

lementen und Vorrichtung zur Ausübung des Verfahrens, DE-PS 19 917 165, 5. 9. 2000.

- [4] R. Mai, D. Kreft, H. Leibold, H. Seifert, K. Schulz, Coupled Pressure Pulse (CPP) Recleaning of Ceramic Filter Candles, *4th Internat. Symp. and Exhibition Gas Cleaning at High Temperatures*, Karlsruhe, 22./24. Sept. 1999.
- [5] R. Mai, D. Kreft, H. Leibold, H. Seifert, K. Schulz, Angekoppelte Druckimpulsabreinigung (CPP-Abreinigung) mit integriertem Sicherheitsfilter, *Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6319*, Karlsruhe 1999.
- [6] B. Zimmerlin, H. Leibold, H. Seifert, Development of a Model Dust for the Simulation of Fine and Sticky Dust, *PARTEC 2001: International Congress for Particle Technology*, Nürnberg, 27./29. März 2001.

Numerische Simulationen von Mischung und chemischer Reaktion mit Spektralverfahren unter Verwendung von Waveletfiltern*

CARSTEN BETA** , KAI SCHNEIDER, MARIE FARGE UND HENNING BOCKHORN

1 Problemstellung

Die Untersuchung von Mischungsphänomenen ist ein interdisziplinäres Gebiet. Der atmosphärische und marine Transport von Verunreinigungen, die Produktionsprozesse der Lebensmittelindustrie oder die Stoffwechselfgänge in einem Organismus sind nur einige Beispiele für Mischungsabläufe aus den unterschiedlichsten Bereichen des Lebens. Insbesondere in der chemischen Industrie spielen Mischungsprozesse in Rahmen der Steuerung und Optimierung von Reaktoren eine zentrale Rolle.

In einer allgemeinen Definition kann Mischung als der Übergang zwischen zwei einfachen Systemzuständen, dem Zustand der vollständigen Trennung und dem der

vollkommenen Vermischung der Komponenten, beschrieben werden. Der Transient zwischen diesen Zuständen zeigt komplexe Strukturen und eine komplizierte Dynamik und ist der eigentliche Gegenstand von Mischungsstudien. Da eine Vielzahl industriell relevanter Reaktionen unter turbulenten Strömungsbedingungen in homogener Phase stattfindet, ist das Problem der Vermischung zudem eng mit der Untersuchung turbulenter Strömungen verknüpft [1].

Bedingt durch die rasche Entwicklung computer-technischer Ressourcen gewinnen in neuerer Zeit numerische Methoden zur Erforschung turbulenter Strömungen zunehmend an Bedeutung [2]. Da jedoch auch mit heutigen Computerkapazitäten die direkte numerische Simulation (DNS), d. h. die vollständige Lösung der Bewegungsgleichungen der Strömung auf allen Skalen, für technisch relevante Probleme hoher Reynolds-Zahlen nicht möglich ist, wird der Rechenaufwand durch Aufteilung der Freiheitsgrade in aktive und passive Moden reduziert. Dabei wird lediglich die Entwicklung der geringen Anzahl aktiver Moden simuliert, während die Hinzunahme eines Modells den Einfluss der passiven Moden berücksichtigt.

Eine bereits etablierte, nach diesem Schema aufgebaute Methode ist die Large Eddy Simulation (LES, Grob-skalensimulation) [3]. Die Aufteilung der Moden wird hier durch eine Tiefpassfilterung der Bewegungsgleichungen vollzogen, wobei die groben Skalen als aktive Moden behandelt werden und der Effekt der feinen Skalen (passive Moden) im Rahmen eines Modells in die Simulation ein-geht.

Um Mischung und Reaktion in der Strömung zu berücksichtigen, ist eine entsprechende Erweiterung des Modells erforderlich, wozu im Falle von LES bereits ausführliche Arbeiten existieren [4]. Problematisch ist hierbei, dass aufgrund des Multiskalenverhaltens der turbulenten Strömung [5] auch an einem Mischungsprozess in der Strömung alle Skalen des Systems bis hinunter auf molekulare Ebene (diffusive Vermischung) beteiligt sind. Kommen außerdem chemische Reaktionen hinzu, so gewinnen die feinen Skalen zusätzlich an Bedeutung. Diesem Problem kann durch die Wahl einer Multiskalenfilterung begegnet werden, die verglichen mit der Tiefpassfilterung zu einer geeigneteren Separation in aktive und passive Moden führt.

2 Methode

Eine naheliegende Wahl bietet die in neuerer Zeit zur Modellierung und numerischen Simulation turbulenter Strömungen entwickelte waveletbasierte Coherent Vortex Simulation (CVS) [6, 7], eine Multiskalenmethode, die auf der Verwendung der waveletgefilterten Navier-Stokes-Gleichungen basiert. Die hier vorgestellten Arbeiten sind ein erster Schritt, die CVS-Methode für Mischungs- und Reaktionsvorgänge in turbulenten Strömungen zunächst in zwei Dimensionen zu erweitern.

Eine Wavelettransformation, d. h. die Projektion der Strömung auf eine Waveletbasis, bewirkt deren gleichzeitige Zerlegung in Orts- und Skaleninformation. Wavelets sind selbstähnliche Funktionen, die sowohl im Orts- als

* Vortrag anlässlich der gemeinsamen Sitzung der GVC-Fachausschüsse „Wärme- und Stoffübertragung“ und „CFD“, 5. März 2002 in Weimar.

** Dipl. Chem. C. BETA (Korrespondenzautor, E-mail: beta@fhi-berlin.mpg.de), Fritz-Haber-Institut der MPG, Abteilung Physikalische Chemie, Faradayweg 4–6, D-14195 Berlin; Prof. Dr. K. SCHNEIDER, Laboratoire de Modélisation et Simulation Numérique en Mécanique du CNRS & Centre de Mathématiques et d'Informatique, Université de Provence, 39 rue Joliot-Curie, 13453 Marseille Cedex 13, France; Prof. Dr. M. FARGE, Laboratoire de Météorologie Dynamique du CNRS, Ecole Normale Supérieure de Paris, 24 rue Lhomond, 75231 Paris Cedex 05, France; Prof. Dr.-Ing. H. BOCKHORN, Institut für Chemische Technik, Universität Karlsruhe (TH), Kaiserstraße 12, D-76128 Karlsruhe.

auch im Frequenzraum eine hohe Lokalisierung aufweisen und die durch Dilatation und Translation eines so genannten Basiswavelets generiert werden. Für eine fundierte mathematische Behandlung von Wavelets siehe z. B. [8, 9].

Die CVS-Methode bedient sich einer Waveletfilterung (im Folgenden als CVS-Filterung bezeichnet), um das Wirbelstärkefeld der Strömung in aktive und passive Moden zu trennen, die in diesem Fall als kohärenter und inkohärenter Teil der Strömung bezeichnet werden. Die Filterung erfolgt in drei Schritten:

- Projektion des Wirbelstärkefeldes auf eine orthogonale Waveletbasis.

Abbildung 1.

Links: Ungefiltertes Wirbelstärkefeld (oben), kohärenter (Mitte) und inkohärenter (unten) Teil. Rechts: Konzentrationsfeld, advektiert von der ungefilterten Strömung (oben), vom kohärenten (Mitte) und vom inkohärenten (unten) Teil nach zehn Wirbelumdrehungszeiten.

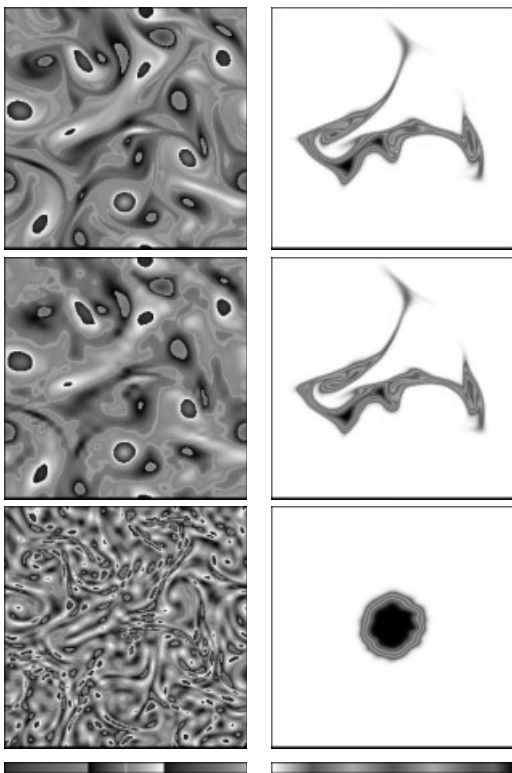


Tabelle 1.

Kompressionsrate, Energie (massenspezifisch) und Enstrophie zur CVS-Filterung eines turbulenten Wirbelstärkefeldes.

Koeffizienten	gesamt	65536	100 %
	kohärent	566	0,9 %
	inkohärent	64970	99,1 %
Energie	gesamt	0,0974	100 %
[m ² /s ²]	kohärent	0,0967	99,3 %
	inkohärent	6,5526 × 10 ⁻⁴	0,7 %
Enstrophie	gesamt	2,2046	100 %
[1/s ²]	kohärent	2,0531	93,1 %
	inkohärent	0,1515	6,9 %

- Filterung der Waveletkoeffizienten des Wirbelstärkefeldes an einem festgelegten Schwellenwert. Koeffizienten, deren Betrag oberhalb der Filterschwelle liegt, gehören dem kohärenten Teil an, Koeffizienten, deren Betrag unterhalb des Filterwertes liegt, dem inkohärenten.
- Rekonstruktion des kohärenten und inkohärenten Wirbelstärkefeldes der Strömung durch inverse Wavelettransformation aus den beiden Teilmengen der Waveletkoeffizienten.

Die linke Seite von Abb. 1 zeigt das Resultat dieser Filterung für ein zweidimensionales, homogenes und isotropes turbulentes Wirbelstärkefeld. Es erfolgt eine starke Kompression: Der kohärente Teil wird lediglich aus den 0,9 % größten Waveletkoeffizienten rekonstruiert. Trotz der hohen Kompression enthält der kohärente Teil 99,3 % der kinetischen Energie, $E(t) = \frac{1}{2} \frac{1}{4\pi^2} \int |\mathbf{v}(\mathbf{x}, t)|^2 d\mathbf{x}$, und 93,1 % der Enstrophie, $Z(t) = \frac{1}{2} \frac{1}{4\pi^2} \int |\omega(\mathbf{x}, t)|^2 d\mathbf{x}$, (s. Tab. 1) und weist, verglichen mit dem ungefilterten Strömungsfeld, dieselbe lokale Verteilung von Wirbelstrukturen auf (s. Abb. 1 links, oben und Mitte).

Abb. 2 zeigt die Energiespektren des ungefilterten Strömungsfeldes sowie der kohärenten und inkohärenten Teile. Abgesehen von den kleinsten Skalen wird der Verlauf des Gesamtspektrums durch das Spektrum des kohärenten Teils gut wiedergegeben. Das Spektrum des inkohärenten Teils hingegen zeigt über weite Teile einen k^{-1} -Verlauf, was einer Enstrophiegleichverteilung bzw. einer Dekorrelation im Ort entspricht. Die Spektren zeigen ferner, dass der kohärente wie auch der inkohärente Teil Multiskalenverhalten aufweisen.

Auch für die in Abb. 3 gezeigten Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen (PDFs) zeigt sich eine gute Übereinstimmung des kohärenten Teils mit dem Gesamtfeld. Die PDF des inkohärenten Teils hingegen weist eine wesentlich geringere Streuung auf und zeigt den parabolischen Verlauf einer Gauß-Verteilung in guter Übereinstimmung mit der

Abbildung 2.

Energiespektren $E(k)$ des ungefilterten, des kohärenten und inkohärenten Strömungsfeldes, definiert gemäß

$$E(k) = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}:|\mathbf{k}|=k} |\hat{\mathbf{v}}(\mathbf{k})|^2, \text{ mit } \hat{\mathbf{v}} \text{ der Fourier-Transformierten des}$$

Geschwindigkeitsfeldes und $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ dem

Wellenzahlvektor vom Betrag $k = |\mathbf{k}| = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$.

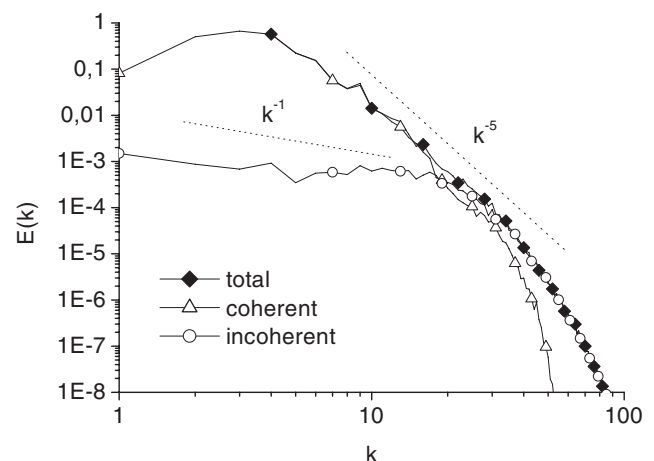
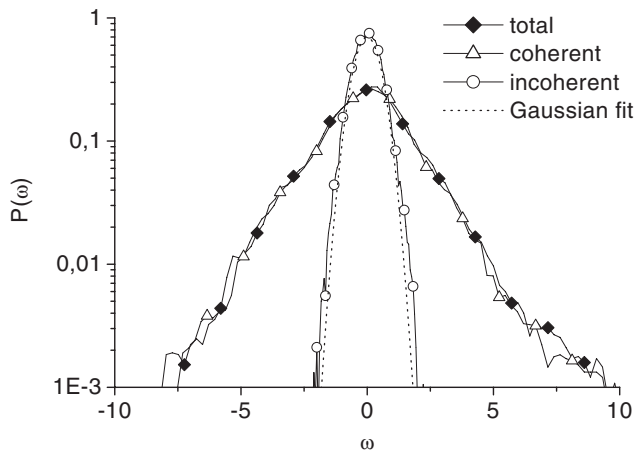


Abbildung 3. Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen (PDFs) des ungefilterten, des kohärenten und inkohärenten Wirbelstärkefeldes.



strukturlosen Erscheinung des inkohärenten Wirbelstärkefeldes, das einem statistischen Rauschen gleicht (s. Abb. 1 links, unten).

3 Ergebnisse

Im Folgenden wird untersucht, inwieweit eine Anwendung der CVS-Filterung auf turbulente Strömungen möglich ist, in denen Mischungs- und Reaktionsprozesse stattfinden. Dazu wird die zeitliche Entwicklung einer zweidimensionalen, inkompressiblen, Newtonschen, homogenen und isotropen turbulenten Strömung durch Integration der Navier-Stokes-Gleichungen mittels DNS berechnet. Verwendet wird die Wirbelstärke-Geschwindigkeitsformulierung der Navier-Stokes-Gleichungen

$$\begin{aligned} \partial_t \omega + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \omega - \nu \nabla^2 \omega &= 0 \\ \nabla \cdot \mathbf{v} &= 0 \end{aligned} \tag{1}$$

mit der Geschwindigkeit $\mathbf{v} = (u(\mathbf{x}, t), v(\mathbf{x}, t))$, der Wirbelstärke $\omega = \nabla \times \mathbf{v}$ und einer kinematischen Viskosität $\nu = 9,9 \times 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}$, was einer Reynolds-Zahl von $Re = 1236$ entspricht, basierend auf der turbulenten kinetischen Energie und der Feldgröße. Als Strömungsfeld wird ein quadratisches Gebiet $\Omega = [0, 2\pi] \times [0, 2\pi]$ mit periodischen Randbedingungen gewählt und als Anfangsbedingung das in Abb. 1, links oben, gezeigte Strömungsfeld.

Zur Integration von Gl. (1) (und später auch der Konvektions-Diffusions-Gleichungen für die Konzentrationsfelder) wird ein Standard-Pseudospektralcode verwendet [2]. Simultan mit der Zeitentwicklung der Strömung wird in jedem Zeitschritt eine CVS-Filterung des Gesamtfeldes in seinen kohärenten und seinen inkohärenten Teil durchgeführt. Daran anschließend werden die Konvektions-Diffusions-Gleichungen der sich vermischenden (und eventuell reagierenden) Spezies c_i

$$\partial_t c_i + (\mathbf{v} \cdot \nabla) c_i - \frac{1}{Sc_i Re} \nabla^2 c_i = 0 \tag{2}$$

mit jedem der drei Geschwindigkeitsfelder, dem gesamten, dem kohärenten und dem inkohärenten, gelöst. (In Gl. (2)

steht $c_i = c_i(\mathbf{x}, t)$ für die zwischen Null und Eins normierte Konzentration der Spezies i , $Sc_i = \nu/D_i$ für die Schmidt-Zahl dieser Spezies mit ν der kinematischen Viskosität des Fluids und D_i dem Diffusionskoeffizienten der Spezies i und schließlich Re für die Reynolds-Zahl des Fluids.)

Abb. 1 zeigt in der rechten Spalte das Konzentrationsfeld eines passiven Skalars nach Vermischung über einen Zeitraum von zehn Wirbelumdrehungszeiten ($\tau = 1/\sqrt{2Z(0)} = 0,5 \text{ s}$), ausgehend von einem kreisförmigen Gebiet maximaler Konzentration in der Mitte zum Zeitpunkt $t = 0$. Der visuelle Vergleich ergibt eine hohe Übereinstimmung zwischen dem in der Gesamtströmung (oben) und dem im kohärenten Teil (Mitte) vermischten Konzentrationsfeld. Das durch den inkohärenten Teil der Strömung advektierte Skalarfeld (unten) hingegen zeigt nach zehn Wirbelumdrehungszeiten eine völlig andere Gestalt und scheint lediglich einem Diffusionsprozess ausgesetzt zu sein.

Eine quantitative Auswertung des Mischungsvorgangs bestätigt diesen Eindruck. Die globale Produktion von Gradienten im Konzentrationsfeld wird bestimmt durch Dehnung und Stauchung der Grenze der unvermischten Bereiche infolge konvektiver Vermischung (*macro-mixing*). Der Verlauf dieser Größe (s. Abb. 4) zeigt eine weitgehende Übereinstimmung für die ungefilterte Strömung und den kohärenten Teil. Die Vermischung im inkohärenten Teil hingegen zeigt keine nennenswerte Gradientenproduktion und damit keinen Beitrag zum konvektiven Teil des Mischungsprozesses. Ebenso zeigt der zeitliche Verlauf der Varianz $\sigma^2(t) = \int_{\Omega} (c(t) - \bar{c})^2 d\mathbf{x}$ des Konzentrationsfeldes eine hohe Übereinstimmung für die Gesamtströmung und den kohärenten Teil.

In Abb. 5 ist die Differenz $\sigma^2(0) - \sigma^2(t)$ der Varianz zum Zeitpunkt $t = 0$ und der momentanen Varianz in einem doppeltlogarithmischen Diagramm aufgetragen. Neben dem hohen Grad an Übereinstimmung dieser Größe für die Gesamtströmung und den kohärenten Teil erkennt man fer-

Abbildung 4. Zeitlicher Verlauf der globalen Produktion von Gradienten im Konzentrationsfeld $\Gamma(t)$, definiert als das Integral über die lokale Gradientenproduktion $\gamma = \frac{1}{2} |\nabla c| s \cos 2\alpha$, wobei α den Winkel zwischen dem Gradientenvektor und dem Eigenvektor des Verzerrungstensors in Kompressionsrichtung bezeichnet. Ferner ist $s = \sqrt{s_{11}^2 + s_{12}^2}$ mit $s_{11} = \partial_x u - \partial_y v$ und $s_{12} = \partial_x v + \partial_y u$ (zur Herleitung dieser Größen siehe [10]).

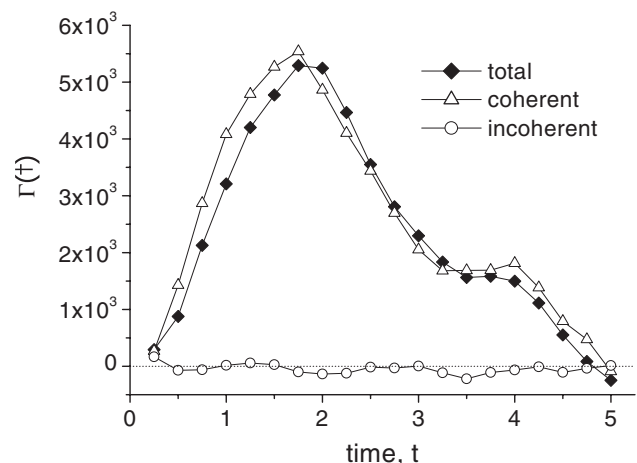
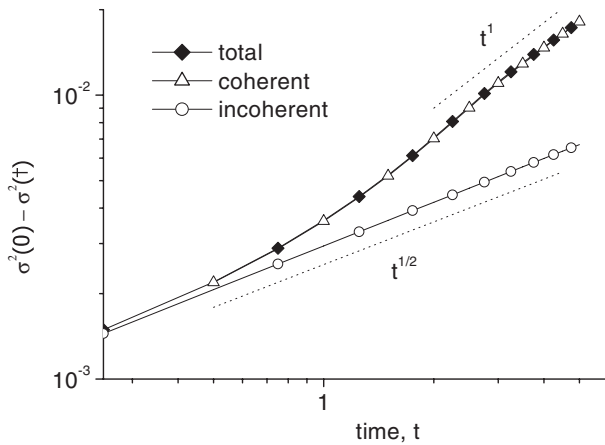


Abbildung 5.
Zeitlicher Verlauf der Differenz zwischen der Varianz der Konzentration zum Zeitpunkt $t = 0$ und der momentanen Varianz.



ner einen $t^{1/2}$ -Verlauf für den inkohärenten Teil. Dieses Skalierungsverhalten entspricht der theoretischen Voraussetzung für einen rein diffusiven Mischungsvorgang.

In einem weiteren Schritt wurde dieselbe Untersuchung auf die Mischung reagierender Spezies ausgedehnt (jeweils in der isothermen Näherung), wobei sowohl eine einfache bimolekulare Reaktion als auch Reaktionen von komplizierterer Kinetik (Parallelreaktion und autokatalytische Folgereaktion) bezüglich ihres Mischungs- und Reaktionsverhaltens im kohärenten und inkohärenten Teil analysiert und mit der ungefilterten Strömung verglichen wurden. Ähnlich dem Fall des nichtreaktiven Konzentrationsfeldes ergibt die quantitative Auswertung von Mischungs- und Reaktionsgrößen eine gute Übereinstimmung für den kohärenten Teil und die Gesamtströmung [10].

4 Schlussfolgerung

Die vorgestellte Arbeit ist ein erster Schritt zur Erweiterung der waveletbasierten Coherent Vortex Simulation für die numerische Simulation von Mischung und Reaktion in turbulenten Strömungen. Durch Anwendung eines orthogonalen Waveletfilters wird ein stark komprimierter kohärenter Teil des Strömungsfeldes extrahiert, der die wesentliche dynamische Information der Gesamtströmung enthält. Der zurückbleibende, aus dem überwiegenden Teil der Moden zusammengesetzte inkohärente Teil hingegen ist strukturlos und entspricht einem homogenen statistischen Rauschen (Gauß'sche PDF und Dekorrelation im Ort). Beide Teile zeigen Multiskalenverhalten.

Sowohl für einen nichtreaktiven Skalar als auch für Reaktionen einfacher und komplizierterer Kinetik zeigt der Mischungsprozess im kohärenten Teil eine hohe quantitative Übereinstimmung mit den Mischungseigenschaften der ungefilterten Strömung. Für die Mischung im inkohärenten Teil hingegen findet man ein rein diffusives Verhalten. Es findet somit eine Auftrennung in zwei wohlunterschiedene Arten des dynamischen Verhaltens statt.

Es wird der Gegenstand weiterführender Arbeiten sein, sowohl die Evolution des Strömungsfeldes als auch

die der Konzentrationsfelder nicht mehr in einer DNS, sondern in einer adaptiven Waveletbasis zu simulieren [11]. In dem lediglich eine geringe Anzahl kohärenter Moden entsprechend der Bewegungsgleichungen deterministisch berechnet wird und der Einfluss der großen Anzahl inkohärenter Moden unter Hinzunahme eines Modells in die Berechnung eingeht, könnte der Aufwand für Simulationen, eventuell auch für die Mischung von Spezies mit großen Schmidt-Zahlen, erheblich reduziert werden.

Eingegangen am 4. Juli 2002 [K 3085]

Literatur

- [1] H. Bockhorn, Simulation chemischer Reaktionen in turbulenten Strömungen, *Chem. Ing. Tech.* **1991**, *63*, 715.
- [2] W. Gerlinger, K. Schneider, L. Falk, H. Bockhorn, Numerical Simulation of the Mixing of Passive and Reactive Scalars in Two-dimensional Flows Dominated by Coherent Vortices, *Chem. Eng. Sci.* **2000**, *55*, 4255/4269.
- [3] J. H. Ferziger, Large Eddy Simulation, in *Simulation and Modeling of Turbulent Flows* (Eds: T. B. Gatski, M. Y. Hussaini, J. L. Lumley), Cambridge Univ. Press, New York **1995**.
- [4] H. Im, T. Lund, J. H. Ferziger, LES of Turbulent Front Propagation with Dynamic Subgrid Models, *Phys. Fluids* **1997**, *9* (12), 3826/3833.
- [5] U. Frisch, *Turbulence, The Legacy of A. N. Kolmogorov*, Cambridge University Press, Cambridge **1995**.
- [6] M. Farge, K. Schneider, N. Kevlahan, Non-Gaussianity and Coherent Vortex Simulation for Two-dimensional Turbulence Using an Adaptive Orthogonal Wavelet Basis, *Phys. Fluids* **1999**, *11* (8), 2187.
- [7] M. Farge, G. Pellegrino, K. Schneider, Coherent Vortex Extraction in 3D Turbulent Flows Using Orthogonal Wavelets, *Phys. Rev. Lett.* **2001**, *87*, 054501.
- [8] M. Farge, Wavelet Transforms and their Application to Turbulence, *Ann. Rev. Fluid Mech.* **1992**, *24*, 395/457.
- [9] S. Mallat, *A Wavelet Tour of Signal Processing*, Academic Press, New York **1997**.
- [10] C. Beta, K. Schneider, M. Farge, H. Bockhorn, Numerical Study of Mixing of Passive and Reactive Scalars in Two-dimensional Turbulent Flows Using Orthogonal Wavelet Filtering, angenommen zur Veröff. bei *Chem. Eng. Sci.*
- [11] J. Fröhlich, K. Schneider, An Adaptive Wavelet-vaguelette Algorithm for the Solution of PDEs, *J. Comput. Phys.* **1997**, *130* (2), 174/190.