

Abb. 1.1. Berechnete Temperaturverteilung in einer Mach 2 Überschallbrennkammer. Gasförmiger Wasserstoff wird durch die wellenförmige Hinterkante des Zentralkörpers in eine Luftströmung eingeblasen

erfolgte mittels Gebietszerlegung auf 256 Prozessoren eines Parallelrechners mit verteiltem Hauptspeicher (Cray T3E). Das Rechengbiet wurde mit 3,2 Millionen Volumen diskretisiert, Seitenwände vernachlässigt und alle möglichen Symmetrien genutzt. Ansonsten wären ca. 22 Millionen Gitterpunkte notwendig gewesen. Auch das aus zwanzig Reaktionen und neun Gaskomponenten bestehende Reaktionsschema ist für eine genaue Wiedergabe des Verbrennungsablaufs noch relativ klein. Aus Rechenzeitgründen wurden diese Einschränkungen jedoch in Kauf genommen. Dieses Beispiel soll verdeutlichen, dass zumindest bei Simulationen mit detaillierter Chemie weitere Effizienzsteigerungen notwendig sind, um die numerische Verbrennungssimulation für den Alltag des Ingenieurs tauglich zu machen. Dass dieses Ziel in absehbarer Zeit erreicht werden kann, hat vor allem zwei Gründe:

1. die schnelle Entwicklung im Bereich der Hardware, die immer mehr Rechenleistung zu geringeren Kosten bereitstellt,
2. Weiterentwicklungen bei den numerischen Verfahren.

Beide Punkte sind gleich bedeutend. Die Entwicklung effizienter und genauer numerischer Verfahren zur Simulation von Verbrennungsprozessen stellt

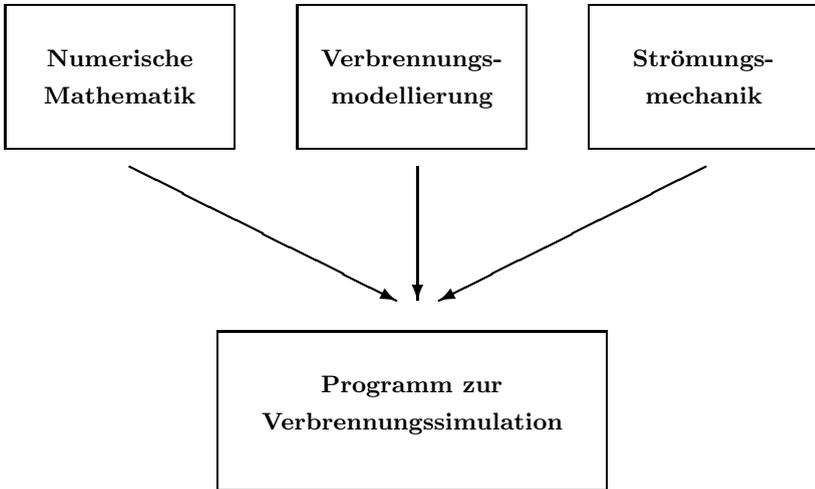


Abb. 1.2. Eigenständige Forschungsbereiche welche die Programmentwicklung in der Verbrennungssimulation prägen

hohe Anforderungen, die unterschiedliche Forschungsgebiete betreffen. Abbildung 1.2 zeigt deren Zusammenwirken bei der Erstellung eines Simulationsprogramms. Jeder der drei skizzierten Bereiche beeinflusst maßgeblich die Code-Entwicklung und stellt gleichzeitig ein eigenständiges Forschungsgebiet dar. Hinzu kommt die Anpassung der Programme an die sich schnell ändernden Rechnerarchitekturen. So gesehen handelt es sich bei der Verbrennungssimulation um ein interdisziplinäres Thema, das Mathematik, Physik, Chemie und Ingenieurwissenschaften gleichermaßen betrifft.

1.1 Bemerkungen zur Verbrennungssimulation

Leider ist das universelle numerische Verfahren, das alle Anwendungsbereiche abdeckt und auf unterschiedlichen Rechnerarchitekturen gut arbeitet, aus vielerlei Gründen nicht realisierbar. Das gilt insbesondere für turbulente Verbrennung. Zu den Problematiken der Strömungsberechnung kommen dann (außer bei der DNS) die des *Verbrennungsmodells*. Darüber hinaus erfordert eine genaue Beschreibung der chemischen Kinetik bei den meisten Brennstoffen große Reaktionsmechanismen und zahlreiche Komponentengleichungen: Für 3D-Simulationen ein schwer zu bewältigendes Unterfangen. Somit bleibt festzustellen, dass die numerische Simulation turbulenter Verbrennung durch zwei Punkte wesentlich erschwert wird:

1. die Beschreibung der Wechselwirkung turbulenter Fluktuation mit der chemischen Kinetik,
2. die hohe Anzahl an relevanten chemischen Komponenten.

Dort setzen die meisten Verbrennungsmodelle an. Deren Ziel liegt in einer möglichst genauen Approximation des Verbrennungsablaufs mittels weniger Variablen. Da die Bandbreite an Verbrennungsmodellen sehr groß ist, werden nur die wichtigsten kurz aufgeführt.

1.1.1 Brutto-Reaktionen und Flame-Sheet-Modell

An Stelle detaillierter chemischer Kinetik tritt eine einzige, irreversible *Brutto-* oder *Globalreaktion*, für die *Brennstoff + Oxidator* \rightarrow *Produkte* gilt. Beim *flame-sheet-Modell* [43] wird zusätzlich ein unendlich schneller Reaktionsablauf vorausgesetzt. Brennstoff und Oxidator können dann an einem Ort nie gleichzeitig vorkommen. Da dieser Ansatz auf Zwischenprodukte verzichtet, ist damit weder der Verbrennungsablauf noch die Schadstoffbildung berechenbar. Selbst die Position der Flamme wird in vielen Fällen sehr ungenau sein. Setzt man einen vollständigen Ausbrand voraus, so ist dieses Modell aber in der Lage, die Energiefreisetzung in einer Brennkammer korrekt wiederzugeben.

1.1.2 Eddy-Breakup- und Eddy-Dissipation-Modell

Viele Verbrennungsmodelle basieren auf der Annahme sehr schneller oder unendlich schneller Chemie. Dazu zählt das *Eddy-Breakup-Modell* von Spalding [232, 233] für vorgemischte Verbrennung und das *Eddy-Dissipation-Modell* nach Magnussen et al. [170], das als Erweiterung auf Diffusionsflammen angesehen werden kann. Bei *vorgemischten Flammen* liegen Brennstoff und Oxidator in den gleichen Wirbeln vor, die an Gebiete mit heißen Verbrennungsprodukten angrenzen. Setzt man sehr schnelle Chemie voraus, so bestimmt die Geschwindigkeit, mit der „Pakete“ aus unverbranntem Gemisch zu immer kleineren Wirbeln zerfallen und große Grenzflächen mit heißen Abgasen bilden, den Verbrennungsablauf. Dies ist der Grundgedanke des Eddy-Breakup-Modells. Die chemischen Reaktionsraten sind dann unbedeutend und die turbulente Mischung genügt zur Beschreibung des Verbrennungsprozesses [251]. Ähnliche Überlegungen lassen sich für *Diffusionsflammen* anstellen. Bei sehr schneller Chemie wird der Stofftransport zum geschwindigkeitsbestimmenden Vorgang, so dass die Mischung auf molekularer Ebene (und damit die Dissipationsrate) die Geschwindigkeit des Verbrennungsablaufs diktiert. Entsprechend geht bei diesem Modell die mittlere Reaktionsrate aus den mittleren Konzentrationen und Turbulenzvariablen (z.B. k und ϵ) hervor [170]. Das Eddy-Dissipation-Concept lässt sich auch mit *endlichen Reaktionsraten* (*finite-rate chemistry*) nutzen.

1.1.3 Chemisches Gleichgewicht

Im Sonderfall *unendlich schneller Chemie* befindet sich das Gas im *chemischen Gleichgewicht*. Unabhängig von der Zahl chemischer Komponenten folgt

dessen Zusammensetzung dann aus der Elementzusammensetzung und zwei thermodynamischen Zustandsgrößen (z.B. Druck und Temperatur). In einem homogenen Reaktor ist die Elementzusammensetzung durch den Ausgangszustand definiert. In offenen Systemen lässt sie sich (bei geeigneten Voraussetzungen) über den *Mischungsbruch* charakterisieren. An Stelle zahlreicher Komponentengleichungen ist dann neben Impuls-, Energie und Kontinuitäts- oder Druckgleichung nur die Gleichung des Mischungsbruchs zu lösen. Das macht die Ermittlung der Gaszusammensetzung rechnerisch sehr effizient. Allerdings ist die Verweilzeit des Gases in den meisten technisch relevanten Systemen (z.B. Gasturbine und Automotor) nicht ausreichend lang, um chemisches Gleichgewicht zu erreichen.

1.1.4 Tabellierungstechniken

Bei vielen Anwendungen ist weder die Annahme unendlich schneller Chemie gerechtfertigt, noch lässt sich der Verbrennungsablauf mit Bruttoreaktionen beschreiben. Dann ist mit *detaillierter Chemie* zu arbeiten. Darunter versteht man die Verwendung von mehr oder weniger großen Reaktionsmechanismen, denen *Elementarreaktionen* zu Grunde liegen. Das heißt, dass für jede Gas Komponente eine eigene Transportgleichung zu lösen ist. Um den hohe Rechenaufwand dieses Ansatzes zu reduzieren, bieten sich *Tabellierungstechniken* an. Im günstigsten Fall führt das zu einer Entkoppelung der chemischen Kinetik von der Strömungsmechanik, was den numerischen Strömungslöser vom *Steifigkeitsproblem der Verbrennung* befreit. Bei der Verwendung von Parallelrechnern kann sich die Nutzung großer Tabellen nachteilig auswirken. Maschinen mit verteiltem Hauptspeicher müssen die Tabelle in der Regel auf jedem Prozessor halten. Zu den wichtigsten Methoden die auf einer Tabellierung von Daten beruhen zählen der *Flamelet-Ansatz*, die *ILDM-Technik* und das *ISAT-Verfahren*. ILDM- und ISAT-Technik sind bei turbulenter Verbrennung mit einem geeigneten Ansatz zur Berücksichtigung der Turbulenz zu koppeln.

Flamelet-Ansatz. Das verbreiteteste Modell zur Simulation turbulenter Verbrennung ist der *laminare Flamelet-Ansatz* [268], der in wesentlichen Teilen auf Peters [195, 196] zurückgeht. Bei dieser Methode wird eine turbulente Flamme als Ensemble zahlreicher laminarer, eindimensionaler „Flämmchen“ (*Flamelets*) approximiert. Die thermochemischen Eigenschaften dieser Flamelets werden im Voraus berechnet und in niedrigdimensionalen Tabellen abgelegt. Bei nicht-vorgemischter Verbrennung dient als Basisproblem meist eine *Gegenstromdiffusionsflamme*, die unter Vereinfachungen eindimensional berechnet werden kann. Den strömungsmechanischen Einfluss auf die Flamme charakterisiert die *Streckungsrate* bzw. die *skalare Dissipationsrate*. Im einfachsten Fall wird der thermochemische Zustand eines Flamelets als Funktion von Mischungsbruch und Streckungsrate tabelliert. Die Übertragbarkeit der eindimensionalen, laminaren Modellprobleme auf turbulente Verbrennung gilt

bei „dünnen Flammen“ als gesichert (Flammendicke $<$ Kolmogorov-Länge). Liegt für den gewünschten Brennstoff und die gegebenen Parameter eine Flamelet-Tabelle vor, so sind bei der Simulation zusätzlich zu den Strömungsgleichungen nur die Transportgleichungen des Mischungsbruchs und seiner Varianz zu lösen. Aus diesen Werten ergibt sich durch Tabellenzugriff ein vollständiges Bild des thermochemischen Zustands. Die Grenzen des Flamelet-Modells werden erreicht, wenn es zu stark aufgedickten Flammen kommt oder wenn die Voraussetzungen des eindimensionalen Problems nicht mehr zutreffen (beispielsweise bei Abgasrückströmung). Der Flamelet-Ansatz ist in modifizierter Form mit der so genannten „*G-Gleichung*“ auch auf vorge-mischte Flammen anwendbar [196]. Des weiteren wurden Varianten für nicht-konstante Schmidt-Zahlen und instationäre Prozesse (instationäre Flamelets) entwickelt [199, 196].

ILDm-Technik. Der *ILDm-Technik* von Maas und Pope [168, 167] und dem *ISAT-Verfahren* von Pope [209] (s. unten) liegen ähnliche Gedanken zu Grunde. Beide Verfahren beruhen darauf, dass der Reaktionsfortschritt zwar theoretisch in einem hochdimensionalen Raum vonstatten gehen kann (der nicht zu tabellieren wäre), in der Praxis aber meist nur kleine Gebiete davon beschrieben werden. Die ILDM-Technik geht ferner davon aus, dass der Verbrennungsablauf nach einer kurzen Startphase in einem niedrigdimensionalen Raum verläuft, auf einer so genannten *niedrigdimensionalen Mannigfaltigkeit* (*ILDm intrinsic low-dimensional manifold*). Durch Tabellierung der Mannigfaltigkeit entkoppelt man im Zustandsraum die langsamen von den schnellen chemischen Vorgängen. Voraussetzung für die Gültigkeit dieses Ansatzes ist, dass die Mannigfaltigkeit schnell erreicht wird. Ist das der Fall, so genügt zur Beschreibung des Reaktionsfortschritts eine geringe Anzahl an *Reaktionsfortschrittsvariablen*, für die Transportgleichungen zu lösen sind. Aus deren Werten ergibt sich aus vorausberechneten Tabellen die Gaszusammensetzung. Der Vorteil dieses Ansatzes liegt darin, dass sich mit einer Erhöhung der Dimension der ILDM (allerdings auch der Tabelle) die Genauigkeit steigern lässt; theoretisch bis zum Ausgangsmechanismus, auf dem die ILDM beruht. In der Praxis ist die Dimension der Tabellen jedoch begrenzt.

ISAT-Verfahren. Das *ISAT-Verfahren* (*in-situ adaptive tabulation*) von Pope [209] beruht darauf, dass bei Verbrennungsprozessen nur ein relativ kleiner Bereich des thermochemischen Raums wirklich durchlaufen wird. Dies ermöglicht eine Tabellierung des Reaktionsfortschritts im problemabhängigen Unterbereich des Zustandsraums. Beim ISAT-Verfahren werden die Tabellen für den Reaktionsfortschritt „in-situ“ (während der Simulation) erzeugt. Kann ein gesuchter Wert nicht mit hinreichender Genauigkeit der Tabelle entnommen werden, so erfolgt eine Neuberechnung und die Erweiterung der Tabelle. Der einzige Fehler dieser Methode geht auf die Interpolation von Tabellenwerten zurück. Allerdings dürfte eine in-situ-Tabellenerweiterung auf Parallelrechnern mit verteiltem Hauptspeicher noch schwieriger umzusetzen

sein, als die effiziente Nutzung vorausberechneter Tabellen. Attraktiv ist diese Methode für Transportgleichungs-PDF-Verfahren, da dann für jeden der zahlreichen Partikel das Chemie-Gleichungssystem gelöst werden muss (s. Teil IV).

1.2 Zu diesem Buch

Die meisten Verbrennungsmodelle beruhen darauf, dass während der eigentlichen Simulation an Stelle zahlreicher Komponentengleichungen nur wenige Transportgleichungen von Ersatzgrößen gelöst werden (z.B. des Mischungsbruchs oder von Reaktionsfortschrittsvariablen). Das reduziert den Rechenaufwand, schränkt aber auch die Allgemeingültigkeit des jeweiligen Ansatzes ein. In diesem Buch wird stattdessen auf numerische Verfahren eingegangen,

- die für jede Gaskomponente eine eigene Transportgleichung lösen,
- in denen Verbrennung durch ein mehr oder weniger großes Reaktionsschema mit *endlichen Reaktionsraten (finite-rate chemistry)* beschrieben wird,
- denen die kompressiblen Strömungsgleichungen zu Grunde liegen.

Ein guter Überblick zu Lösungsmethoden für die inkompressiblen Strömungsgleichungen findet sich bei Noll [192]. Zur Schließung des nichtlinearen chemischen Quellterms werden

- angenommene Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen (assumed PDF, probability density function),
- Transportgleichungs-PDF-Verfahren

behandelt. Eine Besonderheit liegt darüber hinaus im Bestreben, eine Brücke über alle in Abb. 1.2 genannten Forschungsgebiete zu schlagen. Es wird versucht die einzelnen Gebiete zusammenzubringen und moderne mathematische Lösungsstrategien (insbesondere die Mehrgittertechnik) mit Ansätzen zur Modellierung der Turbulenz-Chemie-Interaktion zu verbinden. Detaillierte Chemie geht meist mit großen und in der Regel mathematisch steifen Gleichungssystemen einher, so dass die Effizienz des Löser eine wichtige Rolle spielt.

Da die meisten Fachveröffentlichungen zur numerischen Verbrennungssimulation in englischer Sprache erscheinen, sind die wichtigsten Fachausdrücke in Deutsch und Englisch angegeben.

Grundlagen der Verbrennung

Die physikalischen Gesetze zur Beschreibung von Verbrennungsprozessen sind seit langem bekannt. So stammen die Euler-Gleichungen aus dem Jahr 1755, die Navier-Stokes-Gleichungen wurden 1822 aufgestellt und 1855 folgte die Arrhenius-Beziehung zur Bestimmung der Geschwindigkeitskoeffizienten chemischer Elementarreaktionen. Auch die Grundlagen zur Berechnung des Spannungstensors (Newton'sches Fluid, 1682), das Fourier'sche Gesetz für die Wärmeleitung (1822) und das Fick'sche Gesetz für die Diffusion (1855) haben bis heute Bestand. Die genannten Gleichungen und Beziehungen bilden das Grundgerüst zur Erfassung strömender, reagierender Fluide.

2.1 Bilanzgleichungen reaktiver Strömungen

Hält man sich die Komplexität turbulenter Flammen vor Augen, dann ist es erstaunlich, dass sich die damit verbundenen, äußerst vielschichtigen und teilweise noch unverstandenen physikalischen Vorgänge mathematisch durch ein „verhältnismäßig“ einfaches Gleichungssystem beschreiben lassen (Gl. (2.4) bis (2.7)). In der Physik bezeichnet man die Masse, den Impuls und die Energie als *Erhaltungsgrößen*, da diese in einem *abgeschlossenen System* bei verschiedenen Prozessen und Wechselwirkungen erhalten bleiben. Obwohl in der Fluid-Mechanik häufig keine abgeschlossenen Systeme vorliegen, werden die entsprechenden Transportgleichungen in diesem Buch Erhaltungsgleichungen genannt. Die Erhaltungsgleichungen der Gesamtmasse, des Impulses und der Energie sowie die *Bilanzgleichungen* der Komponentenmassen bilden ein gekoppeltes System partieller Differentialgleichungen, das kompressible, reibungsbehaftete Strömungen vollständig beschreibt. Das Gas kann sich aus einer beliebigen Anzahl an Komponenten zusammensetzen und chemischer Umwandlung unterliegen. Wesentlich für die Herleitung dieser Gleichungen ist, dass das Fluid als *Kontinuum* angesehen werden darf. Hierzu müssen die kleinsten charakteristischen Längenskalen der Strömung l_s noch wesentlich größer sein, als die mittlere freie Weglänge des Gases \mathcal{L} . Bei turbulenter,

inertter Strömung ist das kleinste Längenmaß die *Kolmogorov-Länge* η , bei Verbrennung liegen die auftretenden Flammendicken und damit die kleinsten Strukturen meist noch darunter. Mit der mittleren freien Weglänge zum kleinsten Längenmaß der Strömung lässt sich eine *Knudsen-Zahl*

$$Kn \equiv \frac{\mathcal{L}}{l_s} \quad (2.1)$$

definieren. Als Bedingung für Kontinuum muss $Kn \ll 1$ gelten. Damit ist die *Zeitskala molekularer Bewegung* (das Zeitintervall zwischen Stößen der Moleküle) um ein Vielfaches kleiner, als die der turbulenten Fluktuation. Turbulenz oder strömungsmechanische Vorgänge beeinflussen die thermische Bewegung der Moleküle dann nur unwesentlich: Die molekulare Verteilung befindet sich näherungsweise im Gleichgewicht. Dies ist eine Voraussetzung für die Anwendbarkeit der später genutzten Transportbeziehungen. Zieht man die Kolmogorov-Länge zur Bildung der Knudsen-Zahl heran, dann ergibt sich

$$Kn_\eta \equiv \frac{\mathcal{L}}{\eta} \approx \frac{Ma}{Re^{1/4}} \quad (2.2)$$

[245], wobei $Ma \equiv u/a$ für die *Mach-Zahl* und

$$Re \equiv \frac{\rho u l}{\mu} \quad (2.3)$$

für die *Reynolds-Zahl* steht [245]. Ferner bezeichnet a die Schallgeschwindigkeit, l ein makroskopisches Längenmaß des Strömungsfelds, u die Geschwindigkeit, ρ die Dichte und μ die dynamische Viskosität. In den meisten technisch relevanten Fällen ist die Mach-Zahl klein, die Reynolds-Zahl groß und damit, wie bei Kontinuum vorausgesetzt, die Knudsen-Zahl klein. Daher kann in der Regel von Kontinuum ausgegangen werden. Hiervon ausgenommen sind stark verdünnte Gase in großen Höhen, da dort die mittlere freie Weglänge ansteigt. Weitere Voraussetzungen bei der Herleitung der folgenden momentanen Bilanzgleichungen (instantaneous conservation laws) sind

- thermisches Gleichgewicht,
- Isotropie der Stoffeigenschaften des Fluids (Richtungsunabhängigkeit),
- die Gültigkeit der benutzten Zusammenhänge zwischen dem Spannungstensor sowie den Wärme- und Diffusionsflüssen mit Gradienten des Strömungs-, Temperatur- und Stofffelds (*Newton'sches Fluid*, *Stokes-Beziehung*, *Fourier'sches* und *Fick'sches Gesetz*),
- ideales Gas.

Prinzipiell besteht die Möglichkeit, die Transportgleichungen in *Euler'scher* oder *Lagrange'scher Formulierung* aufzustellen. Bei der Euler-Formulierung wird ein festes Bezugssystem gewählt, in dem die abhängigen Variablen als Funktionen von Raum und Zeit vorliegen. Demgegenüber basieren Lagrange'sche Betrachtungsweisen auf der Verfolgung einzelner Fluid-Partikel im

Raum. In diesem Buch werden Lagrange-Ansätze nur in Zusammenhang mit Transportgleichungs-PDF-Verfahren benutzt.

Genau genommen umfassen die *Navier-Stokes-Gleichungen* nur die Erhaltungsgleichungen des Impulses. Vor allem in der englischsprachigen Literatur wird darunter inzwischen aber oft ein Gleichungssystem verstanden, das eine reibungsbehaftete Strömung vollständig beschreibt. Bei einem reagierenden Fluid sind Bilanzgleichungen für die Gesamtmasse, den Impuls, die Energie sowie die Massen der einzelnen Spezies zu lösen. Deren Herleitung findet sich in zahlreichen Lehrbüchern [149, 121]. In *Tensor-Schreibweise* und bei *konservativer Formulierung* ergibt sich in kartesischen Koordinaten das folgende System gekoppelter, partieller Differentialgleichungen:

• **Gesamtmasse**

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i) = 0, \quad (2.4)$$

• **Komponentenmassen**

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho Y_\alpha) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i Y_\alpha) + \frac{\partial j_{\alpha i}}{\partial x_i} = S_\alpha, \quad (2.5)$$

• **Impuls**

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_i u_j) - \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + \frac{\partial p}{\partial x_i} = \rho f_i, \quad (2.6)$$

• **Energie**

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho E) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i E + u_i p) - \frac{\partial}{\partial x_i} (u_j \tau_{ji}) + \frac{\partial q_i}{\partial x_i} = \rho u_i f_i + S_r, \quad (2.7)$$

mit $i, j = 1, 2, 3$ und $\alpha = 1, 2, \dots, N_{k-1}$. Die Einstein'sche Summenkonvention bezieht sich ausschließlich auf die Indizes i bis m . In diesen Gleichungen bezeichnet u_i den Anteil des Geschwindigkeitsvektors $\mathbf{u} = (u_1, u_2, u_3)^T$ in x_i -Richtung, p den Druck, Y_α den Massenanteil der Komponente α am Massenanteilsvektor $\mathbf{Y} = (Y_1, Y_2, \dots, Y_{N_k})^T$, $E = e + \mathbf{u}^2/2$ die spezifische Gesamtenergie und e die spezifische innere Energie. In e ist die Bildungsenthalpie der Gasbestandteile enthalten, weshalb in Gl. (2.7) kein Reaktionsquellterm auftritt. Alle abhängigen Variablen sind Funktion des Raums $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)^T$ und der Zeit t , was meist nicht explizit angegeben wird. Bei

$$u_i \equiv \frac{\sum_{\alpha=1}^{N_k} \rho_\alpha u_{i\alpha}}{\sum_{\alpha=1}^{N_k} \rho_\alpha} \quad (2.8)$$

handelt es sich um die *mittlere Massengeschwindigkeit* des Gases, wobei $u_{i\alpha}$ die momentane Geschwindigkeit der Komponente α und ρ_α deren Teildichte bezeichnet. N_k ist die Anzahl unterschiedlicher Komponenten.

Zur Lösung des Gleichungssystems sind aus den abhängigen Variablen der Wärmefluss q_i (die Wärmestromdichte durch Wärmeleitung und Diffusion) in x_i -Richtung, der Diffusionsmassenfluss $j_{\alpha i}$ (die Diffusionsmassenstromdichte) der Komponente α in x_i -Richtung, die externen spezifischen Volumenkräfte f_i , der Strahlungsquellterm S_r , die Elemente des Spannungstensors τ_{ij} und die chemischen Produktionsterme S_α der Komponenten α zu bestimmen. Zu den externen spezifischen Volumenkräften zählt die Gravitation g_i , die meist als einzige externe Volumenkraft vorliegt.

2.1.1 Wahl des Gleichungssystems

Das Gleichungssystem (2.4) bis (2.7) ist nicht die einzige Möglichkeit, um ein kompressibles, reagierendes Fluid zu beschreiben. Zum einen können unterschiedliche Transportgleichungen und zum anderen deren unterschiedliche Formulierungen verwendet werden. So kann ein Gleichungssystem in *primitiven* (z.B. ρ , u_i , T , Y_α) oder *konservativen* (z.B. ρ , ρu_i , ρE , ρY_α) Variablen aufgestellt werden. Das beeinflusst unter anderem den Rechenaufwand bei der Bildung von Jacobi-Matrizen. Während konservative Variable im Allgemeinen zu bevorzugen sind, erfordern viele *All-Mach-Number-Präkonditionierungstechniken* primitive Variable [54, 76]. In Abhängigkeit von der Problemstellung kann man sich mit der Wahl des Gleichungssystems und der Variablen mehr oder weniger große Vorteile verschaffen. Alle Varianten lassen sich jedoch auf die Bilanzgleichungen (2.4) bis (2.7) zurückführen.

Kontinuitätsgleichung. Es stellt sich die Frage, ob die Kontinuitätsgleichung im Gleichungssystem enthalten sein soll oder nicht. Da die Summe der Komponentengleichungen die Kontinuitätsgleichung ergibt, kann letztere entfallen, wenn man Gleichungen aller Spezies löst. Wird dagegen mit der Kontinuitätsgleichung gearbeitet, so sind nur N_{k-1} Komponentengleichungen erforderlich. Der Massenanteil (oder Molanteil) der fehlenden Spezies folgt aus der *Normierungsbedingung* $\sum_{\alpha=1}^{N_k} Y_\alpha = 1$. Aus numerischer Sicht ist dann eine Gaskomponente mit möglichst hohem Massenanteil als unberücksichtigte, letzte Spezies zu wählen. Numerisch bedingte Fehler wirken sich so weniger stark aus.

Energiegleichung. An Stelle der Gleichung der Gesamtenergie (2.7) ist auch die Verwendung von Bilanzgleichungen der Gesamtenthalpie $H = h + \mathbf{u}^2/2$, der Energie e , der

• Enthalpie

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho h) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i h) - \frac{Dp}{Dt} - \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial q_i}{\partial x_i} = \rho u_i f_i + S_r, \quad (2.9)$$

deren thermischer („sensibler“) Größen e_s und h_s (s. Gl. (2.26)) oder der Temperatur T möglich, um nur die wichtigsten zu nennen [122]. In Gl. (2.9) steht

$$\frac{D}{Dt} \equiv \frac{\partial}{\partial t} + u_i \frac{\partial}{\partial x_i} \quad (2.10)$$

für eine *substantielle Ableitung*. Je nachdem ob man die Transportgleichung der Temperatur aus der Gleichung der thermischen Energie- oder der Enthalpie ableitet, ergeben sich nochmals zwei unterschiedliche Varianten. Von der thermischen Energie ausgehend folgt für die Transportgleichung der

- **Temperatur** (aus thermischer Energie)

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} (\rho T) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i T) + \frac{1}{c_v} \left(p \frac{\partial u_i}{\partial x_i} - \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial q_i}{\partial x_i} - \sum_{\alpha=1}^{N_k} e_\alpha \frac{\partial j_{\alpha i}}{\partial x_i} \right) \\ &= - \frac{1}{c_v} \sum_{\alpha=1}^{N_k} S_\alpha h_{f\alpha} . \end{aligned} \quad (2.11)$$

In dieser Gleichung sind Strahlung und Fernkräfte vernachlässigt. Im Gegensatz zur Erhaltungsgleichung der Gesamtenergie (2.7) ergibt sich in den Transportgleichungen der Temperatur ein Quellterm, der auf die Wärmefreisetzung oder den Energieentzug durch chemischen Reaktionen zurückgeht. Da dieser nichtlineare Term die implizite Zeitintegration erschwert, werden die Gleichungen der Energie oder Enthalpie gewöhnlich bevorzugt. Geht man von der Bilanzgleichung der thermischen Enthalpie aus, so ergibt sich mit der Transportgleichung der

- **Temperatur** (aus thermischer Enthalpie)

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} (\rho T) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i T) - \frac{1}{c_p} \overbrace{\left(\frac{Dp}{Dt} + \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \sum_{\alpha=1}^{N_k} h_\alpha \frac{\partial j_{\alpha i}}{\partial x_i} \right)}^A \\ &= - \frac{1}{c_p} \sum_{\alpha=1}^{N_k} S_\alpha h_{f\alpha} \end{aligned} \quad (2.12)$$

eine zweite Variante dieser Gleichung. Der darin definierte Term A wird später benötigt.

Erhaltungsgleichungen der Elemente. Die Gln. (2.4) bis (2.7) genügen zur vollständigen Beschreibung von Verbrennungsprozessen. Sie beinhalten inhärent auch die *Erhaltung der Elemente*. Dennoch kann es in einigen Fällen angebracht sein, Elementerhaltungsgleichungen zu verwenden. Der Elementmassenanteil Z_α folgt mit

$$Z_\alpha = \sum_{\beta=1}^{N_k} \epsilon_{\alpha\beta} Y_\beta \quad (2.13)$$

aus den Massenanteilen Y_β der Gaskomponenten. Dabei ist es gleichgültig, ob sich Z_α auf die atomare (H, O, N usw.) oder molekulare (H_2 , O_2 , N_2 usw.) Form eines chemischen Elements beziehen. Die Faktoren $0 \leq \epsilon_{\alpha\beta} \leq 1$ stehen für den massengewichteten Anteil des Elements α an der Komponente β . Aus den Komponentengleichungen (2.5) folgt für die Erhaltungsgleichungen der

• **Elementmassen**

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho Z_\alpha) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i Z_\alpha) + \frac{\partial j_{\alpha i}^Z}{\partial x_i} = 0. \quad (2.14)$$

Diese besitzen keinen Produktionsterm, da Elemente bei chemischer Umwandlung erhalten bleiben. Daher zählen sie zu den *passiven Skalaren* (*conserved scalars*). Da in der Praxis meist wesentlich mehr Komponenten als Elemente vorkommen, ist die Rechenzeiterparnis durch ein Ersetzen von Komponenten durch Elementgleichungen fraglich. Zusätzlich hängen die Diffusionsmassenflüsse der Elemente $j_{\alpha i}^Z$ auf komplexe Weise von den Gradienten der Komponenten ab. Nur bei $D_\alpha = D$ für $\alpha = 1, 2, \dots, N_k$ ist $j_{\alpha i}^Z$ mit geringem Aufwand berechenbar.

2.1.2 Vernachlässigung unbedeutender Terme

Im Hinblick auf ein konkretes zu simulierende Problem sind oftmals Vereinfachungen möglich. Wichtig ist jedoch, dass man sich bei Nutzung eines vereinfachten Gleichungssystems den daraus resultierenden Limitierungen bewusst bleibt. Sehr häufig gewählte Annahmen sind gleiche Diffusionskoeffizienten aller Gaskomponenten, identische Prandtl- und Schmidt-Zahlen, isenthalpe Strömung oder die Vernachlässigung von Gravitation und/oder Strahlung. Physikalisch legitimierte Vereinfachungen ergeben sich darüber hinaus, wenn nur ein bestimmter Geschwindigkeitsbereich abgedeckt werden soll.

Niedrige Strömungsgeschwindigkeit. Bei vielen technisch relevanten Strömungs- und Verbrennungsvorgängen sind die Geschwindigkeiten und damit die Mach-Zahlen klein. Das hat sowohl Auswirkungen auf das Gleichungssystem (hier können einzelne Terme vernachlässigt werden), als auch auf das numerische Lösungsverfahren (der Löser sollte für inkompressible Fluide geeignet sein, s. Abschn. 2.1.3). Ein wichtiges Merkmal langsamer Strömungen ist die quadratische Abnahme strömungsbedingter (auch turbulenzbedingter) Druckschwankungen mit sinkender Mach-Zahl [201]

$$\Delta p \propto \rho u_i^2 = Ma^2 \rho a^2, \quad (2.15)$$

woraus sich mit $a = \sqrt{\gamma p / \rho}$ folgender Zusammenhang zwischen der Druckschwankung und dem Druck $p = \bar{p} + \Delta p$ ergibt

$$\frac{\Delta p}{p} \propto Ma^2. \quad (2.16)$$

Dennoch sind auch bei niedrigen Mach-Zahlen Druckgradienten (z. B. in den Impulsgleichungen (2.6)) und Druckfluktuationen in turbulenten Strömungen zu berücksichtigen. Thermodynamisch darf der Druck jedoch als konstant angesehen werden [158]. Das heißt, dass bei kleinem Ma bei der Berechnung direkt vom Druck abhängiger Variablen Δp vernachlässigbar ist. Daher darf für $Ma \rightarrow 0$ die Dichte mit $\rho = \rho(h, Y_\alpha, \bar{p})$ aus dem mittleren Druck \bar{p} berechnet werden [207]. Ähnliches gilt für die chemischen Quellterme $S_\alpha = S_\alpha(h, Y_\alpha, \bar{p})$. Niedrige Strömungsgeschwindigkeiten haben somit zur Folge, dass von einer Reihe von Vereinfachungen ausgegangen werden kann:

1. Druckschwankungen sind thermodynamisch vernachlässigbar,
2. die durch Reibung verrichtete Arbeit ist vernachlässigbar ($\tau_{ij} \partial u_i / \partial x_j \approx 0$ in Gl. (2.9)),
3. die substantielle Ableitung des Drucks in der Enthalpiegleichung (2.9) darf durch $Dp/Dt = d\bar{p}/dt$ approximiert werden [207] und ist null, wenn keine signifikanten zeitlichen Druckänderungen auftreten,
4. der Anteil der kinetischen Energie an der Gesamtenergie $E = e + \mathbf{u}^2/2 \approx e$ oder Gesamtenthalpie $H = h + \mathbf{u}^2/2 \approx h$ ist vernachlässigbar.

Punkt vier ist bei niedrigen Strömungsgeschwindigkeiten gerechtfertigt, wie folgende Approximation zeigt [201]

$$\frac{1}{2} \frac{u_i^2}{e_s} = \frac{1}{2} \frac{u_i^2}{\hat{c}_v T} \approx \frac{1}{2} Ma^2 \hat{\gamma} (\hat{\gamma} - 1) . \quad (2.17)$$

Darin bezeichnet e_s die spezifische thermische Energie nach Gl. (2.26) (ohne Bildungsenthalpie) und \hat{c}_v die mittlere spezifische Wärmekapazität. Während sich die spezifische Wärmekapazität $c_v = c_v(T)$ auf eine Temperatur T bezieht, handelt es sich bei \hat{c}_v um einen integralen Wert für den Bereich von null K bis T . Selbst wenn die gesamte kinetische Energie zu Wärme dissipiert, führt das bei niedrigen Mach-Zahlen zu keiner nennenswerten Temperaturerhöhung. Die genannten Punkte führen zu einer deutlichen Vereinfachung der bei langsamen Strömungen gewöhnlich verwendeten Enthalpiegleichung.

Hohe Strömungsgeschwindigkeit. Mit steigender Strömungsgeschwindigkeit und Reynolds-Zahl geht der Einfluss der viskosen Terme im Vergleich zu den konvektiven zurück. In Sonderfällen kann das dazu führen, dass Reibung, Wärmeleitung und Diffusion vernachlässigbar sind. Die Navier-Stokes-Gleichungen reduzieren sich dann zu den reibungsfreien *Euler-Gleichungen*. Darüber hinaus spielt Gravitation in schnellen Strömungen keine Rolle.

2.1.3 Kompressibilität

Schreibt man die Kontinuitätsgleichung (2.4) unter Verwendung der substantiellen Ableitung der Dichte in der Form

$$\frac{D\rho}{Dt} = -\rho D , \quad (2.18)$$

so tritt auf der rechten Seite der *Dilatationsterm* (*dilatation*)

$$D \equiv \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \quad (2.19)$$

auf. Der Dilatationsterm entspricht der substantiellen Ableitung des logarithmierten *spezifischen Volumens* $\vartheta = 1/\rho$ des Fluids [210]

$$\frac{D \ln \vartheta}{Dt} = D. \quad (2.20)$$

Fluide mit örtlich und zeitlich konstanter Dichte bezeichnet man als *quellen-* oder *divergenzfrei* (*solenoidal* oder *divergence free*), da dann aus Gl. (2.18) $D = 0$ folgt. Allgemeiner ausgedrückt heißt $D \ln \vartheta / Dt = 0$, dass sich das Gas *isovolumetrisch* entwickelt – das Volumen eines mit der Strömung bewegten Fluid-Partikels bleibt konstant. In *kompresiblen Strömungen* gilt gewöhnlich $D \neq 0$. Hier ist zu beachten, dass in reagierenden Gasen mehrere physikalische Vorgänge $D \neq 0$ und variable Dichten $\rho = \rho(\mathbf{x}, t)$ bewirken. Dazu zählen Änderungen der Gaszusammensetzung, der Temperatur (z. B. durch Wärmefreisetzung aus der Verbrennung) und des Druck. Nur die Auswirkungen der Druckvariationen werden als *Kompresibilitätseffekte* bezeichnet [64]. Entsprechend spricht man bei einem strömenden Medium von einem *dynamisch inkompressiblen Fluid*, wenn die durch Druckänderungen verursachten Dichteänderungen vernachlässigbar klein sind [50]. Das ist bei langsamen Strömungen ($Ma \rightarrow 0$) der Fall. Variable Dichten sind auch in *inkompresiblen Strömungen* möglich, da diese auf Temperatur- oder Konzentrationsänderungen zurückgehen können.

Simulation inkompressibler Strömungen. Die Simulation kompressibler Fluide setzt gewöhnlich auf einem dichte-basierten Gleichungssystem auf. Ohne weitere Maßnahmen sind numerische Verfahren kompressibler Strömungen nicht zur Simulation inkompressibler geeignet (umgedreht kann das gleiche Problem bestehen). Für $Ma \rightarrow 0$ treten bei dichte-basierten Lösern nicht nur Konvergenzprobleme auf, sondern die Lösung kann darüber hinaus stark fehlerhaft sein [224]. Gründe hierfür sind,

1. dass das Gleichungssystem für $Ma \rightarrow 0$ sehr steif wird. Diese Steifigkeit wird durch die stark unterschiedlichen Ausbreitungsgeschwindigkeiten von Störungen hervorgerufen. Das Verhältnis $(\mathbf{u} + a)/\mathbf{u}$ (Ausbreitung akustischer Störungen mit $\mathbf{u} \pm a$ zur konvektiven Ausbreitung mit \mathbf{u}) geht für $Ma \rightarrow 0$ gegen unendlich,
2. dass Rundungsfehler im Druckterm in den Impulsgleichungen für $Ma \rightarrow 0$ stark anwachsen und die Lösung unbrauchbar machen können [250, 224].

Abhilfe ist durch so genannte *All-Mach-Number-Präkonditionierungstechniken* möglich [250, 253, 271, 154, 54, 236]. Diese erlauben die Verwendung kompressibler Strömungslöser bei allen Mach-Zahlen. Alternativ zu kompressiblen Verfahren und der Verwendung der Kontinuitätsgleichung (2.4) wird

bei inkompressiblen Verfahren der Druck als aktive Variable gewählt und eine *Druck-Poisson-Gleichung* gelöst [192]. Da in dieser Arbeit kompressible Strömungen im Vordergrund stehen, wird auf druckbasierte Verfahren nicht eingegangen.

2.2 Thermodynamische Beziehung

Neben den Bilanzgleichungen (2.4) bis (2.7) wird eine weitere Gleichung benötigt, die die thermodynamischen Zustandsgrößen zueinander in Bezug setzt. Bei *idealem Gas* gilt für ein Gasgemisch

$$p = \rho R_m T \sum_{\alpha=1}^{N_k} \frac{Y_\alpha}{M_\alpha}, \quad (2.21)$$

wobei R_m die allgemeine Gaskonstante bezeichnet. Die Gültigkeit der *thermischen Zustandsgleichung* setzt voraus, dass zwischenmolekulare Kräfte vernachlässigbar sind. Bei Verbrennungssimulationen ist das in der Regel der Fall. Ausnahmen sind Brennkammern mit sehr hohem Druck ($p > 100$ bar). Im Gegensatz zu idealem Gas spricht man dann von *realem Gas*, das beispielsweise durch die *Van der Waals-Gleichung* beschrieben werden kann. Bei inkompressiblen, inerten Strömungen wird gewöhnlich von *kalorisch perfektem Gas* ausgegangen, bei dem c_p und c_v konstant sind. Dagegen erfordert Verbrennung mit ihren üblicherweise starken Temperaturänderungen *thermisch perfektes Gas*, bei dem die Wärmekapazitäten $c_p = c_p(T)$ und $c_v = c_v(T)$ reine Funktionen der Temperatur darstellen [3]. Bei realem Gas sind Energie und Enthalpie und damit die spezifischen Wärmekapazitäten $c_p = c_p(T, p)$ und $c_v = c_v(T, p)$ darüber hinaus noch Funktionen des Drucks. Bei den meisten technischen Anwendungen ist die Annahme idealen Gases ausreichend.

Energie. Die in Gl. (2.7) eingeführte *spezifische Gesamtenergie*

$$E = e + \frac{1}{2} u_i^2 \quad (2.22)$$

$$= h - \frac{p}{\rho} + \frac{1}{2} u_i^2 \quad (2.23)$$

setzt sich aus der *spezifischen inneren Energie* e und einem kinetischen Anteil zusammen, wobei e durch die spezifische Enthalpie $h = e - p/\rho$ ersetzt werden kann. Sowohl e als auch h beruhen mit

$$e = \sum_{\alpha=1}^{N_k} Y_\alpha e_\alpha, \quad h = \sum_{\alpha=1}^{N_k} Y_\alpha h_\alpha \quad (2.24)$$

auf Beiträgen der einzelnen Gaskomponenten. Bei idealem Gas erfolgt die Bestimmung von $e_\alpha(T)$ bzw. $h_\alpha(T)$ meist über temperaturabhängige Polynome. Da bei der Integration der Bilanzgleichungen nur Differenzen eine Rolle