

12. Schließungsmodelle turbulenter nicht-vorgemischter Flammen

Turbulente nicht-vorgemischte Flammen sind von großem Interesse in praktischen Anwendungen. Man findet sie zum Beispiel in Gasturbinen (Abb. 12.1), Dieselmotoren, Dampferzeugern, Öfen und Wasserstoff-Sauerstoff gefeuerten Raketentriebwerken. Da sich Brennstoff und Oxidationsmittel erst im Verbrennungsraum vermischen, sind nicht-vorgemischte Flammen im Hinblick auf sicherheitstechnische Überlegungen wesentlich einfacher zu handhaben, als die zu Rückschlag neigenden, vorgemischten Flammen. Gerade die praktische Bedeutung ist ein Grund dafür, dass zahlreiche mathematische Modelle entwickelt wurden, die eine Simulation dieser Verbrennungsprozesse erlauben.

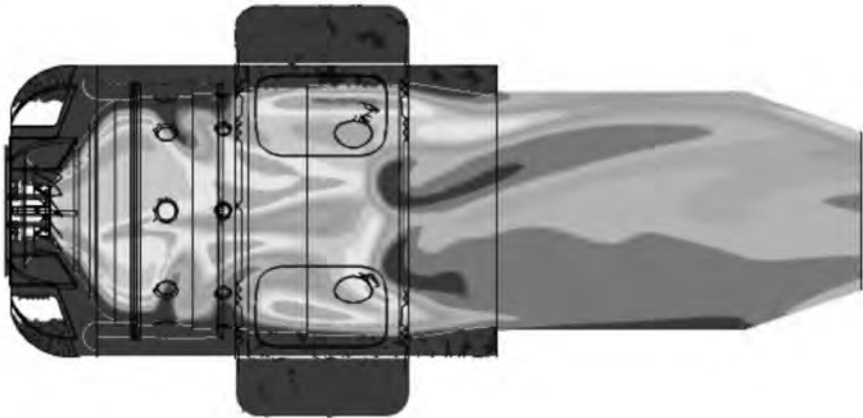


Abb. 12.1 Berechnetes Temperaturfeld der Rohrbrennkammer einer stationären Gasturbine mit nicht-vorgemischter Flamme

In der klassischen Auslegung einer Brennkammer für eine Gasturbine Abb. 12.1 wird die Verbrennungsluft zum einen zur Zerstäubung des flüssigen Brennstoffes benutzt, zum anderen wird sie zur Kühlung der Brennkammerwände und zur Einstellung der Turbineneintrittstemperatur erst nach der eigentlichen Hauptreaktionszone (Primärzone) zugemischt. Es finden demnach in der gesamten Brennkammer Mischprozesse statt. Die

Primärzone wird über die Luftverteilung zwischen Düsen- und Mischluft so eingestellt, dass im gesamten Betriebsbereich, der in der Regel immerhin den Faktor 10 des Brennstoffmassenstromes abdeckt, stabile Verbrennungsbedingungen herrschen. Über die Sicherheitsaspekte hinaus unterliegen heutige Brennkammern engen Umweltschutzauflagen, die sich in den Grenzwerten für NO_x und Ruß widerspiegeln. Diese Auflagen führten u. a. zum Konzept der RQL-Brennkammer in der ähnlich der Verbrennungsführung in Abb. 12.1 nach einer fetten Primärzone durch schnelles Zumischen (quenchen) von Luft eine magere Sekundärzone folgt. Dadurch werden die hohen Temperaturen, die für das thermische NO_x verantwortlich sind, umgangen. Das Verständnis laminarer nicht-vorgemischter Flammen bildet die Grundlage für die Behandlung derartiger turbulenter nicht-vorgemischter Flammen. Wie schon erwähnt, werden solche Flammen auch als Diffusionsflammen bezeichnet, da die Diffusion von Brennstoff und Oxidationsmittel zur Flammenzone langsam und damit geschwindigkeitsbestimmend gegenüber der chemischen Reaktion ist.

Das vorliegende Kapitel behandelt im speziellen Schließungsmodelle für den gemittelten chemischen Umsatz in nicht-vorgemischten Flammen. Durch gezielte Reduktionsmaßnahmen ist es möglich aus einem detaillierten Chemiemechanismus mit mehreren hundert Reaktionsgleichungen auf einen auf lediglich wenige Spezies reduzierten Mechanismus abzuleiten, wie in Kap. 6 dargestellt ist. Für die Anwendung auf räumliche Systeme müssen zusätzlich zu den Speziesgleichungen für den reduzierten Chemiemechanismus auch die gemittelten Navier-Stokes-Gleichungen gelöst werden. Dazu benötigt man Schließungsmodelle, die den mittleren Umsatz $\langle Q \rangle$ möglichst unter Berücksichtigung der Turbulenz im Strömungsfeld beschreiben. Diese trivial scheinende Aufgabe kann nicht durch den Ansatz:

$$\langle S(\varphi) \rangle = S(\langle \varphi \rangle) \quad (12.1)$$

gelöst werden, da hier die turbulenten Schwankungen der Skalare, z.B. die Temperaturspitzen, die maßgeblich für NO_x -Beschreibung sind, ignoriert werden. Zur übersichtlicheren Notation soll hier der Mittelwert in spitzen Klammern geschrieben werden, wie in der Literatur zur Statistik allgemein üblich. Abb. 12.2 stellt den Zusammenhang zwischen der Chemiemodellierung und den Schließungsmodellen dar.

Im Folgenden werden die wichtigsten Schließungsmodelle vorgestellt, Vor- und Nachteile diskutiert und Anwendungsgrenzen aufgezeigt. Zunächst wird das *Eddy-Dissipations-Modell (EDM)* als typischer Vertreter der mischungskontrollierten Modelle vorgestellt. Aufgrund seiner Robustheit ist es in der Industrie ein weitverbreitetes Modell. Allerdings wird

man hiermit nie Flammenlöschung, Zündprozesse oder z.B. die NO_x - oder Rußbildung vorhersagen können.

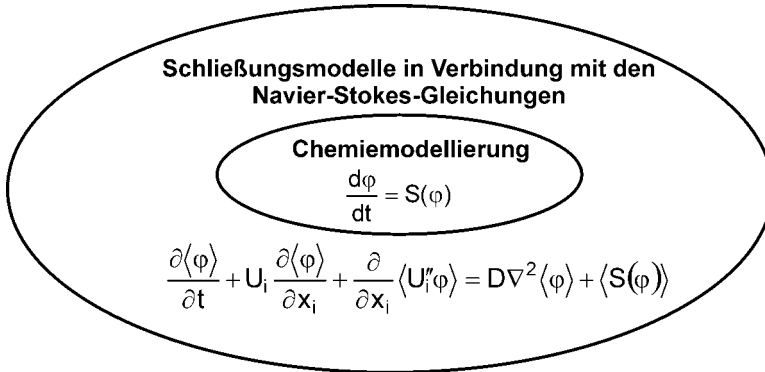


Abb. 12.2 Zusammenhang zwischen Chemiemodellen und Schließungsmodellen

Darauf aufbauend wird am *Mischungsbruchmodell mit Gleichgewichts-Chemie* gezeigt, wie man bei Kenntnis des Mischungsfeldes, der Annahme „gemischt gleich verbrannt“ und angenommener PDF zur Beschreibung des Turbulenzeinflusses eine turbulente, reaktive Strömung berechnen kann. Das linearisierte *Finite-Rate-Chemistry-Modell (FRCM)* als ein typisch chemiekontrolliertes Modell kann zwar Nichtgleichgewichtseffekte vorhersagen, berücksichtigt aber keine Kopplung zwischen den turbulenten Strömungsvorgängen und den chemischen Reaktionen. Die einfachste Möglichkeit einer Turbulenzkopplung besteht in der *Vorannahme der Wahrscheinlichkeitsfunktion (Presumed-PDF)* (z.B. Gaußverteilung). Hierzu sind lediglich zwei Parameter, der Mittelwert und die Varianz, zu bestimmen. Aufgrund des geringen numerischen Aufwands ist diese Art der Kopplung weit verbreitet. Beispielhaft wird der *Presumed-PDF*-Ansatz kombiniert mit der *Mischungsbruchchemie* und der *Flameletchemie* vorgestellt.

Wahrscheinlichkeitsdichte-Modelle (PDF), die eine Transportgleichung zur Formbestimmung der PDF lösen, gehören von der theoretischen Herleitung wohl zu den allgemeingültigsten Modellen. Leider verhindern der enorme Rechenaufwand und die unzureichenden Mischungsmodelle derzeit den industriellen Einsatz. Aktuelle Forschungsschwerpunkte liegen zurzeit in der Verbesserung von Mischungsmodellen und effizienten Kopplungsstrategien mit CFD-Codes unter Einsatz von Parallelisierung, um die Rechengeschwindigkeit zu erhöhen.

Statt der herkömmlichen mittleren Speziestransportgleichungen kann man diese auch für die auf den Mischungsbruch konditionierten Mittel-

werte ableiten. Dieser vielversprechende Ansatz wurde von (Bilger 2001) im *Conditional Moment Closure Modell (CMC)* abgeleitet. Das klassische *Flame Surface Density Modell* leitet eine Transportgleichung für die Flammenoberfläche her und benötigt daher keine PDF.

12.1 Das Eddy-Dissipations-Modell (EDM)

Das EDM ist ein weit verbreitetes, sehr einfaches Verbrennungsmodell. Als typischer Vertreter der klassischen Wirbelzerfallsmodelle ist die bestimmende Zeitskala die turbulente Mischungszeit. Vorausgesetzt wird eine sehr schnelle chemische Reaktion gegenüber einer langsamen Vermischung von Brennstoff und Oxidationsmittel ($Da \gg 1$). Weiterhin wird angenommen, dass chemisches Gleichgewicht herrscht. Mit der Annahme „unendlich schneller Chemie“ reduziert sich das Problem zur Lösung des chemischen Quellterms auf ein Problem der turbulenten Mischung („gemischt ist gleich verbrannt“).

Die turbulente Zeit t_{mix} , als charakteristische Mischungszeit ist gegeben durch:

$$t_{turb} = t_{mix} = \frac{\tilde{k}}{\tilde{\varepsilon}}. \quad (12.2)$$

Die Werte für k und ε stammen aus dem k - ε -Turbulenzmodell, k ist die turbulente kinetische Energie und ε die Dissipationsgeschwindigkeit der kinetischen Energie. Die chemische Reaktionsrate \tilde{r}_α wird direkt proportional zur turbulenten Mischungsfrequenz $1/t_{mix}$ gesetzt, so dass gilt:

$$\tilde{S}_{\alpha,k} \sim \frac{1}{t_{mix}} = \frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{k}}. \quad (12.3)$$

Die chemisch Reaktionsrate $r_{\alpha,k}$ einer Spezies α in einer Elementarreaktion k wird durch folgende Gleichung modelliert:

$$\tilde{S}_{\alpha,k}^{EDM} = AM_\alpha v'_{\alpha,k} \rho \frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{k}} \min \left(\frac{\tilde{Y}_E}{v'_{E,k} M_E}, B \frac{\sum_P \tilde{Y}_P}{\sum_P v''_{P,k} M_P} \right). \quad (12.4)$$

Dabei sind Y_E bzw. Y_P die Massenanteile der Edukte bzw. Produkte. Der zweite Term wird zur Berechnung von Vormischflammen verwendet. Die Modellparameter A und B werden experimentell bestimmt. Bei Diffusionsflammen verwendet das EDM den kleinsten Massenanteil der Edukte.

An dem Beispiel einer einfachen Einschrittreaktion:



wird das Prinzip des EDM verdeutlicht.

Angenommen $Y_F > Y_{F, \text{stoch}}$, dann ist Y_O kleiner als Y_F , demnach wird Y_O eingesetzt. Es wird also nur soviel Brennstoff F verbrannt wie Oxidationsmittel O vorhanden ist

$$\tilde{S}_F^{EDM} = A \rho \frac{\varepsilon \nu'_F M_F}{k \nu'_O M_O} \tilde{Y}_O = A \rho \frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{k}} \tilde{Y}_{F, \text{stoch}}. \quad (12.6)$$

Andererseits, wenn $Y_F < Y_{F, \text{stoch}}$ ist Y_F der betragsmäßig kleinere Massenbruch und es wird der gesamte Massenanteil Y_F umgesetzt, so dass sich der Quellterm wie folgt darstellt:

$$\tilde{S}_F^{EDM} = A M_F \nu'_F \rho \frac{\varepsilon}{k \nu'_F M_F} \tilde{Y}_F = A \rho \frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{k}} \tilde{Y}_F. \quad (12.7)$$

Das EDM koppelt vereinfacht gesagt die turbulente Mischung mit der chemischen Reaktion in dem es prüft, ob sich die Mischung im fetten oder im mageren Bereich des Burke-Schumann-Diagramms (s. Kap. 10.4) befindet und danach über die vollständige oder die teilweise Umsetzung des Brennstoffs entscheidet. Der Nachteil des Eddy-Dissipation-Konzeptes besteht in der fehlenden Berücksichtigung von Nichtgleichgewichtseffekten, wie z.B. der NO -Bildung oder lokaler Verlöschung. In Bereichen endlicher Chemie überschätzt das EDM den Brennstoffverbrauch. Dies führt lokal zu stark überhöhten Temperaturen und stellt einen weiteren Schwachpunkt des Verbrennungsmodells dar. Bei einer zusätzlichen Kopplung von EDM mit einem chemiedominierten Modell, können oben genannte Schwachpunkte z. T. erheblich verbessert werden. Allerdings wird im Gegensatz zum folgendem Modell die Interaktion zwischen turbulenten Strömungsfeld und chemischen Umsätzen nicht abgebildet.

12.2 Das linearisierte Finite-Rate-Chemistry-Modell (FRCM)

Im Gegensatz zum EDM findet die chemische Umsetzung bei diesem Modell mit endlicher Geschwindigkeit statt. Die Möglichkeit einer Rückreaktion wird beim FRCM ebenfalls berücksichtigt. Die Reaktionsrate $r_{\alpha,k}$ für eine Spezies α in einer Elementarreaktion k wird in Anlehnung an die Definition der Reaktionsgeschwindigkeit mit folgender Gleichung modelliert:

$$S_{\alpha,k}^{FRCM} = \Gamma M_{\alpha} \left(v_{\alpha,k}'' - v_{\alpha,k}' \right) \left(k_{f,k} \Pi_{\alpha} \left[\frac{\rho Y_{\alpha}}{M_{\alpha}} \right]^{v_{\alpha,k}'} - k_{b,k} \Pi_{\alpha} \left[\frac{\rho Y_{\alpha}}{M_{\alpha}} \right]^{v_{\alpha,k}''} \right). \quad (12.8)$$

Dabei sind $k_{f,k}$ bzw. $k_{b,k}$ die Geschwindigkeitskoeffizienten der Vorwärts- bzw. Rückwärtsreaktion. Diese Geschwindigkeitskoeffizienten werden nach dem Arrhenius-Ansatz berechnet und hängen ihrerseits nur noch von der Temperatur T ab. Γ modelliert den Einfluss von Stoßpartnern (*third body therm*) auf die Umsatzrate und ist definiert zu:

$$\Gamma = \sum \gamma_{\alpha,k} \frac{\rho Y_{\alpha}}{M_{\alpha}}. \quad (12.9)$$

Wobei $\gamma_{\alpha,k}$ den relativen Einfluss der Komponente α als Stoßpartner in der Elementarreaktion k darstellt. Gl. (12.8) stellt den klassischen Ansatz zur detaillierten Berechnung homogener chemischer Systeme dar. Für die Einbindung in die Speziesgleichung und um in größeren Zeitschritten rechnen zu können wird der Quellterm um einen Arbeitspunkt linearisiert. Dieses Modell ist vor allem für langsame chemische Zeitskalen bei laminarer Strömung vorteilhaft, da hier die chemische Zeitskala größer ist als die Mischungsdauer.

Bei turbulenten Mischungsvorgängen existieren Bereiche mit starker Turbulenz und intensiver Mischung neben Bereichen mit eher laminaren Strukturen. Es bietet sich daher an, das EDM und das FRCM zu koppeln. Bei dieser Vorgehensweise werden für jede Zelle beide Reaktionsraten berechnet und die kleinere als tatsächlich relevante Reaktionsrate eingesetzt. Der Gesamtumsatz bestimmt sich so durch den langsameren Vorgang von Mischung oder chemischer Reaktion.

$$r_{\alpha} = \min \left(r_{\alpha}^{EDM}, r_{\alpha}^{FRCM} \right). \quad (12.10)$$

Das kombinierte Verbrennungsmodell FRCM/EDM deckt einen großen Bereich der Damköhlerzahl ab und bietet bei Verwendung eines Mehrschritt-Chemiemechanismus einen weiteren Vorteil. Ist zum Beispiel ein Reaktionsschritt chemiekontrolliert ($Da \approx 1$), ein anderer jedoch mischungskontrolliert ($Da > 1$), wird der für den jeweiligen Reaktionsschritt zutreffende Quellterm eingesetzt, da ja für jeden Reaktionsschritt beide Quellterme berechnet werden. Nachteilig wirkt sich die fehlende Berücksichtigung der Turbulenz-Chemie-Interaktion aus. Wie im Folgenden gezeigt wird, kann man diese Kopplung durch angenommene Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen mit geringem numerischen Aufwand berücksichtigen.

12.3 Angenommene Wahrscheinlichkeitsdichtemodelle (Presumed-PDF)

Wie in Kap. 11.4 erwähnt kann die Kopplung zwischen turbulentem Strömungsfeld und den chemischen Umsatzraten über die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion erfolgen. Mathematisch ergibt sich der Erwartungswert μ einer Zufallsgröße x aus der Integration über das Produkt aus Wahrscheinlichkeitsfunktion und zugehöriger Zufallsvariable:

$$\mu = E(X) = \int_{-\infty}^{\infty} x \cdot f(x) \cdot dx \text{ bzw. } \mu = E(X) = \sum_i x_i \cdot f(x_i), \quad (12.11)$$

bzw. die Varianz σ^2 zu:

$$\sigma^2 = \text{Var}(X) = \int_{-\infty}^{\infty} (x - \mu)^2 \cdot f(x) \cdot dx \text{ bzw.} \quad (12.12)$$

$$\sigma^2 = \text{Var}(X) = \sum_i (x_i - \mu)^2 \cdot f(x_i)$$

oder die Standardabweichung σ :

$$\sigma = \sqrt{\text{Var}(X)}. \quad (12.13)$$

Die Bestimmung der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (PDF) kann prinzipiell auf zwei Arten erfolgen: Einmal kann eine bestimmte Form (z.B. Gauß, β -Funktion) für die PDF angenommen werden (Presumed-PDF). Im anderen Fall wird sie über eine Transportgleichung berechnet (Transported-PDF, Kapitel 12.4). Der Vorteil einer Presumed-PDF besteht in der einfachen numerischen Implementierung in eine CFD-Gesamtberechnung.

Meist werden Gaußfunktionen bzw. die β -Funktion eingesetzt. Für die Formparameter werden in der Regel Transportgleichungen gelöst. Berechnet man nun den mittleren chemischen Quellterm, so wird die PDF in Abhängigkeit aller Spezies und der Temperatur benötigt. Solch eine multidimensionale Wahrscheinlichkeitsfunktion ist allerdings analytisch nicht zu konstruieren. Unter der Annahme statistischer Unabhängigkeit aller Skalare, kann man eine multidimensionale PDF aus dem Produkt der PDFs der einzelnen Skalare berechnen. Beispielsweise folgt unter dieser Annahme die gemeinsame PDF von Wasser, Kohlendioxid und der Temperatur zu:

$$f_{H_2O,CO_2,T}(\phi) = f(\varphi_{H_2O}) \cdot f(\varphi_{CO_2}) \cdot f(\varphi_T). \quad (12.14)$$

Allerdings ist die Annahme statistischer Unabhängigkeit sehr fragwürdig. Die mathematische Überprüfung dieser Aussage kann über die Korrelationsfunktion:

$$\text{corr}(\varphi_{H_2O,CO_2,T}) = \frac{\langle \varphi'_{H_2O} \varphi'_T \varphi'_{CO_2} \rangle}{\sqrt{\varphi'^2_{H_2O}} \sqrt{\varphi'^2_{CO_2}} \sqrt{\varphi'^2_T}} = 0 \quad (12.15)$$

erfolgen, was allerdings im vorhinein kaum überprüft werden kann. Ein hierzu alternativer Ansatz über die Herleitung einer Transportgleichung für die PDF wird im folgenden Kapitel 12.4 beschrieben.

12.3.1 Das Mischungsbruchmodell mit Presumed-PDF

Man erhält einen guten Einblick in den Charakter nicht-vorgemischter turbulenter Flammen, wenn man vereinfacht annimmt, dass Brennstoff und Oxidationsmittel unendlich schnell reagieren, sobald sie sich gemischt haben („gemischt ist gleich verbrannt“ – vgl. EDM Kap. 12.1). Verwendet man diese Annahme, so muss lediglich bestimmt werden, wie schnell die Mischung stattfindet.

Eine Momentaufnahme eines solchen turbulenten Mischungsprozesses ist in Abb. 12.3 dargestellt. Brennstoff strömt in das Oxidationsmittel (Sauerstoff, Luft). Turbulente Vermischung bewirkt, dass Brennstoff und Oxidationsmittel eine brennbare Mischung bilden, die unter der oben gemachten Annahme unendlich schneller Chemie sofort reagiert. Neben Bereichen, in denen der Brennstoff überwiegt (fette Mischung), und Bereichen, in denen Oxidationsmittel im Überschuss vorhanden ist (magere Mischung), existiert eine stöchiometrische Fläche, entlang derer eine stöchiometrische Mischung vorliegt. Im oberen Teil der Abbildung ist der Molenbruch beispielhaft für einen bestimmten Abstand zum Brenner dargestellt. In vielen Fällen treten bei turbulenten nicht-vorgemischten Flammen im Bereich sehr nahe der stöchiometrischen Mischung Flammenfronten auf, die sich durch die intensiven Leuchterscheinungen identifizieren lassen.

Die Beschreibung der Mischungsprozesse in nicht reagierenden Freistrahlen ist alleine eine schwierige Aufgabe. Das zusätzliche Problem variabler Dichte bei reagierenden Strömungen kommt bei Verbrennungsprozessen erschwerend hinzu.

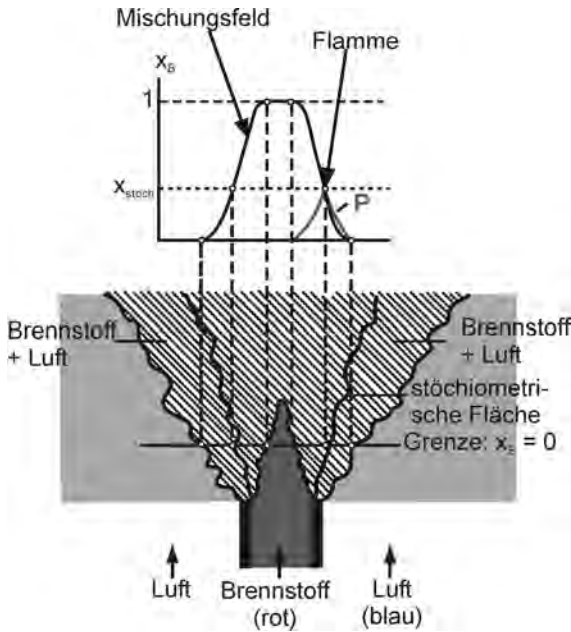


Abb. 12.3 Schematische Darstellung einer Momentaufnahme einer turbulenten nicht-vorgemischten Freistrahlfamme (Molenbruch $x_i = n_i/n$) (Warnatz et al. 2001)

Das Mischungsproblem lässt sich jedoch erheblich vereinfachen, wenn man gleiche Diffusionskoeffizienten für alle Skalare annimmt. Dann mischen alle Spezies gleich schnell und die Mischung nur einer einzigen Variablen muss betrachtet werden. Da chemische Spezies bei chemischen Reaktionen gebildet oder verbraucht werden, ist es einfacher, den Mischungsprozess für die Elemente zu verfolgen. Ganz analog zum laminaren Fall führt man dazu den *Mischungsbruch* ξ als konservativen Skalar ein

$$\xi = \frac{Z_i - Z_{i2}}{Z_{i1} - Z_{i2}} \quad \text{mit } i = 1: \text{Brennstoff}, \quad i = 2: \text{Luft} . \quad (12.16)$$

Dabei sind Z_i Element-Massenbrüche.

Es soll nun ein Zwei-Strom-Problem mit den Element-Massenbrüchen Z_{i1} und Z_{i2} in den beiden Strömen (z.B. in einer Strahlflamme) betrachtet werden. ξ ist bei gleichen Diffusivitäten unabhängig von der Wahl des betrachteten Elementes i ($i = 1, \dots, M$) und wegen Gl. (12.16) und $Z_i = \sum \mu_{ij} Y_j$ linear mit den Massenbrüchen Y_j verknüpft.

Es ist $\xi = 1$ in Strom 1 (z.B. reiner Brennstoff), $\xi = 0$ in Strom 2. Der Mischungsbruch ξ kann als der Massenbruch des Materials gedeutet werden, das aus Strom 1 stammt, $1 - \xi$ als der Massenbruch des Materials, das aus Strom 2 (z.B. reiner Oxidator) stammt.

Wegen der linearen Abhängigkeit (Gl. (12.17)) lässt sich über die Elementenbruchbilanz (Warnatz et al. 2001)

$$\frac{\partial(\rho \cdot Z_i)}{\partial t} + \text{div}(\rho \cdot \vec{u} \cdot Z_i) - \text{div}(\rho \cdot D \cdot \text{grad } Z_i) = 0 \quad (12.17)$$

leicht eine Erhaltungsgleichung für den Mischungsbruch ξ ableiten als

$$\frac{\partial(\rho \xi)}{\partial t} + \text{div}(\rho \vec{u} \xi) - \text{div}(\rho \cdot D \cdot \text{grad } \xi) = 0. \quad (12.18)$$

Bemerkenswert ist, dass in der Erhaltungsgleichung für ξ kein Quellterm auftritt. Man nennt ξ deswegen oft skalare Erhaltungsgröße (englisch: conserved scalar). Nimmt man zusätzlich an, dass die Lewis-Zahl

$$Le = \lambda / (D \cdot \rho \cdot c_p) = 1 \quad (12.19)$$

ist, und dass keine Wärmeverluste auftreten, so kann auch das Enthalpie- bzw. Temperaturfeld durch ξ beschrieben werden (die kinetische Energie der Strömung ist vernachlässigbar),

$$\xi = \frac{h - h_2}{h_1 - h_2}. \quad (12.20)$$

Bei Annahme von

- unendlich schneller Chemie (d.h. Gleichgewichtschemie, gemischt = verbrannt),
- gleichen Diffusivitäten ($Le = 1$),
- fehlenden Wärmeverlusten

sind alle skalaren Variablen (Temperatur, Massenbrüche und Dichte) eindeutige Funktionen des Mischungsbruches. Diese Funktionen sind direkt durch die Gleichgewichtszusammensetzung gegeben. Das Problem der Beschreibung turbulenter nicht-vorgemischter Flammen hat sich damit in einfacher Weise auf das Problem der Beschreibung des turbulenten Mischungsprozesses ξ reduziert.

Im laminaren Fall kann man mit Gl. (12.18) das Mischungsfeld und somit die Reaktionsraten beschreiben. Im turbulenten Fall hingegen ergibt die Mittelwertbildung unter Verwendung des Gradientenansatzes mit dem

turbulenten Austauschkoeffizienten ν_{turb} für den stationären Fall bei vernachlässigbarer Diffusion ($div(\bar{\rho} \cdot D \cdot grad \tilde{\xi}) = 0$) nach (Warnatz et al. 2001):

$$div\left(\bar{\rho} \tilde{u} \tilde{\xi}\right) - div\left(\bar{\rho} \nu_{turb} grad \tilde{\xi}\right) = 0. \quad (12.21)$$

Die Kopplung des turbulenten Strömungsfeldes mit der Chemie erfolgt nun über die *angenommene Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion* des Mischungsbruchs. Mit ihrer Hilfe lassen sich die Mittelwerte der skalaren Größen berechnen. Da in die Massenerhaltungsgleichung, die Navier-Stokes-Gleichung und in die Energieerhaltungsgleichung die mittlere Dichte des Gemisches eingeht, lässt sich auf diese Weise das System der gemittelten Erhaltungsgleichungen schließen.

Bei einer Gaußverteilung benötigt man zusätzlich zum Mittelwert (Gl. (12.21)) noch die Standardabweichung des Mischungsbruchs. Aus Gl. (12.21) lässt sich eine Erhaltungsgleichung für die Favre-Varianz (Standardabweichung) $\widetilde{\xi^{n^2}} = \rho \xi^{n^2} / \bar{\rho}$ herleiten (Multiplikation von Gl. (12.21) mit $\tilde{\xi}$ und anschließende Mittelwertbildung). Es ergibt sich (Bilger 1980)

$$\begin{aligned} div(\bar{\rho} \tilde{u} \widetilde{\xi^{n^2}}) - div(\bar{\rho} \nu_{turb} grad \widetilde{\xi^{n^2}}) \\ = 2 \bar{\rho} \nu_T grad^2 \tilde{\xi} - 2 \rho D grad^2 \xi^n, \end{aligned} \quad (12.22)$$

wobei $grad^2 \xi$ das Betragsquadrat des Gradienten, $(grad \xi)^T grad \xi$ bezeichnet. Den letzten Term dieser Gleichung nennt man skalare Dissipationsgeschwindigkeit χ . Sie dissipiert Fluktuationen der Skalare analog zur Dissipation von Geschwindigkeitsfluktuationen durch die viskose Dissipation. Auch der Term χ muss in Abhängigkeit bekannter Größen modelliert werden z.B. durch den einfachen Gradiententransport-Ansatz (Warnatz et al. 2001)

$$\bar{\chi} = 2 \overline{\rho D grad^2 \xi^n} / \bar{\rho} \approx 2 D grad^2 \tilde{\xi}. \quad (12.23)$$

Aus $\tilde{\xi}$ und $\widetilde{\xi^{n^2}}$ lässt sich nun die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion $f(\xi, \bar{r})$ bestimmen (z.B. eine Gauß-Funktion). Mit deren Hilfe können dann die interessierenden Mittelwerte berechnet werden, da ρ , Y_i und T als Funktionen von ξ bekannt sind:

$$\begin{aligned}
 \tilde{Y}_i(\bar{r}) &= \int_0^1 Y_i(\xi) \tilde{f}(\xi; \bar{r}) d\xi, \\
 \tilde{T}(\bar{r}) &= \int_0^1 T(\xi) \tilde{f}(\xi; \bar{r}) d\xi, \\
 \widetilde{Y_1^{n^2}} &= \int_0^1 [Y_1(\xi) - \tilde{Y}_1(\bar{r})]^2 \tilde{f}(\xi; \bar{r}) d\xi, \\
 \widetilde{T^{n^2}}(\bar{r}) &= \int_0^1 [T(\xi) - \tilde{T}(\bar{r})]^2 f(\xi; \bar{r}) d\xi,
 \end{aligned}
 \tag{12.24}$$

\tilde{f} ist dabei eine Favre-gemittelte Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion, die sich aus der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion durch Integration über die Dichte berechnen lässt,

$$\tilde{f}(\xi; \bar{r}) = \frac{1}{\rho} \int_0^\infty \rho f(\rho, \xi, \bar{r}) d\rho.
 \tag{12.25}$$

Damit besteht das Gleichungssystem aus den Erhaltungsgleichungen für Dichte- und Geschwindigkeitsfeld (z.B. unter Benutzung der Gleichungen des k - ε -Modells), sowie den Bilanzgleichungen für Favre-Mittelwert $\tilde{\xi}$ und Favre-Varianz $\widetilde{\xi^{n^2}}$ des Mischungsbruches ξ . Aus $\tilde{\xi}$ und $\widetilde{\xi^{n^2}}$ lässt sich die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion $f(\xi)$ bestimmen. Wegen des eindeutigen Zusammenhangs zwischen ξ und allen skalaren Größen (d.h. die Gleichgewichtszusammensetzungen) kann man die Statistik jedes Skalars berechnen. Mit diesen Gleichungen lassen sich Flammenlängen, Temperaturfelder und die Konzentrationsfelder von Hauptkomponenten (Brennstoff, Sauerstoff, Wasser, Kohlendioxid) berechnen.

Das Modell kann zwar zur Berechnung des Temperaturfeldes herangezogen werden, es wird jedoch nie eine Flammenlöschung simulieren können, da man unendlich schnelle Chemie annimmt. Prozesse, die nicht bis zum Gleichgewicht ablaufen, sondern wegen der beschränkten Aufenthaltszeit in den Brennräumen transient betrachtet werden müssen, wie z.B. die Rußbildung und die Bildung von Stickoxiden und unverbrannten Kohlenwasserstoffen, lassen sich durch das Modell ebenfalls nicht beschreiben. Dies sind jedoch wichtige Phänomene in Verbrennungsprozessen, denen Beachtung geschenkt werden muss. Deswegen sollen im Folgenden Modellverbesserungen behandelt werden, die den Einfluss endlich schneller Chemie berücksichtigen.

12.3.2 Das Flamelet-Modell

Betrachtet man sich das Zeitskalenspektrum so erkennt man, dass nur wenige chemische Zeitskalen mit den turbulenten, physikalischen Skalen wechselwirken. Im Falle sehr großer Damköhlerzahlen sind die Reaktionsgeschwindigkeiten sehr viel kleiner als die turbulente Mischungszeit, daher kann man für diesen Grenzfall eine *Skalenseparation* vornehmen. Die Grundidee bei der Flamelet-Behandlung besteht also in der Trennung von chemischer Dynamik und dem turbulenten Strömungsfeld. Dies ermöglicht es, die turbulente Flamme in viele, kleine laminare Flamelets aufzuteilen und getrennt von den physikalischen Prozessen zu berechnen. Die nunmehr laminaren Flammen können leicht berechnet und tabelliert als Sub-Modell einer CFD-Rechnung beigelegt werden. Voraussetzungen bei der Flamelet-Behandlung sind demnach $Da \gg 1$, was einer sehr dünnen Reaktionszone entspricht.

Zur mathematischen Herleitung der Flamelet-Gleichung muss zunächst der Begriff der *skalaren Dissipationsgeschwindigkeit* χ eingeführt werden, um ein Maß für das Abweichen vom chemischen Gleichgewicht zu bekommen. Erhöht man beispielsweise bei einer laminaren Flamme die Anströmgeschwindigkeit, so wird die Flamme zunehmend gestreckt, bis sie schließlich ausgeblasen wird. Dies bestätigen auch die Berechnungen laminarer Gegenstromflammen, wo die Lösungen zunehmend vom Gleichgewicht abweichen. Der entscheidende Parameter hierbei ist die *Streckung* a , die mit der *skalaren Dissipationsgeschwindigkeit* $\chi = 2 D \cdot (\text{grad } \xi)^2$ in Beziehung steht. Für die Tsuji-Geometrie (Abb. 12.4) nähert man die Streckungsgeschwindigkeit üblicherweise durch die Lösung der Potentialströmung mit $a = 2 u / R$ an (u Anströmgeschwindigkeit der Frischluft). Diese Gleichung beschreibt korrekt, dass bei jeder Streckung a die skalare Dissipation groß oder klein sein kann.

Die skalare Dissipationsgeschwindigkeit χ entspricht der Inversen einer diffusiven Zeit und charakterisiert die lokale Mischungsrate. Somit ist sie ein passender Parameter, der die Abweichung vom Gleichgewicht beschreiben kann.

Die turbulente Flamme wird somit als ein Ensemble vieler kleiner laminarer Flämmchen (*Flamelets*) angenähert, die alle die gleiche skalare Dissipationsgeschwindigkeit χ besitzen. Da der Mischungsbruch über den Mischungsbruch als bekannte Funktion von Ort und Zeit ausgedrückt werden kann, ist es möglich ein Koordinatensystem auf einem Oberflächenelement mit konstantem Mischungsbruch einzuführen. Die Koordinate senkrecht dazu stellt als unabhängige Variable den Mischungsbruch dar (Abb. 12.5).

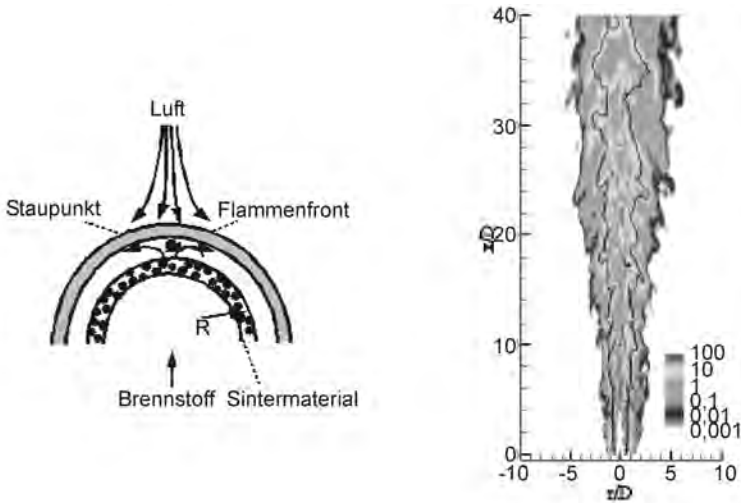


Abb. 12.4 Tsuji-Gegenstromflamme und berechnete (LES) skalare Dissipationsgeschwindigkeit für eine Freistrahlfamme (Barlow u. Frank 2003)

Die Annahmen für die Gültigkeit des Flamelet-Modells sind somit:

- die Konzentrationen der Spezies sind eine eindeutige Funktion des Mischungsbruches,
- eine mehrdimensionale turbulente Flamme ist beschreibbar über viele eindimensionale, laminare Flamelets im Mischungsbruchraum,
- gleiche Diffusivität aller Spezies ($Le = 1$).

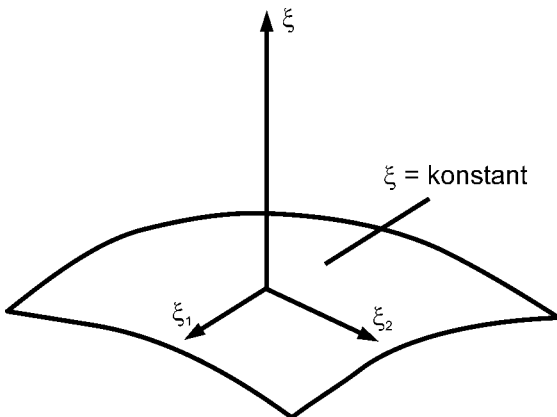


Abb. 12.5 Isofläche mit $\xi = \text{konstant}$ im Zustandsraum und einem dazu senkrecht stehenden Koordinatensystem mit ξ als unabhängiger Variable

Bei einem gegebenen Wert für die skalare Dissipationsgeschwindigkeit χ sind die Massenbrüche an jedem Ort in der Flamme eindeutige Funktionen des Mischungsbruches (Index F : unter Gültigkeit der Flamelet-Annahmen)

$$Y_i = Y_i^{(F)}(\xi), \quad \frac{\partial Y_i}{\partial t} = \frac{\partial Y_i^{(F)}}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial t} \quad \text{und} \quad (12.26)$$

$$\text{grad } Y_i = \frac{\partial Y_i^{(F)}}{\partial \xi} \text{grad } \xi.$$

Einsetzen in die Erhaltungsgleichung für Y_i liefert dann die (nur im Rahmen der oben genannten Vereinfachung gültige) Gleichung (Peters 1987)

$$\frac{\partial Y_i^{(F)}}{\partial \xi} \left[\frac{\partial(\rho \xi)}{\partial t} + \text{div}(\rho \bar{u} \xi) - \text{div}(\rho D \text{grad } \xi) \right] \quad (12.27)$$

$$- \rho D (\text{grad } \xi)^2 \frac{\partial^2 Y_i^{(F)}}{\partial \xi^2} = M_i r_i.$$

Gemäß Gl. (12.28) verschwindet der Term in der eckigen Klammer für stationäre Strömung und man erhält die *Flamelet-Gleichung*:

$$- \rho D (\text{grad}^2 \xi) \frac{\partial^2 Y_i^{(F)}}{\partial \xi^2} = M_i r_i, \quad (12.28)$$

wobei für die skalare Dissipationsgeschwindigkeit $\chi = 2 \cdot D \cdot \text{grad}^2 \xi$ gesetzt wird. Diese Gleichung zeigt die Balance zwischen dem chemischen Umsatz in der Flammenfront und der Diffusion aus der Reaktionszone.

Der bis hier geschilderte Weg, turbulente nicht-vorgemischte Flammen mit einem Flamelet-Modell zu simulieren, verlangt die Lösung der Erhaltungsgleichungen für alle im Reaktionssystem vorkommenden Spezies und ist daher sehr aufwendig. Zudem sind die Massenbrüche, die Temperatur und die Dichte (gemäß der oben dargestellten Annahme) eindeutige Funktionen des Mischungsbruches und der skalaren Dissipationsgeschwindigkeit. In der Praxis wird daher die Abhängigkeit $\rho^{(F)} = \rho^{(F)}(\chi, \xi)$, $Y^{(F)} = Y_i^{(F)}(\chi, \xi)$, $T^{(F)} = T^{(F)}(\chi, \xi)$ aus Berechnungen laminarer nicht-vorgemischter Flammenfronten bereitgestellt. Man benötigt demnach Bibliotheken von Flammenstrukturen $\rho^{(F)} = \rho^{(F)}(\xi)$, $Y^{(F)} = Y_i^{(F)}(\xi)$, $T^{(F)} = T^{(F)}(\xi)$ bei verschiedenen skalaren Dissipationsgeschwindigkeiten χ und T_{inlet} und p . Die Berechnung solcher Bibliotheken ist zwar aufwendig, muss jedoch nur einmal vor der eigentlichen CFD-Rechnung durchgeführt werden. Abb. 12.6 zeigt die Flamelet-Lösung für eine skalare Dissipationsrate von $\chi = 100s^{-1}$ im Mischungsbruchraum.

Analog zu dem hier vorgestellten nicht-vorgemischten Fall mit dem Mischungsbruch als unabhängige Variable, können auch vorgemischte Flammen mit einer Reaktionsfortschrittsvariablen simuliert werden. Während einer CFD-Berechnung werden dann entsprechend vorgemischte laminare Flammenbibliotheken ausgewertet.

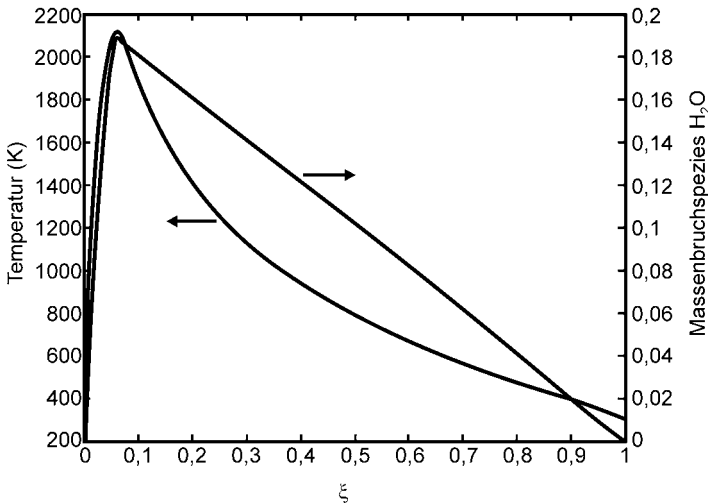


Abb. 12.6 Flameletrechnung von Temperatur und H_2O -Massenbruch bei einer Streckungsrate von $\chi = 100s^{-1}$

Die Kopplung mit dem turbulenten Strömungsfeld geschieht über die sogenannten Schließungsmodelle, z.B. der *presumed* oder *transported PDF* oder bei Tabellierung der laminaren Umsatzrate pro Volumen durch das *flame surface density* Modell.

12.3.3 Das Flamelet-Modell mit Presumed-PDF

Mit dem hier vorgestellten Flamelet-Modell sind in den vergangenen Jahren erhebliche Fortschritte bei der Beschreibung turbulenter Flammen erzielt worden. Unter Beachtung der Gültigkeitsvoraussetzungen sind sehr gute Ergebnisse bei vertretbaren Rechenzeiten realisierbar. Da die Grundlagen zur Herleitung der Flamelet-Gleichung beschrieben sind, soll im Folgenden speziell auf die Kopplung mit dem turbulenten Strömungsfeld eingegangen werden.

Bei Simulationen mit endlicher Chemie, z.B. Flammenlöschung, wird die Abweichung vom Gleichgewicht mit der skalaren Dissipationsgeschwindigkeit χ beschrieben. Folglich muss bei einer Kopplung mit dem

Strömungsfeld die PDF in Abhängigkeit des Mischungsbruchs und der Dissipationsrate χ bestimmt werden.

Üblicherweise nimmt man dabei an, dass χ und ξ *statistisch unabhängig* sind, so dass man einen Produktansatz $\tilde{f}(\chi, \xi) = \tilde{f}_1(\chi) \tilde{f}_2(\xi)$ verwenden kann (Peters 1987). Für $\tilde{f}_1(\chi)$ benutzt man nach Kolmogorov eine logarithmische Normalverteilung (siehe z.B. Liew et al. 1984, Buch u. Dahm 1996, 1998), während für $\tilde{f}_2(\xi)$ eine β -Funktion gewählt wird. Dann ergeben sich die mittleren Speziesmassenbrüche zu:

$$\bar{Y}_i(\bar{r}) = \int_0^1 \int_0^\infty Y_i^{(F)}(\chi, \xi) \tilde{f}(\chi, \xi; \bar{r}) d\chi d\xi \tag{12.29}$$

mit der Favre-gemittelten PDF:

$$\tilde{f}(\chi, \xi; \bar{r}) = \frac{\rho^{(F)}(\xi)}{\bar{\rho}(\bar{r})} f(\chi, \xi; \bar{r}). \tag{12.30}$$

Die Abhängigkeiten $\rho^{(F)} = \rho^{(F)}(\chi, \xi)$, $Y_i^{(F)} = Y_i^{(F)}(\chi, \xi)$, $T^{(F)} = T^{(F)}(\chi, \xi)$ werden aus Berechnungen laminarer nicht-vorgemischter Flammenfronten bereitgestellt. Man benötigt demnach Bibliotheken von Flammenstrukturen $\rho^{(F)} = \rho^{(F)}(\xi)$, $Y_i^{(F)} = Y_i^{(F)}(\xi)$, $T^{(F)} = T^{(F)}(\chi)$ bei verschiedenen skalaren Dissipationsgeschwindigkeiten χ . Die Berechnung der Mittelwerte nach Gl. (12.29) ist dann recht einfach (siehe (Rogg et al. 1987) für Strahl-Flammen, (Gill et al. 1994) für motorische Verbrennung).

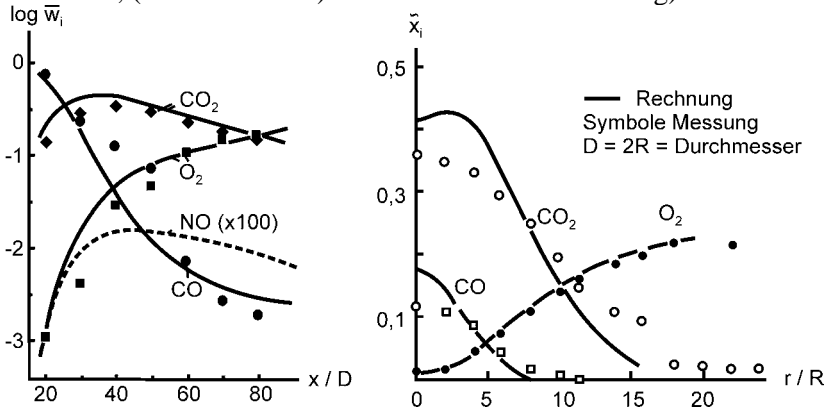


Abb. 12.7 Mit Flamelet-Modell berechnete (Behrendt et al. 1987) und experimentelle (Radzan u. Stevens 1985) Konzentrationsprofile in einer nicht-vorgemischten turbulenten CO -Luft-Freistrahlf Flamme; dargestellt sind radiale (links) und axiale (rechts) Profile; $D = 2 R$ Düsendurchmesser

Das oben beschriebene Modell liefert, sofern die Flamelet-Annahme erfüllt ist, mit einem relativ geringen Aufwand sehr gute Ergebnisse. Zur Demonstration zeigt Abb. 12.7 gemessene (Radzan u. Stevens 1985) und mit Hilfe des Flamelet-Modells simulierte (Behrendt et al. 1987) Konzentrationsprofile in einer turbulenten nicht-vorgemischten Strahlflamme von CO in Luft. Das CO -Luft-System hat hier den Vorteil, dass die Bedingung gleicher Diffusionskoeffizienten gut erfüllt ist, andererseits die Strahlung von Ruß die Temperatur nicht absenkt.

Dieses Modell stellt eine große Verbesserung dar. Nicht-Gleichgewichts-Konzentrationen von CO , NO und anderen Stoffen werden vorhergesagt. Es findet heute vorwiegend bei der Berechnung motorischer Verbrennung Anwendung.

12.4 Das PDF-Transportgleichungsmodell

Soll für die PDF statistische Unabhängigkeit der interessierenden Skalare vorausgesetzt werden, ist die mehrdimensionale PDF nicht mehr einfach im Voraus zu bestimmen. Die Entwicklung der PDF im Verlauf des Strömungsfeldes wird anhand von Transportgleichungen beschrieben.

12.4.1 Einleitung

Betrachtet man turbulente Strömungen als einen chaotischen Prozess, so ist es naheliegend, die Strömung mittels stochastischer Gleichungen zu beschreiben. Die das Strömungsfeld beschreibenden Größen sind Zufallsvariablen. Im Gegensatz zu den deterministischen Navier-Stokes-Gleichungen, die für eine Vielzahl von leicht veränderten Randbedingungen zu lösen sind, erhält man direkt aus der PDF alle stochastischen Momente, wie Mittelwerte bzw. Varianzen.

Motiviert wird die Methode zusätzlich aus dem Schließungsproblem des hoch nichtlinearen chemischen Quellterms. Ohne Kenntnis der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion ist eine exakte Mittelwertbildung nicht möglich. Die genaue Berechnung der fluktuierenden Skalare, wie Temperatur, Konzentrationen bzw. des daraus abgeleiteten chemischen Umsatzes sind aber erst die Voraussetzung für spätere Schadstoffbestimmungen (z.B. NO_x , Ruß). Es geht bei der PDF-Methode also grundlegend um folgende Bestimmungsgleichung für den chemischen Umsatz:

$$\tilde{S}(\Phi) = \int \tilde{f}_\Phi(\Psi) S(\Psi) d\Psi, \quad (12.31)$$

wobei \tilde{S} den Favre-gemittelten Umsatz und \tilde{f} die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion in Abhängigkeit aller möglichen Strömungsrealisierungen Ψ darstellt. Die eigentliche Schwierigkeit besteht nun in der Berechnung dieser Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion.

Im Kapitel 12.3 wurde die Turbulenz-Chemie Interaktion durch die Presumed-PDF abgebildet. Hierbei berechnet sich die Form der PDF unter Annahme weniger Parameter (z.B. Mittelwerte, Varianz jeweils aus CFD-Rechnungen). Gute Ergebnisse erzielt diese Methode bei eindimensionalen Wahrscheinlichkeitsfunktionen. Es ist aber kaum möglich mehrdimensionale PDF's derart zu konstruieren, dass sich für alle physikalischen Zustände positive Wahrscheinlichkeiten ergeben. Ein Vorteil der angenommenen PDF-Methode besteht sicherlich im geringen Mehraufwand zur laminaren Chemie, weil lediglich zwei zusätzliche Gleichungen gelöst werden müssen. Allerdings gibt es eine Reihe von Nachteilen, wie die begrenzten Erkenntnisse über die tatsächliche Form der PDF oder die Annahme von statistischer Unabhängigkeit von Temperatur und Zusammensetzung. Berücksichtigungen solcher Korrelationen erweisen sich als äußerst schwierig.

Eine Alternative besteht in der im Folgenden erklärten Lösung einer Transportgleichung für die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion. Dabei soll zunächst das generelle Vorgehen anhand Abb. 12.8 erklärt werden.

Abb. 12.8 zeigt links das Photo einer nicht vorgemischten CH_4 /Luftflamme, in der über eine zeitliche Raman Scattermessung (im Photo ist der grüne Laserlichtschnitt einer LIF-Messung sichtbar) das rechts oben dargestellte Streudiagramm gemessen wird. Jeder einzelne Punkt im Messdiagramm entspricht dabei einem speziellen thermochemischen Zustand. Dabei ist im Diagramm der Zustand Temperatur über dem Mischungsbruch aufgetragen. Man erkennt, dass die turbulenten Strömungsfuktuationen eine stochastische Temperaturverteilung bewirken. In der Messung erstreckt sich über den gesamten Mischungsbruch ein breites Band gleichverteilter (Wahrscheinlichkeit) Zustände zwischen 700 K und 1.200 K. Somit befindet sich die Flamme in der dargestellten Ebene an der Verlöschungsgrenze.

Um diese Phänomene rechnerisch nachzubilden, müssen die physikalischen Vorgänge in ihrer stochastischen Natur simuliert werden. In der Lagrangschen Betrachtungsweise ändert ein Fluidpartikel seinen Zustand durch molekulare Diffusion und chemische Reaktion. Diese Prozesse werden analog zu dem Fluidsystem über ein stochastisches Ersatzsystem in den PDF-Methoden nachgebildet. Dabei ändern sogenannte stochastische Partikel, die die gleiche Verteilungsfunktion besitzen wie die fluiden Partikel, ihren Zustand durch Diffusions- und Reaktionsprozesse.

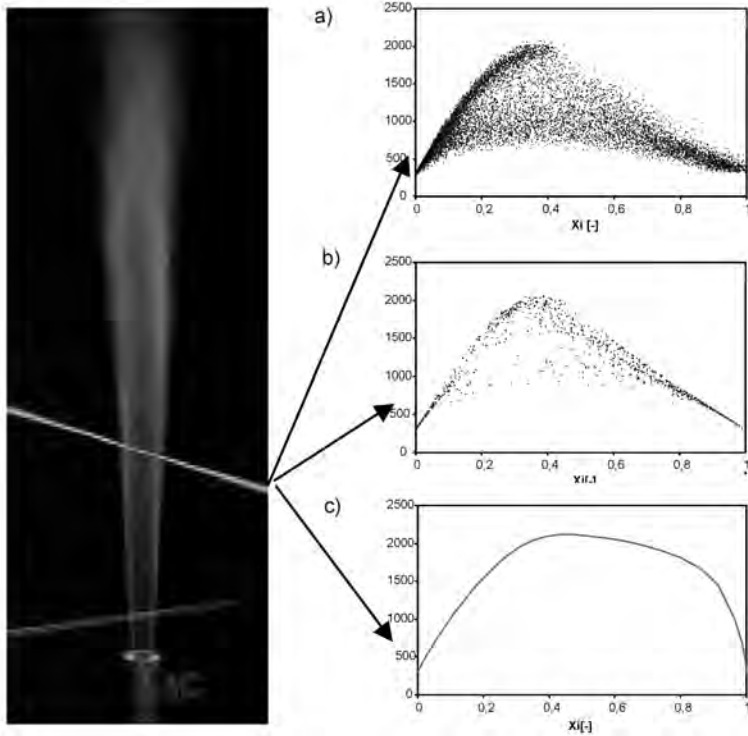


Abb. 12.8 links: nicht vorgemischte CH_4 /Luft Flamme mit Lichtschnitt (grau) ; rechts von oben nach unten: a) gemessene Einzelrepräsentationen der Temperatur über den Mischungsbruch entlang des Lichtschnitts; b) mit PDF-Methoden berechnete Einzelzustände der Temperatur; c) deterministische Temperaturberechnung (Messungen aus Sandia National Laboratories 2002)

Dieses Vorgehen erlaubt den direkten Vergleich in der Streubilddarstellung (Abb. 12.8 rechts mitte) und ermöglicht die Wiedergabe von Flammenlöschen. Im Vergleich dazu zeigt Abb. 12.8 rechts unten ein deterministisches Verbrennungsmodell, das für exakt jeden Mischungsbruch nur eine Temperatur vorhersagt. In diesem Fall kann das Flammenlöschen nicht wiedergegeben werden.

12.4.2 Statistische Beschreibung des thermochemischen Zustandes

Führt man wiederholende Messungen in einer turbulenten Strömung durch, so beobachtet man unterschiedliche Werte. Dies liegt an den sich stets leicht ändernden Anfangsbedingungen. Wie bereits angesprochen, sind die

das Strömungsfeld beschreibenden Größen Zufallsvariablen, die nur über ihre Wahrscheinlichkeitsfunktion beschrieben werden können. Die Zusammenhänge verdeutlicht Abb. 12.9, in der schematisch an einer ebenen Scherschicht die Vermischung zweier Stoffströme dargestellt ist. Aus dem zeitlichen Verlauf der skalaren Eigenschaften leiten sich dann die Eintrittswahrscheinlichkeiten in Form der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (PDF) bzw. der aufsummierten Verteilungsfunktion (CDF) ab.

Zur Ableitung der Transportgleichung für die PDF geht man von den Mittelwerten der skalaren Größen aus. Es sei Φ ein Vektor von thermochemischen Größen:

$$\Phi = \{\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3, \dots, \varphi_\sigma\}, \quad (12.32)$$

der sich über eine Transportgleichung berechnen lässt. Für nicht-vorgemischte Flammen kann dies im einfachsten Fall der Mischungsbruch sein. Bei Berücksichtigung detaillierter Chemie kommen entsprechend der Anzahl der Spezies weitere Skalare hinzu.

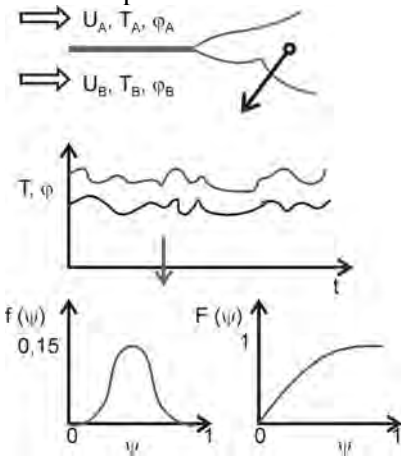


Abb. 12.9 Zeitlicher Verlauf, Wahrscheinlichkeitsdichte (PDF) $f(\psi)$ und Verteilungsfunktion (CDF) $F(\psi)$ in einer Mischschicht

$\Phi(x, t)$ beschreibt also als Zufallsvektor den Zustand an einem bestimmten Ort zu einem bestimmten Zeitpunkt. Die korrespondierenden unabhängigen Variablen im Zustandsraum seien dann:

$$\Psi = \{\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_\sigma\}. \quad (12.33)$$

Sie bilden den σ -dimensionalen Zustands(stichproben)raum, der alle möglichen Zustände Φ enthält. Eine daraus abgeleitete Verteilungsfunktion:

$$F(\Psi; \mathbf{x}, t) = \text{Prob}(\Phi(x, t) < \Psi(\mathbf{x}, t)) \quad (12.34)$$

gibt die Wahrscheinlichkeit an, mit welcher ein Zustand im thermochemischen Raum angenommen wird. Die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion erhält man durch differenzieren der Verteilungsfunktion zu:

$$f(\Psi; \mathbf{x}, t) = \frac{\partial F}{\partial \Psi} \quad (12.35)$$

mit folgenden Eigenschaften:

$$f(\Psi) \geq 0 \quad (12.36)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(\Psi) d\Psi = 1.$$

Wie schon erwähnt ergibt sich der mathematische Erwartungswert damit zu:

$$\langle Q(\Phi) \rangle = \int Q(\Psi) f(\Psi) d\Psi, \quad (12.37)$$

bzw.

$$\tilde{Q}(\Phi) = \int Q(\Psi) \tilde{f}(\Psi) d\Psi. \quad (12.38)$$

Im Allgemeinen ist es nicht möglich einen analytischen Ausdruck für \tilde{f} anzugeben.

12.4.3 Herleitung der PDF-Transportgleichung

Die PDF kann als Summe von Einzelzuständen (Delta-Funktionen) dargestellt werden. Ausgehend von dieser momentanen Wahrscheinlichkeitsdichte kann man die PDF als Transportgröße im Strömungsfeld auffassen.

Es sei angemerkt, dass man in Anlehnung an die Brown'sche Molekularbewegung die PDF auch allgemein als Markov-Prozess behandeln kann. Dies bedeutet, dass der Zustand zum Zeitpunkt $t + \Delta t$ nur vom gegenwärtigen Zustand t abhängt und nicht von der Vergangenheit. Für die Lösung der PDF bedeutet dies folgendes: Durch die Kenntnis der PDF zum Zeitpunkt t_0 ist sie auch zum Zeitpunkt $t + \Delta t$ eindeutig bestimmt. Aus der Fokker-Planck-Gleichung, die die Entwicklung einer Zufallsvariablen beschreibt, kann die PDF hergeleitet werden.

Ein zweiter, anschaulicherer Weg über die momentane Wahrscheinlichkeitsdichte (Laxander 1996) geht von der allgemeinen Transportgleichung einer thermochemischen Variablen aus:

$$\frac{\partial(\rho \varphi_\alpha)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \bar{u} \varphi_\alpha) + \operatorname{div}(\rho D \cdot \operatorname{grad} \varphi_\alpha) = M_\alpha r_\alpha, \alpha = 1, \dots, S \quad (12.39)$$

mit S Reaktionsgleichungen.

Dabei wird ein konstanter Diffusionskoeffizient D vorausgesetzt. Mit dem Ansatz für die momentane Wahrscheinlichkeitsdichte

$$\hat{f}(\Psi; \mathbf{x}, t) = \prod_{\alpha=1}^{\sigma} \delta(\varphi_\alpha(\mathbf{x}, t) - \psi_\alpha) \quad (12.40)$$

und der Transportgleichung (12.39) folgt nach einigem Umformen die Transportgleichung für die momentane Wahrscheinlichkeitsdichte bzw. nach anschließender Favre-Mittelung die gesuchte PDF $\tilde{f}(\Psi; \mathbf{x}, t)$ zu:

$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho} \tilde{f})}_{\substack{\text{zeitliche} \\ \text{Änderung} \\ \text{von } f}} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_i}(\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{f})}_{\substack{\text{konvektive} \\ \text{Änderung von } f \\ \text{im phys. Raum}}} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial \psi_k}(\bar{\rho} S_k \tilde{f})}_{\substack{\text{chemische} \\ \text{Änderung von } f \\ \text{im Zustandsraum}}} = - \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_i}[\bar{\rho} \langle u_i'' | \psi \rangle \tilde{f}]}_{\substack{\text{konvektive Änderung von} \\ f \text{ durch Geschwindigkeits-} \\ \text{fluktuationen im phys.} \\ \text{Raum; Modellierung nötig}}} \quad (12.41)$$

$$+ \underbrace{\frac{\partial}{\partial \psi_k} \left[\bar{\rho} \left\langle \frac{1}{\rho} \frac{\partial J_{i,k}}{\partial x_i} \middle| \psi \right\rangle \tilde{f} \right]}_{\substack{\text{turbulente Mischung im} \\ \text{Zustandsraum;} \\ \text{Modellierung nötig}}}.$$

Die obige Gleichung beschreibt die zeitliche Entwicklung der deterministischen Wahrscheinlichkeitsfunktion f im σ -dimensionalen Zustandsraum der durch die unabhängigen Variablen Ψ aufgespannt wird. Man erkennt, dass sich die Form der PDF durch konvektive Prozesse im physikalischen Raum und durch chemische sowie Mischungsprozesse im Zustandsraum ergibt. Der entscheidende Vorteil dieser Formulierung gegenüber den gemittelten Navier-Stokes-Gleichungen besteht in der geschlossenen Darstellung des chemischen Quellterms als Transport im Zustandsraum. Bei alleiniger Einwirkung des chemischen Quellterms würde die PDF zu einem Delta-Peak am Gleichgewichtspunkt im Zustandsraum relaxieren.

Terme der Form $\langle \dots | \Psi \rangle$ bezeichnen bedingte Erwartungswerte all jener Realisierungen bei denen die Zufallswerte Φ bestimmte Werte Ψ im Zustandsraum annehmen. Diese Korrelationen können mit den Informationen

der Ein-Punkt-PDF nicht bestimmt werden. Beispielsweise benötigt man zur Schließung des turbulenten Mischungsterms gleichzeitig zwei Punkte in der Strömung, um den Gradienten von J zu schließen. Die Herleitung einer Zwei-Punkt-PDF schließt zwar den turbulenten Mischungsterm, allerdings zu einem nicht vertretbaren Rechenaufwand mit neuen unbekanntem Korrelationen. Auch die Aufnahme der Gradienten als Zufallsvariablen in die PDF führt zu neuen, physikalisch schwer deutbaren Ausdrücken. Deswegen enthält eine Ein-Punkt-PDF keine Informationen über Zeit- und Längenskalen von Fluktuationen. Die dadurch verlorengangenen statistischen Informationen führen zu ungeschlossenen Termen (z.B. turbulente Mischung), die wieder modelliert werden müssen.

Anstatt nur die Skalare als unabhängige Variablen in die Beschreibung aufzunehmen, kann man zusätzlich noch die Geschwindigkeiten und die turbulente Zeitskala mit aufnehmen. Dies erhöht zwar den Rechenaufwand, aber die Berechnung kann damit unabhängig von CFD-Programmen durchgeführt werden (stand alone PDF). Die oben dargestellte Gleichung bildet die Grundlage für die PDF-Methoden.

12.4.4 Mischungsmodellierung

Der bedeutendste ungeschlossene Term in den PDF-Modellen ist die turbulente Mischung (vgl. 12.41). Dieser Term resultiert aus dem molekularem Mischungsterm der momentanen Teilchenerhaltungsgleichung (vgl. 12.39), aus dem die PDF-Transportgleichung hergeleitet ist. Die molekulare Mischung beschreibt Ausgleichsprozesse in Abhängigkeit der räumlichen Konzentrationsgradienten. Allerdings kann die Ein-Punkt-PDF die erforderlichen räumlichen Informationen nicht liefern. Die sogenannte turbulente Mischung lässt sich in Abhängigkeit des bedingten Erwartungswerts vom Diffusionsfluss J wie folgt darstellen:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{f}) = \frac{\partial}{\partial \psi_k} \left[\bar{\rho} \left\langle \frac{1}{\rho} \frac{\partial J_{i,k}}{\partial x_i} \middle| \psi \right\rangle \tilde{f} \right] \quad (12.42)$$

$$J_i^\alpha = -D\rho \frac{\partial \varphi_\alpha}{\partial x_i}.$$

Die rechte Seite von Gl. (12.42) beschreibt den Transport im skalaren Raum, wobei die Varianzen und Kovarianzen reduziert werden. Diesen Prozess beschreibt man in Analogie zum physikalischen Raum als turbulente Mischung. Theoretisch ließen sich die räumlichen Gradienten als unabhängige Variablen in die PDF-Beschreibung mit aufnehmen und damit der Mischungsterm schließen. Allerdings müssten im dreidimensionalen

$3 \cdot N_{\text{Spezies}}$ unabhängige Variablen zusätzlich betrachtet werden. Zudem entstehen wieder neue ungeschlossene Ausdrücke die ebenfalls modelliert werden müssten, so dass es derzeit abwegig erscheint, die Gradienten mit in die PDF-Formulierung aufzunehmen.

Da die Mischung entscheidend die chemischen Umsatzraten mitbestimmt, kommt der Modellierung dieses Terms eine enorme Bedeutung zu. Es existieren eine Vielzahl von Ansätzen und Mischungsmodellen, allerdings gibt es bis heute noch kein physikalisch validiertes Modell für reaktive Strömungen.

Die Herleitung aller Modelle basiert grundsätzlich auf zwei Annahmen: Dies ist zum einen, dass der Mittelwert eines passiven Skalars in homogener Turbulenz infolge turbulenter Mischung erhalten bleibt:

$$\frac{d\langle\varphi\rangle}{dt} = 0 \quad (12.43)$$

und zum anderen, dass die Varianz der skalaren Fluktuationen gemäß

$$\frac{d\langle\varphi'^2\rangle}{dt} = -2\varepsilon_\varphi, \quad \varepsilon_\varphi = D \left\langle \frac{\partial\varphi'}{\partial x_i} \frac{\partial\varphi'}{\partial x_i} \right\rangle \quad (12.44)$$

abnimmt. In Analogie zum dissipativen Abbau der turbulenten Geschwindigkeitsschwankungen wird der Abbau der Skalarfluktuationen als Kaskadenprozess mit einer skalaren Mischungszeit:

$$\tau_\varphi \equiv \frac{1/2\langle\varphi'^2\rangle}{\varepsilon_\varphi} \quad (12.45)$$

definiert. Somit folgt für den Abbau der Skalarvarianz:

$$\frac{d\langle\varphi'^2\rangle}{dt} = -\frac{\langle\varphi'^2\rangle}{\tau_\varphi}. \quad (12.46)$$

Eine einfache Annahme führt zur Schließung der Gl. (12.46)

$$\tau_\varphi = \frac{\tau}{C_\varphi}, \quad \tau = \frac{k}{\varepsilon}. \quad (12.47)$$

Die angenommene Proportionalität zwischen der Geschwindigkeits- und Skalarzeitskala über die Konstante C_φ stellt einen Schwachpunkt vieler existierender Mischungsmodelle dar. Experimentelle Messungen in inerten

Gitterturbulenz ergaben Werte von C_φ zwischen 0,6 bis 3,1 (Warhaft 1980). Neben der direkten Lösung einer Transportgleichung für ε_φ verspricht auch die Verwendung eines Zeitspektrums von turbulenten Zeitskalen eine verbesserte Darstellung der zeitlichen Strömungsstruktur. Im folgenden sollen kurz drei klassische Mischungsmodelle vorgestellt werden.

IEM-Modell

Bei diesem von Dopazo vorgeschlagenen Modell wird die turbulente Mischung als Bewegung der Partikel zu ihrem Erwartungswert im Zustandsraum modelliert. Somit folgt für Gl. (12.24):

$$\frac{\partial \tilde{f}}{\partial t} \cong -\frac{1}{2} \frac{C_\varphi}{\tau} \frac{\partial}{\partial \psi} (\psi - \langle \varphi \rangle) \tilde{f}. \quad (12.48)$$

Für die Bewegungsgleichung der stochastischen Partikel ergibt sich:

$$\varphi^P(t + \Delta t) = \langle \varphi \rangle + (\varphi^P(t) - \langle \varphi \rangle) \cdot \exp\left(-\frac{\Delta t}{2\tau_\varphi}\right). \quad (12.49)$$

Wegen seiner Einfachheit wird dieses Modell oft verwendet. Die in inerter Strömung nachgewiesene Relaxation beliebiger Anfangszustände zu einer Gaußverteilung kann dieses Modell nicht wiedergeben. Ein weiterer Schwachpunkt ist die Verletzung der Lokalitätsbedingung. Dies bedeutet, dass Diffusionsprozesse räumlich lokal ablaufen müssen. Auf den Zustandsraum übertragen folgt somit eine Partikelwechselwirkung nur mit den Nachbarpartikeln. Beim IEM-Modell hingegen bewegen sich alle Partikel deterministisch auf ihren Mittelwert zu und können sich dadurch über die Reaktionszone hinweg mischen ohne zu reagieren.

Curl-Modell (Curl 1963)

Das Curl-Modell (Curl 1963) ist ein stochastisches Partikel-Interaktionsmodell (ursprünglich für die Interaktion von Flüssigkeitstropfen gedacht), bei dem sich entsprechend der Wahrscheinlichkeit $P = \Delta t \cdot N_{part} / \tau$ ein Partikelpaar zu:

$$\varphi^p(t + \Delta t) = \varphi^q(t + \Delta t) = 1/2 \cdot (\varphi^p + \varphi^q) \quad (12.50)$$

mischt. Alle übrigen Partikelpaare bleiben in ihrem ursprünglichen Zustand. Für dieses Mischungsmodell gelten die gleichen Kritikpunkte, die schon beim IEM-Modell angeführt wurden. Die im Gegensatz zum IEM-

Modell diskontinuierliche Zustandsänderung wurde im modifizierten Curl-Modell (Janicka et al. 1977) über eine Zufallsvariable ausgeglichen, wodurch sich die Partikel nicht auf ihren gemeinsamen Mittelwert mischen sondern sich auf eine zufällige Schrittweite annähern.

EMST-Modell (Subramaniam u. Pope 1998)

Im Gegensatz zu den vorherig vorgestellten Modellen berücksichtigt das Euclidian Minimum Spanning Tree Modell (EMST) die Lokalität im Zustandsraum. Dieses numerisch sehr aufwendige stochastische Partikel-Interaktionsmodell bildet entsprechend der Mischungshistorie jedes einzelnen Partikels eine Untermenge der zu mischenden Partikel in einer Zelle. Danach wird für diese Untermenge entsprechend einer Minimierung der Euklidischen Norm ein „Partikelbaum“ im Zustandsraum geformt, so dass jeder Partikel mindestens mit einem Nachbarpartikel verbunden ist. Die Mischung dieser Partikel erfolgt dann nach:

$$m^P \frac{d\varphi^P}{dt} = -\gamma \sum_{v=1}^{N_{part}-1} B_v [(\varphi^P - \varphi^{n_v})\delta_{Pn_v} + (\varphi^P - \varphi^{m_v})\delta_{Pm_v}], \quad (12.51)$$

wobei m_P das numerische Partikelgewicht, B_v ein Modellkoeffizient und γ zum Abbau der Varianz nach Gl. (12.46) führt.

Dieses Modell kann ebenfalls die Relaxation beliebiger Anfangszustände zu einer Gaußverteilung nicht wiedergeben.

Ein vollständig physikalisch validiertes Mischungsmodell ist bis heute noch nicht verfügbar. Jedoch versprechen die zunehmenden DNS-Simulationen neue Erkenntnisse über Mischungsprozesse, die dann in geeigneter Weise in Mischungsmodelle implementiert werden können.

12.4.5 Monte-Carlo-Lösungsverfahren

Treten z.B. in den Navier-Stokes-Gleichungen mit Raum und Zeit vier unabhängige Variablen (x, y, z, t) auf, so sind bei der PDF noch zusätzlich alle Skalare, wie die Zusammensetzung und Temperatur (c_i, T) unabhängig. Man bezeichnet die PDF deshalb auch als hochdimensionale Funktion, die mit gewöhnlichen Methoden zur Lösung partieller DGL's nicht lösbar ist. Bei Finite-Volumen-Methoden steigt der Rechenaufwand exponentiell mit der Zahl der unabhängigen Variablen, bei Monte-Carlo-Methoden hingegen nur linear.

Obwohl schon früh mit Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen in der turbulenten Verbrennung gearbeitet wurde (Janicka et al. 1977), schlug Pope erst 1981 ein Monte-Carlo-Verfahren zur Lösung der Transportgleichung

vor. Hierbei wird die PDF in jeder Zelle durch ein Ensemble von N stochastischen Partikeln präsentiert. Um den stochastischen Fehler möglichst gering zu halten, muss eine möglichst hohe Anzahl von Partikeln verwendet werden ($f_N \xrightarrow{N \rightarrow \infty} f$). Man versucht nun die stochastischen Partikel entsprechend den Transportprozessen (Gl. (12.41)) zu manipulieren. Natürlich verhalten sich stochastische Partikel nicht wie reale Fluidpartikel. Entscheidend ist der Zusammenhang zwischen den Navier-Stokes-Gleichungen (NSG) und der daraus abgeleiteten PDF: Die Dynamik des Geschwindigkeits- bzw. des Zusammensetzungsfeldes in den NSG wird durch die entsprechenden Zufallsvariablen bestimmt. Die PDF-Gleichung hingegen enthält bedingte Erwartungswerte. Dies bedeutet, dass unterschiedliche Zufallsvariablen (Fluidteilchen versus stochastische Partikel) die gleichen mathematischen Erwartungswerte besitzen können. Somit kann die PDF durch verschiedene stochastische Systeme beschrieben werden.

Wichtig für das Lösen der PDF-Transportgleichung ist der Umstand, dass unterschiedliche stochastische Prozesse die gleiche Verteilungsfunktion besitzen können. Deshalb entwickelt man ein leicht zu berechnendes stochastisches System, das die gleiche PDF besitzt wie die PDF der Fluidteilchen.

Um die einzelnen physikalischen Prozesse behandeln zu können, wird die PDF nach zeitlicher Diskretisierung zunächst faktorisiert:

$$\tilde{f}(t + \Delta t) = (I + \Delta t K)(I + \Delta t M)(I + \Delta t R)\tilde{f}(t) + O(\Delta t). \quad (12.52)$$

Abbildung 12.10 skizziert die „Partikelmanipulation“ in den unterschiedlichen Prozessen vom Zeitpunkt t_0 zum Zeitpunkt $t_0 + \Delta t$. Der Ausgangszustand der PDF stellt sich als Delta-Funktion mit Wahrscheinlichkeit Eins z.B. für den Massenbruch $Y_F = 1$ dar. Danach verändert sich die Form der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (bzw. der stochastischen Partikel) entsprechend der Konvektion, der Mischung und der chemischen Reaktion.

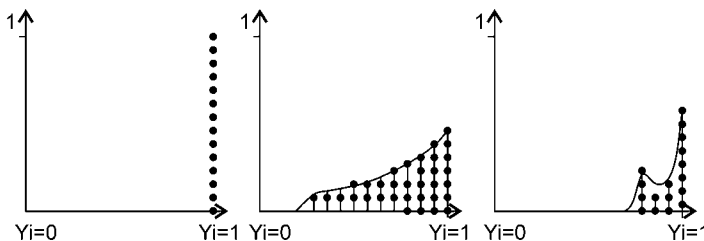


Abb. 12.10 PDF-Darstellung durch stochastische Partikel in den Teilschritten Konvektion, Mischung und Reaktion am Beispiel vom Massenbruch Y_F

Die einzelnen Prozesse werden dann entweder exakt oder bei ungeschlossenen Ausdrücken durch stochastische Ersatzsysteme beschrieben. So lautet z.B. der Teilprozess R für die chemische Reaktion mit dem stochastischen Partikel φ^* :

$$\frac{d\varphi^*}{dt} = r_\alpha(\varphi^*). \quad (12.53)$$

Die Lösung obiger Gleichung $\varphi(t) = \varphi(\varphi_0, t)$ ist abhängig vom Anfangswert φ_0 . Zu jedem Zeitpunkt kann die Zusammensetzung als Punkt im Zustandsraum dargestellt werden (Abb. 12.11). Die Reaktionstrajektorie relativ zeitlich gesehen auf ihren Gleichgewichtswert im Zustandsraum. Der chemische Quellterm ist also die Geschwindigkeit der einzelnen Zustandspunkte mit dem dazu tangentialen Reaktionspfad.

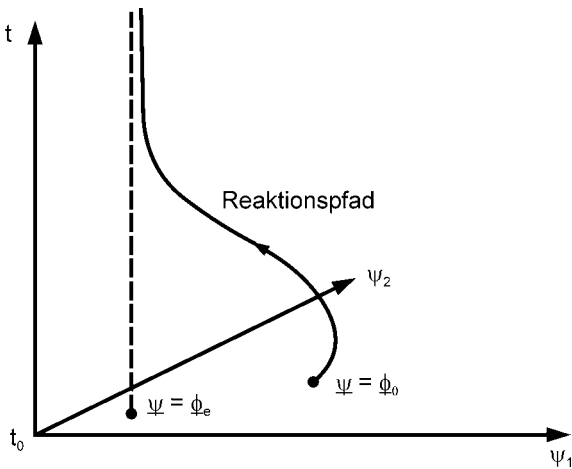


Abb. 12.11 Reaktionspfad im Zustandsraum zum Gleichgewichtswert (Pope 1986)

12.4.6 Kopplung mit CFD-Programmen

Je weniger Zustandsgrößen in die PDF-Formulierung aufgenommen werden, desto mehr Informationen müssen aus herkömmlichen CFD-Codes bereitgestellt werden. Bei der reinen skalaren PDF (Gl. (12.41)) fehlen demnach Informationen über das Strömungs- und Turbulenzfeld. Bei alternativen PDF-Formulierungen ist das Geschwindigkeitsfeld und die turbulente Zeitskala mit aufgenommen, so dass diese nicht extern bereitgestellt werden müssen.

Da die Dichte sensitiv von der Chemie-Turbulenz-Interaktion abhängt, ist eine iterative Rückkopplung beider Teilprogramme erforderlich. Der programmtechnische Ablauf kann vereinfacht wie folgt beschrieben werden: Das Finite-Volumen-Programme errechnet ein Strömungs- und Turbulenz-Feld, welches an den PDF-Code übergeben wird. Hier werden nacheinander die Teilprozesse Konvektion, Mischung und Chemie durchlaufen. Da die Integration des chemischen Quellterms (Gl. (12.41)) fast 80 % der CPU benötigt, werden die Quellterme meist tabelliert und es erfolgt nur ein einziger Tabellenaufruf. Die Tabellen können z.B. mit der ILDM Reduktionsmethode erzeugt werden. Danach wird aus der PDF die mittlere Dichte an das CFD-Programm übergeben und dieses errechnet hieraus wieder ein neues Geschwindigkeits- und Turbulenzfeld. Die Prozedur wird so lange wiederholt bis sich eine stationäre Endlösung einstellt. Abb. 12.12 zeigt die Kopplungsstrategie mit ILDM reduzierter Chemie.

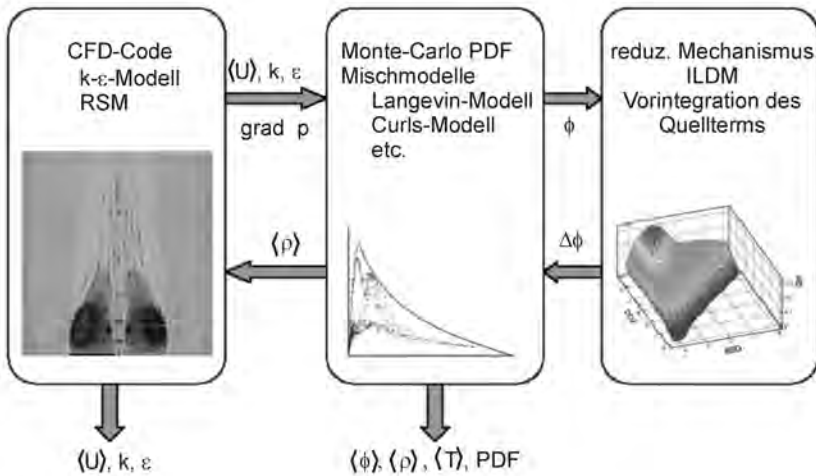


Abb. 12.12 Kopplungsschema von CFD-Code und PDF-Code (Nau et al. 1997)

Zum Abschluss zeigt Abb. 12.13 eine PDF-Simulation einer nicht-vorgemischten Strahlflamme. Dem gegenübergestellt ist die gleiche Flammenkonfiguration berechnet mit einem Eddy-Dissipationsmodell und experimentellen Ergebnissen. Deutlich erkennbar ist die gute Übereinstimmung der Temperaturfelder von PDF-Rechnung und Experiment.

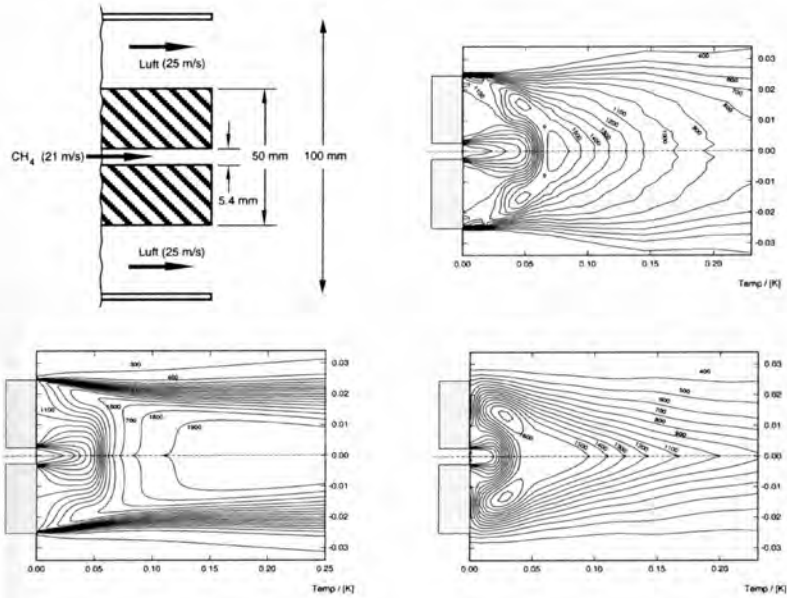


Abb. 12.13 Simulation einer nicht vorgemischten CH_4 -Luft Strahlflamme (Nau et al. 1997); (oben links) Konfiguration; (oben rechts) gemessene Temperaturprofile, $T_{\max} \approx 1.600$ K (Perrin et al. 1995); (unten links) „Eddy-Dissipation“-Modell, $T_{\max} \approx 1.900$ K; (unten rechts) kombiniertes PDF/Turbulenzmodell-Verfahren, $T_{\max} \approx 1.600$ K

12.5 Das Conditional Moment Closure Modell

Dieses von (Bilger 2001) entwickelte Modell vereinfacht die Speziestransportgleichung, indem diese nicht für den Erwartungswert der Spezies, sondern für den auf den Mischungsbruch konditionierten (bedingten) Erwartungswert abgeleitet wird.

Mathematisch folgt der bedingte Erwartungswert aus der Summe (Integral) des Produkts der bedingten Wahrscheinlichkeit und den Zufallsvariablen. Eine konditionierte oder bedingte Wahrscheinlichkeit des Ereignisses A unter der Bedingung B ist gleich dem Quotienten aus der Wahrscheinlichkeit des Produktes AB und der Wahrscheinlichkeit der Ereignisse B :

$$f(A|B) = \frac{f(AB)}{f(B)}. \quad (12.54)$$

Somit teilt man einen Skalar in den konditionierten Mittelwert und seiner Schwankung wie folgt auf:

$$\begin{aligned} \varphi_K(x, t) &= Q_K(\eta, x, t) + \varphi'_K \\ Q_K(\eta, x, t) &= \langle \varphi_K(x, t) | Z(x, t) = \eta \rangle. \end{aligned} \quad (12.55)$$

Für den bedingten Mittelwert Q_K werden dann die Speziestransportgleichungen abgeleitet. Diese Gleichung enthält fünf ungeschlossene Terme, die wiederum modelliert werden müssen. Beispielsweise folgt der chemische Umsatz zu:

$$\langle r_K | \eta \rangle = r_K(Q), \quad (12.56)$$

d.h. die Fluktuationen um den konditionalen Mittelwert werden vernachlässigt. Nicht zu verwechseln ist diese Annahme mit dem Ansatz:

$$\langle r_K(\varphi) \rangle = r_K(\langle \varphi \rangle), \quad (12.57)$$

der die unkonditionierten Schwankungen vernachlässigt („laminare Chemie“).

Vergleiche des CMC-Modells mit DNS-Berechnungen ergaben gute Übereinstimmungen. Allerdings verschlechtern sich die Ergebnisse mit zunehmender Entfernung vom Gleichgewicht.

12.6 Das Flame Surface Density Modell

Ausgehend von der Mischungsbruchgleichung (12.18) kann man eine Gleichung für die Flammenoberflächendichte Σ_Z ableiten (Veynante et al. 2003), d.h. für die Flammenoberfläche pro Volumen. Die mittlere Umsatzrate ergibt sich dann aus dem Produkt der Flammenoberflächendichte und der laminaren Reaktionsrate pro Flammenoberflächendichte V_n . Diese ist eine konstante Eigenschaft der lokalen Flammstruktur und kann für eine Ein-Schritt-Reaktion analytisch bzw. bei komplexer Chemie aus laminaren Flamelets berechnet werden. Sie ergibt sich aus dem Integral des momentanen Umsatzes entlang einer Koordinate senkrecht zur Flammenoberfläche.

Die mittleren Reaktionsraten in einer turbulenten Strömung setzen sich nun aus der Reaktionsrate pro Flammenoberflächendichte einer laminaren

Flamme V_n und der mittleren turbulenten Flammenoberflächendichte zusammen:

$$r_n = \bar{\rho} V_n \overline{\sum_n} . \quad (12.58)$$

Während einer CFD-Simulation werden dann die Reaktionsraten pro Flammenoberflächendichte aus einer Bibliothek laminarer Gegenstromflammen (1D) bereitgestellt. Zusammenfassend lässt sich sagen, dass das Problem der turbulenten Verbrennung auf die dynamische Oberflächenstruktur der Flammfront zurückgeführt wird und somit die aufwendige Berechnung der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion entfällt. Allerdings treten bei der Lösung der Transportgleichung für die Flammenoberflächendichte wiederum ungeschlossene Terme auf, die modelliert werden müssen.

12.7 Modellvergleich mit experimentellen Daten

Für einfache, stabile Flammen liefert das EDM schon gute Werte für die Temperaturverteilung. Bei hochturbulenten Flammen hingegen, bei denen durch Streckung einzelne Gebiete löschen, werden selbst für die Berechnung des Temperaturfeldes komplexere Modelle benötigt. Im folgenden sollen zwei vermessene Flammen sowohl mit dem EDM als auch mit einem PDF-Ansatz berechnet und verglichen werden.

12.7.1 Beschreibung der Sandia-Flamme

Am Institut für Verbrennungstechnik des DLR in Stuttgart, an der Universität Darmstadt und am SANDIA Forschungszentrum wurde ein Satz vorgemischter Freistrahldiffusionsflammen mit steigender Reynoldszahl definiert (Flamme C bis Flamme F, Sandia National Laboratories 2003) und untersucht. Für jede Flamme liegen Messergebnisse zu Temperatur und Massenbrüchen der verschiedenen Spezies in unterschiedlichen Höhen und verschiedenen radialen Positionen vor. Dabei nimmt die Jetgeschwindigkeit von Flamme C bis F zu, wodurch sich die Flamme F nahe der Verlöschgrenze befindet.

Abb. 12.14a) stellt die Abmaße des Brenners sowie die Temperaturen am Eintritt dar, wogegen Abb. 12.14b) eine Laboraufnahme der Flamme D zeigt.

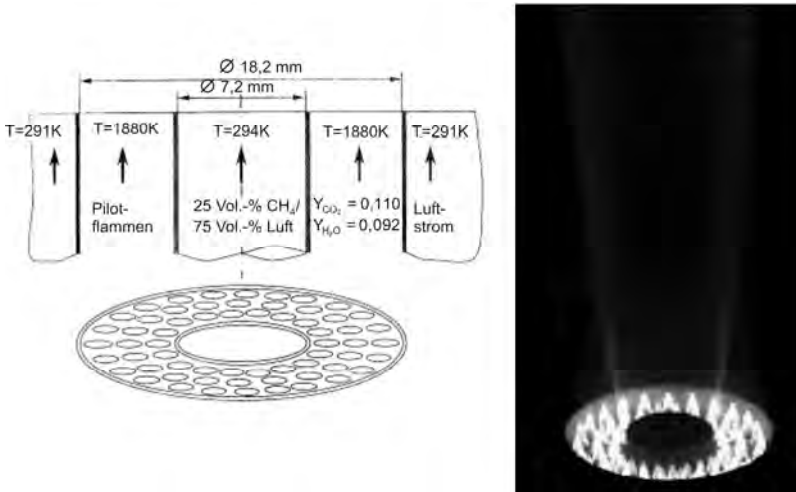


Abb. 12.14 a) Geometrische Daten und Einlassbedingungen des Sandia-Brenners; b) Fotoaufnahmen der Sandia-Flamme *D* (Barlow u. Frank 2003)

Die Tabellen 12.1 und 12.2 enthält die Randbedingungen von Flamme C und *F*.

Tabelle 12.1 Anströmgeschwindigkeiten für Jet-, Pilot- und Coflowströmung

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

Tabelle 12.2 Experimentelle Randbedingungen für Flamme C und F

	$T [K]$	λ	$\chi_i [vol \ %]$
Jet	294	0.315	25% CH ₄ , 75% Luft
Pilot	1880	1.29	vgl. (Barlow u. Frank 2003)
Coflow	291	0	100% Luft

Anmerkung: Bei der untersuchten Flamme handelt es sich im eigentlichen Sinne um eine partiell vorgemischte Flamme, die aber wie eine Diffusionsflamme mit einer Reaktionszone nahe dem stöchiometrischen Mischungsbruch brennt. Die Zumischung von Luft im Einlass reduziert die Flammenlänge und stabilisiert die Flamme.

12.7.2 Ergebnisse

Um einen ersten Eindruck von der berechneten Flamme zu erhalten, zeigt Abb. 12.15 den axialen Temperaturverlauf der Flamme F (PDF-Modell mit ILDM Chemie)

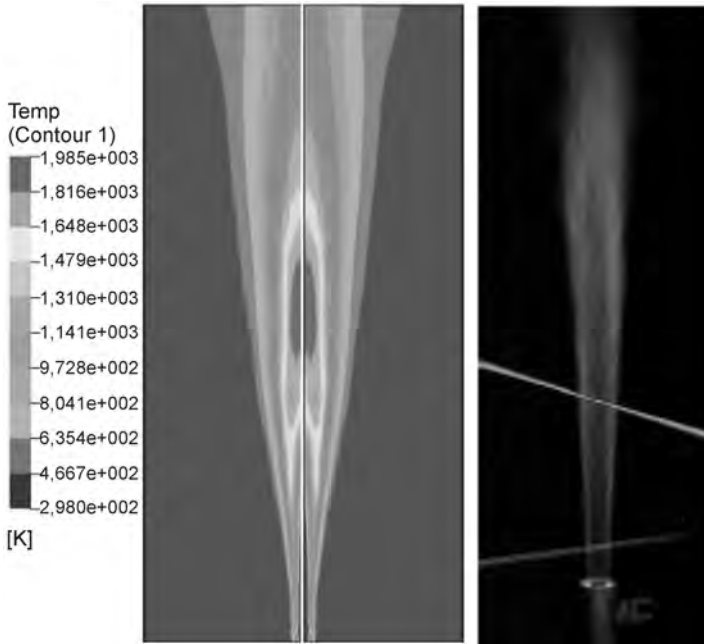


Abb. 12.15 Berechnete Temperaturverteilung der Flamme F mit PDF u. ILDM im Vergleich zur Visualisierung (Barlow u. Frank 2003)

Die folgenden Abbildungen (Abb.12.16) zeigen radiale Verläufe von Temperatur und Massenbruch Y_{CO_2} der Rechnungen mit dem EDM-, dem Flamelet- und dem PDF-Modell im Vergleich mit Messungen in der Ebene $x/D = 15$. Als Chemiemechanismus wurde beim EDM ein 2-Schritt-Mechanismus mit CO -Kinetik und beim PDF-Modell tabellierte ILDM-Chemie verwendet. Das Flamelet-Modell bestimmt den chemischen Umsatz in Abhängigkeit von Mischungsbruch, seiner Varianz und der skalaren Dissipationsrate aus zuvor berechneten laminaren Flammen und koppelt über eine presumed-PDF (β -PDF) zum turbulenten Strömungsfeld.

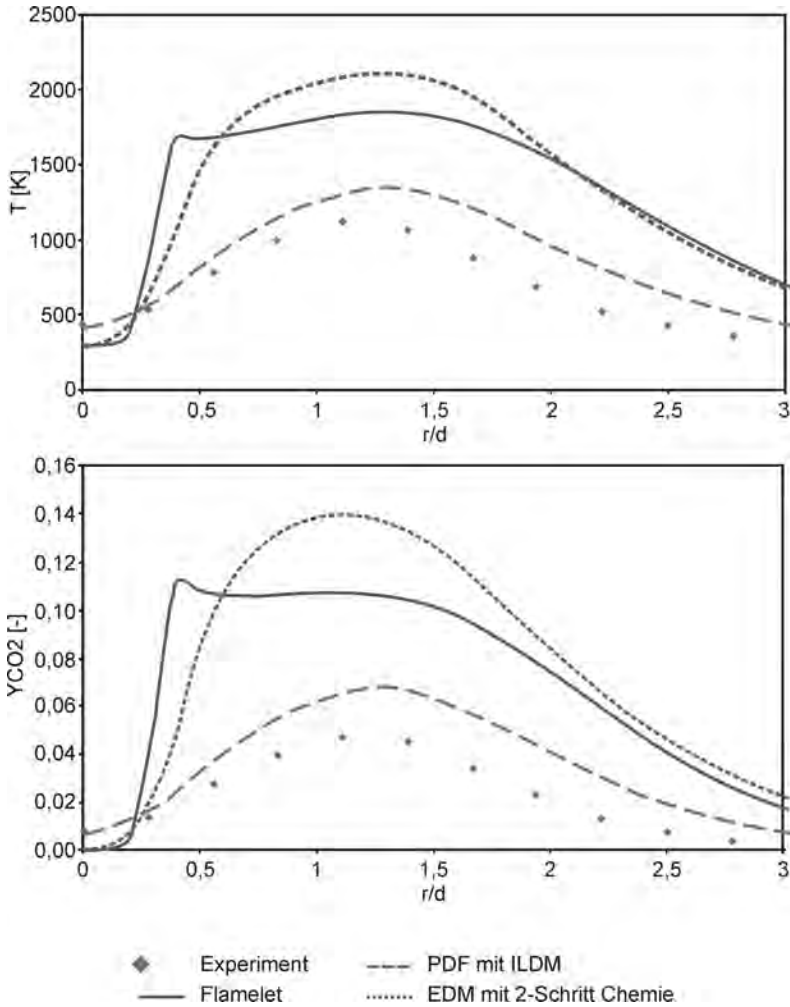


Abb. 12.16 Berechnete und gemessene radiale Verläufe von Y_{CO_2} und der Temperatur der Sandia-Flamme F

Das einfache EDM-Modell ist nicht in der Lage das Flammenlöschens wiederzugeben und geht von einem fast vollständigen Umsatz aus. Die Temperatur wird dabei um ca. 1.000 K überschätzt. Auch das Flamelet-Modell überschätzt die Temperaturen deutlich. Dies bedeutet, dass man sich bei der Flamme F mit ihren hohen Streckungsraten nicht mehr im klassischen Flamelet-Bereich befindet und somit auch die Gültigkeitsvoraussetzungen des Flamelet-Modells verletzt werden.

Das PDF-Modell ist in der Lage das Flammenlöschens qualitativ wiederzugeben. Durch das Lösen einer Transportgleichung für die Wahrschein-

lichkeitsdichtefunktion kann der mittlere chemische Quellterm geschlossen gelöst werden. Somit wird die Interaktion mit dem turbulenten Strömungsfeld richtig wiedergeben. Dennoch treten beim PDF-Modell Abweichungen auf, die u.a. in der Mischungsmodellierung begründet sind.

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass das EDM-Modell die größten Schwächen zeigt. Das Flamelet-Modell kann das Flammenlöchen ebenfalls nur unzureichend wiedergeben. Allerdings sind beide Modelle sehr robust (industrielle Anwendung) und besitzen geringe Rechenzeiten. Das rechenintensive PDF-Modell kann die physikalischen Phänomene der Flamme F wiedergeben.

Um in Zukunft erfolgreich turbulente Flammen beschreiben zu können (mit vertretbarem Rechenaufwand), muss zum einen die Turbulenzbeschreibung (k - ε , RSM) und zum anderen die Mischungsbeschreibung im PDF-Modell erheblich verbessert werden. Die Chemiebeschreibung mit reduzierten Mechanismen (z.B. ILDM) ist erfolgreich an laminaren Flammen angewandt worden, und kann somit kaum als Grund für Abweichungen bei der Beschreibung turbulenter Flammen angesehen werden.

12.8 Überblick über die vorgestellten Modelle

Die besprochenen Verbrennungsmodelle sind im Folgenden vom einfachsten bis zum komplexesten mit den charakteristischen Vor- und Nachteilen zusammengestellt.

Chemie –Turbulenz-Interaktion nicht berücksichtigende Modelle

- EDM
 - Mischungs-kontrolliert,
 - $Da \gg 1$,
 - Anwendungsbereich: turbulent, nicht vorgemischt, vorgemischt
 - Wenn $t_C \ll t_{turb}$ dann gilt: $t_{turb} \sim \varepsilon/k$
 - Quellterm errechnet sich aus dem Prinzip „gemischt gleich verbrannt“, daher:
 - meist zu hoher Brennstoffverbrauch,
 - Temperaturen lokal zu hoch,
 - Nichtgleichgewichtseffekte bleiben unberücksichtigt.
- Linearisiertes FRCM
 - Chemie-kontrolliert,
 - $Da \approx 1$,
 - Anwendungsbereich laminar-turbulent, nicht vorgemischt
 - Quellterm über Arrhenius-Ansatz modelliert,

- nur Mittelwerte der Temperatur im Arrheniusterm, deshalb:
 - turbulente Schwankungen nicht berücksichtigt; Temperatur lokal zu niedrig,
 - Nichtgleichgewichtseffekte werden berücksichtigt.
- FRCM/EDM
 - wählt lokal zwischen Chemie-kontrolliert und Mischungs-kontrolliert,
 - $Da \approx 1$ bis $Da \gg 1$,
 - ganze Zeitskala wird abgebildet,
 - Nichtgleichgewichtseffekte werden bei Wahl des FRCM berücksichtigt,
 - Chemie-Turbulenz-Interaktion nicht abgebildet.

Chemie –Turbulenz-Interaktion berücksichtigende Modelle

- Mischungsbruchmodell mit Gleichgewichts-Chemie und Presumed-PDF,
 - $Da \gg 1$, Mischungs-kontrolliert,
 - Anwendungsbereich: turbulent, nicht vorgemischt
 - n -Speziesgleichungen werden durch eine Mischungsbruchgleichung und eine Varianzgleichung ersetzt,
 - linearer Zusammenhang zwischen Mischungsbruch und Spezies,
 - Chemie-Turbulenz-Interaktion wird durch angenommene PDF abgebildet,
 - robust, geringe Rechenzeit,
 - keine Berechnung von Nebenspezies, Zündvorgänge, Flammenlöschungen oder Ruß
- Flamelet-Modell
 - $Da \gg 1$, sehr schnelle Reaktion in den Flamelets,
 - Anwendungsbereich: turbulent, nicht vorgemischt
 - Entkoppelt schnelle Chemie und turbulente Strömung,
 - Separate Berechnung der Chemie in laminaren, eindimensionalen Flamelets; werden in sogenannten Flameletbibliotheken vorab berechnet,
 - Nichtgleichgewichtseffekte durch Dissipationsgeschwindigkeit bzw. Streckungsrate berücksichtigt,
 - Chemie-Turbulenz-Interaktion durch angenommene PDF abgebildet,
 - sehr robust, geringe Rechenzeiten
 - Anwendung überall wo Flamelet-Voraussetzung erfüllt, z.B. motorischer Verbrennung

- Flame Surface Density
 - $Da \gg 1$, sehr schnelle Reaktion in den Flamelets
 - Anwendungsbereich: turbulent, nicht vorgemischt, vorgemischt
 - Entkoppelt schnelle Chemie und turbulente Strömung,
 - Separate Berechnung der chemischen Umsatzrate pro Flammenvolumen in laminaren, eindimensionalen Flamelets; werden in sogenannten Flameletbibliotheken vorab berechnet,
 - Nichtgleichgewichtseffekte durch Dissipationsgeschwindigkeit bzw. Streckungsrate berücksichtigt,
 - Chemie-Turbulenz-Interaktion durch Lösung einer Transportgleichung für die Flammenoberflächendichte abgebildet,
 - Schließungsmodelle für Fortschrittsvariable (Flammengeschwindigkeit bei vorgemischter Verbrennung)
 - Anwendung überall wo Flamelet-Voraussetzung erfüllt, z.B. motorischer Verbrennung
- Conditional Moment Closure (CMC)
 - $Da \gg 1$,
 - Anwendungsbereich: turbulent, nicht vorgemischt, vorgemischt
 - Lösung einer Transportgleichung für die auf den Mischungsbruch konditionierten Speziengleichungen,
 - Schließungsmodelle und Turbulenzinteraktion über presumed-PDF,
 - Gute Übereinstimmung mit DNS-Berechnungen
- Wahrscheinlichkeitsdichte-Modelle (PDF)
 - allgemeingültig,
 - Anwendungsbereich: turbulent, nicht vorgemischt und vorgemischt
 - Chemie-Turbulenz-Interaktion durch Lösung einer PDF-Transportgleichung berücksichtigt,
 - chemischer Quellterm geschlossen darstellbar, Modellierung der turbulenten Mischung,
 - Nichtgleichgewichtseffekte werden durch die Güte der Chemiebeschreibung bestimmt, z.B. ILDM, Mehrschritt-Chemie,
 - Lösung der hochdimensionalen Funktion durch ein Monte-Carlo-Verfahren
 - hoher Rechenaufwand

Literatur

Barlow R., Frank J. (2003) Piloted CH_4 /Air Flames C,D,E, and F – Release 2.0, 20.01.2003, Sandia National Laboratories

- Behrendt F., Bockhorn H., Rogg B., Warnatz, J. (1987) Modelling of turbulent diffusion flames with detailed chemistry, in: Warnatz J., Jäger W. (eds.) Complex chemical reaction systems: Mathematical modelling and simulation, Springer, Heidelberg, p. 376
- Bilger R. W. (1980) Turbulent flows with nonpremixed reactants. In Libby P. A., Williams F. A. (Ed) Turbulent reactive flows. Springer, New York
- Bilger R. W. (2001) Analyse of conditional moment closure for turbulent premixed flames, *Combustion Theory Modelling* 5, S. 241–260
- Buch K. A., Dahm W. J. A. (1996) Fine scale structure of conserved scalar mixing in turbulent flows Part I: $Sc \gg 1$. *J Fluid Mech* 317:21
- Buch K. A., Dahm W. J. A. (1998) Fine scale structure of conserved scalar mixing in turbulent flows Part II: $Sc \gg 1$. *J Fluid Mech* 364:1
- Curl R. L. (1963) Dispersed Phase Mixing: I-Theory and Effects in Simple Reactors. *A.I.Ch.E. Journal*, 9(2):175–181
- Dopazo C. (1975) Probability density function approach for a turbulent axisymmetric heated Jet. Centerline evolution, *Physics of Fluids*, 18(4):397–404
- Gill A., Warnatz J., Gutheil E. (1994) Numerical investigation of the turbulent combustion in a direct-injection stratified-charge engine with emphasis on pollutant formation. *Proc. COMODIA (1994)*, S. 583. JSME, Yokohama
- Janicka J., Kolbe W., Kollmann W. (1978) *Proc. Heat. Transfer Fluid Mech. Inst.* 296–312, Stanford University Press
- Laxander A. (1996) Numerische Simulation von turbulenten Diffusionsflammen mit einem PDF-Transportgleichungsmodell, Diss. Universität Stuttgart 1996
- Liew S. K., Bray K. N. C., Moss J. B. (1984) A stretched laminar flamelet model of turbulent nonpremixed combustion. *Comb Flame* 56:199
- Nau M., Wölfert A., Maas U., Warnatz, J. (1996) Application of a combined pdf/finite-volume scheme on turbulent methane diffusion flames. 8th International Symposium on Transport Phenomena in Combustion, S. 986
- Perrin M., Namazian, N., Kelly J., Schefer R. W. (1995) Effect of confinement and blockage ratio on nonpremixed turbulent bluff-body burner flames. Poster, 23rd Symposium (International) on Combustion, Orleans
- Peters N. (1987) Laminar flamelet concepts in turbulent combustion. *Proc Comb Inst* 21:1231
- Pope S. B. (1986) PDF methods of turbulent reactive flows. *Prog Energy Combust Sci* 11:119
- Radzan M. K., Stevens J. G. (1985) CO/air turbulent diffusion flame: Measurements and modelling. *Comb Flame* 59:289
- Rogg B., Behrendt F., Warnatz J. (1987) Turbulent non-premixed combustion in partially premixed diffusion flamelets with detailed chemistry. *Proc Comb Inst* 21:1533
- Subramaniam S., Pope S. B. (1998) A Mixing Model for Turbulent Reactive Flows based on Euclidian Minimum Spanning Trees. *Combustion and Flame*, Vol. 115, pp.487–514
- Veynante D., Tap F. A., Hilbert R.: (2003) A generalized flame surface density modelling approach for the auto-ignition of a turbulent non-premixed system, *Combustion Theory Modelling* 8 S.165–193

Warhaft Z. (1980) Fluid Mech. 99, 545

Warnatz J., Maas U., Dibble R. W. (2001) Technische Verbrennung, 3. Auflage,
Springer Verlag Berlin Heidelberg New York