

Stochastische Modellierung einer Methan/Luft Freistrah-Flamme mit detaillierter Chemie

T. Starick^{1*} und H. Schmidt¹

*Tommy.Starick@b-tu.de

¹ Lehrstuhl Numerische Strömungs- und Gasdynamik, Brandenburgische Technische Universität Cottbus-Senftenberg, Siemens-Halske-Ring 15a, 03046 Cottbus, Deutschland

Abstract

Die vorliegende Arbeit befasst sich mit der stochastischen Modellierung einer Methan/Luft Freistrah-Flamme unter Verwendung des One-Dimensional Turbulence (ODT) Modells. Bei der untersuchten Cabra-Brennerkonfiguration handelt es sich um ein offenes System, bei welchem ein vorgemischter Methan/Luft Freistrah von einer zentral angeordneten Düse in eine Umgebungsströmung aus heißen Verbrennungsgasen strömt. Das One-Dimensional Turbulence Modell ist ein stochastisches und abbildungsbasiertes Modell, welches die molekulare Diffusion und Reaktionskinetik durch sich zeitlich entwickelnde, deterministische Erhaltungsgleichungen berücksichtigt und entlang eines eindimensionalen Rechengebietes vollständig auflöst. Die Besonderheit von ODT liegt in der Modellierung der turbulenten Advektion über zufällig auftretende Wirbelereignisse, welche den fundamentalen Erhaltungseigenschaften unterliegen. Für die Abbildung der Methan/Luft Verbrennungschemie wird ein reduzierter Mechanismus mit 19 Spezies und 15 Reaktionen und ein detaillierter Mechanismus mit 53 Spezies und 325 Reaktionen eingesetzt.

Die gezeigten vorläufigen ODT-Simulationsergebnisse der Methan/Luft Freistrah-Flamme beinhalten Mittellinienprofile, radiale Profile, Streudiagramme und zweidimensionale Visualisierungen der Freistrah-Flamme, welche mit einer zylindrischen Formulierung von ODT erzeugt wurden. Zu Vergleichszwecken werden die Simulationsergebnisse experimentellen Messungen gegenübergestellt. Obwohl die Simulation von reaktiven Freistrah-Flammen keinen neuen Anwendungsfall von ODT darstellt, ist die akkurate Wiedergabe des sensiblen Zusammenspiels des zunächst unverbrannten Freistrahls mit der heißen Umgebungsströmung eine Herausforderung für das Modell. In der durchgeführten Studie 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 liegende Strömung 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 [4].

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 Rechenaufwandes 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 [4].

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) [12], das One-Dimensional Turbulence (ODT) Modell [10] oder das Hierarchical Parcel Swapping (HiPS) Modell [11] dar. Zu den dreidimensionalen Vertretern zählen unter anderem LES-LEM [16], LES-ODT [19] und ODTLES [5,6]. 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 [13,14]. Obwohl die meisten der bereits untersuchten Fälle auf dem Ansatz von niedrigen Mach-Zahlen beruhen, ist auch eine Erweiterung von ODT auf kompressible Strömungen vorhanden [9]. In Studien zu Gegenstrom-Flammen und Selbstzündungsprozessen konnte bereits nachgewiesen werden, dass ODT in der Lage ist die statistischen Momente aus der DNS für Temperatur, Wärmefreisetzungsrate und Spezies zu reproduzieren [8,18].

In dieser Arbeit werden die Fähigkeiten des ODT-Modells an einem offenen, reaktiven System demonstriert. Dieses System besteht aus einer Methan/Luft Freistrah-Flamme, welche sich in einer Umgebungsströmung aus heißen Verbrennungsgasen von Wasserstoff/Luft Flammen befindet. 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 aus eindimensionalen Rechnungen erzeugt werden.

ODT-Modell

Beim ODT-Modell handelt es sich um einen effizienten Ansatz zur Simulation von turbulenten Strömungen, welcher von A. Kerstein [10] entwickelt wurde. An dieser Stelle wird die ODT-Modellformulierung repräsentativ für offene Systeme, welche bei der untersuchten Freistrah-Flamme Anwendung findet, gezeigt. Diese nutzt Zylinderkoordinaten und löst die Strömung entlang der Radialkoordinate und der Zeit auf [14].

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 [14].

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 [14]. Zur Berechnung der Akzeptanzwahrscheinlichkeit eines individuellen Wirbelereignisses in einem gegebenen Abtastzeitintervall wird die Wirbelrate λ für den Kandidaten eines Wirbelereignisses benötigt. Letzterer wird mittels einer Dimensionsanalyse definiert. Die Wirbelrate λ ist eine Funktion der Wirbelgröße l , der Wirbelposition r_0 und der Wirbelereignis-Zeitskala τ . Die Wirbelrate skaliert mit der Differenz aus der verfügbaren kinetischen Energie E_{kin} in dem betrachteten Liniensegment und einer viskosen Sanktionierung E_{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. λ ist gegeben durch folgenden Zusammenhang,

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

Hierbei steht ρ 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 τ).

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 [14]. Die Erhaltung der Masse ist gegeben durch,

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

Die Dichte ρ des Gasgemisches wird mittels des Drucks, der Temperatur und der molekularen Masse 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^{ten} Spezies und M_k die molekulare Masse der k^{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^{ten} Spezies, welche einen geeigneten Modellierungsansatz erfordert, wie in jeder reaktiven DNS. Des Weiteren ist $\dot{\omega}_k$ die Reaktionsrate der k^{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 [14]. 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 μ für die dynamische Viskosität des Gasgemisches. Die Energieerhaltung ist gewährleistet durch 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^{en} Spezies und λ_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 implizit, 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 [7] eingesetzt.

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, lassen detaillierte Einblicke zu und erlauben Untersuchungen der zugrunde liegenden Mechanismen.

Die akkurate Wiedergabe der feinen Interaktionen zwischen der heißen Umgebungsströmung und dem kalten unverbrannten Freistrah stellt eine Herausforderung für die Simulation dar, da dies maßgeblich für die Reaktion und Selbstzündung des Freistrahls verantwortlich ist [2].

In dem untersuchten Fall strömt ein Methan/Luft Gemisch durch eine Düse in eine Umgebungsströmung aus heißen Verbrennungsgasen, welche durch mehrere Wasserstoff/Luft Flammen erzeugt wird. Der genaue Aufbau ist in der Veröffentlichung von Cabra et al. [2] beschrieben und in Abbildung 1 skizziert. Für die ODT Simulation wurden die gleichen Parameter verwendet und derselbe Versuchsaufbau herangezogen, wie in der experimentellen Messung. Tabelle 1 listet die Anfangsbedingungen für den Freistrah und die umgebende Strömung auf. X steht für die Stoffmengenanteile der beteiligten Spezies, D ist der Düsendurchmesser 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 [15] und über den detaillierten GRI-Mech 3.0 Mechanismus [20]. Im Folgenden ist z die Ortskoordinate in Strömungsrichtung.

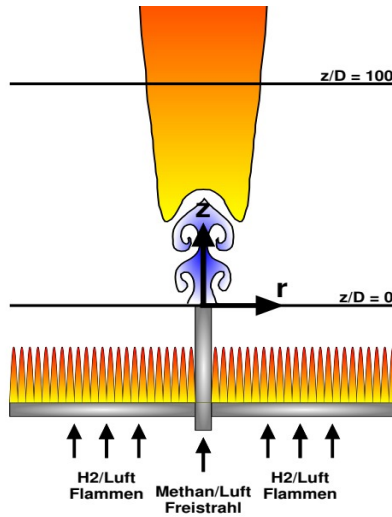


Abbildung 1. Schematische Darstellung der Methan/Luft Freistrah-Flamme in einer Umgebungströmung aus heißen Verbrennungsgasen, gebildet von einer Vielzahl von Wasserstoff/Luft Flammen.

Tabelle 1. Anfangsbedingungen für den Freistrah und die Umgebungströmung.

-	Freistrah	Umgebungströmung
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

In dieser Arbeit werden Vergleiche von vorläufigen ODT-Ergebnissen mit einer stationären, sich örtlich entwickelnden, runden Freistrah-Flamme angestellt. Die ODT-Simulation verwendet eine zeitliche Modellformulierung und bedarf daher einer Transformation der Zeit in einen stromabwärts befindlichen Ort. Dies wird, wie in Echekki et al. [3], über eine Advektion des ODT-Rechengebietes in Strömungsrichtung basierend auf der stetig aktualisierten Hauptströmungsgeschwindigkeit \bar{u} umgesetzt,

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

Die Berechnung der Hauptströmungsgeschwindigkeit erfolgt über die Summe aus der Freistromgeschwindigkeit (Umgebungströmung) u_∞ 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 2 sind die Favre-gemittelte

Profile für Temperatur, Temperaturfluktuation, Massenanteil von O₂ und OH, Mischungsanteil und Mischungsanteilfluktuationen von ODT-Simulationen mit reduziertem Mechanismus [15] und detailliertem Mechanismus [21] abgebildet. Die Definition des Mischungsanteils stammt von Bilgers et al. [1] und ist über folgende Gleichung gegeben,

$$f = \frac{2(Y_C - Y_{C,2})/M_C + (Y_H - Y_{H,2})/2M_H - (Y_O - Y_{O,2})/M_O}{2(Y_{C,1} - Y_{C,2})/M_C + (Y_{H,1} - Y_{H,2})/2M_H - (Y_{O,1} - Y_{O,2})/M_O} \quad (9)$$

Für die durchgeführten Simulationen wurden die ODT-Modellparameter in Gleichung 1 mit C=18 und Z=400 angenommen. Die Mittelung basiert auf 400 Realisierungen. Für detailliertere Informationen wird auf die Veröffentlichung von Starick et al. [20] verwiesen.

Die Anfangsphase, welche sich bis z/D=40 erstreckt, ist in den Mittellinienprofilen in Abbildung 2 charakterisiert durch Vermischen des kalten Freistrahls und der heißen umgebenden Strömung ohne Reaktionen. In dieser Phase ist der Temperaturanstieg und die Sauerstoffabnahme eher gering. Der Mischungsanteil erfährt durch die Vermischung aus Freistrahls und Umgebungsströmung einen raschen Abfall. Die Temperaturfluktuationen sind relativ klein und der Massenanteil von OH ist vernachlässigbar.

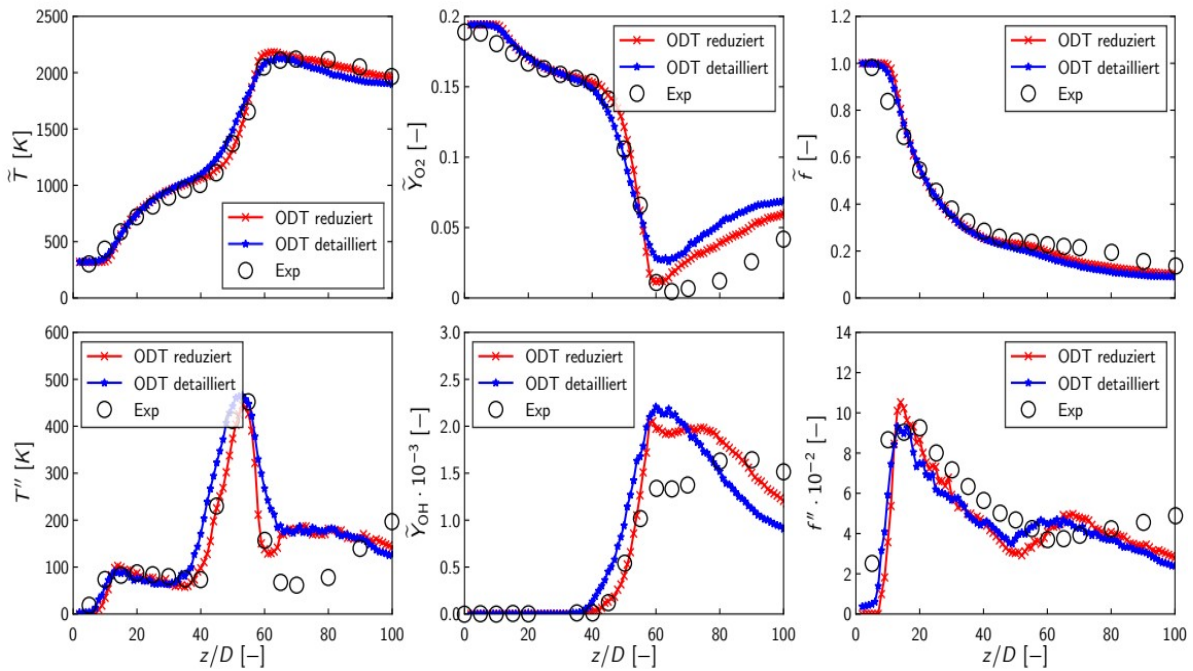


Abbildung 2. Vergleich der Favre-gemittelten Mittellinienprofile für Temperatur (\tilde{T}), Temperaturfluktuationen (T''), Massenanteil von O₂ (\tilde{Y}_{O_2}), Massenanteil von OH (\tilde{Y}_{OH}), Mischungsanteil (\tilde{f}) und Mischungsanteilfluktuationen (f'') mit den experimentellen Messungen (Exp) von Cabra et al. [2]. Die roten Kurven stellen die ODT-Simulationsergebnisse mit dem reduzierten Mechanismus (ODT reduziert) [15] und die blaue Kurve mit dem detaillierten Mechanismus (ODT detailliert) [21] dar.

An die Anfangsphase schließt sich eine Phase der Flammenstabilisierung an. Ein starker Temperaturanstieg, schneller Abfall des Massenanteils von O₂, Zunahme des Massenanteils von OH und Sprung in den Temperaturfluktuationen ist typisch für diese Phase. In den Abbildungen ist zu erkennen, dass ODT für beide Mechanismen 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 und des Mischungsanteils nachzubilden. Die Simulationsergebnisse mit dem reduzierten Mechanismus stimmen für die Temperatur, die Temperaturfluktuationen und den Massenanteil von O_2 etwas besser mit den experimentellen Daten überein, als die Ergebnisse vom detaillierten Mechanismus. Eine Ursache hierfür liegt in der Tatsache, dass die ODT-Modellparameter zunächst für den reduzierten Mechanismus kalibriert worden sind und für den detaillierten Mechanismus beibehalten wurden.

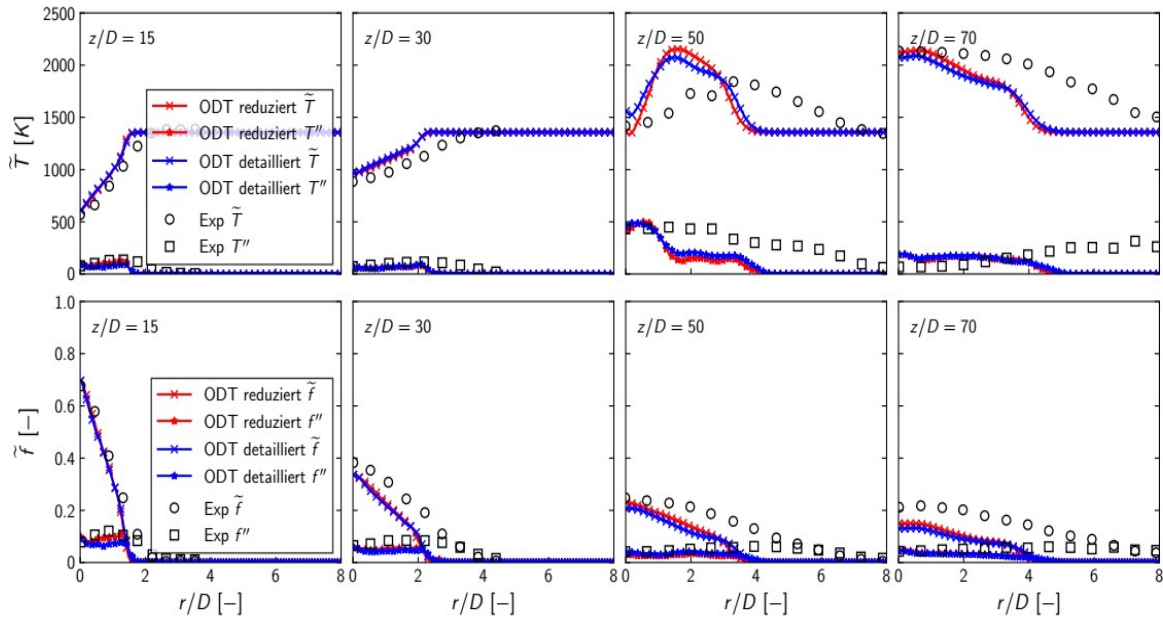


Abbildung 3. Vergleich der Favre-gemittelten radialen Profile für Temperatur (\tilde{T}), Temperaturfluktuationen (T''), Mischungsanteil (\tilde{f}) und Mischungsanteilfluktuationen (f'') mit den experimentellen Messungen von Cabra et al. [2] an verschiedenen axialen Positionen. Die roten Kurven stellen die ODT-Simulationsergebnisse mit dem reduzierten Mechanismus (ODT reduziert) [15] und die blaue Kurve mit dem detaillierten Mechanismus (ODT detailliert) [20] dar.

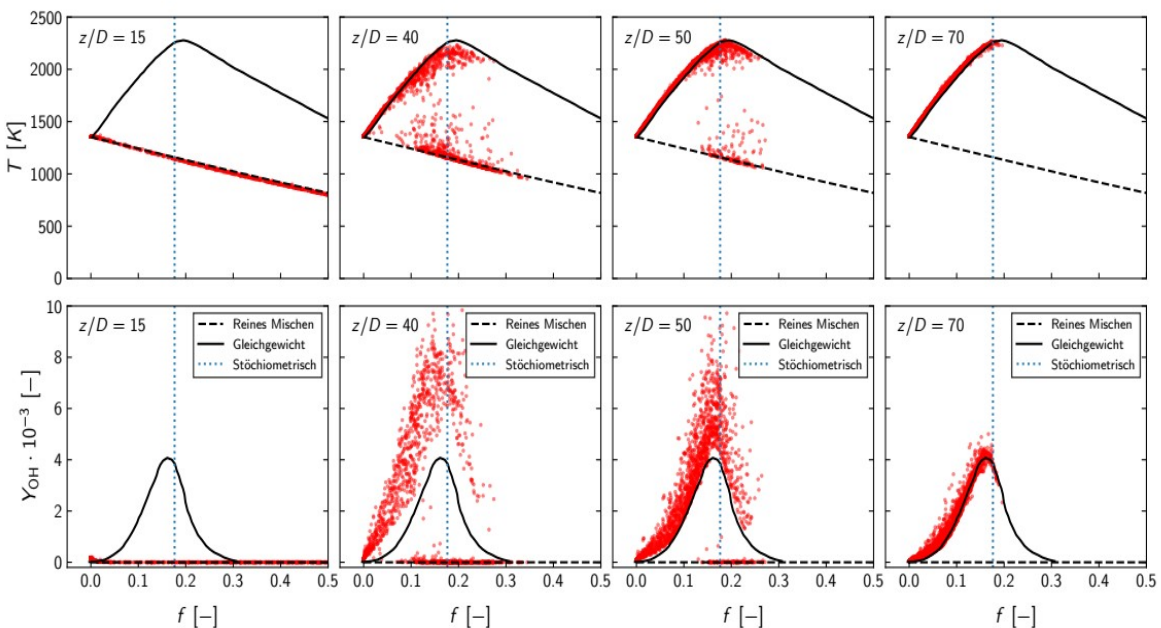


Abbildung 4. Streudiagramm der ODT-Simulationsergebnisse mit detailliertem Mechanismus an verschiedenen axialen Positionen.

Abbildung 3 zeigt die radialen Profile für Temperatur, Temperaturfluktuation, Mischungsanteil und Mischungsanteilstreuung an verschiedenen axialen Positionen. Die radialen Profile für die axiale Position von $z/D=15$ und $z/D=30$ weisen für die Favre-gemittelten Werte und Fluktuationen eine angemessene Übereinstimmung mit den experimentellen Daten auf. Mit höheren axialen Positionen treten Abweichungen zwischen den Simulationsdaten und den Messwerten auf. Dies lässt sich mit der eingesetzten Formulierung von ODT begründen. Die verwendete ODT-Formulierung verwendet eine zeitliche Modellformulierung und löst eine Ortskoordinate in der Zeit auf. Aus diesem Grund kommt Gleichung 7 zum Einsatz, wodurch jedem Zeitpunkt eine axiale Position zugewiesen werden kann. Dies setzt eine Advektion des Rechengebietes mit einer festen Hauptströmungsgeschwindigkeit voraus. Die Verwendung einer örtlichen ODT-Formulierung, welche die Strömung für zwei Ortskoordinaten auflöst, könnte hier zu einer Verbesserung der Simulationsergebnisse führen. Die Abweichungen zwischen dem reduzierten und dem detaillierten Mechanismus fallen eher gering aus und sind erst bei höheren axialen Positionen festzustellen.

Abbildung 4 zeigt das Streudiagramm der Temperatur über den Mischungsanteil und des Massenanteils von OH über den Mischungsanteil an verschiedenen stromabwärts gelegenen Positionen. Die Simulationsergebnisse stammen von ODT-Simulationen, welche zur Wiedergabe der Verbrennung einen detaillierten Mechanismus verwenden. Diese Darstellungen wurden erzeugt, indem entweder die Werte der Temperatur und des Mischungsanteils oder der Massenanteil von OH und des Mischungsanteils für jede Zelle des Rechengebietes von einer Realisierung zu einem Zeitpunkt (feste Position stromabwärts) dargestellt wurden. In jeder Darstellung kennzeichnet die gepunktete Linien den stöchiometrischen Mischungsanteil von $f_s=0.17$ und die gestrichelte Linie den reinen Mischungszustand (ohne Reaktionen). Die durchgezogene Linie markiert den Gleichgewichtszustand. Bei der axialen Position von $z/D=15$ liegt ein reiner Mischungszustand vor und die Reaktionen haben noch nicht begonnen. Bei der axialen Position von $z/D=70$ befinden sich nahezu alle Datenpunkte im Gleichgewichtszustand. Die axialen Positionen $z/D=40$ und $z/D=50$ befinden sich dazwischen. Einige Datenpunkte haben schon das Gleichgewicht erreicht und einige weisen noch den reinen Mischungszustand auf. Die Streudiagramme zeigen, dass ODT in der Lage ist die Schlüsseigenschaften der Verbrennung zu erfassen und die experimentell ermittelten Streudiagramme von Cabra et al. [2] (hier nicht gezeigt) zu reproduzieren.

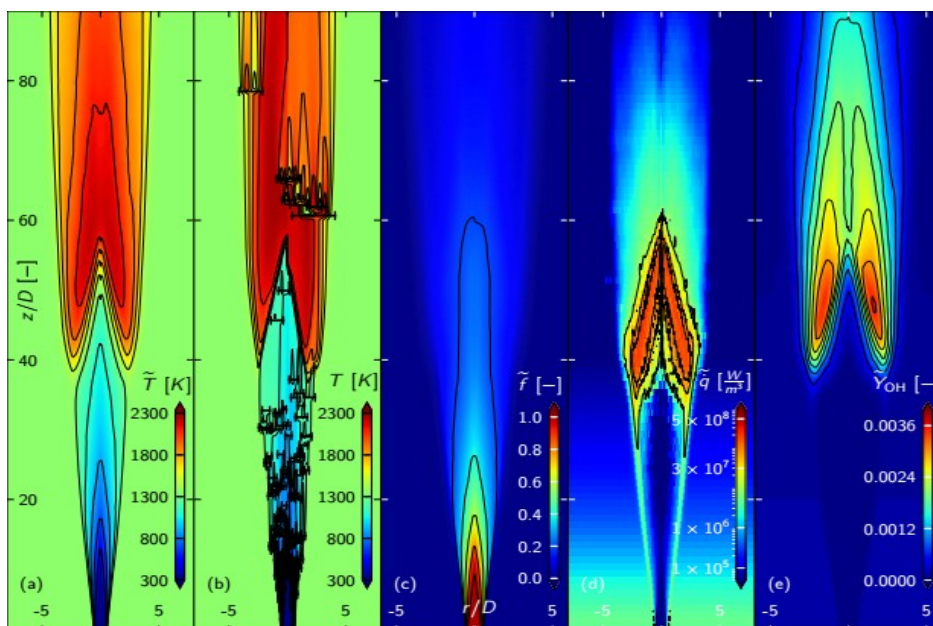


Abbildung 5. Zweidimensionale Visualisierung der Freistrah-Flamme für die Favre-gemittelte Temperatur (a), Temperatur einer Realisierung mit Wirbelereignissen (b), Favre-gemittelter

Mischungsanteil (c), Favre-gemittelte Wärmefreisetzungsrate (d) und Favre-gemittelter Massenanteil von OH (e).

Abbildung 5 zeigt zweidimensionale Darstellungen der Favre-gemittelten Temperatur (a), des Favre-gemittelten Mischungsanteils (c), der Favre-gemittelten Wärmefreisetzungsrate (d) und des Favre-gemittelten OH Massenanteils (e). In Abbildung 5 (b) ist die Temperaturverteilung einer einzelnen Realisierung dargestellt. Die schwarzen Balken visualisieren die implementierten Wirbelereignisse. 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 heißen 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-Region erkennbar. Die Temperaturzunahme setzt sich mit zunehmender Stromabwärtsposition weiter in Richtung Mitte fort. 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

Vorläufige ODT-Simulationsergebnisse für eine Methan/Luft Freistrah-Flamme umgeben von einer Strömung aus heißen Verbrennungsabgasen wurden präsentiert. Es wurde ein reduzierter und ein detaillierter Mechanismus für die Wiedergabe der Verbrennungschemie eingesetzt und mit den experimentellen Messungen von Cabra et al. verglichen. Die Abweichungen zwischen den Mechanismen fallen für die untersuchte Methan/Luft Freistrah-Flamme eher gering aus. Der Vergleich der Mittellinienprofile mit den Messdaten ergab eine gute Übereinstimmung. ODT ist in der Lage, die Favre-gemittelten Mittellinienprofile und Fluktuations-Mittellinienprofile zu reproduzieren. Bei den radialen Profilen besteht für niedrige axiale Positionen eine akzeptable Übereinstimmung mit den experimentellen Daten. Für höhere axiale Positionen treten bei der eingesetzten zeitlichen ODT-Formulierung Abweichungen auf, welche sich durch die Adevektion des Rechengebietes mit einer festen Hauptströmungsrichtung in axialer Richtung ergeben. Des Weiteren wurden Streudiagramme der Temperatur über den Mischungsanteil und des OH-Massenanteils über den Mischungsanteil dargestellt. Auch hier ist ODT in der Lage das gleiche Brennverhalten wie bei den experimentellen Messungen an unterschiedlichen axialen Positionen zu reproduzieren. Die 2D-Visualisierungen der Methan/Luft Freistrah-Flamme für die Favre-gemittelte Temperatur, den Favre-gemittelten Mischungsanteil, die Favre-gemittelte Wärmefreisetzungsrate und den Favre-gemittelten OH Massenanteil demonstrieren die Fähigkeiten von ODT bei der Bereitstellung von 2-D-Informationen aus 1-D Simulationen. Im Allgemeinen deuten die erhaltenen Ergebnisse darauf hin, dass die zylindrische ODT-Formulierung in der Lage ist, die wichtigen Verbrennungscharakteristiken der untersuchten Methan/Luft-Freistrahflamme in einer heißen Umgebungsströmung zu erfassen.

Literatur

- [1] 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.
- [2] 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.
- [3] Echekki 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.
- [4] Ferziger J. H., Perić M.: *Numerische Strömungsmechanik*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, ISBN: 978-3-540-67586-0, 2008.
- [5] 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.
- [6] Gonzalez-Juez E.D., Schmidt R.C., Kerstein A.R.: *ODTLES simulations of wall-bounded flows*, Physics of Fluids, 23, 125102, 2011.

- [7] Goodwin D.: *Cantera C++ User's Guide*, California Institute of technology, 2002.
- [8] 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.
- [9] 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.
- [10] 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.
- [11] Kerstein A.R.: *Hierarchical Parcel-Swapping Representation of Turbulent Mixing. Part 1. Formulation and Scaling Properties*, *Journal of Statistical Physics*, 153, 142-161, 2013.
- [12] 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.
- [13] 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.
- [14] 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.
- [15] 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.
- [16] 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.
- [17] 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.
- [18] 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.
- [19] 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.
- [20] 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.
- [21] Smith G.P., Golden D.M., Frenklach M., Moriarty N.W., Eiteneer B., Goldenberg M., Bowman C.T., Hanson R.K., Song S., Gardiner W.C., Lissianski V.V., Qin Z. http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/