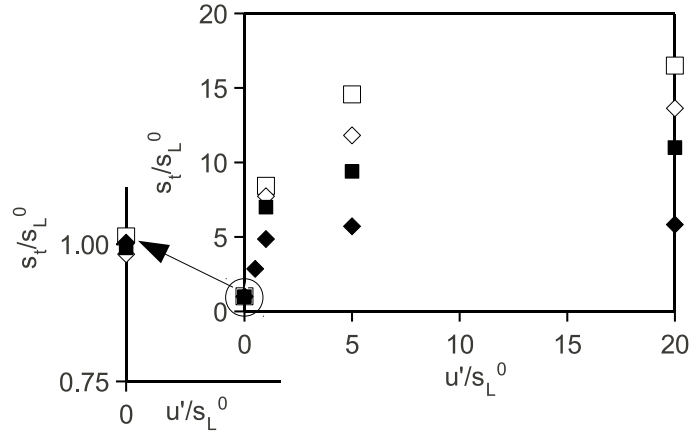


Abbildung 8.2: Evaluierung der Vorhersage der turbulenten Flammengeschwindigkeit durch das neue Modell über eine 1D Simulation einer stationären Flamme; 1bar (schwarze Rauten); 5bar (schwarze Vierecke); 10bar (weiße Rauten); 20bar (weiße Vierecke)

Die Simulationszeit beträgt $0,5s$. Abbildung 8.2 zeigt die Auswertung der simulierten turbulenten Flammengeschwindigkeiten. Wie dargelegt in Kapitel 4.2.1 bzw. gefordert von Poinot und Veynante [134], beschreibt das Modell eine Zunahme von s_t/s_L^0 mit zunehmender Turbulenz. Aufgrund der physikalisch basierten Limitierung von ϵ_i und D kann das Verbrennungsmodell auch den bei hoher Turbulenz auftretenden ebenen Verlauf von s_t , das sogenannte “Bending” wiedergeben. Das Verbrennungsmodell sagt zudem die laminare Flammengeschwindigkeit für den Bereich $u'_\Delta \rightarrow 0$ voraus.

Die Unabhängigkeit der Langzeitlösung von der Startlösung wird überprüft durch eine unterschiedliche Initialisierung der Flammendicke $l_{F,init}$ im Rechengebiet mit $0,1 \leq l_{F,init}/\Delta \leq 10$ (wobei Δ konstant gehalten wird), vgl. Abbildung 8.1. Der untersuchte Betriebspunkt ist charakterisiert durch $1bar$ und $u'/s_L^0 = 0,5$ für den das Verbrennungsmodell einen Wert von $s_t/s_L^0 = 2,85$ vorhersagt. Die Auswertung in Abbildung 8.3 zeigt den Verlauf von s_t/s_L^0 über der mit dem chemischen Zeitmaß τ_c entdimensionierten Zeit. Alle simulierten turbulenten Flammengeschwindigkeiten überschätzen die Langzeitlösung innerhalb der ersten Zeitschritte, konvergieren aber innerhalb des chemischen Zeitmaßes gegen die Langzeitlösung. Der Fall mit $l_{F,init}/\Delta = 0,1$ berechnet ein zweites Überschwingen, konvergiert aber ebenfalls innerhalb des chemischen Zeitmaßes.

8.1.3 Simulation einer propagierenden Flamme

Die durch einen Kanal propagierende 1D Flamme wird an der Position $x = 0m$ initialisiert und propagiert in das unverbrannte Gemisch in x -Richtung. Abbildung 8.4 zeigt die Ausbreitung der Flamme durch den Kanal für die Initialisierung bis zum Zeitpunkt $t = 0,02s$. Zu Beginn ist die Flammenausbreitung durch die Beschleunigung der Flamme, bedingt durch die Randbedingungen und die Initialisierung, geprägt. Ab dem Zeitpunkt $t = 0,01s$ stellt sich eine Flammenausbreitung mit konstanter Geschwindigkeit ein. Die Auflösung der Flamme durch ca. 6 Zellen ist konstant während des Propagierens. Für drei

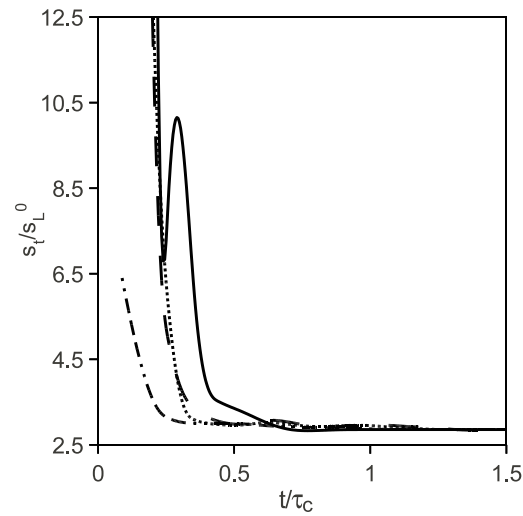


Abbildung 8.3: Untersuchung der Konvergenzrate der turbulenten Flammengeschwindigkeit bei unterschiedlicher Initialisierung der Flammendicke im Rechengebiet; $l_{F,init}/\Delta = 0$, 1 (durchgezogene Linie); $l_{F,init}/\Delta = 1$ (gestrichelte Linie); $l_{F,init}/\Delta = 5$ (gepunktete Linie); $l_{F,init}/\Delta = 10$ (gestrichelt gepunktete Linie)

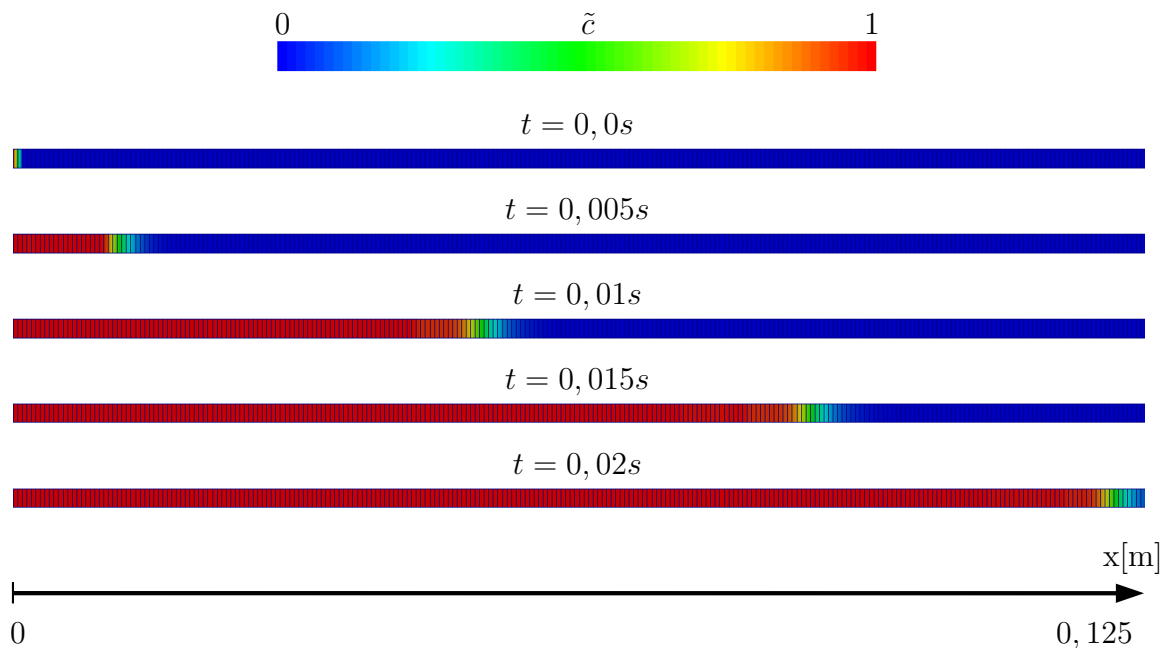


Abbildung 8.4: Propagation der Flamme im 1D Rechengebiet

weitere Zeitpunkte sowie für eine laminare Flamme zeigt Abbildung 8.5 den Verlauf der Flammenfront. Die Flamme mit $u'/s_L^0 = 0,5$, für die das Verbrennungsmodell einen Wert von $s_t/s_L^0 = 2,85$ vorhersagt, vgl. Abbildung 8.2, propagiert dabei in etwa $1/3$ der Zeit

8.1 Simulation einer 1-D Konfiguration

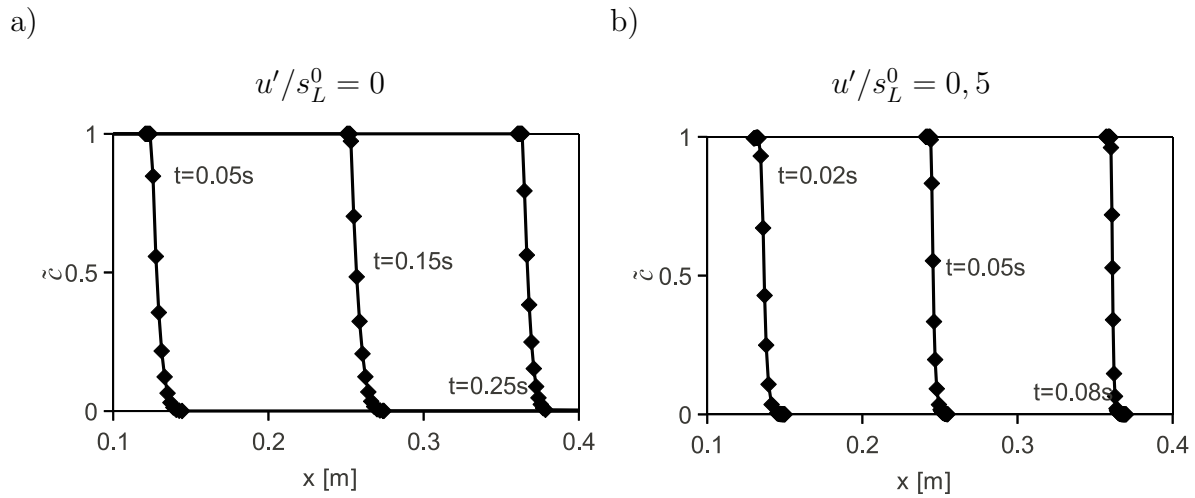


Abbildung 8.5: 1-D Simulation der Flammenausbreitung in einem Kanal: Verlauf von \tilde{c} über dem Ort; a) $u'/s_L^0 = 0$; b) $u'/s_L^0 = 0,5$; Symbole kennzeichnen die Zellmittelpunkte

der laminaren Flamme durch das Rechengebiet. Unabhängig vom Turbulenzgrad ist die numerisch berechnete Dicke der Flammen in etwa gleich bei ca. 6 Zellen.

8.2 Evaluierung des Modells für hydrodynamische Instabilitäten

Laminare, expandierende Flammen werden untersucht, um das in Kapitel 7 formulierte Modell zur Berücksichtigung von LD- und TD-Effekten auf die laminare Flammengeschwindigkeit zu validieren. Zusätzlich wird das Modell von Bradley [15], das in Kapitel 4.1.3 zusammengefasst ist, validiert. Der Reaktionsquellterm wird beschrieben über $\bar{\omega}_c = \rho_u s_{L,Inst} |\nabla \tilde{c}|$, da in diesem Abschnitt nur laminare Flammen simuliert werden.

8.2.1 Beschreibung des Experiments

Gu et al. [68] untersuchen die Ausbreitung laminarer, kugelförmiger Methan-Luft Flammen in einer Verbrennungsbombe. Der experimentelle Aufbau wird bereits in Bradley et al. [18] zur Untersuchung vorgemischter Iso-Oktan- und Iso-Oktan-n-Heptan-Luftgemische verwendet. Die Verbrennungsbombe hat einen Durchmesser von 380mm . Fenster mit einem Durchmesser von 150mm erlauben einen optischen Zugang. Gu et al. [68] verwenden ein Methan-Luftgemisch mit einem Brennstoff-Luftverhältnis von $0,6 \leq \Phi \leq 1,2$. Die Temperatur der Reaktanten vor der Zündung wird zu $300\text{K} \leq T_u \leq 400\text{K}$ eingestellt. Der Druck vor der Zündung beträgt 1bar , 5bar und 10bar . Die Kugelflammen werden bis zu einer Ausdehnung mit einem Radius von 60mm vermessen. Aufgrund des Volumens der Verbrennungsbombe kann für die untersuchten Flammenradien der Druck als konstant betrachtet werden. Hochgeschwindigkeitskameras mit 6000 Bilder pro Sekunde vermessen die Ausbreitung der Flamme. Anhand der Schlierenbilder wird die Ausbreitungsgeschwindigkeit der Flamme S_n ausgewertet, die sich definiert durch:

$$S_n = \frac{dr_u}{dt} \quad (8.4)$$

Der Flammenradius r_u entspricht dem Bereich, bei dem die Temperatur 5K oberhalb des unverbrannten Gemischs liegt. Verwendet man die Definition der Streckung in Gleichung (4.12), lässt sich die Streckrate der Flammenfront bestimmen durch:

$$\kappa = \frac{1}{A} \frac{dA}{dt} = \frac{2}{r_u} S_n \quad (8.5)$$

Anhand der Ausbreitungsgeschwindigkeit werten Gu et al. [68] im stabilen Bereich die laminare Flammengeschwindigkeit und die Markstein Länge aus. Zudem werden kritische Peclet Zahlen bestimmt, bei denen die Flamme beginnt zelluläre Strukturen auszubilden. Um die experimentellen Ergebnisse mit numerischen Daten zu vergleichen, simulieren Gu et al. [68] sphärische, expandierende Flammen unter Verwendung eines reduzierten 4-Schritt Mechanismus von Mauss und Peters [113], basierend auf 40 Elementarreaktionen.

8.2.2 Modellierung und Simulation

Rechengebiet

Die Verbrennungsbombe wird als Box mit einer Kantenlänge von 65mm abgebildet. Damit ist der simulierte Ausschnitt der Verbrennungsbombe etwas größer als der experimentell untersuchte Bereich. Das Rechengebiet ist äquidistant mit 160^3 Hexaedern diskretisiert. Die Zellweite beträgt $\Delta \approx 0,4\text{mm}$.

Randbedingungen

Für alle Variablen werden von Neumann Randbedingungen vorgegeben. Die verwendete Diskretisierung ist in Kapitel 8.1.1 beschrieben.

Initialisierung

Im Experiment wird die Flammenausbreitung unterhalb eines Radius von $r_u < 6\text{mm}$ von Zündungseffekten beeinflusst [68], so dass Gu et al. [68] die experimentellen Daten erst oberhalb $r_u \approx 6\text{mm}$ auswerten. In der Simulation wird daher das Rechengebiet mit einer kugelförmigen Flamme mit $r_u \approx 6\text{mm}$ initialisiert. Die Felder für die Geschwindigkeit, Temperatur und Fortschrittsvariable zur Zeit $t = 0\text{s}$ werden entsprechend dem Vorschlag von Poinot und Veynante [134] für 1-D Flammen, die auf dem analytischen EF Modell von Echehki und Ferziger [51] basieren, berechnet. Der Initialisierungsansatz wird hier für dreidimensionale, kugelförmige Flammen erweitert. Da die Zellweite i.d.R. größer als die laminare Flammendicke ist, wird zusätzlich für die Initialisierung ein künstlicher Aufdickungsfaktor F_F eingeführt, um die Flamme über ca. 5 Zellen aufzulösen. Aufbauend auf der eindimensionalen Beschreibung von Echehki und Ferziger [51] wird die Reaktionsfortschrittsvariable in der Verbrennungsbombe initialisiert über:

$$\tilde{c} \sim \begin{cases} (1 - 1/\beta_{Zel}) e^{(r-r_u)/(F_F l_F)} & \text{für } r - r_u < 0 \\ 1 - 1/\beta_{Zel} e^{(1-\beta_{Zel})(r-r_u)/(F_F l_F)} & \text{für } r - r_u > 0 \end{cases} \quad (8.6)$$

$r - r_u = 0$ entspricht dem Ort der sogenannten reduzierten kritischen Temperatur, die definiert ist durch $c_{cl} = 1 - 1/\beta_{Zel}$. Entsprechend der Definition der Fortschrittsvariablen bei adiabater Verbrennung wird die Temperaturverteilung berechnet über:

$$T(\tilde{c}) = \tilde{c}(T_b - T_u) + T_u \quad (8.7)$$

Poinot und Veynante [134] zu Folge errechnet sich der Betrag der Strömungsgeschwindigkeit im unverbrannten Gas zu:

$$|u_i(r)| = \left(\frac{r_u}{r}\right)^2 \left(1 - \frac{T_u}{T_b}\right) \frac{dr_u}{dt} \Big|_{t=0\text{s}} \quad \text{für } \tilde{c} > 0,99 \quad (8.8)$$

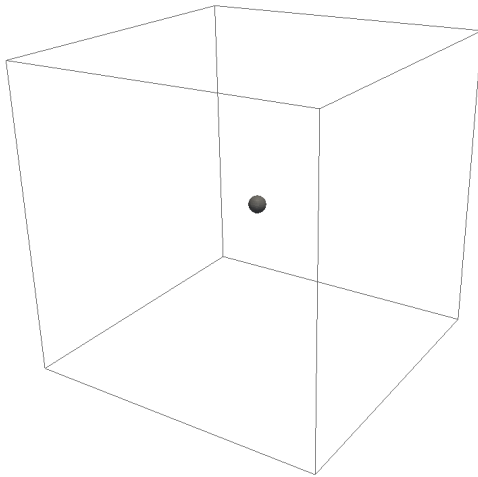
wobei die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit bei $\frac{dr_u}{dt} \Big|_{t=0\text{s}}$ den experimentellen Daten in [68] entnommen werden kann. Für die Geschwindigkeitsverteilung in der Flamme, wird

ein linearer Zusammenhang von Strömungsgeschwindigkeit und Reaktionsfortschritt angenommen:

$$|u_i(\tilde{c})| = \left(1 - \frac{T_u}{T_b}\right) \frac{dr_u}{dt} \Big|_{t=0_s} \tilde{c} \quad \text{für } 0 \leq \tilde{c} \leq 0,99 \quad (8.9)$$

Anhand von Azimut- und Polarwinkel werden die Komponenten des Geschwindigkeitsvektorfelds errechnet. Abbildung 8.6a) zeigt das Rechengebiet mit der initialisierten Kugelflamme. Abbildung 8.6b) zeigt den Verlauf der initialisierten Geschwindigkeit und der Fortschrittsvariablen über dem Radius.

a)



b)

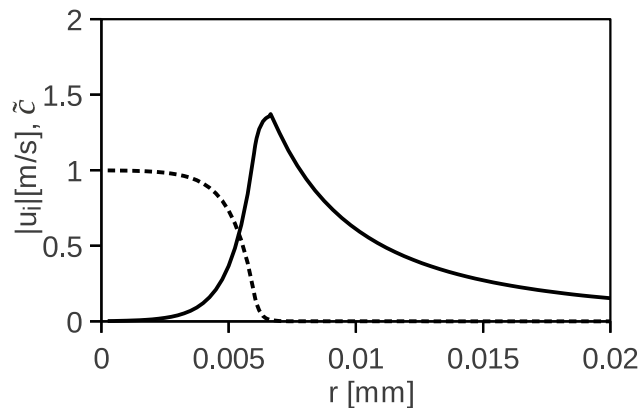


Abbildung 8.6: a) Rechengebiet mit initialisierter Kugelflamme; b) radialer Verlauf der initialisierten Geschwindigkeit (Linie) und Fortschrittsvariablen (gestrichelte Linie)

Spezifische Modellierungen

Motivation der Simulationen ist die Evaluierung des in Kapitel 7 vorgestellten Modells zur Berücksichtigung von TD- und LD-Instabilitäten in der CFD-Simulation. Nach der Zündung wird die Flammenausbreitung zunächst durch große Streckeffekte dominiert, die einen linearen Zusammenhang von Ausbreitungsgeschwindigkeit und Streckung zur Folge haben. Um in der Simulation den Instabilitätsbereich geeignet mit dem Experiment vergleichen zu können, muss auch der stabile, lineare Bereich gut mit dem Experiment übereinstimmen. Dies gelingt nur über eine an das Experiment angelehnte Modellierung des stabilen Bereichs. Gu et al. [68] verwenden eine separierte Betrachtung von Krümmungs- und Deformationseffekten. Streckeffekte auf die laminare Flammengeschwindigkeit werden daher über die lineare Theorie, Gleichung (4.15), modelliert. Zudem muss die Berechnung der Streckrate in der Simulation möglichst gut mit der experimentellen Auswertung übereinstimmen. Wie in Kapitel 4.1.2 dargestellt, können Krümmungseffekte entsprechend

8.2 Evaluierung des Modells für hydrodynamische Instabilitäten

Gleichung (4.13) über $\kappa_c = s_d \frac{\partial n_i}{\partial x_i}$ lokal an der Flammenfront berechnet werden. Der Ausdruck reduziert sich für kugelförmige Flammen zu [134]:

$$\kappa_{c,sp} = 2 \frac{s_d}{r_u} \quad (8.10)$$

und wird zur Auswertung der globalen Krümmung der Flamme im Experiment [68] verwendet. In der Simulation, wie im Experiment, liegen allerdings keine exakt kugelförmigen Flammen vor und die lokal berechnete Krümmung weicht von der globalen Kugelkrümmung, die im Experiment bestimmt wird, ab. In der Simulation wird daher Gleichung (8.10) verwendet, um die Krümmung abzuschätzen. s_d wird über s_L approximiert. Abbildung 8.7a) stellt die Auswertung der globalen Krümmung über Gleichung (8.10) der lokalen Krümmung über $\kappa_c = s_d \frac{\partial n_i}{\partial x_i}$ einer kugelförmigen Flamme mit $r_u = 20mm$ gegenüber und zeigt, dass für die ausgewertete Position, die lokale Krümmung die globale, bei r_u ausgewertete Krümmung, um ca. 50% überschätzt.

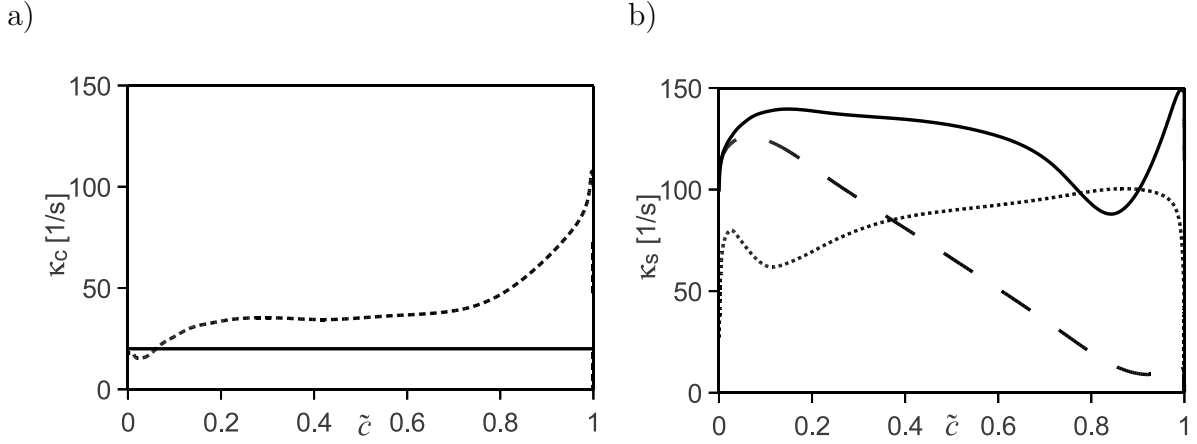


Abbildung 8.7: Auswertung von Krümmung und Deformation der Flammenfront bei $r_u = 20mm$; a) Verlauf der Krümmung über der Fortschrittsvariablen, $\kappa_{c,sp}$ (durchgezogene Linie), κ_c (gepunktete Linie); b) Verlauf der Deformation über der Fortschrittsvariablen, $\kappa_{s,sp,kor}$ (durchgezogene Linie), $\kappa_{s,sp}$ (gestrichelte Linie), κ_s (gepunktete Linie)

Deformationseffekte können in der CFD entsprechend Gleichung (4.13) über $\kappa_s = (\delta_{ij} - n_{ij}) \frac{\partial u_i}{\partial x_j}$ berechnet werden, wobei sich der Ausdruck für kugelförmige Flammen reduziert zu [134]:

$$\kappa_{s,sp} = \frac{2}{r_u} |u_i|_{r_u} \quad (8.11)$$

$|u_i|_{r_u}$ beschreibt den Betrag der Geschwindigkeit der Reaktanten an der Flammenoberfläche. Gleichung (8.11) wird im Experiment [68] verwendet, um die Deformationseffekte auszuwerten. In der CFD kann Gleichung (8.11) nur lokal ausgewertet werden. Die Deformationsrate würde nur bei $\tilde{z} \approx 0,1$ die tatsächliche Deformationsrate vorhersagen und

linear mit dem Reaktionsfortschritt abnehmen, vgl. Abbildung 8.7b). Wertet man die Deformationsrate κ_s lokal aus, wird aufgrund numerischer Unsicherheiten sowie der aufgedickten Flamme die Deformationsrate um ca. 30% unterschätzt. Um in Hinblick auf die Evaluierung der Modelle für den Instabilitätsbereich eine gute Übereinstimmung der Flammenausbreitungsgeschwindigkeit beim Übergang stabiler, instabiler Bereich zu erreichen, wird in der CFD die Deformationsrate berechnet über:

$$\kappa_{s,sp,kor} = \frac{2}{r_u} |u_i| \frac{1}{\tilde{c}} \quad (8.12)$$

Abbildung 8.7 stellt die Berechnungsmöglichkeiten für die Deformationsrate gegenüber. Die Korrektur erlaubt eine über den Reaktionsfortschritt nahezu konstante Vorhersage der Deformationsrate die für den in Abbildung 8.7 dargestellten Fall bei $\kappa_s \approx 145s^{-1}$ liegt. Die zu diesem Zeitpunkt berechnete Streckrate unter Verwendung von Gleichungen (8.4) und (8.5) ergeben einen Wert von $\kappa \approx 165s^{-1}$ und damit eine sehr gute Übereinstimmung mit der hier verwendeten spezifischen Modellierung¹.

8.2.3 Vergleich Simulation Experiment

Zur Modellierung der laminaren Flammengeschwindigkeit wird das neue in Kapitel 7 formulierte Modell verwendet sowie das von Bradley [15] für kugelförmige Flammen vorgeschlagene Modell, entsprechend Gleichung (7.1). Um die Transition vom stabilen zum instabilen Bereich zu charakterisieren, wird für das neue Modell eine kritische Deformationsrate verwendet, die über die Korrelation in Gleichung (7.9) berechnet wird. Für das Modell von Bradley wird ein kritischer Flammenradius verwendet, der exakt mit den untersuchten Experimenten übereinstimmt. Um die Eignung der in Kapitel 7.2 zusammengefassten fraktalen Dimensionen zu untersuchen, werden mit jedem Modell Simulationen mit $D = 7/3$, $D = 2,06$ und $D = 2,08$ durchgeführt. Da die Ergebnisse für $D = 2,06$ und $D = 2,08$ identisch sind, werden nur die Simulationsdaten mit $D = 2,08$ gezeigt.

Für die Validierung der Simulationsdaten muss in der Simulation der globale Radius und die Ausbreitungsgeschwindigkeit der Flammenfront bestimmt werden. Die Flammenfront wird ähnlich dem Experiment definiert durch² $\tilde{c} = 0,05$. Um den Radius der Flamme zu bestimmen, wird während der Simulation das Volumen des verbrannten Gases V_b , definiert über $c \geq 0,05$, im Rechengebiet bestimmt. Der Radius der kalten Verbrennungsfrent wird zu jedem Zeitschritt errechnet aus $r_u = (3/(4\pi)V_b)^{1/3}$. Anhand der Gleichungen (8.4) und (8.5) wird die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit und die Streckrate berechnet.

In Gu et al. [68] werden jeweils für den Druck $p = 5bar$ und $p = 10bar$ ein Fall graphisch dargestellt, der eine Transition von stabiler zu instabiler Flamme zeigt. Beide Fälle werden in diese Arbeit nachgerechnet. Ein dritter Testfall simuliert eine stets stabile Flamme

¹ Für eine CFD beliebig gekrümmter Flammen in der r_u nicht bekannt ist, können die Gleichungen (8.10) und (8.12) nicht verwendet werden. Um den Einfluss der Modellierung der Streckrate auf das Simulationsergebnis zu untersuchen, werden in Abbildung 8.12 Simulationsergebnisse der globalen und der allgemeinen Auswertemethode gegenübergestellt.

²Nachdem in der Simulation die Flamme mit konstanter Flammendicke propagiert, ist das Simulationsergebnis unabhängig von der Definition der Flammenfront

8.2 Evaluierung des Modells für hydrodynamische Instabilitäten

bei $p = 1\text{bar}$. Tabelle 8.1 fasst die simulierten Fälle zusammen. Die Markstein Zahlen für Krümmung und Deformation Ma_c und Ma_s sind Gu et al. [68] entnommen. Testsimulationen zeigen, dass nur mit diesen Werten der lineare, stabile Bereich dem Experiment entsprechend gut reproduziert werden kann. Die Expansion der kugelförmigen Flamme

Fall	Φ	$p[\text{MPa}]$	Ma_s	Ma_c	Pe_{cl}	$Ka_{s,cl}[1/s]$	s_L^0	Δ/l_F
1	0,9	0,1	-4,8	0,9	-	-	0,36	9
2	0,9	0,5	-9,6	-3,9	1734	$7,4 \cdot 10^{-3}$	0,2	25
3	0,9	1	-10,8	-5,1	1797	$8,2 \cdot 10^{-3}$	0,15	38

Tabelle 8.1: Auflistung der simulierten Fälle expandierender, kugelförmiger Flammen

zeigt Abbildung 8.8 für den Fall 2 mit Berücksichtigung von Instabilitäten über das neue Modell. Die Transition vom linearen, stabilen Bereich zum hydrodynamisch instabilen Bereich tritt bei $t \approx 0,02\text{s}$ auf. Die laminare Flammendicke bleibt während der Expansion konstant und wird von 6 Gitterzellen aufgelöst. Die Flamme ist nahezu kugelförmig, in Bereichen in denen die Flammennormale parallel zu den Zellnormalen verläuft, bilden sich abgeflachte Flammenfronten aus. In Bereichen in denen die Geschwindigkeitsnormalen parallel zu den Zellnormalen verlaufen ist die numerische Dissipation bzw. Diffusion minimal. Dies könnte die etwas geringere Ausbreitungsgeschwindigkeit der Flamme in diesen Bereichen erklären.

Den Vergleich der Ausbreitungsgeschwindigkeit aus der Simulation mit der aus dem Experiment über der Streckrate und über dem Radius der Flamme zeigt Abbildung 8.9 für den stets stabilen Fall 1, bei $p = 1\text{bar}$. Die von Gu et al. [68] dargestellten Simulationsdaten kugelförmiger Flammen unter Verwendung des reduzierten Mechanismus sind ebenfalls dargestellt und können das Experiment exakt reproduzieren. Die in dieser Arbeit verwendete Modellierung des Reaktionsquellterms reproduziert den linearen Zusammenhang von Streckung und Ausbreitungsgeschwindigkeit. Die Ausbreitungsgeschwindigkeit der Flamme wird dabei leicht überschätzt, was möglicherweise an einer zu großen numerischen Dissipation liegen könnte oder einem zu großen Wert für die laminare Flammengeschwindigkeit. Allerdings verlaufen die experimentellen Daten sowie die hier simulierte Ausbreitungsgeschwindigkeit nahezu parallel was darauf hindeutet, dass die verwendete Kombination von berechneter Streckung und Markstein Zahlen den linearen Bereich gut abbilden kann. Die experimentellen Daten in Abbildung 8.9 wurden aus zwei Abbildungen von [68] entnommen, so dass sich geringe Unterschiede in den Ausbreitungsgeschwindigkeiten ergeben.

Abbildung 8.10 stellt das Simulationsergebnis mit dem Modell von Bradley für die Fälle 2 und 3 (5bar und 10bar) den experimentellen Daten gegenüber. Ebenfalls dargestellt sind die Simulationsergebnisse für kugelförmige Flammen von Gu et al. [68] unter Verwendung eines reduzierten Mechanismus. Im linearen Bereich kann die CFD für 5bar und 10bar die experimentellen Daten gut reproduzieren, während die Simulationen aus [68] unter Verwendung reduzierter Chemie nur bei hohen Streckraten die experimentellen Daten reproduzieren können und zu hohe Markstein Längen vorhersagen. Beim Einsetzen von Instabilitäten zeigt sich eine gute Übereinstimmung von Experiment und der in dieser Arbeit durchgeführten Simulation. Verwendet man $D = 2,08$ wird bei 5bar die Ausbreitungsgeschwindigkeit zunächst unterschätzt. Bei einer Streckrate von $\kappa = 60\text{s}^{-1}$ wird die experimentelle Aus-

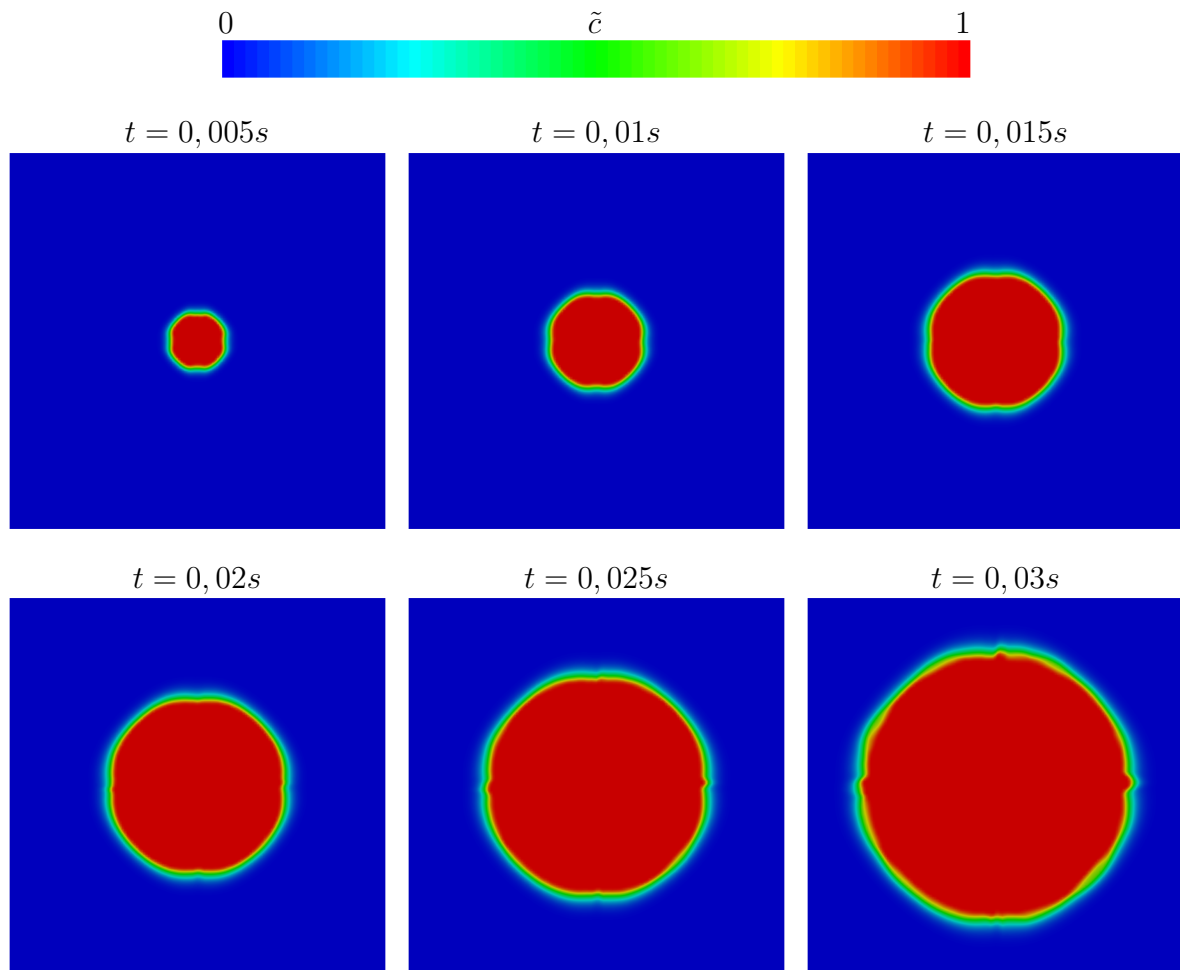


Abbildung 8.8: Propagation der Flamme im Rechengebiet anhand des Reaktionsfortschritts \tilde{c} , für Fall 2 mit Berücksichtigung von Instabilitäten über das neue Modell, Gleichung (7.7)

breitungsgeschwindigkeit reproduziert. Bei 10bar und $D = 2,08$ kann über den gesamten Bereich der Flammenexpansion der experimentelle Verlauf reproduziert werden, die maximalen Ausbreitungsgeschwindigkeiten im Instabilitätsbereich werden leicht unterschätzt. Verwendet man einen Wert von $D = 7/3$ werden die Ausbreitungsgeschwindigkeiten im Instabilitätsbereich leicht überschätzt was auf einen zu hohen Wert für die fraktale Dimension hindeutet.

Abbildung 8.11 zeigt die Ergebnisse der CFD-Simulation der Fälle 2 und 3 unter Verwendung des neuen Modells für die Berücksichtigung von hydrodynamischen Instabilitäten. Die CFD Ergebnisse mit $D = 2,08$ zeigen für 5bar und 10bar eine sehr gute Übereinstimmung mit den experimentellen Daten. Der Übergang von stabilen zu instabilen Bereich folgt den experimentellen Daten ebenso wie die Zunahme der Ausbreitungsgeschwindigkeit der Flammenfront. Deutlich stärker als bei dem Modell von Bradley überschätzen die

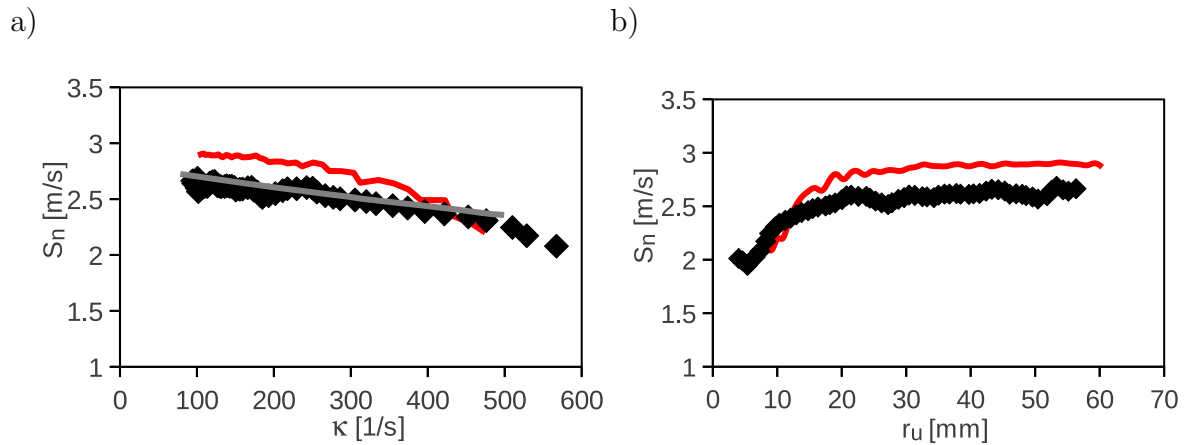


Abbildung 8.9: Ausbreitungsgeschwindigkeit der Flamme für 1bar Fall 1; a) über der Streckrate; b) über dem Radius; Experiment (Rauten), reduzierter Mechanismus (graue Linie) und Simulationsdaten (rote Linie)

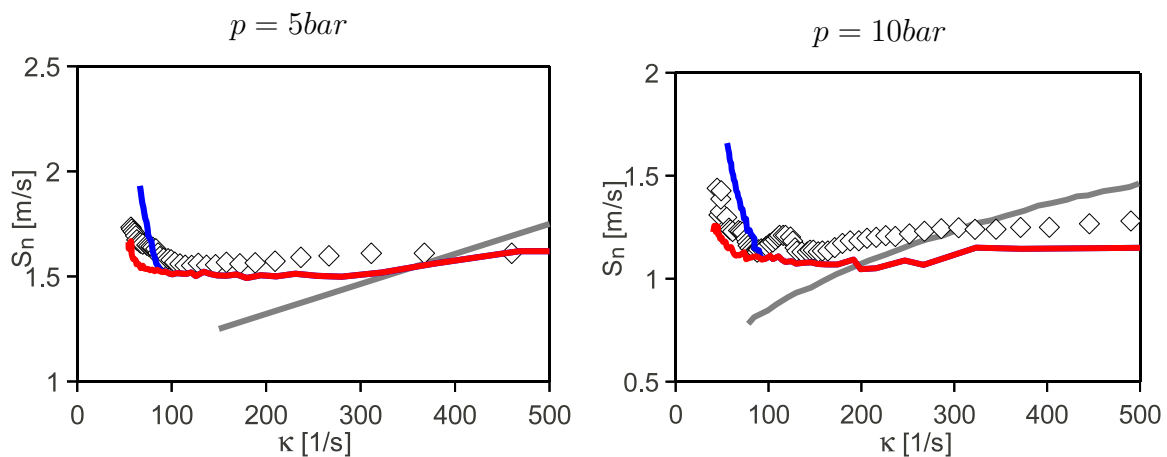


Abbildung 8.10: Darstellung der Flammenausbreitungsgeschwindigkeit über der Streckrate für Fall 2 (links) und Fall 3 (rechts); Berücksichtigung von Instabilitäten nach dem Modell von Bradley [15] Gleichung (5.57); Experiment (Rauten); reduzierter Mechanismus (graue Linie); Simulationsdaten $D = 7/3$ (blaue Linie) und $D = 2,08$ (rote Linie)

CFD Ergebnisse die experimentellen Daten bei Verwendung einer fraktalen Dimension von $D = 7/3$. Da in der CFD die kritische Deformationsrate über eine Korrelation berechnet wird, stimmt diese nicht exakt mit dem Experiment überein und erklärt das Einsetzen von Instabilitäten bei 10bar und $D = 7/3$ bei etwas größeren Streckraten.

Um den Einfluss einer allgemeinen, lokalen Berechnung der Streckrate auf die Ausbreitungsgeschwindigkeit der Flamme zu untersuchen, werden die Fälle 2 und 3 mit der Berechnung von κ entsprechend der allgemeinen Formulierung in Gleichung (4.13) simuliert. Die Gegenüberstellung mit der Modellierung von κ über Gleichung (8.10) und (8.12) zeigt Ab-

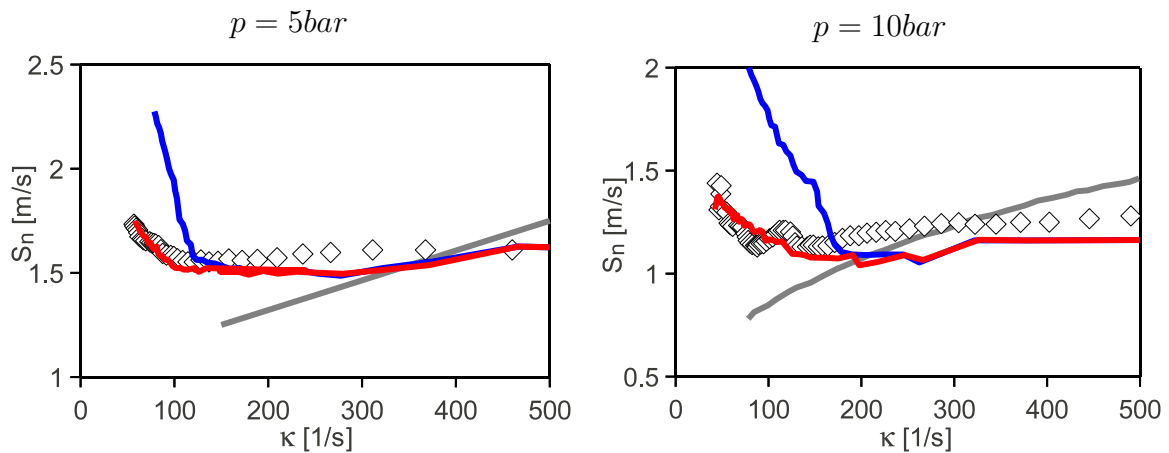


Abbildung 8.11: Darstellung der Flammenausbreitungsgeschwindigkeit über der Streckrate für Fall 2 (links) und Fall 3 (rechts); Berücksichtigung von Instabilitäten nach dem in dieser Arbeit vorgeschlagenen Modell Gleichung (7.7); Experiment (Rauten); reduzierter Mechanismus (graue Linie); Simulationsdaten $D = 7/3$ (blaue Linie) und $D = 2,08$ (rote Linie)

Abbildung 8.12. Wie die Abbildung 8.7 zeigt, unterschätzt die generische, lokale Berechnung

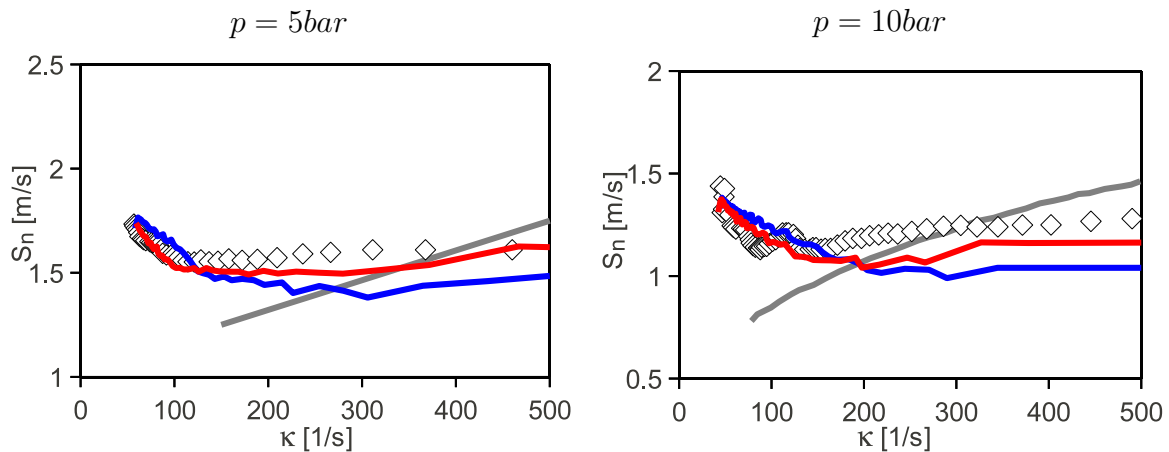


Abbildung 8.12: Darstellung der Flammenausbreitungsgeschwindigkeit über der Streckrate für Fall 2 (links) und Fall 3 (rechts) unter Verwendung unterschiedlicher Berechnungsansätze für die Streckrate; Berücksichtigung von Instabilitäten nach dem in dieser Arbeit vorgeschlagenen Modell Gleichung (7.7); Experiment (Rauten); reduzierter Mechanismus (graue Linie); Simulation mit allgemeiner Berechnung der Streckrate (blaue Linie) und globaler Berechnung der Streckrate (rote Linie)

der Streckrate das Ergebnis der globalen Berechnung. Folglich wird die Flammenausbreitung im stabilen Bereich stärker unterschätzt. Durch die unterschätzte Deformationsrate

wird aber auch ein früheres Einsetzen der Instabilität vorhergesagt. Wertet man die Unterschiede der Simulationsergebnisse quantitativ aus, zeigt sich im instabilen Bereich eine Abweichung von ca. 3% und im stabilen Bereich von ca. 5%.

8.2.4 Bewertung der Modelle zur Berücksichtigung hydrodynamischer Instabilitäten

Die Gegenüberstellung der Simulationsdaten mit den experimentellen Daten zeigt, dass im stabilen, linearen Bereich das hier verwendete Modell zur Berechnung laminarer Flammenausbreitung, unter Verwendung der Markstein Zahlen Ma_s und Ma_c des Experiments in Kombination mit der linearen Theorie, die experimentellen Daten gut reproduzieren kann. Verwendet man das Modell von Bradley zur Berücksichtigung hydrodynamischer Instabilitäten, kann der Verlauf der experimentellen Daten gut wiedergegeben werden. Das hier vorgeschlagene Modell für hydrodynamische Instabilitäten zeigt eine etwas bessere Übereinstimmung mit den experimentellen Daten unter Verwendung von $D = 2,08$. Für $D = 7/3$ überschätzen beide Modelle die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit und legen kleinere fraktale Dimensionen im Bereich von $D = 2,06$ bzw. $D = 2,08$ nahe. Die Simulationsergebnisse bestätigen, dass die Charakterisierung stabile/instabile Flamme über die Deformationsrate ein geeignetes Kriterium ist.

Der Vergleich der Simulationsergebnisse mit den experimentellen Daten zeigt, dass das hier für generische Flammen vorgeschlagene Modell für die untersuchten Bereiche als validiert betrachtet werden kann und für die CFD beliebiger Konfigurationen auch unter Verwendung der generischen, lokalen Berechnung der Streckung eingesetzt werden kann.

8.3 Simulation einer turbulenten Bunsenbrennerflamme

Die simulierte Bunsenbrennerflamme entspricht den experimentellen Daten der Kobayashi Datenbank [88, 91, 94]. Betriebspunkte der Datenbank werden simuliert, da diese die Evaluierung des Verbrennungsmodells bei unterschiedlichen Druck- und Turbulenzniveaus ermöglichen, die typische Bereiche ottomotorischer Verbrennung abbilden. Zudem werden für diese Konfiguration experimentelle Daten bei unterschiedlichen Brennstoffen bereitgestellt, so dass das Modellverhalten bei Variation des Brennstoffs untersucht werden kann. Die Bunsenbrenner Flamme ist durch geringe Strömungsgeschwindigkeiten charakterisiert und dadurch sehr sensitiv gegenüber dem Verbrennungsmodell. Die Kobayashi Datenbank ermöglicht aufgrund des kleinen Rechengebiets und den geringen bis moderaten Reynolds Zahlen eine umfangreiche Netzstudie um den Einfluss der Filterweite auf die aufgelöste und modellierte Flammenoberfläche zu untersuchen.

Die Auswertungen konzentrieren sich zunächst auf die Untersuchung des neuen turbulenten Verbrennungsmodells in Kombination mit der Modellierung stabilisierender Streckeffekte auf die laminare Flammengeschwindigkeit über Gleichung (5.39). In Abschnitt 8.3.6 wird ein potentieller Einfluss von LD- und TD-Instabilitäten auf die laminare Flammengeschwindigkeit untersucht. Die Kobayashi Bunsenflamme wurde bereits mit RANS u.a. von Muppala et al. [121] und Brandl et al. [22] simuliert. Grobstruktursimulationen finden sich in Aluri et al. [6] und Tangermann et al. [146]. Lipatnikov und Chomiak verwenden die Kobayashi Datenbank zu theoretischen Analysen bzgl. Turbulenz- und Druckabhängigkeit der turbulenten Flammengeschwindigkeit.

8.3.1 Beschreibung des Experiments

Der Bunsenbrenner befindet sich in einer Hochdruckbrennkammer. 40mm stromauf des Brennkammereinlasses mit einem Durchmesser von 20mm können vier unterschiedliche Lochbleche als Turbulenzgitter montiert werden, um unterschiedliche turbulente Schwankungen und integrale Längenmaße zu generieren. Die Strömungsgeschwindigkeit, sowie u' und l_t werden in der Mitte der Einlassdüse zur Brennkammer mittels Hitzdrahtanemometrie in Hauptströmungsrichtung gemessen. Eine Wasserstoff-Diffusionsflamme als Pilotflamme stabilisiert die Hauptflamme, die im zeitlichen Mittel eine kegelförmige Struktur aufweist. Die Hochdruckbrennkammer hat eine Länge von $0,6\text{m}$ und einen Durchmesser von $0,5\text{m}$. Drucksensoren und ein automatisiertes Auslassventil garantieren ein konstantes Druckniveau in der Brennkammer. Messungen werden bei einem Druckniveau von $1\text{bar} - 30\text{bar}$ durchgeführt. Die Strömungsgeschwindigkeit am Einlass zur Brennkammer beträgt zwischen $0,86\text{m/s}$ und $8,86\text{m/s}$. Die turbulente Schwankung sowie die integralen Längenmaße werden zu $0,0 \leq u' \leq 2,06\text{m/s}$ und $0,7 \leq l_t \leq 1,9\text{mm}$ gemessen. Als Brennstoff wird Methan ($\Phi = 0,9$), Propan ($\Phi = 0,9$) und Ethan ($\Phi = 0,5$; $\Phi = 0,7$; $\Phi = 0,9$) verwendet. Neuere Arbeiten befassen sich mit der Untersuchung von Syngas-Flammen [92]

8.3 Simulation einer turbulenten Bunsenbrennerflamme

sowie mit Wasser und CO_2 verdünnte Flammen [153]. Die Temperatur der untersuchten Betriebspunkte des unverbrannten Gemischs am Einlass beträgt $T_u = 300K$. Den schematischen Aufbau, entnommen aus [91, 94] und [97], zeigt Abbildung 8.13. Die Flammen

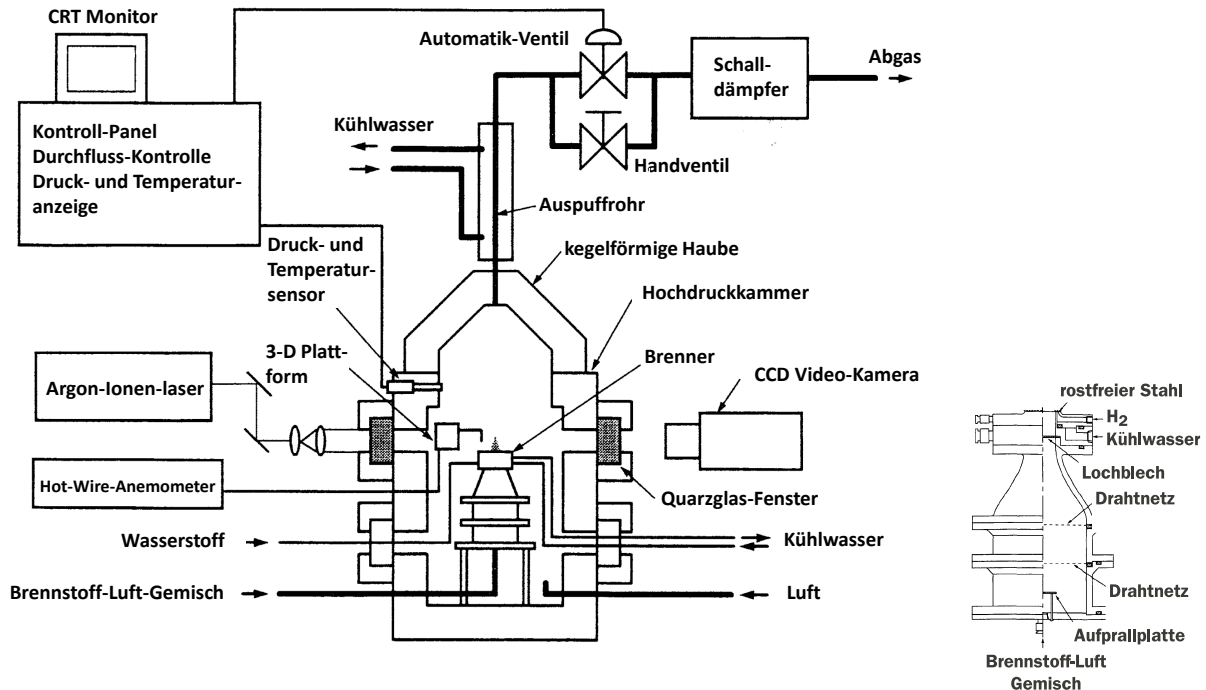


Abbildung 8.13: links: Experimenteller Aufbau der Hochdruckbrennkammer mit Messaufbau und Peripherie; rechts: Konfiguration der Strömungsführung vor dem Brennkammerinlass

werden in [88, 91, 94] hinsichtlich ihrer Flammenform untersucht. Dazu werden mittels Tomographie Bilder der instantanen Flamme aufgenommen. Unter der Annahme von Achsensymmetrie wird aus 50 instantanen Bildern eine Zeit gemittelte Flammenform erstellt. Der Bereich $\langle \bar{c} \rangle = 0,5$ wird als Flammenfront definiert. Vernachlässigt man den Bereich am Brennereinlass und die Flammenspitze zeigen Kobayashi et al. [94], dass die gemittelte Flammenfront einen geraden Verlauf mit konstanter Steigung über der Rotationsachse der Brennkammer aufweist. Damit lässt sich anhand des Flammenwinkels gegenüber der Rotationsachse und der Geschwindigkeit am Einlass die turbulente Flammengeschwindigkeit berechnen:

$$s_t = U \sin(\varphi) \quad (8.13)$$

U errechnet sich aus dem Massenstrom und dem Durchmesser der Düse am Einlass und entspricht damit der mittleren Geschwindigkeit am Einlass. φ bezeichnet den Flammenwinkel. Abbildung 8.14 illustriert die Methode zur Bestimmung der turbulenten Flammengeschwindigkeit im Experiment und entspricht der Bestimmung der laminaren Flammengeschwindigkeit in laminaren Bunsenbrennern, vgl. Kapitel 4.1.1. Der Vergleich von

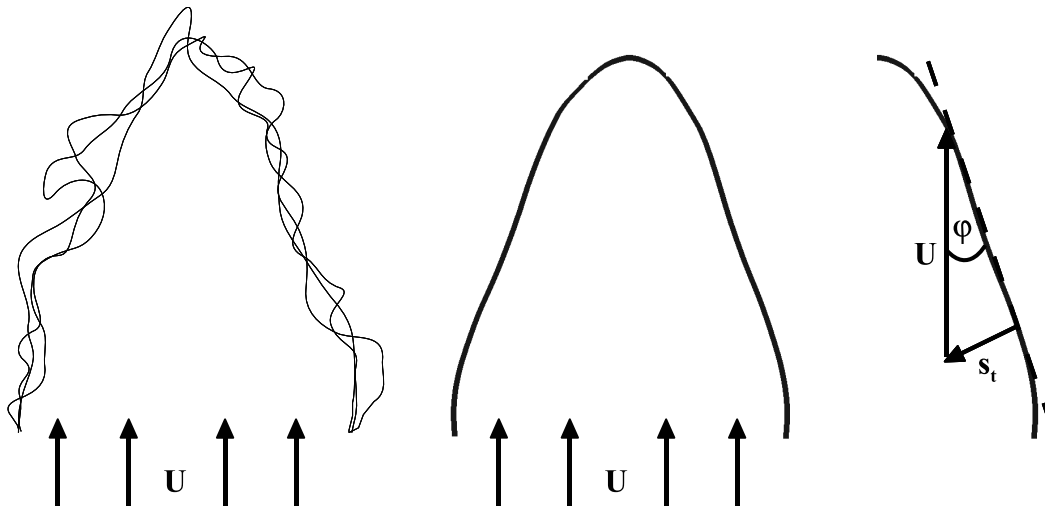


Abbildung 8.14: Methode zur Bestimmung der turbulenten Flammengeschwindigkeit im Experiment

Simulation und Experiment mit dieser Auswertemethode kann als grober Vergleich der linearisierten Flammenform und Position der Flamme interpretiert werden.

8.3.2 Modellierung und Simulation

Rechengebiet

Das Rechengebiet bildet einen Bereich der Brennkammer ab und weist einen Durchmesser von 80mm sowie eine Länge von 120mm auf. Aufgrund des Düsendurchmessers von 20mm , der in etwa der größten radialen Ausdehnung der Flammenfront entspricht sowie einer maximalen simulierten Flammlänge von ca. 50mm werden die simulierten Flammen nicht durch die Randbedingungen beeinflusst. Das Rechengebiet, gezeigt mit stark reduzierter Auflösung in Abbildung 8.15, ist mit Hexaedern diskretisiert, und im Bereich der Flamme verfeinert. Drei systematisch reduzierte Rechnetze werden verwendet, um den Einfluss der Filterweite auf die simulierte Flamme zu untersuchen. Wie in Abschnitt 6.2 diskutiert, muss für die Anwendbarkeit des Konzepts der fraktalen Modellierung $\Delta < l_t$ bzw. für das hier verwendete Modell $2,2\Delta < l_t$ gelten. Damit ergibt sich als maximale Filterweite $\Delta_{\max} \approx 0,5\text{mm}$. Wie ebenfalls in Abschnitt 6.2 dargelegt, entspricht dies keiner Modelleinschränkung, da bereits für die LES $\Delta \ll l_t$ erfüllt werden muss. Tabelle 8.2 fasst die charakteristischen Daten der 3 verwendeten Rechnetze zusammen, wobei Δ der mittleren Filterweite im Bereich der Flammenfront entspricht.

Randbedingungen

Am Einlass werden für alle Variablen, außer für den Druck, Dirichlet Randbedingungen vorgegeben. Aufgrund der Strömungsführung vor der Brennkammer sowie den geringen Geschwindigkeiten wird von einem Blockprofil in der Anströmung ausgegangen. Um die integralen Längenmaße und die turbulenten Intensitäten, die im Experiment am Einlass

8.3 Simulation einer turbulenten Bunsenbrennerflamme

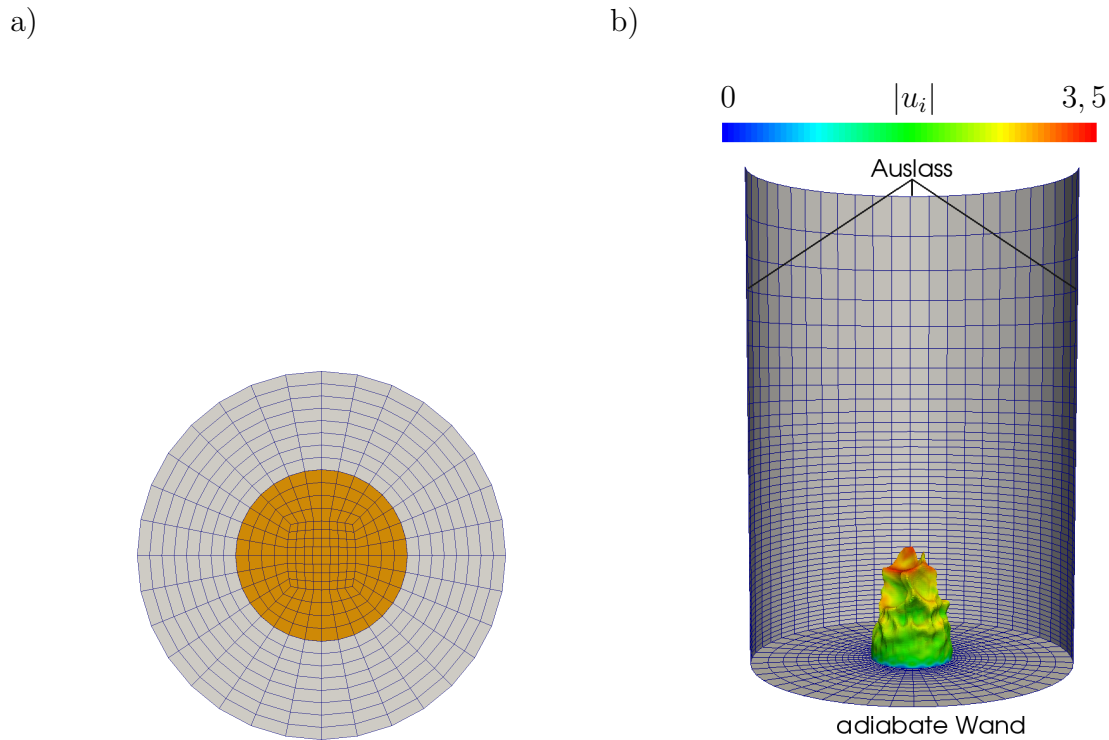


Abbildung 8.15: a) Prinzip der Vernetzung in radialer und azimuthaler Richtung; b) Rechengebiet mit instantaner Flammenfront, Axialgeschwindigkeit als Konturplot

Bez.	$\Delta [mm]$	Zellenzahl	$\frac{\Delta}{l_F} _{1bar}$	$\frac{\Delta}{l_F} _{5bar}$	$\frac{\Delta}{l_F} _{10bar}$	$\frac{\Delta}{l_F} _{20bar}$
A	0,4	$0,6 \cdot 10^6$	8,8	19	27,8	35,4
B	0,3	$2 \cdot 10^6$	6,6	14,2	20,9	26,6
C	0,2	$3,7 \cdot 10^6$	4,4	9,5	13,9	17,7

Tabelle 8.2: Filterweite und charakteristische Netzdaten der 3 verwendeten Rechnetze der Bunsenbrennerflamme

gemessen werden, in der Simulation vorgeben zu können, wird ein Turbulenzgenerator nach Kempf et al. [81] verwendet. Die Turbulenz über zufällige Geschwindigkeitsfluktuationen abzubilden, kann die kohärenten Strukturen der Turbulenz nicht wiedergeben. Das Zufallssignal gibt zudem die Fluktuation im Geschwindigkeitsfeld nur punktuell wieder. Dies führt zu großen Geschwindigkeitsgradienten, die schnell gedämpft werden und zu einer Relaminarisierung im Strömungsfeld führen können. Die Turbulenzgrößen werden im Experiment nur in Hauptströmungsrichtung vermessen. Für die Simulation wird am Einlass homogene, isotrope Turbulenz angenommen, um die Spur des Reynoldsspannungstensors vollständig zu besetzen. Die Implementierung des Turbulenzgenerators von Tangermann et al. [147] wird erfolgreich angewendet. Validierungsrechnungen die eine Netzkonvergenz des Turbulenzgenerators zeigen, werden in [98] anhand von Auto- und Kreuzkorrelationen des generierten turbulenten Felds durchgeführt. Zudem werden für jeden in dieser Arbeit simu-

lierten Betriebspunkt die korrekten u' -Werte durch Auswertung der Reynoldsspannungen über den gesamten Einlass überprüft.

Die Temperatur am Einlass beträgt $T_u = 300K$. Von Neumann Randbedingungen werden an den übrigen Rändern für die Temperatur vorgegeben. Am Auslass wird eine Totaldruck Randbedingung gesetzt sowie eine Rückströmung ins Rechenggebiet zugelassen.

Wie in Weller et al. [156] wird das Eingleichungsmodell für k_Δ gewählt, das zudem von Fureby et al. [57] vorgeschlagen wird. k_Δ am Einlass wird über $(2c_k/c_e)\Delta^2|S_{ij}|^2$ berechnet, wobei die Konstanten in der Transportgleichung für k_Δ , Gleichung (3.23) zu $c_k = 0,94$ und $c_e = 1,048$, Fureby et al. [57] folgend gewählt werden. Die zu modellierenden turbulenten Fluktuationen werden über $u'_\Delta = \sqrt{2/3k_\Delta}$ berechnet.

Die Diskretisierung wird entsprechend der 1-D Simulation gewählt und ist in Abschnitt 8.1.1 beschrieben.

Beschreibung Simulation

Für jeden simulierten Rechenfall werden ca. 10 Durchströmzeiten zur Ausbildung des Strömungsfeldes sowie zusätzliche 10 Durchströmzeiten zur Zeitmittelung gerechnet. Die simulierten Rechenfälle der Kobayashi Datenbank sind in Tabelle 8.3 aufgelistet. Die daraus resultierenden globalen Kennzahlen sind in Tabelle 8.4 zusammengefasst. Die Regimezuordnung in einem Verbrennungsdiagramm nach Peters in Abbildung 8.16 zeigt, dass die simulierten Fälle im Bereich gewinkelter sowie gefalteter Flammenfronten und im Bereich dünner Reaktionszonen liegen und den typischen Bereich ottomotorischer Verbrennung abbilden. Die Bezeichnung der Simulationsfälle setzt sich im Folgenden aus der Nummer des

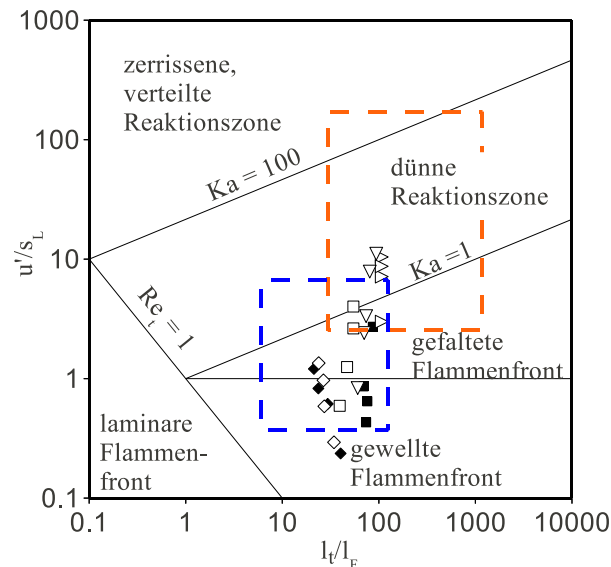


Abbildung 8.16: Simulierte Betriebspunkte in einem Verbrennungsdiagramm nach Peters; Methan-Luft (weiß); Propan-Luft (schwarz); 1bar (Rauten); 5bar (Vierecke); 10bar (Dreieck unten); 20bar (Dreieck rechts); blauer Bereich: ottomotorische Verbrennung; oranger Bereich: stationäre Gasturbinen

8.3 Simulation einer turbulenten Bunsenbrennerflamme

Fall	Brennstoff	Φ	p[MPa]	U[m/s]	u'[m/s]	l_t [mm]
1	CH4	0,9	0,1	2,02	0,00	0
2	CH4	0,9	0,1	2,02	0,10	1,8
3	CH4	0,9	0,1	2,33	0,20	1,43
4	CH4	0,9	0,1	2,42	0,33	1,4
5	CH4	0,9	0,1	2,36	0,46	1,25
6	CH4	0,9	0,5	2,05	0,09	0,83
7	CH4	0,9	0,5	2,53	0,19	0,99
8	CH4	0,9	0,5	3,38	0,61	1,15
9	CH4	0,9	0,5	2,21	0,40	1,15
10	CH4	0,9	1,0	2,6	0,09	1,05
11	CH4	0,9	1,0	3,4	0,26	0,9
12	CH4	0,9	1,0	2,11	0,36	1,1
13	CH4	0,9	1,0	4,64	1,20	1,4
14	CH4	0,9	1,0	3,57	0,85	1,2
15	CH4	0,9	2,0	2,84	0,21	1,15
16	CH4	0,9	2,0	3,22	0,73	1,15
17	CH4	0,9	2,0	2,42	0,50	1,15
18	CH4	0,9	2,0	2,87	0,61	1,15
19	C3H8	0,9	0,1	1,75	0,10	1,7
20	C3H8	0,9	0,1	1,25	0,21	1,05
21	C3H8	0,9	0,1	1,5	0,26	1,25
22	C3H8	0,9	0,1	1,75	0,35	1
23	C3H8	0,9	0,5	1,89	0,10	1,02
24	C3H8	0,9	0,5	2,17	0,15	1,05
25	C3H8	0,9	0,5	2,76	0,20	0,96
26	C3H8	0,9	0,5	3,51	0,63	1,2

Tabelle 8.3: Umgebungs- und Randbedingungen der simulierten Betriebspunkte aus der Kobayashi Datenbank

Brennstoff	Re	Re_t	Ka	Da	u'/s_L	l_t [mm]
CH4	2600 – 82.000	11 – 1100	0,03 – 3,4	10 – 120	0,3 – 11	0,83 – 1,8
C3H8	2400 – 21.000	10 – 200	0,01 – 0,5	20 – 170	0,2 – 3	0,9 – 1,7

Tabelle 8.4: Bereich der globalen, verbrennungsspezifischen Kennzahlen der simulierten Betriebspunkte, errechnet über Werte am Einlass bzw. der Umgebung

Falls in Tabelle 8.3 und der verwendeten Filterweite aus Tabelle 8.2 zusammen.

Evaluierung der LES Qualität

Die Qualität einer LES kann u.a. durch die Berechnung des Verhältnisses von aufgelöster k_{res} zu gesamter turbulenter kinetischer Energie $k_{tot} = k_{\Delta} + k_{res}$ erfolgen. Als zu untersuchender Bereich wird die Rotationsachse festgelegt. Das Verhältnis von k_{res}/k_{tot} ist in

Abbildung 8.17a) für die Fälle 5 und 16 der Rechenetze A und C aufgetragen. Der Fall 16A entspricht dabei dem Fall größter turbulenter Reynolds Zahl bei größter Filterweite. Die

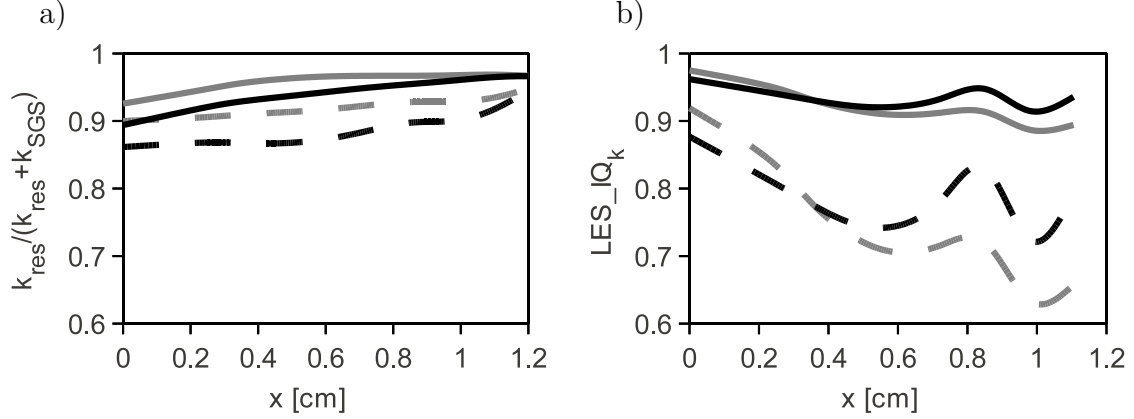


Abbildung 8.17: a) Verhältnis aufgelöster zur gesamten turbulenten kinetischen Energie; b) Verhältnis aufgelöster zur gesamten turbulenten kinetischen Energie unter Berücksichtigung numerischer Diffusion; Fall 5A (schwarz gestrichelt); Fall 5C (schwarz durchgezogen); Fall 16A (grau gestrichelt); Fall 16C (grau durchgezogen); vgl. Tab. 8.2 und Tab. 8.3 zur Fallbezeichnung

Auswertung wird bis zu einem Abstand $x = 1,2\text{cm}$ von dem Brenneinlass durchgeführt, da weiter stromab der Verbrennungsprozess stattfindet. Bei $\tilde{c} > 0$ werden k_{res} als auch k_{Δ} durch die räumliche und zeitliche Fluktuation der Flamme beeinflusst, was zu unphysikalischen Werten führt [134]. Im betrachteten Bereich werden dieser Bewertungsmethode zur Folge für die größte Filterweite A selbst für den Rechenfall bei größter turbulenter Reynolds Zahl (Fall 16), 85% der turbulenten kinetischen Energie aufgelöst. Eine allgemeinere Evaluierungsmethode berücksichtigt zudem numerische Fehler, bzw. numerische Dissipation und wird von Celik et al. [31] vorgeschlagen. Die numerische Dissipation geht dabei durch eine modellierte, numerische turbulente kinetische Energie in die totale turbulente kinetische Energie ein. Für diese Methode werden Simulationen auf zwei unterschiedlichen Rechenetzen benötigt. Erste Anwendungen dieser Methode für die LES von Vormischverbrennung findet sich in Aluri et al. [6]. Celik et al. [31] definiert einen Index für die Qualität einer LES:

$$LES_{IQ_k} = \frac{k_{res}}{k_{tot}} = \frac{k_{res}}{k_{res} + a_k i^p} \quad (8.14)$$

wobei $a_k i^p$ eine effektive turbulente kinetische Feinstruktur Energie bezeichnet die k_{Δ} , sowie die numerische Dissipation beinhaltet. i bezeichnet die Zellgröße, p die Ordnung der Diskretisierung, hier zu 2 angenommen und a_k wird berechnet über:

$$a_k = \frac{1}{i_C^p} \left[\frac{k_{res,C} - k_{res,A}}{(k_{res,A}/k_{res,C})^p - 1} \right] \quad (8.15)$$

wobei der Index A bzw. C die Werte bei der größeren bzw. kleineren Zellweite bezeichnen. Abbildung 8.17b) zeigt den Verlauf von LES_{IQ_k} auf der Rotationsachse über dem

Abstand vom Brenneinlass der Fälle 5 und 16 im Bereich des unverbrannten Gemischs. Beeinflusst durch die Randbedingung zeigen die Abbildungen 8.17a) und 8.17b) am Einlass ähnliche Werte. Weiter stromab zeigt die Auswertung nach Gleichung (8.14), dass nur noch 65 – 75% bei der LES von Fall 16A aufgelöst werden. Celik et al. [31] zu Folge ist eine gut aufgelöste LES durch Werte von $LES_IQ_k > 0,7$ gekennzeichnet. Dieser Wert wird für den Extremfall 16A leicht unterschritten.

8.3.3 Evaluierung des neuen FSD Modells bei Variation der Filterweite

Im Folgenden werden Modelleigenschaften wie der Einfluss der Filterweite auf die vorhergesagte totale Flammenoberfläche und die aufgelöste Flammenoberfläche untersucht. In der LES berechnet sich die totale Flammenoberfläche A_{tot} über:

$$A_{tot} = \int_{\Omega_V} \Sigma \, dV \quad (8.16)$$

und die aufgelösten Flammenoberfläche A_{res} über:

$$A_{res} = \int_{\Omega_V} |\nabla \bar{c}| \, dV \quad (8.17)$$

Nachdem mit kleiner werdender Filterweite die aufgelöste Flammenoberfläche zunimmt, muss im gleichen Maß die modellierte Fläche reduziert werden, da A_{tot} unabhängig von der Filterweite ist bzw. sein sollte. Dies stellt auch ein Bewertungskriterium für FSD Modelle dar. Zusätzlich wird der Einfluss der Filterweite auf die turbulente Flammendicke evaluiert, die ebenfalls unabhängig von Δ sein sollte. Dazu wird für jedes Druckniveau ein Betriebspunkt mit den Filterweiten A, B und C simuliert. Als Betriebspunkte werden die Fälle 5, 8, 14, 16 aus Tabelle 8.3 ausgewählt. Der Umgebungsdruck der ausgewählten Fälle beträgt $0,1MPa$, $0,5MPa$, $1MPa$ und $2MPa$. Das integrale Längenmaß ist nahezu konstant bei $1,2mm$, die turbulente Intensität variiert zwischen $19\% \leq I \leq 22\%$ und die u'/s_L^0 -Werte ergeben sich zu $1,3|_{0,1MPa}$, $3,9|_{0,5MPa}$, $7,7|_{1MPa}$ und $10|_{2MPa}$. Abbildung 8.18 illustriert die instantanen Flammenformen der Fälle 5, 8, 14, 16 bei unterschiedlichen Filterweiten. Trotz einer Zunahme des Drucks um den Faktor 20 ist kein deutlicher Einfluss auf die aufgelöste Flammenform zu erkennen, während im Experiment [88,91,94] eine deutliche Zunahme der Flammenfaltung zu erkennen ist. Mit kleiner werdender Filterweite wird die aufgelöste Flammenfront stärker verwinkelt vorhergesagt.

Die Auswertung der 4 Fälle hinsichtlich der totalen Flammenoberfläche A_{tot} entsprechend Gleichung (8.16) sowie der aufgelösten Flammenoberfläche A_{res} entsprechend Gleichung (8.17) ist in Abbildung 8.19 dargestellt. Die berechnete Gesamtoberfläche ist nahezu konstant und damit unabhängig von der Filterweite. Das neue Verbrennungsmodell in Kombination mit dem Modell für die Feinstruktur-turbulenz und der Numerik ist daher in der Lage, die mit zunehmender Filterweite geringer aufgelöste Flammenfront durch einen im gleichen Maße vergrößerten Modelleinfluss zu kompensieren. Fall 5 entspricht dem $1bar$ Fall mit der höchsten Turbulenz. Dabei werden 50% bzw. 80% der gesamten Flammenoberfläche mit der größten bzw. feinsten Filterweite aufgelöst. Die Fälle bei $p = 1bar$, Fall

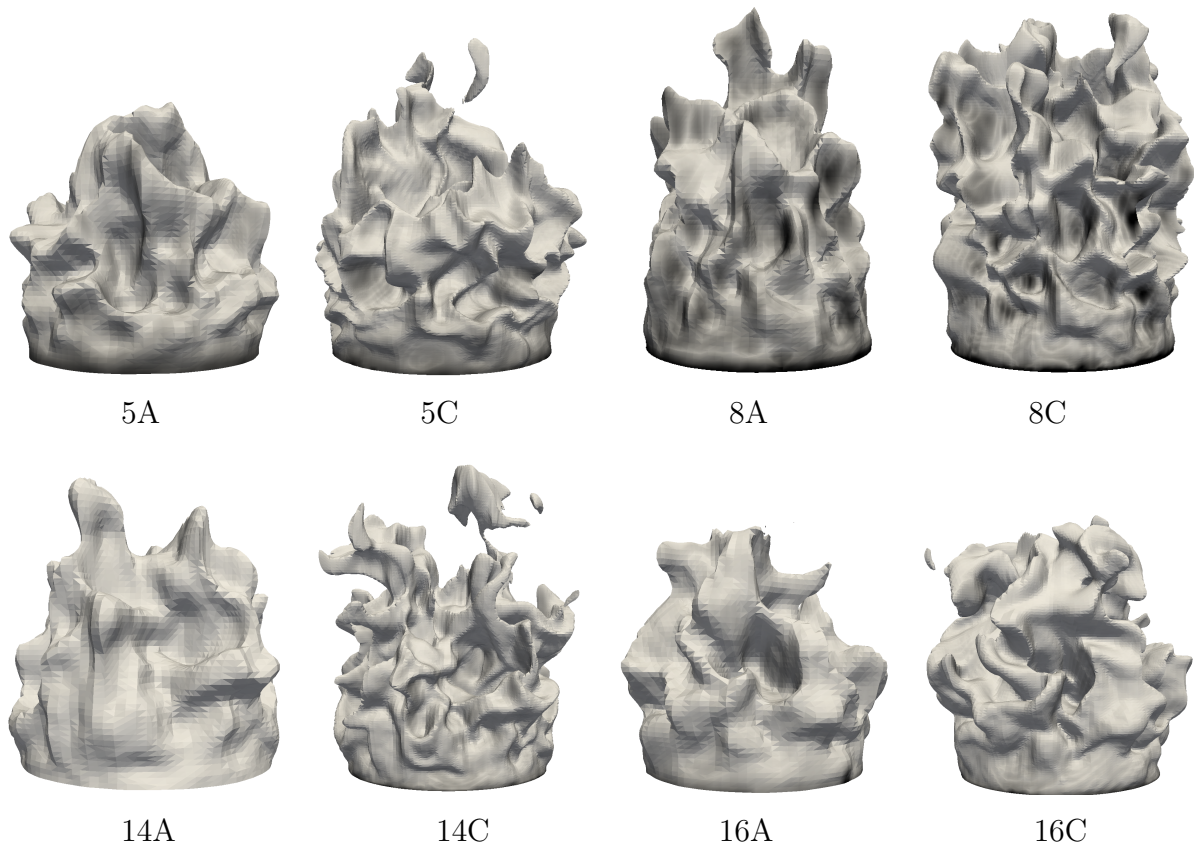


Abbildung 8.18: Instantane Flammenformen von Fall 5 (1bar), 8 (5bar), 14 (10bar), 16 (20bar) mit den Filterweiten A und C; vgl. Tab. 8.2 und Tab. 8.3 zur Fallbezeichnung

1 – 5 entsprechen daher einer LES mit hoch aufgelöster Flammenoberfläche und geringem Modelleinfluss. Mit zunehmendem Druck nimmt der Einfluss der Flammenfaltung auf Feinstrukturebene zu. Obwohl Abbildung 8.17b) zeigt, dass für den Fall 16C gut 90% der turbulenten kinetischen Energie aufgelöst werden, sind nur 15% der gesamten Flammenoberfläche aufgelöst. Ähnliche Ergebnisse zeigt die LES eines Verbrennungsmotors mit variierendem Druck von Richard et al. [139]. Dies bestätigt, dass trotz einer hoch aufgelösten LES bei moderater Reynolds Zahl, der Hauptteil der Flammenfaltung sich innerhalb des Feinstrukturbereichs befindet.

Weitere Auswertungen zum Einfluss der Filterweite auf die Vorhersage des Verbrennungsmodells werden anhand der Fälle 5 und 16 durchgeführt. Dem Regimediagramm in Abbildung 8.16 zu Folge können die Fälle dem Bereich gefalteter Flammenfronten und dem Bereich dünner Reaktionszonen zugeordnet werden. Das von Pitsch [132] vorgeschlagene Regimediagramm kann verwendet werden, um die Fälle im LES-Kontext einzuordnen. Pitsch [132] verwendet das Gibson Längenmaß um den Übergang von aufgelöster zu gefalteter Flammenfront zu charakterisieren. In dem neuen Modell wird die kleinste Faltungslänge durch $\epsilon_i = l_F Ka^{-1/2}$ beschrieben. Die Grenze zwischen aufgelöster und gefalteter Flammenfront wird daher durch $Re_\Delta = 1$ beschrieben und das LES-Regimediagramm muss dementsprechend modifiziert werden. Ka_Δ und Δ/l_F werden auf einer instantanen Flam-

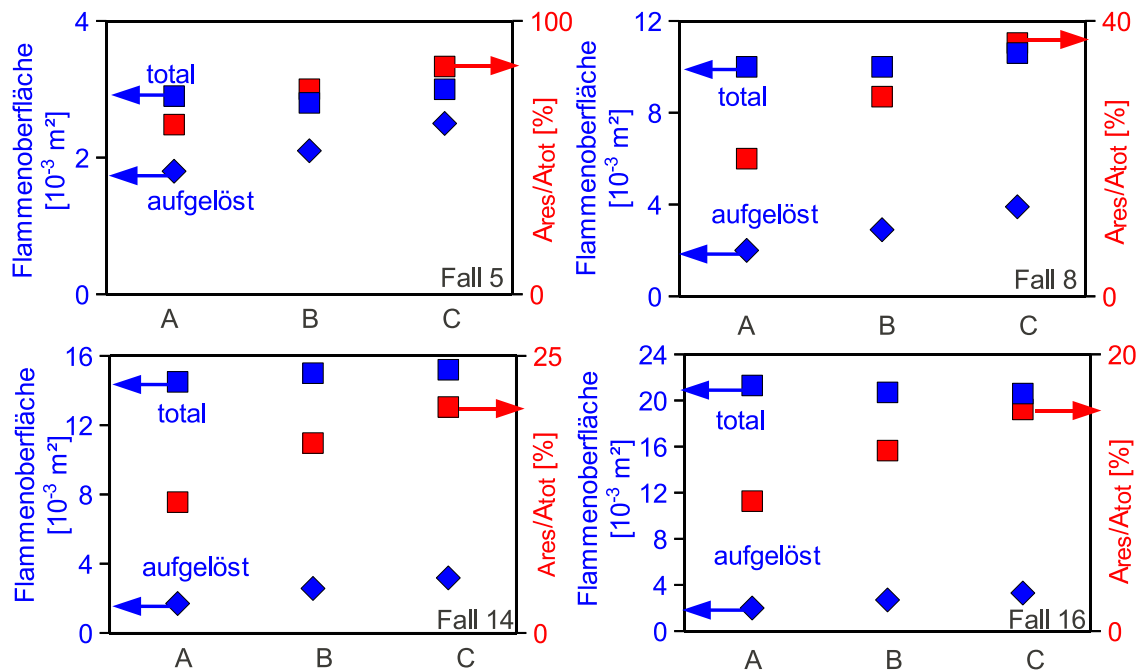


Abbildung 8.19: Auswertung der aufgelösten Flammenoberfläche (blaue Raute), Gesamtoberfläche (blaue Vierecke) und A_{res}/A_{tot} [%] (rote Vierecke) der Filterweite A,B,C vgl. Tabelle 8.2 der Fälle 5, 8, 14, 16; ; vgl. Tab. 8.2 und Tab. 8.3 zur Fallbezeichnung

menfront, definiert durch $\tilde{c} = 0,5$ ausgewertet. Das LES-Regime Diagramm in Abbildung 8.20 zeigt den Bereich der Fälle 5 und 16 bei der Filterweite A,B und C. Aufgrund der Auswertung auf der Flammenfront erstrecken sich die einzelnen Punkte im Regimediagramm in Abbildung 8.16 über einen größeren Bereich im LES Regimediagramm. Die Auswertung der Karlovitz Zahl, die theoretisch unabhängig von der Auflösung ist, aber durch die Implementierung $Ka_{\Delta} = (u'_{\Delta}/s_L^0)^{3/2} (\Delta/l_F)^{-1/2}$ eine gewisse Netzabhängigkeit einführt, erstreckt sich, wie in Abbildung 8.20 zu sehen, über nahezu die selben Bereiche der Karlovitz Zahl, unabhängig von der Filterweite. Entsprechend den Auswertungen in Abbildung 8.19, zeigen die Fälle 5B und 5C eine hoch aufgelöste Flammenoberfläche.

Fall 16 wird bei der Auswertung der Einlassrandbedingungen dem Bereich dünner Reaktionszonen zugeordnet. Im LES Regime Diagramm wird der Hauptteil der Flammenfront dem Bereich der gefalteten Flammenfront zugeordnet. Einen Eindruck über die Korrelation der Karlovitz Zahl auf der Flammenfront $\tilde{c} = 0,5$ mit dem Radius und dem axialen Abstand vom Brenneinlass zeigt die Abbildung 8.21 für den Fall 16A. Der Bereich am Brenneinlass und in der Scherschicht $x/d \approx 0,5$ ist wie im Peters Diagramm über $Ka_{\Delta} > 1$ charakterisiert. Weiter stromab und im Bereich der Rotationsachse kann die Flammenfront dem Regime der gefalteten Flammenfront zugeordnet werden. Es zeigt sich, dass die Einordnung in ein Verbrennungsdiagramm über Randbedingungen nur die Größenordnung des vorherrschenden Regimes wiedergeben kann.

Einfluss der Filterweite auf die instantanen und Zeit gemittelten Flammenformen \tilde{c} und $\langle \tilde{c} \rangle$, sowie die aufgelöste und gesamte Flammenoberflächendichte für den Fall 5 mit Fil-

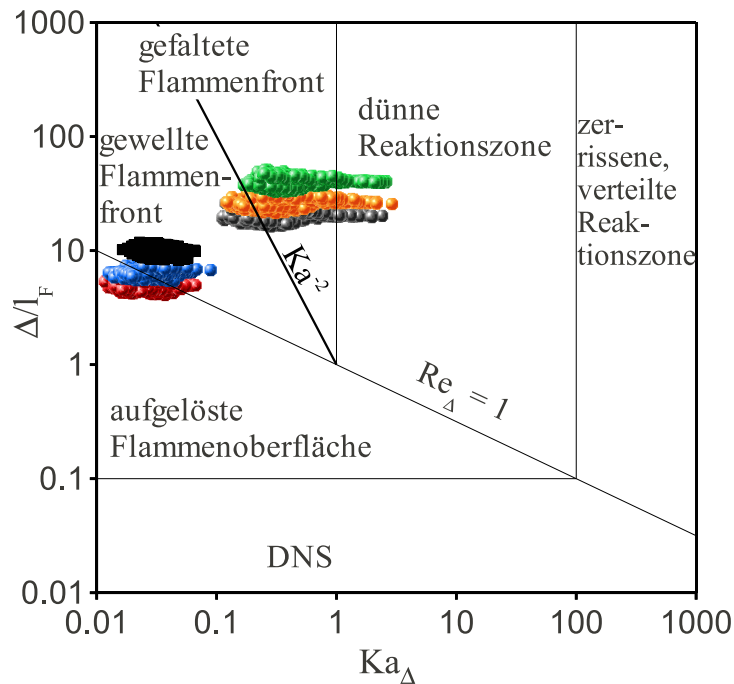
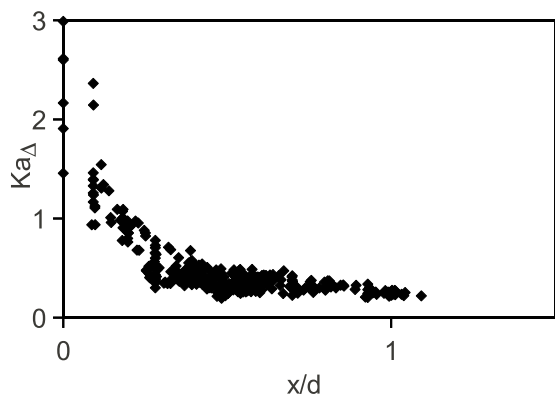


Abbildung 8.20: Bereich der simulierten Fälle 5 und 16 der Filterweite A,B,C in einem LES Diagramm; 5A (schwarz); 5B (blau); 5C (rot); 16A(grün); 16B (orange); 16C (grau); vgl. Tab. 8.2 und Tab. 8.3 zur Fallbezeichnung

a)



b)

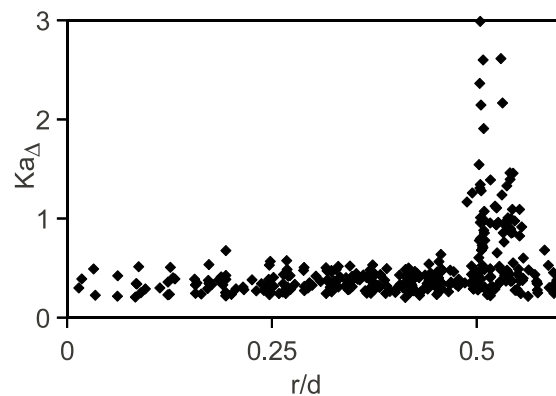


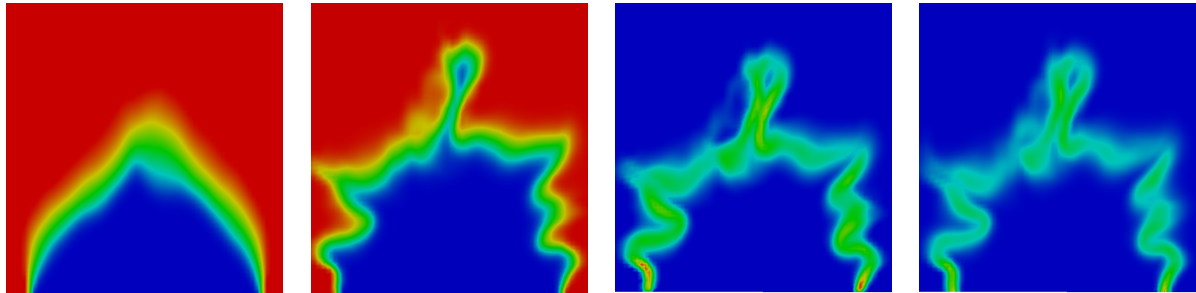
Abbildung 8.21: Abhängigkeit der Karlovitz Zahl Ka_{Δ} auf der Flammenoberfläche für Fall 16A a) mit axialen Abstand von der Brennerdüse; b) mit radialen Abstand von der Rotationsachse

terweite A und C und damit 50% – 80% aufgelöster Flammenoberfläche zeigt Abbildung 8.22. Die entsprechende Auswertung für den Fall 16, bei 20 bar mit 11% – 16% aufgelöster

8.3 Simulation einer turbulenten Bunsenbrennerflamme

Flammenoberfläche und damit deutlich größerem Modelleinfluss ist in Abbildung 8.23 dargestellt. Die Favre gemittelte Fortschrittsvariable wird dargestellt, da sie der numerisch gelösten Variable entspricht. $\langle \bar{c} \rangle$ wird ausgewertet, da diese mit experimentellen Daten verglichen wird. Stromab des Einlassbereichs zur Brennkammer wird die instantane tur-

a)



b)

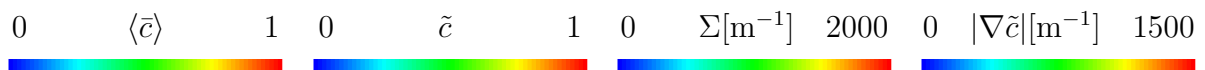
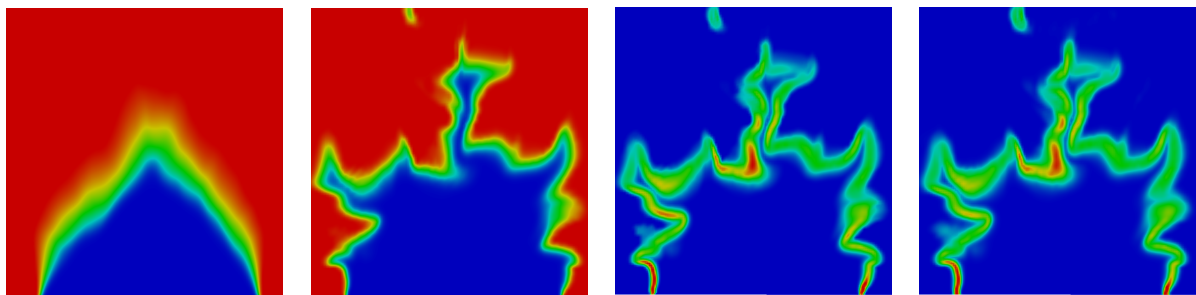
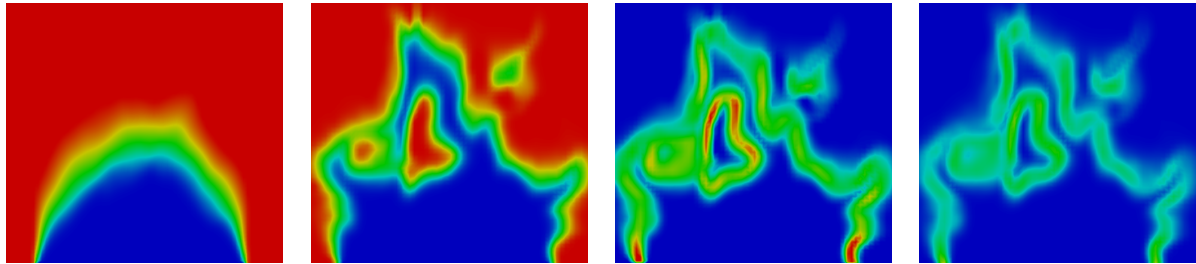


Abbildung 8.22: Einfluss der Filterweite auf die Zeit gemittelte $\langle \bar{c} \rangle$ und die instantane Flammenoberfläche \tilde{c} , die Flammenoberflächendichte Σ und die aufgelöste Flammenoberflächendichte $|\nabla \tilde{c}|$; a) Fall 5A ; b) Fall 5C; vgl. Tab. 8.2 und Tab. 8.3 zur Fallbezeichnung

bulente Flamme von ca. 6 Zellen unabhängig von der Filterweite A und C aufgelöst. Bei der größten Filterweite A ist die aufgelöste Flammenoberfläche deutlich glatter, im Vergleich zu der stärker gefalteten Flamme mit kleinerer Filterweite. Obwohl die instantane Flamme bei Filterweite C deutlich dünner verglichen mit der bei Filterweite A ist, zeigen die Zeit gemittelten turbulenten Flammendicken eine gute Übereinstimmung und δ_t , zeitlich gemittelt, kann als näherungsweise unabhängig von der Filterweite betrachtet werden. $|\nabla \tilde{c}|$ wird hier als Indikator für die aufgelöste Flammenoberflächendichte interpretiert. Für den Fall 5 in Abbildung 8.22 zeigt sich, dass Σ und $|\nabla \tilde{c}|$ im selben Wertebereich verlaufen was bestätigt, dass die Flammenfaltung hoch aufgelöst ist. Da die instantane Flamme für den Fall 5C deutlich dünner ist, als die Flamme 5A, werden bei kleinerer Filterweite größere Gradienten von \tilde{c} berechnet. Abweichungen in der aufgelösten FSD zwischen Fall A und C

a)



b)

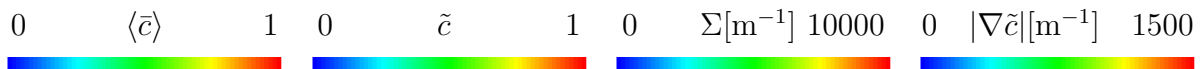
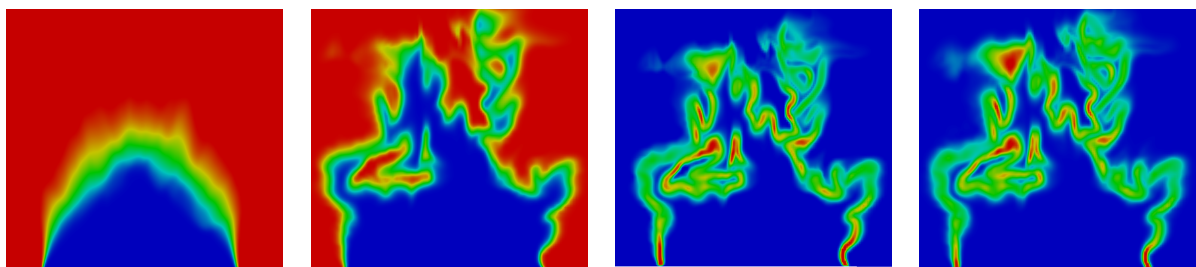


Abbildung 8.23: Einfluss der Filterweite auf die Zeit gemittelte $\langle \bar{c} \rangle$ und die instantane Flammenoberfläche \tilde{c} , die Flammenoberflächendichte Σ und die aufgelöste Flammenoberflächendichte $|\nabla \tilde{c}|$; a) Fall 16A ; b) Fall 16C; vgl. Tab. 8.2 und Tab. 8.3 zur Fallbezeichnung

werden durch einen größeren Einfluss des FSD Modells bei Fall A verringert. Da Σ bei Filterweite A einen größeren räumlichen Bereich abdeckt, ergibt die Berechnung der gesamten Flammenoberfläche $S_{tot} = \int_{\Omega_V} \Sigma dV$ die in Abbildung 8.19 festgestellte Unabhängigkeit der Flammenoberfläche von der Filterweite.

Die selben Beobachtungen sind auch für die Flamme mit großem Einfluss des Verbrennungsmodells, dargestellt in Abbildung 8.23, gültig. Während der Wertebereich für die aufgelöste Flammenfront $|\nabla \tilde{c}|$ im Vergleich mit Fall 5 in etwa konstant bleibt, ist die Flammenoberflächendichte auf Feinstrukturebene um eine Größenordnung höher. Dies bestätigt, dass für Fall 16 ca. 10% der Flammenoberfläche aufgelöst werden. Die etwas größeren Werte von $|\nabla \tilde{c}|$ bei Fall 16 verglichen mit Fall 5 in Abbildung 8.22 ergeben sich aus einem etwas größeren Turbulenzniveau bei Fall 16, vgl. Tabelle 8.3. Erneut zeigt sich, dass die FSD und $|\nabla \tilde{c}|$ mit abnehmender Filterweite viel schärfer abgebildet werden. Die großen Unterschiede von $|\nabla \tilde{c}|$ bei den unterschiedlichen Filterweiten, können durch das Modell für die Feinstrukturflammenfaltung Σ ausgeglichen werden. Zusammen mit der breiteren Flammenfläche, ergibt sich auch hier die in Abbildung 8.19 gezeigte konstante totale Flammenoberfläche.

8.3.4 Untersuchung der turbulenten Flammengeschwindigkeit

Experiment und Simulation werden hinsichtlich der turbulenten Flammengeschwindigkeit verglichen, die wie in Abschnitt 8.3.1 beschrieben, aus dem Winkel der Flammenfront gegenüber der Rotationsachse berechnet wird. Kobayashi et al. [93] vergleichen diese Methode mit einer Auswertung unter Berücksichtigung der gesamten Flammenform und stellen nur geringe Unterschiede fest. Hier wird zunächst untersucht, inwieweit die ausgewertete turbulente Flammengeschwindigkeit aus der Simulation sensitiv gegenüber der Auswertemethode ist.

Vergleich der Methoden zur Bestimmung der turbulenten Flammengeschwindigkeit

Methode 1 entspricht der Auswertemethode von Kobayashi et al. [88,91,94] in Gleichung (8.13). Wie in Abschnitt 8.3.1 beschrieben, kann die turbulente Flammengeschwindigkeit anhand des Winkels der Zeit gemittelten Flammenfront zur Rotationsachse bestimmt werden. Im Experiment ist die Flammenfront als $\langle \bar{c} \rangle = 0,5$ definiert. In der Simulation werden 10 Durchströmzeiten simuliert um eine Zeit gemittelte Flammenfront zu erhalten. Eine zusätzliche Umfangsmittelung wird angewandt um die Statistik zu erhöhen. Da in der Simulation \bar{c} berechnet wird, muss über Gleichung (5.6) die Favre gemittelte Flammenfront in eine Reynolds gemittelte Flammenfront überführt werden. Der Verlauf der Isolinie $\bar{c} = 0,5$ wird schließlich über eine lineare Regression bestimmt. Wie im Experiment wird die Flammenspitze sowie der Bereich der Flamme am Einlass, hier definiert als 10% der Flammenlänge vernachlässigt.

Methode 2 wird beschrieben von Peters [128] und berücksichtigt die gesamte Flammenoberfläche:

$$s_t = U \frac{A_{inlet}}{A_{mean,c}} \quad (8.18)$$

Wie bei Methode 1, Gleichung (8.13), bezeichnet U die mittlere Geschwindigkeit am Einlass. A_{inlet} ist die Querschnittsfläche am Einlass und $A_{mean,c}$ bezeichnet die gemittelte Flammenoberfläche bei einem bestimmten Wert von $\langle \bar{c} \rangle$. Griebel et al. [67] verwenden $\langle \bar{c} \rangle = 0,05$ und argumentieren, dass an dieser Position die Dichte des unverbrannten Gases nur geringfügig durch den Verbrennungsprozess beeinflusst wird. Für eine bessere Vergleichbarkeit zwischen den Auswertemethoden wird hier $A_{mean,c}$ bei $\langle \bar{c} \rangle = 0,5$ verwendet. Zur Berechnung von $A_{mean,c}$ wird aus den Simulationsdaten eine Zeit- und Umfang gemittelte 2-D Flammenfront generiert, für die Rotationssymmetrie angenommen wird.

Methode 3: Damköhler [42] folgend, kann das Verhältnis von turbulenter zu laminarer Flammengeschwindigkeit über $s_t/s_L^0 = A_t/A$ beschrieben werden. In der Simulation kann dies ausgewertet werden über:

$$\frac{s_t}{s_L^0} = \frac{\int_{\Omega_V} \Sigma \, dV}{A_{mean,c}} \quad (8.19)$$

wobei erneut $A_{mean,c}$ bei $\langle \bar{c} \rangle = 0,5$ zum besseren Vergleich der Auswertemethoden gewählt wird.

Methode 4: Die turbulente Flammengeschwindigkeit kann schließlich nur über numerische Daten berechnet werden. Zimont und Lipatnikov [163] beschreiben den Reaktionsquellterm entsprechend Gleichung (5.10) über $\bar{\omega}_c = \rho_u s_t |\nabla \bar{c}|$. Integriert man diesen Ausdruck über den Ort Ω_V und nimmt eine einheitliche turbulente Flammengeschwindigkeit an, führt dies zu:

$$\int_{\Omega_V} \bar{\omega}_c dV = \rho_u s_t \int_{\Omega_V} |\nabla \bar{c}| dV \quad (8.20)$$

Damit muss kein geometrischer Verlauf der Flammenfront ausgewertet werden. Ähnlich zu Methode 1 wird bei der Integration der Bereich der Flammenspitze und der Einlassbereich vernachlässigt. Modelliert man den Reaktionsquellterm über eine FSD Formulierung und verwendet man Zeit gemittelte Größen, wird Gleichung (8.20) zu:

$$s_t = \frac{\int_{\Omega_V} \langle \rho_u s_L \Sigma \rangle dV}{\rho_u \int_{\Omega_V} |\nabla \langle \bar{c} \rangle| dV} \quad (8.21)$$

bzw. zu $s_t/s_L^0 = \langle S_{total} \rangle / \langle S_{res} \rangle$ wenn man s_L als ungestörte Flammengeschwindigkeit beschreibt. Diese Methode unterschätzt damit die s_t/s_L^0 -Werte wenn, wie in dieser Arbeit der Einfluss von Streckeffekten auf die laminare Flammengeschwindigkeit berücksichtigt wird. Deshalb muss für diese Methode eine über die Flammenfront gemittelte laminare Flammengeschwindigkeit $\langle s_L \rangle_A$ ausgewertet werden, um s_t zu entdimensionieren.

Die turbulente Flammengeschwindigkeit für die Fälle 2 - 9 bei Filterweite A mit den Methoden 1-4 ausgewertet, zeigt Abbildung 8.24. Die Werte von s_t sind nur wenig sensitiv

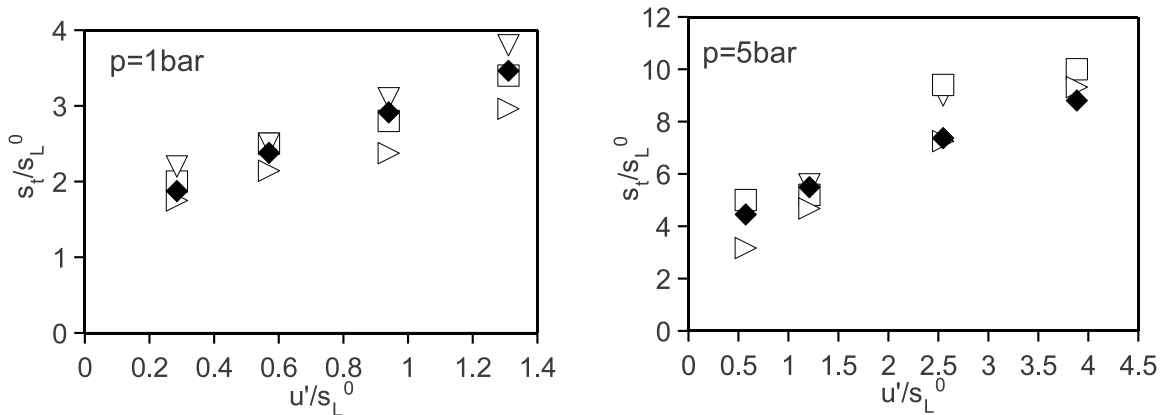


Abbildung 8.24: Vergleich der verschiedenen Auswertemethoden für s_t bei Filterweite A; Methode 1 (schwarze Raute); Methode 2 (weißes Dreieck unten); Methode 3 (weißes Quadrat); Methode 4 (weißes Dreieck rechts)

gegenüber der Auswertemethode. Die Methoden 2 und 3 zeigen bei zunehmender turbulenter Reynolds Zahl etwas größere Werte, was darauf hindeuten könnte, dass bei moderat

turbulenten Flammen eine lineare Approximation eine zu starke Vereinfachung darstellt. Nachdem Kobayashi et al. [88,91,94] zur Auswertung der experimentellen Daten Methode 1 verwenden, wird auch in der Auswertung der Simulationen die linearisierte Flammenfront zur Berechnung von s_t verwendet.

Vergleich mit experimentellen Daten

Der Vergleich der turbulenten Flammengeschwindigkeiten aus der LES mit dem Experiment ist in Abbildung 8.25 dargestellt. Simuliert werden die Fälle 1 - 16 mit den Filterweiten A und B. Jeweils ein Betriebspunkt pro Druckniveau, Fall 5, Fall 8, Fall 13 und Fall 16 werden unter Verwendung der kleinsten Filterweite C simuliert. Das neue Verbren-

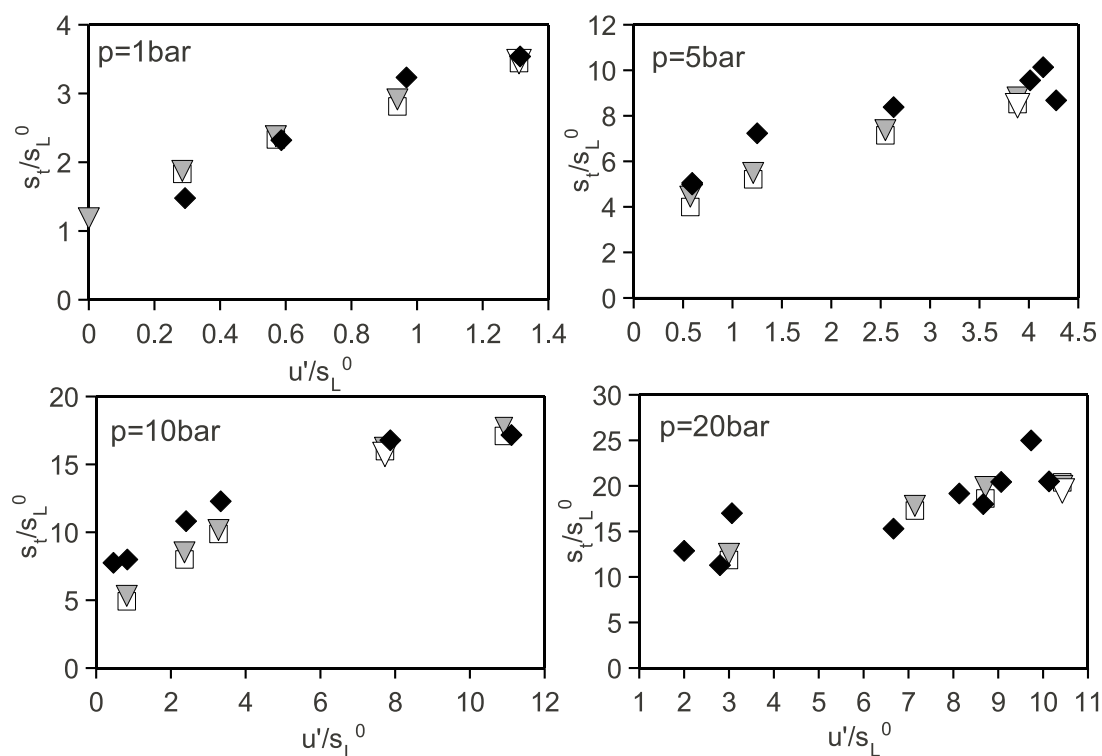


Abbildung 8.25: Vergleich von s_t simuliert bei drei unterschiedlichen Filterweiten mit Methan als Brennstoff; Experiment (schwarze Raute); Filterweite A (graues Dreieck); Filterweite B (weißes Viereck); Filterweite C (weißes Dreieck)

nungsmodell kann den Verlauf der turbulenten Flammengeschwindigkeit über einen großen Druck- und Turbulenzbereich dem Experiment entsprechend wiedergeben, ohne Anpassung der Modellkonstanten. Bei 10bar und geringem Turbulenzniveau wird die experimentelle turbulente Flammengeschwindigkeit leicht unterschätzt. Die s_t -Daten bei $u'/s_L^0 > 8$ sowie einem Umgebungsdruck von 10bar und 20bar zeigen, dass aufgrund der Limitierung von ϵ_i und D die Simulation ein "Bending" des s_t Verlaufs mit zunehmendem u' vorhersagen kann. Konsistent mit Abbildung 8.19 zeigt Abbildung 8.25, dass die simulierte turbulente

Flammengeschwindigkeit unabhängig von der Filterweite ist. Eine laminare Flamme wird bei 1bar Umgebungsdruck simuliert, in dem am Einlass keine Geschwindigkeitsfluktuationen vorgegeben werden sowie die Feinstruktur-turbulenz zu Null gesetzt wird. Anhand der selben Auswertemethode wie für die turbulente Flammengeschwindigkeit wird in Abbildung 8.25 gezeigt, dass die laminare Flammengeschwindigkeit um ca. 10% überschätzt wird. Da die 1-D Simulationen die exakte laminare Flammengeschwindigkeit reproduzieren können, werden die Abweichungen bei der 3D Simulation auf numerische Unsicherheiten, numerische Diffusion sowie Unsicherheiten in der Evaluierung zurückgeführt.

In Abbildung 8.26 wird überprüft, ob das Verbrennungsmodell die bereits bei der Formulierung des Verbrennungsmodells diskutierte Druckunabhängigkeit der turbulenten Flammengeschwindigkeit bei Methan-Luftgemischen wiedergeben kann. Die dargestellten nicht

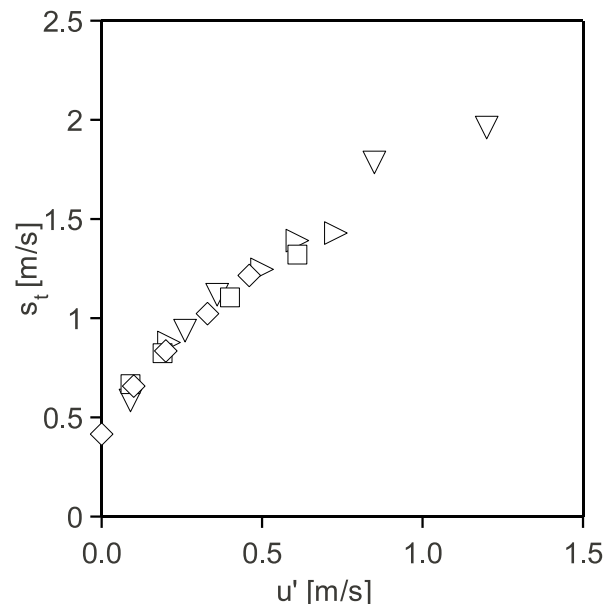


Abbildung 8.26: Turbulente Flammengeschwindigkeit über u' mit Filterweite A bei 4 unterschiedlichen Drücken und Methan als Brennstoff; 1bar (Raute); 5bar (Viereck) 10bar (Dreieck unten); 20bar (Dreieck rechts)

normierten s_t -Werte über u' für die Drücke 1 – 20bar können sehr gut durch eine einzige Linie approximiert werden und bestätigen die Eigenschaften des Modells eine Druck unabhängige turbulente Flammengeschwindigkeit für Methanflammen vorherzusagen.

LES mit Propan als Brennstoff werden durchgeführt, um die Eigenschaften des Verbrennungsmodells für einen zweiten Brennstoff zu evaluieren. Im Gegensatz zu Methan mit einer Lewis Zahl von $Le \approx 1$ weisen Propan-Luftgemische eine Lewis Zahl von $Le \approx 1,64$ auf. Für $Le > 1$ gilt, dass die Wärme der Verbrennungsreaktion schneller von der Flammenfront über Diffusion abgeführt wird, als durch die Speziesdiffusion Reaktionsenthalpie der Flammenfront zugeführt werden kann, vgl. Abschnitt 4.1.3. Damit sind bei Propan etwas größere stabilisierende TD-Effekte zu erwarten. Der stabilisierende Einfluss von TD-Effekten auf die laminare Flammengeschwindigkeit wird über die lineare Theorie, Gleichung (5.39) berücksichtigt. Einfluss stabilisierender TD-Effekte auf die turbulente Flammenfal-

8.3 Simulation einer turbulenten Bunsenbrennerflamme

tung sind nicht modelliert. Abbildung 8.27 zeigt den Vergleich der LES Ergebnisse mit den experimentellen Daten. Im Bereich geringer Turbulenz kann bei 1bar die turbulente Flam-

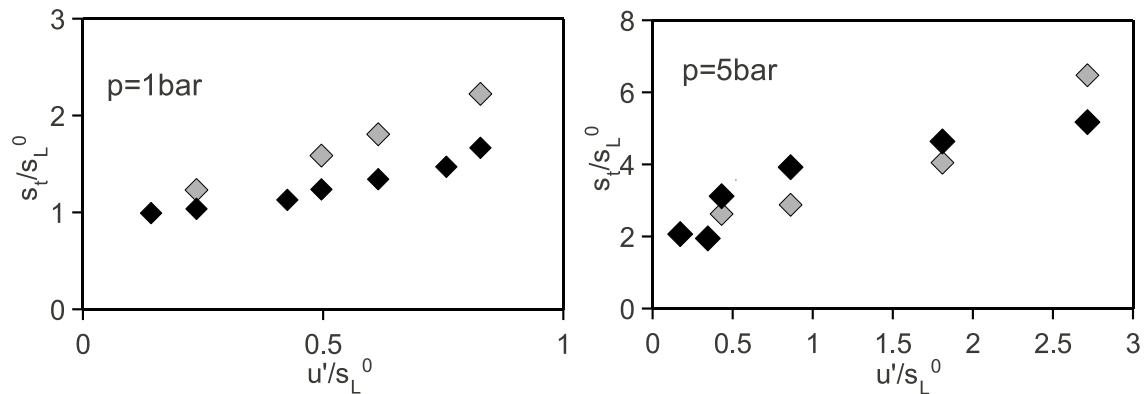


Abbildung 8.27: Vergleich von s_t über LES mit Filterweite A für Propan als Brennstoff; Experiment (schwarze Raute); Simulation (graue Raute)

mengeschwindigkeit der Simulation das Experiment gut wiedergeben. Mit zunehmender Turbulenz werden die experimentellen Daten überschätzt. Die Druckskalierung wird gut wiedergegeben und die Simulationsergebnisse zeigen eine gute Übereinstimmung bei 5bar und einem Turbulenzbereich von $0 < u'/s_L^0 < 2$. Die überschätzten turbulenten Flammengeschwindigkeiten bei höherem Turbulenzniveau könnten auf einen zusätzliche Modellierungsbedarf thermodynamischer Effekte auf die Feinstrukturflammenfaltung hinweisen.

Evaluierung weiterer LES Verbrennungsmodelle

Die Modelle von Hawkes et al. [75] und Fureby [56], vorgestellt in Kapitel 5.2.4, werden hier im Favre gefilterten Kontext implementiert, um das Verhalten weiterer fraktaler Verbrennungsmodelle zu testen. Die Simulationen werden mit Filterweite A durchgeführt, die verwendete Numerik ist entsprechend Kapitel 8.1.1. Die turbulente Flammengeschwindigkeit wird nach Methode 1 ausgewertet. Abbildung 8.28 zeigt die turbulente Flammengeschwindigkeit der Methan-Luft-Flammen für die Drücke 1bar und 5bar. Bei 1bar können die Verbrennungsmodelle die turbulente Flammengeschwindigkeit gut reproduzieren. Bei 5bar werden die turbulenten Flammengeschwindigkeiten des Experiments von diesen Modellen deutlich unterschätzt. Damit unterschätzen die Verbrennungsmodelle den Einfluss der Flammenfaltung auf Feinstrukturebene bei geringer Turbulenz. Die Analyse der Feinstrukturflammenfaltung, $s_{t,\Delta}/s_L^0 = \Xi = \Sigma/|\nabla\tilde{c}|$, erlaubt eine algebraische Evaluierung der Modelle von Fureby [56], Hawkes et al. [75] und des in dieser Arbeit entwickelten Modells³, bezüglich ihres Einflusses von Druck und Turbulenz. Exemplarisch wird der Fall 8, 5bar mit einer turbulenten Schwankung von $u' = 0,61\text{m/s}$, vgl. Tabelle 8.3, betrachtet. Geht man von homogener, isotroper Turbulenz sowie 80% aufgelöster turbulenter kinetischer Energie aus, so entspricht dies einer turbulente Schwankung innerhalb der Filterweite von

³aus Gleichung (5.21) und ($\tilde{c} = 0,5$) für das neue Modell, reduzieren sich alle drei Modell zu $s_t/s_L^0 = (\epsilon_0/\epsilon_i)^{D-2}$

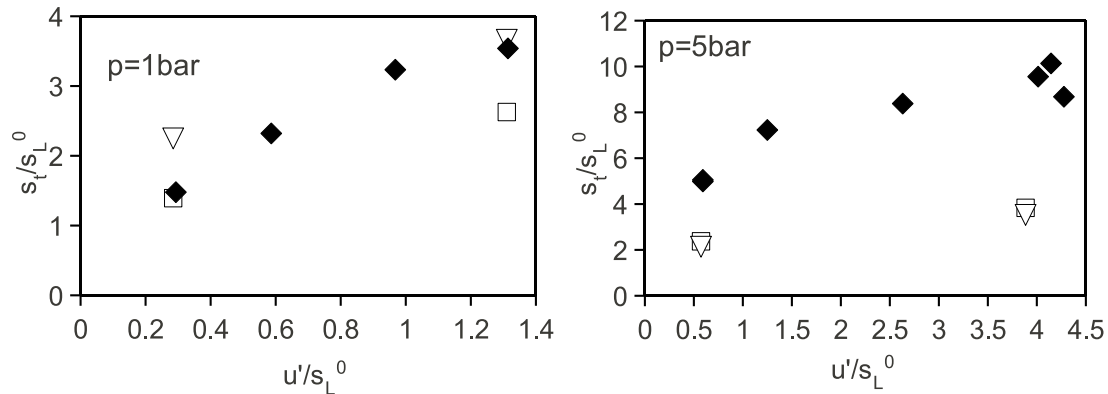


Abbildung 8.28: Vergleich von s_t aus der Simulation mit dem Modell von Fureby [56] und Hawkes et al. [75] mit Filterweite A und Methan als Brennstoff mit dem Experiment; Experiment (schwarze Raute); Fureby (weißes Dreieck); Hawkes (weißes Viereck)

$u'_\Delta \approx 0,27m/s$. Bei Auflösung A, mit einer Filterweite von $\Delta \approx 0,45mm$, lässt sich $s_{t,\Delta}/s_L^0$ in Abbildung 8.29 auftragen.

Obwohl dieser Abschätzung zu Folge für Fall 8 A eine turbulente Feinstruktur Reynolds

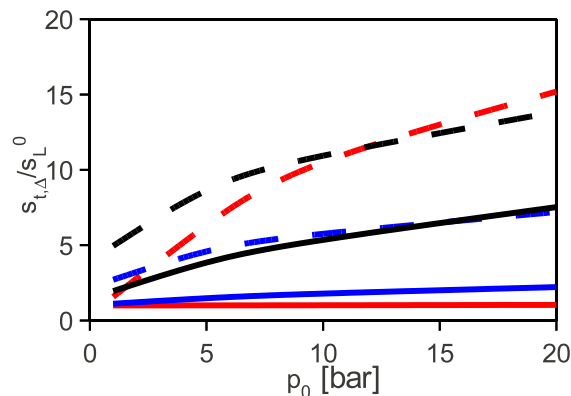


Abbildung 8.29: Vergleich der Vorhersage von s_t/s_L^0 über dem Druck; neues Modell (schwarz); Fureby (blau); Hawkes (rot); $u'_\Delta = 0,27m/s$ (durchgezogene Linie); $u'_\Delta = 3m/s$ (gestrichelte Linie)

Zahl von $Re_\Delta \approx 40$ vorliegt, beschreiben die Modelle von Hawkes und Fureby kaum einen Einfluss der Feinstrukturhaltung, während das in dieser Arbeit formulierte Modell bereits einen deutlichen Einfluss beschreibt. Die zweite Abschätzung in Abbildung 8.29 zeigt einen Fall mit $u'_\Delta = 3m/s$, mit $\Delta = 0,45mm$, der einen Betriebspunkt typisch für die Verbrennung in stationären Gasturbinen beschreibt. Hier weist das Modell von Hawkes et al. [75], einen deutlichen Einfluss der Feinstrukturhaltung auf, der auch die Vorhersage des neuen Modells übertrifft. Abbildung 8.29 deutet an, dass die Modelle von Hawkes und Fureby bei hoher nicht aufgelöster turbulenter Schwankung die Feinstrukturhaltung gut wiedergeben können, bei moderater turbulenter Reynolds Zahl aufgrund hohen Drucks bei geringer

turbulenter Schwankung, wird die nicht aufgelöste Faltung der Flamme unterschätzt. Die Gegenüberstellung von Experiment und Simulation für Propan als Brennstoff simuliert mit den Modellen von Fureby und Hawkes zeigt die Abbildung 8.30. Bei 1bar zeigt sich

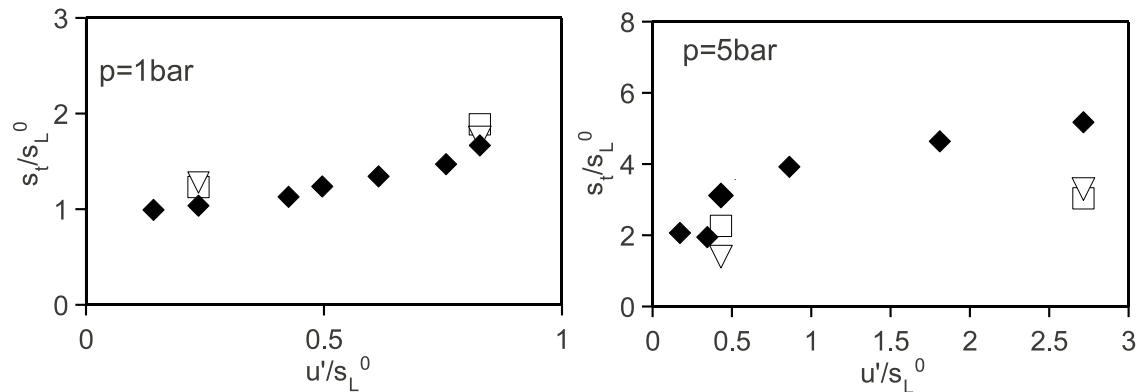


Abbildung 8.30: Vergleich von s_t aus der Simulation mit dem Modell von Fureby [56] und Hawkes et al. [75] mit Filterweite A und Propan als Brennstoff mit dem Experiment; Experiment (schwarze Raute); Fureby (weißes Dreieck); Hawkes (weißes Viereck)

eine hervorragende Übereinstimmung, während das neue Modell hier den Einfluss der Feinstruktur Flammenfaltung (Abbildung 8.27) überschätzt. Die Druckskalierung bei 5bar und geringer Turbulenz kann gut wiedergegeben werden. Allerdings unterschätzen die Modelle von Hawkes und Fureby die turbulente Flammgeschwindigkeit bei 5bar und $u'/s_L^0 = 2,6$.

8.3.5 Bewertung des neuen FSD Modells

Fasst man die Erkenntnisse der Abschnitte 8.3.3 und 8.3.4 zusammen, weist die LES-Implementierung des Verbrennungsmodells in OpenFOAM® folgende Eigenschaften auf:

- Die laminare Flammgeschwindigkeit wird um 10% überschätzt was auf Unsicherheiten in der Auswertemethode zurückgeführt werden kann.
- Bei hohem Druck beschreibt das Modell einen deutlichen Einfluss der Feinstrukturfaltung und kann die Druckskalierung bei geringer turbulenter Schwankung sehr gut wiedergeben.
- Aufgrund der Limitierung von ϵ_i und D kann ein “Bending” im Verlauf von s_t über u' vorhergesagt werden.
- In Kombination mit der verwendeten Numerik ist die totale Flammenoberfläche unabhängig von der Filterweite.
- Bei Propan als Brennstoff wird bei höherer Turbulenz die Reaktionsrate überschätzt und verlangt möglicherweise die Berücksichtigung von Le Zahl Effekten auf die Flammenfaltung.

8.3.6 Untersuchung des Einflusses von LD- und TD-Instabilitäten

Da hydrodynamische Instabilitäten bei hohem Druck und geringer Deformationsrate auftreten können, werden Fall 2, Fall 6 und Fall 10 mit Filterweite A, vgl. Tabelle 8.3, hinsichtlich dem in Gleichung (7.10) vorgeschlagenen Kriterium auf das potentielle Auftreten hydrodynamischer Instabilitäten hin untersucht. Ausgewertet wird dabei während der Simulation die Oberflächen gemittelte Deformationsrate der Flammenfront, definiert als $\tilde{c} = 0,5$. Kenngrößen die hydrodynamische Instabilitäten charakterisieren sowie die Auswertung der Oberflächen gemittelter Deformationsrate $\langle \kappa_s \rangle_s$ sind in Tabelle 8.5 zusammengefasst. Die Markstein Zahl der Deformationsrate die zur Auswertung von Gleichung (7.10)

Fall	$p[\text{bar}]$	u'/s_L^0	Ma_s	$\kappa_{s,cl}[\text{s}^{-1}]$	$\langle \kappa_s \rangle_s[\text{s}^{-1}]$
2	1	0,29	-3,7	26	590
6	5	0,6	-10	56	580
10	10	0,8	-11	67	600

Tabelle 8.5: Charakteristische Größen für Einsetzen von Instabilitäten

benötigt wird, ist Gu et al. [68] entnommen. Trotz der geringen Turbulenz $u'/s_L^0 < 1$ liegt die Oberflächen gemittelte Deformationsrate um eine Größenordnung oberhalb der kritischen Deformationsrate für Instabilitäten $\kappa_{s,cl}$. Das in dieser Arbeit vorgeschlagene Stabilitätskriterium beschreibt damit das Unterdrücken von hydrodynamischen Instabilitäten. Dies stimmt mit den Ergebnissen von Kobayashi et al. [89] überein, in denen für die Fälle 2, 6, 10 kein Zusammenhang der kleinsten Faltungslänge mit instabilen Längenmaßen aus Dispersionsrelationen festgestellt wird. Die unterdrückte Instabilität kann zudem in der geringen Ausdehnung der Bunsenbrennerflamme begründet sein, da in Gu et al. bei laminarer stöchiometrischer Verbrennung bei 5bar und 10bar erst ab einem Radius von $r_u \approx 40\text{mm}$ Instabilitäten beobachtet werden und die turbulente Flamme von Fall 10 eine Länge von $\approx 40\text{mm}$ aufweist. Abbildung 8.31 illustriert den Verlauf der Deformationsrate auf der Flammenoberfläche $\tilde{c} = 0,5$ für die Fälle 2, 6 und 10. Obwohl die Flammenfront Bereiche mit einer Deformationsrate von $\kappa_s \approx 0$ aufweist, ist ein großer Bereich der Flammenfront durch Deformationsraten der Größenordnung $\mathcal{O}(2)$ dominiert und unterdrückt damit hydrodynamische Instabilitäten.

8.3 Simulation einer turbulenten Bunsenbrennerflamme

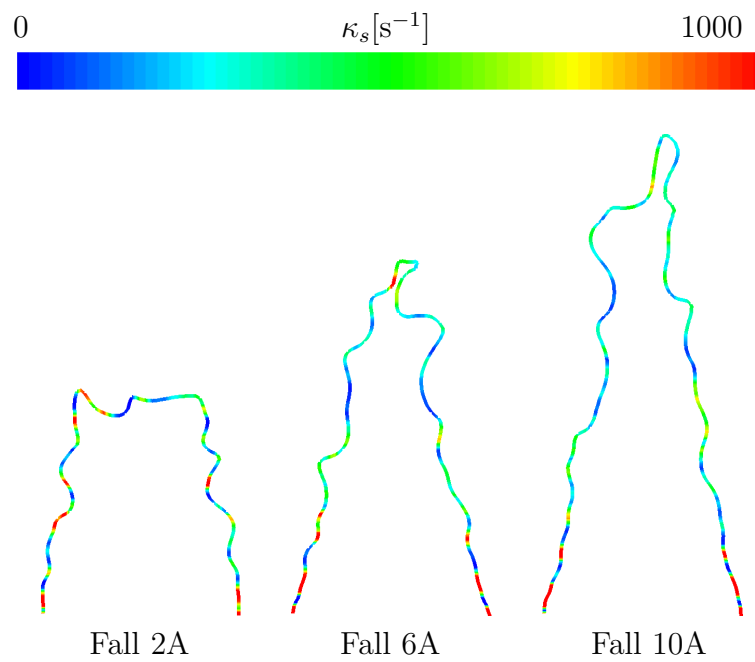


Abbildung 8.31: Instantane Flammenfront mit der Deformationsrate als Kontur der Fälle 2, 6 und 10

8.4 Simulation einer turbulenten Jetflamme

Der Brenner des Paul Scherrer Instituts entspricht einer Jetflamme in einer Hochdruckbrennkammer. Während das Verbrennungsregime der Kobayashi Flamme einer ottomotorischen Verbrennung entsprechen, ermöglicht der PSI Brenner die Evaluierung des Verbrennungsmodells für Betriebsbedingungen, die die Verbrennung in einer stationären Gasturbine abbilden. Als experimentelle Daten steht die gesamte Flammenform zur Verfügung sowie Geschwindigkeitsverläufe und die turbulenten Schwankungen.

Der PSI-Brenner wurde bereits zur Modellevaluierung im LES-Kontext von Duwig et al. [49,50] und Durand [48] und im RANS-Kontext von Dinckelacker et al. [45] untersucht.

8.4.1 Beschreibung des Experiments

Der Brenner wurde experimentell von Griebel et al. [65–67] und Siewert [143] untersucht. Den experimentellen Aufbau, der Dissertation von Siewert [143] entnommen, zeigt Abbildung 8.32. Die zylindrische Hochdruckkammer hat einen Durchmesser von 75mm und eine

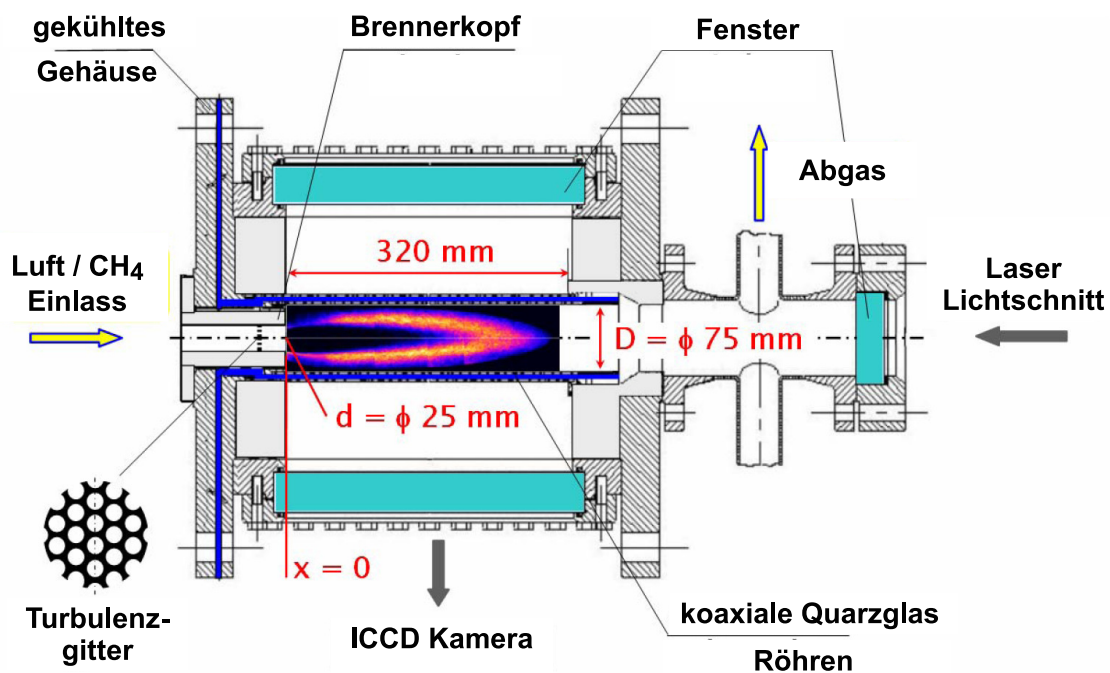


Abbildung 8.32: Experimenteller Aufbau des PSI Brenners, Siewert [143] entnommen

Länge von 320mm . $10\text{mm} - 120\text{mm}$ stromauf der Düse zur Brennkammer (Durchmesser 25mm) können Turbulenzgitter montiert werden, um das Turbulenzniveau zu variieren. Der Brenner erlaubt Drücke bis 30bar und eine thermische Leistung von 400kW . Die Temperatur am Einlass kann bis zu 823K vorgeheizt werden. Particle Image Velocimetry (PIV) mit einer physikalischen Auflösung von $0,21\text{mm}/\text{Pixel}$ wird verwendet, um das turbulente Längenmaß, die turbulente Schwankung und das Geschwindigkeitsfeld in der Brennkammer zu untersuchen. Nach der Zündung stabilisiert sich die Flamme durch die Rezirkulation

heißer Produkte die sich aufgrund der plötzlichen Querschnittserweiterung am Eintritt zur Brennkammer ausbildet. Mittels OH-Planar Laser Induced Fluorescence (OH-PLIF) Messtechnik, bei einer Auflösung von $0,5\text{mm}$, wird die Flamme untersucht. Aus den instantanen OH-PLIF Bildern wird im Postprocessing ein binäres Bild erzeugt, wobei eine OH-Intensität von $6 - 20\%$ der maximalen OH-Intensität als Flammenfront definiert wird. Aus 800 Bildern der instantanen Flammenfront wird eine gemittelte Flammenform errechnet. Die Anzahl der Flammenfrontdetektionen beschreibt die Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Flammenfront. Eine ausführliche Beschreibung der Messtechnik, den Auswerterroutinen sowie eine Gegenüberstellung von OH-Chemilumineszenz und OH-PLIF ist in Siewert [143] zu finden.

In den Arbeiten von Griebel et al. [65–67] und Siewert [143] wird als Reaktant ein perfekt vorgemischtes Methan-Luft Gemisch mit einem Äquivalenzverhältnis von $\Phi = 0,43$, $\Phi = 0,5$ und $\Phi = 0,56$ verwendet. Das integrale Längenmaß beträgt $1,8\text{mm} < l_t < 3,4\text{mm}$, die turbulente Intensität am Einlass wird zu $8,1\% < I < 15,4\%$ bestimmt.

8.4.2 Modellierung und Simulation

Rechengebiet

Das Rechengebiet beginnt nach dem Turbulenzgitter und umfasst die gesamte Brennkammer. Abbildung 8.33 zeigt das Prinzip der Vernetzung in radialer und azimuthaler Richtung sowie die instantane Flammenfront im Rechengebiet. Die Brennkammer ist in axialer

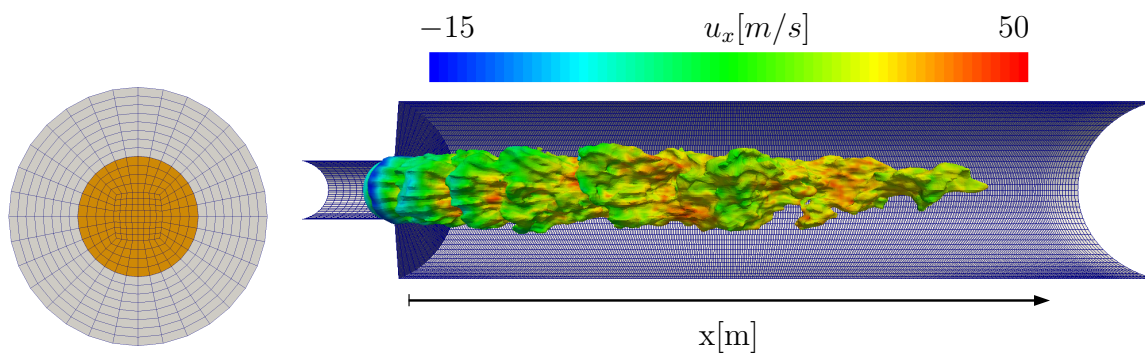


Abbildung 8.33: links: Prinzip der Vernetzung in radialer und azimuthaler Richtung; rechts: Rechengebiet mit instantaner Flammenfront, Axialgeschwindigkeit als Konturplot

Richtung mit 366, in radialer Richtung mit 75 und in Umfangsrichtung mit 80 Hexaedern vernetzt. Das Rohr vor der Brennkammer ist in Hauptströmungsrichtung mit 21 Hexaedern und 25 bzw. 80 Hexaedern in radialer- und Umfangsrichtung aufgelöst. Das gesamte Rechengebiet ist mit $2,1 \cdot 10^6$ Hexaedern diskretisiert. Die Filterweite im Kernbereich der Strömung beträgt $\Delta \approx 6,5 \cdot 10^{-4}\text{m}$ und in der Scherschicht $\Delta \approx 7,5 \cdot 10^{-4}\text{m}$. Die Filterweite ist damit deutlich kleiner als das integrale Längenmaß, und befindet sich im fraktalen Bereich der Flamme.

Randbedingungen und Diskretisierung

Entsprechend der Einlassrandbedingung zur Simulation der Kobayashi Datenbank, vgl. Seite 100, wird am Einlass das vom Turbulenzgenerator nach Kempf et al. [81] generierte Geschwindigkeitsfeld vorgegeben. Von Neumann Randbedingung für die Geschwindigkeit wird am Auslass vorgegeben. Entsprechend [48] wird die Temperatur an der Brennkammerwand zu $T_w = T_u$ gesetzt. Für den Druck werden an allen Rändern von Neumann Randbedingungen, am Brennkammerauslass wird eine nicht reflektierende Randbedingung vorgegeben.

Die Diskretisierung entspricht der 1D-Simulation, Abschnitt 8.1.1.

Beschreibung Simulation

Basierend auf der Strömungsgeschwindigkeit am Einlass des unverbrannten Gemischs werden zur Ausbildung des Strömungsfeldes und zur Zeitmittelung je 10 Durchströmzeiten simuliert. Simuliert werden 2 Fälle mit $\Phi = 0,5$ und $\Phi = 0,56$ bei $p = 5\text{bar}$. Um die Druckunabhängigkeit der Modellvorhersage zu überprüfen, wird ein Fall bei $p = 1\text{bar}$ und $\Phi = 0,5$ simuliert. Neben dem in Kapitel 6 vorgeschlagenen neuen Modell, werden die Modelle von Fureby [56] und Hawkes et al. [75], im Favre gefilterten Kontext implementiert, zur Beschreibung der turbulenten Verbrennung verwendet. Zudem wird von einer adiabaten Verbrennung ausgegangen. Evaluiert werden die Modelle bezüglich der Flammenformen, Axialgeschwindigkeiten und der turbulenten Schwankung. Tabelle 8.6 fasst die für alle simulierten Fälle konstanten Daten des Strömungsfeldes zusammen. Tabelle 8.7 listet die

Brennstoff	$U[m/s]$	$u'[m/s]$	$l_t[mm]$	$T_u[K]$
CH_4	40	3,24	2,5	673

Tabelle 8.6: Daten des Strömungsfeldes der simulierten Fälle des PSI Brenners

simulierten Fälle und verbrennungsspezifischen Kenngrößen auf. Die Δ/l_F -Werte sind auf die Gitterweite in der Kernströmung bezogen. Das Regime Diagramm nach Peters in Ab-

Fall	$p[MPa]$	Φ	$s_L^0[m/s]$	$l_F \cdot 10^{-5}[m]$	Δ/l_F	Da	Ka	Re_d	Re_t
1	0,1	0,5	0,49	12	6,1	3,1	3,7	$16,1 \cdot 10^3$	130
2	0,5	0,5	0,23	5,4	13,6	3,3	7,8	$80,6 \cdot 10^3$	653
3	0,5	0,56	0,34	3,6	20,4	7,4	3,5	$80,6 \cdot 10^3$	653

Tabelle 8.7: Auflistung der simulierten Fälle mit verbrennungsspezifischen Kenngrößen des PSI Brenners

bildung 8.34 zeigt, dass sich die simulierten Fälle im Bereich der dünnen Reaktionszone befinden und damit zumindest die Reaktionszone noch die Struktur einer laminaren Flamme aufweist. Folgt man Driscoll [46] kann für die simulierten Fälle noch eine "flamelet" Struktur vorliegen, vgl. Kapitel 4.2.3. Die Auswertung der Klassifizierung auf der Flammenoberfläche in einem LES-Regime Diagramm nach Pitsch [132] zeigt Abbildung 8.35. Konsistent mit dem Regimediagramm nach Peters wird Fall 2 in dem LES-Diagramm dem

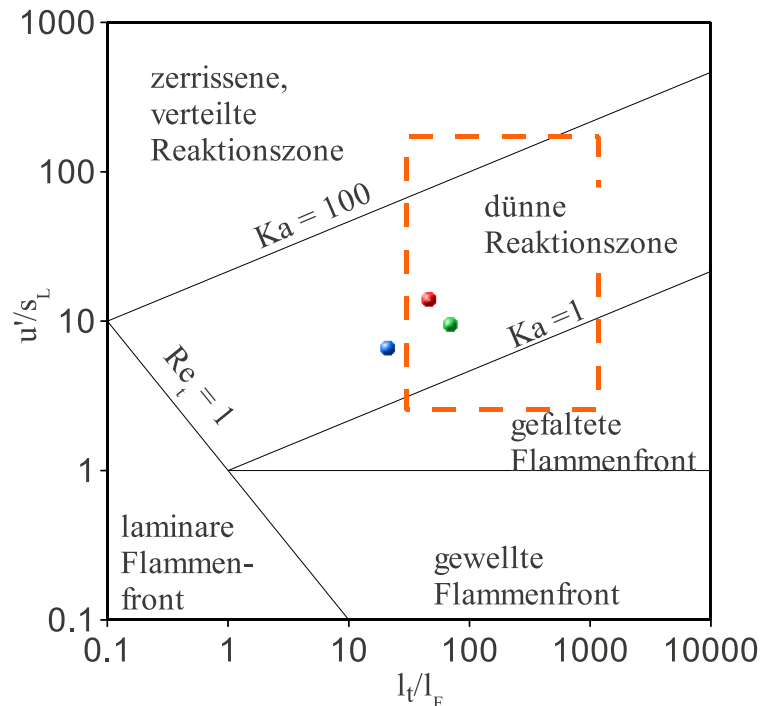


Abbildung 8.34: Zuordnung der Betriebspunkte der simulierten Fälle in das Regime-Diagramm nach Peters; Fall 1 (blau) Fall 2 (rot); Fall 3 (grün); orange Linie zeigt den Betriebsbereich stationärer Gasturbinen nach Hoffmann [77]

Regime der dünnen Reaktionszone zugeordnet. Der Hauptbereich von Fall 3, entsprechend Tabelle 8.7 liegt hier $Ka = 3,5$ vor, wird in dem LES-Diagramm dem gefalteten Flammenfront Regime zugeordnet. Unterschiede begründen sich darin, dass für das Peters-Diagramm globale Werte am Brenneinlass ausgewertet werden, während für das LES-Diagramm die Werte auf der Flammenfront ausgewertet werden, die für den Fall 3 bis zu 120mm stromab vom Einlass liegt. Einen Eindruck über die Korrelation der Karlovitz Zahl auf der Flammenfront $\tilde{c} = 0,5$ mit dem Radius und dem axialen Abstand vom Brenneinlass zeigt die Abbildungen 8.36. Am Brenneinlass liegt eine ausgeprägte Scherschicht vor, wodurch das Feinstrukturmodell hohe Werte von u'_Δ vorhersagt. In diesen Bereichen zeigt sich eine gute Übereinstimmung der Regimezuordnung in dem LES- und Peters Diagramm. Für $x/d > 2$ und $r/d < 0,4$ ist die Turbulenz nicht mehr durch die Scherschicht dominiert. In diesen Bereichen stellt sich eine nahezu konstante Karlovitz Zahl von $Ka_\Delta < 1$ ein.

8.4.3 Vergleich Simulation-Experiment

Vergleich der Flammenfronten

Eine Gegenüberstellung der instantanen Flammenfronten von Experiment und Simulation für den Fall 2 zeigt Abbildung 8.37. Das Experiment zeigt die OH Intensität sowie die binäre Abbildung zur Ermittlung der Flammenfront. Die Simulationsdaten zeigen die Kontur von

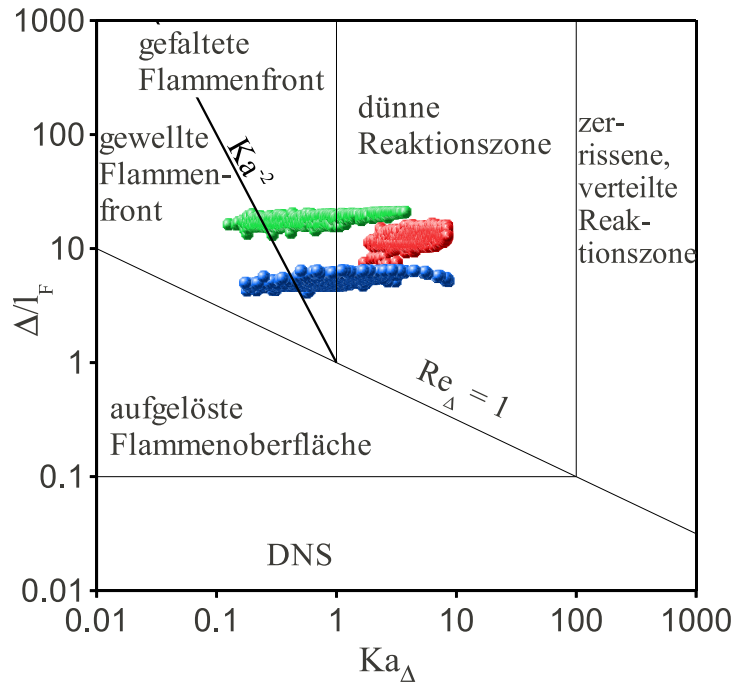
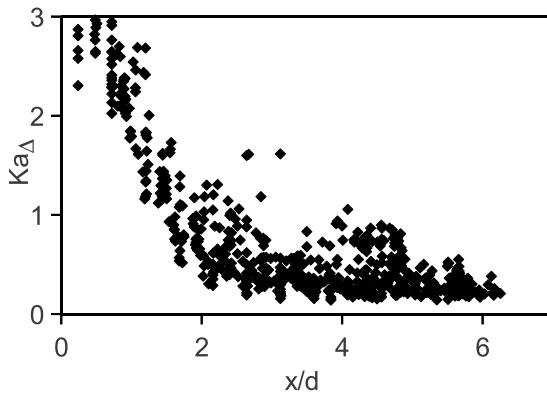


Abbildung 8.35: Auswertung der Fälle 1-3 in einem LES-Regime-Diagramm nach Pitsch [132]; Fall 1 (blau) Fall 2 (rot); Fall 3 (grün)

a)



b)

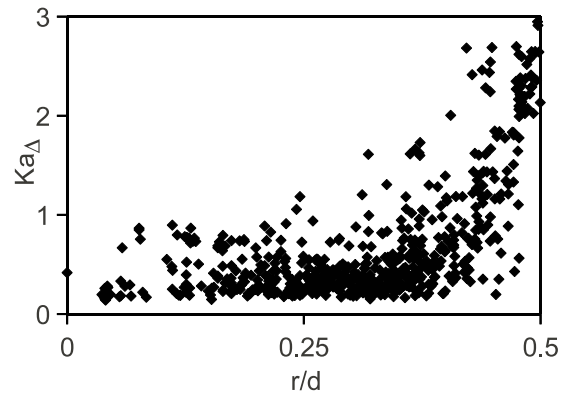


Abbildung 8.36: Abhängigkeit der Karlovitz Zahl Ka_{Δ} auf der Flammenoberfläche a) mit axialen Abstand von der Brennerdüse; b) mit radialen Abstand von der Rotationsachse

\bar{c} sowie die zugehörige binäre Abbildung mit $\bar{c} = 0,5$ als Indikator der Flammenfront. Die räumliche Ausdehnung der OH-Intensität ist in guter Übereinstimmung mit dem Reaktionsbereich der LES. Da die Auflösung im Experiment (Pixelgröße $0,210mm$) um Faktor 3, 5 größer als in der Simulation ist, zeigt die experimentelle, binäre Flammenstruktur eine

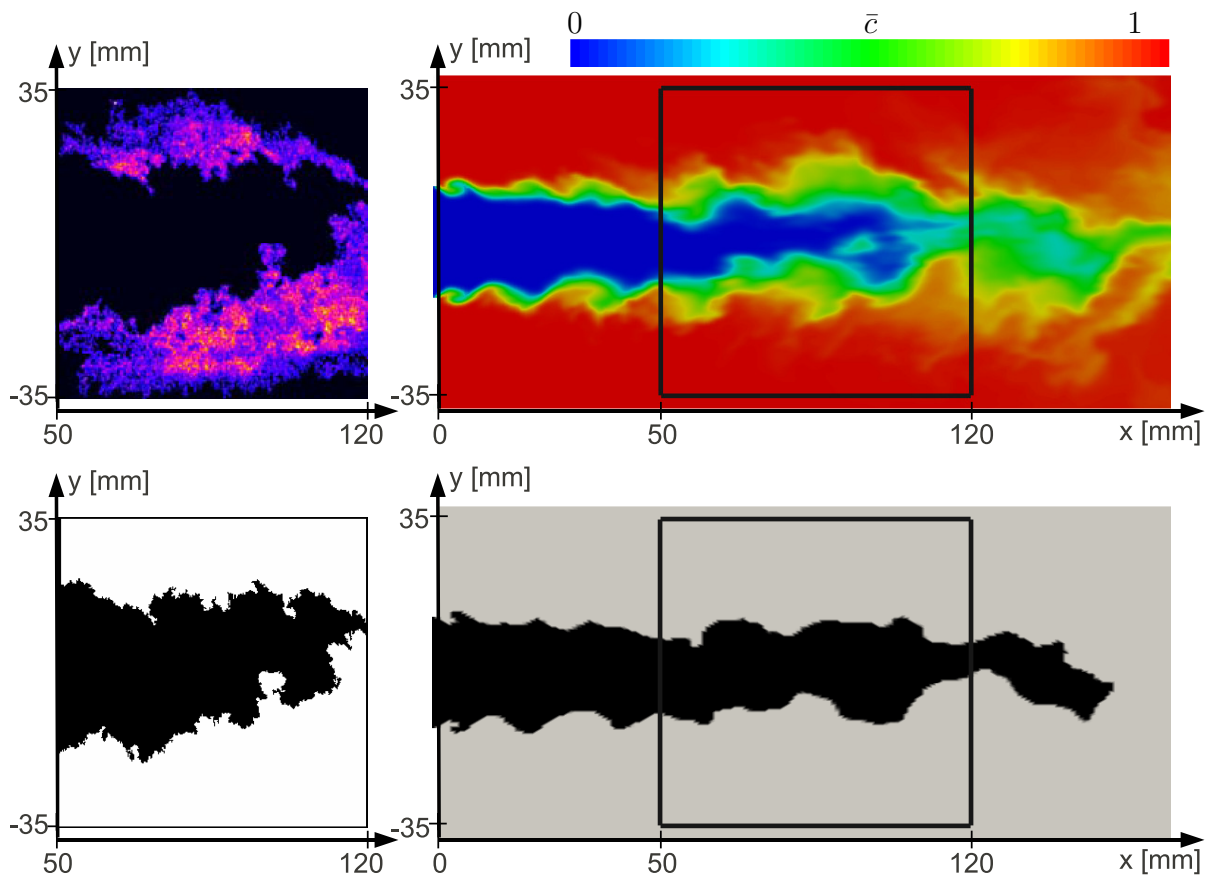


Abbildung 8.37: Gegenüberstellung experimenteller und simulierter instantaner Flammenfronten; links: Experiment, oben OH-PLIF unten binär; rechts: Simulation, oben \bar{c} unten binär

deutlich feiner gewinkelte Flammenfront, im Vergleich zur aufgelösten Flammenfront der Simulation.

Abbildung 8.38 stellt die zeitlich gemittelte Flammenfront bei Modellierung der Verbrennung mit dem neuen Verbrennungsmodell der experimentellen Flammenform für Fall 2 gegenüber. Zu beachten ist die leicht unsymmetrische Flammenform im Experiment, die sich bereits am Einlass zur Brennkammer ergibt. Die turbulente Flammenform ist in guter Übereinstimmung mit der experimentell ermittelten. Die Isolinie $\langle \bar{c} \rangle = 0,5$ und damit der Bereich größter Wahrscheinlichkeit der Flammenfront wird bei Fall 2 etwas weiter stromauf als im Experiment vorhergesagt. Das Wachstum der turbulenten Flammendicke unterschätzt etwas die experimentelle Flammenform. Die Gegenüberstellung der Zeit gemittelten Flammenfront bei einem Brennstoff-Luft Verhältnis von $\Phi = 0,56$ (Fall 3) in Abbildung 8.39 zeigt eine sehr gute Übereinstimmung der Isolinie $\langle \bar{c} \rangle = 0,5$. Die turbulente Flammendicke der Simulation unterschätzt jedoch die Ausdehnung der experimentellen Flammenform. Im Experiment wird bereits am Brennkammereinlass eine große Ausdehnung der Flamme detektiert, während in der Simulation ein Wachstum der turbulenten

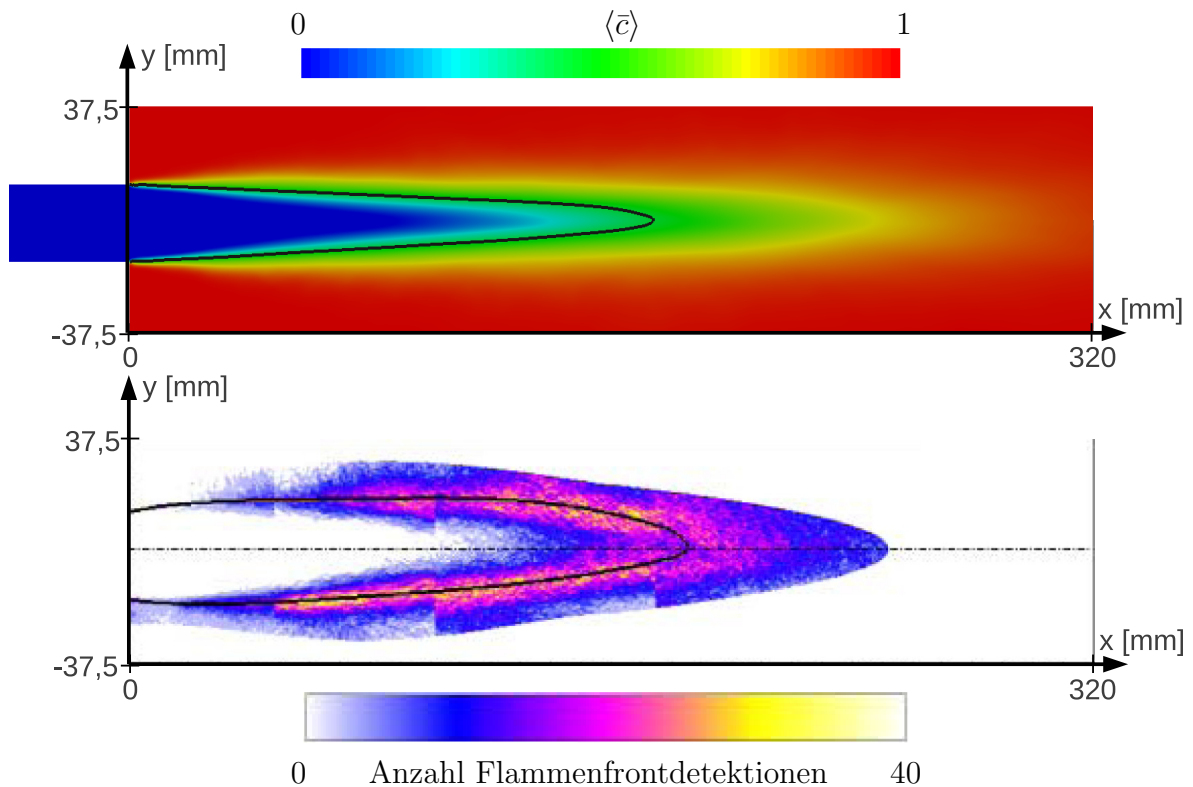


Abbildung 8.38: Gegenüberstellung der Flammenform von Experiment (unten) und Simulation (oben) mit neuem Modell für $\Phi = 0,5$

Flammendicke vorhergesagt wird. An der Flammenspitze zeigt sich allerdings eine sehr gute Übereinstimmung von Experiment und Simulation. Flammenfronten bei einem Umgebungsdruck $p = 1\text{bar}$ sind in [65–67, 143] nicht dargestellt, werden aber als Druck unabhängig beschrieben. Abbildung 8.40 stellt für $\Phi = 0,5$ an 5 unterschiedlichen axialen Positionen die vorhergesagten Flammenformen für 1bar und 5bar (Fall 1 und Fall 2) gegenüber. Die Auswertepositionen in der Brennkammer zeigt Abbildung 8.44. Für den 5bar Fall wird im allgemeinen eine etwas breitere turbulente Flammendicke vorhergesagt. Bis zur Position $x/d = 5$ ist kein Druckeinfluss festzustellen, während ab $x/d = 7$ für 5bar eine etwas geringere Reaktionsrate vorhergesagt wird und dadurch eine längere Flamme. Der Bereich größter Wahrscheinlichkeit der Flammenfront $\bar{c} = 0,5$ stimmen für einen großen Bereich sehr gut überein. Ab der Auswerteposition $x/d = 7$ wird bei 5bar eine etwas längere Flamme vorhergesagt. Die längere Flammenfront kann dadurch begründet werden, dass die in der Simulation verwendete laminare Brenngeschwindigkeit nicht exakt mit $s_L^0 \sim p^{-0,5}$ skaliert und für 5bar leicht unterschätzt wird. Möglicherweise überschätzt auch bei 5bar die lineare Theorie stärker den Einfluss von Streckeffekten auf die laminare Brenngeschwindigkeit als bei 1bar .

8.4 Simulation einer turbulenten Jetflamme

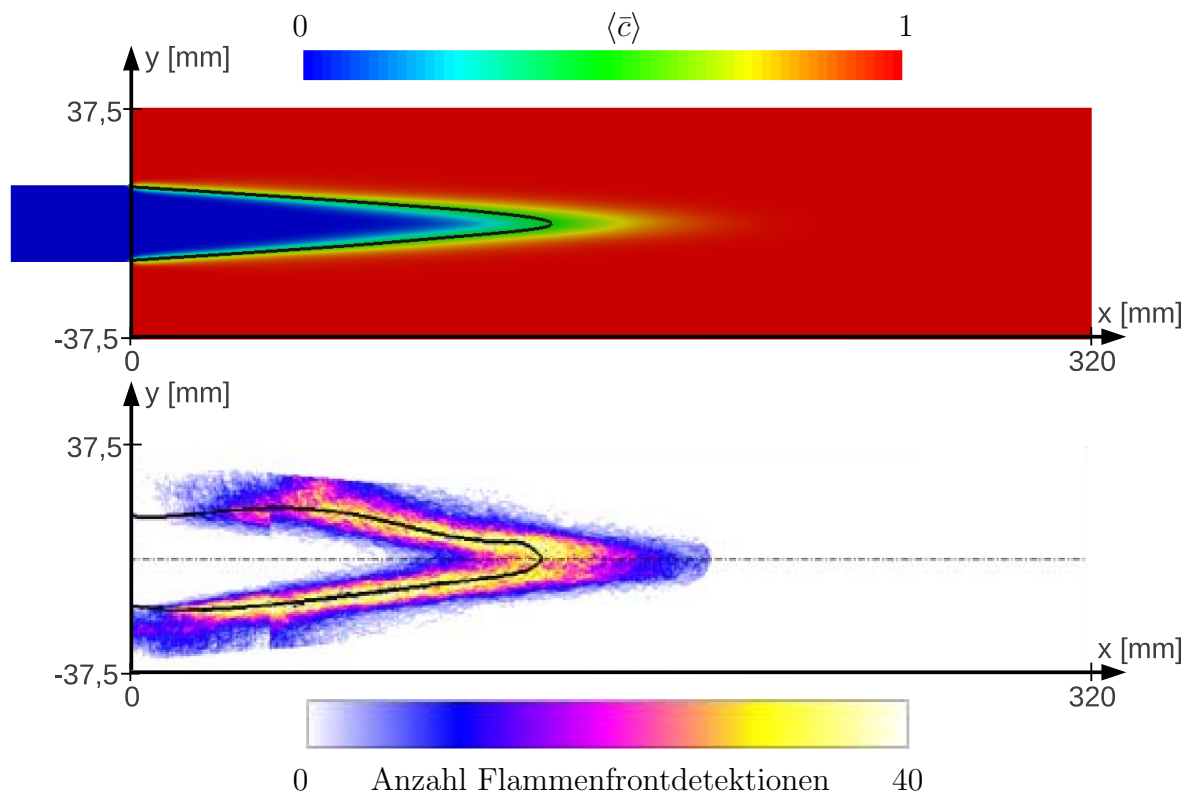


Abbildung 8.39: Gegenüberstellung der Flammenform von Experiment (unten) und Simulation (oben) mit neuem Modell für $\Phi = 0,56$

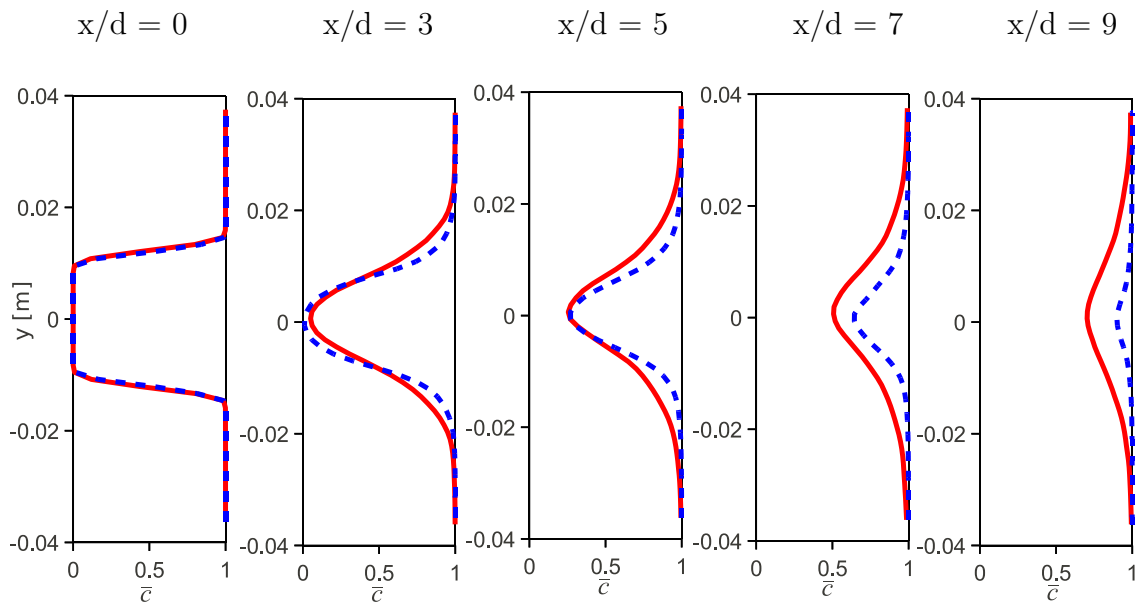
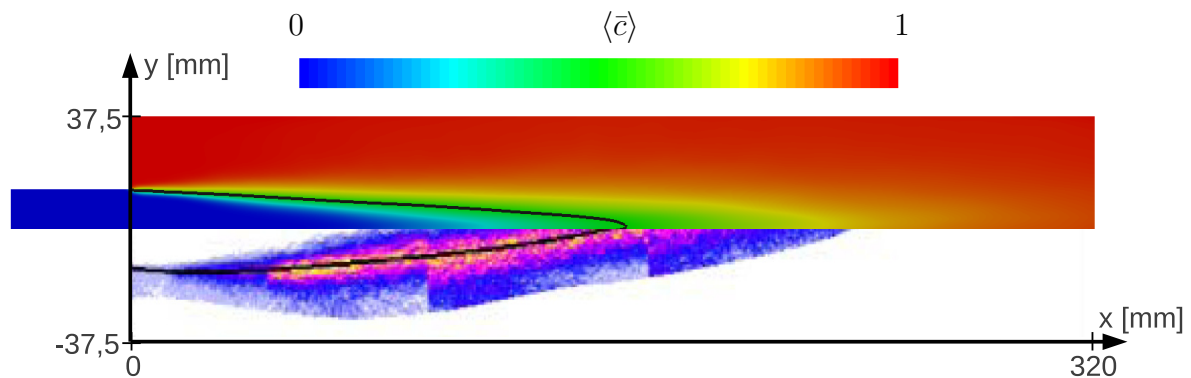


Abbildung 8.40: Gegenüberstellung von \bar{c} der Simulation mit neuem Modell für 1bar(blau) und 5bar(rot) mit $\Phi = 0,5$

Untersuchung weiterer Verbrennungsmodelle

Die Simulationsergebnisse unter Verwendung des Verbrennungsmodells von Fureby [56] in Abbildung 8.41a) zeigen bezüglich der räumlichen Ausdehnung der Flamme eine sehr gute Übereinstimmung mit der experimentell vermessenen Flamme. Der Bereich größter Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Flammenfront wird durch das Modell von Fureby etwas weiter stromauf vorhergesagt. Das Modell von Hawkes et al. [75], mit dem Experiment

a)



b)

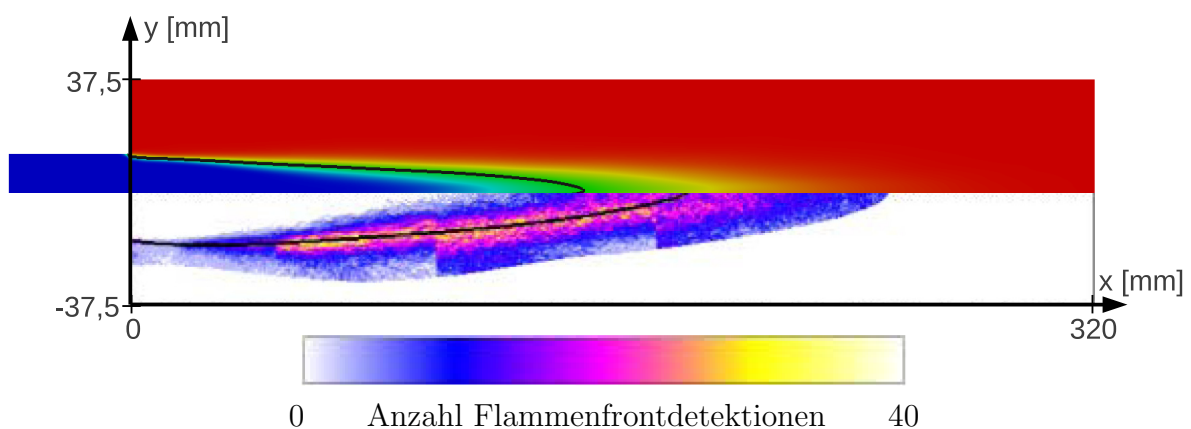


Abbildung 8.41: Gegenüberstellung der Flammenform von Experiment und Simulation für $\Phi = 0,5$; a) Modell von Fureby; b) Modell von Hawkes

in Abbildung 8.41b) verglichen, ergibt ein geringeres Wachstum sowie eine geringere Ausdehnung der turbulenten Flammendicke im Vergleich zum Experiment. Zu beachten sind zudem die leichten Unsymmetrien der experimentellen Flammenformen, vgl. Abbildung 8.38. Die Simulationen mit den Modellen von Fureby und Hawkes konzentrieren sich auf eine alleinige Evaluierung der Verbrennungsmodelle. Der Einfluss von Streckeffekten auf die laminare Flammengeschwindigkeit wird daher nicht berücksichtigt. Dies erklärt ähnliche vorhergesagte Flammenformen mit dem neuen Modell und dem Modell von Fureby, obwohl die Abschätzung der Feinstrukturflammenfaltung in Abbildung 8.29 generell eine größere

Flammenfaltung des neuen Modells vorhersagt. Der Vergleich der Simulationsergebnisse mit dem Modell von Fureby hinsichtlich des Verlaufs der Reaktionsfortschrittsvariablen bei 1bar und 5bar in Abbildung 8.42 zeigt nur einen geringen Druckeinfluss. Wie bei der

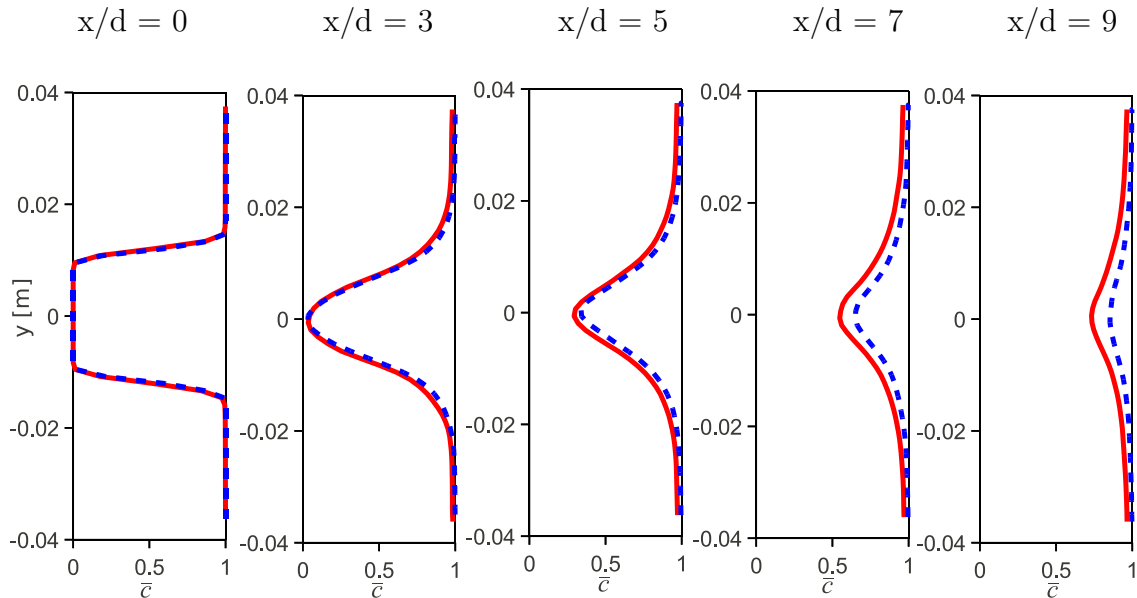


Abbildung 8.42: Gegenüberstellung von \bar{c} der Simulation mit Modell von Fureby für 1bar (blau) und 5bar (rot) mit $\Phi = 0,5$

Evaluierung des neuen Modells, wird ab der Position $x/d = 7$ bei 5bar eine geringere Reaktionsrate vorhergesagt. Die Evaluierung der Druckabhängigkeit bei der Verwendung des Modells von Hawkes ist in Abbildung 8.43 dargestellt. Hierbei wird die kürzeste Flammenfront vorhergesagt, so dass bereits ab der Position $x/d = 5$ bei 5bar eine etwas geringere Reaktionsrate festgestellt wird.

Vergleich des Strömungsfeldes

Die Geschwindigkeit und die turbulenten Schwankungen des Strömungsfeldes werden für die Konfiguration $\Phi = 0,5$ bei 1bar Umgebungsdruck in [48] bereitgestellt und sind an den Positionen $x/d = 0$, $x/d = 3$, $x/d = 5$, $x/d = 7$ und $x/d = 9$ ausgewertet. Untersucht werden die Simulationsergebnisse für das Modell von Fureby [56] und Hawkes et al. [75] bei $p = 1\text{bar}$, sowie die Ergebnisse des neuen Modells für 1bar und 5bar , um die Druckunabhängigkeit anhand der Auswertung des Strömungsfeldes zu überprüfen. Wie in Kapitel 4.2.1 dargelegt, kann die Turbulenz innerhalb der turbulenten Flammendicke durch die periodische Schwankung der Flammenfront nicht korrekt gemessen bzw. berechnet werden [134]. Die ausgewerteten u' -Werte enthalten neben der turbulente Schwankung auch Informationen über die Flammenperiodizität. Allerdings ist die Auswertung im Experiment und in der Simulation gleich und enthält damit die selben Informationen. Abbildung 8.44 zeigt das mittlere Geschwindigkeitsfeld $\langle u_x \rangle$ sowie die Positionen der Aus-

8.4 Simulation einer turbulenten Jetflamme

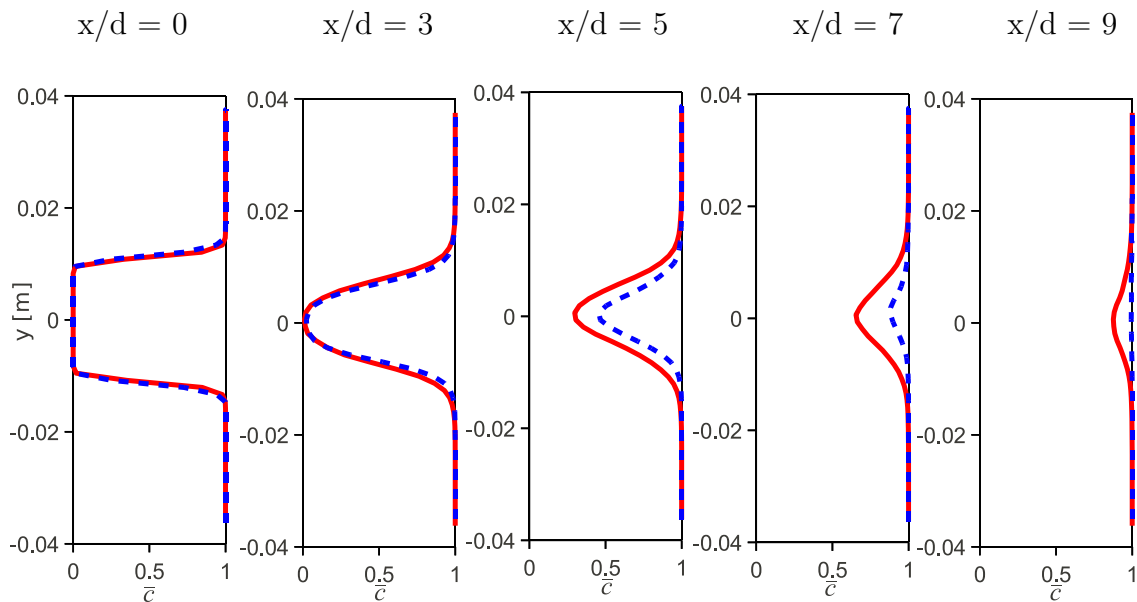


Abbildung 8.43: Gegenüberstellung von \bar{c} der Simulation mit Modell von Hawkes für 1bar (blau) und 5bar (rot) mit $\Phi = 0,5$

wertung. Abbildung 8.45 stellt die simulierten Geschwindigkeits- und Turbulenzfelder in

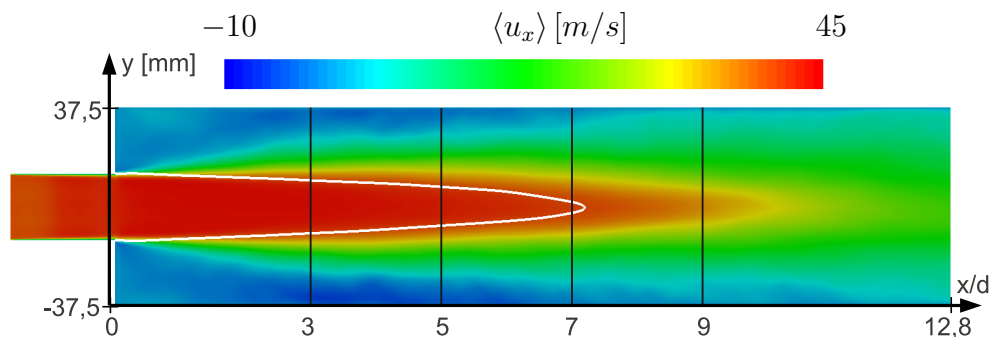


Abbildung 8.44: Geschwindigkeitsfeld bei Simulation von Fall 2 sowie Auswertepositionen, Konturlinie zeigt $\langle \bar{c} \rangle = 0,5$

axialer Richtung den experimentellen Daten für den Einlassbereich $x/d = 0$ sowie $x/d = 3$ gegenüber. Der Einlassbereich zeigt, dass die Zeit gemittelten Geschwindigkeitsfelder gut mit den experimentellen Daten übereinstimmen. Nachdem der Einfluss der Verbrennung noch sehr gering ist, sind auch die Geschwindigkeiten bei den verschiedenen Modellen nahezu identisch. Die turbulente Schwankung am Einlass ist in sehr guter Übereinstimmung mit den experimentellen Daten.

An der Position $x/d = 3$ stimmen die Geschwindigkeitsfelder gut mit den experimentellen Daten überein. Da das Modell von Hawkes etwas kürzere Flammenfronten vorhersagt, ist die Geschwindigkeit im Kernbereich der Strömung etwas höher im Vergleich zu den übrigen Modellen. Die u' -Werte zeigen im Kernbereich eine sehr gute Übereinstimmung mit

den experimentellen Daten, im Bereich großer Scherraten wird die turbulente Schwankung etwas überschätzt.

Im Bereich $x/d = 5$ und $x/d = 7$, dargestellt in Abbildung 8.46, zeigt das Modell von Fureby die beste Übereinstimmung mit den experimentellen Daten. Die Abweichungen der Simulationsergebnisse des in dieser Arbeit vorgeschlagenen Modells sind aber gering. Da das neue Modell sowie das Modell von Hawkes ein weiter stromauf verlagertes Einsetzen der Verbrennung im Vergleich zum Experiment vorhersagen, sind hier auch die Geschwindigkeiten etwas höher. Die Geschwindigkeitsverläufe des neuen Modells für $1bar$ und $5bar$ sind nahezu identisch. Da bei $x/d = 7$ für $1bar$ die Verbrennung etwas weiter stromauf vorhergesagt wird, vgl. Abbildung 8.40, ergeben sich an dieser Position bei $1bar$ etwas höhere Geschwindigkeiten als bei $5bar$. Die u' -Werte vorhergesagt durch das neue Modell zeigen eine sehr gute Übereinstimmung mit den experimentellen Daten.

Da das Modell von Fureby die axiale Ausdehnung der turbulenten Flammendicke stromab etwas überschätzt, werden mit Furebys Modell an der Position $x/d = 9$ geringere Geschwindigkeiten vorhergesagt, als im Experiment festgestellt. Das neue Modell sowie das Modell von Hawkes sagen einen abgeschlossenen Verbrennungsprozess vorher und damit eine sehr gute Übereinstimmung mit den experimentellen Daten.

8.4 Simulation einer turbulenten Jetflamme

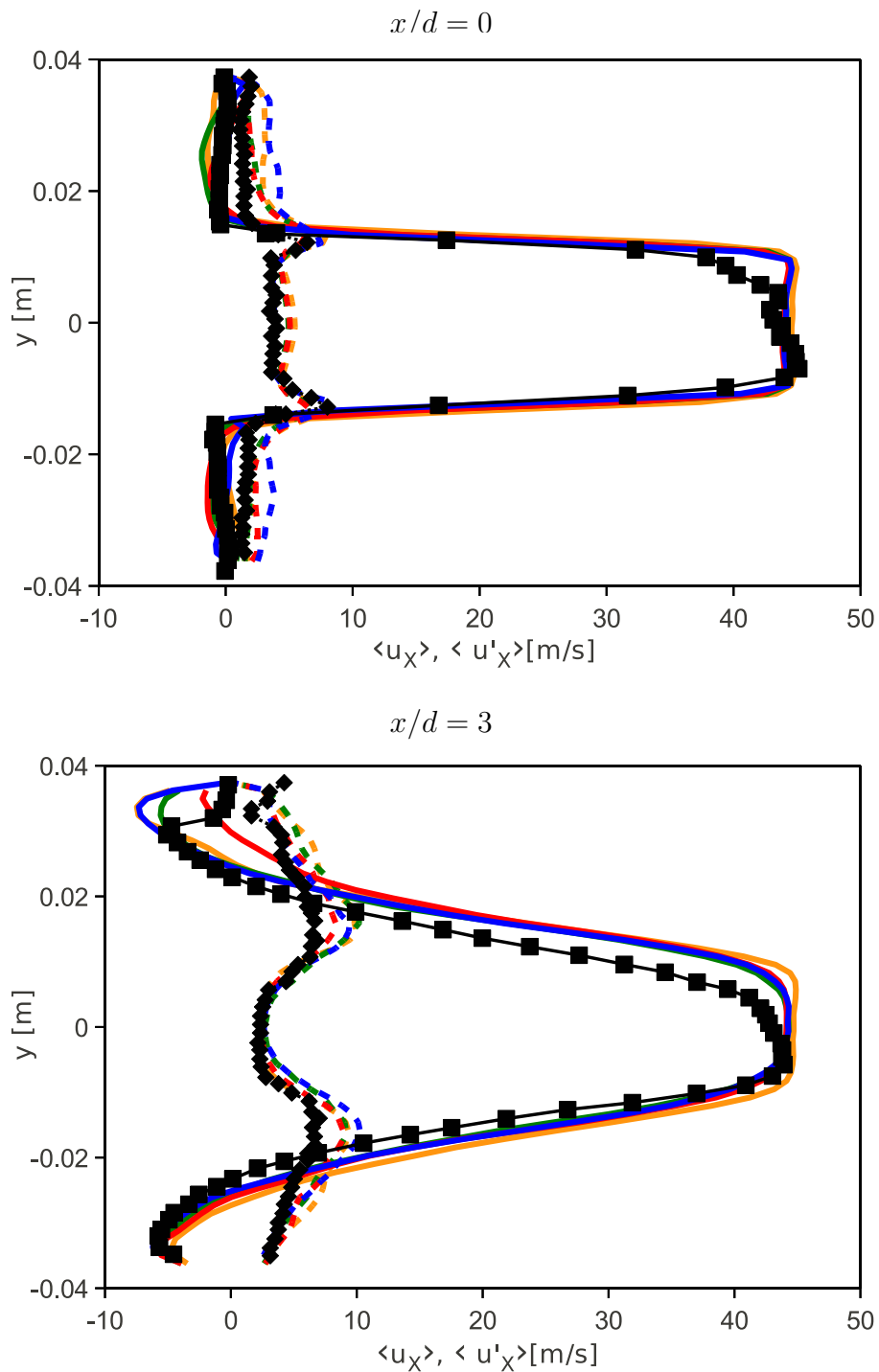


Abbildung 8.45: Vergleich der Axialgeschwindigkeit (durchgezogene Linie) und der turbulenten Schwankung (gestrichelt); Experiment (schwarz und Symbol); neues Modell 1bar (rot); neues Modell 5bar (blau); Fureby (grün); Hawkes (orange)

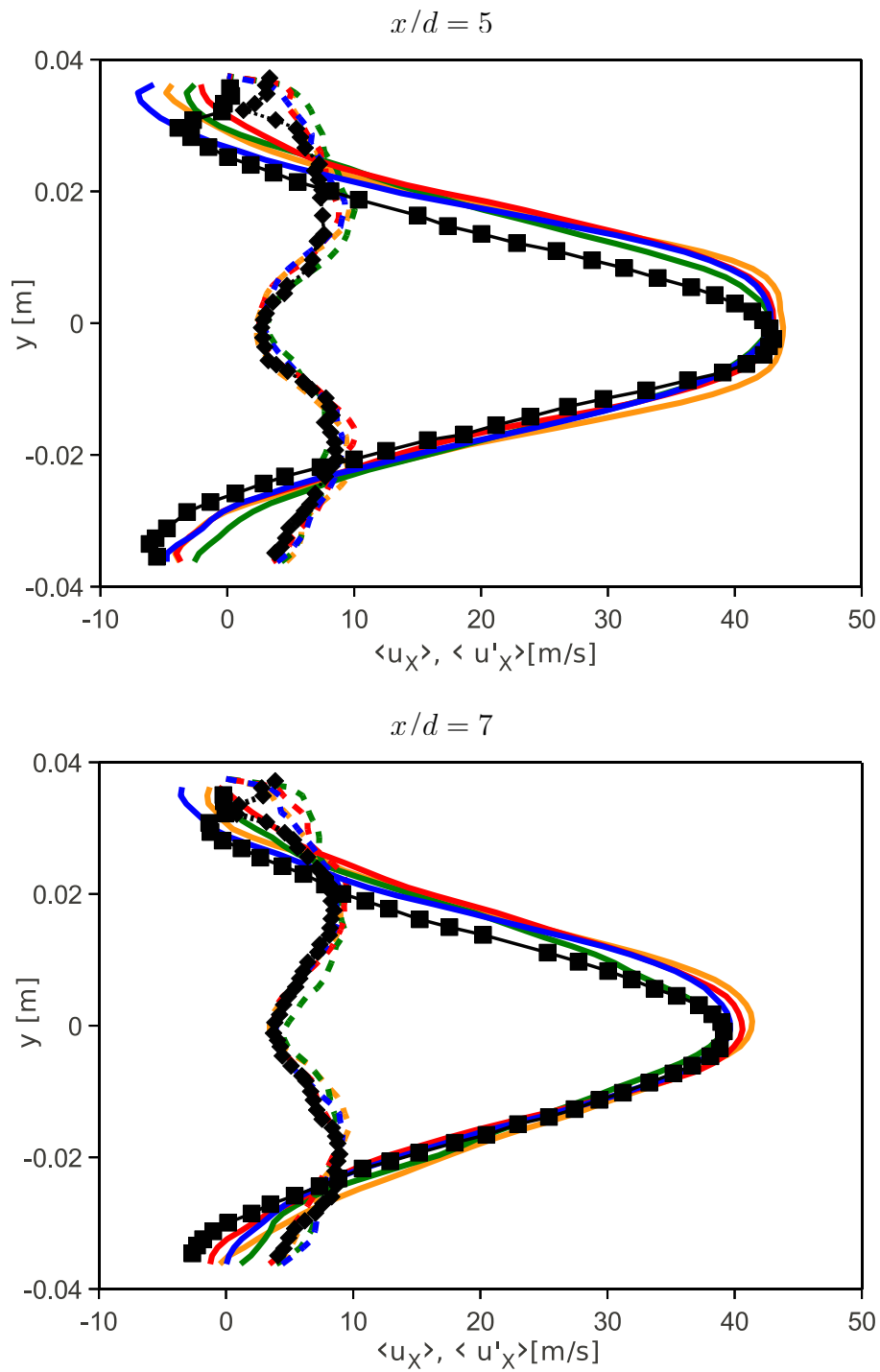


Abbildung 8.46: Vergleich der Axialgeschwindigkeit (durchgezogene Linie) und der turbulenten Schwankung (gestrichelt); Experiment (schwarz und Symbol); neues Modell 1bar (rot); neues Modell 5bar (blau); Fureby (grün); Hawkes (orange)

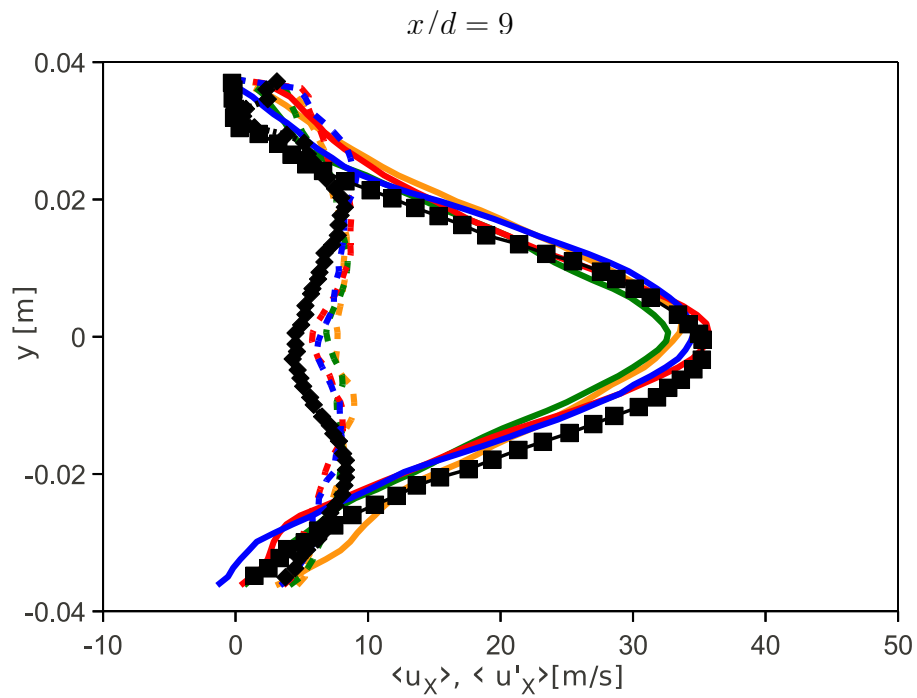


Abbildung 8.47: Vergleich der Axialgeschwindigkeit (durchgezogene Linie) und der turbulenten Schwankung (gestrichelt); Experiment (schwarz und Symbol); neues Modell *1bar* (rot); neues Modell *5bar* (blau); Fureby (grün); Hawkes (orange)

8.5 Simulation eines nicht-adiabaten Drallbrenners

Zur Evaluierung des Verbrennungsmodells für eine technisch relevante Konfiguration wird der BRS-Drallbrenner des Lehrstuhls für Thermodynamik der TUM simuliert. Der Drallbrenner weist Bereiche auf, in denen die Flamme mit den nicht adiabaten Wänden interagiert und ermöglicht somit die Evaluierung der in Abschnitt 5.5 vorgestellten Modelle zur Berücksichtigung der Flamme-Wand Interaktion bei vorgemischter Verbrennung. Der Brenner wurde bereits von Keppeler et al. [137] mit einem fraktalen Verbrennungsmodell simuliert, um das Verhalten von thermischen Verlöschmodellen bei technisch relevanten Konfigurationen zu untersuchen.

8.5.1 Beschreibung des Experiments

Der Drallbrenner wurde von Komarek und Polifke [95] im Rahmen des Projekts Kraftwerke des 21ten Jahrhunderts, GV 6 Premixed Flame Dynamics entwickelt und experimentell untersucht. Das Drallregister befindet sich in einem Ringspalt zwischen der Lanze und dem Außenrohr der Anströmung 30mm vor der Brennkammer. Der Innen- und Außendurchmesser des Ringspalts beträgt 16mm und 40mm . Die Brennkammer hat eine Länge von 300mm und einen quadratischen Querschnitt mit $90\text{mm} \times 90\text{mm}$ Kantenlänge. Am Brennkammerauslass sind Lochbleche montiert, um akustische Reflektionen zu vermeiden. Eine detaillierte Beschreibung des experimentellen Aufbaus ist in [96] zu finden.

Die Flammenposition wird über die Verteilung der Wärmefreisetzung der Flamme in der Brennkammer anhand von OH^* Chemilumineszenz der Verbrennung bestimmt. Ein Interferenzfilter zentriert auf eine Wellenlänge von $307,1 + 3/-0\text{nm}$ mit einer Transmission von 15% und einer Bandbreite von $10 - 2\text{nm}$ bei halber Leistung wird verwendet, um das Signal von weiteren Emissionen zu separieren. Instantane Bilder werden mit einer bildverstärkten CMOS Kamera aufgenommen. Die Zeit gemittelte OH^* Kontur in der Brennkammer wird über 200 Bilder, die innerhalb von 4s aufgenommen werden, erstellt.

Axiale und radiale Komponenten der Geschwindigkeit in der Brennkammer werden in einer Schnittebene in der Brennkammermitte über ein Hochgeschwindigkeits PIV System gemessen. Der Nd:YLF Laser hat eine Wellenlänge von 527nm und einen Pulsabstand von $20\mu\text{s}$. Eine zeitliche Auflösung von 1ms bei einer Messzeit von 1s erlaubt es ein adäquates Zeit gemitteltes Geschwindigkeitsfeld zu erstellen.

8.5.2 Modellierung und Simulation

Rechengebiet

Das Rechengebiet bildet die gesamte Geometrie des Brenners ab und ist in Abbildung 8.48 dargestellt. Ringspalt und Brennkammer sind mit $8,3$ Millionen Hexaedern diskretisiert und an den Wänden verfeinert.

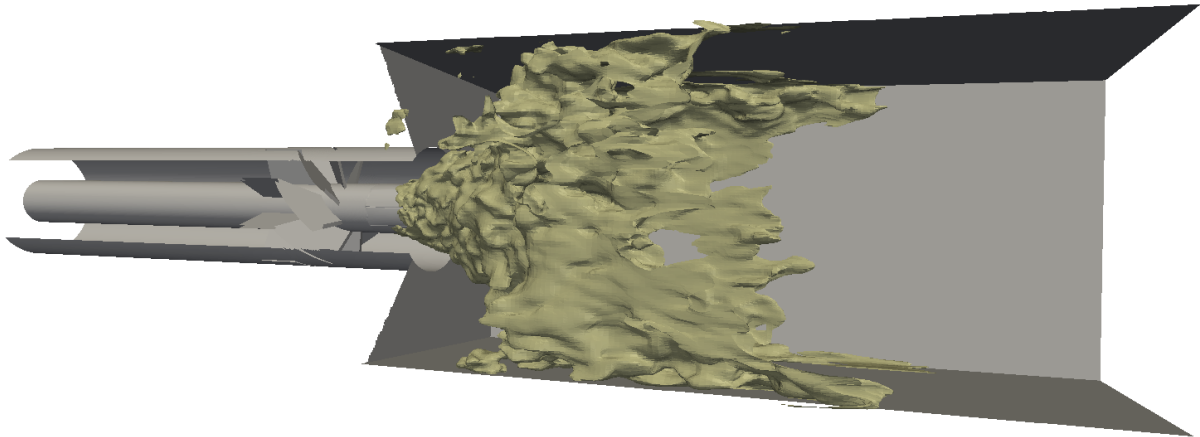


Abbildung 8.48: Konfiguration des Drallbrenners; Isofläche entspricht $\tilde{c} = 0,4$ und illustriert die instantane Flammenposition

Randbedingungen

Mit Ausnahme des Drucks werden am Einlass Dirichlet Randbedingungen vorgegeben. Die Temperatur am Einlass beträgt $T_u = 293K$, die Mantelfläche der Lanze wird zu $T_w = 293K$ gesetzt und für die Spitze der Lanze sowie die Brennkammerwände werden $T_w = 600K$ vorgegeben. Am Einlass des Ringspalts wird für die Geschwindigkeit ein Blockprofil mit $26,5m/s$ vorgegeben, das einer Brennerleistung von 70 kW entspricht. Da das Drallregister ausreichend Turbulenz einführt, muss am Einlass kein turbulenzbehaftetes Geschwindigkeitsfeld vorgegeben werden. Der Druck in der Konfiguration ist konstant bei $p_0 = 1bar$. Am Auslass wird eine nicht reflektierende Randbedingung für den Druck vorgegeben. Eine van Driest Dämpfung wird verwendet, um in Wandnähe die turbulente Viskosität nicht zu überschätzen.

Die verwendete Diskretisierung ist in Kapitel 8.1.1 beschrieben.

Beschreibung Simulation

Sieben Durchströmzeiten werden gerechnet um ein ausgebildetes Strömungsfeld zu erhalten, weitere 7 Durchströmzeiten werden zur Zeitmittelung simuliert. Das Brennstoff-Luftverhältnis beträgt $\Phi = 0,77$. Mangels experimenteller Daten zum Turbulenzniveau, kann das globale Verbrennungsregime nicht bestimmt werden. Die Klassifizierung in einem LES-Regime Diagramm ausgewertet auf der Flammenoberfläche $\tilde{c} = 0,5$ ist in Abbildung 8.49 dargestellt und zeigt, dass der Hauptbereich dem Regime dünner Reaktionszonen zugeordnet werden kann.

Bewertung der LES Qualität

Im Gegensatz zu den Freistrahlsströmungen in Abschnitt 8.4 und 8.3 ist die Strömung im Drallbrenner deutlich durch den wandnahen Bereich beeinflusst. Zudem konzentriert sich

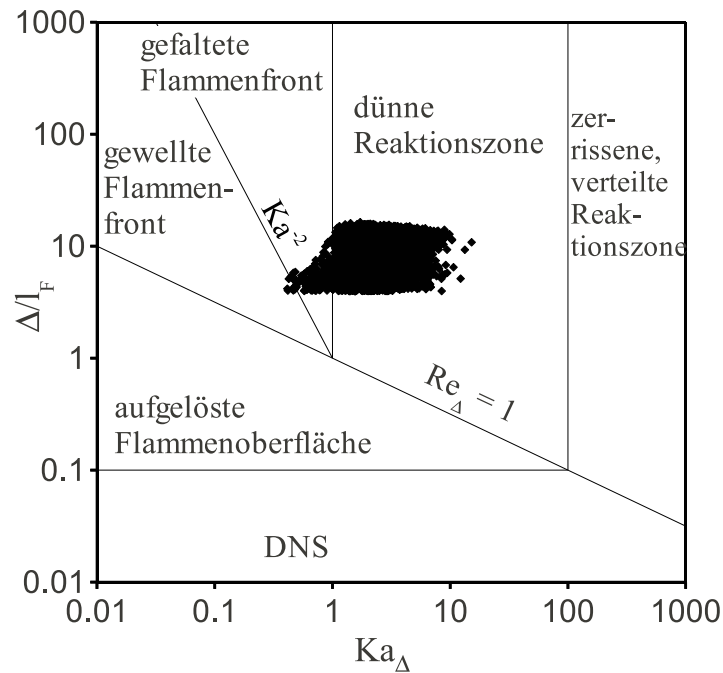


Abbildung 8.49: Auswertung der Regimezuordnung auf der Flammenfront $\tilde{c} = 0,5$ in einem LES Regimediagramm

die Auswertung des BRS-Brenners auf die Evaluierung der FWI-Modelle und benötigt die Untersuchung der Wandauflösung. Maximale y^+ Werte von 25 treten im Bereich der Lanze nur am Drallregister auf. Werte von $y^+ < 5$ liegen in Bereichen vor, in denen die Flamme mit der Wand interagiert. Wie in Keppeler et al. [82] gezeigt, ist eine Zelle in der laminaren Unterschicht ausreichend, um die Turbulenz im Strömungsfeld sowie in Wandnähe ausreichend aufzulösen. Die Simulation des Drallbrenners auf einem größeren Netz mit 5,5 Millionen Zellen mit der selben Numerik und einem leicht modifizierten Verbrennungsmodell in Keppeler et al. [137] zeigt nur geringe Abhängigkeit des Geschwindigkeitsfeldes von der Netzauflösung.

8.5.3 Evaluierung der FWI-Modelle

Evaluiert werden die FWI-Erweiterungen, \tilde{Q}_{SL} , Gleichung (5.42), die eine Reduktion der laminaren Flammengeschwindigkeit beschreibt sowie Q_{FSD} , Gleichung (5.46), zur Reduktion der Feinstrukturflammenfaltung bei Wärmeverlusten. Eine dritte Simulation wird ohne Berücksichtigung von FWI-Modellen durchgeführt.

Evaluierung der Peclet Zahlen für den Wandabstand

Die Modelle werden zunächst in Hinblick auf die Vorhersage der charakteristischen Peclet Zahlen, $Pe_{w,q}$ für den Abstand thermischen Verlöschens und $Pe_{w,I}$ für den Abstand ersten Auftretens thermischer Verluste untersucht. Abbildung 8.50 zeigt dazu die Isolinien der Zeit gemittelten Reaktionsfortschrittsvariablen sowie die Zeit gemittelten Konturverläufe

der FWI-Modelle, die den Bereich von Wärmeverlusten der Flamme beschreiben. Berück-

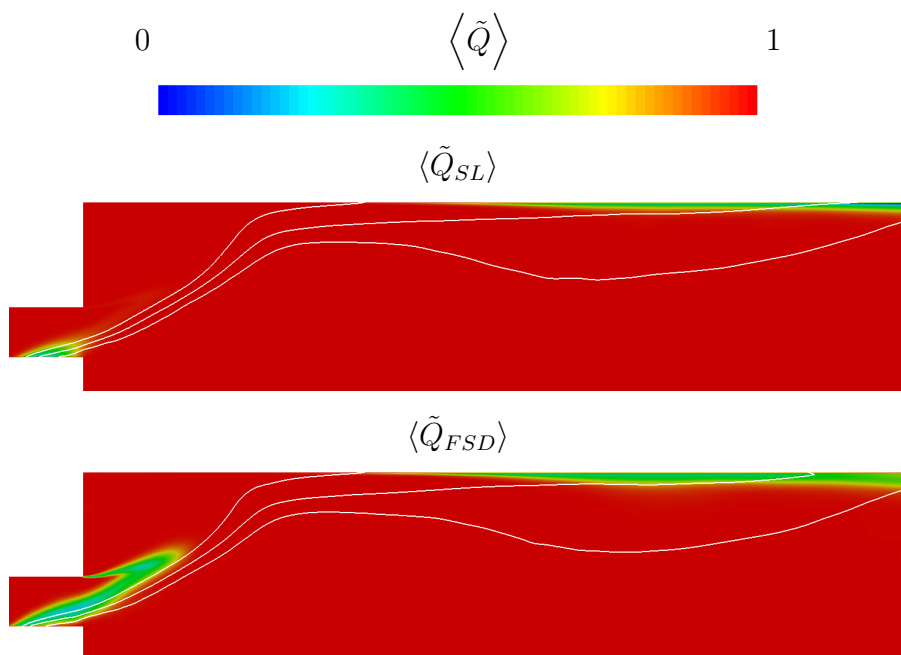


Abbildung 8.50: Auswertung der FWI-Modelle \tilde{Q}_{SL} Gleichung (5.42) und \tilde{Q}_{FSD} Gleichung (5.46) als Konturfläche; Isolinien zeigen $\tilde{c} = 0, 2; 0, 5; 0, 8$

sichtigt man den Einfluss von Wärmeverlusten auf die laminare Flammengeschwindigkeit über \tilde{Q}_{SL} , wird der Wandeffekt nur im wandnahen Bereich vorhergesagt, mit einer deutlichen Reduktion des Reaktionsquellterms. Im Gegensatz dazu beschreibt \tilde{Q}_{FSD} in einem größeren Bereich den Einfluss von Wärmeverlusten auf die Verbrennung, allerdings mit einer geringeren Reduktion des Reaktionsquellterms. Dass auch Wärmeverluste in einem großen Abstand zur Wand vorhergesagt werden, ist darin begründet, dass sich Produkte an der Brennkammerwand abkühlen können und über die äußere Rezirkulationszone zurück transportiert werden. Dies führt zu nicht adiabaten Bereichen außerhalb des wandnahen Bereichs. Diese Art von Verlöscheffekten ist damit keine direkte Konsequenz von FWI Mechanismen, sondern eine Folge der Beschreibung der FWI über einen Wärmeverlustparameter und nicht über den Wandabstand.

Eine quantitative Auswertung der Wandabstände für vollständiges, thermisches Verlöschens $Pe_{w,q}$ sowie des Abstands für den ersten Einfluss von Wandeffekten auf den Reaktionsquellterm $Pe_{w,I}$ ist in Tabelle 8.8 zusammengefasst. Für $Pe_{w,q}$ wird der Abstand definiert, bei dem das Verlöschmodell im Bereich der Flammenfront, definiert als $\tilde{c} = 0, 5$ einen Wert von $\tilde{Q} < 0, 05$ annimmt. $Pe_{w,I}$ wird als Wandabstand der Flammenfront ausgewertet, für den $\tilde{Q} < 1$ vorliegt. Ausgewertet werden dabei instantane Verteilungen von \tilde{Q} , da die Zeitmittelung aufgrund der Periodizität der Flamme Bereiche vollständigen Verlöschens, $\tilde{Q} < 0, 05$ nicht abbilden kann. Die Peclet Zahlen werden an den Positionen bestimmt, wo sich die Flamme an der Lanze der Temperatur $T_W = 293\text{K}$ stabilisiert sowie in dem Bereich wo die

T_W	\tilde{Q}_{SL}		\tilde{Q}_{FSD}	
	293 K	600 K	293 K	600 K
$Pe_{w,q}$	3,6	2,5	—	—
$Pe_{w,I}$	40	36	65	45

Tabelle 8.8: Vorhersage der Peclet Zahlen durch die Verlöschmodelle \tilde{Q}_{SL} Gleichung (5.42) und \tilde{Q}_{FSD} Gleichung (5.46) für thermisches Verlösch $Pe_{w,q}$ und Beginn von Wärmeverlusten $Pe_{w,I}$ bei unterschiedlichen Wandtemperaturen

Flamme die Brennkammerwand berührt der eine Temperatur von $T_W = 600K$ vorgegeben wird.

Verwendet man \tilde{Q}_{SL} , liegen die Peclet Zahlen für vollständiges Verlösch in einem Bereich von $Pe_{w,q} \approx 3, 4$, der auch in der DNS von [133] und [2] beobachtet wird. $Pe_{w,I}$ über \tilde{Q}_{SL} modelliert, überschätzt leicht die Wandabstände die in der DNS von Poinot et al. [133] und Bruneaux et al. [25] eine Größenordnung von $\mathcal{O}(10)$ bzw. $Pe_{w,I} \approx 25$ aufweisen.

Das Modell \tilde{Q}_{FSD} kann kein vollständiges, thermisches Verlösch vorhersagen. Der Abstand ersten Einflusses von Wärmeverlusten auf den Reaktionsquellterm überschätzt etwas stärker die Beobachtungen aus der DNS [25, 133] sowie das Modell für \tilde{Q}_{SL} . Beide Modelle beschreiben allerdings auch einen Einfluss der Wandtemperatur auf die Peclet Zahlen.

Einfluss von FWI auf die Flammenposition

Der Einfluss der FWI-Modelle auf die Flammenposition ist in Abbildung 8.51 dargestellt. Durch die Reduktion des Reaktionsquellterms in Wandnähe stabilisiert sich die Flamme

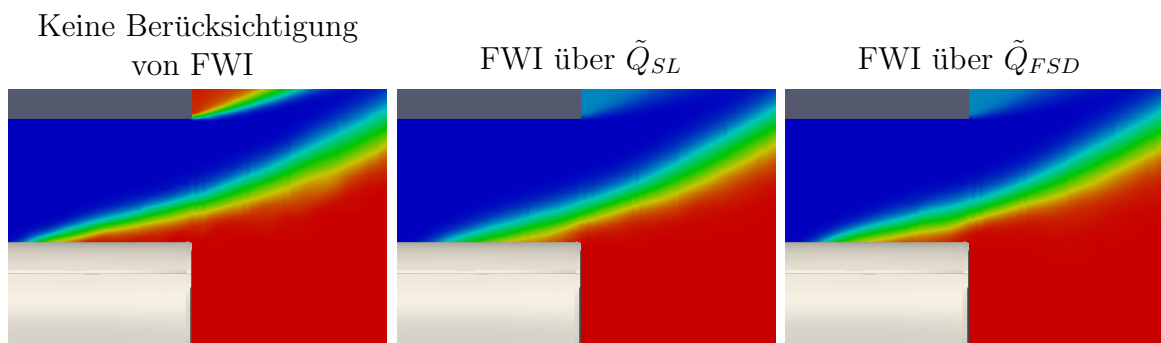


Abbildung 8.51: Konturverlauf von $\langle \tilde{c} \rangle$ auf der Brennerlanze bei Vernachlässigung und Berücksichtigung von Wärmeverlusten der Flamme

me an der Lanze weiter stromab. Zudem vergrößert sich die turbulente Flammendicke. Da durch \tilde{Q}_{FSD} geringere FWI-Effekte vorhergesagt werden, wird die Flamme nicht so weit stromab vorhergesagt, wie bei Berücksichtigung von Wärmeverlusten über \tilde{Q}_{SL} . Eine

Stromabverschiebung der Flamme lässt sich mit der Theorie des Flammenrückschlags in Grenzschichten erklären, die erstmals von Lewis und von Elbe [103] für laminare Verbrennung formuliert und z.B. von Khitritin et al. [85] bei turbulenten Flammen angewendet wird. Man geht davon aus, dass sich eine Flamme in der Grenzschicht stabilisieren kann, wenn gilt:

$$\left. \frac{\partial u_{ax}}{\partial n} \right|_w = \left. \frac{s_L}{l_F} \right|_w \quad (8.22)$$

Wertet man in der Simulation den Gradienten der Geschwindigkeit in Hauptströmungsrichtung normal zur Wand aus, zeigt sich, dass dieser mit zunehmendem Abstand vom Drallregister abnimmt. Da sich aufgrund der Verlöscheffekte auch die effektive Flammengeschwindigkeit reduziert, ergibt sich daraus eine Stabilisierung der Flamme weiter stromab vom Drallregister.

8.5.4 Vergleich Experiment-Simulation

Die veränderte Flammenposition sowie die reduzierte Reaktionsrate in Wandnähe beeinflusst zudem das Geschwindigkeitsfeld. Ausgewertet wird der radiale Verlauf der Axialgeschwindigkeit an 4 Positionen in der Brennkammer. Abbildung 8.52 zeigt die Auswertepositionen in der Brennkammer sowie den Konturverlauf der Axialgeschwindigkeit mit der charakteristischen Rezirkulationszone bei Verwendung von \tilde{Q}_{SL} zur Berücksichtigung von FWI. Der radiale Geschwindigkeitsverlauf bei Berücksichtigung sowie Vernachlässigung von FWI ist in Abbildung 8.53 den experimentellen Daten gegenübergestellt. Berücksichtigt man FWI wird die Reaktionsrate in Wandnähe reduziert und die Flamme stabilisiert sich weiter stromab an der Lanze. Vernachlässigt man FWI ist damit an der gleichen axialen Position die Verbrennung weiter fortgeschritten und die Axialgeschwindigkeit vergrößert sich, wie die Auswertung an der Position $z = 30mm$ zeigt. An dieser Position stimmen auch die Simulationsdaten bei Berücksichtigung von FWI-Modellen gut mit den experimentellen Daten überein, während die Simulation mit Vernachlässigung der FWI die experimentellen Daten überschätzt.

Geringe Unterschiede zwischen den Simulationsdaten sind an der Position $z = 50mm$ zu erkennen. Etwas stromauf dieser Position ist aber auch die Flamme keinen weiteren Wärmeverlusten ausgesetzt. Die Breite der Rückströmzone wird in der Simulation etwas überschätzt, wie an der Position $z = 30mm$ stimmen aber auf der Rotationsachse die Geschwindigkeiten sehr gut mit dem Experiment überein.

Bei $z = 70mm$ und $z = 90mm$ und bereits weiter stromauf berührt die Flamme die Wand. Vernachlässigt man Auswirkungen von Wärmeverlusten, ergeben sich größere Geschwindigkeitsspitzen in Wandnähe, welche die experimentellen Daten überschätzen. Bei Berücksichtigung von FWI-Modellen ist eine bessere Übereinstimmung mit dem Experiment zu erkennen. Bei $y < 0$ ergibt sich eine sehr gute Übereinstimmung von Experiment und Simulation, während aufgrund von Unsymmetrien der experimentellen Daten bei $y > 0$ die Abweichungen etwas größer sind. Alle Simulationen überschätzen aber im Bereich $70mm < z < 90mm$ betragsmäßig die negativen Geschwindigkeiten in der Rückströmzone.

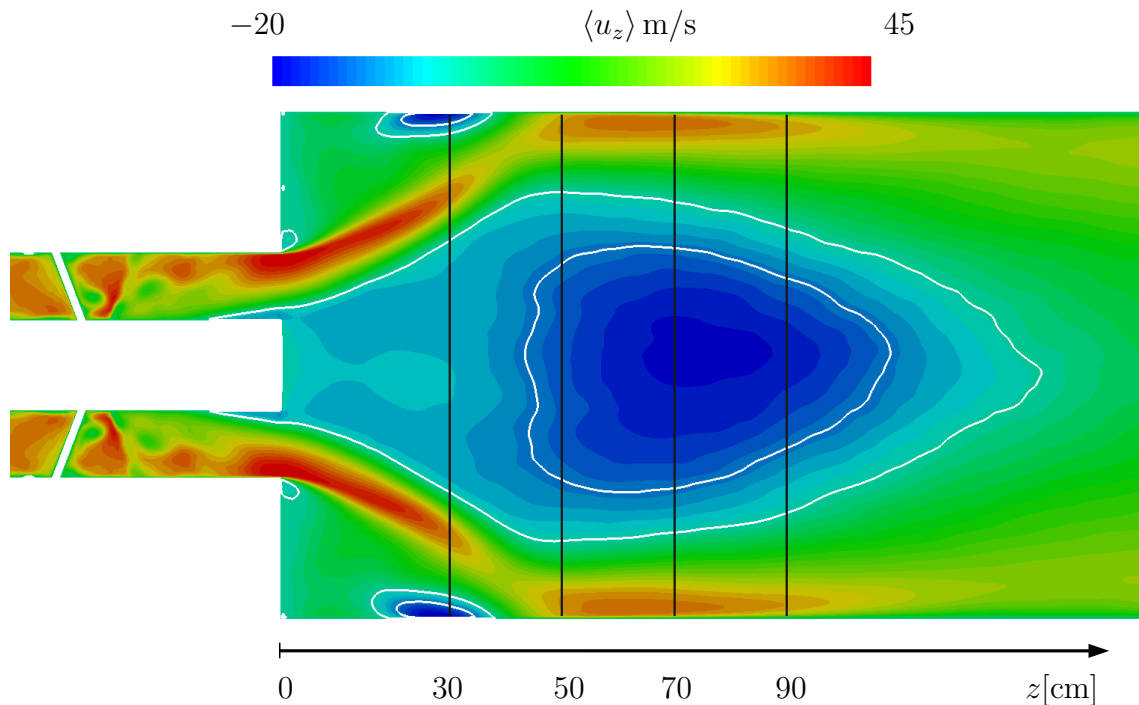


Abbildung 8.52: Konturverlauf der Axialgeschwindigkeit; Isolinien kennzeichnen $u_z = 0\text{ m/s}$ und $u_z = -10\text{ m/s}$; vertikale Linien kennzeichnen Auswertepositionen

Der Vergleich der Geschwindigkeitsfelder zeigt, dass eine bessere Übereinstimmung von Experiment und Simulation bei Verwendung der FWI-Modelle erzielt werden kann. Trotz der unterschiedlichen Werte für $Pe_{w,q}$ und $Pe_{w,I}$ in Tabelle 8.8 der beiden Modelle, zeigen die Geschwindigkeitsfelder der beiden Simulationen kaum Abweichungen von einander.

Um den Einfluss von Wärmeverlusten direkt über den Reaktionsquellterm zu untersuchen, wird die OH^* Chemilumineszenz in der Brennkammer verglichen. Diese wird in der Brennkammer normal zur Betrachtungsebene aufsummiert und entspricht damit einer integralen Darstellung. In der Simulation wird der Reaktionsquellterm $\overline{\dot{\omega}_c}$ ausgewertet und ebenso normal zur Betrachtungsebene aufintegriert. Die Gegenüberstellung zeigt Abbildung 8.54, wobei im Experiment und den Simulationen die maximalen Wärmefreisetzungsraten auf 1 normiert werden. Berücksichtigt man Wärmeverluste stimmen die Bereiche maximaler Reaktionsrate gut mit den maximalen OH^* Bereichen überein. In der Simulation wird allerdings an der Position $z = 0,01\text{ cm}$ eine etwas erhöhte Reaktionsrate vorhergesagt als im Experiment. Vernachlässigt man Wärmeverluste, ergeben sich hohe Reaktionsraten bereits im Bereich der Lanze, so dass im Bereich maximaler OH^* Chemilumineszenz des Experiments die Reaktionsrate bei Vernachlässigung der FWI deutlich geringer ausfällt.

8.5.5 Bewertung der Modelle zur Berücksichtigung von Flamme-Wand Interaktion

Die Untersuchung der Simulationsdaten zeigt, dass die Berücksichtigung von Modellen für die FWI eine deutliche Verbesserung der Übereinstimmung mit dem Experiment, hinsichtlich des Geschwindigkeitsfeldes und der integralen Reaktionsrate ergeben. Die Auswertung der Peclet Zahlen $Pe_{w,q}$ und $Pe_{w,I}$ zeigt, dass das Modell, welches die Reduktion der laminaren Flammengeschwindigkeit beschreibt, in guter Übereinstimmung mit experimentellen und DNS Daten ist, während das Modell, welches eine Verringerung von Σ beschreibt, kein vollständiges Verlöschen vorhersagen kann und den Wandabstand für erste Wärmeverluste überschätzt.

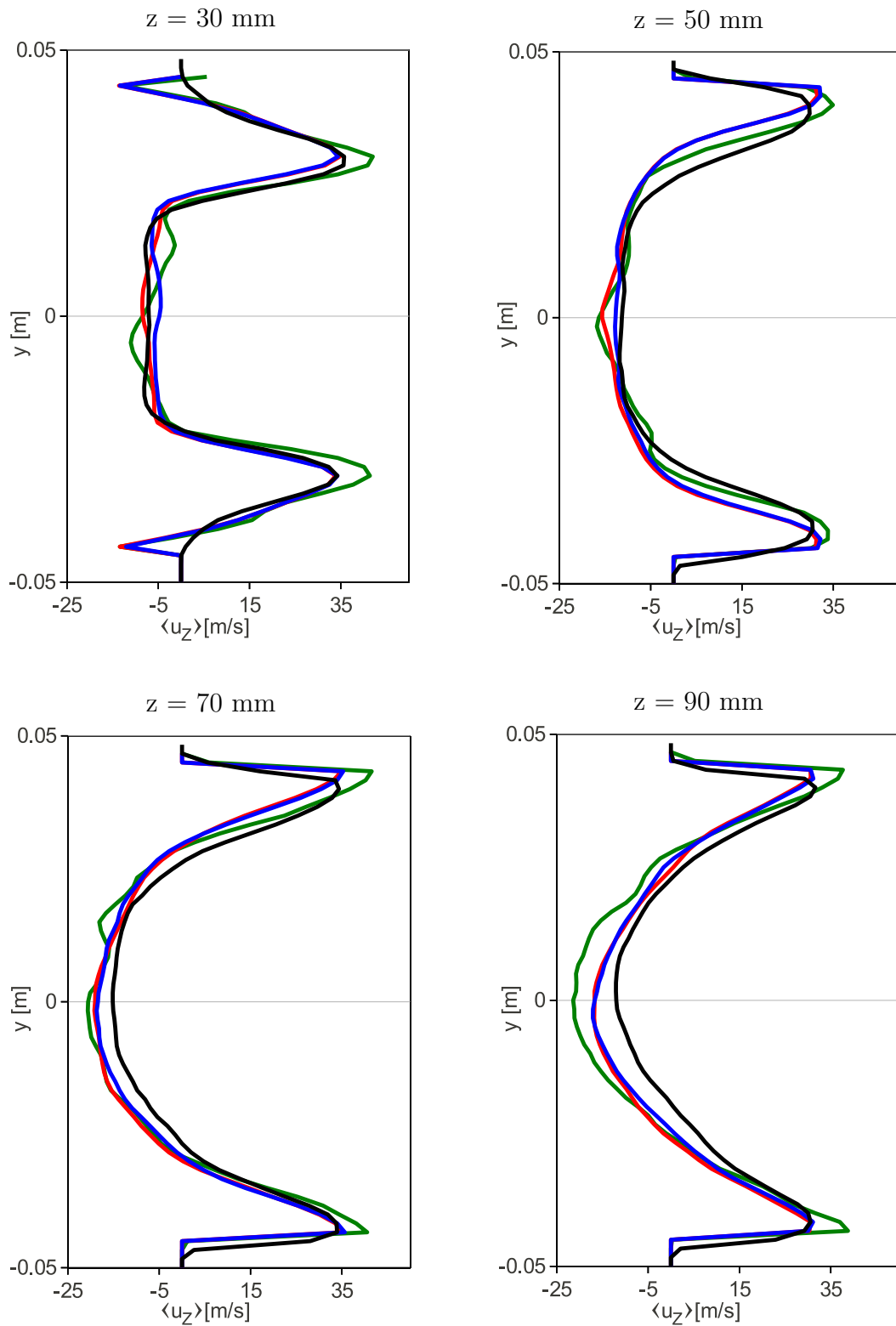


Abbildung 8.53: Auswertung der Zeit gemittelten Axialgeschwindigkeit in der Brennkammer; Experiment (schwarz); Vernachlässigung von FWI (grün); Berücksichtigung von FWI über \tilde{Q}_{FSD} (rot); Berücksichtigung von FWI über \tilde{Q}_{SL} (blau)

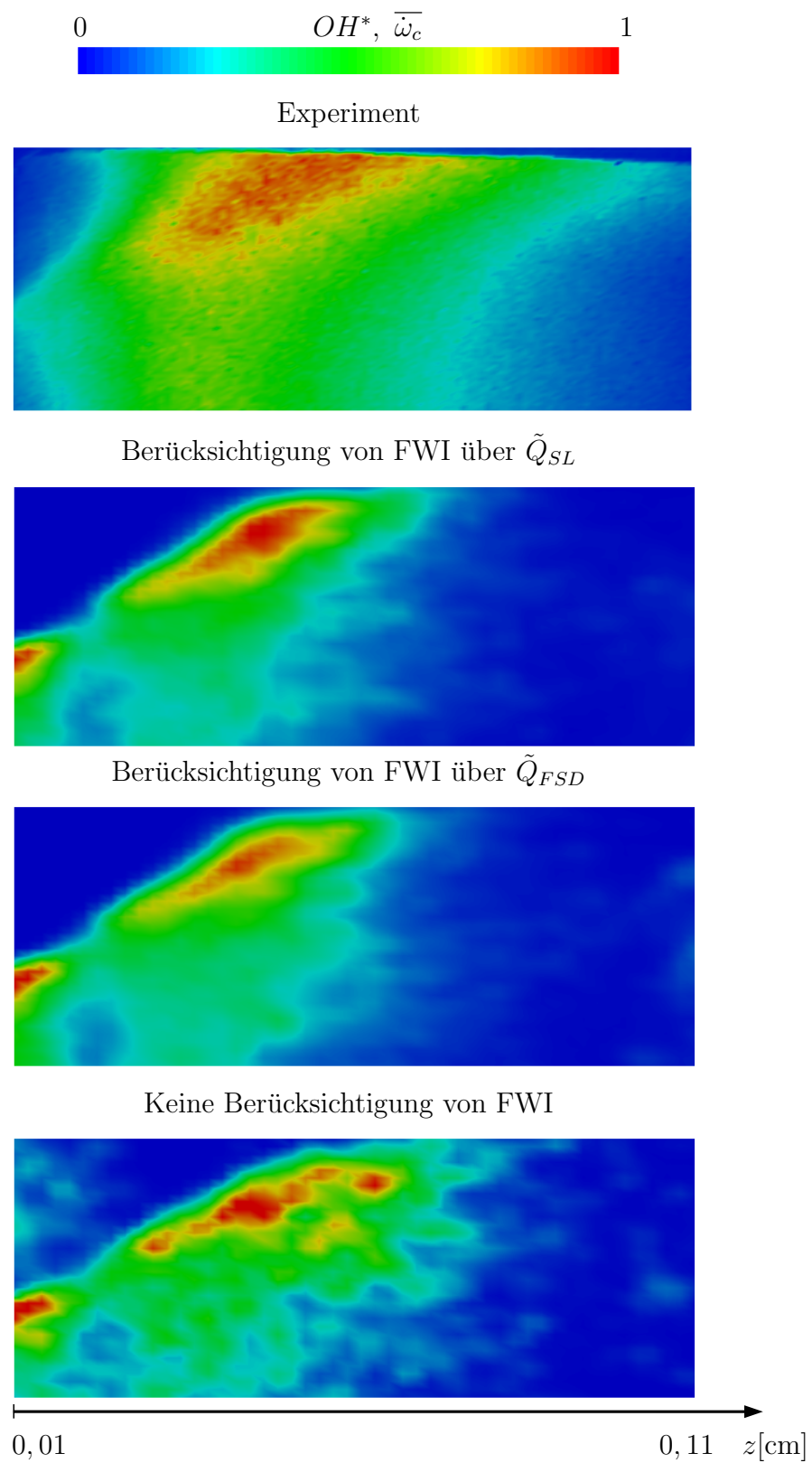


Abbildung 8.54: Integrale Darstellung der OH^* Chemilumineszenz im Experiment und die integrale Darstellung des Reaktionsquellterms der Simulation, jeweils auf 1 normiert

9 Zusammenfassung

Die Arbeit beschäftigt sich mit der Modellierung und Simulation von Vormischverbrennungssystemen im LES-Kontext mit Fokus auf die Hochdruckverbrennung. Ein algebraisches, fraktales Verbrennungsmodell wird formuliert, das die Flammenfaltung innerhalb der Filterweite beschreibt. Da bei hohem Druck die Tendenz zunimmt, dass Flammen durch Landau-Darrieus und thermodiffusive Instabilitäten beeinflusst werden, wird in dieser Arbeit ein Modell formuliert, das den Einfluss von Instabilitätseffekten auf die laminare Flammengeschwindigkeit berücksichtigt. Basierend auf einem phänomenologischen Modell wird die Deformationsrate auf der Flammenoberfläche als Stabilitätskriterium verwendet. Um die Simulation von technisch relevanten Konfigurationen zu ermöglichen, bei denen die Verbrennung zumeist durch Wärmeverluste in Wandnähe beeinflusst wird, werden Modelle, die als einfache Erweiterungen für algebraische Verbrennungsmodelle verwendet werden können, in der Literatur identifiziert und evaluiert.

Das Modell zur Berücksichtigung von LD- und TD-Instabilitäten wird anhand der Simulation laminarer, expandierender Kugelflammen in einer isobaren Verbrennungsbombe validiert. Die simulierte laminare Brenngeschwindigkeit im stabilen Bereich, als auch im instabilen Bereich zeigt eine sehr gute Übereinstimmung mit experimentellen Daten bei den Drücken $1bar$, $5bar$ und $10bar$. Die Deformationsrate zeigt sich als geeignetes Kriterium um die Transition zu instabilen Flammen zu beschreiben. Ein validiertes Modell für die laminare Flammengeschwindigkeit wird damit bereitgestellt, um LD- und TD-Effekte bei der Simulation von Vormischverbrennung zu berücksichtigen.

Um das neue Verbrennungsmodell für ottomotorische Verbrennung zu analysieren, wird eine turbulente Bunsenbrennerflamme bei unterschiedlichen Drücken und Turbulenzgraden simuliert. Die Ergebnisse werden hinsichtlich der turbulenten Flammengeschwindigkeit mit der Kobayashi Datenbank verglichen. Das neue Verbrennungsmodell mit Methan als Brennstoff kann für einen großen Druck- und Turbulenzbereich die turbulente Flammengeschwindigkeit des Experiments reproduzieren. Bei Propan als Brennstoff wird bei $1bar$ die Reaktionsrate etwas überschätzt, die Druckskalierung zu $5bar$ sowie die experimentellen Daten bei $5bar$ können gut wiedergegeben werden. LES mit unterschiedlichen Filterweiten zeigen, dass die Kombination aus Numerik, Turbulenzmodellierung und Verbrennungsmodell eine von der Filterweite unabhängige totale Flammenoberfläche berechnet.

Simulationen der turbulenten Bunsenbrennerflamme mit den Verbrennungsmodellen von Hawkes et al. [75] und Fureby [56] zeigen, dass bei hohem Druck mit moderaten turbulenten Reynolds Zahlen (aufgrund des hohen Drucks), aber geringer Feinstruktur-turbulenz beide Modelle die Feinstrukturflammenfaltung deutlich unterschätzen. Dies wird durch algebraische Analysen der Feinstruktur-faltung der Modelle bestätigt. Bei Propan als Brennstoff, wird bei $1bar$ eine sehr gute Übereinstimmung erreicht, allerdings wird bei hohem Druck und moderater Turbulenz die Reaktionsrate erneut deutlich unterschätzt.

Um das Verbrennungsmodell für Betriebspunkte zu untersuchen, die typisch für die

Verbrennung in stationären Gasturbinen sind, wurde eine Jetflamme, experimentell vom Paul-Scherrer-Institut untersucht, simuliert. Der Vergleich der Flammenformen, Geschwindigkeitsfelder und turbulenten Schwankungen zeigt bei Verwendung des neuen Verbrennungsmodells sowie den Modellen von Hawkes und Fureby eine gute Übereinstimmung mit dem Experiment. Bei den hohen Reynolds Zahlen wird die Druckskalierung bei allen Modellen zufriedenstellend wiedergegeben.

Dies lässt darauf schließen, dass bei erhöhtem Druck bereits bei geringer Turbulenz ein Verbrennungsmodell einen deutlichen Einfluss der Flammenfaltung auf Feinstrukturebene vorhersagen muss, um beispielsweise ottomotorische Verbrennung korrekt simulieren zu können. Die Simulation der turbulenten Jetflamme zeigt, dass aufgrund der hohen Geschwindigkeiten genügend Feinstruktur-Turbulenz generiert wird, um einen ausreichenden Einfluss der Verbrennungsmodelle zu erreichen. Es zeigt sich aber auch, dass die simulierten Flammen bei hohen Strömungsgeschwindigkeiten und den damit verbundenen ausgeprägten Scherschichten weniger sensitiv gegenüber den Verbrennungsmodellen sind.

Die Simulation eines nichtadiabaten Drallbrenners validiert das neue Verbrennungsmodell für eine technisch relevante Konfiguration und evaluiert Modelle zur Berücksichtigung der Flamme-Wand Interaktion. Eine verbesserte Übereinstimmung mit experimentellen Daten zeigt sich bei Berücksichtigung von FWI-Modellen. Die Erweiterung, die eine Reduktion der laminaren Flammengeschwindigkeit aufgrund von Wärmeverlusten beschreibt, zeigt das beste Modellverhalten und reproduziert Peclet Zahlen aus DNS und experimentellen Daten, die den Abstand der Flamme zur Wand bei Wärmeverlusten charakterisieren.

Das neue Verbrennungsmodell kann damit für Methan-Luft Gemische hinsichtlich der Vorhersage der turbulenten Flammengeschwindigkeit, Flammenform, Geschwindigkeits- und Turbulenzfelder als ausreichend validiert betrachtet werden.

LES der Bunsenbrennerflamme von Lachaux et al. [101] würde das Verbrennungsmodell hinsichtlich der vorhergesagten Flammenoberflächendichte für unterschiedliche Drücke validieren. Die Simulation der turbulenten Verbrennung in einer Verbrennungsbombe, experimentell untersucht von Renou und Boukhalfa [138], ermöglicht die Untersuchung der durch das Verbrennungsmodell vorhergesagten Flammenfaltung während der Expansion der Flamme für unterschiedliche Brennstoffe.

Das neue Verbrennungsmodell überschätzt bei 1bar die turbulente Flammengeschwindigkeit mit Propan als Brennstoff. Dies könnte die Berücksichtigung von Lewis Zahl Effekten auf die turbulente Flammenfaltung erfordern. In diesem Zusammenhang könnte man das Verbrennungsmodell für weitere Brennstoffe wie Wasserstoff oder Syngas evaluieren.

Die in dieser Arbeit verwendete lineare Theorie zur Berücksichtigung von stabilisierenden Streckeffekten auf die laminare Flammengeschwindigkeit ist auf schwach bis moderat turbulente Verbrennung limitiert. Zukünftige Arbeiten müssten sich daher mit einer geeigneten Modellierung laminarer Flammengeschwindigkeiten unter Berücksichtigung von Streckeffekten bei unterschiedlichen Drücken beschäftigen. Möglich wäre auch die Verwendung von Effizienzfunktionen die für die FSD Formulierung z.B. von Driscoll [46] vorgeschlagen wird, mit Korrelationen für die LES von Steinberg und Driscoll [145]. Allerdings werden bisher Effizienzfunktionen nicht bei unterschiedlichen Drücken numerisch

oder experimentell untersucht.

Literaturverzeichnis

- [1] Energie für Deutschland 2012 Fakten, Perspektiven und Positionen im globalen Kontext. pages 1–144, 2012.
- [2] T. M. Al-Shaalan. *Studying reacting turbulent couette flow using direct numerical simulations*. PhD Thesis, University of Wisconsin-Madison, 1997.
- [3] T. M. Al-Shaalan and C. Rutland. Turbulent, scalar transport, and reaction rates in flame-wall interaction. *Syposium (International) on Combustion/The Combustion Institute*, 27:793–799, 1998.
- [4] R.C. Aldredge, V. Vaezi, and P.D. Ronney. Premixed-flame propagation in turbulent Taylor–Couette flow. *Combustion and Flame*, 115:395–405, 1998.
- [5] R.C. Aldredge and Baifang Zuo. Flame acceleration associated with the Darrieus-Landau instability. *Combustion and Flame*, 127(3):2091–2101, 2001.
- [6] N. Aluri, S. Muppala, and F. Dinkelacker. Large-eddy simulation of lean premixed turbulent flames of three different combustion configurations using a novel reaction closure. *Flow, Turbulence and Combustion*, 80:207–224, 2008.
- [7] M.S. Anand and S.B. Pope. Calculations of premixed turbulent flames by PDF methods. *Combustion and Flame*, 67(2):127–142, 1987.
- [8] C. Angelberger, T. Poinso, and B. Delhaye. Improving near-wall combustion and wall heat transfer modelling in SI engine computations. *SAE Paper*, page 972881, 1997.
- [9] C. Angelberger, D. Veynante, F. Egolfopoulos, and T. Poinso. Large eddy simulations of combustion instabilities in premixed flames. *Proceedings of the Summer Program*, pages 61–82, 1998.
- [10] Arnaud Trouvé and Thierry Poinso. The evolution equation for the flame surface density in turbulent premixed combustion. *Journal of Fluid Mechanics*, 278(1):1–31, 1994.
- [11] J.K. Bechtold and M. Matalon. Hydrodynamic and diffusion effects on the stability of spherically expanding flames. *Combustion and Flame*, 67(1):77–90, 1987.

- [12] Richard J. Blint. The Relationship of the Laminar Flame Width to Flame Speed. *Combustion Science and Technology*, 49(1-2):79–92, 1986.
- [13] M. Boger and D. Veynante. Large eddy simulations of a turbulent premixed v-shaped flame. *Advances in Turbulence*, VIII, 2000.
- [14] M. Boger, D. Veynante, H. Boughanem, and A. Trouvé. Direct numerical simulation analysis of flame surface density concept for large eddy simulation of turbulent premixed combustion. *Symposium (International) on Combustion*, 27(1):917–925, 1998.
- [15] D. Bradley. Instabilities and flame speeds in large-scale premixed gaseous explosions. *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, pages 3567–3581, 1999.
- [16] D. Bradley. Fundamentals of Lean Combustion. In D. Dunn-Rankin, editor, *Lean Combustion: Technology and Control*, pages 19–53. Elsevier, 2008.
- [17] D. Bradley, P.H. Gaskell, X.J. Gu, and A. Sedaghat. Premixed flamelet modelling: Factors influencing the turbulent heat release rate source term and the turbulent burning velocity. *Combustion and Flame*, 143(3):227–245, 2005.
- [18] D. Bradley, R.A. Hicks, M. Lawes, C.G.W. Sheppard, and R. Woolley. The Measurement of Laminar Burning Velocities and Markstein Numbers for Iso-octane–Air and Iso-octane–n-Heptane–Air Mixtures at Elevated Temperatures and Pressures in an Explosion Bomb. *Combustion and Flame*, 115(1–2):126–144, 1998.
- [19] D. Bradley, M. Lawes, Kexin Liu, S. Verhelst, and R. Woolley. Laminar burning velocities of lean hydrogen–air mixtures at pressures up to 1.0 MPa. *Combustion and Flame*, 149(1–2):162–172, 2007.
- [20] D. Bradley, C.G.W. Sheppard, R. Woolley, D.A. Greenhalgh, and R.D. Lockett. The development and structure of flame instabilities and cellularity at low markstein numbers in explosions. *Combustion and Flame*, 122(1–2):195–209, 2000.
- [21] Derek Bradley and C.M. Harper. The development of instabilities in laminar explosion flames. *Combustion and Flame*, 99(3–4):562–572, 1994.
- [22] A. Brandl, M. Pfitzner, J. Mooney, B. Durst, and W. Kern. Comparison of combustion models and assessment of their applicability to the simulation of premixed turbulent combustion in SI-engines. *Flow, Turbulence and Combustion*, 75:335–350, 2005.
- [23] K. N. C. Bray, M. Champion, and P.A. Libby. Pre-mixed flames in stagnating turbulence: Part V—evaluation of models for the chemical source term. *Combustion and Flame*, 127:2023–2040, 2001.

- [24] I.N. Bronstein, K.A. Semendjajew, G. Musiol, and H. Mühlig. *Taschenbuch der Mathematik*. Harry Deutsch, 2008.
- [25] G. Bruneaux, T. Poinso, and J.H. Ferziger. Premixed flame-wall interaction in a turbulent channel flow: budget for the flame surface density equation and modelling. *Journal of Fluid Mechanics*, 349:191–219, 1997.
- [26] E. Bruno, C. Favini, and B. Giacomazzi. Fractal modeling of turbulent combustion. *Combustion Theory and Modelling*, 4(4):391–412, 2000.
- [27] T.D. Butler and P.J. O’Rourke. A numerical method for two dimensional unsteady reacting flows. *Symposium (International) on Combustion*, 16(1):1503–1515, 1977.
- [28] Vitaly Bychkov. Importance of the Darrieus-Landau instability for strongly corrugated turbulent flames. *Phys. Rev. E*, 68:066304, Dec 2003.
- [29] S. M. Candel and T. J. Poinso. Flame Stretch and the Balance Equation for the Flame Area. *Combustion Science and Technology*, 70(1-3):1–15, 1990.
- [30] C.A. Catlin and R.P. Lindstedt. Premixed turbulent burning velocities derived from mixing controlled reaction models with cold front quenching. *Combustion and Flame*, 85(3–4):427–439, 1991.
- [31] I. B. Celik, Z. N. Cehreli, and I. Yavuz. Index of Resolution Quality for Large Eddy Simulations. *Journal of Fluids Engineering*, 127(5):949–958, 2005.
- [32] Nilanjan Chakraborty and R.S. Cant. Effects of Lewis number on flame surface density transport in turbulent premixed combustion. *Combustion and Flame*, 158(9):1768–1787, 2011.
- [33] Nilanjan Chakraborty and Markus Klein. A priori direct numerical simulation assessment of algebraic flame surface density models for turbulent premixed flames in the context of large eddy simulation. *Physics of Fluids*, 20(8):085108, 2008.
- [34] Fabrice Charlette, Charles Meneveau, and Denis Veynante. A power-law flame wrinkling model for LES of premixed turbulent combustion Part I: non-dynamic formulation and initial tests. *Combustion and Flame*, 131(1–2):159–180, 2002.
- [35] Fabrice Charlette, Charles Meneveau, and Denis Veynante. A power-law flame wrinkling model for LES of premixed turbulent combustion Part II: Dynamic formulation. *Combustion and Flame*, 131(1–2):181–197, 2002.
- [36] A. G. Class, B. J. Matkowsky, and A. Y. Klimenko. Stability of planar flames as gasdynamic discontinuities. *Journal of Fluid Mechanics*, 491:51–63, 2003.
- [37] P. Clavin and P. Garcia. The influence of the temperature dependence of diffusivities on the dynamics of flame fronts. *Journal de Mécanique Théorique et Appliquée*, 2:245–263, 1983.

- [38] P. Clavin and G. Joulin. Flamelet library for turbulent wrinkled flames. *Lecture notes in engineering: turbulent reactive flows*, 40:213–239, 1989.
- [39] Paul Clavin. Dynamic behavior of premixed flame fronts in laminar and turbulent flows. *Progress in Energy and Combustion Science*, 11(1):1–59, 1985.
- [40] O. Colin, F. Ducros, D. Veynante, and T. Poinso. A thickened flame model for large eddy simulations of turbulent premixed combustion. *Physics of Fluids.*, 12(7):1843–1863, 2000.
- [41] P. Constantin, I. Procaccia, and K.R. Sreenivasan. Fractal Geometry of Isoscalar Surfaces in Turbulence: Theory and Experiments. 67:1739–1743, 1991.
- [42] Gerhard Damköhler. Der Einfluss der Turbulenz auf die Flammengeschwindigkeit in Gasgemischen. *Zeitschrift für Elektrochemie und angewandte physikalische Chemie*, 46(11):601–626, 1940.
- [43] A.K. Das. *A fractal analysis of premixed turbulent flames*. Ph.d. thesis, University of British Columbia, 1993.
- [44] B. Debusschere and C. J. Rutland. Turbulent scalar transport mechanisms in plane channel and Couette flows. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 47(8-9):1771–1781, 2004.
- [45] F. Dinkelacker, B. Manickam, and S.P.R. Muppala. Modelling and simulation of lean premixed turbulent methane/hydrogen/air flames with an effective lewis number approach. *Combustion and Flame*, 158(9):1742–1749, 2011.
- [46] James F. Driscoll. Turbulent premixed combustion: Flamelet structure and its effect on turbulent burning velocities. *Progress in Energy and Combustion Science*, 34(1):91–134, 2008.
- [47] J.M. Duclos, D. Veynante, and T. Poinso. A comparison of flamelet models for premixed turbulent combustion. *Combustion and Flame*, 95(1–2):101–117, 1993.
- [48] L. Durand. *Development, implementation and validation of LES models for inhomogeneously premixed turbulent combustion*. Dissertation, Technische Universität München, 2007.
- [49] C. Duwig, L. Fuchs, P. Griebel, P. Siewer, and W. Boschek. Study of a Confined Turbulent Jet: Influence of Combustion and Pressure. *AIAA Journal*, 45(3):624–639, 2007.
- [50] C. Duwig, L. Urbina, L. Fuchs, P. Griebel, and P. Siewer. Large Eddy Simulation of a confined jet: influence of combustion on the velocity field. *44th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*, (2006-157):1–12, 2006.

- [51] J. H. Ferziger and T. Echehki. A Simplified Reaction Rate Model and its Application to the Analysis of Premixed Flames. *Combustion Science and Technology*, 89(5-6):293–315, 1993.
- [52] J. H. Ferziger and M. Perić. *Numerische Strömungsmechanik*. Springer, 1 edition, 2006.
- [53] L. Filyand, G.I. Sivashinsky, and M.L. Frankel. On self propagation of outward propagating flames. *Physica D*, 72:110–118, 1997.
- [54] P. Flohr and H. Pitsch. A turbulent flame speed closure model for LES of industrial burner flows. *Center for Turbulence Research, Proceedings of the Summer Program*, pages 169–179, 2000.
- [55] Jochen Fröhlich. *Large Eddy Simulation turbulenter Strömung*. Teubner, 2006.
- [56] C. Fureby. A fractal flame-wrinkling large eddy simulation model for premixed turbulent combustion. *Proceedings of the Combustion Institute*, 30(1):593–601, 2005.
- [57] C. Fureby, G. Tabor, H. G. Weller, and A. D. Gosman. A comparative study of sub-grid scale models in homogeneous isotropic turbulence. *Physics of Fluids*, 9(5):1416–1429, 1997.
- [58] Peter Gerlinger. *Numerische Verbrennungssimulation*. Springer Berlin / Heidelberg, 2005.
- [59] P. J. Goix and I. G. Shepherd. Lewis Number Effects on Turbulent Premixed Flame Structure. *Combustion Science and Technology*, 91(4-6):191–206, 1993.
- [60] P. J. Goix, I. G. Shepherd, and M. Trinite. A Fractal Study of a Premixed V-Shaped H₂/Air Flame. *Combustion Science and Technology*, 63(4-6):275–286, 1989.
- [61] Yu. A. Gostintsev, A. G. Istratov, and Yu. V. Shulenin. Self-similar propagation of a free turbulent flame in mixed gas mixtures. *Combustion, Explosion, and Shock Waves*, 24:563–569, 1988.
- [62] J. Göttgens, F. Mauss, and N. Peters. Analytic approximations of burning velocities and flame thicknesses of lean hydrogen, methane, ethylene, ethane, acetylene, and propane flames. *Symposium (International) on Combustion*, 24(1):129–135, 1992. Twenty-Fourth Symposium on Combustion.
- [63] F.C. Gouldin. An application of fractals to modeling premixed turbulent flames. *Combustion and Flame*, 68(3):249–266, 1987.
- [64] F.C. Gouldin, K.N.C. Bray, and J.-Y. Chen. Chemical closure model for fractal flamelets. *Combustion and Flame*, 77(3-4):241–259, 1989.

-
- [65] P. Griebel, R. Bombach, A. Inauen, R. Scharen, S. Schenker, and P. Siewert. Flame Characteristics and Turbulent Flame Speeds of Turbulent, High-Pressure, Lean Premixed Methane/Air Flames. *ASME Conference Proceedings*, 2005(4725X):405–413, 2005.
- [66] P. Griebel, R. Scharen, P. Siewert, R. Bombach, A. Inauen, and W. Kreutner. Flow Field and Structure of Turbulent High-Pressure Premixed Methane/Air Flames. *ASME Conference Proceedings*, 2003(36851):301–310, 2003.
- [67] P. Griebel, P. Siewert, and P. Jansohn. Flame characteristics of turbulent lean premixed methane/air flames at high pressure: Turbulent flame speed and flame brush thickness. *Proceedings of the Combustion Institute*, 31(2):3083–3090, 2007.
- [68] X.J. Gu, M.Z. Haq, M. Lawes, and R. Woolley. Laminar burning velocity and Markstein lengths of methane–air mixtures. *Combustion and Flame*, 121(1–2):41–58, 2000.
- [69] Ömer L. Gülder. Turbulent premixed flame propagation models for different combustion regimes. *Symposium (International) on Combustion*, 23(1):743–750, 1991.
- [70] Ömer L. Gülder and Gregory J. Smallwood. Inner cutoff scale of flame surface wrinkling in turbulent premixed flames. *Combustion and Flame*, 103(1-2):107–114, 1995.
- [71] H. Boughanem and A. Trouvé. The domain of influence of flame instabilities in turbulent premixed combustion. *Symposium (International) on Combustion*, 27(1):971–978, 1998.
- [72] H. Kröger. *Large-Eddy Simulation of Combustion Induced Vortex Breakdown in an Unconfined Turbulent Vortex using a Presumed-PDF Combustion Model*. Dissertation, Universität Rostock, 2010.
- [73] E. R. Hawkes and R. S. Cant. Implications of a flame surface density approach to large eddy simulation of premixed turbulent combustion. *Combustion and Flame*, 126(3):1617–1629, 2001.
- [74] E.R. Hawkes and R.S. Cant. A flame surface density approach to large-eddy simulation of premixed turbulent combustion. *Proceedings of the Combustion Institute*, 28(1):51–58, 2000.
- [75] Evatt R. Hawkes, Obulesu Chatakonda, Hemanth Kolla, Alan R. KerDur, and Jacqueline H. Chen. A petascale direct numerical simulation study of the modelling of flame wrinkling for large-eddy simulations in intense turbulence. *Combustion and Flame*, (0):–, 2012.
- [76] F.E. Hernández-Pérez, F.T.C. Yuen, C.P.T. Groth, and Ö.L. Gülder. LES of a laboratory-scale turbulent premixed Bunsen flame using FSD, PCM-FPI and thickened flame models. *Proceedings of the Combustion Institute*, 33(1):1365–1371, 2011.

- [77] A. B. Hoffmann. *Modellierung turbulenter Vormischverbrennung*. Dissertation, Universität Karlsruhe TH, 2004.
- [78] Hrvoje Jasak. *Error Analysis and Estimation for the Finite Volume Methode with Applications to Fluid Flows*. PhD thesis, Imperial College of Science, Technology and Medicine, 1996.
- [79] Franz Joos. *Technische Verbrennung*. Springer, 2006.
- [80] Ulrich Maas Jügen Warnatz. *Technische Verbrennung*. Springer, 1992.
- [81] Andreas Kempf, Markus Klein, and Johannes Janicka. Efficient Generation of Initial- and Inflow-Conditions for Transient Turbulent Flows in Arbitrary Geometries. *Flow, Turbulence and Combustion*, 74:67–84, 2005.
- [82] R. Keppeler, J. Kranawetvogl, M.-M. Jarczyk, and M. Pfitzner. *Large Eddy Simulationen von Rohr- Kanal- und Freistrahlsströmung mit OpenFOAM*. Technical report, Universität der Bundeswehr München, 2011.
- [83] R. Keppeler, E. Tangermann, and M. Pfitzner. Extension of a Large Eddy Simulation combustion model for high pressures and for low Reynolds number flames. *Proceedings of European Combustion Meeting, Cardiff*, 2011.
- [84] Alan R. Kerstein. Fractal Dimension of Turbulent Premixed Flames. *Combustion Science and Technology*, 60(4-6):441–445, 1988.
- [85] L. Khittrin, P. Moin, D. Smirnov, and V. Shevchuk. Peculiarities of laminar- and turbulent-flame flashbacks. *Symposium (International) on Combustion*, 10:1285–1291, 1965.
- [86] A. Y. Klimenko. Examining the Cascade Hypothesis for Turbulent Premixed Combustion. *Combustion Science and Technology*, 139:15–40, 1998.
- [87] E. Knudsen and H. Pitsch. A dynamic model for the turbulent burning velocity for large eddy simulation of premixed combustion. *Combustion and Flame*, 154(4):740–760, 2008.
- [88] Hideaki Kobayashi, Y. Kawabata, and K. Maruta. Experimental study on general correlation of turbulent burning velocity at high pressure. *Symposium (International) on Combustion*, 27(1):941–948, 1998.
- [89] Hideaki Kobayashi, Takuya Kawahata, Katsuhiro Seyama, Toshiro Fujimari, and Jong-Soo Kim. Relationship between the smallest scale of flame wrinkles and turbulence characteristics of high-pressure, high-temperature turbulent premixed flames. *Proceedings of the Combustion Institute*, 29(2):1793–1800, 2002.
- [90] Hideaki Kobayashi and Hiroyuki Kawazoe. Flame instability effects on the smallest wrinkling scale and burning velocity of high-pressure turbulent premixed flames. *Proceedings of the Combustion Institute*, 28(1):375–382, 2000.

- [91] Hideaki Kobayashi, Teppei Nakashima, Takashi Tamura, Kaoru Maruta, and Takashi Niioka. Turbulence measurements and observations of turbulent premixed flames at elevated pressures up to 3.0 MPa . *Combustion and Flame*, 108(1-2):104–110, 1997.
- [92] Hideaki Kobayashi, Yuki Otawara, Jinhua Wang, Futoshi Matsuno, Yasuhiro Ogami, Masaki Okuyama, Taku Kudo, and Satoshi Kadowaki. Turbulent premixed flame characteristics of a CO/H₂/O₂ mixture highly diluted with CO₂ in a high-pressure environment. *Proceedings of the Combustion Institute*, (0):–, 2012.
- [93] Hideaki Kobayashi, Katsuhiko Seyama, Hirokazu Hagiwara, and Yasuhiro Ogami. Burning velocity correlation of methane/air turbulent premixed flames at high pressure and high temperature. *Proceedings of the Combustion Institute*, 30(1):827–834, 2005.
- [94] Hideaki Kobayashi, Takashi Tamura, Kaoru Maruta, Takashi Niioka, and Forman A. Williams. Burning velocity of turbulent premixed flames in a high-pressure environment. *Symposium (International) on Combustion*, 26(1):389–396, 1996.
- [95] T. Komarek and W. Polifke. GV 6:Dynamik von Vormischflammen. *Abschlussbericht Forschungsinitiative "Kraftwerke des 21. Jahrhunderts (KW21)"*, pages 704–723, 2009.
- [96] T. Komarek, L. Tay Wo Chong, M. Zellhuber, A. Huber, and W. Polifke. Modelling the Effect of Heat Loss on the Flame Stabilization in Shear Layers. 2nd International Conference on Jets, Wakes and Separated Flows, Berlin, Germany, 2008.
- [97] Josef Kranawetvogl. *Implementierung und Validierung eines auf der Fraktaltheorie basierenden Vormischverbrennungsmodells*. Masterarbeit, Universität der Bundeswehr München, 2010.
- [98] Josef Kranawetvogl. *Large Eddy Simulation turbulenter Freistrahlen*. Projektarbeit, Universität der Bundeswehr München, 2010.
- [99] V.R. Kuznetsov and V.A. Sabel'nikov. In N. Chigier and P.A. Libby, editors, *Turbulence and Combustion*. Hemisphere Publishing Corporation, 1990.
- [100] O.C. Kwon, G. Rozenchan, and C.K. Law. Cellular instabilities and self-acceleration of outwardly propagating spherical flames. *Proceedings of the Combustion Institute*, 29(2):1775–1783, 2002.
- [101] T. Lachaux, F. Halter, C. Chauveau, I. Gökalp, and I.G. Shepherd. Flame front analysis of high-pressure turbulent lean premixed methane–air flames. *Proceedings of the Combustion Institute*, 30(1):819–826, 2005.
- [102] Gwang G. Lee, Kang Y. Huh, and Hideaki Kobayashi. Measurement and analysis of flame surface density for turbulent premixed combustion on a nozzle-type burner. *Combustion and Flame*, 122(1–2):43–57, 2000.

- [103] B. Lewis and G. von Elbe. Stability and Structure of Burner Flames. *J. Chem. Phys.*, 11:75–97, 1943.
- [104] R.P. Lindstedt and V. Sakthitharan. Modelling of Transient Compressible Turbulent Reacting Flows. *Eight Symposium on Turbulent Shear Flows*, 1991.
- [105] R.P. Lindstedt and E.M. Váos. Modeling of premixed turbulent flames with second moment methods. *Combustion and Flame*, 116(4):461–485, 1999.
- [106] A. N. Lipatnikov and J. Chomiak. Turbulent flame speed and thickness: phenomenology, evaluation, and application in multi-dimensional simulations. *Progress in Energy and Combustion Science*, 28(1):1–74, 2002.
- [107] A.N. Lipatnikov and J. Chomiak. Molecular transport effects on turbulent flame propagation and structure. *Progress in Energy and Combustion Science*, 31(1):1–73, 2005.
- [108] Terence Ma and Andreas Kempf. Compressible and Incompressible Large Eddy Simulation of a Premixed Dump Combustor. *Proceedings of ASME Turbo Expo*, page 45304, 2011.
- [109] B. B. Mandelbrot. On the geometry of homogeneous turbulence, with stress on the fractal dimension of the iso-surfaces of scalars. *Journal of Fluid Mechanics*, 72:401–416, 1975.
- [110] M. Matalon, C. Cui, and J. K. Bechthold. Hydrodynamic theory of premixed flames: effects of stoichiometry, variable transport coefficients and arbitrary reaction orders. *Journal of Fluid Mechanics*, 487:179–210, 2003.
- [111] M. Matalon and B. J. Matkowsky. Flames as gasdynamic discontinuities. *Journal of Fluid Mechanics*, 124:239–259, 1982.
- [112] Moshe Matalon. Flame dynamics. *Proceedings of the Combustion Institute*, 32(1):57–82, 2009.
- [113] F. Mauss and N. Peters. Reduced Kinetic Mechanisms for Premixed Methane-Air Flames. *Lecture Notes in Physics*, 15:58–75, 1993.
- [114] C. Meneveau and T. Poinso. Stretching and quenching of flamelets in premixed turbulent combustion. *Combustion and Flame*, 86(4):311–332, 1991.
- [115] M. Metghalchi and J.C. Keck. Laminar burning velocity of propane-air mixtures at high temperature and pressure. *Combustion and Flame*, 38(0):143–154, 1980.
- [116] Varun Mittal and Heinz Pitsch. A flamelet model for premixed combustion under variable pressure conditions. *Proceedings of the Combustion Institute*, (0):–, 2012.

- [117] Vladimir Molkov. A multiphenomena turbulent burning velocity model for large eddy simulation of premixed combustion. In G.D. Frolov S.M. Roy and A.M. Starik, editors, *Nonequilibrium Phenomena: Plasma, Combustion, Atmosphere*, pages 315–323. Torus Press Ltd., 2009.
- [118] Robert D. Moser, John Kim, and Nagi N. Mansour. Direct numerical simulation of turbulent channel flow up to $Re_\tau = 590$. *Physics of Fluids*, 11(4):943–945, 1999.
- [119] V. Moureau, B. Fiorina, and H. Pitsch. A level set formulation for premixed combustion LES considering the turbulent flame structure. *Combustion and Flame*, 156(4):801–812, 2009.
- [120] U. C. Müller, M. Bollig, and N. Peters. Approximations for burning velocities and Markstein numbers for lean hydrocarbon and methanol flames. *Combustion and Flame*, 108(3):349–356, 1997.
- [121] S.P. Muppala, N.K. Aluri, F. Dinckelacker, and A. Leipertz. Development of an algebraic reaction rate closure for the numerical calculation of turbulent premixed methane, ethylene, and propane/air flames for pressures up to 1.0 MPa. *Combustion and Flame*, 140:257–266, 2005.
- [122] Motohide Murayama and Tadao Takeno. Fractal-like character of flamelets in turbulent premixed combustion. *Symposium (International) on Combustion*, 22(1):551–559, 1989.
- [123] I.K. Nwagwe, H.G. Weller, G.R. Tabor, A.D. Gosman, M. Lawes, C.G.W. Sheppard, and R. Wooley. Measurements and large eddy simulations of turbulent premixed flame kernel growth. *Proceedings of the Combustion Institute*, 28(1):59–65, 2000.
- [124] OpenFOAMCFD Limited . *OpenFOAM 1.6 User Guide* <http://www.openfoam.org/archive/1.6/docs/user/>.
- [125] R.N. Paul and K.N.C. Bray. Study of premixed turbulent combustion including landau-darrieus instability effects. *Symposium (International) on Combustion*, 26(1):259–266, 1996.
- [126] Pierre Pelce and Paul Clavin. Influence of hydrodynamics and diffusion upon the stability limits of laminar premixed flames. *Journal of Fluid Mechanics*, 124:219–237, 1982.
- [127] N. Peters. The turbulent burning velocity for large-scale and small-scale turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 384:107–132, 1999.
- [128] N. Peters. *Turbulent Combustion*, volume 1st. Cambridge University Press, 2000. 1st.
- [129] N. Peters and F.A. Williams. The asymptotic structure of stoichiometric methane-air flames. *Combustion and Flame*, 68(2):185–207, 1987.

- [130] J. Pieringer, M. Brandt, W. Polifke, P. Griebel, P. Siewert, Dr. Bombach R., A. Inauen, and W. Kreutner. Anwendung von Modellen der turbulenten Flammengeschwindigkeit auf einen vorgemischten Strahlbrenner. In *21. Deutscher Flammentag*, pages 629–634, Cottbus, D, September 2003.
- [131] Cambray Pierre and Joulin Guy. Length-Scales of Wrinkling of Weakly-Forced, Unstable Premixed Flames. *Combustion Science and Technology*, 97(4-6):405–428, 1994.
- [132] H. Pitsch and L. Duchamp de Lageneste. Large-eddy simulation of premixed turbulent combustion using a level-set approach. *Proceedings of the Combustion Institute*, 29(2):2001–2008, 2002.
- [133] T. Poinso, D.C. Haworth, and G. Bruneaux. Direct Simulation and Modeling of Flame-Wall Interaction for Premixed Combustion. *Combustion and Flame*, 95:118–132, 1993.
- [134] T. Poinso and D. Veynante. *Theoretical and numerical combustion*. Number 2nd. Edwards, 2005. 2nd.
- [135] T. Poinso, D. Veynante, and S. Candel. Diagrams of premixed turbulent combustion based on direct simulation. *Symposium (International) on Combustion*, 23(1):613–619, 1991.
- [136] S. B. Pope. *Turbulent Flows*. Cambridge University Press, 2008.
- [137] Keppeler R., Pfitzner M., Chong L.T.W, Komarek Th., and Polifke W. Including heat loss and quenching effects in algebraic models for Large Eddy Simulation of premixed combustion. *Proceedings of ASME Turbo Expo*, pages GT2012–68689, 2012.
- [138] B. Renou and A. Boukhalfa. An Experimental Study of Freely Propagating Premixed Flames at Various Lewis Numbers. *Combustion Science and Technology*, 162(1):347–370, 2001.
- [139] S. Richard, O. Colin, O. Vermorel, A. Benkenida, C. Angelberger, and D. Veynante. Towards large eddy simulation of combustion in spark ignition engines. *Proceedings of the Combustion Institute*, 31(2):3059–3066, 2007.
- [140] G. L. Santavicca and D. A. North. The Fractal Nature of Premixed Turbulent Flames. *Combustion Science and Technology*, 72(4):215–232, 1990.
- [141] F. Schwertfilm and M. Manhart. DNS of passive scalar transport in turbulent channel flow at high Schmidt numbers. *Turbulence Heat and Mass Transfer*, 5:289–292, 2006.
- [142] Geoff Searby and Jean-Marie Truffaut. Experimental Studies of Laminar Flame Instabilities. In David Reguera, José Rubí, and Luis Bonilla, editors, *Coherent Structures in Complex Systems*, volume 567 of *Lecture Notes in Physics*, pages 159–181. Springer Berlin / Heidelberg, 2001.

- [143] P. Siewert. *Flame front characteristics of turbulent lean premixed methane / air flames at high-pressure*. Dissertation, ETH Zürich, 2007.
- [144] G.J. Smallwood, Ö.L. Gülder, D.R. Snelling, B.M. Deschamps, and I. Gökalp. Characterization of flame front surfaces in turbulent premixed methane/Air combustion. *Combustion and Flame*, 101(4):461–470, 1995.
- [145] Adam M. Steinberg and James F. Driscoll. Stretch-rate relationships for turbulent premixed combustion LES subgrid models measured using temporally resolved diagnostics. *Combustion and Flame*, 157(7):1422–1435, 2010.
- [146] Eike Tangermann, Roman Keppeler, and Michael Pfitzner. Premixed Turbulent Combustion Models for Large Eddy and RANS Simulations. *Proceedings of ASME Turbo Expo*, pages GT2010–22298, 2010.
- [147] Eike Tangermann and Michael Pfitzner. Evaluation of Combustion Models for Combustion-Induced Vortex Breakdown. *Journal of Turbulence*, 10(7), 2009.
- [148] Jean-Marie Truffaut and Geoff Searby. Experimental Study of the Darrieus-Landau instability on an inverted-‘V’ flame, and measurement of the Markstein number. *Combustion Science and Technology*, 149(1-6):35–52, 1999.
- [149] O. Vermorel, S. Richard, O. Colin, C. Angelberger, A. Benkenida, and D. Veynante. Towards the understanding of cyclic variability in a spark ignited engine using multi-cycle LES. *Combustion and Flame*, 156(8):1525–1541, 2009.
- [150] D. Veynante, A. Trouvé, K. N. C. Bray, and T. Mantel. Gradient and counter-gradient scalar transport in turbulent premixed flames. *Journal of Fluid Mechanics*, 332:263–293, 1997.
- [151] D. Veynante and Luc Vervisch. Turbulent combustion modeling. *Progress in Energy and Combustion Science*, 28:193–266, 2002.
- [152] G. Wang, M. Boileau, and D. Veynante. Implementation of a dynamic thickened flame model for large eddy simulations of turbulent premixed combustion. *Combustion and Flame*, 158(11):2199–2213, 2011.
- [153] Jinhua Wang, Futoshi Matsuno, Masaki Okuyama, Yasuhiro Ogami, Hideaki Kobayashi, and Zuohua Huang. Flame front characteristics of turbulent premixed flames diluted with CO₂ and H₂O at high pressure and high temperature. *Proceedings of the Combustion Institute*, (0):–, 2012.
- [154] A. P. Watkins, S.P. Li, and R.S. Cant. Premixed Combustion Modelling for Spark-Ignition Engine Applications . *SAE technical paper*, page 961190, 1996.
- [155] H.G. Weller. The Development of a New Flame Area Combustion Model Using Conditional Averaging. Technical Report TF/9307, Department of Mechanical Engineering, Imperial College of Science Technology and Medicine, March 1993.

- [156] H.G. Weller, G. Tabor, A.D. Gosman, and C. Fureby. Application of a flame-wrinkling les combustion model to a turbulent mixing layer. *Symposium (International) on Combustion*, 27:899–907, 1998. Twenty-Seventh Symposium on Combustion.
- [157] I. S. Wichman and G. Bruneaux. Head-on quenching of a premixed flame by a Cold wall. *Combustion and Flame*, 103:296–310, 1995.
- [158] Forman A. Williams. *Combustion Theory*. Number 2. Benjamin/Cummings, 1985.
- [159] Huahua Xiao, Dmitriy Makarov, Jinhua Sun, and Vladimir Molkov. Experimental and numerical investigation of premixed flame propagation with distorted tulip shape in a closed duct. *Combustion and Flame*, 159(4):1523–1538, 2012.
- [160] A. Yoshida, M. Kasahara, H. Tsuji, and T. Yanagisawa. Fractal Geometry Application in Estimation of Turbulent Burning Velocity of Wrinkled Laminar Flame. *Combustion Science and Technology*, 103(1-6):207–218, 1994.
- [161] IA.B. Zeldovich, G.I. Barenblatt, V.B. Librovich, and G.M. Makhviladze. In *Mathematical theory of combustion and explosions*. Consultants Bureau, New York, NY, 1985.
- [162] V. Zimont and V. Battaglia. Joint RANS/LES Approach to Premixed Flame Modelling in the Context of the TFC Combustion Model. *Flow, Turbulence and Combustion*, 77:305–331, 2006.
- [163] V. L. Zimont and A. Lipatnikov. A Numerical Model of Premixed Turbulent Combustion of Gases. *Chem. Phys. Rep.*, 14(1):993–1025, 1995.

Abbildungsverzeichnis

2.1	Energiespektrum turbulenter Strömung	11
3.1	Geschwindigkeitsfeld einer Kanalströmung aus LES (rot) und DNS (schwarz); a) Geschwindigkeit und Wandabstand normiert mit u_τ ; b) Geschwindigkeit und Wandabstand normiert mit mittlerer Geschwindigkeit und Kanalhöhe	19
3.2	Reynoldsspannungen einer Kanalströmung aus LES (rot) und DNS (schwarz)	20
3.3	Simulation einer Kanalströmung mit Skalartransport; DNS (schwarz) LES (rot); a) mittleres Konzentrationsfeld von c ; b) mittlere turbulente Schwankung von c	21
3.4	Turbulenter Fluss aus Simulation einer Kanalströmung mit Skalartransport DNS (schwarz) LES (rot)	21
3.5	Netzeinfluss auf Feinstrukturviskosität bei geradem inneren Block, Konturlinien $\langle \nu_t \rangle$ (rot)	22
3.6	Netzeinfluss auf Feinstrukturviskosität bei abgerundetem inneren Block, Konturlinien $\langle \nu_t \rangle$ (rot)	22
4.1	Normierte Reaktionsrate $\dot{\omega}_F/\max(\dot{\omega}_F)$ bei Einschrittchemie für $1bar$ (durchgezogene Linie) und $5bar$ (gepunktete Linie); dominierende Mechanismen sind für $5bar$ eingetragen	25
4.2	Laminare Flammengeschwindigkeiten; a) ebene stationäre Flamme; b) schräg angeströmte, stationäre Flamme	26
4.3	Laminare Flammengeschwindigkeit bei variierendem Druck und Äquivalenzverhältnis; Experiment von Gu et al. [68] (Rauten); Auswertung der Korrelationen von Göttgens et al. [62] (Linien); $1bar$ (schwarz), $5bar$ (grau), $10bar$ (weiß bzw. gestrichelt)	28
4.4	Temperaturverlauf einer laminaren in x-Richtung propagierenden Flamme mit dominierenden Mechanismen aus [129]	29
4.5	Prinzip von Landau-Darrieus und thermodiffusiven Instabilitäten	31
4.6	Entdimensionierte Wachstumsrate für unterschiedliche Lewis Zahl; $Le = 1,64$ (durchgezogen), $Le = 1$ (gepunktet), $Le = 0,8$ (gestrichelt), nur Landau-Darrieus Effekt (strich-punkt)	34

4.7	Entdimensionierte Wachstumsrate für unterschiedlichen Druck; $p = 1bar$ (durchgezogen), $p = 5bar$ (gepunktet), $p = 10bar$ (gestrichelt), nur Landau-Darrieus Effekt (strich-punkt)	34
4.8	Auswertung der Dispersionsrelation Gleichung (4.27) für expandierende Kugelflammen; a) $Pe_r = 80$; b) $Pe_r = 250$; σ_{sp} (durchgezogene Linie), $\sigma_{LD,sp}$ (Strichpunklinie), $\sigma_{sp}\Omega/Pe_r$ (gepunktete Linie)	36
4.9	Von Damköhler [42] identifizierte Mechanismen bei turbulenter Vormischverbrennung; a) Grenzbereich grober Skalen; b) Grenzbereich kleiner Skalen	38
4.10	Prinzipielles Verhalten der turbulenten Flammengeschwindigkeit mit zunehmender Turbulenz [134]	39
4.11	Regimediagramm nach Borghi in doppelt-logarithmischer Darstellung	42
4.12	Verbrennungsdiagramm nach Peters [128] in doppelt-logarithmischer Darstellung; blauer Bereich kennzeichnet charakteristische Betriebspunkte ottomotorischer Verbrennung, oranger Bereich entspricht typischer Verbrennung in stationären Gasturbinen	43
5.1	Fraktales Verhalten von turbulenten Flammen in einem doppelt-logarithmischen Diagramm; theoretischer Verlauf entsprechend Gleichung (5.23) ist als Linie dargestellt; a) Auswertung von DNS in [75]; b) Auswertung experimenteller Daten in [140];	51
5.2	Schematisches Verhalten der Flammenoberflächendichte in Abhängigkeit des Wandabstands	59
5.3	Berechnungsprinzip anhand der Auswertung der Dispersionsrelation in Gleichung (4.27) für $Pe_r = 250$	65
5.4	Instabilitätsbereich laminarer kugelförmiger Flammen anhand der Dispersionsrelation in Gleichung (4.27); durchgezogene dicke Linie: $n_{sp,s}$; durchgezogene dünne Linie: $n_{sp,l}$; Strichpunklinie: $n_{sp,m}$;	66
5.5	Instabilitätsbereich laminarer kugelförmiger Flammen anhand der Dispersionsrelation in Gleichung (4.27) mit Korrektur nach Bradley [15], Gleichung (5.56); durchgezogene dicke Linie: $n_{sp,s}$; durchgezogene dünne Linie: $n_{sp,l}$; gepunktete Linie: $f n_{sp,s}$	66
5.6	Zusammenfassung experimentell ermittelter kritischer Peclet Zahlen über der Markstein Zahl für die Deformationsrate, übernommen aus [68]; Quadrat: Methan [68]; Raute: Iso-Oktan [18]; Linie: lineare Regression der Daten	67
6.1	Auswertung von $\bar{c}(1 - \bar{c})$ (durchgezogene Linie); $d\bar{c}/d\xi$ (gestrichelte Linie); $\bar{c}(1 - \bar{c})/(d\bar{c}/d\xi)$ (gepunktete Linie)	76
7.1	Gegenüberstellung der Dispersionsrelation, Gleichung (4.22), mit experimentellen Daten aus [142] für Propanflammen mit $\Phi = 1,05$	78

7.2	Modellierungsprinzip zur Berücksichtigung von Deformationseffekten auf die Wachstumsrate von Störungen; a) Dispersionsrelation aus Gleichung (4.22) über der Wellenzahl; b) Dispersionsrelation aus Gleichung (4.22) über der Wellenlänge	80
7.3	Auswertung des kritischen Karlovitz Faktors für die Deformationsrate; a) über Ma_s ; b) über Ma_{sr} ; Linie: lineare Regression der Daten	81
8.1	Initialisierung des Rechengebiets einer 1D Flamme	84
8.2	Evaluierung der Vorhersage der turbulenten Flammengeschwindigkeit durch das neue Modell über eine 1D Simulation einer stationären Flamme; 1bar (schwarze Rauten); 5bar (schwarze Vierecke); 10bar (weiße Rauten); 20bar (weiße Vierecke)	85
8.3	Untersuchung der Konvergenzrate der turbulenten Flammengeschwindigkeit bei unterschiedlicher Initialisierung der Flammendicke im Rechengebiet; $l_{F,init}/\Delta = 0, 1$ (durchgezogene Linie); $l_{F,init}/\Delta = 1$ (gestrichelte Linie); $l_{F,init}/\Delta = 5$ (gepunktete Linie); $l_{F,init}/\Delta = 10$ (gestrichelt gepunktete Linie)	86
8.4	Propagation der Flamme im 1D Rechengebiet	86
8.5	1-D Simulation der Flammenausbreitung in einem Kanal: Verlauf von \tilde{c} über dem Ort; a) $u'/s_L^0 = 0$; b) $u'/s_L^0 = 0, 5$; Symbole kennzeichnen die Zellmittelpunkte	87
8.6	a) Rechengebiet mit initialisierter Kugelflamme; b) radialer Verlauf der initialisierten Geschwindigkeit (Linie) und Fortschrittsvariablen (gestrichelte Linie)	90
8.7	Auswertung von Krümmung und Deformation der Flammenfront bei $r_u = 20mm$; a) Verlauf der Krümmung über der Fortschrittsvariablen, $\kappa_{c,sp}$ (durchgezogene Linie), κ_c (gepunktete Linie); b) Verlauf der Deformation über der Fortschrittsvariablen, $\kappa_{s,sp,kor}$ (durchgezogene Linie), $\kappa_{s,sp}$ (gestrichelte Linie), κ_s (gepunktete Linie)	91
8.8	Propagation der Flamme im Rechengebiet anhand des Reaktionsfortschritts \tilde{c} , für Fall 2 mit Berücksichtigung von Instabilitäten über das neue Modell, Gleichung (7.7)	94
8.9	Ausbreitungsgeschwindigkeit der Flamme für 1bar Fall 1; a) über der Streckrate; b) über dem Radius; Experiment (Rauten), reduzierter Mechanismus (graue Linie) und Simulationsdaten (rote Linie)	95
8.10	Darstellung der Flammenausbreitungsgeschwindigkeit über der Streckrate für Fall 2 (links) und Fall 3 (rechts); Berücksichtigung von Instabilitäten nach dem Modell von Bradley [15] Gleichung (5.57); Experiment (Rauten); reduzierter Mechanismus (graue Linie); Simulationsdaten $D = 7/3$ (blaue Linie) und $D = 2, 08$ (rote Linie)	95
8.11	Darstellung der Flammenausbreitungsgeschwindigkeit über der Streckrate für Fall 2 (links) und Fall 3 (rechts); Berücksichtigung von Instabilitäten nach dem in dieser Arbeit vorgeschlagenen Modell Gleichung (7.7); Experiment (Rauten); reduzierter Mechanismus (graue Linie); Simulationsdaten $D = 7/3$ (blaue Linie) und $D = 2, 08$ (rote Linie)	96

8.12	Darstellung der Flammenausbreitungsgeschwindigkeit über der Streckrate für Fall 2 (links) und Fall 3 (rechts) unter Verwendung unterschiedlicher Berechnungsansätze für die Streckungsrate; Berücksichtigung von Instabilitäten nach dem in dieser Arbeit vorgeschlagenen Modell Gleichung (7.7); Experiment (Rauten); reduzierter Mechanismus (graue Linie); Simulation mit allgemeiner Berechnung der Streckrate (blaue Linie) und globaler Berechnung der Streckrate (rote Linie)	96
8.13	links: Experimenteller Aufbau der Hochdruckbrennkammer mit Messaufbau und Peripherie; rechts: Konfiguration der Strömungsführung vor dem Brennkammereinlass	99
8.14	Methode zur Bestimmung der turbulenten Flammengeschwindigkeit im Experiment	100
8.15	a) Prinzip der Vernetzung in radialer und azimuthaler Richtung; b) Rechengebiet mit instantaner Flammenfront, Axialgeschwindigkeit als Konturplot	101
8.16	Simulierte Betriebspunkte in einem Verbrennungsdiagramm nach Peters; Methan-Luft (weiß); Propan-Luft (schwarz); 1bar (Rauten); 5bar(Vierecke); 10bar (Dreieck unten); 20bar (Dreieck rechts); blauer Bereich: ottomotorische Verbrennung; oranger Bereich: stationäre Gasturbinen	102
8.17	a) Verhältnis aufgelöster zur gesamten turbulenten kinetischen Energie; b) Verhältnis aufgelöster zur gesamten turbulenten kinetischen Energie unter Berücksichtigung numerischer Diffusion; Fall 5A (schwarz gestrichelt); Fall 5C (schwarz durchgezogen); Fall 16A (grau gestrichelt); Fall 16C (grau durchgezogen); vgl. Tab. 8.2 und Tab. 8.3 zur Fallbezeichnung	104
8.18	Instantane Flammenformen von Fall 5 (1bar), 8 (5bar), 14 (10bar), 16 (20bar) mit den Filterweiten A und C; vgl. Tab. 8.2 und Tab. 8.3 zur Fallbezeichnung	106
8.19	Auswertung der aufgelösten Flammenoberfläche (blaue Raute), Gesamtoberfläche (blaue Vierecke) und $A_{res}/A_{tot}[\%]$ (rote Vierecke) der Filterweite A,B,C vgl. Tabelle 8.2 der Fälle 5, 8, 14, 16; ; vgl. Tab. 8.2 und Tab. 8.3 zur Fallbezeichnung	107
8.20	Bereich der simulierten Fälle 5 und 16 der Filterweite A,B,C in einem LES Diagramm; 5A (schwarz); 5B (blau); 5C (rot); 16A(grün); 16B (orange); 16C (grau); vgl. Tab. 8.2 und Tab. 8.3 zur Fallbezeichnung	108
8.21	Abhängigkeit der Karlovitz Zahl Ka_{Δ} auf der Flammenoberfläche für Fall 16A a) mit axialen Abstand von der Brennerdüse; b) mit radialen Abstand von der Rotationsachse	108
8.22	Einfluss der Filterweite auf die Zeit gemittelte $\langle \bar{c} \rangle$ und die instantane Flammenoberfläche \tilde{c} , die Flammenoberflächendichte Σ und die aufgelöste Flammenoberflächendichte $ \nabla \tilde{c} $; a) Fall 5A ; b) Fall 5C; vgl. Tab. 8.2 und Tab. 8.3 zur Fallbezeichnung	109

8.23	Einfluss der Filterweite auf die Zeit gemittelte $\langle \bar{c} \rangle$ und die instantane Flammenoberfläche \tilde{c} , die Flammenoberflächendichte Σ und die aufgelöste Flammenoberflächendichte $ \nabla \tilde{c} $; a) Fall 16A ; b) Fall 16C; vgl. Tab. 8.2 und Tab. 8.3 zur Fallbezeichnung	110
8.24	Vergleich der verschiedenen Auswertemethoden für s_t bei Filterweite A; Methode 1 (schwarze Raute); Methode 2 (weißes Dreieck unten); Methode 3 (weißes Quadrat); Methode 4 (weißes Dreieck rechts)	112
8.25	Vergleich von s_t simuliert bei drei unterschiedlichen Filterweiten mit Methan als Brennstoff; Experiment (schwarze Raute); Filterweite A (graues Dreieck); Filterweite B (weißes Viereck); Filterweite C (weißes Dreieck) . .	113
8.26	Turbulente Flammengeschwindigkeit über u' mit Filterweite A bei 4 unterschiedlichen Drücken und Methan als Brennstoff; 1bar (Raute); 5bar (Viereck) 10bar (Dreieck unten); 20bar (Dreieck rechts)	114
8.27	Vergleich von s_t über LES mit Filterweite A für Propan als Brennstoff; Experiment (schwarze Raute); Simulation (graue Raute)	115
8.28	Vergleich von s_t aus der Simulation mit dem Modell von Fureby [56] und Hawkes et al. [75] mit Filterweite A und Methan als Brennstoff mit dem Experiment; Experiment (schwarze Raute); Fureby (weißes Dreieck); Hawkes (weißes Viereck)	116
8.29	Vergleich der Vorhersage von s_t/s_L^0 über dem Druck; neues Modell (schwarz); Fureby (blau); Hawkes (rot); $u'_\Delta = 0,27m/s$ (durchgezogene Linie); $u'_\Delta = 3m/s$ (gestrichelte Linie)	116
8.30	Vergleich von s_t aus der Simulation mit dem Modell von Fureby [56] und Hawkes et al. [75] mit Filterweite A und Propan als Brennstoff mit dem Experiment; Experiment (schwarze Raute); Fureby (weißes Dreieck); Hawkes (weißes Viereck)	117
8.31	Instantane Flammenfront mit der Deformationsrate als Kontur der Fälle 2, 6 und 10	119
8.32	Experimenteller Aufbau des PSI Brenners, Siewert [143] entnommen	120
8.33	links: Prinzip der Vernetzung in radialer und azimuthaler Richtung; rechts: Rechengebiet mit instantaner Flammenfront, Axialgeschwindigkeit als Konturplot	121
8.34	Zuordnung der Betriebspunkte der simulierten Fälle in das Regime-Diagramm nach Peters; Fall 1 (blau) Fall 2 (rot); Fall 3 (grün); orange Linie zeigt den Betriebsbereich stationärer Gasturbinen nach Hoffmann [77]	123
8.35	Auswertung der Fälle 1-3 in einem LES-Regime-Diagramm nach Pitsch [132]; Fall 1 (blau) Fall 2 (rot); Fall 3 (grün)	124
8.36	Abhängigkeit der Karlovitz Zahl Ka_Δ auf der Flammenoberfläche a) mit axialen Abstand von der Brennerdüse; b) mit radialen Abstand von der Rotationsachse	124
8.37	Gegenüberstellung experimenteller und simulierter instantaner Flammenfronten; links: Experiment, oben OH-PLIF unten binär; rechts: Simulation, oben \bar{c} unten binär	125

8.38	Gegenüberstellung der Flammenform von Experiment (unten) und Simulation (oben) mit neuem Modell für $\Phi = 0,5$	126
8.39	Gegenüberstellung der Flammenform von Experiment (unten) und Simulation (oben) mit neuem Modell für $\Phi = 0,56$	127
8.40	Gegenüberstellung von \bar{c} der Simulation mit neuem Modell für $1bar$ (blau) und $5bar$ (rot) mit $\Phi = 0,5$	128
8.41	Gegenüberstellung der Flammenform von Experiment und Simulation für $\Phi = 0,5$; a) Modell von Fureby; b) Modell von Hawkes	129
8.42	Gegenüberstellung von \bar{c} der Simulation mit Modell von Fureby für $1bar$ (blau) und $5bar$ (rot) mit $\Phi = 0,5$	130
8.43	Gegenüberstellung von \bar{c} der Simulation mit Modell von Hawkes für $1bar$ (blau) und $5bar$ (rot) mit $\Phi = 0,5$	131
8.44	Geschwindigkeitsfeld bei Simulation von Fall 2 sowie Auswertepositionen, Konturlinie zeigt $\langle \bar{c} \rangle = 0,5$	131
8.45	Vergleich der Axialgeschwindigkeit (durchgezogene Linie) und der turbulenten Schwankung (gestrichelt); Experiment (schwarz und Symbol); neues Modell $1bar$ (rot); neues Modell $5bar$ (blau); Fureby (grün); Hawkes (orange)	133
8.46	Vergleich der Axialgeschwindigkeit (durchgezogene Linie) und der turbulenten Schwankung (gestrichelt); Experiment (schwarz und Symbol); neues Modell $1bar$ (rot); neues Modell $5bar$ (blau); Fureby (grün); Hawkes (orange)	134
8.47	Vergleich der Axialgeschwindigkeit (durchgezogene Linie) und der turbulenten Schwankung (gestrichelt); Experiment (schwarz und Symbol); neues Modell $1bar$ (rot); neues Modell $5bar$ (blau); Fureby (grün); Hawkes (orange)	135
8.48	Konfiguration des Drallbrenners; Isofläche entspricht $\tilde{c} = 0,4$ und illustriert die instantane Flammenposition	137
8.49	Auswertung der Regimezuordnung auf der Flammenfront $\tilde{c} = 0,5$ in einem LES Regimediagramm	138
8.50	Auswertung der FWI-Modelle \tilde{Q}_{SL} Gleichung (5.42) und \tilde{Q}_{FSD} Gleichung (5.46) als Konturfläche; Isolinien zeigen $\tilde{c} = 0,2; 0,5; 0,8$	139
8.51	Konturverlauf von $\langle \tilde{c} \rangle$ auf der Brennerlanze bei Vernachlässigung und Berücksichtigung von Wärmeverlusten der Flamme	140
8.52	Konturverlauf der Axialgeschwindigkeit; Isolinien kennzeichnen $u_z = 0m/s$ und $u_z = -10m/s$; vertikale Linien kennzeichnen Auswertepositionen . . .	142
8.53	Auswertung der Zeit gemittelten Axialgeschwindigkeit in der Brennkammer; Experiment (schwarz); Vernachlässigung von FWI (grün); Berücksichtigung von FWI über \tilde{Q}_{FSD} (rot); Berücksichtigung von FWI über \tilde{Q}_{SL} (blau) . .	144
8.54	Integrale Darstellung der OH* Chemilumineszenz im Experiment und die integrale Darstellung des Reaktionsquellterms der Simulation, jeweils auf 1 normiert	145

Tabellenverzeichnis

4.1	Werte für β_{Zel}, T_u, T_b für eine stöchiometrische Methanflamme bei $1bar$ und $5bar$ zur Auswertung der Reaktionsrate in Gleichung (4.1)	26
4.2	Auflistung der Konstanten aus [62] zur Auswertung von Gleichung (4.5) und (4.6)	27
8.1	Auflistung der simulierten Fälle expandierender, kugelförmiger Flammen .	93
8.2	Filterweite und charakteristische Netzdaten der 3 verwendeten Rechenetze der Bunsenbrennerflamme	101
8.3	Umgebungs- und Randbedingungen der simulierten Betriebspunkte aus der Kobayashi Datenbank	103
8.4	Bereich der globalen, verbrennungsspezifischen Kennzahlen der simulierten Betriebspunkte, errechnet über Werte am Einlass bzw. der Umgebung . . .	103
8.5	Charakteristische Größen für Einsetzen von Instabilitäten	118
8.6	Daten den Strömungsfeldes der simulierten Fälle des PSI Brenners	122
8.7	Auflistung der simulierten Fälle mit verbrennungsspezifischen Kenngrößen des PSI Brenners	122
8.8	Vorhersage der Peclet Zahlen durch die Verlöschmodelle \tilde{Q}_{SL} Gleichung (5.42) und \tilde{Q}_{FSD} Gleichung (5.46) für thermisches Verlösch $Pe_{w,q}$ und Beginn von Wärmeverlusten $Pe_{w,I}$ bei unterschiedlichen Wandtemperaturen	140

A Anhang

A.1 Zusammenfassung der formulierten Modelle

A.1.1 Algebraisches, fraktales Verbrennungsmodell

Das in dieser Arbeit in Kapitel 6 formulierte Verbrennungsmodell schreibt sich zu:

$$\Sigma = \left\{ e^{\left(-\frac{2,2\Delta}{\epsilon_i}\Theta\right)} + \left(1 - e^{\left(-\frac{2,2\Delta}{\epsilon_i}\Theta\right)}\right) C_R \left(\frac{2, 2\Delta}{\max(l_F \cdot K a_{\Delta}^{-1/2}, 2l_F)} \right)^{D-2} \tilde{c}(1 - \tilde{c})\mathcal{F}(\tilde{c})^{-1} \right\} |\nabla\tilde{c}| \quad (\text{A.1})$$

Mit $\Theta = 2, 5$ und $C_R = 4, 5$ sowie:

$$\epsilon_i = l_F \max\left(K a_{\Delta}^{-1/2}, 2\right) \quad (\text{A.2})$$

$$D = \frac{8/3K a_{\Delta} + 2c_D}{K a_{\Delta} + c_D} \quad (\text{A.3})$$

Wobei $c_D = 0, 03$.

$$\mathcal{F}(\tilde{c}) = a_1 + a_2(-0.5 + \tilde{c})^2 + a_3(\tilde{c} - 0.5)^4 \quad (\text{A.4})$$

Die zugehörigen Konstanten ergeben sich zu $a_1 = 0, 995176$; $a_2 = -2, 81811$; $a_3 = -4, 30724$. Die Karlovitz Zahl wird implementiert über:

$$K a_{\Delta} = \left(\frac{u'_{\Delta}}{s_L^0} \right)^{3/2} \left(\frac{\Delta}{l_F} \right)^{-1/2} \quad (\text{A.5})$$

Wie in Abschnitt 6.6 dargelegt, würde sich aufgrund $[C_R\tilde{c}(1 - \tilde{c})/\mathcal{F}(\tilde{c})] \approx 1$ bei $C_R = 4, 5$ eine einfachere Modellformulierung ergeben:

$$\Sigma = \left(\frac{2, 2\Delta}{\max(l_F \cdot K a_{\Delta}^{-1/2}, 2l_F)} \right)^{D-2} |\nabla\tilde{c}| \quad (\text{A.6})$$

die allerdings hier nicht weiter untersucht wurde.

A.1.2 Modell für hydrodynamische Instabilitäten

Hydrodynamische Instabilitäten werden über eine Modellierung der laminaren Flammengeschwindigkeit berücksichtigt. Entsprechend Kapitel 7 ergibt sich das formulierte Modell zu:

$$s_{L,Inst} = \max \left(s_L^0 \left(\frac{k_{\Lambda,s}}{k_{\Lambda,l}} \right)^{D-2}, s_L \right) \quad (\text{A.7})$$

Die größten und kleinsten Wellenlängen, bei denen Instabilitäten auftreten berechnen sich über:

$$\begin{aligned} k_{\Lambda,s} &= \frac{s_L^0 \Psi_{LD} + \left[(s_L^0 \Psi_{LD})^2 - 4\alpha_{k,u} \Psi \sigma_s \right]^{0,5}}{2\alpha_{k,u} \Psi} \\ k_{\Lambda,l} &= \frac{s_L^0 \Psi_{LD} - \left[(s_L^0 \Psi_{LD})^2 - 4\alpha_{k,u} \Psi \sigma_s \right]^{0,5}}{2\alpha_{k,u} \Psi} \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

$$\text{mit } \max \left(\left[(s_L^0 \Psi_{LD})^2 - 4\alpha_{k,u} \Psi \sigma_s \right], 0 \right)$$

Die durch die Deformationsrate beeinflusste Wachstumsrate einer Störung wird berechnet über:

$$\sigma_s = C_s \kappa_s \quad (\text{A.9})$$

und

$$C_s = \frac{\sigma_{max,th}}{\kappa_{s,cl}} \quad (\text{A.10})$$

$\kappa_{s,cl}$ erhält man aus:

$$Ka_{s,cl} = \kappa_{s,cl} \frac{l_F}{s_L^0} \quad (\text{A.11})$$

mit:

$$Ka_{s,cl} = -5.9677 \cdot 10^{-4} Ma_{sr} + 5.8486 \cdot 10^{-3} \quad (\text{A.12})$$

Die maximale Wachstumsrate einer Dispersionsrelation $\sigma_{max,th}$ kann z.B. über die Relation von Matalon et al. [111] berechnet werden:

$$\sigma = s_L^0 \Psi_{LD} k_{\Lambda} - \alpha_{k,u} \Psi k_{\Lambda}^2 \quad (\text{A.13})$$

mit

$$\Psi = \frac{\gamma}{2(\gamma-1)} \frac{\beta_{Zel} (Le-1) I (\gamma + \Psi_{LD}) (1 + \Psi_{LD}) + (\gamma-1)^2 + \gamma(\gamma+1+2\Psi_{LD}) \ln \gamma}{\gamma + \Psi_{LD} (\gamma+1)}$$

A.2 Gleichungen zur Berechnung kugelförmiger Flammen

Im Folgenden sind die Gleichungen zusammengefasst, um die Dispersionrelation für expandierende Kugelflammen von Bechthold und Matalon [11] in Gleichung (4.27) auszuwerten. Zudem sind Korrekturen von Bradley [15] berücksichtigt.

$$\sigma_{LD,sp} = \frac{-(b-a) + \sqrt{(b-a)^2 - 4ac}}{2a} \quad (\text{A.14})$$

mit

$$a = (\gamma + 1)n_{sp} + 1$$

$$b = 2n_{sp}^2 + (4 + 5\gamma) + 4$$

$$c = -\frac{(\gamma - 1)n_{sp}^3}{\gamma} + 2n_{sp}^2 + (3(\gamma + 1) - \frac{1}{\gamma})n_{sp} + 2$$

$$\Omega = \frac{Q_1 + \beta_{Le}Q_2}{\sigma_{LD,sp}} \quad (\text{A.15})$$

mit

$$\beta_{Le} = \frac{\beta_{Zel}(Le - 1)}{\gamma - 1}$$

$$Q_1 = \frac{1}{(2\sigma_{LD,sp}a + b - 2a)} \left[\frac{\ln \gamma}{(\gamma - 1)} ((\gamma + 1)n_{sp}^4 + (2\sigma_{LD,sp} + 5)\gamma n_{sp}^3 + (\sigma_{LD,sp}\gamma - 2\gamma^2 + \gamma - 1)n_{sp}^2 + (\gamma - 7 - 3\sigma_{LD,sp} - \gamma\sigma_{LD,sp})n_{sp}\gamma - 2\gamma(1 + \sigma_{LD,sp})) + n_{sp}(n_{sp}^2 - 1)(n_{sp} + 2)\frac{(\gamma - 1)}{\gamma} \right]$$

$$Q_2 = \frac{\gamma \int_1^\gamma \frac{\ln s}{s-1} ds}{2\gamma(2\sigma_{LD,sp}a + b - 2a)} \left[2n_{sp}^4 + (2\sigma_{LD,sp}\gamma + 2\sigma_{LD,sp} + 10\gamma - 3)n_{sp}^3 + (2\gamma\sigma_{LD,sp}^2 + (5\gamma - 1)\sigma_{LD,sp} + 3\gamma - 2\gamma^2 - 2)n_{sp}^2 + (\gamma\sigma_{LD,sp}^2(1 - 4\gamma) - (14\gamma^2 + 1)\sigma_{LD,sp} + 3 - 9\gamma - 8\gamma^2)n_{sp} - 2\gamma(\sigma_{LD,sp}^2 + 4\sigma_{LD,sp} + 3) \right]$$

A.3 KPP-Analyse

Herleitung und Formulierung der Kolmogorov-Petrovski-Piskunov Analyse ist [134] entnommen. Betrachtet wird eine eindimensionale, stationäre Flamme, die beschrieben wird über:

$$\rho_u s_t \frac{\partial \tilde{c}}{\partial x} = \bar{\rho} \frac{\nu_t}{S_{C_t}} \frac{\partial^2 \tilde{c}}{\partial x^2} + \bar{\dot{\omega}}_c \quad (\text{A.16})$$

wobei ν_t nur von Turbulenzgrößen abhängt. Mit einem allgemeinen Reaktionsquellterm:

$$\bar{\dot{\omega}}_c = C_R \rho \frac{1}{\tau_{c,t}} \tilde{c}(1 - \tilde{c}) \quad (\text{A.17})$$

Für $\nu_t > 0$ wird die Flamme durch die Flammenvorderkante $\tilde{c} = 0$ kontrolliert und damit wird Gleichung (A.16) zu:

$$\rho_u s_t \frac{\partial \tilde{c}}{\partial x} = \rho_u \frac{\nu_t}{S_{C_t}} \frac{\partial^2 \tilde{c}}{\partial x^2} + C_R \rho_u \frac{1}{\tau_{c,t}} \tilde{c} \quad (\text{A.18})$$

Die Lösungen von Gleichung (A.18) ergeben sich zu [134]:

$$s_t \geq 2 \left(\frac{C_R \nu_t}{S_{C_t} \tau_{c,t}} \right)^{0,5} \quad (\text{A.19})$$

wobei dem KPP Theorem zu Folge die kleinste Geschwindigkeit der tatsächlichen Lösung entspricht [134]:

$$s_t = 2 \left(\frac{C_R \nu_t}{S_{C_t} \tau_{c,t}} \right)^{0,5} \quad (\text{A.20})$$

Für das in dieser Arbeit betrachtete fraktale Modell gilt:

$$\frac{1}{\tau_{c,t}} = s_L^0 \left(\frac{\epsilon_0}{\epsilon_i} \right)^{D-2} \delta_t^{-1} \quad (\text{A.21})$$

A.4 Berechnung kritischer Streckraten

In Gu et al. [68] werden kritische Peclet Zahlen, aber keine Daten zu kritischen Deformationsraten bereitgestellt. Diese müssen aus den experimentellen Daten errechnet werden. Mit Gleichung (8.5), $\kappa = 2/r_u S_n$, und mit S_n im stabilen Bereich:

$$S_n = S_s - La_b \kappa \quad (\text{A.22})$$

der ungestreckten laminaren Ausbreitungsgeschwindigkeit

$$S_s = s_L^0 \frac{\rho_u}{\rho_b} \quad (\text{A.23})$$

kann man die Streckrate κ bei einem bekannten Flammenradius berechnen:

$$\kappa = \frac{2}{r_u} s_L^0 \frac{\rho_u}{\rho_b} \left(1 + \frac{2}{r_u} La_b \right)^{-1} \quad (\text{A.24})$$

Aus der kritischen Peclet Zahl kann $r_{u,cl}$ und damit eine kritische Streckrate κ_{cl} berechnet werden. Über Gleichung (8.5) wird die kritische Ausbreitungsgeschwindigkeit der Flamme $S_{n,cl}$ bei $r_{u,cl}$ berechnet. Mit

$$s_L = S \left(S_n \frac{\rho_b}{\rho_u} \right) \quad (\text{A.25})$$

und über [68]

$$S = 1 + 1,2 \left[\frac{l_F}{r_u} \left(\frac{\rho_u}{\rho_b} \right)^{2,2} \right] - 0,15 \left[\frac{l_F}{r_u} \left(\frac{\rho_u}{\rho_b} \right)^{2,2} \right]^2 \quad (\text{A.26})$$

sowie Gleichung (4.15), $s_L = s_L^0 - (Ma_s \kappa_s + Ma_c \kappa_c) l_F$ und

$$|u_i|_{r_u} = S_n - s_L \quad (\text{A.27})$$

kann die kritische Deformationsrate über [68]

$$\kappa_s = 2 \frac{|u_i|_{r_u}}{r_u} \quad (\text{A.28})$$

berechnet werden. Werte zu $Pe_{r,cl}$, Ma_s , Ma_c , s_L^0 , ρ_u/ρ_b und l_F sind in Gu et al. [68] gegeben.

Vorveröffentlichungen

Im Rahmen dieser Arbeit wurden Teile bereits vorab veröffentlicht:

Keppeler R., Pfitzner M., Tay-Wo-Chong L., Komarek Th., and Polifke W.: *Including heat loss and quenching effects in algebraic models for Large Eddy Simulation of premixed combustion*. Proceedings of ASME Turbo Expo, GT2012-68689, 2012.

R. Keppeler, E. Tangermann, and M. Pfitzner: *Extension of a Large Eddy Simulation combustion model for high pressures and for low Reynolds number flames*. Proceedings of European Combustion Meeting, Cardiff, 2011.

Keppeler R., Tangermann E., Pfitzner M.: *Entwicklung und Validierung eines Grobstruktursimulations Modells für vorgemischte Verbrennung*, 25. Deutscher Flammentag 2011, 14.-15.9.2011, Karlsruhe (2011)