

# Zur jüngsten Entwicklung in der Modellierung von turbulenten Verbrennungsprozessen mittels ODT

T. Starick<sup>1\*</sup>, J. A. Medina M.<sup>1</sup>, M. Klein<sup>1</sup>, Z. Jozefik<sup>2</sup> und H. Schmidt<sup>1</sup>

\*Tommy.Starick@b-tu.de

<sup>1</sup> Lehrstuhl Numerische Strömungs- und Gasdynamik, Brandenburgische Technische Universität Cottbus-Senftenberg, Siemens-Halske-Ring 14, 03046 Cottbus, Deutschland

<sup>2</sup> ERC Inc./Air Force Research Lab, Edwards AFB, Ca., USA

## Abstract

Die vorliegende Arbeit befasst sich mit den jüngsten Entwicklungen und Anwendungen des One-Dimensional Turbulence (ODT) Modells auf reaktive Strömungen. Bei ODT handelt es sich um ein stochastisches und abbildungsbasiertes Turbulenzmodell zur Simulation von turbulenten Strömungen. In ODT wird das eindimensionale Rechengebiet als gedachte Linie durch das dreidimensionale Strömungsfeld verstanden, welches in Richtung des mittleren Gradienten einer Geschwindigkeit oder anderer skalarer Felder orientiert ist. Die Besonderheit von ODT liegt in der Modellierung der turbulenten Advektion durch stochastisch auftretende Wirbelereignisse. Die molekulare Diffusion und Reaktionskinetik entlang des ODT-Rechengebietes wird mittels sich zeitlich entwickelnder, deterministischer Erhaltungsgleichungen berücksichtigt und vollständig aufgelöst.

In dieser Arbeit werden vorläufige ODT-Simulationsergebnisse von reaktiven Strömungen für jeweils ein offenes und ein geschlossenes System vorgestellt. Essentielle Vorarbeiten, die die Vermischung eines passiven Skalars in einer planaren Strahldüse untersuchen, werden ebenfalls gezeigt. Beim offenen System handelt es sich um eine Methan/Luft Freistrah-Flamme in einer umgebenden Strömung aus heißen Verbrennungsgasen. Die Simulationsergebnisse werden zu Vergleichszwecken den Messungen von Cabra et al. [3] gegenübergestellt. Beim geschlossenen System wird die Selbstzündung von mageren n-Heptan Gemischen bei niedrigen Temperaturen und komplexer Reaktionskinetik betrachtet. Hierbei werden die ODT-Ergebnisse mit den Resultaten aus einer Direkten Numerischen Simulation (DNS) [21] verglichen. In den durchgeführten Studien konnte gezeigt werden, dass die mittels ODT erzeugten Statistiken eine beachtlich gute Übereinstimmung mit den Vergleichsdaten aufweisen. Im Hinblick auf die reduzierte Dimensionalität von ODT, die Qualität der erzielten Ergebnisse und die erforderliche Rechenleistung, stellt ODT ein attraktives Modell zur Simulation von turbulenten und reaktiven Strömungen dar.

## Einleitung

Turbulente Strömungen sind Phänomene, welche in unserem täglichen Leben ständig in Erscheinung treten, sei es das Wetter, die Umströmung von Fahr- und Flugzeugen, der Blutstrom in der menschlichen Aorta oder eben auch die zugrunde liegenden Strömungen bei einer Vielzahl von Verbrennungsprozessen. Klassische Vertreter hierfür erstrecken sich von der innermotorischen Verbrennung bei Otto-, Diesel- und HCCI-Motoren über Freistrah- und Gegenstromflammen bis hin zu Detonationen und Deflagrationen. Turbulente wie auch laminare Strömungen lassen sich durch die Navier-Stokes-Gleichungen beschreiben, wobei es sich um ein System nichtlinearer, gekoppelter, partieller Differentialgleichungen handelt. Für nur wenige kanonische Einzelfälle können diese strömungsmechanischen Grundgleichungen analytisch gelöst werden, weshalb für die meisten industriellen Problemstellungen eine numerische Lösung erforderlich wird. Hierbei haben sich drei Verfahren etabliert, welche nachfolgend kurz aufgeführt werden [7].

Die Direkte Numerische Simulation (DNS) orientiert sich an der Grundform der instationären Navier-Stokes-Gleichungen und löst diese ohne Modellierungen oder Approximationen auf der gesamten Skalenbandbreite vollständig auf. Aufgrund des immensen Rechenaufwands bei der Auflösung aller Zeit- und Längenskalen ist die DNS auf moderate Reynoldszahlen limitiert und

schließt eine industrielle Anwendung derzeit quasi aus. Der Einsatzbereich ist überwiegend auf fundamentale Problemstellungen in der Strömungsmechanik beschränkt.

Bei der Large Eddy Simulation (LES) liegt der Fokus auf den großen bis mittleren Skalen, welche bei diesem Ansatz aufgelöst werden. Die kleinen Skalen werden wegen der durchgeführten Filterung nur parametrisiert mittels eines Schließungsmodells betrachtet. In Prozessen, bei denen molekulare Vorgänge, also die kleinen Skalen, einen entscheidenden Einfluss auf die globalen Eigenschaften des Prozesses haben, können Modellierungsfehler die Ergebnisse stark beeinflussen.

Weite Verbreitung in der Industrie findet das Reynolds-Averaged Navier-Stokes (RANS) Verfahren, da es die gesamten Navier-Stokes Gleichungen mittelt und Aussagen über mittlere Größen mit einem überschaubaren Rechenaufwand zulässt. Durch die Nichtlinearität der Navier-Stokes Gleichungen entstehen bei der Mittelung Terme, welche, wie bei der LES, modelliert werden müssen. Aufgrund der Tatsache, dass bei RANS nur die integrale Skala aufgelöst wird, ist es in vielen Szenarien nicht zu erwarten alle turbulenten Strömungen ausreichend genau zu beschreiben [7].

Einen interessanten Ansatz zur Lösung des Dilemmas aus Genauigkeit und verfügbarer Rechenleistung stellen Simulationsmethoden dar, welche auf stochastischen Ansätzen basieren. Eindimensionale Vertreter dieser stochastischen Ansätze stellen beispielsweise das Linear-Eddy Modell (LEM) [15], das One-Dimensional Turbulence (ODT) Modell [13] oder das Hierarchical Parcel Swapping (HiPS) Modell [14] dar. Zu den dreidimensionalen Vertretern zählen unter anderem LES-LEM [22], LES-ODT [25] und ODTLES [8,9]. In dieser Arbeit liegt der Fokus ausschließlich auf dem ODT-Modell.

Die vollständige Auflösung der molekularen Diffusion und Reaktionskinetik entlang des eindimensionalen Rechengebietes macht ODT besonders attraktiv für die Simulation von turbulenten Verbrennungsprozessen. In den bisherigen Studien konnte bereits gezeigt werden, dass die mittels ODT erzeugten Statistiken eine beachtlich gute Übereinstimmung mit DNS-Resultaten und Messdaten aufweisen [18,19]. Obwohl die meisten der bereits untersuchten Fälle auf dem Ansatz von niedrigen Mach-Zahlen beruhen, ist auch eine Erweiterung von ODT auf kompressible Strömungen formuliert worden [12]. In Studien zu Gegenstrom-Flammen und Selbstzündungsprozessen konnte bereits nachgewiesen werden, dass ODT in der Lage ist die statistischen Momente aus der DNS für die Temperatur, Wärmefreisetzungsrate und Spezies zu reproduzieren [11,23].

In dieser Arbeit werden zunächst die Fähigkeiten des ODT-Modells bei der Vermischung eines passiven Skalars in einer planaren Strahldüse demonstriert [17]. Dabei kann der Einfluss von diskreten Zeit- und Längenskalen der Turbulenz separat von Reaktionen analysiert werden. Im konkreten Fall werden die ODT-Ergebnisse mit Messungen und RANS-Simulationen von Feng et al. [6] verglichen. Des Weiteren wird jeweils eine Anwendung des ODT-Modells auf reaktive Strömungen in einem offenen und in einem geschlossenen System vorgestellt. Beim geschlossenen System wird die Selbstzündung von n-Heptan bei niedrigen Temperaturen mit komplexer Reaktionskinetik und konstantem Volumen betrachtet, welche beispielsweise in Homogeneous Charge Compression Ignition (HCCI) Motoren Anwendung findet. An dieser Stelle ist ODT nicht nur in der Lage eine zuverlässige Vorhersage des zeitlichen Verlaufs der Hauptströmungsgrößen, wie Druck und Wärmefreisetzungsrate zu liefern, sondern auch Aussagen über komplexe Größen, wie beispielsweise die Dichte-gewichtete Flammenfrontgeschwindigkeit zu treffen. Letztere wird für die Unterteilung von Verbrennungsvorgängen in Deflagration und Detonation eingesetzt. Für HCCI-Motoren sind exakte Vorhersage der Zündverzugszeit und des Druckes besonders wichtig, da es durch das homogene Gemisch zu einer gleichzeitigen Umsetzung kommt.

Beim offenen System wird eine Methan/Luft Freistrah-Flamme in einer umgebenden Strömung aus heißen Verbrennungsgasen von H<sub>2</sub>/Luft Flammen untersucht. Für scherungsdominierte Strömungen, welche sich in Brennerflammen einstellen, kann ODT die genaue Position der Entflammung ermitteln, sowie die Statistiken der Messdaten nachbilden. Zusätzlich können zweidimensionale Visualisierungen der stationären Flamme erzeugt werden.

## **ODT-Modell**

Beim ODT-Modell handelt es sich um einen effizienten Ansatz zur Simulation von turbulenten Strömungen, welcher von A. Kerstein [13] entwickelt wurde. An dieser Stelle wird die ODT-Modellformulierung repräsentativ für offene Systeme, welche unten für die Anwendung auf Freistrah-Flammen eingesetzt wird, gezeigt [19]. Diese nutzt Zylinderkoordinaten und löst die Strömung entlang

der Radialkoordinate und der Zeit auf. Die ODT-Modellformulierung für geschlossene Systeme, welche einen veränderlichen Druck berücksichtigt, ist in der Veröffentlichung von Medina et al. [23] zu finden. Der einfachere Fall eines passiven Skalars in einer planaren Geometrie ist in der Arbeit von Klein et al. [17] dargestellt.

Eine charakteristische Eigenschaft des ODT Modells ist die Auflösung aller Zeit- und Längenskalen entlang einer fiktiven Linie durch das dreidimensionale, turbulente Strömungsfeld. Dieses 1D-Rechengebiet ist in Richtung des mittleren Gradienten einer Geschwindigkeit oder anderer skalarer Felder orientiert. Die Reduktion der Dimensionalität in ODT erfordert eine Modellierung der dreidimensionalen Turbulenzeigenschaften. Dazu werden zufällig auftretende Wirbelereignisse auf der eindimensionalen ODT-Linie realisiert. Ein Wirbelereignis erzeugt einen lokalen Umordnungsprozess der Strömungsgrößen durch die Anwendung der sogenannten „triplet map“. Die „triplet map“ platziert auf einem ODT-Liniensegment  $[r_0, r_0+l]$ , mit der stochastisch ermittelten Wirbelposition  $r_0$  und Wirbelgröße  $l$ , drei Kopien des originalen Liniensegmentes, welches in der Größe komprimiert wird. Dies entspricht einer dreifachen Stauchung. Die mittlere Kopie wird invertiert, um die Stetigkeit der Strömungsprofile zu gewährleisten. Die Abbildung ist maßerhaltend, was zu einer Erfüllung der Erhaltungseigenschaften beiträgt. Die Gradienten der Strömungsgrößen steigen sodann lokal an [19].

Die Wirbelereignisse werden in der Zeit mittels eines Poisson-Prozesses generiert. Die Wirbelposition  $r_0$  und Wirbelgröße  $l$  werden dabei mithilfe angenommener Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen (PDFs) ermittelt. Es wird jedoch nur ein Teil der für den aktuellen Strömungszustand energetisch plausiblen Ereignisse probabilistisch implementiert. Dieses Vorgehen ist in der Lage durch eine Überabtastung der Wirbelereignisse im Mittel die Statistiken von turbulenten Strömungen unter Beibehaltung einer mittleren Akzeptanzwahrscheinlichkeit nachzubilden [19]. Zur Berechnung der Akzeptanzwahrscheinlichkeit eines individuellen Wirbelereignisses in einem gegebenen Abtastzeitintervall wird die Wirbelrate  $\lambda$  für den Kandidaten eines Wirbelereignisses benötigt. Letzterer wird mittels einer Dimensionsanalyse definiert. Die Wirbelrate  $\lambda$  ist eine Funktion der Wirbelgröße  $l$ , der Wirbelposition  $r_0$  und der Wirbelereignis-Zeitskala  $\tau$ . Die Wirbelrate skaliert mit der Differenz aus der verfügbaren kinetischen Energie  $E_{\text{kin}}$  in dem betrachteten Liniensegment und einer viskosen Sanktionierung  $E_{\text{vp}}$ . Die viskose Sanktionierung dient zur Unterdrückung von zu kleinen Wirbeln (jene unterhalb der Kolmogorov-Länge) und wirkt sich positiv auf den Simulationsaufwand aus [19]. Die statistischen Resultate werden dadurch aber nicht beeinflusst.  $\lambda$  ist gegeben durch folgenden Zusammenhang,

$$\lambda(l, r_0, \tau) = \frac{1}{l^2 \tau} \sim \frac{C}{l^3} \sqrt{\frac{E_{\text{kin}} - ZE_{\text{vp}}}{\rho l^2}}. \quad (1)$$

Hierbei steht  $\rho$  für die Dichte.  $C$  und  $Z$  sind dimensionslose Modellparameter von ODT, welche zuvor an einer Strömungskonfiguration kalibriert werden. Wirbelereignisse werden in der Zeit der Reihe nach getestet. Wird ein solches Ereignis akzeptiert und implementiert, findet ein Aufholvorgang statt. Dieser Aufholvorgang entwickelt die deterministischen Diffusions- und Reaktionsgleichungen in der Zeit bis zum Zeitpunkt des Wirbelereignisses (plus dessen nominaler Dauer  $\tau$ ).

Die integralen Gleichungen für die Erhaltung der Masse, des Impulses und der Energie sind nachfolgend für das reduzierte System in radialer Richtung und in Lagrange'scher Betrachtungsweise angegeben [19]. Die Erhaltung der Masse ist gegeben durch,

$$\frac{d}{dt} \int \rho r \, dr = 0. \quad (2)$$

Die Dichte  $\rho$  des Gasgemisches wird mittels des Drucks, der Temperatur und des molekularen Gewichts des Gemisches über das ideale Gasgesetz bestimmt,

$$P = \rho R_u T \sum_k \frac{Y_k}{M_k}. \quad (3)$$

Das ideale Gasgesetz enthält den thermodynamischen Druck  $P$ , welcher für offene Systeme örtlich und zeitlich konstant ist. Zudem ist  $R_u$  die universelle Gaskonstante,  $T$  die Temperatur des

Gasgemisches,  $Y_k$  ist der Massenanteil der  $k^{\text{ten}}$  Spezies und  $M_k$  das molekulare Gewicht der  $k^{\text{ten}}$  Spezies. Alle Spezies zusammen formen das Gasgemisch. Die Erhaltung der Spezies ist gegeben durch folgenden Zusammenhang,

$$\frac{d}{dt} \int \rho Y_k r dr = - \int \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \rho V_k Y_k) r dr + \int \dot{\omega}_k r dr. \quad (4)$$

In Gleichung 4 steht  $V_k$  für die Diffusionsgeschwindigkeit der  $k^{\text{ten}}$  Spezies, welche einen geeigneten Modellierungsansatz erfordert, wie in jeder reaktiven DNS. Des Weiteren ist  $\dot{\omega}_k$  die Reaktionsrate der  $k^{\text{ten}}$  Spezies, welche durch einen Reaktionsmechanismus basierend auf dem vorliegenden thermodynamischen Zustand berechnet wird. Als nächstes wird die Impulserhaltungsgleichung vorgestellt. In dieser Gleichung wird eine Dominanz des radialen Transportes und eine Zuständigkeit des Gradienten der modellierten Scherspannung für die Diffusion des Impulses im System angenommen [19]. Die Impulserhaltungsgleichung ist gegeben durch,

$$\frac{d}{dt} \int \rho u_i r dr = \int \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \mu \frac{\partial u_i}{\partial r} \right) r dr. \quad (5)$$

Hier steht  $u_i$  für die drei Geschwindigkeitskomponenten im Zylinderkoordinatensystem und  $\mu$  ist die dynamische Viskosität des Gasgemisches. Die Energieerhaltung ist umgesetzt über die Erhaltung der Enthalpie  $h$ ,

$$\frac{d}{dt} \int \rho h r dr = - \int \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \rho V_k Y_k h_k) r dr + \int \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \lambda_t \frac{\partial T}{\partial r} \right) r dr. \quad (6)$$

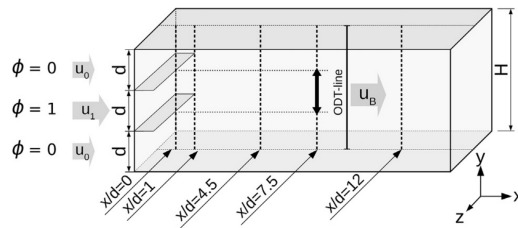
In der Gleichung für die Erhaltung der Enthalpie steht  $h_k$  für die spezifische Enthalpie der  $k^{\text{ten}}$  Spezies und  $\lambda_t$  für die Wärmeleitfähigkeit des Gasgemisches.

Die Lösung der deterministischen Gleichungen 2-6 in der Zeit ist umgesetzt über eine Zeitintegration erster Ordnung unter Verwendung der Finite Volumen Methode (FVM) im Ort. Die Zeitintegration in Gleichung 2-6 ist implizite, wobei die berechneten diffusiven Flussterme zu Beginn des Zeitschritts als konstant angenommen werden. Dies umgeht das Problem der möglicherweise einschränkenden CFL-Bedingung durch die steife Reaktionskinetik im enthaltenen chemischen Quellterm. In Gleichung 5-6 führt dieses Vorgehen aber auch zu einer Umwandlung der Zeitintegration in eine explizite Euler Methode.

Die am Ende des Zeitschritts ermittelte Dichte in der Spezies- und Enthalpiegleichung wird über das ideale Gasgesetz in Gleichung 3 und unter Berücksichtigung der neuen chemischen Zusammensetzung und Temperatur berechnet. Nach der Aktualisierung der Dichte wird die Erhaltung der Masse über eine erhaltende Anpassung des Gitters unter Beachtung von Gleichung 2 erwirkt. Zur Berechnung der thermodynamischen Größen des verwendeten Gasgemisches und der Reaktionskinetik wird das Softwarepaket CANTERA [10] eingesetzt.

### Planare Strahldüse

Die korrekte Wiedergabe der Turbulenz und damit der Vermischung von Skalaren spielt bei Verbrennungsprozessen eine entscheidende Rolle. Die Verwendung von passiven Skalaren erlaubt die selektive Betrachtung des Mischungsvorgangs ohne das Einsetzen von Reaktionen und ermöglicht so eine sehr genaue Validierung des ODT-Modells. Dies wurde vor Kurzem z.B. durch Klein et al. [17] an einer planaren Strahldüse vorgenommen. Für weiterführende Informationen zum verwendeten Simulationsaufbau und weiteren Resultaten sei auf die Originalveröffentlichung [17] verwiesen. Nachfolgend werden die wichtigsten Kernergebnisse kurz vorgestellt.



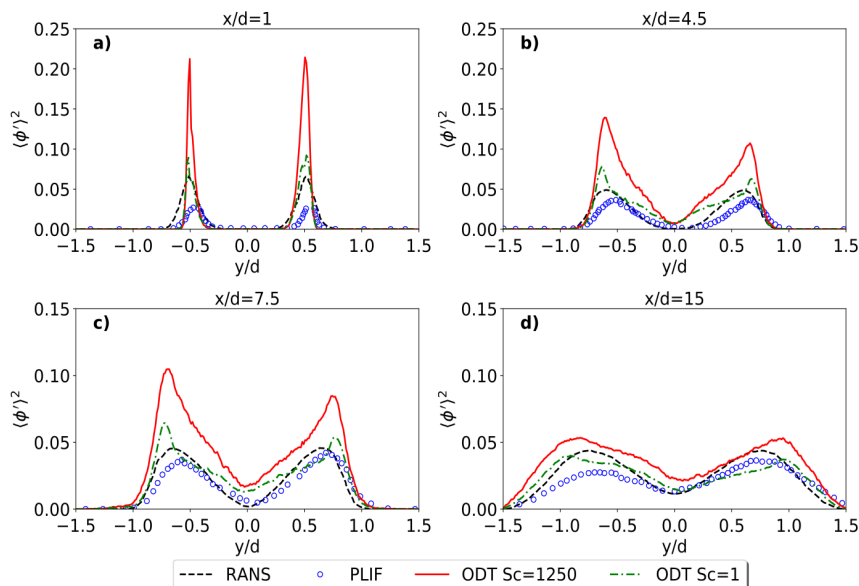
**Abbildung 1.** Schematischer Aufbau der betrachteten planaren Strahldüse.

Reprinted from Publication Chemical Engineering Science, 204, M. Klein, Ch. Zenker, H. Schmidt, Small-scale resolving simulations of the turbulent mixing in confined planar jets using one-dimensional turbulence, 186-202, Copyright (2018), with permission from Elsevier.

Abbildung 1 zeigt schematisch den Versuchsaufbau der planaren Strahldüse. Hierbei stellt  $x$  die Koordinate in Strömungsrichtung und  $y$  jene in wandnormaler Richtung dar. Drei Kanäle mit der Höhe  $d$  münden in einen Kanal der Höhe  $3d$ . Der obere und untere Kanal haben eine mittlere Anfangsgeschwindigkeit von  $U_0=0.5$  m/s und einen Massenanteil des passiven Skalars von  $\Phi=0$ . Der mittlere Kanal hat eine Anfangsgeschwindigkeit von  $U_1=1.0$  m/s und einen Massenanteil des passiven Skalars von  $\Phi=1$ .

Die durchgeführten Simulationen beruhen auf einer zeitlichen Formulierung des ODT-Modells, wodurch die Erhaltungsgleichungen für eine wandnormale Koordinate und die Zeit gelöst werden. Aus diesem Grund ist eine Approximation für die Advektion der ODT-Linie in der Zeit notwendig. Aufgrund der Geometrie des Kanals kann die Hauptgeschwindigkeit  $U_B$  zur Advektion der ODT-Linie durch  $U_B=(2U_0+U_1)/3$  berechnet werden. Diese ist für die gewählte Geometrie konstant.

Abbildung 2 zeigt wandnormale Profile der Skalarvarianz  $\langle \Phi'^2 \rangle$  für vier stromabwärts gelegene Positionen  $x/d$  für die Schmidt-Zahlen von  $Sc=1$  und  $Sc=1250$ . Zu Vergleichszwecken sind RANS und PLIF Referenzdaten von Feng et al. [6] mit der nominellen Schmidt-Zahl von  $Sc=1250$  angegeben. Man sieht deutlich, dass die kleinskalig auflösenden ODT-Simulationen viel höhere Fluktuationen (bis zu Faktor 10 für  $Sc=1250$ ) gegenüber den Referenzdaten nahe der Eintrittsfläche aufweisen. Diese Fluktuationen werden in den RANS-Simulationen systematisch unterschätzt. Die Messdaten sind in ähnlicher Weise, jedoch aufgrund impliziter Mittelung durch endlich große Messvolumina verzerrt. Beides lässt sich qualitativ durch eine drastische Verminderung der Schmidt-Zahl (hier  $Sc=1$ ) im ODT-Modell repräsentieren. Die Asymmetrie in den Profilen der Skalarvarianz in Abbildung 2 ist begründet durch die Verwendung von experimentell ermittelten Anfangsbedingungen [17].



**Abbildung 2.** Varianz des passiven Skalars  $\langle \Phi'^2 \rangle$  für vier stromabwärts gelegenen Positionen.

Reprinted from Publication Chemical Engineering Science, 204, M. Klein, Ch. Zenker, H. Schmidt, Small-scale resolving simulations of the turbulent mixing in confined planar jets using one-dimensional turbulence, 186-202, Copyright (2018), with permission from Elsevier.

**Tabelle 1.** Parameter der Simulationsfälle 1 und 2 mit Inhomogenitäten in der Temperaturverteilung oder chemischen Zusammensetzung.

Fall	$T_0$ (K)	$T'$ (K)	$\Phi_0$	$\Phi'$	$l_c, l_{Tc}, l_{\Phi c}$ (mm)	$u'$ (m/s)	$\tau_{ig}^0$ (ms)
1	805	15	0.45	-	1.25	0.83	1.5
2	805	-	0.45	0.05	1.25	0.83	1.5

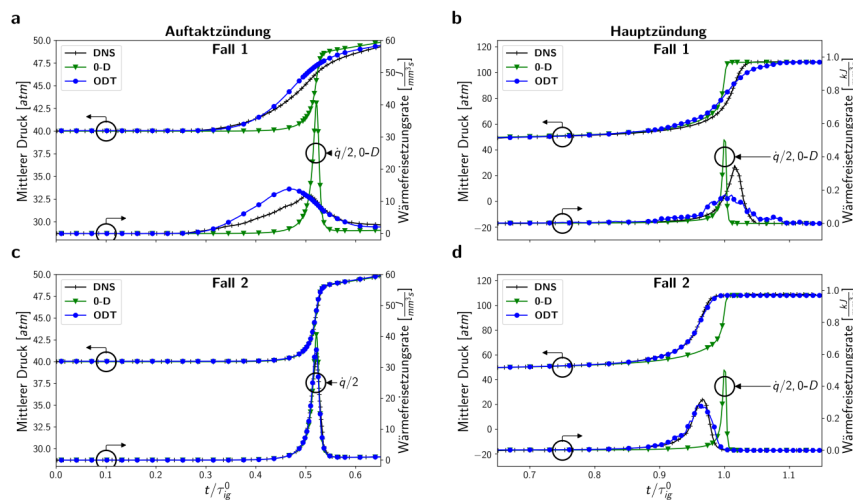
### n-Heptan Selbstzündung

In der Simulation stellen innermotorische Verbrennungsvorgänge von Otto-, Diesel- und HCCI-Motoren besondere Herausforderungen aufgrund der turbulenten Strömung gekoppelt mit chemischen Reaktionen in komplexen dreidimensionalen Brennraumgeometrien dar. Bei HCCI-Motoren kommt es aufgrund der sofortigen Reaktion der homogenen Mischungszonen zu einem rapiden Druckanstieg, welcher Klopfen begünstigt und damit zur Beschädigung des Motors führen kann. Inhomogenitäten in der Temperaturverteilung oder eine Schichtung des Luft-Kraftstoff-Gemisches können den schlagartigen Druckanstieg abmildern.

In dem hier untersuchten Fall wird der Einfluss von Temperatur- und Zusammensetzungsinhomogenitäten auf die Selbstzündung von mageren n-Heptan-Gemischen in einem geschlossenen System mittels ODT untersucht. Die ODT-Modellformulierung für die Berücksichtigung des veränderlichen Drucks in geschlossenen Systemen kann in [23,26,27] nachgelesen werden. Für die durchgeführten Simulationen wurden zu Vergleichszwecken die gleichen Einstellungen wie in der DNS von Luong et al. [21] getroffen. Das Rechengebiet erstreckt sich über 3.2 mm mit periodischen Randbedingungen. Zufällige Anfangsprofile für Geschwindigkeit, Temperatur und Spezies wurden auf Grundlage eines Passot-Pouquet Spektrums [24], welches mit den Mittelwerten und den RMS Fluktuationen aus der DNS übereinstimmt, erzeugt.

In Tabelle 1 sind die zwei untersuchten Simulationsfälle aufgelistet. Hierbei steht  $T_0$  für die mittlere Anfangstemperatur,  $\Phi_0$  für das mittlere Äquivalenzverhältnis,  $T'$  und  $\Phi'$  jeweils für die Fluktuationen der Temperatur und des Äquivalenzverhältnisses,  $u'$  für die Fluktuationen der Geschwindigkeit und  $\tau_{ig}^0$  für die Zündverzugszeit aus 0-D Simulationen [21].  $l_c, l_{Tc}, l_{\Phi c}$  repräsentieren die Längenskalen mit der größten Energie für die Geschwindigkeit, Temperatur und das Äquivalenzverhältnis. Der Ausgangsdruck beträgt 40 atm, wie in der DNS [21].

Die Chemie für die magere n-Heptan Verbrennung wird mittels eines reduzierten Mechanismus mit 58 Spezies von Yoo et al. [29] wiedergegeben. Die Simulationen wurden für die ODT-Modellparameter  $C=4$  und  $Z=0.4$  durchgeführt. Für weitere Informationen zum Simulationsaufbau und ausführlichere Untersuchungen von Temperatur- und Zusammensetzungsinhomogenitäten wird auf die Veröffentlichungen von Starick et al. [26,27] verwiesen.



**Abbildung 3.** Zeitliche Verläufe der örtlich und Ensemble-gemittelten ODT-Ergebnisse für die Wärmefreisetzungsrate und den Druck. In Fall 1 (oben) wird ein homogenes Gasgemisch mit Temperaturinhomogenitäten betrachtet und in Fall 2 (unten) ein Gasgemisch mit Inhomogenitäten in der chemischen Zusammensetzung und homogener Anfangstemperatur.

In Abbildung 3 sind die zeitlichen Verläufe der örtlich und Ensemble-gemittelten ODT-Ergebnisse für die Wärmefreisetzungsrate und den Druck zu sehen. Die Mittelung beruht auf 100 Ensembles. Auf der linken Seite (a und c) ist die Auftaktzündung und rechts (b und d) die Hauptzündung gezeigt. Zu Vergleichszwecken ist neben den DNS-Ergebnissen auch der Verlauf von 0-D Simulationen dargestellt. 0-D Simulationen berücksichtigen keine Inhomogenitäten bei der Verbrennung und geben dadurch Auskunft über den Einfluss von Inhomogenitäten auf die Zündverzugszeit. Im Allgemeinen lässt sich erkennen, dass ODT in der Lage ist die Verläufe der DNS-Daten zu reproduzieren. Hierbei ist die Übereinstimmung bei Zusammensetzungsinhomogenitäten besser als bei Temperaturinhomogenitäten.

### Methan/Luft Freistrah-Flamme

Bei der Energieumwandlung von chemischer zu thermischer Energie, sei es bei Flugzeugtriebwerken, Gasturbinen oder Heizungssystemen, kommen oftmals Brenner zum Einsatz. Ein klares Verständnis über das Verlöschen und die Stabilisierung der Brennerflamme hat einen hohen Stellenwert und wird gewöhnlich durch Freistrah-Flammen untersucht. Brenner mit Umgebungsströmung, welche die Flamme mit heißen Verbrennungsgasen umschließen, erlauben detaillierte Einblicke und Untersuchungen der zugrunde liegenden Mechanismen.

Die akkurate Wiedergabe der feinen Interaktionen zwischen der heißen Umgebungsströmung und dem kalten unverbrannten Freistrah stellt eine Herausforderung in der Simulation dar, da dies maßgeblich für die Reaktion und Selbstzündung des Freistrahls verantwortlich ist [3].

In dem untersuchten Fall strömt ein Methan/Luft-Gemisch durch eine Düse in eine Umgebungsströmung aus heißen Verbrennungsgasen, welche durch mehrere Wasserstoff/Luft Brenner erzeugt wird. Der genaue Aufbau ist in den Messungen von Cabra et al. [3] beschrieben. Für die ODT-Simulationen werden die gleichen Parameter verwendet und derselbe Versuchsaufbau herangezogen. Tabelle 2 listet die Anfangsbedingungen für den Freistrah und die umgebende Strömung auf.  $X$  steht für die Stoffmengenanteile der beteiligten Spezies,  $d$  ist der Durchmesser und  $u$  die Geschwindigkeit. Für die Umgebungsströmung wird ein uniformes Geschwindigkeitsprofil in Strömungsrichtung mit einem konstanten Wert von 5.4 m/s angenommen. Das Geschwindigkeitsprofil des Freistrahls wird mit augenblicklichen Geschwindigkeitsprofilen von ODT-Rohrströmungssimulationen initialisiert. Das ODT-Rechengebiet erstreckt sich über 100 mm mit homogenen Neumann-Randbedingungen. Die Wiedergabe der Chemie der Methan/Luft Flamme erfolgt über einen reduzierten Mechanismus von Lu und Law [20]. Im Folgenden ist  $z$  die Ortskoordinate in Strömungsrichtung.

In dieser Arbeit werden Vergleiche von vorläufigen ODT-Ergebnissen mit einer stationären, sich örtlich entwickelnden, runden Freistrah-Flamme angestellt. Wie bei der ODT-Simulation der planaren Strahldüse in Klein et al. [17], welche ebenfalls eine zeitliche Modellformulierung verwendet, bedarf es auch hier einer Transformation der Zeit in einen stromabwärts befindlichen Ort. Dies wird, wie in Echekki et al. [5], über eine Advektion des ODT-Rechengebietes in Strömungsrichtung basierend auf der stetig aktualisierten Hauptströmungsgeschwindigkeit  $\bar{u}$ ,

$$z(t) = z(t_0) + \int_{t_0}^t \bar{u}(t') dt', \quad (7)$$

**Tabelle 2.** Anfangsbedingungen für den Freistrah und die Umgebungsströmung.

-	Freistrah	Umgebungsströmung
$d$ (mm)	4.57	100
$u$ (m/s)	100	5.4
$T$ (K)	320	1350
$X_{O_2}$	0.15	0.12
$X_{N_2}$	0.52	0.73
$X_{H_2O}$	0.0029	0.15
$X_{CH_4}$	0.33	0.0003

umgesetzt. Die Berechnung der Hauptströmungsgeschwindigkeit erfolgt über die Summe aus der Freistromgeschwindigkeit (Umgebungsströmung)  $u_\infty$  und dem Verhältnis aus integriertem Impulsfluss zu integriertem Massenfluss,

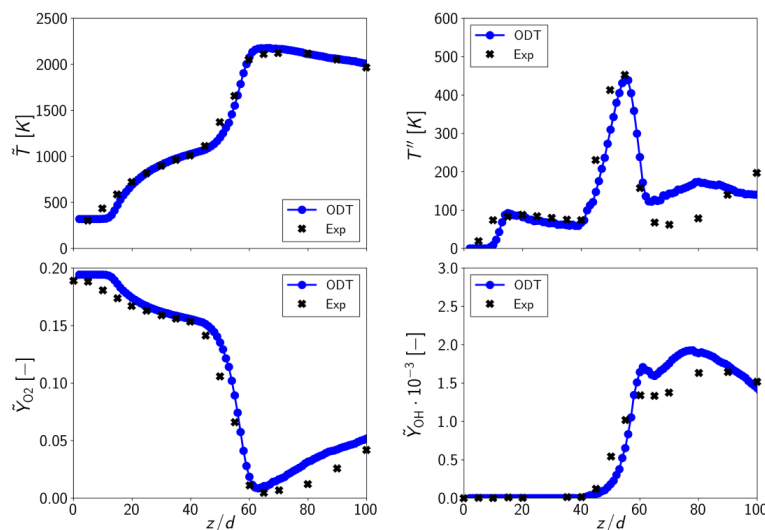
$$\bar{u}(t) = u_\infty + \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \rho(u - u_\infty)^2 r dr}{\int_{-\infty}^{\infty} \rho(u - u_\infty) r dr} \Big|_t. \quad (8)$$

Mittellinienprofile liefern Informationen über die Entwicklung der Strömung im Flammenkern und werden für die Validierung der ODT-Ergebnisse eingesetzt. In Abbildung 4 sind Favre-gemittelte Profile für Temperatur, Temperaturfluktuation und Massenanteile von  $O_2$  und  $OH$  dargestellt. Für die durchgeführten Simulationen wurden die ODT-Modellparameter in Gleichung 1 mit  $C=18$  und  $Z=400$  angenommen. Die Mittelung basiert auf 1000 Realisierungen. Für detailliertere Informationen wird auf die Veröffentlichung von Starick et al. [28] verwiesen.

Die Anfangsphase, welche sich bis  $z/d=40$  erstreckt, ist in den Mittellinienprofilen in Abbildung 4 charakterisiert durch Vermischen des kalten Freistrahls und der heißen umgebenden Strömung ohne Reaktionen. In dieser Phase ist der Temperaturanstieg und die Sauerstoffabnahme eher gering. Die Temperaturfluktuationen sind relativ klein und der Massenanteil von  $OH$  ist vernachlässigbar.

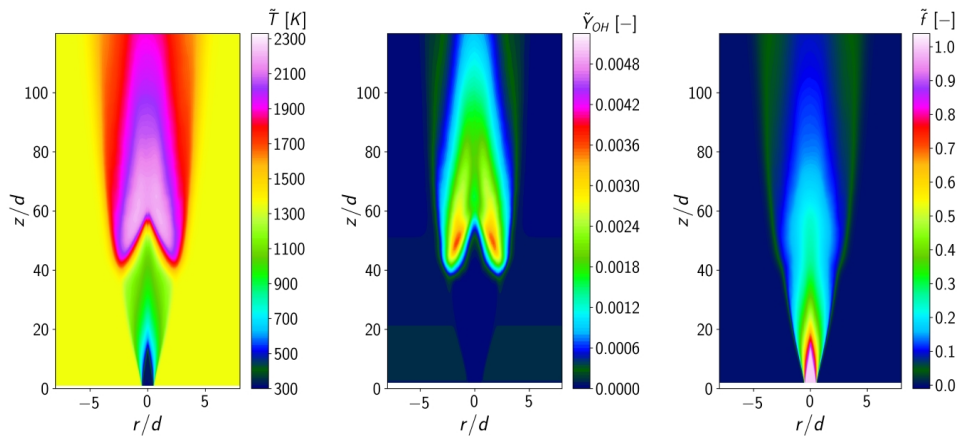
An die Anfangsphase schließt sich eine Phase der Flammenstabilisierung an. Ein starker Temperaturanstieg, schneller Abfall des Massenanteils von  $O_2$ , Zunahme des Massenanteils von  $OH$  und Sprung in den Temperaturfluktuationen ist typisch für diese Phase. In den Abbildungen ist zu erkennen, dass ODT in guter Übereinstimmung mit den Messungen ist. Dies umfasst die richtige Wiedergabe der Mischung in der Anfangsphase und die korrekte Position des Verbrennungsprozesses, welcher durch einen Temperatursprung und eine starke Abnahme des Sauerstoffmassenanteils sichtbar ist. Des Weiteren ist ODT in der Lage die Favre Fluktuationen der Temperatur nachzubilden.

Abbildung 5 zeigt zweidimensionale Darstellungen der Favre-gemittelten Temperatur, des  $OH$  Massenanteils und des Mischungsanteils. Für die Berechnung des Mischungsanteils wird die Gleichung von Bilger [2] herangezogen. Wie bei den Mittellinienprofilen ist auch hier bis zu  $z/d=40$  eine Anfangsphase erkennbar. Der Temperaturanstieg in der Freistrah-Region ist durch die Vermischung mit der Umgebungsströmung begründet und es kommt zu keiner sichtbaren Produktion von  $OH$ . Der Mischungsanteil erfährt einen starken Rückgang durch die Mischung mit der Umgebungsströmung. In der Phase der Flammenstabilisierung, ab  $z/d>40$ , ist eine starke Temperaturzunahme beginnend an dem Übergangsbereich zwischen Umgebungsströmung und Freistrah erkennbar. Die Temperaturzunahme setzt sich mit zunehmender Stromabwärtsposition weiter in Richtung Mitte fort.



**Abbildung 4.** Vergleich der ODT-Ergebnisse für die Favre-gemittelten Mittellinienprofile für Temperatur, Temperaturfluktuationen, Massenanteil von  $O_2$  und Massenanteil von  $OH$  mit den experimentellen Messungen von Cabra et al. [3].





**Abbildung 5.** Zweidimensionale Visualisierung der Freistrah-Flamme für die Favre-gemittelte Temperatur (links), Massenanteil von OH (mittig) und Mischungsanteil (rechts).

In den Bereichen mit den höchsten Temperaturen sind auch die höchsten Massenanteile von OH zu finden. Der Mischungsanteil weist keine signifikanten Veränderungen für die Phase der Flammenstabilisierung auf.

### Zusammenfassung

ODT-Simulationsergebnisse für die Vermischung eines passiven Skalars in einer planaren Strahldüse, für die Selbstzündung eines mageren n-Heptan/Luft Gemisches bei konstantem Volumen und für die Verbrennung eines Methan/Luft Gemisches in einer Freistrah-Flamme umgeben von einer Strömung aus heißen Verbrennungsabgasen wurden gezeigt. Die Untersuchung der Vermischung eines passiven Skalars stellt eine Vorarbeit dar, da es die genaue Betrachtung der turbulenten Vermischung ohne ein Einsetzen von Reaktionen zulässt. Die Selbstzündung bei konstantem Volumen stellt eine Anwendung von einem geschlossenen System dar. Hierfür war eine Erweiterung der ODT-Formulierung für veränderliche thermodynamische Drücke notwendig. Die Freistrah-Flamme demonstriert einen Anwendungsfall von ODT auf offene Systeme. In allen betrachteten Fällen zeigte ODT eine angemessene Übereinstimmung mit den verfügbaren Vergleichsdaten, die entweder aus Referenzmessungen oder -simulationen stammen. Die vollständige Auflösung der molekularen Diffusion und Reaktionskinetik, ohne Modellierung oder Approximationen, und der verhältnismäßig geringe Rechenaufwand legen nahe, dass ODT ein attraktives Simulationsverfahren für turbulente Verbrennungsprozesse darstellt.

### Literatur

- [1] Ashurst W.T., Kerstein A.R.: *One-dimensional turbulence: Variable-density formulation and application to mixing layers*, Physics of Fluids, 17, 025107, 2005.
- [2] Bilger R.W., Stårner S.H., Kee R.J.: *On reduced Mechanisms for Methane-Air Combustion in Nonpremixed Flames*, Combustion and Flame, 80, 135-149, 1990.
- [3] Cabra R., Chen J.-Y., Dibble R. W., Karpetis A. N., Barlow R. S.: *Lifted methane-air jet flames in vitiated coflow*, Combustion and Flame, 143, 491-506, 2005.
- [4] Cao S., Echehki T.: *A low-dimensional stochastic closure model for combustion large-eddy simulation*, Journal of Turbulence, 9, N2, 2008.
- [5] Echehki T., Kerstein A.R., Dreeben T.: *One-Dimensional Turbulence Simulation of Turbulent Jet Diffusion Flames: Model Formulation and Illustrative Applications*, Combustion and Flame, 125, 1083-1105, 2001.
- [6] Feng H., Olsen M.G., Liu Y., Fox R.O., Hill J.C.: *Investigation of turbulent mixing in a confined planar-jet reactor*, AIChE Journal, 51, 2649-2664, 2005.
- [7] Ferziger J. H., Perić M.: *Numerische Strömungsmechanik*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, ISBN: 978-3-540-67586-0, 2008.
- [8] Glawe C., Medina M. J.A., Schmidt H.: *IMEX based multi-scale time advancement in ODTLES*, Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik, 98, 1907-1923, 2018.

- [9] Gonzalez-Juez E.D., Schmidt R.C., Kerstein A.R.: *ODTLES simulations of wall-bounded flows*, Physics of Fluids, 23, 125102, 2011.
- [10] Goodwin D.: *Cantera C++ User's Guide*, California Institute of technology, 2002.
- [11] Jozefik Z., Kerstein A.R., Schmidt H., Lyra S., Kolla H., Chen J.H.: *One-dimensional turbulence modeling of a turbulent counterflow flame with comparison to DNS*, Combustion and Flame, 62, 2999-3015, 2015.
- [12] Jozefik Z., Kerstein A.R., Schmidt H.: *Simulation of shock-turbulence interaction in non-reactive flow and in turbulent deflagration and detonation regimes using one-dimensional turbulence*, Combustion and Flame, 164, 53-67, 2016.
- [13] Kerstein A.R.: *One-dimensional turbulence: model formulation and application to homogeneous turbulence, shear flows, and buoyant stratified flows*, Journal of Fluid Mechanics, 392, 277-334, 1999.
- [14] Kerstein A.R.: *Hierarchical Parcel-Swapping Representation of Turbulent Mixing. Part 1. Formulation and Scaling Properties*, Journal of Statistical Physics, 153, 142-161, 2013.
- [15] Kerstein A.R.: *Linear-eddy modeling of turbulent transport. Part 6. Microstructure of diffusive scalar mixing fields*, Journal of Fluid Mechanics, 231, 361-394, 1991.
- [16] Kerstein A.R., Ashurst W.T., Wunsch S., Nilsen V.: *One-dimensional turbulence: vector formulation and application to free shear flows*, 447, 85-109, 2001.
- [17] Klein M., Zenker Ch., Schmidt H.: *Small-scale resolving simulations of the turbulent mixing in confined planar jets using one-dimensional turbulence*, Chemical Engineering Science, 204, 186-202, 2019.
- [18] Lignell D.O., Kerstein A.R., Sun G., Monson E.: *Mesh adaption for efficient multiscale implementation of One-Dimensional Turbulence*, Theoretical and Computational Fluid Dynamics, 27 (3-4), 273-295, 2013.
- [19] Lignell D., Lansinger V., Medina J., Klein M., Kerstein A., Schmidt H., Fistler M., Oevermann M.: *One-dimensional turbulence modeling for cylindrical and spherical flows: model formulation and application*, Theoretical and Computational Fluid Dynamics, 32, 495-520, 2018.
- [20] Lu T.F., Law C.K.: *A criterion based on computational singular perturbation for the identification of quasi steady state species: A reduced mechanism for methane oxidation with NO chemistry*, Combustion and Flame, 154, 761-774, 2008.
- [21] Luong M., Yu G., Lu T., Chung S., Yoo S.: *Direct numerical simulations of ignition of a lean n-heptane/air mixture with temperature and composition inhomogeneities relevant to HCCI and SCCI combustion*, Combustion and Flame, 162, 4566-4585, 2015.
- [22] McMurtry P.A., Menon S., Kerstein A.R.: *A linear eddy sub-grid model for turbulent reacting flows: Application to hydrogen-AIR combustion*, Proceedings of the Combustion Institute, 24, 271-278 1992.
- [23] Median M. J.A., Schmidt H., Mauss F., Jozefik Z.: *Constant volume n-Heptane autoignition using One-Dimensional Turbulence*, Combustion and Flame, 190, 388-401, 2018.
- [24] Passot T., Pouquet A.: *Numerical simulation of compressible homogeneous flows in the turbulent regime*, Journal of Fluid Mechanics, 181, 441-466, 1987.
- [25] Schmidt R.C., Kerstein A.R., Wunsch S., Nilsen V.: *Near-wall LES closure based on one-dimensional turbulence modeling*, Journal of Computational Physics, 186, 317-355, 2003.
- [26] Starick T., Medina M. J.A., Schmidt H.: *One-Dimensional Turbulence simulations for reactive flows in open and closed systems*, Conference on Modelling Fluid Flow (CMFF'18), Budapest, Hungary, 2018.
- [27] Starick T., Medina M. J.A., Schmidt H.: *One-Dimensional Turbulence Simulations for Reactive Flows in Open and Closed Systems*, Zeitschrift Technische Mechanik, 39, 162-174, 2019.
- [28] Starick T., Schmidt H., Lignell D.: *One-Dimensional Turbulence Modelling of a Lifted Methane/Air Jet Flame in a Vitiated Coflow*, 11th International Symposium on Turbulence and Shear Flow Phenomena (TSFP11), Southampton, UK, 2019.
- [29] Yoo C.S., Lu T., Chen J., Law C.: *Direct numerical simulations of ignition of a lean n-heptane/air mixture with temperature inhomogeneities at constant volume: Parametric study*, Combustion and Flame, 158, 1727-1741, 2011.