

Zeitskalenanalyse chemischer Reaktionen

Uwe Prüfert¹, Franziska Hunger², Christian Hasse²,

¹Institut für Numerische Mathematik und Optimierung

²Institut für Energieverfahrenstechnik und
Chemieingenieurwesen

Die Zeitskalenanalyse chemischer Reaktionsgleichungen spielt eine wichtige Rolle bei der Entscheidung, ob bestimmte Modelle bei der Simulation von Brennern und Vergasungsanlagen gültig sind oder nicht. Insbesondere gilt das Flameletmodell nur im Falle von im Verhältnis zur transportierenden Strömung schnellen Chemie. Hier ist also eine möglichst genaue Kenntnis der Zeitskalen notwendig. Gängige Verfahren benutzen die Abschätzung der Eigenwerte der Jacobimatrix des chemischen Quellterms basierend auf deren Diagonalelementen oder direkt über die Berechnung der Eigenwerte. Die Schwierigkeit ist hierbei, dass das System in Richtung der Eigenvektoren zu Null-Eigenwerte, von denen es auf Grund von implizit eingehenden Erhaltungsgleichungen mindestens einen gibt, keinen Fortschritt zeigt, die zugehörigen Zeitskalen also unendlich sind. Es wurde eine Methode entwickelt, eine relevante Zeitskala zu identifizieren, die die tatsächliche Systementwicklung beschreibt. Darauf aufbauend wurde ein effizientes Verfahren konstruiert, das die relevante Zeitskala in Richtung des Systemfortschritts bestimmt. Dabei konnte auf die aufwändige Berechnung der Eigenwerte der Jacobimatrix verzichtet werden.

Förderung: Haushalt/Virtuhcon