

**Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule
Aachen**

Lehrstuhl für Technische Mechanik

Professor Dr. N. Peters

DIPLOMARBEIT

Thema:

**Entwicklung eines Programmpaketes zur
Berechnung eindimensionaler Flammen am
Beispiel einer Gegenstromdiffusionsflamme**

von

Heinz Pitsch

Betreuer:

Dipl.-Ing. Josef Göttgens

Aachen, im Januar 1993

Inhalt

1	Einleitung	1
2	Mathematische Beschreibung	3
2.1	Gegenstromdiffusionsflammen	3
2.2	Molekulare und Thermodynamische Transportkoeffizienten . .	8
2.3	Reaktionskinetik	11
3	Numerisches Verfahren	14
3.1	Newtonverfahren	16
3.1.1	Gedämpftes Newtonverfahren	17
3.1.2	Pseudozeititeration	19
3.1.3	Modifiziertes Newtonverfahren	20
3.1.4	Lösungsfortschrittsverfahren	20
3.2	Adaptive Gittergenerierung	21
4	Das Programm	25
4.1	Programmiersprachen	25
4.2	Das Vorlaufprogramm ScanMan	27
4.2.1	Deklarationen	27
4.2.2	Definitionen	27
4.2.3	Aufbau der Eingabedatei	28
4.2.4	Syntax der Eingabedaten	28
4.2.5	Allgemeines	31
4.2.6	Aufruf und Kommandozeilenoptionen	32
4.3	Das Programm FlameMaster	34
4.3.1	Syntax der Steuerdatendatei	35

4.3.2	Schlüsselsequenzen der Steuerdatendatei	35
4.3.3	Ausgabe	41
5	Ergebnisse	42
6	Zusammenfassung	50
A	Reaktionsmechanismus	52
B	Beispiel einer Eingabedatei für ScanMan	57
C	Beispiel einer Steuerdatendatei für FlameMaster	59
D	Konzentrationsprofile für Propanflammen	61
D.1	Variation der Streckungsrate	61
D.2	Variation des Druckes	77
E	Programmverzeichnis	93
	Programmverzeichnis	93
	Literaturverzeichnis	94

1 Einleitung

Die numerische Simulation technischer Verbrennungsvorgänge bereitet durch das Auftreten turbulenter Strömungen und komplexer chemischer Vorgänge große Schwierigkeiten. Man ist daher bemüht, Modelle zu konstruieren, die diesen hohen Bedarf an Rechenzeit und Speicherkapazität minimieren, und dennoch quantitative Aussagen über Konzentrationsverteilungen der beteiligten Spezies, Temperaturverteilung und Strömungsfeld zulassen. Man ist damit immer mehr in der Lage, Fragen von praktischer Bedeutung, wie beispielsweise nach Brennstoffausnutzung oder Schadstoffemissionen, zu beantworten.

Zur vereinfachten Handhabung des Strömungsfeldes wird hier das sogenannte Flameletmodell verwendet, das darauf basiert, daß die charakteristischen Reaktionszeiten, und damit die Reaktionszonendicke viel kleiner sind als die entsprechenden turbulenten Skalen. Man kann die turbulente Flamme demnach als ein Ensemble laminarer Flammen (Flamelets) darstellen. Für nicht vorgemischte Systeme haben diese Flamelets nach [1] eine der laminaren Gegenstromdiffusionsflamme sehr ähnliche skalare Struktur und können daher sehr gut durch diese approximiert werden. Dies erweist sich als besonders nützlich, da die Transportgleichungen der ebenen, laminaren Gegenstromdiffusionsflamme mit Hilfe einer Ähnlichkeitstransformation in ein System gewöhnlicher Differentialgleichungen überführt werden können und sich damit die Möglichkeit eröffnet, die Struktur turbulenter Flammen mit Hilfe eindimensionaler Gleichungen in einer Koordinate senkrecht zur Flammenfläche zu beschreiben.

Da die sich hieraus ergebenden Konzentrationsprofile nur von wenigen Parametern abhängen (z.B. Druck und lokale Streckungsrate), ergibt sich die Möglichkeit, diese Konzentrationsprofile in Flamelet-Libraries abzulegen. Zur automatischen Berechnung solcher Libraries über weite Parameterbereiche benötigt man Programme, die eindimensionale Konfigurationen sicher und schnell berechnen können.

Ziel dieser Arbeit ist die Entwicklung eines Programmpaketes zur Berechnung eindimensionaler Flammen unter Verwendung moderner Programmier techni-

ken und -sprachen am Beispiel der ebenen, laminaren Gegenstromdiffusionsflamme.

Dieses Programmpaket besteht aus einem Vorlaufprogramm zum Einlesen, Überprüfen und Aufbereiten eines Reaktionsmechanismus und aus einem Integrator, der zur Lösung des Gleichungssystems ein mit Pseudozeititerationsverfahren, Dämpfung und Lösungsfortschrittsverfahren ausgestattetes Newtonverfahren verwendet, und außerdem über adaptive Gittergenerierung verfügt.

Schließlich wird das Programm anhand der Berechnung einer Propanflamme für verschiedene Streckungsraten und verschiedene Drücke verifiziert.

2 Mathematische Beschreibung

2.1 Gegenstromdiffusionsflammen

Die hier betrachtete Konfiguration der Gegenstromdiffusionsflamme ist in Abb. 1 dargestellt. Diese besteht aus einem Oxidator- und einem Brennstoffstrom, die gegeneinander gerichtet sind und damit eine Stauebene ausbilden. In der Nähe dieser Stauebene im Bereich des mageren Gemisches stellt sich die Flamme ein.

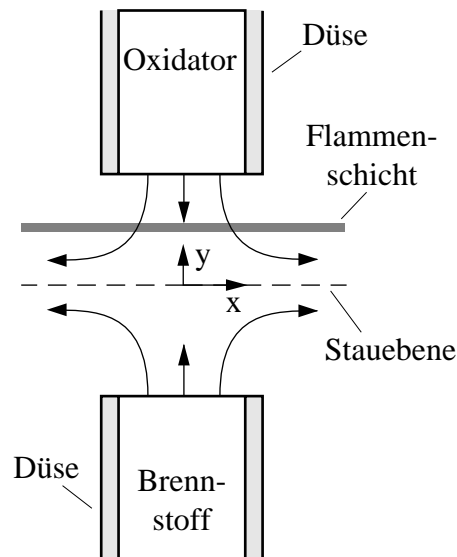


Abbildung 1: Schematische Darstellung der verwendeten Gegenstromkonfiguration

Für $y \rightarrow \infty$ und $y \rightarrow -\infty$ liegen Potentialströmungen vor. Ausgangspunkt für die Herleitung eines Systems gewöhnlicher Differentialgleichungen zur Beschreibung der laminaren Gegenstromdiffusionsflamme sind die zweidimensionalen Navier-Stokes Gleichungen. Diese werden dann mit einer Ähnlichkeitstransformation in ein eindimensionales Gleichungssystem überführt. Die Bilanzgleichungen für das stationäre Strömungsfeld lauten:

Kontinuität:

$$\frac{\partial \rho u}{\partial x} + \frac{\partial \rho v}{\partial y} = 0 \quad (1)$$

Impulserhaltung in x -Richtung:

$$\begin{aligned} \rho u \frac{\partial u}{\partial x} + \rho v \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial p}{\partial x} \\ - \frac{\partial}{\partial x} \left[\mu \left(2 \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{2}{3} \nabla \cdot \vec{v} \right) \right] - \frac{\partial}{\partial y} \left[\mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right] = 0 \end{aligned} \quad (2)$$

Impulserhaltung in y -Richtung:

$$\begin{aligned} \rho u \frac{\partial v}{\partial x} + \rho v \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial p}{\partial y} \\ - \frac{\partial}{\partial x} \left[\mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right] - \frac{\partial}{\partial y} \left[\mu \left(2 \frac{\partial v}{\partial y} - \frac{2}{3} \nabla \cdot \vec{v} \right) \right] = 0 \end{aligned} \quad (3)$$

Hierbei sind x und y die unabhängigen Raumkoordinaten, u und v die Geschwindigkeitskomponenten in Hauptströmungs- und Querrichtung. ρ ist die Dichte, p der Druck und μ die dynamische Viskosität.

Für die Divergenz der Geschwindigkeit steht

$$\nabla \cdot \vec{v} = \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} . \quad (4)$$

In den Impulsgleichungen ist dabei der Auftrieb vernachlässigt worden.

Da sich in dieser Strömungskonfiguration eine ebene Flamme parallel zur Ebene $y = 0$ ausbildet, hängen alle Skalare nur noch von y ab. Gemäß der hier verwendeten Ähnlichkeitstransformation (z.B. [2]) werden nun die Koordinaten

$$\eta = \left[\frac{a}{(\rho\mu)_{\text{ref}}} \right]^{1/2} \int_0^y \rho dy \quad (5)$$

und

$$\xi = x \quad (6)$$

eingeführt. Dabei entspricht die Streckungsrate a dem Geschwindigkeitsgradienten im Oxidatorstrom:

$$a = \frac{du_\infty}{dx} . \quad (7)$$

Die Streckungsrate kann als Kehrwert einer charakteristischen Verweilzeit gedeutet werden und stellt den bestimmenden Strömungsparameter dar. Die Referenzgrößen ρ_{ref} und μ_{ref} werden ebenfalls im Oxidatorstrom gebildet.

Es ergeben sich damit die Transformationsregeln

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial \xi} \quad (8)$$

und

$$\frac{\partial}{\partial y} = \left[\frac{a}{(\rho\mu)_{\text{ref}}} \right]^{1/2} \rho \frac{\partial}{\partial \eta} . \quad (9)$$

Durch Einführung der dimensionslosen Stromfunktion f , definiert durch

$$\rho u = \sqrt{(\rho\mu)_{\text{ref}}} a x \frac{\partial f}{\partial y} \quad (10)$$

und

$$\rho v = -\sqrt{(\rho\mu)_{\text{ref}}} a \frac{\partial x f}{\partial x} \quad (11)$$

wird die Kontinuitätsgleichung identisch erfüllt.

Für die Geschwindigkeiten ergeben sich damit die folgenden Ansätze:

$$u = a\xi \frac{\partial f}{\partial \eta} \quad (12)$$

und

$$\rho v = -\sqrt{(\rho\mu)_{\text{ref}}} a f(\eta) . \quad (13)$$

Für den Druck wird folgender Ansatz gewählt:

$$p = p_0 - \frac{1}{2} \left(a^2 \rho_\infty \xi^2 + a \mu_\infty F(\eta) \right) . \quad (14)$$

Hierbei ist p_0 der Staudruck. Der zweite Term beschreibt die Druckminderung infolge der Beschleunigung in ξ -Richtung und der dritte Term die Druckänderung infolge Expansion. Damit ergeben sich die transformierten Impulsgleichungen zu:

x -Richtung:

$$f \frac{d^2 f}{d\eta^2} + \frac{\rho_\infty}{\rho} - \left(\frac{df}{d\eta} \right)^2 + \frac{d}{d\eta} \left(C \frac{d^2 f}{d\eta^2} \right) = 0 \quad (15)$$

y -Richtung:

$$\begin{aligned} f \frac{d}{d\eta} \left(\frac{f}{\rho} \right) + \frac{1}{2\rho_\infty} \frac{dF}{d\eta} + \frac{C}{\rho} \frac{d^2 f}{d\eta^2} - 2 \frac{d}{d\eta} \left(C \frac{d}{d\eta} \left(\frac{f}{\rho} \right) \right) \\ - \frac{2}{3} \frac{d}{d\eta} \left(\frac{C}{\rho^2} f \frac{d\rho}{d\eta} \right) = 0 . \end{aligned} \quad (16)$$

Hierbei wurde der Chapman-Rubesin-Parameter

$$C = \frac{\rho\mu}{(\rho\mu)_{\text{ref}}} \quad (17)$$

verwendet. Man erkennt, daß die Impulsgleichung in x -Richtung unabhängig von der Impulsgleichung in y -Richtung gelöst werden kann, die nur benutzt wird, wenn der Druckverlauf von Interesse ist.

Um den in Gleichung (15) auftretenden Chapman-Rubesin-Parameter bestimmen zu können, werden die Spezieserhaltungsgleichungen und die Energieerhaltungsgleichung ebenfalls der oben beschriebenen Transformation unterworfen. Man erhält:

Spezieserhaltung:

$$f \frac{dY_i}{d\eta} - \frac{1}{\sqrt{(\rho\mu)_{\text{ref}} a}} \frac{d}{d\eta} (\rho Y_i V_{iy}) + \frac{\dot{m}_i}{\rho a} = 0 , \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (18)$$

Energieerhaltung:

$$f \frac{dT}{d\eta} + \frac{1}{c_p(\rho\mu)_{\text{ref}}} \frac{d}{d\eta} \left(\rho\lambda \frac{dT}{d\eta} \right) - \frac{1}{\sqrt{(\rho\mu)_{\text{ref}}a}} \frac{dT}{d\eta} \sum_{i=1}^n \frac{c_{pi}}{c_p} \rho Y_i V_{iy} - \frac{1}{c_p \rho a} \sum_{i=1}^n \dot{m}_i h_i - \frac{1}{c_p \rho a} \sum_{i=1}^n q_{Ri} = 0. \quad (19)$$

Dabei ist Y_i der Massenbruch der i -ten Spezies, n die Anzahl der beteiligten Spezies, T die Temperatur, V_{iy} die Diffusionsgeschwindigkeit der i -ten Spezies in y -Richtung, \dot{m}_i die volumenbezogene Produktionsrate der i -ten Spezies, c_{pi} die spezifische Wärmekapazität der i -ten Spezies bei konstantem Druck, h_i die spezifische Enthalpie der i -ten Spezies, q_{Ri} die Strahlungsleistung der i -ten Spezies, λ die Wärmeleitfähigkeit der Mischung, M die mittlere Molmasse der Mischung und c_p die spezifische Wärmekapazität der Mischung bei konstantem Druck.

Zur Schließung des Gleichungssystems wird die Zustandsgleichung thermisch idealer Gase verwendet:

$$\rho = \frac{p M}{\mathcal{R} T}, \quad (20)$$

wobei \mathcal{R} die allgemeine Gaskonstante ist.

Zur Bestimmung des Strahlungsquellterms in Gl. (19) wird ein Modell für optisch dünne Gase benutzt. Hierbei werden alle Terme gegenüber denen von CO_2 und H_2O als vernachlässigbar angesehen. Es ergibt sich damit für den Strahlungsquellterm

$$\sum_{i=1}^n q_{Ri} = -2\sigma_S \rho \mathcal{R} T^5 \left[\alpha_{P,\text{CO}_2} \left(\frac{Y}{M} \right)_{\text{CO}_2} + \alpha_{P,\text{H}_2\text{O}} \left(\frac{Y}{M} \right)_{\text{H}_2\text{O}} \right]. \quad (21)$$

Hierbei ist σ_S die Stefan-Boltzmann-Konstante, α_{P,CO_2} und $\alpha_{P,\text{H}_2\text{O}}$ sind die Planckschen Strahlungskoeffizienten. Diese werden durch die empirischen Beziehungen

$$\alpha_{P,\text{CO}_2} = 46.241 \exp(-8.888 \cdot 10^{-4} T) \quad (22)$$

und

$$\alpha_{P,\text{H}_2\text{O}} = 22.6 \exp\left(-1.546 \cdot 10^{-3} T\right) \quad (23)$$

bestimmt. Eine ausführliche Darstellung hierzu findet sich bei [3].

Die Lösung des Gleichungssystems erfolgt mit den zu dem oben beschriebenen Problem korrespondierenden Randbedingungen:

$\eta \rightarrow -\infty$:

$$\frac{df}{d\eta} = \sqrt{\frac{\rho_\infty}{\rho_{-\infty}}} \quad (24)$$

$$T = T_{-\infty} \quad (25)$$

$$Y_i = Y_{i,-\infty} \quad (26)$$

$\eta = 0$:

$$f = 0 \quad (27)$$

$\eta \rightarrow \infty$:

$$\frac{df}{d\eta} = 1 \quad (28)$$

$$T = T_\infty \quad (29)$$

$$Y_i = Y_{i,\infty} \quad (30)$$

2.2 Molekulare und Thermodynamische Transportkoeffizienten

Nach [4] kann die Diffusionsgeschwindigkeit \vec{V}_i in drei Teile aufgeteilt werden:

$$\vec{V}_i = \vec{V}_i^D + \vec{V}_i^T + \vec{V}_c, \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (31)$$

Dabei ist \vec{V}_i^D die Druckdiffusionsgeschwindigkeit, \vec{V}_i^T die Thermodiffusionsgeschwindigkeit und \vec{V}_c eine für alle Spezies gleiche Korrekturgeschwindigkeit. Die Druckdiffusionsgeschwindigkeit wird durch die Curtiss-Hirschfelder-Approximation [5] angenähert:

$$\vec{V}_i^D = -\frac{D_i}{X_i} \nabla X_i, \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (32)$$

Dabei entspricht X_i dem Molenbruch der Spezies i und ∇X_i in dem hier vorliegenden eindimensionalen Fall dem Gradienten dX_i/dy . D_i ist der Mischungsgemittelte Diffusionskoeffizient der Spezies i und wird mit

$$D_i = \frac{1 - \sum_{j=1}^n Y_j}{\sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n \frac{X_j}{\mathcal{D}_{ij}}}, \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (33)$$

aus den binären Diffusionskoeffizienten \mathcal{D}_{ij} berechnet, die ihrerseits nach [6] durch

$$\mathcal{D}_{ij} = 0.0753206 \frac{\sqrt{T^3 \left(\frac{1}{M_i} + \frac{1}{M_j} \right)}}{p (\sigma_i + \sigma_j)^2 \Omega_{ij}^{(1,1)}} \quad (34)$$

gegeben sind. Dabei ist σ der Stoßquerschnitt der jeweiligen Spezies und $\Omega_{ij}^{(1,1)}$ das Stoßintegral. Hierbei wird der Stoßquerschnitt in Angström, die Molmasse in kg/kmol und die übrigen Größen in SI-Einheiten angegeben.

Die Thermodiffusionsgeschwindigkeit, die sowieso nur Beiträge für Spezies mit sehr kleinen Molmassen ergibt (z.B. H, H₂, He), wird hier vernachlässigt.

Da die Curtiss-Hirschfelder-Approximation, obwohl für binäre Gemische exakt, für Gemische mit mehr als zwei Komponenten nicht mehr massenerhaltend ist, wird die Korrekturgeschwindigkeit so berechnet, daß die Massenerhaltung

$$\sum_{i=1}^n \vec{V}_i Y_i = 0 \quad (35)$$

gewährleistet wird. Mit Gl. (31) folgt:

$$\vec{V}_c = - \sum_{i=1}^n \vec{V}_i^D Y_i. \quad (36)$$

Die dynamische Viskosität und die Wärmeleitfähigkeit der Mischung werden mit Hilfe empirischer Mischungsregeln aus den Stoffeigenschaften der einzelnen Spezies nach [6] berechnet:

$$\mu = \sum_{i=1}^n \frac{Y_i \mu_i}{\Delta_i}, \quad (37)$$

$$\lambda = \sum_{i=1}^n \frac{Y_i \lambda_i}{\Delta_i}, \quad (38)$$

$$\Delta_i = \sum_{j=1}^n G_{ij} \frac{M_i}{M_j} Y_j, \quad (39)$$

$$G_{ij} = \frac{1}{\sqrt{8}} \left(1 + \frac{M_i}{M_j} \right)^{-1/2} \left[1 + \left(\frac{\mu_i}{\mu_j} \right)^{-1/2} \left(\frac{M_j}{M_i} \right)^{1/4} \right]^2. \quad (40)$$

Dynamische Viskosität und Wärmeleitfähigkeit der reinen Stoffe werden auf der Grundlage der Theorie für verdünnte Gase berechnet:

$$\mu_i = 2.6693 \cdot 10^{-5} \frac{\sqrt{M_i T}}{\sigma_i^2 \Omega_{ij}^{(2,2)}} \quad (41)$$

$$\lambda_i = \mu_i \left(c p_i + \frac{5}{4} \frac{\mathcal{R}}{M_i} \right). \quad (42)$$

Wärmekapazität und Enthalpie der einzelnen Spezies werden nach [7] unter Verwendung der NASA-Polynome bestimmt.

2.3 Reaktionskinetik

Die in den Gleichungen (18) und (19) auftretenden Quellterme werden im wesentlichen durch die chemische Produktionsrate \dot{m}_i bestimmt. Diese erhält Beiträge aus allen Reaktionen, und wird damit zu

$$\dot{m}_i = M_i \sum_{k=1}^r \nu_{ik} w_k, \quad (43)$$

wobei r die Anzahl der beteiligten Reaktionen, ν_{ik} der stöchiometrische Koeffizient der Spezies i in Reaktion k und w_k die Reaktionsrate der Reaktion k ist. Die Reaktionsraten werden aus den Geschwindigkeitskoeffizienten k_k der jeweiligen Reaktion und den Konzentrationen der darin auftretenden Spezies berechnet:

$$w_k = k_{fk}(T) \prod_{j=1}^n \left(\frac{\rho Y_j}{M_j} \right)^{\nu'_{kj}} - k_{bk}(T) \prod_{j=1}^n \left(\frac{\rho Y_j}{M_j} \right)^{\nu''_{kj}}. \quad (44)$$

Für die Geschwindigkeitskoeffizienten wird ein modifizierter Arrheniusansatz gewählt, der die Temperaturabhängigkeit der Reaktion widerspiegelt:

$$k_k = A_k T^{n_k} \exp \left(-\frac{E_k}{\mathcal{R}T} \right). \quad (45)$$

Dabei ist A_k der Frequenzfaktor, n_k der präexponentielle Temperaturexponent und E_k die Aktivierungsenergie der Reaktion k . Diese Größen sind Konstanten einer Reaktion. Dabei ist zu beachten, daß die physikalische Einheit des Frequenzfaktors von der Ordnung der Reaktion p und vom präexponentiellen Temperaturexponenten abhängt:

$$[A_k] = \left[\frac{\text{m}^{3(p-1)}}{\text{s kmol}^{p-1} \text{K}^{n_k}} \right]. \quad (46)$$

Der in der vorliegenden Arbeit verwendete Reaktionsmechanismus [8] ist in Anhang A dargestellt. Dieser beinhaltet noch einige weitere Besonderheiten:

Zunächst tritt in einigen Reaktionen die Konzentration inerter Stoßpartner M' auf, die sich aus der Summe der Konzentrationen C_i aller beteiligter Spezies multipliziert mit entsprechenden Effektivitätsfaktoren z_i berechnet:

$$C_M = \sum_{i=1}^n z_i C_i. \quad (47)$$

Die hier verwendeten Effektivitätskoeffizienten sind in Anhang A angegeben.

Da die Reaktionen 34, 36, 51 und 58 druckabhängig sind, müssen die entsprechenden Geschwindigkeitskoeffizienten temperatur- und druckabhängig berechnet werden. Daraus folgt, daß Gl. (45) für diese Reaktionen nicht verwendet werden kann. Stattdessen wird hier ein druckabhängiger Ansatz nach [9] verwendet:

$$k = F k_\infty k_L. \quad (48)$$

Hierbei ist

$$k_L = \frac{k_0 [M] / k_\infty}{1 + k_0 [M] / k_\infty} \quad (49)$$

der sogenannte Lindemann-Hinshelwood-Ansatz. Nach [10] wird durch den Erweiterungsfaktor F eine Korrektur hierzu vorgenommen. Dieser Erweiterungsfaktor wird angenähert durch

$$\log_{10} F = \frac{1}{1 + \left(\log_{10} [k_0 [M] / k_\infty] \frac{1}{N} \right)^2} \log_{10} F_c, \quad (50)$$

mit

$$N = 0.75 - 1.27 \log_{10} F_c \quad (51)$$

und der Moldichte des Gasgemisches

$$[M] = \frac{p}{\mathcal{R}T}. \quad (52)$$

Es werden also für jede Reaktion zunächst zwei Geschwindigkeitskoeffizienten berechnet, demzufolge werden im Mechanismus die entsprechenden Arrheniuskoeffizienten für k_∞ und k_0 angegeben. Zu beachten ist dabei, daß die Koeffizienten von Vorwärts- und Rückwärtsreaktion nicht unabhängig voneinander sind. Die fehlenden Konstanten können aus dem Massenwirkungsgesetz berechnet werden, zum Beispiel ergibt sich für Reaktion 51b:

$$k_{0b} = \frac{k_{\infty b}}{k_{\infty f}} k_{0f} . \quad (53)$$

Es ergibt sich daraus weiterhin, daß k_L und F für Vorwärts- und Rückwärtsreaktionen gleich sind.

Für den empirischen, temperaturabhängigen Wert F_c werden hier folgende Ausdrücke benutzt:

$$F_{c34} = 0.577 \exp \left(-\frac{T}{2370.0} \right) , \quad (54)$$

$$F_{c36} = 0.38 \exp \left(-\frac{T}{73.0} \right) + 0.62 \exp \left(-\frac{T}{1180.0} \right) , \quad (55)$$

$$F_{c51} = 0.35 , \quad (56)$$

$$F_{c58} = 0.411 \exp \left(-\frac{73.4}{T} \right) + \exp \left(-\frac{T}{422.8} \right) . \quad (57)$$

3 Numerisches Verfahren

Zunächst sollen hier die Gleichungen in eine der Numerik besser zugängliche Form gebracht werden.

Die in Gl. (15) auftretende dritte Ableitung ist numerisch schwierig zu handhaben. Um dies zu vermeiden wird eine neue Variable $g = f'$ eingeführt und eine entsprechende Substitution in allen Erhaltungsgleichungen und in den Randbedingungen durchgeführt. Um die Anzahl der abhängigen Variablen zu verringern, wird die Dichte ρ an den Stellen, die implizit gerechnet werden sollen, mit Gl. (20) eliminiert. Desweiteren werden die Diffusionsgeschwindigkeiten entsprechend Gl. (31) und (32) aufgelöst. Daraus ergibt sich das folgende Gleichungssystem:

$$\frac{df}{d\eta} - g = 0 \quad (58)$$

$$f \frac{dg}{d\eta} + \rho_\infty \frac{\mathcal{R}}{p M} T - g^2 + \frac{1}{\rho_\infty \mu_\infty} \frac{d}{d\eta} \left(\rho \mu \frac{dg}{d\eta} \right) = 0 \quad (59)$$

$$\begin{aligned} f \frac{dY_k}{d\eta} + \frac{1}{\rho_\infty \mu_\infty} \frac{d}{d\eta} \left(\rho^2 D_k \frac{dY_k}{d\eta} \right) \\ - \frac{1}{\rho_\infty \mu_\infty} \frac{d}{d\eta} \left(\rho^2 Y_k V_{c\eta} \right) + \frac{\mathcal{R}}{a p M} T \dot{m}_k = 0 \end{aligned} \quad (60)$$

$$\begin{aligned} f \frac{dT}{d\eta} + \frac{1}{\rho_\infty \mu_\infty c_p} \frac{d}{d\eta} \left(\rho \lambda \frac{dT}{d\eta} \right) + \frac{p^2 M^2}{\rho_\infty \mu_\infty c_p \mathcal{R}^2} \frac{1}{T^2} \frac{dT}{d\eta} \sum_{i=1}^n c_{pi} D_i \frac{dY_i}{d\eta} \\ - \frac{1}{\rho_\infty \mu_\infty} \frac{\rho^2 V_c}{c_p} \frac{dT}{d\eta} \sum_{i=1}^n c_{pi} Y_i - \frac{\mathcal{R}}{c_p a p M} T \sum_{i=1}^n \dot{m}_i h_i \\ - \frac{\mathcal{R} T}{c_p a p M} \sum_{i=1}^n q_{Ri} = 0. \end{aligned} \quad (61)$$

Bei der Lösung dieses Gleichungssystems handelt es sich um ein nichtlineares Zweipunkt-Randwertproblem auf dem unendlichen Intervall $-\infty < \eta < \infty$.

Die Handhabung der Integrationsgrenzen besteht hier darin, das Gleichungssystem auf einem endlichen Intervall $L_- \leq \eta \leq L_+$ zu lösen. Die Grenzen sind dabei so zu wählen, daß die im Unendlichen angenommene Bedingung der Potentialströmung in einer kleinen Umgebung um L_- und L_+ erfüllt ist. Geeignete Werte für die Grenzen können entweder durch Experimente oder durch einige numerische Versuchsläufe bestimmt werden.

Ziel ist es nun, eine Lösung des Differentialgleichungssystems auf einem diskreten Gitter

$$\mathcal{M} = \{L_- = \eta_1 < \eta_2 < \dots < \eta_N = L_+\} , \quad (62)$$

mit $h_j = \eta_j - \eta_{j-1}$, $j = 2, \dots, N$, zu erhalten. Dabei ist N die Anzahl der Gitterpunkte.

Dazu werden die räumlichen Ableitungen durch finite Differenzen approximiert. Für erste Ableitungen einer Variablen f werden entweder Upwinddifferenzen

$$\left. \frac{df}{d\eta} \right|_{\eta_i} = \frac{f_i - f_{i-1}}{h_i} + O(h_i) \quad (63)$$

oder zentrale Differenzen

$$\left. \frac{df}{d\eta} \right|_{\eta_i} = \frac{h_i^2 f_{i+1} + (h_{i+1}^2 - h_i^2) f_i - h_{i+1}^2 f_{i-1}}{h_i h_{i+1} (h_i + h_{i+1})} + O(h_i h_{i+1}) \quad (64)$$

verwendet. Upwinddifferenzen bringen dabei ein stabileres Verfahren, da es bei diesem Differenzenschema erster Ordnung durch numerische Diffusion zu einer Vergrößerung des Konvergenzradius kommt. Weiterhin erhöhen Upwinddifferenzen gegenüber zentralen Differenzen die Diagonaldominanz der Jakobimatrix. Zentrale Differenzen weisen dagegen den Vorteil auf von zweiter Ordnung genau zu sein.

Zweite Ableitungen werden durch zentrale Differenzen diskretisiert:

$$\left. \frac{d^2 f}{d\eta^2} \right|_{\eta_i} = 2 \frac{h_i f_{i+1} - (h_{i+1} + h_i) f_i + h_{i+1} f_{i-1}}{h_i h_{i+1} (h_i + h_{i+1})} + O(h_{i+1} - h_i) + O(h^2) . \quad (65)$$

Diese zentralen Differenzen sind für nicht äquidistante Gitter nur von erster Ordnung genau. Werden jedoch äquidistante Gitter verwendet, so fällt der erste Fehlerterm weg, und das Verfahren ist auch hier von zweiter Ordnung genau.

Diffusionsterme werden durch

$$\left. \frac{d}{d\eta} \left(a \frac{df}{d\eta} \right) \right|_{\eta_i} = \frac{(a_i + a_{i+1})h_i(f_{i+1} - f_i) - (a_{i-1} + a_i)h_{i+1}(f_i - f_{i-1})}{h_i h_{i+1}(h_i + h_{i+1})} \quad (66)$$

approximiert.

3.1 Newtonverfahren

Werden nun alle Differentiale in Gl. (58)–(61) durch finite Differenzen ersetzt, überführt man damit das Problem, eine analytische Lösung für dieses Gleichungssystem zu finden, in das, eine Approximation dieser Lösung für jeden Punkt η_j auf dem Gitter \mathcal{M} zu finden. Gesucht ist damit die Lösung Z des nichtlinearen Systems finiter Differenzengleichungen

$$F(Z) = 0. \quad (67)$$

Um dieses Gleichungssystem zu linearisieren, führt man eine Taylorreihenentwicklung durch:

$$F(Z^n + \Delta Z^n) = F(Z^n) + \frac{\partial F(Z^n)}{\partial Z^n} \Delta Z^n \equiv 0. \quad (68)$$

Dabei ist Z^n die Lösung des Systems nach der n -ten Iteration und $J(Z^n) = \partial F(Z^n)/\partial Z^n$ die Jakobimatrix.

Man erhält das iterative Verfahren

$$Z^{n+1} = Z^n + \Delta Z^n \quad (69)$$

wobei ΔZ^n durch die Lösung des linearen Systems

$$J(Z^n)\Delta Z^n = -F(Z^n) \quad (70)$$

bestimmt wird.

Zur Lösung dieses Gleichungssystems wird ein Löser für blocktriagonale Gleichungssysteme von Hindmarsh [11] verwendet. Die hier verwendete Implementation stammt von Josef Göttgens und ist Teil des **ArrayManager**-Paketes. Konvergenz ist dann erreicht, wenn die Norm des Lösungsincrements $\|\Delta Z^n\|$ und die Norm des Residuums $\|F(Z^n)\|$ genügend klein sind.

Um die Lösungsgeschwindigkeit und die Konvergenzrate zu verbessern, wurden Abwandlungen des gewöhnlichen Newtonverfahrens implementiert, die im folgenden erläutert werden.

3.1.1 Gedämpftes Newtonverfahren

Die Idee der Dämpfung ist es, die Schrittweite einer Newtoniteration, i.e. ΔZ^n , mit einem Parameter λ zu kontrollieren. Man schreibt für Gl.(70) demgemäß:

$$Z^{n+1} = Z^n + \lambda^n \Delta Z^n \quad (71)$$

mit ΔZ^n aus Gl. (70).

Das Problem besteht nun darin, einen Wert für λ so zu bestimmen, daß der Lösungsfortschritt möglichst groß wird. Dies wird hier mit einer Art Prädiktor-Korrektor-Schema nach Ascher [12] erreicht.

Zunächst wählt man eine Monitorfunktion $g(Z)$, die den Lösungsfortschritt repräsentiert so, daß $g(Z) \geq 0$ und $g(Z^*) = 0$ für $F(Z^*) = 0$, wobei Z^* die exakte Lösung darstellt. Ein Beispiel für eine Monitorfunktion, die diesen Kriterien genügt, ist die Residuumnorm $\|F(Z^n)\|$. Um Schwierigkeiten durch eine schlecht konditionierte Jakobimatrix zu vermeiden, nimmt man diese in den Ansatz mit auf. Als geeignete Monitorfunktion erhält man damit

$$g(Z^n + \lambda \Delta Z^n) := \frac{1}{2} \left| J(Z^n)^{-1} F(Z^n + \lambda \Delta Z^n) \right|^2 \quad (72)$$

Dies führt auf ein Minimalwertproblem, denn λ wird genau dann optimal, wenn $g(Z^n + \lambda \Delta Z^n)$ minimal wird. Eine exakte Liniensuche bestünde nun

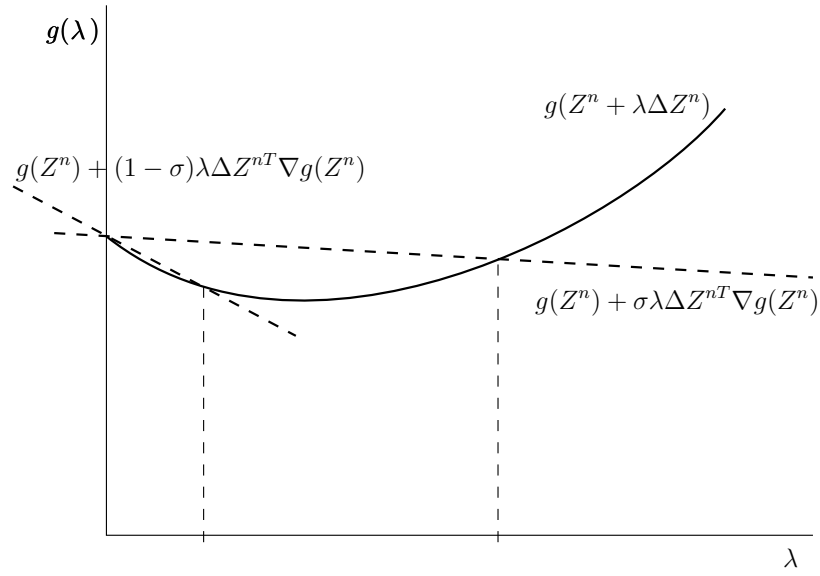


Abbildung 2: Akzeptabler Bereich für den Dämpfungsfaktor

darin, $\min_{\lambda} g(Z^n + \lambda \Delta Z^n)$ zu bestimmen. Da dies zu aufwendig ist, wird hier die schwache Liniensuche gewählt. Dabei wird zunächst der Bereich eines akzeptablen Wertes für λ festgelegt. Dieser Bereich ist in Abb. 2 wiedergegeben. Die Grenzen hierfür werden bestimmt durch:

$$(1 - 2\lambda(1 - \sigma)) g(Z^n) \leq g(Z^{n+1}) \leq (1 - 2\lambda\sigma) g(Z^n) . \quad (73)$$

Dabei ist σ eine empirische Konstante mit $0 < \sigma < 1/2$ (z.B. $\sigma = 10^{-2}$).

Approximiert man nun $g(Z^n + \lambda \Delta Z^n)$ durch ein quadratisches Polynom, erhält man ein lokales Minimum für

$$\lambda = \frac{\lambda^2 g(Z)}{(2\lambda - 1)g(Z) + g(Z^n + \lambda \Delta Z^n)} , \quad (74)$$

wobei mit Gl. (70) und (72)

$$g(Z^n) = \frac{1}{2} |\Delta Z|^2 \quad (75)$$

ist.

Gleichung (74) ist iterativ zu lösen. Diese Iteration wird solange durchgeführt, bis die Bedingung in Gl. (73) erfüllt ist. Als Startwert für die Iteration kann man beispielsweise $\lambda_n^{(0)} = \lambda_{n-1}$ oder $\lambda_n^{(0)} = 1$ wählen. Sehr gute Ergebnisse erzielt man mit

$$\lambda = \frac{|\Delta Z^{n-1}|}{|\Delta Z^n + J(Z^{n-1})^{-1} F(Z^n)|} \lambda_{n-1}, \quad \lambda_{\min} \leq \lambda \leq 1. \quad (76)$$

3.1.2 Pseudozeititeration

Ein weiteres Verfahren, mit dem der Konvergenzradius des Newtonverfahrens vergrößert werden kann, besteht darin, in das zu lösende Gleichungssystem (67) einen Term einzubringen, der die Eigenschaften einer Zeitableitung besitzt, das heißt für große Zeitschritte verschwindet. Dabei beschreibt dieser Term bei einer konservativen Formulierung des Systems tatsächlich die Zeitabhängigkeit, die exakte Formulierung bringt bei der hier verwendeten nichtkonservativen Form des Gleichungssystems aber keinen Nutzen und kann daher ausbleiben. Man erhält damit das Gleichungssystem

$$\frac{dZ}{dt} = F(Z). \quad (77)$$

Die Diskretisierung erfolgt hier mit einem Verfahren nach Ascher [12]. Zunächst wird eine implizite Eulerdiskretisierung durchgeführt. Man erhält

$$Z^{n+1} = Z^n + \Delta t F(Z^{n+1}). \quad (78)$$

Um dieses System zu lösen, wird $F(Z^{n+1})$ durch einen gedämpften Newtonschritt (Gl. (68) mit Dämpfung) approximiert. Dies führt auf

$$\Delta Z^n = \lambda \Delta t [I - \Delta t J(Z^n)]^{-1} F(Z^n). \quad (79)$$

Effektiv wird durch die Addition der Einheitsmatrix I die Diagonaldominanz der Jakobimatrix erhöht, und damit von einer Singularität weg bewegt. Die sich hieraus ergebende Newtonrichtung wird also eher einen Lösungsfortschritt ergeben. Gl. (79) zeigt außerdem, daß dieses Verfahren für große Zeitschritte $\Delta t \rightarrow \infty$ in ein echtes Newtonverfahren übergeht. Nachteilig ist, daß durch die Pseudozeititeration die Konvergenzrate nicht mehr, wie beim echten Newtonverfahren, quadratisch, sondern nur noch linear ist.

3.1.3 Modifiziertes Newtonverfahren

Probleme, bei denen das Bilden und Faktorisieren der Jakobimatrix einen wesentlichen Anteil an der Gesamtrechnenzeit einnehmen, lassen sich durch die Verwendung eines modifizierten Newtonverfahrens in erheblich geringerer Zeit berechnen. Dabei wird die faktorisierte Jakobimatrix einer Lösung Z^0 für mehrere Iterationsschritte verwendet. Gl. (70) wird damit zu

$$J(Z^0)\Delta Z^n = -F(Z^n). \quad (80)$$

Da dieses Iterationsverfahren aber nicht notwendigerweise konvergiert, wird es nur so lange verwendet, wie ausreichende Konvergenz vorliegt. Ein Kriterium hierfür ist nach [12]:

$$g(Z^{n+1}) \leq \rho g(Z^n), \quad (81)$$

wobei ρ eine Konstante mit $0 < \rho < 1$ ist, die die Konvergenzrate des modifizierten Newtonverfahrens widerspiegelt. Eine geeignete Monitorfunktion ist die Norm des Residuums

$$g(Z^n) = \|F(Z^n)\|. \quad (82)$$

Wird dieses Kriterium nicht erfüllt, so wird im nächsten Schritt wieder ein gedämpfter Newtonschritt durchgeführt und damit eine neue Jakobimatrix gebildet und faktorisiert, die dann wieder als Ausgangspunkt für eine neue Sequenz modifizierter Newtonschritte dienen kann.

3.1.4 Lösungsfortschrittsverfahren

Ein Nachteil des Newtonverfahrens besteht darin, daß es nur konvergiert, wenn man eine Startlösung Z^0 benutzt, die nahe genug bei der exakten Lösung Z^* liegt. Eine häufig benutzte Methode eine Startlösung zu erhalten, die diese Eigenschaft besitzt, besteht darin, ein ähnliches aber einfacheres Problem zu lösen, und diese Lösung als Startprofil für das eigentliche

Problem zu verwenden. Allgemein kann man mit einem einfachen Problem beginnen, und sich dem eigentlichen Problem immer weiter nähern.

Gl. (67) kann damit folgendermaßen formuliert werden:

$$H(Z, \tau) = 0, \quad 0 \leq \tau \leq 1 \quad (83)$$

wobei

$$H(Z, 0) = 0 \quad (84)$$

ein leicht zu lösendes und

$$H(Z, 1) \equiv F(Z) \quad (85)$$

das eigentlich zu lösende Problem ist.

Das Lösungsfortschrittverfahren besteht nun darin, auf einem stetigen Lösungspfad den Parameter τ mit möglichst großer Schrittweite von Null bis Eins zu variieren. Zur Steuerung des Lösungsfortschritts werden hier einfache empirische Kriterien auf der Basis des Lösungsfortschritts verwendet.

3.2 Adaptive Gittergenerierung

Die Wahl der Gitterpunkte beeinflusst in hohem Maße die Auflösung, die Konvergenzeigenschaften und die Geschwindigkeit eines Integrators, besonders dann, wenn die Lösung große räumliche Änderungen aufweist. Um nun ein Gitter mit möglichst wenig Gitterpunkten zu erhalten, das trotzdem die erforderliche Auflösung in schwierigen Gebieten zeigt, ist es notwendig, daß der Gittergenerator vom Löser gesteuert wird. Man nennt diese Art der Gittergenerierung adaptiv.

Das Prinzip der adaptiven Gittergenerierung ist, ein Gitter zu erzeugen, dessen Zellen alle gleiche Teile einer vorher festgelegten Gewichtsfunktion enthalten. Diese Gewichtsfunktion hängt von der Lösung des vorangehenden

Iterationsschrittes ab und wird durch Linearkombinationen verschiedener Eigenschaften dieser Lösung, z.B. Steigung, Krümmung oder lokaler Abbruchfehler, beschrieben. Wählt man nun positive Funktionen M_i , die diese Eigenschaften beschreiben, und gewichtet diese mit Einflußfaktoren c_i , ergibt sich für die Gewichtsfunktion

$$w = 1 + c_1 M_1 + c_2 M_2 + \dots + c_m M_m . \quad (86)$$

In dieser Arbeit wird das Gitter nur auf der Basis des lokalen Abbruchfehlers nach [13] generiert, d.h. es wird eine Gleichverteilung des lokalen Abbruchfehlers vorgenommen. Für die Gleichverteilung wurde hier ein Algorithmus nach [14] gewählt.

Zur Berechnung des lokalen Abbruchfehlers werden für eine gegebene Anfangslösung je eine Iteration auf einem Fein- und einem Grobgitter durchgeführt. Dabei entspricht die Schrittweite des Grobgitters der doppelten Schrittweite des Feingitters. Nimmt man zu dieser Lösung die erste Fehlerordnung hinzu, so ergibt sich für die Lösung des Feingitters

$$f(x) = f_h(x) + ch^p \quad (87)$$

und für die Lösung des Grobgitters

$$f(x) = f_{2h}(x) + c(2h)^p , \quad (88)$$

wobei h die Schrittweite des Feingitters und p die Fehlerordnung des finiten Differenzenverfahrens ist.

Eliminiert man hieraus den Fehlerterm, so ergibt sich als verbesserte Lösung

$$\hat{f}(x) = \frac{2^p f_h(x) - f_{2h}(x)}{2^p - 1} + O(h^{p+n}) \quad (89)$$

mit einem Fehlerterm von einer Ordnung größer als p .

Damit erhält man als Schätzwert für den lokalen Abbruchfehler

$$M(x) = \frac{2^p}{2^p - 1} |f_h(x) - f_{2h}(x)| . \quad (90)$$

Eine Gleichverteilung ergibt sich dann, wenn der Abstand zwischen zwei Gitterpunkten umgekehrt proportional zu den jeweiligen Gewichten ist:

$$w d\eta = c d\xi, \quad (91)$$

wobei η die unabhängige Koordinate ist und ξ das Gitter in einer Art Knotennummer repräsentiert, d.h. $d\xi$ ist konstant und gegeben durch die Integrationsgrenzen η_{\min} und η_{\max} und die Anzahl der Gitterpunkte $N = \xi_{\max}$. c ist eine Proportionalitätskonstante.

Um nun eine ungekoppelte Beziehung zwischen den Gitterpunkten zu erhalten, wird die Gleichverteilung über ein globales Integral vorgenommen. Die Integration von Gl. (91) ergibt.

$$\frac{\xi - \xi_{\min}}{\xi_{\max} - \xi_{\min}} = \frac{F(\eta)}{F\eta_{\max}}, \quad (92)$$

mit

$$F(\eta) = \int_{\eta_{\min}}^{\eta} w(\tilde{\eta}) d\tilde{\eta}. \quad (93)$$

Die Proportionalitätskonstante c in Gl. (91) wurde dabei aus der Integration über das gesamte Gebiet berechnet:

$$c = \frac{F(\eta_{\max})}{\xi_{\max} - \xi_{\min}}. \quad (94)$$

Der einfachste Weg das Integral (93) auszuwerten besteht darin, das Integral auf den alten Gitterpunkten $a_1 < a_2 < \dots < a_N$ zu berechnen, und linear auf das Intervall $\eta_{\min} < \eta < \eta_{\max}$ zu interpolieren. Approximiert man (93) durch die Trapezregel, ist

$$F(a_k) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{k-1} (w_{i+1} + w_i)(a_{i+1} - a_i) \quad (95)$$

für $k = 1, 2, \dots, N$. Nach Gl. (92) ist wegen $F(\eta_{\max}) = F(a_N)$

$$F(\eta_j) = \frac{j-1}{N-1} F(a_N). \quad (96)$$

für $j = 2, \dots, N - 1$. Entsprechende Werte für die Randpunkte müssen nicht berechnet werden, da sich deren Position nicht ändert, d.h. $\eta_1 = a_1$ und $\eta_n = a_N$.

Um nun die η_j aus $F(\eta_j)$ bestimmen zu können, benutzt man die Werte aus Gl. (95) als Integrationstabelle. Da $F(a)$ und $F(\eta)$ die gleichen Grenzen besitzen, und weiterhin $F(a)$ streng monoton steigend ist, läßt sich zu jedem η_j ein m finden, so daß

$$F(a_m) \leq F(\eta_j) < F(a_{m+1}) . \quad (97)$$

Lineare Interpolation zwischen a_m und a_{m+1} ergibt

$$\eta_j = a_m + \frac{a_{m+1} - a_m}{F(a_{m+1}) - F(a_m)} (F(\eta_j) - F(a_m)) . \quad (98)$$

Bei dieser Methode wurde in Gl. (94) die Anzahl der Gitterpunkte vorgegeben, und damit die Konstante c bestimmt. Man kann jedoch auch c vorgeben und daraus die Anzahl der Gitterpunkte berechnen. c ist dann ein Maß für den erlaubten Fehler.

4 Das Programm

Das hier vorgestellte Programmpaket besteht aus zwei separaten Programmen. Das eine ist das Vorlaufprogramm **ScanMan**, das den Mechanismus einliest, alle benötigten Daten zusammenträgt, aufbereitet und einige Konsistenzüberprüfungen durchführt. Dieses Vorlaufprogramm wurde in der Programmiersprache C unter Verwendung des Scannergenerators Flex und des Parsergenerators Bison geschrieben. Flex und Bison sind Programme, die von der Free Software Foundation (FSF) entwickelt wurden. Die eigentliche Berechnung eindimensionaler Flammen wird von dem Programm **FlameMaster** durchgeführt, das im Hinblick auf die Komplexität des Problems und der Fülle zu verarbeitender Daten in der objektorientierten Programmiersprache C++ programmiert wurde. **ScanMan** und **FlameMaster** benutzen das Programmpaket **ArrayManager** von Josef Göttgens zur dynamischen Speicherplatzverwaltung und zur Lösung des linearen Gleichungssystems Gl. (70). **FlameMaster** verwendet außerdem ein Programm zur Berechnung kubischer Splines von Peter Terhoeven. Der Gittergenerator basiert auf einer Implementation von Josef Göttgens.

4.1 Programmiersprachen

Es stellt sich nun die Frage, warum diese Programme in C++ und C unter der Verwendung von Flex und Bison geschrieben wurden. Dies soll hier beantwortet werden, indem die wesentlichen Eigenschaften dieser Programmiersprachen vorgestellt werden.

Flex und Bison sind die von der FSF herausgegebenen Erweiterungen der UNIX-Programme Lex und Yacc. Diese sind Compiler für die gleichnamigen Programmiersprachen, deren Ergebnisse C Programme sind, die man selbst wieder als Compiler bezeichnen kann. Dies bedeutet am Beispiel des Vorlaufprogramms, daß der Syntax der Eingabedatei (also des Reaktionsmechanismus) als Programmiersprache zu verstehen ist, die durch das Vorlaufprogramm dem eigentlichen Rechenprogramm in verständliche Form übersetzt wird. Das von Flex als sogenanntem *lexical analyzer generator* erzeugte Pro-

gramm (Scanner) übernimmt dabei die Aufgabe des Einlesens. Dabei werden im wesentlichen reguläre Ausdrücke erkannt, die unter Umständen kontextabhängig sind. Das von dem sogenannten *Parsergenerator* Bison erzeugte Programm (Parser) ruft den Scanner auf, und erhält von ihm sogenannte Token, die die Bedeutung und den Wert eines von ihm gefundenen regulären Ausdrucks wiedergeben. Die Aufgabe des Parsers besteht dann nur noch darin, Kombinationen verschiedener Token miteinander in Verbindung zu bringen. Durch diese Programmier Technik ergibt sich eine sehr freie und anschauliche Grammatik für den Eingabedatensatz.

Die Programmiersprache C++ stellt eine Erweiterung der Programmiersprache C dar. C bietet die Möglichkeit, die grundlegenden Datentypen der Hardware (Bits, Words, Adressen) mittels einfacher Befehle effizient zu manipulieren, wobei die Sprachkonstrukte mit denen anderer höherer Programmiersprachen, wie z.B. Pascal durchaus vergleichbar sind. Die wesentlichen Erweiterungen von C++ gegenüber C sind nach [15]

- Unterstützung von Datenabstraktionen (*Klassen*),
- Unterstützung von objektorientierter Programmierung (*information hiding*),
- Unterstützung von objektorientiertem Design. (*Vererbung*)

Die eigentliche Grundlage objektorientierter Programmierung ist das *Klassenkonzept*. Klassen sind anwenderdefinierte Datenstrukturen, ähnlich den Strukturen in C oder den Records in Pascal. Darüberhinaus beinhalten Klassen Funktionen zur Manipulation und Handhabung der klasseneigenen Objekte. Sowohl Objekte als auch Funktionen einer Klasse werden unterteilt in öffentlich zugänglich und privat, also nur innerhalb der Klasse bekannt. Durch dieses *information hiding* werden einerseits Objekte vor versehentlichen Änderungen geschützt, andererseits wird dadurch eine eindeutige Benutzerschnittstelle definiert, die es in sehr sicherer Weise erlaubt, Programmteile auszutauschen. Das Prinzip der *Vererbung* ermöglicht es, Objekte und Funktionen, die für mehrere Klassen gleich sind, in sogenannten Basisklassen

abzulegen. Klassen, die von diesen Basisklassen vererbt sind, besitzen dann die gleichen Eigenschaften wie die Basisklasse.

Die gute Konzeption eines Programmes erlaubt es nun mit den oben beschriebenen Hilfsmitteln das zu lösende Problem durch Definition geeigneter Datenstrukturen in die Programmiersprache einzubauen, und sich so eine eigene, auf das Problem bezogene Programmiersprache zu entwickeln.

4.2 Das Vorlaufprogramm ScanMan

ScanMan ist ein Programm zum Einlesen, Überprüfen und Aufbereiten von Reaktionsmechanismen und den zugehörigen Eingabewerten. Die Eingabedaten unterliegen einer gewissen Syntax, die im folgenden näher erläutert werden soll. Die Eingabedatei besteht dabei aus Statements und Kommentaren; Statements lassen sich weiter in Deklarationen und Definitionen unterteilen.

4.2.1 Deklarationen

Zur Überprüfung der Konsistenz der Eingabedaten müssen die in den Reaktionen erlaubten Atome deklariert werden. Spezies, die nicht im Reaktionsmechanismus, aber in der Definition inerter Stoßpartner auftreten, müssen angegeben werden. Alle übrigen Spezies werden implizit bei der Verwendung als Reaktionspartner deklariert. Weiterhin können Symbole für die Reaktionsordnung und für den Temperaturexponenten in der modifizierten Arrheniusgleichung deklariert werden. Diese Symbole können dann in der Definition der verwendeten Einheiten benutzt werden.

4.2.2 Definitionen

Die primären Definitionen bestehen aus den Reaktionsgleichungen, den Konstanten der modifizierten Arrheniusgleichung, bei druckabhängigen Reaktionen einem zweiten Satz dieser Konstanten zur Berechnung der Gleichgewichtskonstanten und einer Gleichung, die für die Berechnung des Erweiterungsfaktors nach Gl. (50) benötigt wird. Weiterhin müssen die verwendeten

ten Einheiten für den Frequenzfaktor und die Aktivierungsenergie angegeben werden. Treten in den Reaktionen inerte Stoßpartner auf, müssen deren Konzentrationen als Funktion der Konzentrationen der beteiligten Spezies angegeben werden.

4.2.3 Aufbau der Eingabedatei

Der Aufbau der Eingabedatei ist durch die logische Abfolge der Konsistenzüberprüfung festgelegt. Grundlage hierfür sind die oben angeführten Deklarationen. Es ergeben sich daraus einige Regeln für die Reihenfolge der Eingaben. Zunächst müssen die expliziten Deklarationen vorgenommen werden. Darauf folgen die Definitionen der verwendeten Einheiten, dann die Definitionen der Reaktionen, und anschließend die Definition der inerten Stoßpartner. Kommentare dürfen an allen Stellen in der Eingabedatei auftreten, nicht aber innerhalb einzelner Deklarationen oder Definitionen.

4.2.4 Syntax der Eingabedaten

Zunächst soll hier der syntaktische Aufbau eines Statements erläutert werden. Ausgenommen von diesen Regeln ist die Definition einer Reaktion, die einer eigenen Syntax unterliegt.

Statements bestehen aus dem einleitenden Schlüsselwort 'let', einer Zuweisung und einem abschließenden Punkt ('.'). Die Zuweisung besteht aus einer Schlüsselsequenz, einem Zuweisungsoperator und einem Argument. Der Zuweisungsoperator ist optional '=' oder 'be'. Im folgenden sollen die verschiedenen Statements anhand der ihnen eigenen Schlüsselsequenzen erklärt werden:

- **allowed atoms:** Deklaration aller im Reaktionsmechanismus verwendeten Atomsymbole, die aus maximal zwei Zeichen bestehen dürfen. Das Argument besteht aus einer kommaseparierten Liste.
Beispiel: `let allowed atoms be c, h, o, N.`
- **additional species:** Deklaration der Spezies, die in der Definition eines inerten Stoßpartners auftreten, aber nicht als aktiver Reaktionspartner

erscheinen, womit sie implizit deklariert wären. Das Argument ist wiederum eine kommaseparierte Liste.

Beispiel: `let additional species be N2.`

- **temperature exponent:** Deklaration des Symbols für den Temperaturexponenten der modifizierten Arrheniusgleichung. Diese Deklaration wird benötigt, wenn ein anderes als eines der vordefinierten Symbole bei der Definition von Einheiten benutzt werden soll. Vordefinierte Symbole sind 'n_k' und 'nk'.

Beispiel: `let temperature exponent be n.T.`

- **order of reaction:** Deklaration des Symbols für die Reaktionsordnung. Diese Deklaration wird benötigt, wenn ein anderes als das vordefinierte Symbol bei der Definition von Einheiten benutzt werden soll. Vordefiniertes Symbol ist 'n'.

Beispiel: `let order of reaction be p.`

- **units for A:** Definition der verwendeten Einheiten für die Aktivierungsenergie. Hier wird Groß- und Kleinschreibung unterschieden. Die erlaubten Einheiten können mit Hilfe einer Kommandozeilenoption beim Starten des Programms erfragt werden. Die Einheit kann optional in eckige Klammern gesetzt werden. Als Multiplikatoren können 'm' (milli), 'c' (centi), 'k' (kilo), 'M' (Mega) und 'G' (Giga) benutzt werden. Als Operatoren stehen '*', '/', '(', ')', '^', '+', '-', zur Verfügung. Als Parameter in Exponenten dürfen nur vordefinierte Symbole oder explizit deklarierte Symbole verwendet werden. Es ist darauf zu achten, daß jede SI-Einheit nur linear von einem Parameter abhängen darf. Zur besseren Übersichtlichkeit kann der Multiplikationsoperator im Exponent weggelassen werden. Exponenten, die aus mehr als einem Ausdruck bestehen (z.B. $2n$), müssen in Klammern gesetzt werden.

Beispiel: `let units for A be [cm^(3(n-1)) / (s * mole^(n-1) * K^n_k)].`

- **units for E:** Definition der verwendeten Einheiten für die Reaktionsordnung. Die für das Argument gültigen Regeln können dem Punkt

units for A (s.o.) entnommen werden.

Beispiel: `let units for E be [kJ / mole]`.

- **M:** Definition der inerten Stoßpartner. Hierbei dürfen nur diejenigen inerten Stoßpartner definiert werden, die in den verwendeten Reaktionsgleichungen auftreten und umgekehrt. Erlaubte Symbole für inerte Stoßpartner sind M , M' , M'' , M''' , ... und M_0 , M_1 , M_2 , M_3 , Dabei sind sich entsprechende Symbole beider Formulierungen jederzeit austauschbar (z.B. M'' und M_2). Alle Konzentrationen können optional in eckige Klammern gesetzt werden. Das Argument wird in arithmetischer Form angegeben, d.h. es besteht aus einer '+'-separierten Liste von gewichteten Spezieskonzentrationen, die je aus Koeffizient und Spezies bestehen. Zwischen Koeffizient und Spezies kann optional ein '*' gesetzt werden. Außerdem kann das Schlüsselwort 'other' oder 'others' verwendet werden, das stellvertretend für alle nicht spezifizierten Spezies steht. Werden verschiedene inerte Stoßpartner definiert, so geschieht dies in verschiedenen Statements.

Beispiel: `let [M'] = 6.5 [CH4] + 6.5 [H2O] + 1.5 [CO2] + 0.75 [CO] + 0.4 [O2] + 0.4 [N2] + 1.0 [OTHER]`.

Die Definition einer Reaktion wird durch ein Label eingeleitet, das aus höchstens 31 Zeichen besteht, und durch einen Doppelpunkt abgeschlossen wird. Für Vorwärts- und Rückwärtsreaktionen wird das gleiche Label verwendet, wobei das Label der Vorwärtsreaktion auf 'f', und das der Rückwärtsreaktion auf 'b' endet. Hierauf folgt die Reaktionsgleichung. Als Zuweisungsoperatoren können '>' oder '>=' für Vorwärtsreaktionen, '<-' oder '<=' für Rückwärtsreaktionen und '>=' für Reaktionen im chemischen Gleichgewicht verwendet werden. Als Separatoren zwischen den einzelnen Spezies wird ein '+' benutzt, zwischen Spezieskoeffizienten und Spezies werden keine Separatoren benötigt. Abgeschlossen wird die Definition von einem Ausdruck in geschweiften Klammern, der seinerseits Ausdrücke für die Konstanten der Reaktion und möglicherweise eine Gleichung für die Berechnung des im Lindemannansatz enthaltenen Wertes F_c enthält. Für jede Reaktion muß hier der Frequenzfaktor mit dem Symbol 'a' oder 'b', der Temperaturex-

ponent mit dem Symbol 'n' (unabhängig von der Deklaration in **temperature exponent**) und die Aktivierungsenergie mit dem Symbol 'e' angegeben werden. Als Zuweisungsoperator wird '=' benutzt, als Separator zwischen den einzelnen Ausdrücken kann Blank, Tab, Newline, ';', ',' oder ':' verwendet werden. Der zugewiesene Wert kann in wissenschaftlicher Notation angegeben werden. Hierbei wird ein 'e' zur Einleitung einer Zehnerpotenz verwendet. Bei druckabhängigen Reaktionen müssen diese Werte zusätzlich für $p \rightarrow \infty$, wobei p den Druck bezeichnet, angegeben werden. Mögliche Symbole, hier nur am Beispiel des Frequenzfaktors dargestellt, sind 'ai', 'a_i', 'ainf' oder 'a_inf'. Weiterhin muß für druckabhängige Reaktionen eine Gleichung für F_c angegeben werden, deren Notation in C Syntax erfolgt. Diese Gleichung wird eingeleitet durch das Symbol 'fc', gefolgt von einem Zuweisungsoperator und einem von der Temperatur abhängenden Ausdruck, wobei die Temperatur durch ein großes 'T' dargestellt wird. Abgeschlossen wird die Gleichung durch ein Semikolon.

Beispiel: 34: CH3 + H -> CH4 { A = 6.257e23 n = -1.8 E = 0
ainf = 2.108e14 ninf = 0 Einf = 0
fc = 0.577 * exp(-T / 2370.0); }

4.2.5 Allgemeines

Kommentare werden eingeleitet durch ein '#' und sind nur in der aktuellen Zeile gültig. Kommentare, die vor der Definition einer Reaktion erscheinen, werden gespeichert, und tauchen bei der Erstellung einer L^AT_EX-Tabelle an gleicher Stelle wieder auf.

Grundsätzlich ist ScanMan nicht abhängig von Groß- und Kleinschreibung. Auf Ausnahmen ist in dieser Beschreibung explizit hingewiesen.

Blanks, Tabs und Newlines können an allen Stellen der Eingabedatei in beliebiger Anzahl auftreten, solange dadurch keine Symbole zerstört werden.

Erlaubte Separatoren von Listen sind immer Blank, Tab und Newline. Andere Separatoren werden nur der besseren Übersichtlichkeit halber eingeführt.

Da bei der Konsistenzüberprüfung der Spezies nur deren Zusammensetzung und Isomerie geprüft werden, müssen diese an verschiedenen Stellen nicht

lexikalisch, sondern nur den genannten Prüfkriterien entsprechend gleich angegeben werden. Beim Aufbereiten der Stoffdaten kann allerdings ein zusätzlicher lexikalischer Vergleich nötig werden, wenn Moleküle gleicher Zusammensetzung, aber unterschiedlicher Struktur, in der die Stoffdaten enthaltenden Datei nur durch die Schreibweise unterschieden werden (z.B. CH₂OH und CH₃O). Ein solcher Konflikt wird zunächst durch lexikalischen Vergleich gelöst. Wird in der Stoffdatendatei keine Spezies gefunden, deren Name exakt dem Gesuchten entspricht, wird die erste gefundene Spezies gewählt. Auf jeden Fall aber wird eine Warnung und die Lösung des Konfliktes ausgegeben. Eine streng lexikalische Suche kann durch eine entsprechende Kommandozeilenoption vorgeschrieben werden.

Bei der Konsistenzüberprüfung werden unter anderem Vorwärts- und Rückwärtsreaktionen gegeneinander überprüft. Dabei werden fehlende Konstanten der Arrheniusgleichung bei druckabhängigen Reaktionen berechnet; es dürfen daher bei der Definition von druckabhängigen Vorwärts- und Rückwärtsreaktionen insgesamt nur drei unabhängige Konstantensätze angegeben werden. Wird ein vierter Konstantensatz angegeben, so muß dieser aus den vorhergehenden und dem Massenwirkungsgesetz folgen. Weiterhin muß die Gleichung für F_c nur für Vorwärts- oder Rückwärtsreaktion angegeben werden.

4.2.6 Aufruf und Kommandozeilenoptionen

ScanMan wird durch den Aufruf

```
ScanMan -i <mechanismFile> [-o outFile] [-t <thermoData>] [-abcdhprsuLS3]
```

gestartet. Dabei können die in eckigen Klammern stehenden Argumente optional angegeben werden. Die Bedeutung der einzelnen Argumente wird im folgenden erläutert:

- **-i:** Der Name der Eingabedatei folgt.
- **-o:** Der Name der Ausgabedatei folgt. Wird dieses Argument nicht angegeben, entspricht der Name der Ausgabedatei dem der Eingabedatei, gefolgt von '.pre'; endet die Eingabedatei auf '.mech' wird dieses durch

'pre' ersetzt.

- **-t**: Der Name der Stoffdatendatei folgt. Fehlt dieses Argument, so wird davon ausgegangen, daß der Name der Stoffdatendatei 'thermdat.bin' ist, und der zugehörige Pfad in der Shell-Variablen 'myData' zu finden ist.
- **-a**: Es wird eine Liste der deklarierten und der tatsächlich verwendeten Atome ausgegeben.
- **-b**: Es wird eine Liste der für die Berechnung des im Lindemannansatz enthaltenen Erweiterungsfaktors benötigten empirischen Funktionen F_c ausgegeben.
- **-c**: Die Überprüfung von Vorwärts- gegen Rückwärtsreaktion wird unterdrückt.
- **-d [scanner,parser]**: Es werden alle Scanner- und/oder Parseraktionen angezeigt
- **-h**: Es werden einige für die Verwendung des Programmes wichtige Informationen ausgegeben (entspricht im wesentlichen dieser Liste). Danach wird die Programmausführung abgebrochen.
- **-p**: Der Scannerfortschritt wird ausgegeben.
- **-r**: Es wird eine Liste der angegebenen Reaktionen ausgegeben.
- **-s**: Es wird eine Liste der verwendeten Spezies ausgegeben.
- **-u**: Es wird eine Liste der erlaubten und der verwendeten Einheiten ausgegeben.
- **-3**: Es wird eine Liste der verwendeten inerten Stoßpartner und deren Definition ausgegeben.
- **-L**: Es wird ein \LaTeX -File zur Erstellung einer Tabelle der eingelesenen Reaktionen erzeugt. Der Name des Files entspricht dem Namen der Eingabedatei gefolgt von '.tex'; endet die Eingabedatei auf '.mech' wird dieses durch '.tex' ersetzt.

- **-S:** Spezies werden in der Stoffdatendatei nur durch lexikalischen Vergleich gesucht.
- **-3:** Es wird eine Liste der verwendeten inerten Stoßpartner und deren Definition ausgegeben.

4.3 Das Programm FlameMaster

Das Programm **FlameMaster** berechnet eindimensionale Gegenstromdiffusionsflammen mit komplexer Chemie. Es ist konzeptionell so angelegt, daß sich andere Konfigurationen hinzufügen lassen, ohne auf strukturelle Probleme zu treffen. So sind in nächster Zeit die folgenden Erweiterungen geplant:

- Erweiterung zulässiger Randbedingungen (z.B. Tsuji-Randbedingungen)
- Berechnung von Vormischflammen
- Instationäre Berechnung von Diffusions- und Vormischflammen
- Unterstützung von reduzierten Mechanismen

Das Programm muß nicht installiert werden, d.h. es bedarf keines vom Anwender geschriebenen Quellcodes. Es ist geschrieben für Apple Macintosh Computer und HP Workstations (getestet mit HP Apollo 700). Das ausführbare Programm wird mit einem C++ Compiler erzeugt. Dabei müssen die vom Präprozessor erzeugten C Files 'Broadening.C und Broadening.h' verwendet werden.

Die für den Programmlauf benötigten Eingaben sind auf drei Dateien aufgeteilt:

- **Steuerdatendatei:** Diese Datei enthält Steuerdaten und Randbedingungen, u.a. auch die willkürlichen Namen der beiden folgenden Eingabedateien. Der Name dieser Datei wird beim Aufruf des Programmes in der folgenden Form angegeben:

FlameMaster -i <inputFileName>

Wird dieser Name nicht angegeben, so wird angenommen, daß die Datei den Namen `FlameMaster.input` hat.

- **Präprozessordatei:** Diese Datei wird durch den Präprozessor `ScanMan` erzeugt.
- **Startlösungsdatei:** Diese Datei enthält eine Startlösung für die Newtoniteration. Die darin enthaltenen Daten sind in dem in [16] vorgestellten Flameletformat abgelegt. Da die Ausgabedateien dieses Programmes ebenfalls das erwähnte Flameletformat benutzen, können diese sofort als Startlösungsdatei verwendet werden.

4.3.1 Syntax der Steuerdatendatei

Der syntaktische Aufbau der Steuerdatendatei ist ähnlich dem der Eingabedatei des Vorlaufprogrammes. Der Einfachheit halber kann hier jedoch das Schlüsselwort 'let' unterbleiben. Auch für Kommentare gelten die gleichen Regeln wie für die Eingaben des Vorlaufprogrammes. Da es in der Steuerdatendatei nur Definitionen, also keine Deklarationen gibt, ist die Reihenfolge der Statements völlig beliebig. Gültige Zuweisungsoperatoren sind '=' und 'is'.

Eine Besonderheit ergibt sich durch das Zusammenfassen von Statements zu sogenannten Statementblöcken. Ein Block wird dabei eingeleitet von einer Schlüsselsequenz. Darauf folgen eine linke geschweifte Klammer, ein oder mehrere Statements und eine rechte geschweifte Klammer. Ein Block bildet dann wieder ein Statement, d.h. Blöcke können ineinander verschachtelt werden. Blöcke werden bislang nur bei der Angabe der Randbedingungen verwendet.

4.3.2 Schlüsselsequenzen der Steuerdatendatei

Zulässige, einen Block einleitende Schlüsselsequenzen sind

- **Oxidizer Side:** Der Block beinhaltet die Randbedingungen im Oxidatorstrom

- **Fuel Side:** Der Block beinhaltet die Randbedingungen im Brennstoffstrom
- **Dirichlet:** Die im Block angegebenen Wertzuweisungen sind Dirichlet-randbedingungen
- **Gradient** oder **Neumann:** Die im Block angegebenen Wertzuweisungen sind Gradientenrandbedingungen

Die in den Blöcken gültigen Schlüsselsequenzen sind die Namen der abhängigen Variablen: 'f', 'f', 'T' und für die Randbedingungen der Spezies der Massenbruch '**Y**→<speciesName>', der Molenbruch '**X**→<speciesName>' und der Massenfluß '**massflux**→<speciesName>' oder '**epsilon**→<speciesName>'. Dabei dürfen an jedem Rand entweder nur Molenbrüche oder nur Massenbrüche angegeben werden. Spezies, die hier nicht explizit aufgeführt werden, wird der Wert Null zugewiesen. Beispiel:

```
Fuel Side {  
    dirichlet {  
        f = -6.0  
        T = 298.0  
        Y->C3H8 = 1.0  
    }  
}
```

Die außerhalb der Blocks zulässigen Schlüsselsequenzen sind:

- **MaxGridpoints:** Anzahl der bei der Gittergenerierung maximal zulässigen Gitterpunkte. Dabei darf die Anzahl der Stützstellen des Startprofils größer sein; dieses wird dann aber auf ein äquidistantes Gitter interpoliert. Zulässige Argumente sind Integerwerte.
- **InitialGridpoints:** Zu Beginn des Programmablaufs kann entweder mit dem eingelesenen oder mit einem äquidistanten Gitter gearbeitet werden. Ist 'InitialGridpoints' kleiner oder gleich der Anzahl der

eingelesebenen Gitterpunkte und die Anzahl der eingelesebenen Gitterpunkte kleiner oder gleich 'MaxGridpoints', so wird das eingelesebene Gitter verwendet. Anderenfalls wird ein äquidistantes Gitter mit 'InitialGridpoints' Gitterpunkten generiert. Zulässige Argumente sind Integerwerte.

- **InitialEquations:** Diese Option kann eingeführt werden, um ein gutes Startprofil zu erhalten. Es werden dann nur die ersten 'InitialEquations' Gleichungen gelöst; die restlichen Variablen mit Ausnahme der Temperatur werden konstant gehalten. Die Temperatur wird aus der Burke-Schumann-Lösung des Flammenflächenmodells berechnet. Kann hierfür eine konvergente Lösung gefunden werden, so wird in einem Fortschrittsverfahren die Anzahl der abhängigen Variablen solange um eins erhöht, bis das komplette System gelöst wird. Der Defaultwert von 'InitialEquations' ist die Anzahl aller Gleichungen. Zulässige Argumente sind Integerwerte.
- **Left:** Linker Rand des Integrationsgebietes. Der Wert bezieht sich auf das Koordinatensystem der eingelesebenen Startprofile und wird nur berücksichtigt, wenn vor Beginn der Rechnung ein neues Gitter generiert wird. Dies kann durch geeignete Wahl von 'InitialGridpoints' erzwungen werden. Zulässige Argumente sind Realwerte.
- **Right:** Rechter Rand des Integrationsgebietes. Ansonsten gilt das unter 'Left' erwähnte.
- **Flame:** 'Flame' gibt die zu berechnende Flammenkonfiguration an. Zulässige Argumente, d.h. bisher implementierte Konfigurationen, sind 'FlameSheet', die Burke-Schumann-Lösung des Flammenflächenmodells, und 'CounterflowDiffusion'. Wird das Flammenflächenmodell berechnet, sollte die Eingabedatei des Vorlaufprogrammes nur die Globalreaktion enthalten.
- **GlobalReaction:** Globalreaktion des verwendeten Mechanismus. Das Argument wird als Zeichenkette eingelesen, und muß mit einem Semikolon abgeschlossen werden. Blanks, Tabs und Newlines sind nicht

signifikant.

Beispiel: `GlobalReaction is C3H8 + 5O2 == 3CO2 + 4H2O;`

- **Fuel:** Auswirkungen auf die Lösung ergeben sich hieraus nur für die Lösung des Flammenflächenmodells. Das Argument wird als Zeichenkette eingelesen und sollte der Zeichenkette des im Mechanismus verwendeten Brennstoffs entsprechen.
- **Oxidizer:** Siehe 'Fuel'.
- **ConstantLewisNumber:** Zulässige Argumente sind 'TRUE' und 'FALSE'. Bei der Rechnung mit konstanten Lewiszahlen (TRUE) werden diese aus der Startverteilung an der Stelle der maximalen Temperatur errechnet. Der Diffusionskoeffizient für die Spezies i folgt daraus mit $D_i = \lambda / \rho c_p Le_i$.
- **ComputeWithRadiation:** Zulässige Argumente sind 'TRUE' und 'FALSE'. Bei der Rechnung ohne Strahlung (FALSE) wird der Strahlungsquellterm in der Temperaturgleichung vernachlässigt.
- **GotoFuel:** Diese Option kann benutzt werden, um eine Startlösung für einen neuen Brennstoff zu erhalten. Es wird ein Fortschrittsverfahren durchgeführt, bei dem nach erfolgter Konvergenz dem neuen Brennstoff solange 5% der Gesamtmasse hinzugefügt werden, bis der Brennstoffstrom nur noch aus diesem besteht. Kann für einen Schritt keine Konvergenz erzielt werden, wird bislang keine Schrittweitenkorrektur durchgeführt. Das Argument ist der neue Brennstoff. Er wird als Zeichenkette angegeben, und sollte dem im Mechanismus verwendeten Symbol entsprechen.
- **Pressure:** Der Druck wird in $[N/m^2]$ angegeben. Zulässige Argumente sind Realwerte.
- **Strainrate:** Die Streckungsrate wird in $[1/s]$ angegeben. Zum Erstellen von Libraries kann 'Strainrate' mehrmals verwendet werden. Die zugehörigen Werte werden in einem Fortschrittsverfahren nach erfolgter Konvergenz in der Reihenfolge durchlaufen, in der sie eingelesen

wurden. Kann für einen Schritt keine Konvergenz erreicht werden, muß eine zusätzlicher Schritt eingeführt werden. Zulässige Argumente sind Realwerte.

- **ContinFlag:** Zulässige Argumente sind 'TRUE' und 'FALSE'. Mit dieser Option kann ein Lösungsfortschrittsverfahren mit gesteuerter Schrittweite zur Verbesserung der Konvergenz zugeschaltet werden. Der Fortschrittsalgorithmus liefert einen Parameter $0 \leq \phi \leq 1$, und wird verlassen, wenn ϕ den Wert eins annimmt. Dieser Parameter kann nur programmintern verwendet werden.
- **TimedepFlag:** Zulässige Argumente sind 'TRUE' und 'FALSE'. 'TRUE' schaltet eine Pseudozeititeration ein.
- **DampFlag:** Zulässige Argumente sind 'TRUE' und 'FALSE'. Wird 'DampFlag' der Wert 'TRUE' zugewiesen, wird ein gedämpftes Newtonverfahren benutzt.
- **UseModifiedNewton:** Zulässige Argumente sind 'TRUE' und 'FALSE'. Wird 'UseModifiedNewton' der Wert 'TRUE' zugewiesen, wird ein modifiziertes Newtonverfahren verwendet.
- **ContSteps:** Das Argument dieser Option wird nur verwendet, wenn 'ContinFlag' der Wert 'TRUE' zugewiesen wurde. Das Argument von 'ContSteps' gibt die Zahl der Schritte des Lösungsfortschrittsverfahrens an, die durchgeführt werden, wenn keine Schrittweitenanpassung durchgeführt wird. Zulässige Argumente sind Integerwerte.
- **LambdaMin:** Das Argument dieser Option ist der kleinstmögliche Dämpfungsfaktor. Zulässige Argumente sind Realwerte.
- **DeltaNewGrid:** Das Argument dieser Option ist die maximale Anzahl an Newtoniterationsschritten von einer Gittergenerierung zur nächsten. Zulässige Argumente sind Integerwerte.
- **OneSolutionOneGrid:** Zulässige Argumente sind 'TRUE' und 'FALSE'. Ist 'OneSolutionOneGrid' 'TRUE', so wird für jede Lösung

mindestens einmal ein adaptives Gitter generiert. Dies geschieht entweder, wenn 'DeltaNewGrid' Iterationsschritte durchlaufen sind, oder wenn die Norm des Residuums und die Norm des Lösungsincrementes kleiner als 10^{-2} sind.

- **R:** Dies ist ein Parameter des Gittergenerators. Er ist ein Maß für die globale Gitterstreckung $R = \Delta\eta_{\max}/\Delta\eta_{\min}$. Zulässige Argumente sind Realwerte.
- **Q:** 'Q' ist ein weiterer Gitterparameter, und ein Maß für den maximal erlaubten Fehler. Mit diesem Parameter wird die erforderliche Anzahl an Gitterpunkten berechnet. Wird 'Q' ein Wert kleiner Null zugewiesen, so wird die Anzahl der Gitterpunkte nicht geändert, die vorhandenen Gitterpunkte werden also nur neu verteilt. Zulässige Argumente sind Realwerte.
- **TolRes:** Toleranz für die Norm des Residuums. Zulässige Argumente sind Realwerte.
- **TolDy:** Toleranz für die Norm des Lösungsincrementes. Konvergenz wird dann signalisiert, wenn entweder die Norm des Residuums 'TolRes' oder die Norm des Lösungsincrementes 'TolDy' unterschreitet. Zulässige Argumente sind Realwerte.
- **MaxIter:** Maximale Anzahl an Newtoniterationen. Wird diese Anzahl an Iterationen überschritten, wird die Rechnung abgebrochen. Zulässige Argumente sind Integerwerte.
- **MechanismFile:** Das Argument ist der Name der Ausgabedatei des Präprozessors.
- **StartProfilesFile:** Das Argument ist der Name der Startlösungsdatei.

Für alle logischen Variablen ist dabei der Defaultwert 'FALSE'.

4.3.3 Ausgabe

Die Ausgabe des Programms bei erfolgter Konvergenz ist ein Flameletfile in dem in [16] beschriebenen Format. Dieser enthält die Konzentrationsprofile aller beteiligten Spezies, das Geschwindigkeitsfeld, die Temperatur und die skalare Dissipation. Zudem enthält die Datei einige skalare Größen der Lösung, wie maximale Temperatur und stöchiometrische skalare Dissipation, und Angaben über Besonderheiten der Rechnung, wie z.B. konstante Lewiszahlen, Streckungsrate und Druck. Ein solcher Flameletfile kann direkt als Startprofil für weitere Rechnungen verwendet werden. Der Name enthält Informationen über Parameter und Randbedingungen der Rechnung. Ein Beispiel für einen Dateinamen ist `C3H8_p01a00100tf0298to0298`. Hierin ist `C3H8` der Brennstoff, `p01` bedeutet einen Druck von 1 bar, `a00100` eine Streckungsrate von 100 s^{-1} , `tf0298` eine Brennstoffrandtemperatur von 298 K und `to0298` eine Oxidatorrandtemperatur von 298 K. Zur Umformatierung der Flameletfiles in Datensätze, die von kommerziellen Graphikprogrammen verarbeitet werden können, steht das Programm `ListTool` von Josef Göttgens zur Verfügung.

Zur Überprüfung von Zwischenergebnissen wird nach jedem Iterationsschritt der Lösungsvektor in eine Datei geschrieben. Hierfür werden jedoch maximal zehn Dateien erzeugt; ist die Anzahl der Iterationsschritte größer, werden die Dateien überschrieben. Der Name der Dateien endet mit der letzten Ziffer der jeweiligen Iterationsnummer. Diese Dateien können nicht als Startprofil verwendet werden.

Um das Konvergenzverhalten der einzelnen Variablen verfolgen zu können, wird eine Datei mit dem Namen `residuals.out` erzeugt. Diese enthält die Normen der Residuen für jede Variable.

5 Ergebnisse

In diesem Abschnitt soll zunächst das Lösungsverhalten des Programmes vorgestellt werden. Daraufhin werden die Ergebnisse der Berechnung einer Propanflamme vorgestellt.

Das Lösungsverhalten des Programmes **FlameMaster** ist im Rahmen der Vergleichsmöglichkeiten als gut zu bezeichnen. So werden beispielsweise für die Berechnung einer Propanflamme mit einer Streckungsrate von 500 s^{-1} , 107 Reaktionen und 31 Spezies auf einem Gitter mit 141 Gitterpunkten zwölf Newtoniterationsschritte und 40 Sekunden benötigt. Diese Rechnung wurde mit einer Workstation HP Apollo 700 durchgeführt. Dabei wurde als Startprofil die Lösung einer Propanflamme mit einer Streckungsrate von 100 s^{-1} verwendet.

In einem Vergleich mit dem Programm **RUN1DL** ergab sich eine um den Faktor 15 kürzere Zeit pro Iterationsschritt. Dies kann allerdings nur als grober Anhaltspunkt gelten, da die Iterationszeit von **RUN1DL** möglicherweise durch geschickte Wahl der Steuerparameter verringert werden kann. Weiterhin benötigt **FlameMaster** in dem durchgeführten Vergleich nur etwa 75% des von **RUN1DL** belegten Speicherplatzes. Dies setzt bei **RUN1DL** aber eine vom Anwender vor dem Kompilieren vorgenommene Speicheranpassung voraus, während **FlameMaster** über voll dynamische Speicherplatzverwaltung verfügt und somit jegliche manuelle Anpassung an den benötigten Speicherplatz wegfällt.

Der adaptive Gittergenerator zeigt eine sehr gute räumliche Auflösung, bei der auch sehr schmale Profile durch eine ausreichende Anzahl an Gitterpunkten dargestellt werden. Besonders deutlich wird dies am Beispiel des Konzentrationsprofils der Spezies CH, das in Abb. 3 dargestellt ist.

Um eine entsprechende Auflösung mit einem äquidistanten Gitter zu erzielen, müßte dieses etwa die zehnfache Anzahl an Stützstellen besitzen. Hierbei kommt dem Gitter zugute, daß die Gittergenerierung auf dem Abbruchfehler aller abhängiger Variablen beruht und nicht etwa nur auf dem Abbruchfehler der Temperatur.

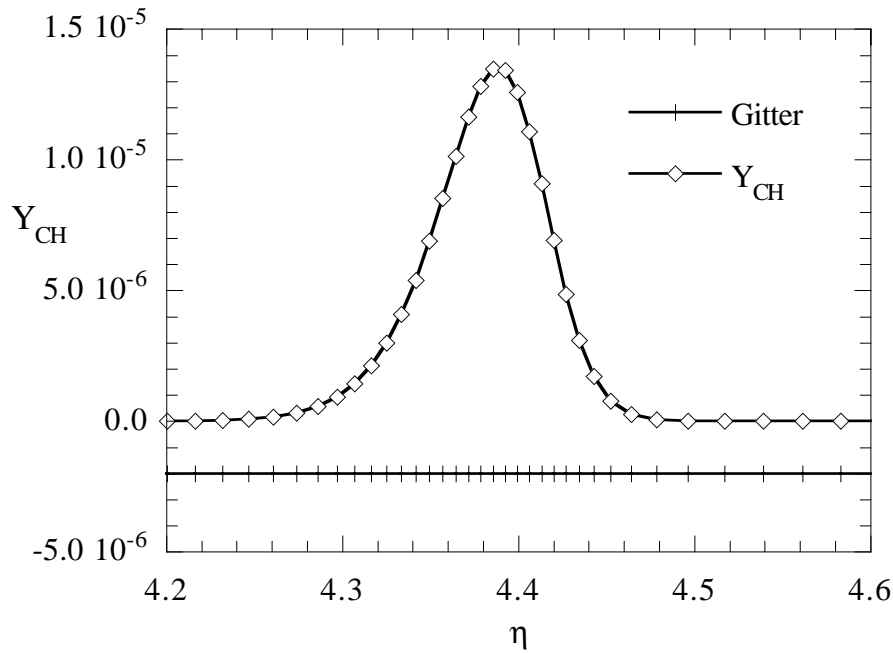


Abbildung 3: Konzentrationsprofil der Spezies CH. Das Verhältnis des gezeigten Ausschnitts zum gesamten Integrationsgebiet ist etwa 1:40.

In Abb. 4 ist das Temperaturprofil im Vergleich mit der Gitterschrittweite dargestellt.

Es zeigt sich, daß eine nur von der Temperatur abhängende Gittergenerierung zwar ein ähnliches Gitter liefern würde, außerhalb des Bereiches großer Temperaturänderungen auftretende Konzentrationsmaxima würden dadurch jedoch nicht erfaßt. Bei dem hier verwendeten Gittergenerator hingegen erkennt man, wie Abb. 5 zeigt, die Anpassung des Gitters an das Konzentrationsmaximum der Spezies $n\text{-C}_3\text{H}_7$ und $i\text{-C}_3\text{H}_7$. Eine weitere Eigenschaft, die der durch lokalen Abbruchfehler gesteuerte Gittergenerator im Gegensatz zu einem gradienten- oder krümmungsgesteuerten Gittergenerator besitzt, ist die Anpassung des Gitters an numerisch schwierige Gebiete. So kommt es beispielsweise im Bereich des kalten Brennstoffs häufiger zu numerischen Problemen. Diese werden bei einer Gittergenerierung durch eine Stützstellenanhäufung kompensiert, die sich aber nach einer weiteren Gittergenerierung, die in der Nähe der konvergenten Lösung vorgenommen wird, wieder auflöst.

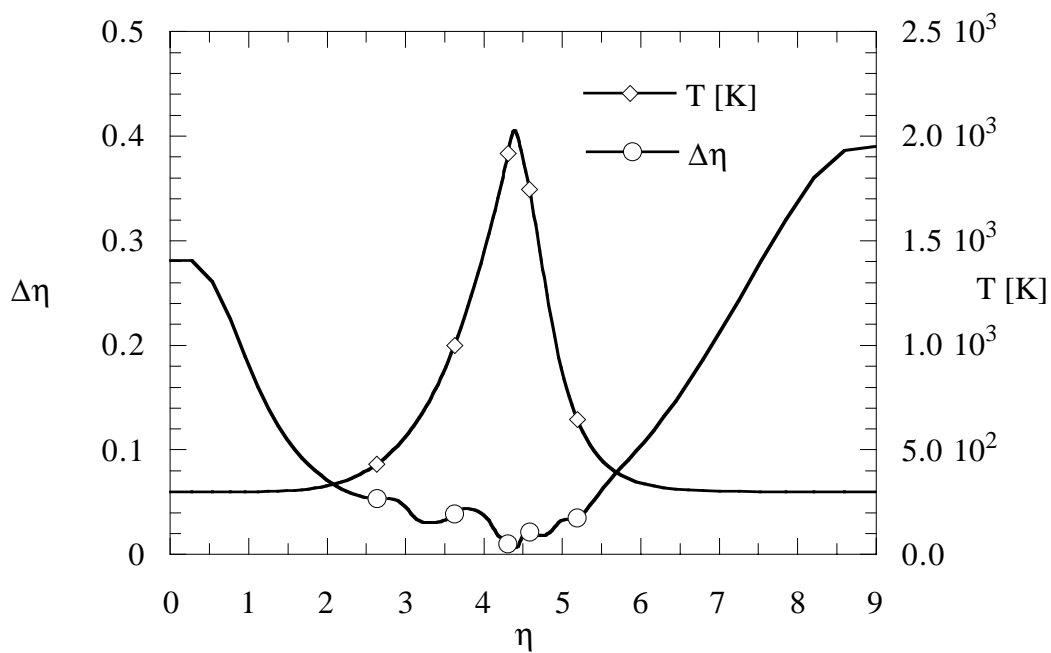
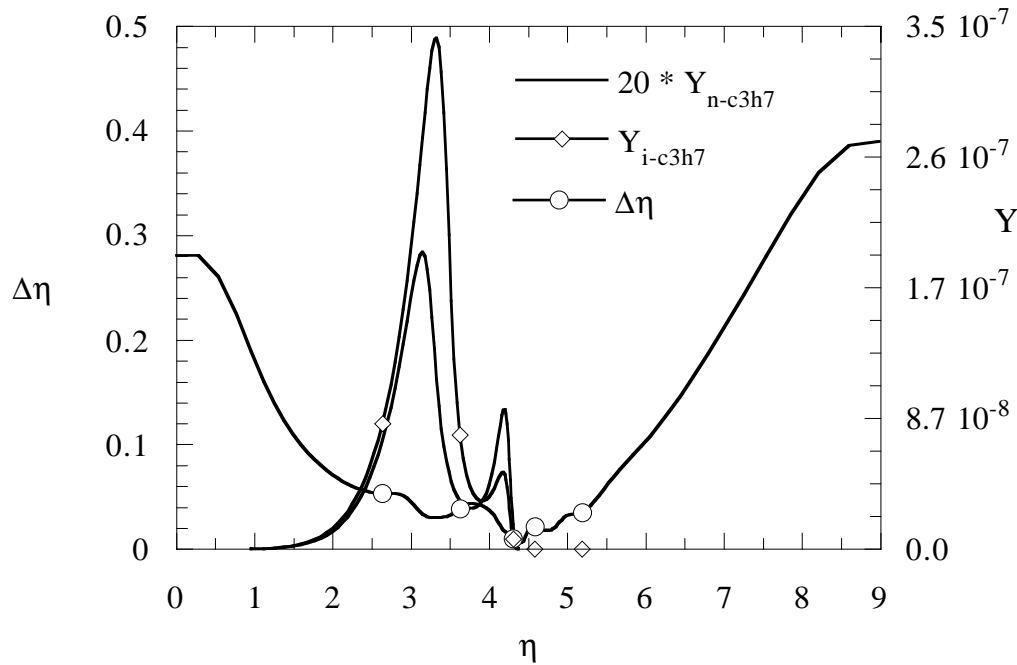


Abbildung 4: Temperaturprofil im Vergleich mit der Gitterschrittweite

Abbildung 5: C_3H_7 -Profile im Vergleich mit der Gitterschrittweite

Die Ergebnisse der Berechnung einer Propanflamme werden hier in Abhängigkeit von den Parametern Streckungsrate und Druck dargestellt. Die Streckungsrate gibt dabei den Einfluß des Strömungsfeldes wieder. Dieser Einfluß kann andererseits nach [1] durch die skalare Dissipationsrate χ , definiert durch

$$\chi = 2a \frac{C}{\text{Pr}} \left(\frac{d\xi}{d\eta} \right) \quad (99)$$

wiedergegeben werden. Dabei ist $\text{Pr} = \mu c_p / \lambda$ die Prandtl-Zahl und C der in Gl. (17) definierte Chapman-Rubeson-Parameter. Nach [1] kann die skalare Dissipationsrate nun als eine Diffusivität im Mischungsbruchraum aufgefaßt werden. Weiterhin beinhaltet χ den Einfluß der Konvektion. Wird χ nun in der Reaktionszone durch steigende Streckungsrate über einen Wert χ_q hinaus erhöht, so kann die chemische Produktion von Wärme den Transport von Wärme aus der Reaktionszone heraus nicht mehr kompensieren, und die Flamme erlischt. Liñán [17] zeigt diesen Effekt für Gegenstromdiffusionsflammen durch asymptotische Entwicklung für große Damköhlerzahlen und große Aktivierungsenergien. Er erhält dadurch die in Abb. 6 gezeigte sogenannte S-Kurve, die das Verhalten der stationären Zustände am Beispiel der maximalen Temperatur wiedergibt.

Mit Hilfe einer Stabilitätsanalyse kann gezeigt werden, daß der mittlere Ast dieser Kurve instabil ist. Es folgt daraus, daß der stationäre Flammzustand vom oberen auf den unteren Ast springt, wenn χ über den kritischen Wert χ_q hinaus erhöht wird. Der Löschpunkt ist somit dann erreicht, wenn bei größer werdendem χ die S-Kurve vom oberen in den mittleren Ast übergeht, d.h. wenn die Tangente an diese Kurve eine Senkrechte ist.

Abb. 7 zeigt den oberen Ast der S-Kurve für die vorliegende Rechnung. Dabei ist die Maximaltemperatur als Funktion vom Logarithmus der Streckungsrate aufgetragen. Der Löschpunkt ergibt sich damit für eine Streckungsrate von $a = 935\text{s}^{-1}$ oder einer stöchiometrischen skalaren Dissipationsrate von $\chi = 40\text{s}^{-1}$. Die maximale Flammentemperatur hierfür ist $T_{\text{max}} = 1695\text{K}$. Dies ist in guter Übereinstimmung mit den Ergebnissen aus [18], wo in einer numerischen Rechnung eine Löschgrenze von $a = 880\text{s}^{-1}$ mit einer maximalen Flammentemperatur von ca. $T_{\text{max}} = 1670\text{K}$ gefunden wurde.

Konzentrationsprofile für die Streckungsraten $a = 10, 100, 900 \text{ s}^{-1}$ sind für einen Umgebungsdruck von 1 bar in Anhang D.1 dargestellt. Der Ursprung der Koordinate y ist dabei in den Punkt des stöchiometrischen Mischungsverhältnisses $Z_{st} = 0.06010$ gelegt.

Als Folge der größer werdenden Wärmeabfuhr bei steigender Streckungsrate wird die Reaktionszone immer kleiner. Weiterhin schiebt sich die Reaktionszone immer weiter zum Punkt stöchiometrischer Mischung. Dies ist in den in Abb. 8 dargestellten Temperaturprofilen, im Brennstoffkonzentrationsprofil Abb. 40 und in den Konzentrationsprofilen der Kettenträger H, OH und O, dargestellt in Abb. 12, 13 und 14, zu erkennen. Dabei sind die Unterschiede in den Maximalkonzentrationen bei verschiedenen Streckungsraten für diese Radikale recht klein. Große Unterschiede in den Maximalkonzentrationen treten jedoch für die Radikale CHO, C_2H_3 und C_2H_5 auf. Es kommt hierbei zu Konzentrationssteigerungen von mehr als zwei Größenordnungen. Für einige Spezies zeigt sich, daß die Maximalkonzentrationen der Zwischenprodukte mit steigender Streckungsrate zunächst anwachsen und im weiteren wieder abfallen. Bei der höchsten hier gezeigten Streckungsrate von $a = 900\text{s}^{-1}$ ist ein Abfallen der Maximalkonzentrationen gegenüber der Streckungsrate $a = 100\text{s}^{-1}$ vornehmlich für die Endprodukte H_2O und CO_2 , Abb. 16 und 20, aber auch für höhermolekulare Radikale wie CH_2 , C_2H , CHCO und C_3H_3 (Abb. 23, 28, 30 und 31) zu erkennen. Dies kann dadurch erklärt werden, daß bei steigender Streckungsrate (also kleiner werdender Verweilzeit in der Flamme) die Kettenreaktionen nicht mehr bis zum Ende durchlaufen werden können, sich so also die Reaktionsenergie in den Zwischenprodukten sammelt, was gleichzeitig zu einem Abfall der maximalen Temperatur führt. Die Maximalkonzentrationen der übrigen Spezies aber steigen zunächst weiter an, bis die Temperatur so klein wird, daß sich auch der Brennstoffzerfall einstellt, und die Flamme vollends verlöscht. Dieses Nachlassen des Brennstoffzerfalls tritt bei der hier betrachteten Streckungsrate von $a = 900\text{s}^{-1}$ noch nicht auf, wie an den noch ansteigenden Konzentrationen der Produkte dieses Zerfalles $n\text{-C}_3\text{H}_7$, Abb. 38, und $i\text{-C}_3\text{H}_7$, Abb. 39 zu sehen ist. Wie Abb. 11 aber zeigt, kann der in die Reaktionszone eintretende Sauerstoff aufgrund der kurzen Verweilzeit nicht mehr vollständig verbraucht werden, und es tritt Sauerstoff

durch die Reaktionszone hindurch.

Die druckabhängige Betrachtung zeigt ähnliche Ergebnisse. Wie zu erwarten, kommt es zu einer Verkleinerung der Reaktionszone und einer Erhöhung der Maximaltemperatur bei steigendem Druck (Abb. 9). Weiterhin nähert sich die Reaktionszone immer mehr dem Punkt stöchiometrischer Mischung an. Dies läßt sich dadurch erklären, daß die Reaktionsgeschwindigkeiten bei höheren Drücken größer, und somit die charakteristischen Reaktionszeiten kleiner werden. Die Energieumsetzung erfolgt damit bei hohen Drücken auf einem kleineren Raum als bei niedrigen. Im Einklang hiermit steht die Abnahme der Maximalkonzentrationen der aktiven Kettenträger H, OH und O, deren Konzentrationsprofile in Abb. 43, 44 und 45 dargestellt sind. Besonders stark zeigt sich dies bei den Radikalen H und O, wobei es zu einer Änderung um ungefähr eine Größenordnung kommt. Ebenso wie auf die Variation der Streckungsrate reagieren die Radikale CHO und C₂H₃ auch hier sehr viel stärker (Abb. 53 und 63). Die Änderungen, die in dieser Größenordnung auch bei CH und C₃H₃ (Abb. 52 und 62) auftreten, liegen dabei im Bereich von zwei Zehnerpotenzen. Auch die Maximalkonzentrationen aller anderer beteiligten Zwischenprodukte bis auf CH₄ (Abb. 57), das aber für den Propanmechanismus eine untergeordnete Rolle spielt, fällt mit steigendem Druck. Die Maximalkonzentration der Produkte der Bruttoreaktion H₂O und CO₂ hingegen steigt ebenso wie die Temperatur, da der gleiche Umsatz auf kleinerem Raum geleistet wird (Abb. 47 und 51). Zu erwähnen bleibt noch ein interessanter Effekt in der C₃-Kette für die Spezies C₃H₄, C₃H₅, C₃H₆ und *n*-C₃H₇. Es kommt hier bei steigendem Druck zunächst zu einem Abfall in der Maximalkonzentration, bei sehr hohen Drücken aber wieder zu einem Anstieg (Abb. 66, 67, 68 und 69).

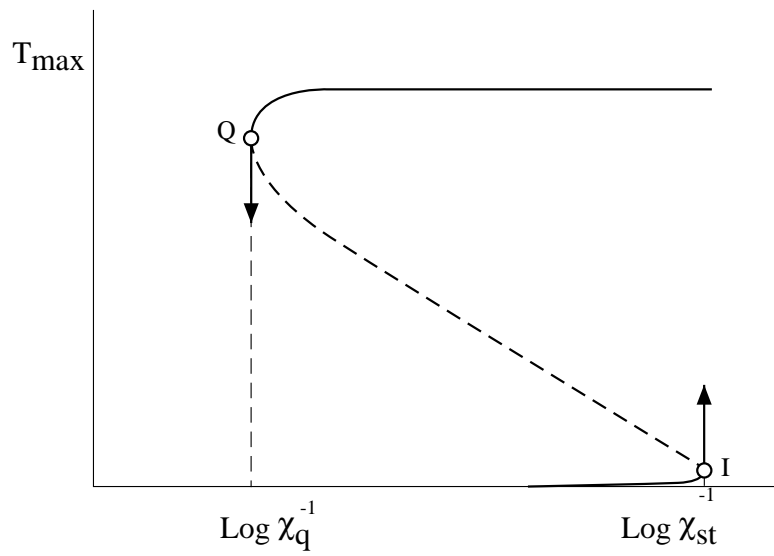


Abbildung 6: S-Kurve für stationäre Flammenzustände mit Löschpunkt (Q) und Selbstzündungspunkt (I)

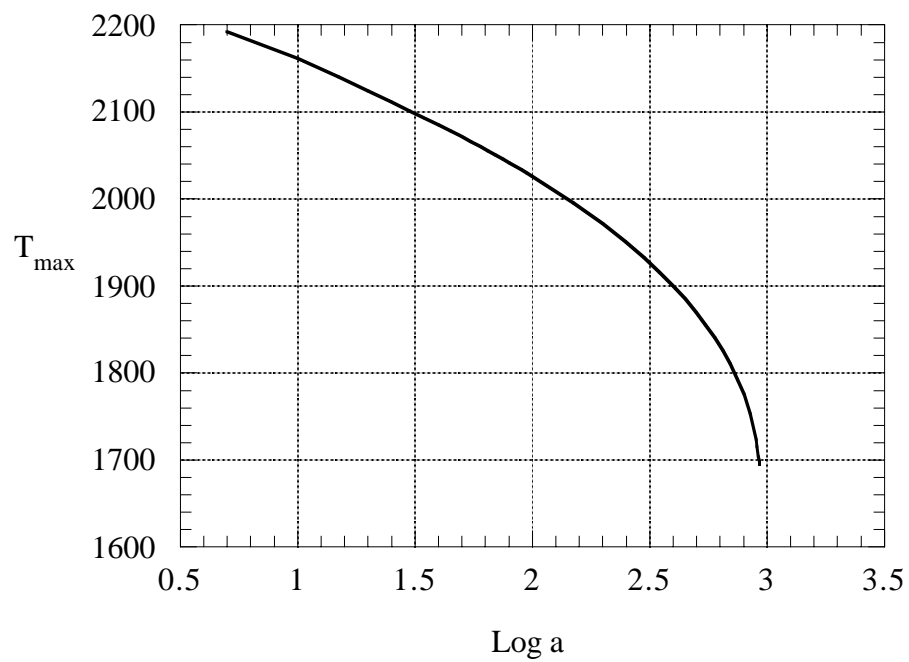


Abbildung 7: Maximale Flammentemperatur als Funktion der Streckungsrate für einen Umgebungsdruck von 1 bar

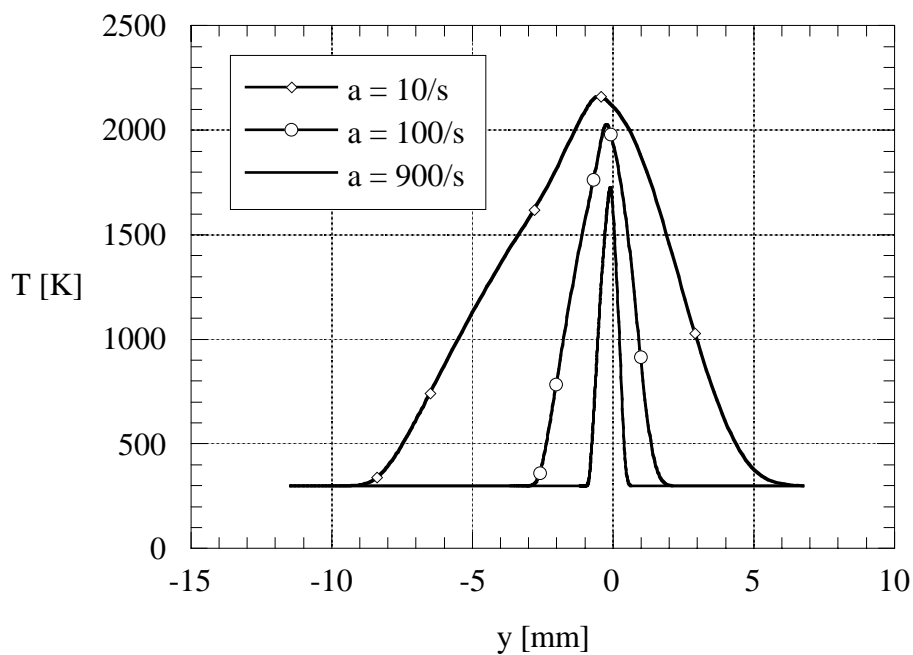


Abbildung 8: Temperaturverlauf für verschiedene Streckungsraten

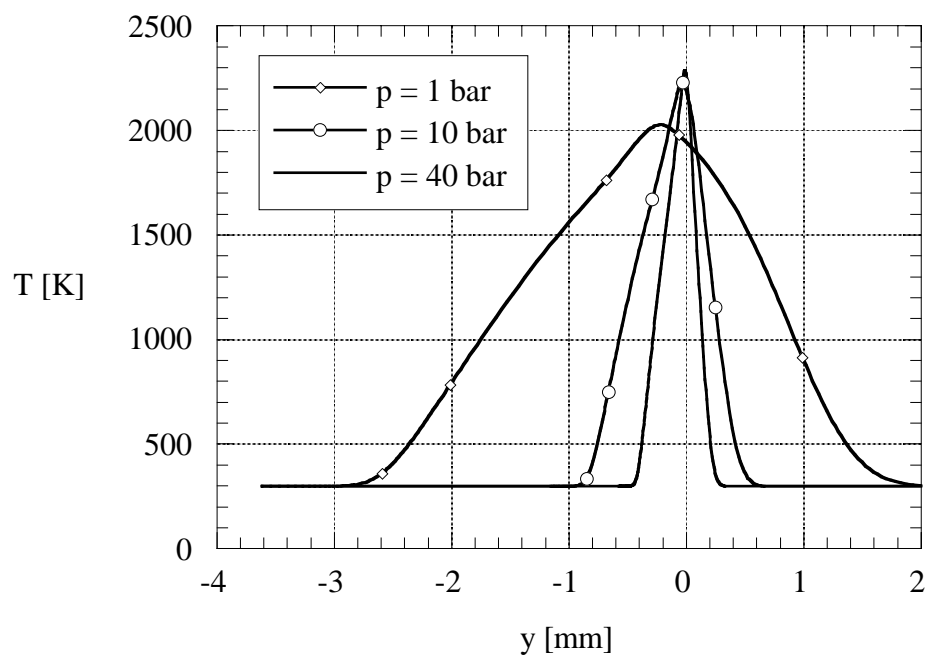


Abbildung 9: Temperaturverlauf für verschiedene Drücke

6 Zusammenfassung

Dem dieser Arbeit zugrundeliegenden Flamelet-Konzept zufolge, können turbulente Diffusionsflammen als ein Ensemble laminarer Diffusionsflamelets betrachtet werden. Diese Flamelets haben eine der laminaren Gegenstromdiffusionsflamme sehr ähnliche skalare Struktur und können daher sehr gut durch diese approximiert werden. Die Transportgleichungen der ebenen, laminaren Gegenstromdiffusionsflamme kann mit Hilfe einer Ähnlichkeitstransformation in ein System gewöhnlicher Differentialgleichungen überführt werden, und es ergibt sich so die Möglichkeit, die Struktur turbulenter Flammen mit Hilfe eindimensionaler Gleichungen in einer Koordinate senkrecht zur Flammenfläche zu beschreiben.

Im Rahmen dieser Arbeit wurde ein Programmpaket zur Berechnung dieser laminaren Gegenstromdiffusionsflammen entwickelt. Dieses besteht aus einem Vorlaufprogramm, das den Reaktionsmechanismus einliest, auf Konsistenz überprüft und in geeigneter Weise aufbereitet, und einem Hauptprogramm, das die eigentliche Flammenberechnung vornimmt. Besonderes Augenmerk galt dabei der komfortablen Handhabung der Eingabedaten und einer überschaubaren Programmstruktur. Um dies zu erreichen, wurden zur Erstellung des Vorlaufprogramms die Programme der Free Software Foundation **Flex** und **Bison**, und zur Programmierung des Hauptprogramms die objektorientierte Programmiersprache C++ verwendet.

Zur Lösung des nichtlinearen diskretisierten Gleichungssystems wurde ein modifiziertes Newtonverfahren mit Dämpfung, Pseudozeititeration und adaptiver Gittergenerierung implementiert. Der Gittergenerator wird dabei durch den lokalen Abbruchfehler der Newtoniteration gesteuert. Im Rahmen der Vergleichsmöglichkeiten erweist sich der Gleichungslöser als äußerst schnell und sehr stabil. Geschwindigkeitsverluste ergaben sich allerdings durch implizite Diffusionskorrektur (Gl. (31)) gegenüber einer expliziten Korrektur der Massenbilanz über inerte Spezies. Die Steuerung des Gittergenerators über den lokalen Abbruchfehler der Newtoniteration erweist sich als vorteilhaft gegenüber einem gradienten- und krümmungsgesteuerten, da hierdurch nicht nur eine gute räumliche Auflösung erreicht wird, sondern auch nume-

risch schwierige Gebiete, die insbesondere an den Rändern auftreten, erfaßt werden.

Zur Überprüfung des Programmes wurde eine Propan-Gegenstromdiffusionsflamme für variierende Streckungsraten und Drücke berechnet und die Löschgrenze in Abhängigkeit von der Streckungsrate bestimmt. Die hieraus erhaltenen Ergebnisse sind in guter Übereinstimmung mit den in [18] vorgestellten numerischen Rechnungen.

Für die Zukunft geplante Projekte sind die Erweiterung der zulässigen Randbedingungen (Tsuji-Konfiguration), Berechnung von Vormischflammen, instationäre Berechnung von Diffusions- und Vormischflammen und die Unterstützung reduzierter Mechanismen.

A Reaktionsmechanismus

Die hier dargestellte Tabelle wurde automatisch durch das Programm **ScanMan** auf der Grundlage einer Eingabedatei wie sie in Anhang B gezeigt wird generiert.

Number	Reaction	A	n	E
H2/O2 Reactions				
1f	$\text{O}_2 + \text{H} \rightarrow \text{OH} + \text{O}$	2.000E+14	0.00	70.3
1b	$\text{OH} + \text{O} \rightarrow \text{O}_2 + \text{H}$	1.568E+13	0.00	3.52
2f	$\text{H}_2 + \text{O} \rightarrow \text{OH} + \text{H}$	5.060E+04	2.67	26.3
2b	$\text{OH} + \text{H} \rightarrow \text{H}_2 + \text{O}$	2.222E+04	2.67	18.29
3f	$\text{H}_2 + \text{OH} \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{H}$	1.000E+08	1.60	13.8
3b	$\text{H}_2\text{O} + \text{H} \rightarrow \text{H}_2 + \text{OH}$	4.312E+08	1.60	76.46
4f	$2\text{OH} \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{O}$	1.500E+09	1.14	0.42
4b	$\text{H}_2\text{O} + \text{O} \rightarrow 2\text{OH}$	1.473E+10	1.14	71.09
HO2 Formation/Consumption				
5f	$\text{O}_2 + \text{H} + \text{M}' \rightarrow \text{HO}_2 + \text{M}'$	2.300E+18	-0.80	0
5b	$\text{HO}_2 + \text{M}' \rightarrow \text{O}_2 + \text{H} + \text{M}'$	3.190E+18	-0.80	195.39
6	$\text{HO}_2 + \text{H} \rightarrow 2\text{OH}$	1.500E+14	0.00	4.2
7	$\text{HO}_2 + \text{H} \rightarrow \text{H}_2 + \text{O}_2$	2.500E+13	0.00	2.9
8	$\text{HO}_2 + \text{OH} \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{O}_2$	6.000E+13	0.00	0
9	$\text{HO}_2 + \text{H} \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{O}$	3.000E+13	0.00	7.2
10	$\text{HO}_2 + \text{O} \rightarrow \text{OH} + \text{O}_2$	1.800E+13	0.00	-1.7
H2O2 Formation/Consumption				
11	$2\text{HO}_2 \rightarrow \text{H}_2\text{O}_2 + \text{O}_2$	2.500E+11	0.00	-5.2
12f	$2\text{OH} + \text{M}' \rightarrow \text{H}_2\text{O}_2 + \text{M}'$	3.250E+22	-2.00	0
12b	$\text{H}_2\text{O}_2 + \text{M}' \rightarrow 2\text{OH} + \text{M}'$	1.692E+24	-2.00	202.29
13	$\text{H}_2\text{O}_2 + \text{H} \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{OH}$	1.000E+13	0.00	15
14f	$\text{H}_2\text{O}_2 + \text{OH} \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{HO}_2$	5.400E+12	0.00	4.2
14b	$\text{H}_2\text{O} + \text{HO}_2 \rightarrow \text{H}_2\text{O}_2 + \text{OH}$	1.802E+13	0.00	134.75

Number	Reaction	A	n	E
Recombination				
15	$2\text{H} + \text{M}' \rightarrow \text{H}_2 + \text{M}'$	1.800E+18	-1.00	0
16	$\text{OH} + \text{H} + \text{M}' \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{M}'$	2.200E+22	-2.00	0
17	$2\text{O} + \text{M}' \rightarrow \text{O}_2 + \text{M}'$	2.900E+17	-1.00	0
CO/CO2 Mechanism				
18f	$\text{CO} + \text{OH} \rightarrow \text{CO}_2 + \text{H}$	4.400E+06	1.50	-3.1
18b	$\text{CO}_2 + \text{H} \rightarrow \text{CO} + \text{OH}$	4.956E+08	1.50	89.76
CH Consumption				
19	$\text{CH} + \text{O}_2 \rightarrow \text{CHO} + \text{O}$	3.000E+13	0.00	0
20	$\text{CO}_2 + \text{CH} \rightarrow \text{CHO} + \text{CO}$	3.400E+12	0.00	2.9
CHO Consumption				
21	$\text{CHO} + \text{H} \rightarrow \text{CO} + \text{H}_2$	2.000E+14	0.00	0
22	$\text{CHO} + \text{OH} \rightarrow \text{CO} + \text{H}_2\text{O}$	1.000E+14	0.00	0
23	$\text{CHO} + \text{O}_2 \rightarrow \text{CO} + \text{HO}_2$	3.000E+12	0.00	0
24f	$\text{CHO} + \text{M}' \rightarrow \text{CO} + \text{H} + \text{M}'$	7.100E+14	0.00	70.3
24b	$\text{CO} + \text{H} + \text{M}' \rightarrow \text{CHO} + \text{M}'$	1.136E+15	0.00	9.97
CH2 Consumption				
25f	$\text{CH}_2 + \text{H} \rightarrow \text{CH} + \text{H}_2$	8.400E+09	1.50	1.4
25b	$\text{CH} + \text{H}_2 \rightarrow \text{CH}_2 + \text{H}$	5.830E+09	1.50	13.08
26	$\text{CH}_2 + \text{O} \rightarrow \text{CO} + 2\text{H}$	8.000E+13	0.00	0
27	$\text{CH}_2 + \text{O}_2 \rightarrow \text{CO} + \text{OH} + \text{H}$	6.500E+12	0.00	6.3
28	$\text{CH}_2 + \text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2 + 2\text{H}$	6.500E+12	0.00	6.3
CH2O Consumption				
29	$\text{CH}_2\text{O} + \text{H} \rightarrow \text{CHO} + \text{H}_2$	2.500E+13	0.00	16.7
30	$\text{CH}_2\text{O} + \text{O} \rightarrow \text{CHO} + \text{OH}$	3.500E+13	0.00	14.6
31	$\text{CH}_2\text{O} + \text{OH} \rightarrow \text{CHO} + \text{H}_2\text{O}$	3.000E+13	0.00	5
32	$\text{CH}_2\text{O} + \text{M}' \rightarrow \text{CHO} + \text{H} + \text{M}'$	1.400E+17	0.00	320

Number	Reaction	A	n	E
CH3 Consumption				
33f	$\text{CH}_3 + \text{H} \rightarrow \text{CH}_2 + \text{H}_2$	1.800E+14	0.00	63
33b	$\text{CH}_2 + \text{H}_2 \rightarrow \text{CH}_3 + \text{H}$	3.680E+13	0.00	44.3
34	$\text{CH}_3 + \text{H} \rightarrow \text{CH}_4$	k_0 6.257E+23	-1.80	0
		k_∞ 2.108E+14	0.00	0
35	$\text{CH}_3 + \text{O} \rightarrow \text{CH}_2\text{O} + \text{H}$	7.000E+13	0.00	0
36	$2\text{CH}_3 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_6$	k_0 1.270E+41	-7.00	11.56
		k_∞ 3.613E+13	0.00	0
37	$\text{CH}_3 + \text{O}_2 \rightarrow \text{CH}_2\text{O} + \text{OH}$	3.400E+11	0.00	37.4
CH4 Consumption				
38f	$\text{CH}_4 + \text{H} \rightarrow \text{CH}_3 + \text{H}_2$	2.200E+04	3.00	36.6
38b	$\text{CH}_3 + \text{H}_2 \rightarrow \text{CH}_4 + \text{H}$	8.391E+02	3.00	34.56
39	$\text{CH}_4 + \text{O} \rightarrow \text{CH}_3 + \text{OH}$	1.200E+07	2.10	31.9
40f	$\text{CH}_4 + \text{OH} \rightarrow \text{CH}_3 + \text{H}_2\text{O}$	1.600E+06	2.10	10.3
40b	$\text{CH}_3 + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{CH}_4 + \text{OH}$	2.631E+05	2.10	70.92
C2H Consumption				
41f	$\text{C}_2\text{H} + \text{H}_2 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_2 + \text{H}$	1.100E+13	0.00	12
41b	$\text{C}_2\text{H}_2 + \text{H} \rightarrow \text{C}_2\text{H} + \text{H}_2$	5.270E+13	0.00	119.95
42	$\text{C}_2\text{H} + \text{O}_2 \rightarrow \text{CHCO} + \text{O}$	5.000E+13	0.00	6.3
CHCO Consumption				
43f	$\text{CHCO} + \text{H} \rightarrow \text{CH}_2 + \text{CO}$	3.000E+13	0.00	0
43b	$\text{CH}_2 + \text{CO} \rightarrow \text{CHCO} + \text{H}$	2.361E+12	0.00	-29.39
44	$\text{CHCO} + \text{O} \rightarrow 2\text{CO} + \text{H}$	1.000E+14	0.00	0
C2H2 Consumption				
45	$\text{C}_2\text{H}_2 + \text{O} \rightarrow \text{CH}_2 + \text{CO}$	4.100E+08	1.50	7.1
46	$\text{C}_2\text{H}_2 + \text{O} \rightarrow \text{CHCO} + \text{H}$	4.300E+14	0.00	50.7
47f	$\text{C}_2\text{H}_2 + \text{OH} \rightarrow \text{C}_2\text{H} + \text{H}_2\text{O}$	1.000E+13	0.00	29.3
47b	$\text{C}_2\text{H} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{C}_2\text{H}_2 + \text{OH}$	9.000E+12	0.00	-15.98
48	$\text{C}_2\text{H}_2 + \text{CH} \rightarrow \text{C}_3\text{H}_3$	3.000E+13	0.00	0

Number	Reaction	A	n	E
C2H3 Consumption				
49	$\text{C}_2\text{H}_3 + \text{H} \rightarrow \text{C}_2\text{H}_2 + \text{H}_2$	3.000E+13	0.00	0
50	$\text{C}_2\text{H}_3 + \text{O}_2 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_2 + \text{HO}_2$	5.400E+11	0.00	0
51f	$\text{C}_2\text{H}_3 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_2 + \text{H} \quad k_0$	1.187E+42	-7.50	190.4
	k_∞	2.000E+14	0.00	166.29
51b	$\text{C}_2\text{H}_2 + \text{H} \rightarrow \text{C}_2\text{H}_3 \quad k_0$	6.245E+41	-7.50	27.5
	k_∞	1.053E+14	0.00	3.39
C2H4 Consumption				
52f	$\text{C}_2\text{H}_4 + \text{H} \rightarrow \text{C}_2\text{H}_3 + \text{H}_2$	1.500E+14	0.00	42.7
52b	$\text{C}_2\text{H}_3 + \text{H}_2 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_4 + \text{H}$	9.605E+12	0.00	32.64
53	$\text{C}_2\text{H}_4 + \text{O} \rightarrow \text{CH}_3 + \text{CO} + \text{H}$	1.600E+09	1.20	3.1
54f	$\text{C}_2\text{H}_4 + \text{OH} \rightarrow \text{C}_2\text{H}_3 + \text{H}_2\text{O}$	3.000E+13	0.00	12.6
54b	$\text{C}_2\text{H}_3 + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{C}_2\text{H}_4 + \text{OH}$	8.283E+12	0.00	65.2
55	$\text{C}_2\text{H}_4 + \text{M}' \rightarrow \text{C}_2\text{H}_2 + \text{H}_2 + \text{M}'$	2.500E+17	0.00	319.8
C2H5 Consumption				
56f	$\text{C}_2\text{H}_5 + \text{H} \rightarrow 2\text{CH}_3$	3.000E+13	0.00	0
56b	$2\text{CH}_3 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_5 + \text{H}$	3.457E+12	0.00	49.68
57	$\text{C}_2\text{H}_5 + \text{O}_2 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_4 + \text{HO}_2$	2.000E+12	0.00	20.9
58f	$\text{C}_2\text{H}_5 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_4 + \text{H} \quad k_0$	1.000E+16	0.00	126
	k_∞	1.300E+13	0.00	167
58b	$\text{C}_2\text{H}_4 + \text{H} \rightarrow \text{C}_2\text{H}_5 \quad k_0$	1.595E+16	0.00	-27.39
	k_∞	2.073E+13	0.00	13.61
C2H6 Consumption				
59	$\text{C}_2\text{H}_6 + \text{H} \rightarrow \text{C}_2\text{H}_5 + \text{H}_2$	5.400E+02	3.50	21.8
60	$\text{C}_2\text{H}_6 + \text{O} \rightarrow \text{C}_2\text{H}_5 + \text{OH}$	3.000E+07	2.00	21.4
61	$\text{C}_2\text{H}_6 + \text{OH} \rightarrow \text{C}_2\text{H}_5 + \text{H}_2\text{O}$	6.300E+06	2.00	2.7
C3H3 Consumption				
62	$\text{C}_3\text{H}_3 + \text{O}_2 \rightarrow \text{CHCO} + \text{CH}_2\text{O}$	6.000E+12	0.00	0
63	$\text{C}_3\text{H}_3 + \text{O} \rightarrow \text{C}_2\text{H}_3 + \text{CO}$	3.800E+13	0.00	0
64f	$\text{C}_3\text{H}_4 \rightarrow \text{C}_3\text{H}_3 + \text{H}$	5.000E+14	0.00	370
64b	$\text{C}_3\text{H}_3 + \text{H} \rightarrow \text{C}_3\text{H}_4$	1.700E+13	0.00	19.88

Number	Reaction	A	n	E
C3H4 Consumption				
65	$\text{C}_3\text{H}_4 + \text{O} \rightarrow \text{C}_2\text{H}_2 + \text{CH}_2\text{O}$	1.000E+12	0.00	0
66	$\text{C}_3\text{H}_4 + \text{O} \rightarrow \text{C}_2\text{H}_3 + \text{CHO}$	1.000E+12	0.00	0
67	$\text{C}_3\text{H}_4 + \text{OH} \rightarrow \text{C}_2\text{H}_3 + \text{CH}_2\text{O}$	1.000E+12	0.00	0
68	$\text{C}_3\text{H}_4 + \text{OH} \rightarrow \text{C}_2\text{H}_4 + \text{CHO}$	1.000E+12	0.00	0
C3H5 Consumption				
69f	$\text{C}_3\text{H}_5 \rightarrow \text{C}_3\text{H}_4 + \text{H}$	3.980E+13	0.00	293.1
69b	$\text{C}_3\text{H}_4 + \text{H} \rightarrow \text{C}_3\text{H}_5$	1.267E+13	0.00	32.48
70	$\text{C}_3\text{H}_5 + \text{H} \rightarrow \text{C}_3\text{H}_4 + \text{H}_2$	1.000E+13	0.00	0
C3H6 Consumption				
71f	$\text{C}_3\text{H}_6 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_3 + \text{CH}_3$	3.150E+15	0.00	359.3
71b	$\text{C}_2\text{H}_3 + \text{CH}_3 \rightarrow \text{C}_3\text{H}_6$	2.511E+12	0.00	-34.69
72	$\text{C}_3\text{H}_6 + \text{H} \rightarrow \text{C}_3\text{H}_5 + \text{H}_2$	5.000E+12	0.00	6.3
C3H7 Consumption				
73	$\text{N-C}_3\text{H}_7 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_4 + \text{CH}_3$	9.600E+13	0.00	129.8
74f	$\text{N-C}_3\text{H}_7 \rightarrow \text{C}_3\text{H}_6 + \text{H}$	1.250E+14	0.00	154.9
74b	$\text{C}_3\text{H}_6 + \text{H} \rightarrow \text{N-C}_3\text{H}_7$	4.609E+14	0.00	21.49
75	$\text{I-C}_3\text{H}_7 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_4 + \text{CH}_3$	6.300E+13	0.00	154.5
76	$\text{I-C}_3\text{H}_7 + \text{O}_2 \rightarrow \text{C}_3\text{H}_6 + \text{HO}_2$	1.000E+12	0.00	20.9
C3H8 Consumption				
77	$\text{C}_3\text{H}_8 + \text{H} \rightarrow \text{N-C}_3\text{H}_7 + \text{H}_2$	1.300E+14	0.00	40.6
78	$\text{C}_3\text{H}_8 + \text{H} \rightarrow \text{I-C}_3\text{H}_7 + \text{H}_2$	1.000E+14	0.00	34.9
79	$\text{C}_3\text{H}_8 + \text{O} \rightarrow \text{N-C}_3\text{H}_7 + \text{OH}$	3.000E+13	0.00	24.1
80	$\text{C}_3\text{H}_8 + \text{O} \rightarrow \text{I-C}_3\text{H}_7 + \text{OH}$	2.600E+13	0.00	18.7
81	$\text{C}_3\text{H}_8 + \text{OH} \rightarrow \text{N-C}_3\text{H}_7 + \text{H}_2\text{O}$	3.700E+12	0.00	6.9
82	$\text{C}_3\text{H}_8 + \text{OH} \rightarrow \text{I-C}_3\text{H}_7 + \text{H}_2\text{O}$	2.800E+12	0.00	3.6

$$M' = 6.5[\text{CH}_4] + 6.5[\text{H}_2\text{O}] + 1.5[\text{CO}_2] + 0.75[\text{CO}] + 0.4[\text{O}_2] + 0.4[\text{N}_2] + 1.0[\text{OTHER}]$$

B Beispiel einer Eingabedatei für ScanMan

Es wird hier ein Beispiel für eine Eingabedatei für das Vorlaufprogramm **ScanMan** wiedergegeben. Auf eine besondere Strukturierung wurde dabei bewußt verzichtet, um die freie Eingabesyntax des Programmes zu veranschaulichen.

```

let allowed atoms be c, h, o, N.
let additional species be N2.
let temperature exponent be n_k.
let orderOfReaction be n.

let units for A be [ cm^(3(n-1)) / ( s * mole^(n-1) * K^(n_k)) ] .
let units for E be [ kJ / mole ].

# H2/O2 Reactions
1f: O2 + H -> OH + O { a = 2.e14 n = 0 E = 70.3}
1b  : OH+o -> O+H      { A = 1.568e13 N = 0 e = 3.52}
2f: H2 + O -> OH + H  { a = 5.06e4 n = 2.67 E = 26.3}
2b: OH + H -> H2 + O  { a = 2.222e4 n = 2.67 E = 18.29}

# C2H3 Consumption
49: C2H3 + H -> C2H2 + H2 { a = 3.e13 n = 0 E = 0}
50: C2H3 + O2 -> C2H2 + HO2
                                { a = 5.4e11 n = 0 E = 0}
51f:C2H3 -> C2H2 + H          { Fc = 0.38 * exp( -T / 73.0 )
                                + 0.62 * exp( -T / 1880.0 );
                                ai = 2.e14 a = 1.187e42 ni = 0
                                n = -7.5 Ei = 166.29 E = 190.4}
51b:C2H2 + H -> C2H3          { a_i = 1.053e14 ni = 0 E_inf = 27.5}
55: C2H4 + M' -> C2H2 + H2 + M'
                                { a = 2.5e17 n = 0 E = 319.8}

let [M'] = 6.5 [CH4] + 6.5 *[H2o] + 1.5 [co2] 0.75 co

```

58 _____ *B* Beispiel einer Eingabedatei für ScanMan

+ 0.4 [o2] + 0.4 [n2] + 1.0 [OTHER]

C Beispiel einer Steuerdatendatei für FlameMaster

Im folgenden ist ein Beispiel für die Steuerdatendatei des Programmes **FlameMaster** wiedergegeben. Einige Optionen sind nur zur besseren Anschauung angegeben, da die ihnen zugewiesenen Werte den Defaultwerten entsprechen. Es wird dabei ein Flameletfile mit der Streckungsrate $a = 100$ (siehe dazu Abschnitt 4.3.3) eingelesen, und in einem Fortschrittsverfahren werden die Flamelets mit den Streckungsraten $a = 100, 200$ und 400 berechnet. Da 'Initialgridpoints' kleiner ist als 'Maxgridpoints', wird zunächst das eingelesene Gitter verwendet, falls die Anzahl der eingelesenen Gitterpunkte 'Maxgridpoints' nicht übersteigt. In diesem Fall werden die Werte 'Left' und 'Right' nicht verwendet. Eine Beschreibung aller Optionen ist in Abschnitt 4.3.2 zu finden.

```
Fuel Side {
  dirichlet {
    T = 298.0
    y->C3H8 = 1
  }
}
```

```
Oxidizer Side {
  dirichlet {
    t = 298.0
    x->o2 = 0.21
    x->n2 = 0.79
  }
}
```

```
pressure = 1.0e5
strainrate = 200
strainrate = 300
```

```
strainrate = 400
```

```
initialgridpoints = 101
```

```
maxgridpoints = 103
```

```
left = 0
```

```
right = 9.0
```

```
#initialEquations = 33
```

```
TimeDepFlag = FALSE
```

```
DampFlag = FALSE
```

```
UseModifiedNewton = TRUE
```

```
LambdaMin = 1.0e-2
```

```
MaxIter = 50
```

```
DeltaNewGrid = 25
```

```
OneSoluOneGrid is TRUE
```

```
TolRes = 1.0e-5
```

```
TolDy = 1.0e-5
```

```
q = -0.25
```

```
R = 60
```

```
ConstantLewisNumber is FALSE
```

```
ComputeWithRadiation is FALSE
```

```
fuel is C3H8
```

```
oxidizer is o2
```

```
globalReaction is C3H8 + 5O2 == 3CO2 + 4H2O;
```

```
#GoToFuel H2
```

```
Flame is CounterFlowDiffusion
```

```
MechanismFile is C3H8.82.pre
```

```
StartProfilesFile is C3H8_p10a00100tf0298to0298
```

D Konzentrationsprofile für Propanflammen

In diesem Abschnitt wird die graphische Auswertung der im Rahmen dieser Arbeit vorgenommenen Berechnungen vorgestellt. Die dargestellten Konzentrationsprofile wurden durch lineare Verbindung der Lösung auf dem verwendeten Gitter erzeugt. Es wurde keine Glättung vorgenommen.

D.1 Variation der Streckungsrate

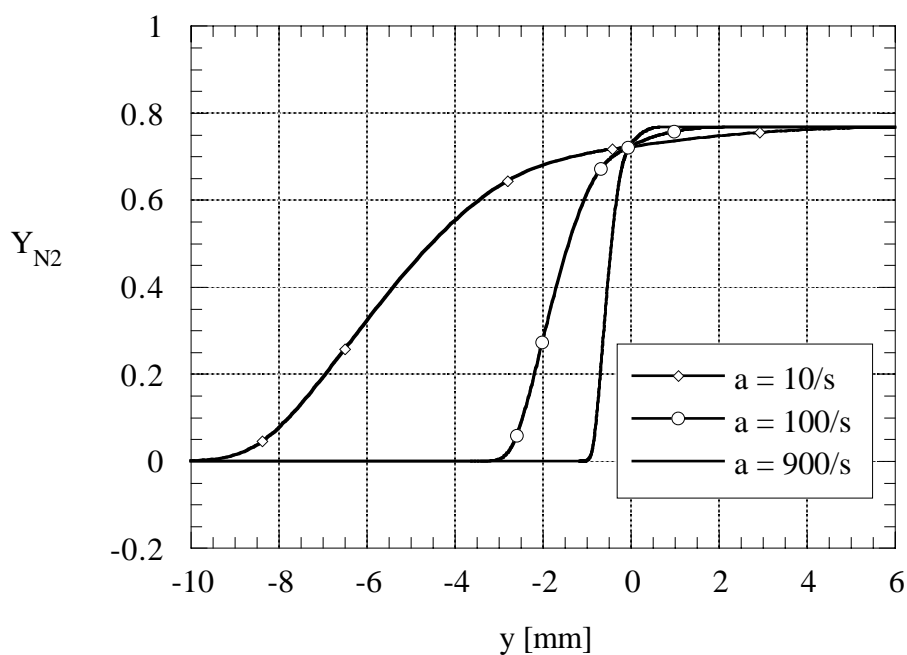


Abbildung 10: N_2 -Konzentrationsprofil für verschiedene Streckungsraten

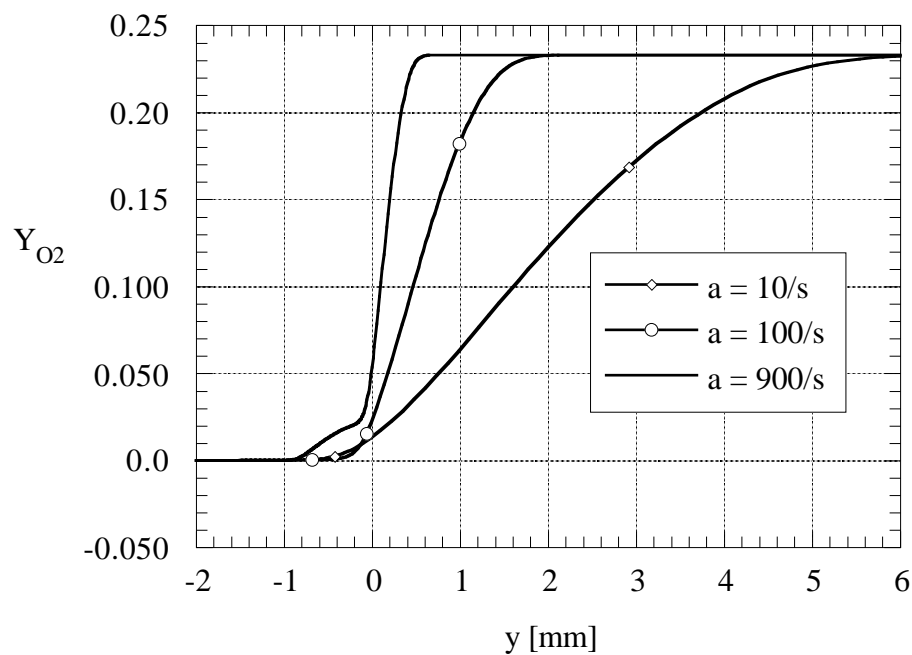
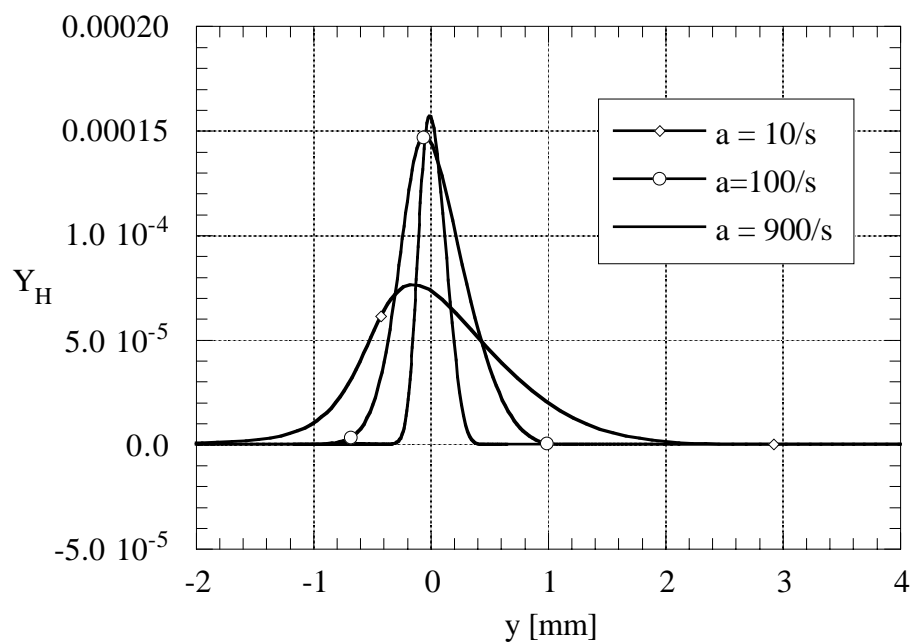
Abbildung 11: O_2 -Konzentrationsprofil für verschiedene Streckungsraten

Abbildung 12: H-Konzentrationsprofil für verschiedene Streckungsraten

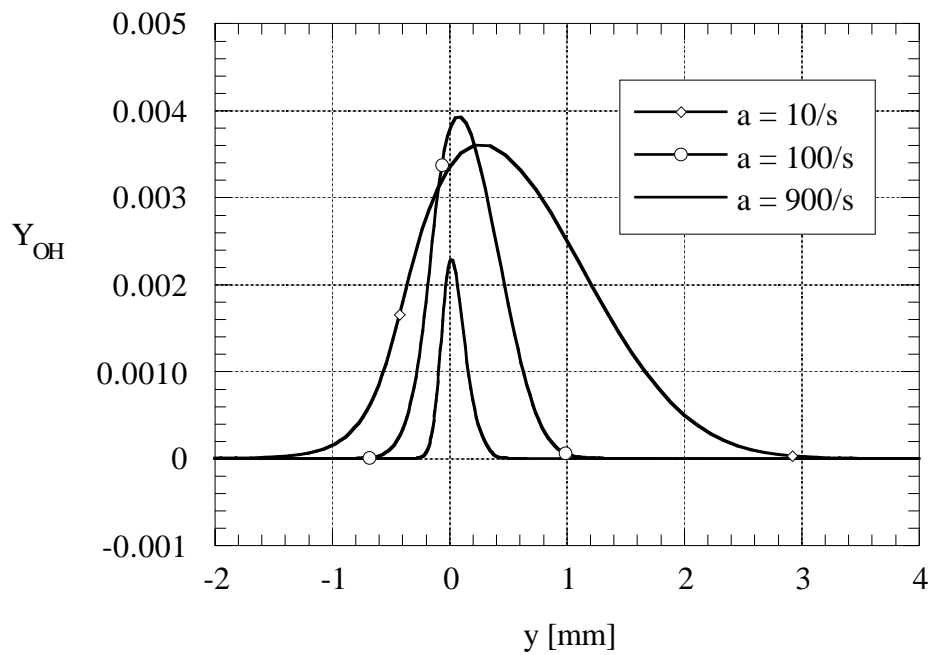


Abbildung 13: OH-Konzentrationsprofil für verschiedene Streckungsraten

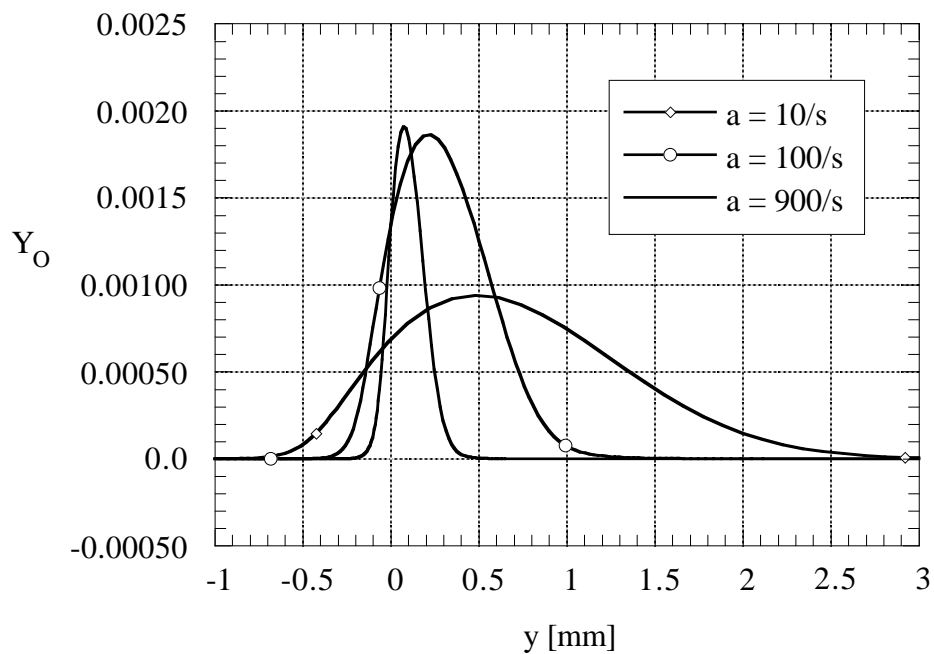
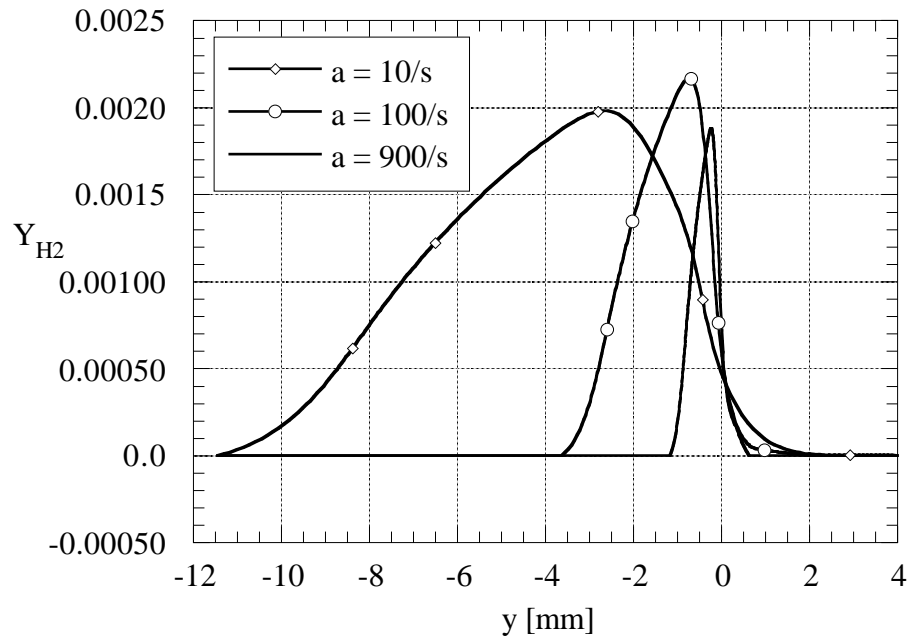
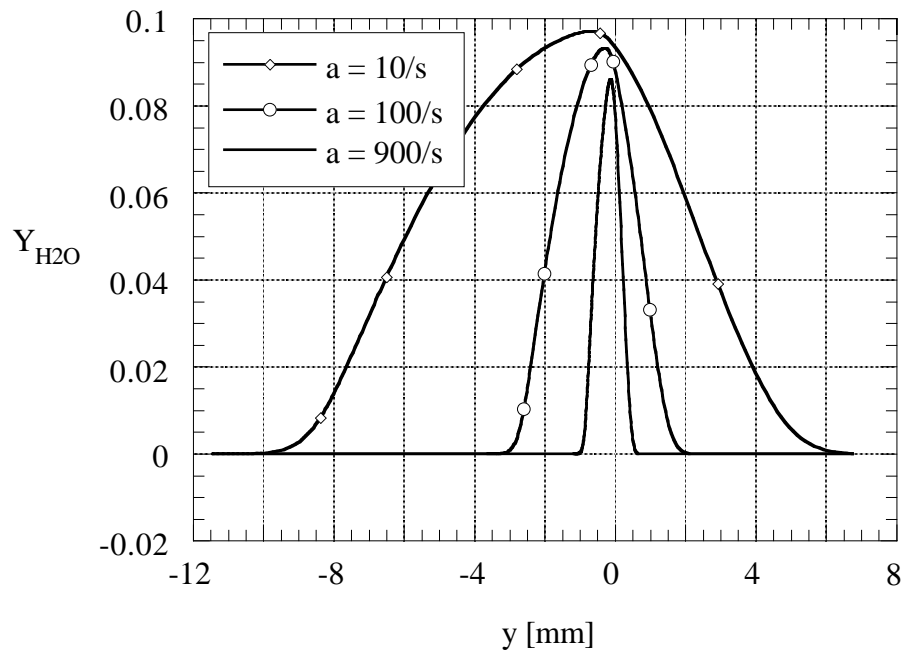


Abbildung 14: O-Konzentrationsprofil für verschiedene Streckungsraten

Abbildung 15: H_2 -Konzentrationsprofil für verschiedene StreckungsratenAbbildung 16: H_2O -Konzentrationsprofil für verschiedene Streckungsraten

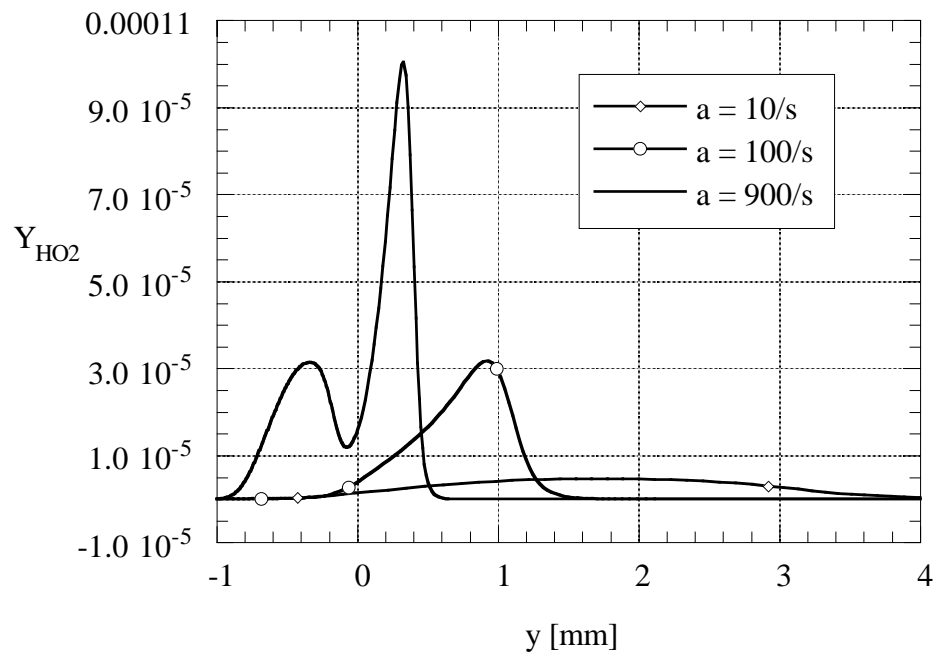


Abbildung 17: HO_2 -Konzentrationsprofil für verschiedene Streckungsraten

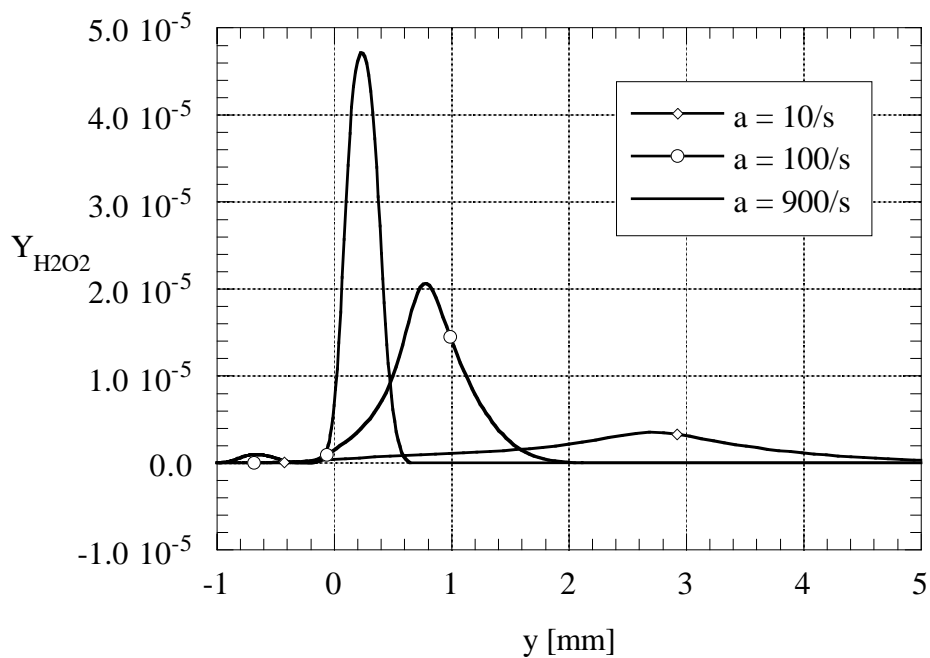


Abbildung 18: H_2O_2 -Konzentrationsprofil für verschiedene Streckungsraten

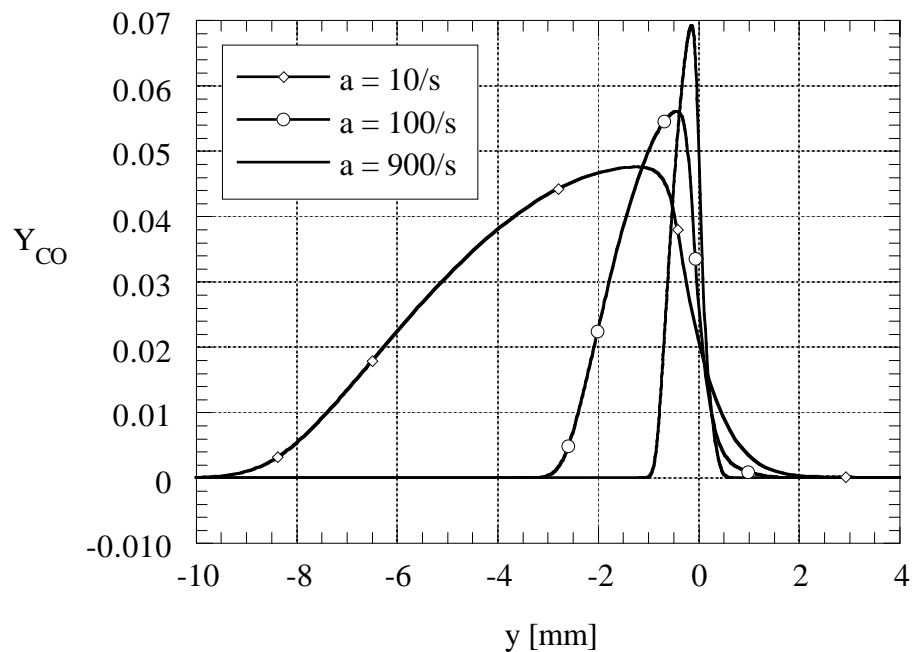
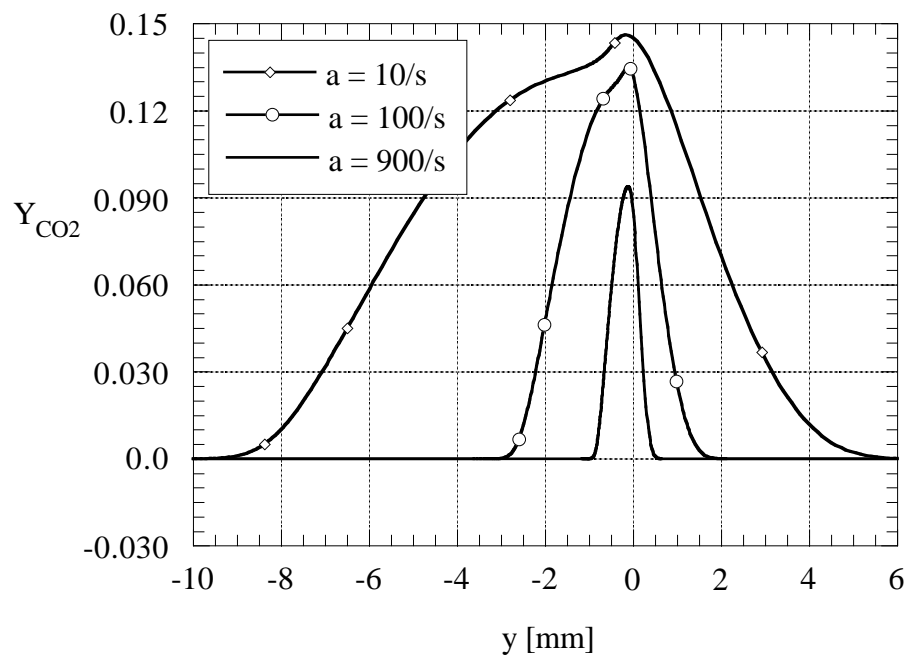


Abbildung 19: CO-Konzentrationsprofil für verschiedene Streckungsraten

Abbildung 20: CO₂-Konzentrationsprofil für verschiedene Streckungsraten

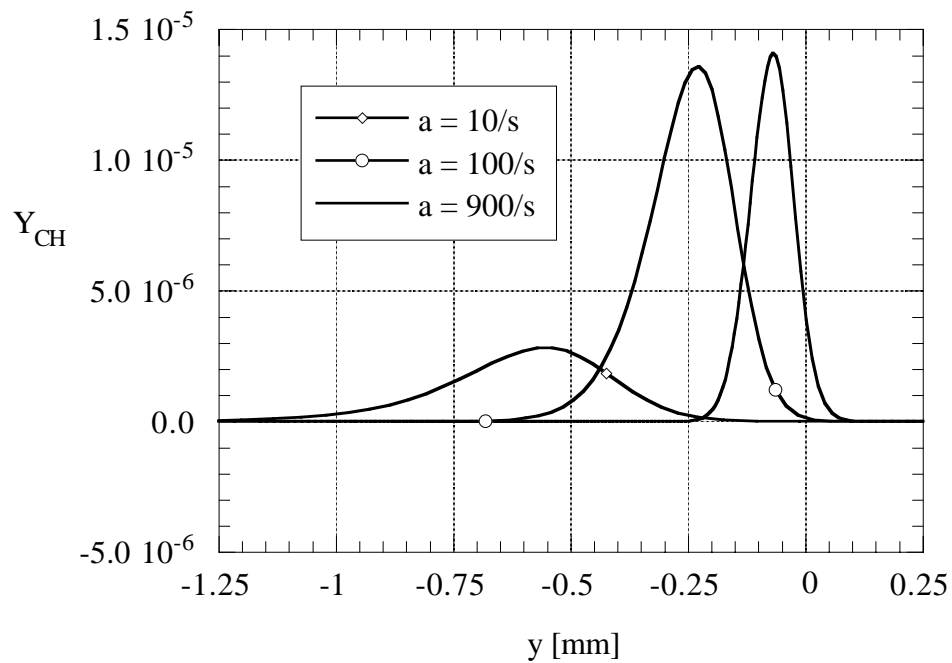


Abbildung 21: CH-Konzentrationsprofil für verschiedene Streckungsraten

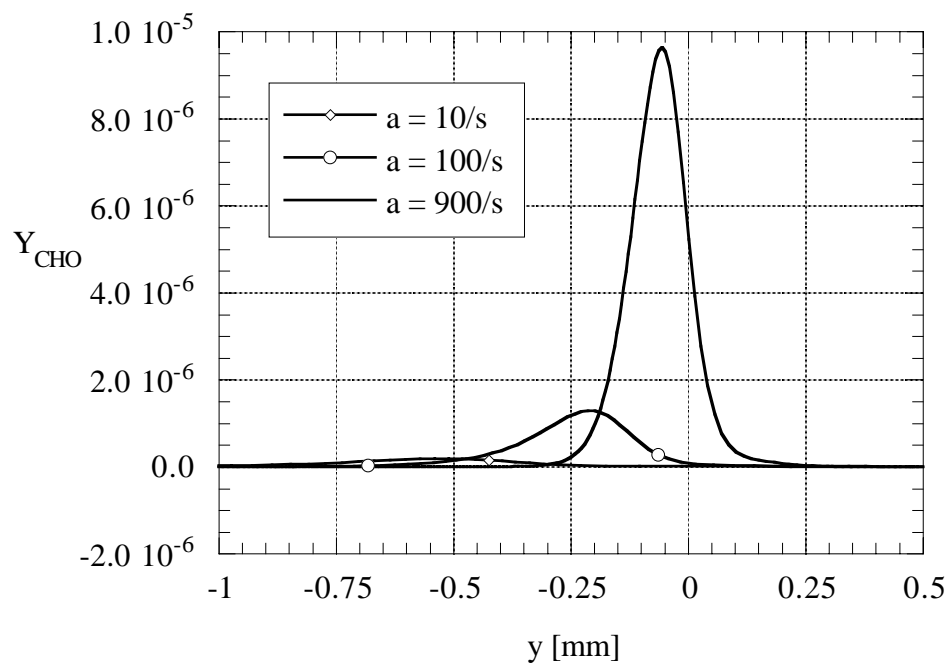
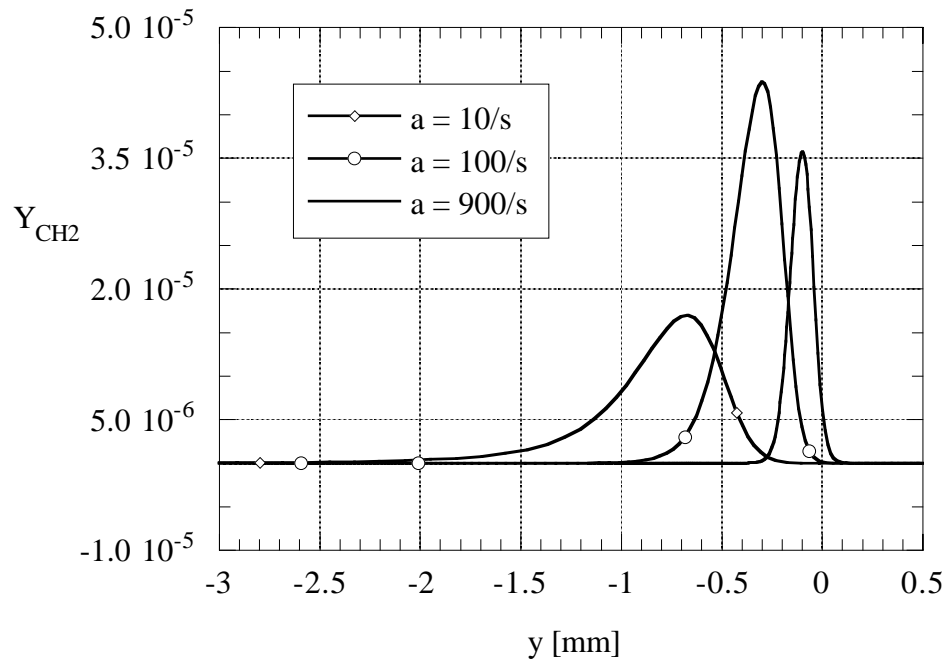
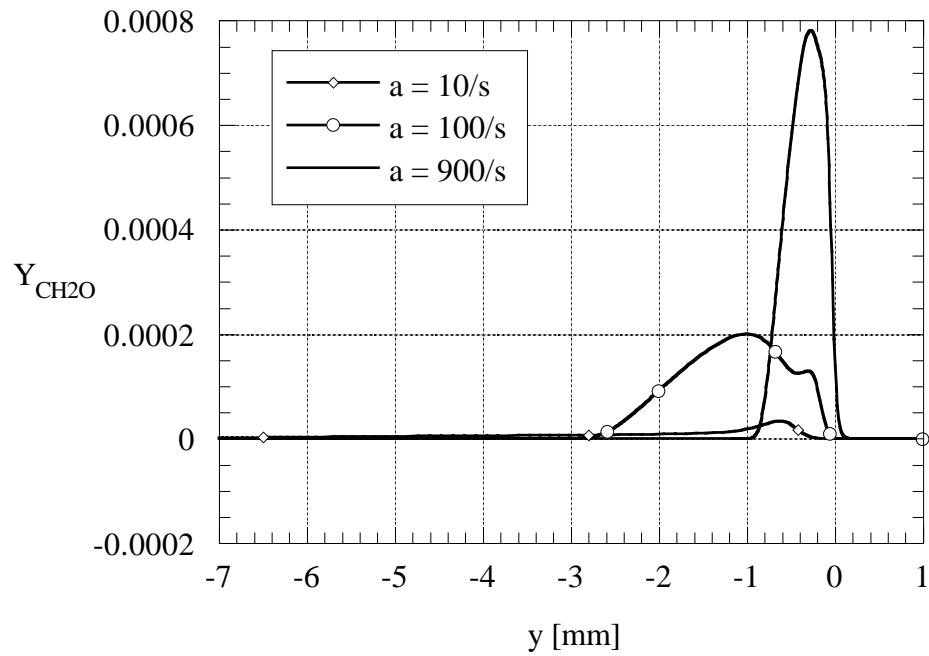


Abbildung 22: CHO-Konzentrationsprofil für verschiedene Streckungsraten

Abbildung 23: CH_2 -Konzentrationsprofil für verschiedene StreckungsratenAbbildung 24: CH_2O -Konzentrationsprofil für verschiedene Streckungsraten

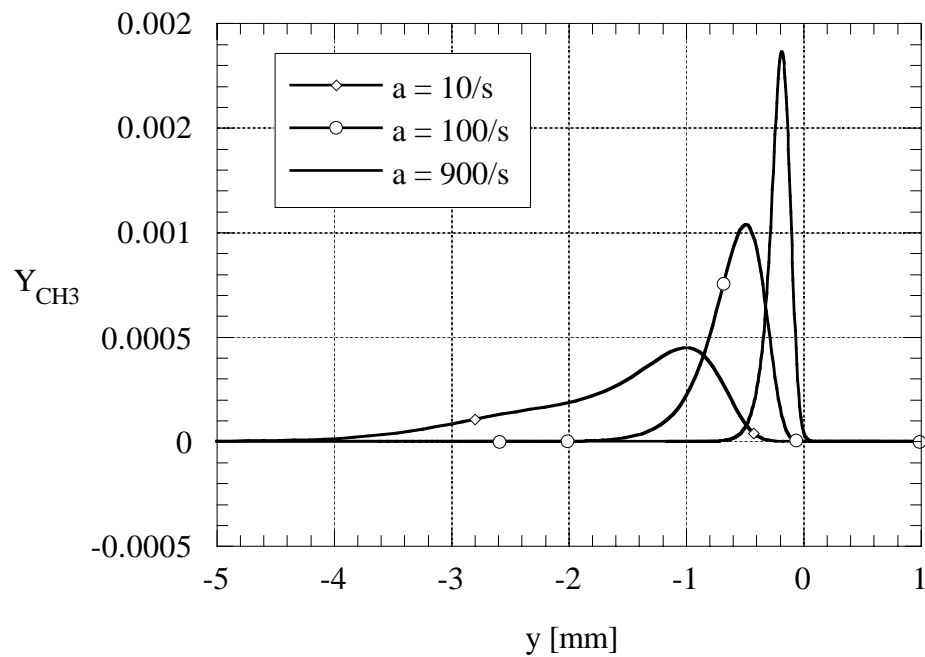


Abbildung 25: CH_3 -Konzentrationsprofil für verschiedene Streckungsraten

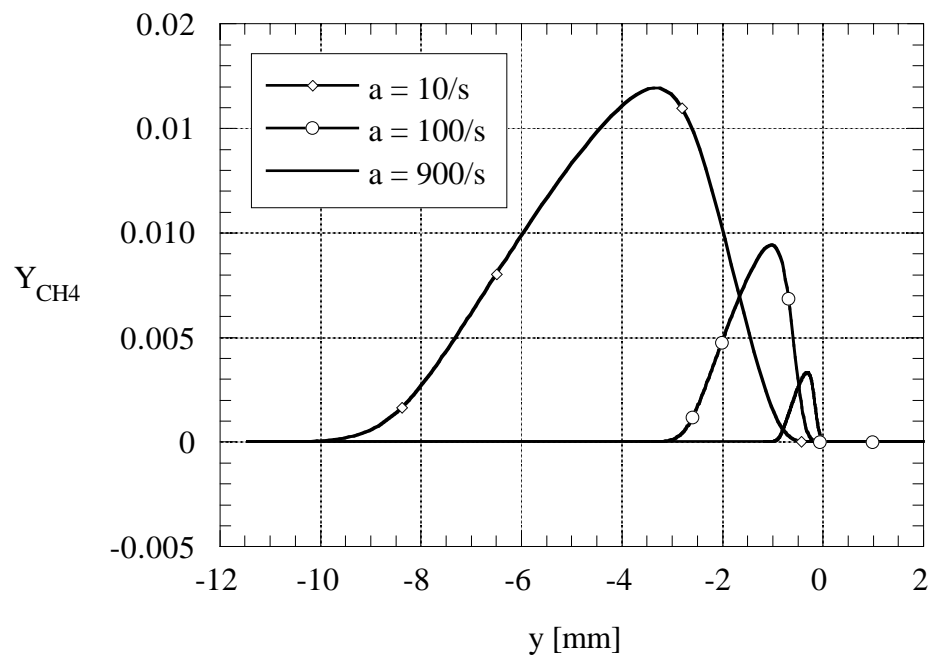


Abbildung 26: CH_4 -Konzentrationsprofil für verschiedene Streckungsraten

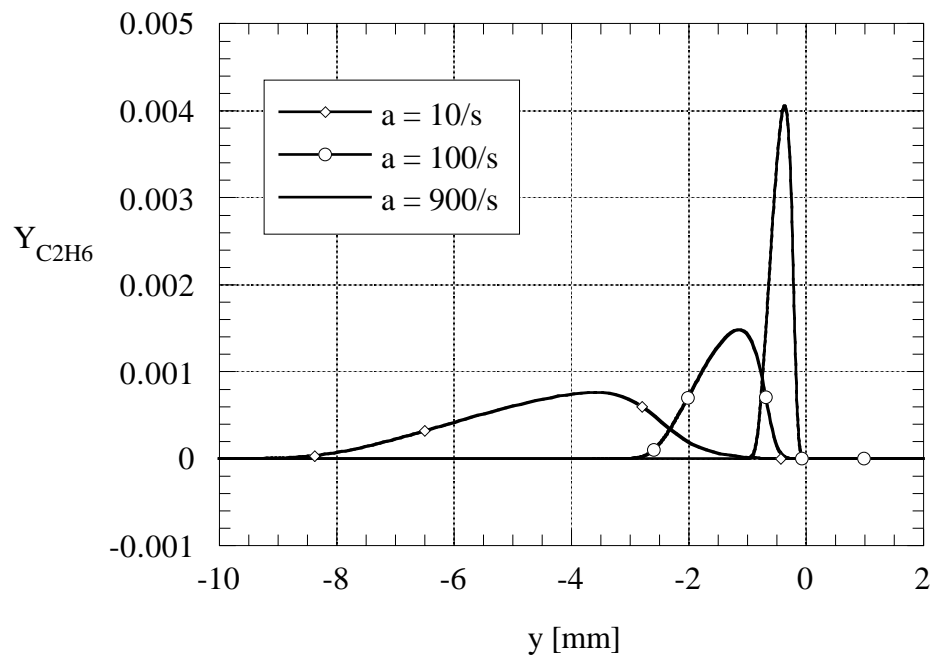


Abbildung 27: C_2H_6 -Konzentrationsprofil für verschiedene Streckungsraten

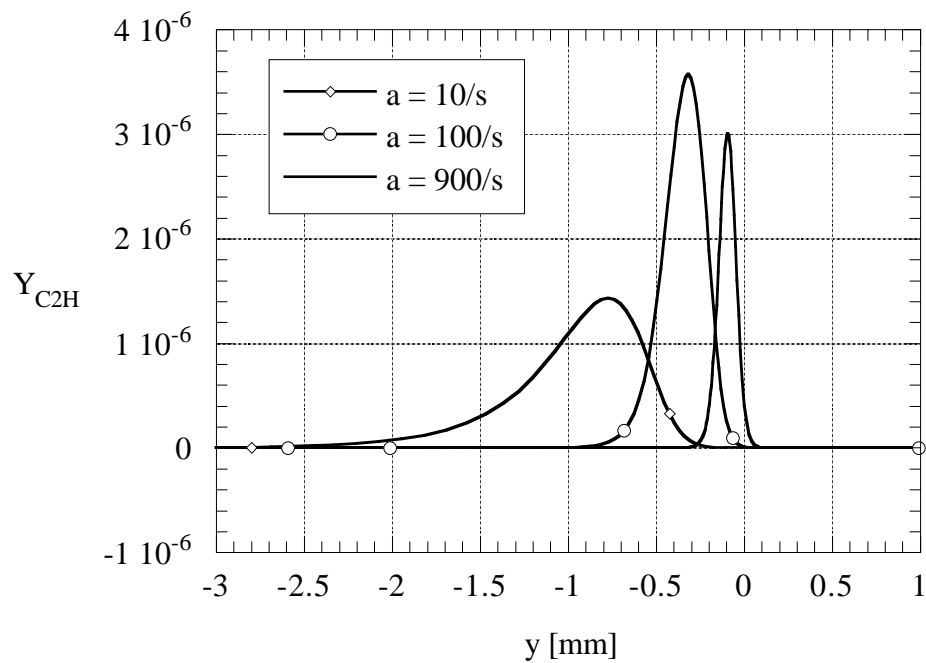


Abbildung 28: C_2H -Konzentrationsprofil für verschiedene Streckungsraten

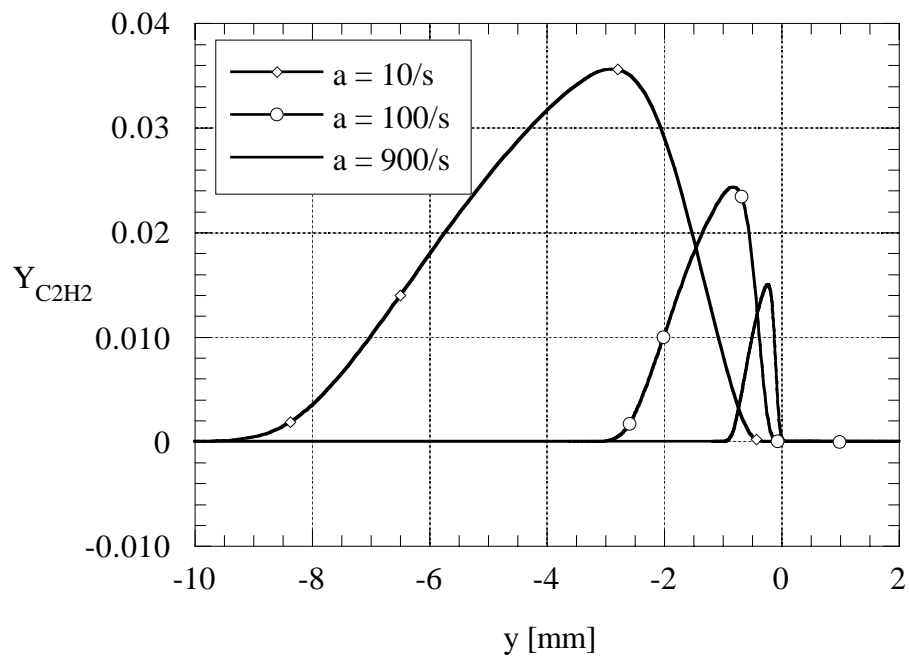


Abbildung 29: C_2H_2 -Konzentrationsprofil für verschiedene Streckungsraten

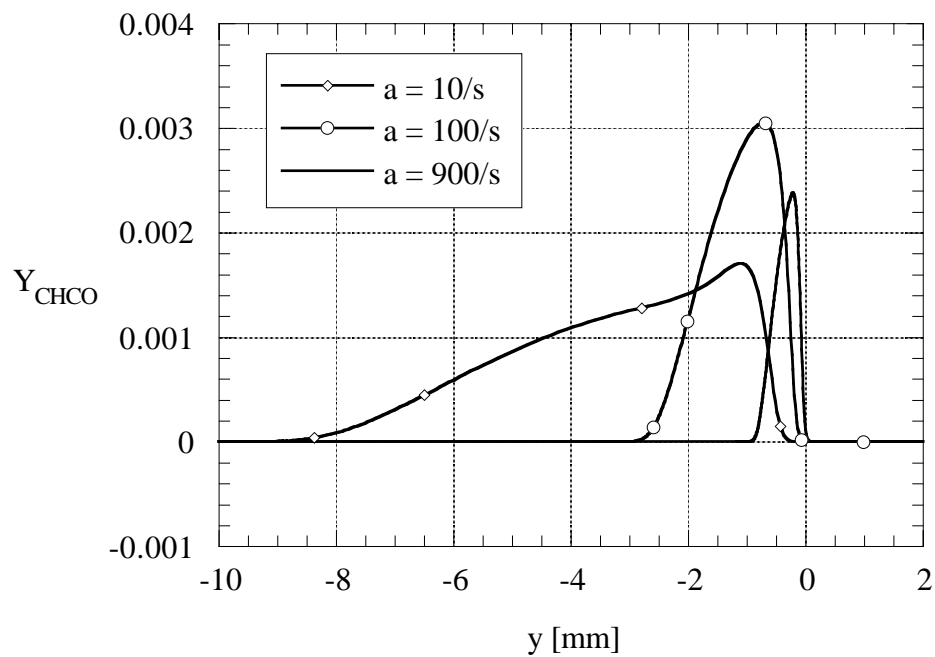


Abbildung 30: $CHCO$ -Konzentrationsprofil für verschiedene Streckungsraten

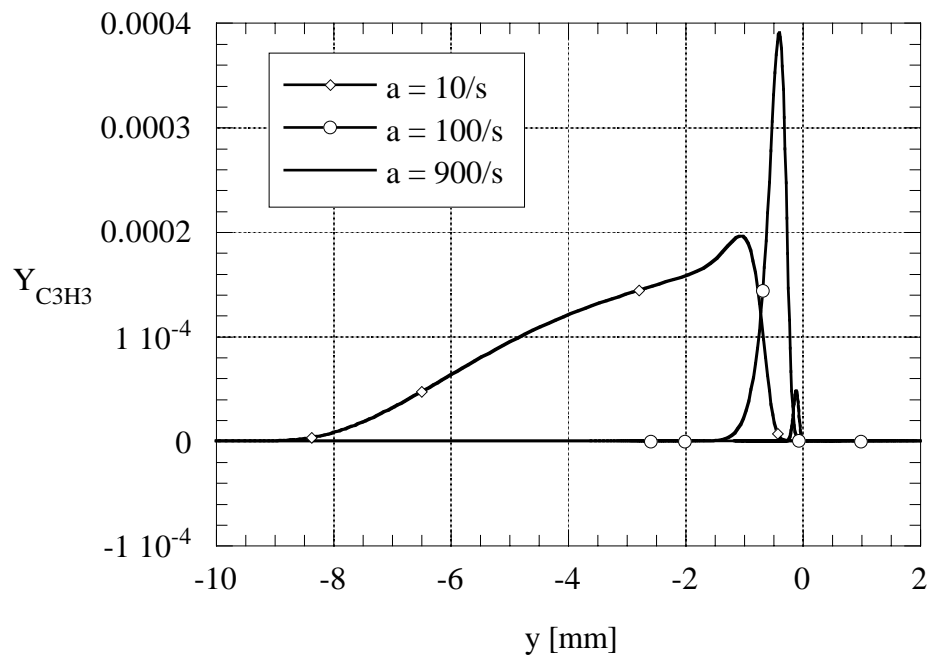


Abbildung 31: C_3H_3 -Konzentrationsprofil für verschiedene Streckungsraten

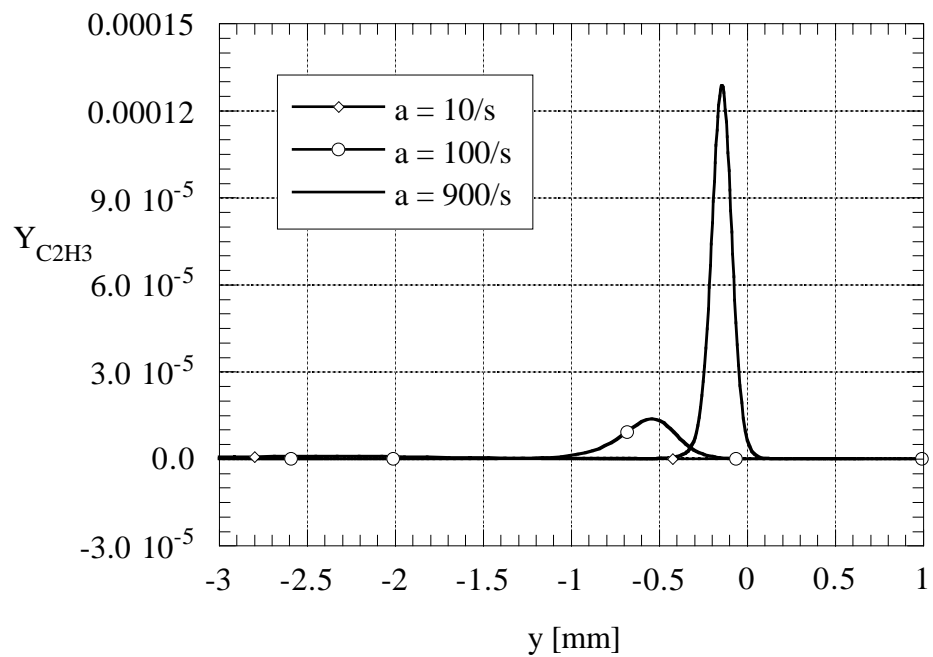


Abbildung 32: C_2H_3 -Konzentrationsprofil für verschiedene Streckungsraten

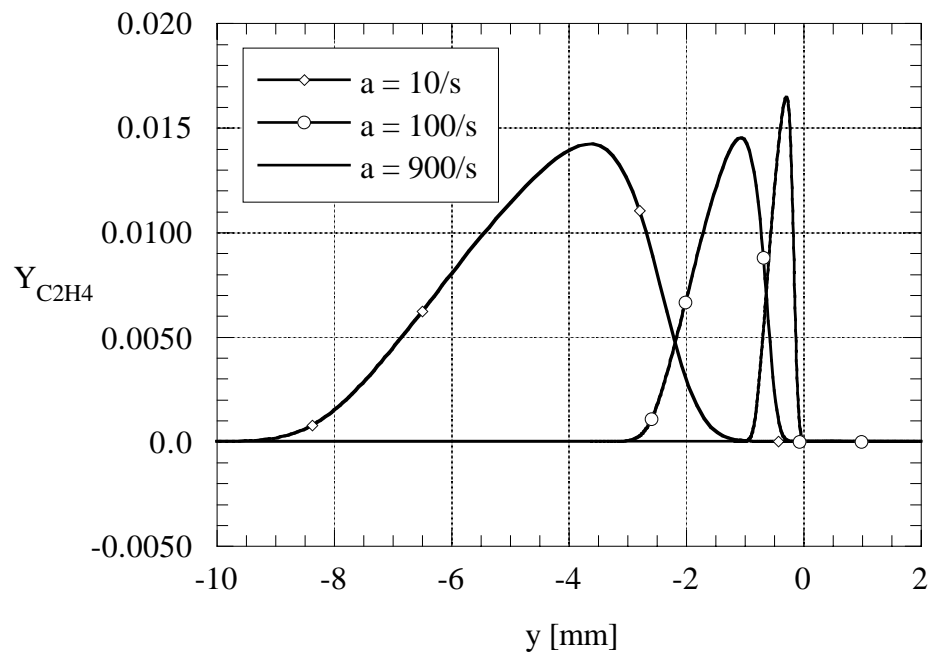


Abbildung 33: C_2H_4 -Konzentrationsprofil für verschiedene Streckungsraten

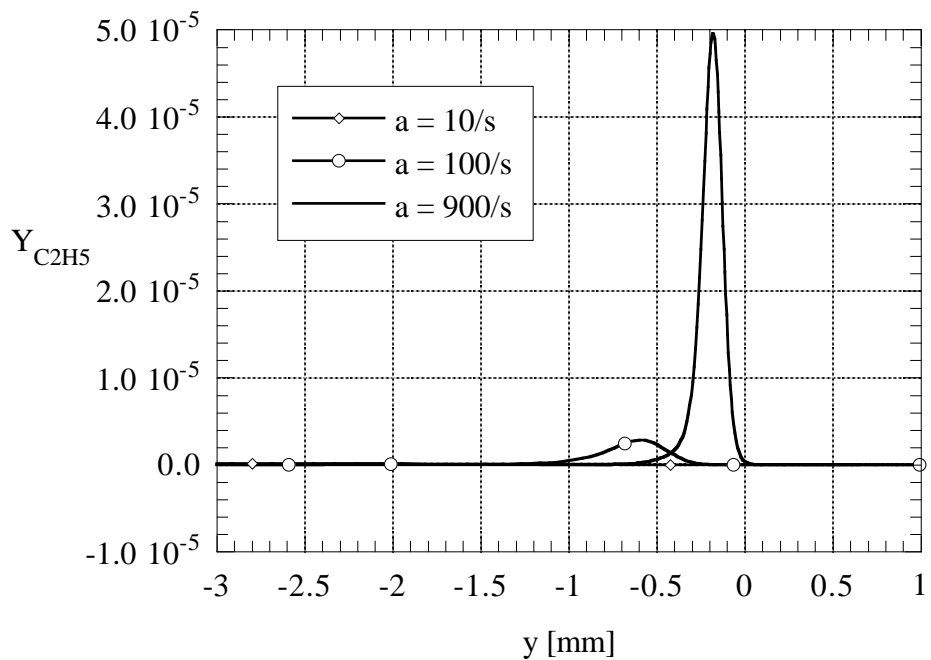


Abbildung 34: C_2H_5 -Konzentrationsprofil für verschiedene Streckungsraten

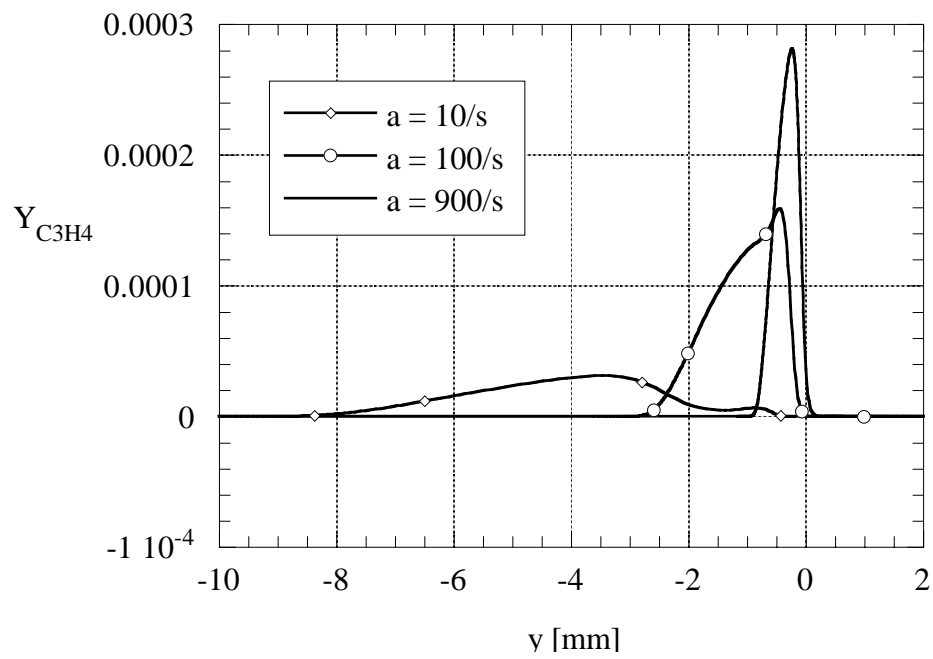


Abbildung 35: C_3H_4 -Konzentrationsprofil für verschiedene Streckungsraten

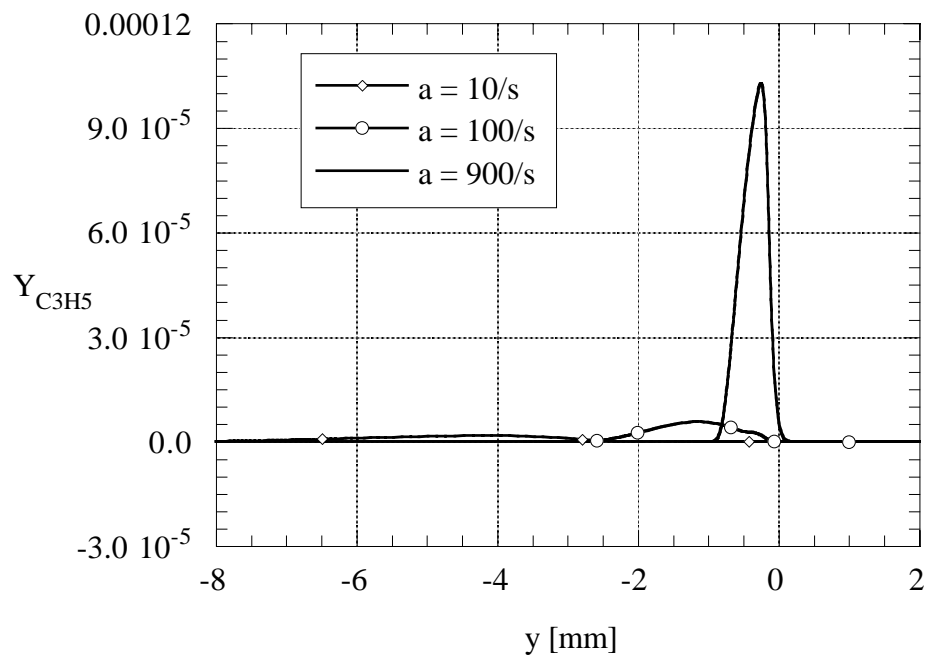


Abbildung 36: C_3H_5 -Konzentrationsprofil für verschiedene Streckungsraten

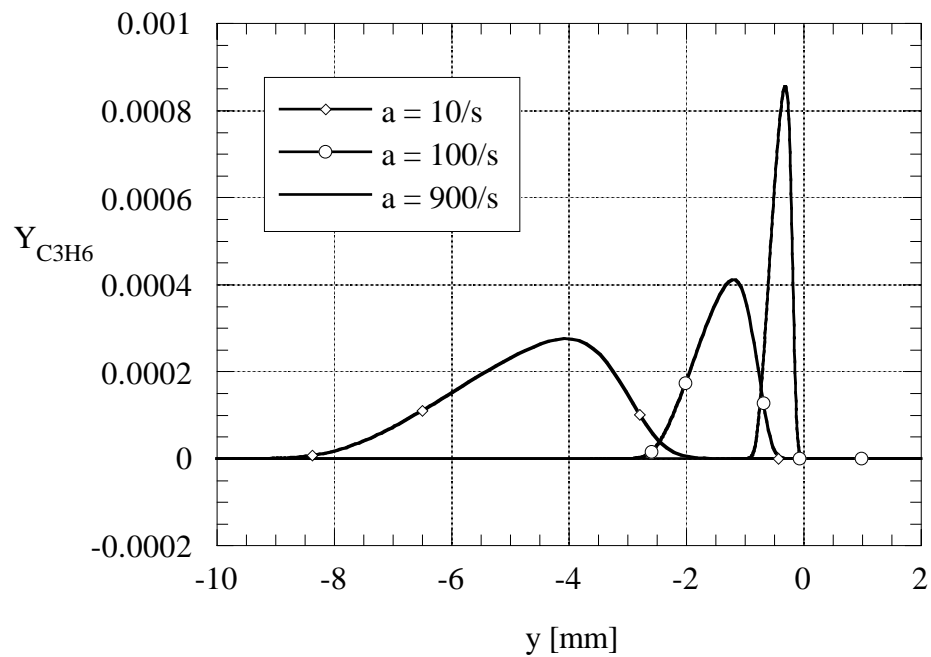


Abbildung 37: C_3H_6 -Konzentrationsprofil für verschiedene Streckungsraten

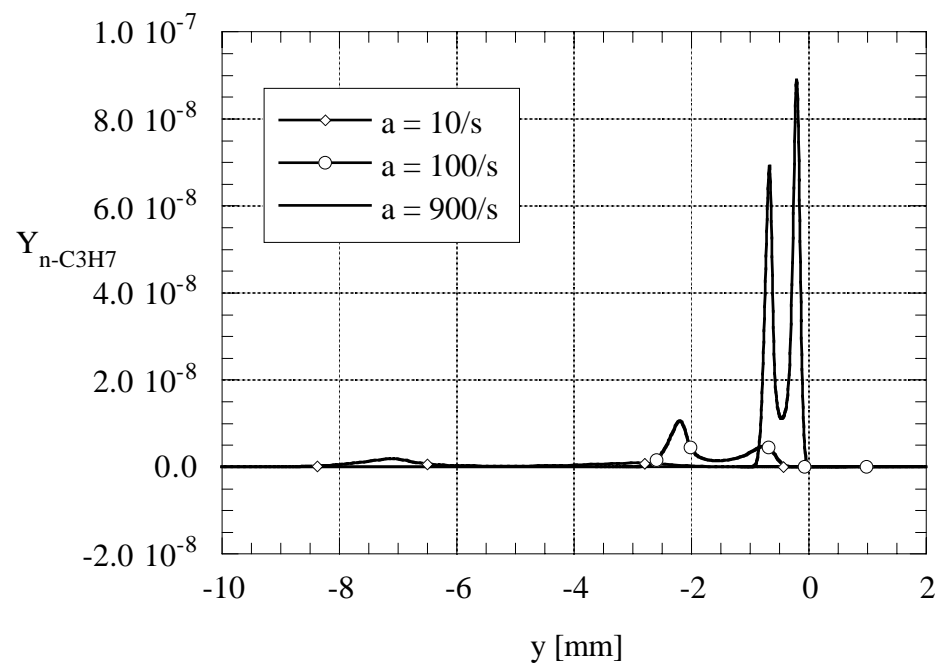


Abbildung 38: $\text{n-C}_3\text{H}_7$ -Konzentrationsprofil für verschiedene Streckungsraten

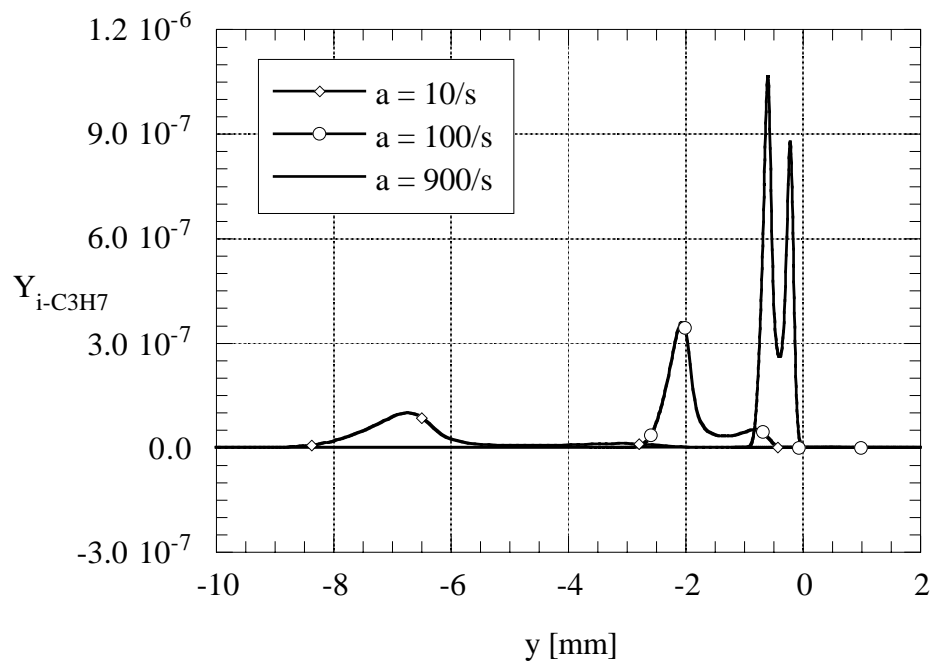


Abbildung 39: $i\text{-C}_3\text{H}_7$ -Konzentrationsprofil für verschiedene Streckungsraten

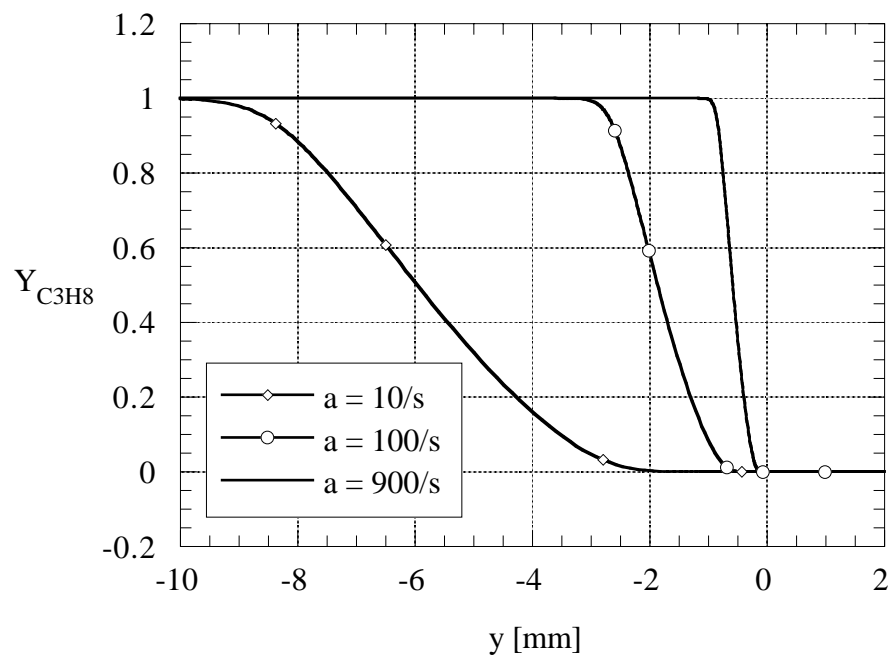


Abbildung 40: C_3H_8 -Konzentrationsprofil für verschiedene Streckungsraten

D.2 Variation des Druckes

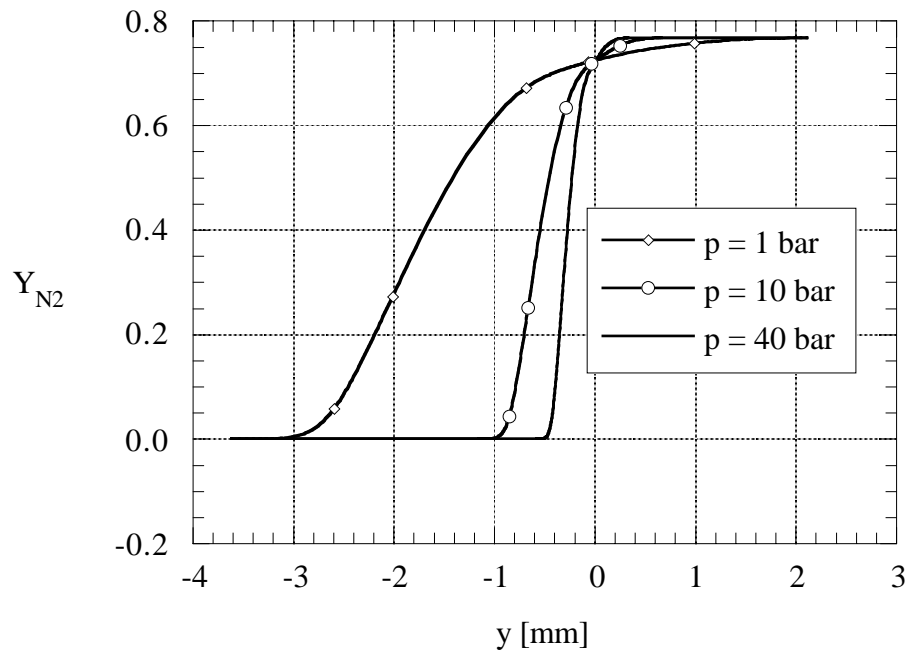


Abbildung 41: N₂-Konzentrationsprofil für verschiedene Drücke

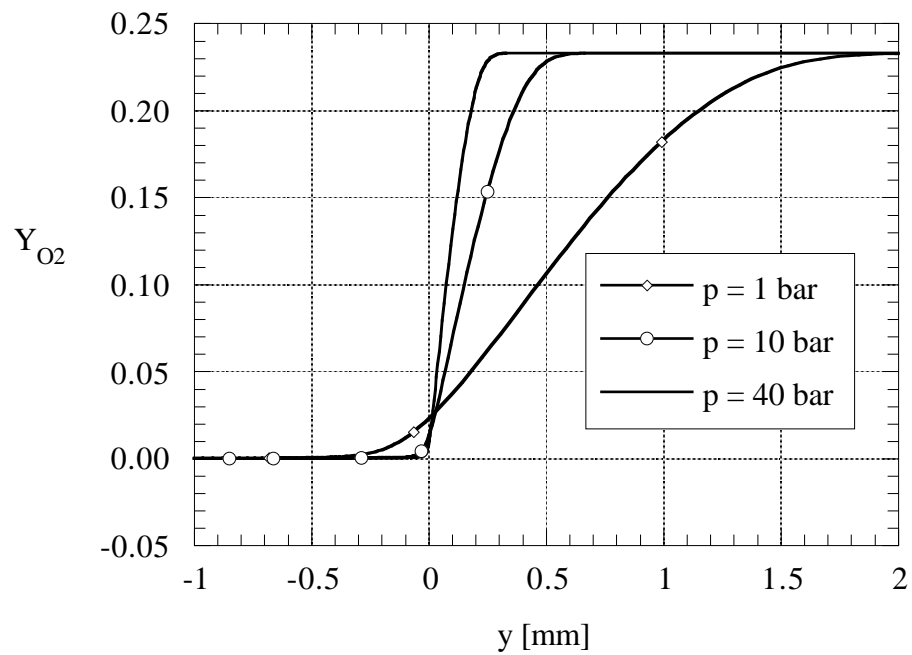


Abbildung 42: O₂-Konzentrationsprofil für verschiedene Drücke

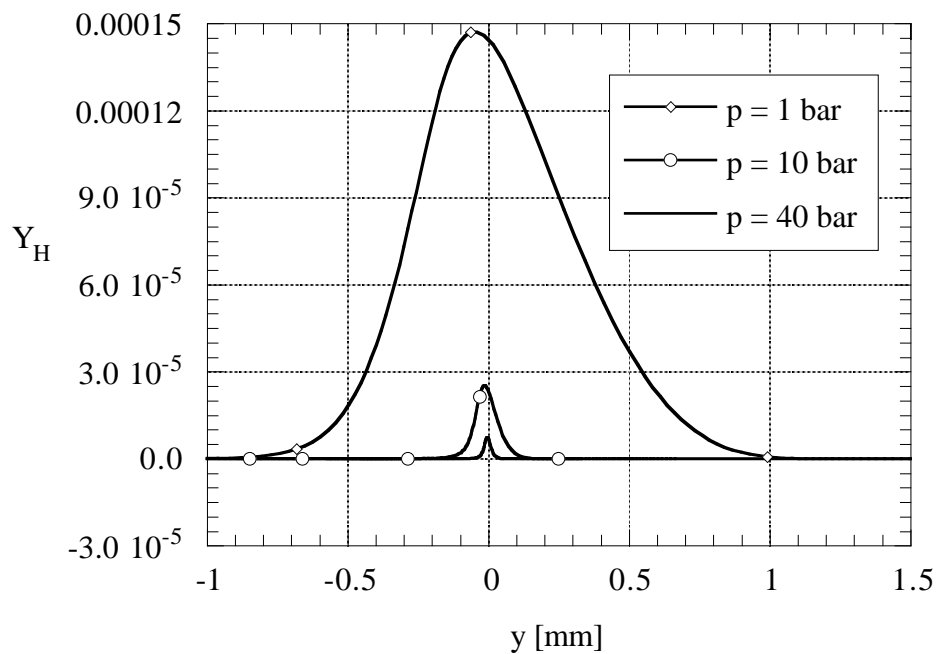


Abbildung 43: H-Konzentrationsprofil für verschiedene Drücke

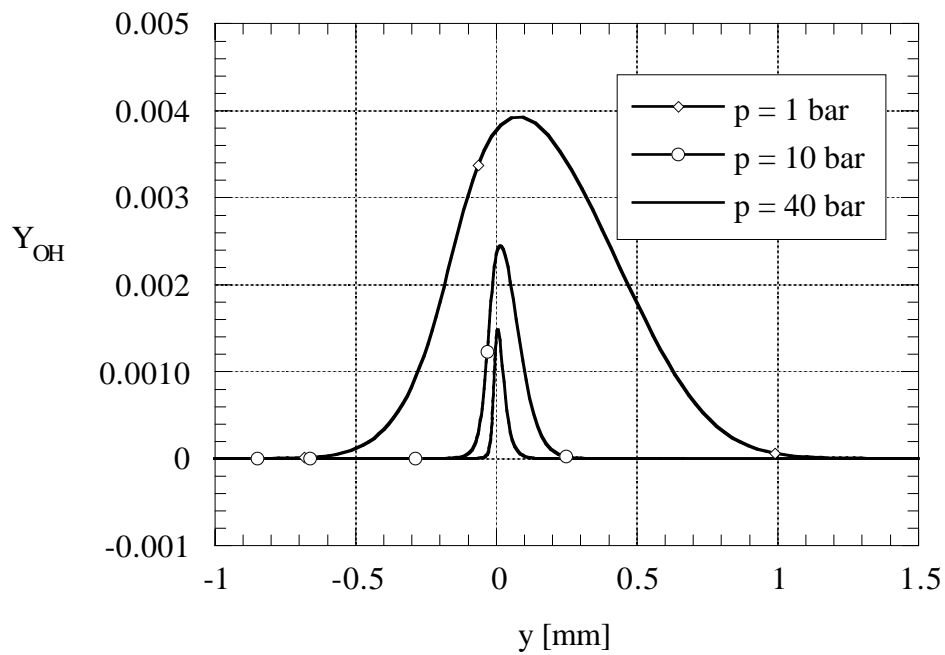


Abbildung 44: OH-Konzentrationsprofil für verschiedene Drücke

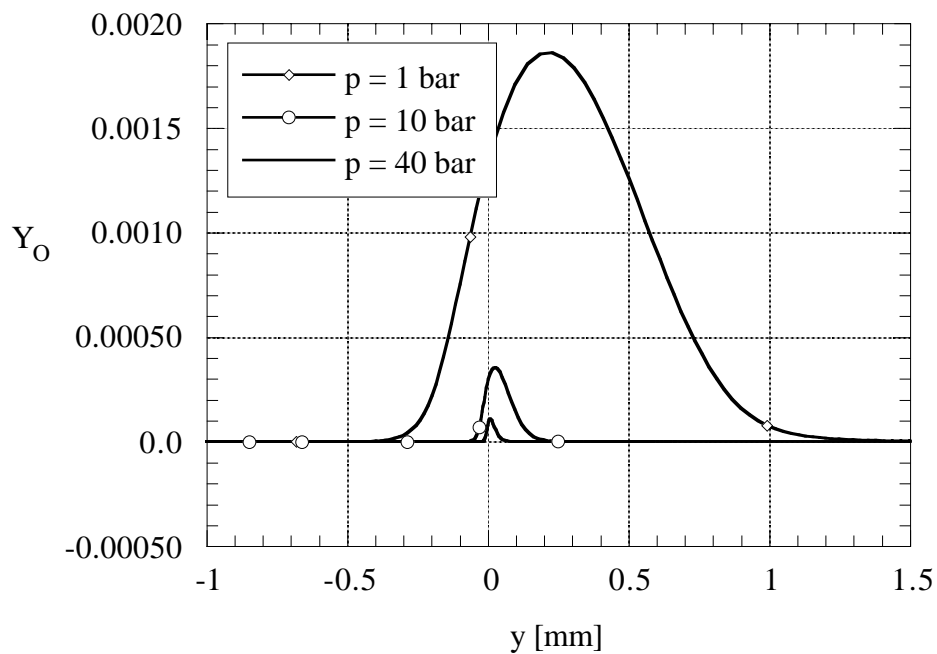


Abbildung 45: O-Konzentrationsprofil für verschiedene Drücke

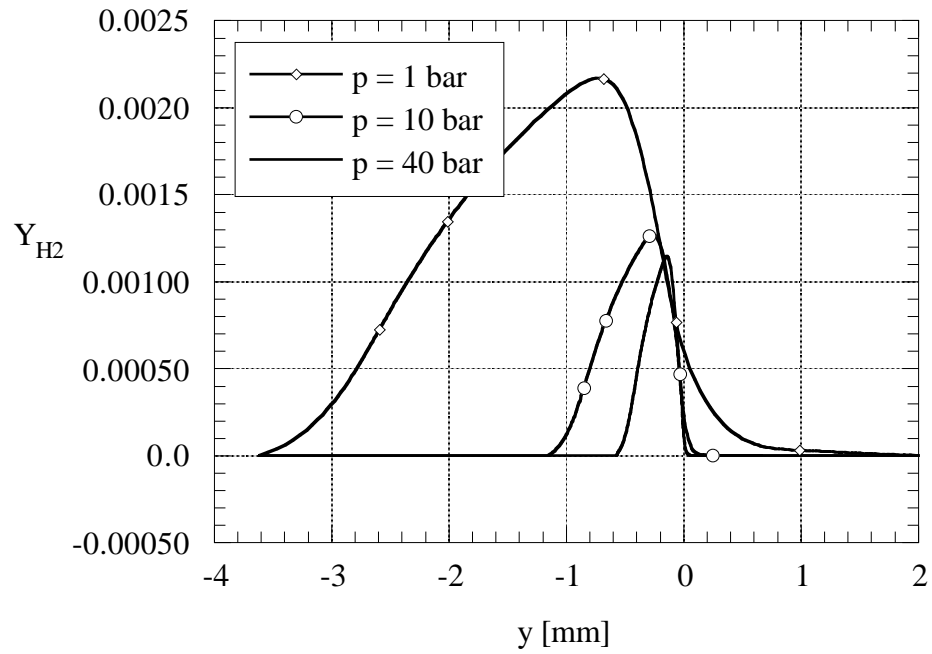


Abbildung 46: H_2 -Konzentrationsprofil für verschiedene Drücke

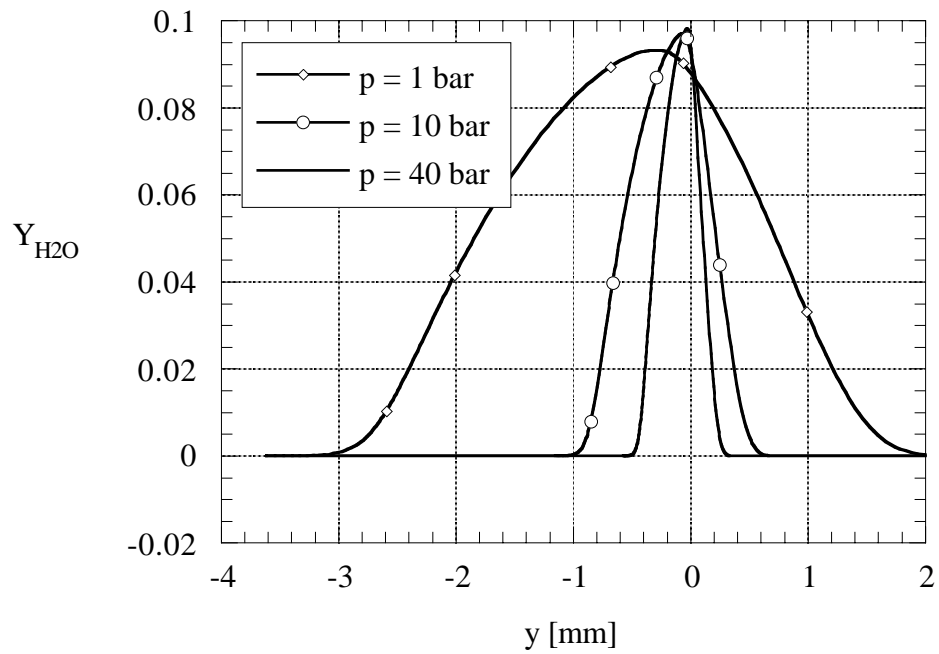


Abbildung 47: H_2O -Konzentrationsprofil für verschiedene Drücke

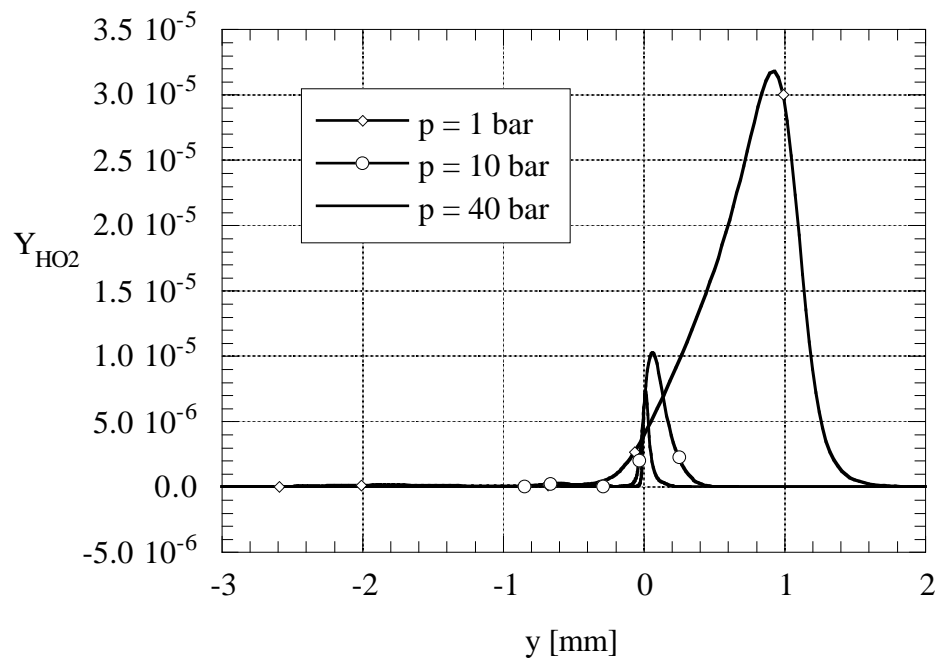


Abbildung 48: HO_2 -Konzentrationsprofil für verschiedene Drücke

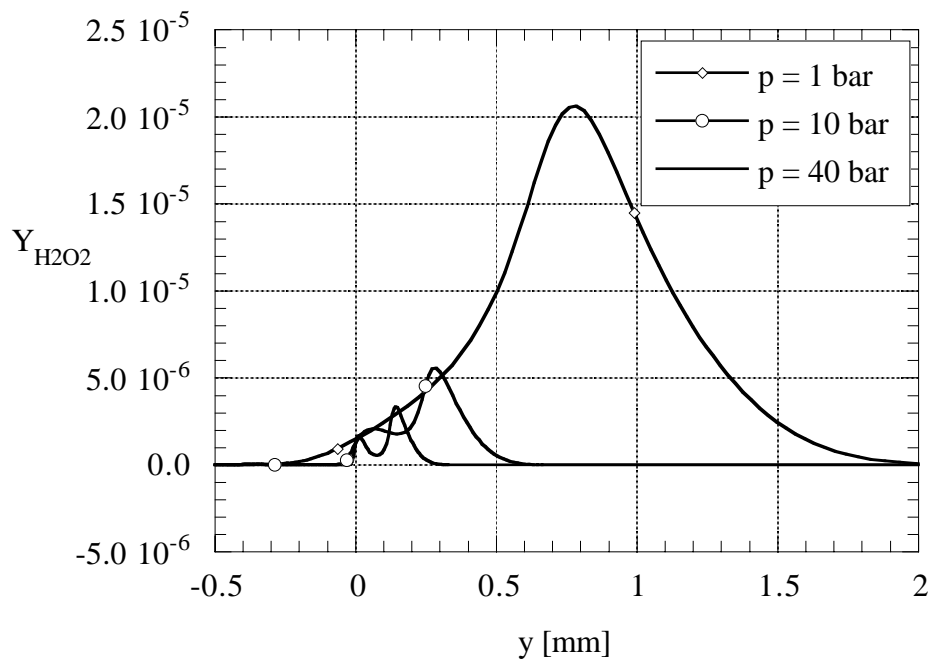


Abbildung 49: H_2O_2 -Konzentrationsprofil für verschiedene Drücke

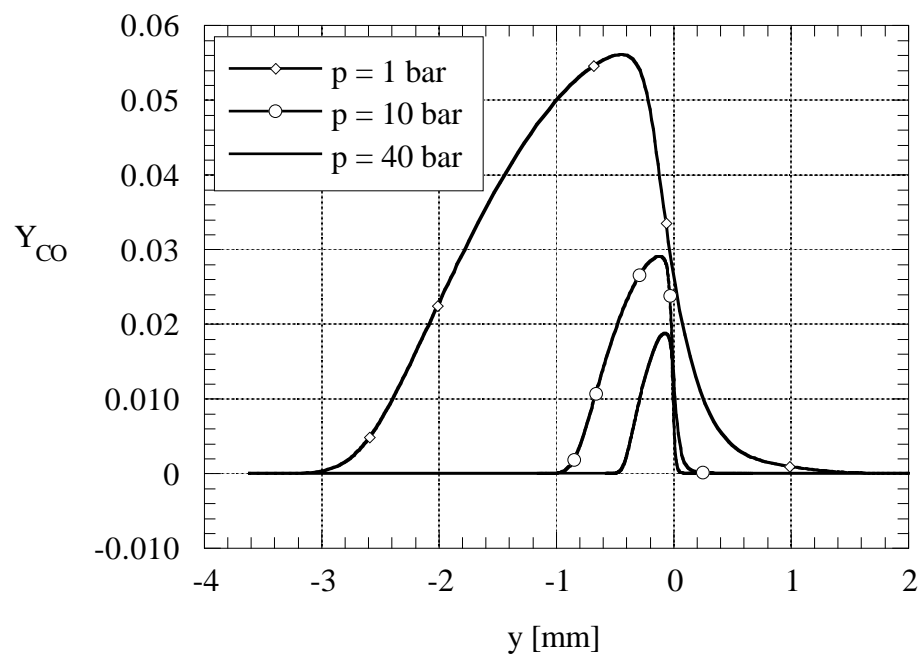
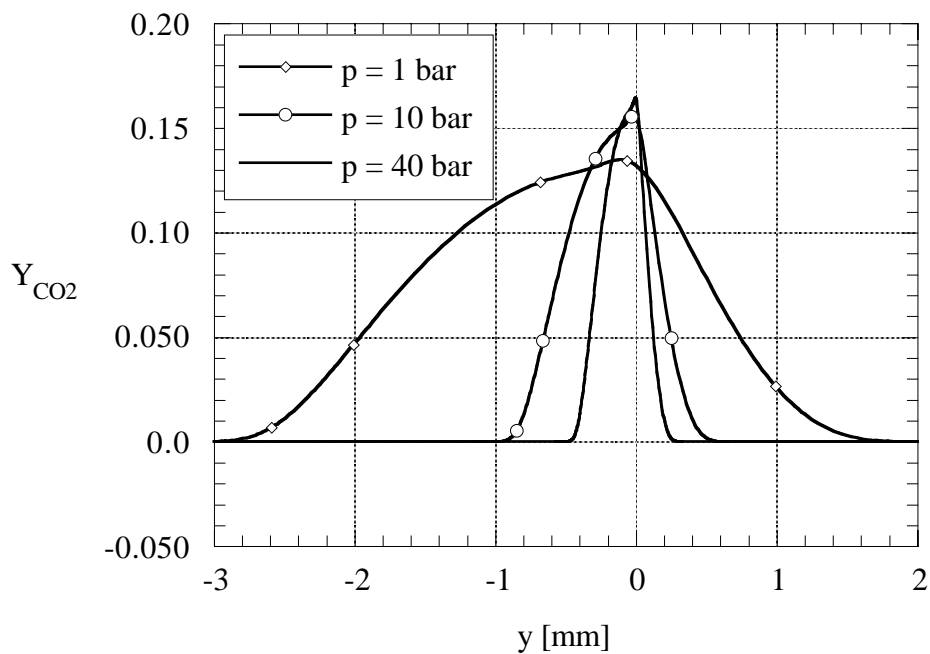


Abbildung 50: CO-Konzentrationsprofil für verschiedene Drücke

Abbildung 51: CO₂-Konzentrationsprofil für verschiedene Drücke

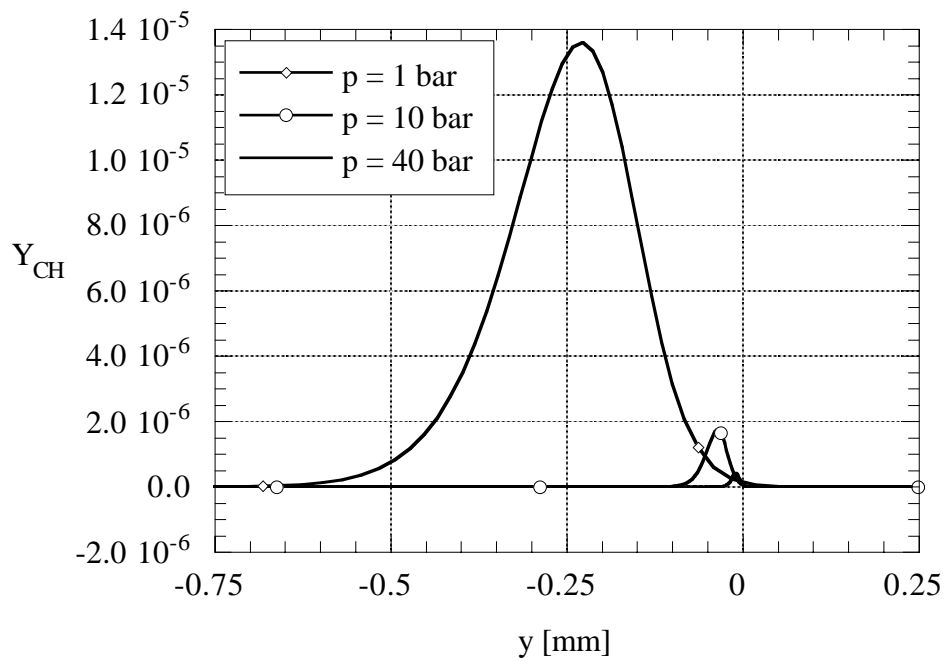


Abbildung 52: CH-Konzentrationsprofil für verschiedene Drücke

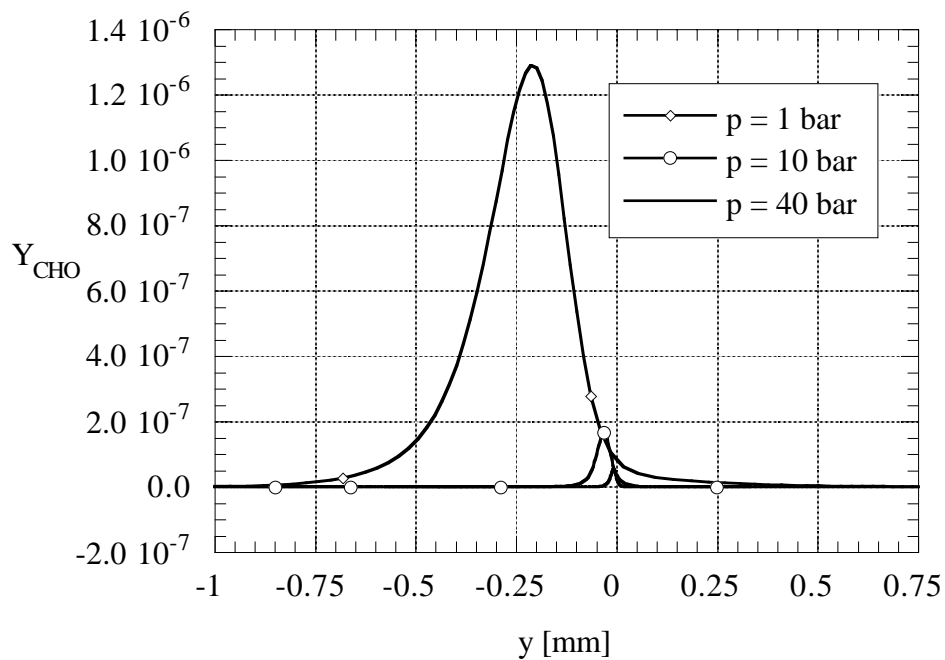


Abbildung 53: CHO-Konzentrationsprofil für verschiedene Drücke

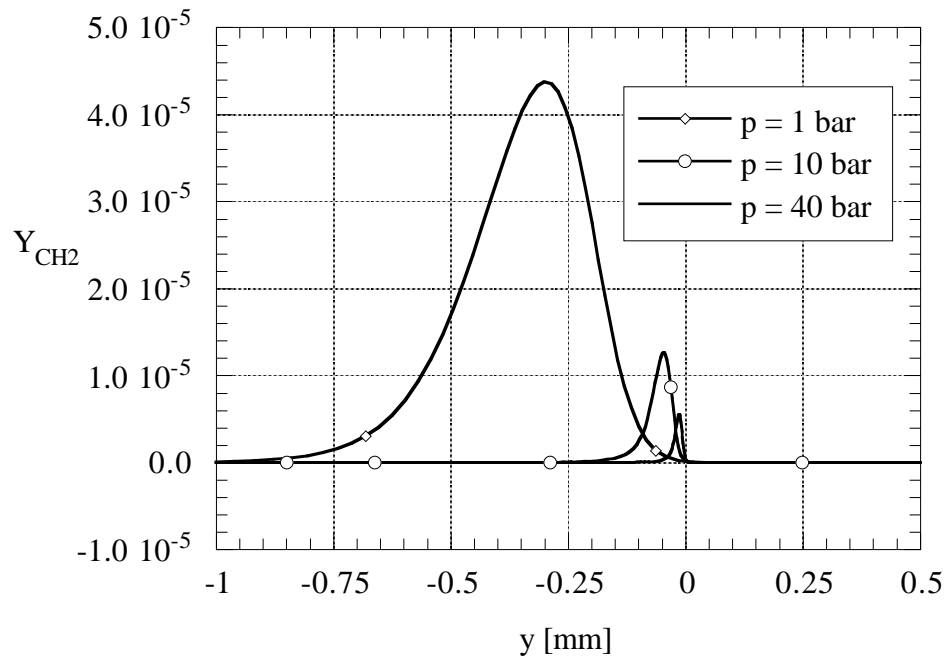


Abbildung 54: CH_2 -Konzentrationsprofil für verschiedene Drücke

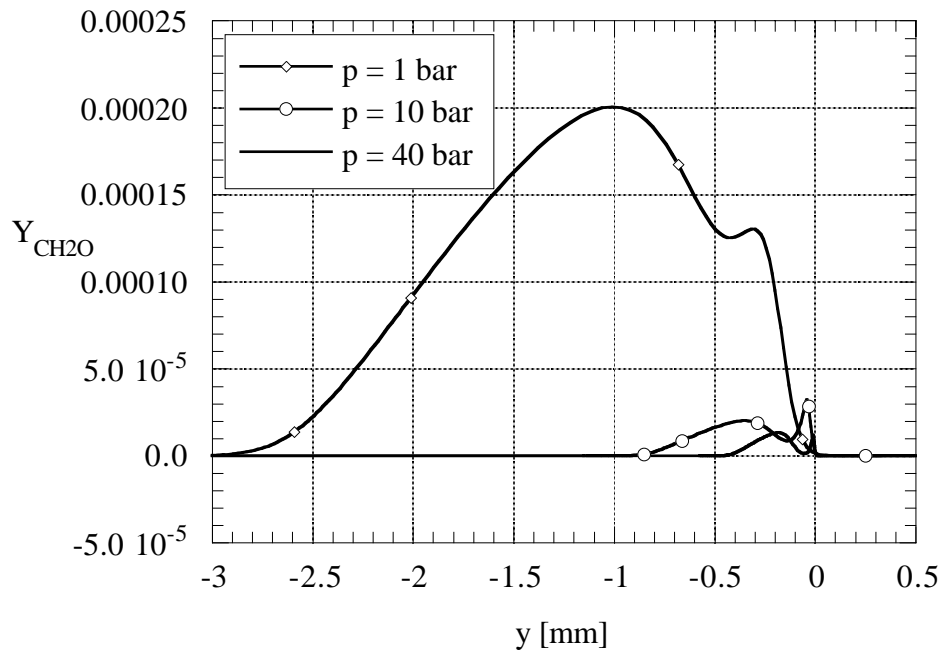


Abbildung 55: CH_2O -Konzentrationsprofil für verschiedene Drücke

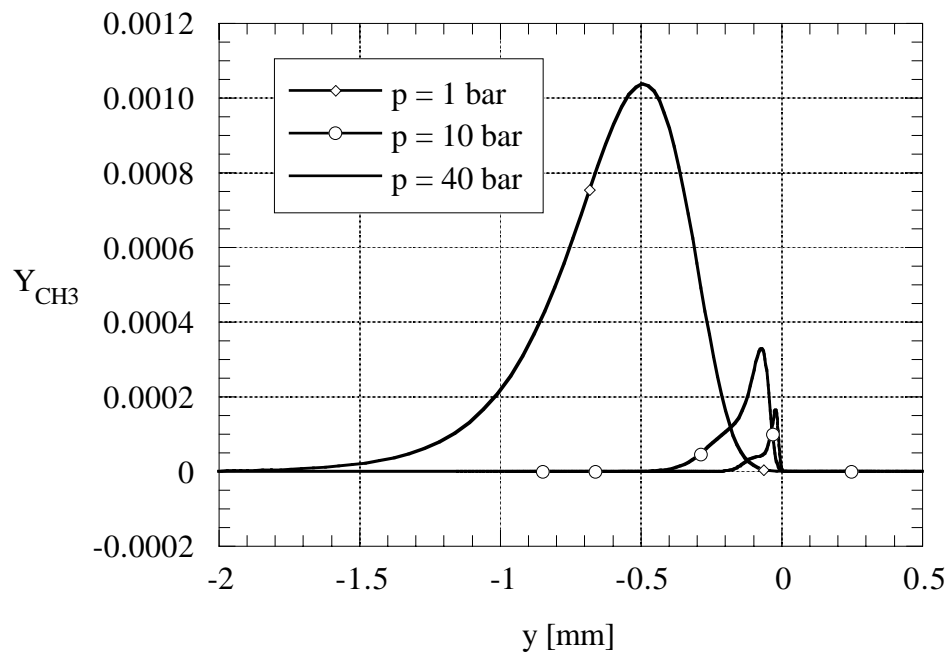


Abbildung 56: CH_3 -Konzentrationsprofil für verschiedene Drücke

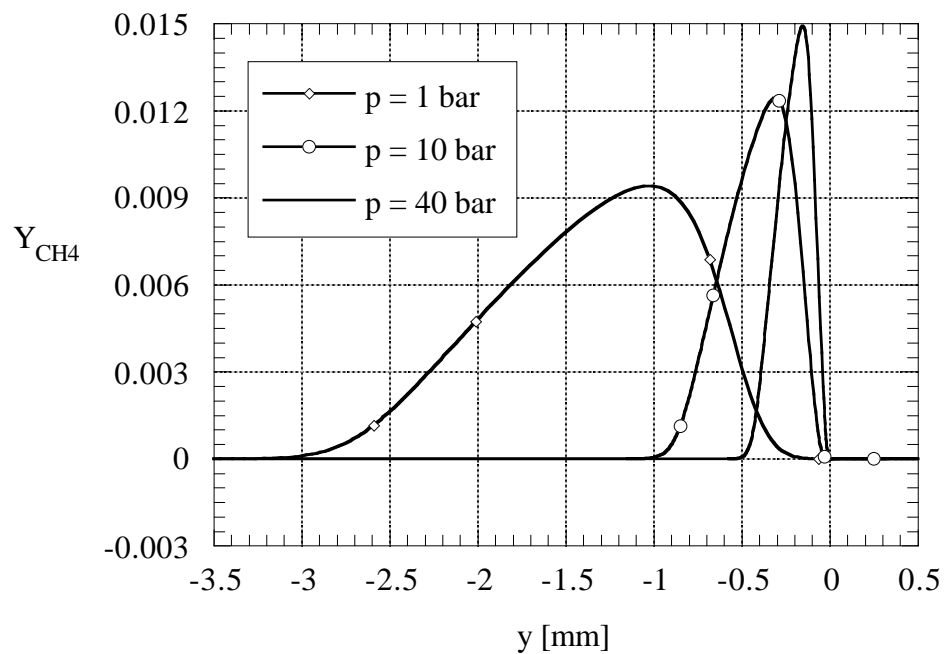
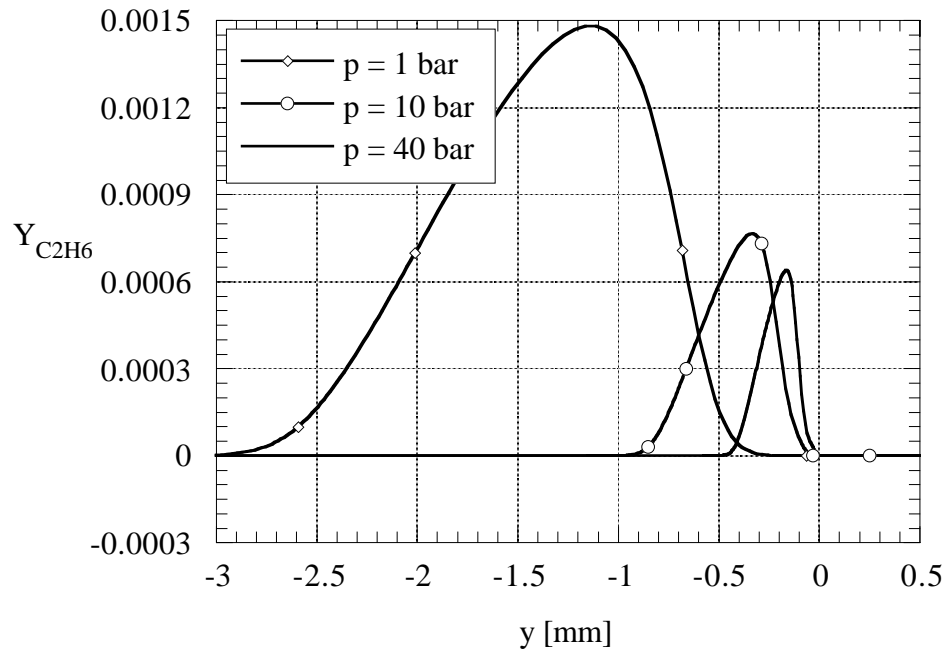
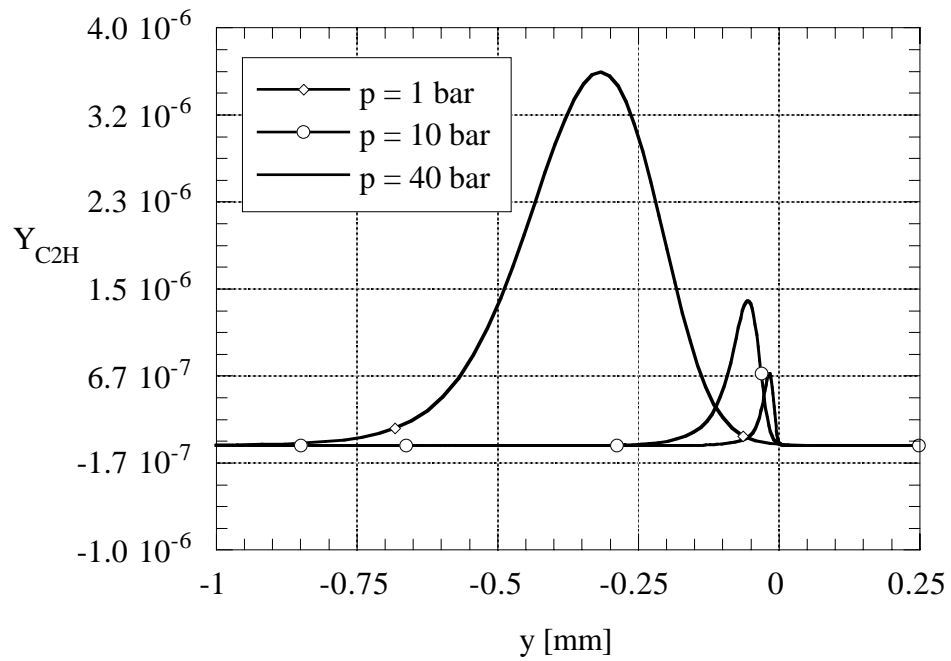


Abbildung 57: CH_4 -Konzentrationsprofil für verschiedene Drücke

Abbildung 58: C_2H_6 -Konzentrationsprofil für verschiedene DrückeAbbildung 59: C_2H -Konzentrationsprofil für verschiedene Drücke

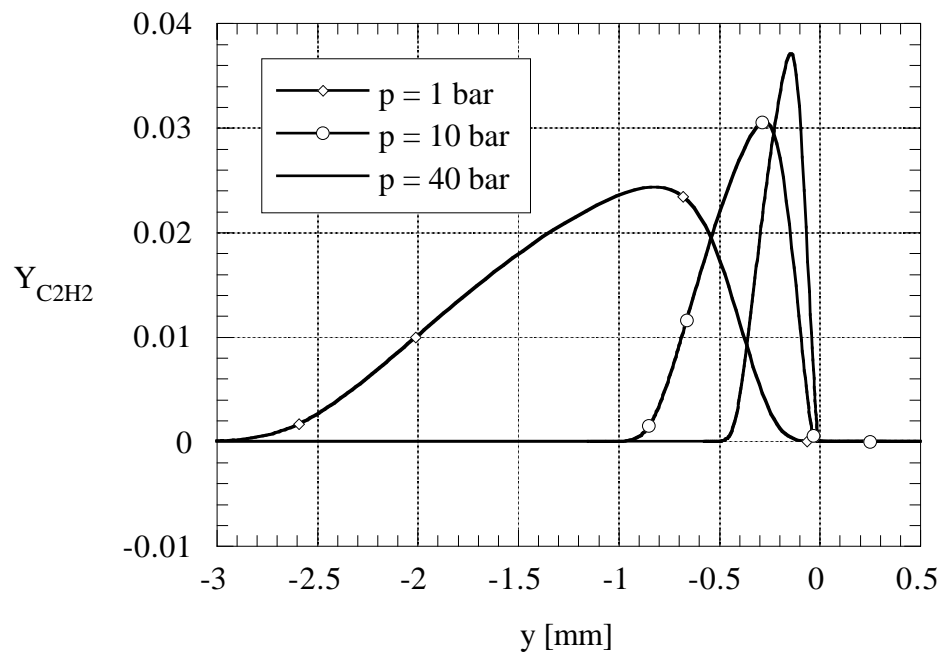


Abbildung 60: C_2H_2 -Konzentrationsprofil für verschiedene Drücke

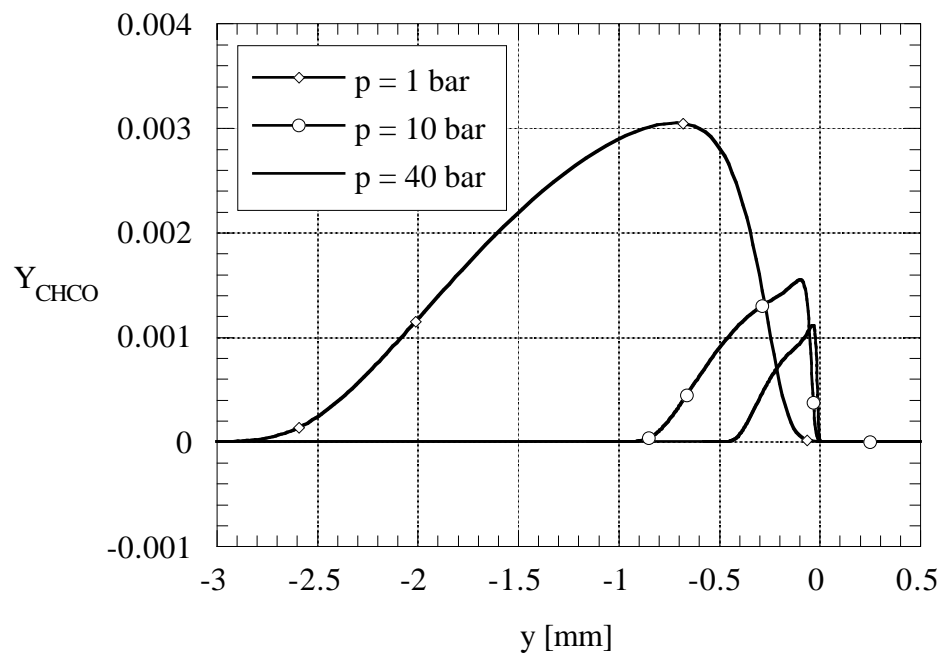
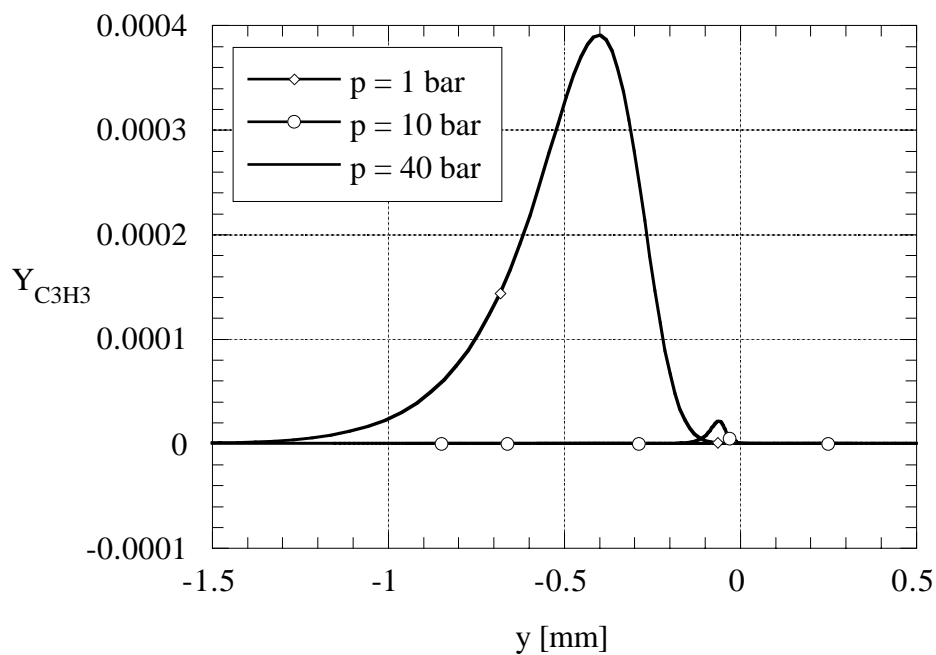
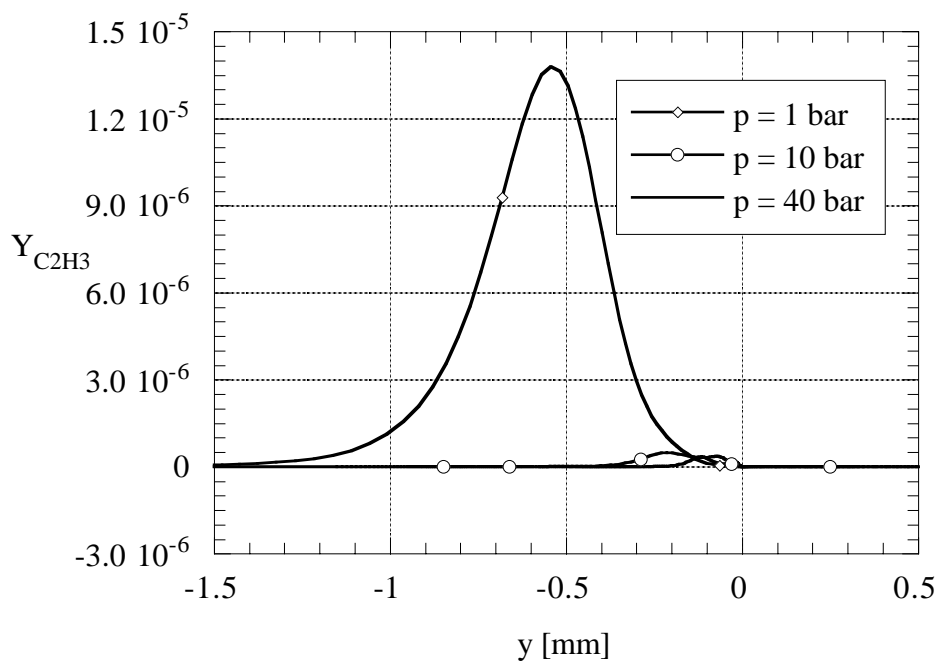
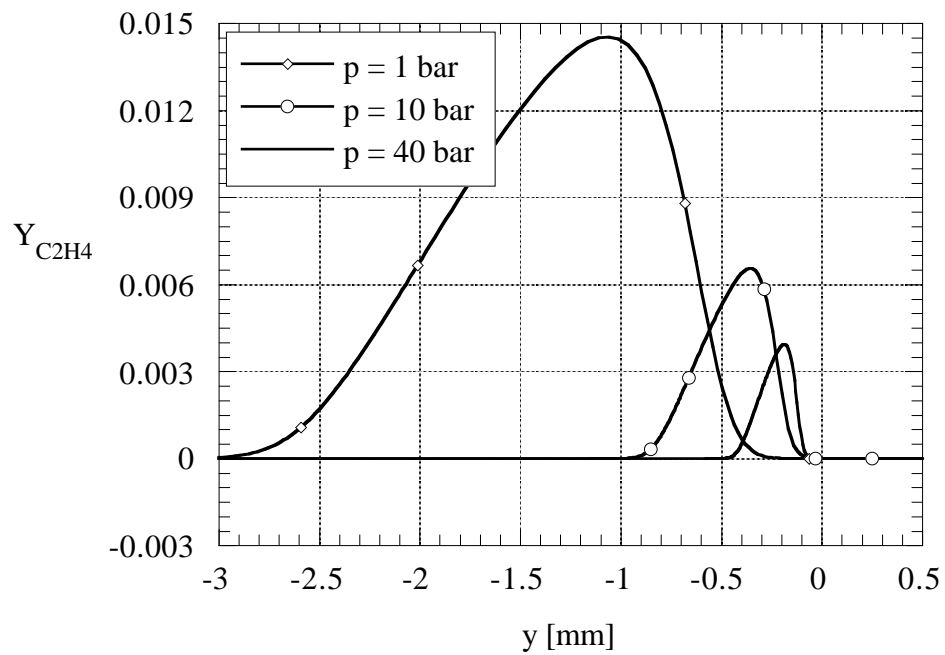
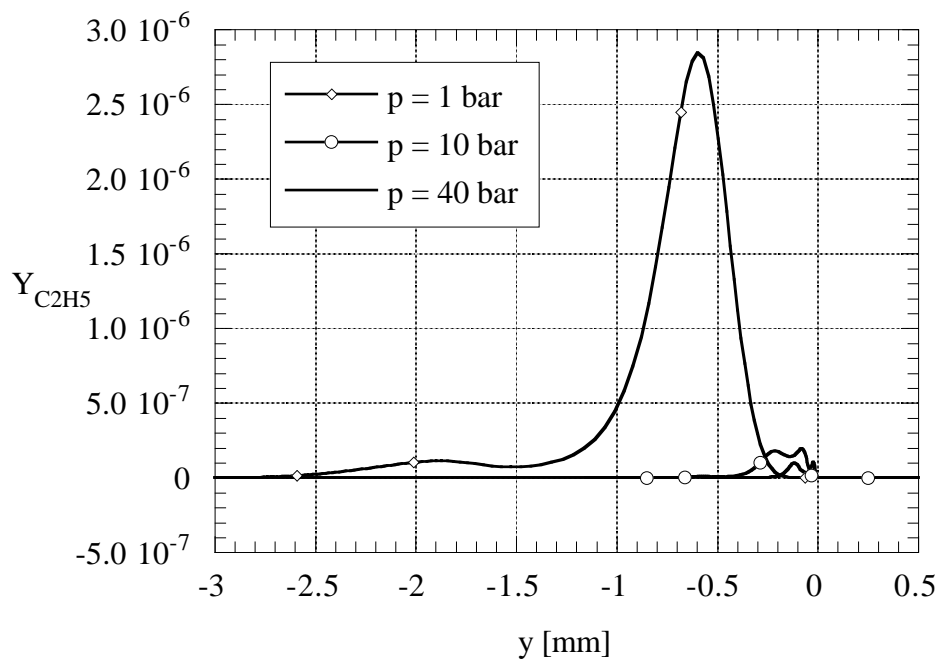
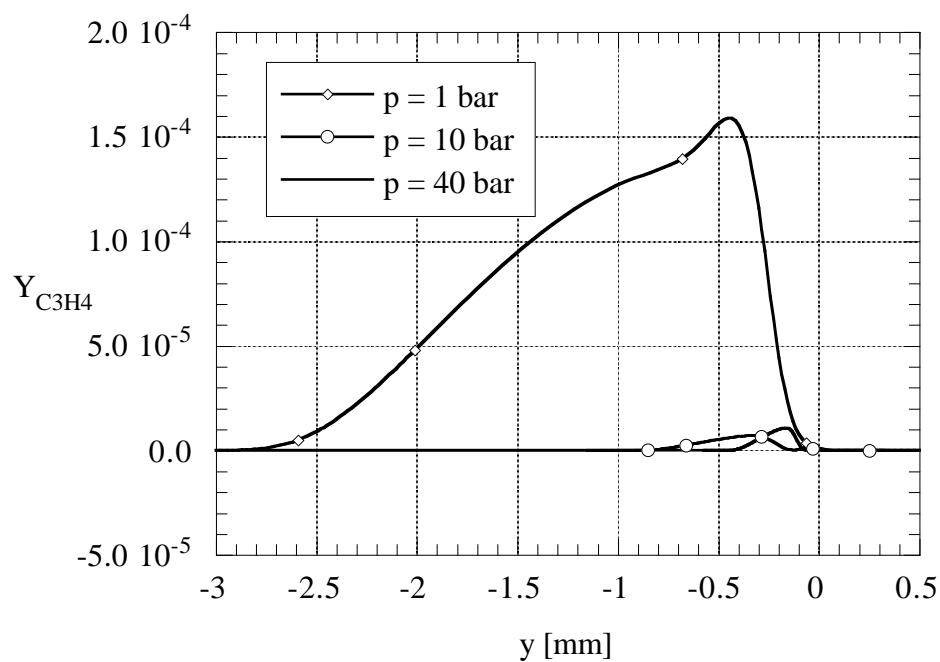
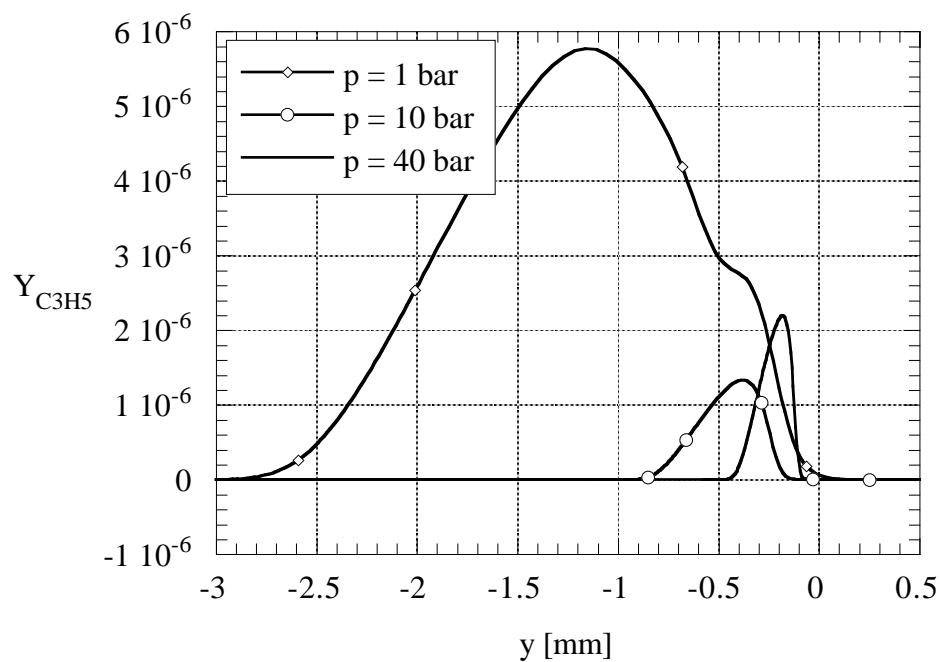


Abbildung 61: CHCO -Konzentrationsprofil für verschiedene Drücke

Abbildung 62: C_3H_3 -Konzentrationsprofil für verschiedene DrückeAbbildung 63: C_2H_3 -Konzentrationsprofil für verschiedene Drücke


Abbildung 64: C_2H_4 -Konzentrationsprofil für verschiedene Drücke

Abbildung 65: C_2H_5 -Konzentrationsprofil für verschiedene Drücke

Abbildung 66: C_3H_4 -Konzentrationsprofil für verschiedene DrückeAbbildung 67: C_3H_5 -Konzentrationsprofil für verschiedene Drücke

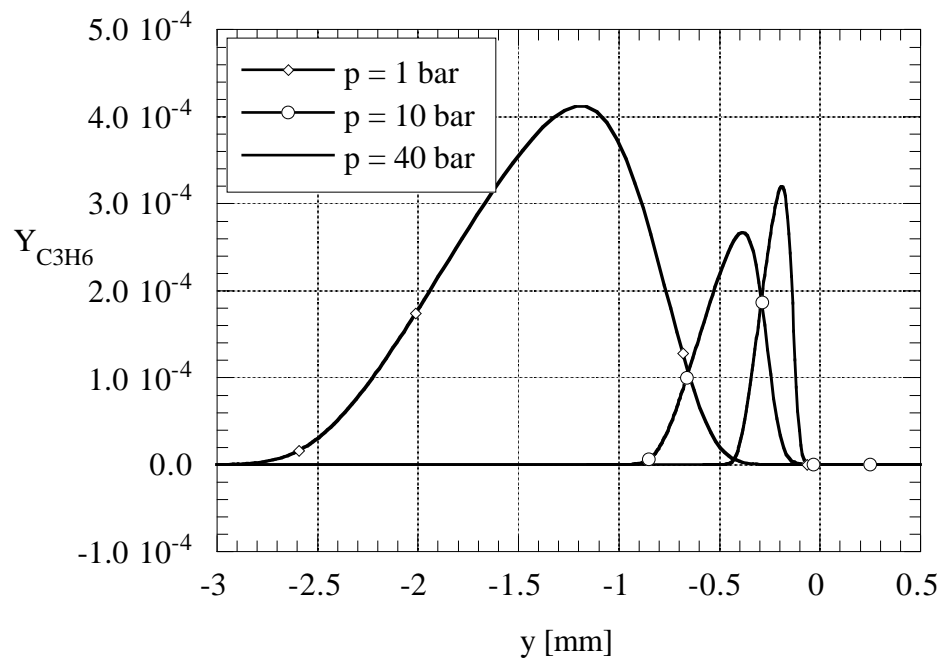


Abbildung 68: C_3H_6 -Konzentrationsprofil für verschiedene Drücke

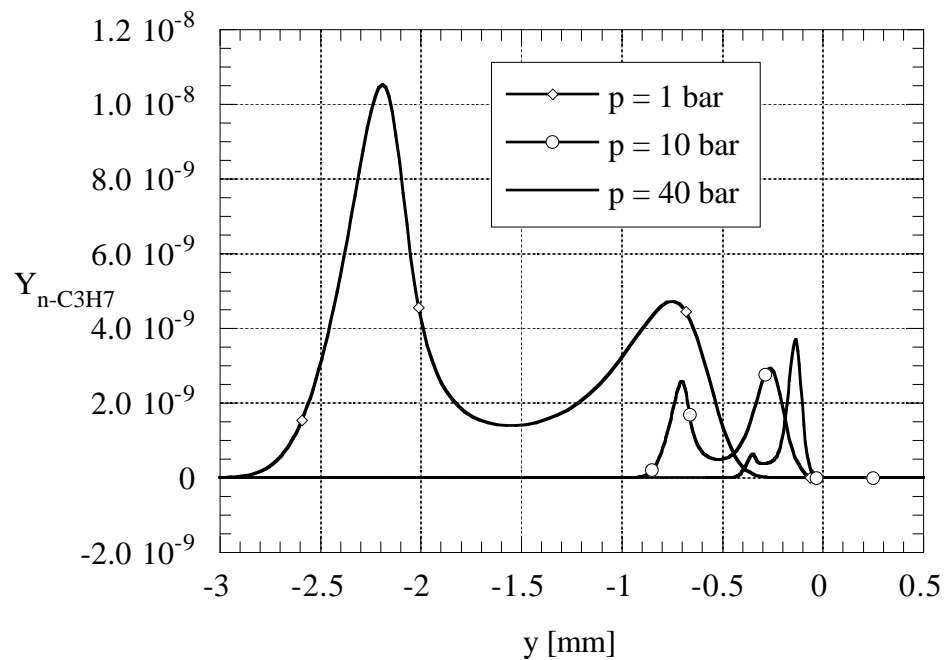


Abbildung 69: $\text{n-C}_3\text{H}_7$ -Konzentrationsprofil für verschiedene Drücke

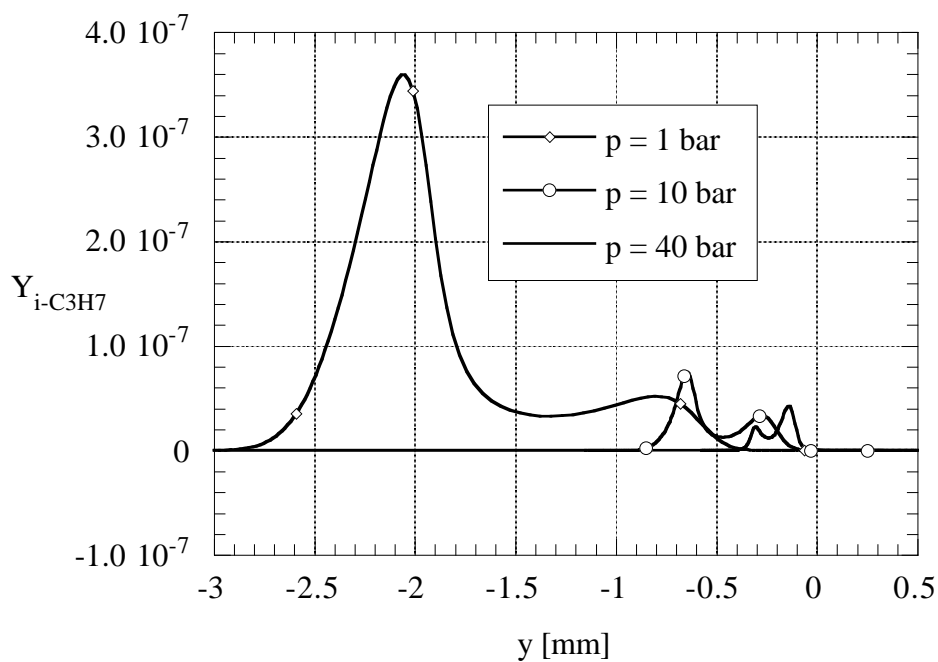


Abbildung 70: $i\text{-C}_3\text{H}_7$ -Konzentrationsprofil für verschiedene Drücke

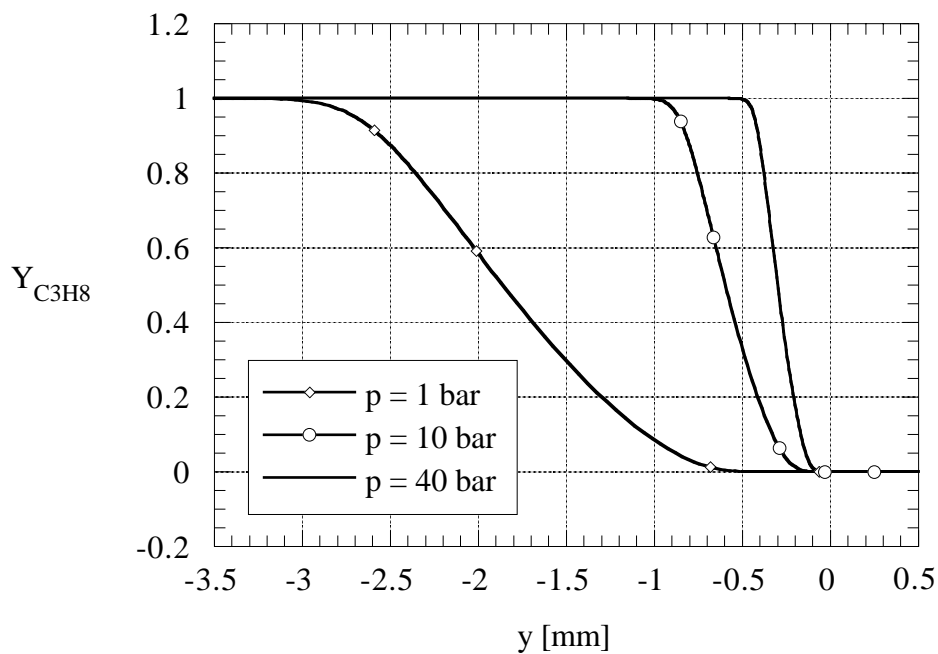


Abbildung 71: C_3H_8 -Konzentrationsprofil für verschiedene Drücke

E Programmverzeichnis

Im folgenden sind die verwendeten und beschriebenen Programme und Programmpakete mit entsprechenden Urheberrechten und Kurzbeschreibung aufgeführt:

- **Flex**: Copyright Free Software Foundation. Scannergenerator, genauere Beschreibung in Abschnitt 4.1.
- **Bison**: Copyright Free Software Foundation. Parsergenerator, genauere Beschreibung in Abschnitt 4.1.
- **ArrayManager**: Copyright Josef Göttgens. Programmpaket zur dynamischen Speicherplatzverwaltung und numerischen linearen Algebra.
- **ListTool**: Copyright Josef Göttgens. Programm zur Aufbereitung der in [16] beschriebenen Flameletfiles zur Verwendung in kommerziellen Graphikprogrammen.
- **ScanMan**: Copyright Heinz Pitsch und Josef Göttgens. Vorlaufprogramm des Programmes **FlameMaster** zum Einlesen und Aufbereiten von Reaktionsmechanismen.
- **FlameMaster**: Copyright Heinz Pitsch und Josef Göttgens. Programm zur Berechnung eindimensionaler, laminarer Flammen.
- **RUN1DL**: Copyright B. Rogg. Programm zur Berechnung eindimensionaler, laminarer Flammen.

Literatur

- [1] N. Peters: *Laminar Diffusion Flamelet Models in Non-Premixed Turbulent Combustion*. Prog. Energy Combust. Sci. 10, S. 319-339 (1984)
- [2] G. Dixon Lewis, T. David, P. H. Haskell, S. Fukutani, H. Jinno, J. A. Miller, R. J. Kee, M. D. Smooke, N. Peters, E. Effelsberg, J. Warnatz, F. Behrendt: *Calculation of the Structure and Extinction Limit of a Methane-Air Counterflow Diffusion Flame in the Forward Stagnation Region of a Porous Cylinder*. Twentieth Symposium (International) on Combustion, Reinhold, New York, S. 1893 (1985)
- [3] U. C. Müller: *Der Einfluß von Strahlungsverlusten auf die thermische NO-Bildung in laminaren CO-H₂-Diffusionsflammen*. Diplomarbeit, Institut für technische Mechanik, RWTH Aachen (1989)
- [4] E. Oran, J. Boris: *Detailed Modeling of Combustion Systems*. Prog. Energy Combust. Sci. 7, S. 1-72 (1981)
- [5] C. F. Curtiss, J. O. Hirschfelder: *Transport Properties of Multicomponent Gas Mixtures*. J. Chem. Phys. 17, S. 550 (1949)
- [6] R. B. Bird, W. F. Stewart, E. N. Lightfoot: *Transport Phenomena*. Wiley, New York (1960)
- [7] A. Burcat: *Thermochemical Data for Combustion Calculations*. in Combustion Chemistry (W. C. Gardiner, Ed.), Springer, S. 455-504 (1984)
- [8] N. Peters: *Flame Calculations with Reduced Mechanisms*. in Reduced Kinetic Mechanisms for Applications in Combustion Systems (N. Peters, B. Rogg, Ed.), Springer, (1993)
- [9] W. C. Gardiner, J. Troe: *Rate Coefficients of Thermal Dissociation, Isomerization and Recombination Reactions*. in Combustion Chemistry (W. C. Gardiner, Ed.), Springer, S. 173-196 (1984)
- [10] J. Troe: J. Phys. Chem. , 83, S. 114 (1979)

- [11] A. C. Hindmarsh: *Solution of Block-Tridiagonal Systems of Linear Equations*. Lawrence Livermore Laboratory Report UCID-30150 (1977)
- [12] U. M. Ascher: *Numerical Solution of Boundary Value Problems for Ordinary Differential Equations*. Prentice Hall (1988)
- [13] J. Göttgens, Private Mitteilung
- [14] P. R. Eiseman: *Adaptive Grid Generation*. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 64 S. 321-376 (1987)
- [15] S. B. Lippman: *C++ Primer*. Addison Wesley (1991)
- [16] J. Göttgens, F. Mauß: *Flamelet Libraries – Description of the Data Format and Catalogue of Existing Libraries*. in Reduced Kinetic Mechanisms for Applications in Combustion Systems (N. Peters, B. Rogg, Ed.), Springer, (1993)
- [17] S. Liñán: Acta Astronautica, 1, S. 1007 (1974)
- [18] K. M. Leung, R. P. Lindstedt, W. P. Jones: *Reduced Kinetic Mechanisms for Propane Diffusion Flames*. in Reduced Kinetic Mechanisms for Applications in Combustion Systems (N. Peters, B. Rogg, Ed.), Springer, (1993)