



Doctoral Thesis

## Numerical investigation of the dynamics of unstable lean premixed hydrogen/air flames

**Author(s):**

Altantzis, Christos

**Publication Date:**

2011

**Permanent Link:**

<https://doi.org/10.3929/ethz-a-6560074> →

**Rights / License:**

[In Copyright - Non-Commercial Use Permitted](#) →

This page was generated automatically upon download from the [ETH Zurich Research Collection](#). For more information please consult the [Terms of use](#).

Diss. ETH No. 19695

# Numerical investigation of the dynamics of unstable lean premixed hydrogen/air flames

A dissertation submitted to  
ETH Zurich

for the degree of  
Doctor of Sciences

presented by

**Christos Altantzis**

Diploma in Mechanical Engineering  
Aristotle University of Thessaloniki, Greece.

born March 28, 1983  
citizen of Greece

Accepted on the recommendation of  
Prof. Dr. K. Boulouchos, examiner  
Dr. C. E. Frouzakis, co-examiner  
Prof. Dr. M. Matalon, co-examiner

2011

# Abstract

Premixed flame propagation has been the subject of extensive experimental, theoretical as well as numerical work, concerning both applications and aspects of fundamental interest. The recent progress in computational capabilities has made numerical studies of flames at scales comparable to laboratory experiments feasible, thus increasing their importance in combustion research. Although in most practical applications combustion occurs in a turbulent environment, the study of laminar flames and the transition to corrugated flames is important for understanding the fundamental mechanisms of turbulent flame propagation and the complex flame-flow interactions involved.

In the absence of turbulence and gravity, hydrodynamic and thermal-diffusive effects can render laminar premixed flames unstable inducing self-wrinkling and transition to cellularity. Hydrodynamic effects result from the omnipresent density jump across the flame leading to the deflection of the streamlines ahead of a curved flame front. Thermal-diffusive effects stem from the disparity of the diffusion rates of heat away from, and mass towards the flame, thus their action is either stabilizing or destabilizing, depending on the Lewis number, the ratio of thermal to mass diffusivity, of the deficient reactant.

The present work aims at investigating the influence of the hydrodynamic and the thermal-diffusive instability mechanisms on the evolution of laminar premixed flames via numerical simulations of the reactive Navier-Stokes equations at the low-Mach number limit. Three geometries were investigated, namely the 2D planar, the 2D circular and the 3D spherical setup.

The planar flame, the simplest form of combustion illustrating the nature of premixed flames, is studied in detail both with respect to its stability and its long-term nonlinear evolution. Specifically for this case, computations were performed using both detailed and single-step chemistry

schemes, in an attempt to elucidate the role of chemistry in the observed dynamics. Additionally, in order to isolate the effect of the hydrodynamic instability on the propagation of the planar front, unity Lewis number flames were also simulated by setting the species diffusivities equal to the thermal diffusivity. The linear stability results extracted from the simulations are compared with theoretical stability analyses for both Lewis number cases. On the other hand, the comparison of the long-time simulations with the nonlinear hydrodynamic theoretical analyses confirmed the predictions of the theory concerning the nonlinear evolution of solely hydrodynamically unstable flames. In addition, the cascade of the transitions of the observed dynamics is analyzed through the parametric study of the long-term evolution of the front with respect to the domain size. Finally, the effects of stretch on the propagation characteristics of the flame were studied in detail. It was found that for hydrodynamically unstable flames, the local flame propagation speed scales linearly with curvature, but, due to unsteady aerodynamic effects, it is non-linearly related to the stretch rate. In the presence of thermal-diffusive effects, the flame propagation speed is nonlinearly and non-monotonically related to both stretch and curvature.

Contrary to the simplicity of the planar geometry, the flame surface of outwards propagating 2D circular and 3D spherical flames grows continuously together with the wavelength of additional disturbances. The response of circular flames to monochromatic and polychromatic perturbations of the flame front were investigated and it was found that the rate at which the flame surface area grows is not monotonic, reflecting the transitions of the dynamical behavior of the expanding front. Contrary to the reported results concerning solely hydrodynamically unstable flames, it was found that the temporal evolution of the mean flame radius does not follow a power law, and varies almost linearly in time, at least during the initial time interval of the propagation considered in this study.

Finally, the simulation of the three-dimensional spherical flame was performed on a spherical grid, based on the cubed sphere concept, with a diameter of 200 thermal flame thicknesses. A relatively large amplitude perturbation was imposed, so that the transition to cellularity occurs early. During the initial stages of expansion, the imposed cells get amplified and acquire a polygonal shape. Later they flatten and finally, when their wavelength is large enough, they split into new smaller cells. As in the 2D circular geometry, the growth rate of the flame surface area is not monotonic and the mean radius varies almost linearly with time.

# Zusammenfassung

Die Flammausbreitung in homogenen Gemischen wurde bereits umfangreich in experimentellen, theoretischen und numerischen Arbeiten untersucht, sowohl im Bereich von praktischen Anwendungen als auch in der Grundlagenforschung. Die jüngsten Fortschritte in computergestützten Fähigkeiten erhöhen die Relevanz von numerischen Untersuchungen von Flammen in der Verbrennungsforschung, indem Flammsimulationen in Labormassstäben ermöglicht werden. Obwohl in den meisten praktischen Anwendungen die Verbrennung in einem turbulenten Umfeld erfolgt, ist das Studium von laminaren Flammen und des Übergangs zu gewellten Flammen wichtig für das Verständnis der zugrundeliegenden Mechanismen der turbulenten Flammausbreitung und der komplexen Wechselwirkungen zwischen Flamme und Strömung.

Unter Vernachlässigung von Turbulenz und Gravitation können hydrodynamische und thermisch-diffusive Effekte laminare vorgemischte Flammen destabilisieren und somit Selbstfaltungsprozesse sowie den Übergang zur Zellstruktur herbeiführen. Die hydrodynamischen Effekte resultieren aus dem Dichtesprung über der Flamme, was zu einer Ablenkung der Stromlinien vor einer sich ausbreitenden und gekrümmten Flammfront führt. Thermisch-diffusive Effekte entstehen aus den Unterschieden in den Diffusionsraten von Wärme aus der Flamme heraus und von Masse in die Flamme hinein. Diese thermisch-diffusiven Effekte können, abhängig von der Lewis-Zahl des limitierenden Reaktanden, entweder eine stabilisierende oder destabilisierende Wirkung auf die Flamme ausüben.

Die vorliegende Arbeit untersucht den Einfluss der Mechanismen von hydrodynamischen und thermisch-diffusiven Instabilitäten auf die Entwicklung von laminaren vorgemischten Flammen durch numerische Simulationen der vollständigen reaktiven Navier-Stokes-Gleichungen. Folgende drei Geometrien von Flammen wurden untersucht: 2D planar, 2D radial-symmetrisch und 3D sphärisch.

Die ebene Flamme als einfachste Form der Verbrennung, welche die Eigenschaften von vorgemischten Flammen darstellt, wird im Detail untersucht im Hinblick auf deren Stabilität und langzeitigen, nichtlinearen Entwicklung. Spezifisch für diesen Fall wurden mithilfe von detaillierten und auch Eischritt-Reaktionsmechanismen Berechnungen durchgeführt, um Klarheit über den Einfluss der Reaktionskinetik auf die beobachteten Dynamiken zu erlangen. Um den Effekt der hydrodynamischen Instabilitäten auf die Flammausbreitung der ebenen Flammfront zu isolieren, wurden zusätzlich Flammen mit Lewis-Zahl gleich eins untersucht. Dies wurde durch Gleichsetzen der Diffusionskoeffizienten für Masse und Wärme erreicht. Die aus den Simulationen gewonnenen Erkenntnisse bezüglich linearer Stabilität bestätigen im Vergleich mit theoretischen Stabilitätsanalysen die Voraussagen der Theorie für die nichtlineare Entwicklung von rein hydrodynamisch instabilen Flammen. Zusätzlich wird die Abfolge der Übergangsprozessen der beobachteten Dynamiken durch eine parametrische Studie für die Langzeitentwicklung der Flammfront mit Bezug auf die Donnengrösse analysiert. Schliesslich wurde der Einfluss von Streckung auf die Ausbreitungscharakteristika der Flamme untersucht. Es wird für hydrodynamisch instabile Flammen gezeigt, dass die lokale Flammausbreitungsgeschwindigkeit zwar linear von der Krümmung abhängig ist, diese allerdings durch instationäre aerodynamische Effekte eine nichtlineare Abhängigkeit bezüglich der Streckung aufweist. Ist jedoch thermisch-diffusive Instabilität vorhanden, verhält sich die Flammausbreitungsgeschwindigkeit weder linear noch monoton bezüglich Streckung und Krümmung.

Im Gegensatz zur Einfachheit der ebenen Geometrie wächst die Flammfront von sich nach aussen ausbreitenden 2D radialsymmetrischen und 3D sphärischen Flammen kontinuierlich zusammen mit der Wellenlänge von zusätzlichen Störungen. Die Reaktion von radialsymmetrischen Flammen auf mono- und polychrome Störungen in der Flammfront wurde untersucht. Dabei wurde festgestellt, dass sich die Wachstumsrate der Flammfrontfläche nicht monoton entwickelt, was die Übergänge im dynamischen Verhalten der sich ausbreitenden Front wiederspiegelt. Im Gegensatz zu den Erkenntnissen bezüglich rein hydrodynamisch instabilen Flammen konnte gezeigt werden, dass die zeitliche Evolution des Flammradius keinen exponentiellen Verlauf zeigt, sondern ein beinahe lineares Verhalten aufweist. Dies gilt besonders für die in dieser Arbeit untersuchten frühen Phasen der Flammausbreitung.

Die 3D sphärische Flamme wurde mithilfe eines sphärischen Rechenetzes modelliert, welches auf dem Prinzip der "kubischen Kugel" basiert

und einen Durchmesser von 200 Flammdicken aufweist. Eine Störung mit verhältnismässig grossen Auslenkungen wurde dem numerischen Modell auferlegt, damit in der Flammfront der Übergang zur Zellstruktur früh stattfindet. Während den ersten Phasen der Expansion erfahren die aufgezwungenen Zellen eine Verstärkung und nehmen eine polygonale Form an. Später flachen diese Strukturen ab und teilen sich, sobald deren Wellenlängen gross genug sind, wieder in kleinere Zellen auf. Wie im Falle der 2D radialsymmetrischen Geometrie, verhält sich die Wachstumsrate der Flammfrontfläche nicht monoton und weist eine nahezu lineare zeitliche Abhängigkeit auf.