

3 Aufgabenstellung

In Kapitel 2 wurde deutlich, dass die Bestimmung der chemischen Reaktion in turbulenten Strömungen sehr viele verschiedene Aspekte beinhaltet, die während der Simulation berücksichtigt werden müssen. Praxisnahe Anwendungsfälle zeichnen sich oft durch eine hohe geometrische Komplexität aus. Dies stellt hohe Anforderungen an die Qualität des Rechenetzes. Die größeren, derzeit beim DLR in der Brennkammer angewandten Netze besitzen ein Rechengitter von etwa 500000 bis 1000000 Punkten. Für praxisnahe Geometrien ist aber auch das Zehnfache dieser Punktzahl denkbar. Ferner gewinnt die Simulation instationärer Prozesse zunehmend an Bedeutung, so dass neben der hohen räumlichen Auflösung auch mehr Iterationsschritte benötigt werden. Auch bei der Beschreibung der Turbulenz werden immer komplexere Modelle benutzt, da das einfache Standard-k- ϵ -Modell in vielen Fällen zu ungenauen Ergebnissen liefert.

Neben den erhöhten Anforderungen bei der Beschreibung der turbulenten Strömung werden die Forderungen an die Berechnung der chemischen Reaktion immer größer. Auf Grund der Optimierung von Brennkammern in Richtung geringerer Schadstoffproduktion sollen Verlöscheffekte und Zündinstabilitäten an Hand numerischer Betrachtungen untersucht werden können. Hierzu reichen die bisher verwandten Gleichgewichtsmodelle nicht mehr aus. Statt dessen ist man bestrebt, immer weitgehendere reduzierte Mechanismen zu entwickeln, welche in der Anwendung sehr viel Rechenzeit in Anspruch nehmen. Durch die Simulation technisch relevanter Feuerungen werden die kinetischen Systeme, die benötigt werden, immer umfangreicher. Die Verbrennung von Kerosin wird mittlerweile schon durch mehrere Hundert Reaktionsgleichungen beschrieben [Frenklach-Group,1999].

Die Kopplung der Berechnung der chemischen Reaktion mit der turbulenten Strömung stellt wohl den größten Anteil der Vergrößerung der Rechenzeiten dar. Wie in Kapitel 2.2.4 dargestellt, muss die Lösung der chemischen Systeme mit den Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen ihrer Einflussparameter gewichtet werden (vgl. Gleichung (2.38)). Die erhöhte Anzahl von Einflussparametern führt zu einer mehrdimensionalen Integration. Jeder Einflussparameter mehr erhöht die Dimension der Integration um eins. So kommt es, dass hier der Rechenzeitbedarf mit der Anzahl der die chemische Reaktion beschreibenden Größen exponentiell ansteigt. Neben der erhöhten Anzahl von Einflussparametern, die sich durch die Bestimmung von Nicht-Gleichgewichts-Effekten ergeben, sind auch Korrelationen der Einflussparameter untereinander von Interesse. Bisher wurden die Einflussparameter meist als statistisch unabhängig angenommen. Durch die Möglichkeit der zeitlich aufgelösten, simultanen Bestimmung mehrerer Spezies [vgl. Kapitel 6] ist bekannt, dass diese Annahme nur bedingt richtig ist. Daher ist man bestrebt, auch die statistische Abhängigkeit mit zu berücksichtigen.

Neben der Beschreibung der chemischen Reaktion wird auch die Modellierung anderer physikalischer Phänomene immer komplexer. Hier sind beispielsweise die Beschreibung der Zerstäubung des Sprays oder die Mitberücksichtigung der Wellenlängenabhängigkeit der Wärmestrahlung zu nennen.

Aus dieser Betrachtung wird deutlich, dass die Simulation turbulenter Verbrennungsprozesse in praxisnahen Anwendungsfällen schnell die Grenzen des Machbaren erreicht. Selbst Hochleistungsrechner vermögen es nicht mehr, diese Probleme in angemessenen Rechenzeiten zu bewältigen. Daher werden in dieser Arbeit Wege aufgezeigt, wie die Rechenzeit reduziert werden kann, ohne allzu große Einbußen in der Genauigkeit des Ergebnisses hin-

nehmen zu müssen. Hierzu werden zwei Lösungsmöglichkeiten gefunden werden, die die Rechenzeit insgesamt um mehrere Größenordnungen reduzieren:

a) Vorwegnahme von Berechnungen im Preprozessing

Während der Berechnung der Chemie-Turbulenz-Interaktion gibt es einige Berechnungen, die nur von wenigen Parametern abhängen, aber immer wieder gleich ablaufen. Anstatt die Berechnung während der Strömungsberechnung immer wieder durchzuführen, werden diese Berechnungen im Preprozessing, d.h. vor Ablauf der eigentlichen Strömungssimulation durchgeführt und deren Lösungen in Abhängigkeit ihrer beeinflussenden Parameter in Tabellenwerken abgelegt. Es werden alle Kombinationen von Einflussparametern vorher berechnet, von denen man vermutet, dass sie tatsächlich in der Strömungsberechnung benötigt werden. Während der Simulationsrechnung wird dann die benötigte Lösung aus den schon erzeugten Ergebnissen mit ähnlichen Einflussparametern interpoliert.

Diese Vorgehensweise wurde bisher beispielsweise bei der Bestimmung des Gleichgewichtszustandes angewandt. Dieser hängt bei adiabater, isobarer Verbrennung nur noch von der atomaren Zusammensetzung ab. Bei der Annahme einer Lewiszahl von eins kann die atomare Zusammensetzung bei bekannten Randbedingungen aus dem Mischungsbruch bestimmt werden. Der Gleichgewichtszustand hängt nun nur noch von einer Größe ab und kann in Abhängigkeit dieser Variable tabelliert werden.

Verfeinerte Chemiemodelle hängen von weitaus mehr Parametern ab. Dies erhöht die Anzahl der Dimensionen und damit die Anzahl der abzulegenden Punkte drastisch. Daraus folgt, dass der Speicherbedarf und die Zugriffszeiten auf die Tabelle schon bei geringer Anzahl von Dimensionen stark anwachsen. Es muss also ein geeignetes Tabellierungsverfahren gefunden werden, welches den hohen Anforderungen n-dimensionaler Datenablage genügt. Ein solches Tabellensystem wird im Rahmen dieser Arbeit vorgestellt.

b) Reduzierung der Rechenzeiten durch vereinfachte PDF-Formen

Ein wesentlicher Anteil der Rechenzeit bei der Bestimmung der Interaktion zwischen turbulenter Strömung und chemischer Reaktion wird bei der Mittelung der Quellterme der chemischen Reaktion über die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen ihrer Einflussparameter benötigt. Es handelt sich wiederum um ein mehrdimensionales Problem dessen Rechenzeit mit Hinzunahme weiterer Dimensionen exponentiell anwächst [vgl. Kapitel 2.4.4].

Bei Presumed-PDF-Methoden werden in der Regel Gauß- oder β -Verteilungen zur Beschreibung der Wahrscheinlichkeitsdichte herangezogen, da diese für realistische PDF's in vielen Fällen eine ausreichende Approximation darstellt. Diese PDF-Formen besitzen allerdings den Nachteil, dass sie eine Vielzahl von Stützstellen zur genauen Integration benötigen, was einen hohen Rechenzeitbedarf zur Folge hat. Daher wird im Rahmen dieser Arbeit untersucht, ob und wenn ja, in welchem Fall diese kontinuierlichen PDF-Formen durch eine einfacher zu bestimmende Delta-Funktion ersetzt werden kann.

Für diese Untersuchung werden zeitlich aufgelöste Messungen von Spezies und Mischungsbruch detailliert ausgewertet werden. Es werden die Lösungen der Integration von verschiedenen Kombinationen der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen verglichen. Es sollen Regeln abgeleitet werden, in welchem Fall es legitim ist, eine kontinuierliche Verteilung durch diskrete Peaks anzunähern. Ferner wird die Annahme der statistischen Unabhängigkeit überprüft.

Um praxisnahe Brennkammern berechnen zu können, genügt es nicht, lediglich die Kenntnis der möglichen Vereinfachungen zu besitzen. Es muss auch möglich sein, die gefundenen Vereinfachungen anwenden zu können. In der Zukunft werden noch viele weitere Methoden gefunden werden, Rechenzeit in Abhängigkeit der gerade vorliegenden physikalischen Bedingungen reduzieren zu können. Daher muss eine Möglichkeit geschaffen werden, flexibel während der Strömungsberechnung zwischen verschiedenen Lösungsstrategien wählen zu können. Dies bedarf eine modularen Struktur des Programm-Codes zur Bestimmung der chemischen Quellen. Im Rahmen dieser Arbeit wird eine Struktur entwickelt, die den Anforderungen der Zukunft gerecht werden soll. Das System soll flexibel für weitere Modelle erweiterbar sein. Es sollte einem hohen Standard in der Qualitätssicherung genügen und es muss möglich sein, Ideen zur Rechenzeitreduktion mit geringem Zeitaufwand austesten und realisieren zu können.

Das entwickelte Chemie-Modul soll die Basis für weitere Entwicklungen darstellen. Den bisherigen Modellen zur Bestimmung von chemischen Reaktionen wird die ILDM-Methode zur Bestimmung von Nicht-Gleichgewichts-Effekten hinzugefügt werden. Das gesamte System findet daraufhin bei der Berechnung einer komplexen Versuchsbrennkammer erstmals Anwendung.

4 Entwicklung eines Chemie-Moduls

Im Kapitel 2 und Kapitel 3 wurde beschrieben, wie chemische Reaktionen in Verbindung mit turbulenten Strömungsprozessen modelliert werden. Es wurde deutlich gemacht, wie viele verschiedene Aspekte hierbei zum Tragen kommen. Diese Komplexität stellt hohe Anforderungen an das Programm-System. Zum einen führt die Vielzahl von ineinander geschichteten Rechenoperationen zu einem sehr hohen Rechenzeit- und Speicherbedarf, zum anderen wird eine flexible Organisationsstruktur der Programmroutinen notwendig, um Erweiterbarkeit und Qualitätssicherung des Chemiemoduls zu gewährleisten.

Im Rahmen dieser Arbeit wurde ein Chemie-Modul entwickelt, das den Anforderungen, wie sie in Kapitel 3 aufgelistet wurden, genügt.

4.1 Organisationsstruktur der Chemie-Routinen im Chemie-Modul

In den letzten Jahren wurde eine Fülle von verschiedenen Methoden entwickelt, um chemische Reaktionen in Brennkammern zu berechnen. Hier mischen sich verschiedenste Modelle zur Bestimmung der chemischen Quellen mit den vielen Ansätzen für die Modellierung der Turbulenz-Chemie-Interaktion. Die meisten Codes haben ihre Schnittstellen meist aus historischen Gründen wenig allgemein gehalten, so dass Erweiterungen in den Chemiemodellen nur mit hohem Programmieraufwand getätigt werden können. Dabei wäre es eine besondere Stärke eines Codes, wenn er flexibel, in Abhängigkeit von der Problemstellung, einfach zwischen verschiedensten Modellen wählen könnte. Ferner ist es wichtig, dass die Einzelkomponenten der Chemie-Modelle schnell ausgetauscht werden können, ohne an vielen Stellen des Codes eingreifen zu müssen.

Die geforderte Flexibilität geht noch weiter: Mit Chemie-Modellen, die die Turbulenz berücksichtigen, stößt man immer wieder an die Grenzen der zur Verfügung stehenden Rechenzeit. Je mehr Rechenzeit in Anspruch genommen wird, desto weniger Effekte können gleichzeitig behandelt werden. Nun hängt es jedoch von den lokalen Bedingungen in der Brennkammer ab, ob ein umfangreicheres Chemiemodell wirklich bessere Ergebnisse liefert. Es ist also wünschenswert, dass während der Rechnung flexibel entschieden werden kann, welches Verbrennungsmodell für die Berechnung der chemischen Quellterme herangezogen wird. Aus dieser Forderung ergibt sich eine modulare Organisationsstruktur der Chemieroutinen, welche in diesem Kapitel näher erläutert wird.

Bild 4.1.1 zeigt den grundsätzlichen Programmablauf, der zur Berechnung von turbulenten reagierenden Strömungen notwendig ist.

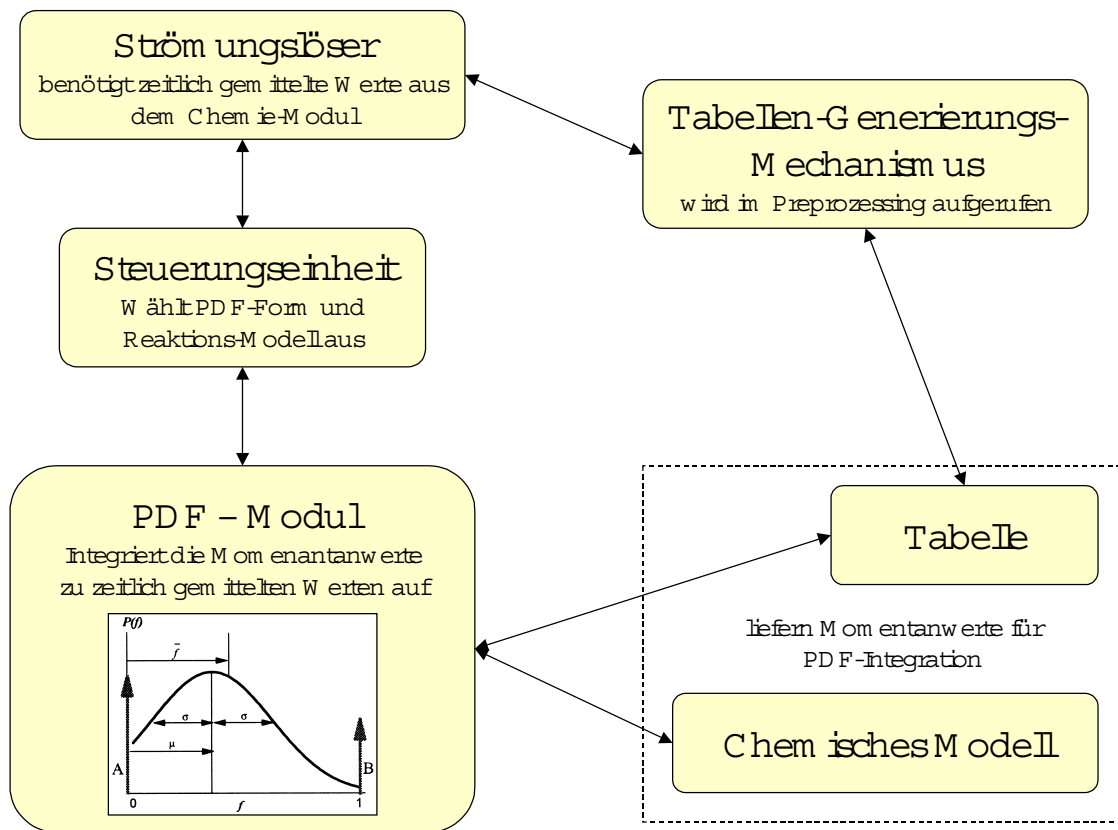


Bild 4.1.1 Grundsätzlicher Ablauf einer turbulenten Verbrennungsrechnung (1)

In der hier vorliegenden Arbeit wurden alle Programmteile bis auf den Strömungslöser nach den oben genannten Forderungen neu entwickelt. Zu Beginn einer Verbrennungsrechnung ruft der Strömungslöser den Tabellen-Generierungs-Mechanismus auf. Dieser erstellt alle für die Chemie notwendigen Tabellen. Die Daten, die die Tabelle enthalten soll, werden vom entsprechenden chemischen Modell geliefert. Hierzu zählen beispielsweise Routinen für die Berechnung des chemischen Gleichgewichtszustandes oder Routinen für das Auslesen von Teilbereichen großer ILDM-Tabellen. Die Struktur der Tabellen wird ausführlich in Kapitel 4.2 behandelt.

Sobald alle Tabellen vorhanden sind, beginnt die Strömungsrechnung. Einmal pro Strömungs-Zeitschritt wird die Steuereinheit des Chemie-Modul aufgerufen. Dieses wählt in Abhängigkeit der Eingabegrößen das geeignete Modell und ruft dieses auf. Da nicht jeder Strömungslöser die gleichen Größen als Lösung der Chemie erwartet, ist die Steuereinheit auch die (einzige) Stelle im Chemie-Modul, in die eingegriffen werden muss, wenn das Modul an andere Strömungslöser als den in dieser Arbeit verwendeten CFD-Code TRUST (Schütz et al., 1997) angeflanscht werden soll.

Bei einer turbulenten Verbrennung wird standardmäßig erst das PDF-Modul aufgerufen. Hier findet die zeitliche Mittelung der chemischen Quellen nach Gleichung (2.46) statt. Es stehen bisher zwei Formen für die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion zur Verfügung, nämlich die Delta-Funktion und die abgeschnittene Gauß-Verteilung (vgl. Kapitel 2.2.4). Durch die einfache modulare Struktur der Routinen ist es ohne großen Programmieraufwand möglich, weitere Formen einzufügen. Das PDF-Modul benötigt nun für jede Integrationsstützstelle die Lösungen der chemischen Berechnung. Diese werden entweder direkt von einem

chemischen Modell geliefert oder aus den im Preprocessing erstellten Tabellen interpoliert. Da der Zugriff auf die Lösung des chemischen Systems extrem oft getätigt werden muss, ist es sinnvoll, so viele Daten wie möglich in Tabellen abzulegen, da die Interpolation um Größenordnungen schneller eine Lösung liefert als die direkte Berechnung über chemische Zusammenhänge.

Der Grund, weshalb die Rechenzeit der Chemie bei komplexeren Modellen drastisch anwächst, begründet sich aus der Mehrdimensionalität des Problems [siehe Gleichung (2.46)]. Dies hat zur Folge, dass viele Routinen durch ineinandergeschachtelte Schleifen extrem oft aufgerufen werden müssen. Bild 4.1.2 veranschaulicht, wie sich bei Zuschaltung weiterer Dimensionen die Rechenzeit drastisch erhöht.

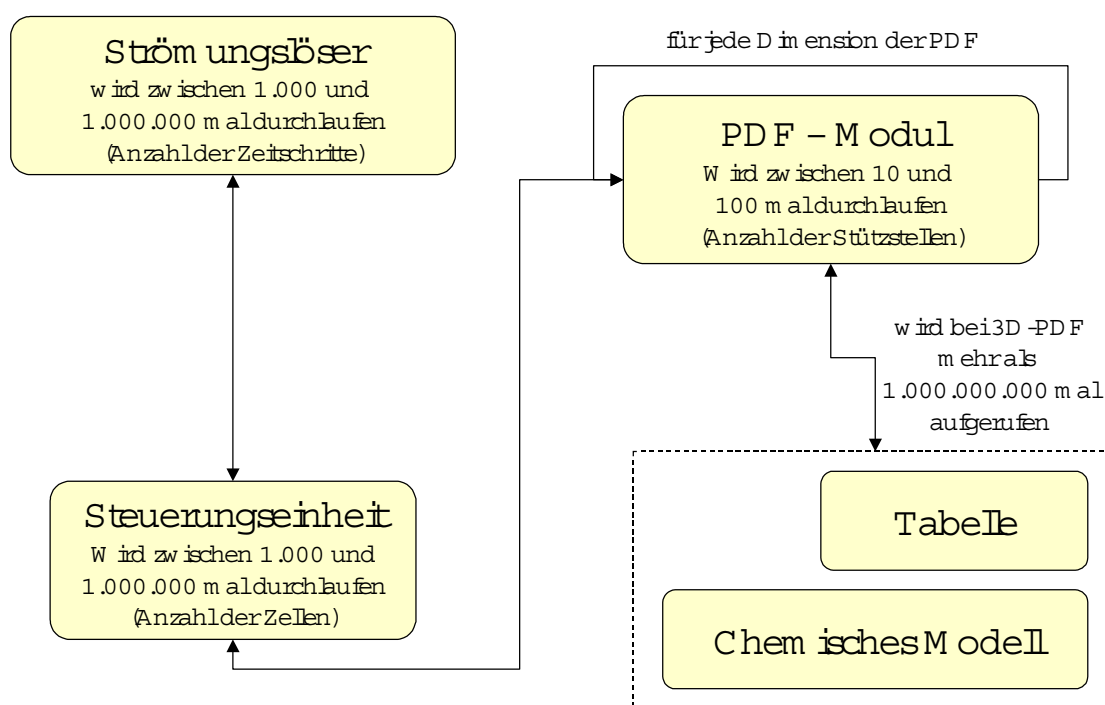


Bild 4.1.2 Grundsätzlicher Ablauf einer turbulenten Verbrennungsrechnung (2)

Die Anzahl des Auslesens der chemischen Daten zeigt deutlich, dass schon bei Anwendungsfällen mittlerer Größen die Grenzen der zur Verfügung stehenden Rechenzeit erreicht werden.

Bisher wurde die vollständige Vorgehensweise zur Beschreibung der Gleichung (2.46) dargestellt. An Hand physikalischer Betrachtungen ist es jedoch möglich, in vielen zu berechnenden Punkten den vollständigen Weg abzukürzen, so dass die Rechenzeit dadurch erheblich minimiert werden kann. Oft kann ein einfacheres Modell gewählt werden, welches mit deutlich geringerem Aufwand ausreichend genaue Ergebnisse liefert. Das bedeutet, dass während der Berechnung immer wieder zwischen verschiedenen Berechnungsmethoden hin- und hergeschaltet wird. So kann beispielsweise in Gleichgewichtsnähe von der ILDM-Methode auf das einfache Gleichgewichtsmodell geschaltet werden oder bei extrem schmalen PDF's anstatt der vollständigen Integration der PDF direkt der Wert an der Stelle des Mittelwertes als Lösung genommen werden. Hierdurch ergeben sich eine Vielzahl von in der Verbrennungsrechnung möglichen Lösungswegen. Möchte man alle diese Wege im Verbrennungscode berücksichtigen erreicht das Programm bei herkömmlicher sequentieller

Programmierung eine wesentlich zu hohe Komplexität. Durch die Undurchsichtigkeit des resultierenden Programmcodes wird das Programm zunehmend fehleranfällig und nur noch sehr schwer verständlich. Es muss also eine Struktur für das Programm gefunden werden, die es noch überschaubar hält und dennoch alle geforderten Kombinationen von Lösungsmöglichkeiten ermöglicht.

Ein Ansatz hierfür liefern die Theorie der objektorientierten Programmierung [Knobloch & Seeboeger-Weichselbaum,1997], in dem ein Datensatz (hier der Lösungsdatensatz) durch Werkzeuge (hier Reaktions-Modelle, Integrations-Modelle) bearbeitet wird. Diese Programmiermethoden haben den Vorteil, dass auch komplexe Strukturen sehr übersichtlich abgebildet werden können. Der Nachteil, der durch die Allgemeingültigkeit der einzelnen Routinen entsteht, liegt in den höheren Rechenzeit.

Das Chemie-Modul wurde in Fortran 90 programmiert. Obwohl es sich um eine sehr moderne Programmiersprache handelt, lässt diese Sprache eine Programmierung im klassischen objektorientierten Ansatz nicht zu. Jedoch konnten hiermit gewisse Grundsätze dieser Idee in einer einfachen Form nachprogrammiert werden, so dass ein gut organisiertes System entstand, welches immer noch in adäquaten Rechenzeiten verarbeitet werden kann.

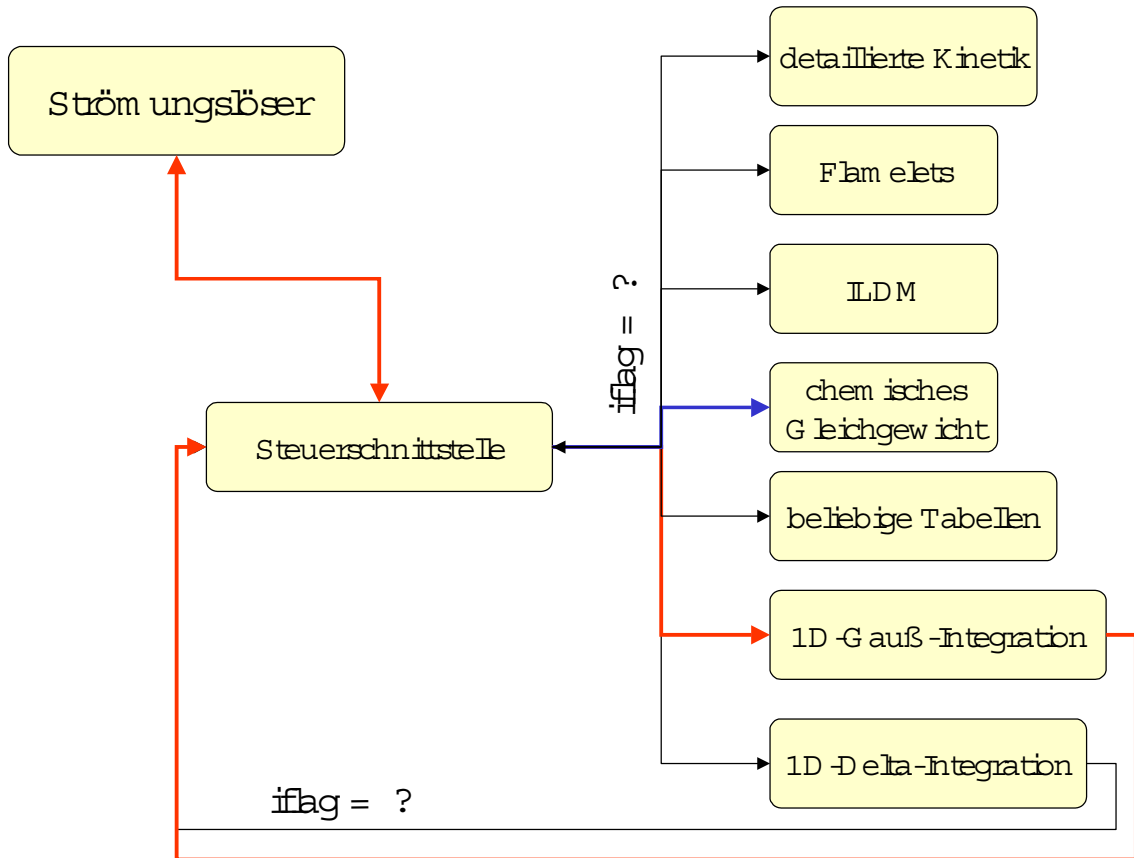
Vier Grundgedanken liegen der Struktur des Chemie-Moduls zu Grunde:

- Eine Steuerschnittstelle dient als Schaltzentrale zwischen allen Teilmodellen. Sie fordert die einzelnen Berechnungsmethoden an, um den Lösungsdatensatz zu bearbeiten.
- Die Teilmodelle liegen in einer möglichst allgemeinen und modularen Form vor. Sie besitzen genau einen Ein- und einen Ausgang für die Eingabe- und Ausgabefelder. Werden Ergebnisse anderer Modelle benötigt, dann wird nur die Steuerschnittstelle aufgerufen.
- Die Eingabe- und Ausgabefelder sind standardisiert, so dass zu jedem Zeitpunkt im Programm alle Informationen zur Verfügung stehen.
- Die Teilmodelle liegen vollkommen gleichberechtigt nebeneinander vor: Es besteht formal kein Unterschied zwischen Modellen, die die chemische Reaktion beschreiben und Modellen, die die Fluktuation beschreiben.

Gesteuert wird das Chemie-Modul über flags. Die Aufrufe der Routinen sind gleicher Struktur und unterscheiden sich nur in der Wahl der flags. Mitgeführte Integer-Felder geben zu jedem Zeitpunkt der Berechnung Aufschluss darüber, wo man sich befindet und wo Fehler aufgetreten sind.

Bild 4.1.3 zeigt eine Übersicht über die Struktur der Chemie-Routinen. Der flag entscheidet bei Eingang in die Steuerschnittstelle, welches Modell als nächstes aufgerufen wird. Ferner ist beispielhaft der Verlauf der einfachen Gleichgewichtsrechnung mit Mischungsbruch-Fluktuation dargestellt. Zuerst wird der rot markierte Weg verfolgt, dann der Blaue.

”



*Bild 4.1.3 Struktur des Chemie-Moduls
(farbig: Vorgehensweise bei einer Gleichgewichtsrechnung
mit Mischungsbruch-Fluktuation)*

Die Schnittstelle wird während der Berechnung vielfach von den einzelnen Modulen mit immer demselben Eingabe-Feld aufgerufen. Durch einen mitübergebenen Steuerungs-Parameter wird in der Schnittstelle entschieden, in welches Modul der Datensatz zur weiteren Berechnung weitergeleitet werden muss.

Diese Organisationsstruktur liefert folgende Vorteile:

- **Erweiterbarkeit:**
Es können beliebig viele Integrationsformen und Reaktionsmodelle eingebunden werden, ohne dass ein hoher Programmieraufwand entsteht.
- **Flexibilität:**
Es können physikalisch motivierte Strategien leicht implementiert und ausgetestet werden, in denen in Abhängigkeit des Eingabe-Feldes verschiedene Integrations- oder Reaktionsmodelle aufgerufen werden. So kann sehr flexibel Rechenzeit eingespart werden. Ziel ist es, immer nur so komplex wie gerade notwendig zu rechnen.
- **Qualitätssicherung:**
Die Programmstruktur ist trotz ihrer vielfältigen Möglichkeiten einfacher zu durchschauen. Dadurch wird die Fehleranfälligkeit auch bei Änderungen des Systems herabgesetzt.

Zum Abschluss des Kapitels sei noch erwähnt, dass die obengenannte Vorgehensweise natürlich auch Nachteile gegenüber einer sequentiellen Programmstruktur bringt. Die objektorientierte Programmieretechnik hat eine Verlangsamung des Codes zur Folge. Durch die Vielzahl von Verzweigungen kann der Compiler in Schleifen nicht so optimieren, wie es bei unverzweigten Routinen der Fall ist. Jedoch sind die Felder, die ständig übergeben werden, sehr klein gehalten, so dass sie größtenteils im schnellen Cache-Speicher gehalten werden. Im Rahmen dieser Arbeit wurde festgestellt, dass auch die dynamische Speicherplatzbelegung kaum Rechenzeitverluste mit sich bringt.

Das hier entwickelte Konzept ist nach der Maßgabe der Erweiterbarkeit, Modell-Flexibilität und Qualitätssicherung programmiert worden. Aus der rasanten Entwicklung der Rechner-Hardware und der Probleme, die sich in der Vergangenheit aus unübersichtlichen Programm-Modulen ergaben, erweist es sich aus Sicht dieser Arbeit als sinnvoll, zu Gunsten einer modularen Programm-Struktur Einbußen in der Rechengeschwindigkeit zu tolerieren.

4.2 Optimierte Datenspeicherung

Würden alle Rechenoperationen, die für die Berechnung der chemischen Quellterme notwendig sind, stets online während der Strömungssimulation durchgeführt, so würde der Rechenzeitbedarf für die chemische Reaktion die des Strömungslösers um mehrere Größenordnungen überschreiten. Da dies für praxisrelevante Anwendungsfälle nicht praktikabel ist, ist es notwendig, so viele Rechenoperationen wie möglich ins Preprozessing zu verlagern und die Lösung dieser Berechnungen in Tabellensystemen abzuspeichern. Alle Größen, die in der Strömungsberechnung immer wieder berechnet werden und von nur wenigen Parametern abhängen, werden nur einmal berechnet. Während der Strömungsberechnung werden dann die benötigten Lösungen aus den abgespeicherten Werten interpoliert.

Ein einfaches Beispiel hierfür ist die Lösung der Gleichgewichtsberechnung. Der thermodynamische Zustand und die Spezies-Konzentrationen hängen im chemischen Gleichgewicht bei konstanten Zuströmbedingungen lediglich vom Mischungsbruch ab. Bei Vergleichsrechnungen wurde im Rahmen dieser Arbeit festgestellt, dass ein Tabellenzugriff in einer eindimensionalen Tabelle etwa 100.000 mal schneller die Gleichgewichtszusammensetzung

liefert, als das bei deren Online-Berechnung mit einem Gleichgewichtskonstantenverfahren mit etwa elf Reaktionsgleichungen der Fall ist. Eine solche Gleichgewichtstabelle beinhaltet bei ausreichender Interpolationsgenauigkeit etwa 100 Stützstellen und benötigt daher kaum Speicherplatz. Damit kann die Rechenzeit der Strömungsberechnung mit Chemie durch Benutzung einer Tabelle drastisch reduziert werden.

Eine weitere Beschleunigung bei turbulenter Gleichgewichtsverbrennung wird erreicht, wenn auch noch die Integration über die Mischungsbruch-PDF ins Preprocessing vorgezogen wird. Auch hier gilt, dass die Berechnung immer in der gleichen Art typischerweise von nur zwei Parametern abhängt. Mittelwert und Standardabweichung des Mischungsbruchs ergeben die Form der PDF. Der Mischungsbruch alleine liefert wiederum die zugehörigen momentanen Gleichgewichtszusammensetzungen an den Stützstellen der PDF-Integration. Es ergibt sich eine zweidimensionale Tabelle, welche etwa 5000 Stützstellen benötigt und in der Zugriffszeit nur unwesentlich langsamer ist als die reine Gleichgewichtstabelle. Legt man für die ausreichend genaue Integration der Gauß-PDF etwa zehn Stützstellen zu Grunde, so ergibt sich hier schon eine Beschleunigung der Rechenzeit gegenüber der Online-Chemie-Berechnung von etwa 1:1000000.

Weiterführende Chemie-Modelle, wie die Joint-PDF-Methoden (vgl. Kapitel 2.1 und Kapitel 2.4), hängen von mehr als zwei Variablen ab. Die in der vorliegenden Arbeit verwendeten Methan-ILDM-Tabellen benötigen zur Bestimmung der Zusammensetzung neben dem Mischungsbruch auch noch zwei Fortschrittsvariablen, nämlich CO_2 und H_2O . Das heißt, dass alleine die Bestimmung eines Momentanwertes schon eine dreidimensionale Tabelle benötigt. Die Integration ist in diesem Fall auch dreidimensional. Die Anzahl der benötigten Stützstellen für die Integration über die PDF steigt mit Hinzunahme jeder weiteren Integrationsrichtung exponentiell an. Bei nur zehn Stützstellen pro Integrationsrichtung wären etwa 1000 Tabellenzugriffe auf die Momentanwerte für die Integration notwendig.

Daher ist man auch hier bestrebt, wenigstens einen Teil dieser Integration durch Tabellierung zu vereinfachen. Daraus ergäbe sich für die adiabate, isobare Methanverbrennung eine sechsdimensionale Tabelle mit den Input-Parametern der Mittelwerten und Varianzen des Mischungsbruchs, CO_2 und H_2O .

Bei 100 Stützstellen in jede der sechs Richtungen ergeben sich 10^{12} Tabellenpunkte mit jeweils etwa 15 Werten für die Zusammensetzung. Dies ist in der Praxis kaum realisierbar. Da in Zukunft bei komplexeren Problemstellungen eher noch mehr Parameter - wie beispielsweise die Enthalpie bei nichtadiabaten Problemstellungen - benötigt werden, muss die Datenablage so optimal wie möglich organisiert sein.

Aus dieser Betrachtung ergibt sich folgender Forderungskatalog für ein geeignetes Tabellensystem:

- Optimierung des Speicherbedarfs
- Optimierung der Zugriffszeit
- Flexibilität der Datenstrukturen, um Nutzbarkeit für andere Problemstellungen zu gewährleisten
- hohe Anzahl der möglichen Dimensionen
- einfache Bedienung
- automatische Behandlung fehlerhaft berechneter Punkte, wie beispielsweise Lösungsaussetzer in der Gleichgewichtsberechnung
- allgemein gehaltener Programm-Code, um Portabilität in andere Codes und Qualitätssicherung zu gewährleisten

Im Folgenden wird das Tabellensystem vorgestellt, welches im Rahmen dieser Arbeit für jegliche Art der Datenspeicherung verwandt und nach dem oben genannten Forderungskatalog entwickelt wurde.

Die Tabellierung von numerischen Daten weist zwei Grundprobleme auf. Zum einen muss bekannt sein, wie dicht das Netz von Stützstellen sein muss, um bei der Interpolation von Zwischenwerten ausreichend genaue Ergebnisse zu erhalten. Ferner müssen die Punkte, die zur Interpolation herangezogen werden, so schnell wie möglich gefunden werden. Es gibt nun zwei grundsätzlich unterschiedliche Strategien, die jeweils eine der beiden Forderungen unterstützen:

Der schnellste Zugriff auf die Stützstellen wird durch sogenannte strukturierte Tabellen erreicht, bei denen alle Stützstellen in den Raumrichtungen äquidistant verteilt und durchnummeriert werden. Hieraus ergibt sich ein direkter linearer Zusammenhang zwischen den Input-Variablen und dem Index der Stützstellen.

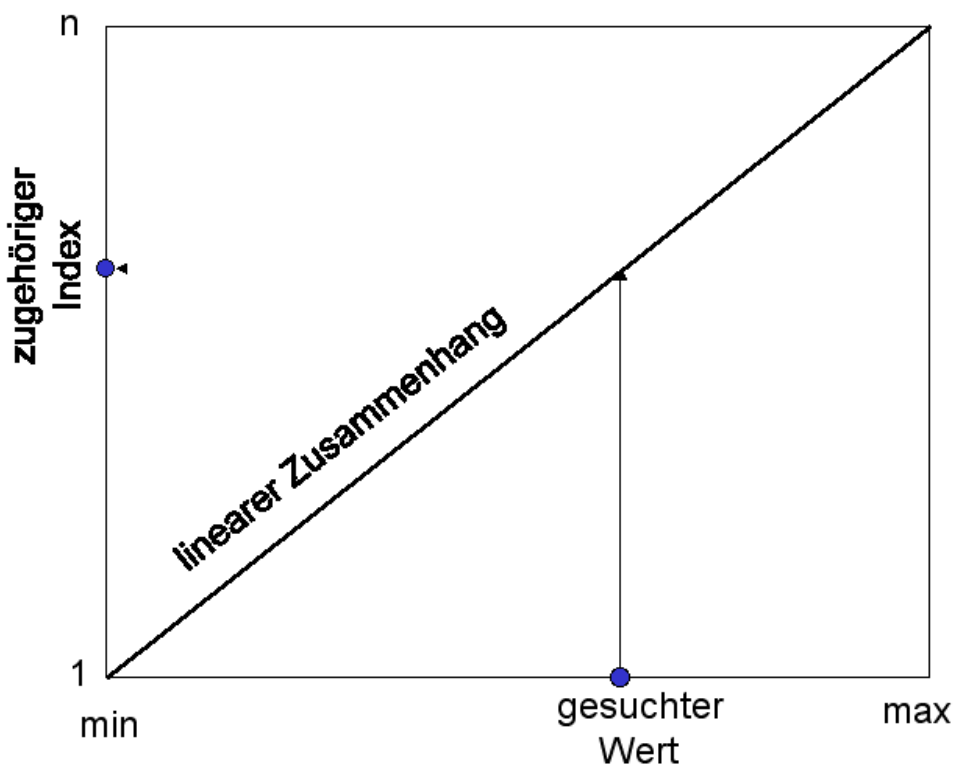


Bild 4.2.1 Index-Suche in strukturierten Tabellen

Bild 4.2.1 zeigt, wie aus einem gegebenen Eingabewert der zugehörige Index ermittelt wird. Anstatt eines linearen Zusammenhangs wäre es auch möglich gewesen, andere Funktionen, wie beispielsweise eine Funktion 2. Grades zu wählen. Hiermit hätte die Punktdichte lokal verfeinert werden können. Diese Erweiterung wurde im Rahmen dieser Arbeit getestet und wegen des höheren Aufwandes bei der Berechnung der Rück-Abbildung wieder verworfen. Es wurde damit keine deutliche Steigerung der Effizienz erzielt.

Ist vor der Erstellung der Tabelle bereits bekannt, dass in bestimmten Bereichen eine wesentlich höhere Anzahl von Punkten als in anderen Bereichen benötigt werden, dann können eine grob aufgelöste Tabelle und eine zweite feiner aufgelöste Tabelle überlagert werden, um die eine lokale Verfeinerung zu gewährleisten.

Bei der Vorgehensweise der strukturierten Tabellen ist die lokale Genauigkeit der Tabelle Ergebnis der Wahl des Gitters. Die flexibelste Wahl des Ortes der Stützstellen im Phasenraum, um eine vorher festgelegte Genauigkeit zu gewährleisten, wird durch unstrukturierte Tabellen erreicht. Hier ist im Gegensatz zu strukturierten Tabellen die Position der Stützstellen Ergebnis der Tabellenberechnung bei Vorgabe der Genauigkeit. Es werden nur so viele Punkte hinzugefügt, wie zum Erreichen der geforderten Genauigkeit benötigt werden. Während der Erstellung der Tabelle muss also jede Zelle auf Ihre Interpolationsgenauigkeit überprüft werden. Dies geschieht, indem die analytisch berechneten Werte auf der Mitte der Verbindungslinie zweier Punkte ermittelt werden und mit den aus der zugehörigen Zelle interpolierten Werten verglichen werden. Die Abweichung des theoretischen Wertes vom Ergebnis der Interpolation darf den maximal zulässigen Fehler nicht überschreiten. Weicht der interpolierte Wert zu weit ab, so werden zusätzliche Stützstellen hinzugefügt. Dadurch wird sichergestellt, dass nur dort viele Stützstellen besetzt werden, wo auch tatsächlich hohe Gradienten diese Feinheit des Netzes benötigen. Somit zeichnen sich unstrukturierte Tabellen durch ihren geringen Speicherplatzbedarf aus. Da die Punkte dynamisch während der Berechnung hinzugefügt werden, kann die Position nicht mehr an Hand ihrer Indizes festgestellt werden. Der Zugriff auf unstrukturierte Tabellen ist daher wesentlich aufwendiger, weil der Algorithmus erst einen Teil der Tabelle durchsuchen muss, um die zur Interpolation benötigten Stützstellen zu finden.

Im Rahmen dieser Arbeit wurde ein Tabellensystem entwickelt, welches den oben genannten Forderungen entspricht. Es wurde sich für ein Zwitter-Modell entschieden, welches die Vorteile der beiden grundsätzlichen Vorgehensweisen verbindet. Es entstand ein System von Programm-Routinen, welche unabhängig von anderen Codes physikalische Daten in Abhängigkeit mehrere Parameter optimiert ablegen kann. Neben der in dieser Arbeit gezeigten Anwendung fand das System auch schon in anderen Programmen Anwendung. Durch die allgemeine Struktur können Daten, die in einem Programm berechnet werden, anderen Programmen zugänglich gemacht werden.

Bild 4.2.2 stellt die Struktur der Tabellen für den zweidimensionalen Fall dar.

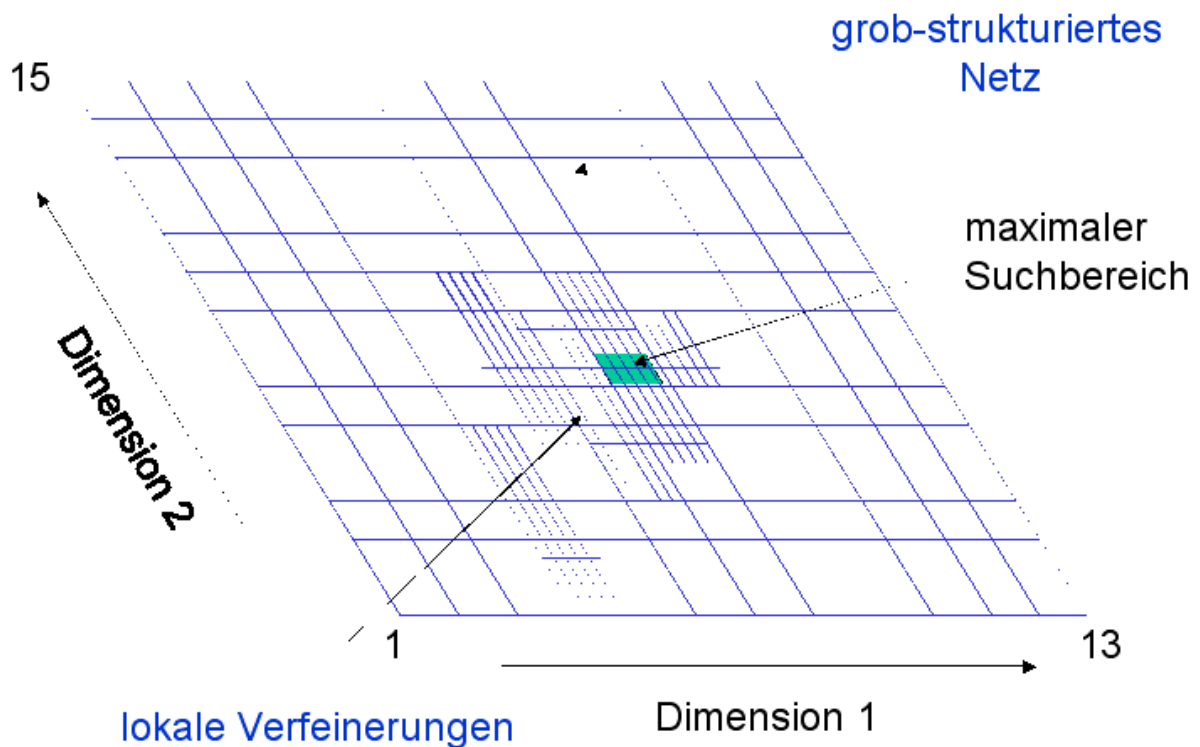


Bild 4.2.2 Struktur einer in dieser Arbeit entwickelten 2D - Tabelle

Es handelt sich um eine sehr grobe strukturierte Tabelle, deren einzelne Zellen unstrukturierte Untertabellen enthalten. So kann der Löser gleich über die Index-Abbildung (vgl. Bild 4.1.1) der strukturierten Tabelle in einen groben Suchbereich springen, um von dort aus im unstrukturierten Bereich nach den Stützstellen zu suchen.

Die Erstellung erfolgt vollkommen automatisch. Zuerst wird das grobe Netz erstellt, dessen Auflösung, Minimal- und Maximalwerte vom Benutzer vorgegeben werden. Die Tabelle ist so geartet, dass jeder Punkt in jeder Dimension genau zwei Nachbarn besitzt. Das bedeutet, dass ähnlich wie bei der Raumvernetzung reguläre Grundkörper aus 2-ndim Punkten gebildet werden können. Zur Interpolation von Werten werden genau die Punkte des Grundkörpers herangezogen, die im n-dimensionalen Phasenraum den gesuchten Punkt umschließen. Wegen der Analogie zu Raumnetzen werden im Folgenden die Grundkörper Zellen genannt. Die gedankliche Orthogonalität drückt die formale Unabhängigkeit der Eingabe-Parameter aus.

Der Anwender gibt eine geforderte Genauigkeit pro Zelle und eine maximal zulässige Verfeinerungstiefe vor. Darauf hin wird jede Zelle auf ihren Kanten (Subraum) auf Genauigkeit überprüft, indem der interpolierte Wert in der Mitte der Kante mit dem zugehörigen analytisch berechneten Werte verglichen wird. Ist die Abweichung des interpolierten vom analytisch berechneten Wert größer als die zulässige Abweichung, wird die Zelle in zwei Teile gespalten und zwei neue Zellen entstehen. Der Algorithmus merkt sich die geteilten Zellen und deren Zeiger auf die beiden neuen Zellen. Nachdem alle Zellen überprüft sind, werden

die neu entstandenen Zellen in der gleichen Art überprüft und eventuell wieder geteilt, bis eine vom Benutzer vorgegebene maximale Verfeinerungstiefe erreicht ist.

Der Anwender kann durch eine geschickte Auswahl der Parameter selbst entscheiden, auf welche Seite er den Kompromiss zwischen strukturierten und unstrukturierten Tabellen stärker gewichtet. Wählt er viele Stützstellen für das strukturierte Netz, erhält er einen schnellen Zugriff, weil weniger Zellen stark verfeinert werden müssen und aufwendiges Suchen reduziert wird. Dafür belegt er mehr Speicher, da viele Stützstellen mit in die Tabelle aufgenommen werden, die zur Genauigkeit nichts mehr beitragen. Ferner dauert die Tabellenerstellung durch die höhere Anzahl von Punkten länger.

Wichtig für eine gute Tabelle ist, dass die Originalfunktion keine Aussetzer in der Lösung hat. Hier kommt die maximale Verfeinerungstiefe zum tragen, weil der Algorithmus bei Fehlstellen der Originalfunktion unendlich oft verfeinern würde. Tritt dieser Fall ein, wird ein Lösungspunkt aus einer Interpolation zwischen seinen Nachbarpunkten generiert, um die Lösung möglichst glatt zu halten. Treten mehrere Fehler in einer Nachbarschaft auf, so versagt das System und es kommt zu einer Fehlermeldung.

Das Tabellensystem ist formal n -dimensional, das bedeutet, dass alle Schleifen während der Tabellenerstellung von 1 bis $ndim$ laufen. Auch das Problem der Kenntnis der Nachbarknoten im n -dimensionalen Raum wurde formal gelöst. Getestet wurde das System bisher bis vier Dimensionen. Tabellen höherer Dimension sind von der Logik her kein Problem, wurden aber in dieser Arbeit nicht benutzt. Aus Gründen der Optimierbarkeit wurden die Ausleseroutinen nicht mehr allgemein n -dimensional geschrieben, sondern für jede Dimension einzeln codiert. Da der Quellcode bei zunehmender Anzahl von Dimensionen deutlich anwächst, ist bei etwa zehn Dimensionen die Grenze der Praktikabilität erreicht.

Die Struktur des Codes ist sehr allgemein gehalten. Die Routinen können einfach abgekoppelt und an andere Codes angebunden werden. Dadurch bieten sie auch eine gute Möglichkeit, Daten von einem Programm in andere zu überführen. So wurden beispielsweise bereits Gleichgewichtstabellen, die an Hand der Gleichgewichtsroutinen des CFD-Codes TRUST erzeugt wurden, für ein Auswerteprogramm für Messdaten benutzt (siehe Kapitel 5 und Kapitel 6).

4.3 Gleichgewichtsmodul

Im vorherigen Kapitel wurde deutlich, dass in vielerlei Hinsicht immer wieder die Gleichgewichtslösung eine entscheidende Rolle spielt. Daher wurde ein Programm-Modul entwickelt, welches für verschiedenste Brennstoffe und Startbedingungen den chemischen Gleichgewichtszustand ermittelt. Hierbei wurde insbesondere Wert auf die Robustheit des Lösers gelegt, damit bei der Erstellung der Gleichgewichtstabelle keine Konvergenzprobleme entstehen.

Es gibt prinzipiell zwei Arten den chemischen Gleichgewichtszustand zu bestimmen. Die erste und meist verwandte Methode ist die Bestimmung des Gleichgewichtszustandes an Hand der Minimierung der freien Enthalpie, der sogenannten Gibbs-Enthalpie. Die Gibbs-Enthalpie ist definiert mit $g = h - T \cdot s$. Sie ist ein Maß für das chemische Potential. Im chemischen Gleichgewichtszustand erreicht sie ein Minimum. Der Vorteil dieser Methode ist, dass der Weg der chemischen Reaktion vollkommen irrelevant ist. Es wird lediglich die Kenntnis der involvierten Spezies, des Druckes und der Temperatur benötigt. Die Spezies

werden so lange an Hand der Reaktionsgleichungen umverteilt, bis die Gibbs-Enthalpie minimal wird. Hiermit kann mit geringem Rechenaufwand der Gleichgewichtszustand auch für komplexe Reaktionen mit einer hohen Anzahl von Spezies bestimmt werden. Der Nachteil der Methode ist, dass der Löser vor allem in fetten Bereichen in metastabilen Zuständen einen Konvergenzpunkt erreicht und damit falsche Ergebnisse für die Gleichgewichtstabelle liefert.

Da dies problematisch für die Konvergenz des Tabellensystems ist, wurde in Rahmen dieser Arbeit der zweite Lösungsweg zur Bestimmung des chemischen Gleichgewichts beschritten. Hierbei wird der Gleichgewichtszustand über die Lösung eines Gleichungssystems von Elementarreaktionen erreicht. Da nur der chemische Endzustand von Interesse ist, ist es egal, welche Gleichungen genommen werden. Jede involvierte Spezies muss mindestens in einer Elementarreaktion vorkommen. Die Reihenfolge der Reaktionen spielt für den Gleichgewichtszustand keine Rolle.

Die genaue Vorgehensweise des Gleichgewichtslösers ist im KIVA-II Manual [KIVA,1989] detailliert beschrieben. Ferner ist es auch in [Ramshaw&Amsden,1985] nachzulesen. Zu diesem Löser wurde eine zusätzliche Temperatur- und Druckiteration hinzugefügt, die im Original-KIVA von anderen Programmteilen übernommen wurde und nicht mit in das Chemie-Modul übertragen wurde. Ferner wurde die Lösung einer Matrix durch einen Standardalgorithmus aus den hochoptimierten *blas-2*-Libraries [NAG,1999] ausgewechselt, um mehr Effizienz in der Abarbeitung zu erreichen.

Die Geschwindigkeit einer chemischen Reaktion ist gegeben durch [Libby&Williams,1994]:

$$\dot{\omega}_r = k_{fr} \prod (c_\alpha)^{a_{\alpha r}} - k_{br} \prod (c_\alpha)^{b_{\alpha r}} \quad (3.1)$$

Die Koeffizienten k_{fr} und k_{br} erhält man durch den Arrhenius-Ansatz, dessen Koeffizienten für viele Reaktionsgleichungen in der Literatur nachzulesen sind:

$$k_{fr} = A_{fr} T^{n_{fr}} e^{-\frac{E_{fr}}{T}}; \quad k_{br} = A_{br} T^{n_{br}} e^{-\frac{E_{br}}{T}} \quad (3.2)$$

Bildet man nun den Quotient der Arrheniuskoeffizienten k_f/k_b , so erhält man die Gleichgewichtskonstante K_c^r der Reaktionsgleichung r . Diese Konstante wird im Preprozessing für jede involvierte Reaktion abgelegt. Sie ist Funktion der Temperatur und wird nach folgender Gleichung bestimmt:

$$K_c^r = \exp \left(-\frac{\Delta G_r}{\Re T} - \sum_i \nu_i \cdot \ln \left(\frac{\Re T}{p_0} \right) \right) \quad (3.3)$$

mit

$$\Delta G_r = \sum_i \nu_i G_i(T) \quad (3.4)$$

$G_i(T)$ sind die Gibbs-Enthalpie der Spezies i und ν_i stellen die stöchiometrischen Koeffizienten der Spezies in der Reaktionsgleichung dar.

Im Fall des chemischen Gleichgewichts muss folgende Bedingung erfüllt sein [Libby&Williams,1994]:

$$\prod_m (\rho_m / W_m)^{b_{mr} - a_{mr}} = K^r_c(T) \quad (3.5)$$

Vereinfacht stellt sich der Lösealgorithmus der Gleichungen (3.1) bis (3.5) wie folgt dar:

Um den Bedingungen in einer Zelle eines CFD-Lösers gerecht zu werden, läuft die Reaktion unter der Voraussetzung konstanter Totalenthalpie und konstanter Dichte ab. Das bedeutet, dass sich der Druck des Gas-Gemischs durch die Wärmefreisetzung der Reaktion erhöht. Die zur Verfügung stehende Reaktionszeit ist unendlich und die Moleküle im Kontrollvolumen sind immer ideal gerührt.

Zu jedem Iterationsschritt wird die Bruttoreaktionsgeschwindigkeit $\dot{\omega}$ jeder einzelnen Reaktionsgleichung bestimmt. Nach dem Satz von Hess [Atkins,1992] ergibt sich durch Aufsummation der Einzelgeschwindigkeiten eine Gesamtbildungsrate für jede Spezies α . Die Speziesdichten nach einem Reaktionszeitschritt bestimmen sich demnach wie folgt:

$$\rho_\alpha^{n+1} = \rho_\alpha^n + W_\alpha \sum_r (a_{\alpha r} - b_{\alpha r}) \dot{\omega}_r \quad (3.6)$$

Die neue Temperatur wird mit

$$T^{n+1} = T^n + \sum_r \left(\frac{Q_r \cdot \dot{\omega}}{\rho^n \cdot c_p} \right) \quad (3.7)$$

bestimmt.

Sind die Spezies nach dem gerade gezeigten Verfahren ins Gleichgewicht gebracht worden, folgt noch einmal eine nachgeschaltete Iteration, die aus der Totalenthalpie und den neuen Spezies die resultierende Gleichgewichtstemperatur bestimmt. Diese Iteration geschieht an Hand folgender Gleichungen:

$$c_p = f(T, y_i) \quad (3.8)$$

$$h = h_{298} + \int_{298K}^T c_p dT \quad (3.9)$$

Bei dieser Iteration hat sich im Rahmen dieser Arbeit eine Unterrelaxation als notwendig herausgestellt. Ein Relaxationsfaktor von 0.3 erwies sich als zweckmäßig.

Aus der neuen Temperatur erhält man eine neue Gleichgewichtskonstante, mit der die iterative Berechnung solange erneut gestartet wird, bis sich die Temperatur nicht mehr ändert.

Da viele CFD-Programme eine Gleichgewichtslösung bei konstantem Druck benötigen, wird über das ideale Gasgesetz eine neue Dichte zu dem gewünschten Druck berechnet und der Algorithmus beginnt von vorne, bis der Gleichgewichtsdruck dem geforderten Druckniveau entspricht.

Aus Gründen der Rechengeschwindigkeit wird in den ersten sieben Iteration ein SOR-Newton-Algorithmus [KIVA,1989] benutzt. In den meisten Fällen reicht dieser zur Lösungsbestimmung aus. Ist dies nicht der Fall, so wird auf einen Matrix-Löser aus den *Blas2-Libraries (subroutine dtbsv)* [NAG,1999] zurückgegriffen. Dies entspricht der in der Numerik oft verwendeten ‚risk‘-Vorgehensweise, bei der erst eine vereinfachte Löse-Strategie zum Einsatz kommt. Erst wenn sich herausstellt, dass das einfache Verfahren nicht zur Lösung führt, wird ein komplexerer Algorithmus gewählt.

Im in dieser Arbeit entwickelten Chemie-Modul sind mittlerweile mehr als hundert Reaktionsgleichungen implementiert, auf die sehr einfach zugegriffen werden kann. Die vorhandenen Reaktionsgleichungen können sehr einfach durch weitere erweitert werden. So ist es möglich, Rechnungen mit beliebigen Brennstoffen durchzuführen, wie beispielsweise alle Arten von Kohlenwasserstoffen oder Exoten wie zum Beispiel Ammoniak. Ferner hat der Nutzer die Möglichkeit, die Genauigkeit seiner Verbrennungsrechnung selbst zu bestimmen. Er kann zum Beispiel Rechenzeit einsparen, indem er nur wenige Gleichungen angibt, die den Verlauf im extrem fetten Bereich beschreiben.

Die Auswahl der Reaktionsgleichungen bestimmt die in der Strömung involvierten Spezies mit. Daher werden in den Gleichungen neu auftretende Spezies automatisch der Liste der im Strömungslöser vorkommenden Spezies hinzugefügt.

Somit ist durch das Gleichgewichtsmodul überall im Programm die Gleichgewichtslösung auf einfache Art zugänglich. Die wesentliche Aufgabe, die der Nutzer des Programms zu leisten hat, ist es, eine geeignete Auswahl der Gleichgewichtsreaktionen zu finden.

In dieser Arbeit wird im Wesentlichen die Gleichgewichtslösung für Methan benötigt. Der gewählte Methan-Mechanismus umfasst die in Bild 4.3.1 dargestellten Reaktionsgleichungen:

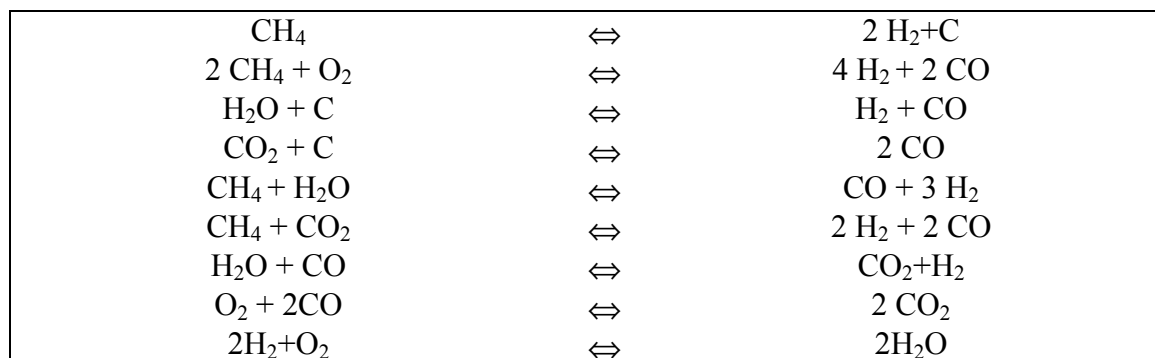


Bild 4.3.1 Gleichgewichtsmechanismus für Methan

In Bild 4.3.2 ist die Lösung dieses Gleichungssystems mit dem System dieser Arbeit mit einer Lösung, die mit dem Chemiepaket CHEMKIN [Sandia,1999] an Hand der Methode der Minimierung der Gibbs-Enthalpie bestimmt wurde, gegenübergestellt. Für die CHEMKIN-Lösung sind insgesamt 54 Spezies verwandt worden, um eine genaue Lösung zu garantieren.

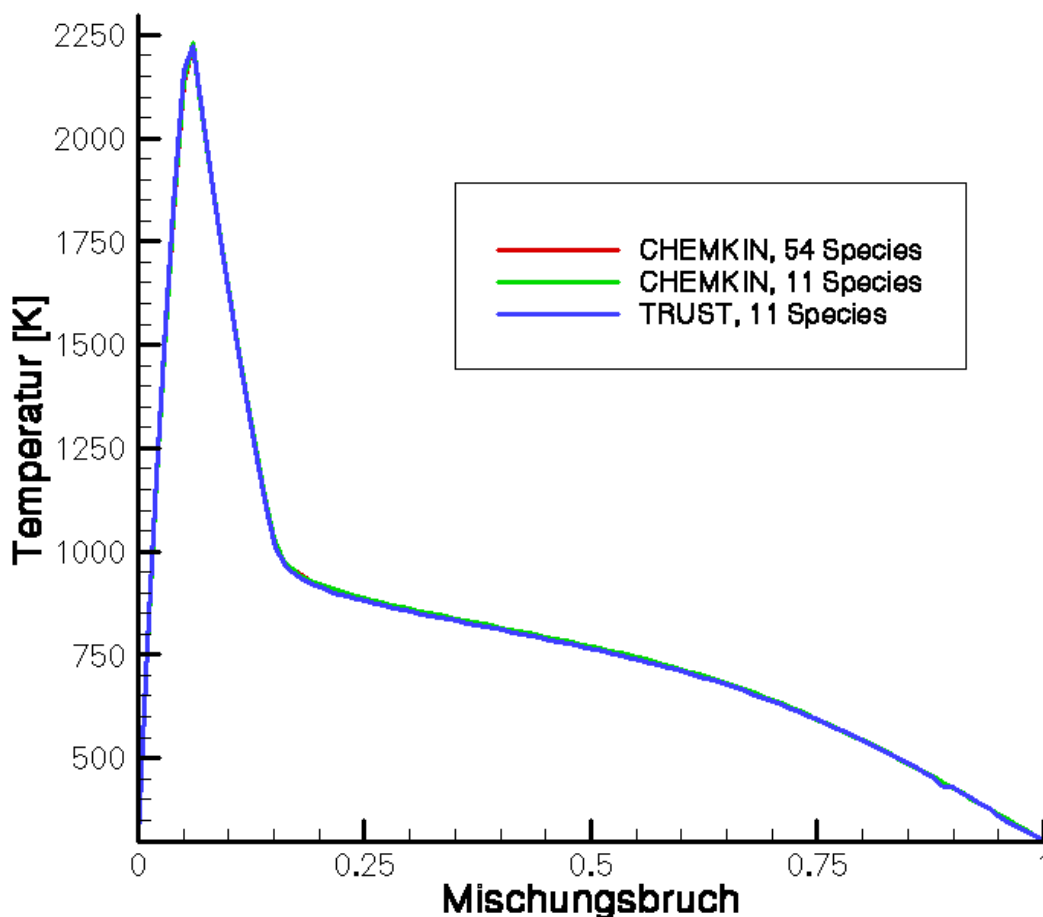


Bild 4.3.2 Vergleich der Gleichgewichtstemperaturen von Methan berechnet mit TRUST und CHEMKIN

Es sind praktisch keine Abweichungen in den Temperaturen zu erkennen. Da die Gleichgewichtslösung bei der Verbrennungssimulation nur zur Bestimmung der Wärmefreisetzung und zur Normierung der Fortschrittsvariablen mit dem maximal möglichen CO_2 - oder H_2O -Wertes bei gegebenen Mischungsbruch benötigt wird, ist die Lösung genügend genau.

In einem zweiten Anwendungsfall wird die Gleichgewichtskurve für den Kerosin-Ersatzstoff $\text{C}_{12}\text{H}_{23}$ benötigt [Rachner,1998]. Die Bild der kinetischen Vorgänge des Zerfalls von Kerosin sind im fetten Bereich sehr schwierig. Hier kommt eine Vielzahl von Zwischenprodukten zum Tragen, die den Verlauf der Reaktion beeinflussen. Da in praxisnahen Brennkammern dieser Bereich nur selten vorkommt, wird bei der Erstellung der Gleichge-

wichtslösung dieser Bereich nur durch eine einzige Reaktionsgleichung beschrieben, nämlich durch die Bruttoreaktion von Kerosin mit Sauerstoff in ein Gemisch von CO und H₂. Anschließend wird dann ein Gleichgewichtsmechanismus für dieses sogenannte Synthesegas gelöst, welcher schon sehr genau untersucht wurde. Bild 4.3.3. zeigt den zu Grunde gelegten Mechanismus.

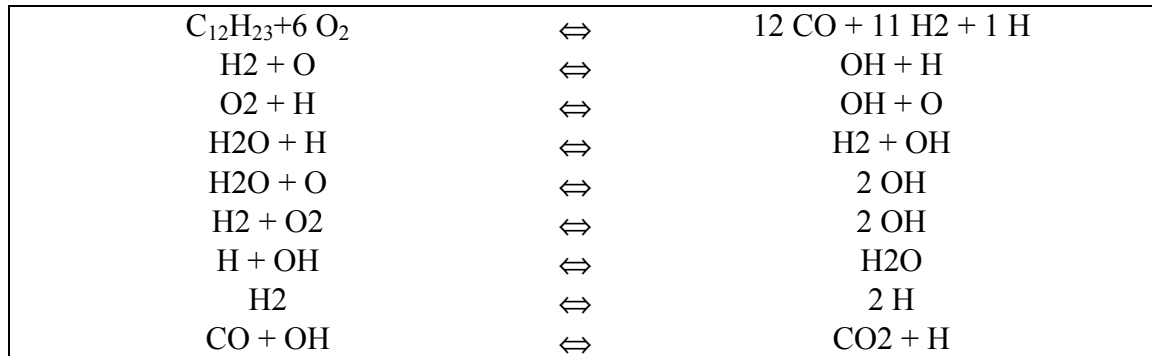


Bild 4.3.3 Gleichgewichtsmechanismus für Kerosin

In Bild 4.3.4 ist wieder der Vergleich zwischen CHEMKIN und dem in dieser Arbeit entwickelten Verfahren dargestellt. Da CHEMKIN mit der Methode der Minimierung der Gibbs-Enthalpie arbeitet, können hier wiederum viele Spezies berücksichtigt werden, so dass auch der fette Bereich angemessen berücksichtigt wird.

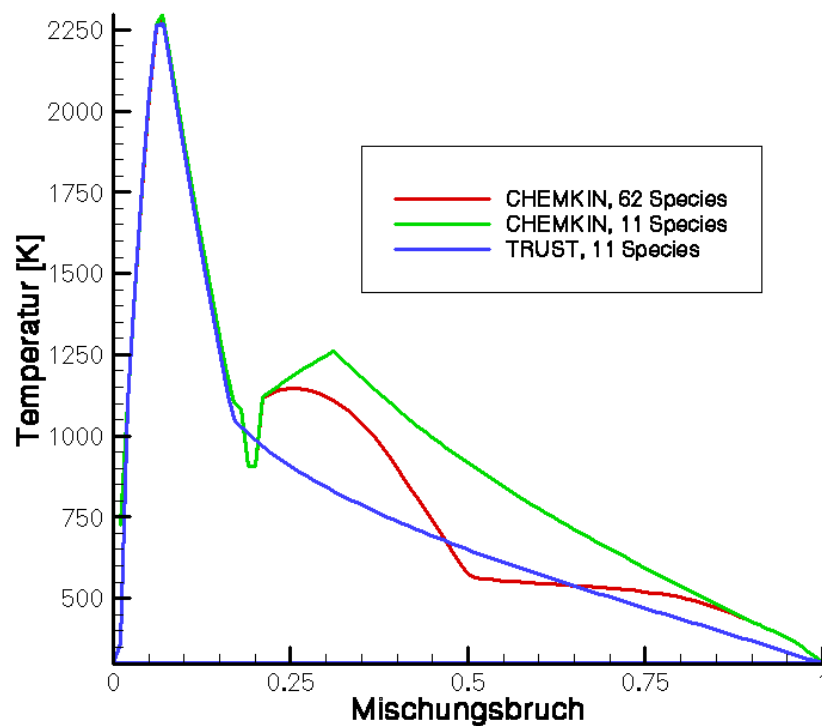


Bild 4.3.4 Vergleich der Gleichgewichtstemperaturen von Kerosin berechnet mit TRUST und CHEMKIN

Im Intervall $0 \leq f \leq 0.17$ verlaufen alle drei Kurven identisch. Im weiteren Verlauf zeigt die Lösung des hier entwickelten Verfahrens einen recht glatten Verlauf. Bei beiden CHEMKIN Lösungen sind Sprünge und Knicke in der Kurve zu erkennen. Es lagen leider keine Messungen vor, um zu entscheiden, welche der drei Kurven der Realität am nächsten kommt.

Gemäß der Beziehung

$$\lambda = \frac{1/f - 1}{L_{st}} \quad (3.10)$$

L_{st} : stöchiometrischer Luftbedarf

($L_{st,Kerosin} \approx 14.8 \text{ kg}_{Kerosin} / \text{kg}_{Luft}$)
($L_{st,Methan} \approx 17.2 \text{ kg}_{Kerosin} / \text{kg}_{Luft}$)

entspricht ein Mischungsbruch von $f = 0.17$ in etwa einem Luftverhältnis von $\lambda \approx 0.33$. Ab diesem Bereich sind die Kurven nicht mehr identisch. Jedoch sind Zustände, die sich durch eine solch geringe Luftzahl auszeichnen, für praxisnahe Anwendungen nicht mehr relevant. Die Tabellierung der Lösung des hier verwendeten Algorithmus ist numerisch deutlich einfacher als die der Lösung von Chemkin, da der Verlauf keine Sprünge aufweist. Durch die geringe Anzahl von Reaktionsgleichungen geht zwar Information verloren, jedoch ist es sinnvoller, den sehr fetten Bereich nicht so genau aufzulösen und stattdessen Rechenzeit und Speicherbedarf zu sparen.

Mit dem Gleichgewichtsmodul steht für CFD-Programme ein robustes und flexibles System zur Bestimmung des Gleichgewichtszustandes zur Verfügung. Es ist möglich, die Gleichgewichtszusammensetzung für beliebige Brennstoffe zu berechnen. Ferner können auf einfache Art und Weise Mechanismen berechnet werden, die in dieser Form in der Natur nie vorkommen, wie beispielsweise Bruttoreaktionen ohne Zwischenprodukte. Dies ist bei der Normierung der Fortschrittsvariablen sinnvoll, bei der man die maximal mögliche Menge an CO_2 und H_2O berechnen muss. Hier liegt man mit der Annahme der Bruttoreaktion immer auf der sicheren Seite und es ergeben sich nie dadurch numerische Probleme, weil die normierte Konzentration den Wert 1 überschreitet (vgl. Kap. 6).

5 Numerische Auswertung von Mischungsbruch-Messungen

In Kapitel 2 wurde dargestellt, welche physikalischen Phänomene modelliert werden müssen, um die Vorgänge in praxisnahen Brennkammern zu simulieren. Es wurde gezeigt, mit welchen unterschiedlichen Modellen die Umsatzraten der chemischen Reaktion bestimmt werden können. Jedes Modell hat hierbei seine Stärken und Schwächen und es hängt von den jeweils lokalen Verhältnissen und der zur Verfügung stehenden Rechenzeit ab, welches Modell zu favorisieren ist.

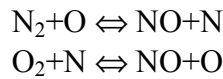
In Kapitel 4 wurde beschrieben, wie die in Kapitel 2 beschriebene Theorie numerisch umgesetzt werden kann. Es wurde ein System zur effektiven, mehrdimensionalen Datenablage entwickelt und ein Lösungsvorschlag gemacht, wie die Modell-Vielfalt im Chemie-Modul möglichst einfach strukturiert werden kann, um schnell und flexibel auf die unterschiedlichen Anwendungsfälle eingehen zu können.

Es ist bekannt, dass in nicht-vorgemischten Flammen die Mischung von Brennstoff und Luft der entscheidende Vorgang für die chemische Reaktion ist. Wenn die Mischungsbruch-Verteilung und –Fluktuation nicht adäquat beschrieben ist, dann nützen alle weiterführenden Chemiemodelle nichts mehr, weil der Fehler durch die ungenau berechnete Mischung deutlich höher liegt als die Genauigkeit, die durch das komplexere Chemie-Modell gewonnen wird. Daher soll in diesem Kapitel die numerische Berechnung der Mischungsbruch-PDF in einem isothermen Modellexperiment genauer betrachtet werden, bevor im nächsten Kapitel der Schritt zur Untersuchung der mehrdimensionalen Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion, bestehend aus Mischungsbruch und Fortschrittsvariablen, unternommen wird.

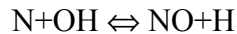
5.1 Vorstellung des Anwendungsfalles

Als Testfall wurde ein isothermes Modellexperiment zur Fett-Mager-Verbrennung ausgewählt. Die Fett-Mager-Verbrennung stellt neben dem LPP-Konzept (magere Vormischverbrennung) ein in jüngsten Forschungsarbeiten [Migueis,1996; Griebel,1997] untersuchtes Konzept zur Reduktion der thermischen Stickoxid-Bildung in Triebwerksbrennkammern dar.

Zeldovic-Mechanismus [Zeldovic et al.,1947]:



Erweiterung nach Fenimore [Fenimore,1971]:



Geschwindigkeitsansatz für die thermische Stickoxid-Produktionsrate:

$$\frac{dc_{\text{NO}}}{dt} = 3.6 \cdot 10^{14} c_{\text{O}} \cdot c_{\text{N}_2} \cdot e^{\frac{-318 \text{ KJ}}{\text{RT}} \frac{\text{KJ}}{\text{mol}}} \left[\frac{\text{cm}^3}{\text{mol} \cdot \text{s}} \right] \quad (5.1)$$

Bild 5.1.1 Thermische Stickoxid-Bildung

Aus dem Zeldovic-Ansatz ist bekannt, dass der geschwindigkeitsbestimmende Schritt der thermischen Stickoxidbildung exponentiell von der Temperatur und linear von der Konzentration der Sauerstoffradikale abhängt. Beide Werte erreichen im nahstöchiometrischen Bereich ihr Maximum [Khalil,1982]. Die Reaktion verläuft so langsam, dass diese Reaktion bei kurzen Aufenthaltszeiten, d.h. relativ hohen Strömungsgeschwindigkeiten, ihren Gleichgewichtspunkt (Maximum der NO-Produktion) nicht erreicht.

Um nun die Stickoxidproduktion weitgehend zu unterdrücken, wird versucht, nahstöchiometrische Bereiche so schnell wie möglich zu durchfahren. Dies wird dadurch erreicht, indem der Brennstoff (Kerosin) zuerst im fetten Bereich ($\lambda \approx 0.55$) verbrannt wird. Die Reaktionsprodukte dieser Verbrennung enthalten noch hohe Konzentrationen von brennbaren Gasen, insbesondere CO und H₂. Diese werden durch seitliches Einblasen von Sekundärluft verbrannt. Das Mischmodul wird so ausgelegt, dass ein möglichst schnelles Mischen der beiden Stoffströme stattfindet. Durch den schnellen Mischprozess ist die Zeit, die die Moleküle im stöchiometrischen Mischungszustand verweilen, sehr kurz. Sobald die endgültige Mischung ($\lambda \approx 2.5$) erreicht ist, findet auf Grund der geringen Temperaturen kaum noch Stickoxidbildung statt. Das Fett-Mager-Konzept wird mit dem Kürzel RQL (*rich-quench-lean*) bezeichnet.

Untersuchungen haben gezeigt, dass die Berechnung der globalen Bildung des thermischen Stickoxids nicht in jedem Fall wesentlich vom verwandten Verbrennungsmodell abhängt. In [Koopman et al., 1998] wurde die Stickoxidbildung zum einen mit der Annahme chemischen Gleichgewichts und zum anderen an Hand der Flamelet-Theorie berechnet. In dieser Untersuchung unterschied sich das insgesamt gebildete Stickoxid in beiden Verfahren nur wenig, weil der Effekt der Verringerung des Temperaturniveaus durch die Flamelet-Annahme durch eine höhere Sauerstoffradikalen-Konzentration kompensiert wurde.

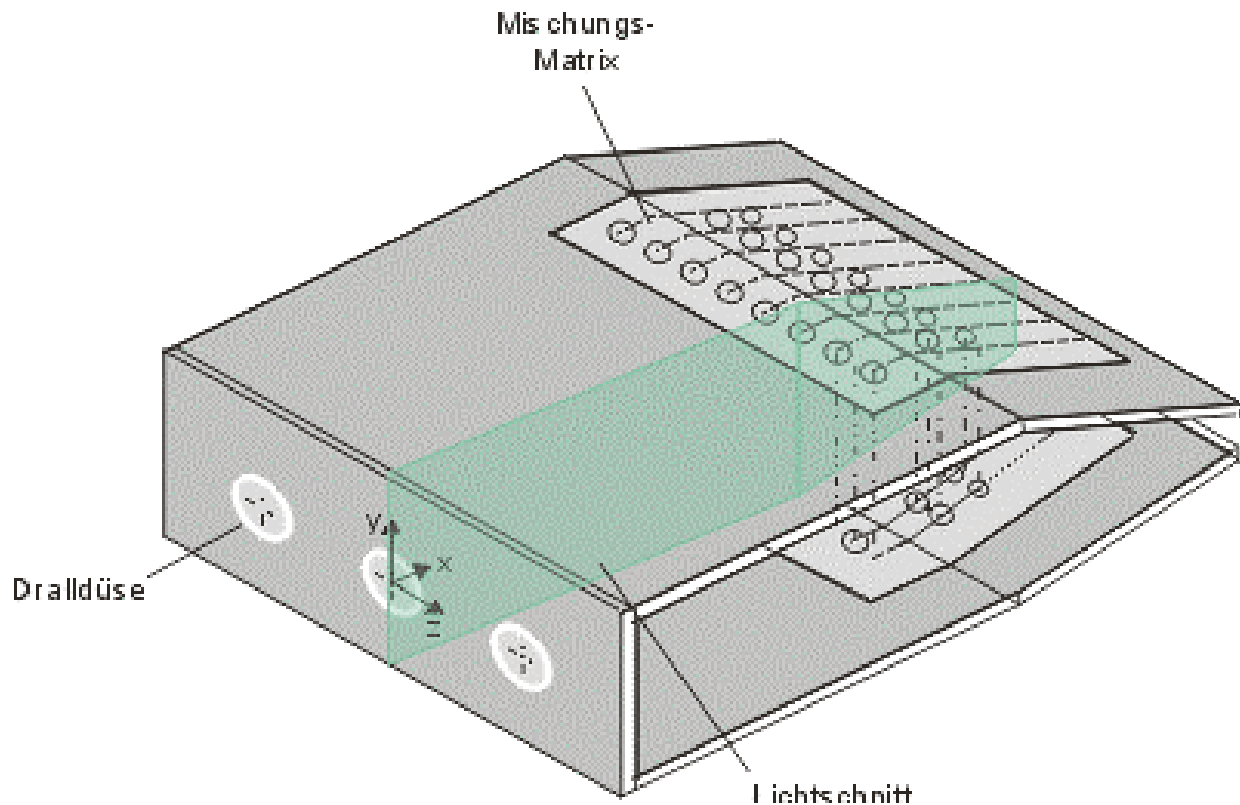


Bild 5.1.2 Untersuchte RQL-Brennkammer

Bild 5.1.2 zeigt den Aufbau des Flammrohrs der experimentell und numerisch untersuchten RQL-Brennkammer. Die Primärluft wird durch drei Dralldüsen mit hohem Drall in die Primärzone eingeblasen. Diese Geometrie wurde beim DLR-Köln isotherm und mit Verbrennung experimentell untersucht [Voigt,1999]. Der einzige Unterschied im Aufbau zwischen dem heißen und dem kalten Fall besteht in der Zuführung der Kühlluft. Im heißen Fall wird die gesamte Verbrennungszone mit einer Effusionskühlung gekühlt. Der gesamte Kühlluftmassenstrom, der durch die Effusionsbohrungen strömt, wird im isothermen Modell durch zwei Schlitze an der Ober- und Unterseite der Kopfplatte eingeblasen.

Kurz vor der Verjüngung des Kanalquerschnittsplatte ist die erste Lochreihe zur Quereinblasung von Sekundärluft angebracht. Danach folgen weiter stromab um einen halben Lochabstand versetzt zwei weitere Lochreihen. Die letzte Lochreihe besitzt einen wesentlich kleineren Lochdurchmesser als die ersten beiden. Die Lochreihen sind oben und unten versetzt (staggered) angeordnet, damit die Strahlen nicht in der Mitte der Kammer aufeinanderprallen und somit die Mischung verschlechtern.

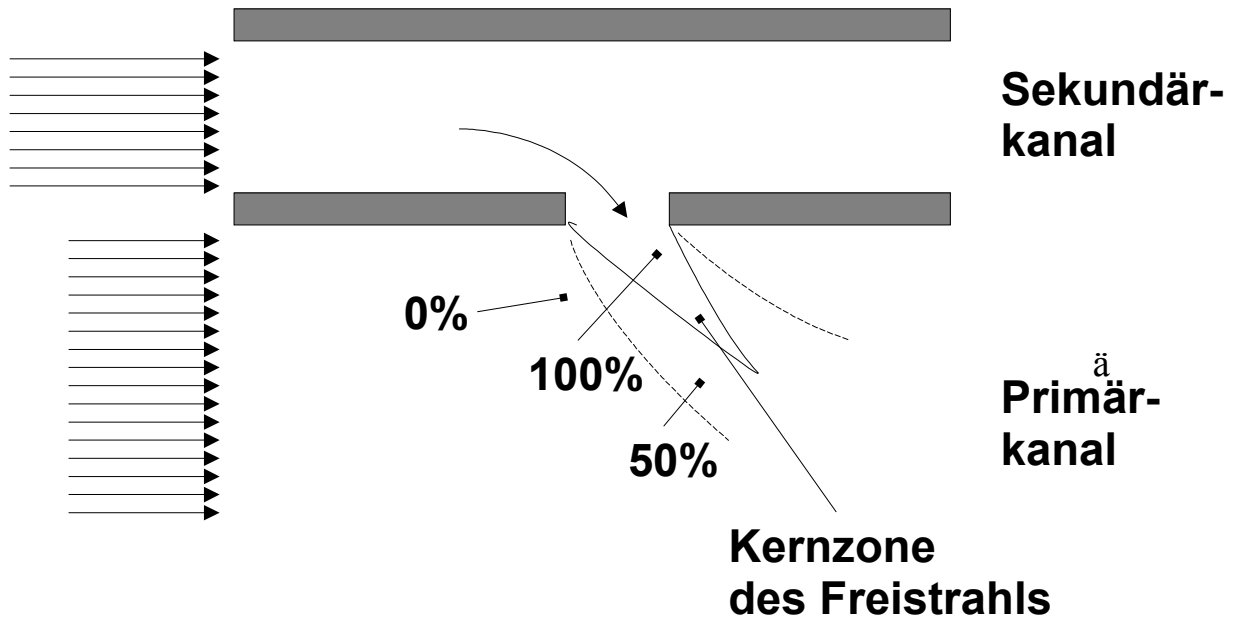


Bild 5.1.3 Prinzip des Jet in Crossflow [Migueis, 1996]

Bild 5.1.4 zeigt die Randbedingungen, mit denen der isotherme Fall betrieben wurde. Δp_{pr} und Δp_{sek} bezeichnen hierbei den Druckverlust im Primär- und Sekundärkanal. Die Massenströme und das Impulsverhältnis resultieren aus der Einstellung der Druckverluste.

Δp_{pr} [%]	Δp_{sek} [%]	\dot{m}_{pr} [g/s]	\dot{m}_{sek} [g/s]	J [-]
3.02	3.01	27.47	52.04	930

Bild 5.1.4 Randbedingungen des isothermen Mischungsexperiments

Dabei ist das Impulsstromverhältnis J definiert als:

$$J = \frac{\rho_{sek} v_{sek}^2}{\rho_{pr} v_{pr}^2} \quad (5.2)$$

Bei der numerischen Simulation wurde nur das mittlere Brennkammersegment berechnet, da planare Periodizität angenommen werden kann. Die Geschwindigkeiten am Lochaustritt wurden mit einem Laser-2-Fokus-Velocimeter gemessen [Voigt, 1999]. Bild 5.1.5 zeigt den Versuchsaufbau dieser Messungen.

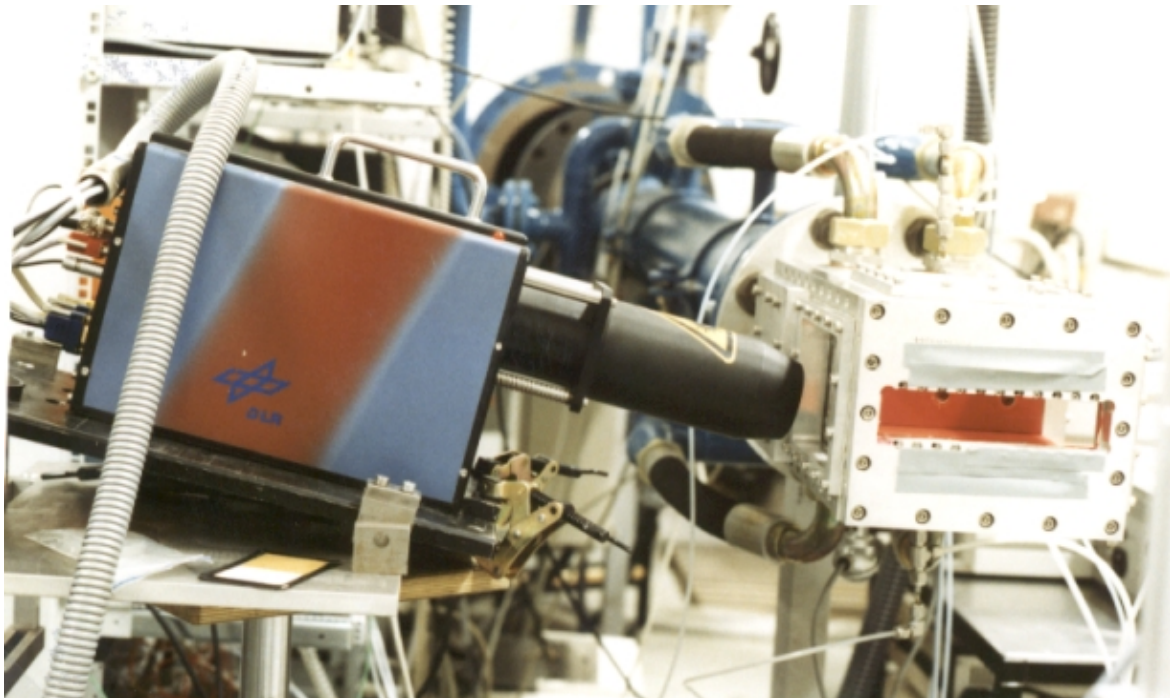
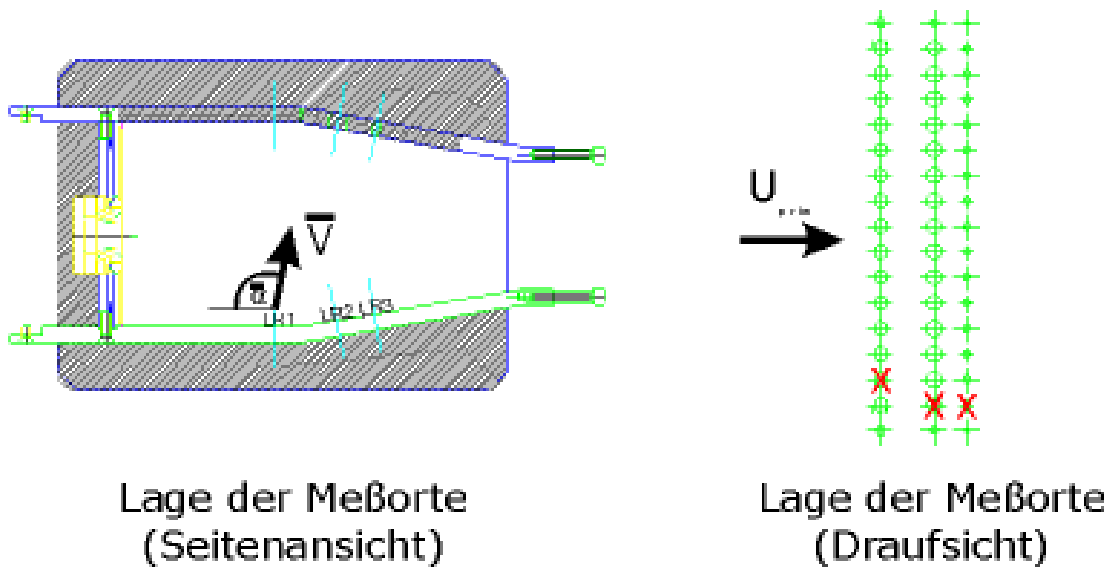


Bild 5.1.5 Lage der Messpunkte bei der Bestimmung von Eindringwinkel $\bar{\alpha}$ und Turbulenzgrad T_p (parallel) und T_s (senkrecht) und Photo der Versuchsdurchführung mit einem Diodenlaser-L2F

Bild 5.1.6 zeigt die Messergebnisse an drei Messorten. Dargestellt sind die mittlere Geschwindigkeit \bar{v} , der mittlere Eindringwinkel $\bar{\alpha}$ (vgl. Bild 5.1.5) sowie paralleler (T_p) und senkrechter Turbulenzgrad (T_s).

	LR1	LR2	LR3
$\bar{\alpha}$ [°]	96.1	85.5	82.7
\bar{v} [m/s]	74.3	74.8	71.5
T_p [%]	3.8	3.2	3.9
T_s [%]	10.5	11.2	10.4

Bild 5.1.6 Ergebnis der L2F-Messungen an den Sekundärbohrungen

Die Geschwindigkeitsrandbedingungen an der Drallzerstäuberdüse wurde am Institut für Turbulenzforschung des DLR-Berlin an Hand von LDA-Messungen ermittelt. Bild 5.1.7 zeigt die gefundenen Geschwindigkeitsprofile.

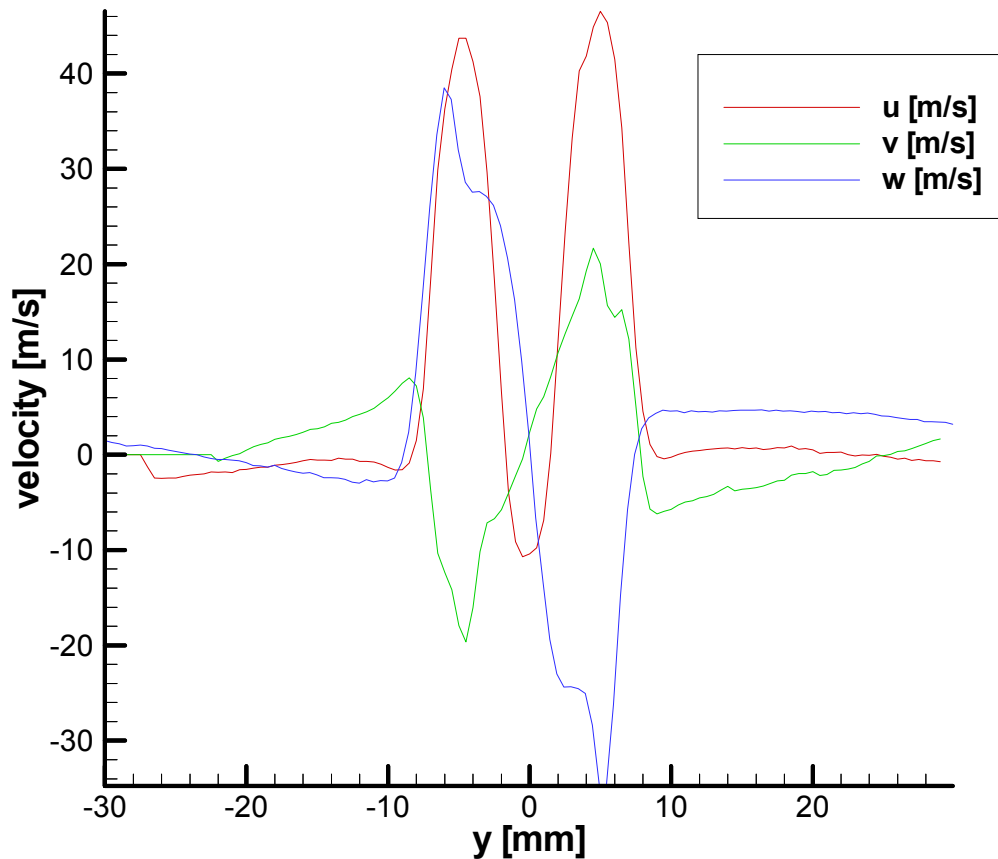


Bild 5.1.7 gemessenes Geschwindigkeitsprofil am Düsenaustritt [$x=1$ mm]
(u =axial, v =vertikal, w =tangential)

5.2 Experimentelle und numerische Untersuchung des Strömungsfeldes

In diesem Kapitel sind die Ergebnisse zum mittleren Strömungsfeld dargestellt. Für die Strömungsberechnung wurde das mittlere Segment herangezogen und mit den in Kapitel 5.1 gegebenen Randbedingungen numerisch simuliert. Die Geschwindigkeiten und Mischung der Primärluft mit der Sekundärluft in der mittleren Ebene (Symmetrieebene der mittleren Drallzerstäuberdüse) wurden sowohl numerisch, als auch experimentell ermittelt. Bild 5.2.1 zeigt einen Schnitt durch das benutzte Rechengitter. Im Bereich der Mischluftstrahlen ist das Netz stark verfeinert worden. Aufgrund der Komplexität der Anordnung konnte jedoch kein ideales Netz erstellt werden. Es zeigte sich, dass sich eine weitere Verfeinerung nur unwesentlich auf die Lösung auswirkte. Ein Netz mit weniger stark gescherten Zellformen hätte sich aber positiv auf die Rechengeschwindigkeit ausgewirkt.

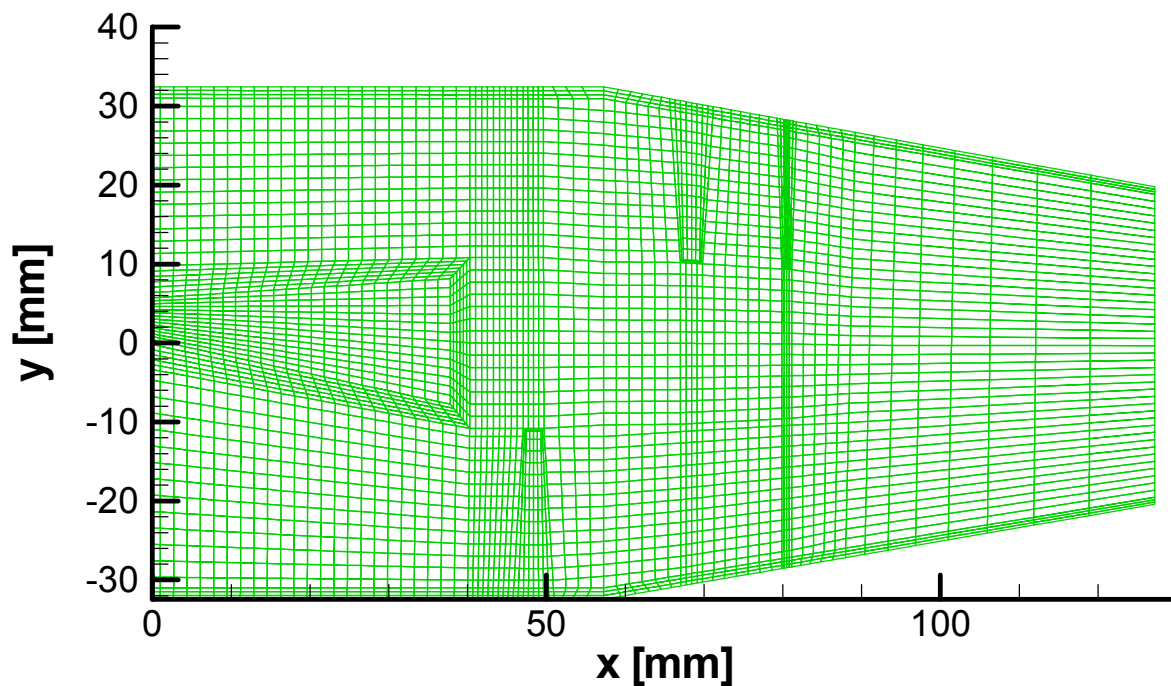
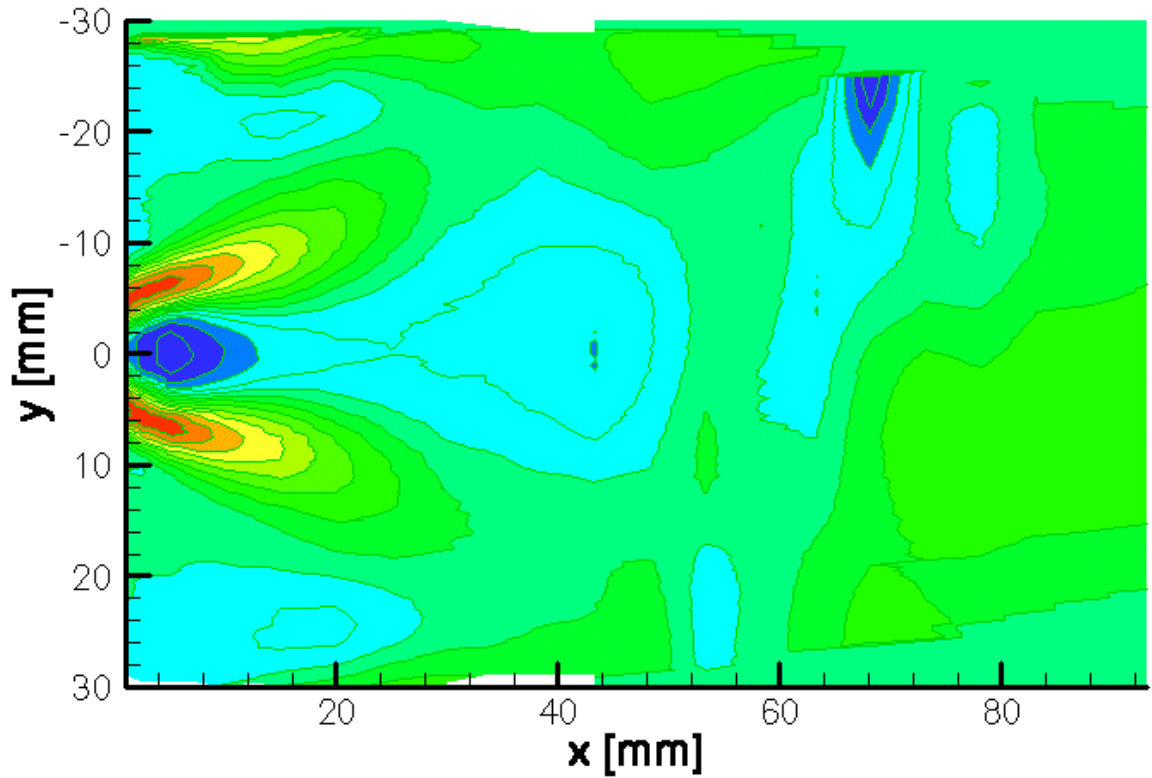


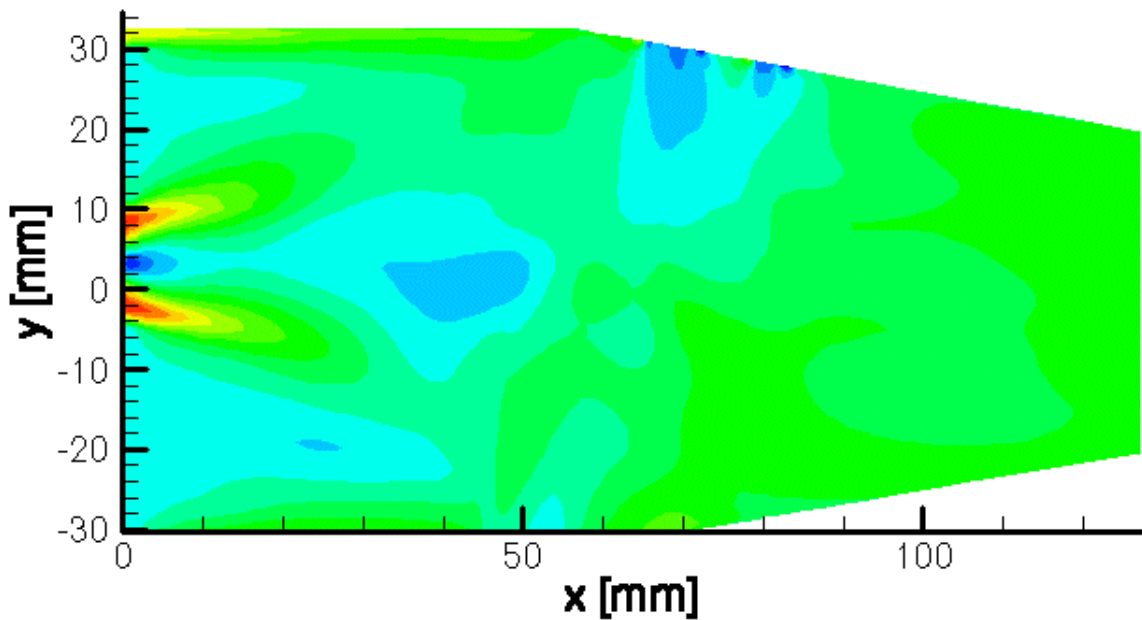
Bild 5.2.1 Schnitt durch Rechengitter

Die folgenden Bilder zeigen die Ergebnisse der Rechnung und der Messung. Die Geschwindigkeitsmessungen wurden am Institut für Turbulenzforschung des DLR Berlin [Lehmann, 1998] durchgeführt. Die Bilder 5.2.2 und 5.2.3 zeigen die gemessenen und die mit dem CFD-Code TRUST [Schütz et al., 1997] berechneten Axial-Komponenten der Geschwindigkeiten in der Ebene bei $z = 0$ mm. Die Rechnung wurde mit einem unstrukturierten Hexaeder-Gitter mit ca. 260000 Zellen durchgeführt.



u [m/s]: -20 -15 -10 -5 0 5 10 15 20 25 30 35 40 45

Bild 5.2.2 gemessene Axialgeschwindigkeit u



u - velocity, m/s: -20 -15 -10 -5 0 5 10 15 20 25 30 35 40 45

Bild 5.2.3 mit TRUST berechnete Axialgeschwindigkeit u

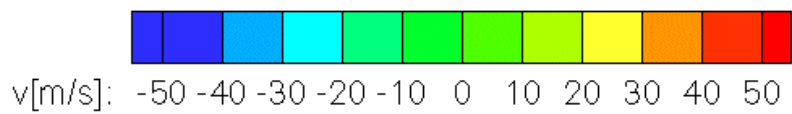
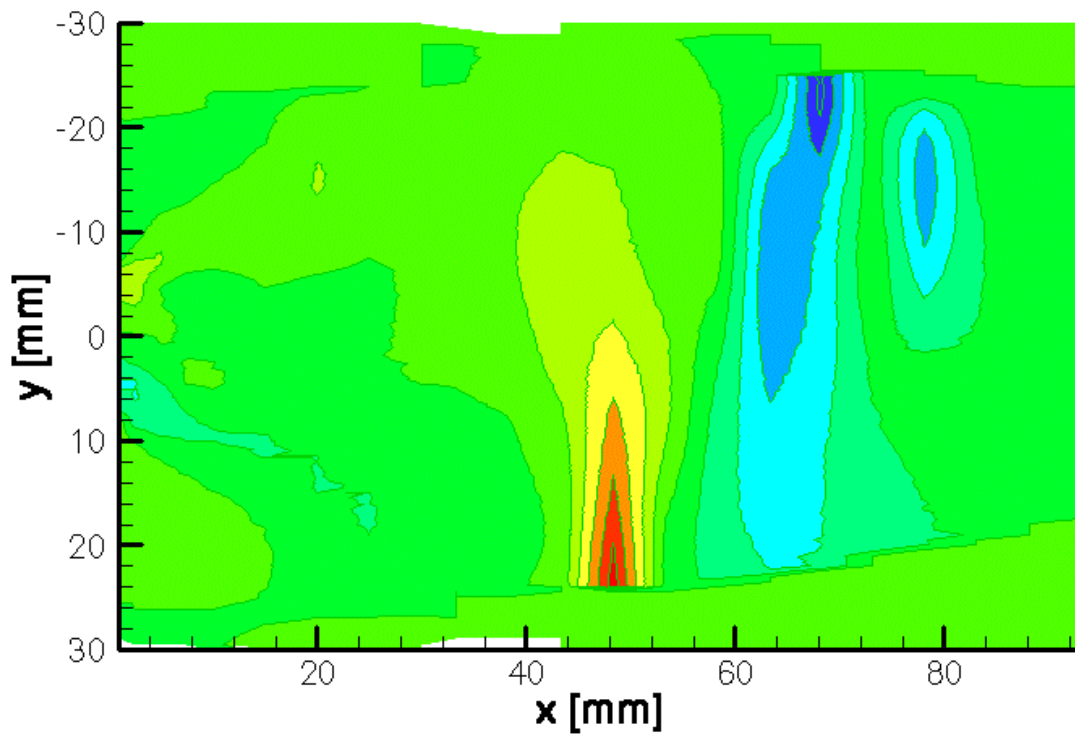


Bild 5.2.4 gemessene Radialgeschwindigkeit v

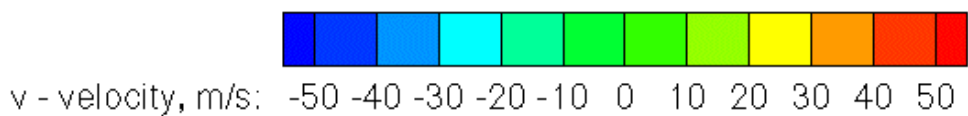
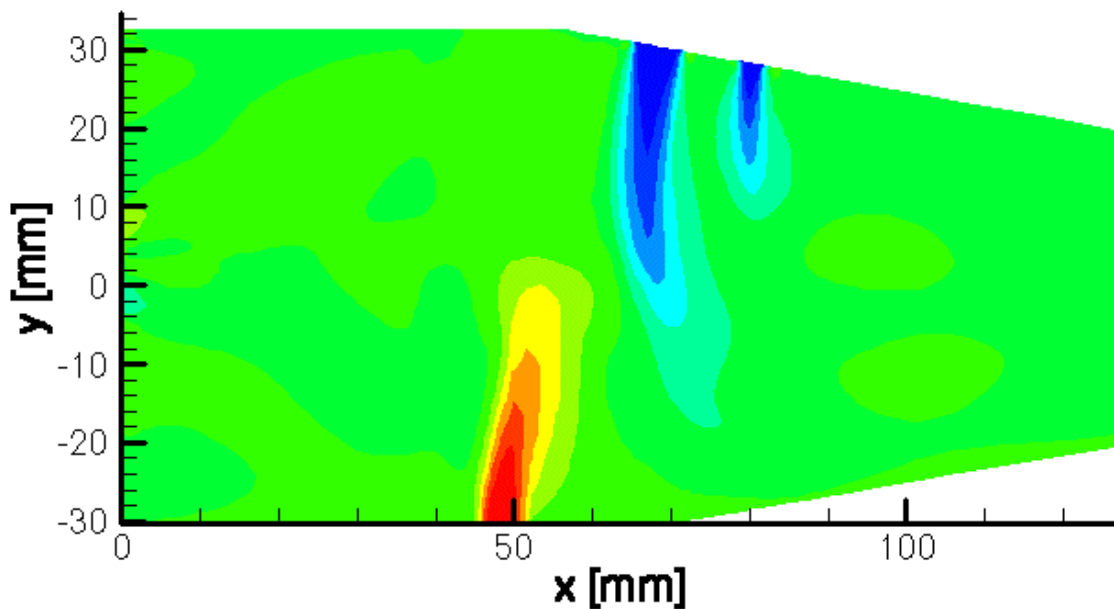


Bild 5.2.5 Mit TRUST berechnete Radialgeschwindigkeit v

In der Primärzone ist das typische Bild einer Drallströmung zu erkennen. Auf der Achse befindet sich ein inneres Rezirkulationsgebiet und in den Ecken der Brennkammer entstehen zwei Außenwirbel. Die Hauptströmung platzt zuerst auf, würde aber dann weiter stromab wieder schließen, wenn hier nicht schon der Einfluss der vertikal eingeblasenen Zumischstrahlen bemerkbar würde. Die Sekundärluft strömt bis über die Mittelachse ($y = 0 \text{ mm}$) ein. Auf Grund der inneren Rezirkulation, wird ein Teil der Luft der ersten Lochreihe in die Primärzone zurückgesaugt. Die gemessenen und berechneten Verteilungen der Geschwindigkeiten zeigen eine gute Übereinstimmung.

Für die experimentelle Bestimmung der Mischung stand am Institut für Antriebstechnik der DLR-Köln ein neu entwickeltes Messverfahren zur Verfügung. Hierbei handelt es sich um die **Quantitative-Lichtschnitt-Messtechnik (QLS)** [Voigt, 1999] die es erstmals gestattete, quantitative, zeitlich aufgelöste, zweidimensionale Messungen des Mischungsbruchs durchzuführen. Bild 5.2.6 zeigt schematisch das Prinzip dieser Messtechnik, die in [Voigt, 1999] ausführlicher beschrieben ist.

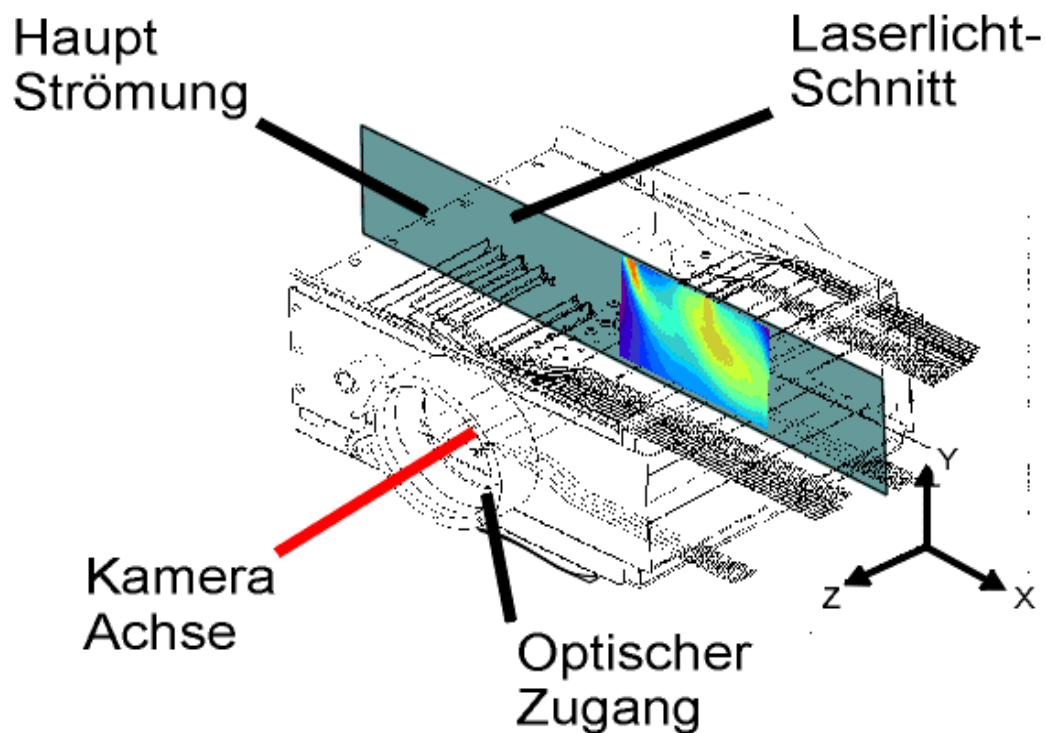


Bild 5.2.6 QLS-Aufbau am RQL-Brennkammersegment [Voigt, 1999]

Durch die zu messende Ebene wird ein Lichtschnitt gelegt. Die Sekundärluft wird weit stromauf mit einem Partikelstrom, dem sogenannten Seeding versetzt, deren Partikelgrößen $1,5\mu\text{m}$ nicht überschreiten. Dieses Seeding erzeugt im Lichtschnitt ein Streusignal, welches von einer Kamera erfasst wird. Die Intensität des Streulichtes ist im isothermen Fall eine Funktion der vorhandenen Partikel. Eine Auswertekette filtert aus den gemessenen Lichtintensitäten ungewünschte Effekte wie beispielsweise Winkelabhängigkeiten der Streuung und vieles mehr heraus. Das Resultat ist die Volumenkonzentration der Partikel. Diese ist äquivalent zur Volumenkonzentration der Sekundärluft. Da der Druck in der gesamten Kammer atmosphärisch ist und die Temperatur als annähernd konstant angesehen werden kann, ist die Volumenkonzentration gleich der Massenkonzentration. Durch Normierung mit

den gemessenen Werten am Eintritt wird daher eine quantitative Messung des Mischungsbruches erreicht.

Da dieses Messverfahren zweidimensional und relativ einfach in der Durchführung ist, konnte durch Traversion der Messebene in Millimeterschritten in Tiefenrichtung ein dreidimensionaler Datensatz erzeugt werden. Das Ergebnis ist in Bild 5.2.7 dargestellt.

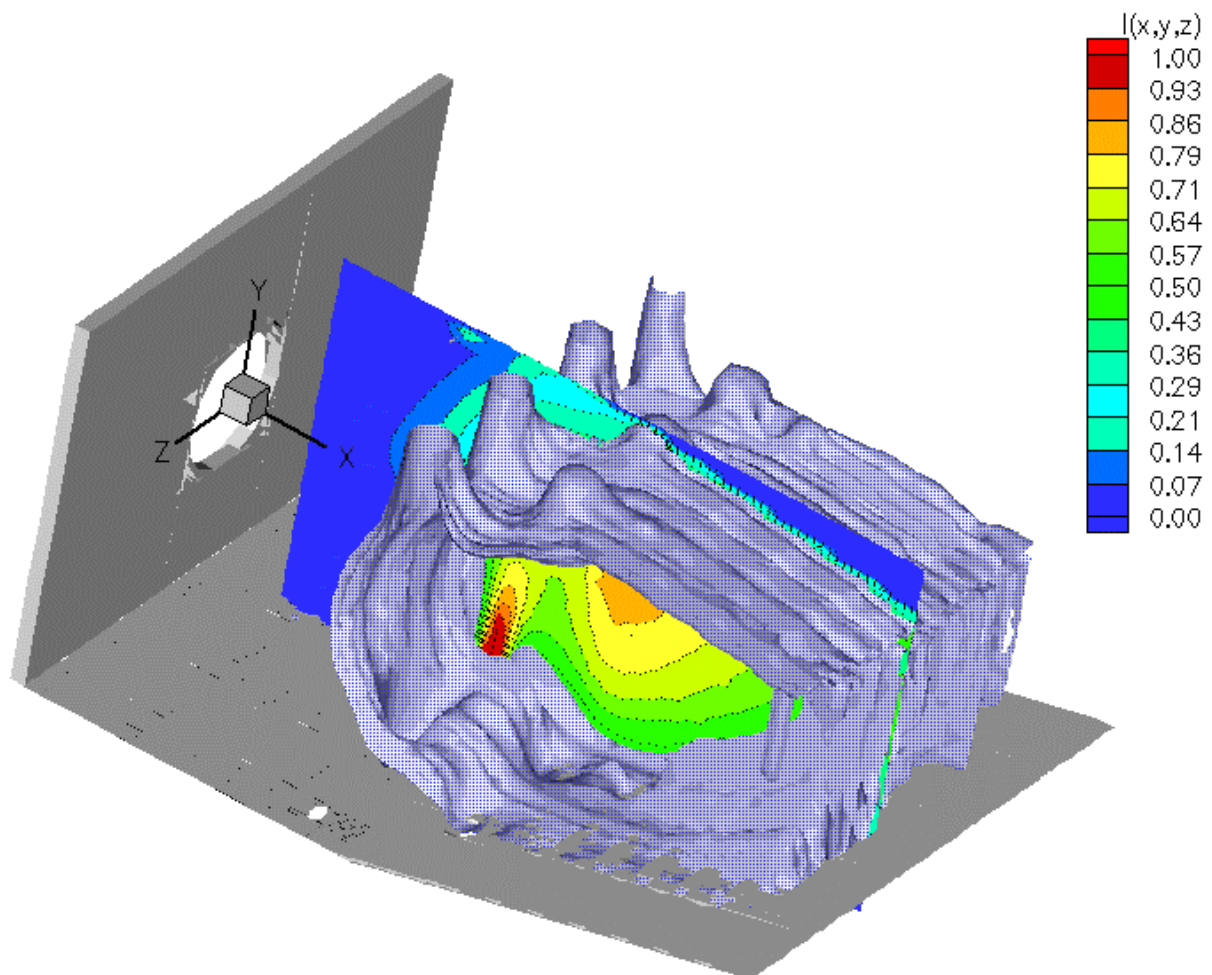


Bild 5.2.7 Mischungsfeld im Basisversuch und zentraler Längsschnitt, $z=0\text{mm}$, [Voigt, 1999]

Neben dem Mischungsfeld auf der Mittelebene ist eine beliebig gewählte Iso-Fläche des Mischungsbruches eingetragen. Das Bild zeigt in eindrucksvoller Weise die Komplexität der Mischung.

Genau wie bei den Geschwindigkeiten soll an dieser Stelle wieder der Vergleich der mittleren Ebene repräsentativ herangezogen werden. Bild 5.2.8 zeigt die gemessene Mischungsbruch-Verteilung in dieser Ebene.

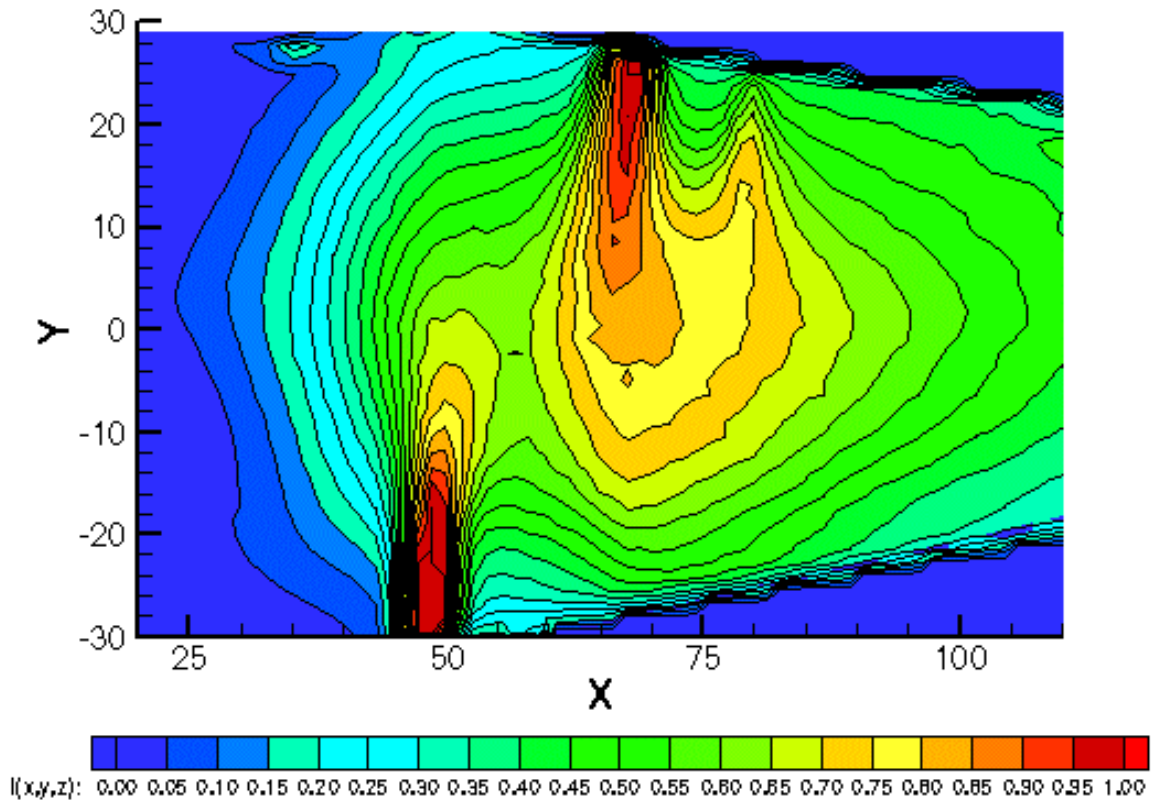


Bild 5.2.8 gemessene Mischungsbruch-Verteilung bei $z=0$

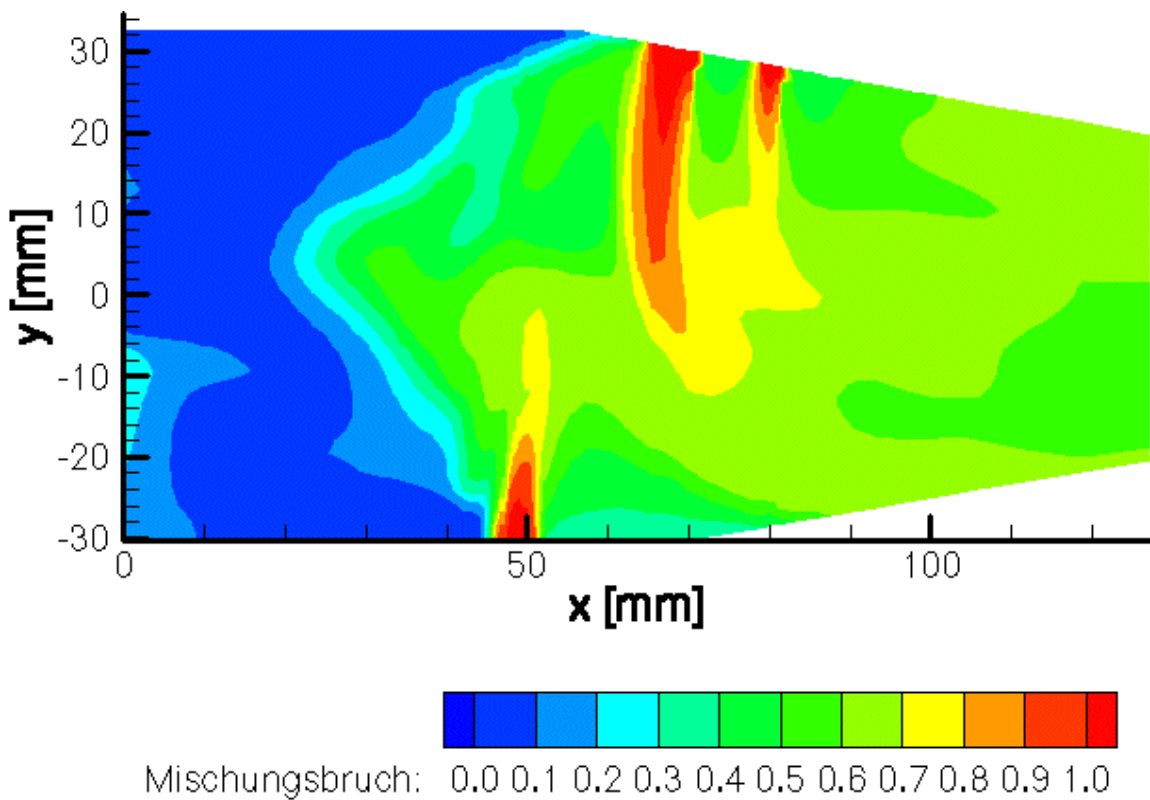


Bild 5.2.9 mit TRUST berechnete Mischungsbruch-Verteilung bei $z=0$

Die Sekundärluft vermischt sich gut mit der Primärluft. Es ist keine bleibende Strähne von Primärmaterial auf der Achse zu erkennen. Die Kanalversperrung, die durch die Querstrahlen entsteht, ist etwas zu groß, da ein Teil der Sekundärluft in die Primärzone zurück gemischt wird. Bild 5.2.9 zeigt zum Vergleich die mit dem Programm TRUST berechnete Mischung.

Das QLS-Verfahren benötigt zur Bestimmung des Mischungsbruchs zwei Referenzpunkte, um die Normierung der Massenkonzentrationen vornehmen zu können. Um den zugehörigen Streulichtintensitätswert für den Zustand Mischungsbruch gleich Null wird ein Punkt nahe der Dralldüsen in der Primärzone vermessen. Analog dazu wird die Annahme getroffen, dass im Strahlkern der Zumischstrahlen direkt am Lochaustritt der Mischungsbruch gleich eins ist [Voigt,1999]. Die in Bild 5.2.8 dargestellte Verteilung ist keine Momentaufnahme, sondern stellt durch eine hohe Belichtungszeit bereits ein Mittelwertbild dar. Die zur Normierung herangezogenen Messergebnisse sind auch dieser Mittelwertmessung entnommen. Bei der Auswertung der in Kapitel 5.3 dargestellten, kurzzeitbelichteten Aufnahmen stellte sich heraus, dass die Annahme, dass in der Zumischung der Sekundärluft noch keine Mischung stattgefunden hat, falsch ist. Tatsächlich entspricht die in den Mittelwertbildern gemessene Intensität am Lufteintritt in der Mitte des Lochquerschnitts einem Mischungsbruch von etwa $f=0.9$. Da die Rechnung von reiner Sekundärluft am Eintritt ausgeht, müssen die Rechnungen mit dem Faktor 0.9 skaliert werden.

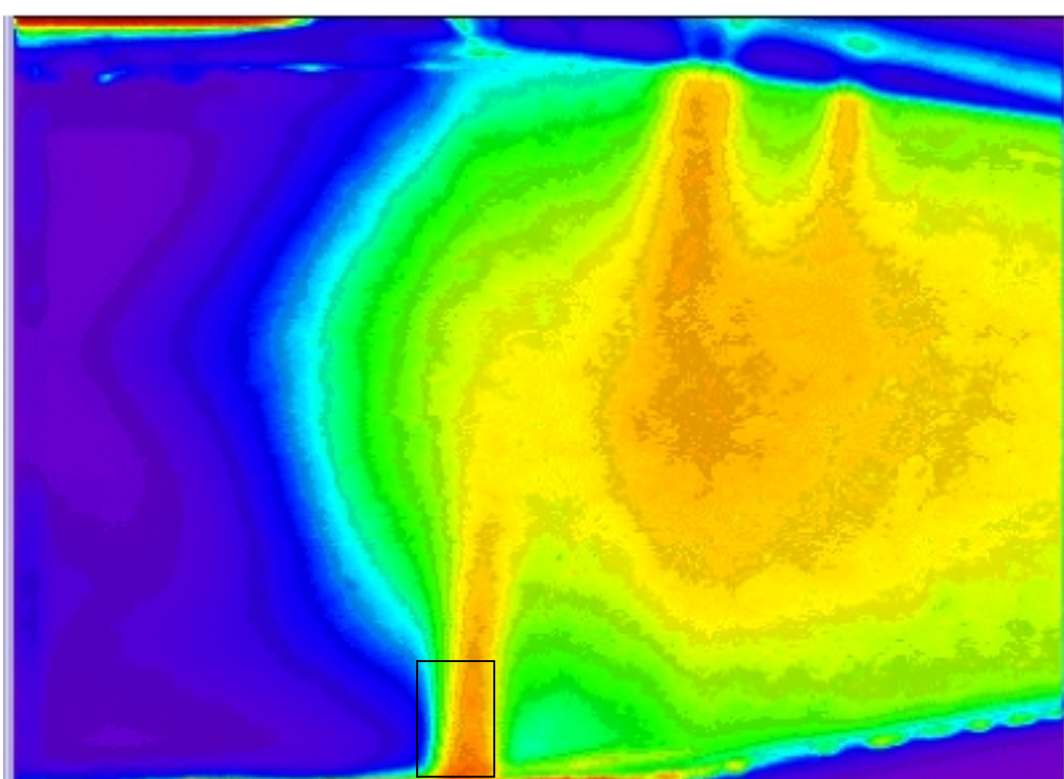
Aus der bereits guten Übereinstimmung zwischen den gemessenen und berechneten Geschwindigkeitsprofilen resultiert auch bei der Mischung eine gute Übereinstimmung zwischen Rechnung und Messung.

5.3 Auswertung der zeitlich gemittelten Messungen

Das QLS-Verfahren bietet die Möglichkeit der Messung von Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen des Mischungsbruchs für jeden Bildpunkt. In den angeführten Messungen wurde die PDF aus 64 linear skalierten Unterteilungen der Massenstromkonzentration bestimmt. Dabei wurde für jeden Bildpunkt geprüft, welchem Konzentrationsintervall der lokale Messwert zuzuordnen ist. Da der Wertebereich von c_m zwischen 0% und 100% liegt, bedeutet eine Unterteilung in 64 Datenfelder eine Intervallbreite von 1.56%. Bei 384×286 Bildpunkten können auf diese Weise 109824 lokale PDF's der Massenstrom-Konzentration bestimmt werden. Aus Gründen der Datenreduktion werden dabei jedoch Gebiete von 4×4 Bildpunkten zusammengefasst. Der in dieser Arbeit vorgestellte Messbereich entsprach einer Fläche von etwa 150 mm^2 , woraus eine mittlere Fläche von $5.4 \times 10^{-3} \text{ mm}^2$ pro Bildpunkt resultiert (vgl. Bild 5.3.1).

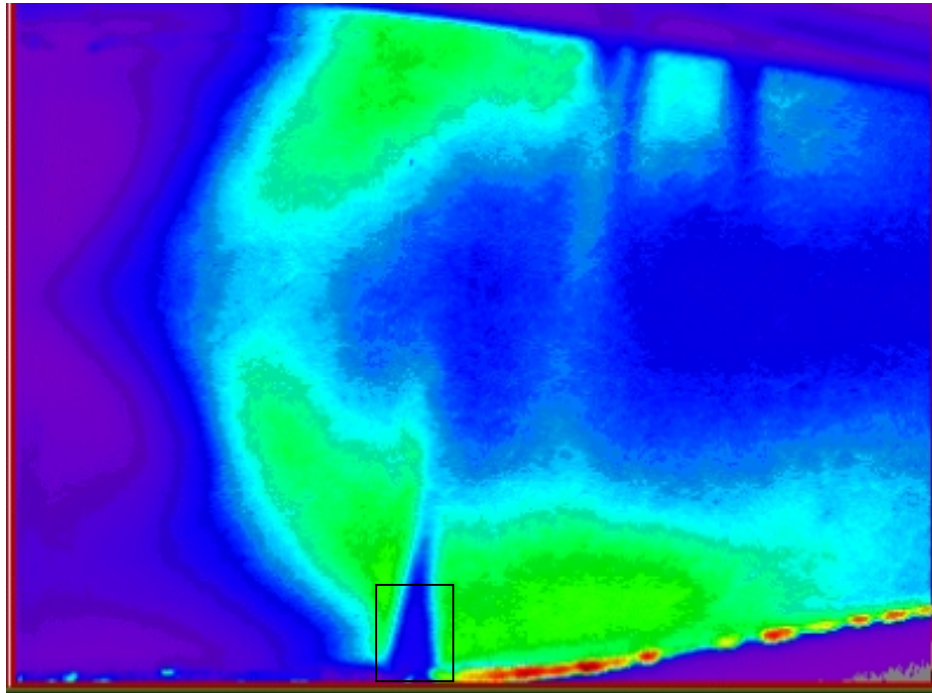
Durch diese hohe Auflösung wird erreicht, dass eine Vielzahl von möglichen PDF's erfasst werden und so eine Verallgemeinerung der Ergebnisse sichergestellt werden kann. Das Verfahren bietet weiterhin den Vorteil, dass es möglich ist, durch Vergrößerungsoptiken einen sehr kleinen Bereich mit vielen Bildpunkten aufzulösen. So können auch Mikro-Strukturen untersucht werden.

Im Folgenden werden die Ergebnisse der zeitlich aufgelösten Messungen dargestellt. Bild 5.3.1 zeigt die Verteilung des zeitlichen Mittels des Mischungsbruchs, die durch numerisches Mitteln der 10000 Bilder einer Messreihe gewonnen wurde. Die Bilder 5.3.1 und 5.3.2 zeigen einen Überblick über das gesamte Mischungsfeld. Der markierte Bereich ist der Bereich der Einblasung des ersten Zumischstrahls. Dieser Bereich wurde für die numerischen Auswertung der Messwertbilder herangezogen. Bild 5.3.2 zeigt die Verteilung der Standardabweichung des Mischungsbruchs. Bild 5.3.3 zeigt eine Momentaufnahme des vergrößerten Bildausschnitts, welcher im Folgenden genauer untersucht werden wird. Dieser Bereich wurde gewählt, weil hier der Großteil der Verbrennung stattfindet. Durch die aus der Vergrößerung resultierenden hohen räumlichen Auflösung konnten auch Mikrostrukturen berücksichtigt werden.



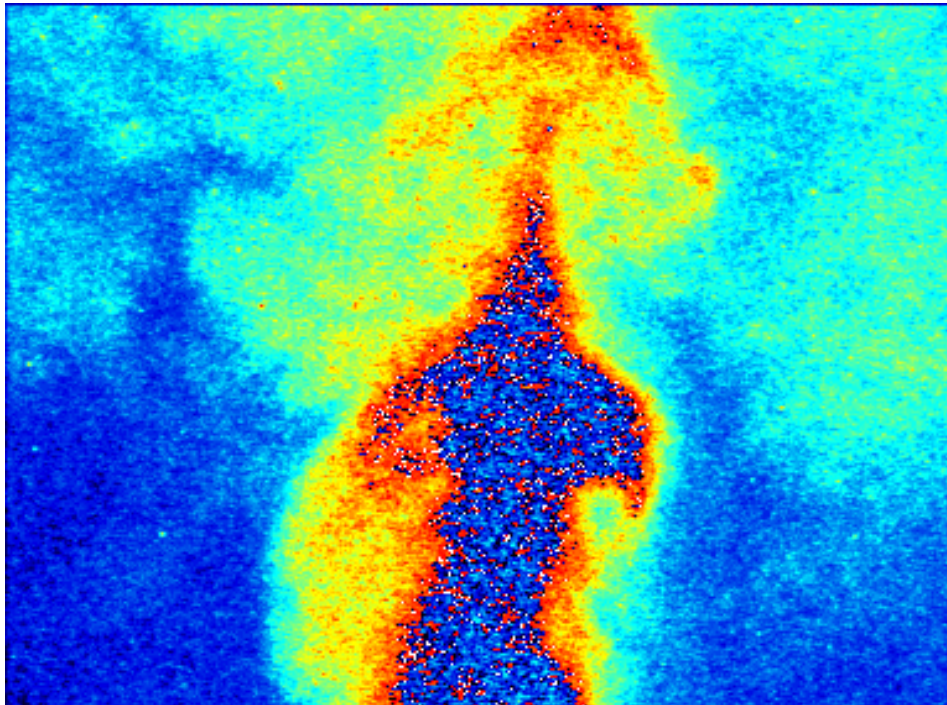
0 0.1 0.2 0.3 0.4 0.5 0.6 0.7 0.8 0.9 1

Bild 5.3.1 Konzentrationsverteilung, numerisch gemittelt über 10000 Einzelbilder



0 0.1 0.2 0.3 0.4 0.5 0.6 0.7 0.8 0.9 1

*Bild 5.3.2 RMS-Werte der Konzentration,
ausgewertet für 10000 Bilder*



0 0.1 0.2 0.3 0.4 0.5 0.6 0.7 0.8 0.9 1

*Bild 5.3.3 Pseudofarbdarstellung der Konzentrationsverteilung
als Momentaufnahme (vergrößerter Bildausschnitt)*

In Bild 5.3.3 werden die turbulenten Flammenstrukturen deutlich. Schon nach einer Mittelung von nur 16 solcher Momentaufnahmen ist ein glatter Strahlrand zu erkennen. Die numerische Simulation kann diese Strukturen mit vertretbarem Aufwand nicht auflösen. Sie würde einen glatten Strahlrand in ähnlicher Form vorhersagen, wie er im Mittelwertbild (Bild 5.3.1) gezeigt worden ist. Am Strahlrand findet jedoch der Großteil der Verbrennung statt, da hier stöchiometrische Mischung vorliegt. Verweilzeiten und räumliche Ausdehnung der stöchiometrischen Bereiche haben erheblichen Einfluss auf den chemischen Umsatz. Der Unterschied der Strahloberflächenstruktur, der durch den Vergleich der Mittelwertbilder und der Momentaufnahmen deutlich wird, zeigt die Notwendigkeit der turbulenten Betrachtung des chemischen Umsatzes.

Das Messverfahren QLS kann bei genügend vielen Momentaufnahmen für jeden Bildpunkt eine komplette Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (vgl. Kapitel 2.2.4) des Mischungsbruchs liefern. Aus dieser PDF können Mittelwert und Varianz ermittelt werden, die wiederum die Parameter der Gauß- bzw. Delta-PDF darstellen. In Bild 5.3.4 sind exemplarisch die gemessene PDF eines zufällig gewählten Bildpunktes aus der Mitte des Bildes 5.3.3 mit den aus ihr berechneten Delta-PDF und Gauß-PDF dargestellt.

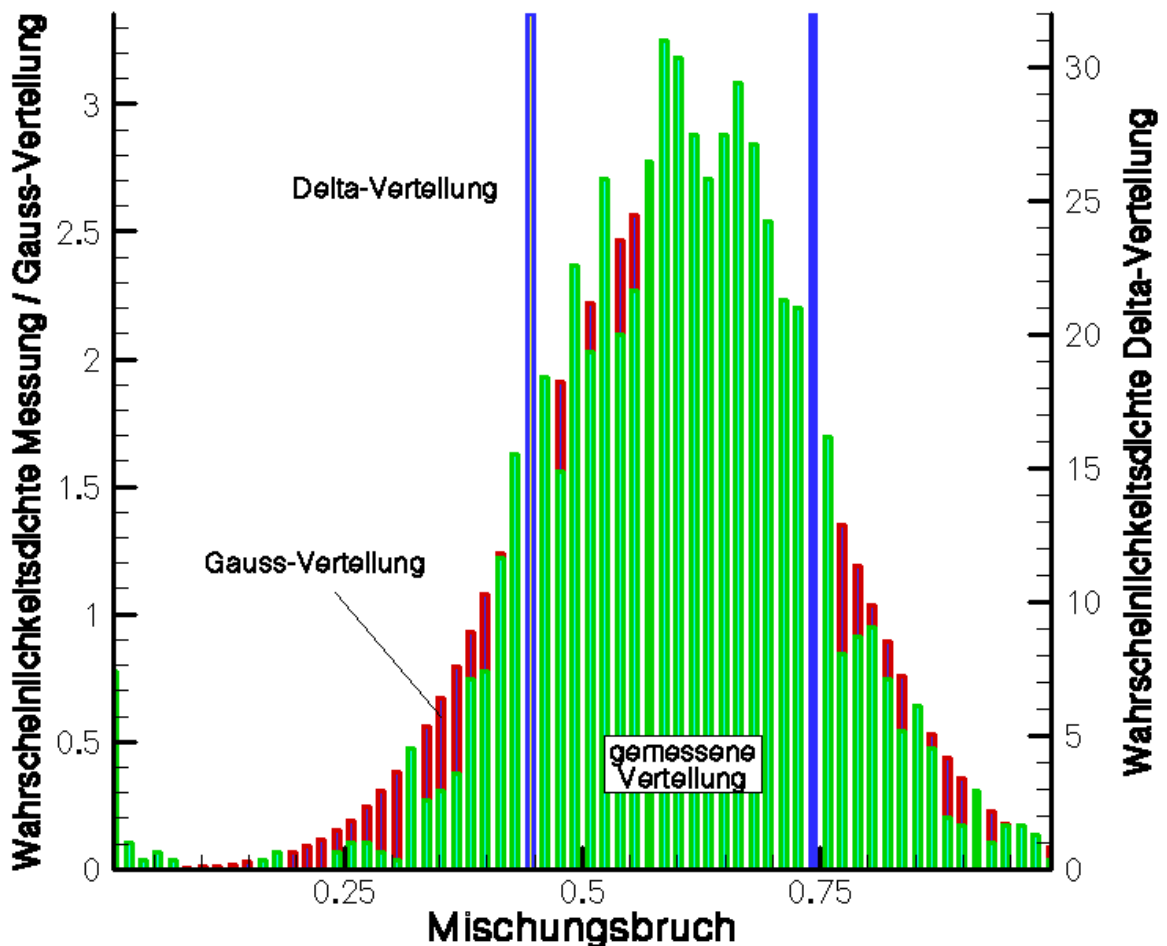


Bild 5.3.4 Vergleich von PDF-Formen

Es ist zu erkennen, dass hier die Gauß-PDF die Form der gemessenen PDF recht gut approximiert. Jedoch liefert auch schon die Doppel-Delta-PDF in vielen Fällen bei der Berechnung von zeitgemittelten Größen adäquate Ergebnisse. Ziel der nun folgenden Untersuchung ist, an Hand der Messungen zu prüfen, ob die Gauß-PDF immer eine gute Näherung

der gemessenen PDF darstellt und inwieweit die Gauß-Funktion für numerische Berechnungen der chemischen Quellterme durch eine Delta-Funktion ersetzt werden kann.

Um ein genaueres Bild der Übereinstimmung der gemessenen PDF und der daraus resultierenden Gauß-Verteilung zu bekommen, ist in Bild 5.3.5 die Verteilung des Korrelationskoeffizienten (2.63) zwischen den gemessenen Verteilungen und den aus den gemessenen Mittelwerten und Varianzen berechneten Gauß-Verteilungen im Bereich der Einblasung der ersten Strahlreihe dargestellt.

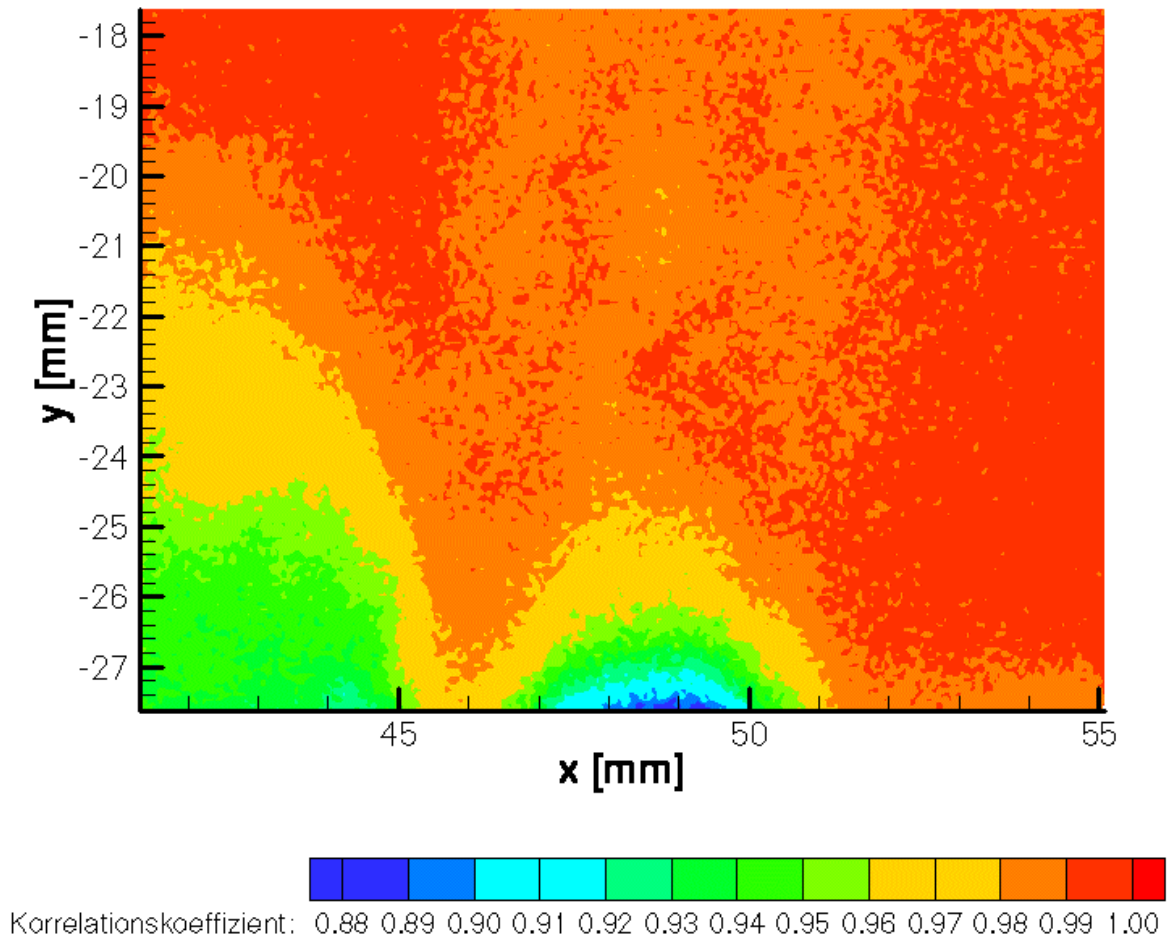


Bild 5.3.5: Korrelationskoeffizient zwischen gemessener Verteilung und Gauß-Verteilung

In den Bereichen, in denen Verbrennung stattfindet, ist der Korrelationskoeffizient zwischen der gemessenen und der Gauß-Verteilung größer als 98%. Hier kann also ohne weiteres die Gauß-Verteilung zur Berechnung der chemischen Quellterme herangezogen werden. In den Bereichen, in denen der Korrelationskoeffizient auf etwa 85% abfällt, sind die chemischen Quellterme weitgehend linear vom Mischungsbruch abhängig (vgl. Bild 4.3.4), weil hier keine nahstöchiometrischen Zustände vorliegen. Hier liefert die Integration der Quellterme mit der Gaußverteilung nur geringe Abweichungen vom Ergebnis mit Mittelung über die gemessenen PDF's. Für die Verbrennungsrechnung ist ferner nur entscheidend, dass der Fehler, der durch die Approximation der gemessenen PDF mit der Gauß-PDF entsteht, in den für die Bestimmung der Wärmefreisetzung relevanten Bereichen gering ist.

Um zu verstehen, in welchen Fällen die Gauß-Verteilung schlecht mit der gemessenen Verteilung korreliert, ist in Bild 5.3.6 eine gemessene PDF dieses Bereichs einer Gauß-Verteilung und einer Delta-Verteilung gegenübergestellt. Es handelt sich um einen Messort direkt über der Einblasung der Sekundärluft. Er steht repräsentativ für den Bereich der Strahleindringung.

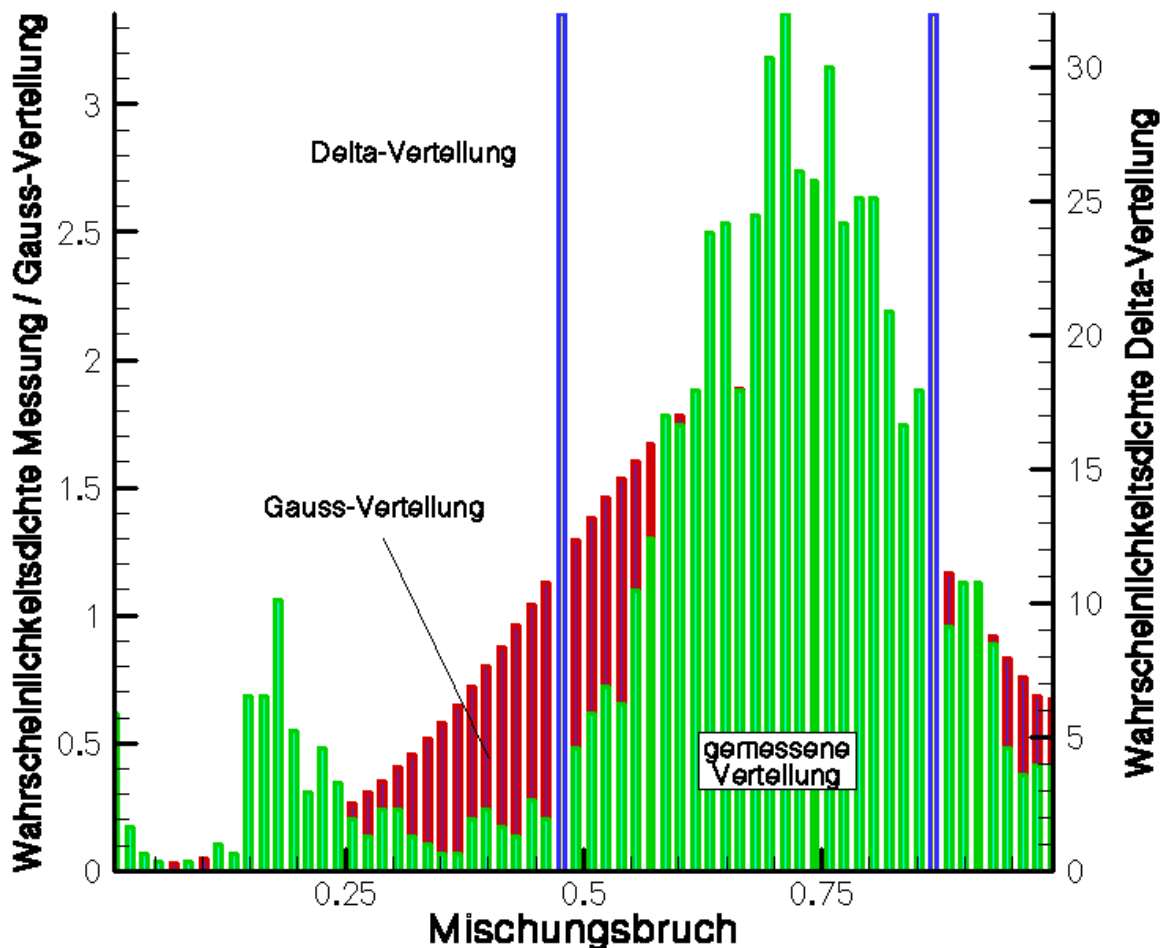


Bild 5.3.6 Vergleich von PDF-Formen
(repräsentativer Punkt am Strahleintritt)

Hier ist zu erkennen, dass die gemessene Verteilung eine Bimodalität aufweist. Der Mischungszustand pendelt zwischen zwei Zuständen hin und her.

Akustische Messungen hierzu haben gezeigt, dass die Dralldüsen der Primärzone zwei Frequenzen induzieren, die im Bereich der Mischluftstrahlen verstärkt auftreten. Es könnte also sein, dass die Schwingungen der Dralldüsen ein kurzzeitiges Abreißen der Strahlen triggern.

Im Rahmen dieser Arbeit wurde festgestellt, dass für die Integration des Produktes des chemischen Quellterms mit der Gauß-Verteilung für die Diskretisierung mindestens zehn Punkte benötigt werden. Bei einer praktischen Rechnung muss diese Integration mehrere hundert Millionen mal durchgeführt werden. Wenn man berücksichtigt, dass in weiterführenden Chemiemodellen nicht nur der Mischungsbruch, sondern auch einige Fortschrittsvariablen gewichtet werden müssen, so wird klar, dass der Aufwand für die Integration in

praktisch relevanten Fällen sehr groß ist. Daher werden die Ergebnisse der Gauß-PDF im folgenden mit Ergebnissen, die aus der Integration der wesentlich schneller zu berechnenden Delta-PDF erhalten werden, verglichen.

Das Ergebnis der Integration hängt nicht nur von der Form der PDF ab, sondern auch von der zugrunde liegenden Funktion des Momentanwerts der Quellterme, da diese eine starke Nichtlinearität aufweist. Um Aussagen über die Eignung einer PDF für die Berechnung der mittleren chemischen Quellen machen zu können, wird eine Testfunktion benötigt, die dem Verlauf der Momentanwerte der chemischen Quellen möglichst ähnlich ist. Zu diesem Zweck werden im Folgenden Gleichgewichtswerte für Temperatur und Stickoxid-Produktionsrate in Abhängigkeit des Mischungsbruchs bestimmt, deren Randwerte üblichen Bedingungen in Fett-Mager-Brennkammern entsprechen:

Mischungsbruch=0:

(entspricht der Rauchgas-Zusammensetzung der Primärzone im heißen Fall)

- Gleichgewichtszusammensetzung von Kerosin-Verbrennung bei $\lambda=0.61$
- $T = 2050 \text{ K}$

Mischungsbruch=1:

- Luft
- $T = 700 \text{ K}$

Aus jeder gemessenen PDF ergibt sich je ein Mittelwert und eine Standardabweichung. Mit diesen beiden Werten wird eine Delta-PDF gemäß Kapitel 2.3 bestimmt. Die Quellterme werden an Hand eines Gleichgewichtsalgorithmus (vgl. Kapitel 4.3) aus den Momentanwerten des Mischungsbruchs bestimmt. Gleichung (2.46) liefert nun für jeden Bildpunkt mittlere thermodynamische Zustände, die äquivalent zu den Zuständen in einem heißen Fall wären, der das gleiche turbulente Strömungsverhalten aufweist. Durch diese Vorgehensweise ist es möglich, tatsächlich Berechnungsunterschiede, die nur die Chemie-Modelle betreffen, aufzuzeigen. Bisher wurden Vergleiche von Chemie-Modellen meist durch fehlerhaft berechnete Mischungen aufgrund unzureichender Turbulenzmodelle verfälscht. Durch die vollkommene Entkopplung des Strömungsverhaltens von der chemischen Reaktion in dieser Modellrechnung konnte dieser Fehler ausgeschlossen werden.

In Bild 5.3.7 ist die absolute Abweichung der resultierenden Temperaturen für jeden Bildpunkt dargestellt, die sich einmal aus der Mittelung mit der gemessenen PDF und einmal aus der Mittelung der Gleichgewichtstemperaturen mit der Delta-PDF ergibt.

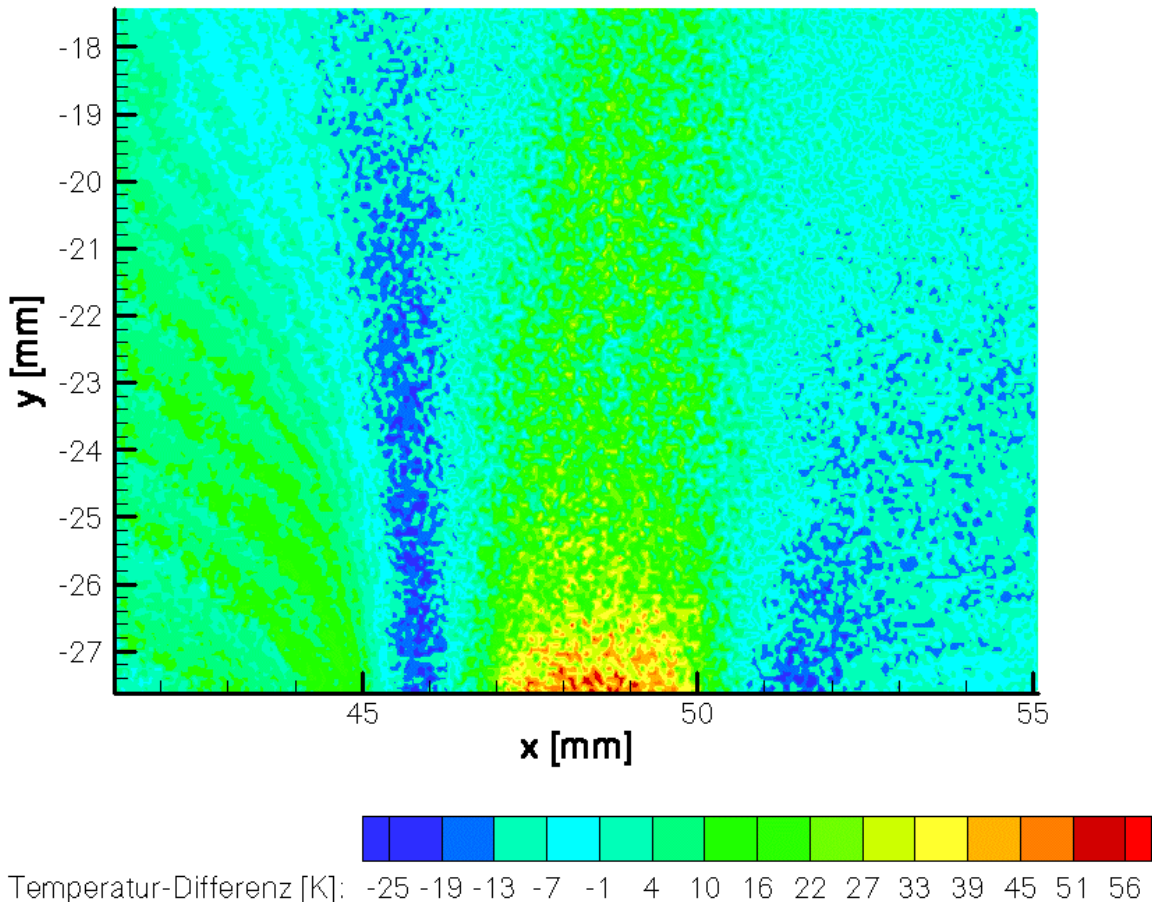


Bild 5.3.7 Absolute Abweichungen der mittleren Temperaturen, Berechnung mit gemessener PDF und Delta-PDF ($T_{ref} = 700K$)

In Bild 5.3.7 ist zu erkennen, dass in weiten Bereichen die Abweichung sehr klein ist, d.h. dass zur Berechnung der Wärmefreisetzung die Gaußverteilung durch die wesentlich schneller zu berechnende Delta-PDF ersetzt werden kann. Im Bereich der Einblasung der Strahlen ($x \approx 48.5$ mm, $y \approx -27.4$ mm) kommt es zu geringen Abweichungen, die auf die bereits erwähnte Bimodalität zurückzuführen sind. Diese Fehler treten auch bei der Mittelung mit der Gauß-Verteilung auf. Das Phänomen der Bimodalität kann mit einer zweiparametrischen PDF nicht mehr gut beschrieben werden.

Stickoxide hängen nichtlinear von der Temperatur ab und linear von der Sauerstoffradikalkonzentration. In Bild 5.3.8 ist die gleiche Untersuchung, wie zuvor für die Temperatur, für den Produktionsterm des thermischen Stickoxids nach Zeldovic' durchgeführt.

Hier sind im auch im stöchiometrischen Bereich starke Abweichungen zu erkennen. Dies liegt daran, dass Sauerstoff-Radikale, die zur Bildung des thermischen Stickoxids notwendig sind, nur im nahstöchiometrischen Bereich und dort mit hohen Gradienten in Mischungsbruchrichtung auftreten. Die Überlagerung dreier nichtlinearer Funktionen kann durch eine einfache Doppel-Delta-Approximation nicht mehr angenähert werden. Die Berechnung der mittleren Produktionsrate des thermischen Stickoxids wird also wesentlich durch die Form der angenommenen Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion beeinflusst.

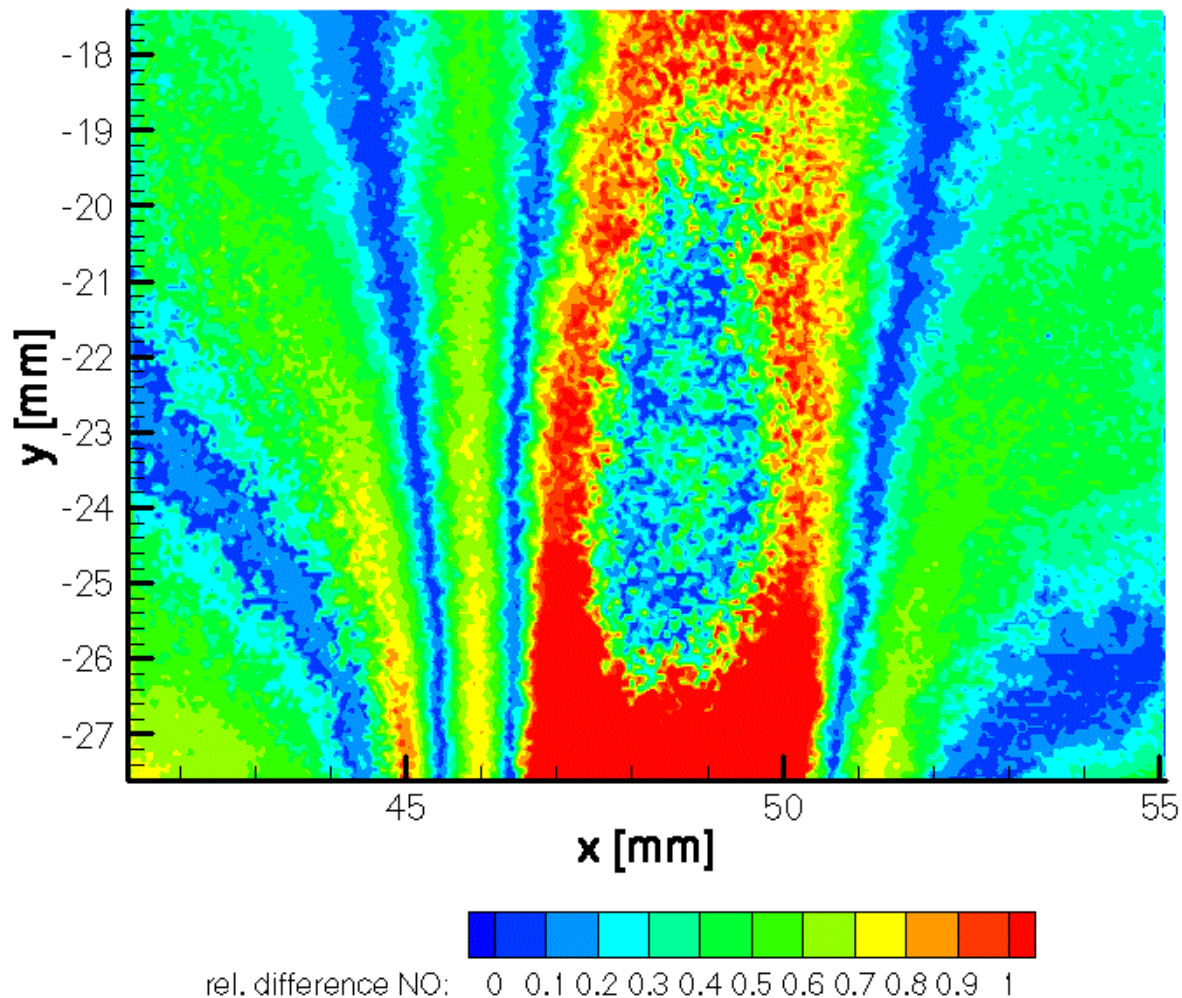


Bild 5.3.8 relative Abweichungen der mittleren Stickoxidproduktion, Berechnung mit gemessener PDF und Delta-PDF

Zusammenfassend ergibt sich, dass für die Berechnung der mittleren Wärmefreisetzung durch chemische Reaktion eine Delta-Approximation gemäß der in dieser Arbeit vorgeschlagenen Vorgehensweise (vgl. Kapitel 2.3) ausreichend genaue Ergebnisse liefert. Bei einfachen Gleichgewichtsmodellen kann hier eine Rechenzeitbeschleunigung von mindestens einer Größenordnung gegenüber der normalerweise üblichen Gauß-Mittelung erreicht werden. Durch die Wahl eines komplexen, praxisnahen Strömungszustandes als Versuchsobjekt und durch die hohe Anzahl von betrachteten Punkten kann dieses Ergebnis verallgemeinert werden. In Kapitel 6 wird eine ähnliche Untersuchung mit einem anderen Messverfahren und an einem anderen Anwendungsfall vorgenommen. Dabei wurden gleichlautende Ergebnisse erzielt.

Zur Berechnung von thermischen Stickoxiden reicht diese Näherung nicht mehr aus. In Rahmen dieser Arbeit wurde festgestellt, dass die Doppel-Delta-Funktion die Sauerstoffradikale nicht in ausreichend genauer Form vorhersagt. Hier muss zur Bestimmung eine kontinuierliche PDF herangezogen werden, wie beispielsweise die Gauß-Verteilung.

Es ist dennoch nicht notwendig, während der gesamten Strömungsberechnung die aufwendige Gauß-Verteilung anzuwenden. Da die Rückwirkungen der Radikalkonzentrationen auf das Strömungsfeld nur marginal sind, genügt es, bis zum stationären Zustand die Delta-Integration für die Bestimmung der chemischen Quellen vorzunehmen und die mittlere

Stickoxid-Produktionsrate danach im Postprocessing an Hand der Gauß-Verteilung zu bestimmen.

In Kapitel 6 wird die soeben durchgeführte Betrachtung für ein System mit Verbrennung durchgeführt. Neben der Mischungsbruch-PDF werden in gleicher Weise die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen zweier Fortschrittsvariablen untersucht werden. Ziel ist es wiederum, herauszufinden, ob und inwieweit die Gauß-Verteilung durch eine Delta-PDF ersetzt werden kann. Da es sich hier um eine dreidimensionale Integration handelt, wird hier ein Beschleunigungspotential von mehr als drei Größenordnungen für die Rechenzeit erwartet.