

# Numerische Strömungssimulation der Hochdruckvergasung unter Berücksichtigung detaillierter Reaktionsmechanismen

Der Fakultät für Maschinenbau, Verfahrens- und Energietechnik  
der Technischen Universität Bergakademie Freiberg  
eingereichte

## Dissertation

zur Erlangung des akademischen Grades

Doktor-Ingenieur

Dr.-Ing.

vorgelegt

von Diplom-Mathematiker Markus Rehm  
geboren am 02.07.1979 in Erlabrunn

Freiberg, den 07.05.2010



# Vorwort und Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich bei allen bedanken, die mich im Laufe der Zeit, in der diese Arbeit am Institut für Energieverfahrenstechnik und Chemieingenieurwesen (IEC) der TU Bergakademie Freiberg entstanden ist, unterstützt haben.

Herrn Prof. Dr.-Ing. Bernd Meyer danke ich herzlich für die Betreuung der Arbeit, das entgegengebrachte Vertrauen und die stete Unterstützung in vielen Bereichen meiner Arbeit.

Für die Übernahme der Gutachtertätigkeit und die kontinuierliche Zusammenarbeit danke ich Herrn Prof. Dr. Michael Eiermann.

Bei allen Mitarbeitern des HP-POX-Teams und des IEC bedanke ich mich für die angenehme Arbeitsatmosphäre während meiner Tätigkeit auf der Reichen Zeche.

Ich danke Prof. Tommaso Lucchini (Politecnico di Milano) und Bernhard Gschai-der (ICE Strömungsforschung) für die Unterstützung und Kooperation bei der OpenFOAM-Entwicklung.

Weiter danke ich Dr. Klaus Schneider und Dr. Dieter Simon vom Universitätsrechenzentrum für die freundliche und schnelle Hilfe bei Problemen mit der Rechentechnik.

Die Arbeit wurde im Rahmen des COORAMENT-Forschungsvorhabens erstellt, einem vom Bundesministerium für Wirtschaft und Technologie (Förderkennzeichen: 0327113B) und vom Sächsischen Ministerium für Wissenschaft und Kunst (Förderkennzeichen: 12372) geförderten Gemeinschaftsprojekt der Lurgi GmbH und der TU Bergakademie Freiberg.

Von ganzem Herzen danke ich meiner Familie. Besonders danke ich meiner Frau Kamila, die mir stets zur Seite stand. Ich danke Gott für alles, was er für mich getan hat.



# Inhaltsverzeichnis

<b>Formel- und Abkürzungsverzeichnis</b>	<b>VIII</b>
<b>1 Einleitung und Aufgabenstellung</b>	<b>1</b>
1.1 Einleitung . . . . .	1
1.2 Partialoxidation gasförmiger Kohlenwasserstoffe . . . . .	1
1.2.1 Reaktionen bei der Vergasung . . . . .	2
1.2.2 Hochdruckverfahren zur Steigerung der Wirtschaftlichkeit . . . . .	2
1.3 HP-POX-Versuchsanlage . . . . .	2
1.4 Numerische Modellierung der Partialoxidation . . . . .	3
1.4.1 Simulation reaktiver Strömungen . . . . .	3
1.4.2 Vorgegangene Arbeiten . . . . .	4
1.5 Aufgabenstellung . . . . .	5
<b>2 Theoretische Grundlagen</b>	<b>6</b>
2.1 Navier-Stokes-Gleichungen . . . . .	6
2.1.1 Masseerhaltung . . . . .	7
2.1.2 Impulserhaltung . . . . .	7
2.1.3 Speziesmassenerhaltung . . . . .	8
2.1.4 Energieerhaltung . . . . .	8
2.1.5 Berechnung einer durchströmten Schüttung . . . . .	8
2.2 Physikalische Teilprozesse . . . . .	9
2.2.1 Transportvorgänge . . . . .	9
2.2.2 Turbulenz . . . . .	12
2.2.3 Thermodynamik und chemische Kinetik . . . . .	20
2.2.4 Wärmestrahlung . . . . .	25
2.3 Diskretisierung der Navier-Stokes-Gleichungen . . . . .	27
2.3.1 Die Finite-Volumen-Methode . . . . .	27
2.3.2 Behandlung der diskretisierten Gleichungen . . . . .	30
2.3.3 Die Lösung des linearen Gleichungssystems . . . . .	31
2.3.4 Rechengitter und Fehleranalyse . . . . .	32
2.3.5 Zeitdiskretisierung und stationäre Lösung . . . . .	32
2.4 Turbulente reaktive Strömungen . . . . .	35
2.5 Interaktion von chemischer Kinetik und Transport . . . . .	36
2.5.1 Regime bei nicht vorgemischten Flammen . . . . .	36
2.5.2 Modelle basierend auf dem Mischungsbruch . . . . .	37
2.5.3 Modelle basierend auf Gleichgewichtsannahmen . . . . .	38
2.5.4 Das Eddy-Dissipation-Concept . . . . .	39
2.5.5 Transported-PDF-Modell . . . . .	41

---

2.6	Mathematische Behandlung chemischer Kinetik . . . . .	42
2.6.1	Stabilisierung bei der Lösung reaktiver Strömungen . . . . .	42
2.6.2	ISAT zur schnelleren Berechnung der chemischen Kinetik . . . . .	43
2.7	Diskussion einzelner Modelle . . . . .	50
2.7.1	Analyse des EDC-Modells für Vergasungsbedingungen . . . . .	50
2.7.2	Anpassung des Verbrennungsmodells für Vergasungsbedingungen . .	53
2.7.3	Reaktionsmechanismen für die partielle Oxidation von Methan . . .	54
<b>3</b>	<b>Numerische Implementierung und Validierung</b>	<b>55</b>
3.1	Eingesetzte Software . . . . .	55
3.1.1	Fluent . . . . .	55
3.1.2	OpenFOAM . . . . .	55
3.1.3	CANTERA . . . . .	56
3.2	Entwickelte Werkzeuge . . . . .	57
3.2.1	CANTERA-Schnittstelle für OpenFOAM . . . . .	57
3.2.2	Implementation des EDC-Modells in MATLAB und OpenFOAM . .	57
3.2.3	Entwicklung eines EDC-Lösers für OpenFOAM . . . . .	57
3.2.4	Transienter Löser tracerFoam . . . . .	58
3.2.5	ISAT-Algorithmus . . . . .	58
3.3	Validierung der entwickelten Löser . . . . .	59
3.3.1	Versuchsaufbau und experimentelle Daten . . . . .	59
3.3.2	Ergebnisse für inerte Versuche (NRBB) . . . . .	61
3.3.3	Ergebnisse für die HM1-Testflamme . . . . .	65
3.4	Ergebnisse des OpenFOAM-Lösers mit ISAT-Tabellierung . . . . .	71
3.5	Optimierung und Parallelisierung des Lösers . . . . .	73
3.5.1	ODE-Löser für chemische Kinetik . . . . .	73
3.5.2	Code-Analyse und Compilerergebnisse . . . . .	73
3.5.3	Parallelisierbarkeit . . . . .	75
<b>4</b>	<b>Ergebnisse HP-POX</b>	<b>79</b>
4.1	Einführung . . . . .	79
4.1.1	Allgemeine Einstellungen . . . . .	79
4.1.2	Modellierungsfehler . . . . .	80
4.2	Gitterstudien . . . . .	81
4.2.1	OpenFOAM-Ergebnisse . . . . .	82
4.2.2	Fluent-Ergebnisse . . . . .	84
4.2.3	Zusammenfassung Gitterstudie . . . . .	86
4.3	Untersuchung des Strahlungsmodells . . . . .	86
4.4	Detached-Eddy-Simulation . . . . .	91
4.4.1	Verwendete Gitter . . . . .	91
4.4.2	Einstellungen und Berechnungen . . . . .	92
4.4.3	Ergebnisse DES . . . . .	93
4.5	Vergleich des OpenFOAM-Modells mit dem Fluent-Modell . . . . .	97
4.6	Vergleich verschiedener Modelle zur Turbulenz-Mischungs-Interaktion . . .	98
4.7	Zusammenfassung Modellvergleich . . . . .	101
4.8	Weitere Simulationsergebnisse für verschiedene Messpunkte . . . . .	102
4.8.1	Kampagne 30-60 bar . . . . .	102

---

4.8.2	Kampagne 80-100 bar . . . . .	104
4.8.3	Kampagne mit inerter Schüttung . . . . .	105
4.8.4	Instationäre Berechnungen . . . . .	107
4.8.5	Zusammenfassung zu den Simulationsergebnissen für verschiedene Kampagnen . . . . .	110
<b>5</b>	<b>Zusammenfassung</b>	<b>111</b>
	<b>Anhang</b>	<b>113</b>
	<b>Beispielprogramme</b>	<b>114</b>
1	Molekularer Transport (MATLAB) . . . . .	114
2	Gibbs-Energie (MATLAB) . . . . .	115
3	Reaktionsgeschwindigkeit (MATLAB) . . . . .	115
4	EDC-Modell (MATLAB) . . . . .	116
5	EDC-Modell mit Idealreaktoren (MATLAB) . . . . .	118
6	EDC-Modell mit Idealreaktoren (C++) . . . . .	119
	<b>Tabellen und Grafiken</b>	<b>121</b>
7	Simulations- und Messergebnisse für Gas-POX . . . . .	121
7.1	Kampagne 30-60 bar . . . . .	121
7.2	Kampagne 80-100 bar . . . . .	122
7.3	Kampagne mit inerter Schüttung . . . . .	124
8	Typische Erdgaszusammensetzung . . . . .	125
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>126</b>

# Formel- und Abkürzungsverzeichnis

$A$	Fläche in $[\text{m}^2]$
$A$	Prä-exponentieller Faktor der Arrhenius-Gleichung
$c_i$	Konzentration der Spezies $i$ in $[\text{kmol}/\text{m}^3]$
$c_p$	Spezifische Wärmekapazität $[\text{kJ}/\text{kg} \cdot \text{K}]$
$D$	Diffusionskoeffizient
$D_{ij}$	Binärer Diffusionskoeffizient
$D_i$	Diffusionskoeffizient einer Spezies $i$ in ein Gasgemisch
$E$	Aktivierungsenergie
$G$	Gibbs-Enthalpie in $[\text{J}]$
$H$	Enthalpie in $[\text{J}]$
$h_i$	Spezifische Enthalpie der Spezies $i$ in $[\text{kJ}/\text{kg}]$
$I$	Turbulenzintensität
$\dot{j}_q$	Wärmestromdichte in $[\text{J}/\text{s} \cdot \text{m}^2]$
$\dot{j}_{mv}$	Impulsstromdichte
$k$	Turbulente kinetische Energie in $[\text{m}^2/\text{s}^2]$
$M_i$	Molare Masse des Stoffes $i$ in $[\text{kg}/\text{kmol}]$
$n_e$	Anzahl der Elemente
$n_r$	Anzahl der chemischen Reaktionen
$n_s$	Anzahl der chemischen Spezies
$Q$	Wärmemenge in $[\text{J}]$
$R$	Universelle Gaskonstante in $[\text{J}/\text{kmol} \cdot \text{K}]$
$R_s$	Spezifische Gaskonstante in $[\text{J}/\text{kg} \cdot \text{K}]$
$R_{ij}$	Reynolds-Spannung
$S$	Entropie in $[\text{J}/\text{K}]$
$S_{ij}$	Scherrate
$T$	Temperatur in $[\text{K}]$
$t$	Zeit in $[\text{s}]$
$T_{ij}$	Sub-Grid Scale Spannungstensor
$U$	Innere Energie in $[\text{J}]$
$V$	Volumen in $[\text{m}^3]$
$W$	Arbeit in $[\text{J}]$
$x$	Ortskoordinate
$x_i$	Molenbruch der Spezies $i$ in $[\text{kmol}/\text{kmol}]$
$y_i^*$	Massenbruch der Spezies $i$ in den Fine-Scales
$y_i^o$	Massenbruch der Spezies $i$ im Surrounding Fluid
$y_i$	Massenbruch der Spezies $i$ in $[\text{kg}/\text{kg}]$
$Z_i$	Elementmassenbruch
$\mathbb{R}^3$	Dreidimensionaler Vektorraum der reellen Zahlen
Co	Courant-Zahl
Da	Damköhler-Zahl



---

$Pr_t$	Turbulente Prandtl-Zahl
$Re$	Reynolds-Zahl
$Re_t$	Turbulente Reynolds-Zahl
$Sc_t$	Turbulente Prandtl-Zahl
$\bar{M}$	Mittlere molare Masse in [kg/kmol]
$\Delta$	LES-Filtergröße
$\delta_{ij}$	Kronecker-Symbol
$\epsilon$	Dissipation der turbulenten kinetische Energie in [m <sup>2</sup> /s <sup>3</sup> ]
$\epsilon_{por}$	Lückenvolumen einer Schüttung
$\gamma^3$	Fine-Scale-Anteil einer Zelle
$\lambda$	Wärmeleitfähigkeitskoeffizient in [J/s · m · K]
$\mu$	Dynamische Viskosität in [kg/m · s]
$\mu_t$	Turbulente Viskosität
$\mu_{eff}$	Effektive Viskosität
$\mu_{ij}$	Massenanteile des Elementes $i$ im Stoff $j$
$\nu$	Kinematische Viskosität in [m <sup>2</sup> /s]
$\omega_i$	Stoffänderungsgeschwindigkeit der Spezies $i$ in [kmol/m <sup>3</sup> · s]
$\rho$	Dichte [kg/m <sup>3</sup> ]
$\tau_{EDC}$	Zeitskale des EDC-Modells
$\mathbb{T}$	Spannungstensor
$\xi$	Mischungsbruch
ATR	Auto Thermal Reforming
CFD	Computational Fluid Dynamics
CFL	Courant-Friedrichs-Levy
DES	Detached Eddy Simulation
DNS	Direct Numerical Simulation
ED	Eddy Dissipation Model
EDC	Eddy Dissipation Concept
FT	Fischer-Tropsch
FVM	Finite Volumen Methode
GtL	Gas to Liquid
HP POX	High Pressure Partial Oxidation
ILDm	Intrinsic Low-Dimensional Manifold
ISAT	In Situ Adaptive Tabulation
KV	Kontrollvolumen
LES	Large Eddy Simulation
MPG	Multi Purpose Gasification
ODE	Ordinary Differential Equation
PDE	Partial Differential Equation
PDF	Probability Density Function
PFR	Plug Flow Reactor
PSR	Perfectly Stirred Reactor
RANS	Reynolds Averaged Navier Stokes
RMS	Root Mean Squared
RSM	Reynolds Stress Model
SGS	Sub-Grid Scale
TVR	Turbulence Viscosity Ratio



# 1 Einleitung und Aufgabenstellung

## 1.1 Einleitung

Die zukünftige und nachhaltige Energieversorgung der Menschheit, die durch Bevölkerungswachstum und steigenden Primärenergiebedarf zusätzlich erschwert wird, stellt eine der größten globalen Herausforderungen dar. Parallel dazu findet die Diskussion um Treibhausgasemissionen und deren Folgen statt. Durch diese Entwicklungen steigt die Bedeutung einer effizienten Rohstoffnutzung weiter an. Vergasungsprozesse, bei denen kohlenstoffhaltige Ausgangsstoffe in ein vorwiegend aus Wasserstoff ( $H_2$ ) und Kohlenmonoxid (CO) bestehendes Synthesegas umgewandelt werden, stellen dabei eine grundlegende Schlüsseltechnologie dar. Sie werden auch Partialoxidationsprozesse genannt und zeichnen sich durch ein sehr flexibles Einsatzstoff- und Produktspektrum aus (siehe Higman u. Van der Burgt [26]). So stehen neben der breiten Palette an konventionellen Energieträgern (z. B. Erdgas, Erdöl, Kohle) auch Abfallprodukte (z. B. Raffinerieabfälle, Klärschlämme, Hausmüll) oder Biomasse (z. B. Holz, Stroh) als Einsatzstoffe zur Verfügung. Über das Zwischenprodukt Synthesegas kann außer chemischen Produkten (z.B. Ammoniak, Methanol, Wasserstoff) auch Energie (direkte Verbrennung des Synthesegases in einer Gasturbine) erzeugt werden. Die vorliegende Arbeit entstand im Rahmen des Forschungsprojekts COORAMENT (gefördert durch das Bundesministerium für Wirtschaft und Technologie (BMWi), Projektnummer 0327113B), welches die Erforschung von Hochdruckvergasungsprozessen (HP POX, High Pressure Partial Oxidation) flüssiger und gasförmiger Kohlenwasserstoffe zum Ziel hat. Die Simulation der nichtkatalytischen Hochdruckpartialoxidation von Erdgas steht dabei im Mittelpunkt der Arbeit.

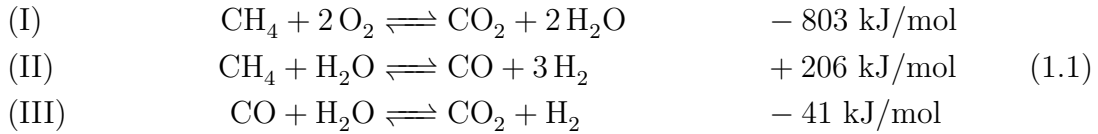
## 1.2 Partialoxidation gasförmiger Kohlenwasserstoffe

Partialoxidation ist besonders attraktiv, wenn minderwertiges Erdgas oder Erdölbegleitgase zur Verfügung stehen. Diese werden nicht selten wegen des zu aufwendigen Transports abgefackelt. So werden laut GGFR [18] weltweit jährlich  $150 \cdot 10^9 \text{ m}^3$  Erdgas ohne eine stoffliche oder energetische Nutzung abgebrannt. Das entspricht 30 % des gesamten europäischen Erdgasverbrauchs.

Über den Zwischenschritt der Vergasung und eine anschließende Synthese kann daraus jedoch beispielsweise ein Flüssigprodukt gewonnen werden, welches sich kostengünstig transportieren lässt. Dieses Vorgehen wird meist als Gas-To-Liquid (GtL) bezeichnet. Neben Methanol kommen dafür Fischer-Tropsch-Produkte (FT) in Betracht. GtL-Anlagen sind zur Zeit in Malaysia, Quatar, Trinidad und Südafrika in Betrieb [26].

### 1.2.1 Reaktionen bei der Vergasung

An dieser Stelle sollen beispielhaft die Reaktionen zur Partialoxidation von Methan als einfachste Kohlenwasserstoffverbindung genannt werden:



Die Methanverbrennung (I) läuft ab, bis der Sauerstoff aufgebraucht ist. Dabei entsteht Wärme, die für die endotherme Methanspaltungsreaktion (II) benötigt wird. Methan wird aufgespalten und es wird  $\text{H}_2$  und  $\text{CO}$  gebildet. Bei der homogenen Wassergasreaktion (III, auch Wasser-Gas-Shift-Reaktion) kann mit Hilfe von Wasserdampf das Verhältnis von  $\text{CO}$  zu  $\text{H}_2$  verändert werden.

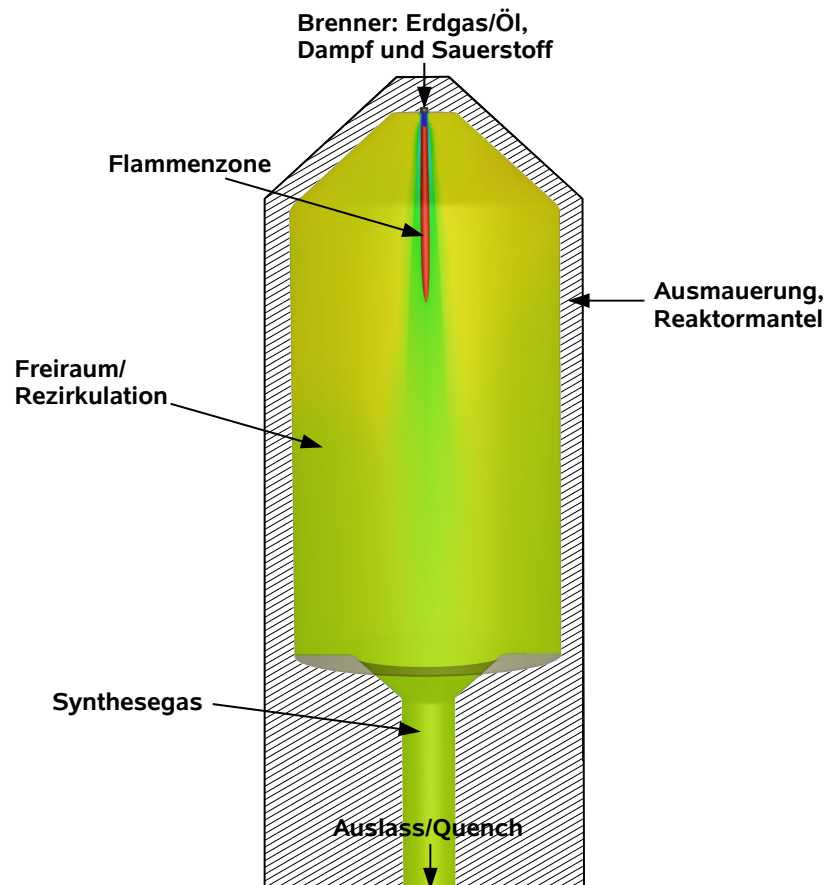
### 1.2.2 Hochdruckverfahren zur Steigerung der Wirtschaftlichkeit

Der Grund für die Nutzung von Hochdruckvergasungsverfahren liegt in der Steigerung der Wirtschaftlichkeit. Da für die meisten aus Synthesegas erzeugten Produkte hohe Drücke notwendig sind, muss es unter hohem Druck zur Verfügung gestellt werden. Im günstigsten Fall, wenn der Vergaserdruck ausreichend hoch ist, kann eine energieintensive Verdichtung entfallen. Durch eine Anhebung des Vergaserdruckes von 5 bar auf 50 bar ergibt sich beispielsweise eine Einsparung der Verdichtungsenergie von 75% [26]. Ein weiterer Vorteil der Hochdruckvergasung ist eine kompaktere Reaktorbauweise. Das stellt jedoch zusammen mit den hohen Temperaturen größere Anforderungen an die Materialien. Außerdem ist bekannt, dass bei höheren Drücken mehr  $\text{CO}_2$  und Methan entsteht. Das muss durch höhere Vergasungstemperaturen ausgeglichen werden, die durch eine höhere Sauerstoffzuspeisung erreicht werden.

## 1.3 HP-POX-Versuchsanlage

Zur Untersuchung von Hochdruckvergasungsprozessen wird am Institut für Energieverfahrenstechnik und Chemieingenieurwesen (IEC) der TU Bergakademie Freiberg eine HP-POX-Versuchsanlage betrieben. Der maximale Betriebsdruck beträgt 100 bar und die thermische Leistung 5 MW. Die schematische Darstellung ist in Abbildung 1.1 gezeigt.

Über einen Brenner wird der Vergasungsstoff (Erdgas, Heiz- oder Schweröl) und das Vergasungsmittel (Sauerstoff, Wasserdampf) in den Reaktor eingebracht. Dort mischen sich die Reaktanden und verbrennen in der Flammenzone (Oxidationsreaktionen), bis der Sauerstoff vollständig verbraucht ist. Stromabwärts und außerhalb der Flamme läuft die Spaltung und Reformierung der Kohlenwasserstoffe ab. Dabei wird Wärme aus der Flammenzone durch Strahlung und Konvektion in den Freiraum übertragen. Das mit etwa 1200-1500°C austretende heiße Synthesegas gelangt zum Wasserquench, wo es schlagartig auf etwa 200°C abgekühlt wird. Damit werden alle chemischen Reaktionen praktisch „eingefroren“. Der Reaktionsraum ist von einer feuerfesten Ausmauerung und einem druckfesten Reaktormantel umgeben.



**Abbildung 1.1:** Schematische Darstellung des HP-POX-Reaktors (nicht maßstäblich)

Die HP-POX-Anlage kann in den Betriebsarten Gas-POX, ATR<sup>1</sup> und MPG<sup>2</sup> arbeiten. Unter Gas-POX versteht man die nichtkatalytische Partialoxidation von Erdgas, ATR bezeichnet die katalytische Erdgasspaltung und MPG die Partialoxidation verschiedener flüssiger Kohlenwasserstoffe (Heiz- und Schweröl). Siehe dazu auch Tabelle 1.1. Für den ATR-Betrieb wird eine Katalysatorschüttung im unteren Teil des Reaktors eingebracht, die die Reformierungsreaktionen begünstigt.

## 1.4 Numerische Modellierung der Partialoxidation

### 1.4.1 Simulation reaktiver Strömungen

Die numerische Simulation der Partialoxidation ordnet sich in die Simulation reaktiver Strömungen ein und hat große Schnittmengen mit der Verbrennungssimulation. So kann die Flammenzone einer sauerstoffgeblasenen Vergasung mit Hilfe von Verbrennungsmodellen beschrieben werden. Hinzu kommt bei der Vergasung jedoch noch die Beschreibung der nachfolgenden langsamen Reformierungsreaktionen. Dies stellt eine besondere Herausforderung dar und wird durch herkömmliche Verbrennungsmodelle nur unzureichend berücksichtigt.

<sup>1</sup>ATR steht für Auto Thermal Reforming.

<sup>2</sup>MPG steht für Multi Purpose Gasification.

**Tabelle 1.1:** Überblick der Betriebsarten der Versuchsanlage

Modus	Bedeutung	Einsatzstoff	Druckbereich
Gas-POX	nichtkatalytische Partialoxidation	Erdgas	30-100 bar
ATR	katalytische Partialoxidation	Erdgas	30-70 bar
MPG	Multi-Purpose-Gasification	Heiz- und Schweröl	60-100 bar

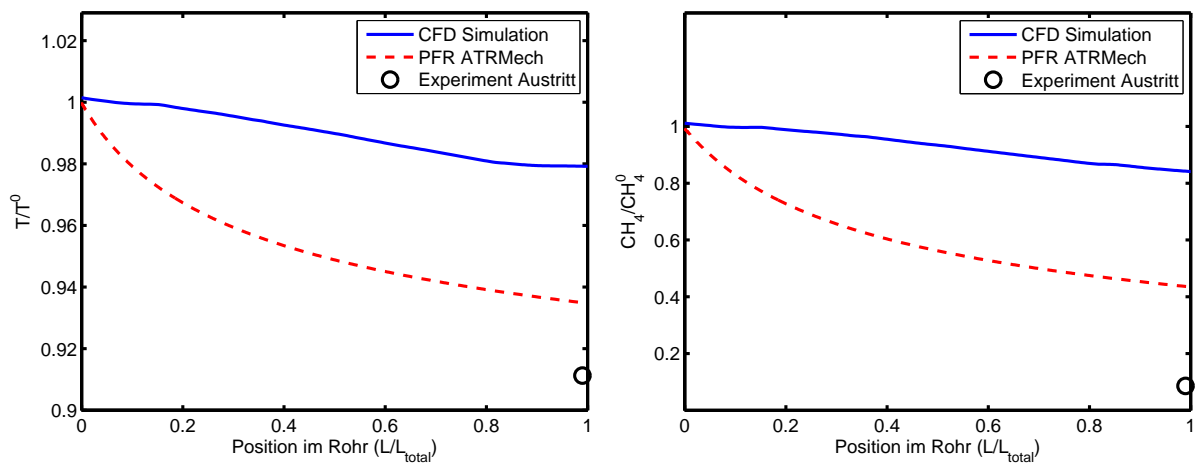
Bei der Modellierung reaktiver Strömungen spielen verschiedene wissenschaftliche Aspekte eine Rolle. Dazu gehören mathematische Beschreibungen, deren Lösung und entsprechende Fehlerabschätzungen, Kenntnisse über physikalische Prozesse wie Turbulenz oder Materialeigenschaften, aber auch Reaktionsmechanismen zur Beschreibung der chemischen Kinetik. Zur Implementierung in ein Programm zur Strömungssimulation werden Programmier-technik, geeignete Bibliotheken und eine gute Computerhardware zur Realisierung der Berechnungen benötigt. Letztendlich müssen die Ergebnisse einer ingenieurtechnischen Überprüfung auf Plausibilität und Übertragbarkeit unterzogen werden.

Wegen der großen zeitlichen und örtlichen Skalenerunterschiede tritt in den mathematischen Gleichungen eine große Steifheit auf, die dazu führt, dass der Rechenaufwand für reaktive Strömungen sehr hoch ist.

### 1.4.2 Vorgegangene Arbeiten

In der Arbeit von Zeißler [81] wurden CFD-Simulationsrechnungen (Computational Fluid Dynamics) der HP-POX-Anlage für die Betriebsarten Gas-POX und ATR durchgeführt und mit experimentellen Ergebnissen verglichen. Die Hauptkomponenten des Synthesegases wurden durch die Simulationen zufriedenstellend getroffen, jedoch zeigten sich für die Größen Methangehalt und Temperatur Abweichungen zu den Messwerten am Reaktoraustritt.

Um die Abweichungen zu veranschaulichen, wurde eine Gaszusammensetzung (mit Temperatur  $T^0$  und Methanmolenbruch  $CH_4^0$ ) auf der Reaktorachse im Reformierungsbereich des CFD-Berechnungsgebietes bis zum Reaktoraustritt beobachtet. Im CFD-Modell wurde als Verbrennungsmodell das Eddy Dissipation Concept (EDC, siehe Abschnitt 2.5.4) eingesetzt. Die selbe Gaszusammensetzung wurde unter gleichen Bedingungen in einen nichtrückvermischenden Idealreaktor (PFR, Plug-Flow-Reaktor) gegeben. Es wird ebenfalls der detaillierte Reaktionsmechanismus ATRMech verwendet. Diese Modellierungsergebnisse wurden mit den gemessenen Werten am Reaktoraustritt in den Abbildungen 1.2 verglichen. Die Ergebnisse der CFD-Simulation zeigen eine viel langsamere Temperatur- und Methanabnahme als das PFR-Modell bei perfekter Mischung. Die experimentellen Werte werden zudem durch den PFR-Ansatz besser getroffen. Diesen Umstand gilt es genauer zu untersuchen und geeignete Verbesserungen im CFD-Modell vorzunehmen. In Heinzl [24] wurde die Reduktion der chemischen Reaktionsmechanismen auf Basis mathematischer Unterraumverfahren untersucht. Dazu wurde die ILDM-Methode von Maas u. Pope [43] verwendet.



**Abbildung 1.2:** Vergleich der Ergebnisse des CFD-Modells im Reformierungsbereich mit einem rein kinetischen Ansatz und Messergebnissen am Reaktoraustritt.

## 1.5 Aufgabenstellung

Die Aufgabe der Arbeit besteht darin, die Genauigkeit bestehender Computermodelle zur Simulation der Hochdruckpartialoxidation zu verbessern und eine möglichst effiziente Berechnung zu ermöglichen. Dazu sollen die bestehenden Simulationen untersucht und nach Möglichkeit verbessert werden.

Dabei sind unter anderem folgende Teilaspekte zu beachten:

- Entwurf und Optimierung der benötigten Simulationen unter Anwendung der vorhandenen Daten zur detaillierten Kinetik,
- Untersuchung der Teilmodelle für Turbulenz, Strahlung und Verbrennung,
- Implementierung alternativer Lösungsansätze in eine Strömungssimulation,
- Validierung der angewandten Methoden anhand von Modellsimulationen und
- Durchführen von Gesamtsimulationen für verschiedene Prozessbedingungen.

## 2 Theoretische Grundlagen

Im folgenden Kapitel werden die theoretischen Grundlagen und die mathematischen Modelle der relevanten Teilprozesse und Phänomene reaktiver Gasphasenströmungen beschrieben. Die Navier-Stokes-Gleichungen (Abschnitt 2.1) bestehen aus den Erhaltungsgleichungen für Masse, Energie, Speziesmassen und Impuls.

### 2.1 Navier-Stokes-Gleichungen

Reaktive Strömungen können mit den Navier-Stokes-Gleichungen, einem Satz von Erhaltungsgleichungen, beschrieben werden. Das System partieller Differentialgleichungen (engl. Partial Differential Equation, PDE) ist stark gekoppelt und besitzt eine hohe numerische Steifheit. Die Navier-Stokes-Gleichungen sollen im folgenden für ein beliebiges Rechengebiet formuliert werden [79]. Sei  $\hat{G} \subset \mathbb{R}^3$  ein zusammenhängendes Gebiet in  $\mathbb{R}^3$  und  $\partial\hat{G}$  dessen hinreichend glatter Rand. Weiter sei die extensive Größe  $F(t)$  mit der zugehörigen Dichte  $f(x, t)$  in  $\hat{G}$  definiert und stetig differenzierbar. Mit dem Ortsvektor  $x$  und der Zeit  $t$  gilt:

$$F(t) = \int_{\hat{G}} f(x, t) dV \quad (2.1)$$

und

$$\frac{\partial F}{\partial t} = \int_{\hat{G}} \frac{\partial f(x, t)}{\partial t} dV. \quad (2.2)$$

Dabei ist  $dV$  ein infinitesimal kleines Volumenelement in  $\hat{G}$ . Die Größe  $F(t)$  erfährt Änderungen durch:

- **Fluss** (Stromdichte)  $\Phi_f$  durch ein Flächenelement  $dA$  (z.B. Diffusion, Wärmeleitung),  $\Phi_f$  beschreibt dabei die Menge  $F$ , die pro Zeit durch  $dA$  fließt,
- **Quellterm**  $q_f$  (z. B. durch chemische Reaktionen) durch im Inneren des Volumenelements entstehende oder verschwindende Anteile von  $f$  und
- **Fernwirkung**  $s_f$  (Wärmestrahlung, Gravitation) von außen in das Volumenelement.

Lokal gilt dann mit Hilfe des Gaußschen Integralsatzes für ein kleines Volumenelement und  $\hat{G} \rightarrow 0$ :

$$\underbrace{\frac{\partial f(r, t)}{\partial t}}_{\text{Dichteänderung}} + \underbrace{\text{div}\Phi}_{\text{Fluss}} = \underbrace{q}_{\text{Quellterm}} + \underbrace{s}_{\text{Fernwirkung}} \quad (2.3)$$

Für die Größen Gesamtmasse, Speziesmasse, Impuls und Energie können aus (2.3) nun Erhaltungsgleichungen abgeleitet werden.



### 2.1.1 Masseerhaltung

Für die Gleichung zur Erhaltung der Gesamtmasse  $m$  des Systems oder die Kontinuitätsgleichung ist die Stromdichte  $\Phi = \rho u$ ,  $u$  ist die Geschwindigkeit und  $\rho$  die Dichte des Fluids:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho u) = 0. \quad (2.4)$$

Für ein kartesisches Koordinatensystem, wie es in dieser Arbeit immer verwendet wird, ergibt sich

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_x)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho u_y)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho u_z)}{\partial z} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i)}{\partial x_i} = 0, \quad (2.5)$$

wobei die letzte Beziehung nach der Einsteinschen Summenkonvention gilt, nach der über doppelt auftretende Indizes summiert wird.

### 2.1.2 Impulserhaltung

Bei der Erhaltung des Impulses  $m \cdot u$  müssen mehrere Stoff- und Umgebungseigenschaften berücksichtigt werden. Die Dichte des Impulses ist  $\rho u$  und die Fernwirkung  $\rho g$ ,  $g = (0, 0, 9.81)^\top$  der Gravitationsvektor in  $\text{m/s}^2$ . Die Impulserhaltungsgleichung lautet:

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho(uu^\top)) - \operatorname{div}(\mathbb{T}) = \rho g. \quad (2.6)$$

Wobei der Divergenzoperator zeilenweise angewandt wird:

$$\operatorname{div} \begin{pmatrix} a_1 a_2 a_3 \\ b_1 b_2 b_3 \\ c_1 c_2 c_3 \end{pmatrix} := \begin{pmatrix} \operatorname{div}(a^\top) \\ \operatorname{div}(b^\top) \\ \operatorname{div}(c^\top) \end{pmatrix}. \quad (2.7)$$

Der Spannungstensor  $\mathbb{T}$  beschreibt die Oberflächenkräfte eines Volumenelements, das heißt die Impulsänderung durch Druck- und Reibungskräfte. Für Newtonsche Fluide, bei denen die Schubspannung linear von der Scherrate  $S$  abhängt, gilt [15]:

$$\mathbb{T} = - \left( p + \frac{2}{3} \mu \frac{\partial u_j}{\partial x_j} \right) \delta_{ij} + 2\mu S_{ij}, \quad (2.8)$$

$\delta_{ij}$  ist das Kronecker-Symbol

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 0, & \text{für } i \neq j \\ 1, & \text{für } i = j \end{cases} \quad (2.9)$$

und die Scherrate ist

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right). \quad (2.10)$$

Weiter ist  $p$  der hydrostatische Druck und  $\mu$  die dynamische Viskosität (siehe 2.2.1). Mit den Gleichungen (2.5) und (2.6) sind die klassischen Navier-Stokes-Gleichungen für nicht reagierende, isotherme Strömungen definiert. Die Impulserhaltungsgleichung enthält zwar keine Reaktionsterme, wird jedoch von reaktiven Strömungen erheblich beeinflusst, da sich die Viskosität und die Dichte mit der Temperatur stark ändern.

### 2.1.3 Speziesmassenerhaltung

Sei  $y_i$  der Speziesmassenbruch der Spezies  $i$ . Die Erhaltungsgleichung für die Speziesmassenerhaltung der  $i$ -ten Spezies kann mit Hilfe von  $y_i$  folgendermaßen formuliert werden [58]:

$$\frac{\partial y_i \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(y_i \rho u) + \operatorname{div} j_i = r_i, \quad (2.11)$$

$j_i$  ist die Diffusionsstromdichte (siehe (2.29) in Abschnitt 2.2.1) und

$$r_i = \omega_i M_i \quad (2.12)$$

der Quellterm für die chemischen Reaktionen. Weiter ist  $\omega_i$  die Stoffänderungsgeschwindigkeit des Stoffes  $i$  in  $[\text{kmol}/\text{m}^3 \cdot \text{s}]^1$  und  $M_i$  die molare Masse. Die Berechnung von  $r_i$  erfolgt mit der Gleichung (2.83) in Abschnitt 2.2.3.

### 2.1.4 Energieerhaltung

Die Gleichung zur Erhaltung der Energie mit Hilfe der spezifischen Enthalpie  $h$  des Gemisches in  $[\text{J}/\text{kg}]$  ist:

$$\frac{\partial \rho h}{\partial t} - \frac{\partial p}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho u h + j_q) - \mathbb{T} : \operatorname{grad} u - \operatorname{div}(p u) = q_r, \quad (2.13)$$

$j_q$  ist die Wärmestromdichte nach Gleichung (2.25),  $q_r$  der Strahlungswärmeeintrag und  $\mathbb{T}$  wie in Gleichung (2.8). Die Operation „:“ wird als doppelte Verjüngung zweier Matrizen bezeichnet und es gilt

$$A : B = \sum_i \sum_j A_{ij} B_{ji}. \quad (2.14)$$

Die Navier-Stokes-Gleichungen für reaktive Strömungen sind formuliert. Es handelt sich um ein System nichtlinearer, partieller Differentialgleichungen, das stark gekoppelt ist. Eine mathematische Klassifikation ist schwierig. So kann das System hyperbolischen, parabolischen oder elliptischen Charakter haben [15], was die Lösung zusätzlich erschwert.

### 2.1.5 Berechnung einer durchströmten Schüttung

Zur Beschreibung der Durchströmung eines homogenen porösen Mediums kann die Darcy-Gleichung (FLUENT<sup>®</sup>, 2006) verwendet werden:

$$S_i = - \left( \frac{\mu}{\alpha_{\text{por}}} + \frac{1}{2} \rho |u| C_{\text{por}} \right) u_i. \quad (2.15)$$

Die Größe  $S_i$  wird als Quellterm zur Impulserhaltungsgleichung addiert. Die Größen  $\alpha_{\text{por}}$  und  $C_{\text{por}}$  können mit Hilfe des Lückenvolumens  $\epsilon_{\text{por}}$  und des repräsentativen Partikeldurchmessers erhalten werden.

<sup>1</sup>Die Kennzeichnung „:“ soll deutlich machen, dass die Größe  $s$  im Nenner steht:  $[\text{kmol}/\text{m}^3 \cdot \text{s}] \hat{=} [\frac{\text{kmol}}{\text{m}^3 \cdot \text{s}}]$ .

<sup>1</sup>FLUENT<sup>®</sup> ist ein eingetragenes Markenzeichen von ANSYS Inc.

## 2.2 Physikalische Teilprozesse

Zunächst sollen alle für die Modellierung von reaktiven Strömungen in der Gasphase in Betracht kommenden Phänomene genannt, erläutert und deren mathematische Beschreibung vorgestellt werden.

### 2.2.1 Transportvorgänge

Molekulare Transportvorgänge wie Diffusion oder Viskosität sind dadurch gekennzeichnet, dass verschiedene physikalische Größen durch die Bewegung der Moleküle im Gas transportiert werden [79]. Die hier genannten Transportvorgänge werden auch oft als laminare Vorgänge bezeichnet, weil sie in stark turbulenten Strömungen in den Hintergrund treten und die turbulenten Transportvorgänge dominieren. Weitere Erläuterungen zu turbulenten Transportvorgängen befinden sich in Abschnitt 2.4.

#### Viskosität

Das Newtonsche Schubspannungsgesetz für die Viskosität eines eindimensionalen Systems besagt, dass die Impulsstromdichte  $j_{mv}$  proportional zum Geschwindigkeitsgradienten ist [79].

$$j_{mv} = \frac{\partial(mu)}{\partial tA} = -\mu \frac{\partial u}{\partial x} \quad (2.16)$$

Es ist  $A$  die Fläche, die zur Verfügung steht,  $x$  die Ortskoordinate,  $u$  die Geschwindigkeit,  $m$  die Masse des Fluids und  $\mu$  der Viskositätskoeffizient, wobei  $\mu$  meist als dynamische Viskosität bezeichnet wird. Entsprechend kann die kinematische Viskosität  $\nu$  mit  $\nu = \mu/\rho$  berechnet werden. Der Viskositätskoeffizient eines reinen Stoffes  $\mu_i$  kann für ein ideales Gas mit Hilfe der kinetischen Gastheorie [2] erhalten werden. Für Stoffgemische müssen Mittelungsansätze über die Stoffzusammensetzung erfolgen. Die Wilke-Formel für die Mischviskosität ergibt sich nach Kee u. a. [31] aus

$$\mu = \sum_{i=1}^{n_s} \frac{\mu_i x_i}{\sum_j \Phi_{i,j} x_j}, \quad (2.17)$$

mit

$$\Phi_{k,j} = \frac{\left[ 1 + \sqrt{\left( \frac{\mu_k}{\mu_j} \sqrt{\frac{M_j}{M_k}} \right)^2} \right]}{\sqrt{8} \sqrt{1 + M_k/M_j}}, \quad (2.18)$$

$M_i$  und  $x_i$  sind die molare Masse und der Molenbruch einer Spezies  $i$  und  $n_s$  ist die Anzahl der Spezies. Laut Fluent [16] kann auch die Mischungsformel

$$\mu = \sum_{i=1}^{n_s} \left( \frac{x_i \mu_i}{\sum_j x_j \Phi_{i,j}} \right), \quad \text{oder} \quad (2.19)$$

$$\mu = \sum_{i=1}^{n_s} y_i \mu_i \quad (2.20)$$

genutzt werden, wobei  $y_i$  der Massenbruch der  $i$ -ten Spezies ist.

## Wärmeleitfähigkeit

Der Wärme- oder Energietransport, bei dem eine Wärmemenge  $Q$  durch Molekularbewegung seinen Ortsvektor ändert, wird empirisch durch das Fouriersche Wärmeleitungsgesetz beschrieben:

$$j_q = \frac{\partial Q}{\partial t A} = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x}. \quad (2.21)$$

Dabei ist  $j_q$  die Wärmestromdichte,  $\lambda$  der Wärmeleitfähigkeitskoeffizient und  $T$  die Temperatur. Der Wärmeleitfähigkeitskoeffizient für ein ideales Gas kann wieder mit Hilfe der kinetischen Gastheorie erhalten werden. Wie bei der Viskosität existiert nach Kee u. a. [31] für Molenbrüche  $x_i$  und die Wärmeleitfähigkeitskoeffizienten der reinen Stoffe  $\lambda_i$  folgender Mischungsansatz:

$$\lambda = 0.5 \left( \sum_{i=1}^{n_s} x_i \lambda_i + \frac{1}{\sum_i x_i / \lambda_i} \right). \quad (2.22)$$

Laut Fluent [16] kann die Mischviskosität berechnet werden durch:

$$\lambda = \sum_{i=1}^{n_s} \left( \frac{x_i \lambda_i}{\sum_{j=1}^{n_s} y_j \Phi_{i,j}} \right) \text{ oder} \quad (2.23)$$

$$\lambda = \sum_{i=1}^{n_s} y_i \lambda_i. \quad (2.24)$$

Dabei ist  $\Phi_{i,j}$  wie in Gleichung (2.18). Für den Wärmetransport in einem Gasgemisch muss neben dem Anteil aus dem Fourierschen Gesetz (2.21) auch der Beitrag durch Diffusion von Spezies unterschiedlicher Enthalpie berücksichtigt werden:

$$j_q = -\lambda \text{ grad } T + \sum_{i=1}^{n_s} h_i j_i, \quad (2.25)$$

$h_i$  ist die spezifische Enthalpie der Spezies  $i$  und  $j_i$  die Massenstromdichte nach Gleichung (2.27). Das Verhältnis von Impulstransport zu Wärmeleitung wird durch die Prandtl-Zahl charakterisiert:

$$\text{Pr} = \frac{\mu c_p}{\lambda}. \quad (2.26)$$

## Diffusion

Der Massentransport auf Grund von Konzentrationsunterschieden der Spezies ergibt sich empirisch gemäß dem Fickschen Gesetz. Die Massenstromdichte wird proportional zum Konzentrationsgradienten angenommen:

$$j = \frac{\partial m}{\partial t A} = -D \rho \frac{\partial c}{\partial x}, \quad (2.27)$$

hier ist  $c$  die Konzentration und  $D$  der Diffusionskoeffizient. Für die Diffusion zweier Spezies in einem idealen Gas kann ein so genannter binärer Diffusionskoeffizient  $D_{ij}$  mit Hilfe der kinetischen Gastheorie berechnet werden. Nach dem Stefan-Gesetz folgt dann für die Diffusion einer Spezies  $i$  in ein Gasgemisch eine Abschätzung für den Diffusionskoeffizienten  $D_i$  nach:

$$D_i = \frac{1 - y_i}{\sum_{j,j \neq i} (x_j / D_{ij})}. \quad (2.28)$$

Ficks Gesetz sollte jedoch nicht für Flammenberechnungen benutzt werden, da es streng genommen nur für Gemische mit zwei Spezies Gültigkeit besitzt. Statt dessen ist die Hirschfelder- und Curtiss-Formel, die häufig für die Berechnung von Verbrennungsprozessen herangezogen wird, eine gute Annäherung [79]:

$$j_i = -D_i \rho \frac{y_i}{x_i} \text{grad } x_i. \quad (2.29)$$

Oft werden die Diffusionskoeffizienten auch mit Hilfe der Lewis-Zahl

$$Le_i = \frac{\lambda}{D_i \rho c_p}, \quad (2.30)$$

also aus dem Verhältnis von der Geschwindigkeit der Wärmeleitung und der Speziesdiffusion, bestimmt. Die Lewis-Zahl ändert sich in einer Flammenfront nur minimal und kann daher nach Poinsoot u. Veynante [58] in guter Näherung als konstant angenommen werden. Als weitere wichtige Kennzahl sei die Schmidt-Zahl genannt, die das Verhältnis von Impulstransport und Diffusionstransport beschreibt

$$Sc_i = \frac{\nu}{D_i} = Pr Le_i. \quad (2.31)$$

Effekte wie Thermodiffusion, Druckdiffusion oder der Dufour-Effekt (Wärmetransport bedingt durch Konzentrationsunterschiede) werden in den im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Simulationen vernachlässigt. Für weiterführende Informationen wird der Leser auf die entsprechende Literatur verwiesen [2, 31, 79].

### Beispiel molekularer Transport

In Abbildung 2.1 ist das Ergebnis eines numerischen Beispiels mit Transportdaten des GRI-Mech 3.0 [70] dargestellt. In reinen Wasserstoff wurde bei konstantem Druck ( $p = 10^5$  Pa) und fester Temperatur (1000 K) Argon eingebracht, bis das Gemisch aus reinem Argon bestand. Die Veränderung der Transporteigenschaften Viskosität, Wärmeleitfähigkeit und Diffusion wurde dabei aufgenommen. Der Code für das Beispiel ist im Anhang 1 zu finden.

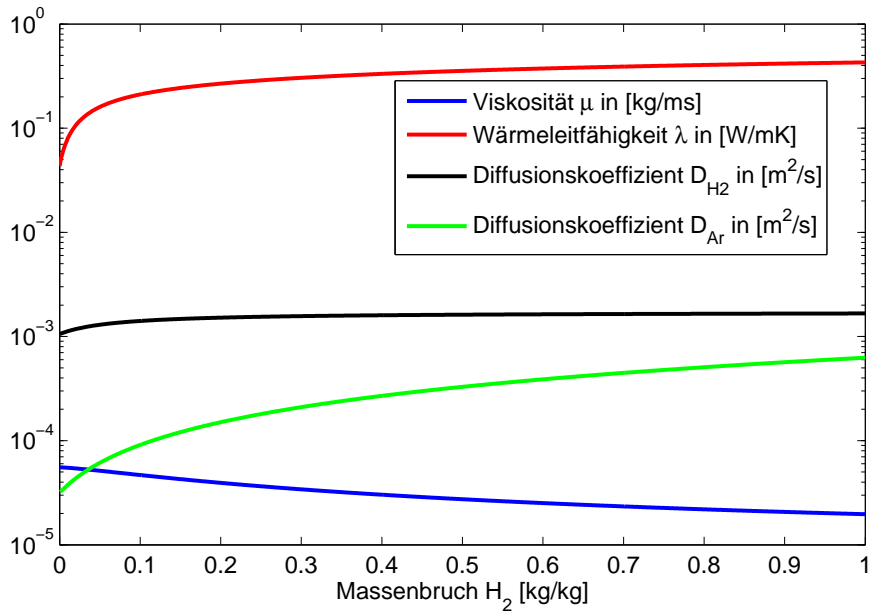


Abbildung 2.1: H<sub>2</sub>-Ar-Mischung und resultierende molare Transporteigenschaften

## 2.2.2 Turbulenz

Bei Strömungen mit hohen Geschwindigkeiten treten große zeitliche und örtliche Fluktuationen der Geschwindigkeitskomponenten auf, die als Turbulenz bezeichnet werden. Diese Fluktuationen finden in einem breiten Spektrum von Längen- und Zeitskalen, in einer schwer vorhersagbaren Struktur und empfindlichen Abhängigkeiten von Rand- und Anfangsbedingungen statt. Die turbulenten Längenskalen heißen integrales Längenmaß ( $l_t$ ) für die größten Wirbel im System und Kolmogorov-Längenmaß ( $\eta_k$ ) für die kleinsten Wirbel. Turbulenz ist ein dreidimensionales und unstetiges Phänomen und zudem hängen die restlichen Größen des Systems von der Turbulenz stark ab. Man spricht beispielsweise von einer vollturbulenten Rohrströmung, wenn die Reynolds-Zahl (Re) 2300 übersteigt. Die Reynolds-Zahl definiert das Verhältnis zwischen destabilisierender Trägheitskraft und dämpfender Viskositätskraft [79]

$$\text{Re} = \frac{\rho u l_0}{\mu}, \quad (2.32)$$

$l_0$  ist die charakteristische Länge und  $u$  die Geschwindigkeit. Ein weiteres Maß für die Stärke der Turbulenz ist die so genannte Turbulenzintensität  $I$ . Sie kann von einer Schwankungsgröße  $f$  folgendermaßen bestimmt werden:

$$I = \sqrt{\overline{f'^2} / \bar{f}}, \quad (2.33)$$

$\bar{f}$  ist der Mittelwert von  $f$  und  $f'$  die Schwankung ( $f' = f - \bar{f}$ ). Der Zähler von Gleichung (2.33) wird auch als RMS-Wert von  $f$  (Root Mean Squared) bezeichnet. Für die Geschwindigkeit  $u$  folgt

$$I = \frac{\sqrt{\frac{1}{3} (\overline{u_x'^2} + \overline{u_y'^2} + \overline{u_z'^2})}}{\bar{u}} = \frac{\sqrt{\frac{2}{3} k}}{\bar{u}}. \quad (2.34)$$

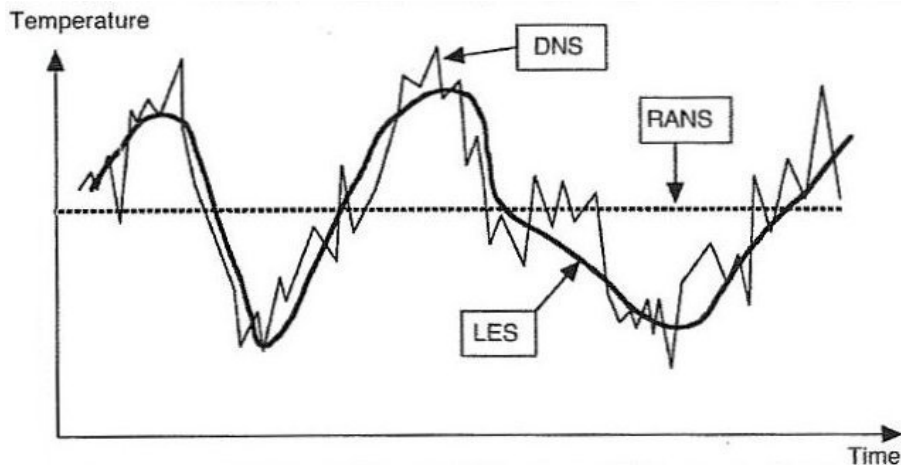
Die letzte Beziehung gilt mit der Definition der turbulenten kinetischen Energie

$$k = \frac{1}{2} \left( \overline{u_x'^2} + \overline{u_y'^2} + \overline{u_z'^2} \right). \quad (2.35)$$

Die großen Wirbel zerfallen zu immer kleineren und geben dabei Energie ab. Für homogene und isotrope Turbulenz wird dieser Vorgang durch die Kolmogorov-Wirbelkaskade erklärt. Der Energiefluss von einer Längenskala zur nächsten wird konstant angenommen und durch  $\epsilon$  beschrieben. Unterhalb der Größe von  $\eta_k$  existieren keine turbulenten Strukturen mehr, da sich die molekulare Diffusion dort schneller als der turbulente Transport abspielt. Das Verhältnis von größten zu kleinsten Wirbeln wird durch die turbulente Reynolds-Zahl

$$\text{Re}_t^{\frac{3}{4}} = \frac{l_t}{\eta_k} = \frac{u'^3/\epsilon}{(\nu^3/\epsilon)^{\frac{1}{4}}} \quad (2.36)$$

definiert.



**Abbildung 2.2:** Detail der Auflösungsgüte der Temperatur mit verschiedenen Ansätzen zur Turbulenzberechnung, aus [58]. Mit freundlicher Genehmigung des Verlages.

Die Ausdehnung

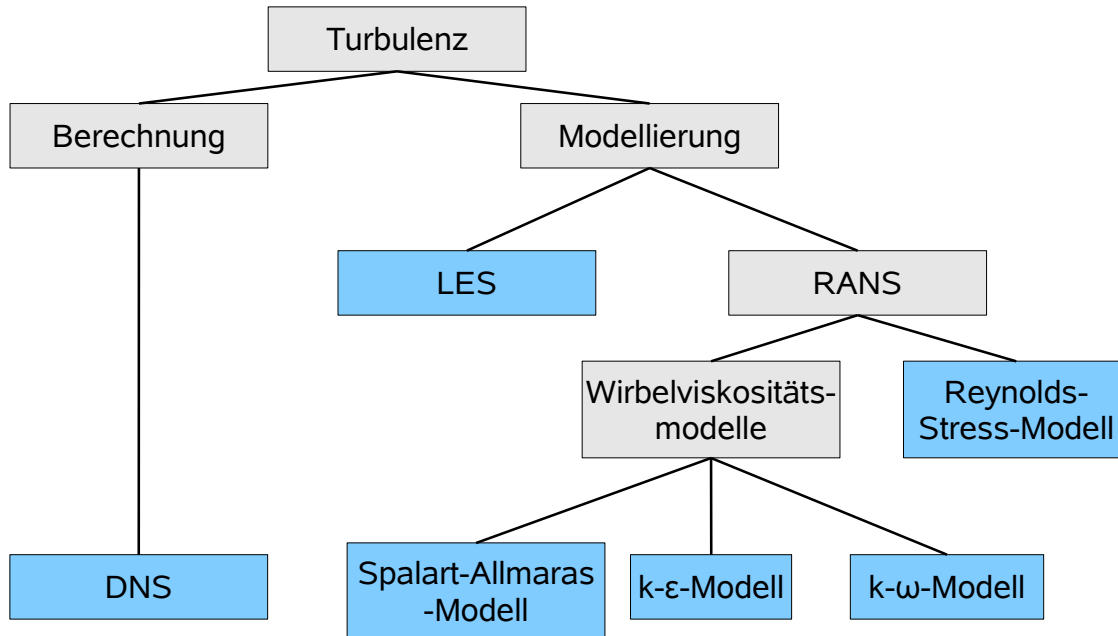
$$\eta_k = \left( \frac{\nu^3}{\epsilon} \right)^{\frac{1}{4}} \quad (2.37)$$

ist die Kolmogorov-Längenskala und ihr wird die Kolmogorov-Zeitskala

$$\tau_\eta = \left( \frac{\nu}{\epsilon} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (2.38)$$

zugeordnet. Sie beschreiben die kleinsten Wirbelstrukturen. Theoretisch wäre es möglich, alle, auch diese feinsten Strukturen, in den Berechnungen mit Hilfe der Navier-Stokes-Gleichungen aufzulösen. Dann spricht man von einer Direct Numerical Simulation (DNS). Dies erfordert jedoch einen immensen Rechenaufwand, da bei einer hohen räumlichen Auflösung wegen des CFL-Kriteriums (siehe Abschnitt 2.3.5) auch eine extrem feine Zeitdiskretisierung notwendig ist. Dies ist für praktische Rechnungen komplexer Systeme auf absehbare Zeit nicht realisierbar. Auch eine Large-Eddy-Simulation (LES), wo nur die großen

Wirbel berechnet und die kleinen mit Hilfe von Modellen erfasst werden, scheitert oft noch an den zu großen Rechenzeiten. Praktisch werden meist gemittelte Navier-Stokes-Gleichungen gelöst und man beschreibt den Einfluss der Fluktuationen durch separate (zu modellierende) Terme. Dieses Vorgehen bezeichnet man als Reynolds-Averaged Navier-Stokes (RANS). In Abbildung 2.2 wird die Auflösungsgüte der verschiedenen Herangehensweisen zur Abbildung der Turbulenz gegenübergestellt und Abbildung 2.3 liefert eine Übersicht der wichtigsten Turbulenzmodelle und deren Einordnung. Um für RANS-Simulationen die Turbulenzterme



**Abbildung 2.3:** Übersicht und Einordnung einiger Turbulenzmodelle

aus den gemittelten zu erhalten, kann man grundsätzlich zwei Wege gehen: Der erste ist die so genannte Boussinesq-Annahme, bei der davon ausgegangen wird, dass die durch die Turbulenz induzierte Wirbelviskosität linear vom Gradienten der mittleren Geschwindigkeit abhängt. Modelle, die diese Annahme benutzen, sind unter anderem die  $k$ - $\epsilon$ -Modelle. Ein zweiter Weg für die Schließung der RANS-Gleichungen ist das Reynolds-Stress-Modell.

### Gemittelte Erhaltungsgleichungen (RANS)

Bei den gemittelten Navier-Stokes-Gleichungen wird eine fluktuierende Größe als Summe aus deren Mittelwert und der Schwankung um diese betrachtet, so zum Beispiel die Geschwindigkeit:

$$u_i = \bar{u}_i + u'_i \quad (2.39)$$

mit den Richtungskomponenten  $i = 1, 2, 3$  ( $\hat{=}$  Richtungen  $x, y, z$ ). Dies gilt auch für andere Größen, wie Temperatur, Druck etc. Die Mittelung kann über einen Zeitabschnitt, örtlich, aber auch Favre-gemittelt (dichtegewichtet) sein. Favre-Mittelung (gekennzeichnet mit  $\tilde{u}_i$ ) wird meist für Strömungen mit variabler Dichte eingesetzt und es gilt

$$\bar{\rho \tilde{u}_i} = \overline{\rho u_i} \quad (2.40)$$



nach [79]. Die Reynolds-Averaged-Navier-Stokes-Gleichungen (RANS) sind dann [16]

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\bar{\rho} \tilde{u}_i) = 0 \quad (2.41)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho} \tilde{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j) = & -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \mu \left( \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_j} \right) \right] \\ & + \frac{\partial}{\partial x_j} \underbrace{(-\overline{\rho u'_i u'_j})}_{:=R_{ij}}. \end{aligned} \quad (2.42)$$

$\delta_{ij}$  ist das Kronecker-Symbol. Im Folgenden wird die Bezeichnung für die Mittelwerte aus (2.39) ohne Überstriche oder Tilde benutzt:  $u_j := \bar{u}_j$ .

Der Term  $R_{ij}$  in der Gleichung (2.42) heißt Reynolds-Spannung und geht auf Osborne Reynolds (1842-1912) zurück, der auch als erster die gemittelten Gleichungen aus den Navier-Stokes-Gleichungen ableitete. Die Berechnung der Reynolds-Spannung stellt auch heute noch eine Herausforderung dar. Sie kann nicht ohne Weiteres aus den gemittelten Größen erhalten werden (Schließungsproblem der RANS). In den folgenden beiden Abschnitten sollen die verbreitetsten Ansätze zur Modellierung dieser Terme erläutert werden.

### Boussinesq-Hypothese und die $k$ - $\epsilon$ -Modelle

Bei der Boussinesq-Hypothese, auch Gradientenansatz oder Wirbelviskositätsansatz genannt, besteht die Annahme darin, dass die Schwankung einer Größe proportional zum Gradienten des Mittelwertes der betrachteten Größe ist. Die Modellierung der Reynolds-Spannung erfolgt durch

$$R_{ij} = -\overline{\rho u'_i u'_j} = \mu_t \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \rho k \delta_{ij} \quad (2.43)$$

Hierbei bezeichnen die Größen  $k$  die turbulente kinetische Energie (zu verstehen als Energie pro Masseinheit,  $k = [\frac{m^2}{s^2}]$ ),  $\epsilon$  deren Dissipationsgeschwindigkeit (Energie pro Masse und Zeit,  $\epsilon = [\frac{m^2}{s^3}]$ ) und  $\mu_t$  die neu eingeführte turbulente Viskosität. Diese Annahme ist nicht immer gültig, denn laut [50] wurde auch schon turbulenter Transport entgegen dem Gradienten beobachtet. Außerdem wird angenommen, dass  $\mu_t$  isotrop und skalar ist, was auch nicht in allen Fällen gut erfüllt ist. Der Vorteil der Boussinesq-Hypothese ist der relativ geringe Rechenaufwand, um  $\mu_t$  zu erhalten. Bei den verbreiteten  $k$ - $\epsilon$ -Modellen werden zum Beispiel zwei zusätzliche Erhaltungsgleichungen für den Transport der Größen turbulente kinetische Energie  $k$  und deren Dissipationsgeschwindigkeit  $\epsilon$  eingeführt.

### Standard- $k$ - $\epsilon$ -Modell

Für die Modellierung von  $k$  und  $\epsilon$  gelten die Gleichungen [30]:

$$\frac{\partial \rho k}{\partial t} + \frac{\partial \rho k u_j}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + P_k + P_b - \rho \epsilon \quad (2.44)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho \epsilon}{\partial t} + \frac{\partial \rho \epsilon u_j}{\partial x_j} = & \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \right) \frac{\partial \epsilon}{\partial x_j} \right] + C_{1\epsilon} \frac{\epsilon}{k} (P_k + C_{3\epsilon} P_b) \\ & - C_{2\epsilon} \rho \frac{\epsilon^2}{k}. \end{aligned} \quad (2.45)$$

$P_k, P_b$  sind Beiträge durch die Gradienten von Durchschnittsgeschwindigkeit und Auftrieb. Kompressionseffekte werden vernachlässigt. Es gilt:

$$P_k = -\overline{\rho u'_i u'_j} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = R_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \quad (2.46)$$

nach Glg. (2.43) und

$$P_b = -g_i \frac{\mu_t}{\rho \text{Pr}_t} \frac{\partial p}{\partial x_i} \quad (2.47)$$

mit  $g$  dem Gravitationsvektor und  $\text{Pr}_t$  der turbulenten Prandtl-Zahl (siehe auch Gleichung (2.121)). Die turbulente Viskosität wird durch

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{k^2}{\epsilon} \quad (2.48)$$

erhalten. Somit gibt es fünf Konstanten im Standard- $k$ - $\epsilon$ -Modell, die laut [37] die folgenden Standardwerte besitzen:

$$C_{1\epsilon} = 1.44, \quad C_{2\epsilon} = 1.92, \quad C_{3\epsilon} = -0.33, \quad C_\mu = 0.09, \quad \sigma_k = 1.0, \quad \sigma_\epsilon = 1.3. \quad (2.49)$$

Erhalten werden sie durch Vergleiche einfacher Modelle mit Experimenten.

### Realizable- $k$ - $\epsilon$ -Modell

Bekannte Probleme beim Standard- $k$ - $\epsilon$ -Modell sind bei rotationssymmetrischen Düsenströmungen vorhanden, wo die Turbulenz oft überschätzt wird. Um dieser als Round-Jet-Anomalie bezeichneten Ungenauigkeit zu begegnen, schlug Pope [59] eine Anpassung der konstanten Parameter des Standard- $k$ - $\epsilon$ -Modells vor. Später wurde unter anderem von Shih u. a. [69] eine Variation, das so genannte Realizable- $k$ - $\epsilon$ -Modell, vorgestellt. Dieses Modell zeigt bei rotationssymmetrischen Modellen bessere Ergebnisse als das Standard- $k$ - $\epsilon$ -Modell. Die Gleichung (2.45) wurde folgendermaßen verändert:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho \epsilon}{\partial t} + \frac{\partial \rho \epsilon u_j}{\partial x_j} &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \right) \frac{\partial \epsilon}{\partial x_j} \right] + \rho C_1 S \epsilon - \rho C_2 \frac{\epsilon^2}{k + \sqrt{\nu \epsilon}} \\ &+ C_{\epsilon 1} \frac{\epsilon}{k} C_{3\epsilon} P_b. \end{aligned} \quad (2.50)$$

Bei der Modellierung der turbulenten Viskosität nach (2.48) ist nun der Parameter  $C_\mu$  aus (2.48) eine Funktion der Scherrate  $S$  und einiger Rotationsparameter. Die Konstante  $\sigma_k$  erfährt keine Veränderung zum Standardmodell, da auch Gleichung (2.44) nicht verändert wird.

Der Parameter  $C_1$  hängt laut [69] von der mittleren Schubspannung  $\eta_S$  ab. Aus dem Verhalten in Wandnähe schließt man:

$$C_1 = \max \left( 0.43, \frac{\eta_S}{5 + \eta_S} \right), \quad \eta_S = \frac{k \sqrt{2 S_{ij} S_{ij}}}{\epsilon} \quad (2.51)$$

Der Wert für  $C_2$  ist 1.9. Die Größe  $\sigma_\epsilon$  wird in Wandnähe laut [69] für die Standardwerte  $C_2 = 1.9$ ,  $C_\mu = 0.09$  und  $C_1 = 0.43$  mit

$$\sigma_\epsilon = \frac{\kappa^2}{C_2 \sqrt{C_\mu - C_1}} = 1.2 \quad (2.52)$$

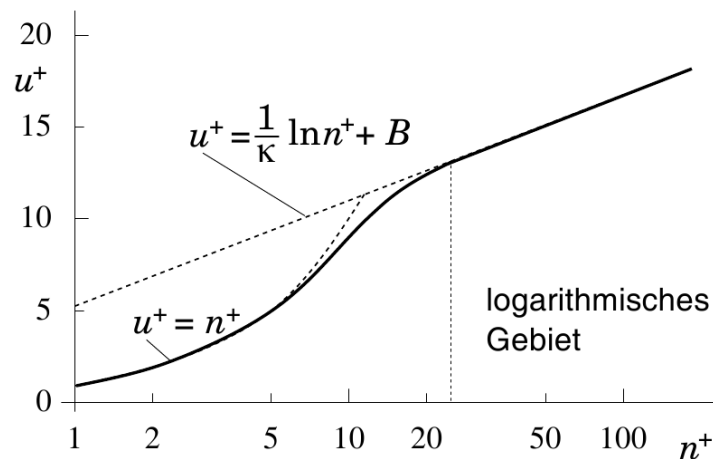
bestimmt. Hierbei ist  $\kappa = 0.41$  die Karman-Konstante.

## Reynolds-Stress-Modelle

Im Reynolds-Stress-Modell (RSM) wird eine Transportgleichung für jede Komponente des Reynolds-Spannungstensors abgeleitet, um den Transport der Reynolds-Spannung auszudrücken. So ist es theoretisch möglich, den Transport exakt zu berechnen. Jedoch gibt es auch in dieser Gleichung wieder viele unbekannte Größen, so dass einzelne Terme modelliert werden müssen. Die Transportgleichung und deren Schließung soll an dieser Stelle nicht erläutert werden. Dies ist beispielsweise in Davidson [11] beschrieben. Das RSM benötigt mehr Rechenaufwand, denn statt der zwei Gleichungen des  $k$ - $\epsilon$ -Modells werden fünf (2D-Fall) benötigt. Es eignet sich jedoch besser, wenn nichtisotrope Einflüsse von Bedeutung sind. In der turbulenten Grenzschicht treten anisotrope Phänomene auf, die bei isotropen Modellen (die auf der Boussinesq-Annahme beruhen) durch spezielle Wandfunktionen berücksichtigt werden. Problematischer sind für letztere Modelle gekrümmte Oberflächen, verwirbelte Strömungen, starke Beschleunigungen und Verzögerungen. Diese können vom RSM selektiv verstärkt oder gedämpft werden, da die jeweiligen Terme einzeln modelliert werden. Ein weiterer Nachteil neben der erhöhten Rechenzeit sind numerische Instabilitäten, die häufiger beobachtet wurden und zur Divergenz der Simulation führen können.

## Modellierung wandnaher Bereiche im RANS-Kontext

Bei der Berechnung von Strömungen in unmittelbarer Wandnähe treten numerische Probleme infolge großer Reynolds-Zahlen und sehr hoher Geschwindigkeitsgradienten auf. Im Wandbereich haben Scherschichten aber ein nahezu allgemeingültiges Verhalten, weshalb die Berechnung dort mit Hilfe von Wandfunktionen auf einem weitaus größeren Gitter realisiert werden kann [15]. Abbildung 2.4 zeigt das Geschwindigkeitsprofil nahe der Wand in einer turbulenten Strömung. Die Größe  $u^+$  beschreibt die dimensionslose Geschwindigkeit



**Abbildung 2.4:** Schematische Darstellung der turbulenten Grenzschicht aus Ferziger u. Peric [15] und der Geschwindigkeit in Abhängigkeit des dimensionslosen Wandabstands. Die durchgezogene Linie beschreibt experimentelle Messwerte.

$$u^+ = \frac{\overline{u}_t}{u_\tau} = \frac{1}{\kappa} \ln n^+ + B, \quad (2.53)$$

$\bar{u}_t$  ist die mittlere Geschwindigkeit parallel zur Wand und  $B \approx 5.5$  ein empirischer Wert. Die Wandreibungsgeschwindigkeit ist definiert durch

$$u_\tau = \sqrt{\frac{|\tau_W|}{\rho}} \quad (2.54)$$

mit

$$\tau_W = \frac{\rho C_\mu^{1/2} \kappa \sqrt{k} \bar{u}_t}{\ln(n^+ E)}. \quad (2.55)$$

Hier ist  $\kappa = 0.41$  die Karman-Konstante,  $C_\mu$  wie in (2.49),  $E = e^{\kappa B}$ . Der dimensionslose Wandabstand  $n^+$  (auch häufig mit  $y^+$  bezeichnet) ist

$$n^+ = \frac{\rho u_\tau s}{\mu} \quad (2.56)$$

und  $s$  ist hier der tatsächliche Wandabstand.

Laut dem universellen Wandgesetz (siehe gestrichelte Linien in Abbildung 2.4) wird  $u^+$  mit Hilfe der Gleichungen (2.53) und (2.56) erhalten. Es ist eine Annäherung an experimentelle Werte. Der wandnahe Bereich kann damit berechnet und muss nicht mehr aufgelöst werden. Der erste Gitterpunkt sollte etwa im Bereich  $30 < n^+ < 300$  liegen [16]. Das erlaubt deutlich größere Gitter und somit schnellere Rechnungen.

## Large Eddy Simulation

Nur für sehr wenige, zumeist akademische Problemstellungen lassen sich DNS-Rechnungen, bei denen alle turbulenten Strukturen berechnet (simuliert) werden, durchführen. Im RANS-Kontext wird Turbulenz immer als isotropisch und homogen angenommen und komplett modelliert. Einen Zwischenweg stellt LES dar: eine direkte Berechnung erfolgt nur für große Wirbel, kleine Wirbel werden modelliert. Dazu erfolgt eine Filterung der Größen. Es ist bekannt, dass kleinere Wirbelstrukturen eine höhere Isotropie und Ähnlichkeit aufweisen, also leichter zu modellieren sind. Herkömmliche Turbulenzmodelle sollten für diese Wirbel auch bessere Ergebnisse liefern [25]. Auf eine zu berechnende Größe  $f$  wird ein Filter  $G(x, t)$  angewandt. Der Tiefpassfilter bewirkt, dass der Einfluss kleiner Turbulenzgrößen aus den Navier-Stokes-Gleichungen eliminiert wird. Diese werden durch so genannte sub-grid-scale-Turbulenzmodelle (SGS) berücksichtigt. Folgende Integration ist für die Berechnung der gefilterten Größe  $\bar{f}$  nötig:

$$\bar{f}(x, t) = \int f(x - x', t) G(x') dx'. \quad (2.57)$$

Die Filterfunktion  $G$  kann eine Gauss- oder Rechteckfunktion in Abhängigkeit der Filtergröße  $\Delta$  oder ein Filter für die Wellenlänge sein, so dass alle Wirbel, die eine bestimmte Wellenzahl überschreiten, abgeschnitten werden [61]. Die Filtergröße  $\Delta$  ist meist in der Größenordnung der Gitterweite. Für eine inkompressible Strömung ergibt sich folgende Grobstrukturgleichung für die Navier-Stokes-Gleichungen [15]:

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_i} = 0 \quad (2.58)$$

$$\frac{\partial \rho \bar{u}_i}{\partial t} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \mu \left( \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \right] + \frac{\partial T_{ij}}{\partial x_j}. \quad (2.59)$$

Die Größe  $T_{ij}$  bezeichnet den durch Filterung entstandenen Feinstruktur-Spannungstensor (SGS Reynolds stress):

$$T_{ij} = \overline{u_i u_j} - \overline{u_i} \overline{u_j}. \quad (2.60)$$

Dieser Feinstruktur-Spannungstensor wird nun mit Hilfe eines Wirbelviskositätsmodells ähnlich RANS modelliert:

$$T_{ij} - \frac{1}{3} T_{kk} \delta_{ij} = \mu_t \left( \frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{u_j}}{\partial x_i} \right) = 2\mu_t \overline{S_{ij}}, \quad (2.61)$$

$\overline{S_{ij}}$  ist die Scherrate. Einer der bekanntesten Vertreter der LES-SGS-Turbulenzmodelle ist das Smagorinsky-Modell. Die SGS-Wirbelviskosität wird mit

$$\mu_t = C_s^2 \rho \Delta^2 |\overline{S}| \quad (2.62)$$

berechnet,  $|\overline{S}| = (\overline{S_{ij} S_{ij}})^{\frac{1}{2}}$  und  $C_s \approx 0.2$  ist eine Modellkonstante. Das aufgelöste Geschwindigkeitsfeld ist laut Pope [62] ein extrem komplexes Objekt: „Es ist ein dreidimensionales, zeitabhängiges Zufalls-Vektorfeld, welches fundamentale Abhängigkeiten von dem künstlichen (nicht physikalischen) Parameter  $\Delta$  besitzt und oft zusätzlich von der Gitterweite und der verwendeten numerischen Methode abhängt.“ Unter Experten wird deshalb über die Gültigkeit von LES-Berechnungen oder über LES als Methode diskutiert. Turbulenz ist dadurch gekennzeichnet, dass eine Interaktion von Wirbeln aus dem kontinuierlichen Bereich aller Längenskalen stattfindet. Das heißt: es gibt keine Skalentrennung [62]. Sind zudem große Teile der kinetischen Energie nicht aufgelöst, so ist die Turbulenzentstehung nicht mehr korrekt erfasst, während die Dissipation überschätzt wird [17]. Um ein Kriterium für die Gültigkeit von LES-Berechnungen zu schaffen, wurden Qualitätsmaße für die LES-Auflösungsgüte definiert [7, 62]. Das von Pope formulierte Kriterium ist ein Maß für den Anteil der turbulenten kinetischen Energie, die in den aufgelösten Wirbeln enthalten ist:

$$M(x, t) = \frac{K(x, t)}{K(x, t) + k(x, t)}, \quad (2.63)$$

$K(x, t)$  ist die in den Grobstrukturen enthaltene Energie

$$K(x, t) = \frac{1}{2} ((u_x - \overline{u_x})^2 + (u_y - \overline{u_y})^2 + (u_z - \overline{u_z})^2) \quad (2.64)$$

und  $k(x, t)$  die turbulente kinetische Energie der Feinstrukturen (SGS- $k$ , siehe (2.35)),  $\overline{u}$  ist hier die über die Zeit gemittelte Geschwindigkeit. Das Pope-Kriterium besagt nun, dass mindestens 80% der turbulenten kinetischen Energie aufgelöst sein, also  $M(x, t) > 0.8$  erfüllt sein muss. Dieses Kriterium erfordert häufig, dass LES-Berechnungen verfeinert und wiederholt werden müssen. Gerade für praktische Problemstellungen ist das oft nicht machbar.

### Detached-Eddy-Simulation

Detached-Eddy-Simulation (DES) wird auch häufig als Hybrid-LES-RANS-Simulation bezeichnet. Wie der Name andeutet, werden die abgelösten (englisch = detached) Grobstrukturwirbel wie bei LES simuliert, während die wandnahen Wirbel modelliert werden.

Der Grund dafür liegt in dem hohen Verfeinerungsbedarf in Richtung Wand, der bei LES große und komplexe Strömungsprobleme nur schwer möglich macht. Turbulenzmodellierung wird daher einerseits für die SGS-Viskosität im LES-Gebiet und andererseits für die turbulente Viskosität im RANS-Gebiet benötigt. Ursprünglich schlug Spalart u. a. [72] hierzu das Spalart-Allmaras-DES-Modell vor. Man kann aber ebenfalls Modelle wie das Realizable- $k$ - $\epsilon$ -Modell oder das nicht näher erläuterte  $k$ - $\omega$ -SST-Modell von Menter u. a. [49] einsetzen.

### 2.2.3 Thermodynamik und chemische Kinetik

Die chemische Kinetik kann die Zustände in der Strömung ganz entscheidend beeinflussen. Bei Verbrennungsreaktionen werden große Mengen Wärme in sehr kurzer Zeit frei. Die korrekte Beschreibung dieser Vorgänge stellt eine besondere Herausforderung für die mathematische Beschreibung und numerische Berechnung dar.

Nach dem ersten Hauptsatz der Thermodynamik ist die Änderung der inneren Energie  $dU$  eines Systems gleich der Summe aus zugeführter Wärme  $dQ$  und durch das System verrichteter Arbeit  $dW$  [79]

$$dU = dQ + dW. \quad (2.65)$$

An dieser Stelle ist lediglich die Volumenarbeit  $p dV$  von Interesse. Dabei ist

$$dU = dQ - p dV, \quad (2.66)$$

$p$  ist der Druck. Die Enthalpie ist definiert durch

$$H = U + pV, \quad (2.67)$$

und deren Änderung

$$dH = dU + p dV + V dp, \quad (2.68)$$

mit (2.65) folgt

$$dH = dQ + V dp. \quad (2.69)$$

Oft ist es günstig, die oben genannten Größen massennormiert als spezifische Größen anzugeben. Dies soll mit Kleinbuchstaben erfolgen. So gilt zum Beispiel für die spezifische Enthalpie

$$h = \frac{H}{m}. \quad (2.70)$$

Eine weitere wichtige Größe ist die Gibbs-Energie oder freie Enthalpie  $G$  [31]:

$$G = H - TS \quad (2.71)$$

und  $S$  ist die Entropie. Für isotherme Bedingungen gilt

$$dG = dH - T dS, \quad (2.72)$$

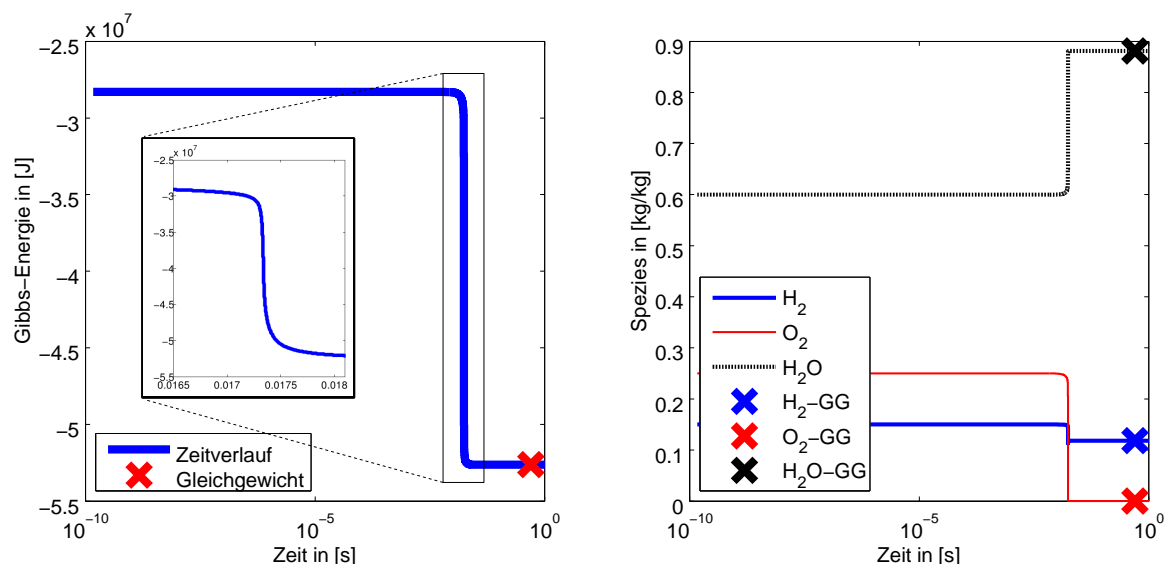
$dG$  ist die Änderung der Gibbs-Energie während der Reaktion. Die Gibbs-Energie (wie auch die Entropie und die Enthalpie) lässt sich für ein durch Druck, Temperatur und Spezieszusammensetzung thermodynamisch eindeutig definiertes Gemisch über die Summe der Gibbs-Energien der Reaktionsprodukte minus der Reaktionsedukte errechnen. Die Reaktionsrichtung kann mit Hilfe der Änderung der Gibbs-Energie  $dG$  bestimmt werden:

- $dG < 0$ : Die Vorwärtsreaktion findet statt.
- $dG > 0$ : Die Rückwärtsreaktion läuft ab.
- $dG = 0$ : Das thermodynamische Gleichgewicht ist erreicht und die Reaktion läuft nicht weiter.

Der Betrag der Änderung der Gibbs-Energie wird beim Ablaufen chemischer Reaktionen immer kleiner, oder anders gesagt: die Gibbs-Energie strebt immer dem Minimum zu. Jedoch sagt die Größe nichts über die Geschwindigkeit der ablaufenden Reaktion aus. Dies ist nur mit kinetischen Ausdrücken möglich.

### Beispiel Gibbs-Energie

In Abbildung 2.5 ist der zeitliche Verlauf der Gibbs-Energie und einiger beteiligter Spezies in einem isobaren, adiabaten Reaktionssystem dargestellt. Die Anfangsbedingungen sind  $y_{H_2} = 0,2$ ,  $y_{O_2} = 0,2$  und  $y_{H_2O} = 0,6$ ,  $T = 1600$  K und  $p = 10^5$  Pa. Man sieht, dass  $G$  immer weiter abnimmt, bis sein Minimum, das der Gibbs-Energie im thermodynamischen Gleichgewichtspunkt entspricht, erreicht ist. Die thermodynamischen und kinetischen Daten stammen vom Reaktionsmechanismus GRI-Mech 3.0 [70]. Der Code zum Beispiel befindet sich im Anhang 2.



**Abbildung 2.5:** Verlauf der Gibbs-Energie und der beteiligten Spezies bei der Wasserstoffverbrennung in einem adiabaten Reaktionssystem und der entsprechende Gleichgewichtspunkt (GG).

## Tabellierung der thermodynamischen Daten

Für sehr viele Stoffe existieren thermodynamische Datenbanken. So zum Beispiel das NIST-Webbook [9]. Bei der Verwendung detaillierter Reaktionsmechanismen werden neben den kinetischen Daten oft auch die zugehörigen thermodynamischen Daten mitgeliefert (siehe zum Beispiel Smith u. a. [70]). Die durch numerische Anpassung an Messdaten gewonnenen Daten werden in Polynomform hinterlegt. Die bekanntesten Vertreter sind die NASA-Polynome [80]. Dabei handelt es sich um Polynome 4. Grades<sup>2</sup> mit der Temperatur als unabhängiger Variable. Abhängigkeiten der Größen voneinander führen dazu, dass pro Spezies nur sieben Koeffizienten für drei Größen benötigt werden. Die Temperaturintervalle, auf denen die Daten interpoliert werden, sind [200K, 1000K] und [1000K, 3000K]. Folgende Größen sind in Polynomform abgespeichert:

- die spezifische Wärmekapazität  $c_p(T)$  in [J/kg · K],
- die spezifische Enthalpie  $h(T)$  in [J/kg] und
- die spezifische Entropie  $s(T)$  in [J/kg · K].

Es gilt

$$\frac{c_p(T)}{R_s} = a_0 + a_1T + a_2T^2 + a_3T^3 + a_4T^4 \quad (2.73)$$

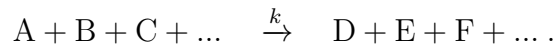
$$\frac{h(T)}{R_s T} = a_0 + \frac{a_1}{2}T + \frac{a_2}{3}T^2 + \frac{a_3}{4}T^3 + \frac{a_4}{5}T^4 \quad (2.74)$$

$$\frac{s(T)}{R_s} = a_0 \ln T + a_1T + \frac{a_2}{2}T^2 + \frac{a_3}{3}T^3 + \frac{a_4}{4}T^4 + a_6. \quad (2.75)$$

Die Daten beziehen sich jeweils auf Normbedingungen, in diesem Fall  $p_0 = 10^5$  Pa und  $T_0 = 298.15$  K. Die Größe  $R_s = R/\bar{M}$  ist die spezifische Gaskonstante mit der universellen Gaskonstante  $R = 8314$  J/kmol · K und der mittleren molaren Masse  $\bar{M}$  in kg/kmol. Für abweichende Drücke werden die Größen entsprechend dem Idealgasgesetz korrigiert.

## Chemische Kinetik

Das empirische Zeitgesetz für eine chemische Reaktionen



beschreibt die Reaktionsgeschwindigkeit, mit der ein Stoff gebildet oder verbraucht wird [79]:

$$\frac{d[c_A]}{dt} = -k[c_A]^{(a_1)}[c_B]^{(a_2)}[c_C]^{(a_3)} \dots, \quad (2.76)$$

$k$  ist der Geschwindigkeitskoeffizient,  $a_i$  die Reaktionsordnung,  $c_i$  die Konzentration des Stoffes  $i$  in [kmol/m<sup>3</sup>].

<sup>2</sup>Die neueste Version der NASA-Polynome ist 6. Grades, die meisten Daten liegen jedoch noch im alten Standard vor.



Handelt es sich um Reaktionen, wie sie makroskopisch beobachtet werden, so spricht man von Bruttoreaktionen, zum Beispiel



Für Bruttoreaktionen lassen sich die Geschwindigkeitsausdrücke für die Reaktion schwer allgemeingültig bestimmen. Sie können sogar nicht-ganzzahlige Werte annehmen. Zudem sind sie stark von den Reaktionsbedingungen abhängig und nur unter identischen Randbedingungen gültig.

### Detaillierte Reaktionsmechanismen

Tatsächlich läuft die in Gleichung (2.77) beschriebene Reaktion auf molekularer Ebene über zahlreiche Radikalreaktionen ab. Sind diese bekannt, so lassen sich durch Kombination relevanter Elementarreaktionen die Bruttoreaktionen gut abbilden. Dies ist jedoch sehr aufwendig und für komplizierte Kohlenwasserstoffe mit erheblichem Rechenaufwand verbunden. Einfache  $\text{H}_2\text{-O}_2$ -Mechanismen haben noch 8 Spezies und 27 Elementarreaktionen, während Mechanismen für die Methanverbrennung schon 53 Spezies und 325 Reaktionen umfassen [70]. Für eine Elementarreaktion  $r$ , an der  $n_s$  verschiedene Stoffe  $A_i$  beteiligt sind, gilt



$\nu^{(a)}$  und  $\nu^{(p)}$  sind die stöchiometrischen Koeffizienten der Ausgangsstoffe und der Produkte. Das Zeitgesetz der Bildung der Spezies  $i$  in der Reaktion  $r$  lautet

$$\left( \frac{dc_i}{dt} \right)_r = k_r \left( \nu_{ri}^{(p)} - \nu_{ri}^{(a)} \right) \prod_{s=1}^{n_s} c_s^{\nu_{rs}^{(a)}}. \quad (2.79)$$

Zum Beispiel für Elementarreaktionen nach Warnatz u. a. [79]:

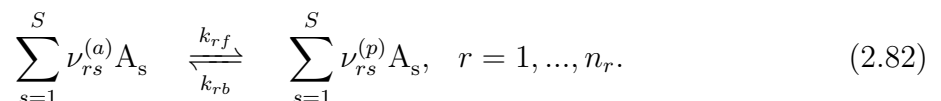


$$\begin{aligned} \frac{dc_{\text{H}}}{dt} &= -k_1 c_{\text{H}} c_{\text{O}_2} & \frac{dc_{\text{O}_2}}{dt} &= -k_1 c_{\text{H}} c_{\text{O}_2} \\ \frac{dc_{\text{OH}}}{dt} &= k_1 c_{\text{H}} c_{\text{O}_2} & \frac{dc_{\text{O}}}{dt} &= k_1 c_{\text{H}} c_{\text{O}_2} \end{aligned}$$



$$\begin{aligned} \frac{dc_{\text{OH}}}{dt} &= -2k_2 (c_{\text{OH}})^2 & \frac{dc_{\text{H}_2\text{O}}}{dt} &= k_2 (c_{\text{OH}})^2 \\ \frac{dc_{\text{O}}}{dt} &= k_2 (c_{\text{OH}})^2. \end{aligned}$$

Für einen Mechanismus mit  $n_r$  Reaktionen und  $n_s$  Stoffen gilt dann



Hier sind  $k_{rf}$  und  $k_{rb}$  die Geschwindigkeitskoeffizienten der Hin- und Rückreaktion. Die Stoffänderungsgeschwindigkeit  $\omega_i$  der Spezies  $i$  ergibt sich durch Summation von (2.82) [31]:

$$\omega_i := \left( \frac{dc_i}{dt} \right) = \sum_{r=1}^{n_r} \left( \nu_{ri}^{(p)} - \nu_{ri}^{(a)} \right) \left( k_{rf} \prod_{s=1}^{n_s} c_s^{\nu_{rs}^{(a)}} - k_{rb} \prod_{s=1}^{n_s} c_s^{\nu_{rs}^{(p)}} \right). \quad (2.83)$$

Für alle Spezies  $i$  ergibt (2.83) ein steifes System gewöhnlicher Differentialgleichungen (engl. Ordinary Differential Equation, ODE) Die Reaktionsgeschwindigkeit des Stoffes  $i$  ist  $r_i = \omega_i M_i$  mit der molaren Masse  $M_i$ .

Mit Hilfe thermodynamischer Daten kann man  $k_{rb}$  aus  $k_{rf}$  erhalten:

$$k_{rb} = \frac{k_{rf}}{K_{cr}}. \quad (2.84)$$

Die Größe  $K_{cr}$  wird Gleichgewichtskonstante genannt und berechnet sich durch

$$K_{cr} = K_{pr} \left( \frac{p_0}{RT} \right)^{\left( \nu_r^{(p)} - \nu_r^{(a)} \right)}. \quad (2.85)$$

Dabei sind  $\nu_r^{(p)}$  und  $\nu_r^{(a)}$  die Summen der Stöchiometrikoeffizienten der Produkte und Ausgangsstoffe aus Reaktion  $r$ . Nun kann  $K_{pr}$  durch

$$K_{pr} = \exp \left( \frac{\Delta S_r^\circ}{R} - \frac{\Delta H_r^\circ}{RT} \right) \quad (2.86)$$

gewonnen werden, wobei  $\Delta H_r^\circ$  die Reaktionsenthalpie der  $r$ -ten Reaktion ist. Sie kann mit Hilfe der tabellierten Werte aus (2.74) und (2.75) durch Summation über die an der Reaktion  $r$  beteiligten Stoffe berechnet werden:

$$\Delta H_r^\circ = \sum_{s=1}^{n_s} \nu_{rs} h_s^\circ. \quad (2.87)$$

Ist  $\Delta H_r^\circ < 0$ , so ist die Reaktion  $r$  exotherm, und ist  $\Delta H_r^\circ > 0$ , so ist sie endotherm. Die Entropieänderung wird äquivalent berechnet

$$\Delta S_r^\circ = \sum_{s=1}^{n_s} \nu_{rs} s_s^\circ. \quad (2.88)$$

### Berechnung des Geschwindigkeitskoeffizienten $k$

Der Geschwindigkeitskoeffizient, der zur Berechnung der Reaktionsgeschwindigkeit in (2.83) benötigt wird, hängt extrem stark und nichtlinear von der Temperatur ab. Diese exponentielle Abhängigkeit nach dem Arrhenius-Ansatz erschwert die Berechnung reaktiver Strömungen sehr stark. Zum einen kann  $\omega_i$  wegen der starken Schwankungen nicht ohne weiteres in eine CFD-Rechnung eingesetzt werden und man benötigt spezielle Techniken zur numerischen Behandlung von Verbrennungsmodellen (siehe Abschnitte 2.5 und 2.6) und zum anderen ist die Berechnung der Exponentialfunktion eine anspruchsvolle numerische Operation, die sehr rechenzeitintensiv ist. Der einfache Arrhenius-Ansatz lautet

$$k = A \exp \left( \frac{-E_a}{RT} \right) \quad (2.89)$$

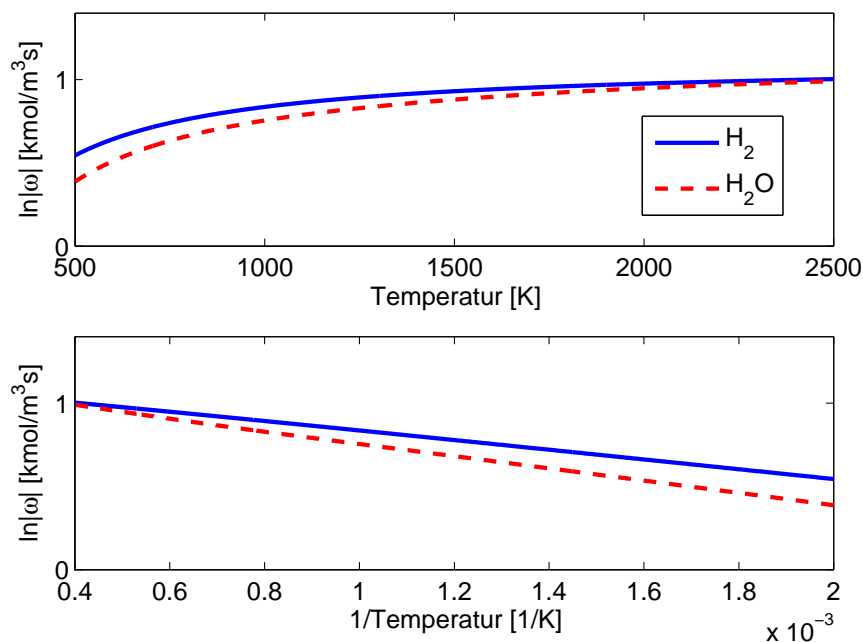
mit  $E_a$  Aktivierungsenergie und  $A$  präexponentieller Faktor. Der erweiterte Arrhenius-Ansatz, der heute fast ausschließlich Verwendung findet, lautet

$$k = AT^n \exp\left(\frac{-E_a}{RT}\right). \quad (2.90)$$

Weiter ist  $k$  abhängig vom Druck. Dies wird in den detaillierten Reaktionsmechanismen durch bestimmte Reaktionstypen (Fall-off-Reaktionen), wie Lindemann-Reaktionen oder Troe-Reaktionen, berücksichtigt [20].

### Beispiel Reaktionsgeschwindigkeit

In Abbildung 2.6 ist die Abhängigkeit der Stoffänderungsgeschwindigkeit  $\omega_i$  aus (2.83) von der Temperatur dargestellt. Es handelt sich um ein Gemisch mit  $y_{H_2} = 0.2$ ,  $y_{O_2} = 0.2$  und  $y_{H_2O} = 0.6$  bei  $p = 10^5$  Pa. Die Temperatur wurde zwischen 500 K und 2500 K variiert. Das Beispiel wurde mit den kinetischen Daten des GRI-3.0 nach [70] berechnet und befindet sich im Anhang 3. Bei den gegebenen Bedingungen läuft vorwiegend Dissoziation ab, so dass die Stoffänderungsgeschwindigkeit für die betrachteten Stoffe  $H_2$  und  $H_2O$  negativ ist und ihr Betrag mit steigender Temperatur zunimmt.



**Abbildung 2.6:** Abhängigkeit des Betrags der Stoffänderungsgeschwindigkeit  $\omega_i$  von der Temperatur, jeweils halblogarithmische Darstellung. Unten ist der Arrhenius-Plot dargestellt.

## 2.2.4 Wärmestrahlung

Ein weiterer wichtiger physikalischer Vorgang, der bei Hochtemperaturprozessen eine Rolle spielt, ist die Strahlung. Sie ist neben der Konvektion die wichtigste Größe, die zum Wärmetransport beiträgt. In der vorliegenden Arbeit soll sich auf die für die Anwendung interessanten Fälle von Wärmestrahlung konzentriert werden: Es wird angenommen, dass

keine Rußpartikel existieren und das Gas im Reaktionsraum eine hohe optische Dichte besitzt. Beide Annahmen sind gerechtfertigt, da bei den Betriebsvarianten Gas-POX und ATR kein Ruß beobachtet wurde und die optische Dichte mit steigendem Druck und steigender Temperatur ebenfalls zunimmt. Zur Berücksichtigung der Strahlung in der Simulation wird auf verbreitete Standardmodelle zurück gegriffen, da eine direkte Untersuchung des Strahlungsverhaltens auf Grund der mangelnden optischen und messtechnischen Zugänglichkeit des Reaktors bisher nicht möglich war. Es handelt sich dabei um das P-1-Modell und das Rosseland-Modell. Der Quellterm für die Strahlung in Gleichung (2.13) wird beim P-1-Modell folgendermaßen berücksichtigt:

$$q_r = aG - 4a\hat{n}^2\sigma T^4. \quad (2.91)$$

Dabei ist  $a$  der Absorptionskoeffizient,  $G$  die einfallende Strahlung,  $\hat{n}$  der Brechungsindex und  $\sigma$  die Boltzmann-Konstante. Für  $G$  wird eine Erhaltungsgleichung gelöst. Beim Rosseland-Modell wird die Strahlung wie bei einem Wärmeleitungsproblem angenommen mit

$$q = q_c + q_r = -(k + k_r) \nabla T, \quad (2.92)$$

die Größe  $k_r = 16\sigma n^2 T^2$  ist als radiative Wärmeleitfähigkeit interpretierbar. Das Rosseland-Modell ist nur für optisch dichte Medien geeignet.

Zur Bestimmung des Absorptionskoeffizienten  $a$  können entweder konstante Werte abgeschätzt oder Submodelle benutzt werden, die in Abhängigkeit der Zusammensetzung, des Drucks und der Temperatur die Größe liefern. In Verbrennungsprozessen wird dazu häufig das Weighted-Sum-of-Gray-Gases-Modells (WSGGM) von [71] verwendet. Der Absorptionskoeffizient berechnet sich dann nach [16] durch

$$a = \frac{-\ln(1 - \epsilon)}{s}. \quad (2.93)$$

Die Emmissivität berechnet sich nach

$$\epsilon = \sum_{i=0}^I a_{\epsilon,i}(T) (1 - e^{-\kappa_i p s}), \quad (2.94)$$

mit den Wichtungsfaktoren  $a_{\epsilon,i}$  eines fiktiven  $i$ -ten grauen Gases,  $\kappa_i$  dessen Absorptionskoeffizient,  $p$  die Summe der Partialdrücke und  $s$  die Weglänge des Strahls. Zur Bestimmung von  $s$  kann die Zellgröße verwendet werden („WSGGM-cell-based“) oder durch den Löser mit Hilfe von Gebietseigenschaften ermittelt werden („WSGGM-domain-based“).

Nachdem nun alle relevanten physikalischen Teilmodelle besprochen wurden, soll nun das Vorgehen bei der Berechnung der Navier-Stokes-Gleichungen erklärt werden.

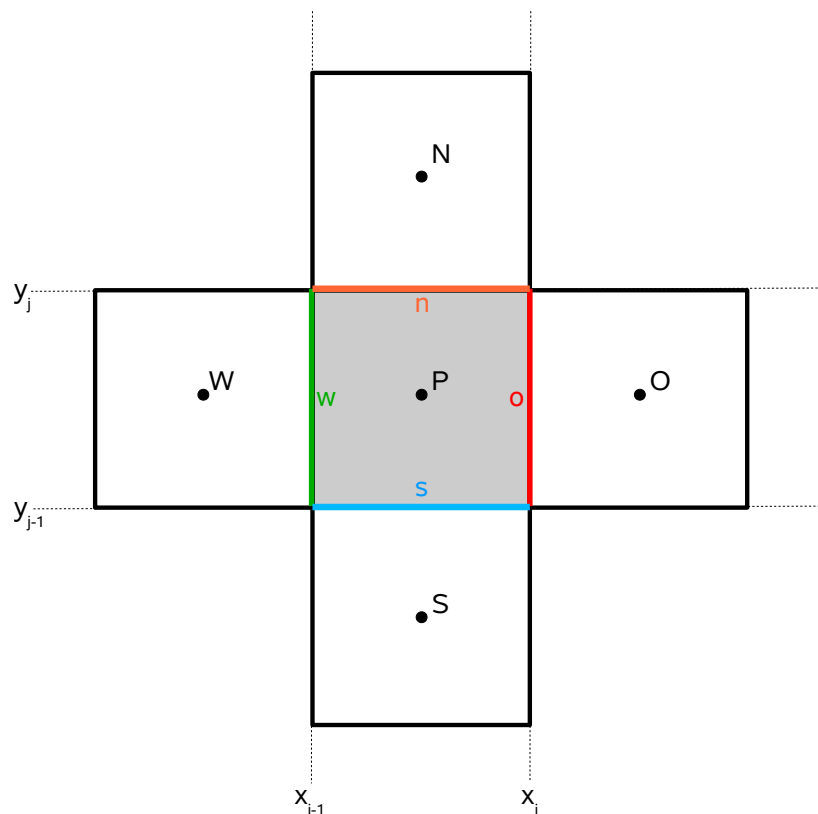
## 2.3 Diskretisierung der Navier-Stokes-Gleichungen

Bei den Navier-Stokes-Gleichungen handelt es sich um ein stark gekoppeltes System partieller Differentialgleichungen. Bei der Lösung wird nun folgendermaßen vorgegangen:

- Diskretisierung und Linearisierung der einzelnen Gleichungen auf einem Rechengitter - aus den partiellen Differentialgleichungen wird ein lineares Gleichungssystem erzeugt.
- Getrennte Lösung der einzelnen Gleichungen einer Erhaltungsgröße (innere Iteration zur Lösung des algebraischen Gleichungssystems mit einem linearen Matrixlöser) und iterative Lösungsberechnung des Gesamtsystems (äußere Iteration mit Hilfe eines so genannten „Segregated Solver“ durch einen Algorithmus zur Druck-Geschwindigkeits-Kopplung, zum Beispiel SIMPLE, siehe Abschnitt 2.3.5).

### 2.3.1 Die Finite-Volumen-Methode

Zur Ortsdiskretisierung der Navier-Stokes-Gleichungen soll die Finite-Volumen-Methode (FVM) eingesetzt werden. Das Verfahren wird in Ferziger u. Peric [15] sehr detailliert beschrieben. Zunächst soll von einem uniformen, kartesischen Gitter wie in Abbildung 2.7 ausgegangen werden. Die Zelle mit Punkt  $P$  als Mittelpunkt sei ein Kontrollvolumen (KV)



**Abbildung 2.7:** Schematische Darstellung der Gitterpunkte in einem kartesischen Gitter und die Zellen mit angrenzenden Nachbarn seien  $N$ ,  $O$ ,  $S$  und  $W$ . Ausgehend von der

Integralform für eine stationäre Erhaltungsgleichung der Größe  $\Phi$  erhält man:

$$\int_A \rho \phi u \cdot \vec{n} \, dA = \int_A \gamma \text{grad} \phi \cdot \vec{n} \, dA + \int_G q_\phi \, dG. \quad (2.95)$$

Hier ist  $\vec{n}$  der Normalenvektor auf der Fläche  $A$ . Es müssen nun Näherungsformeln für

- Oberflächenintegrale  $\int_A$ ,
- Volumenintegrale  $\int_G$ ,
- Ableitungen und
- die Interpolation nicht verfügbarer Werte

für ein Kontrollvolumen gefunden werden. Diese Approximationen können verschiedene Genauigkeitseigenschaften haben: Man spricht von einem Verhalten erster Ordnung, wenn bei halber Gitterweite der Fehler ebenfalls halbiert wird. Bei zweiter Ordnung nimmt der Fehler quadratisch mit der Gitterweite ab und entspricht  $\frac{1}{4}$  oder weniger des ursprünglichen Fehlers.

### Oberflächenintegrale

Der Fluss einer Größe  $\phi$  in oder aus einem Kontrollvolumen entspricht der Summe der Oberflächenintegrale der Begrenzungsflächen  $A_k$  (n, o, s, w in Abbildung 2.7)

$$\int_A f \, dA = \sum_k \int_{A_k} f \, dA, \quad (2.96)$$

wobei  $f$  sowohl der konvektive ( $\rho \phi u \cdot \vec{n}$ ) oder diffusive Anteil ( $\gamma \text{grad} \phi \cdot \vec{n}$ ) aus Gleichung (2.95) sein kann.

Nun wird eine zweistufige Approximation durchgeführt: Zuerst wird das Oberflächenintegral durch Variablenwerte in der Zelle angenähert, um dann die Werte auf der Zelloberfläche mit den Werten im Zentrum zu bestimmen. Mit Hilfe des Mittelwertes der Fläche

$$F_{A_k} = \int_{A_k} f \, dA = \overline{f_{A_k}} A_k \approx f_{A_k} A_k \quad (2.97)$$

kann das realisiert werden. Der Wert der Größe  $f$  ist nicht auf der Oberfläche, sondern nur in den Knoten bekannt, weshalb dieser Wert durch Interpolation errechnet wird. Für die Fläche  $A_k = A_o$  aus Abbildung 2.7 gilt dann

$$F_o = \int_{A_o} f \, dA \approx f_o A_o. \quad (2.98)$$

Der Mittelwert auf der Oberfläche  $o$  muss durch Interpolation (siehe Seite 29) gewonnen werden. Diese Approximation ist zweiter Ordnung genau [15].

## Volumenintegrale

Die Approximation der Volumenintegrale, wie sie zum Beispiel für Quellterme benötigt wird und ebenfalls eine Genauigkeit zweiter Ordnung besitzt, ist:

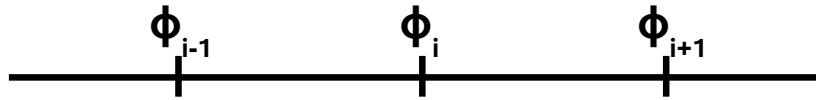
$$\int_G q dG = \bar{q} V_P \approx q_P V_P. \quad (2.99)$$

Im Punkt  $P$  sind alle Größen bekannt, es ist keine Interpolation notwendig.

## Approximation von Ableitungen und Interpolation

### Ableitungen

Mit Hilfe der Taylor-Reihenentwicklung auf dem vorgegebenen Rechengitter und der Vernachlässigung von Termen höherer Ordnung können Approximationen für die Ableitungen gewonnen werden. Die Ordnung der kleinsten vernachlässigten Potenz beschreibt das Fehlerverhalten des verwendeten Schemas.



**Abbildung 2.8:** Physikalische Werte  $\phi_i = \phi(x_i)$  auf einem eindimensionalen Gitter

Ein Vorwärts- oder Rückwärtsschema lautet:

$$\left( \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_i \approx \frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{x_{i+1} - x_i} \quad (2.100)$$

$$\left( \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_i \approx \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{x_i - x_{i-1}}, \quad (2.101)$$

diese sind erster Ordnung genau und das so genannte zentrale Differenzschema

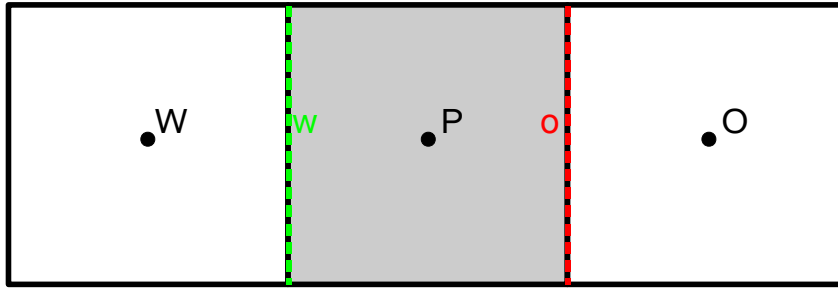
$$\left( \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_i \approx \frac{\phi_{i+1} - \phi_{i-1}}{x_{i+1} - x_{i-1}} \quad (2.102)$$

ist zweiter Ordnung genau. Verfahren höherer Ordnung werden an dieser Stelle nicht besprochen und können [15] entnommen werden.

### Interpolation

Größen, die auf den Zellflächen nicht gegeben sind, müssen durch bekannte Werte interpoliert werden. Dazu stehen wieder Verfahren verschiedener Genauigkeit zur Verfügung. Die Upwind-Interpolation benutzt die stromaufwärts gelegenen Zellmittelpunkte. Entsprechend der Strömungsrichtung gilt für die Zellfläche  $o$  in Abbildung 2.9:

$$\Phi_o = \begin{cases} \Phi_P, & \text{falls } (u \cdot \vec{n})_o > 0, \\ \Phi_O, & \text{falls } (u \cdot \vec{n})_o < 0. \end{cases} \quad (2.103)$$



**Abbildung 2.9:** Schema eines eindimensionalen FV-Gitters

Dieses Verfahren ist immer beschränkt, jedoch nur erster Ordnung genau und induziert eine so genannte numerische Diffusion [15]. Die lineare Interpolation der Werte  $\Phi_o$  auf der Zelloberfläche ergibt ein Schema mit zweiter Ordnung Genauigkeit

$$\Phi_o = \Phi_O \gamma_o + \Phi_P (1 - \gamma_o), \quad \gamma_o = \frac{x_o - x_P}{x_O - x_P}. \quad (2.104)$$

So genannte lineare Upwind-Interpolationsverfahren beziehen neben dem Zellwert der Upwind-Zelle wie in (2.103) auch die erste Ableitung der Größe mit ein:

$$\Phi_o = \begin{cases} \Phi_P + \Phi'_P (x_o - x_P), & \text{falls } (u \cdot \vec{n})_o > 0, \\ \Phi_O + \Phi'_O (x_o - x_O), & \text{falls } (u \cdot \vec{n})_o < 0. \end{cases} \quad (2.105)$$

Verfahren höherer Ordnung wie QUICK stehen ebenfalls zur Verfügung.

Jede Erhaltungsgleichung der Form (2.95) wird nun mit Hilfe der beschriebenen Methoden in ein algebraisches Gleichungssystem der Form

$$Ax = b \quad (2.106)$$

umgewandelt. Der Vektor  $x$  enthält die gesuchte unbekannte Erhaltungsgröße,  $A$  ist die Koeffizientenmatrix. Diese ist abhängig von der Diskretisierung und für uniforme Gitter eine Bandmatrix. Im Allgemeinen ist sie sehr dünn besetzt. Hinter  $b$  verbergen sich unter anderem die Quellterme aus (2.95).

### 2.3.2 Behandlung der diskretisierten Gleichungen

Bei nichtlinearen und stark gekoppelten Systemen partieller Differentialgleichungen (wie bei den reaktiven Navier-Stokes-Gleichungen) ist die simultane Lösung des entstandenen Systems algebraischer Gleichungen (2.106) sehr schwierig und teuer<sup>3</sup>. Häufig wird deshalb eine entkoppelte schrittweise Lösung der Gleichungssysteme für jede Erhaltungsgröße durchgeführt, während alle anderen Größen konstant gehalten werden. Eine weitere äußere Iteration wird dann durchgeführt, bis alle Gleichungen ausreichend genau erfüllt sind.

<sup>3</sup>In der numerischen Mathematik wird die Bezeichnung teuer häufig als Synonym für rechenzeitintensiv eingesetzt.



### Unterrelaxation

Die eben getroffenen Aussagen gelten besonders für stationäre Berechnungen. Dort wird zusätzlich für jede äußere Iteration eine Unterrelaxation durchgeführt, um die Stabilität zu erhöhen: Eine Größe  $\phi$  sei gesucht. Das diskretisierte System zur Erhaltungsgleichung von  $\phi$  sei  $Ax=b$  und habe die Lösung  $\phi_n^*$  in der  $n$ -ten äußeren Iteration. In einem äußeren Iterationsschritt wird die Änderung der Größe um den Faktor  $\alpha_\phi$  vermindert:

$$\phi^n = \phi^{n-1} + \alpha_\phi(\phi_n^* - \phi^{n-1}). \quad (2.107)$$

Die Größe  $\alpha_\phi$  wird als Unterrelaxations-Faktor bezeichnet,  $0 < \alpha_\phi < 1$ .

### Linearisierung

Damit das algebraische System (2.106) mit einem effektiven iterativen Löser für dünn besetzte lineare Gleichungssysteme berechnet werden kann, müssen nichtlineare Terme speziell behandelt werden. Solche Terme treten im Konvektionsterm und in den Quelltermen auf. Sie werden meist mit Hilfe der so genannten Picard-Iteration [15] linearisiert. Für den konvektiven Ausdruck der Impulserhaltungsgleichung (2.6) gilt zum Beispiel:

$$\rho(u_j u_i) \approx \rho(u_j)^o u_i, \quad (2.108)$$

wobei  $(u_j)^o$  aus der vorhergehenden Iteration stammt. Ein Quellterm der Größe  $\phi$  würde folgendermaßen linearisiert:

$$q_\phi = b_0 + b_1 \phi. \quad (2.109)$$

Der Anteil  $b_0$  wird in der Gleichung der rechten Seite zugeschlagen und  $b_1$  der Diagonalen der Matrix  $A$ . Zur Druck-Geschwindigkeits-Kopplung wird in der äußeren Iteration der SIMPLE- oder PISO-Algorithmus verwendet. SIMPLE wird beispielhaft in Abschnitt 2.3.5 erläutert und PISO ist in Ferziger u. Peric [15] beschrieben.

### 2.3.3 Die Lösung des linearen Gleichungssystems

Das diskretisierte und linearisierte Gleichungssystem (2.106) kann nun mit iterativen Lösern für lineare Gleichungssysteme gelöst werden. Eine exakte Lösung mit direkten Lösern ist aus zwei Gründen nicht sinnvoll:

- Da eine weitere äußere Iteration durchgeführt wird, werden nur (jeweils verbesserte) Näherungslösungen für jede Größe benötigt.
- Direkte Löser sind im Allgemeinen sehr teuer und haben hohe Speicheranforderungen.

Für die  $n$ -te Iteration der Gleichung (2.106) sei  $\phi_n^*$  die Lösung und es gilt

$$A\phi_n^* - b = r. \quad (2.110)$$

Die Norm des Residuums  $r$  sollte während der (äußeren) Iteration gegen Null gehen. Für die Konvergenz der Lösung von (2.106) ist die Größe der Eigenwerte von  $A$  von besonderer Bedeutung [68]. Standard-Löser in CFD-Codes sind zum Beispiel Jacobi-Löser, Gauss-Seidel-Löser, (Bi-)Conjugierte-Gradienten-Löser oder Multigrid-Löser.

### 2.3.4 Rechengitter und Fehleranalyse

Die FVM-Gittererzeugung ist ein entscheidender Schritt für eine erfolgreiche und genaue Simulation. Oft müssen Gitter verworfen und angepasst werden, da Probleme erst im Verlauf der Rechnung auffallen. Zur Gittergenerierung stehen gute und ausgereifte Werkzeuge zur Verfügung (siehe Kapitel 3). An dieser Stelle sollen nur einige wesentliche Aspekte aufgezählt werden. Die Eigenschaften konkreter Gitter werden bei der Beschreibung der Rechenfälle erläutert.

Folgende Prinzipien sind bei der Gittererzeugung zu beachten [15]:

- Gitterzellen sollen möglichst orthogonal sein (ideal ist ein kartesisches Gitter), da sich eine höhere Verzerrung negativ auf die Interpolation der Werte auf den Zellflächen auswirkt.
- Der Größenunterschied angrenzender Zellen sollte den Faktor 2 nicht überschreiten.
- In Regionen, wo die größten Gradienten auftreten, sollte ein feineres Gitter benutzt werden.
- Gitterpunkte sollten entlang der Stromlinien liegen.

#### Fehlerbetrachtung

Ein großer Nachteil der FVM (im Gegensatz zur Finite Elemente Methode) ist die Schwierigkeit, gute Fehlerschätzer einzubinden. Das Verfahren der Richardson-Extrapolation wurde in der Diplomarbeit von Mattheus [48] untersucht. Es zeigte sich jedoch, dass dies für nichthomogene Gitter und Rechnungen mit vielen Erhaltungsgleichungen zu komplex und zeitaufwendig ist.

Deshalb wird wie bei praktischen Rechnungen üblich auch in dieser Arbeit eine Gitteranalyse durchgeführt, indem Rechnungen mit identischen Einstellungen wiederholt auf sukzessive verfeinerten Gittern durchgeführt werden. Eine anschließende Bewertung zeigt den Grad der Gitterabhängigkeit. Bei der Berechnung reaktiver Strömungen ist die Gittergröße besonders problematisch. Häufig ist ein Kompromiss zwischen Genauigkeit und Geschwindigkeit einzugehen.

### 2.3.5 Zeitdiskretisierung und stationäre Lösung

Die Ortsdiskretisierung der Navier-Stokes-Gleichungen wurde in Abschnitt 2.3.1 beschrieben. Um zeitliche Veränderungen zu berechnen oder den stationären Zustand zu erhalten, muss eine geeignete Approximation und Behandlung der zeitlichen Ableitungen zur Verfügung stehen. Es wird die differenzielle, zeitabhängige Form der Erhaltungsgleichung (2.95) für einen einfachen eindimensionalen Fall mit konstanten Werten für  $u$ ,  $\gamma$  und  $\rho$  betrachtet [15]:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -u \frac{\partial \phi}{\partial x} + \frac{\gamma}{\rho} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}. \quad (2.111)$$

Prinzipiell können implizite und explizite sowie Einschritt- und Mehrschrittverfahren unterschieden werden. Einschrittverfahren berücksichtigen für die Lösung im  $(n + 1)$ -ten Zeitschritt nur eine weitere Zeitebene. Das heißt nur Daten aus dem vorhergehenden (dem  $n$ -ten) Zeitschritt. Mehrschrittverfahren verwenden entsprechend mehrere Zeitebenen. Ein

Zweischrittverfahren benötigt Daten aus dem  $(n-1)$ -ten und  $n$ -ten Zeitschritt. Bei expliziten Verfahren kann man die  $(n+1)$ -te Lösung  $\phi^{(n+1)}$  direkt aus den vorhandenen Daten des  $n$ -ten Zeitschrittes berechnen. Bei impliziten Verfahren hängt die Lösung  $\phi^{(n+1)}$  sowohl von den Daten des  $n$ -ten als auch des  $(n+1)$ -ten Zeitschrittes ab. Um  $\phi^{(n+1)}$  zu erhalten, muss dann ein nichtlineares Gleichungssystem gelöst werden.

### Explizite Verfahren

An dieser Stelle soll exemplarisch das explizite Euler-Verfahren beschrieben werden. Für eine Differentialgleichung

$$y' = f(t, y) \quad (2.112)$$

ist zum Zeitpunkt  $t_0$  der Zustand  $y(t_0)$  bekannt. Dies ist ein typisches Anfangswertproblem. Soll aus einem bekannten Zeitschritt  $t_n$  ein darauffolgender Zustand zur Zeit  $t_{n+1} = t_n + \Delta t$  erhalten werden, gilt

$$y_{n+1} = y(t_{n+1}) = y_n + f(t_n, y_n) \Delta t. \quad (2.113)$$

Diskretisiert man die Ortsableitung in Gleichung (2.111) mit dem zentralen Differenzen-schema, ergibt sich mit  $\phi_i = \phi(x_i)$  [15]

$$\phi_i^{n+1} = \phi_i^n + \Delta t \left[ -u \frac{\phi_{i+1}^n - \phi_{i-1}^n}{2 \Delta x} + \frac{\gamma}{\rho} \frac{\phi_{i+1}^n + \phi_{i-1}^n - 2\phi_i^n}{(\Delta x)^2} \right]. \quad (2.114)$$

Eine Neumann-Analyse zeigt [15], dass folgende Diskretisierungsbedingung für die Stabilität notwendig sind:

$$\Delta t < \frac{\rho(\Delta x)^2}{2\gamma} \quad \text{und} \quad \frac{\rho u \Delta x}{\gamma} < 2. \quad (2.115)$$

Diese Bedingungen können etwas entschärft werden, wenn der konvektive Term mit einem Aufwind-Verfahren diskretisiert wird. Dann gilt

$$\Delta t < \frac{1}{\frac{2\gamma}{\rho(\Delta x)^2} + \frac{u}{\Delta x}}. \quad (2.116)$$

Für durch Konvektion dominierte Strömungen gilt dann

$$\Delta t < \frac{\Delta x}{u}. \quad (2.117)$$

Das Verhältnis des Zeitschrittes  $\Delta t$  zur charakteristischen Konvektionszeit  $\frac{\Delta x}{u}$  wird als CFL-Zahl (nach Courant-Friedrichs-Levy) oder nur als Courant-Zahl (Co) bezeichnet. Die Bedingung (2.117) besagt also, dass die Courant-Zahl bei expliziter Zeitdiskretisierung kleiner als eins gehalten werden sollte. Besonders bei feinen Gittern und hohen Geschwindigkeiten ist das eine starke Forderung.

## Implizite Methoden

Das implizite Euler-Verfahren lautet für ein Problem (2.112)

$$y_{n+1} = y_n + f(y_{n+1}, t_{n+1}) \Delta t. \quad (2.118)$$

Entsprechend gilt für Gleichung (2.111)

$$\phi_i^{n+1} = \phi_i^n + \Delta t \left[ -u \frac{\phi_{i+1}^{n+1} - \phi_{i-1}^{n+1}}{2 \Delta x} + \frac{\gamma}{\rho} \frac{\phi_{i+1}^{n+1} + \phi_{i-1}^{n+1} - 2\phi_i^{n+1}}{(\Delta x)^2} \right]. \quad (2.119)$$

Diese Gleichung kann als algebraisches Gleichungssystem umgeschrieben werden, welches dann iterativ gelöst wird. Das implizite Euler-Verfahren ist auch für große Zeitschritte stabil. Deshalb ist es besonders attraktiv für stationäre Probleme, bei denen nur das Endergebnis und nicht der zeitliche Verlauf von Interesse ist. Wie in Ferziger u. Peric [15], S. 149, beschrieben wird, sind implizite zeitabhängige und unter-relaxierte stationäre Lösungsverfahren sehr ähnlich aufgebaut, denn beide bewirken im linearen Gleichungssystem (2.106) eine Veränderung des Quellterms  $q$  und der Hauptdiagonalen von  $A$ . Das Verfahren ist erster Ordnung genau in  $x$  und  $t$ . Verfahren höherer Ordnung wie Leapfrog, Crank-Nicholson oder Runge-Kutta stehen ebenfalls zur Verfügung und können in Ferziger u. Peric [15] nachgeschlagen werden. Die CFL-Bedingung gilt bei impliziter Zeitdiskretisierung nicht mehr. Zu hohe CFL-Zahlen bereiten jedoch insbesondere für reaktive Strömungen Probleme, so dass eine Abhängigkeit der Zeitschrittweite von der Gittergröße bestehen bleibt.

## Berechnung der Druckkorrektur

Zur Berechnung des Drucks steht in den Navier-Stokes-Gleichungen keine Gleichung zur Verfügung. Er hat jedoch erheblichen Einfluss auf die Impuls- und Masseerhaltung [15]. In CFD-Berechnungen wird der Druck deshalb häufig als Größe zur Einhaltung der Kontinuitätsgleichung konstruiert. Dieses Verfahren, auch Druck-Geschwindigkeits-Kopplung genannt, wird in diesem Abschnitt behandelt.

Dazu wird folgendermaßen vorgegangen [15]:

1. Die Berechnung der gesuchten Werte zum  $(n + 1)$ -ten Zeit- oder (äußeren) Iterationsschritt erfolgt mit Hilfe der bekannten Größen  $u^n$ ,  $p^n$  als Schätzungen für  $u^{(n+1)}$ ,  $p^{(n+1)}$ .
2. Lösung der Impulsgleichung. Das Ergebnis  $u^{(m*)}$  erfüllt noch nicht die Kontinuitätsgleichung (Prädiktorschritt).
3. Berechnung der Druckkorrektur  $p'$  mit Hilfe einer aus der Kontinuitäts- und Impulserhaltungsgleichung konstruierten Poisson-Gleichung für den Druck.
4. Korrektur des Drucks und der Geschwindigkeit (mit Hilfe von  $p'$ ), um  $u^m$  (erfüllt nun Kontinuitätsgleichung) und den Druck  $p^m$  zu erhalten.
5. **Für Zeititeration:** Gehe zu 2) und wiederhole, bis Korrekturen für die Schätzungen ausreichend klein sind.

**Für stationäre Iteration:** Benutze  $u^{(n+1)} = u^m$  und  $p^{(n+1)} = p^m$ .

6. Gehe zum nächsten Zeitschritt oder zur nächsten Iteration.

Das beschriebene Verfahren wird als SIMPLE-Algorithmus bezeichnet. Ein weiterer Vertreter ist das PISO-Verfahren, wo noch eine weitere Druckkorrektur stattfindet. Die Druck-Geschwindigkeits-Kopplung stellt ein Linearisierungsverfahren für die Geschwindigkeit dar. Es ist auch möglich, die Impuls- und Masseerhaltungsgleichung gekoppelt mit einem Newton-Verfahren zu lösen. Das wird in der Praxis jedoch selten getan.

Für die stationäre Lösung der reaktiven Navier-Stokes-Gleichungen wird im  $(n + 1)$ -ten Iterationsschritt mit entsprechenden Unterrelaxationsfaktoren folgendermaßen vorgegangen ( $u^n, \rho^n, h^n, p^n, y^n$  bekannt):

1. Berechne Schätzung  $u^{(n+1)*}$  mit Hilfe der Kontinuitätsgleichung.
2. Berechne chemische Quellterme  $\omega_i(y^n, h^n, p^n)$ .
3. Löse Spezieserhaltungsgleichung, Ergebnis:  $y^{n+1}$ .
4. Berechne  $h^{n+1}$  mit Hilfe der Energieerhaltungsgleichung.
5. Berechne Druckkorrektur  $p'$ .
6. Korrigiere Geschwindigkeit und erhalte  $u^{(n+1)}$ .
7. Berechne Turbulenzgrößen  $k$  und  $\epsilon$ .

Für stationäre Probleme sind diese Verfahren sehr effektiv. Für viele praktische Problemstellungen der Verbrennungs- und Vergasungsmodellierung scheiden instationäre Lösungsverfahren aus, da sie meist zu lange Rechenzeiten aufweisen.

## 2.4 Turbulente reaktive Strömungen

In Abschnitt 2.1 wurden die Navier-Stokes-Gleichungen für reaktive Strömungen formuliert. Die Herleitung der ungeschlossenen Terme der Kontinuitäts- und Impulsgleichung erfolgte mit Hilfe von Turbulenzmodellen und wurde in Abschnitt 2.2.2 erklärt. Für die Spezies- und Energieerhaltungsgleichung lauten die gemittelten Gleichungen [58, 79]

$$\frac{\partial \tilde{y}_i \bar{\rho}}{\partial t} + \text{div}(\bar{\rho} \tilde{y}_i \tilde{u}) - \text{div} \left( \frac{\mu_{\text{eff}}}{\text{Sc}_t} \text{grad } \tilde{y}_i \right) = \bar{\omega}_i M_i \quad (2.120)$$

$$\frac{\partial \tilde{\rho} \tilde{h}}{\partial t} - \frac{\partial \bar{p}}{\partial t} + \text{div}(\bar{\rho} \tilde{h} \tilde{u}) - \text{div} \left( \frac{\mu_{\text{eff}}}{\text{Pr}_t} \text{grad } \tilde{h} \right) = \bar{q}_r, \quad (2.121)$$

dabei gilt  $\mu_{\text{eff}} = \mu + \mu_t$ . Oft wird angenommen, dass der turbulente Transport viel größer als der laminare ist (vollturbulente Strömung) und deshalb  $j_i$  und  $j_q$  vernachlässigbar sind und die effektive der turbulenten Viskosität entspricht. Die Größen  $\text{Sc}_t$  und  $\text{Pr}_t$  sind die turbulenten Schmidt- und Prandtl-Zahlen. Sie liegen für Gasströmungen meist im Bereich von 0.7-1 [29, 58].

Bis auf die Größe  $\bar{\omega}_i$ , deren Modellierung in Abschnitt 2.5 beschrieben wird, sind nun alle Terme bekannt und das Gleichungssystem kann gelöst werden.

## 2.5 Interaktion von chemischer Kinetik und Transport

Die turbulente Interaktion von molekularem Mischen und chemischer Kinetik ist einer der wichtigsten und kompliziertesten Prozesse bei Verbrennungs- und Vergasungsvorgängen. An dieser Stelle soll ausschließlich nicht vorgemischte Verbrennung und Vergasung betrachtet werden, bei denen die Reaktanden getrennt in den Reaktionsraum geführt werden.

Damit eine chemische Reaktion ablaufen kann, müssen die Edukte auf molekularer Ebene gemischt vorliegen. Für eine Flamme bedeutet das, dass die Reaktanden durch molekulare Diffusion die Flammenfront erreichen müssen. Aus diesem Grund werden nicht vorgemischte Flammen auch Diffusionsflammen genannt. Laminare Diffusionsflammen sind schon vor über 80 Jahren von Burke u. Schumann [5] untersucht worden und sind heute gut verstanden. Für einige Fälle existieren sogar analytische Lösungen [58].

Praktische Verbrennungs- und Vergasungsprozesse sind jedoch immer turbulent, da so die Mischung weitaus schneller stattfindet und deshalb bessere Umsätze erreicht werden. Turbulenz ist ein zufälliger und chaotischer Vorgang und führt zum Beispiel dazu, dass an einem Punkt im Reaktionsraum zu einem Zeitpunkt ausschließlich Brennstoff, zu einem anderen nur Oxidationsmittel vorliegt. Existieren in einem System zwei Einlässe, so lässt sich der Mischungsbruch  $\xi$  mit Hilfe der Elementmassenbrüche  $Z_i$  angeben [79].  $Z_{i1}$  und  $Z_{i2}$  sind die Elementmassenbrüche von zwei verschiedenen Zuflüssen mit unterschiedlicher Gemischzusammensetzung (z.B. Brennstoff und Oxidationsmittel). Es gilt

$$\xi = \frac{Z_i - Z_{i2}}{Z_{i1} - Z_{i2}}, \quad (2.122)$$

mit

$$Z_i = \sum_{j=1}^{n_s} \mu_{ij} y_j, \quad i = 1, \dots, n_e, \quad (2.123)$$

$n_s$  ist die Anzahl der chemischen Spezies,  $n_e$  die Anzahl der Elemente im Gemisch,  $\mu_{ij}$  sind die Massenanteile des Elementes  $i$  im Stoff  $j$ . Ein Beispiel findet sich in [79] in Abschnitt 9.3.

Die theoretische Beschreibung und Entwicklung genauer Modelle für die Interaktion von Turbulenz und chemischer Kinetik ist ein intensiv bearbeitetes Forschungsgebiet. Die Verfügbarkeit von Hochleistungsrechnern, sehr genau vermessenen Testflammen [76] und die Zusammenarbeit von Wissenschaftlern verschiedener Wissenschaftsbereiche haben jedoch zu einem deutlichen Fortschritt auf diesem Gebiet geführt.

### Schließung des Ausdrucks für die mittlere Reaktionsgeschwindigkeit

Um die turbulenten Navier-Stokes-Gleichungen aus Abschnitt 2.1 lösen zu können, müssen unbekannte Terme noch modelliert werden. Die Schließung der Reynolds-Spannung und der turbulenten Ausdrücke für Enthalpie- und Speziesdiffusion wurden in Abschnitt 2.4 beschrieben, ein Ausdruck der gemittelten Reaktionsgeschwindigkeit  $\bar{\omega}_i$  soll in diesem Abschnitt diskutiert werden.

#### 2.5.1 Regime bei nicht vorgemischten Flammen

Bei der Betrachtung von Mischung und chemischer Kinetik sind die Zeitskalen, bei denen sie ablaufen (wie schnell sie ablaufen beziehungsweise wie viel Massentransport oder -umsatz

pro Zeiteinheit stattfindet) besonders wichtig. Das Verhältnis der Zeitskalen für Mischung und chemische Kinetik wird durch die Damköhler-Zahl  $Da$  beschrieben

$$Da = \frac{\tau_{\text{mix}}}{\tau_{\text{chem}}}, \quad (2.124)$$

dabei ist  $\tau_{\text{mix}}$  eine lokale fluiddynamische Größe, die die Mischungsrate repräsentiert und  $\tau_{\text{chem}}$  die Zeitskala, bei der chemische Reaktionen ablaufen. Tabelle 2.1 stellt die drei verschie-

**Tabelle 2.1:** Mögliche Regime bei der Untersuchung der Damköhler-Zahl mit den Grenzfällen Gleichgewicht und Rührreaktor (PSR)

Regime	Gleichgewicht	Interaktion	PSR
Da	$Da \gg 1$	$Da \approx 1$	$Da \ll 1$
Zustand	Chemie läuft viel schneller als Mischung ab und kann als unendlich schnell angesehen werden.	Chemie und Mischung beeinflussen sich gegenseitig. Interaktion muss berücksichtigt werden.	Ideale Mischung kann angenommen werden (PSR), chemische Kinetik ist zeitbestimmend.

denen Regime mit den Grenzfällen chemisches Gleichgewicht und PSR (perfectly-stirred reactor) gegenüber. Sehr kleine Damköhler-Zahlen können zum Quenchen der Reaktionen und zur Flammenlöschung führen, wenn die chemischen Reaktionen zu langsam ablaufen, so dass zuströmende Edukte nicht mehr umgesetzt werden können. Modellierungsansätze für nicht vorgemischte Verbrennung aus der Literatur werden in Tabelle 2.2 wie in Poinsoot u. Veynante [58] klassifiziert.

**Tabelle 2.2:** Einordnung der Modelle für nicht vorgemischte Verbrennung nach Poinsoot u. Veynante [58]

	Unendlich schnelle Chemie	Berücksichtigung chemischer Kinetik
Basierend auf Mischungsbruch $\xi$	pre-PDF-Modell (Gleichgewichtsannahme)	pre-PDF-Modell (Flamelets)
Basierend auf Reaktionsgeschwindigkeit $\bar{\omega}_i$	Eddy-Break-Up-Modell I (2.125)	Eddy-Break-Up-Modell II (2.126), Eddy-Dissipation-Concept-Modell (2.133), Transported-PDF-Modell

## 2.5.2 Modelle basierend auf dem Mischungsbruch

Modelle, die auf dem in Gleichung (2.122) definierten Mischungsbruch  $\xi$  basieren, werden für die Berechnung von Diffusionsflammen im Industriemaßstab häufig und oft erfolgreich

eingesetzt. Der größte Vorteil liegt im geringen Zeitbedarf für die Berechnung, denn es werden lediglich zwei Erhaltungsgleichungen für den Mischungsbruch und dessen Schwankung  $\xi'$  benötigt, um die Zusammensetzung und Temperatur zu ermitteln. Insbesondere für Vergasungsbedingungen ist dies jedoch problematisch, denn wenn das Oxidationsmittel aufgebraucht ist, existiert aus der Perspektive des Modells nur noch ein Zustand (Gleichgewichtszustand), der sich aber nur sehr langsam und bei Verweilzeiten praktisch relevanter Anlagen gar nicht einstellt.

Über eine Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (PDF - Probability Density Function) werden aus  $\xi$  und  $\xi'$  die gemittelten Größen  $y$  und  $T$  durch Gleichgewichtsannahmen berechnet [58]. Die Form der PDF unterscheidet sich je nach Modell. Im einfachsten Fall wird eine  $\beta$ -Form angenommen und die PDF wird vorausberechnet und alle Werte tabelliert. Durch Anwendung des Flamelet-Ansatzes, wo lokal ähnliche Flammenstrukturen ähnlich den Vormischflammen angenommen werden und abhängig von  $\xi$  und  $\xi'$  berechnet werden, kann der Einfluss der chemischen Kinetik berücksichtigt werden.

Aus den genannten Gründen sind Mischungsbruch-basierte Modelle für die vorliegende Anwendung nicht gut geeignet und für weiterführende Lektüre wird auf Poinsoit u. Veynante [58], Warnatz u. a. [79] verwiesen.

### 2.5.3 Modelle basierend auf Gleichgewichtsannahmen

Die Annahme unendlich schneller Chemie für Vergasungssimulationen ist ebenfalls eine zu starke Vereinfachung. In vielen Verbrennungsprozessen, wo sehr hohe Temperaturen herrschen und die Mischung zeitbestimmend ist ( $Da \gg 1$ ), ist diese Annahme durchaus gerechtfertigt. Soll aber zum Beispiel die Stickoxidbildung ( $\text{NO}_x$ ) untersucht werden, ist dies nicht mit Gleichgewichtsannahmen möglich, da diese Reaktionen sehr langsam ablaufen. Das heißt, die Zeit, bis das chemische Gleichgewicht erreicht ist, ist länger als die Verweilzeit im heißen Bereich [79]. Ein ähnlicher Vorgang spielt sich in einem Vergasungsreaktor ab. Die Verweilzeit im Reaktor reicht meist nicht aus, um das thermodynamische Gleichgewicht zu erreichen. Aus diesem Grund kommen nur Modelle mit Berücksichtigung der Reaktionsraten in Frage.

#### Eddy-Dissipation-Modell

Das Eddy-Dissipation-Modell (ED-Modell) wird auch Eddy-Break-Up-Modell genannt und geht auf Magnussen u. Hjertager [45] zurück. In der ursprünglichen Fassung hängt die mittlere Reaktionsgeschwindigkeit nur von den turbulenten Größen  $k$  und  $\epsilon$  ab und es gilt nach Brink u. a. [3] für eine Bruttoreaktion:  $\nu_{\text{Br}}\text{Br} + \text{Ox} \rightarrow \text{Prod}$ :

$$\bar{\omega}_i = A \frac{\epsilon}{k} \min \left( y_{\text{Br}}, \frac{y_{\text{Ox}}}{\nu_{\text{Br}}}, B \frac{y_{\text{Prod}}}{1 + \nu_{\text{Br}}} \right), \quad (2.125)$$

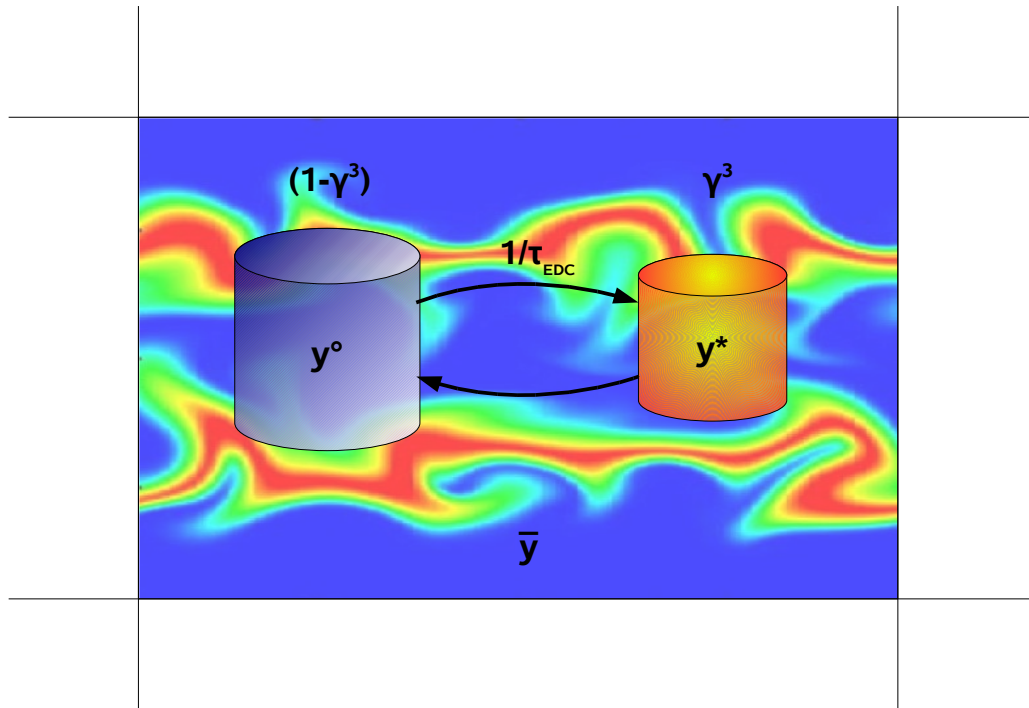
$A, B$  sind Modellkonstanten. Eine häufig benutzte Erweiterung des Modells bezieht Bruttoreaktionskinetiken mit nur wenigen Reaktionsgleichungen mit ein. Für die  $j$ -te Reaktion gilt:

$$\bar{\omega}_{i,j} = \min \left( A \frac{\epsilon}{k} y_{\text{Br}}, A \frac{\epsilon}{k} \frac{y_{\text{Ox}}}{\nu_{\text{Br}_i}}, \omega_{\text{kin},i,j} \right). \quad (2.126)$$



## 2.5.4 Das Eddy-Dissipation-Concept

Das Kolmogorov-Längenmaß (2.37) ist die Längenskala, in der die kleinsten Wirbelstrukturen auftreten. In dieser Region findet Dissipation von kinetischer turbulenter Energie  $k$  mit der Rate  $\epsilon$  statt. Unterhalb der Größe von  $\eta$  existieren keine turbulenten Strukturen mehr, da sich die molekulare Diffusion dort schneller als der turbulente Transport abspielt. Aus



**Abbildung 2.10:** Schematische Darstellung der Aufteilung einer Rechenzelle in einen reaktiven Anteil (Fine-Scales, mit dem Massenbruch  $y^*$ ) und einen inerten Anteil (Surrounding Fluid,  $y^o$ )

diesem Gedanken heraus entstand die Vorstellung des Eddy-Dissipation-Concept-Modells (EDC). Es ist eine Weiterentwicklung des Eddy-Dissipation-Modells für detaillierte Reaktionsmechanismen: Es existiert ein Bereich, in welchem die Spezies als ideal gemischt betrachtet werden können und die chemische Reaktionskinetik den Geschwindigkeitsverlauf bestimmt, während außerhalb dieses Bereiches die Reaktanden nicht gemischt sind und auch nicht reagieren.

Dazu wird jede Rechenzelle in einen reaktiven Anteil ( $\gamma^3$ ) und einen entsprechenden inerten Anteil ( $1 - \gamma^3$ ) zerlegt (siehe Abbildung 2.10). Nun stellt der reaktive Anteil den Teil des Gemisches dar, der sich in den kleinsten Strukturen der Turbulenz befindet. Er wird auch als Fine-Scale-Anteil bezeichnet. Den inerten Anteil nennt man umgebendes Fluid oder Surrounding Fluid. Die Größe des reaktiven Anteils  $\gamma^3$  wird mit Hilfe des Längenmaßes  $\gamma$  folgendermaßen modelliert (siehe auch Chakraborty u. a. [8], Gran u. Magnussen [21]):

$$\gamma = C_\gamma \left( \frac{\nu \epsilon}{k^2} \right)^{\frac{1}{4}}. \quad (2.127)$$

Die Größe  $\gamma$  wird also aus Turbulenzgrößen erhalten wird. Es ist

$$C_\gamma = \left( \frac{3C_{D2}}{4C_{D1}^2} \right)^{\frac{1}{4}} = 2.1377, \text{ mit } C_{D1} = 0.134, C_{D2} = 0.5. \quad (2.128)$$

Die Konstanten wurden mit Hilfe des Energiekaskadenmodells von Ertesvåg u. Magnussen [14] erhalten. Die Zeitskala für den Massentransfer vom reaktiven Anteil zum inerten Anteil ist

$$\tau_{EDC} = C_\tau \left( \frac{\nu}{\epsilon} \right)^{\frac{1}{2}} = C_\tau \tau_\eta, \text{ mit } C_\tau = \left( \frac{C_{D2}}{3} \right)^{\frac{1}{2}} = 0.4082. \quad (2.129)$$

Die Reaktionen werden durch einen isobaren, adiabaten, perfekt durchmischten Reaktor beschrieben. Die Strahlung von oder in die Fine-Scales wird vernachlässigt<sup>4</sup>. Die Mischungsrate  $1/\tau_{EDC}$  charakterisiert einen offenen Rührkesselreaktor mit der Verweilzeit  $\tau_{EDC}$  [21]. Der Fine-Scale-Reaktor wird durch

$$\frac{dy_i^*}{dt} = \frac{M_i \omega_i^*}{\rho^*} + \frac{y_i^o - y_i^*}{\tau_{EDC}}, \text{ mit } i = 1, \dots, n_s, \quad (2.130)$$

beschrieben,  $y_i^o$  ist die Zusammensetzung des aus dem Surrounding Fluid einfließenden Gemisches und berechnet sich aus

$$\bar{y}_i = \gamma^3 y_i^* + (1 - \gamma^3) y_i^o, \quad i = 1, \dots, n_s. \quad (2.131)$$

Dabei ist  $\bar{y}_i$  der Zellmittelwert,  $n_s$  die Anzahl der Spezies,  $\omega_i^*$  die Reaktionsgeschwindigkeit der  $i$ -ten Spezies und  $\rho^*$  die Dichte zur Zusammensetzung  $y^*$  im Reaktor. Die stationäre Lösung der Gleichung (2.130) soll auch weiterhin mit  $y^*$  bezeichnet werden und kennzeichnet die Gemischzusammensetzung am Austritt des Idealreaktors. Die Reaktionsgeschwindigkeit  $\omega_i^*$  kann mit Hilfe des Reaktionsmechanismus und Gleichung (2.83) erhalten werden.

Der Gemischaustausch des reaktiven und des inerten Anteils findet nach Gran u. Magnussen [21] mit der Rate  $\gamma^2/\tau_{EDC}$  statt<sup>5</sup>. Der Ausdruck für die gesuchte mittlere Reaktionsrate der Zelle  $\bar{\omega}_i$ , die dann in die Spezieserhaltungsgleichung einfließt, wird nun mit

$$\frac{\bar{\omega}_i}{\bar{\rho}} = \frac{\gamma^2}{\tau} (y_i^* - y_i^o), \quad i = 1, \dots, n_s \quad (2.132)$$

erhalten. Durch Umstellung von (2.131) nach  $y^o$  und Einsetzen in (2.132) ergibt sich

$$\frac{\bar{\omega}_i}{\bar{\rho}} = \frac{\gamma^2}{\tau} \left( \frac{y_i^* - \bar{y}_i}{1 - \gamma^3} \right), \quad i = 1, \dots, n_s. \quad (2.133)$$

Diese Formel stimmt mit der Implementierung in Fluent [16] überein. Der Ausdruck  $\chi$ , der in Magnussens Originalformulierung der Formeln (2.131) und (2.132) erscheint, wird eingesetzt, wie in Gran u. Magnussen [21] vorgeschlagen wurde.

<sup>4</sup>In [35] wurde eine Berücksichtigung von Strahlung bedingt durch Rußeinfluss gezeigt. Dazu muss eine zusätzliche Energiegleichung für den Idealreaktor eingeführt werden.

<sup>5</sup>Der Ausdruck wurde ursprünglich durch  $\gamma^3/\tau$  beschrieben. Die vorliegende Variante wird aber bevorzugt (siehe z.B. Magel u. a. [44]).

### Beispiel zum EDC-Modell

Es soll eine Zelle mit der Zusammensetzung  $y_{\text{H}_2} = 0.4$ ,  $y_{\text{O}_2} = 0.6$ , einer Temperatur von 1000 K und einem Druck von  $10^5$  Pa betrachtet werden. Es wird angenommen, dass für die Zelle  $k = 5 \text{ m}^2/\text{s}^2$  und  $\epsilon = 200 \text{ m}^2/\text{s}^3$  durch ein Turbulenzmodell erhalten wurde. Aus den Transporteigenschaften folgt  $\nu = 2.9141 \cdot 10^{-5} \text{ kg}/\text{m} \cdot \text{s}$ . Dann lassen sich die EDC-Größen  $\gamma = 0.2641$  mit (2.127) und  $\tau_{EDC} = 1.5582 \cdot 10^{-4}$  mit (2.129) berechnen. Mit diesen Größen kann das System (2.130) bis zum stationären Zustand  $y^*$  gelöst werden. Nun kann mit Gleichung (2.133) die mittlere Reaktionsgeschwindigkeit berechnet werden, so ergibt sich zum Beispiel  $\overline{w_{\text{H}_2}} = -31.61 \text{ kg}/\text{m}^3 \cdot \text{s}$ ,  $\overline{w_{\text{O}_2}} = -212.06 \text{ kg}/\text{m}^3 \cdot \text{s}$  und  $\overline{w_{\text{H}_2\text{O}}} = 236.95 \text{ kg}/\text{m}^3 \cdot \text{s}$ . In Abbildung 2.11 ist der Verlauf der Lösung des Fine-Scale-Reaktors dargestellt.

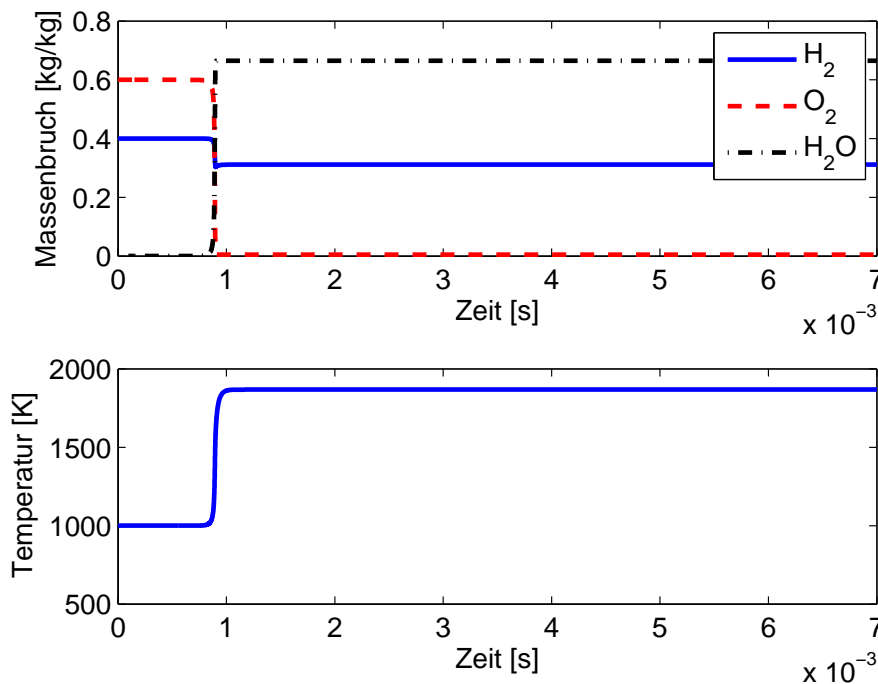


Abbildung 2.11: Zeitlicher Verlauf im EDC-Fine-Scales-Reaktor

Es stellt sich ein stationärer Zustand aus zufließendem „kaltem“ Gemisch und chemischer Reaktion ein. Der Code zum Beispiel ist im Anhang 4 zu finden.

### 2.5.5 Transported-PDF-Modell

Beim so genannten Transported-PDF-Modell oder auch Composition-PDF-Modell werden ebenfalls Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen zur Bestimmung der Gemischzusammensetzung verwendet. Anders als beim Pre-PDF-Modell, wo eine bestimmte Verteilungsfunktion angenommen wird, wird sie hier explizit berechnet. Die chemische Kinetik wird also nicht modelliert, sondern korrekt berücksichtigt. Jedoch ist ein Modell zur Behandlung der Mikromischung unterhalb der Gitterauflösung notwendig. Dazu werden pro Zelle in jedem Zeitschritt eine bestimmte Anzahl masseloser Partikel, die über einen Lagrange-Ansatz verfolgt werden und eine Gemischzusammensetzung repräsentieren, eingebracht. Das geschieht mit Hilfe der vorher berechneten Konvektion und Diffusion. Über einen Monte-Carlo-

Algorithmus wird aus der Interaktion der repräsentativen Partikel die Zellzusammensetzung errechnet, womit dann die chemischen Quellterme erhalten werden können. Bekannte Mikromischungsmodelle sind das EMST-Modell [74] oder das Modified-Curl-Modell [28]. Um gute Ergebnisse zu erzielen benötigt das Mischungsmodell eine ausreichende Anzahl repräsentativer Partikel ( $\geq 20$ /Zelle). Das führt zu einem sehr hohen Rechenaufwand für die Partikelverfolgung. Zudem ist bekannt, dass sich Rechnungen mit Partikelverfolgung schlecht parallelisieren lassen.

## 2.6 Mathematische Behandlung chemischer Kinetik

### 2.6.1 Stabilisierung bei der Lösung reaktiver Strömungen

Bei der Lösung der reaktiven Navier-Stokes-Gleichungen treten besonders zu Beginn einer stationären Rechnung Schwankungen des Drucks und der Temperatur auf. Diese führen zu noch größeren Schwankungen in der Reaktionsrate (exponentielle Abhängigkeit von der Temperatur). Wie bei allen Erhaltungsgrößen findet auch für die chemischen Spezies eine Linearisierung und Unterrelaxation (Abschnitt 2.3.2) statt.

Zusätzlich werden noch Spezies, die in sehr kleinen Mengen vorliegen, besonders behandelt und eine Korrektur für den Fall, dass die Summe aller Speziesmassen größer als 1 ist, durchgeführt. Das erste Verfahren entstammt ANSYS [1] und letzteres wurde vom Autor im Laufe dieser Arbeit entwickelt.

Das Verfahren nach ANSYS [1] führt eine Dämpfung der Quellterme der Spezies mit sehr kleinen Konzentrationen (meist Radikale) durch, um negative Massenbrüche zu vermeiden. Geht der Massenbruch einer Spezies gegen Null oder Eins, so muss dessen Quellterm auch verschwinden. Er wird dann folgendermaßen behandelt:

$$\bar{\omega}_i = \frac{(\bar{\omega}_i - |\bar{\omega}_i|) \cdot y_i}{2 \cdot \max(y_i, \delta_{\text{lin}})} + \frac{(\bar{\omega}_i + |\bar{\omega}_i|) \cdot (1 - y_i)}{2 \cdot \max(1 - y_i, \delta_{\text{lin}})}. \quad (2.134)$$

Der Wert für die Konstante ist  $\delta_{\text{lin}} = 10^{-6}$ . Ist beispielsweise der Quellterm negativ, so folgt [1]

$$\bar{\omega}_i = \begin{cases} \bar{\omega}_i, & \text{falls } y_i \geq \delta_{\text{lin}}, \\ \frac{\bar{\omega}_i \cdot y_i}{\delta_{\text{lin}}}, & \text{sonst.} \end{cases} \quad (2.135)$$

Entsprechendes gilt für positive Quellterme, wenn  $y_i \rightarrow 1$ .

Die zweite, vom Autor erarbeitete Methode zur Stabilisierung überprüft nach jeder Lösung der Spezieserhaltungsgleichung, ob die Bedingung

$$\sum_i y_i < 1 + \epsilon_{\text{tol}} \quad (2.136)$$

erfüllt ist. Diese Konstante ist  $\epsilon_{\text{tol}} = 0.01$ . Falls in einer Zelle die Bedingung verletzt wird, wird lokal der chemische Quellterm für alle Spezies folgendermaßen reduziert

$$\bar{\omega}_i = C_{\text{red}} \cdot \bar{\omega}_i, i = 1, \dots, n_s. \quad (2.137)$$

Dabei ist  $C_{\text{red}} < 1$ , meist wurde  $C_{\text{red}} = 0.25$  gewählt. Das wird so lange wiederholt, bis das Kriterium (2.136) erfüllt ist. Das Verfahren greift, wenn der Zustand weit von einem

stabilen oder stationären Zustand entfernt ist und verhindert eine Divergenz des Löser. Strebt das Verhalten gegen die stationäre Lösung, so wird es nicht mehr benötigt. Mit Hilfe der genannten Methoden konnten stabile Simulationsrechnungen durchgeführt werden.

## 2.6.2 ISAT zur schnelleren Berechnung der chemischen Kinetik

Die direkte Berechnung des steifen ODE-Systems (2.83) aus Abschnitt 2.2.3 für detaillierte Reaktionsmechanismen ist sehr zeitaufwendig und benötigt nicht selten mehr als 90 % der gesamten Berechnungszeit. Von daher müssen Möglichkeiten gefunden werden, um den Berechnungsaufwand für diesen Schritt zu verringern. In der Literatur wurden verschiedene Vorschläge gemacht, um dies zu realisieren. Häufig werden wie bei ISAT (In Situ Adaptive Tabulation, Pope [60]) oder ILDM [43] Tabellen erzeugt, aus denen bekannte Lösungen schnell ausgelesen werden können. Das ILDM-Verfahren reduziert zudem die Anzahl der abhängigen Spezies durch ein Unterraum-Verfahren.

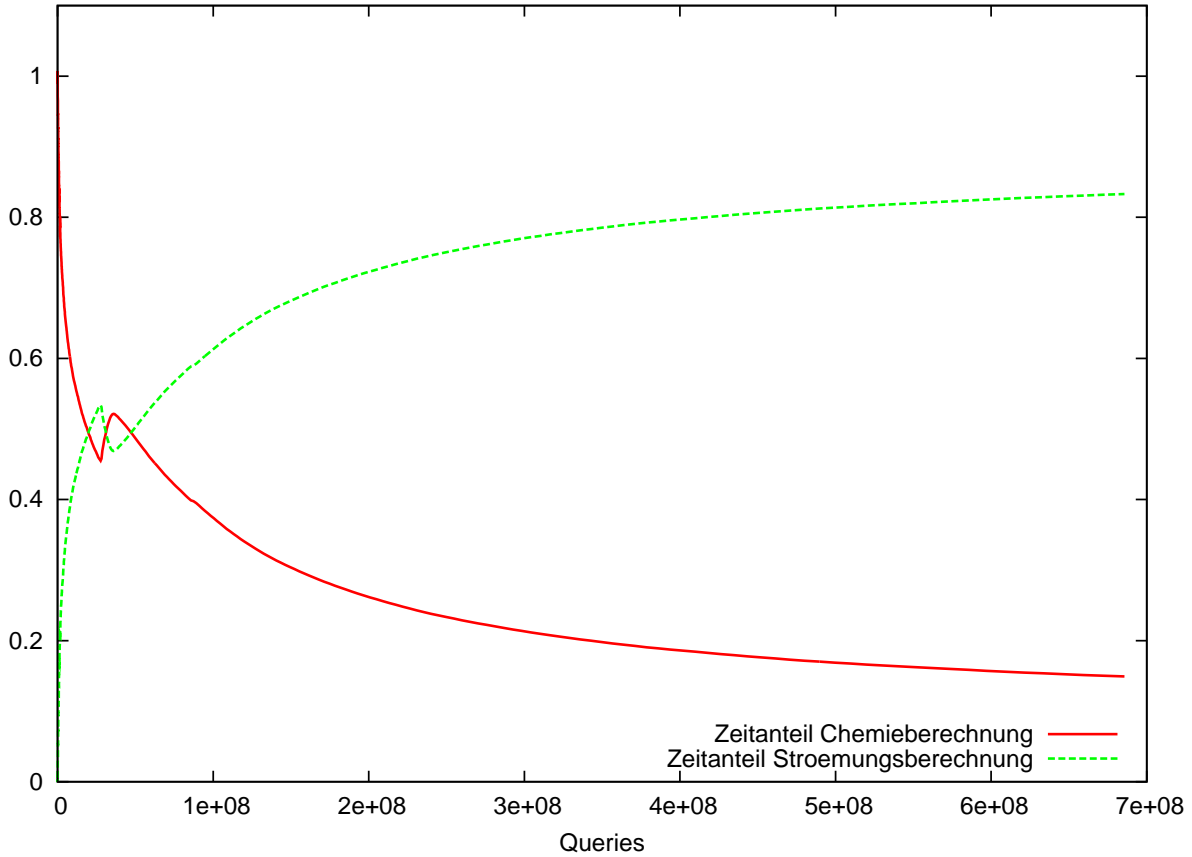
In den Abbildungen 2.12 und 2.13 ist das Verhalten des ISAT-Algorithmus während einer Fluent-Simulation dargestellt. Der Ausdruck „Queries“ steht für Abfragen: jedes Mal, wenn eine direkte Integration (DI) des chemischen ODE-Systems vorzunehmen ist, wird vorher in der ISAT-Tabelle geprüft (abgefragt), ob ein „ähnlicher“ Zustand bereits berechnet wurde. In 2.13 ist zu erkennen, dass zu Beginn der Rechnung fast die gesamte Zeit für die Berechnung der chemischen Kinetik verbraucht wird. Dieser Anteil wird immer kleiner. Es kann angenommen werden, dass die Zeit zur Berechnung der Strömung in etwa konstant ist. Das bedeutet, dass eine Beschleunigung der Simulation um ein bis zwei Größenordnungen durch den ISAT-Algorithmus zu verzeichnen ist. Abbildung 2.13 zeigt die Wahrscheinlichkeit, mit der eines der Ereignisse Retrieve (Auffinden), Grow (Wachsen) oder Add (Hinzufügen) auftritt. Bei Add wird ein unbekannter Eintrag zur Tabelle hinzugefügt. Dieser muss zunächst mittels direkter Integration ermittelt werden. Ein Retrieve findet statt, wenn ein Eintrag gefunden wird und den Genauigkeitsanforderungen genügt. Er wird dann statt der durch direkte Integration gewonnenen Lösung verwendet, das ist in der Regel erheblich schneller. Wachsen bedeutet, dass die Suchanfrage zwar kein Ergebnis lieferte und eine DI durchgeführt werden musste. Anschließend wurde aber festgestellt, dass das Ergebnis fast identisch war mit dem des nächsten Nachbarn der Suchanfrage. Der Toleranzbereich wird dann erweitert. Man sieht in Abbildung 2.13, dass zu Beginn keine Retrieves stattfinden. Die Tabelle muss zunächst aufgebaut werden. Nach etwa 1000 Suchanfragen finden mehr Retrieves als Grows und Adds statt. Die Wahrscheinlichkeit für diese mit direkter Integration verbundenen Ereignisse muss im Verlauf der Rechnung gegen Null gehen, damit eine optimale Geschwindigkeit erreicht wird. Ist dies nicht der Fall, so muss die Tabellengröße erhöht werden.

### ISAT-Algorithmus für ein rein kinetisches System

Der ISAT-Algorithmus nach Pope [60] lautet nun für ein rein kinetisches, adiabates System (Plug-Flow-Reaktor, PFR):

$$S(y(t)) = \frac{dy_i}{dt} = \frac{M_i \omega_i}{\rho}, \quad i = 1, \dots, n_s, \quad (2.138)$$

hier bezeichnen  $M_i$  die molare Masse,  $\rho$  die Dichte und  $\omega_i$  die Reaktionsgeschwindigkeit aus Gleichung (2.83). Die Lösung des Systems (2.138) mit der Startzusammensetzung



**Abbildung 2.12:** Zeitanteil, der für die Berechnung der chemischen Kinetik und der Strömung für eine Simulation mit detaillierter Chemie mit ISAT und einer Tabellengröße von 100 MB und einer ISAT-Fehlertoleranz von  $\epsilon_{ISAT} = 10^{-3}$

$y(t_0) = y^0$  für ein Zeitintervall  $\Delta t$  ist  $y(t_0 + \Delta t)$ . Die Abbildung der Reaktionen wird wie folgt definiert

$$R(y^0, \Delta t) = y(t_0 + \Delta t), \quad (2.139)$$

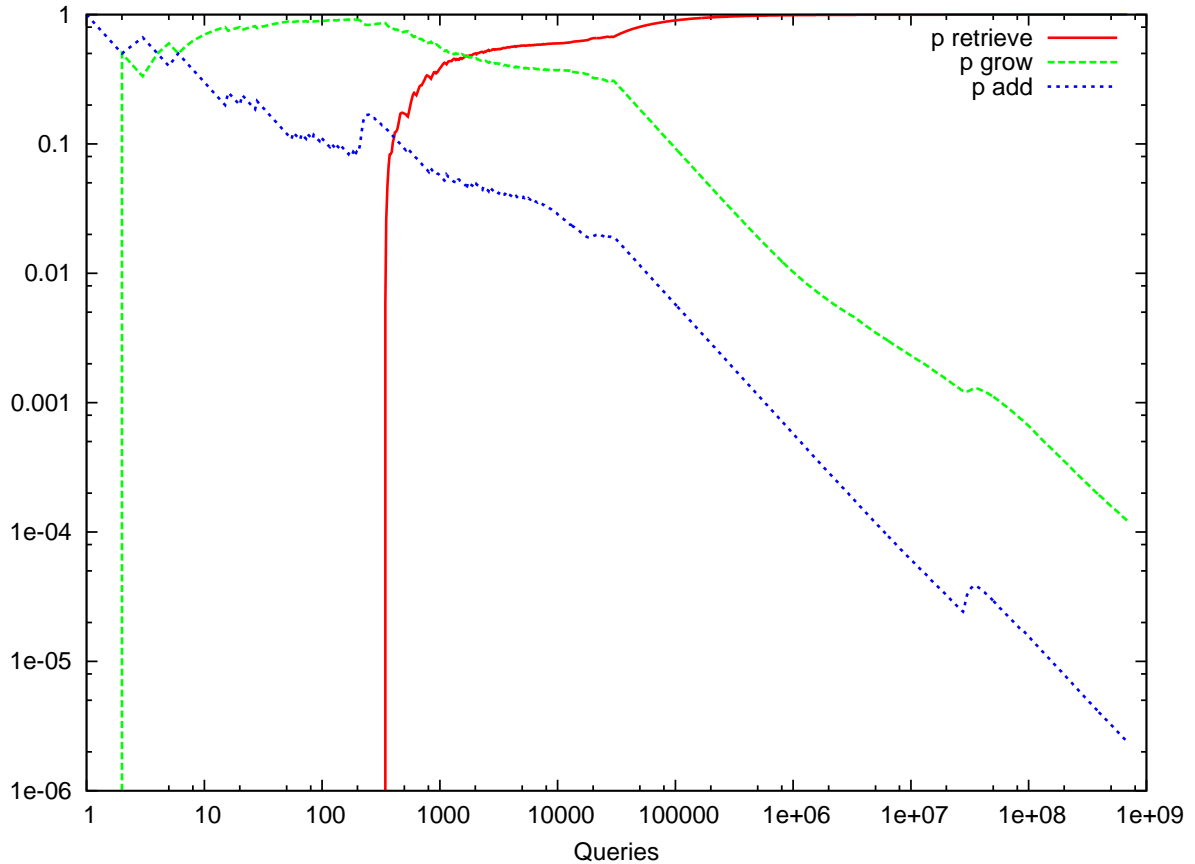
und deren Gradient

$$A(y^0) = \frac{\partial R_i(y^0, \Delta t)}{\partial y_j} \quad (2.140)$$

ist ein Maß für die Sensitivität der Reaktion [58]. Zu jedem Tabelleneintrag wird  $y^0$ ,  $R(y^0)$ ,  $A(y^0)$  sowie eine Angabe über das so genannte Ellipsoid of Accuracy (EOA) gespeichert. Das EOA gibt an in welchem Bereich Retrieves für eine Abfrage  $y^q$  mit Hilfe einer linearen Interpolation

$$R(y^q) = R(y^0) + A(y^0)(y^q - y^0) \quad (2.141)$$

gültig sind. Ist  $y^q$  außerhalb des EOA, so muss eine direkte Integration durchgeführt werden. Diese wird mit der Interpolation (2.141) verglichen. Ist der Fehler kleiner als  $\epsilon_{ISAT}$ , so wird ein Grow durchgeführt, das heißt der EOA wird auf  $y^q$  erweitert. Ist der Fehler größer, so werden  $y^q$  und die zugehörigen Angaben als neuer Eintrag in die Tabelle aufgenommen. Die ISAT-Tabelle wird als binärer Suchbaum in den CFD-Code implementiert. In der



**Abbildung 2.13:** Wahrscheinlichkeit für das Auftreten verschiedener ISAT-Operationen

Literatur wurde von Geschwindigkeitszuwächsen bis zu einem Faktor 1000 durch Einsatz von ISAT berichtet. Verbesserungen des ISAT-Algorithmus für parallele Rechnungen [40], durch verbesserte Grow-Algorithmen [38] oder durch Einführung eines EOI (Ellipsoid of Inaccuracy, Lu u. Pope [41]) sind zum Teil in aktuelleren Implementierungen der ISAT-Bibliothek enthalten.

### ISAT-Algorithmus für das EDC-Modell

Soll das Verfahren in Verbindung mit dem EDC-Modell benutzt werden, muss eine zusätzliche Trennung der Mischungs- und Reaktionsbeiträge erfolgen. Das ODE-System, welches für den EDC-Ansatz gelöst werden muss, lautet wie in Gleichung (2.130)

$$\underbrace{\frac{dy_i^*}{dt}}_{\text{Änderung der Speziesmassen}} = \underbrace{\frac{y_i^o - y_i^*}{\tau_{\text{EDC}}}}_{\text{turbulente Mischung}} + \underbrace{\frac{M_i \omega_i}{\rho^*}}_{\text{chemische Kinetik}}. \quad (2.142)$$

In der ISAT-Tabelle können aber nur kinetische Beiträge erfasst werden. Würde auch der Mischungsparameter  $\tau_{\text{EDC}}$  in einer variierten ISAT-Version berücksichtigt und in  $R_2(y^0, \tau_{\text{EDC}})$  und  $A_2(y^0, \tau_{\text{EDC}})$  entsprechend (2.139) und (2.140) verwendet, so führte das zu einer zu starken „Spreizung“ der Einträge. Das bedeutet, dass die Tabelle sehr groß würde und der Prozess so ineffektiv werden kann, dass er länger dauert als eine direkte Integration.

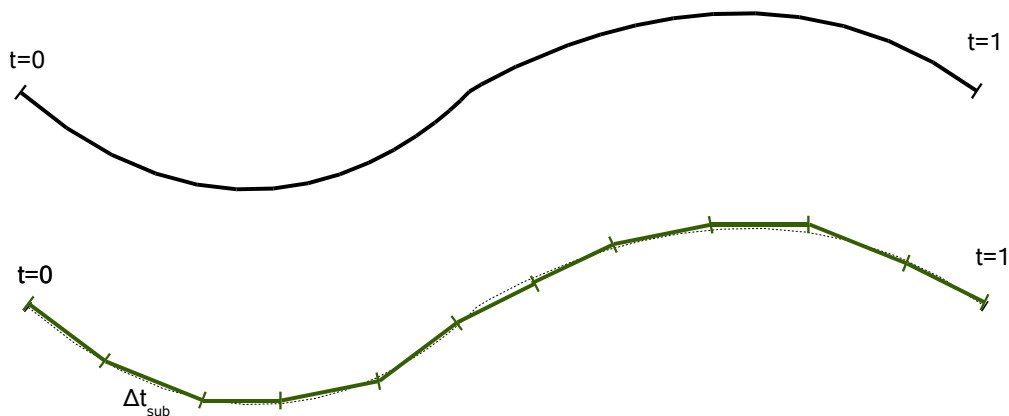
Aus diesem Grund wird eine andere Herangehensweise verwendet: das Operator-Splitting, bei dem eine Entkopplung der Teilprozesse Mischung und Reaktion erreicht werden soll.

Zwei Verfahren, das Strang-Splitting [73] und das Staggered-Splitting [67], sollen an dieser Stelle angeführt werden.

### Strang-Splitting

Das System (2.142) soll für das Zeitintervall  $[0, 1]$  gelöst werden. Durch direkte Integration wird die gekoppelte Lösung mit Hilfe eines ODE-Lösers in einem Schritt  $\Delta t = 1$  durchgeführt. Beim Strang-Splitting wird das Intervall in  $N$  Sub-Intervalle  $\Delta t_{\text{sub}} = \Delta t/N$  unterteilt (siehe Abbildung 2.14) und abwechselnd ein Mischungs- und ein Reaktionsschritt durchgeführt: Für jedes Sub-Intervall  $\Delta t_{\text{sub}}$  wird folgendermaßen vorgegangen (siehe Abbildung 2.15):

1. Integration des Reaktionssystems für das Zeitintervall  $\frac{1}{2}\Delta t_{\text{sub}}$  mit  $y_0$  aus letztem Sub-Intervall.
2. Integration des Mischungssystems für das Zeitintervall  $\Delta t_{\text{sub}}$  mit  $y_0$  aus 1.
3. Integration des Reaktionssystems für das Zeitintervall  $\frac{1}{2}\Delta t_{\text{sub}}$  mit  $y_0$  aus 2.
4. Gehe zum nächsten Sub-Intervall.



**Abbildung 2.14:** Unterteilung des Zeitintervalls in Subschritte der Länge  $\Delta t_{\text{sub}}$

Der Nachteil des Strang-Splittings ist, dass pro Sub-Schritt zwei Reaktionsschritte berechnet werden müssen. Das heißt, dass zwei direkte Integrationen oder ISAT-Abfragen nötig sind. Das Verfahren ist unter bestimmten Voraussetzungen 2. Ordnung genau in  $\Delta t_{\text{sub}}$ .

### Staggered-Splitting

Das Staggered-Splitting nach Ren u. Pope [67] soll die gleiche Genauigkeit wie das Strang-Verfahren bei nur einem Reaktionsschritt erlauben. Dazu wird abwechselnd ein Mischungs- und ein Reaktionsschritt ausgeführt und anschließend eine Mittelung vorgenommen (siehe Abbildung 2.16):

1. Vom  $n$ -ten zum  $n + 1$ -ten Sub-Schritt wird ein Reaktionsschritt ausgeführt, Startwert ist das Ergebnis des vorhergehenden Mischungsschrittes.
2. Ein Mischungsschritt wird durchgeführt, Startwert ist das Ergebnis aus 1.



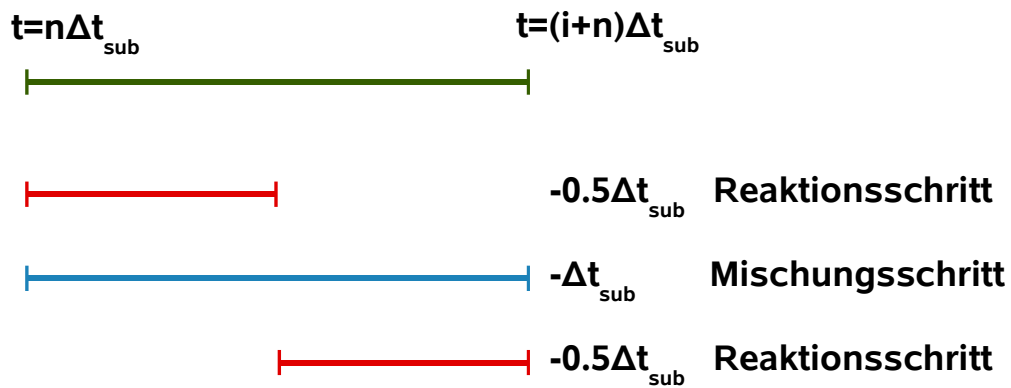


Abbildung 2.15: Schematische Darstellung des Strang-Splittings im  $n$ -ten Sub-Schritt

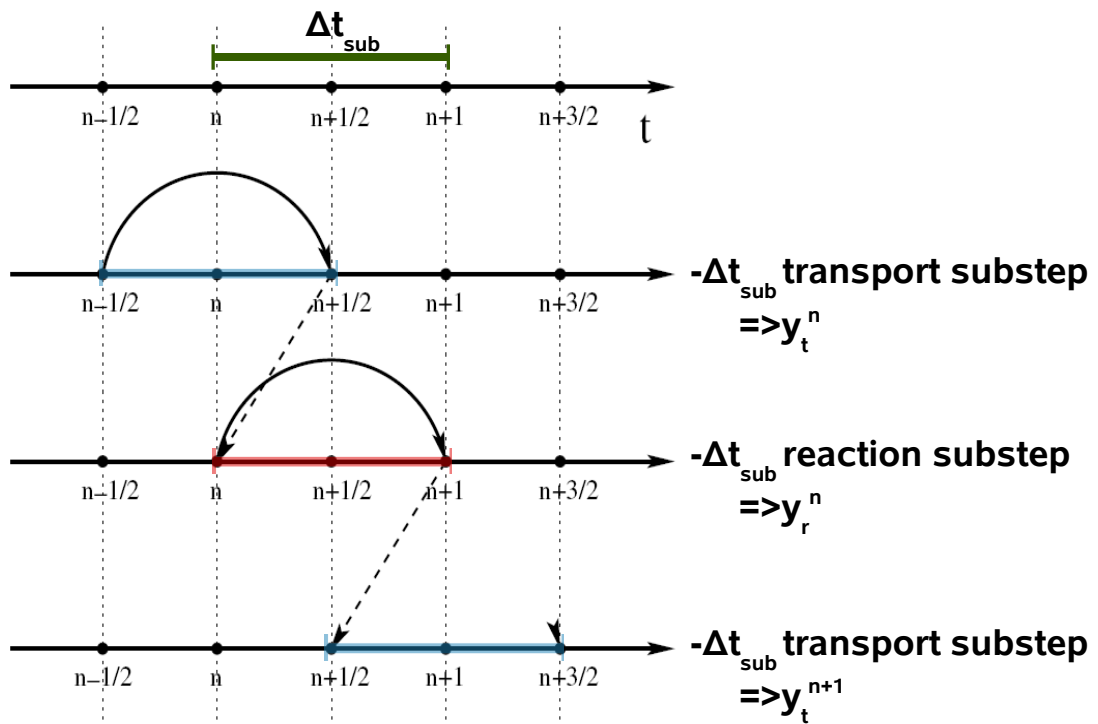


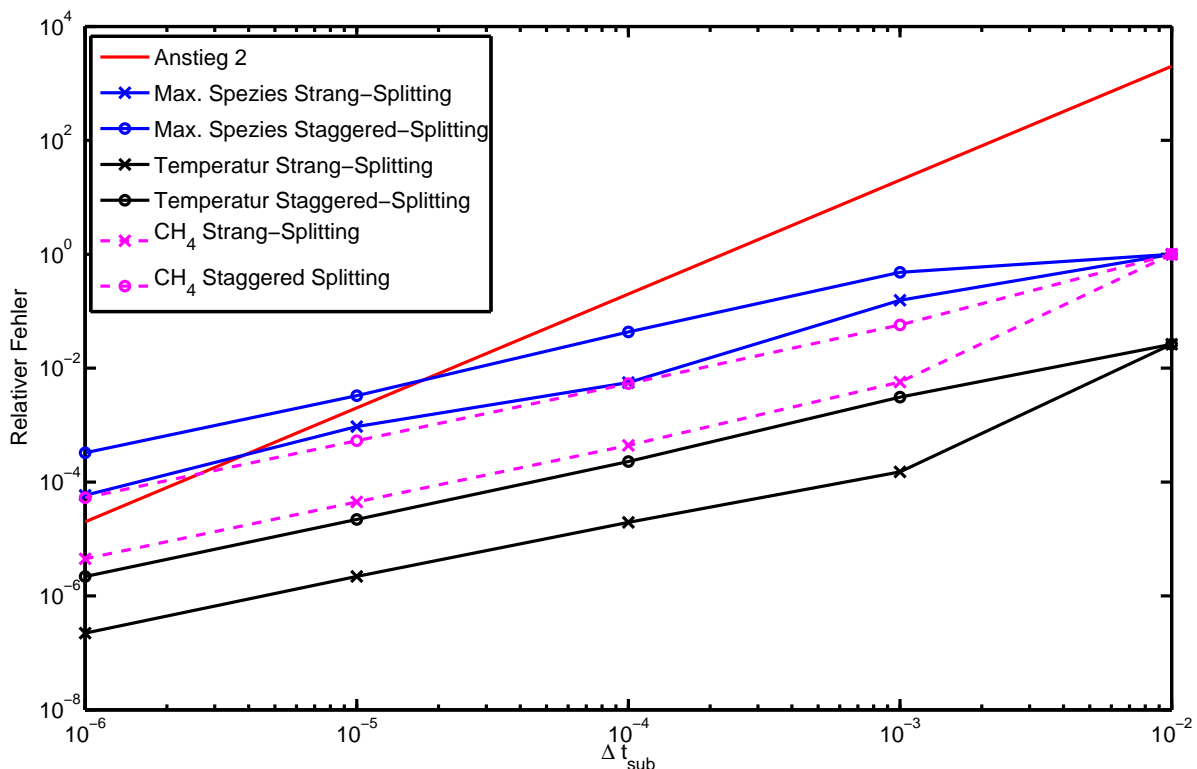
Abbildung 2.16: Die resultierende Zusammensetzung für den Sub-Schritt  $n$  ist  $y^n = \frac{1}{2}(y_t^n + y_r^n)$ . (Skizze aus [67]).

Für den ersten Reaktionsschritt wird der Startwert durch einen halben Mischungsschritt ( $1/2\Delta t_{\text{sub}}$ ) zur Initialisierung erhalten. Die resultierende Zusammensetzung für den Sub-Schritt  $n$  ist

$$y^n = \frac{1}{2}(y_t^n + y_r^n). \quad (2.143)$$

## Numerische Beispiele

Das Zusammenspiel der verschiedenen Zeitskalen im System ist sehr komplex, weshalb für die vorgestellten Verfahren zur Entkopplung des Reaktions-Mischungs-Systems (2.142) numerische Experimente durchgeführt wurden. Dabei wurde das Fehlerverhalten von Strang-Splitting und Staggered-Splitting bezüglich einer Variation von  $\Delta t_{sub}$  und  $\tau_{EDC}$  untersucht. Variiert man den Sub-Zeitschritt  $\Delta t_{sub}$  für die Werte  $\tau_{EDC} = 10^{-2}$  (Abbildung 2.17) und  $\tau_{EDC} = 2 \cdot 10^{-4}$  (Abbildung 2.18), so ist zu erkennen, dass eine Konvergenz zweiter Ordnung (rote Linie, siehe auch Abschnitt 2.3.1 auf Seite 28 zur Erklärung der Konvergenzordnung) für das untersuchte System nicht erreicht werden konnte. Bei einer kleineren Mischungszeit ergibt sich beim Strang-Splitting für die Temperatur und für einige Spezies eine Genauigkeitsverbesserung zweiter Ordnung. Bei einer Variation von  $\tau_{EDC}$  bei festem  $\Delta t_{sub} = 10^{-5}$  (Abbildung 2.19) und  $\Delta t_{sub} = 10^{-6}$  (Abbildung 2.20) zeigt sich, dass der Fehler bei zu großen Sub-Schritten für sehr kleine Mischungszeiten nicht mehr kontrolliert werden kann. Das heißt, dass eine Entkopplung nicht mehr zu rechtfertigen ist. Deshalb muss eine Entkopplung bei ausreichend kleinen Sub-Schritten mit  $\Delta t_{sub} \leq \tau_{EDC}$  durchgeführt werden. Das erfordert jedoch bei hoher Turbulenz viele ISAT-Aufrufe, deren Berechnungsaufwand unabhängig von der Schrittweite ist. Das führt zu einer höheren Berechnungszeit.



**Abbildung 2.17:** Relativer Fehler in Abhängigkeit von  $\Delta t_{sub}$  für  $\tau^* = 10^{-2}$ . Anstieg 2 entspricht einer Genauigkeitsverbesserung zweiter Ordnung.

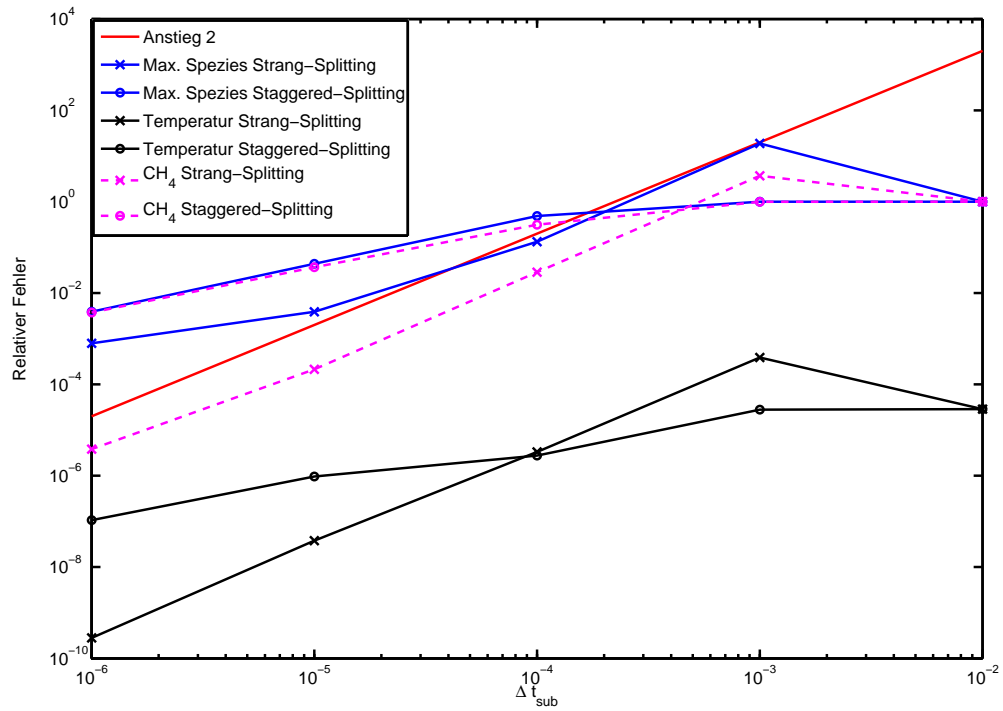


Abbildung 2.18: Relativer Fehler in Abhängigkeit von  $\Delta t_{sub}$  für  $\tau^* = 2 \cdot 10^{-4}$ .

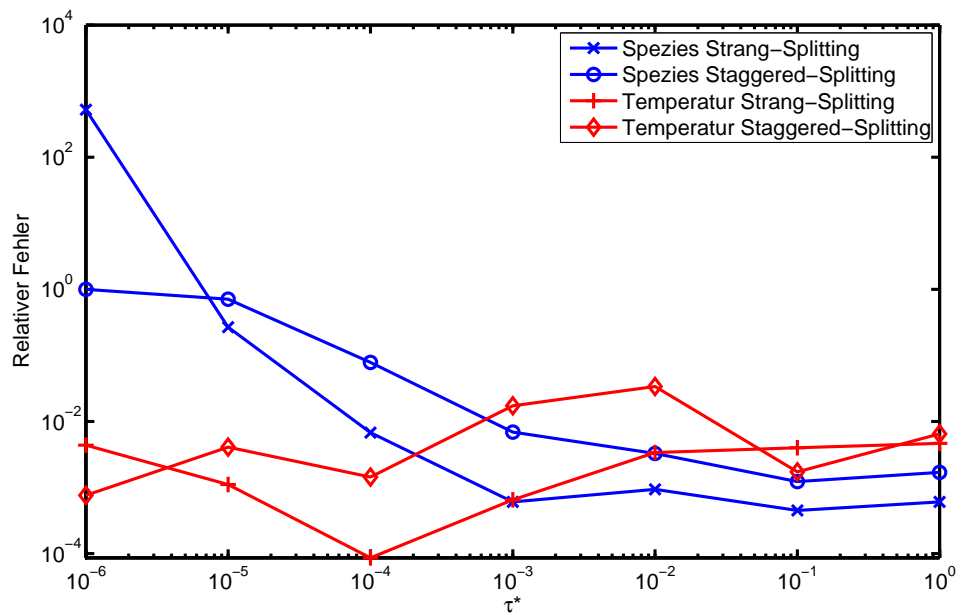


Abbildung 2.19: Abhängigkeit des relativen Fehlers von  $\tau_{EDC}$  bei  $\Delta t_{sub} = 10^{-5}$ .

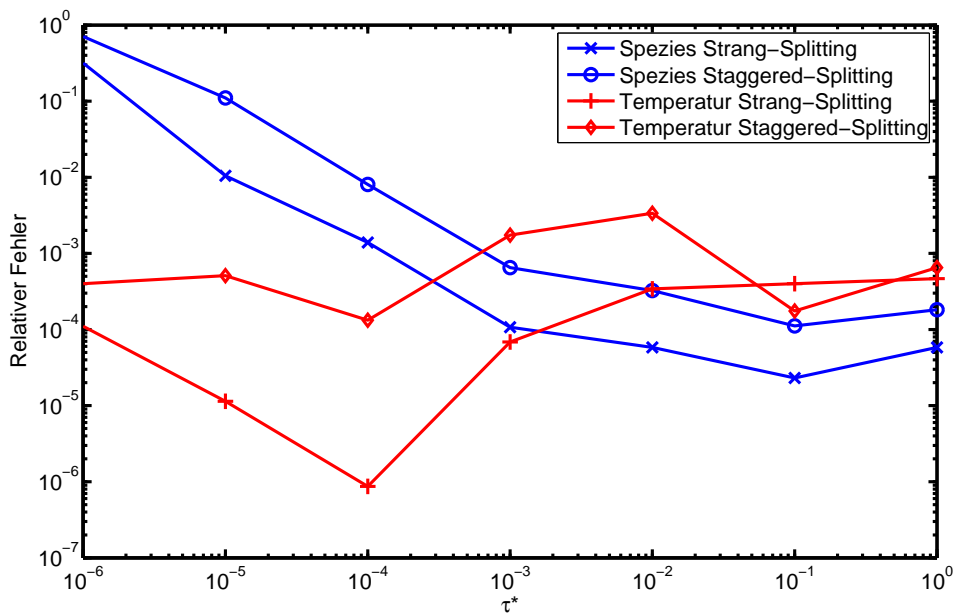


Abbildung 2.20: Abhängigkeit des relativen Fehlers von  $\tau_{\text{EDC}}$  bei  $\Delta t_{\text{sub}} = 10^{-6}$ .

## 2.7 Diskussion einzelner Modelle

Für die meisten der benötigten Modelle kann auf etablierte Standardlösungen zurückgegriffen werden. So sind die erwähnten  $k$ - $\epsilon$ -Turbulenzmodelle für viele Strömungsbedingungen erfolgreich validiert worden und für RANS-Rechnungen das Mittel der Wahl. LES/DES-Rechnungen können nur vereinzelt durchgeführt werden, um RANS-Rechnungen zu überprüfen und Phänomene abzubilden, die bei Simulationen auf größeren Gittern nicht erfasst werden können. Die Auswahl der Strahlungsmodelle erfolgt nach Verfügbarkeit im Code. Eine Bewertung findet in Abschnitt 4.3 statt. Einen starken Einfluss hat jedoch das Verbrennungsmodell, dessen Rolle bisher für Vergasungsbedingungen noch nicht ausreichend untersucht wurde. Dazu soll in den folgenden beiden Abschnitten ein Beitrag geliefert werden. In Abschnitt 2.7.3 wird dann eine kurze Diskussion über den verwendeten detaillierten Reaktionsmechanismus ATRMech durchgeführt.

### 2.7.1 Analyse des EDC-Modells für Vergasungsbedingungen

Das EDC-Modell ist ein Verbrennungsmodell, das in der Lage ist, detaillierte Reaktionsmechanismen zu berücksichtigen. Es hat im Vergleich zu anderen Modellen weitere Vorteile. Es ist wenig komplex und braucht weniger Rechenzeit als zum Beispiel das Transported-PDF-Modell. Von den aus der Literatur bekannten Modellen stellt es die günstigste verfügbare Lösung dar. Wie in Rehm u. a. [65] dargelegt wurde, ist es jedoch für Vergasungsbedingungen nur bedingt geeignet. Eine Parametervariation zeigte, dass auch mit veränderten EDC-Einstellungen die Messwerte durch die Simulation nicht reproduziert werden konnten. Die anschließend durchgeführte Zeitskalenanalyse soll an dieser Stelle noch einmal wiederholt werden.

Die Zeitskalen des turbulenten Transports können mit Hilfe der Größen des Turbulenzmo-

dells erhalten werden. Es seien:

$$\tau_{\text{int}} = \frac{C_D k}{\sqrt{\frac{2}{3}\epsilon}}, \quad (2.144)$$

$$\tau_{\eta} = \left(\frac{\nu}{\epsilon}\right)^{\frac{1}{2}}, \quad (2.145)$$

$$\tau_{\text{cell}} = \frac{V^{\frac{1}{3}}}{|u|}, \quad (2.146)$$

$$\tau_{\text{EDC}} = C_{\tau} \tau_{\eta}. \quad (2.147)$$

Das Kolmogorov-Zeitmaß  $\tau_{\eta}$  heißt auch „turnover time“ der kleinsten Wirbel und das integrale Zeitmaß  $\tau_{\text{int}}$  bezieht sich entsprechend auf die integrale Turbulenzzone. Das sind diejenigen Wirbel mit der größten kinetischen Energie. Die Größe  $\tau_{\text{cell}}$  ist ein Maß für die Verweilzeit in einer Zelle. Weiter sei  $\tau_{\text{EDC}}$  die bereits verwendete Größe aus (2.129).

Eine weitere wichtige Größe ist die charakteristische chemische Zeitskala  $\tau_{\text{chem}}$ . Sie ist ein Maß für die Dauer der langsamsten chemischen Reaktionen. Zwei verschiedene Größen für die chemische Zeitskala werden definiert, zuerst mit Hilfe einer Sensitivitätsanalyse der Hauptspezies. Es seien  $i_j$  gemäß

$$I = \{i_1 = i_{\text{H}_2}, i_2 = i_{\text{H}_2\text{O}}, i_3 = i_{\text{CH}_4}, i_4 = i_{\text{CO}}, i_5 = i_{\text{CO}_2}\} \quad (2.148)$$

die Indizes der Hauptkomponenten im Reaktionsmechanismus. Für die Reaktionsrate gilt

$$\frac{dy}{dt} = f(y). \quad (2.149)$$

Die Entwicklung von  $f(y)$  in eine Taylor-Reihe und die Vernachlässigung der Terme höherer Ordnung ergibt

$$\frac{dy}{dt} \approx f(y_0) + f'(y_0)(y - y_0) \text{ mit } f'(y_0) = J = \frac{\partial f_i(y_0)}{\partial y_{0j}} \text{ und } i, k = 1, \dots, n_s. \quad (2.150)$$

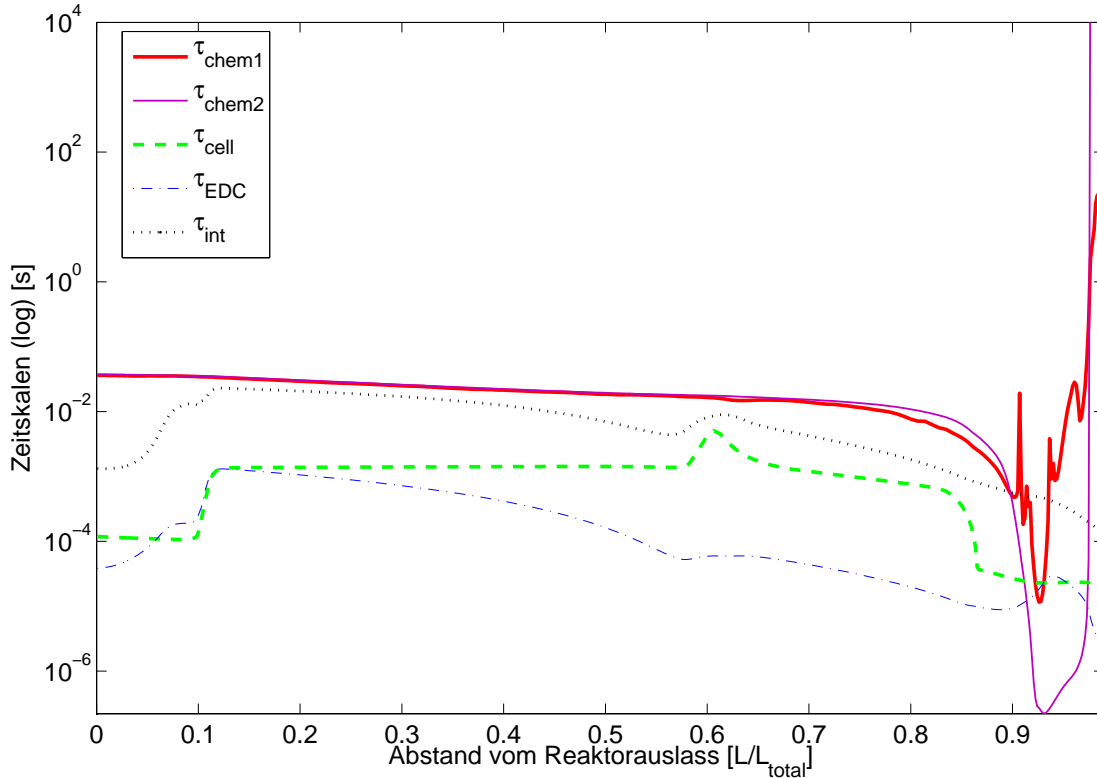
Die Komponenten  $j_{i,k}$  von  $J$  sind ein Maß für die Dynamik des chemischen Systems an dem Punkt  $y_0$  im Zustandsraum. Dieser ist wohl definiert, weil Druck und Enthalpie im Idealreaktor konstant sind. Die reziproken Einträge von  $J$  entsprechen Reaktionszeiten. Als charakteristisches chemisches Zeitmaß einer Hauptkomponente wird nun die langsamste der Zeiten gewählt:

$$\tau_{\text{chem1}} = \max_{i,k \in I} \left( \frac{1}{j_{i,k}} \right). \quad (2.151)$$

Ein zweiter, allgemeinerer Ansatz bezieht sich auf die reellen Anteile der Eigenwerte  $\lambda_i$  von  $J$ , um die kleinsten chemischen Zeitskalen aus

$$\tau_{\text{chem2}} = \max_i \left( \frac{1}{\text{Re}(\lambda_i)} \right) \quad (2.152)$$

zu erhalten. In Abbildung 2.21 kann man erkennen, dass die Zeitskalen  $\tau_{\text{chem1}}$ ,  $\tau_{\text{chem2}}$  stromabwärts fast gleich sind. Die Spezies, die  $\tau_{\text{chem1}}$  in diesem Bereich zugeordnet ist, ist  $\text{CH}_4$ . Das heißt, dass die Methanreformierung einen der langsamsten chemischen Prozesse



**Abbildung 2.21:** Darstellung verschiedener Zeitskalen über der relativen Reaktorlänge entlang der Symmetrieachse, aus einer CFD-Simulation.  $L$  ist der relative Abstand vom Auslass.

darstellt. Das Verhältnis von turbulentem Zeitmaß (Vermischung) und chemischem Zeitmaß (Reaktion) wird auch als Damköhler-Zahl  $Da$  bezeichnet (siehe Gleichung (2.124)):

$$Da = \frac{\tau_{\text{mix}}}{\tau_{\text{chem}}}. \quad (2.153)$$

Für die chemische Zeit wird  $\tau_{\text{chem2}}$  gewählt. Da die Turbulenz die Mischung dominiert, wäre eine Wahl für die Mischungs-Zeitskala  $\tau_{\text{int}}$  aus Gleichung (2.145) oder aber  $\tau_{\text{EDC}}$  aus der EDC-Formulierung möglich. Beide Mischungs-Zeitskalen zeigen ein vergleichbares Verhalten. So ist die Damköhler-Zahl in der Flammenzone sehr groß, das heißt, dass die Mischung der Edukte zeitbestimmend ist. Dagegen ist weiter stromabwärts  $Da < 1$ . Da das EDC-Modell für Verbrennung entwickelt wurde und die Komponenten, die durch Oxidation entstanden sind (vor allem  $\text{CO}_2$ ,  $\text{O}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ), korrekt berechnet werden, wird geschlussfolgert, dass die Schwächen des EDC-Modells aus dem Bereich außerhalb der Flammenzone resultieren. Unter dieser Annahme wird verständlich, dass eine Anpassung der EDC-Parameter nicht ausreicht, weil diese global wirksam sind. Kjälman u. a. [34] erwähnen, dass für den Fall, dass die charakteristische chemische Zeit viel größer ist als die Aufenthaltszeit in den reaktiven Anteilen, auch Reaktionen in dem eigentlich inerten umgebenden Fluid berücksichtigt werden müssen. Da dort  $Da \ll 1$  gilt, kann quasi die gesamte Zelle als Idealreaktor angenommen werden. Es gilt dann

$$\bar{\omega}_i = \gamma^3 \omega_k^* + (1 - \gamma^3) \omega_k^o \quad (2.154)$$

statt (2.133). Hier steht  $\omega_k^*$  für die Reaktionsrate im reaktiven Anteil und  $\omega_k^o$  für die Reaktionsrate im inerten Anteil. In Magnussen [46] wird ähnlich argumentiert. Die Umsetzung dieser Methodik ist Gegenstand des folgenden Abschnitts.

## 2.7.2 Anpassung des Verbrennungsmodells für Vergasungsbedingungen

### EDC-PFR-Zonenmodell

Die Variation des EDC-Modells für den Vergasungsbereich wird folgendermaßen vorgeschlagen: Da die Mischung der Edukte bereits vollständig abgeschlossen ist, kann die im EDC-Modell enthaltene Mikromischung innerhalb der Zelle vernachlässigt werden. Das bedeutet, dass in Gleichung (2.130) der Term der Mischung ( $\frac{y_i^0 - y_i^*}{\tau_{EDC}}$ ) null gesetzt wird. Die mittlere Reaktionsrate der Zelle  $\bar{\omega}_i$  wird dann durch einen einfachen PFR-Ansatz (Plug-Flow-Reactor) mit der Verweilzeit  $\tau_{PFR}$ , der nur chemische Kinetik berücksichtigt, realisiert:

$$\frac{dy_i}{dt} = \frac{\omega_i}{\rho}, \quad i = 1, \dots, n_s. \quad (2.155)$$

Durch Integration des Systems (2.155) über die Zeit  $\tau_{PFR}$  erhält man die Zusammensetzung  $y^1$  und damit ergibt sich

$$\frac{\bar{\omega}_i}{\bar{\rho}} = \frac{y_i^1 - y_i^0}{\tau_{PFR}}, \quad i = 1, \dots, n_s, \quad (2.156)$$

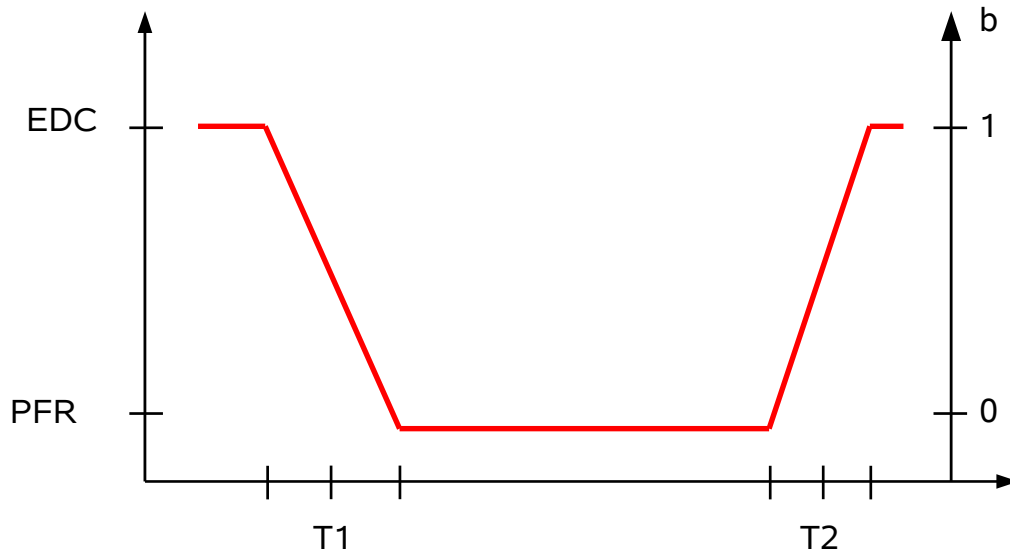
für die Speziesgleichung. Dabei ist  $\tau_{PFR}$  die Verweilzeit des Fluids in der Zelle, welche durch die Strömungsrichtung, den Zelldurchmesser in dieser Richtung und die Strömungsgeschwindigkeit berechnet wird. Eine Unterteilung der Zonen anhand der Kriterien Sauerstoffanteil und Temperatur wird nun folgendermaßen vorgenommen:

- Zone 1: Verbrennungszone - Im Brennernahbereich: Freier Sauerstoff vorhanden ( $y_{O_2} > 0.001$ ) **oder**  $T \notin [T_1, T_2]$ .
- Zone 2: Vergasungszone - Außerhalb der Flammenzone. Kein freier Sauerstoff ( $y_{O_2} < 0.001$ ) **und**  $T \in [T_1, T_2]$ .
- Zone 3: Übergangszone - Ein Zwischenbereich, um numerische Probleme zu vermeiden.

Prinzipiell kann man die Verbrennungs- und Vergasungszone anhand des freien Sauerstoffs unterscheiden. Da aber im Fall von Gas-POX die Edukte getrennt zugeführt werden, ist im Erdgaskanal kein Sauerstoff vorhanden. Dieser Bereich soll aber auch zur Verbrennungszone (Zone 1) gehören. Da die Edukte viel kälter als alle anderen Bereiche des Reaktors sind, kann das Temperaturintervall  $[T_1, T_2]$  als weiteres Kriterium herangezogen werden. Das bedeutet also, dass die besonders kalten und besonders heißen Bereiche zur Zone 1 zugerechnet werden. Dabei ist  $T_1$  kleiner als die Temperatur am Austritt und  $T_2$  ist so gewählt, dass es deutlich unter der Maximaltemperatur liegt und den Übergang von der Verbrennungs- zur Vergasungszone charakterisiert. Die Werte für die Temperatur wurden folgendermaßen gewählt:  $T_1 = 1400$  K,  $T_2 = 2025$  K. Umgekehrt kann das Intervall auch als Temperaturbereich, wo die Vergasung der dominierende Prozess ist, bezeichnet werden. Die Übergangsfunktion  $b$  ist linear für  $T_1 \pm 100$  K,  $T_2 \pm 25$  K und ist in Abbildung 2.22 dargestellt [66]. Die Reaktionsrate wird dann folgendermaßen berechnet:

$$\bar{\omega} = b * \bar{\omega}_{EDC} + (1 - b) * \bar{\omega}_{PFR} \quad (2.157)$$

dabei wird  $\bar{\omega}_{EDC}$  wie in Gleichung (2.133) berechnet und  $\bar{\omega}_{PFR}$  durch Integration der Gleichung (2.156).



**Abbildung 2.22:** Schema der Transitionsfunktion  $b$ ,  $b = 1$  entspricht dem EDC-Modell und  $b = 0$  entspricht dem PFR-Modell.

### Reiner PFR-Ansatz

Es besteht weiterhin die Möglichkeit, auch in der Flammenzone den PFR-Ansatz zu verwenden. Dies stellt eine Vereinfachung dar, bedeutet aber auch eine Verringerung des Rechenaufwandes, da die Zonenaufteilung entfällt. Eine Realisierung entspricht der Formulierung in Gleichung (2.156). Ein Vergleich und eine Bewertung der drei Ansätze befindet sich im Ergebnisteil in Abschnitt 4.6.

### 2.7.3 Reaktionsmechanismen für die partielle Oxidation von Methan

Bei der Verwendung detaillierter Reaktionsmechanismen ist der Berechnungsaufwand für die Lösung der Gleichungen für die chemische Kinetik sehr hoch. Es taucht mitunter sogar die Frage auf, ob der Aufwand den Nutzen nicht übersteigt. Unter den hier geforderten Bedingungen (Verbrennung und Vergasung, Druck 30-100 bar) wäre jedoch für jeden Zustand ein eigener Mechanismus erforderlich. Selbst wenn es gelänge, diese zu finden, wäre eine Vergleichbarkeit der Rechenergebnisse nicht mehr gegeben.

Einem weiteren Einwand, dass die Mechanismen außerhalb der validierten Spezifikationen betrieben würden, soll folgendes entgegengehalten werden: von Konnov u. a. [36] wurden verschiedene Mechanismen unter Vergasungsbedingungen getestet. Die Ergebnisse für den GRI-Mech 3.0 waren zufriedenstellend für Temperaturen oberhalb 1000 K. Auch von Zhu u. a. [82] wurden detaillierte Mechanismen erfolgreich zur Berechnung einer Partialoxidation verwendet. Das heißt, dass für hohe Temperaturen die Gültigkeit des GRI-Mech 3.0 durchaus gegeben ist. In der vorliegenden Arbeit wird die von Zeißler [81] entwickelte reduzierte Variante des GRI-Mech 3.0 mit der Bezeichnung ATRMech eingesetzt. Sie zeigte für alle relevanten Bedingungen eine hohe Übereinstimmung mit dem vollen Mechanismus. Der ATRMech wird somit als günstigste Variante unter den verfügbaren Alternativen erachtet und im Folgenden verwendet.

Von Brüggemann u. a. [4] wurde der Mechanismus von Noto u. a. [51] eingesetzt, der ebenfalls zufriedenstellende Ergebnisse lieferte. Dieser Mechanismus wurde in einer CFD-Rechnung erprobt, jedoch konnte keine stabile Berechnung durchgeführt werden.



## 3 Numerische Implementierung und Validierung

In diesem Kapitel wird die Implementierung der theoretisch beschriebenen Modelle erläutert. Der Beitrag des Autors besteht darin, dass erstmals ein stationärer Löser mit detaillierter Kinetik in OpenFOAM entwickelt wurde.

### 3.1 Eingesetzte Software

#### 3.1.1 Fluent

Das kommerzielle Programmpaket FLUENT<sup>®</sup> wird häufig für Strömungssimulationen eingesetzt und zeichnet sich durch eine hohe Modellvielfalt besonders im Bereich reaktiver Strömungen aus. Das Paket wurde bereits von Heinzel [24] und Zeißler [81] für Simulationen des HP-POX-Reaktors eingesetzt. Alle physikalischen und numerischen Standardmodelle, die in Kapitel 2 erläutert wurden, sind im Paket enthalten. Modelle, die über die Standardimplementierungen hinaus gehen, können durch so genannte User-Defined-Functions (UDF) angekoppelt werden. So wurde beispielsweise in Heinzel [24] die Anbindung der ILDM-Methode dargestellt. Häufig sind komplexere Eingriffe jedoch schwierig (z.B. wegen Fehlersuche) und gehen zu Lasten der Laufzeit und der Parallelisierbarkeit. Weil der Quellcode des Programms nicht zur Verfügung steht, ist bei manchen Modellen die konkrete Implementierung nicht nachvollziehbar. Detaillierte Reaktionsmechanismen können im CHEMKIN<sup>®</sup>-Format eingelesen werden, jedoch nur bis zu einer maximalen Speziesanzahl von 50.

#### 3.1.2 OpenFOAM

Hinter der Bezeichnung OpenFOAM<sup>®</sup> [56] verbirgt sich ein quelloffenes CFD-Programmpaket, das in C++ geschrieben ist. Es ist modular aufgebaut. Es besitzt viele sehr spezielle Löser, und die Modelle sind in verschiedenen Bibliotheken abgelegt. Löser und Modelle können auf einer höheren Ebene mittels eigener Konventionen zur Definition der Gleichungssysteme relativ einfach geändert oder neu geschrieben werden. Zum Beispiel lautet die turbulente Spezieserhaltungsgleichung (Gleichung (2.120))

$$\frac{\partial y_i \rho}{\partial t} + \text{div}(y_i \rho u) - \text{div}(\mu_{\text{eff}} \text{grad } y_i) = \omega_i M_i \quad (3.1)$$

in der OpenFOAM-Konvention:

<sup>1</sup>FLUENT<sup>®</sup> ist ein eingetragenes Markenzeichen von ANSYS Inc.

<sup>2</sup>CHEMKIN<sup>®</sup> ist ein eingetragenes Markenzeichen von Reaction Design.

<sup>3</sup>OpenFOAM<sup>®</sup> ist ein eingetragenes Markenzeichen von OpenCFD limited.

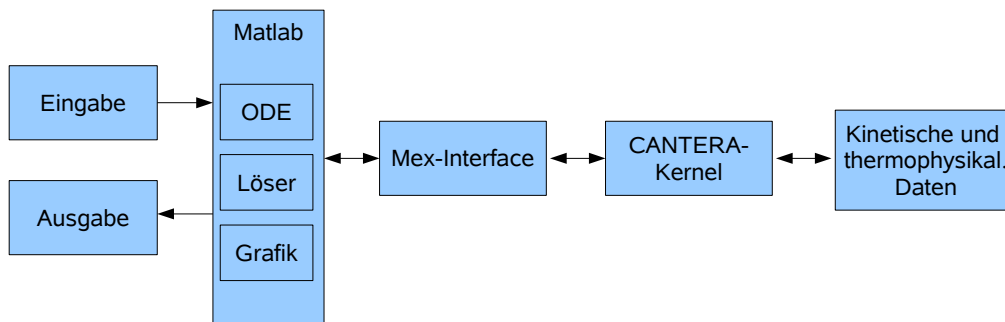
```

    fvm::ddt(rho, Yi)
+   mvConvection->fvmDiv(phi, Yi)
-   fvm::laplacian(turbulence->muEff(), Yi)
==
    chemistry.RR(i)

```

Weitere Informationen dazu sind im OpenFOAM Programmers Guide [53] und im Users Guide [54] enthalten. Im Code ist die vollständige Finite-Volumen-Methode für beliebig unstrukturierte Gitter implementiert. Rechengitter können von allen gängigen Formaten in OpenFOAM genutzt werden. Insbesondere können Gitter aus Fluent-Rechnungen verwendet werden. Für die Modellierung reaktiver Strömungen liegen grundlegende Modelle vor. Andere müssen bei Bedarf hinzugefügt werden oder können aus einer Datenbank bestehender Erweiterungen [55] bezogen werden. Eine genauere Diskussion zu den im Rahmen der vorliegenden Arbeit entwickelten Modelle findet im Abschnitt 3.2.3 statt.

### 3.1.3 CANTERA



**Abbildung 3.1:** Schematische Darstellung der Kopplung des Programmpakets CANTERA an MATLAB

Beim ebenfalls quelloffenen verfügbaren CANTERA [19] handelt es sich um eine Bibliothek zur Berechnung von chemischer Kinetik, thermophysikalischen Zuständen und chemischen Gleichgewichten. Es ist sehr flexibel einsetzbar und kann kinetische, thermodynamische und Transportdaten, welche im weit verbreiteten CHEMKIN-Format [32] vorliegen, verarbeiten. Es besteht aus einer Kernbibliothek, die in C++ programmiert ist und auf die über verschiedene Schnittstellen mit unterschiedlichen Programmierwerkzeugen zugegriffen werden kann. CANTERA kann in Matlab-, Python-, C++- und Fortranumgebungen benutzt werden. Das macht es sehr flexibel und attraktiv für die Entwicklung von Programmen für chemische Reaktionen. So kann ein Modell in MATLAB®[47] komfortabel getestet und dann in den produktiven Einsatz in eine C++-Umgebung eines CFD-Codes wie OpenFOAM übertragen werden. In Abbildung 3.1 ist die Anbindung an MATLAB dargestellt und im Anhang (1 - 4) befinden sich Beispielcodes für den Einsatz von MATLAB und CANTERA. Für ablaufende chemische Reaktionen kann auch der Reaktionsverlauf grafisch dargestellt werden oder es ist möglich, Sensitivitätsanalysen durchzuführen. Weiter steht eine Anzahl von Idealreaktoren

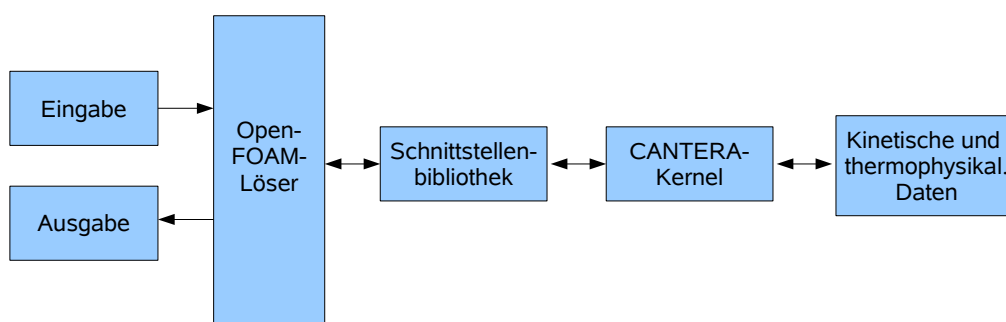
<sup>2</sup>MATLAB® ist ein eingetragenes Markenzeichen von The MathWorks Inc.

zur Verfügung, durch deren Verschaltung auch komplexe Systeme nachgebildet werden können.

## 3.2 Entwickelte Werkzeuge

### 3.2.1 CANTERA-Schnittstelle für OpenFOAM

Im Verlauf der Arbeit zeigte sich, dass die in OpenFOAM vorhandene Klasse zur Behandlung der chemischen Vorgänge nicht für komplexe Reaktionsmechanismen und stationäre Löser stabil arbeitete. Zunächst wurde nur ein neuer ODE-Löser eingebaut, später jedoch wurde der Entschluss getroffen, die Chemiebibliothek CANTERA mittels einer Schnittstellenbibliothek an OpenFOAM zu koppeln. Diese Option hat weiterhin den Vorteil, dass Rechnungen mit Idealreaktoren und CFD-Gesamtberechnungen mittels einer einheitlichen Datenbasis und identischen Berechnungsroutinen durchgeführt werden können. Alle oben beschriebenen Funktionen von CANTERA (Gleichgewicht, Wärmeleitfähigkeit, Viskosität, ...) sind zudem verfügbar. In Abbildung 3.2 ist die Anbindung veranschaulicht. Die Programmierung wurde von Bernhard Gschaider (ICE Strömungsforschung) und dem Autor durchgeführt und in Gschaider u. a. [23] vorgestellt.



**Abbildung 3.2:** Schematische Darstellung der Kopplung des Programmpakets CANTERA an OpenFOAM

### 3.2.2 Implementation des EDC-Modells in MATLAB und OpenFOAM

Die korrekte Implementierung des EDC-Modells stellte sich schwierig dar, da die Umsetzung aus den einschlägigen Veröffentlichungen nicht eindeutig hervorgeht. In einer Korrespondenz mit Ertesvåg [13] konnten die Probleme ausgeräumt werden. Das EDC-Modell wurde dann in CANTERA mit Hilfe von Idealreaktoren nach dem Vorbild von Abbildung 2.10 in Abschnitt 2.5.4 (Seite 39) realisiert. Der Code zu einer Implementation in MATLAB ist im Anhang 5 und ein Auszug aus dem OpenFOAM-Code (C++) ist im Anhang 6 zu finden.

### 3.2.3 Entwicklung eines EDC-Lösers für OpenFOAM

Die Entwicklung des OpenFOAM-EDC-Lösers wurde auf Basis von zwei verfügbaren OpenFOAM-Lösern durchgeführt. In der Standardversion von OpenFOAM existiert zum

einen ein stationärer Löser für inkompressible Strömungen (simpleFOAM) und zum anderen ein instationärer Löser, der Gasphasenchemie berücksichtigt (reactingFoam). Weiter wurde dem Autor ein stationärer Löser, der auf dem Eddy-Dissipation-Modell (EDM, Abschnitt 2.5.3) beruht, von Lucchini [42] zur Verfügung gestellt. Begonnen wurde mit dem stationären Standardlöser und dort wurde im ersten Schritt nur die inerte Mischung berücksichtigt. Dieser Löser wurde anhand von Messdaten einer nichtreaktiven Strahlströmung, wie in Abschnitt 3.3.2 dargestellt, validiert. Später wurden chemische Reaktionen mit Hilfe der CANTERA-OpenFOAM-Schnittstelle hinzugefügt und das EDC-Modell programmiert. Dieser Löser wurde dann mit Hilfe der HM1-Testflamme (siehe Abschnitt 3.3.3) überprüft. Das Ergebnis wurde in Rehm u. a. [64] präsentiert. Anschließend wurde der Löser für die variierten Modelle EDC-PFR und PFR angepasst und ein Strahlungsmodell hinzugefügt.

### 3.2.4 Transienter Löser tracerFoam

Um das Verweilzeitverhalten des HP-POX-Reaktors zu untersuchen, wurden Versuche mit radioaktivem Tracermaterial durchgeführt, da mit dieser Methode kein mechanischer Eingriff in das System nötig ist. Mittels des radioaktiven Isotops  $^{40}_{18}\text{Ar}$ , welches durch einen definierten Impuls am Eintritt aufgegeben wird, kann das Antwortsignal auf verschiedenen Messebenen mit Hilfe von Szintillationszählern aufgenommen werden. Um diese Daten zur Validierung einzusetzen, müssen zeitabhängige Simulationen durchgeführt werden. Diese sind sehr rechenzeitintensiv, weil das Signal über einen Zeitraum von bis zu 40 s im Reaktor nachweisbar ist.

Aus diesem Grund wurde ein spezieller Löser entwickelt, der nur den zeitlichen Verlauf der Tracerspezies berechnet. Als Initialisierung wird eine stationäre Lösung (Geschwindigkeit, Temperatur, Dichte, Druck) verwendet. Mit Hilfe des vorhandenen Feldes lässt sich der zeitliche Verlauf der Konzentrationsänderung der Tracerspezies sehr schnell berechnen, da nur eine Erhaltungsgleichung pro Zeitschritt gelöst wird und keine Chemieberechnung durchgeführt werden muss. Es liegt die berechnete Annahme zugrunde, dass das Feld der stationären Lösung durch den Tracer nicht verändert wird. Dies ist ein typischer Post-Processing-Ansatz. Die Ergebnisse der Simulationen und der Vergleich mit experimentellen Daten ist in Abschnitt 4.8.4 zu finden.

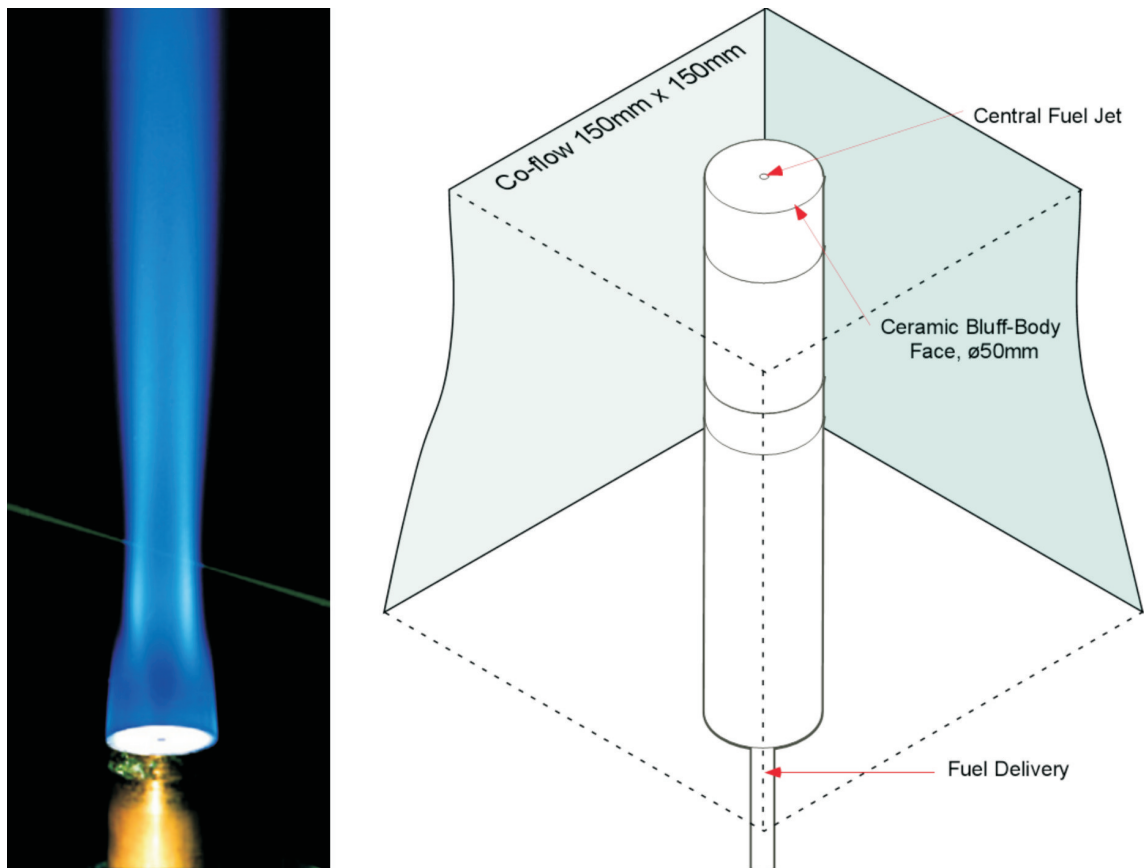
### 3.2.5 ISAT-Algorithmus

Eine Implementierung des ISAT-Algorithmus wurde dem Autor von Lucchini [42] zur Verfügung gestellt. Diese Version wurde für instationäre Löser entwickelt und sie arbeitet mit einer konstanten Zeitschrittweite. Wie in Abschnitt 2.6.2 beschrieben, muss für den Einsatz mit dem EDC-Modell ein geeignetes Splitting eingesetzt werden. Ergebnisse des OpenFOAM-Lösers mit ISAT-Tabellierung für den Testfall HM1-Flamme werden in Abschnitt 3.4 dargestellt.

### 3.3 Validierung der entwickelten Löser

Im Rahmen des seit 1996 alle zwei Jahre stattfindenden „International Workshop on Measurement and Computation of Turbulent Nonpremixed Flames“ (siehe zum Beispiel TNF8 [76]) wurden zahlreiche hervorragende Testfälle für turbulente Diffusionsflammen präsentiert. Die für das spätere Einsatzgebiet (HP POX) am ähnlichsten ausgeprägte Testflamme (Erdgas-Diffusionsflamme, hohe Geschwindigkeit) wurde für die Validierung des Löser ausgewählt.

#### 3.3.1 Versuchsaufbau und experimentelle Daten



**Abbildung 3.3:** Links: Foto der HM1-Flamme, rechts: Skizze der Versuchsanordnung an der Universität Sydney [10].

Der neue OpenFOAM-EDC-Löser wurde mit Hilfe von Daten aus Messreihen zur HM1-Testflamme [10] validiert. Bei der Testflamme handelt es sich um eine turbulente, nicht vorgemischte Laborflamme zu der die Eintrittsbedingungen, Strömungsverhältnisse, Spezies- und Temperaturverteilungen mit Hilfe laserspektroskopischer Methoden exakt vermessen wurden. Sie eignet sich deshalb hervorragend zur Validierung von CFD-Codes. Eine Skizze des Versuchsaufbaus aus Dally u. a. [10] ist in Abbildung 3.3 dargestellt.

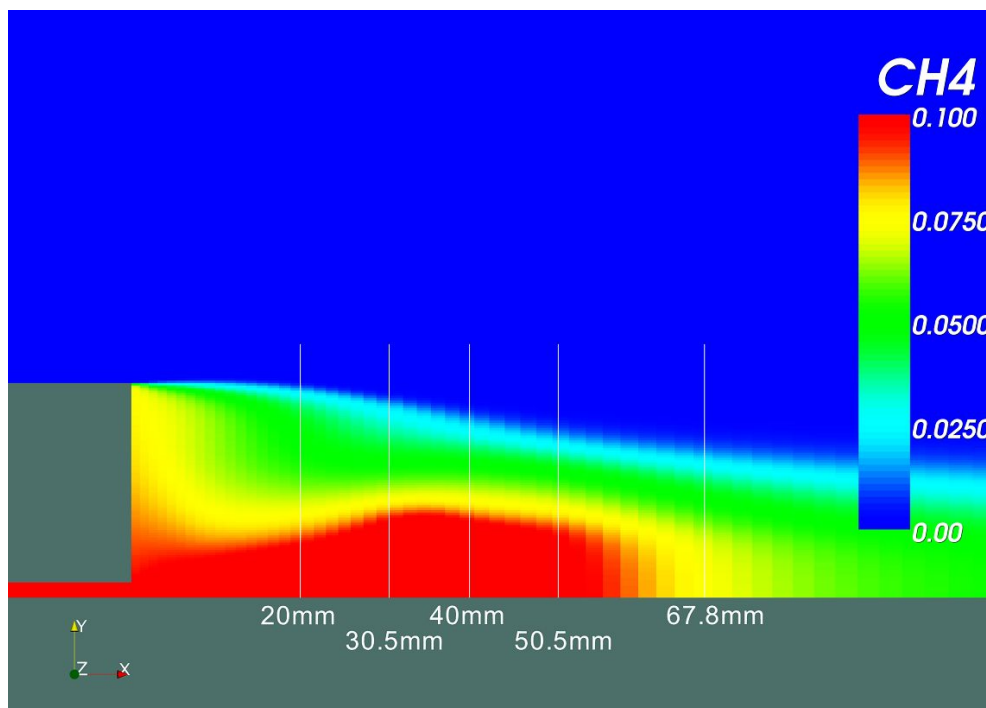
Ein zylindrischer Rundkörper (Bluff-Body) mit 50 mm Durchmesser wird in einem Windkanal von 150 mm x 150 mm Querschnitt positioniert. In der Mitte des Rundkörpers befindet sich eine 3,6-mm-Bohrung für die Brennstoffzufuhr. Der Brennstoff-Jet und die Umströmung

**Tabelle 3.1:** Überblick der Versuchsbedingungen aus dem HM1-Versuchsprogramm [10]. I steht für die Turbulenzintensität und L für die turbulente Längenskala.

	NRBB1	NRBB2	HM1
$U_{\text{Jet}}$ [m/s]	61	50	118
$U_{\text{Co-flow}}$ [m/s]	20	20	40
$I$ (Jet/Co-flow) [%]	8.5/2.5	8.5/2.5	8.5/2.5
$L_t$ (Jet/Co-flow) [mm]	0.135/5.625	0.135/5.625	0.135/5.625
Zusammensetzung			
Jet	Luft	CH <sub>4</sub>	CH <sub>4</sub> -H <sub>2</sub> (je 50 Volumen-%)
Co-flow	Luft	Luft	Luft

(Co-flow) aus dem Windkanal sind nach oben gerichtet. Die Geschwindigkeitsunterschiede bewirken eine Scherwirkung, die einen Wirbel nahe der Fläche des Bluff-Body induziert. Dieser Wirbel stabilisiert die Flamme.

Der Löser wurde zu verschiedenen Entwicklungsschritten mit entsprechenden experimentellen Daten validiert. Zunächst wurde die inerte Strömung ohne Stoffmischung untersucht (NRBB1<sup>1</sup>), dann eine inerte Strömung und Mischung (NRBB2) und abschließend die komplette reaktive Strömung (HM1). Eine Übersicht der Eintrittsbedingungen ist in Tabelle 3.1 dargestellt. Die in der Abbildung 3.4 gezeigten Messpunkte für Geschwindigkeit, Temperatur

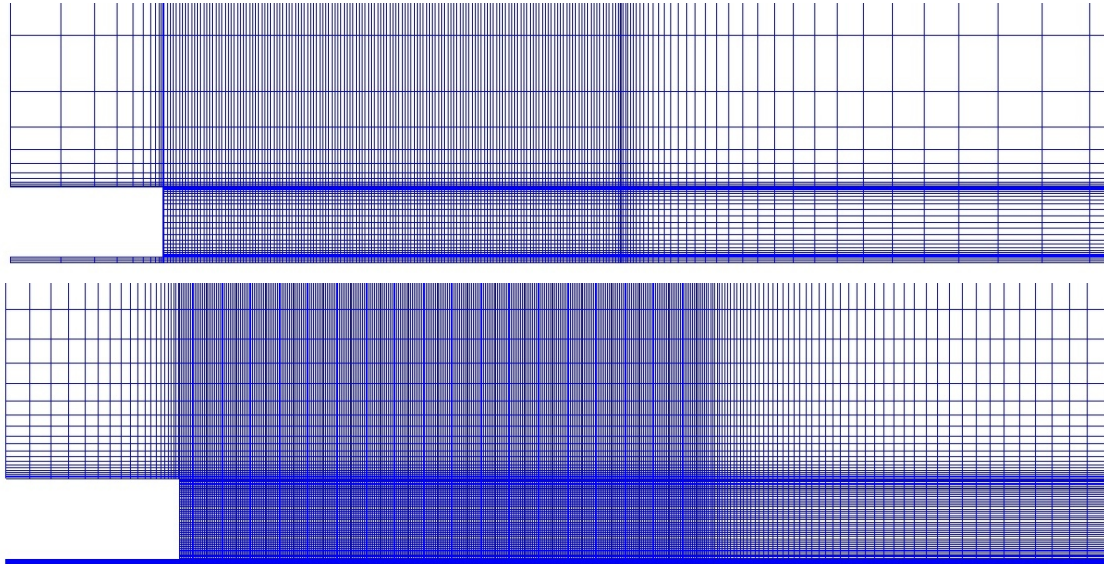


**Abbildung 3.4:** Lage der verfügbaren Messpunkte in verschiedenen Abständen über dem Bluff-Body. Im Konturplot ist der Massenbruch von CH<sub>4</sub> dargestellt.

<sup>1</sup>NRBB steht für Non Reacting Bluff Body.

und Speziesmassenbruch befinden sich senkrecht zur Strömungsrichtung in verschiedenen Abständen vom Bluff-Body. Hierbei bezeichnen  $D_b = 50$  mm den Bluff-Body-Durchmesser und  $R_b = 25$  mm den Bluff-Body-Radius.

Die Validierungsrechnungen mit dem neuen OpenFOAM-Löser wurden auf axialsymmetrischen Gittern mit 7550 (grob), 17130 (mittel) und 30600 Zellen (fein) durchgeführt (siehe Abbildung 3.5). Die Gitter wurden mit Hilfe von Vorschlägen aus der Literatur [39, 52]



**Abbildung 3.5:** Grobes und feines Gitter für die NRBB- und HM1-Simulationen

erstellt: eine Verfeinerung im Bereich des Bluff-Body in beide Raumrichtungen mit einer graduellen Verfeinerung an den Scherschichten. Die Gitter wurden mit dem Programm ICEMCFD<sup>®</sup> erzeugt. Für alle Rechnungen wurde das Standard- $k$ - $\epsilon$ -Modell mit den in 2.2.2 angegebenen Standardparametern verwendet. Die Grundeinstellungen der jeweiligen Codes für die Größen  $Pr_t$  (OpenFOAM: 1, Fluent: 0.85) und  $Sc_t$  (OpenFOAM: 1, Fluent: 0.7) aus den Gleichungen (2.120) und (2.121) wurden ebenfalls nicht verändert.

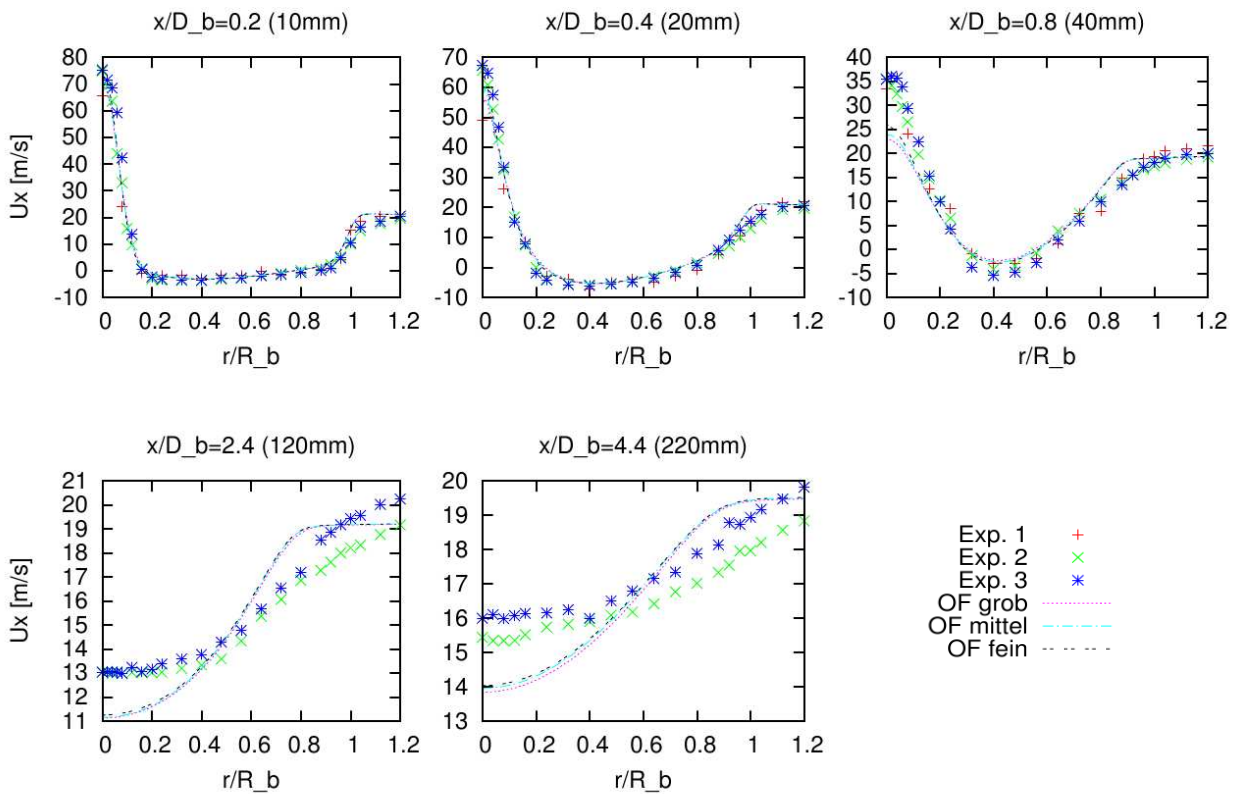
### 3.3.2 Ergebnisse für inerte Versuche (NRBB)

Mit Hilfe der nichtreagierenden Bluff-Body-Versuche (NRBB) soll das Strömungs- und Turbulenzfeld sowie die Mischung untersucht werden.

#### Ergebnisse für NRBB1

Für den Fall NRBB1 stehen Messdaten für die Axial- und Radialgeschwindigkeit und deren Fluktuation zur Verfügung. Die Simulationsergebnisse für die Axialgeschwindigkeit (Abbildung 3.6) und Radialgeschwindigkeit (Abb. 3.7) zeigen eine gute Übereinstimmung mit den Messdaten. Weiter stromabwärts ist der Fehler größer, aber er liegt immer noch in einem akzeptablen Bereich ( $< 10$  %) wenn man berücksichtigt, dass ein stationärer Löser und ein relativ einfaches Turbulenzmodell eingesetzt werden. Die Fluktuation der Geschwindigkeit wird in Abbildung 3.8 gezeigt. Es ist sichtbar, dass die wichtigen Eigenschaften der

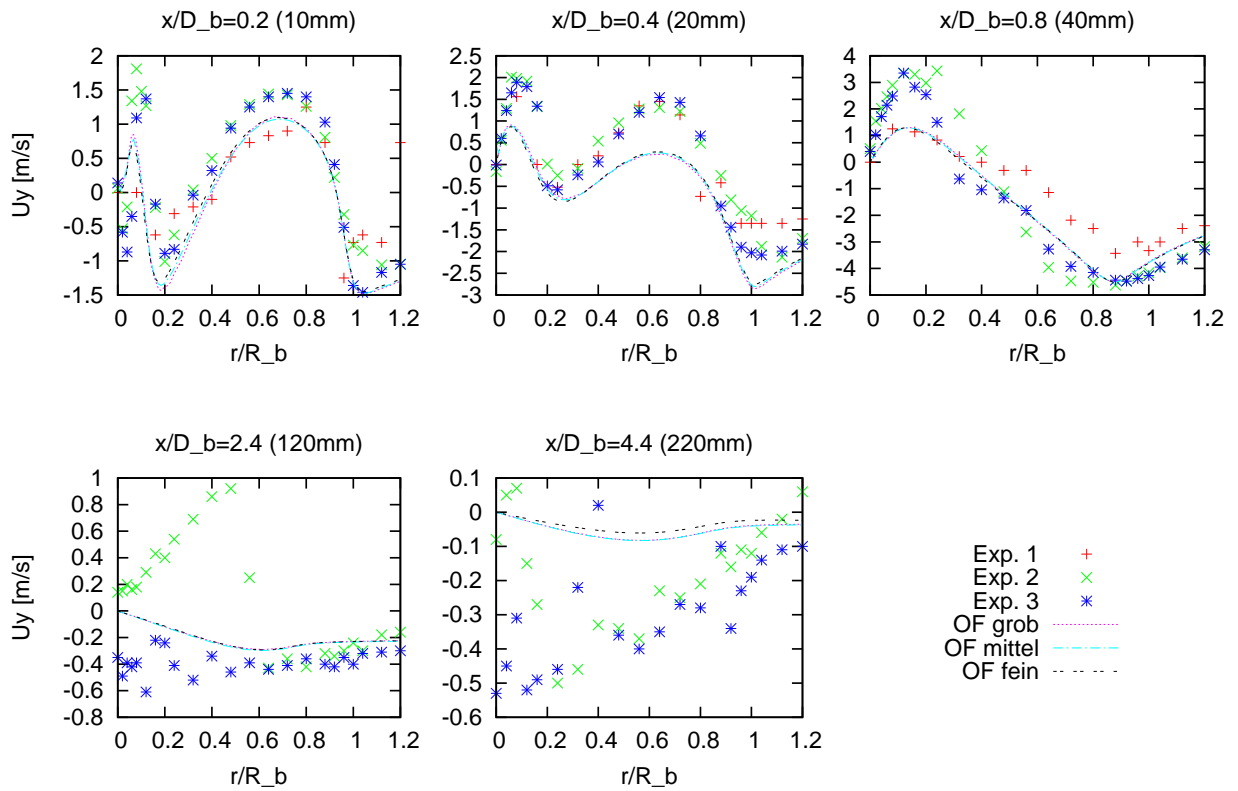
<sup>4</sup>ICEMCFD<sup>®</sup> ist ein eingetragenes Markenzeichen von ANSYS Inc.



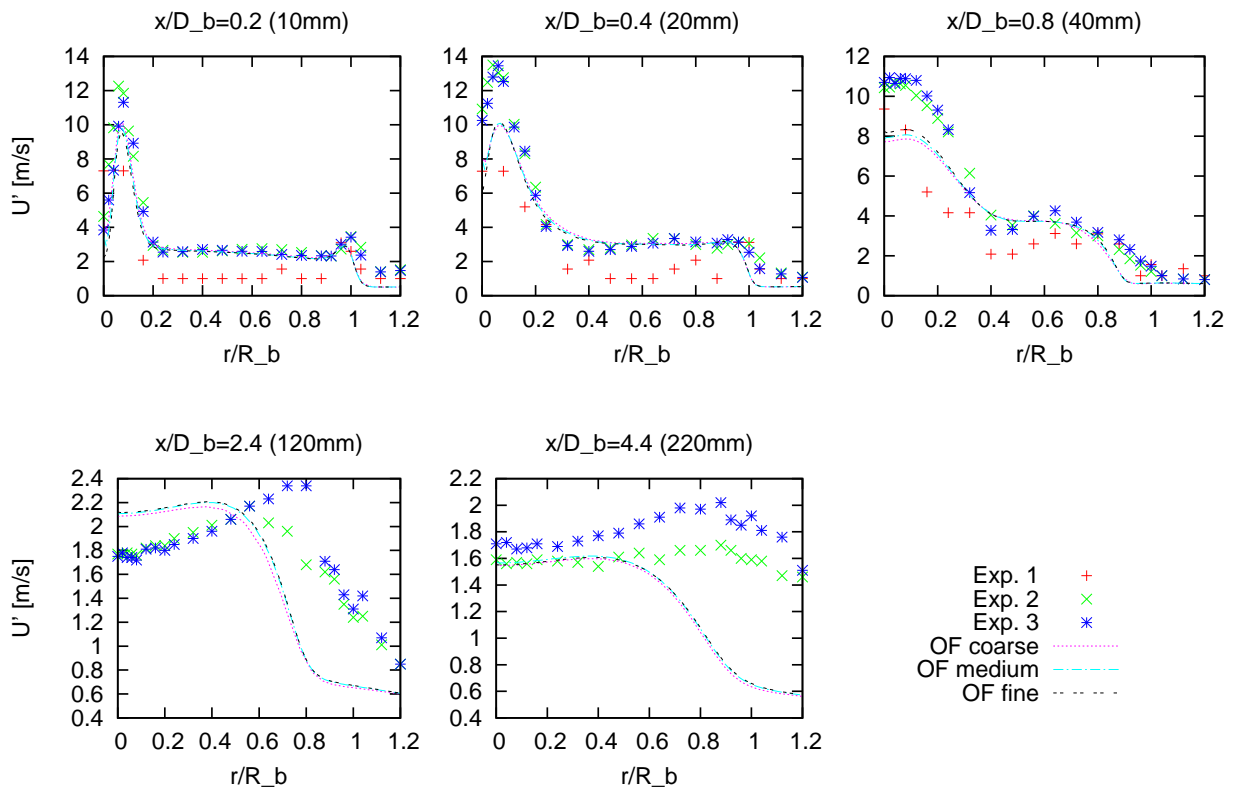
**Abbildung 3.6:** Axialgeschwindigkeit  $U_x$  für NRBB1, Symbole: Experiment, Linien: OF-EDC-Löser auf verschiedenen Gittern. D\_b steht für den Durchmesser  $D_b$  und R\_b für den Radius  $R_b$  des Bluff-Body.

Rezirkulation durch die Simulation erfasst werden. Das Rauschen in den Messdaten und die Unterschiede in den verschiedenen Messreihen zeigen die Problematik der Gewinnung präziser Ergebnisse für die Turbulenzgrößen in der experimentellen Arbeit. Für NRBB1 kann festgestellt werden, dass der Löser für die Strömungssimulation gute Ergebnisse bei akzeptabler Genauigkeit liefert. Das wird deutlich, wenn man die Ergebnisse mit Simulationsergebnissen aus der Literatur vergleicht. In TNF6 [75] werden für NRBB1 Ergebnisse einer 3D-LES von Kempf und eine 2D-RANS-Simulation von Sayre mit den experimentellen Daten verglichen. Auch dort treten größere Abweichungen weiter stromabwärts auf. Das wird durch Wirbelablösungen, die an der äußeren Bluff-Body-Oberfläche auftreten, erklärt. Diese komplexen Phänomene können nur mit sehr hoch aufgelösten transienten LES, die dann auch 3D-Gitter erfordern, korrekt erfasst werden. Die vorgestellten Ergebnisse von Kempf sind auf einem Gitter mit 0.25 Millionen Zellen errechnet worden und weisen nur eine wenig bessere Übereinstimmung mit den Messergebnissen als die RANS-Berechnungen von Sayre auf. Spätere LES-Ergebnisse mit deutlich mehr Zellen zeigen bessere Ergebnisse [33]. Mit einfachen 2D-RANS-Rechnungen konnten nur mit Hilfe von Anpassungen der Turbulenzparameter und/oder Verwendung des Reynolds-Stress-Modells bessere Resultate erreicht werden. Eine Anpassung der Parameter an einen bestimmten Fall ist jedoch wegen der unsicheren Übertragbarkeit immer problematisch, weshalb im Rahmen dieser Arbeit davon abgesehen werden soll. Der Vorteil durch das RSM rechtfertigt oft nicht den erhöhten Berechnungsaufwand [6].





**Abbildung 3.7:** Radialgeschwindigkeit  $U_y$  für NRBB1, Symbole: Experiment, Linien: OF-EDC-Löser



**Abbildung 3.8:** Fluktuation der Geschwindigkeit  $U'$  für NRBB1, Symbole: Experiment, Linien: OF-EDC-Löser

## Ergebnisse für NRBB2

Der Fall NRBB2 zeigt eine ähnliche Versuchsanordnung wie NRBB1, jedoch wird  $\text{CH}_4$  in den Jet gespeist, um eine inerte Mischung zu untersuchen. Die Abbildungen 3.9 und 3.10 zeigen Graphen für den  $\text{CH}_4$ -Massenanteil an unterschiedlichen Messpunkten und einen Konturplot mit Richtungsvektoren. Die Übereinstimmung in den Zonen nahe des Brenners ist sehr gut. An den Positionen 50.5 mm und 67.8 mm ist eine Diskrepanz zu beobachten. An der ersten Position ist sie besonders deutlich und nimmt stromabwärts wieder ab. Dies kann durch eine Unterschätzung des Rezirkulationswirbels durch das Turbulenzmodell erklärt werden (siehe Abbildung 3.10). Das ist eine Konsequenz aus den im vorhergehenden Abschnitt angesprochenen Abweichungen des berechneten Geschwindigkeitsfeldes von den Messdaten und kann mit den dort beschriebenen Ansätzen behoben werden. Allerdings führt dies über die Validierung des eigentlichen Löses hinaus. Das Ergebnis für inerte Mischung des Löses ist somit akzeptabel für die beabsichtigte Anwendung.

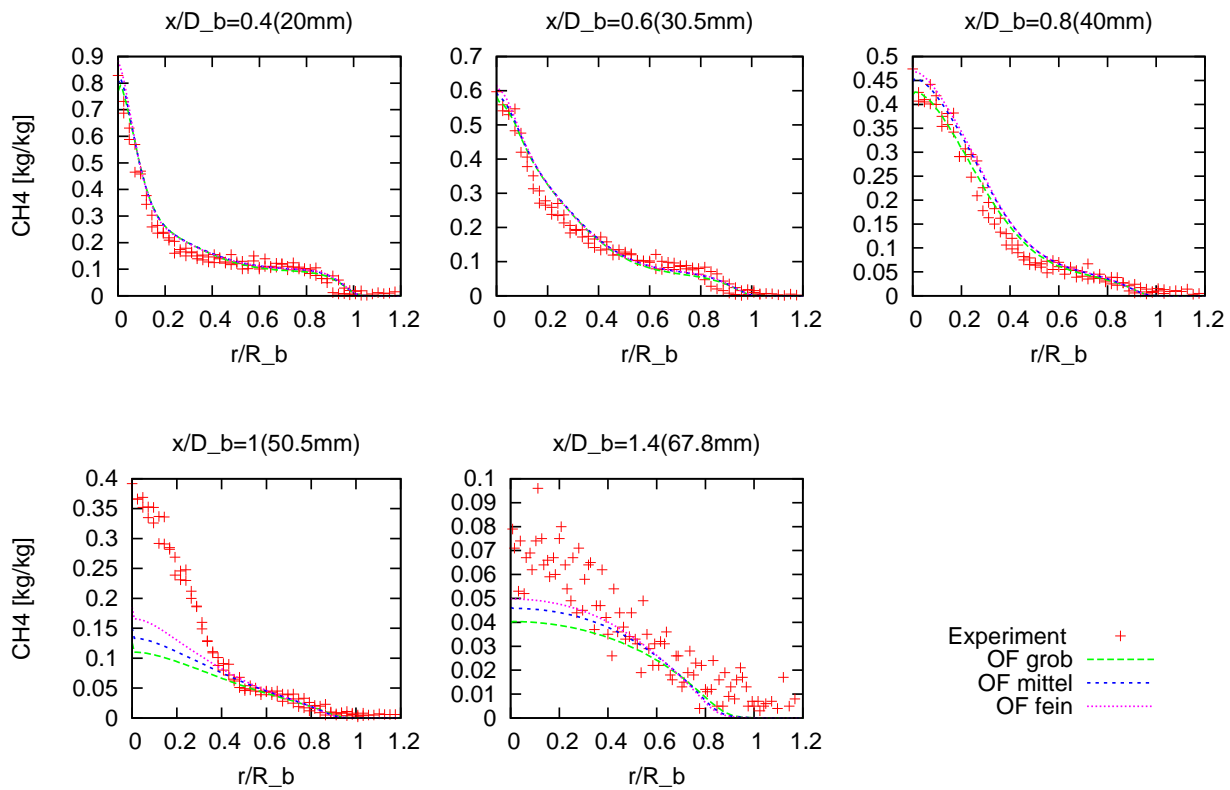
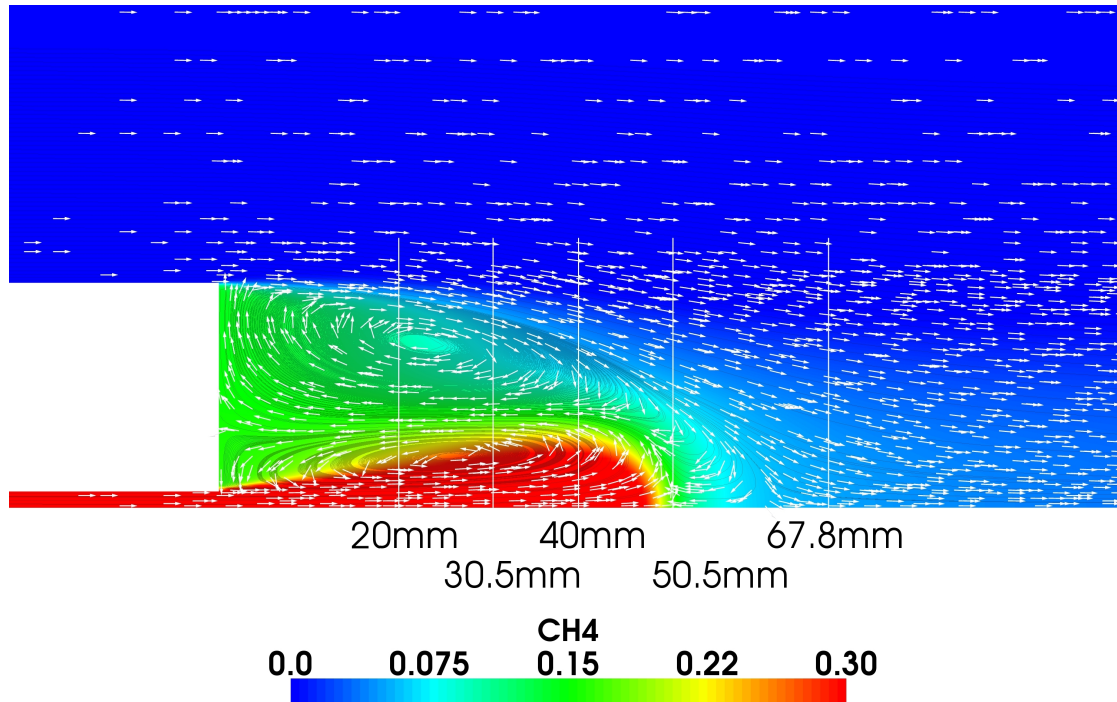


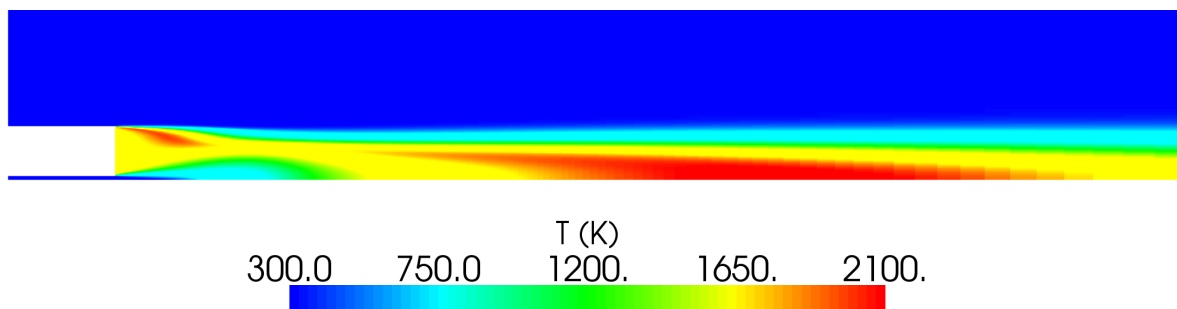
Abbildung 3.9: Massenbruch  $\text{CH}_4$  für NRBB2, Symbole: Experiment



**Abbildung 3.10:** Konturplot von CH<sub>4</sub> [kg/kg] mit Strömungsvektoren für NRBB2

### 3.3.3 Ergebnisse für die HM1-Testflamme

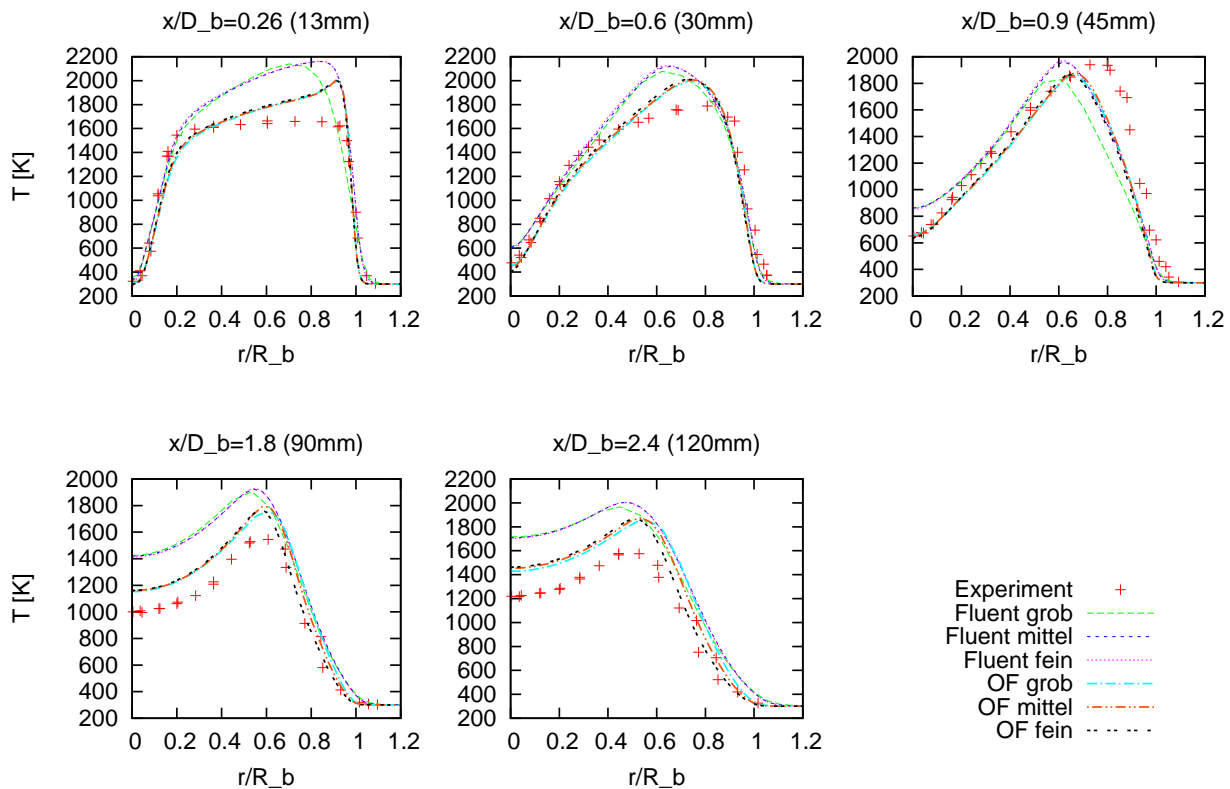
Neben den Rechnungen mit dem neuen OpenFOAM-Löser wurden auch Rechnungen mit Fluent mit nach Möglichkeit identischen Einstellungen wieder auf den axialsymmetrischen Gittern mit 7550, 17130 und 30600 Zellen durchgeführt. Es wurde jeweils das Standard- $k$ - $\epsilon$ -Modell benutzt. In Fluent wird zusätzlich die ISAT-Tabellierung eingesetzt. Es zeigte sich eine gute Übereinstimmung beider Löser mit den Messergebnissen. Ein Konturplot für die Temperatur ist in Abbildung 3.11 dargestellt (eine detaillierte Darstellung mit Bemaßung befindet sich am Endes des Abschnitts in Abbildung 3.18). Die Stabilisierung der Flamme am Bluff-Body ist gut erkennbar. Die Maximaltemperatur liegt bei etwa 2000 K.



**Abbildung 3.11:** Konturplot der Temperatur [K] der HM1-Flamme. Die Abbildung ist um 90° im Uhrzeigersinn gedreht. Links befindet sich der Einlass und unten die Symmetrieachse.

Zur Diskussion und Bewertung der Ergebnisse sollen die vorliegenden Resultate mit denen aus TNF8 [76] und Kempf u. a. [33] verglichen werden. In TNF8 [76] wurden fünf Simulationsergebnisse aufgeführt: davon drei 2D-RANS-Simulationen und zwei LES-Simulationen mit 1.5 und 3 Millionen Zellen. Bei den Ergebnissen von Kempf u. a. [33] handelt es sich um LES-Ergebnisse auf einem Gitter mit 3.6 Millionen Zellen.

In Abbildung 3.12 ist die Temperaturverteilung dargestellt. Bei den vorliegenden Ergeb-



**Abbildung 3.12:** Temperatur  $T$  für HM1, Symbole: Experiment, Linien: Simulation

nissen liegen die Abweichungen von den Messwerten für OpenFOAM bei maximal 200 K und für Fluent bei maximal 400 K. Der Anstieg und Abfall der Temperatur an den Scherschichten bei  $x/D_b = 0.26$  ist gut getroffen. Die Maximaltemperatur wird dort jedoch von beiden Codes überschätzt. In den RANS-Ergebnissen aus TNF8 [76] sind an dieser Stelle ebenfalls Abweichungen bis zu 400 K zu beobachten. Die Resultate für das Temperaturfeld von Kempf u. a. [33] sind im brennernen Bereich gut. Weiter stromabwärts steigen aber auch dort die Abweichungen auf maximal 500 K an, da der Rezirkulationswirbel auch in dieser detaillierten Simulation nicht ausreichend aufgelöst wurde. Diese Abweichungen zeigen sich im vorliegenden Fall bei  $x/D_b = 2.4$  in ähnlicher Weise. Die RANS-Simulationen mit angepassten Turbulenzparametern liefern stromabwärts bessere Ergebnisse. Die Speziesverteilungen sind in den Abbildungen 3.13 - 3.17 dargestellt. Die Übereinstimmung der OpenFOAM-Ergebnisse mit den Messdaten ist für  $H_2O$  sehr gut (3.13). Für Fluent ergeben sich etwas größere Abweichungen, besonders stromabwärts. Für Fluent ist eine leichte Verbesserung der Ergebnisse auf dem mittleren und feinen Gitter erkennbar. Die Ergebnisse sind vergleichbar mit denen aus der Literatur.

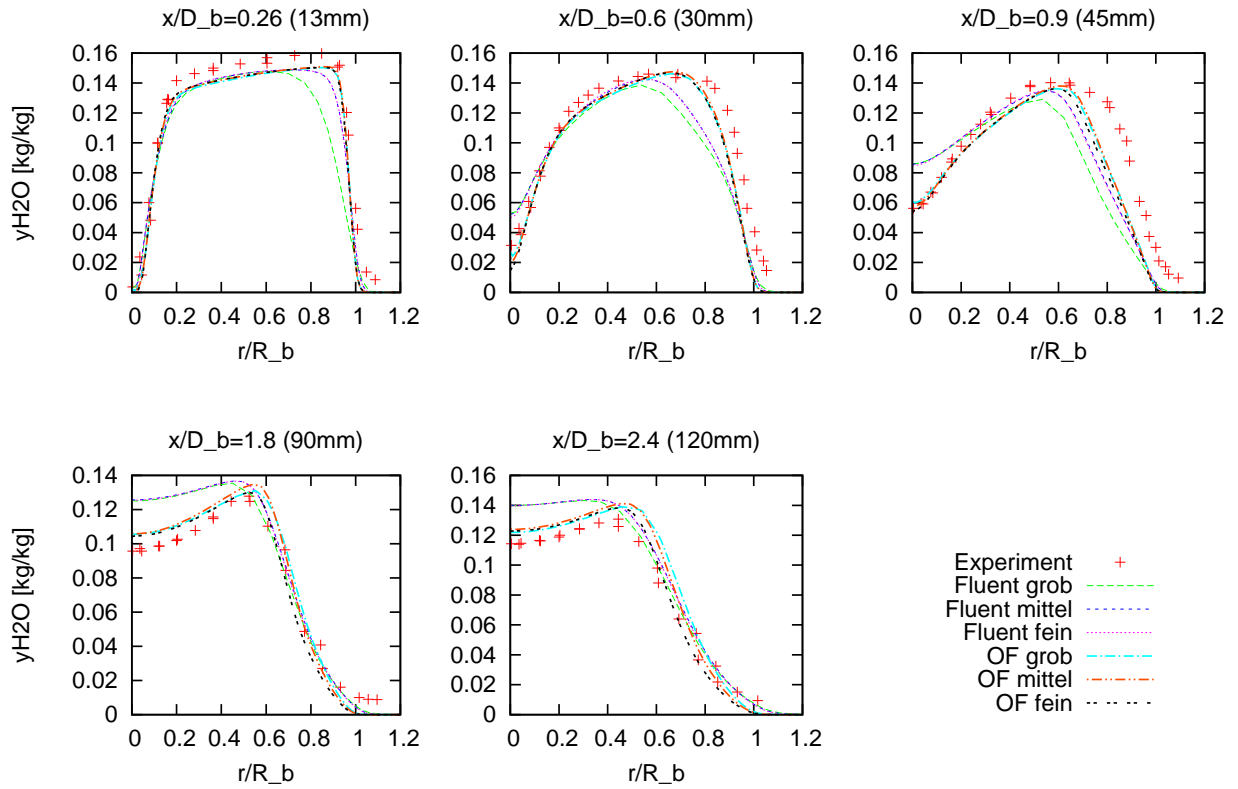


Abbildung 3.13: Massenbruch  $\text{H}_2\text{O}$  für HM1, Symbole: Experiment, Linien: Simulation

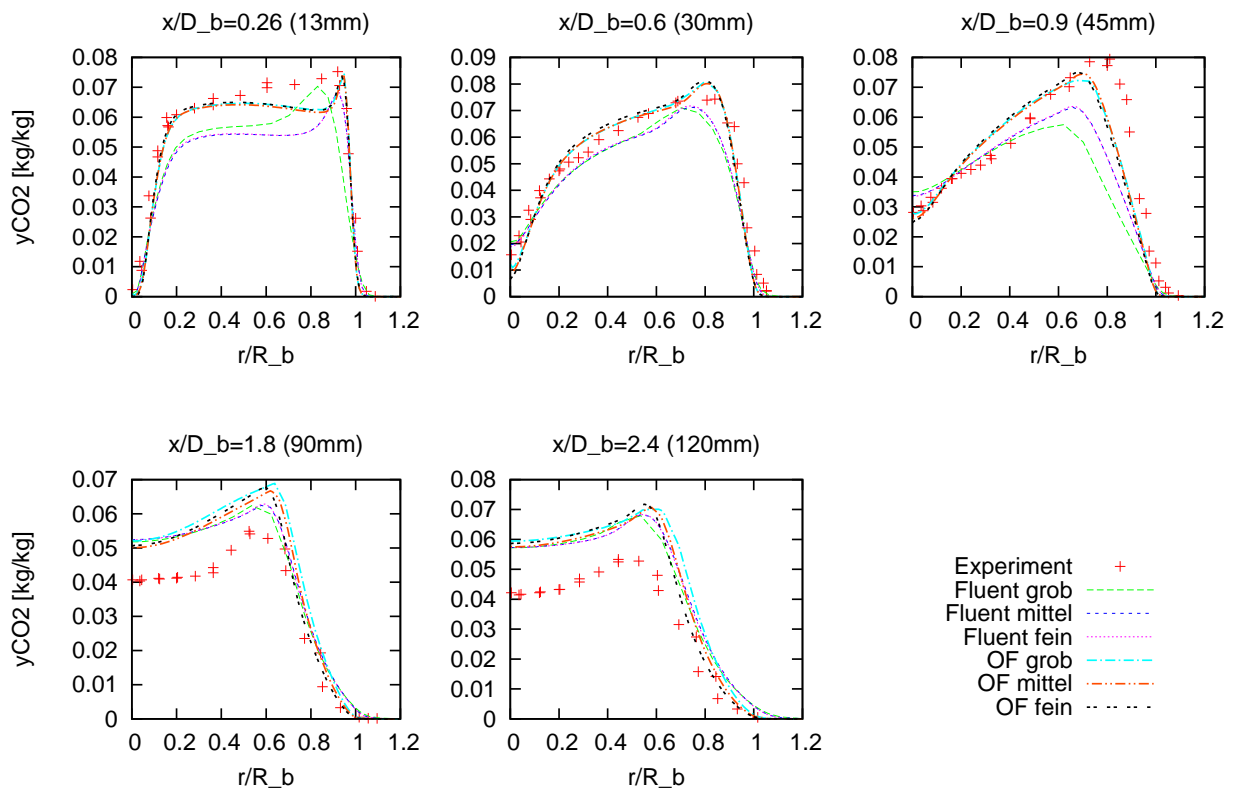
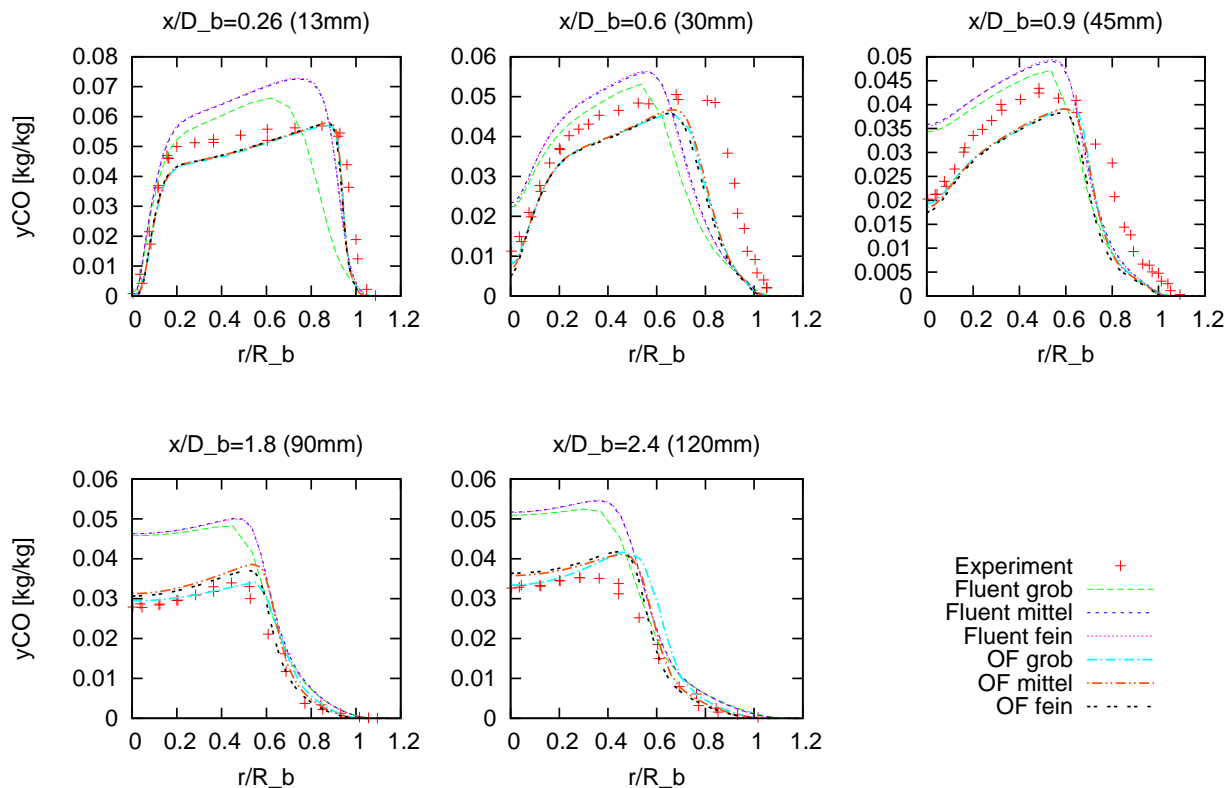


Abbildung 3.14: Massenbruch  $\text{CO}_2$  für HM1, Symbole: Experiment, Linien: Simulation

Während die Ergebnisse für  $\text{CO}_2$  (Abbildung 3.14) sehr gut mit den Messwerten übereinstimmen, gilt das für  $\text{CO}$  (Abbildung 3.15) nur eingeschränkt. Diese Tendenz ist auch in den



**Abbildung 3.15:** Massenbruch  $\text{CO}$  für HM1, Symbole: Experiment, Linien: Simulation

in der Literatur verfügbaren Simulationen vorhanden.  $\text{CO}_2$  wird lediglich in den Bereichen weit weg vom Brenner durch die Simulationen (hier und in der Literatur) überschätzt. Die Spezies  $\text{CO}$  ist deutlich schwerer zu erfassen, da sie in relativ langsam ablaufenden Reaktionen gebildet und dann wieder abgebaut wird. Das OpenFOAM-Modell erfasst den Verlauf dieser Spezies auch noch weiter stromabwärts mit hoher Genauigkeit. Fluent zeigt hier größere Abweichungen, und auch die Ergebnisse aus TNF8 [76] zeigen teilweise eine deutlich schlechtere Übereinstimmung. Die Ergebnisse für die Spezies  $\text{O}_2$  sind in Abbildung 3.16 gezeigt. Beide Löser zeigen gute Ergebnisse. Nur bei  $x/D_b = 0.9$  sind nennenswerte Abweichungen erkennbar.

Die Spezies  $\text{OH}$  (Abbildung 3.17) wird insbesondere im Brennernahbereich stark überschätzt. Wahrscheinlich ist der EDC-Reaktoransatz für diese Abweichung verantwortlich, denn in anderen Ergebnissen aus der Literatur, wo meist Laminar-Flamelet-Ansätze verwendet wurden, ist dies nicht so deutlich.

Der Einfluss des Gitters ist bei beiden Codes gering, jedoch weichen Ergebnisse für das grobe Gitter etwas von denen auf den feineren ab (zum Beispiel  $\text{CO}$ -Profile in Abbildung 3.15). Daraus folgt, dass ab dem mittleren Gitter eine Gitterunabhängigkeit der Lösung erreicht wurde.

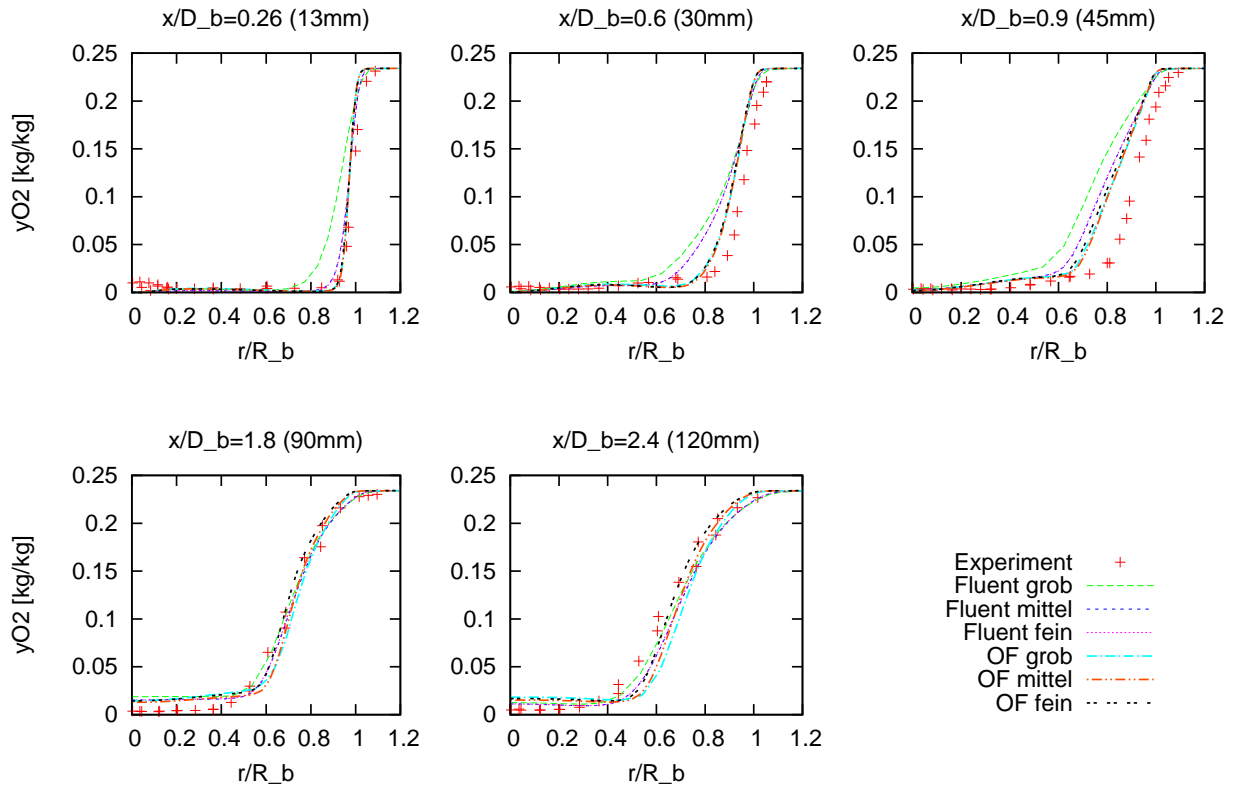


Abbildung 3.16: Massenbruch  $O_2$  für HM1, Symbole: Experiment, Linien: Simulation

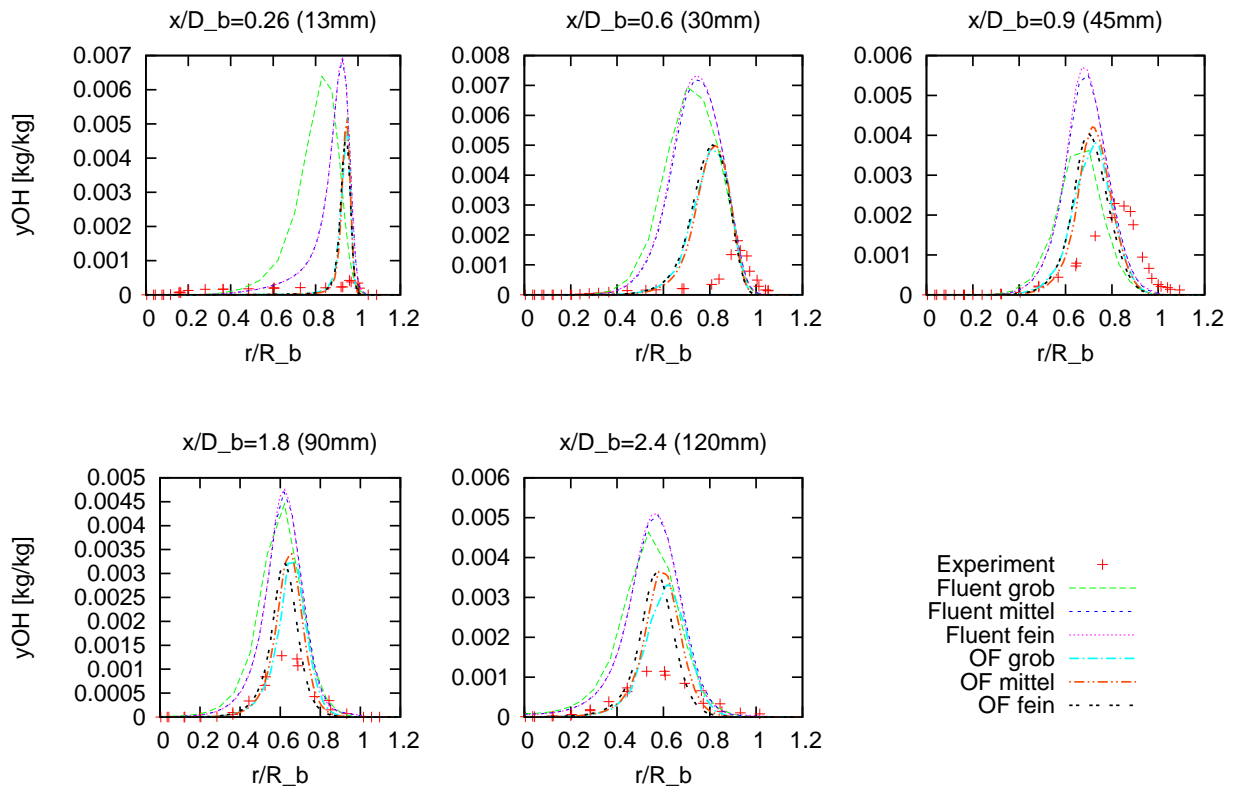
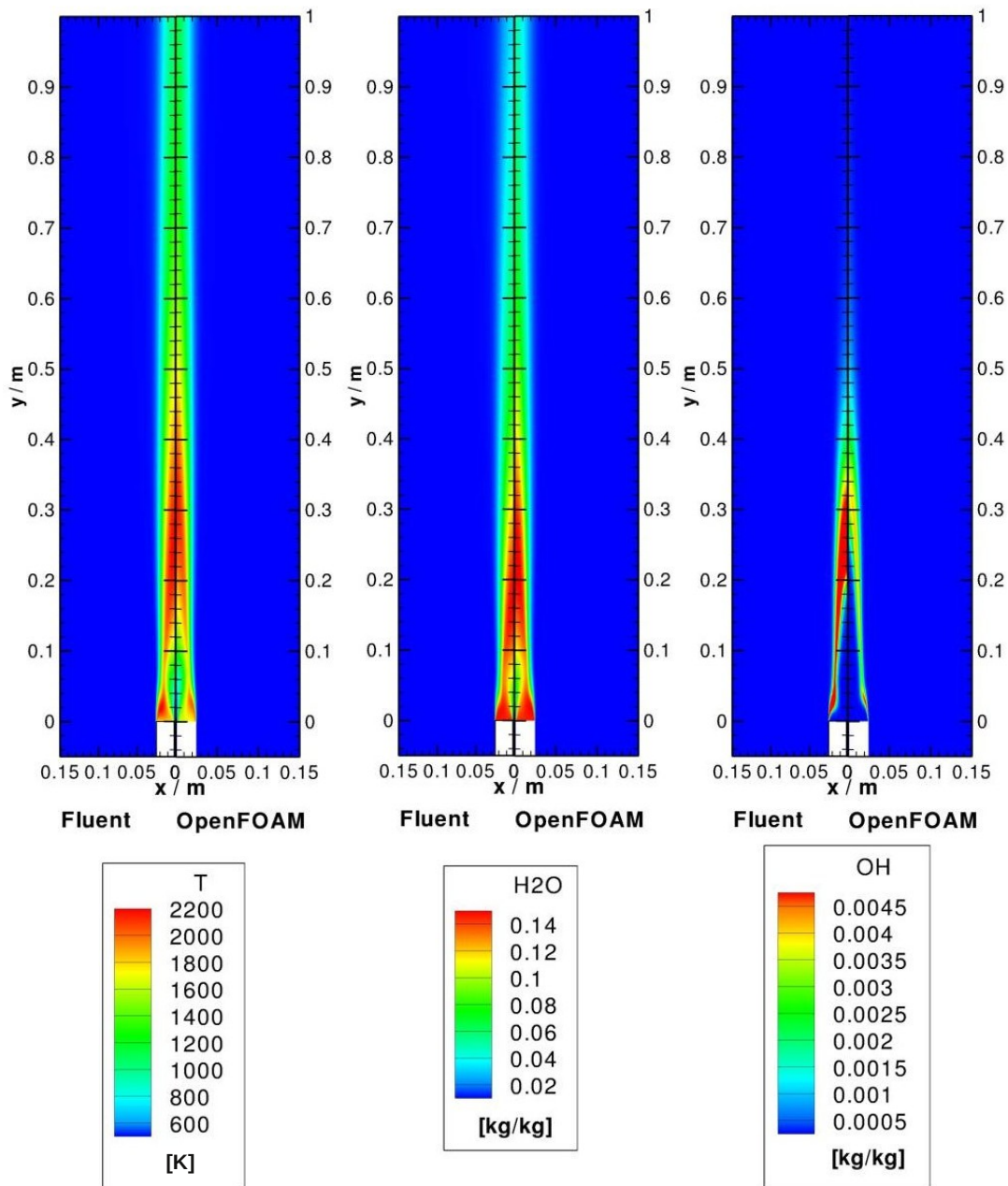


Abbildung 3.17: Massenbruch OH für HM1, Symbole: Experiment, Linien: Simulation



**Abbildung 3.18:** Konturplot für Temperatur, H<sub>2</sub>O und OH auf dem feinen Gitter .

In Abbildung 3.18 sind die Konturplots der Temperatur und der H<sub>2</sub>O- und OH-Verteilungen für beide Löser auf dem feinen Gitter miteinander verglichen. Es sind leicht unterschiedliche Flammenlängen und abweichende Maximaltemperaturen zu erkennen. Die Ergebnisse der Flammenlänge stimmen mit denen aus Carey [6] für das Standard- $k$ - $\epsilon$ -Modell gut überein. Die Ergebnisse in Carey [6] sind jedoch besser hinsichtlich der Rundung der Flammenform mit einer ausgeprägten, schmalen „Neck Zone“ und einer Verbreiterung weiter stromabwärts. In Carey [6] wurde betont, dass sich dieser Effekt nur durch die bereits erwähnte Anpassung des Turbulenzparameters  $C_{1\epsilon}$  von 1.44 auf 1.6 erreichen ließ, erwähnt aber auch, dass dieses Vorgehen nur für Konfigurationen, wo das Strömungsfeld bekannt ist, gerechtfertigt ist und keine generelle Gültigkeit hat. Wegen der nötigen Übertragung des Löser auf den



komplexeren HP-POX-Fall soll von einer Parameteranpassung abgesehen werden. Für  $\text{H}_2\text{O}$  sind kaum Unterschiede erkennbar. Das OH-Niveau ist stark unterschiedlich und wird von Fluent höher wiedergegeben. Für diese stärkere Abweichung der Codes voneinander kann der ISAT-Algorithmus verantwortlich sein.

Zusammenfassend kann gesagt werden, dass beide Codes im Rahmen der vereinfachten Annahmen (RANS, stationäre Lösung) aus Sicht des Autors eine zufriedenstellende Übereinstimmung mit den experimentellen Daten liefern. Die Ergebnisse ordnen sich in die aus der Literatur bekannten Resultate mit ähnlichen Annahmen ein und können teilweise sogar mit wesentlich komplexeren LES-Simulationsergebnissen konkurrieren.

### 3.4 Ergebnisse des OpenFOAM-Lösers mit ISAT-Tabellierung

Beim Einsatz des ISAT-Algorithmus mit dem neu entwickelten OpenFOAM-Löser und dem EDC-Modell stellte sich heraus, dass mit der vorhandenen ISAT-Bibliothek mit konstanter Zeitschrittweite in Verbindung mit dem in 2.6.2 beschriebenen Splitting keine zeitliche Verbesserung der Rechenzeit erzielt werden kann. Dazu wäre ein Eingriff in den Algorithmus notwendig, der mit dem Entwickler der Bibliothek bereits besprochen wurde, aber im Rahmen der vorliegenden Arbeit nicht realisiert werden konnte. An dieser Stelle soll deshalb lediglich die Funktionsweise demonstriert werden. Das vereinfachte PFR-Modell aus Abschnitt 2.7.2 wird am HM1-Fall mit und ohne ISAT-Tabellierung verwendet. Mit Hilfe der in Fluent eingesetzten ISAT-Implementation werden Reduktionen der Rechenzeit in der Größenordnung 10-100 gegenüber der direkten Integration erreicht. Das war mit Hilfe der vorliegenden ISAT-Bibliothek nicht möglich. Die weiteren Rechnungen wurden mit direkter Integration (ohne ISAT) durchgeführt.

In den Abbildungen 3.19 und 3.20 ist das Ergebnis für den PFR-Fall mit und ohne ISAT für die Temperatur und den CO-Massenbruch dargestellt. Zum Vergleich wurden noch die EDC-Ergebnisse (grobes Gitter) aus dem vorhergehenden Abschnitt eingefügt. Der Unterschied der Ergebnisse bei der Verwendung des ISAT-Algorithmus ist erwartungsgemäß unwesentlich. Für die Berechnung wurde eine ISAT-Toleranz von  $\epsilon_{ISAT} = 10^{-3}$  benutzt. Der Fall läuft mit ISAT-Unterstützung etwa um den Faktor 10 schneller als ohne. Es handelt sich allerdings neben dem einfachen PFR-Modell hier um einen besonders gutartigen Fall, da die Zellverweilzeit  $\tau_{PFR}$  (siehe Gleichung (2.156)) im relativ kleinen Intervall  $[3 \cdot 10^{-5}, 10^{-3}]$  liegt. Das heißt, dass bei  $\Delta t_{sub} = 3 \cdot 10^{-5}\text{s}$  maximal 33 Subintervalle und somit ISAT- oder Berechnungsaufrufe für das größte Zeitintervall benötigt werden. Im Fall des HP-POX-Reaktors sind die Größen- und Geschwindigkeitsunterschiede deutlich höher, so dass sich die Intervallbreite im Bereich  $[10^{-6}, 1]$  bewegt und die Berechnung für feste Zeitschritte sogar länger dauert als die direkte Integration ohne ISAT.

Die Funktionsweise des ISAT-Algorithmus im Zusammenspiel mit dem neu entwickelten Löser konnte trotzdem gezeigt werden, auch wenn er für die praktischen Rechnungen noch nicht eingesetzt werden kann. Dazu sind die genannten Anpassungen für eine variable Zeitschrittweite in der ISAT-Bibliothek nötig.

Die Abbildungen 3.19 und 3.20 dienen außerdem einem ersten Vergleich der Ansätze (Verbrennungsmodelle) EDC und PFR. Obwohl die Rechnungen nicht auf gleichen Gittern durchgeführt wurden, überrascht die hohe Übereinstimmung des stark vereinfachten PFR-

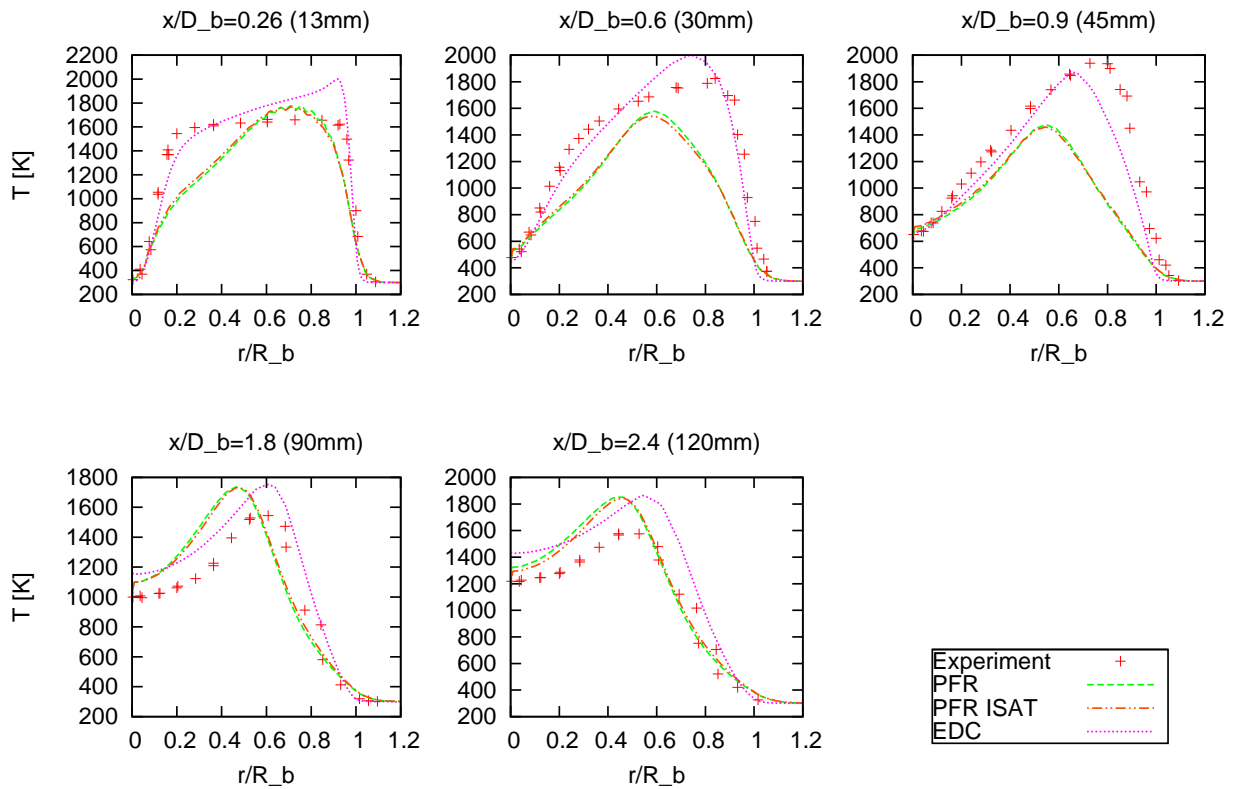


Abbildung 3.19: Temperatur an den Messstellen mit und ohne ISAT-Tabellierung

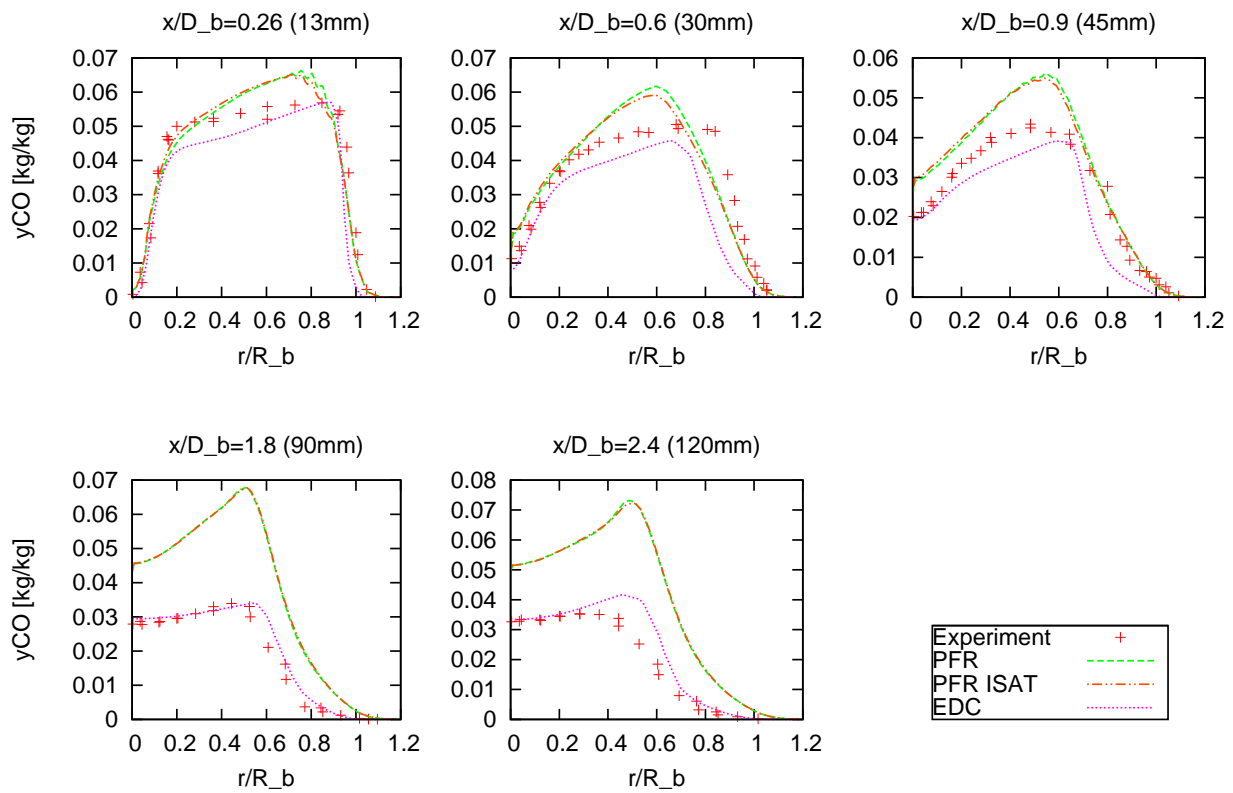


Abbildung 3.20: CO-Massenbruch an den Messstellen mit und ohne ISAT-Tabellierung

Ansatzes mit dem EDC-Modell. Wobei die EDC-Ergebnisse näher an den experimentellen Daten liegen.

## 3.5 Optimierung und Parallelisierung des Löses

Neben einer optimalen programmiertechnischen Implementierung der Modelle in den CFD-Code sind auch die Wahl des Compilers, der zugehörigen Bibliotheken und Teillöser (ODE, lineare Gleichungslöser) wichtige Faktoren, um Berechnungen mit möglichst wenig Zeitaufwand durchführen zu können. Für eine parallele Berechnung sind zudem die parallelen Algorithmen und die Kommunikation im Computer wichtig. In dieser Arbeit können nicht alle relevanten Themen des Hochleistungsrechnens behandelt werden. Es wird lediglich beschrieben, mit welchen Mitteln der Code geprüft und verbessert wurde.

### 3.5.1 ODE-Löser für chemische Kinetik

Der CVODE-Löser aus dem Löserpaket SUNDIALS [27] wurde für die Berechnung der chemischen Kinetik verwendet. Er ist auch standardmäßig in CANTERA enthalten und liefert sehr stabile Berechnungsergebnisse. In der Arbeit von Grote [22] wurden fünf Löser für verschiedene steife ODE-Systeme verglichen. Darunter waren Standard-Testprobleme, ein PFR-Problem und ein Testfall mit EDC-Implementierung. Dabei stellten sich die Löser CVODE und RADAU5 als die Schnellsten heraus.

### 3.5.2 Code-Analyse und Compilerergebnisse

Der neu erstellte Löser und die zugehörigen Bibliotheken wurden komplett in einer Linux-Umgebung entwickelt. Dort steht eine Vielzahl von Entwicklungswerkzeugen kostenlos zur Verfügung. Als Compiler wird üblicherweise der GNU-C-Compiler (gcc) verwendet. Das ist auch der Standardcompiler für OpenFOAM. Bei der Berechnung von Problemen mit detaillierter chemischer Kinetik entfällt ein Großteil der Rechenzeit auf die Berechnung chemischen Quellterme. Im vorliegenden Fall macht das etwa 80-90% aus. Das Hauptpotential zur Steigerung der Rechengeschwindigkeit ist also an dieser Stelle zu suchen. Dazu wurde neben dem gcc der Intel-C-Compiler (icc) verwendet und das Werkzeug VTUNE [78], womit der Zeitaufwand, der zur Bearbeitung jeder Funktion benötigt wird, analysiert und grafisch dargestellt werden kann. Moderne Compiler verfügen über eine Vielzahl von Prüfalgorithmen, um Code in möglichst effektive Programme zu übersetzen. Aus der Literatur ist bekannt, dass der Intel-Compiler Geschwindigkeitsvorteile gegenüber dem gcc bringt. Als Testsystem dienen zwei Systeme auf Intel-Basis mit handelsüblichen Core2-Prozessoren. System 1 hat eine Dual-core CPU und System 2 zwei Quad-Core CPUs (Tabell 3.2).

**Tabelle 3.2:** Verwendete Testsysteme für die Geschwindigkeitsmessungen des Codes.

	System 1	System 2
CPU	T9500	X5355
Anzahl der CPUs	1	2
Anzahl der Kerne pro CPU	2	4
Taktfrequenz	2600 MHz	2660 MHz
Cache/Kern	3 MB	2 MB
RAM	2 GB	16 GB
RAM-Takt	667 MHz	667 MHz

Zunächst wird der CVODE-Löser mit verschiedenen Compilereinstellungen des gcc und des icc auf System 1 übersetzt. Geprüft wird die Zeit für die Berechnung der chemischen Kinetik im Fall der HM1-Flamme:

**Tabelle 3.3:** Vergleich der Berechnungszeit der chemischen Kinetik mit verschiedenen Compiler-einstellungen.

Compiler	Standard	-03	Beschleunigung
gcc	3.8 s	2.6 s	1.46
icc	1.9 s	1.9 s	1.0
Beschleunigung	2	1.37	-

Die Verwendung des Optimierungsparameters `-03` für den gcc ergab eine Beschleunigung des Programms um 46%. Durch den icc konnte das Programm um weitere 37 % beschleunigt werden. Die Option `-03` wird deshalb von nun an für die gcc-Übersetzung empfohlen und hier weiterverwendet. Für einen HP-POX-Fall, wie er in Kapitel 4 beschrieben wird, sind die Resultate in Tabelle 3.4 gezeigt.

**Tabelle 3.4:** Geschwindigkeitsmessungen für den HP-POX-Fall bei Übersetzung von CVODE mit den Compilern gcc und icc.

gcc (-03)	icc	Beschleunigung
43.8 s	31.3 s	1.44

Diese großen Laufzeitunterschiede sind nicht erwartet worden, sind aber aus Anwendersicht erfreulich. Eine Übersetzung von CANTERA (welches auf CVODE zugreift) mit dem icc gelang bis zum gegenwärtigen Zeitpunkt nicht.

Die Übersetzung von OpenFOAM mit dem icc beschleunigte die Gesamtberechnung um etwa 20 %. Dazu wurde ein inerter HP-POX-Fall getestet (Fall 2 aus Abschnitt 3.5.3).

**Tabelle 3.5:** Geschwindigkeitsmessungen für den HP-POX-Fall bei Übersetzung von OpenFOAM mit den Compilern gcc und icc.

gcc (-O3)	icc	Beschleunigung
68.17 s	56.12 s	1.21

### 3.5.3 Parallelisierbarkeit

Auf dem System 2 wurde die Parallelisierbarkeit des Codes geprüft. Es handelt sich um einen Rechencluster, der mit sechs Rechenknoten (Ausstattung wie in Tabelle beschrieben) bestückt ist. Dazu wurden vier verschiedene Testfälle auf 1-16 Prozessoren gerechnet:

- **Fall 1:** HM1-Flamme mit chemischer Kinetik (1000 Zellen, 30 Iterationen),
- **Fall 2:** Gas-POX-inert, feines Gitter (42000 Zellen, 20 Iterationen),
- **Fall 3:** Gas-POX-grob, mit chemischer Kinetik, grobes Gitter (12000 Zellen, 10 Iterationen) und
- **Fall 4:** Gas-POX-fein, mit chemischer Kinetik, feines Gitter (42000 Zellen, 10 Iterationen).

Es handelt sich bei allen Fällen um 2D-Rechnungen. Die Parallelisierung ist in OpenFOAM mit Hilfe von Gebietszerlegung und einer eigenen Kommunikationsbibliothek PStream realisiert, durch welche die relevanten Informationen von einem Rechengebiet in ein benachbartes übertragen werden. Dazu ruft PStream wiederum geeignete Subroutinen auf. Im vorliegenden Fall ist das OpenMPI [57] in der Version 1.2.6. Für die Kommunikation zwischen zwei Rechenknoten wird von der MPI-Implementierung eine latenzarme Hochgeschwindigkeitsverbindung (Infiniband) verwendet. Alle Ergebnisse sind in Tabelle 3.6 zusammengefasst.

In Abbildung 3.21 ist die Beschleunigung (speed-up) im Vergleich zur seriellen Berechnung gezeigt. Abbildung 3.22 stellt die Effizienz bei der Parallelisierung dar. Die Effizienz gibt das Verhältnis aus Rechenzeit bei idealer Parallelisierung und realer Rechenzeit wider. Bei einer idealen Parallelisierung wäre die Effizienz immer eins (100 %). In der Realität liegt sie aber immer niedriger, da der Anteil der zu leistenden Kommunikation mit zunehmendem Parallelisierungsgrad steigt. Besonders bei relativ kleinen Problemen überwiegt der Anteil der Kommunikation schnell die serielle Rechenzeit. So zeigen auch die großen Fälle eine bessere Skalierung.

Auffällig ist ebenfalls, dass der inerte Gas-POX-Fall (2) sich schlechter parallelisieren lässt als der Gas-POX-Fall (4). Das ist durch den viel höheren Rechenaufwand (etwa Faktor 28) beim reaktiven Fall zu erklären. Dort fällt die zunehmende Kommunikation durch die Parallelisierung weniger ins Gewicht, weil die Berechnung der Chemie rechenzeitintensiv ist, aber nur eine geringe Speicherbandbreite benötigt.

Für den Fall der Rechnung mit 8 CPUs wurden zwei Varianten getestet. Standardmäßig wird ein Rechenknoten des Systems 2 (entspricht 8 CPUs) aufgefüllt und dann der nächste mit Berechnungen gefüllt. Diese Strategie wird Fill-up genannt. Eine zweite Strategie namens Round-Robin setzt auf jedem Knoten einen Job für eine CPU ab und geht dann zum

**Tabelle 3.6:** Benchmarkergebnisse der getesteten Rechenfälle. RR steht für Round-Robin.

<b>CPUs</b>	1	2	4	6	8	8RR	12RR	16
Beschleunigung ideal	1	2	4	6	8	8	12	16
Effizienz ideal	1	1	1	1	1	1	1	1
<b>1 HM1 [s]</b>	158.4	101.4	56.3	40.3	36.8	43.7	26.1	25.8
Beschleunigung	1.0	1.6	2.8	3.9	4.3	3.6	6.1	6.1
Effizienz	1.0	0.8	0.7	0.7	0.5	0.5	0.5	0.4
<b>2 Gas-POX inert [s]</b>	103.4	58.5	24.0	21.6	20.8	14.6	13.4	17.4
Beschleunigung	1.0	1.8	4.3	4.8	5.0	7.1	7.7	5.9
Effizienz	1.0	0.9	1.1	0.8	0.6	0.9	0.6	0.4
<b>3 Gas-POX grob [s]</b>	859.5	723.1	503.2	309.6	293.8	289.5	197.4	154.2
Beschleunigung	1.0	1.2	1.7	2.8	2.9	3.0	4.4	5.6
Effizienz	1.0	0.6	0.4	0.5	0.4	0.4	0.4	0.3
<b>4 Gas-POX fein [s]</b>	2878.4	1697.6	964.5	655.8	502.2	489.5	334.7	262.2
Beschleunigung	1.0	1.7	3.0	4.4	5.7	5.9	8.6	11.0
Effizienz	1.0	0.8	0.7	0.7	0.7	0.7	0.7	0.7

Nächsten. Eine Rechnung mit 8 CPUs auf zwei Knoten mit Round-Robin füllt also jeden der Knoten zu 50 %. Der Nachteil ist, dass dann über die Systemgrenze kommuniziert werden muss. Wenn jedoch keine weiteren Rechnungen auf den Knoten laufen steht mehr RAM, CPU-Cache und Speicherbandbreite zur Verfügung. Für die Fälle mit Reaktion ist dieser Einfluss vernachlässigbar, aber im inerten Fall ist die Effizienz bei 8 CPUs Round-Robin (8RR) höher als bei Fill-up. Wahrscheinlich liegt das daran, dass pro Rechnung mehr schneller CPU-Cache zur Verfügung steht.

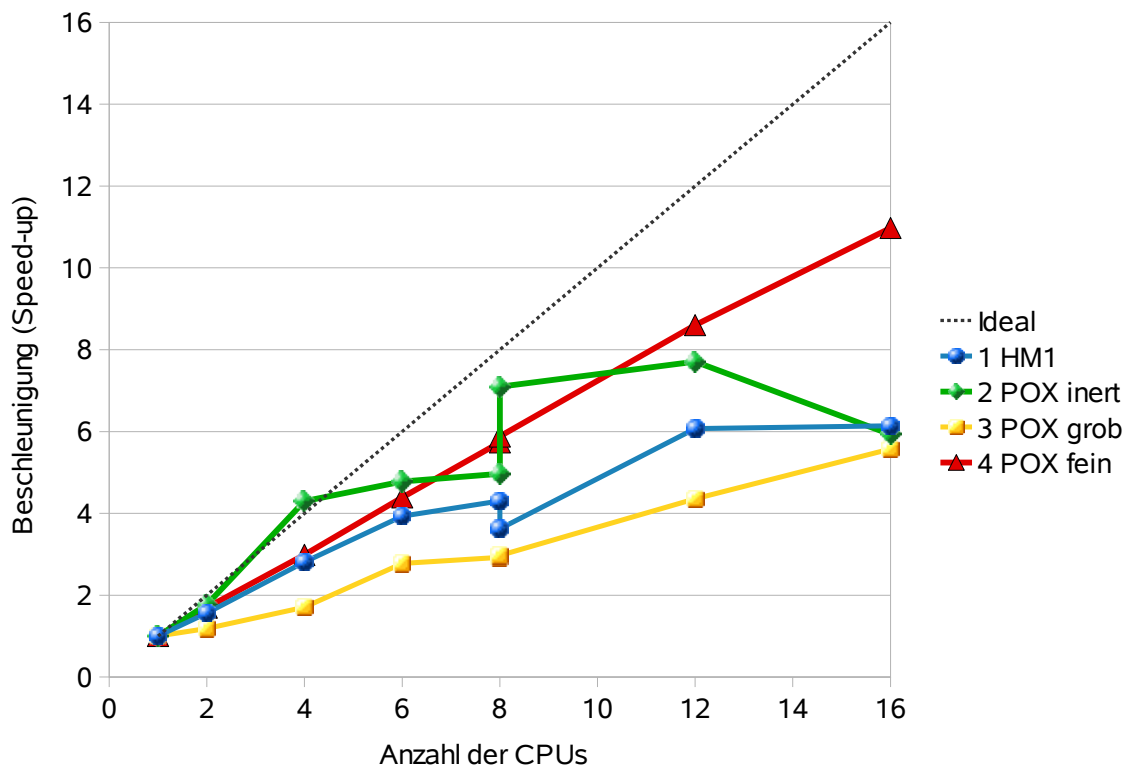


Abbildung 3.21: Beschleunigung beim parallelen Einsatz des Löser

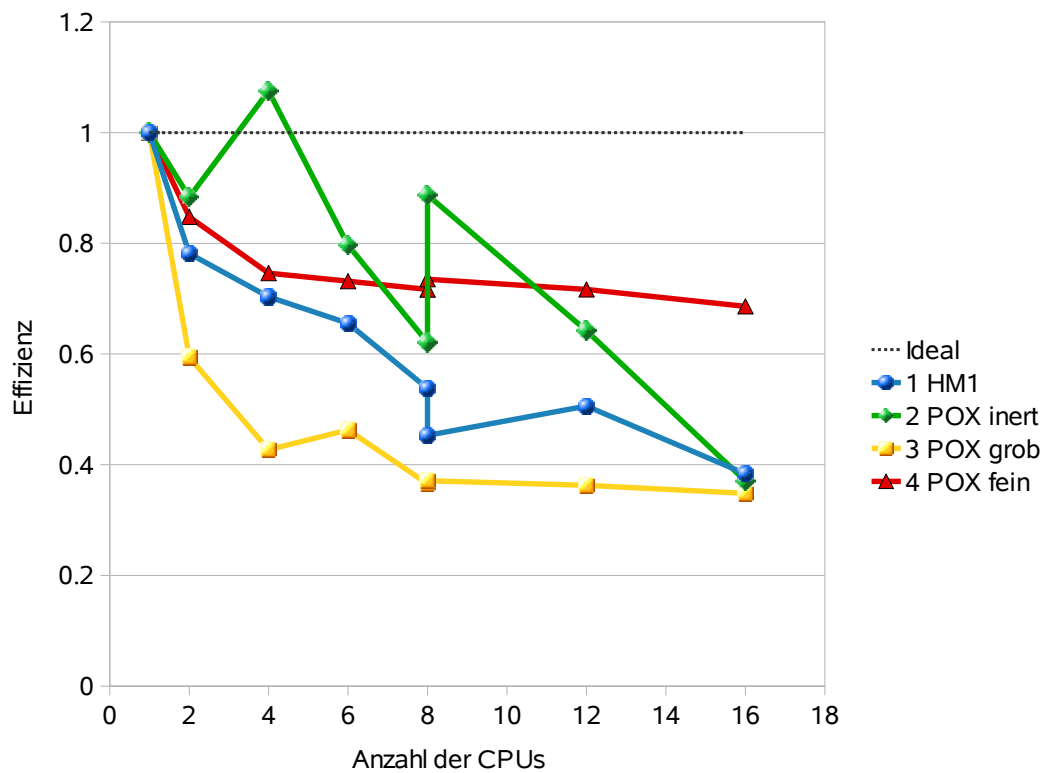


Abbildung 3.22: Effizienz beim parallelen Einsatz des Löser

Ebenso lässt sich die hohe Effizienz bei 4 CPUs (Eff. 1.1) erklären. Die Probleme der Teilgebiete sind kleiner und damit kann ein größerer Teil im Cache berechnet werden, ohne dass auf den langsameren Hauptspeicher zugegriffen werden muss.

### **Zusammenfassung**

Die Verwendung optimierter Compilereinstellungen beim gcc oder der Einsatz des icc zur Übersetzung von CVODE verringern die Rechenzeit zur Lösung der chemischen Kinetik erheblich (50% - 100%). Bei OpenFOAM sind die Unterschiede nicht so stark (max. 21%). Die Parallelisierung für die getesteten Fälle mit chemischer Kinetik ist besser als für identische Inertfälle. Es sollte aber in jedem Fall geprüft werden, ob die Effizienz ausreichend hoch ist, so dass verteilte Rechnungen gerechtfertigt sind.



## 4 Ergebnisse HP-POX

### 4.1 Einführung

Nachdem die Funktionsweise und Validierung des OpenFOAM-Lösers dargelegt wurde, soll dieser nun auf das Gesamtmodell des HP-POX-Versuchsreaktors angewendet werden. Weiter werden die Ergebnisse mit entsprechenden Simulationen in Fluent verglichen. Die Bewertung und Einordnung der Simulationsergebnisse ist für diesen Fall ungleich komplizierter als bei der einfachen HM1-Laborflamme aus Kapitel 3, da es sich bei dem Versuchsreaktor um eine Anlage im Pilotmaßstab als Vorstufe für den großindustriellen Einsatz handelt. Außerdem sind weniger Messdaten verfügbar, da viele Messmethoden wegen des hohen Drucks (bis zu 100 bar) und der hohen Temperaturen nicht eingesetzt werden können. An der Konstruktion einer optischen Sonde, die in der Lage ist, Bilder aus dem Reaktorinnenraum aufzunehmen, wird gearbeitet. Bis zum Zeitpunkt der Verfassung der Arbeit lagen jedoch noch keine Ergebnisse vor. Umso wichtiger ist es, alle rechentechnisch möglichen Werkzeuge auszuschöpfen und wo möglich Validierungen durchzuführen. Neben den verfügbaren Messgrößen am Austritt (Speziesanteile, Temperatur) dienen Tracermessungen dazu, das Verweilzeitverhalten zu untersuchen. Möglichst detaillierte Simulationen (DES) helfen, die Strömungsvorgänge zu erfassen.

Entsprechend der Versuchsplanung der HP-POX-Anlage fanden seit 2005 (Gas-POX-Kampagnen 30-60 bar, 80-100 bar) keine Gas-POX-Versuche mehr statt, so dass die zwischenzeitlich erreichte Verbesserung der Probenahmequalität und der Bilanzierung sich in den vorliegenden Gas-POX-Messergebnissen nicht widerspiegeln. Ende 2006 wurde ein Gas-POX-Versuch mit inerter Schüttung durchgeführt. Dieser wird ebenfalls zu Vergleichen herangezogen. Jedoch entsteht durch die Berücksichtigung der porösen Schüttung in der Simulationen ein zusätzlicher Einflussparameter.

#### 4.1.1 Allgemeine Einstellungen

Folgende allgemeine Einstellungen, die für alle nachfolgenden Simulationen gelten sollen an dieser Stelle zusammengefasst werden. Die Eintrittsbedingungen wurden den stationären Zuständen der jeweiligen Versuchspunkte entnommen. Es wird, sofern nicht anders vermerkt, das realizable- $k-\epsilon$ -Turbulenzmodell verwendet. Die abgeschätzten Randbedingungen für die Turbulenz am Eintritt wurden von Zeißler [81] übernommen (Turbulenzintensität 10 %). Für die Strahlungsberechnung in Fluent wurde das Rosseland-Modell in Kombination mit dem WSGGM-Modell zur Bestimmung des Absorptionskoeffizienten  $a$  (siehe Abschnitt 2.2.4) benutzt. Beide Modelle sind in OpenFOAM nicht verfügbar, weshalb der Absorptionskoeffizient konstant in Abhängigkeit vom Druck gewählt wurde (30 bar -  $10.15 \text{ m}^{-1}$ , 60 bar und höher -  $22.85 \text{ m}^{-1}$ ). Als Strahlungsmodell wurde in OpenFOAM das P1-Modell verwendet. Eine Fehlerabschätzung, die aus der Verwendung eines konstanten Absorptionskoeffizienten resultiert, wird in Abschnitt 4.3 durchgeführt.

Zur Druck-Geschwindigkeits-Kopplung wurde der SIMPLE-Algorithmus eingesetzt. Dabei werden die notwendigen Erhaltungsgleichungen entkoppelt gelöst. Zusammen mit den Spezies- und Turbulenzgleichungen sowie der Strahlungs- und Druckkorrekturgleichung ergeben sich 35 Erhaltungsgleichungen. Je größer die Anzahl der Gleichungen, desto schwieriger ist eine Konvergenz der Rechnung. Während die Simulationen zur HM1-Flamme mit einer räumlichen Diskretisierung zweiter Ordnung durchgeführt wurden, traten in beiden Codes Probleme bei einzelnen Versuchspunkten auf, die sich in Oszillationen und sehr langsamer oder keiner Konvergenz äußerten. Deshalb wurden die HP-POX-Simulationen mit einem Diskretisierungsschema erster Ordnung (upwind) durchgeführt, was zu einer Verbesserung des Konvergenzverhaltens führte. Trotzdem ist es häufig eine Frage geeigneter Unterrelaxationsfaktoren, um eine Konvergenz der Rechnung zu erzielen. In den vorliegenden Fällen mussten die Faktoren für die Turbulenzgrößen häufig sehr niedrig (bis 0.1) gewählt werden. In Fluent steht statt des SIMPLE-Algorithmus der so genannte COUPLED-Ansatz zur Verfügung, bei dem die Druck- und Geschwindigkeitsgleichung simultan gelöst werden können. Dieser Ansatz führt zu einer schnelleren Konvergenz und wurde bei den meisten Fluent-Rechnungen ausgewählt.

Zur Berücksichtigung der chemischen Reaktionen wurde ausschließlich der ATRMech [81] benutzt. Für Fluent-Simulationen wurde die ISAT-Tabellierung mit einer Fehlertoleranz  $\epsilon_{ISAT} = 10^{-3}$  und einer Tabellengröße von 1 GB verwendet. Für den OpenFOAM-Löser wurde die Chemie direkt berechnet.

Ein Wärmeverlust tritt an der Reaktorwand und durch die Brennerkühlung auf. Die Werte sind aus experimentellen Messungen abschätzbar. Bei einigen Rechnungen wurde er vernachlässigt, bei anderen teilweise berücksichtigt. Zur Turbulenzmodellierung wurde in den RANS-Fällen das Realizable- $k$ - $\epsilon$ -Modell mit unveränderten Parametern verwendet. Die Einstellungen für  $Sc_t$  und  $Pr_t$  wurden ebenfalls nicht verändert und entsprechen den in Abschnitt 3.3 angegebenen Werten.

**Beispielfall** Als Rechenfall für die folgenden Untersuchungen wurde der Versuch 30 bar NL, wie auch in Zeißler [81] beschrieben, verwendet. Das molare Dampf/Erdgas-Verhältnis liegt bei 0.73 und der Druck bei 30 bar(Ü). Der Wärmeverlust wurde vernachlässigt. Eine beispielhafte Erdgaszusammensetzung ist im Anhang 8 gegeben.

### 4.1.2 Modellierungsfehler

Um den Modellierungsfehler zu quantifizieren, wurden folgende Fehlernormen verwendet: Der absolute Fehler ist

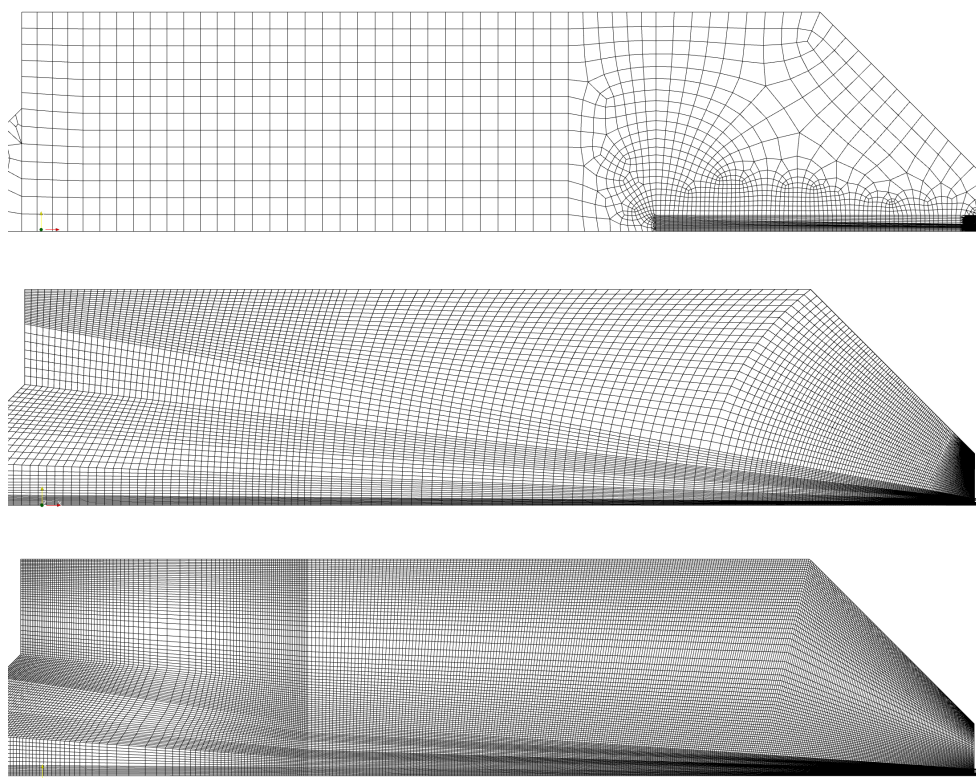
$$F_{x,abs} = x_{Sim} - x_{Exp}. \quad (4.1)$$

Ist der Fehler positiv, so wird der experimentelle Wert durch die Simulation überschätzt, und ist er kleiner Null, so wird er unterschätzt. Es folgt

$$F_{Spezies,abs} = |F_{H_2,abs}| + |F_{CO,abs}| + |F_{CO_2,abs}| + |F_{H_2O,abs}| + |F_{CH_4,abs}| \quad (4.2)$$

für den Speziesfehler.

## 4.2 Gitterstudien

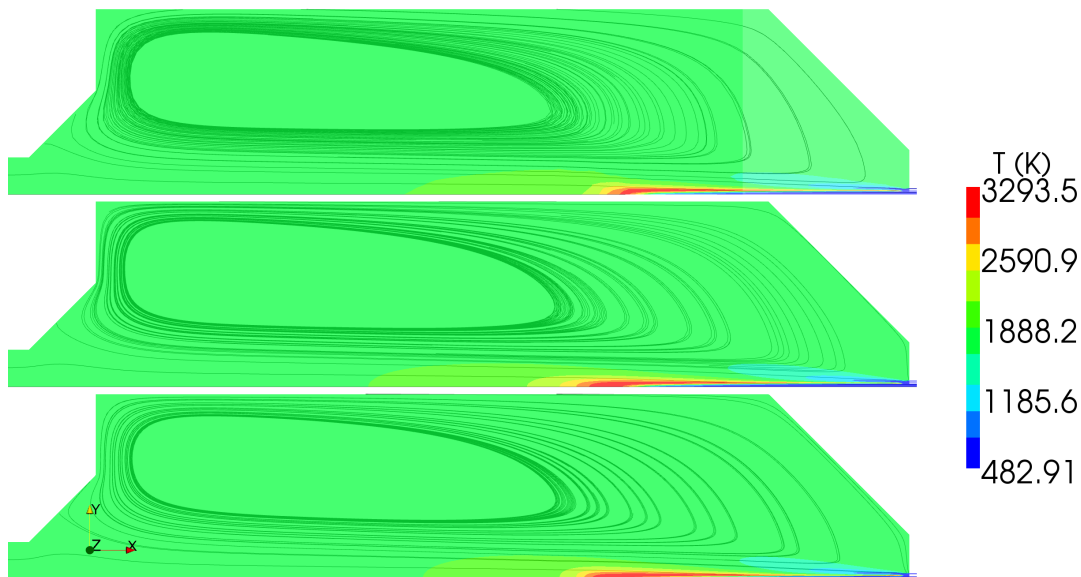


**Abbildung 4.1:** Benutzte Rechengitter für die HP-POX-Simulation. Grobes (12000 Zellen, oben), mittelfeines (17000 Zellen, in der Mitte) und feines Gitter (42000 Zellen, unten)

Eine besondere Schwierigkeit bei der Gittererstellung besteht beim vorliegenden Fall in den Größenunterschieden, die von dem Rechengitter erfasst werden müssen. Der Gesamtreaktor ist mehrere Meter lang und die Einlässe am Brenner dehnen sich nur über wenige Millimeter aus. Dieser Umstand muss durch geeignete Verfahren, wie lokale Verfeinerung, berücksichtigt werden. Um den Einfluss der Gitterauflösung abzuschätzen, wurden die Simulationsrechnungen auf drei verschiedenen Gittern durchgeführt. Ein grobes Gitter, welches mit dem Programm GAMBIT erstellt und bereits in der Arbeit von [81] verwendet wurde, enthält nach lokaler Verfeinerung im Brennerbereich 12000 Zellen.

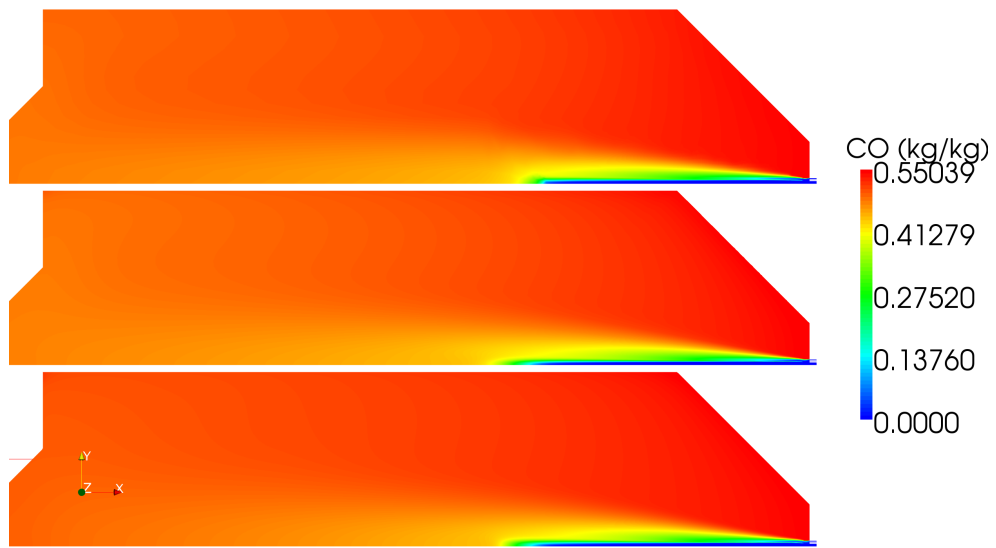
Zwei weitere Gitter („mittel“, „fein“) wurden mit dem Programm ICEMCFD erzeugt. Mit diesem Werkzeug ist es möglich, Blöcke einzuführen, die bestimmte Auflösungseigenschaften in verschiedenen Bereichen festschreiben. In Abbildung 4.1 sind die verwendeten axialsymmetrischen 2D-Gitter dargestellt. Der Brenner befindet sich in den Abbildungen auf der rechten Seite. Für die beiden feineren ICEMCFD-Gitter ist gut zu erkennen, wie die Zuordnung der Blöcke erfolgte: die Einlassflächen werden mit Flächen auf der gegenüberliegenden Seite verbunden. Dabei werden die Blöcke strahlenartig aufgefächert, damit nicht im gesamten Reaktor die extrem kleinen Zellen vom Einlass fortgesetzt werden müssen. Die beiden feineren Gitter besitzen 17000 bzw. 42000 Zellen. Alle Gitter können sowohl mit Fluent als auch mit dem OpenFOAM-Löser benutzt werden. Die Gitterstudien wurden in OpenFOAM mit dem Standard-EDC-Modell durchgeführt.

### 4.2.1 OpenFOAM-Ergebnisse

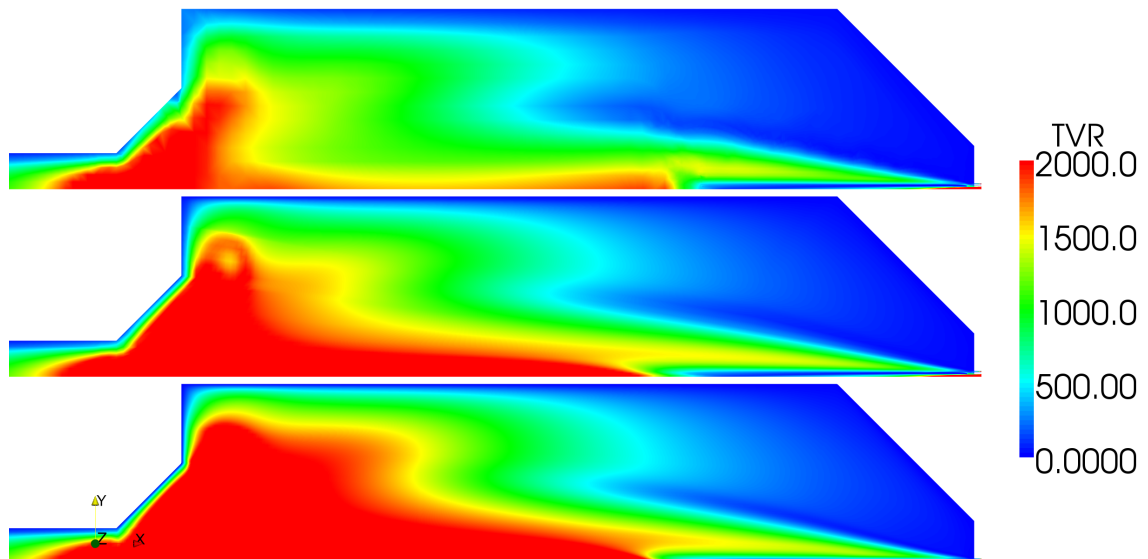


**Abbildung 4.2:** Simulationsergebnisse mit dem OpenFOAM-Löser auf den drei Gittern. Temperatur und Strömungslinien. (Oben-grobes Gitter, Mitte-mittelfines Gitter und unten-feines Gitter)

Zunächst werden Simulationen mit dem OpenFOAM-EDC-Löser durchgeführt. In Abbildung 4.2 sind die Temperaturverteilungen und die Strömungslinien dargestellt. Es ist zu erkennen, dass das Strömungsbild sehr ähnlich wiedergegeben wird. Die Temperatur ist ebenfalls vergleichbar. Lediglich die Flammenlänge unterscheidet sich leicht in den drei Fällen. Die Rezirkulation wird identisch wiedergegeben und auch die Speziesverteilung unterscheidet sich praktisch nicht. Dies ist beispielhaft für die CO-Verteilung im oberen Gasraum in Abbildung 4.3 gezeigt. Lediglich am Ende der Flamme, wo die Verfeinerung des groben Gitters endet, kann man für dieses eine Abweichung zu den beiden feineren erkennen. Die Größe Turbulence-Viscosity-Ratio (TVR) in Abbildung 4.4 beschreibt das Verhältnis von turbulenter und laminarer Viskosität. Die höchsten TVR-Werte lassen sich an der Verengung und im Einlassbereich beobachten. Dies wird auf allen Gittern vorhergesagt. Leichte Unterschiede ergeben sich auflösungsbedingt für das TVR-Feld. Dadurch ergeben sich aber kaum Veränderungen im Spezies- oder Temperaturfeld. In Tabelle 4.1 sind die Eigenschaften am Austritt zusammengefasst. Die Ergebnisse unterscheiden sich unwesentlich und der Modellierungsfehler nimmt mit stärkerer Verfeinerung leicht ab.

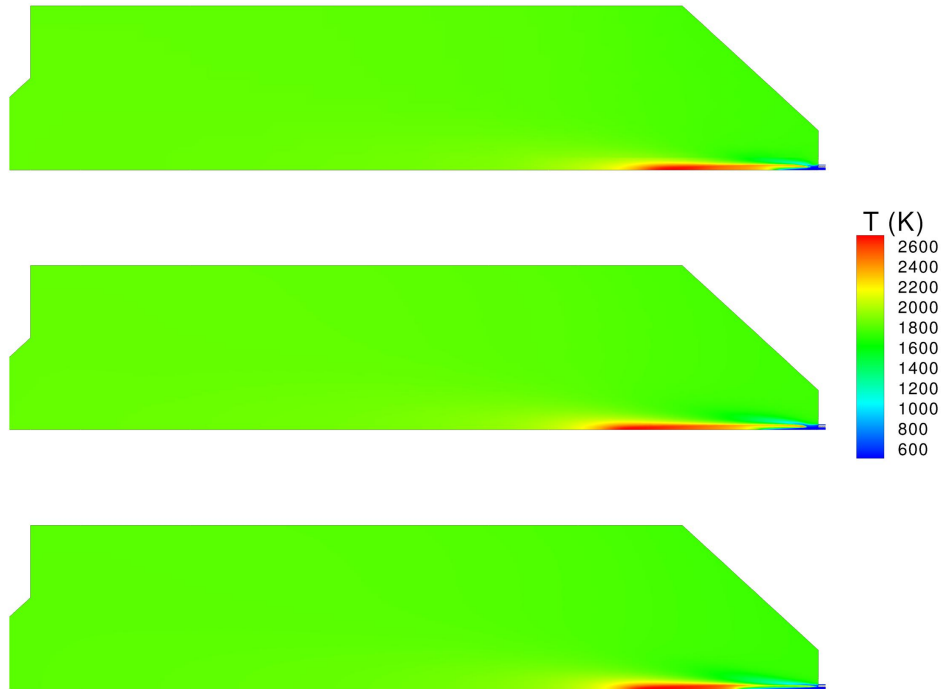


**Abbildung 4.3:** Simulationsergebnisse mit dem OpenFOAM-Löser auf den drei Gittern. CO-Verteilung im oberen Gasraum.



**Abbildung 4.4:** OpenFOAM-Ergebnisse auf den drei Gittern für TVR.

## 4.2.2 Fluent-Ergebnisse



**Abbildung 4.5:** Simulationsergebnisse mit Fluent auf den drei Gittern. Temperatur und Strömungslinien. (Oben-grobes Gitter, Mitte-mittelfeines Gitter und unten-feines Gitter)

In Fluent wurden ebenfalls auf allen drei Gittern Simulationen des Rechenfalls 30 bar NL durchgeführt. Jedoch waren vergleichbare Ergebnisse auf den feinen Gittern (siehe Abbildung 4.5) in Fluent nur mit sehr kleinen Unterrelaxationsfaktoren möglich. Sonst wurde auf den feineren Gittern eine stark abgehobene Flamme, wie zum Beispiel in Abbildung 4.8 erkennbar, berechnet. Dieses Phänomen wurde intensiv untersucht, da auch das Transported-PDF-Modell auf dem groben Gitter (sowie den feineren) ein solches Verhalten erzeugte (siehe zum Beispiel Uebel [77] für Ergebnisse mit dem Transported-PDF-Modell). Nach den durchgeführten Studien und auch den praktischen Erfahrungen für Flammenformen wird hier von einer Instabilität ausgegangen, die bei stationären, axialsymmetrischen Simulationen auftreten kann. Dreidimensionale Simulationen (siehe Abschnitt 4.4) zeigten keine solchen Ergebnisse. Jedoch konnten 3D-Simulationen bisher noch nicht mit dem Transported-PDF-Modell durchgeführt werden.

In den Abbildungen 4.5, 4.6 und 4.7 sind die Ergebnisse auf den drei Gittern für das Temperatur-, CO- und das TVR-Feld dargestellt. Auch hier ergeben sich kaum Abweichungen. Die Modellierungsfehler am Reaktoraustritt sind in Tabelle 4.1 zusammengefasst. Sie stimmen mit denen aus Zeißler [81] überein. Der Fehler für die Temperatur und den Methangehalt spiegelt die in der Einführung beschriebene Problematik des EDC-Verbrennungsmodells wider. Eine Verbesserung soll durch die in Abschnitt 2.7.2 vorgeschlagene Anpassung des Verbrennungsmodells erreicht werden. Die Ergebnisse dazu folgen nach den Untersuchungen der Teilmodelle in Abschnitt 4.6.

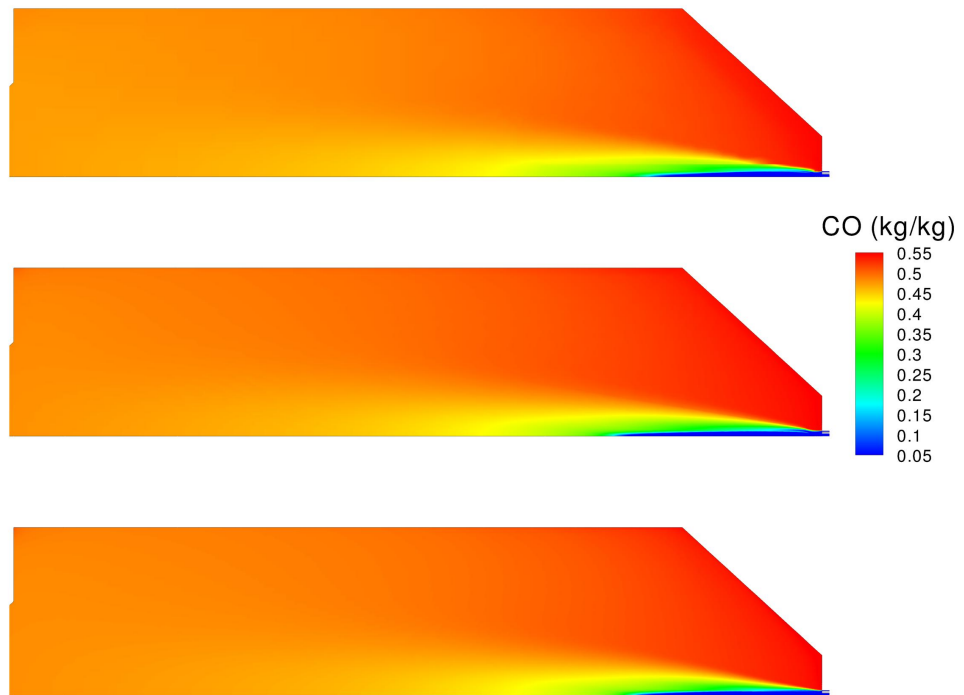


Abbildung 4.6: Simulationsergebnisse mit Fluent auf den drei Gittern. CO-Massenbruch.

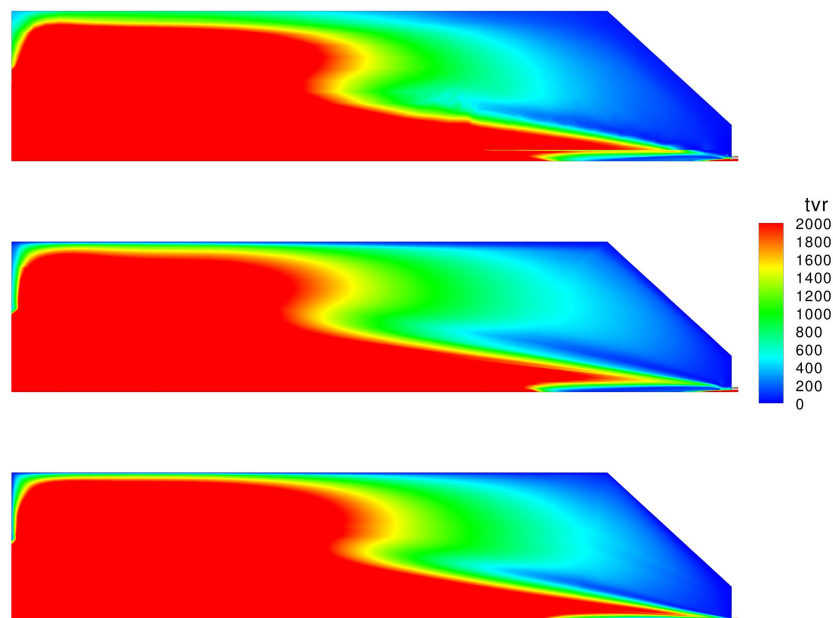


Abbildung 4.7: Simulationsergebnisse mit Fluent auf den drei Gittern. Turbulent-Viscosity-Ratio.



**Abbildung 4.8:** Die Berechnung mit Fluent-Standardereinstellungen auf den feineren Gittern führte bei zu großen Unterrelaxationsfaktoren zu einem starken Flammenabhub.

**Tabelle 4.1:** Modellierungsfehler am Reaktoraustritt für die verschiedenen Gitter mit dem OpenFOAM-Löser (OF) und mit Fluent (FL).

	OF EDC grob	OF EDC mittel	OF EDC fein	FL EDC grob	FL EDC mittel	FL EDC fein
$F_{H_2,abs}$	-0.025	-0.021	-0.018	-0.034	-0.027	-0.028
$F_{CH_4,abs}$	0.024	0.024	0.022	0.028	0.026	0.027
$F_{CO,abs}$	-0.007	-0.008	-0.007	-0.011	-0.008	-0.008
$F_{CO_2,abs}$	-0.004	-0.005	-0.005	-0.004	-0.004	-0.004
$F_{H_2O,abs}$	0.009	0.010	0.009	0.011	0.011	0.011
$F_{Spezies,abs}$	<b>0.070</b>	<b>0.068</b>	<b>0.060</b>	<b>0.088</b>	<b>0.076</b>	<b>0.078</b>
$F_{T,abs}$	<b>111</b>	<b>107</b>	<b>104</b>	<b>121</b>	<b>120</b>	<b>117</b>

### 4.2.3 Zusammenfassung Gitterstudie

Da sich die Ergebnisse auf den drei Gittern kaum unterscheiden, wird für die weiteren 2D-Berechnungen vorzugsweise das grobe Gitter verwendet. Es hat in bestimmten Bereichen sehr große Zellen, dies wirkt sich aber nicht nachteilig aus, so dass der erhöhte Rechenaufwand, der mit den feineren Gittern verbunden ist, vermieden werden kann. Ein weiterer Vorteil ist, dass die Probleme in der Flammenzone bei Fluent-Rechnungen (starker Flammenabhub) bei dem groben Gitter nicht auftreten.

## 4.3 Untersuchung des Strahlungsmodells

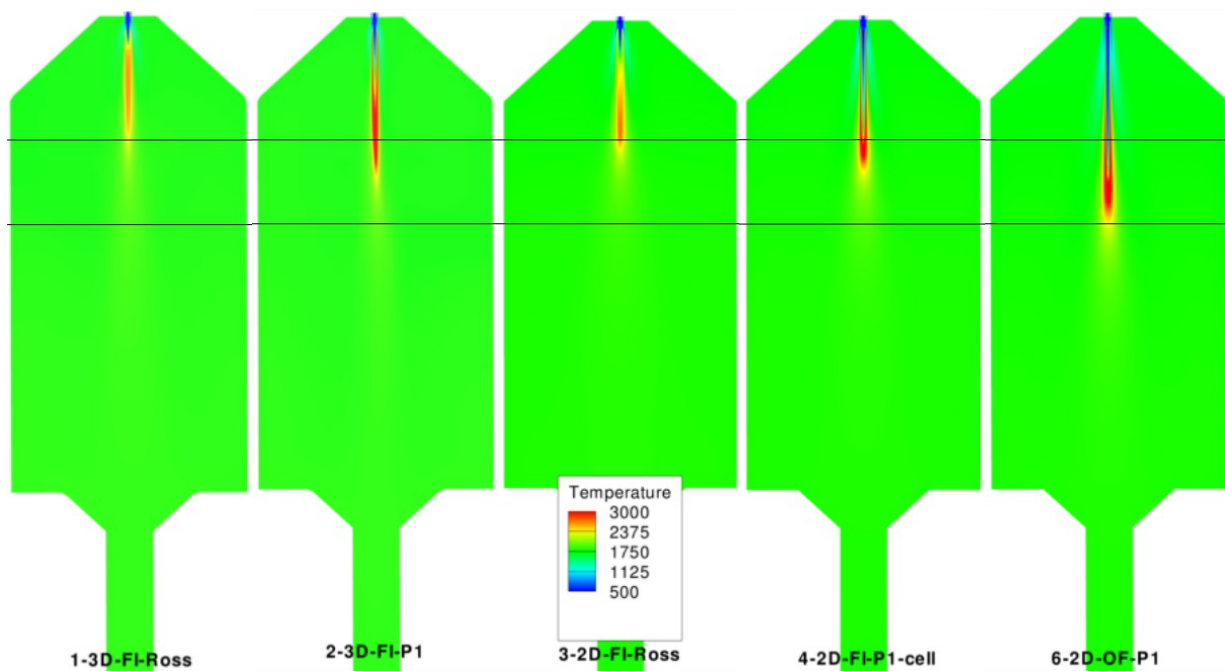
Um den Einfluss des Strahlungsmodells (siehe Abschnitt 2.2.4) zu untersuchen, wurden 6 verschiedene Simulationen verglichen. Zunächst ist von Interesse, wie sich die Modellauswahl auf die Berechnungsergebnisse auswirkt. Dazu wurde das Rosseland- und das P1-Modell für 2D- und 3D-Simulationen verglichen und darauf folgend für das P1-Modell das Weighted-Sum-of-Gray-Gases-Submodell in der zell- und gebietsbasierten Variante (WSGGM-cell-based, WSGGM-domain-based) gegenüber gestellt. Der letzte Fall ist die 2D-OpenFOAM-Rechnung mit dem P1-Modell und konstantem Absorptionskoeffizienten:



**Tabelle 4.2:** Übersicht der Berechnungen zur Untersuchung des Strahlungsmodells.

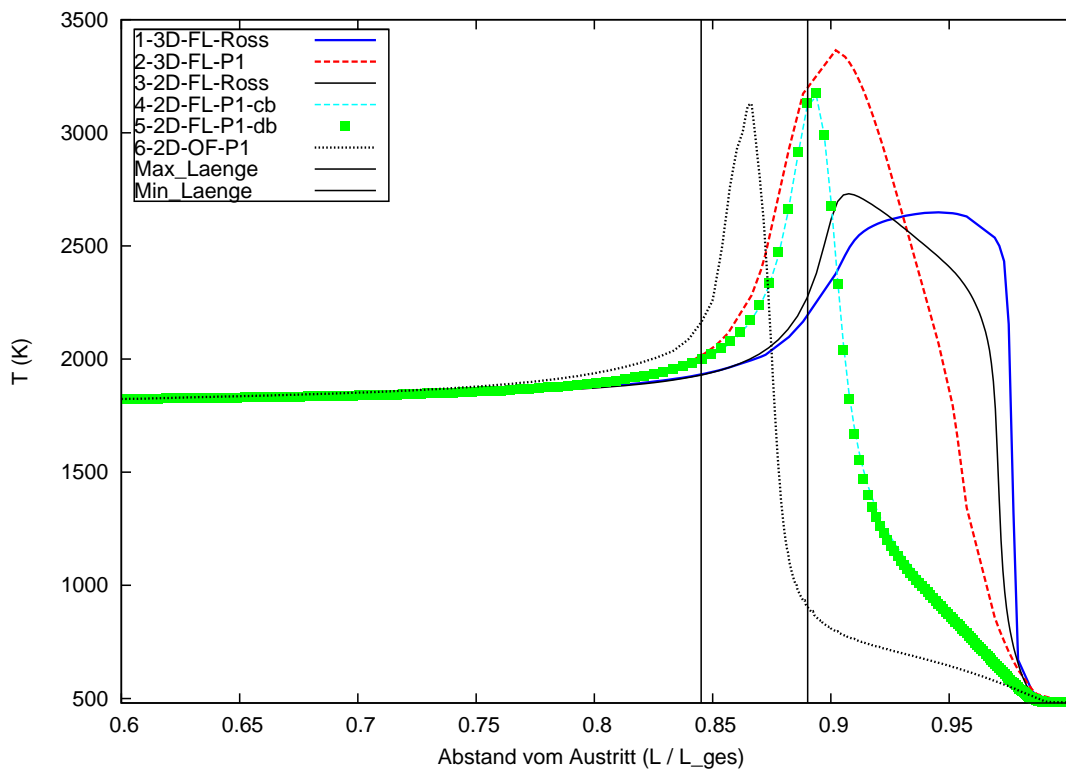
Nr.	Name	Gitter	Code	Strahlungsmodell	Absorptionsmodell
1	3D-FL-Ross	3D, fein	Fluent	Rosseland	WSGGM-cell-based
2	3D-FL-P1	3D, fein	Fluent	P1	WSGGM-cell-based
3	2D-FL-Ross	2D mittel	Fluent	Rosseland	WSGGM-cell-based
4	2D-FL-P1-cell	2D mittel	Fluent	P1	WSGGM-cell-based
5	2D-FL-P1-domain	2D mittel	Fluent	P1	WSGGM-domain-based
6	2D-OF-P1	2D mittel	OpenFOAM	P1	konstant

Die in Tabelle 4.2 benutzte Nummerierung und Namensgebung der Rechenfälle wird auch im Folgenden verwendet und die Eigenschaften des 3D-Rechengitters werden in Abschnitt 4.4 beschrieben. Die Simulationsergebnisse für das Temperaturfeld sind in der Abbildung 4.9 dargestellt. Durch horizontale Linien sind die minimale und maximale Flammenlänge

**Abbildung 4.9:** Vergleich des Temperaturfeldes (in K) für die Fälle 1, 2, 3, 4, 6. Die horizontalen Linien geben die maximale und minimale Flammenlänge an.

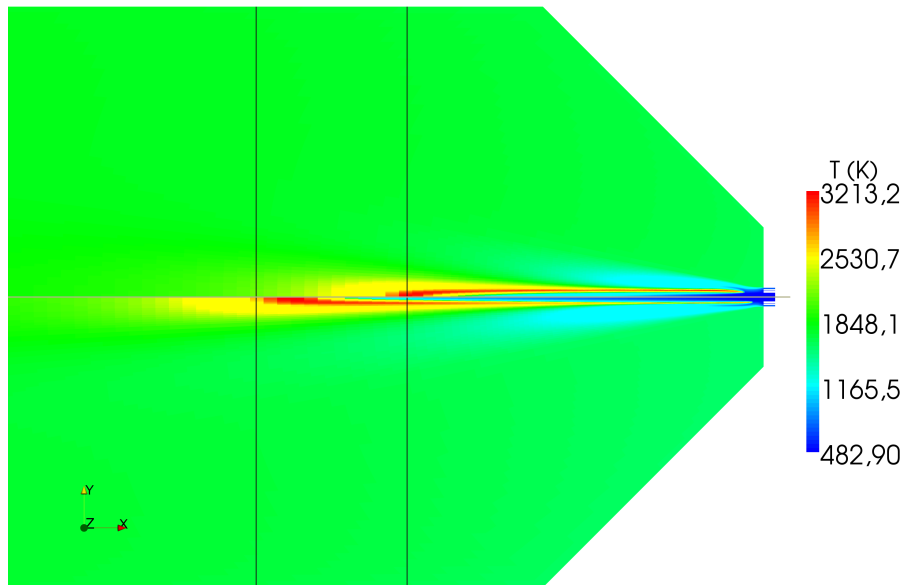
angedeutet. Das Flammenende soll an dieser Stelle dadurch charakterisiert werden, dass die Temperatur unter 2200 K absinkt. Die Definition der Flammenlänge ist aus Zeißler [81] übernommen. Durch die Verwendung des Rosseland-Modells fällt die Maximaltemperatur

(Rosseland: 2700 K, P1: 3200 K) und die Flammenlänge niedriger aus. Der Unterschied zwischen den 2D- und 3D-Rechnungen hinsichtlich der Flammenlänge ist eher gering. Er kann auch auf die unterschiedliche Auflösung der Gitter und die dadurch resultierenden Mischungsunterschiede zurückzuführen sein. Das OpenFOAM-Modell mit konstantem Absorptionskoeffizienten berechnet die längste Flamme. In Abbildung 4.10 ist der Graph der Temperaturverteilungen entlang der Reaktorachse dargestellt. Es wird deutlich, dass für die 2D-Berechnungen mit dem P1-Modell die Bereiche niedriger Temperatur im Zentrum der Mischungszone sich weiter stromabwärts erstrecken. Dadurch setzt der Temperaturanstieg mit den Modellen 4 (Fluent 2D) und 6 (OpenFOAM 2D) erst relativ spät ein. In

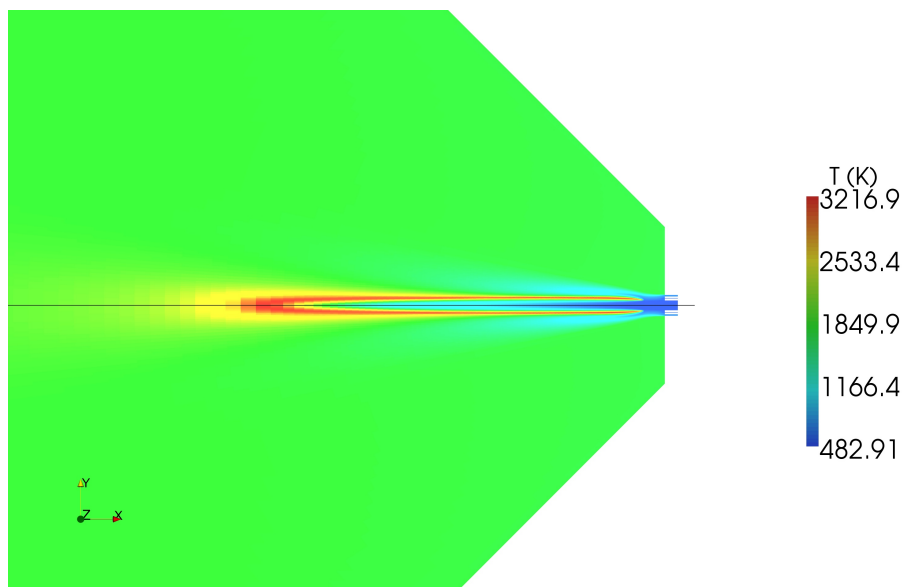


**Abbildung 4.10:** Temperaturvergleich entlang der Reaktorachse (normiert mit Gesamtlänge) für verschiedene Strahlungsmodelle. Zusätzlich ist wieder die Position der maximalen und minimalen Flammenlänge angegeben.

Abbildung 4.11 ist für die eben genannten Rechnungen erkennbar, dass die Flamme durch den OpenFOAM-Löser mit konstantem Absorptionskoeffizienten um 25% länger berechnet wird. In Abbildung 4.12 ist die Fluent-Simulation 4-2D-FL-P1-cell mit konstantem Absorptionskoeffizienten wiederholt worden. Der Einfluss auf das Temperaturfeld ist dabei vernachlässigbar. Es bestehen somit Implementierungsunterschiede bei den beiden Lösern, die zu Abweichungen bei der Flammenlänge führen und die Vereinfachung des konstanten Absorptionskoeffizienten ist nicht die Ursache für die abweichenden Flammenlängen. Die Ursache konnte im Rahmen der vorliegenden Arbeit nicht geklärt werden, in Betracht kommen verschiedene Implementierungen des Turbulenzmodells oder die verschiedenen Werte der turbulenten Schmidt- und Prandtl-Zahlen ( $Sc_t$ ,  $Pr_t$ ).



**Abbildung 4.11:** Temperaturfeld der Fälle 4-2D-F1-P1-cell (oben) und 6-2D-OF-P1 (unten).



**Abbildung 4.12:** Temperaturfeld für den Fall 4-2D-F1-P1-cell mit WSGGM-Absorptionskoeffizienten (oben) und konstantem Absorptionskoeffizienten (unten).

Wie jedoch in Abbildung 4.10 ersichtlich wird, stimmen alle Temperaturen nach  $L/L_{\text{ges}} = 0.7$  nahezu überein (siehe dazu auch Tabelle 4.3). Es zeigte sich außerdem, dass für den betrachteten Fall keine Auswirkungen durch die Verwendung des gebietsbasierten WSGGM beobachtet werden konnten (die Ergebnisse für Rechnungen 4, 5 liegen in Abb. 4.10 übereinander).

**Tabelle 4.3:** Modellierungsfehler am Auslass für die Simulationen zur Strahlungsanalyse.

	1-3D-FL-Ross	2-3D-FL-P1	3-2D-FL-Ross	4-2D-FL-P1-cell	5-2D-FL-P1-domain	6-2D-OF-P1
$F_{H_2,abs}$	-0.030	-0.029	-0.034	-0.027	-0.027	-0.021
$F_{CH_4,abs}$	0.027	0.027	0.028	0.026	0.026	0.024
$F_{CO,abs}$	-0.009	-0.009	-0.011	-0.008	-0.008	-0.008
$F_{CO_2,abs}$	-0.004	-0.004	-0.004	-0.004	-0.004	-0.005
$F_{H_2O,abs}$	0.010	0.010	0.011	0.010	0.010	0.010
$F_{Spezies,abs}$ -	<b>0.080</b>	<b>0.080</b>	<b>0.088</b>	<b>0.076</b>	<b>0.076</b>	<b>0.068</b>
$F_{T,abs}$ -	<b>117</b>	<b>117</b>	<b>121</b>	<b>117</b>	<b>117</b>	<b>107</b>

### Zusammenfassung Strahlungsmodelle

Die vorliegenden Daten deuten darauf hin, dass das Rosseland-Modell eine zu starke Vereinfachung des P1-Modells darstellt und dass dadurch sowohl die Flammenlänge als auch die Maximaltemperatur unterschätzt werden. Der Unterschied zwischen gebiets- und zellbasierten Submodellen für die Berechnung des Absorptionskoeffizienten ist entgegen Aussagen für andere Fälle [12] hier nicht wesentlich. Die Annahme eines konstanten Absorptionskoeffizienten im OpenFOAM-Löser ist nicht die Ursache für die höhere Flammenlänge. In den untersuchten Simulationen konnte kein Zusammenhang zwischen der Form oder Länge der Flamme auf die Gaszusammensetzung am Reaktorausstritt beobachtet werden. Um für den Modellierungsfehler hinsichtlich der Flammenlänge gesicherte Ergebnisse zu erhalten, reichen die zur Verfügung stehenden Messmethoden im Versuchsreaktor nicht aus. Die Strahlungsmodelle und deren Zusammenspiel mit den Turbulenz- und Mischungsmodellen müssten anhand von detaillierten, räumlich aufgelösten Messungen validiert werden. Das bedeutet aber auch, dass die Vereinfachungen für Simulationen, in denen hauptsächlich die Austrittszusammensetzung untersucht wird, kein Problem darstellen. Für Rechnungen mit konstantem Absorptionskoeffizienten (OpenFOAM) oder dem Rosseland-Modell (Fluent) kann der Fehler im Flammenbereich abgeschätzt werden und die Rechnungen behalten ihre Gültigkeit.

## 4.4 Detached-Eddy-Simulation

Für den eben schon betrachteten Rechenfall 30 bar NL wurden neben den stationären 2D-RANS-Rechnungen erstmals instationäre Detached-Eddy-Simulationen (DES) durchgeführt. DES dient als zusätzliches Hilfsmittel, um die vereinfachten RANS-Modelle zu überprüfen und insbesondere das Turbulenz- und Strömungsfeld zu vergleichen. Wie in Abschnitt 2.2.2 beschrieben wurde, stehen für die SGS-Turbulenzmodellierung mehrere Ansätze zur Verfügung. Es wurde jeweils eine DES-Rechnung mit dem Realizable- $k$ - $\epsilon$ -Modell und dem  $k$ - $\omega$ -SST-Modell in FLUENT durchgeführt.

### 4.4.1 Verwendete Gitter

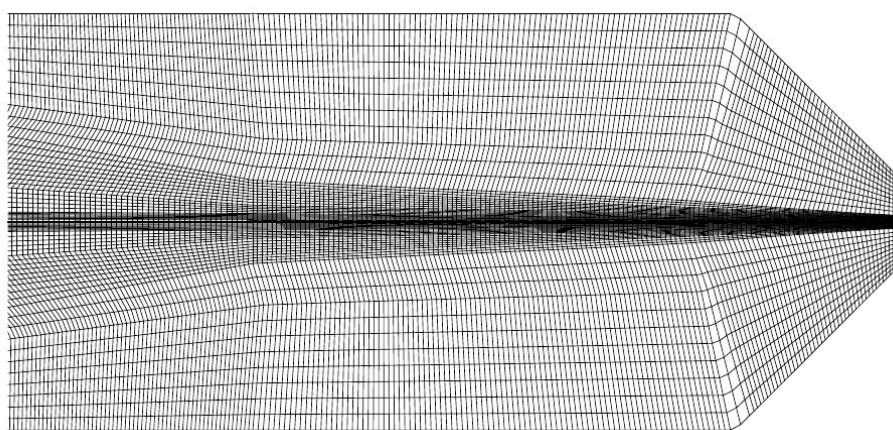


Abbildung 4.13: Schnitt durch das 3D-Gitter.

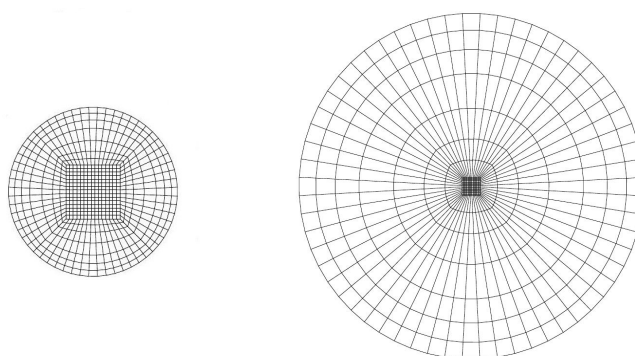
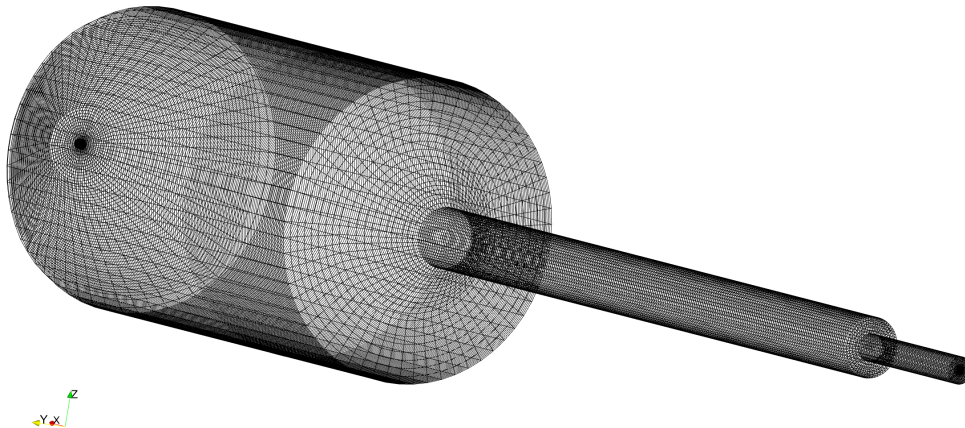


Abbildung 4.14: Gitter am Sauerstoff-Einlass (links) und am Reaktorauslass (rechts)

Für die DES-Simulationen sind zwei verschiedenen Gitter mit ICEMCFD erstellt worden. Es handelt sich wieder um blockstrukturierte Gitter (Abbildung 4.13). Die Ein- und Auslässe sind mit der so genannten O-Grid-Topologie erzeugt (Abbildung 4.14): Im Inneren des kreisförmigen zentralen Einlasses wird ein Quadrat eingefügt und dann gleichmäßig mit dem Rand verbunden. Diese Topologie wird dann auf den Auslass projiziert und ermöglicht so ein gleichmäßiges aber im Zentralbereich verfeinertes Gitter. Das komplette Gitter ist

in Abbildung 4.15 zu sehen. Das feinere Gitter enthält 0.7 Millionen Gitterzellen und das gröbere halb so viele. Um so wenig wie möglich Rechenzeit zu verwenden, wurde zunächst eine stationäre Lösung berechnet, mit der dann die instationäre DES-Lösung initialisiert wurde. Es zeigte sich jedoch, dass die RANS-Rechnung auf dem groben Gitter keine Konvergenz erreichte. Deshalb wurde dieses Gitter verworfen und nur auf dem feinen Gitter weiter gerechnet.

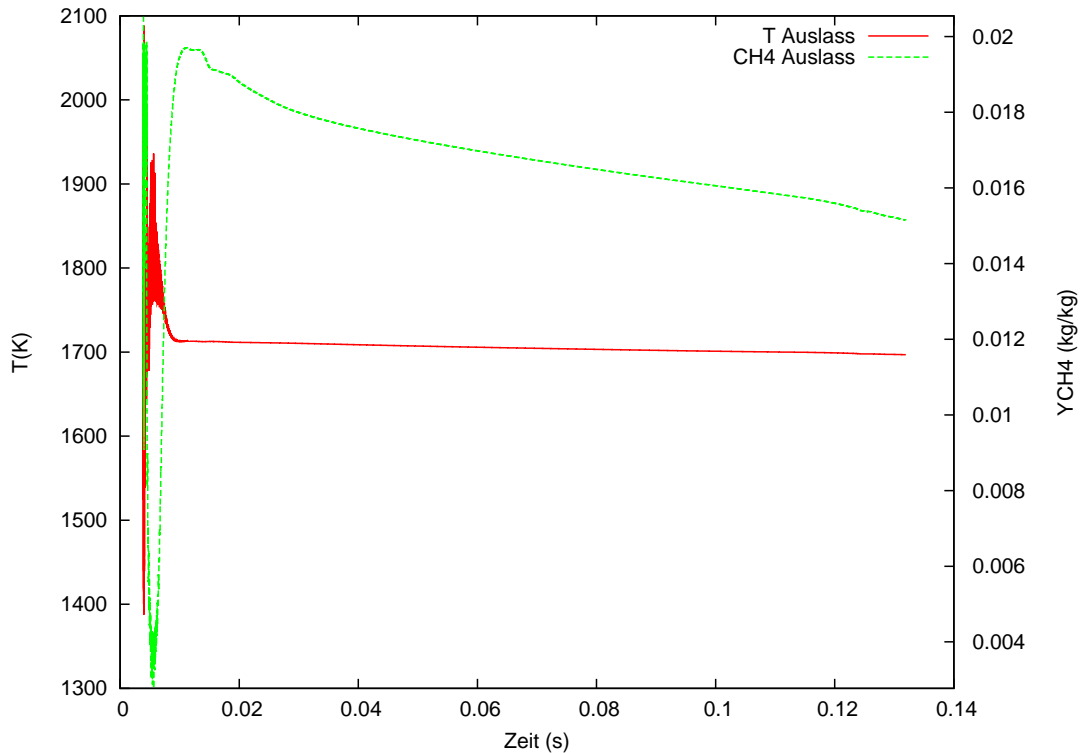


**Abbildung 4.15:** Komplettes 3D-Gitter mit 0.7 Millionen Zellen.

#### 4.4.2 Einstellungen und Berechnungen

Es wurden zwei verschiedene DES-Turbulenzmodelle verwendet (Realizable- $k-\epsilon$ ,  $k-\omega$ -SST von Menter u. a. [49]). Der Rechenfall wurde mittels einer stationären Lösung initialisiert. Wieder wurde der detaillierte Reaktionsmechanismus ATRMech und der ISAT-Algorithmus verwendet. Die Rechenzeiten für eine Rechnung waren sehr hoch (etwa 8 Wochen), obwohl 16 Prozessoren eines ALTIX-3700-Systems verwendet wurden. Zur Zeitdiskretisierung wurde ein implizites Schema zweiter Ordnung und eine Zeitschrittweite von  $10^{-4}$  s verwendet. In jeder Zeititeration wurden 100 SIMPLE-Iterationen durchgeführt. Zur Ortsdiskretisierung wurde das QUICK-Schema<sup>1</sup> benutzt. Bei jeder Rechnung wurde etwa 0.15 s „Real-Zeit“ berechnet, was 150000 Iterationen entspricht. Nach dieser Zeit war jedoch noch kein quasistationärer Zustand erreicht. Das lässt sich daran erkennen, dass sich einige Größen am Austritt noch veränderten. Die Temperatur änderte sich kaum noch, jedoch die besonders träge Größe Methangehalt hatte noch nicht den stationären Wert erreicht (siehe Abbildung 4.16). Deshalb kann der Methananteil am Austritt für diese Simulation nur als Anhaltspunkt dienen. Die wichtigsten Einstellungen der durchgeführten Simulationen sind in Tabelle 4.4 zusammengefasst.

<sup>1</sup>Für Details zum nicht näher erläuterten QUICK-Schema wird der Leser an Ferziger u. Peric [15] verwiesen.



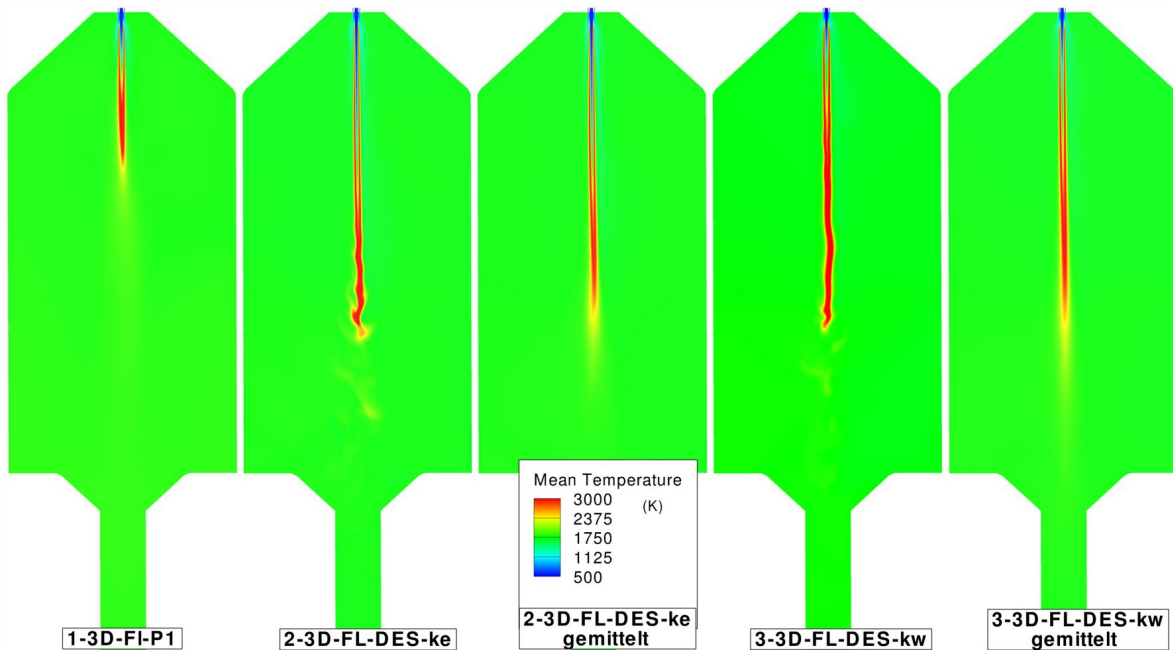
**Abbildung 4.16:** Verlauf der Größen Temperatur und  $\text{CH}_4$ -Massenbruch am Auslass des Reaktors.

**Tabelle 4.4:** Übersicht der Berechnungen zur DES-Analyse.

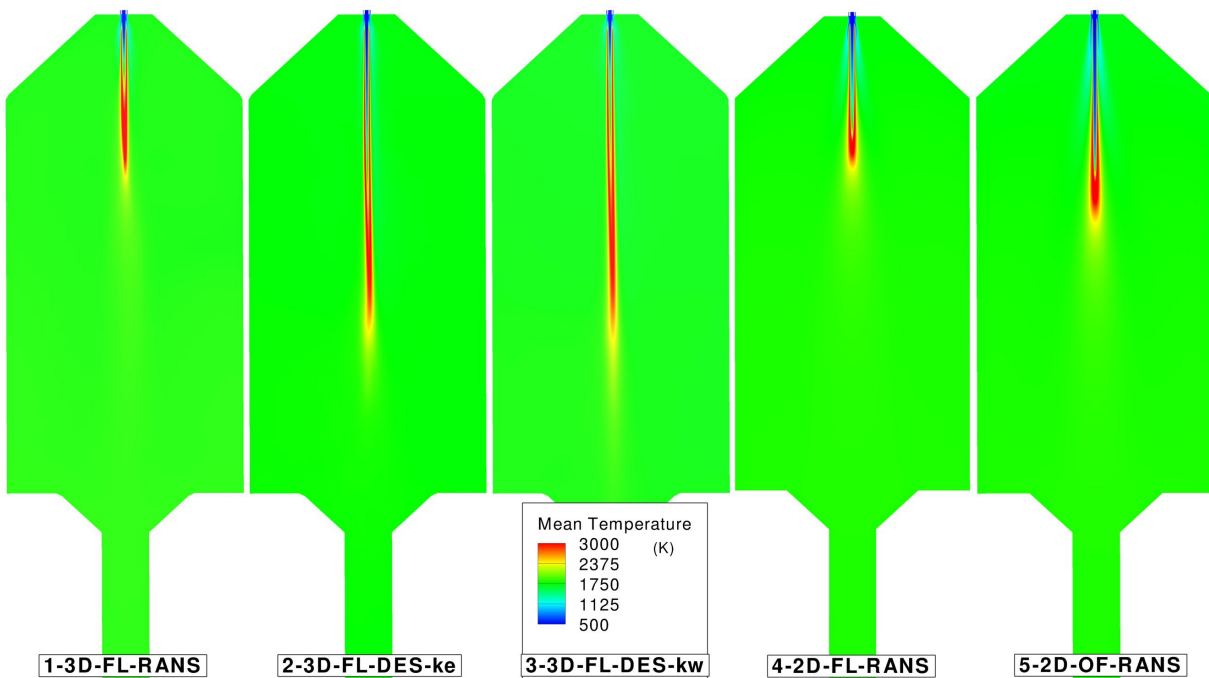
Nr.	Name	Gitter	Code	stationär/ instat.	Strahlungs- modell	Turbulenz- modell
1	3D-FL-RANS	3D, fein	Fluent	stationär	P1	real.- $k$ - $\epsilon$
2	3D-FL-DES-ke	3D, fein	Fluent	instationär	Rosseland	real.- $k$ - $\epsilon$
3	3D-FL-DES-kw	3D, fein	Fluent	instationär	Rosseland	$k$ - $\omega$ -SST
4	2D-FL-RANS	2D, mittel	Fluent	stationär	P1	real.- $k$ - $\epsilon$
5	2D-OF-RANS	2D, mittel	OpenFOAM	stationär	P1	real.- $k$ - $\epsilon$

### 4.4.3 Ergebnisse DES

In Abbildung 4.17 sind zunächst momentane und zeitgemittelte Temperaturen aus den DES-Rechnungen mit dem stationären RANS-Ergebnis verglichen. Die Flammenzone bei den DES-Ergebnissen erstreckt sich weiter stromabwärts. Die beiden DES-Varianten unterscheiden sich in diesem Punkt nur unwesentlich. In den instationären Simulationen werden Fluktuationen mit berücksichtigt und in Animationen ist sogar die Ablösung von heißen „Flammentaschen“ erkennbar. In Abbildung 4.18 sind zusätzlich noch die Temperaturfelder der 2D-RANS-Rechnungen dargestellt. Das Verhalten der Größen turbulente kinetische Energie ( $k$ ) und Turbulence-Viscosity-Ratio (TVR) kann in den Abbildungen 4.19 und 4.20 verglichen werden. Die turbulente Viskosität bewirkt einen verstärkten Wärme- und Stofftransport (Gleichungen (2.120), (2.121)). Neben dem Strahlungsmodell hat die turbulente



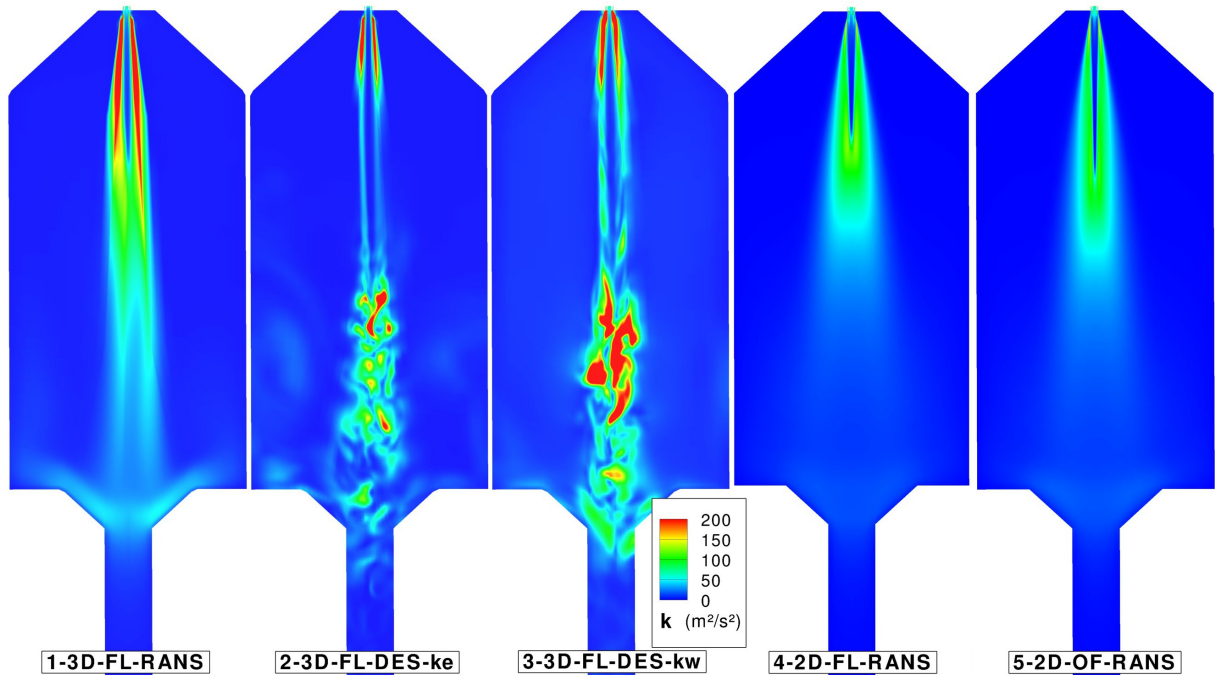
**Abbildung 4.17:** Vergleich des Temperaturfeldes für die Rechnungen 1-3D-Fl-RANS, 2-3D-Fl-DES-ke (Momentaufnahme), 2-3D-Fl-DES-ke (gemittelt), 3-3D-Fl-DES-kw (Momentaufnahme), 3-3D-Fl-DES-kw (gemittelt).



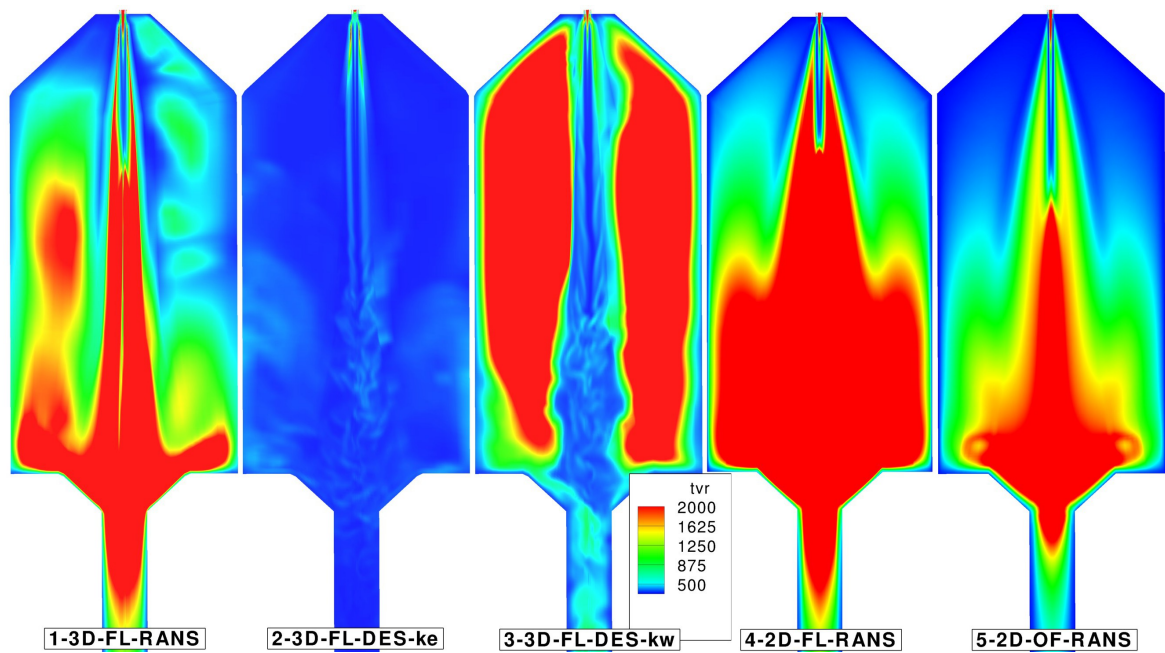
**Abbildung 4.18:** Vergleich der Temperatur für 1-3D-Fl-RANS, 2-3D-Fl-DES-ke (gemittelt), 3-3D-Fl-DES-kw (gemittelt), 4-2D-Fl-RANS und 5-2D-Of-RANS.

Viskosität einen starken Einfluss auf die Flammenlänge. In Abbildung 4.20 ist zu sehen, dass die Flamme aufhört, wo die Turbulenz ( $k$ , TVR) stark ansteigt, da dort ein schneller Wärmetransport erzwungen wird. Für das Feld  $k$  sind die Ergebnisse der DES-Simulationen wieder sehr ähnlich und die stationären Ergebnisse weisen ebenfalls ein ähnliches Feld auf. Bei den DES-Ergebnissen wurde das Feld des jeweils letzten Zeitschritts verwendet.





**Abbildung 4.19:** Vergleich der turbulenten kinetischen Energie ( $k$ ) für 1-3D-FL-RANS , 2-3D-FL-DES-ke (Momentaufnahme), 3-3D-FL-DES-kw (Momentaufnahme), 4-2D-FL-RANS und 5-2D-OF-RANS. DES- $k$  ist die Summe der aufgelösten und modellierten Werte.



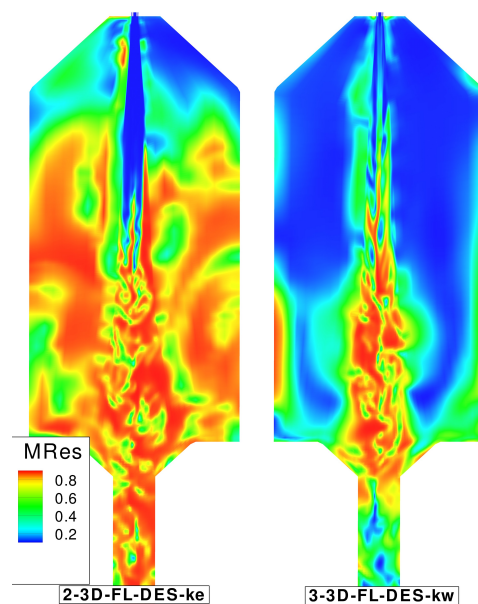
**Abbildung 4.20:** Vergleich des Turbulence-Viscosity-Ratio (TVR) für 1-3D-FL-RANS , 2-3D-FL-DES-ke (Momentaufnahme), 3-3D-FL-DES-kw (Momentaufnahme), 4-2D-FL-RANS und 5-2D-OF-RANS.

Die dargestellten Werte sind die Summe aus dem aufgelösten und nicht aufgelösten (SGS) Werten für  $k$ . Für das TVR wurde nur der SGS-Anteil berücksichtigt. Es fällt auf, dass im Flammenbereich sehr hohe  $k$ -Werte in den 3D-Simulationen berechnet werden. Wahr-

scheinlich liegt das an dem Übergang von feinen zu größeren Zellen in diesem Bereich. Die Größenunterschiede der Zellen sind bei den 2D-Gittern geringer (vergleiche Abb. 4.1 und 4.13).

Für das TVR fallen die starken Abweichungen der DES-Ergebnisse ins Auge. Dass diese aber kaum einen Einfluss auf das Spezies- und Temperaturfeld haben liegt daran, dass das TVR in der Mischungszone noch ähnlich ist und die großen Abweichungen in der Rezirkulation, wo ohnehin kaum Gradienten für Spezies und Temperatur vorliegen, auftauchen.

Für die stationären Lösungen werden die höchsten Werte für das TVR vom Ende der Flammenzone bis zur Verengung berechnet. Es ist bekannt [77], dass Turbulenzmodelle in stationären Lösern das TVR häufig überschätzen. Es zeigte sich aber, dass durch das für DES zu grobe Gitter nicht genug turbulente Skalen aufgelöst werden konnten und so das TVR unterschätzt wird. Die Anwendung des Pope-Kriteriums (Gleichung (2.63)) für die DES-Rechnungen, bei dem untersucht wird, welcher Anteil der turbulenten kinetischen Energie durch die Rechnung aufgelöst wurde, ergibt dass dies in weiten Bereichen nicht dem empfohlenen Wert  $> 0.8$  entspricht (Abbildung 4.21). Insbesondere im Bereich des Freistrahls ist die Auflösung zu gering, weshalb die extrem lange Flammenzone durch eine zu niedrig berechnete Turbulenz in diesem Bereich erklärt wird.



**Abbildung 4.21:** Ergebnis des Pope-Kriteriums für die Auflösungsgüte der DES-Rechnungen.  $M$  beschreibt den Anteil der aufgelösten turbulenten kinetischen Energie

In Tabelle 4.5 sind die Ergebnisse am Austritt gegenüber gestellt. Die DES-Ergebnisse stimmen am besten mit den experimentellen Konzentrationswerten überein. Entweder liegt das an der sehr langen Reaktionszone, die über einen größeren Bereich Wärme freisetzt, oder an der besseren Berücksichtigung der Vermischung durch das DES-Modell.

### Zusammenfassung und Einordnung der DES-Ergebnisse

Zum besseren Verständnis der Strömungsvorgänge im Versuchsreaktor wurde erstmals eine detaillierte, dreidimensionale DES-Berechnung durchgeführt. Zwar konnten instationäre Effekte dargestellt werden. Wichtige Eigenschaften des Reaktors wie die Flammenlänge konnten jedoch dadurch nicht endgültig geklärt werden. Obwohl ein Gitter mit 0.7 Millionen

Zellen benutzt wurde, reicht die Auflösung nicht aus, um genügend turbulente Skalen für eine DES-Simulation aufzulösen. Das ist nur mit einem verfeinerten Gitter möglich. Diese Berechnungen sind aber sehr viel zeitaufwendiger und waren im Rahmen des Projektes nicht zu realisieren.

**Tabelle 4.5:** Übersicht der Ergebnisse am Reaktorauslass verglichen mit experimentellen Ergebnissen für die DES- und RANS-Modelle

	1-3D-FL-RANS	3-3D-FL-DES-kw	4-2D-FL-RANS	5-2D-OF-RANS
$F_{\text{H}_2,\text{abs}}$	-0.029	0.007	-0.027	-0.021
$F_{\text{CH}_4,\text{abs}}$	0.027	0.014	0.026	0.024
$F_{\text{CO},\text{abs}}$	-0.009	-0.008	-0.008	-0.008
$F_{\text{CO}_2,\text{abs}}$	-0.004	-0.006	-0.004	-0.005
$F_{\text{H}_2\text{O},\text{abs}}$	0.010	-0.008	0.010	0.010
$F_{\text{Spezies},\text{abs}}$	<b>0.080</b>	<b>0.042</b>	<b>0.076</b>	<b>0.068</b>
$F_{T,\text{abs}}$	<b>117</b>	<b>40</b>	<b>117</b>	<b>107</b>

## 4.5 Vergleich des OpenFOAM-Modells mit dem Fluent-Modell

In den vorangehenden Abschnitten sind schon mehrfach Ergebnisse des neuen OpenFOAM-Lösers mit denen von Fluent verglichen worden. Die Abbildungen 4.9 und 4.10 zeigen, dass die Flammenlänge in OpenFOAM größer berechnet wird. Diese Problematik ist bereits in 4.3 thematisiert worden. In den Abbildungen 4.19 und 4.20 wird aber auch ein Unterschied im Feld von  $k$  und TVR deutlich, obwohl alle Turbulenzeinstellungen der Löser gleich waren. Diese Turbulenzgrößen beeinflussen sehr stark den Stoff- und Energietransport und können (neben den bereits angesprochenen Abweichungen der Parameter  $Sc_t$ ,  $Pr_t$ ) der Grund für die unterschiedlichen Flammenausprägungen sein. Somit rühren die Unterschiede in der Implementierung möglicherweise vom Turbulenzmodell her. Die Austrittszusammensetzungen hingegen sind für beide Löser sehr ähnlich (siehe Tabelle 4.5). Zusammenfassend kann gesagt werden, dass die Ergebnisse des kommerziellen Codes mit dem neu entwickelten EDC-Löser weitgehend reproduziert werden können. Die Konturplots für das Temperatur- und Speziesfeld (vergleiche beispielsweise Abbildungen 4.2, 4.5 und 4.3, 4.6) und auch die Austrittstemperaturen und -zusammensetzungen stimmen gut überein. Die leichten Abweichungen insbesondere in der Flammenlänge können durch Implementierungsunterschiede erklärt werden.

## 4.6 Vergleich verschiedener Modelle zur Turbulenz-Mischungs-Interaktion

Alle bisher in diesem Kapitel gezeigten Ergebnisse wurden mit dem Standard-EDC-Modell berechnet. Es zeigen sich weiterhin hohe Modellierungsfehler in den Größen Temperatur und Methananteil. In den durchgeführten Modellvariationen (Gitterstudie, Strahlungsmodell, DES) konnten eine Verringerung des Fehlers nur bei der DES-Simulation beobachtet werden. Bei einer Studie zur Variation des Turbulenzmodells [63] konnte ebenfalls kein Einfluss auf die problematischen Größen beobachtet werden.

In Rehm u. a. [65] wurde gezeigt, dass die Ursache im Verbrennungsmodell zu suchen ist und dass eine Anpassung der EDC-Parameter nicht zielführend ist. In Abschnitt 2.7.2 sind die im Rahmen dieser Arbeit entwickelten Verbesserungen des Verbrennungsmodells vorgestellt worden. Es wurde vorgeschlagen, das EDC-Modell ganz oder teilweise durch einen PFR-Ansatz zu ersetzen. Beim EDC-PFR-Ansatz soll das Rechengebiet in zwei Zonen aufgeteilt werden: in Abbildung 4.22 ist die Ausprägung der Zonen zu erkennen. Im

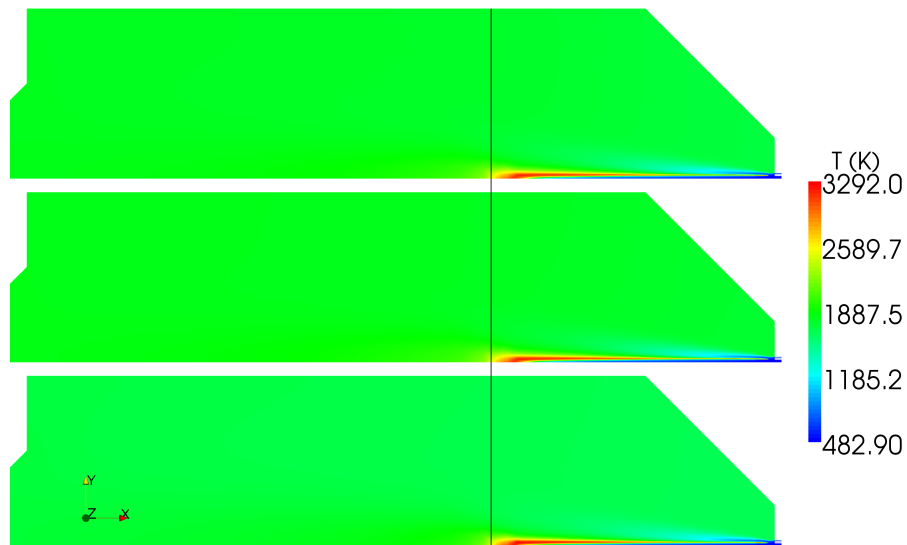


**Abbildung 4.22:** Verteilung der Zonen des EDC-PFR-Modells im oberen Gasraum des Reaktors: Verbrennungszone (1), Übergangszzone (2) und Vergasungszone (3).

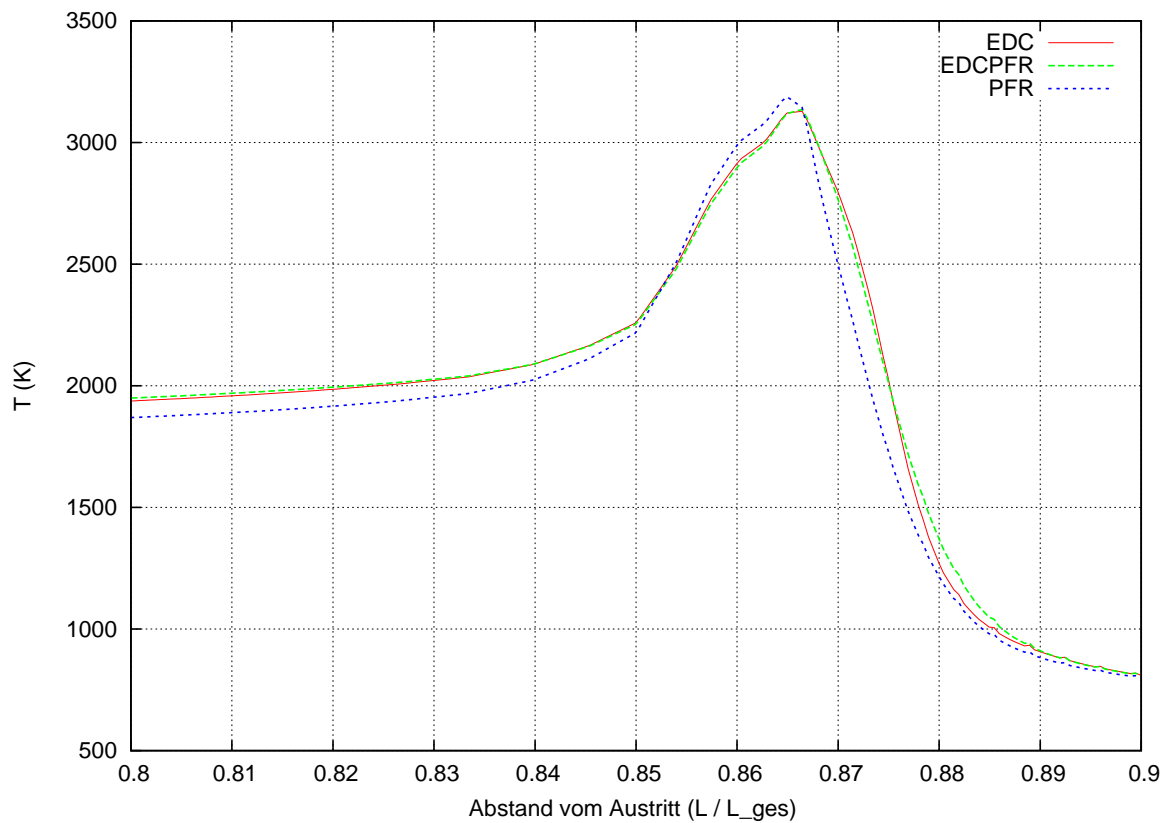
Flammenbereich ist die Verbrennungszone definiert, in der nur das EDC-Modell zum Einsatz kommt und außerhalb die Vergasungszone mit dem PFR-Modell. Im Übergangsbereich wird eine Mittelung aus beiden Ansätzen durchgeführt. Dieser Ansatz wird im Folgenden als EDC-PFR-Ansatz bezeichnet. Eine Vereinfachung dieses Modells stellt der reine PFR-Ansatz dar, bei dem keine Zonenunterteilung stattfindet und im gesamten Rechengebiet nur der PFR-Ansatz benutzt wird.

In der Abbildung 4.23 ist die Temperaturverteilung im oberen Gasraum des Reaktors für die verschiedenen Ansätze zu sehen. Es ist erkennbar, dass die Flammenzone in allen drei Fällen fast identisch ausgeprägt ist. Dies ist auch am sehr ähnlichen Temperaturverlauf entlang der Symmetrieachse, wie in Abbildung 4.24 dargestellt, erkennbar. Die Temperatur entlang der Reaktorachse sinkt für das PFR-Modell stärker ab. In der Flammenzone sind die Verläufe des EDC- und des EDC-PFR-Modell per Definition gleich. Es überrascht aber, dass auch das PFR-Modell in der Lage ist, den Temperaturverlauf des EDC-Modells in der Flammenzone zu reproduzieren.

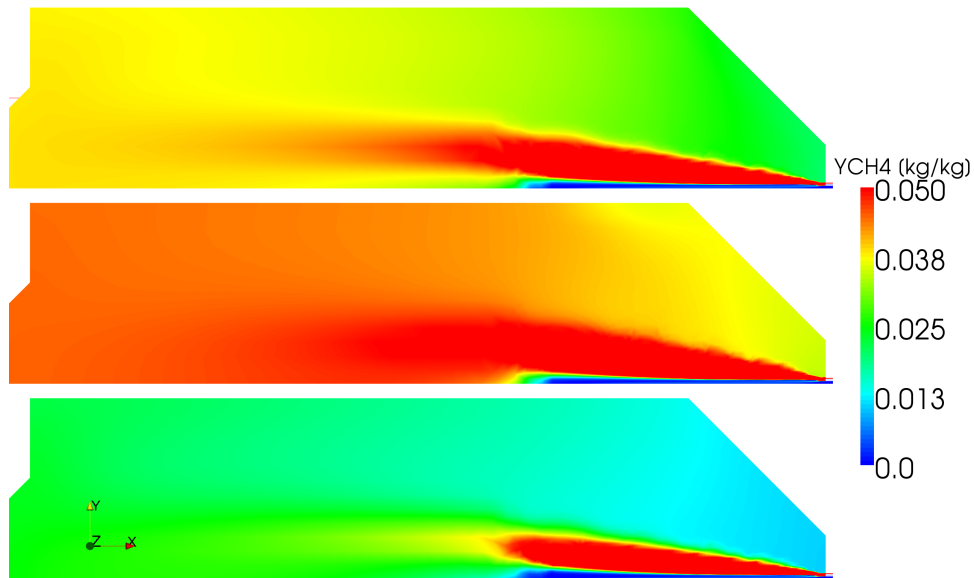
In den Abbildungen 4.25 und 4.26 wird der Einfluss des PFR-Modells in der Vergasungszone noch deutlicher: der Methanslip ist für das EDC-Modell am höchsten. Mit dem PFR-Modell wird der größte Methanumsatz berechnet. Es ist auffällig, dass durch das reine PFR-Modell kurz nach der Flamme bereits deutlich mehr Methan umgesetzt wird. Dieser Bereich ist



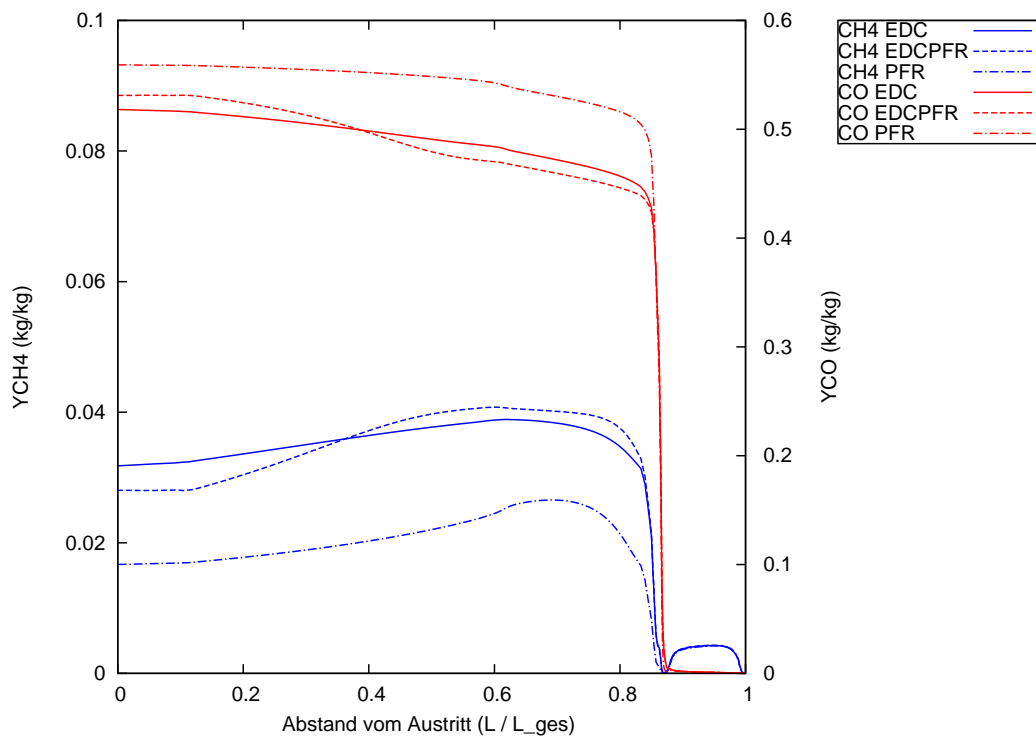
**Abbildung 4.23:** Temperaturverteilung im oberen Gasraum für das EDC-Modell (oben), EDC-PFR-Modell (Mitte) und das PFR-Modell (unten).



**Abbildung 4.24:** Verlauf der Temperatur entlang der Symmetrieachse im Bereich der Flammenzone - die x-Achse ist mit der gesamten Reaktorlänge normiert



**Abbildung 4.25:** Methanverteilung im oberen Gasraum für das EDC-Modell (oben), EDC-PFR-Modell (Mitte) und das PFR-Modell (unten).



**Abbildung 4.26:** Verlauf der Größen CO- und CH<sub>4</sub>-Massenbruch entlang der Symmetrieachse.

besonders wichtig, da dort die höchsten Temperaturen auftreten und die Reformierung am besten ablaufen kann. Dieses Verhalten wird vom reinen PFR-Modell am besten erfasst.

In Tabelle 4.6 sind die Ergebnisse für die verschiedenen Ansätze zusammengefasst. Die

**Tabelle 4.6:** Vergleich der Modellierungsfehler am Reaktoraustritt für verschiedene Verbrennungsmodelle

	EDC	EDC-PFR	PFR	EDC Fluent
$F_{\text{H}_2,\text{abs}}$	-0.025	-0.018	0.007	-0.034
$F_{\text{CH}_4,\text{abs}}$	0.024	0.022	0.011	0.028
$F_{\text{CO},\text{abs}}$	-0.007	-0.004	0.003	-0.011
$F_{\text{CO}_2,\text{abs}}$	-0.004	-0.005	-0.006	-0.004
$F_{\text{H}_2\text{O},\text{abs}}$	0.009	0.005	-0.015	0.011
$F_{\text{Spezies},\text{abs}}$	<b>0.070</b>	<b>0.054</b>	<b>0.043</b>	<b>0.088</b>
$F_{T,\text{abs}}$	<b>111</b>	<b>104</b>	<b>34</b>	<b>121</b>

Verwendung des EDC-PFR-Modells verbessert die Simulationsergebnisse und führt dazu, dass die experimentellen Ergebnisse weiter angenähert werden können. Die Ergebnisse, die mit dem reinen PFR-Ansatz erhalten wurden, liegen näher an den Experimentaldaten. Besonders die Ergebnisse bezüglich der kritischen Messwerte Temperatur und Methananteil werden durch diesen Ansatz deutlich verbessert. So sind die Fehler für die Temperatur  $F_{T,\text{abs}} = 34$  K und für die Spezies  $F_{\text{Spezies},\text{abs}} = 0.043$  für das PFR-Modell am niedrigsten.

## 4.7 Zusammenfassung Modellvergleich

Die Erfahrungen mit dem 30 bar Testfall zeigen die Schwierigkeiten, die nach wie vor bei der Berechnung bestehen. Eine volle Auflösung aller Phänomene ist auch mit der bisher detailliertesten Rechnung (DES) nicht gelungen. Die vereinfachten 2D-Modelle erfassen aber die wesentlichen Eigenschaften mit vertretbaren Unsicherheiten. Durch die Verwendung der vorgeschlagenen Anpassungen, insbesondere durch den PFR-Ansatz konnten die Modellierungsfehler reduziert werden. Dieser Ansatz wird deshalb als vereinfachtes Modell für die folgenden Rechnungen vorgezogen.

## 4.8 Weitere Simulationsergebnisse für verschiedene Messpunkte

Bisher wurde nur der Testfall POX30NL aus Zeißler [81] zum Vergleich verschiedener Modelle verwendet. Nun sollen das OpenFOAM-PFR-Modell und die EDC-Modelle auf eine größere Anzahl von Versuchspunkten in einem breiten Druckbereich angewendet werden. Dabei wurden die Versuchspunkte so gewählt, dass das Intervall der Werte für das Sauerstoff/Kohlenstoff-Verhältnis ( $O_2/C$ ) möglichst groß ist, da diese Größe direkte Auswirkungen auf die Reaktortemperatur hat. Um eine Vergleichbarkeit zu schaffen, wurden nur Versuche, die innerhalb einer Kampagne durchgeführt wurden, gegenüber gestellt.

### 4.8.1 Kampagne 30-60 bar

In dieser Kampagne wurde die gleiche Reaktorkonfiguration wie auch in POX30NL mit einem Brenner, der für Drücke von 30-70 bar geeignet ist, verwendet. Zur Berechnung wurde das grobe Gitter eingesetzt. Zu folgenden Versuchspunkten wurden Simulationen durchgeführt:

- Gas-POX 60bar- $O_2/C=0.69$ ,
- Gas-POX 60bar- $O_2/C=0.70$ ,
- Gas-POX 60bar- $O_2/C=0.72$  und
- Gas-POX 30bar- $O_2/C=0.74$ .

Wegen Probleme des Wärmeübergangsmodells im OpenFOAM-Löser musste der Wärmeverlust über die Wand ( $Q_{\text{Wand}}$ ) vernachlässigt werden. Der Wärmeverlust durch die Brennerkühlung ( $Q_{\text{Brenner}}$ ) wurde durch eine entsprechende Reduktion der Temperaturen der Eintrittsströme berücksichtigt. Die Wärmeverluste wurden durch Temperaturmessungen am Reaktormantel und des Brennerkühlwassers abgeschätzt. Im Fall 60bar- $O_2/C=0.72$  entspricht der Wandwärmeverlust für eine konstante Spezieszusammensetzung einer 30 K niedrigeren Austrittstemperatur. In Testrechnungen, die in Fluent mit vollem Wärmeverlust durchgeführt wurden und nicht hier dargestellt wurden, betrug der Temperaturunterschied am Austritt weniger als 20K. Alle weiteren Einstellungen entsprechen denen des Beispielfalls POX30NL aus Abschnitt 4.1.1.

In der Tabelle 4.7 und den Tabellen 1-3 im Anhang 7.1 sind die Simulationsergebnisse dar-

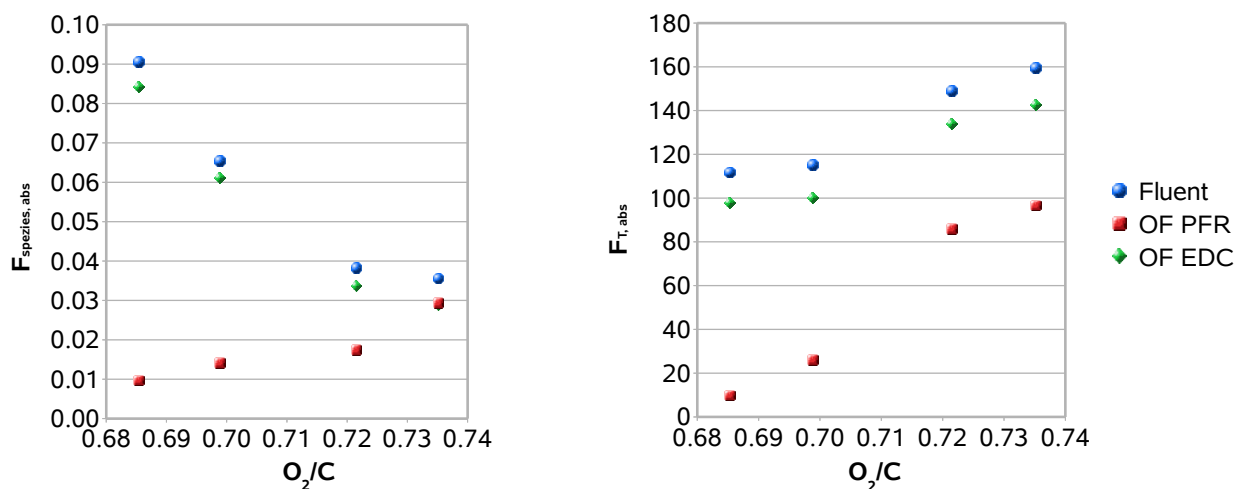
**Tabelle 4.7:** Modellierungsfehler am Reaktorausritt für den Fall 60bar- $O_2/C=0.69$

	OF PFR	OF EDC	Fluent	GG <sub>Exp</sub>	GG <sub>Einlass</sub>
$F_{H_2,abs}$	0.000	-0.031	-0.036	0.006	0.018
$F_{CH_4,abs}$	0.005	0.019	0.020	-0.005	-0.004
$F_{CO,abs}$	0.000	-0.009	-0.010	0.005	0.003
$F_{CO_2,abs}$	-0.004	-0.002	-0.002	-0.003	-0.003
$F_{H_2O,abs}$	0.000	0.022	0.023	-0.003	-0.013
$F_{\text{Spezies},abs}$	<b>0.010</b>	<b>0.084</b>	<b>0.090</b>	<b>0.022</b>	<b>0.042</b>
$F_{T,abs}$	<b>10</b>	<b>97</b>	<b>112</b>	<b>-24</b>	<b>-75</b>

gestellt. Die Spalten GG<sub>Exp</sub> und GG<sub>Einlass</sub> beschreiben die Gleichgewichtszusammensetzung



und -temperatur der experimentellen Gaszusammensetzung des Synthesegases am Reaktoraustritt und der Eintrittsgaszusammensetzung (voller Wärmeverlust). In Abbildung 4.27



**Abbildung 4.27:** Modellierungsfehler  $F_{\text{Spezies,abs}}$  (links) und  $F_{T,abs}$  (rechts) bei verschiedenen  $O_2/C$ -Verhältnissen

sind die Fehler für die Spezies und die Temperatur gegen das  $O_2/C$ -Verhältnis aufgetragen. Die EDC-Ergebnisse beider Löser sind ähnlich, wobei von Fluent die Temperatur meist etwas höher berechnet wird. Der Speziesfehler ist für das PFR-Modell in allen Fällen mit  $F_{\text{Spezies,abs}} < 0.03$  am niedrigsten. Besonders bei kleinen  $O_2/C$ -Verhältnissen, also niedriger Reaktortemperatur, liefert das EDC-Modell deutlich schlechtere Ergebnisse. Für steigende  $O_2/C$ -Verhältnisse sinkt der Speziesfehler der EDC-Simulationen zwar ab, liegt aber immer noch leicht höher als in den PFR-Fällen. Für hohe  $O_2/C$ -Verhältnisse zeigen sich aber auch höhere Temperaturunterschiede bei  $GG_{\text{Exp}}$  und  $GG_{\text{Einlass}}$ .

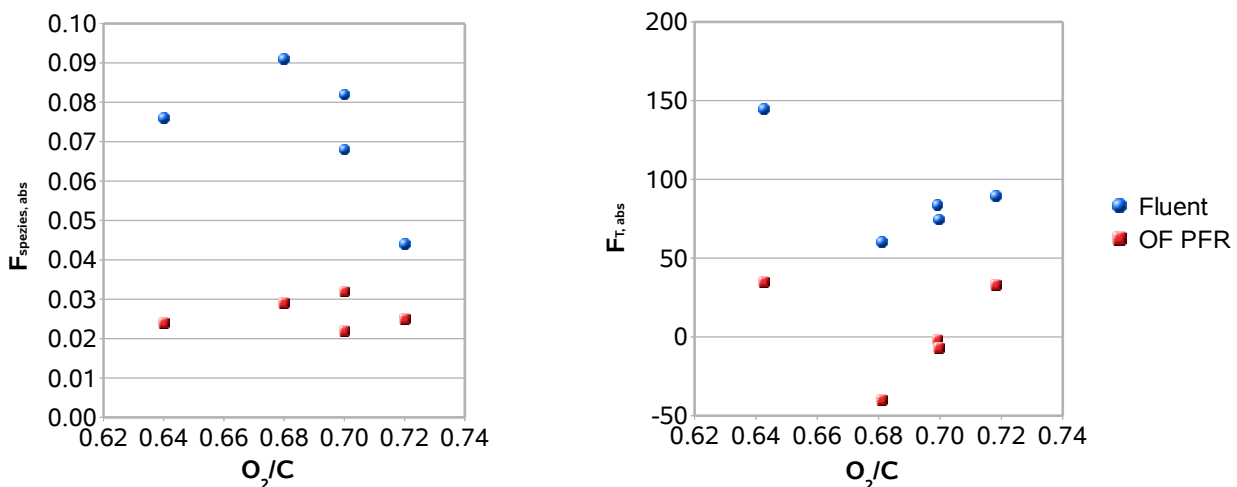
## 4.8.2 Kampagne 80-100 bar

Für die Simulationen zur Kampagne mit hohem Druck wurde das Gitter im Einlassbereich angepasst, da für diese Gas-POX-Versuche ein spezieller Brenner eingesetzt wurde. Das Reaktorvolumen wurde jedoch nicht verändert. Für folgende Versuchspunkte wurden Simulationen durchgeführt:

- Gas-POX 100bar- $O_2/C= 0.64$ ,
- Gas-POX 80bar- $O_2/C= 0.68$ ,
- Gas-POX 95bar- $O_2/C= 0.70$ ,
- Gas-POX 80bar- $O_2/C= 0.70$  und
- Gas-POX 80bar- $O_2/C= 0.72$ .

Aus Zeitgründen wurde für diese Versuche auf die Berechnung mit dem EDC-Ansatz unter OpenFOAM verzichtet, da sich die Ergebnisse in den vorhergehenden Berechnungen ohnehin kaum von denen mit Fluent unterschieden. Wie im vorhergehenden Abschnitt wurde der Wandwärmeverlust vernachlässigt.

Die detaillierten Ergebnisse sind im Anhang 7.2 in den Tabellen 4-8 abgedruckt. In Abbil-



**Abbildung 4.28:** Modellierungsfehler  $F_{\text{Spezies,abs}}$  (links) und  $F_{T,abs}$  (rechts) bei verschiedenen  $O_2/C$ -Verhältnissen

Abbildung 4.28 sind die Modellierungsfehler für die Kampagne mit hohem Druck in Abhängigkeit vom  $O_2/C$ -Verhältnis abgebildet. Die Ergebnisse ähneln denen des vorhergehenden Abschnitts: Bei der Verwendung des PFR-Ansatzes wird der Modellierungsfehler reduziert. Der Speziesfehler  $F_{\text{Spezies,abs}}$  ist mit diesem Modell nicht höher als 0.04 und die Temperatur weicht nicht mehr als 50 K von den Messwerten ab. Besonders die kritische Größe  $CH_4$  wurde gut getroffen. Die Abweichungen der Werte der beiden Gleichgewichtszustände ist kleiner als in der Kampagne Gas-POX 30-70 bar. Nur im Fall  $O_2/C= 0.68$  liegt der Temperaturunterschied noch bei 100 K.

### 4.8.3 Kampagne mit inerter Schüttung

Für den vorliegenden Abschnitt wurden experimentelle und berechnete Ergebnisse einer Gas-POX-Kampagne, bei der der Reaktor mit einer inerten Schüttung ähnlich der katalytischen Fahrweise (ATR) beladen wurde, verglichen. Die Reaktorgeometrie und die Höhe der Schüttung entsprechen denen aus [81] für den ATR-Fall, wobei der Katalysator durch Inertkugeln ersetzt wurde. Die Schüttungsparameter sind in Tabelle 4.8 gezeigt.

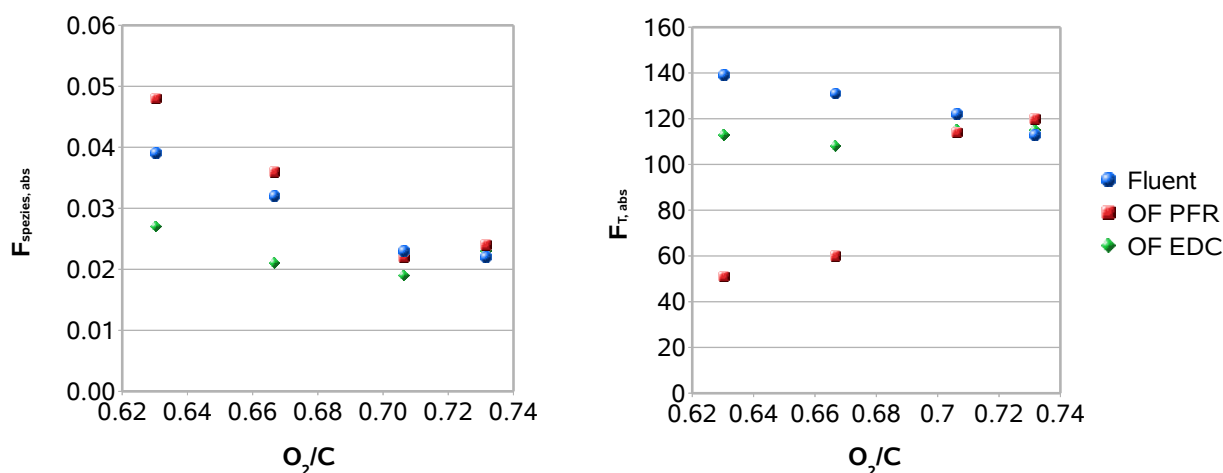
**Tabelle 4.8:** Übersicht der Schüttungsparameter.

	Einheit	Deckschicht	Inertkugeln
$\epsilon_{\text{por}}$	-	0.56	0.47
$\alpha_{\text{por}}^{-1}$	$\text{m}^{-2}$	284707	1199603
$C_{\text{por}}$	$\text{m}^{-1}$	264	968

Die Verweilzeit ist durch das größere Reaktorvolumen und die Schüttung höher als bei den Kampagnen aus den Abschnitten 4.8.1 und 4.8.2. Der Brenner ist der gleiche wie in der Kampagne aus Abschnitt 4.8.1. Die betrachteten Fälle sind:

- Gas-POX 60bar- $\text{O}_2/\text{C}= 0.63$ ,
- Gas-POX 60bar- $\text{O}_2/\text{C}= 0.67$ ,
- Gas-POX 60bar- $\text{O}_2/\text{C}= 0.71$  und
- Gas-POX 60bar- $\text{O}_2/\text{C}= 0.73$ .

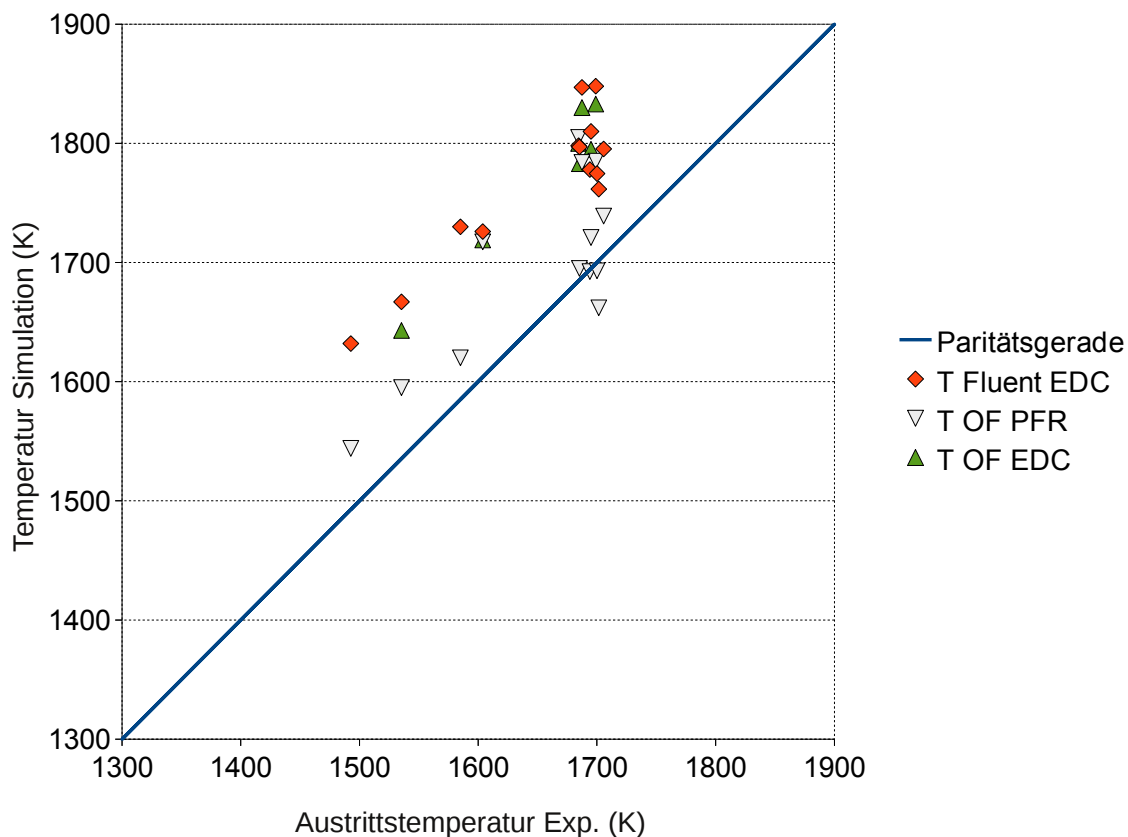
In den Tabellen 9-12 im Anhang 7.3 sind die Ergebnisse zusammengefasst und in Abbildung 4.29 sind die Fehler für die Spezies und der Temperatur gegen das  $\text{O}_2/\text{C}$ -Verhältnis aufgetragen. Die Ergebnisse unterscheiden sich von denen der vorherigen Abschnitte, in denen



**Abbildung 4.29:** Modellierungsfehler  $F_{\text{Spezies,abs}}$  (links) und  $F_{T,abs}$  (rechts) bei verschiedenen  $\text{O}_2/\text{C}$ -Verhältnissen

die Fälle ohne Schüttung betrachtet wurden. Am auffälligsten ist, dass der Speziesfehler des

PFR-Modells für kleine  $O_2/C$ -Verhältnisse höher ist als der Fehler der EDC-Simulationen. Die Temperatur wird weiterhin durch das EDC-Modell konstant überschätzt, was jedoch auch für die Gleichgewichtsberechnungen der Eintrittszusammensetzung insbesondere bei hohem  $O_2/C$ -Verhältnis gilt. Zwar ist der Temperaturfehler für den PFR-Ansatz kleiner, doch für hohe  $O_2/C$ -Verhältnisses stimmen die Fehler bei beiden Modellen fast überein. Für kleine  $O_2/C$ -Verhältnisse ist zu erkennen, dass die Spezies  $H_2$  und  $CH_4$  durch die EDC-Simulationen deutlich besser wiedergegeben werden. Der Speziesfehler ist für den OpenFOAM-EDC-Löser nicht größer als 0.024, während er mit dem PFR-Modell bis zu 0.05 erreicht. Für die Fälle mit hohem  $O_2/C$ -Verhältnis (0.71, 0.73) entspricht die PFR-Zusammensetzung praktisch dem Gleichgewichtszustand. Offensichtlich wird in diesen Fällen die Reformierung durch das PFR-Modell „zu stark“ berechnet. Es wird ersichtlich,



**Abbildung 4.30:** Gemessene Austrittstemperatur gegen berechnete Temperaturen aus dem CFD-Modell.

dass für den Fall einer Schüttungsbeladung das PFR-Modell weniger geeignet ist als das EDC-Modell. Die Schüttung bewirkt eine zusätzliche Durchmischung und eine höhere Reaktorverweilzeit. Die größten Fehler werden vom PFR-Ansatz in der Tat bei besonders hohen Verweilzeiten (für  $O_2/C = 0.63$ ,  $O_2/C = 0.67$ ) berechnet. Somit sollte das EDC-Modell für die Simulation von Reaktionsräumen mit einer porösen Schüttung bzw. für Simulationen von Reaktoren mit sehr hoher Verweilzeit bevorzugt eingesetzt werden. In Abbildung 4.30 sind die berechneten und gemessenen Austrittstemperaturen für alle Kampagnen in Abhängigkeit der gemessenen Austrittstemperatur aufgetragen. Die Simulationen vom

PFR-Modell stimmen am besten mit den Messungen überein und die EDC-Ergebnisse liegen immer deutlich darüber.

#### 4.8.4 Instationäre Berechnungen

Zu den Gas-POX-Versuchen 95bar-O<sub>2</sub>/C=0.70 und 80bar-O<sub>2</sub>/C=0.70 aus Abschnitt 4.8.2 wurden Tracermessungen, wie in Zeißler [81] beschrieben, durchgeführt. Dazu wurden die Messsignale des radioaktiven Tracers analysiert, ausgewertet und Simulationen mit dem in Abschnitt 3.2.4 vorgestellten transienten OpenFOAM-Löser `tracerFoam` durchgeführt. Der Vorteil des neuen Löser besteht darin, dass mit Hilfe einer vorliegenden stationären Lösung (siehe Abschnitt 4.8.2) der zeitliche Verlauf einer skalaren Transportgröße (Tracer - Argon) in sehr kurzer Zeit berechnet werden kann. Während bei einer vollständigen Berechnung stets mehrere Tage oder Wochen benötigt werden, so erfolgt eine Berechnung von 40 s physikalischer Zeit mittels dieses Löser innerhalb von nur 30 min.

Zur Überprüfung der Simulationsergebnisse wurden Messdaten des synthetischen Isotops <sup>41</sup><sub>18</sub>Ar mit einer Halbwertszeit von 109 min, die in den beiden oben genannten Gas-POX-Versuchen ermittelt wurden, verwendet. Das Eingangssignal wurde etwa 2m vor dem Brennermund aufgenommen und interpoliert. Die Funktion wurde als zeitabhängige Randbedingung in der Simulation verwendet. Die Messdaten der Verweilzeitverteilung  $E(t)$  wurden an vier verschiedenen Ebenen des Reaktors aufgenommen:

**Tabelle 4.9:** Übersicht der Messebenen für die Verweilzeitmessungen.

Messebene	Position (L/L <sub>ges</sub> )
1	0.79
2	0.67
3	0.58
Austritt	0.04

Dabei entspricht die Positionsangabe dem Abstand vom Reaktorausritt bezogen auf die gesamte Reaktorlänge. Die Messwerte am Austritt waren zu stark verrauscht und somit nicht für den Vergleich verwendbar. Die Messdaten wurden wie in Zeißler [81] korrigiert und mit  $\int_0^\infty E(t)dt$  normiert. Die entdimensionalisierte Zeit ist

$$t_r = \frac{t}{\tau_{\text{Reaktor}}}, \quad (4.3)$$

wobei die theoretische Verweilzeit des Reaktors mit

$$\tau_{\text{Reaktor}} = \frac{V_{\text{Reaktor}}}{\dot{V}_{\text{Auslass}}} \quad (4.4)$$

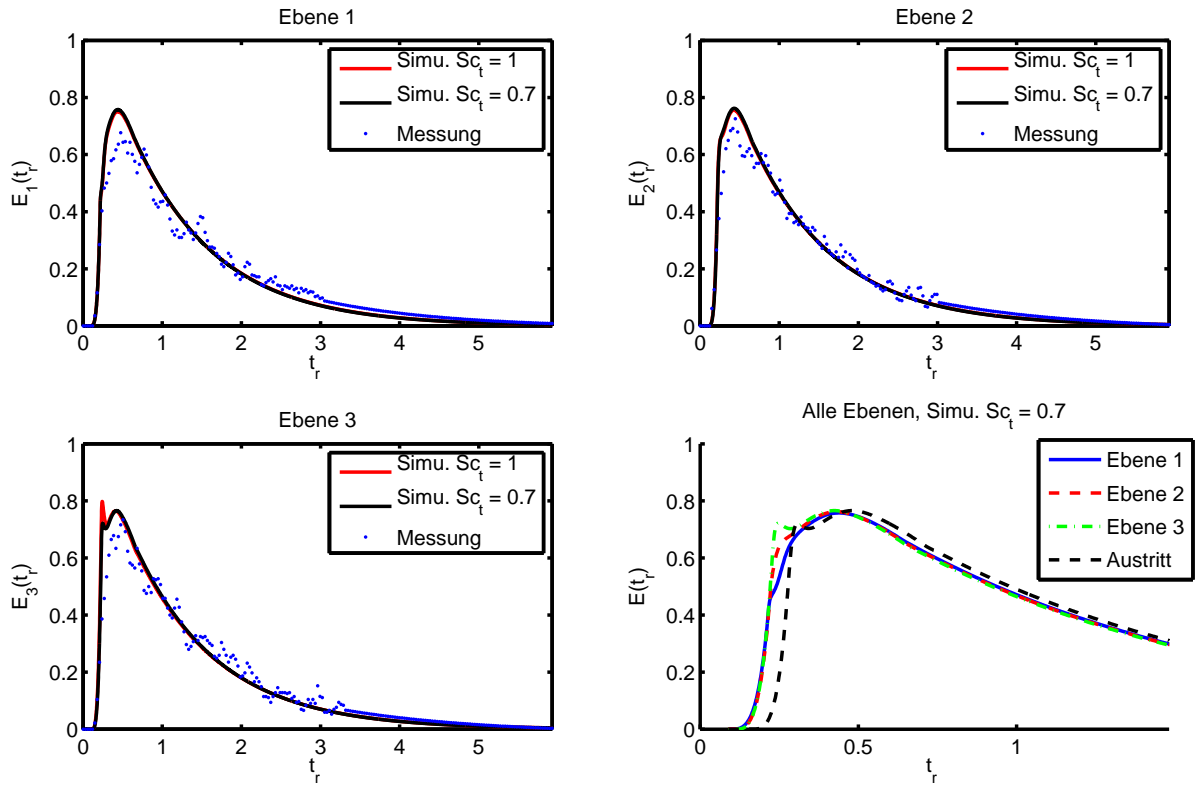
berechnet wird. Dabei ist  $V_{\text{Reaktor}}$  das Reaktorvolumen und  $\dot{V}_{\text{Auslass}}$  der Volumenstrom am Auslass. Die mittlere Verweilzeit des Reaktors wird berechnet mittels

$$t_m = \int_0^\infty t \cdot E(t) dt. \quad (4.5)$$

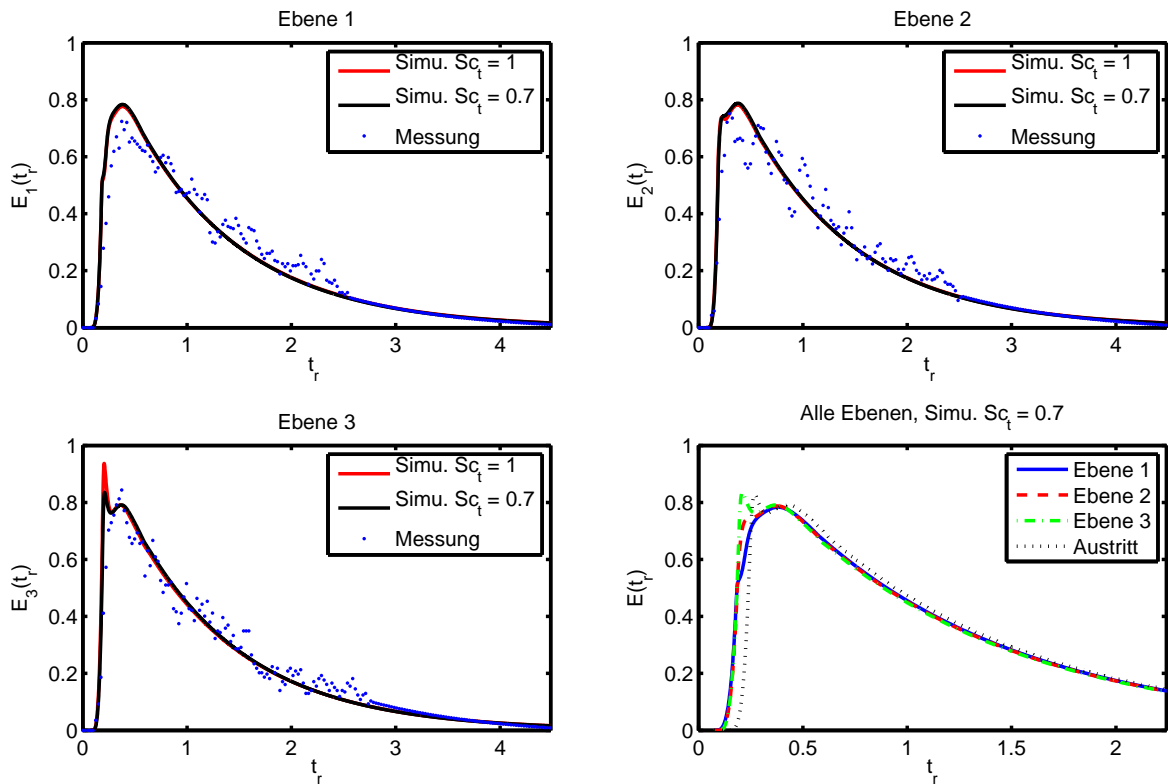
**Tabelle 4.10:** Entdimensionalisierte mittlere Verweilzeit  $t_m/\tau_{\text{Reaktor}}$  aus den Experimenten und den Simulationen mittels Gleichung (4.5)

Versuch	$t_m/\tau_{\text{Reaktor}}$ Ebene 1	$t_m/\tau_{\text{Reaktor}}$ Ebene 2	$t_m/\tau_{\text{Reaktor}}$ Ebene 3	$t_m/\tau_{\text{Reaktor}}$ Austritt
Gas-POX 80, Experiment	1.31	1.24	1.24	-
Gas-POX 80, $Sc_t=1$	1.11	1.11	1.09	1.14
Gas-POX 80, $Sc_t=0.7$	1.10	1.10	1.09	1.14
Gas-POX 95, Experiment	1.15	1.12	1.12	-
Gas-POX 95, $Sc_t=1$	1.07	1.07	1.05	1.10
Gas-POX 95, $Sc_t=0.7$	1.07	1.06	1.05	1.10

Die transienten Simulationen wurden mit zwei verschiedenen Werten für die turbulente Schmidt-Zahl ( $Sc_t = 0.7$ ,  $Sc_t = 1$ ) durchgeführt. Die Mess- und Simulationsergebnisse sind in den Abbildungen 4.31 (80bar- $O_2/C=0.70$ ) und 4.32 (95bar- $O_2/C=0.70$ ) miteinander verglichen. Die Übereinstimmung der Ergebnisse mit den Messdaten ist zufriedenstellend und besser als bei denen der detaillierten transienten Simulation mit Berücksichtigung aller Speziesgleichungen für den ATR-Fall aus Zeißler [81]. Doch auch hier wird die Verweilzeit durch die Simulationen leicht unterschätzt (etwa 10-15 %, siehe Tabelle 4.10). Eine mögliche Erklärung für diesen Fehler ist eine Signalverbreiterung des Aufgabeimpulses in der Zuleitung vor dem Brennermund, die nicht erfasst werden kann. Beim Vergleich der beiden Simulationen fällt auf, dass bei Ebene 3 und am Austritt bei  $t_r = 0.2$  eine Spitze zu beobachten ist, die im Fall  $Sc_t = 1$  noch stärker ausgeprägt ist. Dieses Verhalten lässt sich anhand der Messdaten nur schwer nachvollziehen, da die zeitliche Auflösung und Genauigkeit der Messdaten dazu nicht ausreicht. Die mittlere Verweilzeit in Tabelle 4.10 wird durch den Parameter nur unwesentlich beeinflusst, wobei die Änderung der mittleren Verweilzeit in den oberen Ebenen stärker ausfällt. Daraus lässt sich ableiten, dass die Speziesmischung durch die Größe  $Sc_t$  im Flammenbereich stark beeinflusst wird. Bisher wurde  $Sc_t$  nicht variiert und die Standardwerte der Codes wurden beibehalten. Eine Anpassung kann nur mit detaillierter Kenntnis der Temperatur- oder Speziesverteilung im Reaktor erfolgen. Diese können durch LES oder anhand einer optischen Messmethode gewonnen werden. Für den Testfall der HM1-Flamme in Kapitel 3 zeigte sich, dass der OpenFOAM-Löser mit dem Parameter  $Sc_t = 1$  gute Ergebnisse lieferte. Die Spitze lässt sich so erklären, dass eine kleinere Schmidt-Zahl eine höhere turbulente Durchmischung bewirkt und mehr Argon in die Rezirkulation gelangt. Oder anders ausgedrückt: der Anteil der Kurzschlussströmung geht durch eine bessere turbulente Mischung zurück. Die Ergebnisse bestätigen die Beobachtungen zur Flammenlänge und zum Strahlungsmodelleinfluss: eine Änderung in der Mischungszone wirkt sich nur schwach auf den Zustand im Bereich des Reaktoraustritts aus.



**Abbildung 4.31:** Vergleich der gemessenen und simulierten Tracerverteilung an verschiedenen Ebenen des Reaktors für den Fall 80bar- $O_2/C=0.70$ .



**Abbildung 4.32:** Vergleich der gemessenen und simulierten Tracerverteilung an verschiedenen Ebenen des Reaktors für den Fall 95bar- $O_2/C=0.70$ .

#### 4.8.5 Zusammenfassung zu den Simulationsergebnissen für verschiedene Kampagnen

Die korrekte modellmäßige Erfassung der komplexen Vorgänge in einem technischen Versuchsreaktors für Hochdruckpartialoxidation gestaltet sich schwierig, wie in den vorliegenden Ergebnissen aus dem Abschnitt 4.8 deutlich wird. In der Abbildung der extrem schnellen, durch Radikalreaktionen bestimmten oxidativen Prozesse in der Flamme einerseits und der relativ langsam ablaufenden Reformierungsreaktionen andererseits liegt die besondere Schwierigkeit. Für die Kampagnen ohne Schüttung konnte der Modellierungsfehler durch die Verwendung des PFR-Modells deutlich reduziert werden.

Für die Kampagne mit Schüttung und hoher Verweilzeit sind die Simulationsergebnisse mit dem veränderten Ansatz nicht besser als die des EDC-Modells. In den Rechenfällen mit kleinem  $O_2/C$ -Verhältnis wird der Methangehalt vom PFR-Modell unterschätzt und es ergibt sich ein höherer Speziesfehler. Für Bedingungen mit sehr hohen Verweilzeiten scheint aus Sicht des Autors das PFR-Modell nicht die beste Wahl zu sein, da das EDC-Modell bessere Ergebnisse liefert.

Die berechneten Verweilzeitverteilungen des neuen Löser tracersFoam zeigen eine gute Übereinstimmung mit den Messdaten. Das Werkzeug kann zur Bestimmung einer mittleren Verweilzeit aus einer stationären Lösung herangezogen werden.



## 5 Zusammenfassung

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurden Modelle für die Simulation der Hochdruck-partialoxidation von Erdgas in einer technischen Versuchsanlage entwickelt und verbessert. Es konnte gezeigt werden, dass das EDC-Verbrennungsmodell im Reformierungsbereich, wo kein freier Sauerstoff mehr vorhanden ist, die wesentlichen Reaktionen nur unzureichend abbildet. Eine zunächst vorgeschlagene zonenabhängige Anpassung des EDC-Modells wurde verworfen, da die Modellierungsergebnisse dadurch kaum verbessert werden konnten. Durch die Verwendung eines alternativen Plug-Flow-Reactor-Ansatzes (PFR) konnte der Modellierungsfehler deutlich reduziert werden.

Um diesen Ansatz zu realisieren, wurde ein stationärer Löser im quelloffenen CFD-Code OpenFOAM entwickelt. Dazu wurde ein bestehender OpenFOAM-Löser schrittweise erweitert und anhand einer Testflamme validiert. Für diesen Testfall waren die Simulationsergebnisse des Löser vergleichbar mit denen des Fluent-Löser und Ergebnissen aus der Literatur. Für die Bereitstellung der thermophysikalischen Daten und die Berechnung der chemischen Kinetik wurde eine Schnittstelle zur Bibliothek CANTERA entwickelt. Weiter wurde ein transienter OpenFOAM-Löser zur Berechnung des Verweilzeitverhaltens aus einer stationären Lösung vorgestellt.

Um die Laufzeit der OpenFOAM-Löser zu verkürzen, wurden verbesserte Compilereinstellungen gefunden und Tests zur Parallelisierung durchgeführt. Die Implementierung des ISAT-Algorithmus zur Reduktion der Berechnungszeit für die chemische Kinetik wurde durchgeführt und lieferte gute Ergebnisse hinsichtlich der Genauigkeit. Laufzeitverbesserungen bis zu einem Faktor 10 waren im Fall der Testflamme möglich. Für den Gas-POX-Fall sind jedoch mit der vorliegenden Version der ISAT-Bibliothek keine Verbesserungen der Laufzeit erreicht worden. Dazu sind Veränderungen in der Bibliothek notwendig.

Nach den Validierungsrechnungen an der Testflamme wurde der OpenFOAM-Löser auf einen Gas-POX-Testfall bei 30 bar angewendet. Es wurden zahlreiche Vergleichsrechnungen verschiedener Teilmodelle und Berechnungsansätze durchgeführt. Zunächst wurde der Einfluss des Rechengitters durch eine Gitterstudie überprüft. Es stellte sich heraus, dass das größte der vorgestellten Gitter weiter verwendet werden konnte. Darauf folgte eine Untersuchung des Strahlungsmodelleinflusses mit dem Ergebnis, dass beim Einsatz des P1-Modells eine deutlich heißere und längere Flammenzone als beim Rosseland-Modell beobachtet wurde. Der Einfluss auf den Bereich weiter stromabwärts der Flammenzone war jedoch gering.

Weiterhin wurde erstmals eine Detached-Eddy-Simulation des HP-POX-Reaktors auf einem Gitter mit 0.7 Millionen Zellen durchgeführt. Wie sich jedoch herausstellte, konnte mit dem vorliegenden Gitter die Turbulenz nicht ausreichend genau erfasst werden. Um einen hinreichend großen Anteil der turbulenten kinetischen Energie aufzulösen, ist ein feineres Gitter nötig. In den Ergebnissen ist diese Problematik anhand einer deutlich überschätzten Flammenlänge erkennbar.

Die Berechnungsergebnisse des OpenFOAM-Lösers und des Fluent-Löser für den 30-bar-Testfall zeigten nur im Flammenbereich Unterschiede. Es wird vermutet, dass die Gründe hierfür unterschiedliche Implementierungen des Turbulenzmodells und die unterschiedlichen Standardwerte für die Größen  $Sc_t$  und  $Pr_t$  sind. Im Gasfreiraum außerhalb der Flammenzone und am Reaktoraustritt waren die Temperatur- und Speziesverteilungen für beide Löser vergleichbar. Eine zweifelsfreie Aussage zur tatsächlichen Flammenlänge kann nur mit Hilfe von Messergebnissen aus dem Reaktorinnenraum getroffen werden. Anhand dieser können in zukünftigen Arbeiten die Turbulenzparameter eingestellt werden. Denkbar ist auch, die Parameter anhand genauer Ergebnisse einer hochauflösenden LES oder DES zu kalibrieren.

Die Verwendung des PFR-Ansatzes anstelle des EDC-Modells (oder des EDC-PFR-Zonenansatzes) verbesserte die Modellierungsergebnisse für den Testfall. Das PFR-Modell zeigte minimale Unterschiede zum EDC-Modell in der Flammenzone, bildete aber die Reformierung deutlich besser ab. Somit wurde das PFR-Modell als Verbesserung vorgeschlagen.

Zum Abschluss wurde der OpenFOAM-Löser auf zahlreiche Versuchspunkte unterschiedlicher Druckstufen angewendet und mit Fluent-Ergebnissen verglichen. Für die Fälle ohne Schüttung konnten mit dem OpenFOAM-Löser mit PFR-Ansatz deutlich kleinere Modellierungsfehler erreicht werden. Im Fall der Kampagne mit inerter Schüttung wurde dies nicht erreicht und das EDC-Modell zeigte kleinere Modellierungsfehler.

Schließlich brachte der Vergleich der Ergebnisse des transienten Lösers mit experimentellen Daten aus einer radioaktiven Tracermessung zufriedenstellende Ergebnisse. Die Berechnungszeit konnte durch Einsatz dieses Lösers stark verkürzt werden.

# Anhang

# Beispielprogramme

Die folgenden Beispielprogramme und Programmteile wurden in MATLAB und C++ mit Hilfe von CANTERA-Routinen programmiert.

## 1 Molekularer Transport (MATLAB)

Beschreibung in Abschnitt 2.2.1 auf Seite 11.

```
function transport
clear all
gas = IdealGasMix('grimech30_113tran.xml');
T0   = 1000;           % temp. in [K]
p    = 1e5;           % pressure in [Pa]
yH2 = linspace(0,1,1000); % yi in [kg/kg]
yAr = linspace(1,0,1000);
y = zeros(nSpecies(gas),1);
for i=1:length(yH2)
    y(speciesIndex(gas,'H2')) = yH2(i); y(speciesIndex(gas,'AR')) = yAr(i);
    set(gas, 'T', T0, 'P', p, 'Y', y);
    visc(i) = viscosity(gas);
    lambda(i) = thermalConductivity(gas);
    dmix2(:,i) = mixDiffCoeffs(gas);
end
semilogy(yH2,visc,'LineWidth',2); hold on;
plot(yH2,lambda,'r', 'LineWidth',2);
plot(yH2,dmix2(2,:), 'k', 'LineWidth',2);
plot(yH2,dmix2(27,:), 'g', 'LineWidth',2);
xlabel('Massenbruch H_2 [kg/kg]');
legend('Viskositaet \mu in [kg/m-s]', 'Waermeleitfaehigkeit \lambda in [W/m-K]', ...
'Diffusionskoeff. D_{H2} in [m^2/s]', 'Diffusionskoeff. D_{Ar} in [m^2/s]', ...
'Location', 'NorthEast')
```

## 2 Gibbs-Energie (MATLAB)

Beschreibung in Abschnitt 2.2.3 auf Seite 21.

```
function gibbs
clear all
gas = IdealGasMix('grimech30_113tran.xml');
T0    = 1000;                % temp. in [K]
p     = 1e5;                 % pressure in [Pa]
composition = 'H2:0.2,O2:0.2, H2O:0.6'; %yi in [kg/kg]
set(gas, 'T', T0, 'P', p, 'Y', composition);
y0 = massFractions(gas); h0 = enthalpy_mass(gas);
options = odeset('RelTol',1.e-13,'AbsTol',1.e-14,'Stats','off');
[t,ydummy] = ode15s(@reaction,[0, 1],y0,options,gas,p,h0);
for i=1:length(t)
    set(gas, 'H', h0, 'P', p, 'Y', ydummy(i,:));
    gibbsmass(i) = gibbs_mass(gas);
end
equilibrate(gas,'HP'); gibbsmassEq = gibbs_mass(gas);
semilogx(t,gibbsmass,'LineWidth',4); hold on;
plot(0.5,gibbsmassEq,'rx','LineWidth',4,'MarkerSize',15)
ylabel('Gibbs-Energie in [J]'); xlabel('Zeit in [s]');
legend('Zeitverlauf','Gleichgewicht','Location','SouthWest')

function dydt = reaction(t,y,gas,p,h)
%Function to calculate the reaction rate
set(gas, 'H', h, 'P', p, 'Y', y);
dydt = ydot(gas);
```

## 3 Reaktionsgeschwindigkeit (MATLAB)

Beschreibung in Abschnitt 2.2.3 auf Seite 25.

```
function omegadot
clear all
gas = IdealGasMix('grimech30_113tran.xml');
p     = 1e5;
T = linspace(500,2500,1000);
composition = 'H2:0.2,O2:0.2, H2O:0.6';
for i=1:length(T)
    set(gas, 'T', T(i), 'P', p, 'Y', composition);
    omega(:,i) = netProdRates(gas);
end
subplot(2,1,1)
semilogy(T,omega(1,:), 'LineWidth',2); hold on;
plot(T,omega(6,:), 'r', 'LineWidth',2);
xlabel('Temperatur [K]');
ylabel('ln(\omega) [kmol/m^3-s]');
```

```

legend('H_2','H_20','Location','NorthEast')
subplot(2,1,2)
semilogy(1./T,omega(1,:), 'LineWidth',2); hold on;
plot(1./T,omega(6,:), 'r', 'LineWidth',2);
xlabel('1/Temperatur [1/K]');
ylabel('ln(\omega) [kmol/m^3-s]');

```

## 4 EDC-Modell (MATLAB)

Beschreibung in Abschnitt 2.5.4 auf Seite 41.

```

function edc
T0      = 1000;           % Temperatur in [K]
p       = 1e5;           % Druck in [Pa]
composition = 'O2:0.6,H2:0.4'; % Massenbruch in [kg/kg]
gas = IdealGasMix('grimech30_113tran.xml');
set(gas,'T',T0,'P',p,'Y',composition);
y0      = massFractions(gas);
h0      = enthalpy_mass(gas); % Enthalpie in [J/kg]
rho0    = density(gas);
M       = molarMasses(gas);
MO      = meanMolarMass(gas);
nu = viscosity(gas); % Dyn. Viscosiaet
k = 5; eps = 200; % Turbulente Groessen
Cgamma=2.1377; Ctau = 0.4082; % EDC Modellkonstanten
gamma   = Cgamma * ((nu*eps)/(k*k))^(0.25)
tauStar = Ctau * (nu/eps)^(0.5)
gamma3   = gamma^3
t0=0; tout=t0; dt = 0.001; % Erstes Intervall fuer EDC-Reaktor
ytmp=y0; Ttmp=T0; % Testvariablen
ysave=y0'; tsave=t0; % Speichervariablen fuer Plots

while (1)
    diffy=0; diffT=0;
    t=tout; tout = tout+dt;
    dt =2*dt; % Intervall vergroessern
    tel = [t tout];
    opt = odeset('RelTol',1.e-8,'AbsTol',1.e-9,'Stats','off');
    [t,ytmp]=ode15s(@chp,tel,ytmp,opt,gas,p,tauStar,y0,h0,gamma3);
    tsave = [tsave;t]; ysave = [ysave; ytmp];
    ystar = ytmp(end,:);
    set(gas, 'H', h0, 'P', p, 'Y', ystar);
    Tstar = temperature(gas);
    diffT = abs(Tstar-Ttmp); diffy=sum(abs(ystar-ytmp));
    if ( (diffy+diffT/1000)<1e-5) % Test, ob stationaerer Zustand erreicht
        break;
    end
end

```



## 5 EDC-Modell mit Idealreaktoren (MATLAB)

Beschreibung in Abschnitt 3.2.2 auf Seite 57.

```
function edc_idealreaktoren
T0      = 1000;           % Temperatur in [K]
p       = 1e5;           % Druck in [Pa]
composition = 'O2:0.6,H2:0.4'; % Massenbruch in [kg/kg]
gas = IdealGasMix('grimech30_113tran.xml');
set(gas,'T',T0,'P',p,'Y',composition);
y0      = massFractions(gas);
h0      = enthalpy_mass(gas); % Enthalpie in [J/kg]
nu = viscosity(gas);      % Dyn. Viscosiaet
k = 5; eps = 200;        % Turbulente Groessen
Cgamma=2.1377; Ctau = 0.4082; % EDC Modellkonstanten
gamma   = Cgamma * ((nu*eps)/(k*k))^(0.25)
tauStar = Ctau * (nu/eps)^(0.5)
gamma3   = gamma^3

%% Cantera Idealreaktorverschaltung

mdot = 1/((1-gamma3)*tauStar);
%Fines-Scales-Reaktor
set(gas,'T',T0,'P',p,'Y',y0);
fs = Reactor(gas);
setInitialVolume(fs, 1/density(gas));
%Installation einer Wand, um einen isobaren Reaktor zu erhalten -
%in C++ gibt es eine eigene Klasse ConstPressureReactor.
gas0 = IdealGasMix('grimech30_113tran.xml');
set(gas0,'T',T0,'P',p,'Y',y0);
w = Wall; setArea(w, 1/density(gas)); setExpansionRateCoeff(w, 1e4);
sf = Reservoir(gas0); install(w,fs,sf);

%MFCs von und zu dem Fine-Scales-Reaktor
mfcin = MassFlowController; mfcout = MassFlowController;
install(mfcin, sf, fs); install(mfcout, fs, sf);
setMassFlowRate(mfcin, mdot); setMassFlowRate(mfcout, mdot);
network = ReactorNet({fs});

ytmp=0*y0'; Ttmp=0*T0;           % Testvariablen
dt = 0.001; tout = dt; i=0;
while (1)
    i = i+1;
    %step(network,20);           % Naechster Schritt, maximal 20 s Zeit
    advance(network, tout);     % Erst am Ende verlassen
    dt =2*dt; tout =tout + dt;
    ysave(i,:)= massFractions(fs);
    Tsave(i) = temperature(fs);
    tsave(i) = time(fs);
end
```



```

diffT = abs(Tsave(end)-Ttmp); diffy=sum(abs(ysave(end,:)-ytmp));
if ( (diffy+diffT/1000)<1e-5) % Test, ob stationaerer Zustand erreicht
    break;
end
ytmp =ysave(end,:); Ttmp =Tsave(end);
end
ystar = ysave(end,:)' ; Tstar = Tsave(end);
ymean = y0*(1-gamma^3)+ystar*gamma^3;
set(gas,'H',h0,'P',p,'Y',ymean);
rhomean = density(gas);
Tmean = temperature(gas);
RR=rhomean*(ystar-y0)/tauStar; % Mittlerer Quellterm fuer den
                                % CFD-Code in [kg/m3_s]

%% Plots
subplot(2,1,1)
plot(tsave,ysave(:,speciesIndex(gas,'H2')), 'b','LineWidth',2); hold on;
plot(tsave,ysave(:,speciesIndex(gas,'O2')), 'r--','LineWidth',2);
plot(tsave,ysave(:,speciesIndex(gas,'H2O')), 'k-.','LineWidth',2);
xlabel('Zeit [s]');
ylabel('Massenbruch [kg/kg]');
legend('H_2','O_2','H_2O','Location','NorthEast')
subplot(2,1,2)
plot(tsave,Tsave,'LineWidth',2); hold on;
xlabel('Zeit [s]');
ylabel('Temperatur [K]');

```

## 6 EDC-Modell mit Idealreaktoren (C++)

Beschreibung in Abschnitt 3.2.2 auf Seite 57.

```

forall(rho_,cellI) {
    try {
        scalar tauStarI = tauStar[cellI];
        scalar gamma3I = gamma3[cellI];
        scalar mdot = 1.0/((1.0-gamma3I)*tauStarI);
        const canteraThermo &gas=mix.cellMixture(cellI); //Gas in fs
        const canteraThermo &gas0=mix.cellMixture(cellI); //Inertes G. in sf
        //Fine-Scales-Reaktor (fs)
        ConstPressureReactor fs;
        fs.insert(gas.gas());
        fs.setInitialVolume(1 / gas.gas().density() );
        //Surrounding Fluid (sf)
        Reservoir sf;
        sf.insert(gas0.gas());
        //MFCs von und zu fs
        MassFlowController mfcin, mfcout;
    }
}

```

```

    mfcin.install(sf, fs);
    mfcout.install(fs, sf);
    mfcin.setMassFlowRate(mdot);
    mfcout.setMassFlowRate(mdot);
    ReactorNet network;
    network.addReactor(&fs);
    setNumerics(network);
//Anfangszustand
    T0 = fs.temperature();
    p0 = fs.pressure();
    h0 = fs.enthalpy_mass();
    gas.gas().getMassFractions(y0.begin());

    scalar tout = 0.001;
    scalar diffy, diffT, Ttmp = T0; ystar = y0;
//EDC-Schleife
    while(1) {
        diffy=0; diffT=0;
        network.advance(tout);
        gas.gas().getMassFractions(ymean.begin());
        for(scalar i=1;i<=Ns;i++){ diffy+=fabs(ystar[i-1] - ymean[i-1]); }
        diffT=fabs(Ttmp - fs.temperature() );
        //Prüfen, ob Lösung konvergiert ist
        if ((diffy+diffT/1000)<1e-5) break;
        Ttmp = fs.temperature();
        ystar = ymean; tout*=2;
    }
    gas.gas().getMassFractions(ystar.begin());
    for(label i=0; i<Ns; i++) {
        ymean[i] = y0[i]*(1-gamma3I) + ystar[i]*gamma3I; } //Zellmittelwerte
    gas.gas().setState_TPY(T0, p0, ymean.begin());
    gas.gas().setState_HP(h0, p0);
    scalar rhomean = gas.gas().density();
    for(label i=0; i<Ns; i++)
    { //RR sind Quellterme in kg/m^3_s
        RR_[i][cellI] = pow(gamma3I, 2.0/3.0)*rhomean *
            (ystar[i]-y0[i]) / (tauStarI*(1-gamma3I));
    }
}
}

```

# Tabellen und Grafiken

## 7 Simulations- und Messergebnisse für Gas-POX

### 7.1 Kampagne 30-60 bar

Beschreibung in Abschnitt 4.8.1 auf Seite 102.

**Tabelle 1:** Modellierungsfehler am Reaktoraustritt für den Fall 60bar-O<sub>2</sub>/C=0.70.

	OF PFR	OF EDC	Fluent	GG <sub>Exp</sub>	GG <sub>Einlass</sub>
$F_{H_2,abs}$	0.005	-0.022	-0.026	0.004	0.014
$F_{CH_4,abs}$	0.001	0.014	0.014	-0.004	-0.004
$F_{CO,abs}$	0.003	-0.005	-0.005	0.004	0.004
$F_{CO_2,abs}$	-0.004	-0.002	-0.003	-0.002	-0.003
$F_{H_2O,abs}$	-0.002	0.017	0.018	-0.001	-0.009
$F_{Spezies,abs}$	<b>0.014</b>	<b>0.061</b>	<b>0.065</b>	<b>0.016</b>	<b>0.034</b>
$F_{T,abs}$	<b>26</b>	<b>100</b>	<b>115</b>	<b>-7</b>	<b>-35</b>

**Tabelle 2:** Modellierungsfehler am Reaktoraustritt für den Fall 60bar-O<sub>2</sub>/C=0.72.

	OF PFR	OF EDC	Fluent	GG <sub>Exp</sub>	GG <sub>Einlass</sub>
$F_{H_2,abs}$	0.003	-0.014	-0.018	0.008	0.004
$F_{CH_4,abs}$	-0.004	0.004	0.004	-0.004	-0.004
$F_{CO,abs}$	0.006	0.002	0.001	0.003	0.006
$F_{CO_2,abs}$	-0.003	-0.002	-0.002	-0.001	-0.002
$F_{H_2O,abs}$	-0.001	0.012	0.012	-0.005	-0.002
$F_{Spezies,abs}$	<b>0.017</b>	<b>0.034</b>	<b>0.038</b>	<b>0.020</b>	<b>0.019</b>
$F_{T,abs}$	<b>86</b>	<b>134</b>	<b>149</b>	<b>-25</b>	<b>51</b>

**Tabelle 3:** Modellierungsfehler am Reaktorausritt für den Fall 30bar-O<sub>2</sub>/C=0.74.

	OF PFR	OF EDC	Fluent	GG <sub>Exp</sub>	GG <sub>Einlass</sub>
$F_{H_2,abs}$	0.011	-0.008	-0.014	0.005	0.013
$F_{CH_4,abs}$	-0.002	0.005	0.005	-0.003	-0.003
$F_{CO,abs}$	0.007	0.001	-0.001	0.003	0.007
$F_{CO_2,abs}$	-0.006	-0.004	-0.005	-0.001	-0.005
$F_{H_2O,abs}$	-0.004	0.010	0.011	-0.003	-0.006
$F_{Spezies,abs}$	<b>0.029</b>	<b>0.029</b>	<b>0.036</b>	<b>0.015</b>	<b>0.034</b>
$F_{T,abs}$	<b>97</b>	<b>142</b>	<b>159</b>	<b>-18</b>	<b>53</b>

## 7.2 Kampagne 80-100 bar

Beschreibung in Abschnitt 4.8.2 auf Seite 104.

**Tabelle 4:** Ergebnisse am Reaktorausritt für den Fall 100bar-O<sub>2</sub>/C=0.64.

	OF PFR	Fluent	GG <sub>Exp</sub>	GG <sub>Einlass</sub>
$F_{H_2,abs}$	0.009	-0.031	0.029	0.037
$F_{CH_4,abs}$	-0.002	0.018	-0.016	-0.017
$F_{CO,abs}$	0.004	-0.006	0.007	0.009
$F_{CO_2,abs}$	-0.003	-0.002	-0.001	-0.003
$F_{H_2O,abs}$	-0.006	0.019	-0.020	-0.025
$F_{Spezies,abs}$	<b>0.024</b>	<b>0.076</b>	<b>0.073</b>	<b>0.091</b>
$F_{T,abs}$	<b>35</b>	<b>145</b>	<b>-89</b>	<b>-74</b>

**Tabelle 5:** Ergebnisse am Reaktorausritt für den Fall 80bar-O<sub>2</sub>/C=0.68.

	OF PFR	Fluent	GG <sub>Exp</sub>	GG <sub>Einlass</sub>
$F_{H_2,abs}$	0.005	-0.030	-0.003	0.023
$F_{CH_4,abs}$	0.009	0.026	-0.003	-0.001
$F_{CO,abs}$	0.002	-0.006	0.009	0.006
$F_{CO_2,abs}$	-0.010	-0.009	-0.008	-0.010
$F_{H_2O,abs}$	-0.003	0.020	0.005	-0.016
$F_{Spezies,abs}$	<b>0.029</b>	<b>0.091</b>	<b>0.028</b>	<b>0.055</b>
$F_{T,abs}$	<b>-40</b>	<b>60</b>	<b>-21</b>	<b>-121</b>

**Tabelle 6:** Ergebnisse am Reaktorausstritt für den Fall 95bar-O<sub>2</sub>/C=0.70.

	OF PFR	Fluent	GG <sub>Exp</sub>	GG <sub>Einlass</sub>
$F_{H_2,abs}$	-0.011	-0.038	-0.016	-0.006
$F_{CH_4,abs}$	0.001	0.014	-0.002	-0.001
$F_{CO,abs}$	-0.007	-0.014	-0.004	-0.008
$F_{CO_2,abs}$	-0.006	-0.005	-0.005	-0.005
$F_{H_2O,abs}$	-0.006	0.011	-0.005	-0.010
$F_{Spezies,abs}$	<b>0.032</b>	<b>0.082</b>	<b>0.032</b>	<b>0.030</b>
$F_{T,abs}$	<b>-7</b>	<b>75</b>	<b>-15</b>	<b>-61</b>

**Tabelle 7:** Ergebnisse am Reaktorausstritt für den Fall 80bar-O<sub>2</sub>/C=0.70.

	OF PFR	Fluent	GG <sub>Exp</sub>	GG <sub>Einlass</sub>
$F_{H_2,abs}$	0.005	-0.025	-0.001	0.013
$F_{CH_4,abs}$	0.003	0.018	-0.002	-0.002
$F_{CO,abs}$	0.005	-0.002	0.006	0.006
$F_{CO_2,abs}$	-0.007	-0.006	-0.005	-0.007
$F_{H_2O,abs}$	-0.002	0.016	0.002	-0.008
$F_{Spezies,abs}$	<b>0.022</b>	<b>0.068</b>	<b>0.018</b>	<b>0.035</b>
$F_{T,abs}$	<b>-2</b>	<b>84</b>	<b>-16</b>	<b>-54</b>

**Tabelle 8:** Ergebnisse am Reaktorausstritt für den Fall 80bar-O<sub>2</sub>/C=0.72.

	OF PFR	Fluent	GG <sub>Exp</sub>	GG <sub>Einlass</sub>
$F_{H_2,abs}$	0.006	-0.015	-0.002	0.007
$F_{CH_4,abs}$	-0.001	0.010	-0.002	-0.002
$F_{CO,abs}$	0.007	0.003	0.006	0.007
$F_{CO_2,abs}$	-0.008	-0.008	-0.005	-0.007
$F_{H_2O,abs}$	-0.003	0.009	0.003	-0.004
$F_{Spezies,abs}$	<b>0.025</b>	<b>0.044</b>	<b>0.018</b>	<b>0.027</b>
$F_{T,abs}$	<b>33</b>	<b>90</b>	<b>-13</b>	<b>1</b>

### 7.3 Kampagne mit inerter Schüttung

Beschreibung in Abschnitt 4.8.3 auf Seite 105.

**Tabelle 9:** Ergebnisse am Reaktoraustritt für den Fall 60bar-OC=0.63.

	OF PFR	OF EDC	Fluent	GG <sub>Exp</sub>	GG <sub>Einlass</sub>
$F_{H_2,abs}$	0.017	-0.011	-0.016	0.038	0.041
$F_{CH_4,abs}$	-0.011	0.003	0.005	-0.018	-0.023
$F_{CO,abs}$	0.007	0.000	0.000	0.006	0.011
$F_{CO_2,abs}$	-0.004	-0.002	-0.003	0.002	-0.002
$F_{H_2O,abs}$	-0.009	0.011	0.014	-0.028	-0.027
$F_{Spezies,abs}$	<b>0.048</b>	<b>0.027</b>	<b>0.039</b>	<b>0.091</b>	<b>0.103</b>
$F_{T,abs}$	<b>51</b>	<b>113</b>	<b>139</b>	<b>-99</b>	<b>-44</b>

**Tabelle 10:** Ergebnisse am Reaktoraustritt für den Fall 60bar-OC=0.67.

	OF PFR	OF EDC	Fluent	GG <sub>Exp</sub>	GG <sub>Einlass</sub>
$F_{H_2,abs}$	0.012	-0.007	-0.014	0.020	0.017
$F_{CH_4,abs}$	-0.008	0.001	0.003	-0.009	-0.011
$F_{CO,abs}$	0.006	0.001	0.000	0.003	0.006
$F_{CO_2,abs}$	-0.003	-0.002	-0.003	0.001	-0.002
$F_{H_2O,abs}$	-0.006	0.009	0.012	-0.015	-0.009
$F_{Spezies,abs}$	<b>0.036</b>	<b>0.021</b>	<b>0.032</b>	<b>0.049</b>	<b>0.046</b>
$F_{T,abs}$	<b>60</b>	<b>108</b>	<b>131</b>	<b>-53</b>	<b>25</b>

**Tabelle 11:** Ergebnisse am Reaktoraustritt für den Fall 60bar-OC=0.71.

	OF PFR	OF EDC	Fluent	GG <sub>Exp</sub>	GG <sub>Einlass</sub>
$F_{H_2,abs}$	-0.002	-0.006	-0.007	0.004	-0.002
$F_{CH_4,abs}$	-0.002	-0.001	0.001	-0.002	-0.002
$F_{CO,abs}$	0.004	0.003	0.004	0.001	0.003
$F_{CO_2,abs}$	-0.004	-0.004	-0.004	0.000	-0.003
$F_{H_2O,abs}$	0.005	0.008	0.007	-0.003	0.005
$F_{Spezies,abs}$	<b>0.019</b>	<b>0.022</b>	<b>0.023</b>	<b>0.010</b>	<b>0.016</b>
$F_{T,abs}$	<b>114</b>	<b>115</b>	<b>122</b>	<b>-11</b>	<b>88</b>

**Tabelle 12:** Ergebnisse am Reaktoraustritt für den Fall 60bar-OC=0.73.

	OF PFR	OF EDC	Fluent	GG <sub>Exp</sub>	GG <sub>Einlass</sub>
$F_{\text{H}_2,\text{abs}}$	-0.008	-0.006	-0.007	0.001	-0.007
$F_{\text{CH}_4,\text{abs}}$	-0.001	-0.001	0.000	-0.001	-0.001
$F_{\text{CO},\text{abs}}$	0.004	0.004	0.003	0.001	0.002
$F_{\text{CO}_2,\text{abs}}$	-0.003	-0.003	-0.003	0.000	-0.003
$F_{\text{H}_2\text{O},\text{abs}}$	0.009	0.009	0.007	0.000	0.008
$F_{\text{Spezies},\text{abs}}$	<b>0.024</b>	<b>0.023</b>	<b>0.022</b>	<b>0.003</b>	<b>0.020</b>
$F_{T,\text{abs}}$	<b>120</b>	<b>115</b>	<b>113</b>	<b>-4</b>	<b>89</b>

## 8 Typische Erdgaszusammensetzung

Spezies	Menge
CH <sub>4</sub>	mol/mol 0.9814
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	mol/mol 0.0081
C <sub>2</sub> H <sub>8</sub>	mol/mol 0.0022
N <sub>2</sub>	mol/mol 0.0075
CO <sub>2</sub>	mol/mol 0.0001

## Literaturverzeichnis

- [1] ANSYS, CFX: 11.0 Reference Guide. In: *ANSYS Inc* (2006)
- [2] BIRD, R.B.: *Transport phenomena*. John Wiley & Sons, 2002
- [3] BRINK, A. ; MUELLER, C. ; KILPINEN, P. ; HUPA, M.: Possibilities and limitations of the eddy break-up model. In: *Combustion and flame* 123 (2000), Nr. 1-2, S. 275–279
- [4] BRÜGGEMANN, P. ; SEIFERT, P. ; MEYER, B. ; MÜLLER-HAGEDORN, M.: Influence of Temperature and Pressure on the Non-Catalytic Partial Oxidation of Hydrocarbons. In: *Chemical Product and Process Modeling* (2009)
- [5] BURKE, SP ; SCHUMANN, TEW: Diffusion flames. In: *Industrial & Engineering Chemistry* 20 (1928), Nr. 10, S. 998–1004
- [6] CAREY, W.J.: *New developments in combustion research*. Nova Publishers, 2006
- [7] CELIK, IB ; CEHRELI, ZN ; YAVUZ, I.: Index of resolution quality for large eddy simulations. In: *Journal of Fluids Engineering* 127 (2005), S. 949
- [8] CHAKRABORTY, D. ; PAUL, P. J. ; MUKUNDA, H. S.: Evaluation of Combustion Models for High Speed H<sub>2</sub>/Air Confined Mixing Layer Using DNS Data. In: *Combustion and Flame* 121 (2000), S. 195–209
- [9] CHASE, MW ; TABLES, N.J.T.: Data reported in NIST Standard Reference Database 69, June 2005 Release: NIST Chemistry WebBook. In: *J. Phys. Chem. Ref. Data, Monograph* 9 (1998), S. 1–1951
- [10] DALLY, BB ; MASRI, AR ; BARLOW, RS ; FIECHTNER, GJ: Instantaneous and Mean Compositional Structure of Bluff-Body Stabilized Nonpremixed Flames. In: *Combustion and Flame* 114 (1998), Nr. 1-2, S. 119–148
- [11] DAVIDSON, L.: *An Introduction to Turbulence Models*. Version: 2003. <http://www.tfd.chalmers.se/lada>
- [12] ERFURTH, J. ; TOPOROV, D. ; FÖRSTER, M. ; KNEER, R.: Simulation der Strahlungswärmeübertragung in einem Oxycoal-Großdampferzeuger. In: *VDI Flammentag 2009*, 2009
- [13] ERTESVÅG, I. S.: *Schriftliche Korrespondenz*. 2008
- [14] ERTESVÅG, I. S. ; MAGNUSSEN, Bjorn F.: The Eddy Dissipation Turbulence Energy Cascade Model. In: *Combust. Sci. and Tech.* 159 (2000), S. 213–235
- [15] FERZIGER, Joel H. ; PERIC, Milovan: *Computational Methods for Fluid Dynamics*. Springer, 2002



- 
- [16] FLUENT: *The FLUENT® 6.3 User's Guide*, 2006
- [17] FRÖHLICH, J. ; TERZI, D. von: Hybrid LES/RANS methods for the simulation of turbulent flows. In: *Progress in Aerospace Sciences* 44 (2008), Nr. 5, S. 349–377
- [18] GGFR: *Global Gas Flaring Reduction Public-Private Partnership (GGFR)*. <http://go.worldbank.org/016TLXI7N0>. Version: 2009
- [19] GOODWIN, DG: An open-source, extensible software suite for CVD process simulation. In: *Chemical Vapor Deposition XVI and EUROCVI 14* (2003), 2003–08. [http://cantera-users.googlegroups.com/web/cantera\\_ecs2003.pdf](http://cantera-users.googlegroups.com/web/cantera_ecs2003.pdf)
- [20] GOODWIN, D.G.: Defining Phases and Interfaces / California Institute of Technology. Version: 2003. <http://cantera-users.googlegroups.com/web/cantera-definingphases.pdf>. 2003. – Forschungsbericht
- [21] GRAN, I. R. ; MAGNUSSEN, B. F.: A Numerical Study of a Bluff-Body Stabilized Diffusion Flame. Part 2. Influence of Combustion Modeling and Finite-Rate Chemistry. In: *Combust. Sci. and Tech.* 119 (1996), S. 191–217
- [22] GROTE, Stephan: *Numerik gewöhnlicher Differentialgleichungen zur Simulation von Verbrennungsvorgängen*, TU Bergakademie Freiberg, Diplomarbeit, 2009
- [23] GSCHAIDER, B. ; REHM, M. ; SEIFERT, P. ; MEYER, B.: Implementation of an Alternative Chemistry Library into OpenFOAM®, 2008. – Open Source CFD International Conference 2008, Berlin
- [24] HEINZEL, A.: *Reduktion von detaillierten Reaktionsmechanismen am Beispiel der Gasphasenreaktionen bei der autothermen Erdgasspaltung*, TU Bergakademie Freiberg, Diss., 2006
- [25] HERWIG, H.: *Strömungsmechanik A-Z*. Vieweg & Sohn Verlag, Wiesbaden, 2004
- [26] HIGMAN, C. ; BURGT, M. Van d.: *Gasification*. Gulf Professional Publishing, 2008
- [27] HINDMARSH, A.C. ; BROWN, P.N. ; GRANT, K.E. ; LEE, S.L. ; SERBAN, R. ; SHUMAKER, D.E. ; WOODWARD, C.S.: SUNDIALS: Suite of nonlinear and differential/algebraic equation solvers. In: *ACM Transactions on Mathematical Software (TOMS)* 31 (2005), Nr. 3, S. 396
- [28] JANICKA, J. ; KOLBE, W. ; KOLLMANN, W.: Closure of the transport equation for the probability density function of turbulent scalar fields. In: *Journal of Non-Equilibrium Thermodynamics* 4 (1979), Nr. 1, S. 47–66
- [29] JIANG, L.Y. ; CAMPBELL, I.: Prandtl/Schmidt number effect on temperature distribution in a generic combustor. In: *International Journal of Thermal Sciences* 48 (2009), Nr. 2, S. 322–330
- [30] JONES, WP ; LAUNDER, BE: The prediction of laminarization with a two-equation model of turbulence. In: *Int. J. Heat Mass Transfer* 15 (1972), Nr. 2, S. 301–314

- [31] KEE, R.J. ; COLTRIN, M.E. ; GLARBORG, P.: *Chemically reacting flow: theory and practice*. Wiley-Interscience, 2005
- [32] KEE, R.J. ; RUPLEY, F.M. ; MEEKS, E. ; MILLER, J.A.: CHEMKIN-III: A FORTRAN chemical kinetics package for the analysis of gas-phase chemical and plasma kinetics. In: *Sandia National Laboratories Report SAND96-8216* (1996)
- [33] KEMPF, A. ; LINDSTEDT, RP ; JANICKA, J.: Large-eddy simulation of a bluff-body stabilized nonpremixed flame. In: *Combustion and Flame* 144 (2006), Nr. 1-2, S. 170–189
- [34] KJÄLDMAN, L. ; BRINK, A. ; HUPA, M.: Micro Mixing Time in the Eddy Dissipation Concept. In: *Combustion Science and Technology* 154 (2000), S. 207–227
- [35] KLEIVELAND, R.N.: *Modelling of Soot Formation and Oxidation in Turbulent Diffusion Flames*, Norwegian University of Science and Technology, Faculty of Engineering Science and Technology, Diss., 2005
- [36] KONNOV, AA ; ZHU, J. ; BROMLY, J. ; ZHANG, DK: Non-Catalytic Partial Oxidation of Methane over a Wide Temperature Range. In: *Proceedings of the European combustion meeting 2003, Orléans, France* (2003)
- [37] LAUNDER, B. E. ; SPALDING, D. B.: The numerical computation of turbulent flows. In: *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.* August (1990), S. 269–289. – ISSN 0045–7825
- [38] LIU, BJD ; POPE, SB: The performance of in situ adaptive tabulation in computations of turbulent flames. In: *Combustion Theory and Modelling* 9 (2005), Nr. 4, S. 549–568
- [39] LIU, K. ; POPE, S.B. ; CAUGHEY, D.A.: Calculations of bluff-body stabilized flames using a joint probability density function model with detailed chemistry. In: *Combustion and Flame* 141 (2005), Nr. 1-2, S. 89–117
- [40] LU, L. ; LANTZ, S.R. ; REN, Z. ; POPE, S.B.: Computationally efficient implementation of combustion chemistry in parallel PDF calculations. In: *Journal of Computational Physics* (2009)
- [41] LU, L. ; POPE, S.B.: A systematic investigation of in situ adaptive tabulation for combustion chemistry / Cornell University. Version: 2007. [http://eccentric.mae.cornell.edu/~tcg/pubs/Lu\\_LRP\\_FDA\\_07.pdf](http://eccentric.mae.cornell.edu/~tcg/pubs/Lu_LRP_FDA_07.pdf). 2007. – Forschungsbericht
- [42] LUCCHINI, Tommaso: *Persönliches Gespräch*. 2007
- [43] MAAS, U. ; POPE, SB: Implementation of simplified chemical kinetics based on intrinsic low-dimensional manifolds. In: *Twenty-Fourth Symposium (International) on Combustion*, 1992, S. 103–112
- [44] MAGEL, H.C. ; SCHNELL, U. ; HEIN, K.R.G.: Simulation of Chemistry in a Turbulent Combustor Flow. In: *Twenty-Sixth Symposium (International) on Combustion/The Combustion Institute* 26 (1996), S. 67–74

- 
- [45] MAGNUSSEN, B. F. ; HJERTAGER, B. H.: On mathematical models of turbulent combustion with special emphasis on soot formation and combustion. In: *16th Symp. (Int'l.) on Combustion. The Combustion Institute*, 1976
- [46] MAGNUSSEN, B.F.: The Eddy Dissipation Concept—A Bridge Between Science and Technology. In: *ECCOMAS Thematic Conference on Computational Combustion*, 2005
- [47] MATLAB: *MATLAB: The MATrix LABoratory Toolbox*. <http://www.mathworks.de>. Version: 2007
- [48] MATTHEUS, Willy: *Vergleich des Lösungsverhaltens zweier CFD-Codes für den Fall der Modellierung von Vergasungsreaktionen unter Verwendung detaillierter Reaktionsmechanismen*, TU Bergakademie Freiberg, Diplomarbeit, 2007
- [49] MENTER, FR ; KUNTZ, M. ; LANGTRY, R.: Ten years of industrial experience with the SST turbulence model. In: *Turbulence, heat and mass transfer 4* (2003), S. 2003
- [50] MOSS, J. B.: Simultaneous measurements of concentration and velocity in an open premixed turbulent flame. In: *Combustion Science and Technology* 22 (1980), Nr. 3-4, S. 119–129
- [51] NOTO, T. ; BABUSHOK, V. ; BURGESS, DR ; HAMINS, A. ; TSANG, W. ; MIZIOLEK, A.: Effect of Halogenated Flame Inhibitors on C1-C2 Organic Flames. In: *Symposium International on Combustion* Bd. 1 Combustion Institute, 1996, S. 1377–1384
- [52] ODEDRA, A. ; MALALASEKERA, W.: Eulerian particle flamelet modeling of a bluff-body CH<sub>4</sub>/H<sub>2</sub> flame. In: *Combustion and Flame* 151 (2007), Nr. 3, S. 512–531
- [53] OPENFOAM: *OpenFOAM® Programmers Guide*. OpenCFD Limited, 2008. <http://foam.sourceforge.net/doc/Guides-a4/ProgrammersGuide.pdf>
- [54] OPENFOAM: *OpenFOAM® Users Guide*. OpenCFD Limited, 2008. <http://www.opencfd.co.uk/openfoam/doc/user.html>
- [55] OPENFOAM: *OpenFOAM® Extensions*. <http://sourceforge.net/projects/openfoam-extend/>. Version: 2009
- [56] OPENFOAM: *OpenFOAM®: The Open Source CFD Toolbox*. <http://www.opencfd.co.uk>. Version: 2009
- [57] OPENMPI: *Open source high performance computing*. <http://www.open-mpi.org>. Version: 2009
- [58] POINSOT, T. ; VEYNANTE, D.: *Theoretical and Numerical Combustion*. RT Edwards, Inc., 2005
- [59] POPE, S. B.: An explanation of the turbulent round-jet plane-jet anomaly. In: *AIAA Journal* 16 (1978), Nr. 3, S. 279–281
- [60] POPE, S. B.: Computationally efficient implementation of combustion chemistry using in-situ adaptive tabulation. In: *Combustion Theory and Modeling* 1 (1997), S. 41–63

- [61] POPE, S.B.: Turbulent flows. (2000)
- [62] POPE, S.B.: Ten questions concerning the large-eddy simulation of turbulent flows. In: *New Journal of Physics* 6 (2004), Nr. 35, S. 1–24
- [63] REHM, M.: *Untersuchung des Einflusses des Turbulenzmodells auf die POX-Modellierung in FLUENT*. 2006. – Internal Paper
- [64] REHM, M. ; SEIFERT, P. ; MEYER, B.: Towards a CFD Model for Industrial Scale Gasification Processes, 2008. – OpenFOAM®Workshop 2008, Milan
- [65] REHM, M. ; SEIFERT, P. ; MEYER, B.: Theoretical and numerical investigation on the EDC-model for turbulence-chemistry interaction at gasification conditions. In: *Computers and Chemical Engineering* 33 (2009), Nr. 2, S. 402 – 407. – ISSN 0098–1354
- [66] REHM, M. ; SEIFERT, P. ; MEYER, B. ; ULBER, D.: Numerische Modellierung von Partialoxidationsprozessen, 2009. – VDI Flammentag 2009, Bochum
- [67] REN, Z. ; POPE, S.B.: Second-order splitting schemes for a class of reactive systems. In: *Journal of Computational Physics* (2008)
- [68] SAAD, Yousef: *Iterative Methods for Sparse Linear Systems, Second Edition*. Society for Industrial and Applied Mathematics, 2003. – ISBN 0898715342
- [69] SHIH, T.-H. ; LIOU, W. W. ; SHABBIR, A.: A New k-epsilon Eddy-Viscosity Model for High Reynolds Number Turbulent Flows - Model Development and Validation. In: *Computers Fluids* 24 (1995), Nr. 3, S. 227–238
- [70] SMITH, Gregory P. ; GOLDEN, David M. ; FRENKLACH, Michael ; MORIARTY, Nigel W. ; EITENEER, Boris ; GOLDENBERG, Mikhail: *GRI-Mech 3.0*. [http://www.me.berkeley.edu/gri\\_mech](http://www.me.berkeley.edu/gri_mech). Version: 1999
- [71] SMITH, TF ; SHEN, ZF ; FRIEDMAN, JN: Evaluation of coefficients for the weighted sum of gray gases model. In: *J. Heat Transfer* 104 (1982), Nr. 4, S. 602–608
- [72] SPALART, PR ; JOU, WH ; STRETLETS, M. ; ALLMARAS, SR: Comments on the feasibility of LES for 14 wings and on the hybrid RANS/LES approach. In: *Proceedings of the First AFOSR International 15 Conference on DNS/LES* Bd. 16, 1997
- [73] STRANG, G.: On the construction and comparison of difference schemes. In: *SIAM Journal on Numerical Analysis* (1968), S. 506–517
- [74] SUBRAMANIAM, S. ; POPE, SB: A mixing model for turbulent reactive flows based on Euclidean minimum spanning trees. In: *Combustion and Flame* 115 (1998), Nr. 4, S. 487–514
- [75] TNF6 ; KALT, Peter A. M. (Hrsg.) ; MASRI, Assaad R. (Hrsg.): *The Sixth International Workshop on Measurement and Computation of Turbulent Nonpremixed Flames (TNF6)*. <http://www.ca.sandia.gov/TNF/abstract.html>. Version: 2002

- 
- [76] TNF8 ; KEMPF, Andreas M. (Hrsg.): *The Eighth International Workshop on Measurement and Computation of Turbulent Nonpremixed Flames (TNF8)*. <http://www.ca.sandia.gov/TNF/abstract.html>. Version: 2006
- [77] UEBEL, Konrad: *Numerische Modellierung eines großtechnischen Vergasungsreaktors mit detaillierter Chemie*, TU Bergakademie Freiberg, Diplomarbeit, 2008
- [78] VTUNE: *Intel VTune Performance Analyser*. <http://software.intel.com/en-us/intel-vtune>. Version: 2009
- [79] WARNATZ, J. ; MAAS, U. ; DIBBLE, R.W.: *Verbrennung - Physikalisch-Chemische Grundlagen, Modellierung und Simulation, Experimente, Schadstoffentstehung*. 3. Springer, 2001
- [80] ZEHE, M.J. ; GORDON, S. ; MCBRIDE, B.J.: CAP: A Computer Code for Generating Tabular Thermodynamic Functions from NASA Lewis Coefficients. In: *National Aeronautics and Space Administration, Glenn Research Center, NASA/TP-2001-210959/REV1* (2001)
- [81] ZEISSLER, R.: *Modellierung der Gasphasenreaktion bei der autothermen katalytischen Erdgasspaltung unter hohen Drücken*, TU Bergakademie Freiberg, Dissertation, 2006
- [82] ZHU, J. ; ZHANG, D. ; KING, KD: Reforming of CH<sub>4</sub> by partial oxidation: thermodynamic and kinetic analyses. In: *Fuel* 80 (2001), Nr. 7, S. 899–905