

**Simulation turbulenter reaktiver Strömungen
mittels Monte-Carlo-PDF-Methoden
in drei Raumdimensionen
am Beispiel motorischer Verbrennung**

INAUGURAL - DISSERTATION
zur
Erlangung der Doktorwürde
der
Naturwissenschaftlich - Mathematischen Gesamtfakultät
der
Ruprecht - Karls - Universität
Heidelberg

vorgelegt von

Diplom-Physiker Christian Taut

aus Mannheim

Gutachter: Prof. Dr. Dr. h.c. Jürgen Warnatz
Prof. Dr. Bernhard Schramm

Tag der mündlichen Prüfung: 03.12.1999

**Interdisziplinäres Zentrum für Wissenschaftliches Rechnen
Ruprecht - Karls - Universität Heidelberg
1999**

INAUGURAL - DISSERTATION
zur
Erlangung der Doktorwürde
der
Naturwissenschaftlich - Mathematischen Gesamtfakultät
der
Ruprecht - Karls - Universität
Heidelberg

vorgelegt von
Diplom-Physiker Christian Taut
aus Mannheim
Tag der mündlichen Prüfung: 03.12.1999

**Simulation turbulenter reaktiver Strömungen
mittels Monte-Carlo-PDF-Methoden
in drei Raumdimensionen
am Beispiel motorischer Verbrennung**

Gutachter: Prof. Dr. Dr. h.c. Jürgen Warnatz
Prof. Dr. Bernhard Schramm

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	3
2	Turbulente reaktive Strömungen	5
2.1	Transportgleichungen	5
2.2	Turbulenz	7
2.2.1	Überblick	7
2.2.2	Gemittelte Transportgleichungen	10
2.2.3	Modellierung des turbulenten Transportes	11
2.2.4	Modellierung des skalaren Quellterms	13
2.3	Thermochemisches System	15
2.3.1	Detaillierte Mechanismen	15
2.3.2	Konventionell reduzierte Mechanismen	16
2.3.3	ILDM	18
2.4	Simulation motorischer Verbrennung mit KIVA	20
3	Monte-Carlo-PDF-Methoden	24
3.1	Definitionen	25
3.2	Transportgleichung	27
3.3	Zeitintegration	28
3.4	Erster Schritt: chemische Reaktion	28
3.5	Zweiter Schritt: Mischungsmodell	29
3.5.1	Dopazo-Mischungsmodell	29
3.5.2	Herkömmliches und erweitertes Curl-Modell	29
3.5.3	Alternative Mischungsmodelle	30
3.6	Dritter Schritt: Diffusion im Ortsraum und Konvektion	32
3.7	Diskretisierung der PDF	33
4	Implementierung einer Monte-Carlo-PDF-Methode in KIVA	36
4.1	Grundlegende Bemerkungen	36
4.2	Partikel-Initialisierung	38
4.3	Zündung und chemische Prozesse	40
4.4	Skalares Mischungsmodell	41

4.5	Partikeltransport im Ortsraum	42
4.6	Partikelsuche und -reflexion in drei Raumdimensionen	44
4.7	Klonen und Clustern von Partikeln	47
4.8	Kopplung mit dem CFD-Programm	48
5	Modellierung der Verbrennung in einem Zweitakt-Motor	52
5.1	Daten der Simulation	52
5.2	Gittergenerierung	54
5.3	Das experimentelle System	57
5.4	Laserinduzierte Fluoreszenz	60
5.5	Berechnung der kalten Strömung	61
5.6	Druckverlauf	63
5.7	Flammenfortschritt	65
5.8	Zustandsgrößen	68
5.9	Vergleich mit experimentellen Ergebnissen	71
5.10	Optimierung der Gittergeometrie	77
6	Zusammenfassung und Ausblick	86

1 Einleitung

Verbrennungsprozesse sind seit Jahrtausenden aus dem Alltag nicht mehr wegzudenken. Da ein Verbrennungsprozeß mit exothermen chemischen Reaktionen einhergeht, wird dabei die chemisch gebundene Energie der Brennstoffe in Wärme umgewandelt. Diese kann in Kolbenkraftmaschinen zur Erzeugung mechanischer Energie, über Turbinen und Generatoren in elektrische Energie oder in Reaktoren zur Aktivierung weiterer chemischer Prozesse benutzt werden. Außerdem wird ein nicht zu vernachlässigender Teil der so produzierten Wärme zum Heizen benutzt. Die Brennstoffe sind meist fossiler Herkunft und bestehen zum größten Teil aus Kohlenwasserstoffen oder Kohle. Da diese Brennstoffe nicht unbegrenzt auf der Erde vorhanden sind, ist es wichtig, ökonomisch mit ihnen umzugehen. Des Weiteren werden bei Verbrennungsprozessen nicht selten Stoffe gebildet, deren Emission gesetzlichen Vorschriften unterliegt. Deshalb muß darauf geachtet werden, den Ausstoß dieser Schadstoffe zu minimieren. Aus diesen Gründen ist es unabdingbar, die Verbrennungstechnik stets nach den genannten Gesichtspunkten weiter zu entwickeln.

Die Simulation technischer und naturwissenschaftlicher Zusammenhänge gewinnt heute zunehmend an Bedeutung. Die Gründe liegen auf der Hand: Meist sind experimentelle Apparaturen teuer und deren Betrieb zeitintensiv. Eine numerische Simulation bietet einen eleganten Zugang zu neuen Erkenntnissen. Dies darf jedoch nicht mißverstanden werden. Langfristiges Ziel ist es zweifellos, aufwendige Apparaturen durch das *numerisch Experiment* zu ersetzen. Zunächst müssen jedoch zur Simulation komplexer technischer Systeme geeignete Modelle gefunden werden, um experimentelle Ergebnisse möglichst genau zu reproduzieren. Gelingt dies, so steht ein mächtiges Werkzeug zur Verfügung. Ohne großen Aufwand kann das System verändert und optimiert werden. Es können z.B. mühelos die Geometrie, der Brennstoff oder die Anfangsbedingungen geändert werden. Aus besagten Gründen liegt es in öffentlichem und privatem Interesse, zunehmenden Enthusiasmus auf dem Gebiet der Modellierung reaktiver Strömungen zu entwickeln.

Reaktive Strömungen werden durch ein System partieller Differentialgleichungen beschrieben. Da deren direkte Lösung insbesondere im turbulenten Fall extrem rechenaufwendig ist, müssen die Gleichungen gemittelt werden. Durch diese Mittelung entstehen jedoch ungeschlossene, d.h. unbekannte Terme. Diese beschreiben den turbulenten Transport und die Wechselwirkung chemischer Reaktionen mit der Turbulenz. Beide Terme müssen modelliert werden. Ziel dieser Arbeit ist es, die erwähnte Kopplung chemischer Prozesse mit der Turbulenz durch ein sogenanntes *Monte-Carlo-PDF*-Verfahren zu modellieren. Da dieses Verfahren insbesondere die Simulation mehrerer chemischer Spezies unterstützt, wird in dieser Arbeit ein komplexes ILDM-Modell (engl., Intrinsic Low Dimensional Manifold) verwendet, welches das thermo-chemische System beschreibt. Dies erlaubt unter anderem die Berechnung zahlreicher Zwischenprodukte und Radikale, welche beispielsweise für die Vorhersage von Schadstoffen relevant sind. Es wird gezeigt, daß diese Methoden, welche bislang nur in vereinfachten Spezialfällen angewandt wurden, zur Simulation technischer Systeme in drei Raumdimensionen geeignet sind [Taut99]. Verifiziert wird dies durch einen Vergleich mit

orts- und zeitaufgelösten Zustandsgrößen in einem Zweitakt-Ottomotor, welche mittels laserinduzierter Fluoreszenz gewonnen wurden [Einecke99a].

2 Turbulente reaktive Strömungen

Turbulente reaktive Strömungen [Buschmann96, Warnatz96] haben in Naturwissenschaft und Technik einen interdisziplinären Stellenwert erlangt. Sie umfassen sowohl Bereiche der Strömungsmechanik als auch der Reaktionskinetik und Thermodynamik. Im Sinne der Kontinuumsmechanik [Spurk96] lassen sich reaktive Strömungen durch ein System gekoppelter partieller nichtlinearer Differentialgleichungen beschreiben. Da deren Lösung im allgemeinen analytisch nicht möglich ist, müssen numerische Methoden herangezogen werden. Die Differentialgleichungen stellen Transportgleichungen für das Strömungsfeld und die thermochemischen Variablen dar und werden im nachfolgenden Kapitel vorgestellt. Außerdem wird ein Überblick der Turbulenzmodellierung und der effektiven Behandlung thermochemischer Systeme gegeben. Abschließend soll auf die Berechnung motorischer Verbrennung mit dem Programm KIVA [Amsden89], welches dieser Arbeit zugrunde liegt, eingegangen werden.

2.1 Transportgleichungen

Eine reaktive Strömung kann durch die vom Ort \vec{x} und der Zeit t abhängigen Felder ihrer Zustandsgrößen beschrieben werden. Die Zustandsgrößen sind die Geschwindigkeit \vec{v} , die Dichte ρ , die Massenbrüche der chemischen Spezies w_α und die spezifische Enthalpie h . Der Massenbruch einer Spezies α ist durch $w_\alpha = m_\alpha/m$ definiert, wobei m_α die Masse des Stoffes α und m die Gesamtmasse in einem bestimmten Gebiet sind. Weiterhin gilt für die Massenbrüche: $\sum_\alpha w_\alpha = 1$. Massenbrüche und Enthalpie werden auch als skalare Variablen Φ_α bezeichnet, deren Anzahl durch N_Φ gegeben sei. Die Zustandsgrößen werden durch ein System partieller Differentialgleichungen beschrieben [Bird60]:

$$\underbrace{\frac{\partial \rho}{\partial t}}_{\text{Akkumulation}} + \underbrace{\frac{\partial \rho v_j}{\partial x_j}}_{\text{Konvektion}} = 0 \quad (2.1)$$

$$\underbrace{\frac{\partial \rho v_i}{\partial t}}_{\text{Akkumulation}} + \underbrace{\frac{\partial \rho v_j v_i}{\partial x_j}}_{\text{Konvektion}} - \underbrace{\frac{\partial \tau_{i,j}}{\partial x_j}}_{\text{Scherspannung}} + \underbrace{\frac{\partial p}{\partial x_i}}_{\text{Druckgradient}} = \underbrace{\rho g_i}_{\text{Gravitation}} \quad (2.2)$$

$$\underbrace{\frac{\partial \rho \Phi_\alpha}{\partial t}}_{\text{Akkumulation}} + \underbrace{\frac{\partial \rho v_j \Phi_\alpha}{\partial x_j}}_{\text{Konvektion}} + \underbrace{\frac{\partial J_{\alpha,j}}{\partial x_j}}_{\text{Diffusion}} = \underbrace{\rho S_\alpha}_{\text{Quellterm}} \quad (2.3)$$

Hierbei kennzeichnet der Index α eine skalare Variable und j bzw. i eine Raumdimension. Es wird die Einstein'sche Summenkonvention verwendet. Die Kontinuitätsgleichung (2.1) sichert die Erhaltung der Masse des Fluides.

Die Navier-Stokes-Gleichungen (2.2) beschreiben den Transport des Impulses in der Strömung. Auf der linken Seite stehen zunächst die Terme der Akkumulation und Konvektion. Weiterhin bezeichnet $\tau_{i,j}$ den Tensor der Scherspannungen:

$$\tau_{i,j} = \mu_{\text{lam}} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{i,j} \frac{\partial v_m}{\partial x_m} \right) . \quad (2.4)$$

Die dynamische (laminare) Viskosität ist durch μ_{lam} gegeben, $\delta_{i,j}$ bezeichnet das Kronecker-Delta-Symbol. Im Sinne der Transporttheorie lassen sich die Scherspannungen auch als molekulare Diffusion von Impuls ansehen [Roedel94]. Der Druckgradient in Gl. (2.2) beschreibt die Beschleunigung des Strömungsfeldes durch Druckdifferenzen. Eine Zustandsgleichung der Thermodynamik liefert den Zusammenhang zwischen dem Druck p und den Zustandsgrößen:

$$p = p(\Phi_1 \dots \Phi_{N_\Phi}, \rho) . \quad (2.5)$$

Diese Zustandsgleichung kann z.B. durch die ideale Gasgleichung $p = \rho RT \sum_\alpha w_\alpha / M_\alpha$ genähert werden; hierbei ist R die ideale Gaskonstante und M_α die molare Masse der Spezies α . Weiterhin kann auch die Gravitation in Gl. (2.2) \vec{g} eine Kraft auf das Fluid ausüben. Sie kann als Quellterm der Transportgleichung angesehen werden.

Auf der linken Seite der Transportgleichung (2.3) der skalaren Größen stehen die Terme der Akkumulation, Konvektion und der molekularen (laminaren) Diffusion. Der Diffusionsstrom J wird durch das Fick'sche Gesetz beschrieben:

$$J_{\alpha,j} = -\Gamma_{\text{lam}} \frac{\partial \Phi_\alpha}{\partial x_j} . \quad (2.6)$$

Hierbei ist Γ_{lam} der laminare Transportkoeffizient, welcher proportional zur Viskosität μ_{lam} gewählt werden kann:

$$\Gamma_{\text{lam}} = \frac{\mu_{\text{lam}}}{\sigma_{\text{lam}}} . \quad (2.7)$$

Die zugehörige Proportionalitätskonstante σ_{lam} ist im Falle der Massendiffusion durch die laminare Schmidtzahl $\sigma_{\text{lam}} = Sc_{\text{lam}}$ und im Falle der Enthalpiediffusion durch die laminare Prandtzahl $\sigma_{\text{lam}} = Pr_{\text{lam}}$ gegeben. Der Quellterm der Gl. (2.3) wird für die Transportgleichungen der Massenbrüche durch den chemischen Quellterm beschrieben. Dieser ist im allgemeinen eine Funktion der Zustandsgrößen:

$$S_\alpha = S_\alpha(\Phi_1 \dots \Phi_{N_\Phi}) . \quad (2.8)$$

Er kann z.B. durch einen detaillierten oder einen reduzierten Mechanismus geschlossen werden. Darauf wird in Abschnitt 2.3 näher eingegangen. Im Falle, daß Gl. (2.3) den Transport der Enthalpie h beschreibt, kann deren Quellterm S_h durch

$$\rho S_h = \tau_{i,j} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial p}{\partial t} + v_i \frac{\partial p}{\partial x_i} + (A - E) \quad (2.9)$$

modelliert werden [Bird60]. Hierbei steht der erste Term für den Anteil der molekularviskosen Reibung, der zweite und dritte für die zeitlichen bzw. räumlichen Druckänderungen und die letzten beiden (A und E) bezeichnen den Beitrag der Absorption bzw. Emission.

Um das Temperaturfeld zu berechnen, kann folgender Zusammenhang ausgenutzt werden:

$$h(T) = \sum_{\alpha} h_{\alpha}(T) w_{\alpha}(T) . \quad (2.10)$$

Hierbei sind die spezifische Gesamtenthalpie $h(T)$ und die Massenbrüche $w_{\alpha}(T)$ durch die Transportgleichungen der skalaren Größen gegeben. $h_{\alpha}(T)$ ist die spezifische Enthalpie der Spezies α ; sie kann z.B. den JANAF-Tabellen [HandbookChemPhys] entnommen werden. Somit kann die durch Gl. (2.10) implizit gegebene Temperatur T numerisch bestimmt werden.

2.2 Turbulenz

Turbulenz bezeichnet im Gegensatz zu einer laminaren Strömung eine zeitliche und räumliche, nichtstationäre, zufällige und gewissermaßen chaotisch wirkende Bewegungsform. Sie stellt sich ein, wenn Effekte der Massenträgheit, die durch zufällige Störungen angestoßen werden, nicht mehr durch die molekulare Viskosität gedämpft werden können [Roedel94].

2.2.1 Überblick

Der Übergang einer laminaren in eine turbulente Strömung wird durch die Reynoldszahl beschrieben. Sie wird aus dem Quotienten der Trägheits- und der Reibungskräfte in der Strömung abgeleitet. Diese Terme werden in Gl. (2.2) durch die Ausdrücke der Konvektion und der Scherspannung beschrieben. Somit ergibt sich aus den Gln. (2.2) und (2.4) für die Reynoldszahl Re :

$$\left(\frac{\partial \rho v_j v_i}{\partial x_j} \right) / \left(\frac{\partial \tau_{i,j}}{\partial x_j} \right) \approx \frac{\rho v^2 / l}{\mu_{\text{lam}} v / l^2} = \frac{\rho v l}{\mu_{\text{lam}}} = Re . \quad (2.11)$$

Hierbei wird $\frac{\partial}{\partial x_j}$ durch $1/l$ approximiert, wobei l eine typische Längenskala ist. Es konnte experimentell und theoretisch nachgewiesen werden [Mayer82, Schuster84], daß eine kritische, systemabhängige Reynoldszahl Re_{krit} existiert, ab welcher die Strömung von dem laminaren in den turbulenten Zustand übergeht. Typische kritische Reynoldszahlen liegen im Bereich $10^3 \dots 10^4$.

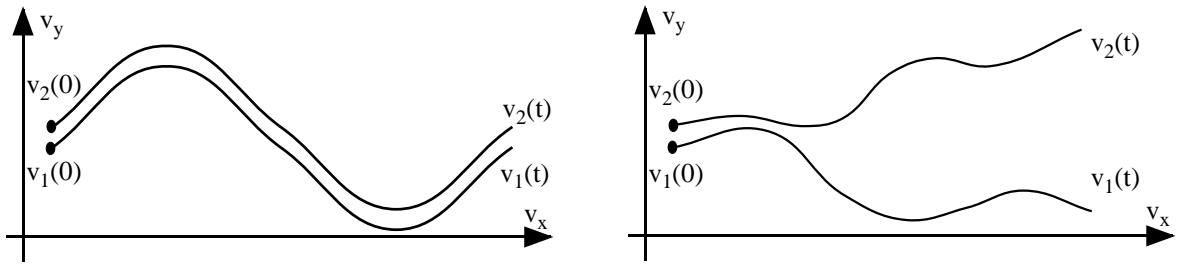


Abbildung 2.1: Trajektorien im Impulsraum, welche zur Zeit $t = 0$ dicht beieinander liegen. Links: laminare Strömung. Rechts: turbulente Strömung.

Bei der Lösung der Strömungsgleichungen (2.1) und (2.2) zeigt sich, daß bei turbulenten Systemen die Trajektorien im Impulsraum, welche anfangs sehr nah beieinander lagen, sich im Laufe der Zeit beliebig weit voneinander entfernen. Im Gegensatz dazu bleiben diese Trajektorien im laminaren Fall stets nah beieinander (Abb. 2.1). Da in der Praxis niemals zwei Systeme mit exakt identische Anfangsbedingungen erzeugt werden können, heißt das, daß sich ein turbulentes System auch unter scheinbar gleichen Anfangs- und Randbedingungen stets anders verhält und somit die praktische Vorhersehbarkeit in Frage gestellt ist. Dies kann z.B. am Wettergeschehen oder an einer aus einem Schornstein aufsteigenden Rauchfahne beobachtet werden. Dieses Phänomen wird auch als *deterministisches Chaos* bezeichnet, weil dem chaotischen Geschehen deterministische Gleichungen zugrunde liegen.

Turbulenz wird oft als ein Ensemble von Wirbeln betrachtet. Diese entstehen durch eine Störung, z.B. eine Scherung oder konvektive Bewegung mit einer Längenskala l_0 , welche der Dimension des betrachteten Experiments entspricht. Durch diese Wirbel werden kleinere Wirbel erzeugt, die ihrerseits wiederum kleinere Wirbel erzeugen usw. Die Energie, die in diesen Wirbeln steckt, wird in einer Kaskade an Wirbel mit einer immer geringer werdenden Längenskala weitergegeben, bis sie schließlich durch molekular-viskose Reibung in Wärme umgewandelt wird. Dadurch ergibt sich eine kleinste Längenskala der Turbulenzelemente, die Kolmogorov-Länge l_K .

Die kinetische Energie E_{kin} , welche in einem Strömungsfeld steckt, kann in einen mittleren und einen fluktuativen Anteil separiert werden:

$$\frac{E_{\text{kin}}}{2\rho} = v_i^2 = \left(\frac{\langle \rho v_i \rangle}{\langle \rho \rangle} + v_i'' \right)^2 = \left(\left(\frac{\langle \rho v_i \rangle}{\langle \rho \rangle} \right)^2 + v_i''^2 \right) . \quad (2.12)$$

Hierbei ist $\frac{\langle \rho v_i \rangle}{\langle \rho \rangle}$ ein dichtegewichteter Mittelwert und v_i'' die Fluktuation der Geschwindigkeit \vec{v} (vgl. Abschnitt 2.2.2). Der gemischte Term entfällt aus statistischen Gründen. Der fluktuative Anteil in Gl. (2.12) wird turbulente kinetische Energie k genannt:

$$k = \frac{v''^2}{2} . \quad (2.13)$$

Die Kolmogorov-Länge kann nun aus der Beziehung

$$Re_{\text{tur}} = \left(\frac{l_0}{l_K} \right)^{4/3} \quad (2.14)$$

berechnet werden [Warnatz96]. Dabei ist Re_{tur} die turbulente Reynoldszahl, welche durch

$$Re_{\text{tur}} = \frac{\rho l_0 \sqrt{2k}}{\mu_{\text{lam}}} \quad (2.15)$$

definiert ist.

Für den Spezialfall isotroper Turbulenz (d.h. die Mittelwerte der Zustandsgrößen weisen keine räumlichen Gradienten auf) gilt für die die Verteilung f der turbulenten kinetischen Energie $dk = f(q) dq$ [Kolmogorov42]:

$$f(q) \propto q^{-5/3} \quad (2.16)$$

Hierbei ist q das Inverse der Längenskala $q = 1/l$.

Verbrennungsprozesse können in verschiedener Weise klassifiziert werden. Zunächst wird zwischen nicht vorgemischten (z.B. Turbinenstrahltriebwerk) und vorgemischten Flammen (z.B. fremdgezündeter Zweitakt-Motor) unterschieden. Zur Berechnung nicht vorgemischter Flammen wird oft das Konzept des Mischungsbruches eingeführt, welcher den Grad der Durchmischung von Brennstoff und Oxidationsmittel beschreibt [Bilger89]. Vorgemischte Flammen werden häufig durch eine oder mehrere Reaktionsfortschrittsvariablen beschrieben. Dies sind im einfachsten Fall die Massenbrüche der Verbrennungsprodukte [Pope87].

Weiterhin ist es sinnvoll, zwischen turbulenter (z.B. Dieselmotor) und laminarer Verbrennung (z.B. ruhige Kerzenflamme) zu unterscheiden. In diesem Zusammenhang wird die betrachtete turbulente Flamme gerne durch die chemische Zeitskala, die Längenskala der jeweils größten und kleinsten Turbulenzelemente und die dazugehörigen Geschwindigkeiten parametrisiert. Sind beispielsweise alle Wirbel größer als die Flammenfront breit ist, können die Wirbel nicht in die Flamme eindringen. Die Flammenoberfläche wird durch die Wirbel verwinkelt und somit vergrößert. Die Flamme kann als Ensemble laminarer gestreckter Flämmchen (engl. Flamelets) angesehen werden. Wächst die Flammenfrontdicke aufgrund langsamer ablaufender Reaktionen, so können die kleineren Wirbel in die Flamme eindringen, die größeren jedoch noch nicht. Die Flammenfront wird zunehmend mehr zerklüftet. Etwa in diesem Bereich läuft eine motorische Verbrennung ab. Bei noch langsameren chemischen Zeitskalen können alle Wirbel in die Reaktionszone eindringen und eine gut durchmischte Verbrennung erzeugen. Dieser Zustand wird z.B. in einem chemischen Reaktor angestrebt. Meist können technische Verbrennungen nicht eindeutig einem Zustand zugeordnet werden. Zur Charakterisierung der verschiedenen Zustände wird oft das Borghi-Diagramm verwendet [Borghi88].

2.2.2 Gemittelte Transportgleichungen

Bei der Simulation turbulenter reaktiver Strömungen können die Längenskalen der Turbulenzelemente ein weiten Bereich einnehmen. Bei einer typischen turbulenten Reynoldszahl von $Re_{\text{tur}} = 500$ ergibt sich aus Gl. (2.14) für diesen Bereich $l_0/l_K \approx 100$. Dies bedeutet, daß zur numerischen Berechnung rund 1000 Gitterpunkte je Raumdimension benötigt werden. Aufgrund des immensen Rechenaufwandes ist diese sogenannte *Direkte Numerische Simulation* (DNS) nur in vereinfachten Spezialfällen möglich [Poinsot96, Lange97, Reynolds89]. Bei der Simulation technischer Systeme, welche im allgemeinen dreidimensional und instationär sind, werden deshalb die Transportgleichungen (2.1)...(2.3) gemittelt. D.h., es werden die Mittelwerte der Zustandsgrößen betrachtet; fluktuative Turbulenzelemente wie z.B. Wirbel werden nicht aufgelöst.

Ein solcher Mittelwert einer Größe x kann als Zeitmittel

$$\langle x(t) \rangle = \frac{1}{t - t_0} \int_{t_0}^t x(t') dt' \quad (2.17)$$

eines Systems in der Zeitspanne $t - t_0$ oder als Ensemblemittel

$$\langle x \rangle_N = \frac{1}{N} \sum_n^N x_n \quad (2.18)$$

von N gleichartigen Systemen zu einem Zeitpunkt definiert werden. Dabei wird x auch Mikrozustand und $\langle x \rangle$ Makrozustand des Systems genannt. Ein und derselbe Makrozustand kann durch verschiedene Ensembles von Mikrozuständen oder Zeitentwicklungen realisiert werden.

Jede Größe x kann in Mittelwert $\langle x \rangle$ und Fluktuation x' zerlegt werden:

$$x = \langle x \rangle + x' \quad (2.19)$$

Der Mittelwert der Fluktuation x' verschwindet stets:

$$\langle x' \rangle = 0 \quad (2.20)$$

Der Mittelwert der quadrierten Fluktuation heißt Varianz und kann aus

$$\langle x'^2 \rangle = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 \quad (2.21)$$

berechnet werden.

Da die Zustandsgrößen der Transportgleichungen stets dichtebezogen sind, wird ein dichtegewichteter Mittelwert, das *Favre-Mittel* \tilde{x} , eingeführt, welches durch

$$\langle \rho x \rangle = \langle \rho \rangle \tilde{x} \quad (2.22)$$

definiert wird. Eine beliebige Variable x läßt sich in ein Favre-Mittel und eine Favre-Fluktuation x'' zerlegen:

$$x = \tilde{x} + x'' \quad (2.23)$$

Daraus läßt sich der Zusammenhang

$$\langle \rho x_1 x_2 \rangle = \langle \rho \rangle \tilde{x}_1 \tilde{x}_2 + \langle \rho x_1'' x_2'' \rangle = \langle \rho \rangle \tilde{x}_1 \tilde{x}_2 + \langle \rho \rangle \widetilde{x_1'' x_2''} \quad (2.24)$$

ableiten [Warnatz96].

Mit Hilfe der Gesetzmäßigkeiten (2.22)...(2.24) läßt sich nun der Mittelwert der Transportgleichungen (2.1)...(2.3) bilden:

$$\frac{\partial \langle \rho \rangle}{\partial t} + \frac{\partial \langle \rho \rangle \tilde{v}_j}{\partial x_j} = 0 \quad (2.25)$$

$$\frac{\partial \langle \rho \rangle \tilde{v}_i}{\partial t} + \frac{\partial \langle \rho \rangle \tilde{v}_j \tilde{v}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \langle \rho \rangle \widetilde{v_j'' v_i''}}{\partial x_j} + \frac{\partial \langle p \rangle}{\partial x_i} = \langle \rho g_i \rangle \quad (2.26)$$

$$\frac{\partial \langle \rho \rangle \tilde{\Phi}_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial \langle \rho \rangle \tilde{v}_j \tilde{\Phi}_\alpha}{\partial x_j} + \frac{\partial \langle \rho \rangle \widetilde{v_j'' \Phi_\alpha''}}{\partial x_j} = \langle \rho S_\alpha \rangle \quad (2.27)$$

Hierbei stellen die Terme $\langle \rho \rangle \widetilde{v_j'' v_i''}$ und $\langle \rho \rangle \widetilde{v_j'' \Phi_\alpha''}$ den turbulenten Transport des Impulses bzw. der skalaren Größen dar. Da der molekulare Transport für hinreichend große Reynoldszahlen gegenüber dem turbulenten Transport sehr klein ist, werden diese Terme hier vernachlässigt (namentlich sind dies die Scherspannung in Gl. (2.2) und die Diffusion in Gl. (2.3)). Im Gegensatz zu dem molekularen Transport, welcher durch die Molekularbewegung der Moleküle des Fluids erzeugt wird, wird der turbulente Transport durch die turbulenten Fluktuationen (Wirbel) hervorgerufen.

2.2.3 Modellierung des turbulenten Transportes

Die Kovarianzen des turbulenten Transportes $\langle \rho \rangle \widetilde{v_j'' v_i''}$ bzw. $\langle \rho \rangle \widetilde{v_j'' \Phi_\alpha''}$ in den Gln. (2.26) und (2.27) besitzen keine geschlossenen Ausdrücke bezüglich der mittleren Zustandsgrößen. Sie müssen deshalb modelliert werden.

Für die Transportterme kann analog zum molekularen Transport (vgl. Gln. (2.4) und (2.6)) ein empirischer Gradientenansatz aufgestellt werden [Jones96a]:

$$\langle \rho \rangle \widetilde{v_j'' v_i''} = -\mu_{\text{tur}} \left(\frac{\partial \widetilde{v}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \widetilde{v}_j}{\partial x_i} \right) + \frac{2}{3} \langle \rho \rangle \widetilde{k} \delta_{i,j} + \frac{2}{3} \mu_{\text{tur}} \frac{\partial \widetilde{v}_m}{\partial x_m} \delta_{i,j} \quad (2.28)$$

$$\langle \rho \rangle \widetilde{v_j'' \Phi''_\alpha} = -\Gamma_{\text{tur}} \frac{\partial \widetilde{\Phi}_\alpha}{\partial x_j} . \quad (2.29)$$

Hierbei ist Γ_{tur} der turbulente Transportkoeffizient der skalaren Größen, welcher proportional zum turbulenten Transportkoeffizient μ_{tur} des Impulses gewählt werden kann:

$$\Gamma_{\text{tur}} = \frac{\mu_{\text{tur}}}{\sigma_{\text{tur}}} . \quad (2.30)$$

Die zugehörige Proportionalitätskonstante σ_{tur} ist durch die turbulente Schmidtzahl $\sigma_{\text{tur}} = Sc_{\text{tur}}$ (Massentransport) bzw. die turbulente Prandtzahl $\sigma_{\text{tur}} = Pr_{\text{tur}}$ (Enthalpietransport) gegeben. Ein in der Literatur bekannter und meist einheitlich verwendeter Wert für σ_{tur} ist [Warnatz96]:

$$\sigma_{\text{tur}} = 0.7 . \quad (2.31)$$

Der turbulente Transportkoeffizient μ_{tur} kann mit Hilfe des k - ϵ -Modells errechnet werden [Jones72]. Hierbei werden zwei zusätzliche Transportgleichungen für die turbulente kinetische Energie \widetilde{k} und die Dissipationsgeschwindigkeit $\widetilde{\epsilon}$,

$$\langle \rho \rangle \widetilde{\epsilon} = \langle \tau'_{i,j} \frac{\partial v_i''}{\partial x_j} \rangle \quad (2.32)$$

gelöst. Sind \widetilde{k} und $\widetilde{\epsilon}$ bekannt, so kann daraus der turbulente Transportkoeffizient μ_{tur} errechnet werden:

$$\mu_{\text{tur}} = C_\mu \langle \rho \rangle \frac{\widetilde{k}^2}{\widetilde{\epsilon}} . \quad (2.33)$$

Die Transportgleichungen für \widetilde{k} und $\widetilde{\epsilon}$ haben die gleiche Form wie diejenigen der skalaren Größen Gl. (2.27). Der turbulente Transport wird analog der Gln. (2.29) und (2.30) behandelt. Die entsprechenden Proportionalitätskonstanten in Gl. (2.30) heißen jetzt σ_k bzw. σ_ϵ . Die Quellterme sind jedoch eine komplizierte Funktion der Zustandsgrößen und ihrer statistischen Momente. Explizit ergibt sich für den Quellterm $\langle \rho S_k \rangle$ der Transportgleichungen für \widetilde{k} :

$$\langle \rho S_k \rangle = -\frac{\mu_{\text{tur}}}{\langle \rho \rangle^2} \frac{\partial \langle \rho \rangle}{\partial x_i} \frac{\partial \langle p \rangle}{\partial x_i} - \langle \rho \rangle \widetilde{\epsilon} . \quad (2.34)$$

Der Quellterm $\langle \rho S_\epsilon \rangle$ der Transportgleichungen für $\widetilde{\epsilon}$ berechnet sich aus:

$$\langle \rho S_\epsilon \rangle = +C_2 \frac{\tilde{\epsilon}}{\tilde{k}} \frac{\mu_{\text{tur}}}{\langle \rho \rangle^2} \frac{\partial \langle \rho \rangle}{\partial x_i} \frac{\partial \langle p \rangle}{\partial x_i} - C_1 \langle \rho \rangle \frac{\tilde{\epsilon}^2}{\tilde{k}} . \quad (2.35)$$

Auch für die hier verwendeten empirischen Modellkonstanten werden die aus der Literatur bekannten Standardwerte verwendet [Jones96a]:

$$\begin{aligned} C_\mu &= 0.09 \\ C_1 &= 1.92 \\ C_2 &= 1.00 \\ \sigma_k &= 1.00 \\ \sigma_\epsilon &= 1.30 . \end{aligned} \quad (2.36)$$

Dieses Zwei-Gleichungsmodell ist ein weit verbreitetes turbulentes Transportmodell. Veraltet sind heute Null- [Prandl25] oder Eingleichungsmodelle [Prandl45], welche zur Berechnung des turbulenten Transportkoeffizienten μ_{tur} eine turbulente Längenskala benötigen, die aus geometrischen Zusammenhängen bestimmt wird.

Eine Verbesserung des k - ϵ -Modells stellt das RNG- k - ϵ -Modell (RNG, engl.: Renormalization Group Theorie) dar [Yakhot92]. Diese Modell verwendet eine erweiterte Transportgleichung für ϵ , welche einen zusätzlichen von der Streckungsrate der Turbulenz abhängigen Term benutzt.

Eine Mischung aus Turbulenzmodellierung und Direkter Numerischer Simulation stellt gewisserweise die Large-Eddy-Simulation (LES) dar. Hierbei werden wie bei der DNS zunächst ungemittelte Gleichungen gelöst. Jedoch wird ein Gitter, welches grobmaschiger als die kleinsten Turbulenzelemente ist, verwendet. Um die kleinsten Skalen aufzulösen, wird ein Turbulenzmodell, z.B. ein k - ϵ -Modell, verwendet [Reynolds89].

2.2.4 Modellierung des skalaren Quellterms

Ebenfalls ungeschlossen ist der Quellterm $\langle \rho S_\alpha \rangle$ der gemittelten Transportgleichung der Skalare (2.27). Da die Funktion $S_\alpha(\Phi_1, \dots, \Phi_{N_\Phi})$ im allgemeinen nicht linear ist, kann dieser Mittelwert nicht in Abhängigkeit der mittleren skalaren Größen ($\tilde{\Phi}_1, \dots, \tilde{\Phi}_{N_\Phi}$) berechnet werden:

$$\langle \rho S_\alpha \rangle = \langle \rho \rangle \tilde{S}_\alpha \neq \langle \rho \rangle S_\alpha(\tilde{\Phi}_1, \dots, \tilde{\Phi}_{N_\Phi}) . \quad (2.37)$$

Das Problem kann gelöst werden, wenn die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion, d.h. die PDF (engl.: Probability Density Function), $f(\psi_1, \dots, \psi_{N_\psi})$ für das Auftreten der skalaren Größen bekannt ist. Dann ist der gemittelte Quellterm durch

$$\langle \rho S_\alpha \rangle = \int d\psi_1 \dots d\psi_{N_\psi} f(\psi_1, \dots, \psi_{N_\psi}) \rho S_\alpha(\psi_1, \dots, \psi_{N_\psi}) \quad (2.38)$$

gegeben. Hierbei sind $(\psi_1, \dots, \psi_{N_\psi})$ die Zufallsvariablen der skalaren Größen $(\Phi_1, \dots, \Phi_{N_\Phi})$. Verfahren, welche die Gl. (2.38) verwenden, werden PDF-Methoden genannt. Die Schwierigkeit liegt nun darin, die PDF f zu finden. Dazu kann eine Transportgleichung der PDF durch eine stochastische Monte-Carlo-Technik gelöst werden. Dies ist das Ziel dieser Arbeit und wird im Kap. 3 ausführlich besprochen. Alternativ kann die Form der PDF auch vorangenommen und durch Mittelwert und Varianz parametrisiert werden [Gutheil88, Hämmerle97, Mühleck95]. Als vorangenommene PDFs werden häufig Beta-Funktionen der Form

$$f(x) = \Gamma x^{p-1} (1-x)^{q-1} \quad \text{mit } x \in [0, 1] \quad (2.39)$$

verwendet. Dabei ist Γ der Normierungsfaktor und die Parameter p und q sind aus den vorgegebenen Größen Mittelwert und Varianz zu bestimmen. Manchmal werden auch zwischen Null und Eins abgeschnittene Gauß- [Gutheil88, Fohrmann98] oder für nicht beschränkte Variablen Log-Normal-Funktionen [Dahm95] verwendet. Der Mittelwert wird aus der gemittelten Transportgl. (2.27) der skalaren Größen bestimmt. Die Varianz $\widetilde{\Phi''^2}$ der skalaren Größen wird aus einer eigenen Transportgleichung für die Schwankungsbreite ermittelt. Diese besitzt die gleiche Form wie die Transportgleichung der skalaren Größen (2.27). Der turbulente Transport wird analog der Gln. (2.29) und (2.30) behandelt. Die entsprechende Proportionalitätskonstante in Gl. (2.30) heißt σ_{var} . Der Quellterm $\langle \rho S_{\text{var}} \rangle$ der Varianz-Transportgleichung besteht aus drei Beiträgen:

$$\langle \rho S_{\text{var}} \rangle = C_1 \mu_{\text{tur}} \left(\frac{\partial \widetilde{\Phi''_\alpha}}{\partial x_i} \right)^2 - C_2 \langle \rho \rangle \frac{\tilde{\epsilon}}{k} \widetilde{\Phi''^2_\alpha} + 2 \widetilde{\Phi''_\alpha} \widetilde{S''_{\Phi''_\alpha}}. \quad (2.40)$$

Diese Transportgleichung kann durch Multiplikation von Gl. (2.3) mit der Schwankung Φ''_α und anschließender Favre Mittelung hergeleitet werden [Gutheil88]. Die Modellkonstanten können mit den Werten

$$\begin{aligned} C_1 &= 1.92 \\ C_2 &= 1.00 \\ \sigma_{\text{var}} &= 0.7 \end{aligned} \quad (2.41)$$

belegt werden [Gutheil88]. Dabei wurde angenommen, daß die Proportionalitätskonstante σ_{var} identisch zu der des k - ϵ -Modells aus Gl. (2.31) ist: $\sigma_{\text{var}} = \sigma_{\text{tur}}$ [Spalding71].

Neben den beschriebenen PDF-Methoden gibt es einige weitere, meist einfache Modelle, den Quellterm zu schließen.

Die skalaren Größen der Funktion $S_\alpha(\Phi_1, \dots, \Phi_{N_\Phi})$ können z.B. in Mittelwert und Varianz aufgespalten werden: $\Phi_\alpha = \widetilde{\Phi}_\alpha + \Phi''_\alpha$. Die Temperatur, welche eine Funktion der skalaren Größen ist, wird in einer Taylorreihe entwickelt und anschließend gemittelt [Libby94, Jones96a].

Eine weitere Möglichkeit stellen Eddy-Break-Up (EBU) Modelle dar. Sie eignen sich nur dann, wenn die chemischen Zeitskalen sehr viel schneller als die des turbulenten Transportes sind. Dabei wird davon ausgegangen, das Rechenggebiet in eine verbrannte und eine unverbrannte Zone zerlegen zu können. Anschließend wird die mittlere Reaktionsgeschwindigkeit als (empirische) Funktion der Dissipationsgeschwindigkeit der Turbulenz bestimmt [Spalding70].

Weit verbreitet sind auch sogenannte Flamelet-Modelle. Auch diese können nur bei hinreichend schnellen chemische Zeitskalen verwendet werden. Dabei sollen die kleinstskaligen Wirbel der Turbulenz ein größeres Ausmaß als die Flammenfrontdicke haben. Dadurch ist gewährleistet, daß die Turbulenzelemente nicht in die Flammenfront eindringen und die Flammenfront so als aus laminar gestreckten Flämmchen (engl.: Flamelets) zusammengesetzt vorstellbar ist. Deshalb wird bei der Berechnung der Reaktionsgeschwindigkeiten auf Bibliotheken laminare Flammen zurückgegriffen. Oft werden die transportierten skalaren Größen auf den Mischungsbruch und die skalare Dissipationsgeschwindigkeit reduziert, die laminaren Massenbrüche in deren Abhängigkeit tabelliert und daraus die turbulenten mittleren Massenbrüche mit vorangenen PDFs berechnet [Gill95, Warnatz96].

2.3 Thermochemisches System

Bei der Berechnung der skalaren Transportgl. (2.27) muß, unabhängig von dem verwendeten Schließungsmodell, die Funktion $S_\alpha(\Phi_1, \dots, \Phi_{N_\Phi})$, die Reaktionsgeschwindigkeit, bekannt sein. Diese wird aus thermodynamischen und chemischen Daten berechnet, welche zunächst experimentell bestimmt werden müssen. Je nach Anwendung und verfügbarer Rechenkapazität werden detaillierte oder reduzierte Mechanismen verwendet. Detaillierte Mechanismen sind aufgrund ihrer hohen Anzahl der betrachteten Spezies und Reaktionen nur für solche Simulationen geeignet, bei denen die Strömungsprozesse nicht zu komplex sind. D.h., zur Simulation dreidimensionaler turbulenter Strömungen wird im Allgemeinen ein reduzierter chemischer Mechanismus verwendet. Ein elegantes Verfahren zur Reduktion stellt die ILDM-Methode (engl., Intrinsic Low Dimensional Manifold) dar. Auf diese verschiedenen Techniken wird im nachfolgenden Kapitel eingegangen.

2.3.1 Detaillierte Mechanismen

Der detaillierte Reaktionsmechanismus beschreibt die ablaufenden Reaktionen auf molekularer Ebene. Dazu werden Informationen über die Elementarschritte bzw. die Kinetik des Brennstoffes benötigt. Die Beschaffung dieser Daten ist experimentell aufwendig. Detaillierte Mechanismen existieren für Brennstoffe wie z.B. Wasserstoff oder Aliphate. Diese Mechanismen beinhalten oft mehrere hundert Spezies und Reaktionen [Warnatz93].

Quantitativ wird ein detaillierter Reaktionsmechanismus mittels einer Arrheniuskinetik beschrieben [Homann75]. Zunächst seien sämtliche Elementarreaktion, d.h. Reaktionen

wie sie real auf molekularer Ebene ablaufen, durch



gegeben. Hierbei repräsentieren X_{α} ein Mol der Spezies α . Die stöchiometrischen Koeffizienten sind durch $a_{\alpha,\beta}$ bzw. $b_{\alpha,\beta}$ gegeben, wobei β die Reaktion identifiziert. Die Reaktionsgeschwindigkeit ρS_{α} wird wie folgt berechnet:

$$\rho S_{\alpha} = M_{\alpha} \sum_{\beta} (b_{\alpha,\beta} - a_{\alpha,\beta}) \left[k_{\beta}^H \prod_{\alpha} \left(\frac{\rho w_{\alpha}}{M_{\alpha}} \right)^{a'_{\alpha,\beta}} - k_{\beta}^R \prod_{\alpha} \left(\frac{\rho w_{\alpha}}{M_{\alpha}} \right)^{b'_{\alpha,\beta}} \right]. \quad (2.43)$$

Hierbei ist M_{α} die molare Masse, k_{β}^H und k_{β}^R der Geschwindigkeitskoeffizient der Hin- bzw. Rückreaktion, und w_{α} die Massenbrüche der Spezies. Für die Exponenten gilt im Falle von Elementarreaktionen:

$$\begin{aligned} a'_{\alpha,\beta} &= a_{\alpha,\beta} \\ b'_{\alpha,\beta} &= b_{\alpha,\beta} \end{aligned} \quad (2.44)$$

Die Geschwindigkeitskoeffizienten haben eine exponentielle Temperaturabhängigkeit:

$$\begin{aligned} k_{\beta}^H &= c_{\beta}^H T^{d_H} \exp\left(\frac{-E_{\beta}^H}{R_0 T}\right) \\ k_{\beta}^R &= c_{\beta}^R T^{d_R} \exp\left(\frac{-E_{\beta}^R}{R_0 T}\right) \end{aligned} \quad (2.45)$$

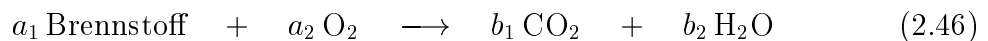
Hierbei ist c_{β}^H bzw. c_{β}^R der Vorfaktor, d_H bzw. d_R der Temperaturexponent und E_{β}^H bzw. E_{β}^R die Aktivierungsenergie. Die Hin- und Rückreaktion ist durch den Index H bzw. R gekennzeichnet. R_0 ist die universelle Gaskonstante. Alle eingeführten Parameter müssen dabei aus experimentellen Daten bestimmt werden. [Warnatz93, Warnatz96]

2.3.2 Konventionell reduzierte Mechanismen

Da die mehrdimensionale Simulation turbulenter reaktiver Strömungen sehr speicher- und rechenzeitintensiv ist, kann in der Regel zur Berechnung technischer Systeme kein detaillierter Mechanismus verwendet werden. Denn für jede Spezies muß eine Transportgleichung gelöst werden. Eine Alternative bilden reduzierte Reaktionsmechanismen, welche ein globales Reaktionenssystem für die wichtigsten Spezies aufstellen. Dabei geht jedoch meist die Information über Radikale, welche oft nur in der Flammenfront auftreten und für die Bildung von Schadstoffen verantwortlich sind, verloren. Die Kinetik kann auch hier formal durch Arrheniusgleichungen wie (2.43) und (2.45) beschrieben werden. Gl. (2.44) ist jedoch im Allgemeinen nicht erfüllt, da reduzierte Mechanismen keine molekularen Prozesse beschreiben. Ein in der Literatur

häufig zitiertes Reaktionsschema ist der Vierschritt-Mechanismus für Alkane [Jones88]. Er berücksichtigt die Spezies Brennstoff, Sauerstoff, Kohlenmonoxid, -dioxid, Wasser und Wasserstoff. Wegen der Erhaltung der Elementmassen Kohlenstoff, Wasserstoff und Sauerstoff ergeben sich in diesem Mechanismus drei unabhängige Spezies, d.h., es müssen neben der Enthalpie- und Kontinuitätsgleichung drei skalare Transportgleichungen gelöst werden.

Eine weitere Vereinfachung des chemischen Systems sind Einschrittmechanismen, bei denen die Kinetik durch eine globale Reaktion genähert wird. Bei dieser Sichtweise geht jegliche Information über die chemischen Details verloren. Es wird lediglich der Reaktionsfortschritt beschrieben. Meist sind Einschrittreaktionen in der Form



gegeben. Dabei sind a_α bzw. b_α die stöchiometrischen Koeffizienten. Zur Beschreibung der Massenteile dieses Systems muß nur eine Transportgleichung für die sogenannte Reaktionsfortschrittsvariable und die Kontinuitätsgleichung gelöst werden. Die restlichen Spezies können aus der Stöchiometrie bestimmt werden. Die Kinetik kann durch einen Arrheniusansatz (2.43) beschrieben werden, wobei der Koeffizient β und die über β gebildete Summe entfällt. Die Parameter müssen auch hier aus experimentellen Daten gefittet werden. Kinetische Daten für Einschrittreaktionen sind für viele, auch strukturell komplexere Brennstoffe bekannt [Westbrook84].

Eine noch stärkere Vereinfachung des chemischen Systems stellt die Annahme eines bereits eingestellten Gleichgewichtes dar. Es wird also davon ausgegangen, daß die thermochemischen Variablen keinen zeitlichen Änderungen mehr unterworfen sind. Deshalb ist es auch nicht notwendig, Transportgleichungen für Massenbrüche zu berechnen. Das Verhältnis der Konzentrationen kann in diesem Falle durch die Gleichgewichtsbedingungen

$$\prod_{\alpha} \left(\frac{\rho w_{\alpha}}{M_{\alpha}} \right)^{b'_{\alpha,\beta} - a'_{\alpha,\beta}} = \left(\frac{p_0}{RT} \right)^{\sum_{\alpha} b'_{\alpha,\beta} - a'_{\alpha,\beta}} \exp \left[- \frac{\Delta \tilde{G}_0}{RT} \right] \quad (2.47)$$

festgelegt werden [Homann75]. Die Parameter $b'_{\alpha,\beta}$, $a'_{\alpha,\beta}$ sind im Falle eines reduzierten Mechanismus experimentell zu bestimmen. Liegt der Gleichgewichtsannahme (2.47) ein detaillierter Mechanismus zugrunde, so ergeben sich die Parameter $b'_{\alpha,\beta}$, $a'_{\alpha,\beta}$ direkt aus den stöchiometrischen Koeffizienten $b_{\alpha,\beta}$, $a_{\alpha,\beta}$. $\Delta \tilde{G}_0$ beschreibt die molare freie Reaktionsenthalpie bei dem Standarddruck p_0 . Im Falle einer nicht vorgemischten Flamme führt diese Betrachtungsweise zu dem Konzept *GEMISCHT = VERBRANNT*, d.h. der Reaktionsfortschritt wird einzig durch die Mischung der Reaktanden beschrieben. Dies kann durch eine Transportgleichung für einen Mischungsbruch realisiert werden. Unter der Annahme, daß die Massendiffusionskoeffizienten und die Wärmeleitfähigkeit gleich groß sind, können die skalaren Größen als Funktion des Mischungsbruches dargestellt werden.

2.3.3 ILDM

Die Kinetik einer homogenen chemischen Reaktion kann aus der Transportgl. (2.3) erhalten werden, wenn die Terme des räumlichen Transportes, d.h. die Gradienten $\partial/\partial x_j = 0$ gesetzt werden. Sie wird durch ein System gewöhnlicher Differentialgleichungen beschrieben:

$$\frac{\partial \Phi_\alpha}{\partial t} = S_\alpha(\Phi_1 \dots \Phi_{N_\Phi}) . \quad (2.48)$$

Hierbei sei N_Φ die Anzahl der unabhängigen skalaren Größen. Wird der Term $S_\alpha(\vec{\Phi})$ aus Gl. (2.48) in der Umgebung $\vec{\Phi} = \vec{\Phi}_0$ bis zur ersten Ordnung entwickelt, so entsteht ein lineares Differentialgleichungssystem:

$$\frac{\partial \Phi_\alpha}{\partial t} = S_\alpha(\vec{\Phi})|_{\vec{\Phi}=\vec{\Phi}_0} \approx S_\alpha(\vec{\Phi}_0) + \hat{F}|_{\vec{\Phi}=\vec{\Phi}_0}(\vec{\Phi} - \vec{\Phi}_0) . \quad (2.49)$$

Hierbei kennzeichnet \hat{F} die Jacobimatrix im Phasenraum der skalaren Größen:

$$\hat{F}_{\alpha,\beta} = \frac{\partial S_\alpha}{\partial \Phi_\beta} . \quad (2.50)$$

Wird die Jacobimatrix \hat{F} durch Transformation in eine geeignete Basis des skalaren Phasenraums ($\Phi'_1 \dots \Phi'_{N_\Phi}$) diagonalisiert, so stellen die Diagonalelemente die Eigenwerte ($\lambda'_1 \dots \lambda'_{N_\Phi}$) der Jacobimatrix dar. Die Eigenwerte geben Auskunft über die Zeitentwicklung der Trajektorie $\vec{\Phi}(t)$ im Phasenraum. Ist der Realteil eines Eigenwertes negativ, so kann dieser als Zeitskala bzw. -konstante einer exponentiellen Annäherung an ein partielles Gleichgewicht interpretiert werden. Je kleiner der Realteil des Eigenwertes ist, um so schneller wird das Gleichgewicht erreicht [Schmidt96, Golup89].

Bei der Lösung chemischer Systeme der Form (2.48) wird gefunden, daß sich die Trajektorien $\vec{\Phi}(t)$ für verschiedene Anfangsbedingungen $\vec{\Phi}(t=0)$ stets nahe von niederdimensionalen Mannigfaltigkeiten im Phasenraum sammeln: Werden die Gl. (2.48) für unterschiedliche Anfangsbedingungen gelöst, bewegen sich die dazugehörigen Trajektorien zunächst im N_Φ -dimensionalen Phasenraum. Nach relative kurzer Zeit haben sich alle Trajektorien auf eine $(N_\Phi - 1)$ -dimensionalen Mannigfaltigkeit gesammelt, welche sie jetzt nicht mehr verlassen. Nach einer weiteren Zeit relaxieren die Trajektorien auf eine $(N_\Phi - 2)$ -dimensionale Mannigfaltigkeit. Dieses Verhalten setzt sich fort, bis die Trajektorien sich schließlich, stets langsamer werdend, auf einer dreidimensionalen Hyperfläche, dann auf eine zweidimensionale Fläche und letztendlich auf eine eindimensionale Kurve bewegen. Von dort aus relaxieren sie in den Gleichgewichtspunkt (Abb. 2.2).

Wird das System nach einer bestimmten Zeit t_θ betrachtet, so befinde sich der Zustand $\vec{\Phi}(t_\theta)$ auf einer Mannigfaltigkeit der Dimension $N_\theta < N_\Phi$. Alle Prozesse mit schnellen Zeitskalen, welche vor der Zeit t_θ abgelaufen sind, bzw. das System der dazugehörigen

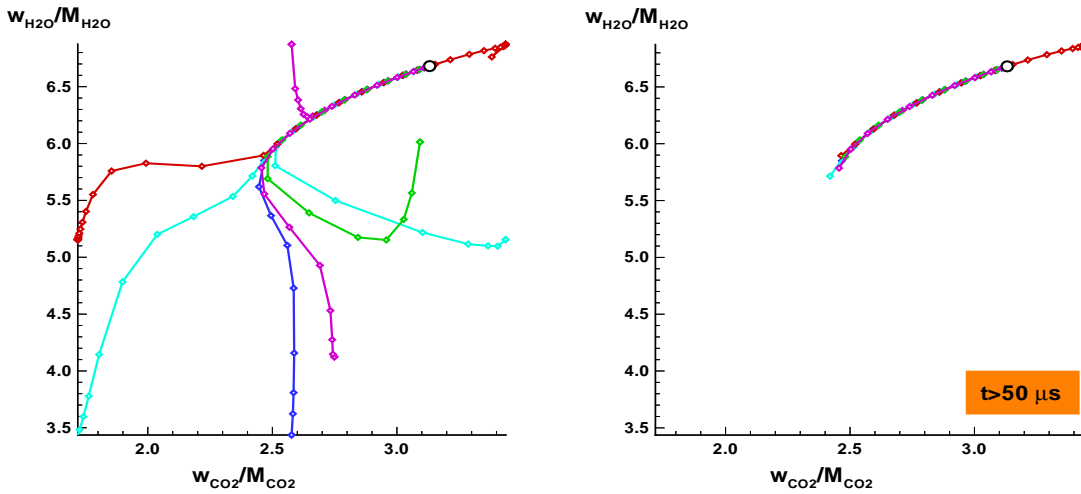


Abbildung 2.2: Projektion des Phasenraumes einer Methan-Luft-Flamme in die CO_2 - H_2O -Ebene [mol/kg]. Links: Relaxation der Trajektorien auf eine eindimensionale Mannigfaltigkeit. Rechts: Abkoppelung der schnellen Zeitskalen von der eindimensionalen Mannigfaltigkeit [Maas93].

Eigenwerte, sind abgekoppelt und befinden sich somit im Gleichgewicht (Abb. 2.2). Nun kann der chemische Zustand und alle von ihm abhängigen Größen durch N_Θ Fortschrittsvariable Θ dargestellt werden [Maas92, Maas93]:

$$\vec{\Phi}(t) = \vec{\Phi}(\Theta(t)) . \quad (2.51)$$

Praktisch wird meist eine ein- bis 4-dimensionale Mannigfaltigkeit der Enthalpie, Massenbrüche und ggf. des Mischungsbruches benutzt. In Abhängigkeit dieser unabhängigen Variablen werden je nach Bedarf die anderen skalaren Eigenschaften, deren zeitlichen Ableitungen und deren Funktionen wie z.B. die Temperatur berechnet und zur schnelleren Verfügbarkeit bei späteren Berechnungen tabelliert. Das Gitter dieser Tabellierung wird adaptiv angepaßt. Neuere Algorithmen der Tabellierung erzeugen und speichern ihre Werte erst bei Bedarf und passen so den abgebildeten Phasenraum der Berechnung an [Niemann98].

Im Allgemeinen variieren die Zeitskalen chemischer Prozesse $1/\lambda$ in einem großen Bereich $1/\lambda \approx 10^{-8} \dots 10^{+2}$. Im Vergleich dazu bewegen sich die Zeitkonstanten der physikalischen Transportprozesse, unter welchen die Turbulenz dominiert, in dem weitaus kleinerem Intervall $1/\lambda \approx 10^{-5} \dots 10^{-2}$ (Abb. 2.3). In diesem Intervall besteht eine Wechselwirkung zwischen den chemischen Reaktionen und den turbulenten Transportprozessen. Das Ziel des ILDM-Verfahrens ist es, zu einem vorgegebenem chemischen System eine möglichst niedrigdimensionale Mannigfaltigkeit zu finden, welche diejenigen Zeitskalen abkoppelt, die kleiner als die der physikalischen Transportprozesse sind [Warnatz96].

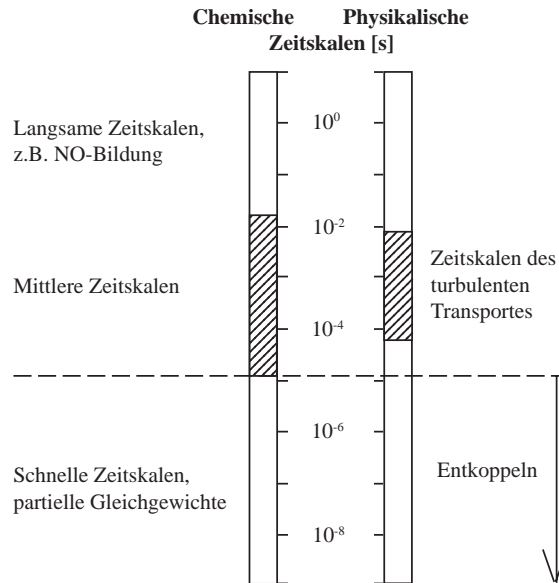


Abbildung 2.3: Wechselwirkung chemischer und physikalischer Zeitskalen [Maas93].

Weiterhin ist zu berücksichtigen, daß bei nicht-homogenen Reaktionen physikalische Transportprozesse den chemischen Zustand von der jeweiligen Mannigfaltigkeit wegbewegen. Dies kann nach dem numerischen Iterationsschritt des Transportes durch eine Projektion dieses Zustandes auf die Mannigfaltigkeit korrigiert werden. Außerdem sind all diejenigen Prozesse, die den Beginn einer chemischen Reaktion beschreiben, wie z.B. Zündprozesse, mit dem ILDM-Verfahren schwer zu handhaben. Denn zu Beginn einer Reaktion laufen zunächst die schnellen Zeitskalen ab; diese werden aber bei Verwendung einer ILDM abgekoppelt. Das Problem kann behoben werden, indem der Zündprozess durch ein anderes chemisches Modell, beispielsweise einen konventionell reduzierten Mechanismus, beschrieben wird und die ILDM erst dann eingesetzt wird, wenn sich der Zustand bereits in der Nähe des Gleichgewichtes befindet.

2.4 Simulation motorischer Verbrennung mit KIVA

Das in dieser Arbeit verwendete Computerprogramm heißt KIVA-3 [Amsden89]. Der Code [Amsden92] löst die gemittelten Transportgleichungen (2.26) und (2.27) in bewegten Gittern und eignet sich zur Berechnung turbulenter Verbrennungsprozesse in Kolbenkraftmaschinen [Reitz95]. Das Gitter kann durch den einfach ausgestatteten mitgelieferten Generator oder ein kommerzielles Programm erzeugt werden. Das gleiche gilt für die Auswertung der Daten. KIVA-3 eignet sich insbesondere für Zweiphasensysteme wie Dieselmotoren; ein eigener Monte-Carlo-Löser für Spray ist implementiert. Ebenso sind Zweitakt-Motoren mit Ein- und Auslaßkanälen, welche auch in dieser Arbeit simuliert wurden, berechenbar. Die Zeitentwicklung wird durch den Kurbelwellenwinkel vor bzw. nach dem oberen Totpunkt der Kolbenbewegung ($^{\circ}$ KW vOT bzw. nOT) definiert.

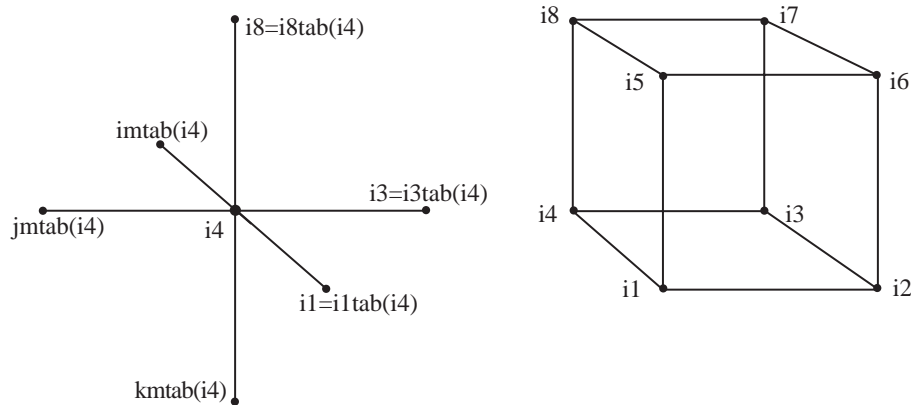


Abbildung 2.4: Links: Nachbarlisten im KIVA-Gitter. Rechts: Kennzeichnung der Eckpunkte der KIVA-Zelle $i4$.

Die Anfangs- und Randbedingungen einer KIVA-Rechnung werden in der Datei `itape`, das Gitter in der Datei `tape17` und die Anfangsbedingungen einer fortgesetzten Rechnung in der Datei `tape8` abgelegt. Die Laufzeitinformation des CFD-Programms wird in die Datei `tape12` ausgegeben. Sonstige Ein- oder Ausgabedateien sind an das implementierten MC-Programm angepaßt und werden in Kap. 4 beschrieben.

Das bewegte Gitter besteht aus blockstrukturierten Hexaederzellen, es wird jedoch wie ein unstrukturiertes Gitter gespeichert. Die Gitterpunkte (Vertizes) bzw. Zellen werden mit einer Variablen, $i4$, indiziert. Eine Zelle ist durch ihre 8 Eckpunkte $i1$, $i2$, ..., $i8$ charakterisiert. Diese Punkte können über Nachbarlisten bestimmt werden. Die Nachbarlisten sind über alle Zellen indizierte Felder, in denen der Index der linken (`imtab($i4$)`), rechten (`i1tab($i4$)`), unteren (`kmtab($i4$)`), oberen (`i8tab($i4$)`), vorderen (`jmtab($i4$)`) und hinteren (`i3tab($i4$)`) Zelle abgelegt sind (Abb. 2.4). Die Zellen bzw. Vertizes werden zur effizienteren Bearbeitung sortiert: Inaktive Zellen, d.h. Zellen außerhalb des Rechengebietes, besitzen die Indizes $i4=1...ifirst-1$; aktive Zellen werden mit $i4=ifirst...ncells$ indiziert; Randvertizes, denen keine Zellen zugeordnet werden, sind im Bereich $i4=ncells+1...nverts$ abgelegt. Zusätzlich sind aktive Zellen durch den Zellflag $f(i4)=1$, alle anderen durch $f(i4)=0$ gekennzeichnet. Weiterhin gibt ein Vertexflag $fv(i4)$ Auskunft darüber, in welchem Volumenbereich oder an welcher Wand der Punkt liegt. Die Zellflächenflags `bcl($i4$)`, `bcb($i4$)`, `bcf($i4$)` beschreiben die Art der Zellfläche. Damit können Randbedingungen wie Ein- und Auslaßkanäle oder periodische Randbedingungen festgelegt werden. Der Blockflag `idreg($i4$)` numeriert die einzelnen Blöcke des Gitters.

Die Bewegung des Kolbens wird in KIVA durch den sogenannten `snap`-Algorithmus ermöglicht. Hierbei wird dem Programm meist ein Gitter, bei welchem sich der Kolben im unteren Totpunkt befindet, vorgegeben. Wird der Kolben nun während der Rechnung nach oben bewegt, so werden die Zellebenen entlang der Zylinderachse zunächst wie bei einem Akkordeon komprimiert. Unterschreitet die Zelhöhe einen gewissen Wert, eliminiert KIVA eine Zellebene (`snap`) und sortiert die Felder über die Zellen neu. Dies

ist natürlich nur in solchen Bereichen möglich, in denen keine Kanäle an den Zylinder angebracht sind.

Die Bewegung des Gitters wird durch ein sogenanntes ALE-Verfahren (engl.: Arbitrary Lagrange Euler) ermöglicht. Dazu wird die Berechnung der Transportgleichungen in drei Phasen **A**, **B** und **C** unterteilt. In der ersten Phase **A** werden sämtliche Quellterme berechnet. In der zweiten Phase **B** werden die Diffusionsterme in Lagrange'scher Sichtweise ermittelt. Das heißt, die Vertizes werden zunächst mit dem strömendem Fluid mitbewegt. In der dritten und letzten Phase **C** wird der konvektive Anteil des Transportes ermittelt. Dazu werden die Vertizes iterativ auf ihre Ausgangsposition zurückbewegt (Euler-Verfahren) bzw. bei bewegten Gitterpunkten in die gewünschte Position gebracht. Während dieser Gitterschiebung werden die Flüsse der Zustandsgrößen durch die Zellwände berechnet. Dabei kann zwischen einem Quasi-Second-Order-Upwind- (QSOU) und einem Partial-Donor-Cell- (PDC) Verfahren gewählt werden.

Die Transportgleichungen werden mit Hilfe eines Finite-Volumen-Verfahren diskretisiert. Dazu werden die Gln. (2.26) und (2.27) im Bereich des Volumens einer Zelle integriert, das Volumenintegral mit dem Gauß'schen Gesetz in ein Oberflächenintegral transformiert und anschließend räumlich und zeitlich diskretisiert. Dies soll am Beispiel der skalaren Transportgl. (2.27) in der Phase B dargestellt werden: Mit Hilfe der Gl. (2.29) kann die Transportgleichung durch

$$\frac{\partial \langle \rho \rangle \tilde{\Phi}_\alpha}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x_j} \Gamma_{\text{tur}} \frac{\partial \tilde{\Phi}_\alpha}{\partial x_j} = 0 \quad (2.52)$$

ausgedrückt werden. Der konvektive Term und der Quellterm entfällt, da nur die Phase **B** betrachtet wird. Integration von (2.52) über das Volumen einer Zelle V_c liefert

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{V_c} dV \langle \rho \rangle \tilde{\Phi}_\alpha - \int_{V_c} dV \frac{\partial}{\partial x_j} \Gamma_{\text{tur}} \frac{\partial \tilde{\Phi}_\alpha}{\partial x_j} = 0 \quad (2.53)$$

Hierbei kennzeichnet dV die Volumenintegration. Durch Anwendung des Gaußschen Satzes kann das zweite Intergral in ein Oberflächenintegral überführt werden:

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle m_\alpha \rangle - \int_{\partial V_c} dA \Gamma_{\text{tur}} \frac{\partial \tilde{\Phi}_\alpha}{\partial x_j} = 0 \quad (2.54)$$

Hierbei kennzeichnet dA die Integration des Flusses $\Gamma_{\text{tur}} \frac{\partial \tilde{\Phi}_\alpha}{\partial x_j}$ über die Flächen ∂V_c , welche das Volumen V_c begrenzen. m_α kennzeichnet die Masse der Spezies α in einer Zelle. Räumliche und zeitliche Diskretisierung führt schließlich zu dem Ausdruck:

$$\frac{\langle m_\alpha \rangle^B - \langle m_\alpha \rangle^A}{\Delta t} - \sum_a \Delta A_a \left(\Gamma_{\text{tur}} \frac{\partial \tilde{\Phi}_\alpha}{\partial x_j} \right)_a = 0 \quad (2.55)$$

Dabei ist das Zeitinkrement durch Δt gegeben. Die Indizes A und B kennzeichnen hier die Integration während der Phase **B**. Die Zellflächen werden durch ΔA_a beschrieben, wobei der Index a die 8 begrenzenden Flächen der betrachteten Zelle kennzeichnet.

Gl. (2.55) wird von KIVA sowohl explizit als auch implizit gelöst.

Die Transportgleichungen des Impulses (2.26) werden mit einem SIMPLE-Algorithmus gelöst. Dazu wird ein aus der vorangegangenen Iteration extrapoliertes Druckfeld vorgegeben, damit das Geschwindigkeitsfeld berechnet und anschließend ein neues Temperatur- und Druckfeld berechnet. Dieses wird mit dem vorgegebenen Druckfeld verglichen und der iterative Prozess bis zur Erfüllung der Konvergenzbedingung $|p_{n+1} - p_n| < \delta$ wiederholt. Hierbei ist p der Druck, n der Zeitschritt und δ ein vorher festzulegendes Kriterium.

Der turbulente Transport kann alternativ durch ein k - ϵ - oder ein SGS-Modell berechnet werden (vgl. Abschnitt 2.2.3). Die Lösung der skalaren und der k - ϵ -Transportgleichungen sind vom SIMPLE-Algorithmus entkoppelt. Ein geeignetes Schließungsmodell des chemischen Quellterms fehlt; er wird aus einem Arrheniusansatz in ungemittelter Form errechnet. In dieser Arbeit wird gezeigt, wie der Quellterm durch ein Monte-Carlo-PDF-Verfahren in drei Raumdimensionen geschlossen werden kann.

3 Monte-Carlo-PDF-Methoden

Zur Beschreibung turbulenter reaktiver Strömungen kann anstelle der Transportgleichungen der Zustandsgrößen (vgl. Abschnitt 2.1) auch eine Transportgleichung der Wahrscheinlichkeitsdichte (PDF) dieser Zustandsgrößen aufgestellt werden [Pope85, Jones96a]. Diese Zustandsgrößen sind im allgemeinsten Fall die Geschwindigkeit \vec{v} , die turbulente kinetische Energie k , die Dissipation ϵ , die Dichte ρ und die skalaren Größen Φ_α wie z.B. die spezifische Enthalpie h und die Massenbrüche w_α . Diese PDF beschreibt die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten eines bestimmten Strömungszustandes an einem Ort \vec{x} zur Zeit t . Die Transportgleichung der PDF ist eine partielle Differentialgleichung in den Variablen aller Zustandsgrößen, des Ortes \vec{x} und der Zeit t .

Die analytische Lösung dieser Transportgleichung ist nur für stark vereinfachte Fälle möglich. Auch numerische Diskretisierungsverfahren scheitern meist an der hohen Dimensionalität der Transportgleichung [Warnatz96]. Ein gebräuchliches Verfahren zur numerischen Lösung stellt die Monte-Carlo- (MC) Methode dar. Eine detaillierte Übersicht zu diesem Thema ist in den Artikeln [Pope85, Borghi88, Jones96a] gegeben. Bei Verwendung der MC-Technik wird die PDF durch ein stochastisches Partikelsystem repräsentiert. Die physikalischen Prozesse Diffusion, Konvektion und die chemische Reaktion müssen auf das Partikelsystem transformiert werden, so daß die diskrete Verteilungsfunktion der Partikel eine möglichst gute Approximation der PDF der Transportgleichung ist. Dabei tragen die Partikel die Eigenschaften der Zustandsgrößen, welche sich durch stochastische Prozesse jeden Zeitschritt ändern. Statistische Momente, wie beispielsweise Mittelwert und Varianz, lassen sich aus den Verteilungsfunktion der entsprechenden Zustandsgrößen berechnen.

Ein wesentlicher Vorteil dieser Methode liegt darin, daß der chemische Quellterm exakt behandelt werden kann; er muß nicht modelliert werden. Da die PDF jedoch nur die Eigenschaften eines Punktes im Raum trägt, müssen sämtliche Diffusionsprozesse modelliert werden. Das geschieht mit Hilfe eines sogenannten Mischungsmodells, wodurch das Mischen durch laminare und turbulente Prozesse beschrieben wird.

MC-Methoden werden nach der Anzahl der Zustandsgrößen, welche sie eigenständig zu lösen vermögen, unterschieden. Im Prinzip kann eine MC-Methode die Transportgleichungen vollständig ersetzen, wenn neben der Geschwindigkeit und den skalaren Feldern auch die turbulente Zeitskala $\tau = \frac{k}{\epsilon}$ modelliert wird. Auf diesem Gebiet ist jedoch erst in jüngster Zeit Erfahrung gesammelt worden [Pope92].

Meist werden jedoch nicht alle Strömungsparameter gelöst und die MC-Methode mit einem Programm zur Lösung der erforderlichen Transportgleichungen in einem hybriden Verfahren gekoppelt [Correa92]. Die für die MC-Technik benötigte turbulente Zeitskala τ wird oft mittels des k - ϵ -Modells berechnet und die Geschwindigkeit und skalare Größen mit der MC-Methode gelöst. Dabei muß eine numerisch aufwendige Differentialgleichung für den mittleren Druckgradienten gelöst werden [Pope85]. Dies kann umgangen werden, indem das Geschwindigkeitsfeld zusätzlich durch die Transportgleichungen bestimmt wird und iterativ an das Partikelmodell angepaßt wird

[Nau96, Nau97, Nooren96]. Die aus dem MC-Modell gewonnene Dichte wird an das CFD-Programm zurückgeliefert (CFD, engl.: Computational Fluid Dynamics).

Eine alternative Möglichkeit besteht darin, die skalaren Variablen mit einer MC-Technik zu lösen [Pope80] und die vom CFD-Programm berechnete Geschwindigkeit auf die Partikel zu interpolieren. Das System kann ebenfalls über die Dichte gekoppelt werden, welche vom MC-Programm berechnet wird. Die für die Partikelprozesse notwendige turbulente Zeitskala wird durch das CFD-Programm bereitgestellt [Jones93, jones96b, Kraft96, Chen89a, Sadat96a].

Eine weiteres Kriterium zur Unterscheidung der MC-Methoden ist durch das Bezugssystem der Partikel gegeben. Werden die Partikel mit dem strömenden Fluid bewegt, spricht man von einem Langrange-System, werden sie an einem festen Ort gehalten, kennzeichnet dies ein Eulersches System. Bei einem Eulersches System müssen die Partikelprozesse ebenfalls in das neue Koordinatensystem transformiert werden [Jones96a]. Diese Technik wird oft in Verbindung mit einer skalaren MC-Methode angewandt [Pope80, Laxander96].

Im Laufe der Zeit wurde die MC-Technik in vielerlei Hinsicht modifiziert. Im folgenden wird ohne Anspruch auf Vollständigkeit ein kurzer Überblick der verschiedenen Varianten, welche aus der Literatur bekannt sind, gegeben. Die PDF-Transportgleichung kann auf kompressible Strömungen erweitert werden [Hulek96]. Zusätzlich werden ungeschlossene druckabhängige Terme modelliert [Hsu94]. Der turbulent-laminare Übergang in Wandnähe kann ebenfalls mit einer zusammengesetzten PDF aus Geschwindigkeit und skalaren Größen beschrieben werden [Wölfert96]. Die skalare MC-Methode eignet sich zur Modellierung einer Zweiphasen-Sprayflamme [Raju95]. Die Transformation der Transportgleichung in Zylinderkoordinaten wird mehrfach beschrieben und angewandt [Anand93, Jones87]. Die Kopplung mit einem künstlichen neuronalem Netzwerk wird in [Christo96] untersucht. Des weiteren kann die PDF-Transportgleichung auch durch ein Ensemble stochastischer Felder (statt stochastischer Partikel) gelöst werden [Valino98].

Im nachfolgenden Abschnitt werden die PDF-Transportgleichung, deren Modellierung und das numerische Lösungsverfahren vorgestellt.

3.1 Definitionen

Die skalaren Größen sind durch den Vektor $\vec{\Phi} = (\Phi_1, \dots, \Phi_{N_\Phi})$ gegeben, wobei N_Φ ihre Anzahl darstellt. Üblicherweise sind dies die Massenbrüche w_α und die spezifische Enthalpie h . Werden die skalaren Größen $\vec{\Phi}$ als Zufallsvariablen $\vec{\psi}$ angesehen, so kann eine Verteilungsfunktion dieser Zufallsvariablen, die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (PDF), an einem Ort \vec{x} zur Zeit t definiert werden:

$$f(\psi_1, \dots, \psi_{N_\Phi}; \vec{x}, t) . \quad (3.1)$$

Hierbei kennzeichnet

$$f(\vec{\psi}; \vec{x}, t) d\psi_1 \dots d\psi_{N_\Phi} \quad (3.2)$$

die Wahrscheinlichkeit, daß sich die skalaren Größen $\vec{\Phi}$ an einem Ort \vec{x} zur Zeit t in dem infinitesimalen Bereich des skalaren Phasenraums

$$\Phi_1 \in [\psi_1, \psi_1 + d\psi_1] \dots \Phi_{N_\Phi} \in [\psi_{N_\Phi}, \psi_{N_\Phi} + d\psi_{N_\Phi}] \quad (3.3)$$

befinden. Die PDF f sei außerdem normiert:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\psi_1 \dots d\psi_{N_\Phi} f(\vec{\psi}) = 1 \quad (3.4)$$

Der Mittelwert einer Funktion $Q(\vec{\Phi})$ der skalaren Größen ist durch

$$\langle Q(\vec{\Phi}) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} d\psi_1 \dots d\psi_{N_\Phi} f(\vec{\psi}) Q(\vec{\psi}) \quad (3.5)$$

gegeben.

Anschließend soll der Begriff der *bedingten Wahrscheinlichkeit* eingeführt werden. Dazu zunächst ein Beispiel: Die Wahrscheinlichkeit des Ereignisses A , mit einem Würfel die Zahl 6 zu werfen, sei $P(A) = 1/6$. Die Wahrscheinlichkeit des Ereignisses B , mit einem Würfel eine gerade Zahl zu werfen, sei $P(B) = 1/2$. Die bedingte Wahrscheinlichkeit die Zahl 6 zu werfen unter der Nebenbedingung, daß nur derjenige Wurf, welcher eine gerade Zahl ergibt, gewertet wird, ist $P(A | B) = P(A)/P(B) = (1/6)/(1/2) = 1/3$. Analog kann eine bedingte Wahrscheinlichkeitsdichte zweier Zufallsvariablen ψ_1 und ψ_2 definiert werden:

$$f(\psi_1 | \Phi_2 = \psi_2) = \frac{f(\psi_1, \psi_2)}{f(\psi_2)} \quad (3.6)$$

O.B.d.A läßt sich dies auf mehrdimensionale bedingte PDFs erweitern, wenn ψ_1 und ψ_2 selbst als Vektoren angesehen werden. $f(\psi_2)$ ist die sogenannte *marginale* Wahrscheinlichkeitsdichte:

$$f(\psi_2) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\psi_1 f(\psi_1, \psi_2) \quad (3.7)$$

Weiterhin kann der *bedingten Erwartungswert* einer Funktion $Q(\Phi_1, \Phi_2)$ wie folgt definiert werden:

$$\langle Q(\Phi_1, \Phi_2) \mid \Phi_2 = \psi_2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} d\psi_1 f(\psi_1 \mid \Phi_2 = \psi_2) Q(\psi_1, \psi_2) . \quad (3.8)$$

Der Mittelwert einer Funktion $Q(\Phi_1, \Phi_2)$ läßt sich mit den Gln. (3.5), (3.6) und (3.8) auch durch einen bedingten Erwartungswert ausdrücken:

$$\langle Q(\Phi_1, \Phi_2) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} d\psi_2 \langle Q(\Phi_1, \Phi_2) \mid \Phi_2 = \psi_2 \rangle f(\psi_2) . \quad (3.9)$$

Die massengewichtete PDF wird durch

$$F(\vec{\psi}; \vec{x}, t) = \rho(\vec{x}, t) f(\vec{\psi}; \vec{x}, t) \quad (3.10)$$

definiert. Sie wird auch als MDF bezeichnet.

3.2 Transportgleichung

Aus den Transportgleichungen (2.1)...(2.3) der Strömung und der Definition bedingter Erwartungswerte (Gl. (3.8)) kann eine Transportgleichung für die massengewichtete PDF $F(\vec{\psi}; \vec{x}, t)$ der skalaren Größen hergeleitet werden [Pope85, Nau97]:

$$\frac{\partial F}{\partial t} + \frac{\partial[\tilde{v}_i F]}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} [S_\alpha F] = \frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} \left[\left\langle \frac{1}{\rho} \frac{\partial J_{\alpha,j}}{\partial x_j} \mid \vec{\Phi} = \vec{\psi} \right\rangle F \right] - \frac{\partial}{\partial x_i} [\langle v_i'' \mid \vec{\Phi} = \vec{\psi} \rangle F] . \quad (3.11)$$

Dabei bezeichnet der Index α die skalare Größe und i die Komponente eines Vektors im Ortsraum, wobei das Summenzeichen über alle mit gleichem Index doppelt indizierten Terme ausgelassen wurde. Weiterhin ist $S_\alpha = S_\alpha(\vec{\psi})$ der Quellterm und $J_{\alpha,j}$ der diffusive Fluß der skalaren Größen (vgl. Gl. (2.6)). Die Favre-gemittelte Geschwindigkeit wird mit \tilde{v}_i und die Favre-Fluktuation mit v_i'' gekennzeichnet.

Die Terme auf der linken Seite der Transportgleichung (3.11) sind geschlossen und beinhalten der Reihe nach den Beitrag der Akkumulation, Konvektion und der chemischen Reaktion zu der MDF $F(\vec{\psi}; \vec{x}, t)$. Die beiden bedingten Erwartungswerte auf der rechten Seite sind dagegen ungeschlossen und müssen modelliert werden. Der erste Term, welcher von $J_{i,k}$ abhängt, stellt den Beitrag der molekularen und turbulenten Diffusion im skalen Phasenraum dar und wird mit einem Mischungsmodell genähert (Abschnitt 3.5). Der zweite von der Fluktuation v_i'' abhängige Term bildet den Anteil der turbulenten Diffusion im Ortsraum. Er kann durch einen Gradientenansatz modelliert werden (Abschnitt 3.6). Der Anteil der molekularen Diffusion im Ortsraum wird in dieser Darstellung vernachlässigt.

3.3 Zeitintegration

Die Transportgleichung (3.11) kann durch stochastische Partikelprozesse gelöst werden. Dazu wird die Zeitintegration zunächst in drei Teile zerlegt. Der erste Teil umfaßt die chemische Reaktion, der zweite Teil das Mischungsmodell. In diesen beiden Schritten werden also nur die skalaren Eigenschaften $\vec{\Phi}$ der Partikel geändert. Der dritte und letzte Teil beinhaltet die Konvektion und die Diffusion im Ortsraum und verändert somit nur die Koordinaten \vec{x} der Partikel.

Durch Einführung der Operatoren \hat{P}_1 , \hat{P}_2 und \hat{P}_3 kann Gl. (3.11) wie folgt geschrieben werden:

$$\frac{\partial F}{\partial t} = (\hat{P}_1 + \hat{P}_2 + \hat{P}_3) F . \quad (3.12)$$

Ein Vergleich mit (3.11) ergibt für die Operatoren:

$$\begin{aligned} \hat{P}_1 &= +\frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} S_\alpha \\ \hat{P}_2 &= -\frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} \left\langle \frac{1}{\rho} \frac{\partial J_{\alpha,j}}{\partial x_j} \mid \vec{\Phi} = \vec{\psi} \right\rangle \\ \hat{P}_3 &= +\frac{\partial}{\partial x_i} (\tilde{v}_i + \langle v_i'' \mid \vec{\Phi} = \vec{\psi} \rangle) . \end{aligned} \quad (3.13)$$

Die zeitliche Integration läßt sich durch drei separate Schritte nähern:

$$\begin{aligned} F_1(t) &\approx (\hat{I} + \Delta t \hat{P}_1) F(t) \\ F_2(t) &\approx (\hat{I} + \Delta t \hat{P}_2) F_1(t) \\ F(t + \Delta t) &\approx (\hat{I} + \Delta t \hat{P}_3) F_2(t) . \end{aligned} \quad (3.14)$$

Dabei ist \hat{I} der Einheitsoperator, der eine Funktion auf sich selbst abbildet. Die Näherung ist gut, wenn Terme der Ordnung Δt^2 vernachlässigt werden.

3.4 Erster Schritt: chemische Reaktion

Der wesentliche Vorteil der MC-Methode ist, daß der Term der chemischen Reaktion geschlossen ist und exakt berechnet werden kann. Dazu muß der Operator \hat{P}_1 (Gl. (3.12)) auf das stochastische Partikelsystem transformiert werden [Pope85]:

$$\Phi_{\alpha,p}(t + \Delta t) = \Phi_{\alpha,p}(t) + \Delta t S_\alpha(\vec{\Phi}) . \quad (3.15)$$

Dabei kennzeichnet der Index α wieder die skalare Größe, p das Partikel und S_α den skalaren Quellterm. Weiterhin ist zu erkennen, daß die Zeitintegration der chemischen

Reaktion eine punktueller Prozess ist, also an jedem Ort (d.h. für jedes Partikel) separat durchgeführt wird. Die Integration kann je nach Verfahren explizit oder implizit ausgeführt werden. Der Ort \vec{x}_p der Partikel ändert sich in diesem Schritt nicht.

3.5 Zweiter Schritt: Mischungsmodell

Das Mischungsmodell beschreibt die Schließung des mit dem Operator \hat{P}_2 verbundenen Terms in Gl. (3.12). Der bedingte Erwartungswert stellt den Anteil der molekularen und turbulenten Diffusion im skalaren Phasenraum dar. Jener Term ist ungeschlossen, weil die MDF F keine Aussage über die Korrelation der skalaren Größen zwischen zwei Orten \vec{x}_1 und \vec{x}_2 macht. Da neben der chemischen Reaktion das Mischungsmodell der einzige Prozeß ist, welcher die skalaren Größen ändert, hat das Mischungsmodell großen Einfluß auf Zündung, Flammenausbreitung und die gesamte Verbrennung [Nooren96]. Einen guten Überblick der Mischungsmodelle ist durch den Übersichtsartikel [Jones96a] gegeben.

3.5.1 Dopazo-Mischungsmodell

Das Dopazo-Mischungsmodell, welches auch LMSE- (Linear Mean Square Estimation), IEM- oder deterministisches Modell genannt wird, basiert auf einer kontinuierlichen Relaxation der skalaren Größen zu ihrem Mittelwert [Dopazo73, Dopazo79]:

$$\Phi_{\alpha,p}(t + \Delta t) = \Phi_{\alpha,p}(t) - \Delta t \frac{C_d \tilde{\epsilon}}{2 \tilde{k}} (\Phi_{\alpha,p} - \langle \Phi_{\alpha} \rangle) \quad . \quad (3.16)$$

Hierbei kennzeichnet der Index α die skalare Größe, p das Partikel, \tilde{k} ist die turbulente kinetische Energie und $\tilde{\epsilon}$ ihre Dissipation. Für die Modellkonstante kann $C_d = 2$ gewählt werden [Pope79]. Dieses simple Schließungsmodell beinhaltet keine Abhängigkeit von der Form der PDF, sondern nur von dem Mittelwert $\langle \Phi_{\alpha} \rangle$. Folglich kann es ausgehend von einer willkürlich initialisierten PDF keine Relaxation zu einer Gaußverteilung beschreiben. Besteht eine PDF bei ihrer Initialisierung aus zwei δ -Funktionen, so bleiben diese stets erhalten und wandern im Laufe der Zeit auf ihren gemeinsamen Mittelwert zu.

Trotzdem stellt das häufig verwendete Dopazo-Mischungsmodell zufriedenstellende Ergebnisse dar [Jones96a, Nau97, Nooren96, Norris96].

3.5.2 Herkömmliches und erweitertes Curl-Modell

Das erweiterte Curl-Modell, welches auch stochastisches Mischungsmodell genannt wird und zu der Gruppe der Koaleszenz-Dispersions- (C/D) Modelle gehört, wird durch ein teilweises, diskontinuierliches Mischen der Partikel beschrieben [Jones96a]. Dabei wird ein Partikelpaar p, q mit der Wahrscheinlichkeit

$$W = \Delta t C_d \frac{\tilde{\epsilon}}{k} \quad (3.17)$$

ausgewählt und die skalare Größe Φ_α auf den Partikeln p und q durch die Vorschrift

$$\begin{aligned} \Phi_{\alpha,p}(t + \Delta t) &= \left(1 - \frac{x}{2}\right) \Phi_{\alpha,p}(t) + \frac{x}{2} \Phi_{\alpha,q}(t) \\ \Phi_{\alpha,q}(t + \Delta t) &= \left(1 - \frac{x}{2}\right) \Phi_{\alpha,q}(t) + \frac{x}{2} \Phi_{\alpha,p}(t) \end{aligned} \quad (3.18)$$

gemischt. Hierbei ist x eine Zufallsvariable aus dem Intervall $(0, 1)$, welche aus einer Verteilung $A(x)$ gewählt wird. Dabei hängt die Wahl der Modellkonstante C_d von der verwendeten Verteilung $A(x)$ ab. Die in der Literatur standardmäßig getroffene Annahme, welche auch hier verwendet wurde, ist eine Gleichverteilung $A(x) = 1$ mit $C_d \approx 3$ [Jones96a]. Es gibt jedoch auch Untersuchungen, die Form der Verteilung $A(x)$ zu ändern. Die entsprechenden Ergebnisse sind in [Jones96a, Kosaly86] zusammengefaßt.

In dem Grenzfall $x = 0$ ergibt sich, daß die Partikel p, q nicht gemischt werden. Im Fall $x = 1$ geht Gl. (3.18) in das herkömmliche Curl-Modell über, welches durch die Vorschrift

$$\begin{aligned} \Phi_{\alpha,p}(t + \Delta t) &= \frac{\Phi_{\alpha,p}(t) + \Phi_{\alpha,q}(t)}{2} \\ \Phi_{\alpha,q}(t + \Delta t) &= \frac{\Phi_{\alpha,p}(t) + \Phi_{\alpha,q}(t)}{2} \end{aligned} \quad (3.19)$$

beschrieben wird. Dabei wird die Modellkonstante $C_d = 2$ verwendet [Pope85].

Das erweiterte Curl-Modell kann, initialisiert mit einer willkürlichen PDF, zu einer glockenförmigen Kurve relaxieren, welche jedoch nicht eine Gaußfunktion darstellen muß. Außerdem entspricht die diskontinuierliche Änderung der skalaren Größen zu diskreten Zeiten nicht einem physikalischen Mischprozeß [Pope85].

Trotzdem ist das erweiterte Curl-Modell neben dem Dopazo-Modell eines der meist verwendeten Mischungsmodelle. Es liefert gute Übereinstimmung mit Experimenten [Nooren96, Jones93, Zurbach97]. Eine Kopplung des erweiterten Curl-Modells mit dem Dopazo-Modell wird durch [Sadat96a] beschrieben. Hier wird das deterministische Modell für den Flameletbereich verwendet, das stochastische Modell wird in Zonen benutzt, in welchen die chemischen Reaktionen hinreichend langsam ablaufen.

Abschließend sei in Abb. 3.1 das Dopazo-Modell, das herkömmliche und das erweiterte Curl-Modell schematisch für die Mischung zweier Partikel veranschaulicht.

3.5.3 Alternative Mischungsmodelle

Zu den Koaleszenz-Dispersions-Modellen zählen weiterhin das Age-Biased- und das Reaction-Zone-Conditioning-Modell. Beide Modelle basieren auf dem erweitertem Curl-

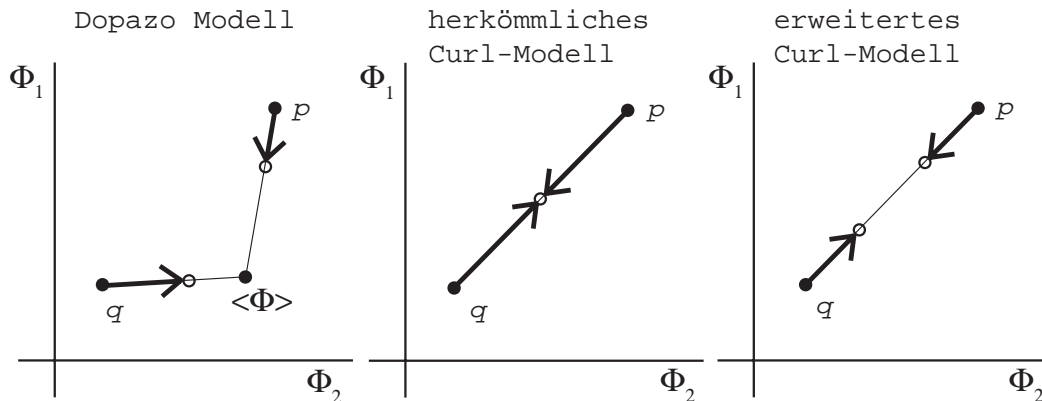


Abbildung 3.1: Schematische Darstellung des Mischens zweier Skalare Φ_1 und Φ_2 der Partikel p, q mit dem Dopazo-Modell, dem herkömmlichen und dem erweiterten Curl-Modell.

Modell. Das Age-Biased-Modell verwendet partikelbezogene Mischungswahrscheinlichkeiten W , welche proportional zu der Zeitdifferenz seit dem letzten Mischen des Partikels sind [Pope82]. Das Reaction-Zone-Conditioning-Modell versucht zu verhindern, daß ein Partikel durch den Mischungsprozeß die Reaktionszone passiert, ohne explizit an der chemischen Reaktion teilzunehmen. Dies wird durch ein Unterteilen des Zeitschrittes während des Mischens und der chemische Reaktion erreicht [Chen91].

Langevin-Modelle, wie sie bei MC-Methoden, welche die Transportgleichung für Skalare und Geschwindigkeiten lösen, zur Schließung der Impulsdiffusion verwendet werden, eignen sich nicht als skalares Mischungsmodell, da diese Modelle eine nicht beschränkte Zeitentwicklung der sich mischenden Skalare liefert [Pope85, Jones96a].

Binomial-Modelle benutzen eine Kombination aus einem Dopazo- und einem stochastischem Modell [Vilano90]. Bisher besteht wenig Erfahrung [Kraft96] mit dieser Variante und es ist nicht klar, wie gut das Modell mit mehrdimensionalen PDFs arbeitet [Jones96a].

Das Mapping-Closure-Modell benutzt die Zeitentwicklung einer Gaußfunktion als Referenzfeld für die PDF der zu mischenden skalaren Größe. Die Entwicklung der skalaren PDF wird durch eine Abbildung der Referenzfunktion auf die skalare PDF bewerkstelligt [Chen89b, Nooren96]. Die Methode liefert bei homogener Turbulenz sehr gute Ergebnisse im Vergleich zu Experimenten bzw. DNS. Es ist jedoch unklar, wie gut das Modell bei inhomogenen Strömungen arbeitet [Jones96a].

Weitere Mischungsmodelle sind das Ordered-Pairing- [Norris91] und das Euclidean-Minimum-Spanning-Tree-Modell [Masri96]. Beide Modelle basieren darauf, die Partikel abhängig von ihrer Position im skalaren Phasenraum zu mischen (z.B. dicht benachbarte Partikel).

3.6 Dritter Schritt: Diffusion im Ortsraum und Konvektion

Der dritte Schritt umfaßt die Transformation des Operators \hat{P}_3 (Gl. (3.13)) auf das Partikelsystem. Dies sind die Terme der Konvektion, welche durch die Favre-gemittelte Geschwindigkeit \tilde{v}_i bestimmt wird, und der Anteil turbulenter Diffusion im Ortsraum, welche durch den bedingten Erwartungswert der Geschwindigkeitsfluktuationen v_i'' beschrieben wird. Die Berechnung der Konvektion kann exakt durchgeführt werden, der Diffusionsterm wird durch einen Gradientenansatz genähert [Pope85]:

$$\langle v_i'' \mid \vec{\Phi} = \vec{\psi} \rangle F = -\Gamma_{\text{tur}} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{F}{\rho} \right) . \quad (3.20)$$

Um weiterhin den molekularen Anteil der Diffusion zu berücksichtigen, wird der turbulente Transportkoeffizient Γ_{tur} durch den effektiven Transportkoeffizient $\Gamma_{\text{eff}} = \Gamma_{\text{tur}} + \Gamma_{\text{lam}}$ ersetzt [Laxander96], wobei Γ_{lam} den molekularen Anteil kennzeichnet. Es wird angenommen, daß diese Größen proportional zu den entsprechenden Transportkoeffizienten μ_{tur} bzw. μ_{lam} des Impulses sind:

$$\Gamma_{\text{eff}} = \Gamma_{\text{tur}} + \Gamma_{\text{lam}} = \frac{\mu_{\text{tur}}}{\sigma_{\text{tur}}} + \frac{\mu_{\text{lam}}}{\sigma_{\text{lam}}} . \quad (3.21)$$

Die zugehörige Proportionalitätskonstanten σ_{tur} bzw. σ_{lam} ist im Falle der Massendiffusion durch die Schmidtzahlen $\sigma_{\text{tur}} = Sc_{\text{tur}}$ bzw. $\sigma_{\text{lam}} = Sc_{\text{lam}}$ und im Falle der Enthalpiediffusion durch die Prandtzahlen $\sigma_{\text{tur}} = Pr_{\text{tur}}$ bzw. $\sigma_{\text{lam}} = Pr_{\text{lam}}$ gegeben. Der turbulente Transportkoeffizient μ_{tur} kann mittels des k - ϵ -Modells bestimmt werden [Launder72]:

$$\mu_{\text{tur}} = C_{\mu} \langle \rho \rangle \frac{\tilde{k}^2}{\tilde{\epsilon}} . \quad (3.22)$$

Hierbei ist \tilde{k} die turbulente kinetische Energie und $\tilde{\epsilon}$ ihre Dissipation. Der laminare Transportkoeffizient μ_{lam} wird mit Hilfe einer Sutherland-Formel bestimmt [Amsden89]:

$$\mu_{\text{lam}} = \frac{a_1 T^{3/2}}{T + a_2} . \quad (3.23)$$

Für die in Gl. (3.22) und (3.23) verwendeten Modellparameter können folgende Werte [Amsden89, Amsden92, Warnatz96] gewählt werden:

$$\begin{aligned} \sigma_{\text{tur}} = \sigma_{\text{lam}} &= 0.7 \\ C_{\mu} &= 0.09 \\ a_1 &= 1.457 \cdot 10^{-5} \\ a_2 &= 110 . \end{aligned} \quad (3.24)$$

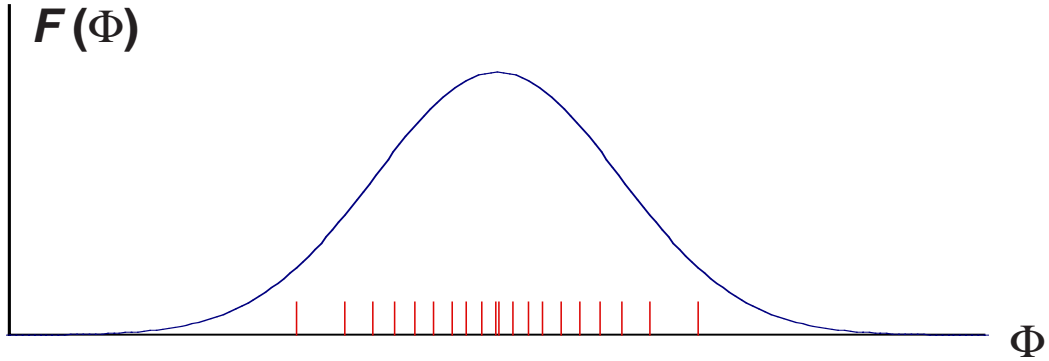


Abbildung 3.2: Eine kontinuierliche PDF kann durch eine Summe von δ -Funktionen genähert werden.

Der Gradientenansatz (3.20) der Diffusion besitzt keinen geschlossenen Ausdruck, er kann im Partikelmodell durch einen isotropen aus zwei Termen bestehenden Wienerprozess modelliert werden [Pope85, Jones96a]. Zusammen mit der Konvektion, welche den Beitrag $\Delta t \tilde{v}$ liefert, ergibt sich für die Ortsänderung der Partikel durch den Operator \hat{P}_3 :

$$\vec{x}_p(t + \Delta t) = \vec{x}_p(t) + \Delta t \tilde{v} + \underbrace{\Delta t \frac{1}{\rho} \nabla \Gamma_{\text{eff}}}_{\text{mittl. Diff}} + \underbrace{\left[\frac{2 \Delta t \Gamma_{\text{eff}}}{\rho} \right]^{1/2} \vec{\xi}}_{\text{flukt. Diff.}} . \quad (3.25)$$

Der Wienerprozess besteht aus zwei Termen, welche die mittlere und die fluktuative Diffusion beschreiben. Die mittlere Diffusion berechnet sich aus dem Gradienten des effektiven Transportkoeffizienten Γ_{eff} . Der fluktuative Anteil wird mit einem aus drei Komponenten bestehendem normalverteiltem Zufallsvektor $\vec{\xi}$ beschrieben. Die skalaren Partikeleigenschaften $\vec{\Phi}_p$ werden in diesem Schritt nicht verändert.

3.7 Diskretisierung der PDF

Da bei der MC-Technik die skalaren Größen als Eigenschaften eines stochastischen Partikelsystems gelöst werden, ist ihre Verteilungsfunktion, die PDF, nicht kontinuierlich, sondern diskret. D.h. die MDF kann als Summe von Delta-Funktionen beschrieben werden (vgl. Abb. 3.2):

$$F(\vec{\Phi}; t) = m_0 \sum_{p=1}^{N_{pc}} \delta(\psi_1 - \Phi_{1,p}) \dots \delta(\psi_{N_\Phi} - \Phi_{N_\Phi,p}) \delta(x_1 - x_{1,p}) \dots \delta(x_3 - x_{3,p})$$

$$= m_0 \sum_{p=1}^{N_{pc}} \delta(\vec{\psi} - \vec{\Phi}_p) \delta(\vec{x} - \vec{x}_p) . \quad (3.26)$$

Hierbei bezeichnet der Index α die skalaren Eigenschaften und p das betrachtete Partikel mit der Masse m_0 . Um einen ortsabhängigen Mittelwert zu berechnen, kann der Raum in Zellen eingeteilt werden, welche so viele Partikel enthalten, daß der statistische Fehler möglichst gering bleibt. Andererseits sollten die Zellen klein genug sein, um eine vernünftige räumliche Auflösung zu erhalten. Die Partikelzahl einer Zelle sei dabei durch N_{pc} gegeben. Der statistische relative Fehler eines Mittelwertes einer über die Zellen gemittelten Größe ergibt sich aus $1/\sqrt{N_{pc}}$ [Fließbach93]. Die mittlere Dichte einer Zelle mit dem Volumen V_c wird durch Summieren der Partikelmassen mit der Masse m_0 gebildet:

$$\langle \rho \rangle = \frac{m_0 N_{pc}}{V_c} . \quad (3.27)$$

Das Favremittel einer Funktion der skalaren Größen $Q(\vec{\Phi})$ kann wie folgt erhalten werden:

$$\begin{aligned} \langle \rho \rangle \tilde{Q} &= \langle \rho Q \rangle = \int d\psi_1 \dots d\psi_{N_{\Phi}} \rho f(\vec{\psi}) Q(\vec{\psi}) = \int d\psi_1 \dots d\psi_{N_{\Phi}} F(\vec{\psi}) Q(\vec{\psi}) \\ &= \int d\psi_1 \dots d\psi_{N_{\Phi}} m_0 \sum_{p=1}^{N_{pc}} \delta(\vec{\psi} - \vec{\Phi}_p) \delta(\vec{x} - \vec{x}_p) Q(\vec{\psi}) \\ &= m_0 \sum_{p=1}^{N_{pc}} Q(\vec{\Phi}_p) \delta(\vec{x} - \vec{x}_p) . \end{aligned} \quad (3.28)$$

Mit Verwendung der Dichte aus Gl. (3.27) folgt für das Favremittel \tilde{Q} in Gl. (3.28):

$$\tilde{Q} = \frac{V_c}{N_{pc}} \sum_{p=1}^{N_{pc}} Q(\vec{\Phi}_p) \delta(\vec{x} - \vec{x}_p) . \quad (3.29)$$

Um einen orts aufgelösten Mittelwert zu erhalten, wird Gl. (3.29) über den Bereich des Volumens V_c einer Zelle integriert:

$$\begin{aligned} V_c \tilde{Q} &= \int dx_1 \dots dx_3 \frac{V_c}{N_{pc}} \sum_{p=1}^{N_{pc}} Q(\vec{\Phi}_p) \delta(\vec{x} - \vec{x}_p) \\ &= \frac{V_c}{N_{pc}} \sum_{p=1}^{N_{pc}} Q(\vec{\Phi}_p) . \end{aligned} \quad (3.30)$$

Damit ergibt sich schließlich für den Zellmittelwert \tilde{Q}

$$\tilde{Q} = \frac{1}{N_{pc}} \sum_{p=1}^{N_{pc}} Q(\vec{\Phi}_p) . \quad (3.31)$$

Analog dazu können auch andere statistische Momente der skalaren Größen berechnet werden. Die PDF selbst kann durch Abzählen der Partikel mit der gesuchten Eigenschaft, welche sich innerhalb definierter Intervalle befinden, gefunden werden.

4 Implementierung einer Monte-Carlo-PDF-Methode in KIVA

Im folgenden Kapitel sollen die numerischen Details über das in KIVA [Amsden92, Amsden89] im Rahmen dieser Arbeit implementierte MC-Modell (MC: Monte-Carlo) für drei Dimensionen und skalare Größen gegeben werden [PDFCode99]. Dabei wird ein Lagrange-Verfahren für bewegte Partikel in einem abgeschlossenen Raum verwendet. Das Lagrange-Verfahren gewährleistet eine einfache Erweiterung auf eine zusammengesetzte PDF aus Geschwindigkeit und skalaren Größen. Die Erweiterung auf nicht abgeschlossene Räume ist ebenfalls leicht möglich.

Die Partikel können neben ihren Koordinaten und dem Index der Zelle, in welcher sie sich befinden, die skalaren Eigenschaften wie Massenbrüche und Enthalpie tragen. Dieses MC-Modell wird in einem hybriden Verfahren mit dem konventionellen CFD-Programm aus KIVA gekoppelt. Alle Zusammenhänge, die sich auf die Originalversion von KIVA beziehen (vgl. Abschnitt 2.4) werden im nachfolgenden Text konventionell genannt. Namen von Variablen, Unterprogrammen oder sonstigen Objekten aus dem Quellcode werden der Übersichtlichkeit wegen in der Schriftart `sans serif` dargestellt.

Als Testsystem der implementierten Teilprogramme wurde ein einfaches, zur Ebene $y = 0$ spiegelsymmetrisches Gitter eines Zweitakt-Motors [Amsden89] (Abb. 4.1) verwendet. Aufgrund dieser Symmetrie muß nur eine Hälfte des Testmotors berechnet werden. Das Gitter besitzt je einen Ein- und Auslaßkanal, zwischen denen während der Kompression eine Druckdifferenz besteht. Dadurch wird im Brennraum eine Strömung erzeugt, welche auch nach dem Schließen der Kanäle bei ca. 34° KW vOT bestehen bleibt. Zu diesem Zeitpunkt werden die Partikel initialisiert und kurz darauf gezündet. Es existieren zwei Versionen des Testgitters, die sich in ihrer Zelldichte unterscheiden: `teapot` mit 600 Zellen und `2n-teapot` mit 3360 Zellen im Brennraum bei 34° KW vOT.

4.1 Grundlegende Bemerkungen

Alle notwendigen Änderungen in KIVA sind mit Kommentarzeilen, die mit `c ctx` oder `ctx` beginnen, gekennzeichnet. Eigens geschriebene Unterprogramme beginnen mit `ct*.f` und enthalten in den Kommentarzeilen Information über die wichtigen Variablen und Funktionen. Dabei wird jedes Unterprogramm im folgenden Text durch `*.f` gekennzeichnet, auch wenn manche Unterprogramme in einer Datei zusammengefaßt sind. Das implementierte MC-Modell wird durch das Unterprogramm `ctpdfmc.f` gesteuert und im Hauptprogramm `kiva.f` einmal pro Zeitschritt aufgerufen. Der Aufruf erfolgt während der KIVA-Phase A (Berechnung der Quellterme) und wird durch den Parameter `cflag=3.0` aktiviert. Die Struktur von `ctpdfmc.f` ist in Abb. 4.2 dargestellt und wird in den folgenden Abschnitten näher erleutert.

Sämtliche Parameter, welche im Quellcode des MC-Modells verwendet werden, sind zu Beginn der jeweiligen Unterprogramme `ct*.f` in Parameterlisten abgelegt. Die verwendeten Variablen sind zum großen Teil lokal definiert und werden durch Variablenlisten

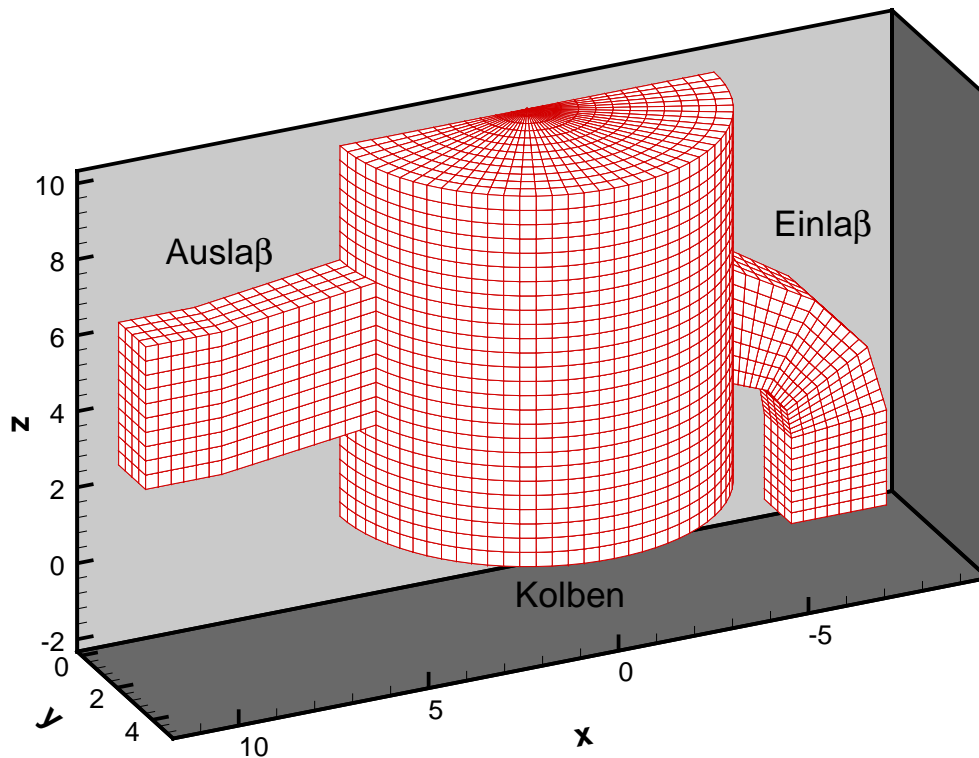


Abbildung 4.1: Das Testgitter 2n-teapot.

an die Unterprogramme übergeben. Einige wenige Variablen sind in common-Blöcken global definiert und werden durch die Include-Datei `comct.i` eingebunden.

Die Eigenschaften der Partikel werden in separaten Feldern der Länge `npart` gespeichert. Dies sind die Koordinaten `xpart`, `ypart`, `zpart`, die zugehörige KIVA-Zelle `i4part`, der räumlich nächste KIVA-Vertex `i4next`, die logarithmierte nominale Masse des Partikels $k_{part} = k_p$ (vgl. Abschnitt 4.7), die Dichte `hpart` und die Massenbrüche `w1part`, `w2part`. Schleifen über alle Partikel beginnen mit `do ip=1,npb`, wobei `npb` die aktuelle Partikelzahl ist, die sich durch das Klonen stets ändert. Hierbei wird unter Klonen die Anpassung der Partikelzahl an die Zellgröße verstanden (näheres dazu in Abschnitt 4.7).

Die Mittelwerte der Partikeleigenschaften, welche über die KIVA-Zellen gebildet werden, sind durch Variablennamen der Form `*ave` gekennzeichnet. Dies sind die Dichte `roave`, die Fortschrittsvariablen `w1ave` und `w2ave`, die Massenbrüche `fuave` und `ohave`, die Temperatur `tpave` und die Inkremente `d*ave`. Der Partikelmittelwert einer Eigenschaft Φ in der Zelle `i4` aus Gl. (3.31) geht dabei in

$$\langle \Phi \rangle = \frac{\sum_{p=1}^{N_{pc}} \Phi_p 2^{k_p}}{\sum_{p=1}^{N_{pc}} 2^{k_p}} \quad (4.1)$$

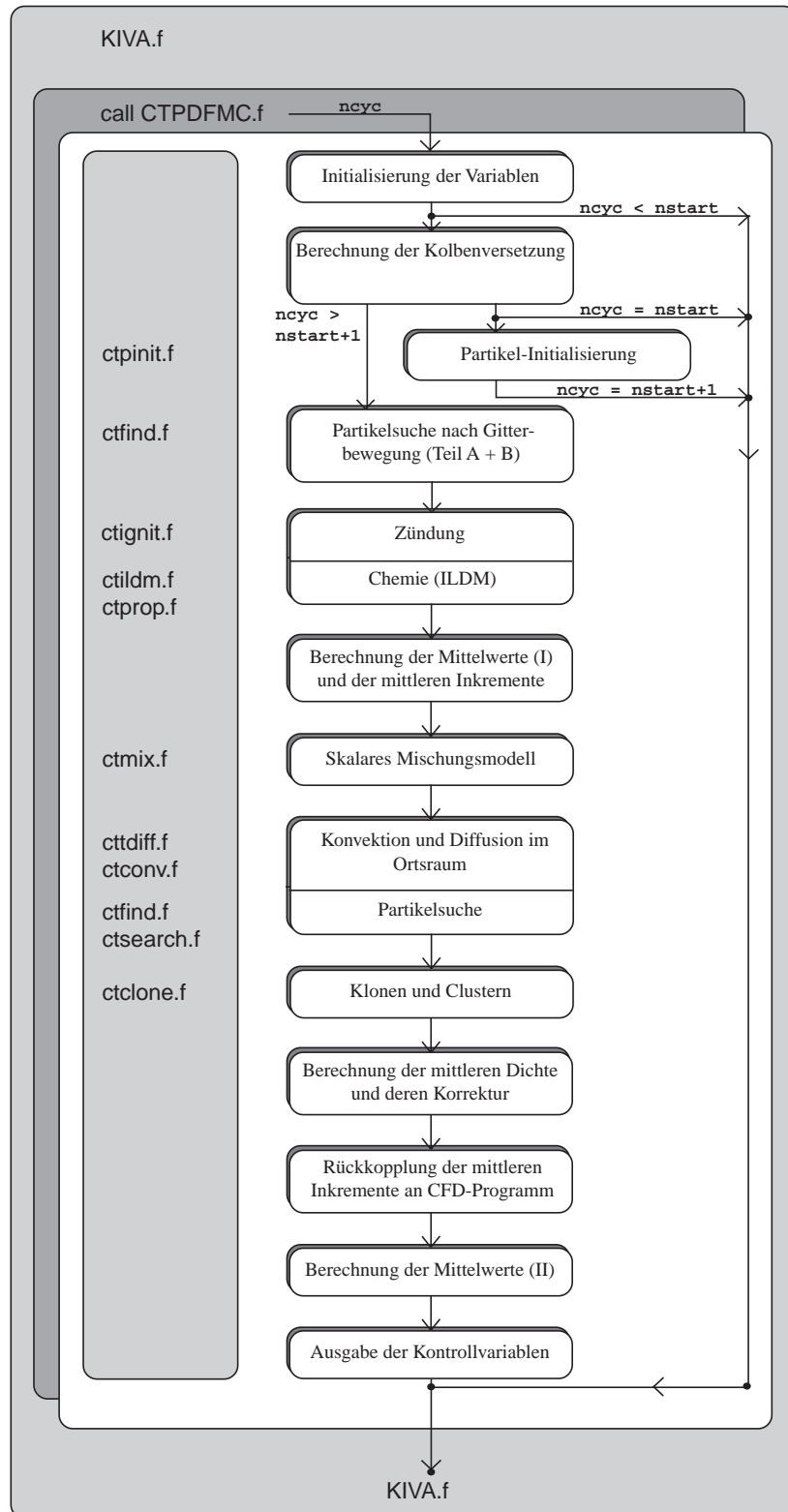
über. Hierbei läuft die Summe über alle N_{pc} Partikel p einer Zelle. Der Normierungsfaktor $\sum_{p=1}^{N_{pc}} 2^{k_p}$ der nominalen Massen 2^{k_p} (vgl. Abschnitt 4.7) wird in der Variablen `hsave` abgelegt. Weiterhin gibt die ebenfalls über die KIVA-Zellen indizierte Größe `trace` die Anzahl der Partikel in der jeweiligen Zelle an. Schleifen über die beschriebenen Felder, welche auf den KIVA-Zellen indiziert sind, in denen sich die Partikel befinden, beginnen stets mit `do i4=ifirst,ncells; if(idreg.eq.1)then . . .`. Dabei bezieht sich das Intervall (`ifirst,ncells`) auf die aktiven KIVA-Zellen und die Bedingung (`idreg.eq.1`) auf den geschlossenen Brennraum. Dieser Raum wird nachfolgend auch Berechnungsvolumen oder fluider Raum genannt.

Die Ergebnisse der Berechnung werden im Tecplot-Format durch das Unterprogramm `ctout9.f` in Dateien der Form `<crank>.plt` geschrieben, wobei `<crank>` den aktuellen Kurbelwellenwinkel kennzeichnet. Somit ist auch während der Rechnung eine Kontrolle der Ergebnisse möglich. Die meisten MC-Unterprogramme liefern außerdem Kontrollvariablen an `ctpdfmc.f` zurück, die dort verwaltet und in die Datei `tape100` geschrieben werden. Somit gibt `tape100` Auskunft über den Ablauf der Partikelprozesse. Weiterhin berechnet die Routine `ctstat.f` Mittelwert, Varianz, Minimum und Maximum einer über die KIVA-Zellen indizierten Größe. Eine weitere Laufzeitkontrolle stellt das Unterprogramm `cterror.f` dar, das im Falle eines Fehler das Programm abbricht oder eine Warnung ausgibt.

4.2 Partikel-Initialisierung

Vor der Zündung des vorgemischten Kraftstoff-Luft-Gemisches wird zunächst die kalte Strömung durch KIVA auf konventionelle Weise berechnet. Das so erhaltene Strömungsfeld stellt gewissermaßen die Anfangsbedingung für die turbulente Verbrennung dar. Das MC-Hauptprogramm `ctpdfmc.f` wird zum erste Mal mindestens drei Zeitschritte vor der Zündung bei dem Kurbelwellenwinkel `cstart` durch `kiva.f` aufgerufen. Da zunächst die Kolbenversetzung `dzpist` bestimmt wird, erfolgt die Partikelinitialisierung erst während des Zeitschrittes `cstart+1` durch den Aufruf `call ctpinit`. Erst im darauffolgenden Zeitschritt wird `ctpdfmc.f` das erste Mal vollständig durchlaufen. D.h. die Zündung der Partikel ist ab dem Zeitschritt `cstart+2` durch das in der Eingabedatei `itape` konventionell festgelegte Zündintervall möglich.

Das Unterprogramm `ctpinit.f` initialisiert zunächst die Koordinaten `xpart`, `ypart`, `zpart` der Partikel, indem es `mcells · pcell` Partikel auf die Zellmittelpunkte verteilt, so daß die Partikelzahl pro Zellvolumen konstant ist. Dabei ist `mcells` die Anzahl der Zellen im Berechnungsvolumen und `pcell` die in `pdfmc.f` vorgegebene Soll-Partikelzahl, welche die Anzahl der Partikel je Zelle nach dem (erst im weiteren Verlauf des Programms aktivierten) Clone-Algorithmus angibt (vgl. Abschnitt 4.7). Die tatsächlich initialisierte Partikelzahl wird in `npb` gespeichert. Die Zelle, in der sich das jeweilige Partikel befindet, wird im Feld `i4part` abgelegt. Die logarithmierte Masse der Partikel wird durch

Abbildung 4.2: Schematischer Ablauf des Monte-Carlo-Hauptprogrammes `ctpdfmc.f`.

$k_p = 0$ initialisiert. Danach wird jedes Partikel zufällig innerhalb einer Kugel mit dem Radius `ranrad` versetzt und anschließend wieder die Zelle `i4part` gesucht, in der sich das Partikel nach dieser Versetzung befindet (vgl. Abschnitt 4.6). Hierbei wird auch das Feld `i4next`, welches den Vertex kennzeichnet, der den geringsten Abstand zu dem Partikel hat, initialisiert. Der Prozeß der zufälligen Versetzung wird für alle Partikel `mtest` Mal hintereinander ausgeführt, um eine räumliche Gleichverteilung der Partikel zu gewährleisten.

Daraufhin werden die skalaren Eigenschaften der Partikel (`w1part`, `w2part`, `hpart`) initialisiert, indem die entsprechenden Größen entweder aus dem CFD-Programm von den Zellen auf die Partikel interpoliert (subroutine `ctint.f`) oder durch Parameter auf einen konstanten Wert festgelegt werden. So wird z.B. der Massenbruch eines Verbrennungsproduktes `w1part` mit dem Parameter `w1pini = 0` gesetzt.

Letztendlich werden die Partikel entsprechend der Soll-Partikelzahl `pcell` durch `ctclone.f` geklont (vgl. Abschnitt 4.7), die ILDM-Tabelle mittels `ctrdildm` initialisiert (vgl. Abschnitt 4.3), die Temperatur-Tabelle der kalten Strömung eingelesen (vgl. Abschnitt 4.8) und die initialisierten Variablen an `ctpdfmc.f` zurückgegeben.

4.3 Zündung und chemische Prozesse

Die Fremdzündung des Partikelsystems kann wahlweise durch zwei Methoden erfolgen: Mittels der ersten Methode werden in dem von `chem.f` abgewandelten Unterprogramm `ctignit.f` alle Zellen bestimmt, in denen das Gemisch gezündet werden soll. Dabei wird diese Zündregion in der Eingabedatei `itape` auf konventionelle Weise festgelegt. Diese Zellen werden in dem Feld `i4ign` abgelegt. Das zweite Verfahren bestimmt alle Partikel, welche sich innerhalb einer kleinen Kugel mit dem Radius `rqiign` und dem Mittelpunkt (`xqiign,yqiign,zqiign`) befinden. Anschließend wird der eigentliche Zündprozeß bei beiden Methoden durch eine Erhöhung der Fortschrittsvariablen der betreffenden Partikel auf die in den Parametern (`w1piign,w2piign`) festgelegten Werte realisiert. Dies sind im Allgemeinen die Werte, welche die Fortschrittsvariablen im chemischen Gleichgewicht annehmen.

Die chemische Umsetzung wird in einer Schleife über alle `npb` Partikel mittels eines ILDM-Modells (vgl. Abschnitt 2.3.3) berechnet. Die ILDM-Tabelle wird als Look-Up-Tabelle in folgendem Format abgelegt [Schramm99]: Die unabhängigen Variablen (Massenbrüche der Reaktionsfortschrittsvariablen) sind auf einem karthesischem Gitter im chemischen Phasenraum indiziert. In deren Abhängigkeit werden die für verschiedene Zeitschritte vorintegrierten Inkremente der Reaktionsgeschwindigkeiten der Fortschrittsvariablen und die thermochemische Zustandvariablen gespeichert. Letztere sind die Massenbrüche, Temperatur, Dichte und die mittlere molare Masse. Sie werden durch `ctrdildm.f` in Felder der Form `tab*(iw1,iw2)` eingelesen. Hierbei beschreibt (`iw1,iw2`) den Gitterpunkt im Phasenraum der Fortschrittsvariablen.

Um eine ausreichende Genauigkeit der Integration der aus der ILDM-Tabelle stammenden Reaktionsgeschwindigkeiten zu gewährleisten, wird die Integration mit Zeitschritten der Länge `dts` ausgeführt. Dabei ist `dts` im Allgemeinen kleiner als der MC-

Zeitschritt dt . Die eigentliche Integration wird durch `ctildm.f` berechnet. Dabei werden die aktuellen Fortschrittsvariablen und ihre Inkremente auf das Gitter interpoliert, welches durch die Tabelle vorgegeben ist. Die thermochemischen Zustandsvariablen werden in Abhängigkeit der aktuellen Fortschrittsvariablen durch das Unterprogramm `ctprop.f` aus den Feldern `tab*` interpoliert.

Das ILDM-Modell kann für kleine Temperaturen (insbesondere unter 1000 K) keine verlässlichen Reaktionsgeschwindigkeiten liefern [Maas93, Niemann98]. Deshalb ist in diesem Bereich ein weiteres Zündmodell, welches den Flammenfortschritt beeinflusst, notwendig. Hierbei soll zunächst ein empirisches Modell Abhilfe verschaffen: Dabei wird der Bereich des Phasenraums, welcher jenen kleinen Temperaturen entspricht, in zwei Gebiete unterteilt. In dem ersten Gebiet, welches näher am Reaktionsbeginn liegt, werden die Reaktionsgeschwindigkeiten auf Null gesetzt. Gelangt ein Partikel jedoch in das zweite Gebiet, in welchem die Reaktion weiter fortgeschritten ist, so wird es *gezündet*. Dies geschieht durch ein Versetzen des Partikels an die Grenze des Bereichs im Phasenraum, für den die ILDM chemisch sinnvolle Werte der Reaktionsgeschwindigkeiten vorraussagt. Von dort aus wird die chemische Reaktion wieder durch die ILDM beschrieben, das Partikel kann sich gemäß seiner Zeitentwicklung in den Gleichgewichtszustand bewegen.

Die beschriebene Aufteilung in zwei Gebiete kann als freier Modellparameter angesehen werden. Mit ihr kann im Wesentlichen der Flammenfortschritt beeinflusst werden.

Es bleibt zu erwähnen, daß hier weiterer Handlungsbedarf besteht. ILDM ist um ein geeignetes Submodell zu ergänzen, welches das thermochemische System auch im Bereich kleiner Temperaturen beschreibt. Dies könnte z.B. durch einen konventionell reduzierten Mechanismus, welcher an das ILDM-Modell gekoppelt wird, bewerkstelligt werden.

4.4 Skalares Mischungsmodell

Im Anschluß an die chemischen Prozesse wird das skalare Mischungsmodell (vgl. Abschnitt 3.5). durch das Unterprogramm `ctmix.f` aufgerufen. Neben den skalaren Eigenschaften wird der Parameter `mixmod` zur Auswahl des gewünschten Mischungsmodells übergeben. Dabei steht `mixmod = 1` für das einfache Curl-Modell, `mixmod = 2` für das erweiterte Curl-Modell und `mixmod = 3` für das Dopazo-Modell. Das skalare Mischen erfolgt bei allen drei Modellen zellenweise, d.h. `ctmix.f` steuert eine Schleife über alle Zellen. Zunächst werden alle Partikel `ip` in der Zelle `i4` gesucht und in dem Feld `ipi4` abgelegt. Um die Partikel bei Verwendung der Curl-Modelle zufällig auszuwählen, wird mit Hilfe von `ctbirect.f` eine zufällige bijektive Abbildung von `ipi4` auf sich selbst erzeugt. Dies hat in der Praxis einen großen Einfluß auf Zündung und Flammenausbreitung, die ohne die zufällige Auswahl der Partikel gar nicht oder nur sehr schwach ausgeprägt sind. Weiterhin werden die Mischungswahrscheinlichkeiten $p \propto \frac{\epsilon C_{\Phi}}{k}$ berechnet und schließlich die skalaren Größen auf ihre neuen Werte abgebildet. Dabei ist zu beachten, daß die Partikel unterschiedliche nominale Massen haben können. Das führt zu folgender Modifikation des einfachen Curl-Modells:

$$\Phi_p(t + \Delta t) = \Phi_q(t + \Delta t) = \frac{\Phi_p(t) + \Phi_q(t)}{2} \longrightarrow \frac{\Phi_p(t) m_p + \Phi_q(t) m_q}{m_p + m_q} \quad (4.2)$$

Dabei ist Φ_p die skalare Eigenschaft und m_p die nominale Masse des Partikels p , welche durch 2^{k_p} gegeben ist (vgl. Abschnitt 4.7). Eine analoge Definition gilt für Partikel q .

Das erweiterte Curl-Modell lautet für Partikel unterschiedlicher nominaler Massen:

$$\begin{aligned} \Phi_p(t + \Delta t) &= \Phi_p(t) + \frac{y}{2} (\Phi_p(t) - \Phi_q(t)) \\ \Phi_q(t + \Delta t) &= \Phi_q(t) + \frac{x}{2} (\Phi_p(t) - \Phi_q(t)) \end{aligned} \quad (4.3)$$

Dabei ist y für $m_q \geq m_p$ eine gleichverteilte Zufallszahl aus dem Intervall $(0, 1)$. Die Variable x wird dann aus der Beziehung $m_p y = m_q x$ ermittelt. Für $m_q < m_p$ wird die Bedeutung von x und y vertauscht. Das Dopazo-Modell kann für ungleiche nominale Partikelmassen in seiner gewohnten Form (3.16) angewandt werden.

Diese Modifikationen gehen für den Fall konstanter Partikelmassen in die herkömmliche Form über (vgl. Abschnitt 3.5). Die Modifikationen wurden aus den Bedingungen gewonnen, daß sowohl die nominale Masse eines jeden Partikels

$$m_p(t + \Delta t) = m_p(t) \quad (4.4)$$

als auch die skalare Eigenschaft beider Partikel

$$\Phi_p(t + \Delta t) m_p + \Phi_q(t + \Delta t) m_q = \Phi_p(t) m_p + \Phi_q(t) m_q \quad (4.5)$$

bei dem Mischungsprozess zweier Partikel p und q erhalten bleibt.

Um die Güte der Mischungsmodelle zu testen, wurde mit KIVA im Gitter `teapot` ein Mischprozess berechnet. Dazu wird bei der Partikel-Initialisierung eine skalare Größe Φ definiert, für die in der vorderen Hälfte ($x < 0$) die zu mischende Größe auf $\Phi = 1$ und in der hinteren Hälfte ($x \geq 0$) auf $\Phi = 0$ gesetzt wird. Der Transport dieser Größe wurde sowohl mit dem CFD-Programm als auch durch die Partikeltechnik für eine kalte Strömung berechnet und verglichen. Das MC-Programm berechnet dabei alle in diesem Kapitel beschriebenen Prozesse bis auf die chemische Reaktion. Die Ergebnisse stimmen hervorragend überein (Abb. 4.3)

4.5 Partikeltransport im Ortsraum

Der Partikeltransport im Ortsraum setzt sich aus der Konvektion, der mittleren und der fluktuativen Diffusion im Ortsraum zusammen (vgl. Gl. (3.25)). Diese Prozesse werden in den Unterprogrammen `cttdiff.f` und `ctconv.f` berechnet.

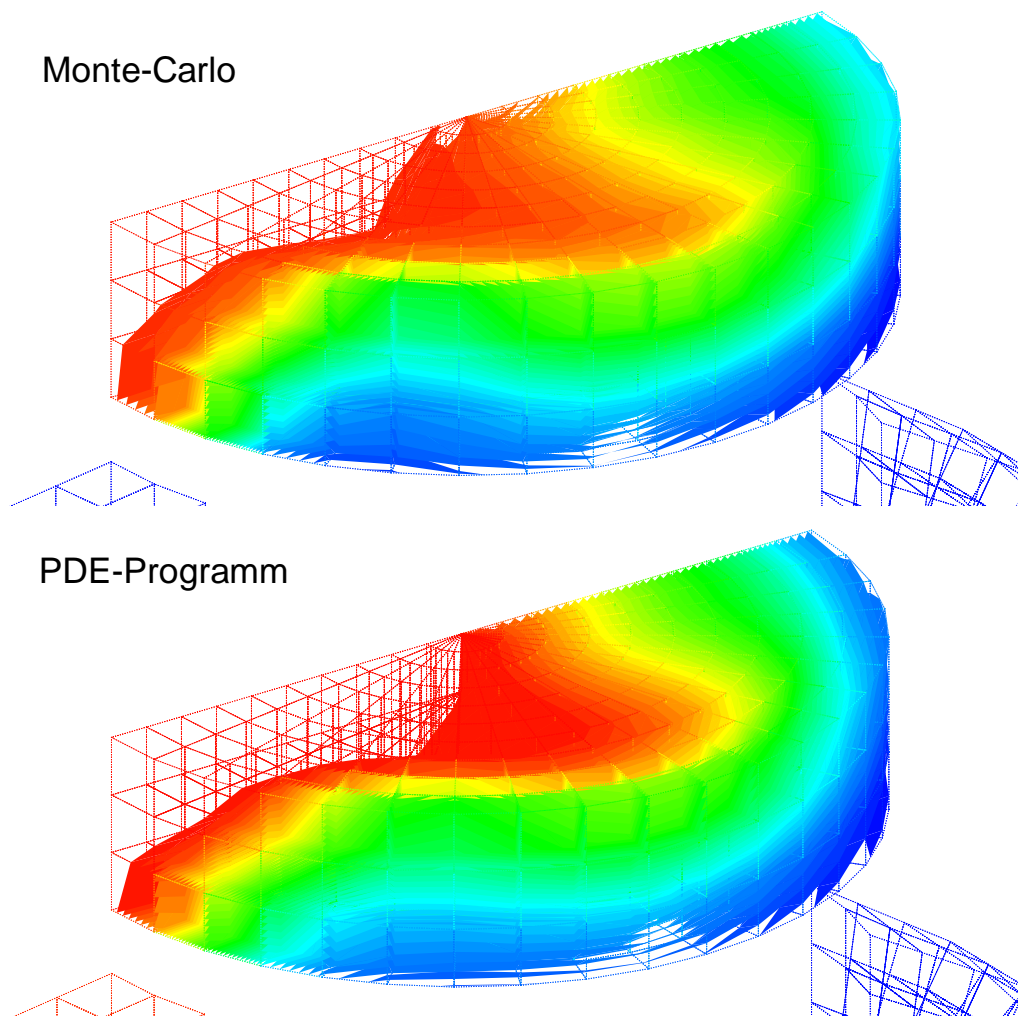


Abbildung 4.3: Vergleich der Mischung eines Skalars bei kalter Strömung zwischen MC- und CFD-Programm.

In `cttdiff.f` wird zunächst der effektive Transportkoeffizient Γ_{eff} aus dem laminaren und turbulenten Anteil bestimmt. Mittels `ctgrad.f` wird der Term $\nabla\Gamma_{\text{eff}}$ und daraus die mittlere Diffusion berechnet und in den Feldern $(u_{\text{eff}}, v_{\text{eff}}, w_{\text{eff}})$ abgelegt. Ebenso wird der Vorfaktor der fluktuativen Diffusion in `v3gam` gespeichert. Danach werden diese vier Größen durch `cvi.f` von den Zellmittelpunkten auf die Vertizes interpoliert. Anschließend wird zu den Geschwindigkeiten $(u_{\text{eff}}, v_{\text{eff}}, w_{\text{eff}})$ der Anteil der Konvektion (u, v, w) , welcher aus dem CFD-Programm erhalten wurde, addiert und an das MC-Hauptprogramm `ctpdfmc.f` zurueckgegeben.

Schließlich wird in `ctpdfmc.f` eine Schleife über alle Partikel gestartet, in welcher der Transport im Ortsraum berechnet wird. Dort wird das Unterprogramm `ctconv.f` aufgerufen und die 4 Felder $(u_{\text{eff}}, v_{\text{eff}}, w_{\text{eff}})$ und `v3gam` übergeben. In `ctconv.f` werden alle räumlichen Änderungen der Partikel ausgeführt. Zu Beginn dieses Unterprogramms werden die vier Größen $(u_{\text{eff}}, v_{\text{eff}}, w_{\text{eff}})$ bzw. `v3gam` mittels des Algorithmus `ctint.f` von den Vertizes auf die Partikel interpoliert.

Dazu wird mit `i4next` der dem Partikel nächste Vertex und seine drei in der selben Zelle gelegenen Nachbarn gesucht. Daraus werden vier Punkte in einem vierdimensionalen Raum erzeugt, welche sich aus den drei Raumdimensionen und der zu interpolierenden Größe dieser vier Vertizes zusammensetzen. Nach den Prinzipien der analytischen Geometrie wird durch diese vier Punkte eine Volumengleichung in Parameter- und Koordinatenform berechnet. Das Einsetzen der Raumkoordinaten des zu interpolierenden Punktes in die Koordinatenform liefert die gewünschte lineare Interpolation.

Die auf diese Weise auf die Partikel interpolierten Werte werden in den Variablen (`upart`, `vpart`, `wpart`) bzw. `gpart` abgelegt. Weiterhin werden mit dem Zufallsgenerator `ctrnu.f` drei normalverteilte Zufallszahlen nach der Transformationsmethode [NumRec89] erzeugt. Außerdem ist zu beachten, daß jede Partikelkoordinate eine unabhängige Zufallszahl erhält. Ist dies nicht der Fall, ändert sich das Verhalten des Partikeltransportes erheblich.

Der räumliche Transport der Partikel $\Delta\vec{x}/\Delta t$, welcher den Prozessen Konvektion, mittlere und fluktuative Diffusion zugrunde liegt, wird nun in einer Änderung der Partikelkoordinaten (`xpart`, `ypart`, `zpart`) gespeichert.

4.6 Partikelsuche und -reflexion in drei Raumdimensionen

Nachdem die Partikel durch die Ortsänderung in `ctconv.f` versetzt oder das Gitter durch den Kolbehub bewegt wurde, müssen die Zellen, in denen sich die Partikel befinden, neu gesucht werden. Hat sich ein Partikel außerhalb des Berechnungsraumes bewegt, wird es an der Wand elastisch reflektiert. Die Zelle, in der sich das Partikel `ip` befindet, heißt `i4part(ip)`.

Der Suchalgorithmus, welcher den Partikeln die zugehörige Zelle zuordnet, heißt `ctfind.f` und basiert auf einem KIVA-Algorithmus zur Suche der Spray-Partikel. Wird jedoch ein Partikel reflektiert, müssen der Reflexionspunkt und die Zellwand, auf der sich dieser Punkt befindet, bestimmt werden. Aufgrund der komplexen Randbedingungen ist es naheliegend, dazu auf Methoden der analytischen Geometrie zurückzugreifen. Die entsprechenden Verfahren wurden im Rahmen dieser Arbeit in den Unterprogrammen `ctsearch.f/ctreflect.f` implementiert und im nachfolgenden Abschnitt beschrieben.

Um versetzte Partikel zu suchen, werden zunächst die Koordinaten vor der Versetzung im Vektor `oldvec` und nach der Versetzung im Vektor `chdvec` gespeichert. Die Variablen `i4old*` beinhalten die Zelle vor der Versetzung. Schließlich wird nach der Partikelversetzung der Suchalgorithmus `ctfind.f` aufgerufen und `i4old1 = i4part` und `chdvec` übergeben. Hierbei ist zu bemerken, daß `i4part` im Unterprogramm `ctfind` kein Feld über alle Partikel, sondern eine einzelne Variable ist. Ausgehend von der Startzelle `i4part`, sucht `ctfind.f` die Zelle, in der sich der Punkt `chdvec` befindet. Dazu vergleicht `ctfind.f` die Koordinaten der Startzelle mit `chdvec` und wählt in jeder Raumrichtung diejenige Nachbarzelle zu `i4part` aus, die dem Zielpunkt `chdvec` am nächsten ist. Die so gefundene Zelle wird neue Startstelle und der beschriebene Prozess iterativ wiederholt. Die gesuchte Zelle, in der sich `chdvec` befindet, ist gefunden, wenn die Abstände in der darauf folgenden Iteration ihr Vorzeichen wechseln. Ein Beispiel für einen zweidimensionalen Suchweg

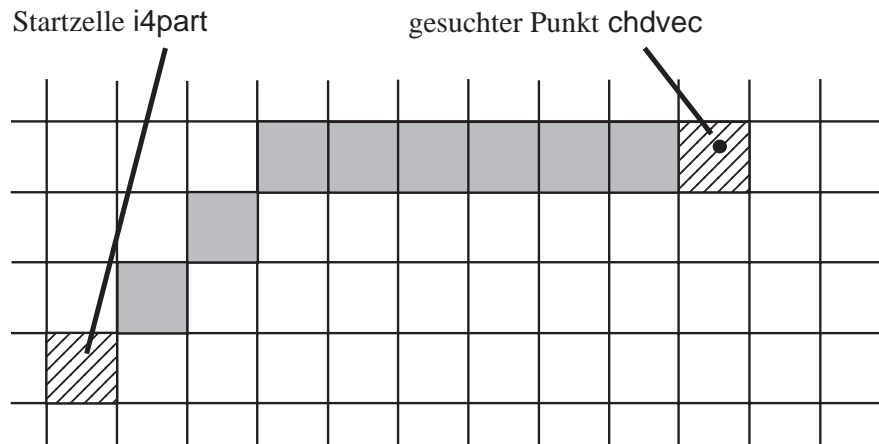


Abbildung 4.4: Beispiel eines Suchweges, wie er durch den Algorithmus `ctfind.f` erzeugt wird.

nach diesem Verfahren ist in Abb. 4.4 gegeben. Die gefundene Zelle wird mittels `i4part` zurückgegeben. Trifft der Suchweg auf eine feste Wand, d.h. der Punkt `chdvec` liegt außerhalb des fluiden Raumes, so wird mittels `i4vert` ein Flag zurückgeliefert, welches diese Wand identifiziert. Dabei steht der Wert $3 \cdot 10^6$ für eine Symmetriewand, $2 \cdot 10^6$ für den Kolbenboden und $1 \cdot 10^6$ für alle anderen Wände. Ansonsten wird durch `i4vert` der dem Punkt `chdvec` nächste Vertex gesucht und zurückgegeben.

Liegt der versetzte Punkt `chdvec` außerhalb des fluiden Raumes, wird er reflektiert. Um den Reflexionspunkt zu bestimmen, wird in `ctsearch.f` eine Gerade durch die Punkte `oldvec` und `chdvec` gelegt. Entlang dieser Geraden werden, ausgehend von `oldvec`, die Schnittpunkte der Geraden mit allen Zellwänden in Richtung des Punktes `chdvec` bestimmt. Diese Durchstoßpunkte seien durch die Folge \vec{x}_n definiert, wobei der Startwert durch $\vec{x}_0 = \text{oldvec}$ gegeben ist. Der Punkt \vec{x}_{n+1} wird bei gegebenem \vec{x}_n durch folgenden Algorithmus (Abb. 4.5) gefunden: Die Gerade wird mit allen Zellwänden der Zelle geschnitten, zu welcher \vec{x}_n gehört, außer mit der Wand, welche \vec{x}_n enthält. Daraus resultieren fünf Schnittpunkte \vec{y}_i . Der gesuchte Punkt \vec{x}_{n+1} ergibt sich aus demjenigen Punkt \vec{y}_i , der zwischen \vec{x}_n und `chdvec` liegt und den kleinsten Abstand zu \vec{x}_n hat.

Wird ein Punkt \vec{x}_R gefunden, der auf einer festen Zellwand liegt, so ist dies der gesuchte Reflexionspunkt. Die hierbei verwendeten Methoden der analytischen Geometrie [Bronstein93] werden durch folgende Unterprogramme beschrieben: `ctsp.f` berechnet das Skalarprodukt zweier Vektoren; `ctge.f` berechnet den Schnittpunkt zwischen Ebene und Gerade; `ctld1.f` lädt KIVA-Koordinaten in einen Vektor; `ctld2` prüft, ob sich ein Punkt außerhalb oder innerhalb zweier weiterer Punkte befindet, wobei alle Punkte auf einer Geraden liegen.

Die Routine `ctreflect.f` errechnet nun aus dem Reflexionspunkt \vec{x}_R und dem Punkt

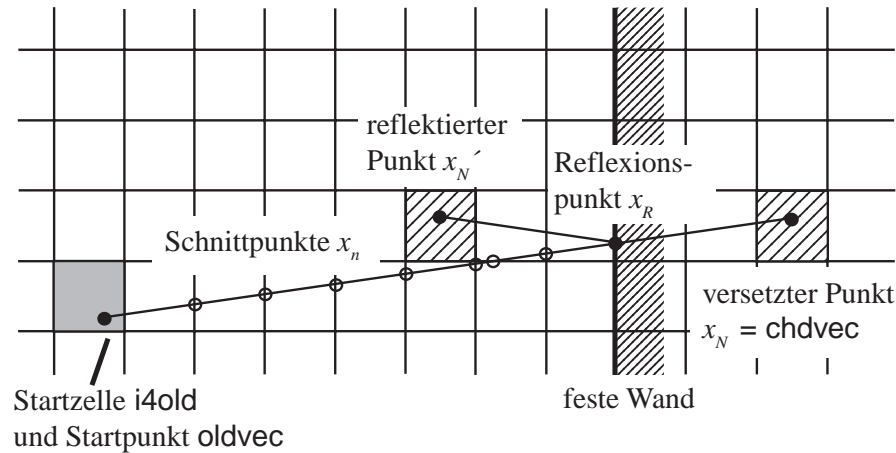


Abbildung 4.5: Suchweg mit Reflexion, welche durch die Algorithmen `ctsearch.f` und `ctreflect.f` erzeugt werden.

$\vec{x}_N = \text{chdvec}$, welcher außerhalb des Berechnungsraumes liegt, die Koordinaten des reflektierten Punktes \vec{x}'_N durch eine gewöhnlich elastische Reflexion mit der Bedingung *Einfallswinkel = Ausfallswinkel*:

$$\vec{x}'_N = \vec{x}_N + 2\vec{n}_0 |(\vec{x}_R - \vec{x}_N) \cdot \vec{n}_0| . \quad (4.6)$$

Dabei ist \vec{n}_0 der normierte Normalenvektor auf die Zellwand, welche \vec{x}_R enthält (Abb. 4.5). Weiterhin muß \vec{n}_0 in den fluiden Raum zeigen. Anschließend wird der Reflexionspunkt \vec{x}_R infinitesimal in den fluiden Raum versetzt, um eine eindeutige Zuordnung zu einer fluiden Zelle zu bekommen.

Der reflektierte Punkt \vec{x}'_N , der Reflexionspunkt \vec{x}_R und die Zelle, in der sich \vec{x}_R befindet, werden durch `chdvec`, `oldvec` und `i4old` an das Hauptprogramm `ctpdfmc.f` zurückgegeben. Dort wird `ctfind.f` erneut gestartet, um die Zelle, in der sich der reflektierte Punkt \vec{x}'_N befindet, zu suchen. Stößt diese Suche wieder auf eine feste Wand, z.B. im Bereich einer Kante oder Ecke, so muß der Reflexionsalgorithmus `ctsearch.f` erneut durchlaufen werden. Schließlich werden die entsprechenden Werte nach der Reflexion in den Partikelfeldern (`xpart,ypart,zpart`) bzw. in `i4part` gespeichert.

Neben der Partikelbewegung sind auch nach einer Gitterbewegung durch den Kolbenhub die Zellen `i4part`, in denen sich die Partikel befinden, neu zu bestimmen. Diese Gitterdiffusion kann numerisch in drei Teile A,B und C aufgeteilt werden. In Teil A werden zunächst zu Beginn des Programms `ctpdfmc.f` alle Partikel durch `ctfind.f` im fluiden Raum neu gesucht. Anschließend werden in Teil B die Partikel, welche sich bei der Suche in Teil A unter dem Kolbenboden außerhalb des Berechnungsraumes befanden, durch die Vorschrift $z \rightarrow z + 2 \cdot \text{dzp}$ in den fluiden Raum zurückgesetzt. Dabei ist

z die z -Koordinate des Partikels und dzp der Kolbenhub im letzten Zeitschritt. Diese Vorschrift liegt allgemein der elastischen Reflexion an einer bewegten Wand zugrunde, bei der für die Normal- und Tangentialkomponente \vec{v}_N und \vec{v}_T der Geschwindigkeit des Partikels, welches auf die Wand trifft, gilt:

$$\begin{aligned}\vec{v}_N &\longrightarrow -\vec{v}_N + 2\vec{v}_W \\ \vec{v}_T &\longrightarrow \vec{v}_T .\end{aligned}\tag{4.7}$$

Dabei ist \vec{v}_W die Geschwindigkeit der bewegten Wand, also hier die Kolbengeschwindigkeit. Schließlich werden in Teil C alle Partikel, welche am Kolbenboden reflektiert werden, ebenfalls nach Vorschrift 4.7 behandelt. Dies geschieht im Gegensatz zu Teil A und B während des Reflexionsalgorithmus `ctreflect.f`.

Um umfangreiche Fallunterscheidungen der analytischen Geometrie, wie sie z.B. im Fall zweier paralleler Geraden auftreten, zu vermeiden, wurden die Unterprogramme `ctdis` und `ctdis2` eingeführt. Diese versetzen in einem solchen, selten auftretenden Fall das entsprechende Partikel infinitesimal und ohne Einfluß auf das Ergebnis der Rechnung.

4.7 Klonen und Clustern von Partikeln

Da der Fehler bei Monte-Carlo-Methoden von der Anzahl der Partikel pro Zelle abhängt, ist es sinnvoll, die Partikelzahl in jeder Zelle annähernd konstant zu halten. Dies wird in dem Unterprogramm `ctclone.f` durch das Zusammenfügen zweier leichter Partikel (clustern), bzw. das Teilen zweier schwerer Partikel (klonen) erreicht. Dazu ist es notwendig, daß die Partikel unterschiedliche nominale Masse tragen. Die nominale Masse eines Partikels ist durch 2^{k_p} gegeben, wobei $k_p = \text{kpart}$ die logarithmierte nominale Masse ist. Weitere Kontrollgrößen im Unterprogramm `ctclone.f` sind die Partikelzahl pro Zelle `trace*`, die nominale Masse je Zelle `roave*`, die Verteilung der logarithmierten nominalen Partikelmassen `pdfk*` und die Verteilung der Partikelzahl pro Zelle im Berechnungsvolumen `pdfn*`.

Die Routine `ctclone.f` wird das erste Mal durch `ctpinit.f` nach der Initialisierung (vgl. Abschnitt 4.2) und anschließend jeden Zeitschritt durch `ctpdfmc.f` nach der Partikelsuche (vgl. Abschnitt 4.6) aufgerufen. Die Übergabevariablen sind die Partikelfelder `*part`, die aktuelle Partikelzahl `npb` und die Soll-Partikelzahl pro Zelle `pcell`. Außerdem werden in `ctclone.f` zwei Parameter `apcell` und `bpcell`, welche das Regelintervall festlegen, definiert. Geclustert werden alle Zellen, die mehr als `apcell · pcell` Partikel enthalten. Zellen mit weniger als `bpcell · pcell` Partikel werden geklont.

Zu Beginn des Unterprogramms `ctclone.f` werden zunächst die oben beschriebenen Kontrollgrößen berechnet. Anschließend wird eine Schleife über alle Zellen gestartet, in welcher die Partikel geclustert werden. Es ist sinnvoll, zuerst zu clustern und dann zu klonen, um Arbeitsspeicher einzusparen. Zunächst wird dazu die Partikelzahl `tri4` in der aktuellen Zelle bestimmt (Abb. 4.6). Anschließend wird die Anzahl der zu clusternden Partikel `nclone` bestimmt. Liegt die Partikelzahl `tri4` in der aktuellen Zelle im Bereich

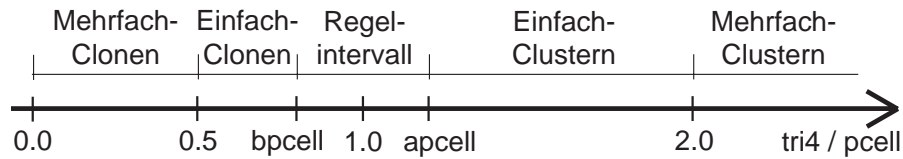


Abbildung 4.6: Clonen und Clustern von Partikeln.

$\text{apcell} \cdot \text{pcell} < \text{tri4} \leq 2 \text{pcell}$, so werden genau so viele Partikel geclustert, daß das Soll pcell erreicht wird. Für $\text{tri4} > 2 \text{pcell}$ werden mehrfach möglichst viele Partikel geclustert. Der iterative Prozeß des Mehrfach-Clusterns ist beendet, wenn die Partikelzahl innerhalb des Regelintervalls liegt. Vor dem eigentlichen Clustern werden die Partikel in der aktuellen Zelle gesucht und durch den Algorithmus `ctsort1.f` ihrer nominalen Masse nach sortiert. Somit können vorerst die leichten Partikel geclustert werden, um zu verhindern, daß im Laufe der Zeit immer leichtere Partikel entstehen. Während des Clusterns werden die Koordinaten und die skalaren Eigenschaften je zweier gleichschwerer Partikel gemittelt und dem Partikel mit dem niedrigeren Index i_p zugeordnet. Die logarithmierte nominale Masse wird um eins erhöht. Die nicht mehr existierenden Partikel werden durch den Flag $i4\text{part} = -1$ markiert.

Nachdem das Clustern beendet wurde, werden alle Partikelfelder neu organisiert. D.h., die nicht mehr existierenden Partikel werden eliminiert und die aktuell vorhandenen Partikel an deren Stelle gespeichert. Die durch das Clustern gesunkene Partikelzahl npb und die Kontrollgrößen werden neu berechnet.

Danach wird wieder eine Schleife über alle Zellen gestartet, in der Partikel geklont werden. Das Klonen beruht auf einem ähnlichen Prinzip wie das Clustern. Zuerst wird die Partikelzahl tri4 und die Zahl der zu klonenden Partikel nclone bestimmt (Abb. 4.6). Im Bereich $0.5 \text{pcell} \leq \text{tri4} < \text{bpcell} \cdot \text{pcell}$ werden genau so viele Partikel geklont, daß nach der Teilung pcell Partikel vorhanden sind. Für $\text{tri4} < 0.5 \text{pcell}$ werden die Partikel mehrfach geklont. Nachdem die Partikel gesucht und sortiert wurden, wird der Klone-Prozeß gestartet: Die Partikel werden mit all ihren Eigenschaften kopiert und mit dem Index $i_p = \text{npb} + 1$ beginnend in den Partikelfeldern abgelegt.

Abschließend werden die neue Partikelzahl und die Kontrollgrößen errechnet. Daraus werden die Summe der gesamten nominalen Masse und die Summe aller Partikel vor und nach den Prozessen bestimmt und als Kontrolle des Algorithmus zusammen mit der Partikelzahl pro Zelle an `ctpdfmc.f` zurückgegeben.

4.8 Kopplung mit dem CFD-Programm

In dem hier beschriebenen MC-Programm wird die PDF-Transportgleichung für skalaren Größen gelöst. Die Geschwindigkeit des Strömungsfeldes und die turbulente Zeit-

skala werden durch das herkömmlichen CFD-Programm bestimmt. Um Konvergenz zu erzielen, müssen beide Programme in einem hybriden Verfahren miteinander gekoppelt werden. Das MC-Programm ist dabei selbst in der Phase A (Berechnung der Quellterme) des CFD-Programms implementiert und wird einmal pro Zeitschritt `ncyc` mit dem Aufruf `call ctpdfmc.f` aufgerufen.

Zur Kopplung der Programme werden die Geschwindigkeiten des Strömungsfeldes, welche durch das CFD-Programm berechnet wurden, in den Routinen `cttdiff.f` und `ctconv.f` an das MC-Modell übergeben. Hierbei wird das Geschwindigkeitsfeld auf die Partikel interpoliert (vgl. Abschnitt 4.5). Des weiteren werden die turbulente kinetische Energie k und ihre Dissipationsgeschwindigkeit ϵ in den Programmteilen `cttdiff.f` und `ctmix.f` an das MC-Programm übergeben. Sie werden zur Ermittlung der turbulenten Zeitskala bei der Berechnung der Diffusion im Orts- und im skalaren Phasenraum benötigt (vgl. Abschnitte 4.5, 4.4).

Im Gegenzug dazu muß das MC-Programm die von ihm berechnete Dichte an das CFD-Programm zurückliefern. Da jedoch in KIVA das Geschwindigkeitsfeld in einem sogenannten SIMPLE-Algorithmus zusammen mit dem Temperaturfeld gelöst wird und da weiterhin die Schnittstelle zwischen MC- und CFD-Programm möglichst überschaubar gehalten werden soll, wird die Dichte durch folgendes Verfahren zurückgegeben:

In KIVA werden Transportgleichungen für die Partialdichten der chemischen Spezies $\langle \rho_\alpha \rangle = \langle \rho w_\alpha \rangle$ gelöst. Die Gesamtdichte berechnet KIVA aus der Summe der Partialdichten $\langle \rho \rangle = \sum_\alpha \langle \rho_\alpha \rangle$. Deshalb werden die mittleren Quellterme der Partialdichten von Sauerstoff und Brennstoff und den Hauptverbrennungsprodukten Kohlendioxid und Wasser, welche durch das MC-Modell berechnet wurden, an KIVA zurückgegeben. Dieses berechnet daraus die Dichte und damit das gesuchte Geschwindigkeitsfeld.

Die Berechnung der mittleren Quellterme der Partialdichten $\langle \Delta \rho_\alpha \rangle$ erfolgt numerisch durch ihre mittleren Inkremente:

$$\langle \Delta \rho_\alpha \rangle = \langle \rho \rangle^{\text{MC}} \cdot \frac{1}{\sum_p 2^{k_p}} \cdot \left[\sum_p^{\text{Chem.}} \Delta w_{\alpha,p} 2^{k_p} + \sum_p^{\text{Zünd.}} \Delta w_{\alpha,p} 2^{k_p} \right]. \quad (4.8)$$

Hierbei kennzeichnet $\langle \rho \rangle^{\text{MC}}$ die direkt im MC-Modell ermittelte mittlere Dichte, auf deren Berechnung später eingegangen wird. Die Inkremente der Massenbrüche der Partikel $\Delta w_{\alpha,p}$ werden direkt aus dem ILDM-Modell durch Differenzbildung gewonnen. Dabei ist zu berücksichtigen, daß sich die Inkremente aus einem Anteil der eigentlichen chemische Reaktion (Chem.) und einem Anteil der Zündung (Zünd.) zusammensetzen.

Da im SIMPLE-Algorithmus von KIVA auch eine Energiegleichung gelöst wird, ist es notwendig, auch ein mittleres Inkrement der freiwerdenden Reaktionswärme $\langle \Delta Q \rangle$ an das CFD-Programm zu übergeben. Dieses wird analog zu Gl. (4.8) berechnet:

$$\langle \Delta Q \rangle = \frac{1}{\sum_p 2^{k_p}} \cdot \left[\sum_p^{\text{Chem.}} \Delta q_p 2^{k_p} + \sum_p^{\text{Zünd.}} \Delta q_p 2^{k_p} \right]. \quad (4.9)$$

Dabei werden die partikelbezogenen Inkremente der Reaktionswärme durch

$$\Delta q_p = C^p \Delta T_p \quad (4.10)$$

berechnet, wobei C^p die spezifische Wärme bei konstantem Druck darstellt. ΔT_p ist die Temperaturänderung der Partikel, welche durch die Reaktion oder die Zündung verursacht wurde. Die Temperatur der Partikel T_p muß dabei aus der Temperatur des ILDM-Modells abgeschätzt werden, da zur Zeit noch keine druckabhängigen ILDM-Tabellen zur Verfügung stehen [Niemann98, Schramm99]. Dabei wird davon ausgegangen, daß die infinitesimale freigesetzte Reaktionswärme im berechneten System und im ILDM-Modell die gleiche ist: $dq^{\text{Re}} = dq^{\text{ILDM}}$. Folglich gilt für die Inkremente der Temperatur: $dT^{\text{Re}} C(T^{\text{Re}}) = dT^{\text{ILDM}} C^p(T^{\text{ILDM}})$. Unter der stark vereinfachenden Annahme, daß beide spezifischen Wärmekapazitäten $C(T^{\text{Re}})$ und $C^p(T^{\text{ILDM}})$ gleich groß sind, gilt für die Temperaturänderung $dT^{\text{Re}} = dT^{\text{ILDM}}$. Eine Integration dieser Gleichung liefert schließlich die gesuchte Temperatur der Partikel:

$$T_p = T_p^{\text{ILDM}} - T_0^{\text{ILDM}} + T_0^{\text{CFD}}(\alpha) \quad (4.11)$$

Dabei ist T_p^{ILDM} die direkt aus dem ILDM-Modell erhaltene Temperatur, T_0^{ILDM} die durch den unverbrannten Zustand des ILDM-Modells festgelegte Temperatur und $T_0^{\text{CFD}}(\alpha)$ die Temperatur der kalten Strömung. T_0^{CFD} wird vor der eigentlichen Verbrennung in einer eigenen Rechnung ermittelt und in einer Datei als Funktion des Kurbelwellenwinkels abgelegt. Dazu wird das gleiche System mit dem gleichen Gitter und den gleichen Anfangs- und Randbedingungen, jedoch ohne Zündung und Verwendung des MC-Modells, berechnet.

Es bleibt zu erwähnen, daß diese Art der Temperaturabschätzung weiter verbessert werden muß. Dies kann durch die Bestimmung des Quotienten der oben genannten Wärmekapazitäten $C(T^{\text{Re}})$ und $C^p(T^{\text{ILDM}})$ oder durch eine druckabhängige ILDM geschehen.

Mittels der Partikeltemperatur T_p läßt sich durch die ideale Zustandsgleichung auch die Dichte der Partikel ρ_p ermitteln:

$$\rho_p = \frac{p^{\text{CFD}} \cdot \overline{M}_p^{\text{ILDM}}}{R \cdot T_p} \quad (4.12)$$

Hierbei ist der Druck p^{CFD} wiederum durch das CFD-Programm gegeben, da, wie bereits erwähnt, ein druckabhängiges ILDM-Modell zur Zeit noch nicht zur Verfügung steht. Weiterhin stellt $\overline{M}_p^{\text{ILDM}}$ die dem ILDM-Modell entnommene mittlere molare Masse dar. Die zellgemittelte Dichte $\langle \rho \rangle$ wird nun analog Gl. (4.1) durch

$$\langle \rho \rangle = \frac{\sum_p \rho_p 2^{k_p}}{\sum_p 2^{k_p}} \quad (4.13)$$

errechnet. Um zu gewährleisten, daß die Gesamtmasse im geschlossenen Brennraum erhalten bleibt, wird die durch das ILDM-Modell erhaltene Dichte $\langle \rho \rangle$ abschließend

wie folgt korrigiert:

$$\langle \rho \rangle^{\text{MC}} = \langle \rho \rangle \cdot \frac{m_0^{\text{CFD}}}{\sum_{i4} \langle \rho \rangle V} . \quad (4.14)$$

Hierbei ist m_0^{CFD} die konstante, zu Beginn der Verbrennung bestimmte Gesamtmasse im abgeschlossenen Brennraum, \sum_{i4} eine über alle Zellen in diesem Raum indizierte Summe und V das Zellvolumen. Die so ermittelte Dichte $\langle \rho \rangle^{\text{MC}}$ wurde bereits oben in Gl. (4.8) verwendet.

Da an das CFD-Programm nur die Quellterme der 4 Hauptspezies zurückgegeben werden und die Summe der Inkremente verschwinden muß, wird das mittlere Inkrement des Brennstoffes durch die drei restlichen Inkremente berechnet:

$$\langle \Delta \rho_F \rangle = - \sum_{\alpha=1}^3 \langle \Delta \rho_\alpha \rangle . \quad (4.15)$$

Dabei läuft die Summe über die Spezies $\alpha = \text{CO}_2, \text{H}_2\text{O}$ und O_2 . Diese durch das MC-Programm errechneten mittleren Inkremente der Partialdichten werden gleich Null gesetzt, wenn im CFD-Programm die Partialdichte des Brennstoffes Null ist.

5 Modellierung der Verbrennung in einem Zweitakt-Motor

In diesem Kapitel sollen die Ergebnisse, welche mit der in KIVA implementierten Monte-Carlo-PDF-Methode gewonnen wurden, dargestellt und mit experimentellen Untersuchungen verglichen werden.

Zuvor werden die Rand- und Anfangsbedingungen sowie weitere Parameter der Simulationen und die Gittergenerierung diskutiert. Im Anschluß daran folgt ein Abschnitt über den dazugehörigen experimentellen Aufbau und die Methodik der laserinduzierten Fluoreszenz.

Der folgende Abschnitt zeigt die Bewegung des Gitters des Zweitakt-Ottomotors in Verbindung mit der turbulenten kinetischen Energie, welche während der Kompressionsphase der kalten Strömung berechnet wurde. Außerdem wird der Druckverlauf im Motor erläutert.

Im Anschluß daran wird der Reaktionsfortschritt am Beispiel des CO_2 -Massenbruchs über die Zeit und verschiedene Zustandsvariablen zu einem festen Kurbelwellenwinkel ausgewertet. Die simulierten Daten werden mit den durch laserinduzierte Fluoreszenz erhaltenen Meßergebnissen verglichen und diskutiert. Abschließend wird gezeigt, wie die Übereinstimmung mit den experimentellen Daten durch Optimierung der Gittergeometrie weiter verbessert werden kann.

5.1 Daten der Simulation

Alle durchgeführten Rechnungen werden numeriert. Diese Nummern werden sowohl in den nachfolgenden Abschnitten als auch in der EDV verwendet. Dabei gliedert sich eine vollständige Berechnung im allgemeinen in drei Teile, von denen jeder Teil eine separate Nummer erhält. Hierbei beinhaltet der erste Teil die Berechnung der kalten Strömung von 180° KW vOT (unterer Totpunkt) bis 23° KW vOT. Die ungezündete kalte Strömung ab 23° KW vOT, welche durch einen Neustart des konventionellen KIVA bei 23° KW vOT realisiert wird, stellt den zweiten Teil dar. Im dritten Teil wird die gezündete reaktive Strömung durch einen Neustart bei 23° KW vOT berechnet.

Im nachfolgenden Text werden zunächst die Parameter, Rand- und Anfangsbedingungen der Rechnungen

- **118:** Kalte Strömung vor 23° KW vOT
- **121:** Kalte Strömung nach 23° KW vOT
- **122:** Reaktive Strömung nach 23° KW vOT

dargestellt:

Wie bereits mehrfach erwähnt, wird der Code KIVA-3 verwendet. Als Turbulenzmodell dient das in KIVA integrierte k - ϵ -Modell. Die Wechselwirkung zwischen Turbulenz und Chemie wird durch das im Rahmen dieser Arbeit implementierte und bereits beschriebene Monte-Carlo-PDF-Modell realisiert. Die Rechnungen wurden auf einem Rechner des Herstellers Silicon-Graphics und des Typs Origin-200 mit 4 Prozessoren R-10k ausgeführt.

Das bei diesen Rechnungen zugrundeliegende blockstrukturierte Gitter des Zweitakt-Motors besteht aus ca. 75000 Zellen bei einer Kolbenposition im unteren Totpunkt. Es wird mit der Bezeichnung `2stroke2` abgekürzt. Alle weiteren gitterspezifischen Daten werden im Abschnitt 5.2 erläutert.

Für das bei dem Kurbelwellenwinkel 22° vOT initialisierte MC-Modell werden rund 170 Partikel je Zelle verwendet, dies entspricht zu diesem Zeitpunkt insgesamt ca. 1.9 Mio. Partikel. Die Partikelzahl ist nicht konstant, insbesondere weil die Zahl der Zellen der Kolbenposition angepaßt wird.

Das skalare Mischen wird durch das modifizierte Curl-Modell beschrieben (vgl. 3.5.2). Hierbei ist die Verteilung $A(x)$ der verwendeten Zufallszahlen eine Gleichverteilung und die dazugehörige Modellkonstante $C_d = 3$ unverändert aus der Literatur übernommen [Jones96a].

Die Zündung erfolgt 20° KW vOT durch die in Abschnitt 4.3 beschriebene Methode, bei welcher die Zündregion zellenbezogen definiert wird. Dabei ist die in der Datei `itape` festgelegte Region so gewählt, daß nur die Partikel einer Zelle gezündet werden. Die Dauer der Zündung beträgt 5° KW.

Das thermochemische System wird durch ein ILDM-Modell beschrieben. Es wird eine Look-Up-Tabelle, welche in der Datei `tab04.dat` gespeichert ist, verwendet [Schramm99]. Sie beinhaltet als Reaktionsfortschrittsvariablen die Massenbrüche der Spezies CO_2 und H_2O und einen konstanten Mischungsbruch $\xi = 0.0401$. Dieser entspricht der Luftzahl des vorgemischten Gases im Motor. Neben den Fortschrittsvariablen und ihren Reaktionsgeschwindigkeiten sind die Massenbrüche folgender Spezies tabelliert: C_7H_{16} (Modell-Brennstoff Heptan), O_2 , OH , CO , H , HO_2 und C_2H_6 . Weiterhin sind die Temperatur, die mittlere molare Masse und die spezifische Wärmekapazität tabelliert. Die Temperatur wird im ILDM-Modell als Funktion der Massenbrüche, der Enthalpie und des Mischungsbruches berechnet. Die Enthalpie selbst wird hierbei an den Mischungsbruch gekoppelt [Schramm99], welcher im vorgemischten Fall konstant ist. Der zur Integration verwendete Zeitschritt `dts` ist mit $2 \cdot 10^{-6}$ s bis zu 40 mal kleiner als der Zeitschritt MC- bzw. CFD-Algorithmus.

Die Wände des Brennraumes werden während der kalten Strömung isotherm und durch das MC-Modell während der reaktiven Phase adiabatisch behandelt.

Um die Teilchenzahl pro Zelle konstant zu halten, ist ein Klon- und Clusteralgorithmus notwendig (vgl. Abschnitt 4.7). Dabei ist das Regelintervall, innerhalb dessen die Partikelzahl liegen soll, durch `bpccell = 0.8` und `apccell = 1.2` definiert. D.h., die Partikelzahl kann somit in einer Zelle um 20% nach oben oder unten abweichen.

Eine weitere Rechnung ist durch

- **407**: Reaktive Strömung nach 23° KW vOT

definiert. Im Vergleich zu Rechnung 122 wird bei Rechnung 407 die Soll-Partikelzahl je Zelle `pcell` auf 200 (vor 10° KW nOT) bzw. 250 (nach 10° KW nOT) erhöht. Außerdem wird der in Abschnitt 4.3 beschriebene Zündalgorithmus, durch welchen die Zündregion mittels eines kleinen Kugelvolumens festlegt wird, benutzt. Der dazugehörige Radius `rqign` ist dabei durch 0.1475 cm und die Zündzeitdauer durch 3° KW gegeben. Die kalte Strömung wird durch die bereits beschriebenen Versionen 118 und 121 repräsentiert. Das verwendete Gitter ist durch die Datei `2stroke2` gegeben.

Die Gruppe

- **207**: Kalte Strömung vor 23° KW vOT
- **212**: Kalte Strömung zwischen 23° KW vOT und 21° KW nOT
- **213**: Kalte Strömung nach 21° KW nOT
- **409**: Reaktive Strömung nach 23° KW vOT

basiert auf den Berechnungen 118, 121 und 407, wobei hier der optimierte Gittertyp `2stroke7` zum Einsatz kam. Außerdem ist in den Rechnungen 213 und 409 der maximal mögliche Zeitschritt aus Konvergenzgründen von 0.5° auf 0.2° KW herabgesetzt worden.

5.2 Gittergenerierung

Die blockstrukturierten KIVA-Gitter des Zweitakt-Motors wurden mit einem kommerziellen Gittergenerator der Firma CFDRC erzeugt. Auch KIVA besitzt einen eigenen Gittergenerator, der jedoch den Anforderungen dieser Arbeit nicht genügt; beispielsweise müssen sämtliche geometrische Daten numerisch definiert werden.

Die Schnittstelle zwischen dem kommerziellen Gittergenerator und dem unstrukturiert adressierten KIVA-Gitter mußte eigens für diese Arbeit entwickelt werden. Das dazugehörige Hauptprogramm heißt `cfdk3.f`. Dabei erforderte insbesondere die Erzeugung der sogenannten KIVA-spezifischen Ghost-Zellen erheblichen Aufwand. Ghost-Zellen befinden sich in inaktiven Zellebenen, welche über den aktiven Randflächen des Gitters liegen. Diese führen in drei Raumdimensionen durch die Topologie von Ecken und Kanten zu vielen Fallunterscheidungen.

Im Rahmen dieser Arbeit werden Rechnungen mit zwei verschiedenen Gittertypen ausgewertet. Sie werden durch die Bezeichnungen `2stroke2` und `2stroke7` beschrieben. Das zugrundeliegende Koordinatensystem ist in Abb. 5.5 skizziert. Dabei ist die z -Achse mit der Zylinderachse identisch und hat ihren Ursprung im Mittelpunkt des Kolbens im unteren Totpunkt.

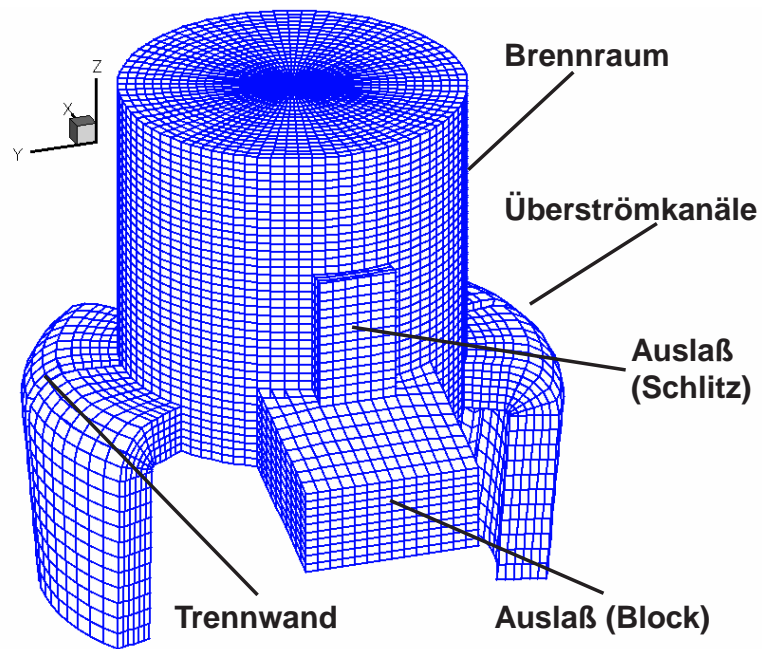


Abbildung 5.1: Gitter 2stroke2 des Zweitakt-Motors am unteren Totpunkt.

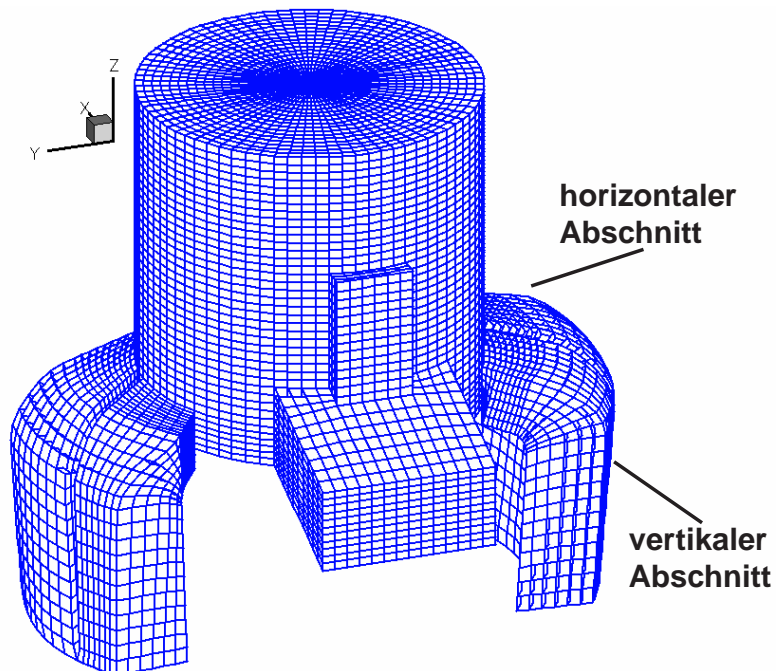


Abbildung 5.2: Gitter 2stroke7 des Zweitakt-Motors am unteren Totpunkt. Die Abschnitte der neu gestalteten Überströmkanäle sind markiert.

Das Gitter 2stroke2 ist in Abb. 5.1 für eine Kolbenposition im unteren Totpunkt dargestellt. Hierbei sind der Brennraum (Zylinder), die Überströmkanäle und der Auslaßkanal sichtbar (vgl. Abschnitt 5.3). Ebenfalls ist eine Trennwand, welche sich etwa in der Mitte der Überströmkanäle befindet, erkennbar. Dabei können die Überströmkanäle in einen vertikalen längeren und in einen horizontalen kürzeren Abschnitt, welcher an den Zylinder angeflanscht ist, eingeteilt werden. Der Auslaßkanal besteht aus einem großen Block und einem kleinem Schlitz, welcher die nachträglich angebrachten Ausfeilungen repräsentiert.

Die Geometrie der Überströmkanäle und des Auslaßkanals wurde bei dem Gittertyp 2stroke2 vereinfacht, um zunächst einen Prototyp zu erhalten, welcher hauptsächlich zur qualitativen Einschätzung der ersten Ergebnisse der neu implementierten Monte-Carlo-Methode dient. So wurden z.B. die Winkel in der x - y -Ebene, mit welchen der horizontale Abschnitt der Überströmkanäle an die Zylinderwand geflanscht ist, zentralsymmetrisch approximiert (vgl. Abschnitt 5.10). Die seitlichen Wände der Kanäle wurden als eben angenommen. Außerdem wurden die geometrischen Details der nachträglich im Brennraum des Motors angebrachten sehr feinen Ausfeilungen am Auslaß durch ein quaderförmiges Volumen approximiert. Es sollte nicht unerwähnt bleiben, daß die beschriebenen Globalisierungen helfen, Gitterzellen des blockstrukturierten Gitters einzusparen und somit die Entwicklungs- und Rechenzeit in einem zeitlichem Rahmen halten.

Das Gitter 2stroke2 besteht im unteren Totpunkt aus insgesamt 74436 Zellen. Davon entfallen 62400 Zellen auf den Brennraum, welche sich in axialer Richtung auf 39, in radialer Richtung auf 20 und in azimuthaler Richtung auf 80 Zellebenen verteilen. Als Richtwert gilt dabei 2 mm je Zelle in einer Dimension. Zum Zeitpunkt der Partikelinitialisierung, 22° KW vOT, besteht der Brennraum aus 11200 und am oberen Totpunkt aus 8000 Zellen. Die Bewegung des Gitters 2stroke2 wird in Abschnitt 5.5 dargestellt.

Mit dem Gitter 2stroke7 wird die Geometrie der Überströmkanäle überarbeitet, um weitere geometrische Details zu berücksichtigen. Da das verwendete Aggregat aus einer bereits ausgelaufenen Baureihe stammt, war es notwendig, geometrische Details an einem Exemplar, welches das Institut für Technische Verbrennung der Universität Stuttgart freundlicherweise zur Verfügung gestellt hat, eigenständig zu bestimmen. Bei der Erzeugung der Geometrie bereitete insbesondere der horizontale Abschnitt der Überströmkanäle Schwierigkeiten, weil dessen Neigungswinkel schwer zugänglich sind.

Zu diesem Zweck wurden mittels einer Formmasse plastische Abdrücke der Öffnungen der Überströmkanäle erzeugt, von welchen die benötigten Neigungswinkel leichter ablesbar sind. Das entsprechende Gitter 2stroke7 ist in Abb. 5.2 dargestellt. Die wesentliche Änderung im Vergleich zur Geometrie 2stroke2 besteht darin, daß der Einlaß der Überströmkanäle in den Brennraum derart nach hinten geneigt ist, daß sich das Fluid beim Einströmen entgegen den Auslaß bewegt. Weiterhin wird ein kleiner Absatz am Einlaß und die Torsion der vorderen Seitenwand der Kanäle berücksichtigt. Das Gitter besteht aus insgesamt 77638 Zellen, wobei die Zellenverteilung im Zylinder unverändert bleibt.

5.3 Das experimentelle System

Das Kernstück des experimentellen Systems ist ein 2-Takt-Ottomotor, der ursprünglich als Generator zur Stromerzeugung verwendet wurde. Es handelt sich dabei um ein Serien-Einzylinderaggregat der Baureihe ILO L372. Um die Verbrennung mittels laser-induzierter Fluoreszenz zu untersuchen (vgl. Abschnitt 5.4), wurde der Motor einigen Modifikationen unterworfen [Einecke98, Einecke99a]. Abb. 5.3 zeigt den schematischen Versuchsaufbau. Der 2-Takt-Motor ist aufgrund seiner fehlenden Ventile über den Zylinderkopf durch ein Quarzglasfenster optisch zugänglich. Mittels einer CCD-Kamera kann die Fluoreszenz aufgezeichnet werden. Ein 4 mm hoher Quarzglasring zwischen Zylinderkopf und Ölkragen ermöglicht die Einblendung eines Laserlichtschnittes in den Brennraum. Dabei verläuft der Schnitt parallel zu dem ebenen Kolbenboden. Um den Druckverlauf zu messen, befinden sich in der Zylinderwand und im Kurbelwellengehäuse je ein Drucksensor.

In dem 2-Taktmotor wird das Gemisch zunächst vom Vergaser über den Einlaß in das Kurbelwellengehäuse gebracht. Von dort wird es während der Dekompression des Kolbens durch die Überströmkanäle in den Brennraum gedrückt. Die Überströmkanäle sind in der Schnittzeichnung 5.3 nicht zu erkennen. Sie werden durch die Darstellung des Gitters in Abschnitt 5.2 veranschaulicht. Gleichzeitig strömt das im vorigen Takt verbrannte Gemisch durch den Auslaß in die daran angeschlossene Schalldämpferanlage.

Der Motor besitzt einen Hubraum von 372 cm^3 , eine Zylinderbohrung von 80 mm, einen Hub von 74 mm und eine Kompressionsvolumenhöhe von 4 mm. Das Verdichtungsverhältnis ist mit dem Wert von 8.6 relativ niedrig. Dies ist durch die nachträglich am Auslaß angebrachten Ausfeilungen bedingt. Die Pleuellänge beträgt 148 mm. Während der Kompression des Kolbens werden zuerst bei ca. 137° KW vOT die Überströmkanäle und bei ca. 73° KW vOT der Auslaß geschlossen. Die Zündung erfolgt bei 20° KW vOT . Die Position der Zündkerze ist in Abb. 5.5 skizziert. Befindet sich der Kolben im oberen Totpunkt, liegt die Zündkerze innerhalb einer Zündtasche, einer kleinen Vertiefung im Kolbenboden.

Der Motor wird bei 1000 U min^{-1} betrieben. Um eine vollständige Spülung zu erhalten, wird der Motor nur jeden 4. Zyklus gezündet. Deshalb ist es notwendig, ihn mittels eines an die Kurbelwelle angeflanschten Drehstrom-Asynchron-Elektromotors zu schleppen. Somit ist auch eine exakte Steuerung der Drehzahl möglich. Zur Synchronisation von Zündung, Laser und Kamera dient der Impuls eines Drehwinkelgebers auf der Kurbelwelle.

Der Kraftstoff besteht aus 90% iso-Oktan und 10% 3-Pentanon. Das Gemisch wird sehr mager mit der Luftzahl 1.6 angereichert. Die Frischgastemperatur beträgt rund 300 K. Die Temperatur der Zylinderwände liegt bei etwa 325 K.

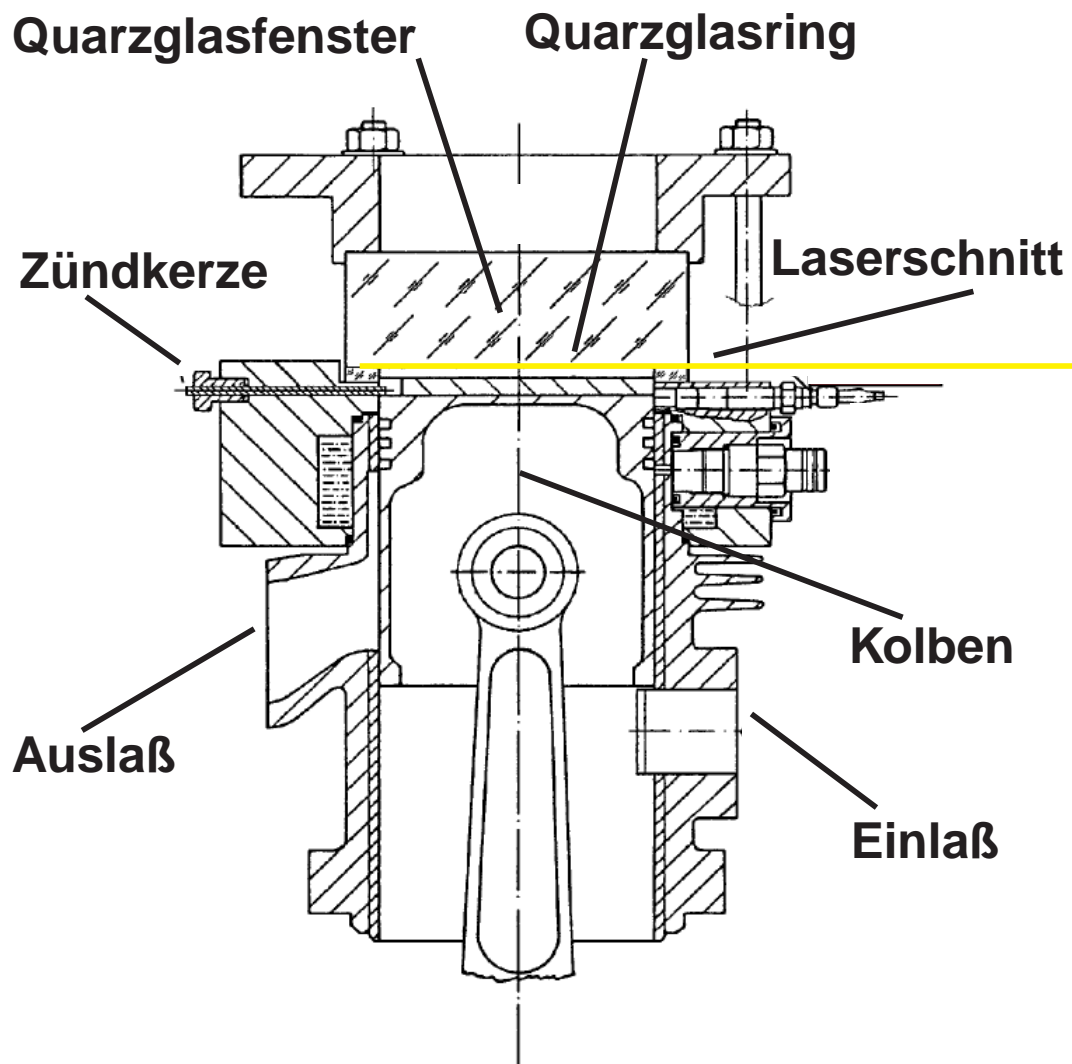


Abbildung 5.3: Experimenteller Aufbau des Forschungsmotors [ITV99].

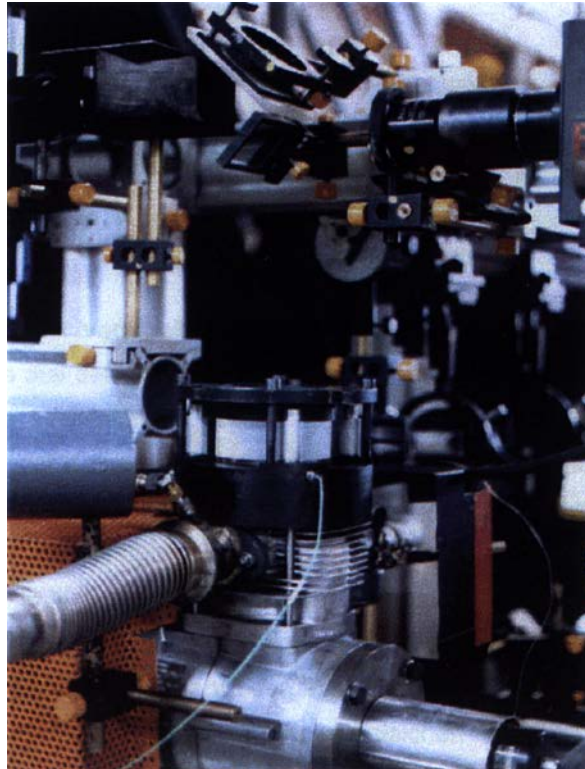


Abbildung 5.4: Fotografie des experimentellen Aufbaus [Einecke99a].

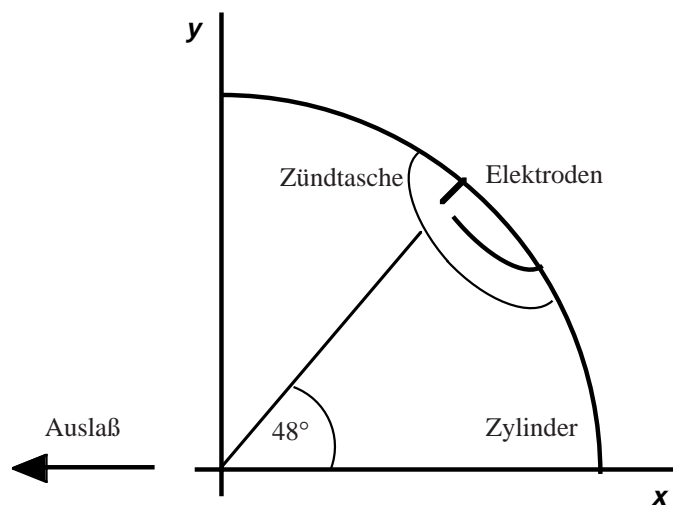


Abbildung 5.5: Position der Zündkerze.

5.4 Laserinduzierte Fluoreszenz

Unter Fluoreszenz wird die spontane Emission eines Photons durch ein elektronisch oder vibronisch angeregtes Atom verstanden. Stammt das anregende Photon dabei aus einer Laserlichtquelle, so spricht man von laserinduzierter Fluoreszenz (LIF). LIF hat sich in den letzten Jahren zunehmend als zuverlässiges Werkzeug zum qualitativen und quantitativen Nachweis von Atomen und Molekülen in reaktiven Systemen erwiesen [Einecke99a]. Zu den wesentlichen Vorzügen dieser Methode zählt, die Messung berührungslos orts- und zeitaufgelöst durchführen zu können. Weiterhin bietet die hohe Selektivität bezüglich einzelner Spezies und eine Nachweisempfindlichkeit bis in den ppb-Bereich große Vorteile.

Zur elektronischen Anregung der meisten Moleküle sind Photonen mit Wellenlängen im UV-Bereich, unterhalb 400 nm, nötig. In diesem Bereich stehen leistungsfähige Excimerlaser als geeignete Lichtquellen zur Verfügung. Sie besitzen zwar nur schmale spektrale Abstimmbereiche, dennoch fallen mehrere Rotationsübergänge der für die Verbrennungsdiagnostik interessanten Spezies mit diesen Bereichen zusammen.

In dieser Arbeit wird die simulierte Brennstoffverteilung mit den experimentell gemessenen Daten verglichen. Die Kenntnis der Kraftstoffverteilung im Brennraum ist dabei von großem Interesse, um den Einfluß der Gemischbereitung auf den Zündungs- und den Brennverlauf und damit auf die Verbrennungseffizienz und die Schadstoffbildung beurteilen zu können. Da kommerzielle Treibstoffe aus einer Vielzahl oft uneinheitlicher Komponenten bestehen, wird in Experimenten gerne der Einkomponenten-Kraftstoff iso-Oktan (2,2,4-Trimethylpentan) verwendet [Einecke99a].

Da iso-Oktan selbst nicht fluoresziert, muß es mit einem sogenannten Tracer (oder Marker) versetzt werden, der den Kraftstoff repräsentiert. Die Anforderungen an einen solchen Tracer sind geeignete und wohldefinierte Fluoreszenzeigenschaften, vollständige Löslichkeit in dem Brennstoff und Ähnlichkeit in den chemischen und physikalischen Eigenschaften. Weiterhin sollte der Tracer zusammen mit dem Kraftstoff in der Flammenfront zerfallen, um eine Fehlrepräsentation des Kraftstoffes zu vermeiden.

Als Tracer eignet sich in diesem System 3-Pentanon [Einecke99a]. Im Gegensatz zu zweiatomigen Molekülen mit diskreten Spektren fluoresziert 3-Pentanon in einem weiten Bereich von 300 bis 550 nm mit einem Maximum bei etwa 430 nm. Die Absorptionsbande von 3-Pentanon liegt bei 500 K im Bereich zwischen 250 und 300 nm und weist aufgrund der Rotverschiebung eine Temperaturabhängigkeit von ca. 10 nm pro 100 K auf. Weiterhin wird eine Temperatur- und Druckabhängigkeit der Fluoreszenzintensität beobachtet.

Für die genannte Absorptionsbande stehen verschiedene gepulste Hochleistungs-Lasersysteme zur Verfügung. Hier kam ein Kryptonfluorid-Excimerlaser mit einer Wellenlänge von 248 nm zum Einsatz. Die Pulsdauer lag bei rund 17 ns, die Pulsenergie bei 180 mJ und die Halbwertsbreite bei etwa 0.8 cm^{-1} . Die Maße des rechteckigen Laserprofils betragen $2 \times 1 \text{ cm}$ und wurden mittels eines Galilei-Teleskops mit zwei Zylinderlinsen zu einem nahezu parallelen Lichtband der Maße $2 \text{ cm} \times 300 \text{ }\mu\text{m}$ komprimiert.

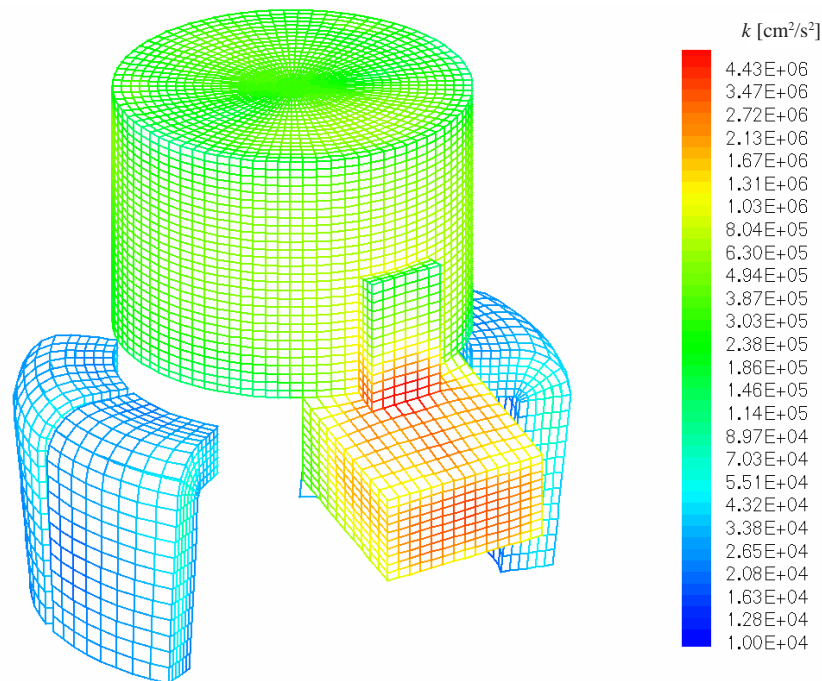


Abbildung 5.6: Gitter und turbulente kinetische Energie bei 110° KW vOT.

5.5 Berechnung der kalten Strömung

In diesem Abschnitt wird die Bewegung des Gitters, welche durch die Kolbenbewegung verursacht wird, und die Intensität der Turbulenz während der kalten Strömung zu drei verschiedenen Zeitpunkten vor der Zündung ausgewertet. Dabei wird das Gitter `2stroke2` betrachtet. Die ausgewerteten Daten stammen aus den Rechnungen 118, 121 und 122.

Während der Zeit, zu der sowohl Überströmkanäle als auch Auslaß geöffnet sind, wird die Strömung erzeugt, welche zur Spülung des 2-Taktmotors führt. Darunter versteht man den Ladungswechsel, d.h. das Auslassen des verbrannten Gases und das teilweise gleichzeitige Ansaugen von Frischgas. Die Strömung wird durch eine Druckdifferenz zwischen den Überströmkanälen und dem Auslaßkanal erzeugt, welche KIVA als Randbedingung vorgegeben werden kann. Dabei liegt der Einlaßrand am unteren Ende der Überströmkanäle (in der Darstellung verdeckt) und der Auslaßrand an der vorderen Seite des Auslaßblockes. Die Druckdifferenz liegt im Bereich zwischen 0.1 und 0.3 bar. Die Abhängigkeit dieser Druckwerte vom Kurbelwellenwinkel wird in Abschnitt 5.6 dargestellt.

In Abb. 5.6 ist das Gitter bei 110° KW vOT dargestellt. Die Überströmkanäle sind hier bereits geschlossen, der Kolben befindet sich an der Oberkante des großen Auslaßblockes. Durch die Strömung des Fluids wird Turbulenz generiert, welche insbesondere an den Ecken und Kanten der Öffnungen der Kanäle und im Schlitz des Auslaßkanals entsteht. Die Intensität der Turbulenz, welche mittels der turbulenten kinetischen Ener-

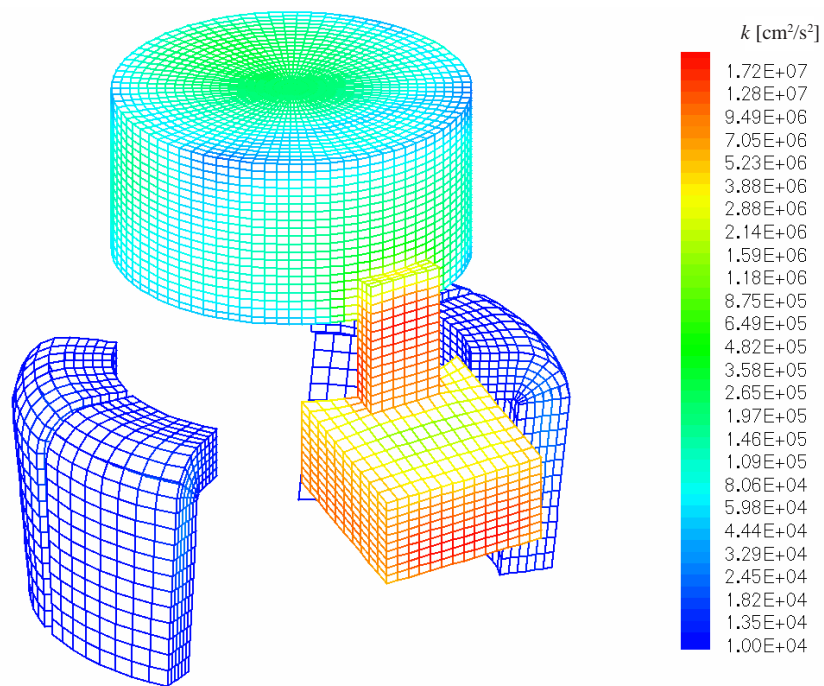


Abbildung 5.7: Gitter und turbulente kinetische Energie bei 80° KW vOT.

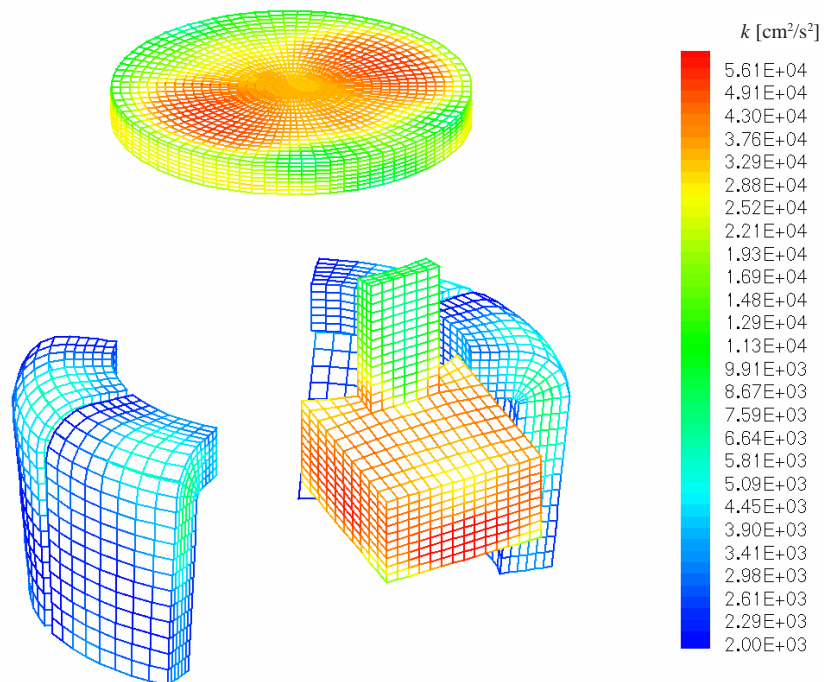


Abbildung 5.8: Gitter und turbulente kinetische Energie bei 23° KW vOT.

gie k quantifiziert werden kann, wird auf der Oberfläche des Gitters ausgewertet und in Abb. 5.6 dargestellt. Genaugenommen wird die turbulente kinetische Energie der Mittelpunkte der Randzellen, welche auf die Vertizes der Gitteroberfläche interpoliert werden, ausgewertet.

Es ist erkennbar, daß die größte Turbulenzintensität im Schlitz und im Block des Auslaßkanals herrscht. Im Brennraum ist die Turbulenz moderat und relativ gleichmäßig verteilt und in den jetzt abgetrennten Überströmkanälen gering. Dabei ist zu beachten, daß die Skala der turbulenten kinetischen Energie logarithmisch geteilt ist. Die Strömungsgeschwindigkeiten liegen zu diesem Zeitpunkt im Brennraum in der Größenordnung um 100 m/s, im Auslaßkanal sind sie um den Faktor 2 bis 3 höher.

Abb. 5.7 zeigt das Gitter bei 80° KW vOT. Zu diesem Zeitpunkt hat nur noch der obere Teil des Schlitzes Verbindung zum Brennraum. Folglich wird die Strömung jetzt durch die Kompression des Kolbens und den Unterdruck im Auslaß aufrecht erhalten. Das Fluid wird durch den Schlitz gepreßt, was dort eine nochmalige Erhöhung der turbulenten kinetischen Energie um rund eine Größenordnung bewirkt.

Schließlich wird in Abb. 5.8 das Gitter bei 23° KW vOT kurz vor der Zündung gezeigt. KIVA berechnet nun den Brennraum und die 5 Bereiche der Überström- und Auslaßkanäle als separate fluide Regionen. Da auf die Strömung keine antreibenden Kräfte mehr wirken, dissipiert sowohl die Strömung als auch die Turbulenzintensität. In dem jetzt sehr flachen Brennraum ist auf der Zylinderkopfoberfläche die Verteilung der turbulenten kinetischen Energie sichtbar. Diese ist (noch) symmetrisch zur $y = 0$ -Ebene, da die Symmetrie des Systems erst durch die Zündung der asymmetrisch angebrachten Zündkerze gebrochen wird. Die Geschwindigkeit des Fluids im Brennraum liegen jetzt unter 10 m/s.

5.6 Druckverlauf

Wie oben bereits erwähnt, wird die Strömung in der KIVA-Rechnung durch eine Druckdifferenz zwischen Überströmkanälen und Auslaßblock initiiert. Der Druck am Einlaßrand (Überströmkanäle) ergibt sich aus der Messung des Druckes im Kurbelwellengehäuse. Der gemessene Druck wird dabei über Intervalle von 10° KW gemittelt. Der Druck am Auslaßrand wird geschätzt, da hierfür zur Zeit noch keine Meßwerte zur Verfügung stehen. Hierbei wird der Druck am Auslaßrand bis zur Schließung des Auslaßkanals kontinuierlich auf 0.7 bar abgesenkt. Bedingt durch einen an den Auslaßkanal angeschlossenen Schalldämpfer und die darin stattfindenden gasdynamischen Prozesse kann ein solcher Unterdruck durchaus realistisch sein. Die auf diese Weise ermittelten Drücke am Ein- und Auslaßrand werden KIVA in der Datei `itape` als Randbedingung vorgegeben. Sie sind in Abb. 5.9 in Abhängigkeit des Kurbelwellenwinkels dargestellt. Weiterhin sind die Schließwinkel der Kanäle gekennzeichnet. Zum Vergleich ist außerdem der gemessene Zylinderdruck aufgetragen. Die ausgewerteten Daten stammen aus den Rechnungen 118, 121 und 122, das Gitter ist durch die Datei `2stroke2` gegeben.

Im nachfolgenden soll der mittlere Druck im Zylinder in Abhängigkeit des Kurbelwellenwinkels diskutiert werden: Während der kalten Strömung hängt dieser Zylinderdruck

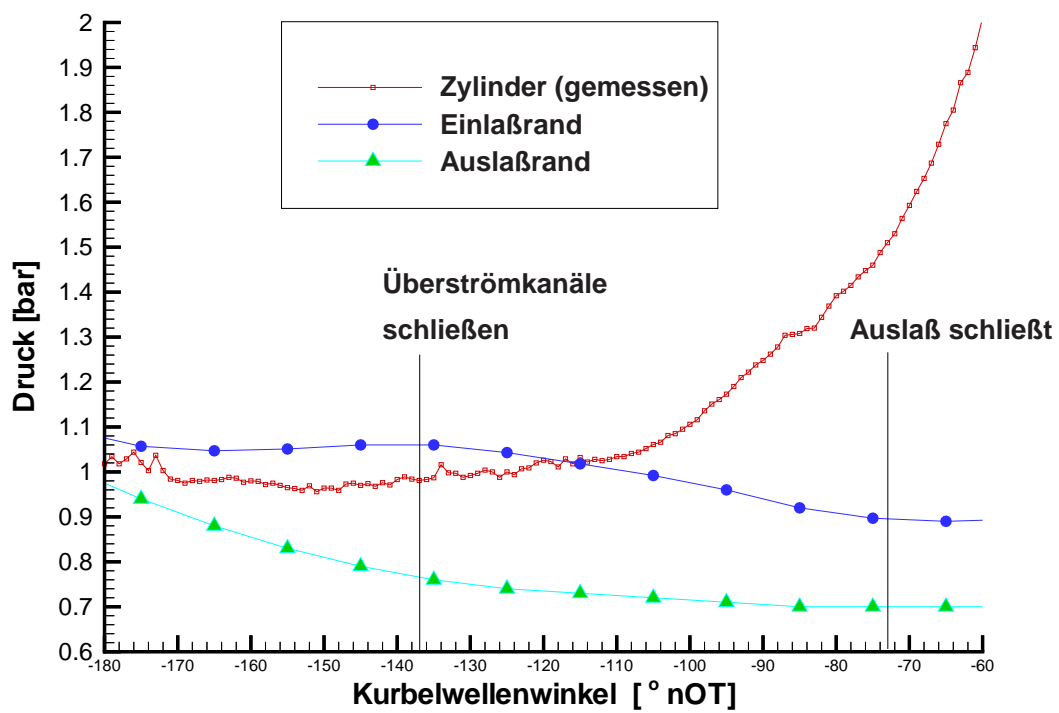


Abbildung 5.9: Vorgegebener Druckverlauf am Einlaß- und Auslaßrand und gemessener Druck im Zylinder.

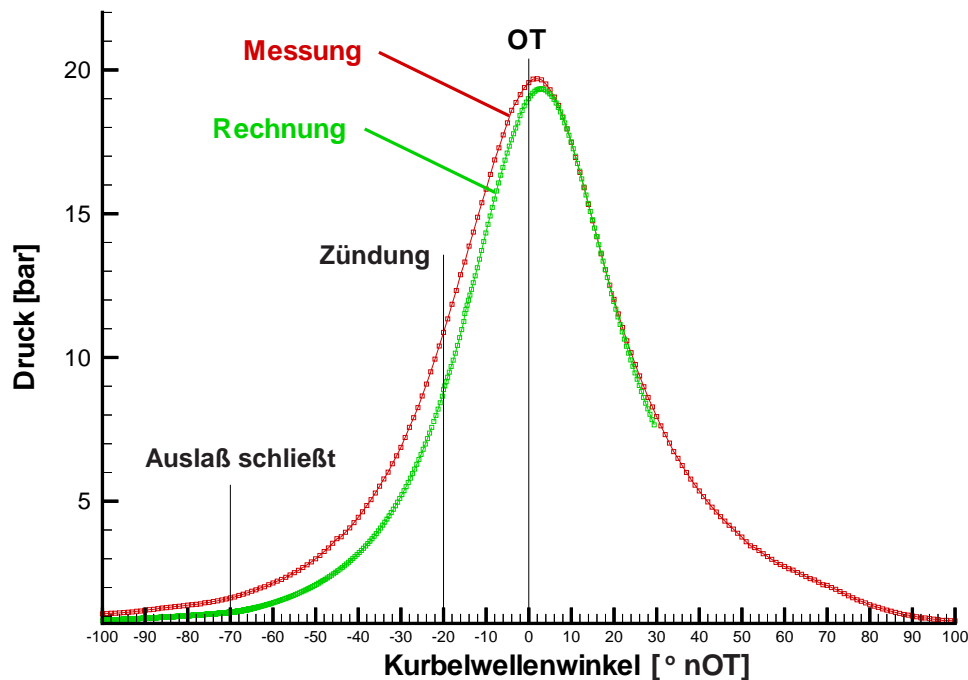


Abbildung 5.10: Gemessener und berechneter Druck im Zylinder.

von Druck, Temperatur und Gemischzusammensetzung des einströmenden Gases und der Geometrie des gesamten, vom Fluid durchströmten Raumes ab. Im Verlauf der Verbrennung wird der Zylinderdruck im wesentlichen durch die Reaktionsenthalpie und die Flammengeschwindigkeit bestimmt. Diese sind wiederum abhängig von dem verwendeten Brennstoff und dem Kraftstoff-Luft-Verhältnis.

Während der Berechnung der kalten Strömung sowie bei der Modellierung der reaktiven Strömung wird der Druck im Zylinder räumlich gemittelt und mit den experimentell gewonnenen Daten verglichen. Das Ergebnis ist in Abb. 5.10 in Abhängigkeit des Kurbelwellenwinkels dargestellt. Ebenfalls sind der Schließwinkel des Auslasses und der Zündzeitpunkt markiert. Die Übereinstimmung ist im allgemeinen gut und während der Dekompressionsphase sehr gut. Die Diskrepanzen während der Kompression sind im wesentlichen auf den nicht bekannten Druck am Auslaßrand zurückzuführen. Weiterhin kann ein zu großer Meßfehler bei der Bestimmung der Frischgastemperatur dafür verantwortlich sein. Letztendlich sollte in diesem Zusammenhang auch die Globalisierung der Auslaßgeometrie bei der Gittergenerierung erwähnt werden (vgl. Abschnitt 5.2).

5.7 Flammenfortschritt

In diesem Abschnitt soll demonstriert werden, daß das implementierte MC-PDF-Modell den Flammenfortschritt in drei Raumdimensionen beschreiben kann. Dazu wird

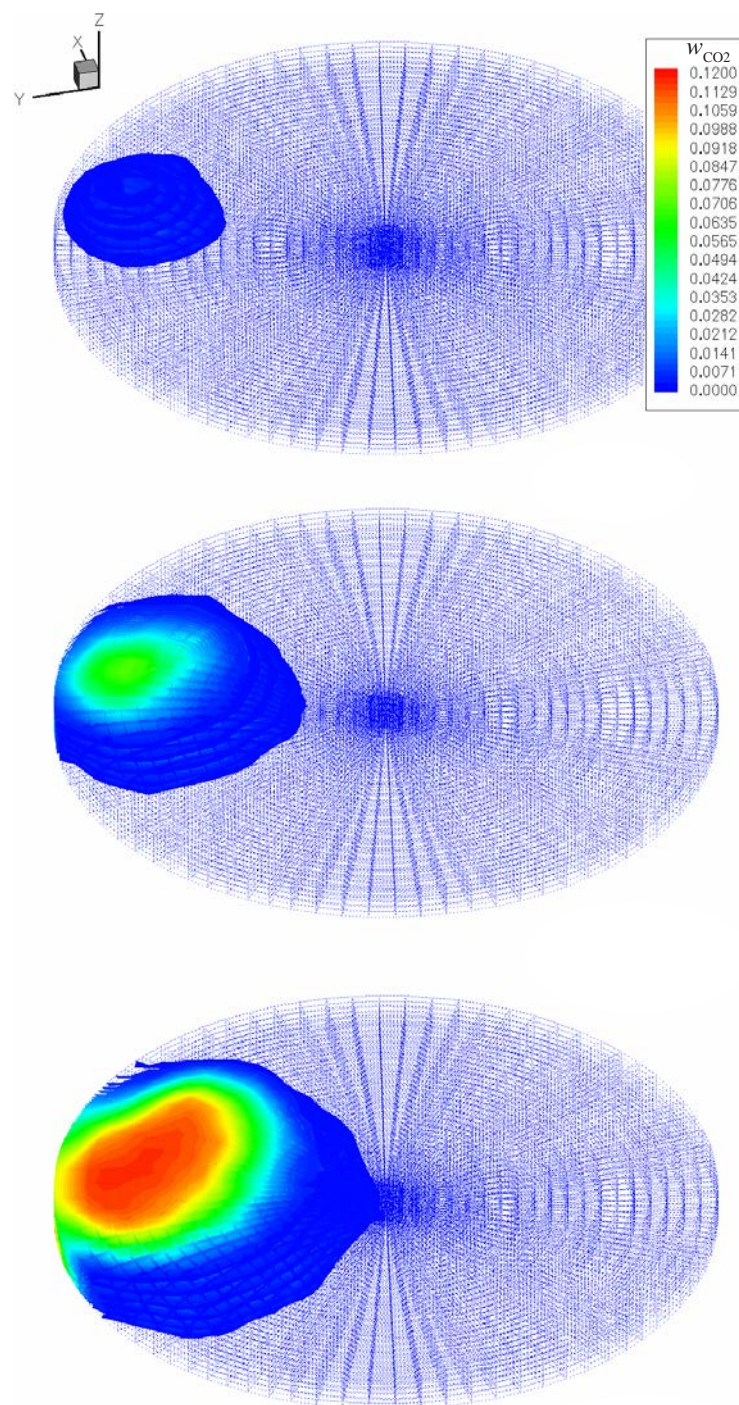


Abbildung 5.11: Flammenfortschritt am Beispiel des Massenbruchs von CO₂.
Oben: 10° KW vOT. Mitte: OT. Unten: 10° KW nOT.

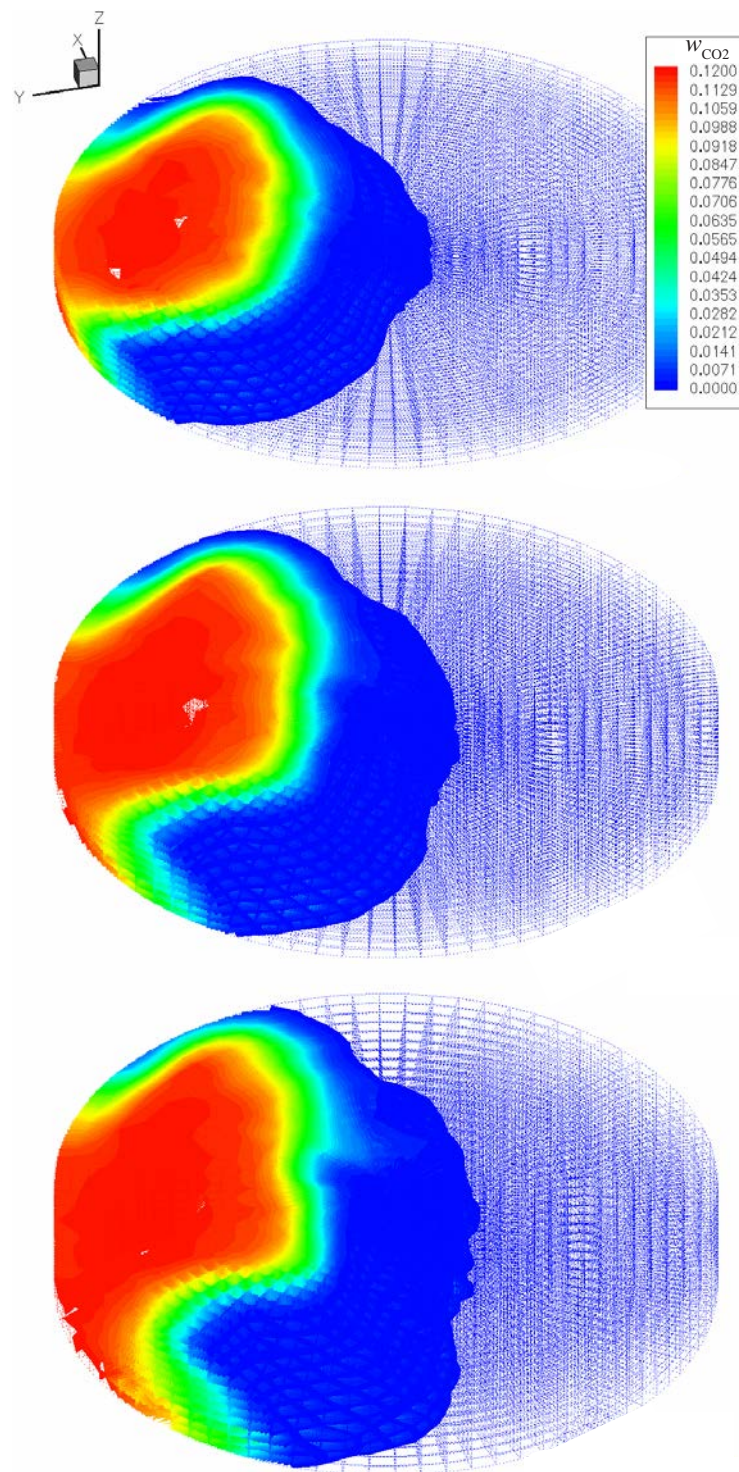


Abbildung 5.12: Flammenfortschritt am Beispiel des Massenbruchs von CO₂.
Oben: 20° KW nOT. Mitte: 30° KW nOT. Unten: 40° KW nOT.

der Massenbruch des Verbrennungsproduktes CO_2 ausgewertet. Dieser ist gleichzeitig Fortschrittsvariable des ILDM-Modells. Der Massenbruch wird in Abb. 5.11 und 5.12 durch dreidimensionale Konturgrafiken in Abhängigkeit des Kurbelwellenwinkels dargestellt. Eine dreidimensionale Konturgrafik kennzeichnet eine Darstellungsform, bei der Isoflächen, d.h. Flächen gleicher skalarer Größe, unterschiedlichen Farben zugeordnet werden. Außerdem ist auf den Abbildungen das strichpunktierte Gitter des scheibenförmigen Brennraumes zu sehen, welches ebenfalls die Farben der Konturgrafik trägt. Existiert also an einer Stelle keine Isofläche, so zeigt die Farbe des Gitters den Wert der aufgetragenen Größe an. Die in diesem Abschnitt ausgewerteten Daten stammen aus der Rechnung 407; das Gitter ist durch die Datei 2stroke2 gegeben.

Allgemein ist der Flammenfortschritt von dem skalaren Mischungsmodell [Nooren96, Jones96a] und dem Zündmodell für geringe Temperaturen außerhalb der ILDM abhängig. Dabei beschreibt das skalare Mischungsmodell den eigentlichen Flammenfortschritt. Ohne das skalare Mischungsmodell wäre eine Ausbreitung der Flammenfront nicht möglich, da keine Wechselwirkung zwischen den Partikeln bestünde.

In Abb. 5.11 (oben) wird der Massenbruch 10° KW nach der Zündung dargestellt. Hier ist zunächst nur eine kleine Region verbrannter Gase sichtbar. Diese wird durch eine schalenförmige Isofläche dargestellt. Innerhalb dieser Schale befinden sich weitere - in dieser Grafik verdeckte - Isoflächen, welche Bereiche größerer Massenbrüche repräsentieren.

Abb. 5.11 (mitte) zeigt den Zustand der Flamme am oberen Totpunkt. Die äußerste Flammenfront stößt nun an den Zylinderkopf und das Zentrum der verbrannten Zone wird sichtbar. Eine deutliche Ausbreitung der Flamme kann nach weiteren 10° KW in Abb. 5.11 (unten) gesehen werden. Zu diesem Zeitpunkt kann die Flamme aufgrund des Verhältnis von ihrem Durchmesser zu der Höhe des Brennraumes als näherungsweise zweidimensional betrachtet werden. Deutlich sichtbar ist jetzt die Region heißer verbrannter Gase, in welcher der Massenbruch von CO_2 auf den Wert des chemischen Gleichgewichtes angestiegen ist ($w_{\text{CO}_2} \approx 0.12$). Weiterhin ist der Bereich des kalten unverbrannten Gemisches erkennbar, in welchem der Massenbruch verschwindet. Dazwischen befindet sich die einige Millimeter dicke Flammenfront.

Der weitere Verlauf der Verbrennung bis 40° KW nOT ist in Abb. 5.12 skizziert. Bei 40° KW nOT hat sich die Flamme etwa auf den halben Brennraum ausgedehnt. Die farblosen Lücken im heißen Bereich der Flamme entstehen als Folge der Darstellung durch dreidimensionale Konturgrafiken: Liegt die ausgewertete Variable über dem höchsten Wert, welcher einer Isofläche zugeordnet wird (hier 0.12), so kann der Hintergrund bzw. das Gitter sichtbar werden. Außerdem ist in dieser Abbildung die Bewegung des Kolbens erkennbar, die Höhe des Brennraumes nimmt mit steigendem Kurbelwellenwinkel zu.

5.8 Zustandsgrößen

In diesem Abschnitt werden einige thermochemische Zustandsgrößen zu einem festen Zeitpunkt, d.h. bei einem konstanten Kurbelwellenwinkel (20° nOT), ausgewertet. Dies

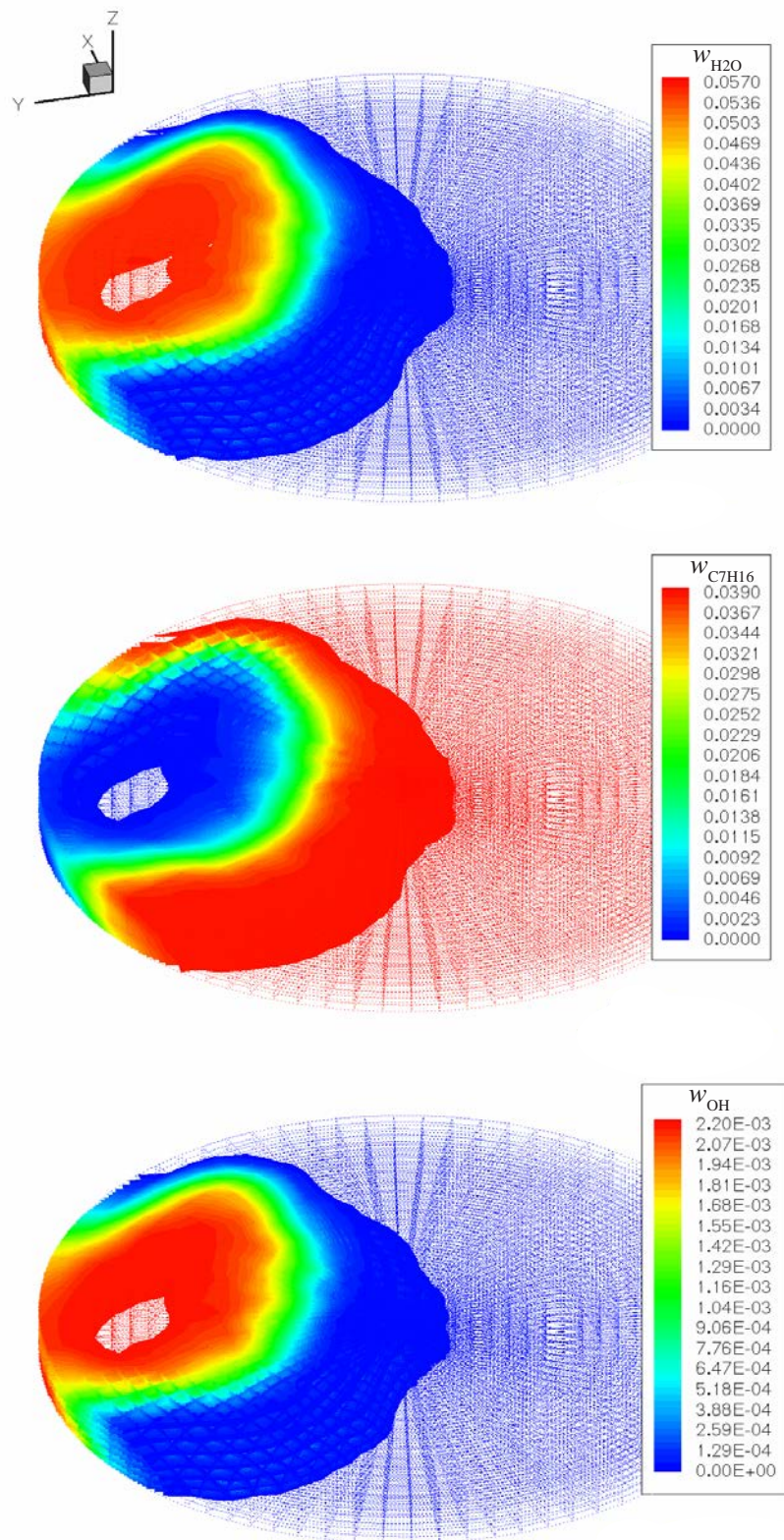


Abbildung 5.13: Massenbrüche verschiedener Spezies bei einem Kurbelwellenwinkel von 20° nOT. Oben: H_2O . Mitte: C_7H_{16} . Unten: OH .

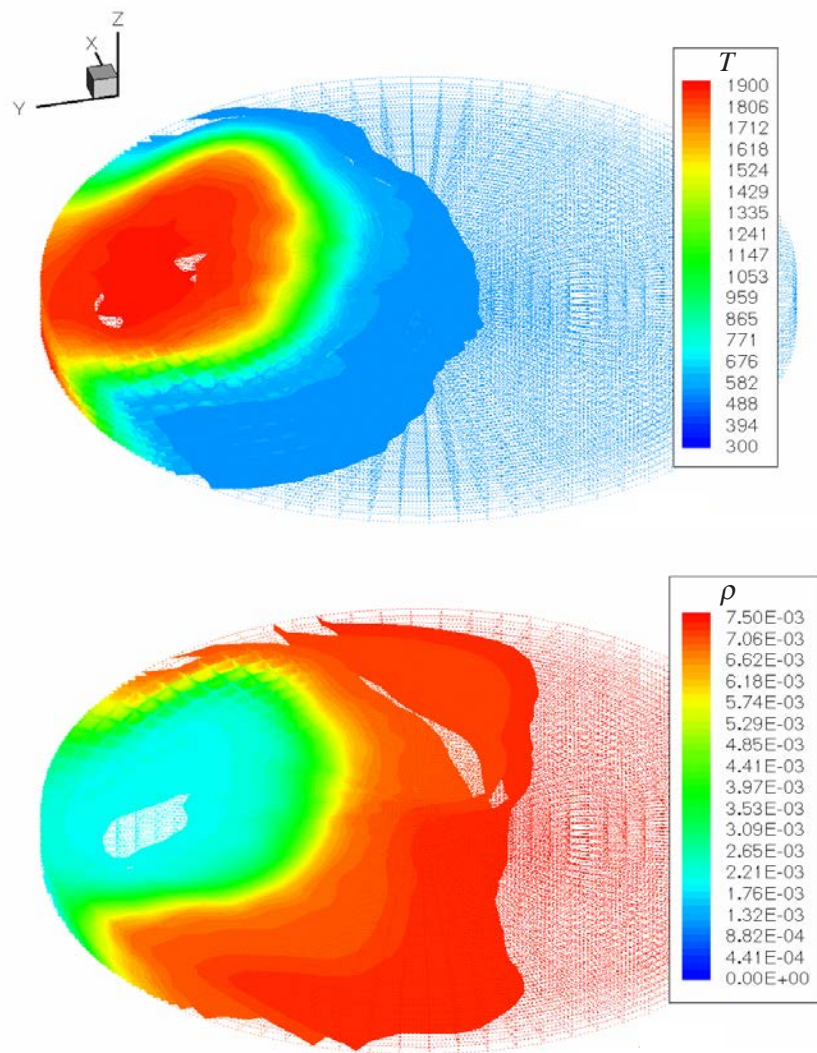


Abbildung 5.14: Temperatur [K] und Dichte [g/cm^3] bei einem Kurbelwellenwinkel von 20° nOT.

sind die Massenbrüche der Spezies H_2O , C_7H_{16} und OH , die Temperatur und die Dichte. Hiermit soll unter anderem die Leistungsfähigkeit des MC-PDF-Modells in Verbindung mit ILDM demonstriert werden. Die grafische Darstellungsform entspricht der aus dem vorangegangenen Abschnitt. Die gezeigten Daten stammen aus der Rechnung 407, das Gitter ist durch die Datei 2stroke2 gegeben.

In Abb. 5.13 (oben) ist zunächst der Massenbruch von Wasser, eine Fortschrittsvariable des implementierten ILDM-Modells dargestellt. Hierbei ist der Flammenfortschritt gut erkennbar: Der Bereich großer Massenbrüche (rot) deutet auf bereits verbranntes Gemisch hin, der Bereich verschwindender Massenbrüche (blau) auf die noch unverbrannte Zone. Das chemische Gleichgewicht des Wasser-Massenbruchs befindet sich bei $w_{\text{H}_2\text{O}} \approx 0.06$. Außerdem kann der Grafik entnommen werden, daß zu diesem Zeitpunkt rund ein Viertel des Gemisches an der Reaktion beteiligt war

In Abb. 5.13 (Mitte) wird der Modellkraftstoff Heptan gezeigt. Hierbei ist deutlich zu sehen, daß der Massenbruch des Kraftstoffs in der verbrannten Zone nahe Null liegt (blau). In der unverbrannten Mischung (rot) ist der maximale Massenbruch des Brennstoffes gleich dem Mischungsbruch ($w_{\text{C}_7\text{H}_{16}} = \xi = 0.0401$) des Systems. Weiterhin ist auch hier die Lage der Flammenfront erkennbar.

Ein Hauptziel der MC-PDF-Methode ist es jedoch, nicht nur chemische Hauptspezies zu berechnen, sondern in Verbindung mit einem komplexen thermochemischen Modell auch Nebenprodukte voraussagen zu können. Exemplarisch dafür wird in Abb. 5.13 (unten) der Massenanteil des Hydroxyl-Radikals gezeigt. Hierbei ist auffallend, daß das Radikal nicht, wie vielleicht zunächst angenommen werden könnte, als intermediäre Spezies auftritt. Im Gegensatz dazu verhält sich das Profil des Massenbruches hier eher wie ein Verbrennungsprodukt. Das Gleichgewicht liegt bei etwa $w_{\text{OH}} \approx 2.26 \cdot 10^{-3}$. Allgemein kann die OH-Konzentration je nach thermodynamischen Zustand und Mischungsbruch sowohl als Zwischenprodukt bei niedrigem Druck, welches nur in der Flammenfront auftritt, als auch als Gleichgewichtsprodukt, wie es hier der Fall ist bei hohem Druck, oder als Mischform davon auftreten [Warnatz98].

Letztendlich wird in Abb. 5.14 die Temperatur und die Dichte ausgewertet. Die Temperatur liegt dabei im Bereich von ≈ 527 bis 1900 K und die Dichte zwischen ≈ 7.40 und $1.98 \cdot 10^{-3}$ g/cm³. Dabei wurden diese Größen wie in Abschnitt 4.8 beschrieben aus dem ILDM-Modell berechnet.

5.9 Vergleich mit experimentellen Ergebnissen

In diesem Abschnitt wird die implementierte Monte-Carlo-PDF-Methode mit experimentellen Ergebnissen verglichen. Dies geschieht über die Auswertung des Reaktionsfortschrittes, welcher durch die Verteilung des Brennstoffes repräsentiert werden soll. Die modellierten Daten stammen aus der Rechnung 407, das Gitter ist durch die Datei 2stroke2 gegeben. Die aus laserinduzierter Fluoreszenz gewonnenen Meßergebnisse wurden am Physikalisch Chemischen Institut der Universität Heidelberg durchgeführt [Einecke99a].

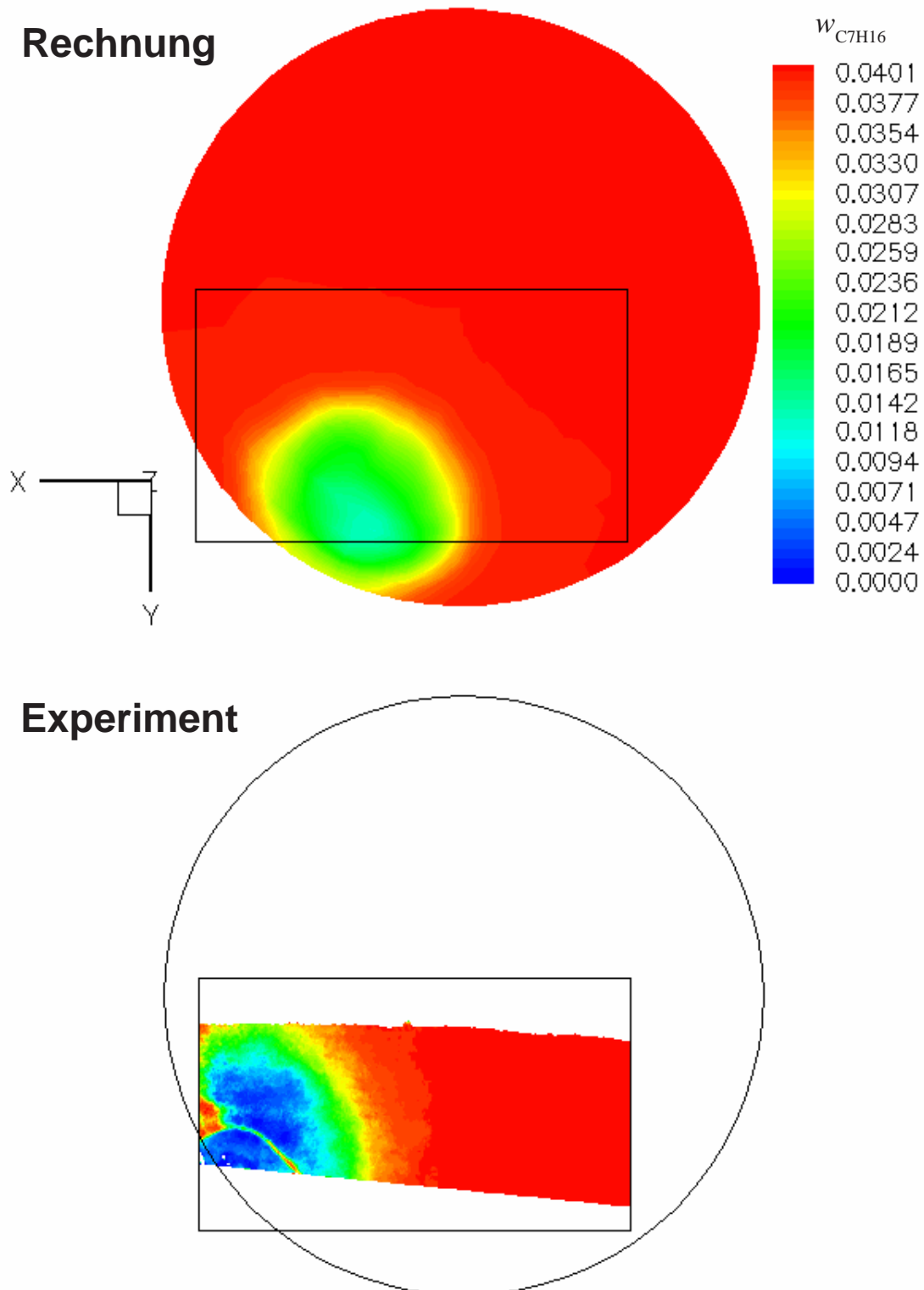


Abbildung 5.15: Vergleich des berechneten mit dem gemessenen Reaktionsfortschritt am oberen Totpunkt. Die dargestellten Größen werden im Text erläutert.

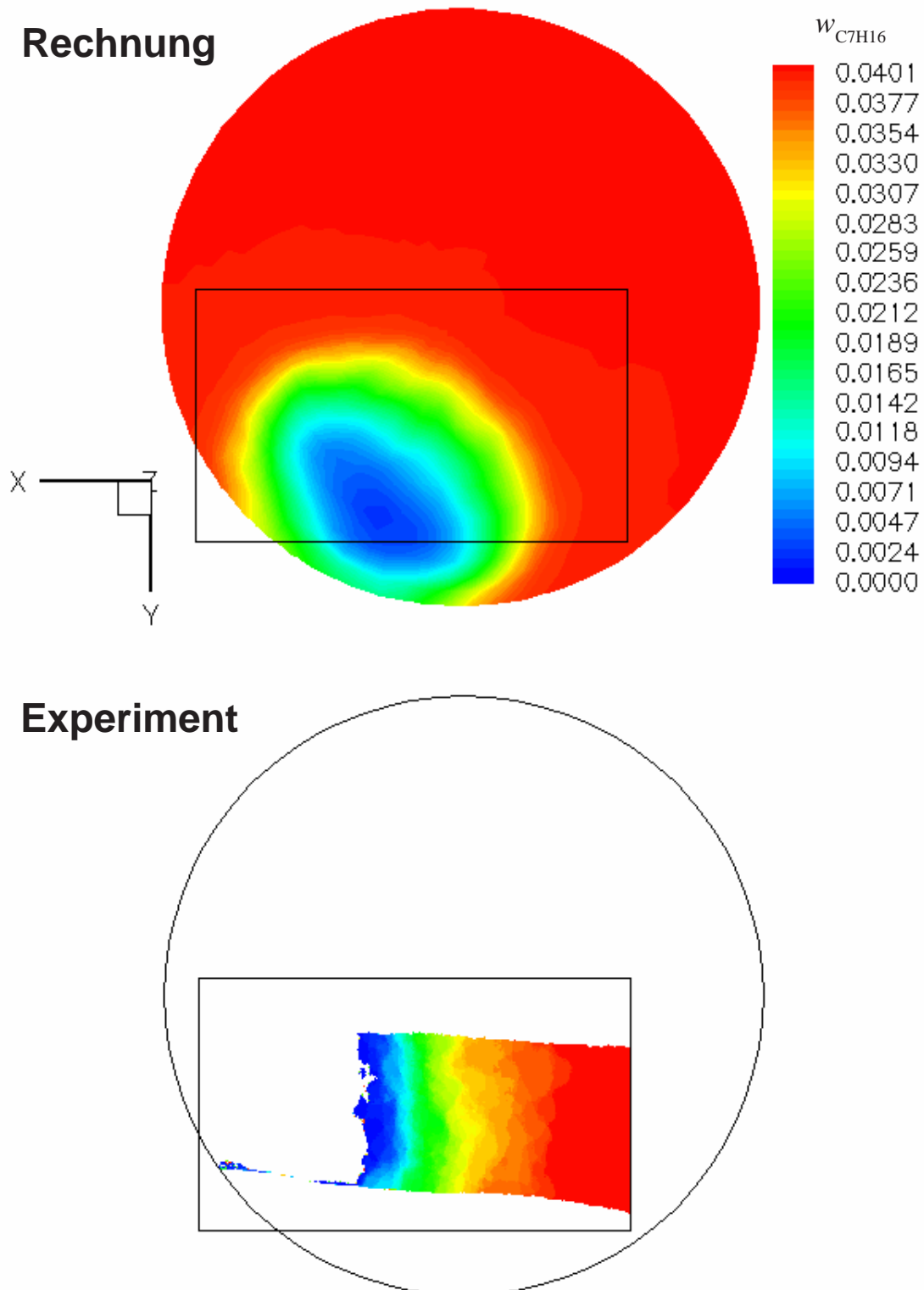


Abbildung 5.16: Vergleich des berechneten mit dem gemessenen Reaktionsfortschritt bei einem Kurbelwellenwinkel von 9° nOT. Die dargestellten Größen werden im Text erläutert.

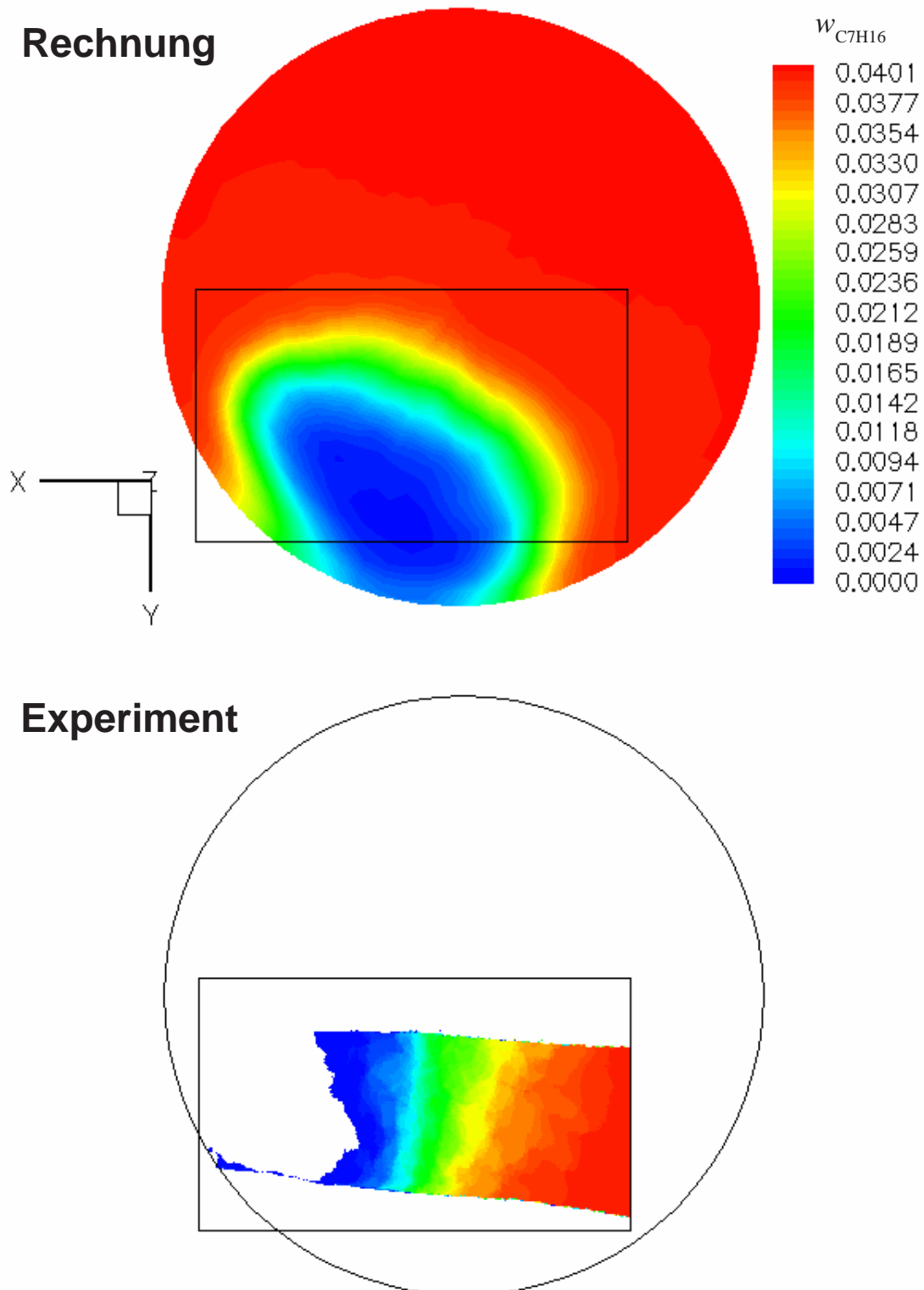


Abbildung 5.17: Vergleich des berechneten mit dem gemessenen Reaktionsfortschritt bei einem Kurbelwellenwinkel von 18° nOT. Die dargestellten Größen werden im Text erläutert.

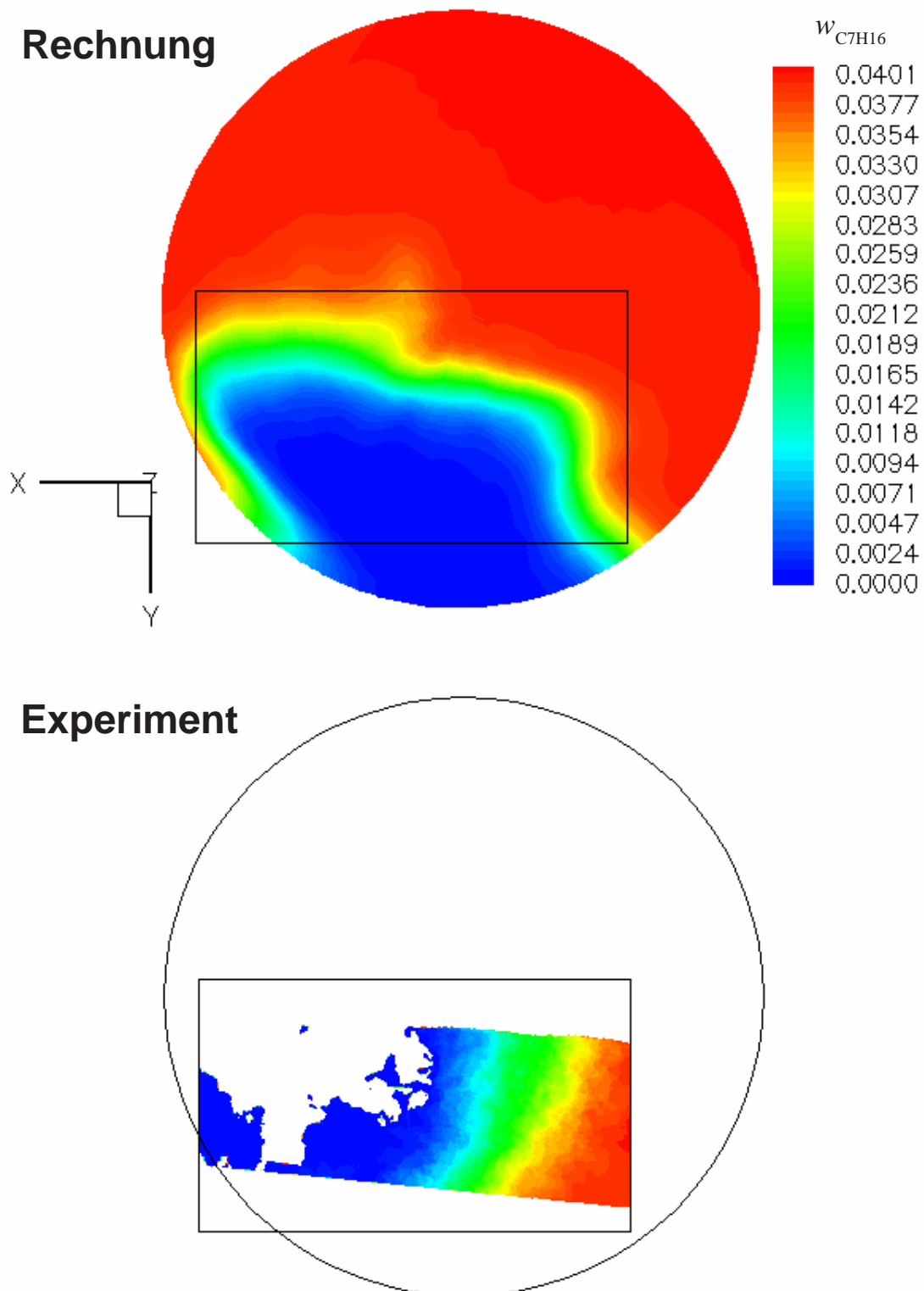


Abbildung 5.18: Vergleich des berechneten mit dem gemessenen Reaktionsfortschritt bei einem Kurbelwellenwinkel von 42° nOT. Die dargestellten Größen werden im Text erläutert.

Zur Messung des Fluoreszenzsignals wird ein nahezu zweidimensionaler Laserlichtschnitt auf einer Höhe $z = 7.6$ cm durch den Brennraum geleitet. Das durch den Kraftstofftracer verursachte Fluoreszenzlicht wird mittels einer CCD-Kamera orts- und zeitaufgelöst aufgenommen. Dabei wird der Lichtschnitt durch die Kamera in einzelne Bildelemente gleicher Größe aufgelöst. Die Intensität des Fluoreszenzsignals ist hierbei proportional zur Anzahl der fluoreszierenden Moleküle pro Volumen, also auch zur Anzahl der Kraftstoff-Moleküle pro Volumen dn_F/dV [Einecke99b].

Um aus diesen Momentanaufnahmen eine mittlere Kraftstoffverteilung zu erhalten, werden daraus durch Festlegung eines Schwellwertes zunächst Binärbilder gewonnen. Dafür wird das unverbrannte Gemisch mit einer Eins und der Bereich ohne Fluoreszenzsignal mit einer Null gekennzeichnet. Die Grenze ist durch den Schwellwert definiert. Anschließend werden diese Bilder gemittelt, indem sie addiert werden. Dabei wurde jeweils über hundert Bilder summiert. Diese Statistik entspricht gewissermaßen einer Ensemblemittelung über Momentaufnahmen, wobei die Einzelereignisse aus verschiedenen Motorzyklen stammen. Durch die Reduzierung auf Binärbilder geht jedoch Information über die Breite der Flammenfront verloren. Eine direkte Mittelung der Momentanbilder ist nicht möglich, weil unter anderem die Kraftstoffverteilung im realen unverbrannten System nicht homogen ist und den Bildern ein verfahrensbedingtes Rauschen überlagert ist [Einecke99b].

Zur Darstellung des modellierten Reaktionsfortschrittes wird der mittlere Massenbruch des Brennstoffes ausgewertet. Die Mittelwerte werden dabei wie in Abschnitt 4.8 beschrieben berechnet.

Der Zusammenhang zwischen dem Massenbruch w_F und der Anzahl der Moleküle dn_F in einem Volumenelement dV ergibt sich für eine homogene Gasmischung aus $dn_F = w_F \rho dV N_a / M_F$. Dabei kennzeichnet der Index F den Brennstoff, M die molare Masse und N_a die Avogadrozahl. Demnach sollte eigentlich nicht der Massenbruch, sondern die Partialdichte des Brennstoffes $\rho_F = \rho w_F \propto dn_F/dV$ mit dem Fluoreszenzsignal verglichen werden. Davon wird jedoch abgesehen, da sich die maximale Partialdichte im System im Gegensatz zum maximalen Massenbruch durch die Kompression des Kolbens zeitabhängig ändert. Für diese Betrachtungsweise müßte auch die zum Vergleich notwendige Skalierung der Partialdichte zu jedem Kurbelwellenwinkel neu bestimmt werden.

Der Brennstoffverteilung wird bei den Kurbelwellenwinkeln 0° , 9° , 18° und 42° nOT in einem horizontalen Schnitt durch den Brennraum bei $z = 7.6$ cm als zweidimensionale Konturgrafik ausgewertet. In den Abbildungen 5.15 bis 5.18 ist als Orientierungshilfe die Zylinderwand jeweils durch einen Kreis und der Bereich, welcher den Laserlichtschnitt enthält, durch ein Rechteck gekennzeichnet. Die Farbskala der Bilder ist dabei so ausgelegt, daß ROT der unverbrannten und BLAU der verbrannten Mischung entspricht. Bedingt durch das Datenformat der experimentellen Bilder zeigen diese sowohl im vollständig verbrannten Bereich als auch außerhalb des Laserlichtschnittes einen weißen Hintergrund.

Um die Bewegung der dreidimensionalen vorgemischten Flamme zu verstehen, sei zu erwähnen, daß die Geschwindigkeit eines Flammenfrontelementes in zwei Anteile zer-

legt werden kann: Dies sind die Ausbreitungsgeschwindigkeit der Flamme an sich und die Drift durch das Strömungsfeld des Gases. Da beide Anteile durch die Wechselwirkung zwischen Turbulenz und Chemie sich sowohl orts- und als auch zeitabhängig beeinflussen, kann die Flammenfront geometrisch komplexe Formen annehmen.

Abb. 5.15 zeigt den Reaktionsfortschritt am oberen Totpunkt, d.h. 20° nach der Zündung. In der experimentellen Darstellung ist ein Teil der Begrenzung der Zündtasche als Artefakt der Konturgrafik sichtbar. Es ist zu erkennen, daß die Rechnung die Ausbreitungsgeschwindigkeit der Flamme gut wiedergibt. Bei genauerem Hinsehen wird jedoch deutlich, daß die Position der berechneten Flamme gegenüber dem Experiment etwas verschoben ist. Auf dieses Problem wird später noch ausführlich eingegangen. Weiterhin ist die Reaktion im Kern der Flamme im realen System scheinbar weiter fortgeschritten (die Farben sind dunkler). Dies kann jedoch darauf zurückgeführt werden, daß in der experimentellen Grafik die Flammenfrontdicke aufgrund der Mittelung über Binärbilder falsch wiedergegeben wird (siehe oben) und zu gering erscheint.

In den folgenden Abb. 5.16 bis 5.18 setzt sich der beschriebene Trend fort: Die Ausbreitungsgeschwindigkeit wird durch die Rechnungen gut dargestellt, jedoch bleibt die Position der Flamme weiterhin verschoben. Dies wird besonders in den Abb. 5.17 und 5.18 deutlich. Zu diesen Zeitpunkten ist die reale Flamme bezüglich des Laserlichtschnittes oben breiter. Dies deutet auf eine Bewegung der Flamme im Uhrzeigersinn hin. Die berechnete Flamme unterliegt jedoch eher einer gegenläufigen Drift.

Ein Grund für diese Abweichung kann ein nicht korrekt berechnetes Geschwindigkeitsfeld sein. Diese Tatsache und ihre möglichen Ursachen sollen im folgenden Abschnitt näher untersucht werden.

5.10 Optimierung der Gittergeometrie

Die im vorangegangenen Abschnitt dargestellten Ergebnisse zeigen eine gewisse Diskrepanz der Bewegungsrichtung der Flamme im Brennraum des Motors, welche auf Abweichungen im Strömungsfeld hindeuten. Da die Vorgänge in einem Zweitakt-Motor sehr stark von dessen Strömungsverhalten abhängig sind, welche im wesentlichen wiederum durch die Geometrie der Überströmkanäle und des Auslaßkanals beeinflußt wird, ist es naheliegend, die Approximationen bei der Modellierung der Geometrie zu optimieren.

Aufgrund der zeitlichen Überlappung des Ansaugens von Frischgas und des Ausstoßens von verbranntem Gemisch im Zweitakt-Motor beeinflussen die Strömungsverhältnisse das Spülungsverhalten des Aggregates wesentlich. Deshalb sollte das Frischgas durch eine geeignete Konstruktion der Ansaug- und Auslaßvorrichtungen möglichst räumlich getrennt vom Abgas geführt werden. Dies kann durch eine sogenannte *Schürle-Umkehr-Strömung* realisiert werden [Heywood89]. Dabei werden die seitlichen Einlaßöffnungen der Überströmkanäle derart geneigt, daß das Frischgas zunächst in den hinteren Teil des Brennraums gelangt und das Abgas durch den vorne gelegenen Auslaß entweichen kann. Existieren zwei spiegelsymmetrische Überströmkanäle, so entstehen dadurch zwei große entgegengesetzte Wirbel, welche das Frischgas auf diese Weise in Richtung des Zylinderkopfes drehen.

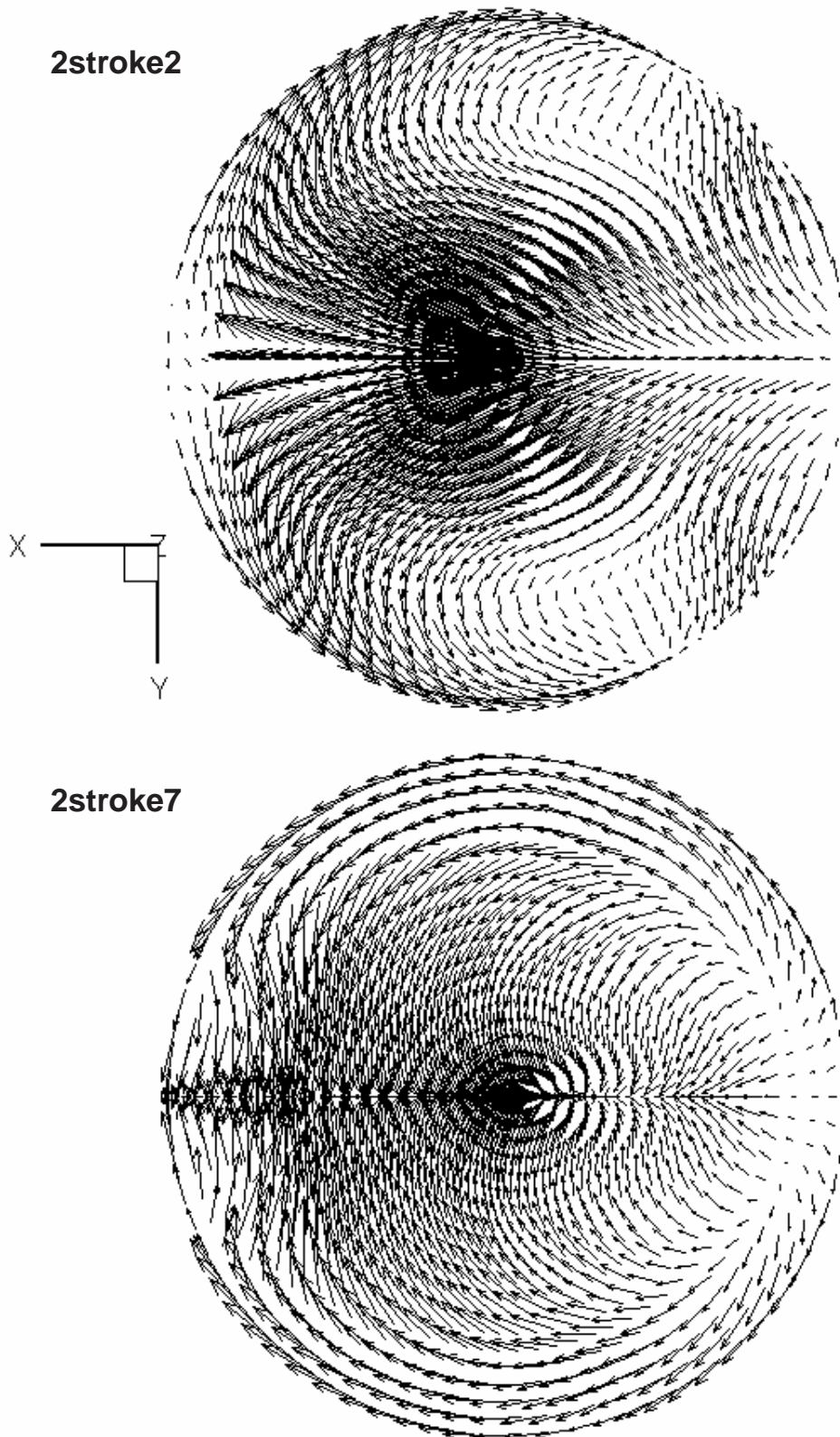


Abbildung 5.19: Vergleich des kalten Strömungsfeldes bei 23° KW vOT in der Schnittebene $z = 7.6$ cm bei verschiedenen Gittertypen. Die Geschwindigkeit wird durch Pfeile der Länge $\frac{0.003 \text{ cm}}{\text{cm/s}}$ dargestellt.

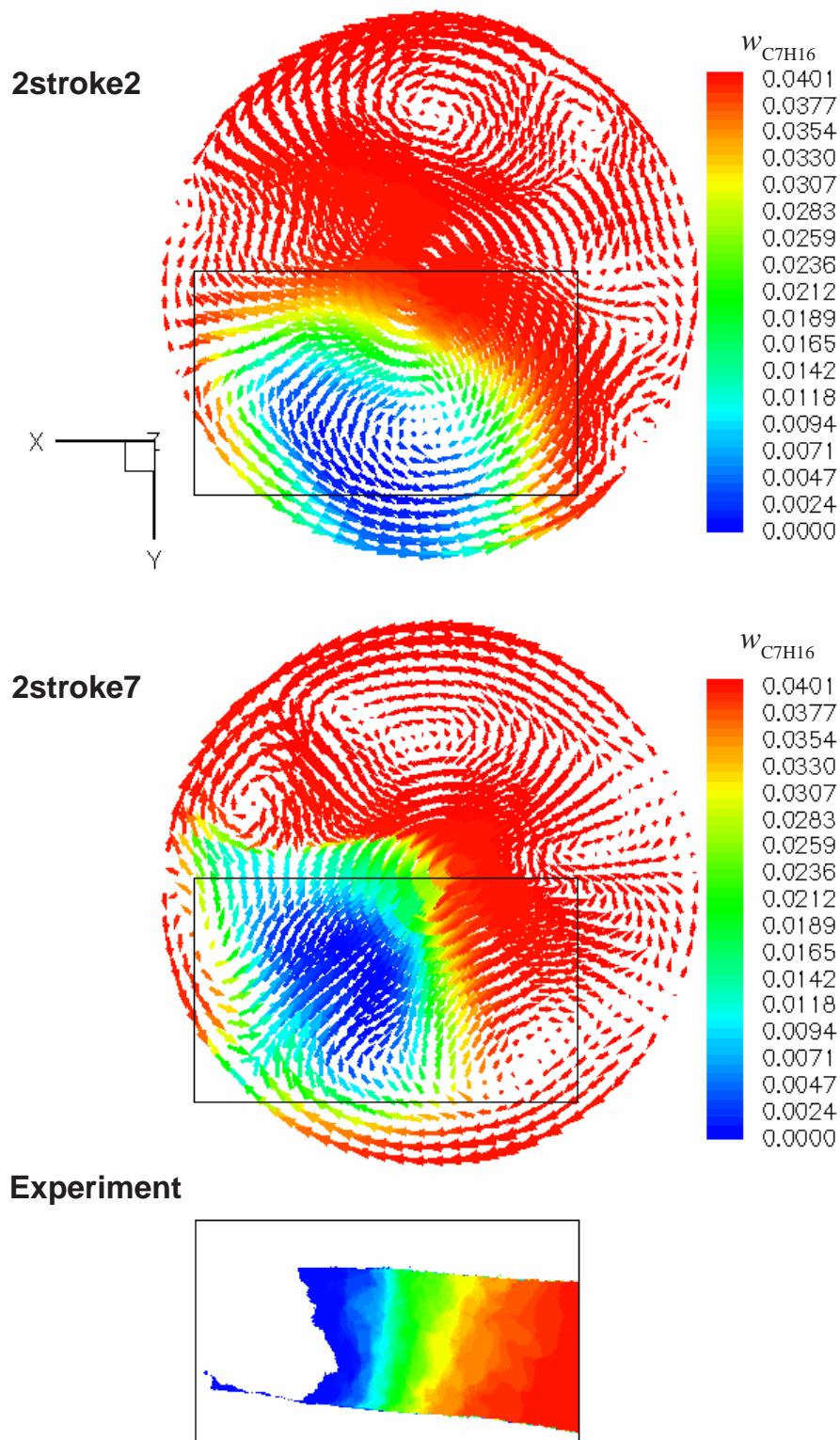


Abbildung 5.20: Vergleich des reaktiven Strömungsfeldes bei 18° KW nOT in der Schnittebene $z = 7.6$ cm bei verschiedenen Gittertypen. Die Geschwindigkeit wird durch Pfeile der Länge $\frac{0.003 \text{ cm}}{\text{cm/s}}$ dargestellt. Unten ist nochmals das Meßergebnis aus Abb. 5.17 gezeigt.

Die Neigung der Überströmkanäle, die eine solche Schürle-Strömung erlaubt, stellt die wesentliche Änderung der Gittergeometrie des optimierten Gitters 2stroke7 im Gegensatz zu dem Gitterprototyp 2stroke2 dar. Die Gitter und ihre geometrischen Unterschiede wurden bereits in Abschnitt 5.2 vorgestellt.

Im Folgenden sollen die Ergebnisse des Gitters 2stroke2 mit den dazugehörigen Rechnungen 118/407, welche bereits im vorangegangenen Abschnitt ausgewertet wurden, mit den Resultaten des optimierten Gitters 2stroke7 verglichen werden. Die entsprechenden Rechnungen dazu sind durch 207/409 gekennzeichnet.

Bei der Durchführung der Rechnungen 207/409 mit dem optimierten Gitter war auffällig, daß die Rechenzeit zum Teil stark anstieg und der von KIVA während der Rechnung angepaßte Zeitschritt sehr klein wurde. Dabei war der Zeitschritt während der kalten Strömung etwa um den Faktor 10 und während der chemischen Reaktion sogar um den Faktor 100 kleiner als bei den Rechnungen mit dem Gitter 2stroke2. Außerdem wurde in der Rechnung 409 der maximal mögliche Zeitschritt von 0.5° auf 0.2° KW herabgesetzt, um eine konvergente Lösung zu erhalten. Die höhere Rechenzeit ist wahrscheinlich auf die komplexere Geometrie des Gitters 2stroke7 und die damit verbundene Strömungsform zurückzuführen.

In Abb. 5.19 ist zunächst das Strömungsfeld durch Vektorpfeile bei 23° KW vOT kurz vor dem Zündzeitpunkt in der Schnittebene $z = 7.6$ cm dargestellt. Dies ist die gleiche Schnittebene, in der auch die experimentellen Daten ausgewertet werden. In dieser Grafik befindet sich der bereits geschlossene Auslaßkanal rechts und die ebenfalls geschlossenen Überströmkanäle jeweils oben und unten bezüglich des Schnittkreises. Da die Gitter spiegelsymmetrisch sind und die Zündung noch nicht eingesetzt hat, ist das Strömungsfeld ebenfalls symmetrisch. In der Abbildung ist deutlich zu erkennen, daß im Gitter 2stroke7 zwei große gegenläufige Wirbel auftreten, welche das Frischgas bei bzw. nach dem Eintritt in den Brennraum von dem Auslaß wegbewegen. Dies ist im Gitter 2stroke2 nicht der Fall. Hier ist eine Strömungsform ausgeprägt, welche eine zum Teil entgegengesetzte Richtung hat. Besonders auffällig wird diese Tatsache im Bereich der Zündkerze, welche sich in den gezeigten Bildern jeweils am Rand des unteren rechten Viertels des Schnittkreises befindet (vgl. Abb. 5.5). Dies erklärt schon jetzt die falsche Bewegungsrichtung der Flamme, was bereits im vorigen Abschnitt festgestellt wurde.

In Abb. 5.20 ist das Strömungsfeld bei 18° KW nOT in der Schnittebene $z = 7.6$ cm dargestellt. Zusätzlich sind die Vektorpfeile wie bei einer Konturgrafik eingefärbt. Dabei wird der Massenbruch des Brennstoffes Heptan, welcher den Flammenfortschritt beschreibt, als Konturvariable gewählt. In Abb. 5.20 unten sind zum Vergleich nochmals die experimentell gewonnenen Ergebnisse des Flammenfortschrittes zum gleichen Zeitpunkt aufgetragen. Dabei entspricht die Konturgrafik des Gitters 2stroke2 und des Experimentes dem bereits in Abb. 5.17 gezeigten Resultat.

In Abb. 5.20 ist deutlich erkennbar, daß das Gitter 2stroke7 die Flammenbewegung wesentlich besser beschreibt als die Geometrie 2stroke2. Dies ist auf das Geschwindigkeitsfeld zurückzuführen, welches die Flamme zum Teil im Uhrzeigersinn dreht und zum Teil in Richtung des Kreismittelpunktes bewegt.

Das entspricht, wie bereits in Abschnitt 5.9 diskutiert, der Bewegung der realen Flamme. Dagegen bewegt sich die Flamme im herkömmlichen Gitter 2stroke2 gegen den Uhrzeigersinn.

Durch die Auswertung der Simulation mit dem Gitter 2stroke7 in Abb. 5.20 kann außerdem gut die Wechselwirkung zwischen dem Strömungsfeld und der chemischen Reaktion untersucht werden. Es können Bereiche identifiziert werden, in denen sich die Ausbreitungsgeschwindigkeit der Flamme und die Geschwindigkeit der Strömung näherungsweise kompensieren. Andererseits existieren Bereiche, in denen sich die beide Geschwindigkeiten gleichphasig addieren. Ein Beispiel, welches beide Phänomene beschreibt, ist über der linken oberen Ecke des rechteckigen, eingezeichneten Rahmens erkennbar. Dort wird die Flammenfront durch einen kleinen, im kalten Gemisch befindlichen Wirbel eingedrückt: Auf der rechten Seite des Wirbels kompensieren sich die Geschwindigkeiten und hindern so die Flammenfront an der Ausbreitung. Auf der linken Seite addieren sich die Geschwindigkeiten und ziehen auf diese Weise die Flammenfront nach links oben.

Abschließend wird in den Abb. 5.21 bis 5.24 noch einmal die zeitliche Entwicklung des Reaktionsfortschrittes unter Verwendung des Gitters 2stroke7 im Vergleich zu den experimentellen Ergebnissen ausgewertet. Dabei sind die Darstellungsweise, die gezeigten Variablen und die Kurbelwellenwinkel völlig analog zu denen in den Abb. 5.15 bis 5.18 gewählt. Die experimentellen Ergebnisse sind demnach zu den in den Abb. 5.15 bis 5.18 vorgestellten Grafiken identisch. Wie oben bereits ausführlich diskutiert, wird die Position der Flamme mit dem Gitter 2stroke7 auch zeitabhängig besser vorhergesagt. Außerdem ist in den Abb. 5.21 bis 5.24 erkennbar, daß die Flamme hier stärker zerklüftet ist als bei Verwendung des Gitters 2stroke2. Dies ist wahrscheinlich auf die größere Verwirbelung des Fluids zurückzuführen, welche durch die oben bereits beschriebene Schürle-Umkehr-Strömung hervorgerufen wird.

Zusammenfassend läßt sich sagen, daß die Neigungswinkel der Überströmkanäle einen großen Einfluß auf das Strömungsfeld, die Flammenbewegung und das Spülungsverhalten des Zweitakt-Motors haben.

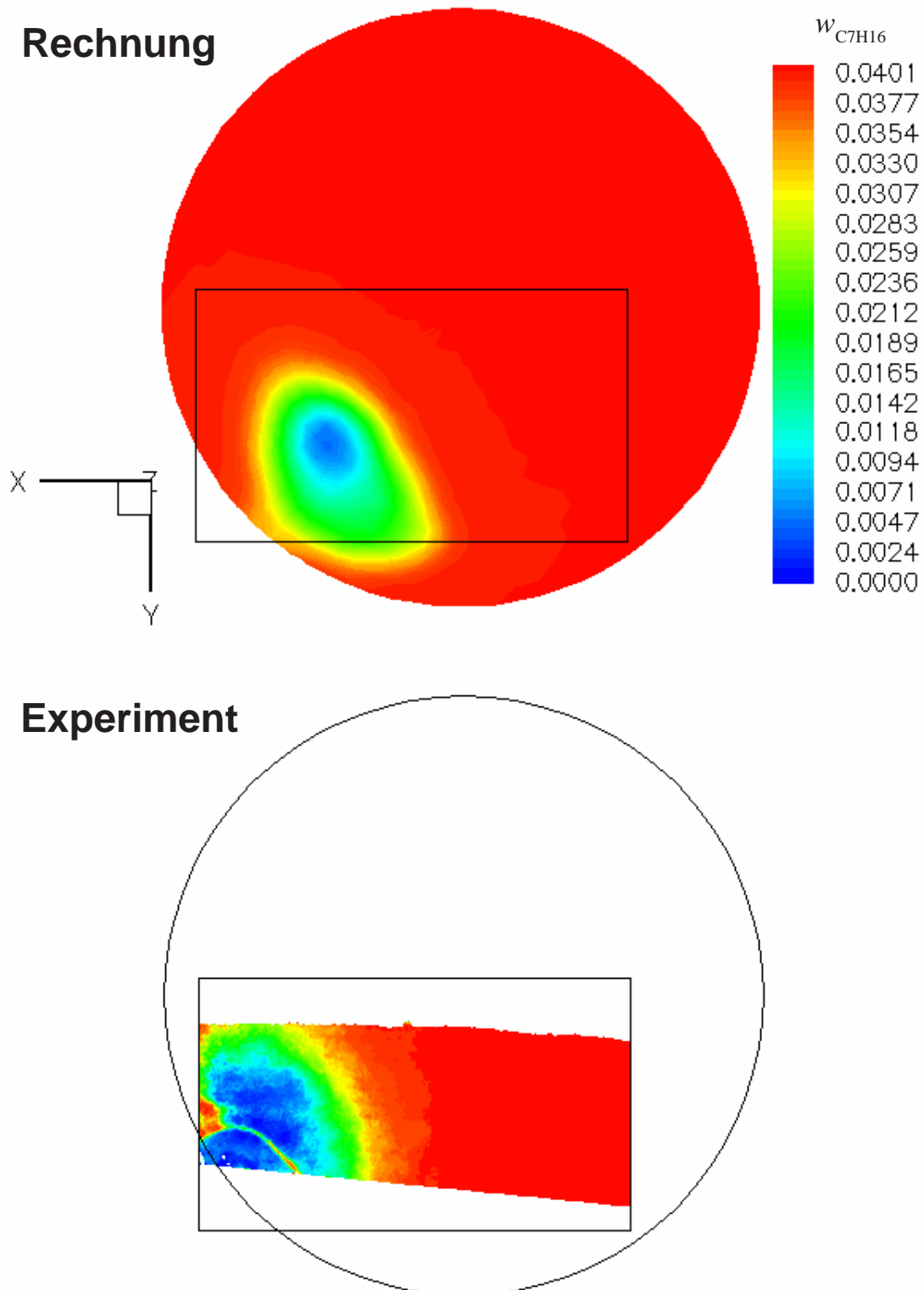


Abbildung 5.21: Vergleich des berechneten mit dem gemessenen Reaktionsfortschritt am oberen Totpunkt (Gitter 2stroke7).

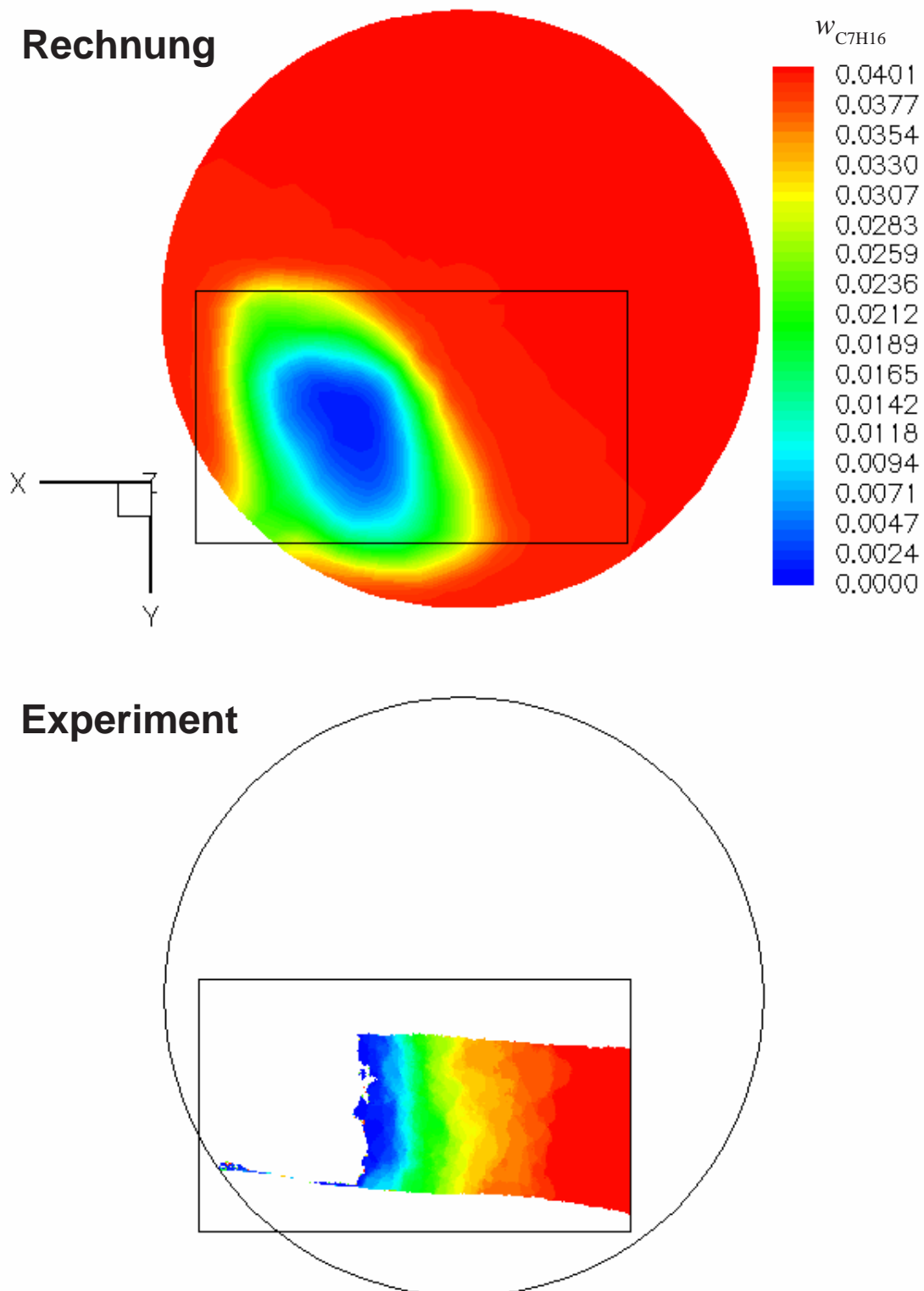


Abbildung 5.22: Vergleich des berechneten mit dem gemessenen Reaktionsfortschritt bei einem Kurbelwellenwinkel von 9° nOT (Gitter 2stroke7).

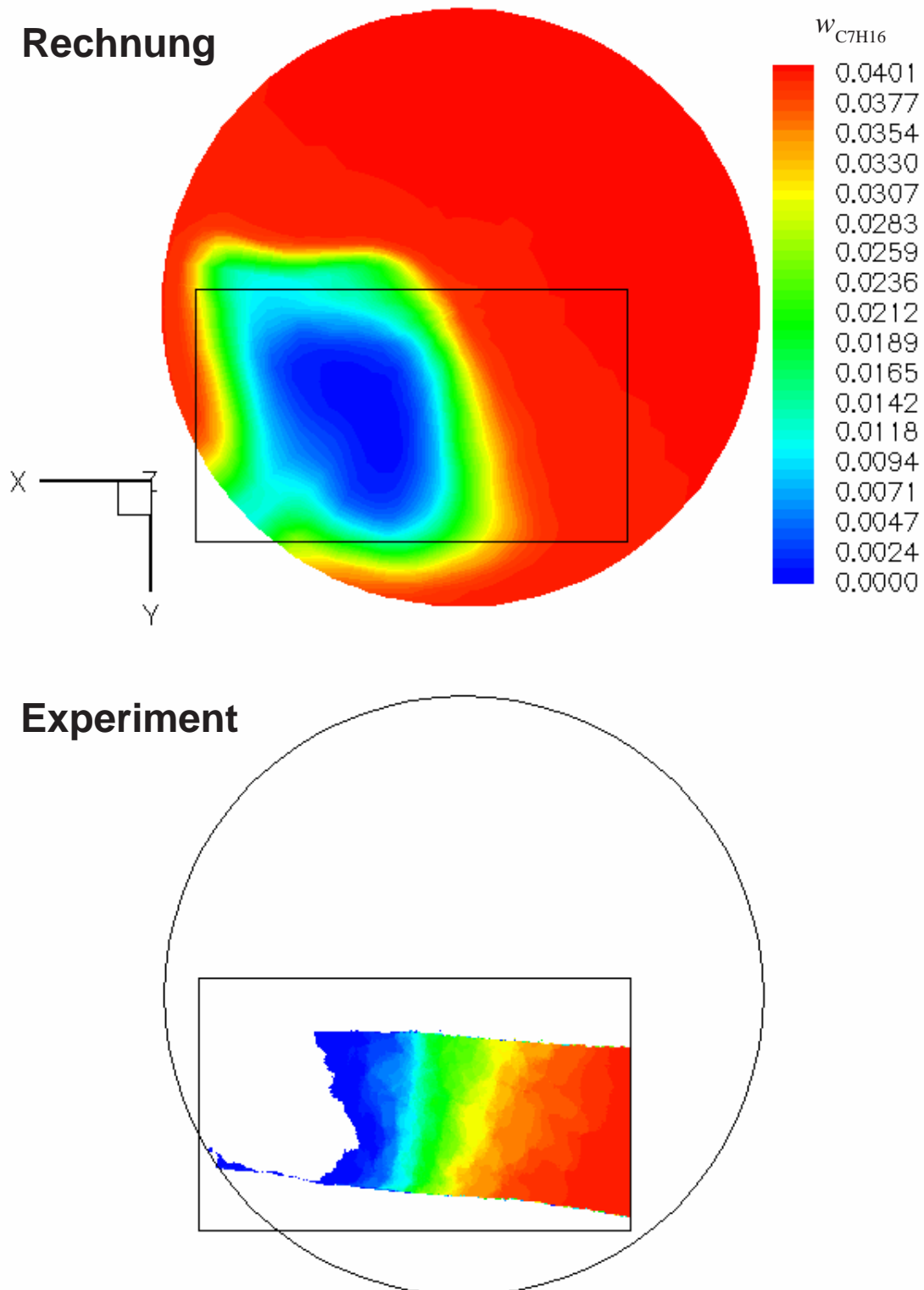


Abbildung 5.23: Vergleich des berechneten mit dem gemessenen Reaktionsfortschritt bei einem Kurbelwellenwinkel von 18° nOT (Gitter 2stroke7).

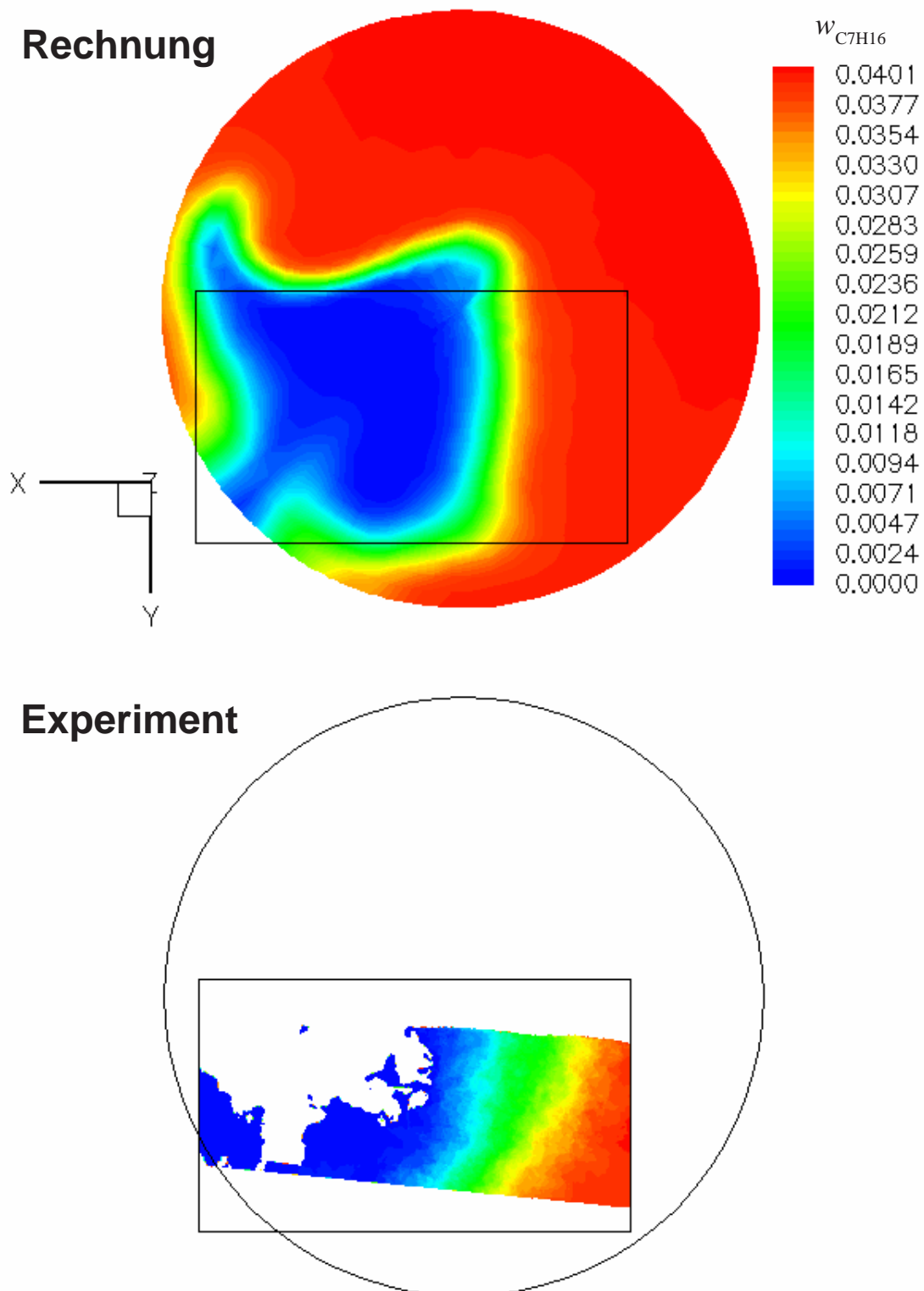


Abbildung 5.24: Vergleich des berechneten mit dem gemessenen Reaktionsfortschritt bei einem Kurbelwellenwinkel von 42° nOT (Gitter 2stroke7).

6 Zusammenfassung und Ausblick

Ziel dieser Arbeit war es, ein Monte-Carlo-PDF-Modell für skalare Größen in drei Raumdimensionen in den Code KIVA-3 zu implementieren. Dieses statistische Modell schließt den mittleren chemischen Quellterm der Speziestransportgleichungen, welche zusammen mit den Navier-Stokes-Gleichungen zur Simulation turbulenter reaktiver Strömungen gelöst werden. Das dabei verwendete thermochemische System basiert auf einem ILDM-Modell. Die Validierung der entwickelten Methoden wurde an einem Zweitakt-Motor, welcher am Physikalisch Chemischen Institut der Universität Heidelberg experimentell untersucht wurde, durchgeführt.

Zu diesem Zweck wurde ein dreidimensionales Gitter des Motors mit ca. 75000 Zellen entwickelt. Damit wurden sowohl die ungezündete kalte Strömung als auch die reaktive Strömung instationär berechnet. Es wurde gezeigt, daß die implementierten Modelle die Flammenausbreitung und die thermochemischen Zustandsvariablen sehr gut beschreiben. Anschließend wurde der Massenbruch des Brennstoffes mit experimentellen Daten, welche aus laserinduzierter Fluoreszenz gewonnen wurden, verglichen. Dieser Vergleich zeigt im allgemeinen eine gute, unter Berücksichtigung der Optimierung der Gittergeometrie eine sehr gute Übereinstimmung.

Es konnte weiterhin festgestellt werden, daß der Flammenfortschritt von dem verwendeten Mischungsmodell und dem empirischen Zündmodell der ILDM-Methode abhängt. Letzteres beschreibt den Bereich kleiner Temperaturen, welcher durch die ILDM nicht definiert ist. Außerdem wird die Bewegung der Flamme durch das Geschwindigkeitsfeld der Strömung beeinflusst, welches wiederum wesentlich von der Geometrie des Systems — hier insbesondere der Überströmkanäle — abhängig ist. Weiterhin ist der Zylinderdruck abhängig von den Druckverhältnissen im Auslaßkanal und dessen Geometrie.

Im Folgenden soll auf mögliche Verbesserungen der implementierten Numerik und der verwendeten Modelle eingegangen werden: Die Partikelmethode wurde zunächst für geschlossenen Systeme entwickelt. Um die reaktive Strömung auch nach erneuter Öffnung des Auslaßkanals zu berechnen, wäre es sinnvoll, die Monte-Carlo-Technik auf offene Systeme zu erweitern. Dazu müßten Algorithmen zur Erzeugung und Vernichtung von Partikeln entwickelt werden. Außerdem besteht bei den thermodynamischen Annahmen, welche zur Kopplung des PDF-Modells mit dem CFD-Code gemacht wurden, weiterer Handlungsbedarf. Hierbei sollte die Temperaturabhängigkeit der spezifischen Wärmekapazitäten detaillierter berücksichtigt werden.

Schließlich soll nicht unerwähnt bleiben, daß ein druckabhängiges ILDM-Modell viele Detaillösungen der Kopplung zwischen PDF- und CFD-Code vereinfachen und die quantitative Validierung der Simulation weiterhin verbessern würde. Des weiteren ist die Anbindung eines geeigneten chemischen Modells für kalte Temperaturen, welche mittels der ILDM-Methode nicht zugänglich sind, sinnvoll. Hier könnte beispielsweise ein konventionell reduzierter Mechanismus wertvolle Dienste leisten. Letztendlich sollte ein ILDM-Mechanismus für den realen Brennstoff iso-Oktan entwickelt werden, um nicht auf den Modellbrennstoff Heptan ausweichen zu müssen.

Literatur

- [Amsden89] A.A. Amsden. KIVA-3 Manual. *Los Alamos, National Laboratory*. **1992**.
A.A. Amsden. KIVA-2 Manual. *Los Alamos, National Laboratory*. **1989**.
- [Amsden92] A.A. Amsden. Quelltext KIVA-3. *Los Alamos, National Laboratory*. **1992**.
- [Anand93] M.S. Anand, S.B. Pope, H.C. Mongia. PDF Calculations for Swirling Flows. *AIAA, 31st. Aerospace Science Meeting and Exhibit, Reno, NV*. **1993**.
- [Bilger89] R. W. Bilger. Turbulent Diffusion Flames. *Ann. Rev. Fluid Mech.* 21, 101-135, **1989**.
- [Bird60] R.B. Bird, W.E. Steward and E.N. Lightfoot. Transport Phenomena. *John Wiley and Sons*. **1960**.
- [Buschmann96] A. Buschmann, J. Wolfrum, U. Maas and J. Warnatz. Das Feuer im Computer und im Laserlicht. *Phys. Bl.* 3, 213-218, **1996**.
- [Borghini88] R. Borghini. Turbulent Combustion Modelling. *Prog. Energy. Combust. Sci.* 14, 245-292, **1988**.
- [Bronstein93] Bronstein. Taschenbuch der Mathematik. *Harry Deutsch Verlag*. **1993**.
- [Chen89a] J.-Y. Chen, W. Kollmann, R.W. Dibble. Pdf Modelling of Turbulent Non-premixed Methane Jet Flames. *Combust. Sci. and Tech.* 64, 315-346, **1989**.
- [Chen89b] H. Chen, S. Chen and R.H. Kraichnan. Probability Distribution of a Stochastically Advected Scalar Field. *Physical Review Letters*. 63(24), 2657-2660, **1989**.
- [Chen91] J.-Y. Chen and W. Kollmann. Mixing Models for Turbulent Flows with Exothermic Reactions. *Turbulent Shear Flows. Springer Verlag*. 7, 277-292, **1991**.
- [Christo96] F.C. Christo, A.R. Masri, E.M. Nebot and S.B. Pope. An Intergrated PDF/Neuronal Network Approach for Simulating Turbulent Reacting Systems. *Twenty-Sixth Symposium on Combustion/ The Combustion Institute*. **1996**.
- [Correa92] S.M. Correa and S.B. Pope. Comparison of Monte Carlo PDF/Finite-Volume Mean Flow Model With Bluff-Body Raman Data. *Twenty-Fourth Symposium on Combustion/ The Combustion Institute*. 279-285, **1992**.
- [Dahm95] W.J.A. Dahm, G. Tryggvason and M.M. Zhuang. Integral Method Solution of Time-Dependent Strained Diffusion-Reaction Equations with Multi-Step Kinetics. *SIAM Journal of Applied Mathematics*. **1995**
- [Dopazo73] C. Dopazo. Non-Isothermal Turbulent Reacting Flows. PhD Thesis. *State University of New York at Stony Brook*. **1973**
- [Dopazo79] C. Dopazo. Relaxation of Initial Probability Functions in the Turbulent Convection of Scalar Fields. *Physics of Fluids*. 22(1), 20-30, **1979**

- [Einecke98] S. Einecke, C. Schulz, V. Sick, A. Dreizler, R. Schießl and U. Maas. Two-Dimensional Temperature Measurements in an SI Engine using Two-Line Tracer LIF. *Society of Automotive Engineers*. **1998**.
- [Einecke99a] S. Einecke. Quantitative laserspektroskopische Charakterisierung von Temperatur- und Konzentrationsfeldern in einem Zweitakt-Ottomotor. Dissertation. *Physikalisch Chemisches Institut, Universität Heidelberg*. **1999**.
- [Einecke99b] S. Einecke. Persönliche Mitteilung. *Physikalisch Chemisches Institut, Universität Heidelberg*. **1999**.
- [Fließbach93] T. Fließbach. Statistische Physik. *B.I. Wissenschaftsverlag*. **1993**.
- [Fohrmann98] O. Fohrmann. Berechnung zweidimensionaler turbulenter reaktiver Strömungen mit vorangenen Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen. Diplomarbeit. *IWR, Universität Heidelberg*. **1998**.
- [Gill95] A. Gill. Modellierung der Verbrennung in einem Schichtlade-Motor unter Verwendung detaillierter chemischer Reaktionsmechanismen. Dissertation *ITV, Universität Stuttgart*. **1995**.
- [Golup89] G.H. Golub and C.F. van Loan. Matrix Computations. *The Hopkins University Press, Baltimore, London*. **1989**.
- [Gutheil88] E. Gutheil. Modellierung turbulenter Kohlenstoffmonoxid/Luft Diffusionsflammen. Dissertation *Phys. Chem. u. Chem. Techn., TH Darmstadt*. **1988**.
- [Hämmerle97] T. Hämmerle. Vergleich statistischer Modelle mit Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen (PDFs) bei der Simulation turbulenter Methan-Luft-Flammen. Diplomarbeit. *IWR, Universität Heidelberg*. **1997**.
- [HandbookChemPhys] Handbook of Chemistry and Physics. *CRC Press*.
- [Heywood89] J.B. Heywood. Internal Combustion Engine Fundamentals. *McGraw-Hill International Editions*. **1989**.
- [Homann75] K.H. Homann. Reaktionskinetik. *Steinkopf, Darmstadt*. **1975**.
- [Hulek96] T. Hulek and R.P. Lindstedt. Modelling of Unclosed Linear Terms in a PDF Closure for Turbulent Flames. *Mathl. Comput. Modelling*. 24, 8, 137-147, **1996**.
- [Hsu94] A.T. Hsu, Y.-L.P. Tsai and M.S. Raju. Probability Density Function Approach for Compressible Turbulent Reacting Flows. *AIAA Journal*. 32, 7, 1407-1415, **1994**.
- [ITV99] Die Grafik wurde bereitgestellt vom *Institut für Technische Verbrennung, Universität Stuttgart*. **1999**.

- [Jones72] W.P. Jones and B.E. Launder. The Prediction of Laminarisation with a Two-Equation Model of Turbulence. *International Journal of Heat and Mass transfer*. 15, 301-314, **1972**.
- [Jones87] W.P. Jones and W. Kollmann. Multi-Scalar Pdf Transport Equations for Diffusion Flames. *Turbulent Shear Flows, Springer*. 5, **1987**.
- [Jones88] W.P. Jones and R.P. Linstedt. Global Reaction Schemes for Hydrocarbon Combustion. *Combustion and Flame*. 73, 233-249, **1988**.
- [Jones93] W.P. Jones and M. Kahki. Pdf Modelling for the Prediction of Turbulent Diffusion Flames. *Prog. Anglo German Combustion Symposium*. 92-95, **1993**.
- [Jones96a] W.P. Jones and M. Kahki. Mathematical Modelling of Turbulent Flames. *Unsteady Combustion*. 411-491, **1996**.
- [jones96b] W.P. Jones and Y. Prasetyo. Probability Density Function Modelling of Premixed Turbulent Opposed Jet Flames. *Twenty-Sixth Symposium on Combustion/ The Combustion Institute*. **1996**.
- [Kolmogorov42] A.N. Kolmogorov. *Izv. Akad. Nauk. SSSR Ser. Phys*. 6, 56, **1942**.
- [Kosaly86] G. Kosaly. Theoretical Remarks on a Phenomenological Model of Turbulent Mixing. *Combustion Science and Technology*. **1986**.
- [Kraft96] M. Kraft, E. Stöckelmann and H. Bockhorn. Analysis of Wet CO Oxidation under Turbulent Non-Premixed Conditions using a PDF Method and Detailed Chemical Kinetics. *Twenty-Sixth Symposium on Combustion/ The Combustion Institute*. **1996**.
- [Lange97] M. Lange, U. Riedel and J. Warnatz. Direct Numerical Simulation of Turbulent Flames using Detailed Chemistry. *VDI Berichte*. 1313, 431-436, **1997**.
- [Launder72] B.E. Launder and D.B. Spalding. Mathematical Models of Turbulence. *Academic Press, London/ New York*. **1972**.
- [Laxander96] A. Laxander. Dissertation. *ICA, Universität Stuttgart*. **1996**.
- [Libby94] P.A. Libby and F.A. Williams. Turbulent Reacting Flows. *Academic Press, New York*. **1994**.
- [Maas92] U. Maas and S.B. Pope. Simplifying Chemical Kinetics: Intrinsic Low Dimensional Manifolds in Composition Space. *Combustion and Flame* 88, 239-264, **1992**.
- [Maas93] U. Maas. Automatische Reduktion von Reaktionsmechanismen zur Simulation reaktiver Strömungen. Habilitation. *ITV, Universität Stuttgart*. **1993**.
- [Masri96] A.R. Masri and S.B. Pope. A Mixing Model to Improve the PDF Simulation of Turbulent Diffusion Flames. *Twenty-Sixth Symposium on Combustion/ The Combustion Institute*. **1996**.

- [Mayer82] D.H. Mayer. Turbulenz, Durchbruch in einem lange ungelöstem Problem? *Phys.Bl.* 38,55-59 (Teil 1); 38 87-92 (Teil 2), **1982**.
- [Mühleck95] P. Mühleck. Numerische Simulation turbulenter, reagierender Strömungen in Brennkammern und Schubdüsen von Hyperschalltriebwerken. Dissertation. *DLR Forschungsbericht.* 95-18, **1995**.
- [Nau96] M. Nau, W. Neef, U. Maas, E. Gutheil, J. Warnatz. Computational and Experimental Investigation of a Turbulent Non-Premixed Methane Flame. *Twenty-Sixth Symposium on Combustion/ The Combustion Institute.* **1996**.
- [Nau97] M. Nau. Berechnung turbulenter Diffusionsflammen mit Hilfe eines Verfahrens zur Bestimmung der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen und automatisch reduzierter Reaktionsmechanismen. Dissertation. *ITV, Universität Stuttgart.* **1997**.
- [Niemann98] H. Niemann. Dissertation, in Arbeit. *IWR, Universität Heidelberg.* **1999**.
- [Nooren96] P.A. Nooren, H.A. Wouters, T.W.J. Peeters, D. Roekaerts, U. Maas and D. Schmidt. Monte Carlo PDF Simulation of a Turbulent Natural-Gas Diffusion Flame *Twenty-Sixth Symposium on Combustion/ The Combustion Institute.* **1996**.
- [Norris91] A.T. Norris and S.B. Pope. Turbulent Mixing Model Based on Ordered Pairing. *Combustion and Flame.* 83, 27-42, **1991**.
- [Norris96] A.T. Norris and S.B. Pope. Modeling of Extinction in Turbulent Diffusion Flames by the Velocity-Dissipation-Composition PDF Method. *Combustion and Flame.* 100, 211-220, **1995**.
- [NumRec89] W.H. Press. Numerical Recipes. *Cambridge University Press.* **1989**.
- [PDFCode99] C. Taut. Quelltext Monte-Carlo-PDF für KIVA. *IWR, Universität Heidelberg.* **1999**.
- [Poinso96] T. Poinso. Using Direct Numerical Simulations to Understand Premixed Turbulent Combustion. *26th Symp. (Int.) on Combustion, The Combustion Institute.* In Proc, **1996**.
- [Pope79] S.B. Pope. The Relationship between Probability Approach and Particle Models for Reaction in Homogeneous Turbulence. *Combustion and Flame.* 35, 41-45, **1979**.
- [Pope80] S.B. Pope. A Monte Carlo Method for the PDF Equations of Turbulent Reacting Flow. *Combustion Science and Technology.* 25, 159-174, **1981**.
- [Pope82] S.B. Pope. An Improved Mixing Model. *Combustion Science and Technology.* 28, 131-135, **1982**.
- [Pope85] S.B. Pope. PDF Methods for Turbulent Reacting Flows. *Prog. Energy. Combust. Sci.* 11, 119-192, **1985**.

- [Pope87] S.B. Pope. Turbulent Premixed Flames. *Ann. Rev. Fluid Mech.* 19, 237-270, **1987**.
- [Pope92] S.B. Pope. Particle Method for Turbulent Flows. *Journal of Computational Physics.* 117, 332-349, **1995**.
- [Prandl25] L. Prandl. Über die ausgebildete Turbulenz. *Zeitschrift für angewandte Mathematik und Mechanik* 5, 136, **1925**.
- [Prandl45] L. Prandl. Über ein neues Formelsystem der ausgebildeten Turbulenz. *Nachrichten der Gesellschaft der Wissenschaften Göttingen, Mathematisch-Physikalische Klasse* p.6, **1945**.
- [Raju95] M.S. Raju. Coupled Monte-Carlo-PDF/ Spray/ CFD Computations of Swirl-Stabilized Flames. *31st AIAA, Joint Propulsion Conference and Exhibit, San Diego.* **1995**.
- [Reitz95] R.D. Reitz and C.J. Rutland. Development and Testing of Diesel Engine CFD Models. *Prog. Energy Combust. Sci.* 21, 173-196, **1995**.
- [Reynolds89] W.C. Reynolds. The Potentials and Limitation of Direct and Large Eddy Simulation. *Wither Turbulence? Turbulence at Crossroads. Lecture Notes in Physics, Springer, New York.* p.313, **1989**.
- [Roedel94] W. Roedel. Physik unserer Umwelt, Die Atmosphäre. *Springer Verlag.* **1994**.
- [Sadat96a] S. Sadatsakkak. Berechnung Turbulenter Vormischflammen mit Hilfe einer erweiterten PDF-Transportgleichung. Dissertation. *Fakultät für Maschinenwesen, TH Aachen.* **1996**.
- [Sadat96b] S. Sadatsakkak and M. Schreiber. Computation of Premixed Turbulent Combustion using the Probability Density Function Approach. *Twenty-Sixth Symposium on Combustion/ The Combustion Institute.* **1996**.
- [Schmidt96] D. Schmidt. Modellierung reaktiver Strömungen unter Verwendung automatisch reduzierter Reaktionsmechanismen. Dissertation. *IWR, Universität Heidelberg.* **1996**.
- [Schramm99] B.Schramm. Erstellung reduzierter Reaktionsmechanismen und deren Anwendung bei der Simulation turbulenter Flammen. Diplomarbeit. *IWR, Universität Heidelberg.* **1999**.
- [Schuster84] H.G. Schuster. Deterministic Chaos. *Physik-Verlag, Weinheim.* **1984**.
- [Spalding70] D.B. Spalding. Mixing and Chemical Reaction in Steady Confined Turbulent Flames. *13th. Symp. (Int.) Comb., The Combustion Institute, Pittsburgh.* p. 649, **1970**.

- [Spalding71] D.B. Spalding. Concentration Fluctuations in a Round Turbulent Free Jet. *Chem. Energ. Sci.* 26, 95-107, **1971**.
- [Spurk96] J. Spurk. Strömungslehre. *Springer Verlag*. **1996**.
- [Taut99] C. Taut, H. Niemann, B. Schramm and J. Warnatz. Simulation motorischer Verbrennung mittels Monte-Carlo-PDF-Methoden in drei Raumdimensionen. *Motorische Verbrennung - aktuelle Probleme und moderne Lösungsansätze (IV. Tagung, Essen); Berichte zur Energie- und Verfahrenstechnik; Hrsg.: Prof. Dr.-Ing. A. Leipertz*. 99.1, 335-344, **1999**.
- [Valino90] L. Valino and C. Dopazo. A Binomial Sampling Model for Scalar Turbulent Mixing. *Physics of Fluids A*. 2(7), 1204-1212, **1990**.
- [Valino98] L. Valino. A Field Monte Carlo Formulation for Calculating the Probability Density Function of a Single Scalar in a Turbulent Flow. *Flow, Turbulence and Combustion*. 60, 157-172, **1998**.
- [Warnatz93] J. Warnatz. Modelling and Simulation of the Combustion Processes Including Detailed Chemical Reaction Mechanisms. *The Combustion Institute, Joint Meeting of the British and German Sections Queens' College. The British Section of the Combustion Institute*. **1993**.
- [Warnatz96] J. Warnatz, U. Maas, R.W. Dibble. Combustion. *Springer*. **1996**.
- [Warnatz98] J. Warnatz. Persönliche Mitteilung. *IWR, Universität Heidelberg*. **1998**.
- [Westbrook84] C.K. Westbrook and F.L. Dryer. Chemical Kinetic Modeling of Hydrocarbon Combustion. *Prog. Energy Combust. Sci.* 10, 1-57, **1984**.
- [Wölfert96] A. Wölfert. Verwendung von PDF-Methoden zur Modellierung turbulenter reaktiver Strömungen. Dissertation. *ITV, Universität Stuttgart*. **1996**.
- [Yakhot92] V. Yakhot, S.A. Orszag, S. Thangam, S. Gatski, T.B. and C.G. Speziale. Development of Turbulence Model for Shear Flows by Double Expansion Technique. *Phys. Fluids*. 4, 1510, **1992**.
- [Zurbach97] S. Zurbach, D. Garreton and M. Kanniche. Validation of a Monte Carlo Method Using Joint PDF of the Composition and an ILDM Kinetic Model for the Prediction of Turbulent Flames. *Department Laboratoire National d'Hydraulique, Groupe Mecanique des Fluides Industrielle, F-78401 Chatou Cedex*. **1997**.

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich all jenen danken, die zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben:

Prof. Dr. Dr. h.c. Jürgen Warnatz nahm mich in seiner Arbeitsgruppe auf und bot mir diese hochinteressante Aufgabenstellung an. Zusammen mit Dr. Olaf Deutschmann als Betreuer bekam ich stets Unterstützung und Hilfestellung in jeder nur denkbaren Hinsicht. Des weiteren übernahm Prof. Dr. Bernhard Schramm die Aufgabe des zweiten Gutachters.

Till Katzenmeier und Maren Thiele halfen mir unermüdlich bei allerlei Problemen in der digitalen Welt. Außerdem waren sie zusammen mit Daniel Chatterjee, Guido Miesen, Jürgen Sojka und dem Rest der Arbeitsgruppe Partner vieler fesselnder Diskussionen. Holger Niemann und Berthold Schramm legten das chemische Fundament meiner Arbeit und lieferten die benötigten ILDM-Tabellen. Prof. Dr. Eva Gutheil gab mir gern Hilfestellung in Sachen Statistik und vorangemommener PDFs. Dr. Miles Elsdon zeigte mir die ersten Gehversuche mit dem Programm KIVA.

Besonderen Dank möchte ich an dieser Stelle Dominik Schlotz und Elke Salzner für ihren steten Beistand und eine sehr schöne Freundschaft aussprechen.

Weiterhin klärten Prof. Dr. Ulrich Maas, Dr. Andreas Dreizler, Roland Bender und Robert Schießl vom Institut für Technische Verbrennung der Universität Stuttgart meine Fragen rund um die PDFs und den Zweitakt-Motor. Die experimentellen Daten und Grundlagen vermittelte mir Dr. Svenja Einecke vom Physikalisch Chemischen Institut der Universität Heidelberg in hervorragender Zusammenarbeit.

Last but not least danke ich ganz herzlich meiner Frau Sandra, meinen Eltern und meinen Schwiegereltern für die liebevolle Unterstützung und die Geduld während meiner Arbeit.

Erklärung:

Hiermit versichere ich, daß ich die Arbeit selbständig verfaßt und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel verwendet habe.

Heidelberg, den

Christian Taut