

Simulation der vorgemischten
Verbrennung in einem realen Motor mit
dem Level-Set-Ansatz

DISSERTATION

zur Erlangung des Grades eines Doktors der
Naturwissenschaften
der Fakultät für Mathematik und Physik
der Eberhard-Karls-Universität zu Tübingen

vorgelegt von
Eberhard Kraus
aus Göppingen

2007

Tag der mündlichen Prüfung: 10. Oktober 2006

Dekan: Prof. Dr. Nils Schopohl

1. Berichterstatter: Prof. Dr. Hanns Ruder

2. Berichterstatter: Prof. Dr.-Ing. Dr. h. c.
Dr.-Ing. E. h. Norbert Peters

3. Berichterstatter: Prof. Dr. Wolfgang Hillebrandt

für Julia

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	4
1.1	Motivation	4
1.2	Der Ottomotor	6
1.2.1	Kurzer geschichtlicher Abriss	6
1.2.2	Arbeitsweise und begriffliche Definitionen	7
1.3	Gliederung der Arbeit	11
2	Turbulente Strömungen	12
2.1	Phänomenologie	12
2.2	Reynoldszersetzung	15
2.3	Grundgleichungen	18
3	Laminare Verbrennung	24
3.1	Phänomenologie	24
3.2	Laminare Brenngeschwindigkeit	26
3.3	Flammenstreckung	28

4	Turbulente Verbrennung	31
4.1	Einteilung der Verbrennungsregimes	31
4.2	Modellierungsansatz	35
4.3	Eddy-Breakup Modell (EBU)	38
4.4	Extended Coherent Flame Model (ECFM)	40
4.5	Die G -Gleichung	41
4.5.1	Herleitung	42
4.5.2	Transformationseigenschaften von G	43
4.5.3	Eichfixierung von G	45
4.5.4	Felder F auf der Flammenfront	46
4.5.5	Eichfixierung von F	48
4.5.6	Favre-gemittelte Gleichungen	50
4.5.7	Reinitialisierung	51
4.5.8	Konvektion	55
4.5.9	Reaktionsrate	55
4.6	Weller-Modelle	56
4.7	Turbulenz und Zwei-Phasenproblematik	59
4.7.1	Auswirkungen auf das k - ϵ -Modell	59
4.7.2	Methode 1: Einführung einer zweiten Turbulenzgleichung	60
4.7.3	Methode 2: Rekonstruktion beider Phasen	61
4.7.4	Zweiphasige Turbulenzquellterme	63
4.8	Turbulente Brenngeschwindigkeit	64
4.8.1	Phänomenologische Modelle	65
4.8.2	Fraktale Modelle	66
4.9	Reaktionsmodell	67

5	Ergebnisse	69
5.1	Einfache Testfälle	69
5.1.1	Eingleichungs-Weller-Modell ohne Diffusion	70
5.1.2	Validierung der Zwei-Phasen Rekonstruktion	71
5.1.3	Netzabhängigkeit	74
5.2	Motorergebnisse	80
5.2.1	Generelles Vorgehen	80
5.2.2	Betriebspunkte	81
5.2.3	Ladungswechsel	82
5.2.4	Verbrennung	86
6	Zusammenfassung und Ausblick	95

Kapitel 1

Einleitung

1.1 Motivation

Erst seit etwa hundert Jahren existiert der Verbrennungsmotor, doch ist die heutige Gesellschaft ohne ihn undenkbar. Zu Wasser, zu Lande und in der Luft ermöglicht er eine in früheren Zeiten unvorstellbare Mobilität, die die Welt zusammenrücken lässt. Was dem einen nur ein Fortbewegungsmittel, ist dem anderen Hobby oder ein Stück Lebensqualität. Leistung und Drehmoment sind immer noch begehrtere Eigenschaften, doch auch andere rücken ins Blickfeld: Geräusch, Schadstoffe und Verbrauch. Die Gesetzgebung fordert immer schärfere Grenzwerte für Emissionen. Diese können allerdings regional unterschiedlich definiert sein. Allgemein wird jedoch erwartet, dass der Dieselmotor einen Teil seines Verbrauchsvorteils der Einhal-

tung der strikteren Emissionsvorschriften opfern muss und dies eine Chance für den Benzinmotor ist, Boden wett zu machen. Der Ottomotor mit seiner vorgemischten Verbrennung hat durch den 3-Wege-Kat niedrige Emissionen. Weitere Anstrengungen gehen in Richtung Verbrauch, denn die europäische Automobilindustrie hat sich freiwillig verpflichtet, bis zum Jahre 2008 den Flottenverbrauch auf 140 g CO₂/km zu reduzieren, was etwa 5,2 l Benzin pro 100 km entspricht. Interessanterweise wird dieses Thema in anderen Nationen weniger diskutiert. So ist z.B. für den durchschnittlichen US-Bürger ein optimaler *Cup-Holder* für den Kauf eines Fahrzeugs ausschlaggebender als der Verbrauch. Um hierzulande den Verbrauch zu reduzieren, wird an den unterschiedlichsten Strategien geforscht. Einen immer größer werdenden Beitrag dazu liefert die Computersimulation, um schon vor den eigentlichen Versuchen eine Vorauswahl von Geometrien und Betriebsparametern zu ermöglichen und während der experimentellen Phase zum Verständnis der innermotorischen Vorgänge beizutragen. Dazu werden Modelle benötigt, die die physikalischen Prozesse im Brennraum korrekt beschreiben und die numerischen Fehler minimieren. Von der Theorie her gehören diese Simulationen wohl zu den schwierigsten, behandeln sie doch turbulente reaktive mehrphasige Strömungen in komplexen bewegten Geometrien. Als Folge sind die Modelle bisher auch nur eingeschränkt vorhersagefähig. Diese Arbeit beschränkt sich auf einen kleinen, aber wesentlichen Teil der Motorsimulation: die vorgemischte Verbrennung. Gängige Modelle weisen immer noch eine Reihe von Schwächen auf, entweder numerischer oder physikalischer Natur. Hier wird ein Modell weiterentwickelt, das diese Schwächen vermeidet, und das zwei alternativen Modellen gegenübergestellt wird.

1.2 Der Ottomotor

Motorische Brennverfahren lassen sich auf eine Vielzahl unterschiedlicher Arten charakterisieren (Heywood 1988), z.B. durch Anwendungsgebiet (Automobil, Schienenfahrzeug, tragbare Anwendungen, ...), grundsätzliches Design (Hub-Kolben, Rotationskolben), Gemischbildung (Vergaser, Kanaleinspritzung, Direkteinspritzung), Kraftstoff, etc. Die Art der Zündung spielt dabei eine besondere Rolle. Der Ottomotor, wie wir ihn hier betrachten, zeichnet sich dabei vor allem dadurch aus, dass das verdichtete, annähernd homogene Kraftstoff-Luft-Gemisch durch eine Zündkerze gezündet wird, im Gegensatz zum Dieselmotor, bei dem sich das Gemisch durch die Kompression spontan selbst entzündet.

In den folgenden beiden Abschnitten soll ein Überblick über den Ottomotor gegeben werden, zum einen ein kurzer geschichtlicher Hintergrund, zum anderen eine Einführung in die begrifflichen Definitionen, die in dieser Arbeit verwendet werden.

1.2.1 Kurzer geschichtlicher Abriss

Das Ende der Dampfmaschine wurde 1860 mit dem Gasmotor von J. J. E. Lenoir (1822–1900) und dem sog. atmosphärischen Flugkolbenmotor von Nikolaus Otto (1832–1891) und Eugen Langen (1833–1895) eingeläutet, die die Brennstoffenergie ohne den Zwischenschritt der Dampferzeugung direkt in Arbeit umwandelten. Der Flugkolbenmotor war ein stehender, nach oben offener Einzylindermotor, bei dem der Kolben nach dem Ansaugen und Zünden nach oben flog und bei der Abwärtsbewegung Arbeit verrichtete. Wie beim Gasmotor wurde noch ohne Vorverdichtung des Arbeitsgases gearbeitet. Auf

der Weltausstellung 1867 erhielt er die Goldmedaille. 1872 wurde daraufhin die Gasmotorenfabrik Deutz AG gegründet, die jährlich 80 Flugkolbenmotoren produzierte, mit Gottlieb Daimler als technischem Direktor und Wilhelm Maybach als Leiter des Konstruktionsbüros. Otto entwickelte dort 1876 den ersten 4-Takt-Motor mit einer Leistung von ca. 3 PS, der von Maybach zur Serienreife weiterentwickelt wurde und noch im gleichen Jahr auf den Markt kam. Daimler und Maybach trennten sich 1882 von der Deutz AG und gründeten in Cannstatt eine eigene Firma, wo sie einen leichten mobilen Motor entwickelten und 1885 in das erste Motorrad, die sog. Standuhr (0,5 PS) einbauten. 1886 folgte das erste Kraftfahrzeug. Weitere Fortschritte folgten schnell, aber am richtungsweisenden Prinzip von Ottos Motor hat sich bis heute nichts geändert.

1.2.2 Arbeitsweise und begriffliche Definitionen

Ein sich bewegnender Kolben verrichtet Arbeit über die Pleuelstange und die Kurbelwelle, wobei die Rotation der Kurbelwelle eine periodische Bewegung des Kolbens verursacht. Umkehrpunkte der Bewegung sind der obere Totpunkt (OT) und der untere Totpunkt (UT), wo der Kolben zur Ruhe kommt. Die Position des Kolbens wird üblicherweise in Grad Kurbelwinkel ($^{\circ}$ KW) gezählt (vgl. Abbildung 1.1). Während der Bewegung ändert sich der Brennraum um das Hubvolumen V_H , am oberen Totpunkt bleibt das Totvolumen V_T . Das Verhältnis von maximalem zu minimalem Volumen nennt man das Kompressionsverhältnis ϵ , bei Ottomotoren gilt typischerweise $8 < \epsilon < 12$, für Dieselmotoren $12 < \epsilon < 24$.

Ein kompletter Zyklus unterteilt sich beim 4-Takt-Motor in vier Schritte. Beginnend bei der Kolbenposition in OT bewegt sich der

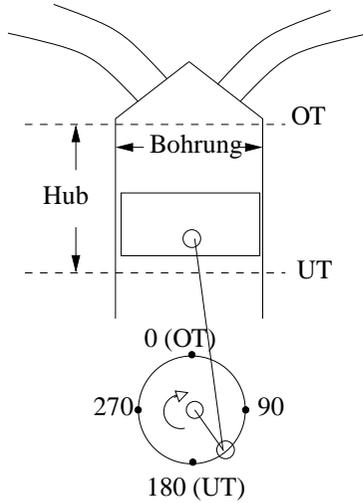


Abb. 1.1: Prinzipskizze eines Zylinders und Notation.

Kolben abwärts und saugt durch das geöffnete Einlassventil frisches Kraftstoff-Luft-Gemisch an. An UT angelangt, schließt das Einlassventil, und der sich nach oben bewegende Kolben komprimiert das Gas. Kurz vor OT wird das Gemisch entzündet. Um Verwechslungen zu vermeiden, wird dieser obere Totpunkt meist mit ZOT abgekürzt. Durch die Expansion des verbrennenden Gases wird der Kolben nach unten gedrückt bis UT. Der vierte und letzte Takt schiebt das verbrannte Gas durch das geöffnete Auslassventil nach aussen. Ein gesamtes Arbeitsspiel dauert somit zwei volle Umdrehungen bzw. 720°

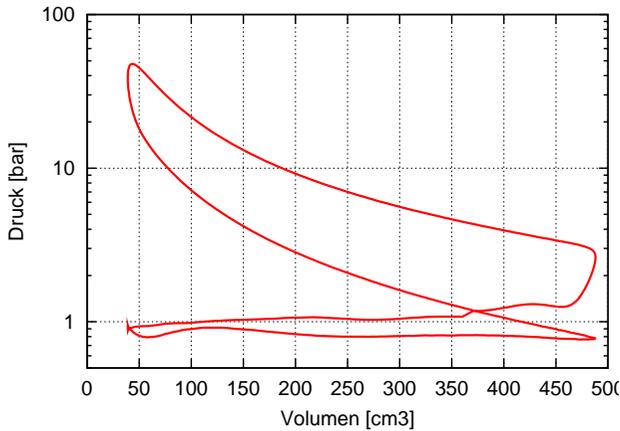


Abb. 1.2: Beispiel für ein p - V -Diagramm.

KW. Aus dem p - V -Diagramm lässt sich die Arbeit berechnen, die vom Gas am Kolben verrichtet wird (Abbildung 1.2). Die indizierte Arbeit pro Zylinder pro Arbeitsspiel ist

$$W = \oint p dV \quad , \quad (1.1)$$

und für die Leistung pro Zylinder gilt mit der Drehzahl N bzw. dem Drehmoment M

$$P = \frac{1}{2} W N = 2\pi N M \quad . \quad (1.2)$$

Leistung und Drehmoment sind abhängig von der Größe des Motors.

Eine unabhängigere Größe erhält man durch Division durch das Hubvolumen. Der dadurch gewonnene indizierte mittlere Druck p_{mi} ist

$$p_{mi} = \frac{W}{V_H} \quad . \quad (1.3)$$

Durch Reibung und Ladungswechselverluste steht nur noch ein geringerer Teil der Leistung an der Kurbelwelle zur Verfügung. Dadurch erhält man den effektiven mittleren Druck

$$p_{eff} = \eta_m p_{mi} \quad , \quad (1.4)$$

mit dem Koeffizienten $\eta_m \approx 0,75-0,9$ unter Volllast, und $\eta_m \rightarrow 0$ bei höherer Drosselung bzw. im Leerlauf. Mit dem maximalen effektiven mittleren Druck lässt sich die Effizienz verschiedener Motoren gut vergleichen. Ein typischer Wert liegt für Saug-Motoren bei $p_{eff,max} \approx 10$ bar.

Für die Verbrennung ist die Zusammensetzung des Arbeitsgases von wesentlicher Bedeutung, dabei spielt das Verhältnis von Kraftstoff und Luft eine wichtige Rolle. Dieses Kraftstoff-Luft-Verhältnis A/F lässt sich z.B. aus gemessenen Massenströmen von Kraftstoff \dot{m}_f und Luft \dot{m}_a berechnen:

$$A/F = \frac{\dot{m}_a}{\dot{m}_f} \quad .$$

Zusammen mit dem stöchiometrischen Kraftstoff-Luft-Verhältnis $(A/F)_s$ erhalten wir die Luftzahl λ

$$\lambda = \frac{A/F}{(A/F)_s} \quad . \quad (1.5)$$

Für $\lambda > 1$ liegt ein sauerstoffreiches (mageres), für $\lambda < 1$ ein kraftstoffreiches (fettes) Gemisch vor. Den Kehrwert $1/\lambda$ bezeichnet man als Äquivalenzverhältnis Φ .

1.3 Gliederung der Arbeit

In den folgenden Kapiteln wird ein in sich schlüssiges Modell für die turbulente vorgemischte Verbrennung erarbeitet. In Kapitel 2 werden turbulente Strömungen diskutiert und die zur Beschreibung nötigen Gleichungen eingeführt. Ottomotorische Verbrennung findet lokal laminar statt. Die Grundlagen dazu, soweit sie notwendig erscheinen, werden in Kapitel 3 referiert. Kapitel 4 schließlich enthält die wesentlichen Voraussetzungen für die turbulente Verbrennung, dazu die Modellbildung für das G -Gleichungsmodell und die Gleichungen für zwei zum Vergleich herangezogene Modelle, das ECFM-Modell und das Weller-Modell. In Kapitel 5 werden die Ergebnisse diskutiert, angefangen bei einfachen Testfällen bis zu den realen Motorrechnungen. Eine Zusammenfassung in Kapitel 6 rundet die Arbeit ab.

Kapitel 2

Turbulente Strömungen

Die in dieser Arbeit verwendeten Modelle wurden in einen vom Los Alamos National Laboratory als Quelltext vorliegenden in Fortran 77 programmierten CFD-Code *Kiva-3V* implementiert (Amsden et al. 1989, Amsden 1993, 1997). Dieser beinhaltet einen Löser zur Berechnung von instationären kompressiblen dreidimensionalen turbulenten reaktiven Strömungen mit Tröpfchen in bewegten Gittern. In diesem Kapitel wird auf die zugrundeliegenden Gleichungen eingegangen werden.

2.1 Phänomenologie

Turbulente Strömungen zeichnen sich aus durch starke räumliche und zeitliche Schwankungen aller physikalischer Größen. Typischerwei-

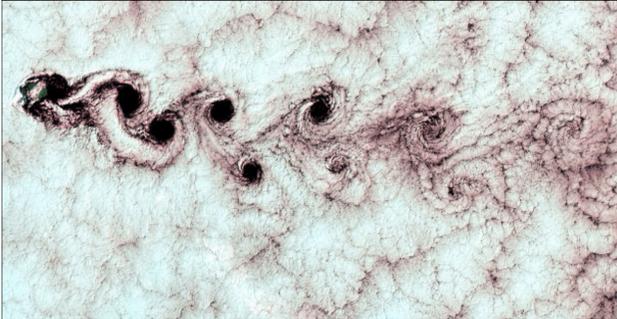


Abb. 2.1: Eine Wirbelstraße bildet sich aus der Wolkendecke hinter der Robinson Crusoe Insel im Südpazifik, aufgenommen vom Landsat-7 Satellit am 15.9.1999.

se prägen sich Wirbelstrukturen aus, die über einen weiten Längenskalenbereich zu finden sind. Bekanntestes Beispiel ist die *von Karman'sche Wirbelstraße*, die sich hinter einem Hindernis ausbildet. Abbildung 2.1 zeigt eine Wirbelstraße hinter der Robinson Crusoe Insel im Südpazifik. Diese erhebt sich ca. 1,6 km über den Meeresspiegel und bildet ein Hindernis für die anströmende Wolkendecke. Für jede Längenskala kann eine turbulente Reynolds-Zahl

$$Re_t(l) = \frac{v(l)l}{\nu}$$

definiert werden, wobei $v(l)$ die typische Geschwindigkeit eines Wirbels der Größe l ist, ν die kinematische Viskosität. Die größten Wirbel liegen in der Größenordnung der geometrischen Begrenzung der

Strömung, in einer Rohrströmung entspricht das also ungefähr dem Durchmesser des Rohres. Diese Größe heißt *integrale Längenskala*. Führt man Geschwindigkeitsmessungen an zwei verschiedenen Punkten im Strömungsfeld durch, so werden sie miteinander korreliert sein, wenn der Abstand kleiner als die integrale Längenskala ist. Überlagert wird diese Struktur von immer kleiner werdenden Wirbeln, die durch dissipierte Energie der größeren aufrechterhalten werden, bis hinunter zur *Kolmogorov-Skala* η_k , auf der die Energie in Reibungswärme übergeht. Die Dissipation ϵ entspricht gemäß der Vorstellung einer Energiekaskade von den größten zu den kleinsten Wirbeln einer Energietransferrate, die konstant über alle Längenskalen ist. Zur Abschätzung der Dissipationsrate kann man annehmen, dass die Energietransferrate proportional zur inversen Zeitskala $v(l)/l$ der Wirbel ist. Die kinetische Energie, die in einem Wirbel enthalten ist, ist proportional $v(l)^2$.

Daher gilt (Taylor 1935)

$$\epsilon \propto v(l)^3/l \quad (2.1)$$

Für die Kolmogorov-Skala erhalten wir mit $Re_t=1$

$$\eta_k = \left(\frac{\nu^3}{\epsilon} \right)^{1/4} . \quad (2.2)$$

Zusätzlich kann ein Kolmogorov-Zeitmaß definiert werden als

$$\tau_k = \left(\frac{\nu}{\epsilon} \right)^{1/2} . \quad (2.3)$$

Für die Beziehung zwischen integraler und Kolmogorov-Skala

gilt

$$\frac{l_t}{\eta_k} \propto Re_t^{3/4} \quad (2.4)$$

Zur Beschreibung turbulenter Strömungen gibt es mehrere Stufen der Genauigkeit. Die Auflösung aller Skalen (*Direkte Numerische Simulation, DNS*) ist (bis auf numerische Fehler) exakt, aber rechenaufwendig: da das Rechenetz mit Zellgröße Δx einerseits mindestens in der Größenordnung der integralen Längenskala l_t liegt, gilt für die Zahl der Zellen N in einer Dimension $N\Delta x > l_t$. Andererseits muss eine Zelle klein genug sein, um die Kolmogorov-Skala aufzulösen, also $\eta_k > \Delta x$. Mit Gleichung (2.4) ergibt sich $N > Re_t^{3/4}$. Praktisch ist DNS daher nur auf Modellprobleme mit kleiner Reynoldszahl und einfacher Geometrie anwendbar.

Die nächste Stufe sind *Large Eddy Simulationen (LES)*, große Skalen werden wie bei der DNS aufgelöst, kleinere modelliert. LES ist bei reinen strömungsmechanischen Problemen schon recht verbreitet, es gibt bisher aber nur wenige Anwendungen auf Probleme mit bewegten Geometrien, Spray und Verbrennung.

Die am meisten verbreitete Methode ist die Lösung der *Reynolds Averaged Navier Stokes Equations (RANS)*, d.h. die Berechnung von gemittelten Strömungsgrößen (Reynolds 1895).

2.2 Reynoldszerlegung

Um zu einer statistischen Beschreibung der Turbulenz zu gelangen, zerlegt man die Momentanwerte der Strömungsgrößen Φ in einen

Größe	Symbol	Wert
Turbulente Dissipationsrate	ϵ	$300 \text{ m}^2/\text{s}^3$
Turbulente kinematische Viskosität	$\nu_t = \mu_t/\rho$	$10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$
Integrale Längenskala	$l_t \approx 0,2 \cdot h_{OT}$	1 mm
Kolmogorov-Längenskala , Gl. (2.2)	η_k	0,04 mm
Turbulente Schwankungsgeschwindigkeit	u'	1 m/s

Tab. 2.1: Beispielhafte Turbulenzwerte einer Zylinderinnenströmung (Drehzahl 1000 1/min am oberer Totpunkt, Zylinderdurchmesser 82 mm).

Mittelwert $\bar{\Phi}$ und eine turbulente Schwankung Φ'

$$\Phi = \bar{\Phi} + \Phi', \quad \bar{\Phi}' = 0 \quad . \quad (2.5)$$

Dabei ist $\bar{\Phi}$ zu verstehen als der zeitliche Mittelwert

$$\bar{\Phi} = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_{t_0}^{t_0+T} \Phi dt \quad (2.6)$$

Dies entspricht einer typischen Laborsituation, wo Strömungsgrößen an einem festen Ort im Strömungsfeld über eine Messzeit T gemessen werden. Dies ist zunächst nur für stationäre Strömungen sinnvoll, da nur dann das Ergebnis unabhängig von t_0 ist. Bei instationären Strömungen lässt sich ein zeitlicher Mittelwert aber analog definieren, falls die Messzeit T groß verglichen mit den turbulenten Schwankungen, aber klein gegenüber der Änderung des Mittelwertes ist.

Zeitliche Mittelwerte sind nicht immer möglich oder praktisch. In solchen Fällen kann ein sog. Ensemble-Mittelwert definiert werden, bei dem das Mittel über eine große Zahl von Experimenten mit

gleichen Anfangs- und Randbedingungen gewonnen wird. Dies entspricht dem in der Simulation berechneten Mittelwert.

Häufig werden diese mit Zyklen-gemittelten Werten assoziiert. Dabei werden die Messungen über viele Zyklen zu bestimmten Kurbelwinkeln durchgeführt. Ein Momentanwert eines Zyklus' i zu einem bestimmten Kurbelwinkel θ wird zerlegt in

$$\Phi(\theta, i) = \overline{\Phi}(\theta, i) + \Phi(\theta, i)' \quad . \quad (2.7)$$

Der Mittelwert wird durch Mittelung vieler Messungen zu einem bestimmten Kurbelwinkel gewonnen:

$$\overline{\Phi}_E(\theta) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \Phi(\theta, i) \quad (2.8)$$

Nicht zu vermeiden sind jedoch Abweichungen der Anfangsbedingungen von einem Zyklus zum nächsten, z.B. durch Schwankung des Zündzeitpunktes, der Einspritzung etc. Dies führt zu *Zyklenschwankungen*, die gemessene Mittelwerte enthalten, nicht aber die berechneten.

Bei kompressiblen Strömungen mit großen Dichteschwankungen vereinfachen sich die gemittelten Gleichungen, falls man *Favre*-Mittelwerte betrachtet, so dass für einen Momentanwert gilt:

$$\Phi = \tilde{\Phi} + \Phi'', \quad \widetilde{\rho\Phi''} = 0 \quad (2.9)$$

Es gilt der Zusammenhang

$$\overline{\tilde{\rho}\Phi} = \overline{\rho\Phi} \quad . \quad (2.10)$$

2.3 Grundgleichungen

Im Folgenden werden die gemittelten Navier-Stokes-Gleichungen kurz eingeführt, wie sie in Kiva3v verwendet werden (Amsden 1989), für eine ausführliche Darstellung siehe z.B. Pope (2000). Die Navier-Stokes-Gleichungen bilden das Grundgerüst der dreidimensionalen Strömungssimulation. Durch den Übergang von Momentanwerten zu Mittelwerten treten zusätzliche, zunächst unbekannte Terme auf. Diese müssen durch zusätzliche Gleichungen modelliert werden, was in der Literatur als Schließungsproblem bezeichnet wird. In der Impulsgleichung enthält dieser Term die sog. Reynoldsschen Spannungen $\widetilde{v_i'' v_j''}$. Der gängigste Modellierungsansatz basiert auf dem *Wirbelviskositätsprinzip*, das von Boussinesq 1877 vorgeschlagen wurde. Hier werden die Auswirkungen der turbulenten Fluktuationen, nämlich erhöhte Diffusion und Dissipation, in Analogie zur laminaren Strömung durch Einführung einer turbulenten Viskosität modelliert. Es gilt dann

$$\bar{\rho} \widetilde{\mathbf{v}'' \mathbf{v}''} = -\mu_t [\nabla \tilde{\mathbf{v}} + (\nabla \tilde{\mathbf{v}})^T] + \frac{2}{3} \mu_t \nabla \cdot \tilde{\mathbf{v}} \mathbf{I} + \frac{2}{3} \bar{\rho} \tilde{k} \mathbf{I} \quad . \quad (2.11)$$

Dabei ist die turbulente kinetische Energie \tilde{k} die Hälfte der Spur des Reynoldsschen Spannungstensors

$$\tilde{k} = \frac{1}{2} \widetilde{\mathbf{v}'' \cdot \mathbf{v}''} \quad . \quad (2.12)$$

Die turbulente Viskosität μ_t ist zunächst unbekannt und muss ebenfalls modelliert werden. Am weitesten verbreitet sind die sog. Zweigleichungsmodelle, von denen in dieser Arbeit das k - ϵ -Modell ver-

wendet wird. In dessen Kontext gilt:

$$\mu_t = \bar{\rho} c_\mu \frac{\tilde{k}^2}{\tilde{\epsilon}} \quad , \quad (2.13)$$

mit der turbulenten Dissipation $\tilde{\epsilon}$ und einer Modellkonstanten c_μ (Tabelle 2.2).

In allen anderen Transportgleichungen treten Korrelationen der Form $\widetilde{v''\Phi}$ auf, dabei bezeichnet Φ den transportierten Skalar. Entsprechend werden diese Terme nach dem Wirbeldiffusionsansatz modelliert als

$$\bar{\rho} \widetilde{v''\Phi} = -\frac{\mu_t}{Sc_t} \nabla \Phi \quad , \quad (2.14)$$

dabei ist $Sc_t=0,9$ die turbulente Schmidt-Zahl. Dies bedeutet nun, dass zusätzlich zur molekularen Diffusion und Viskosität ein meist sehr viel größerer turbulenter Anteil hinzukommt, so dass die effektive Reynolds-Zahl der Strömung drastisch gesenkt wird und die turbulente chaotische Strömung durch eine mittlere, vom Charakter her laminare Strömung ersetzt wird.

Nach diesen Vorbemerkungen gehen wir nun auf die einzelnen Transportgleichungen ein. Für ein Gasgemisch aus M verschiedenen Komponenten (*Spezies*) lautet die Erhaltungsgleichung für Spezies m

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_m}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{Y}_m \tilde{\mathbf{v}}) = \nabla \cdot (\bar{\rho} D \nabla \tilde{Y}_m) + \dot{\rho}_m^s + \dot{\rho}_m^c \quad . \quad (2.15)$$

Dabei bezeichnet $\tilde{\mathbf{v}}$ die Strömungsgeschwindigkeit und \tilde{Y}_m den Speziesmassenbruch. Die Diffusionskonstante D sei für alle Spezies gleich. $\dot{\rho}_m^s$ und $\dot{\rho}_m^c$ berücksichtigen die Änderungen durch Einspritzung und Verbrennung. Zusätzlich zu diesen *aktiven* Spezies werden

ähnliche Gleichungen für die *passiven* Spezies gelöst, die nicht direkt mit der Strömung interagieren, sondern Indikatorfunktionen erfüllen, wie z.B. die Abstandsfunktion, die die Position der Flammenfront markiert.

Summiert man über alle M (aktiven) Spezies, erhalten wir die Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{v}}) = \dot{\rho}^s \quad . \quad (2.16)$$

Die Impulserhaltungsgleichung lautet

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{\mathbf{v}}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{v}} \tilde{\mathbf{v}}) = -\nabla \bar{p} - \frac{2}{3} \nabla (\bar{\rho} \tilde{k}) + \nabla \cdot \sigma + \mathbf{F}^s + \bar{\rho} \mathbf{g} \quad . \quad (2.17)$$

Es bezeichnet \bar{p} den Druck. Der zweite Term auf der rechten Seite kommt aus Gleichung (2.11) und entspricht den isotropen turbulenten Spannungen. Der dritte Term repräsentiert den Impulstransport aufgrund von molekularer und turbulenter Viskosität. Der Reibungstensor σ hat die Gestalt

$$\sigma = \mu [\nabla \tilde{\mathbf{v}} + (\nabla \tilde{\mathbf{v}})^T] - \frac{2}{3} \mu \nabla \cdot \tilde{\mathbf{v}} \mathbf{I} \quad , \quad (2.18)$$

mit der Viskosität μ und der Einheitsmatrix \mathbf{I} . \mathbf{F}^s berücksichtigt den Impulsübertrag von den Kraftstofftropfen auf das Gas. Der letzte Gravitationsterm spielt keine Rolle und wird im Folgenden vernachlässigt.¹

¹Den Einfluss der Gravitation kann man über die Froude-Zahl $Fr=v^2/lg$ abschätzen, die in motorischen Fällen typischerweise sehr viel größer 1 ist.

Die Energiegleichung lautet

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{I}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{v}} \tilde{I}) = -\bar{p} \nabla \cdot \tilde{\mathbf{v}} - \nabla \cdot \mathbf{J} + \bar{\rho} \dot{\epsilon} + \dot{Q}^c + \dot{Q}^s \quad , \quad (2.19)$$

\tilde{I} ist die spezifische innere Energie. Der erste Term der rechten Seite entspricht einer Volumenarbeit. Der Wärmefluss \mathbf{J} setzt sich aus Wärmeleitung und Enthalpiediffusion zusammen:

$$\mathbf{J} = -K \nabla \tilde{T} - \bar{\rho} D \sum_m h_m \nabla \tilde{Y}_m \quad (2.20)$$

K ist der Koeffizient der Wärmeleitung, \tilde{T} die Temperatur, D der Diffusionskoeffizient, h_m ist die spezifische Enthalpie der Spezies m . \dot{Q}^c und \dot{Q}^s sind Beiträge durch chemische Reaktionen und Tröpfchen.

Die Viskosität μ setzt sich aus einem laminaren und einem turbulenten Anteil zusammen

$$\mu = \mu_l + \mu_t \quad . \quad (2.21)$$

Die turbulente Viskosität wird nach Gleichung (2.13) berechnet, die laminare Viskosität nach Sutherland:

$$\mu_l = \frac{A_1 \tilde{T}^{3/2}}{A_2 + \tilde{T}} \quad (2.22)$$

Dabei sind $A_1=1,457e-5$ und $A_2=110$ Konstanten.

Zur Schließung des Gleichungssystems wird noch die ideale Gasgleichung benötigt:

$$\bar{p} = R \tilde{T} \sum_m \frac{\bar{\rho}_m}{W_m} \quad (2.23)$$

Hierbei bedeuten $R=8,314 \text{ J/mol/K}$ die ideale Gaskonstante und W_m das Molekulargewicht der Spezies m . Die Koeffizienten der Wärmeleitung und der Diffusion bestimmen sich durch

$$K = \frac{\mu c_p}{\text{Pr}}, \quad D = \frac{\mu}{\bar{\rho} \text{Sc}} \quad (2.24)$$

mit der Prandtl-Zahl $\text{Pr}=0,9$ und der Schmidt-Zahl $\text{Sc}=0,9$.

Zur Turbulenzmodellierung wird das k - ϵ -Modell verwendet. Es werden also Gleichungen für die turbulente kinetische Energie \tilde{k} und die Dissipation $\tilde{\epsilon}$ gelöst,

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{k}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{v}} \tilde{k}) &= \nabla \cdot \left[\left(\frac{\mu}{\text{Pr}_k} \right) \nabla \tilde{k} \right] \\ &+ \sigma : \nabla \tilde{\mathbf{v}} - \frac{2}{3} \bar{\rho} \tilde{k} \nabla \cdot \tilde{\mathbf{v}} - \bar{\rho} \tilde{\epsilon} + \dot{W}^s \end{aligned} \quad (2.25)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{\epsilon}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{v}} \tilde{\epsilon}) &= \nabla \cdot \left[\left(\frac{\mu}{\text{Pr}_\epsilon} \right) \nabla \tilde{\epsilon} \right] \\ &- \left(\frac{2}{3} c_{\epsilon_1} - c_{\epsilon_3} \right) \bar{\rho} \tilde{\epsilon} \nabla \cdot \tilde{\mathbf{v}} \\ &+ \frac{\tilde{\epsilon}}{\tilde{k}} \left[c_{\epsilon_1} \sigma : \nabla \tilde{\mathbf{v}} - c_{\epsilon_2} \bar{\rho} \tilde{\epsilon} + c_s \dot{W}^s \right] \end{aligned} \quad (2.26)$$

Die rechte Seite der Gleichungen entspricht jeweils dem Transport, der Produktion und Dissipation der entsprechenden Größe. Die Quellterme proportional zu \dot{W}^s haben ihren Ursprung in der Wechselwirkung des Einspritzstrahls mit der Gasphase und werden für die

c_μ	c_{ϵ_1}	c_{ϵ_2}	c_{ϵ_3}	Pr_k	Pr_ϵ
0,09	1,44	1,92	-0,33	1,0	1,3

Tab. 2.2: Standard-Modellkonstanten für das k - ϵ -Modell.

Simulation einer vorgemischten Verbrennung nicht benötigt. Die Größen $c_{\epsilon_{1,2,3}}$ und $\text{Pr}_{k,\epsilon}$ sind Modellkonstanten (siehe Tabelle 2.2).

Die integrale Längenskala berechnet sich aus dem k - ϵ -Modell mit

$$l_t = c_\mu^{3/4} \frac{\tilde{k}^{3/2}}{\tilde{\epsilon}} \quad . \quad (2.27)$$

Dieses Gleichungssystem wird von Kiva3v gelöst. Darauf aufbauend wird in dieser Arbeit ein Verbrennungsmodell entwickelt, implementiert und validiert.

Kapitel 3

Laminare Verbrennung

3.1 Phänomenologie

Betrachtet wird eine vorgemischte Verbrennung, d.h. Kraftstoff und Luft sollen zu Beginn der Verbrennung homogen gemischt sein. Zur Charakterisierung einer *Deflagration*¹ folgen wir Landau & Lifschitz (1991).

Nach der Zündung bildet sich zwischen verbranntem und unverbranntem Gas eine Übergangsschicht aus, in der die Reaktionen gerade von statten gehen (Brennzone oder Flamme). Im Laufe der Zeit wird sich diese Brennzone im Brennraum mit einer charakteristischen

¹Eine „langsame“ Verbrennung, bei der die Ausbreitungsgeschwindigkeit wesentlich kleiner als die Schallgeschwindigkeit ist und ein Druckausgleich zwischen verbrannter und unverbrannter Zone stattfindet, im Unterschied zur Detonation.

Geschwindigkeit in Richtung des unverbrannten Gemischs fortbewegen. Die Größe der Ausbreitungsgeschwindigkeit hängt von der Intensität des Wärmetransports aus der Brennzone in das unverbrannte Ausgangsgemisch ab.

Eine vorgemischte Methan-Luft-Verbrennung wurde mittels eines reduzierten 4-Schritt Mechanismus von Peters (1987) untersucht. Demnach kann die Flamme in drei Bereiche unterteilt werden: die Vorheizzone, in der keine nennenswerte Reaktion stattfindet, die eigentliche dünne Reaktionszone, in der der Kraftstoff reagiert und Zwischenprodukte gebildet werden, und eine etwas dickere, aber immer noch dünne Oxidationszone, in der die chemische Umsetzung abgeschlossen wird, d.h. Zwischenprodukte abgebaut werden und sich Temperatur und Gemischzusammensetzung dem Gleichgewicht annähern.

Die Größenordnung der Dicke δ der Flamme wird durch die mittlere Entfernung bestimmt, welche bei der Reaktion freigesetzte Wärme in der Zeit τ_{ch} erreicht. τ_{ch} ist dabei eine repräsentative Reaktionsdauer. Mit der Temperaturleitfähigkeit χ gilt

$$\delta \sim \sqrt{\chi \tau_{ch}} \quad . \quad (3.1)$$

Typischerweise liegt δ bei 0,5–0,005 mm.²

Sind die strömungsmechanischen Dimensionen groß gegenüber der Dicke der Brennzone, so kann man das rein gasdynamische Problem von der chemischen Kinetik trennen. Im Folgenden wird die Dicke der Brennzone vernachlässigt und als Trennfläche (*Flammenfront*) zwischen unverbranntem und verbranntem Gas betrachtet, an

²Die Werte gehören zu einer der langsamsten Verbrennungen mit 6% CH_4 +Luft und einer der schnellsten Verbrennungen mit $2H_2 + O_2$ (Knallgas).

der die Zustandsgrößen einen Sprung erfahren.

Die Geschwindigkeit, mit der sich die Flammenfront in Normalenrichtung relativ zum Gas bewegt, wird Flammen- oder Brenngeschwindigkeit s genannt. In der Zeit τ_{ch} bewegt sich die Flammenfront um die Strecke δ , daher erhält man mit (3.1)

$$s \sim \frac{\delta}{\tau_{ch}} \sim \sqrt{\frac{\chi}{\tau_{ch}}} . \quad (3.2)$$

Die Brenngeschwindigkeit von Benzin bei Umgebungsbedingungen und $\lambda=1$ liegt bei etwa 35 cm/s. Der Massenstrom $\rho_u s$ von unverbranntem Material durch die Flammenfront entspricht der lokalen Reaktionsrate.

Da die Gasgeschwindigkeit an der Flammenfront einen Sprung erfährt, muss man sich bei der Definition der Brenngeschwindigkeit entweder auf das unverbrannte oder das verbrannte Gas beziehen. In der Regel ist dies das unverbrannte Gas, und die darauf bezogenen Größen werden mit dem Index u gekennzeichnet.

3.2 Laminare Brenngeschwindigkeit

Die Brenngeschwindigkeit von realen Kraftstoffen hängt hauptsächlich von Druck, Temperatur und dem Äquivalenzverhältnis ab. Brenngeschwindigkeiten vieler Gasgemische wurden über einen weiten Bereich hin vermessen und können numerisch unter Verwendung reduzierter Reaktionsmechanismen bestimmt werden. Eine empirische Korrelation, deren Parameter für einige Kraftstoffe bestimmt wurden und die auch in dieser Arbeit verwendet wird, gab Gülder (1984) an

Kraftstoff	Z	W [m/s]	α	β	η	ξ	f
Methan	1	0,422	2,	-0,5	0,15	5,18	
Propan	1	0,446	1,77	-0,2	0,12	4,95	2,1–2,5
iso-Oktan	1	0,4658	1,56	-0,22	-0,326	4,48	

Tab. 3.1: Parameter zur Berechnung der laminaren Brenngeschwindigkeit

mit

$$s_u(\Phi, p, T_u) = ZW\phi^\eta e^{-\xi(\Phi-1.075)^2} \cdot \left(\frac{p}{p_0}\right)^\beta \cdot \left(\frac{T_u}{T_0}\right)^\alpha \cdot (1 - fF) \quad (3.3)$$

Dabei bezeichnen Z , W , f , α , β , η und ξ Modellkonstanten unter Referenzbedingungen $p_0 = 1$ bar und $T_0 = 300$ K, $\Phi = 1/\lambda$ das Äquivalenzverhältnis und F den Molbruch des Restgasanteils. In Tabelle 3.1 sind einige Werte angegeben. Die Brenngeschwindigkeit von iso-Oktan ist mit der von Benzin (*gasoline*) vergleichbar.³ Die maximale Brenngeschwindigkeit für iso-Oktan bei gegebenem Druck und Temperatur erhält man für $\Phi = 1,04$, also ein leicht fettes Gemisch.

Die Koeffizienten für die Abhängigkeiten von Iso-Oktan wurden in einem Bereich $0,7 < \Phi < 1,4$ für das Äquivalenzverhältnis, $1 \text{ bar} < p < 50 \text{ bar}$ für den Druck und $300 \text{ K} < T < 750 \text{ K}$ für die Temperatur bestimmt.

Ein Vergleich der Gülder-Beziehung mit neueren Messdaten zeigt Abbildung 3.1. Die Gülder-Korrelation überschätzt die laminare Brenngeschwindigkeit bei Umgebungsbedingungen, während die alternative Beziehung von Metghalchi und Keck (1982) etwas unter den Mes-

³Heywood (1988) Kap. 9.3.3.

sergebnissen liegt. Der Nachteil der zweiten Beziehung liegt darin, dass für sehr magere und fette Gemische negative Brenngeschwindigkeiten vorhergesagt werden und sie daher für Schichtladeverbrennung nicht geeignet ist. Eine weitere Validierung, vor allem für höhere Temperaturen und Drücke, könnte mit Berechnungen aus detaillierten Reaktionsmechanismen vorgenommen werden, bleibt mangels Daten jedoch zukünftigen Arbeiten vorbehalten.

3.3 Flammenstreckung

Als Flammenstreckung κ bezeichnet man den Einfluss eines inhomogenen lokal laminaren Strömungsfeldes auf die Ausbreitungsgeschwindigkeit einer gekrümmten Flammenfront. Definiert wird es über die zeitliche Änderung eines infinitesimalen Flächenelementes A der Flammenfront:

$$\kappa = \frac{1}{A} \frac{dA}{dt} \quad (3.4)$$

Ein allgemeiner Ausdruck für eine dünne Flamme wurde von Candel und Poinso (1990) hergeleitet:

$$\kappa = \nabla \cdot \mathbf{u} - \mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} \quad (3.5)$$

mit der Ausbreitungsgeschwindigkeit \mathbf{u} . Diese setzt sich aus der Gasgeschwindigkeit \mathbf{v}_u und der Brenngeschwindigkeit s_u zusammen:

$$\mathbf{u} = \mathbf{v}_u + s_u \mathbf{n} \quad (3.6)$$

Eingesetzt ergibt dies⁴

$$\kappa = \nabla \cdot \mathbf{v}_u - \mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{v}_u \cdot \mathbf{n} + s_u \nabla \cdot \mathbf{n} \quad (3.7)$$

⁴Siehe dazu z.B. Clavin (1985) oder Poinso et al. (2001).

Die beiden ersten Terme repräsentieren den Beitrag des inhomogenen Strömungsfeldes, der letzte Term den Beitrag der Krümmung der Flamme zur Flammenstreckung.

Der Einfluss der Flammenstreckung auf die laminare Brenngeschwindigkeit kann im Grenzfall kleiner Streckung κ durch einen linearen Ansatz

$$s_u = s_u^0 - \mathcal{L}\kappa \quad (3.8)$$

modelliert werden (Clavin 1985). Die sog. Markstein-Länge \mathcal{L} liegt in der Größenordnung der laminaren Flammendicke δ (Peters 2000). Das Verhältnis \mathcal{L}/δ heißt Markstein-Zahl. Markstein-Zahlen wurden von einer Reihe von Autoren gemessen, siehe dazu die Verweise in Peters (2000). Das Vorzeichen von \mathcal{L} bestimmt die Stabilität von laminaren Flammen: negatives Vorzeichen führt zu einer instabilen Flammenfront (Williams 1985).

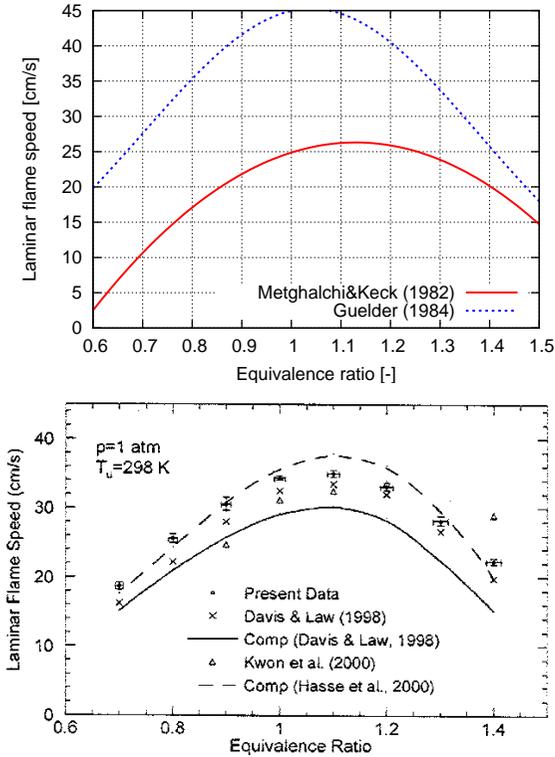


Abb. 3.1: Vergleich der laminaren Brenngeschwindigkeit von iso-Oktan bei $p=1$ atm, $T=298$ K in Abhängigkeit des Äquivalenzverhältnisses. Oben zwei unterschiedliche Korrelationen, unten experimentelle und berechnete Ergebnisse (aus Huang 2004).

Kapitel 4

Turbulente Verbrennung

4.1 Einteilung der Verbrennungsregimes

Der Einfluss einer turbulenten Strömung auf eine vorgemischte Verbrennung wurde häufig mit Hilfe des Borghi-Diagramms (siehe Borghi 1985 und 1988) klassifiziert. Dabei werden verschiedene Verbrennungstypen anhand des Verhältnisses von turbulenter Schwankungsgeschwindigkeit zu laminarer Geschwindigkeit u'/s und dem Verhältnis von turbulenter Längenskala zu laminarer Flammendicke l_t/δ eingeteilt. Ein neues Diagramm wurde von Peters (2000) eingeführt, das hier diskutiert werden soll. Das Ziel dieses Kapitels ist es, den Gültigkeitsbereich der sogenannten *flamelet*-Verbrennungsmodelle zu bestimmen. Danach wird die turbulente Flammenfront als ein Ensemble dünner laminarer Flammen angesehen, die durch das turbulente

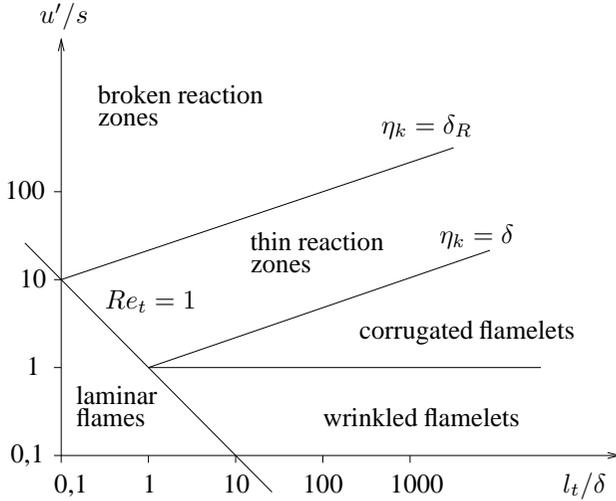


Abb. 4.1: Einteilung der Verbrennungsregimes nach Peters (2000).

Strömungsfeld gestreckt und gekrümmt werden. .

Zunächst werden laminare Flammendicke und laminare Zeitskala definiert:

$$\delta = \frac{D}{s}, \quad \tau_\delta = \frac{D}{s^2} \quad (4.1)$$

Dies entspricht den Gleichungen 3.1 und 3.2 für eine Lewis-Zahl $Le = \chi/D=1$. Die turbulente Reynoldszahl wird definiert durch

$$Re_t = \frac{u' l_t}{s \delta} \quad (4.2)$$

Dabei ist turbulente Schwankungsgeschwindigkeit $u' = \sqrt{2\tilde{k}/3}$. Es werden nun folgende Bereiche identifiziert (Abbildung 4.1):

1. Laminare Flammen:

Es gilt $Re_t < 1$. Dieses Gebiet ist für die motorische Verbrennung uninteressant.

2. *wrinkled flamelets*:

In diesem Gebiet gilt $u' < s$, d.h. die Rotationsgeschwindigkeit selbst der größten Wirbel ist langsam im Vergleich zur laminaren Brenngeschwindigkeit. Es stellt sich eine leicht aufgerauhte laminare Flammenfront ein.

3. *corrugated flamelets regime*:

Für dieses Regime gilt $Re_t > 1$ und $\delta < \eta_k$, was bedeutet, dass die Flamme in Wirbel der Größe der Kolmogorov-Skala eingebettet ist, wo das Strömungsfeld quasi-laminar ist. Die Flammenstruktur wird daher nicht durch die turbulenten Wirbel gestört und bleibt quasi-stationär. Die Grenze zum *thin reaction zones regime* ist erreicht, wenn die Flammendicke gleich der Kolmogorov-Skala wird (Klimov-Williams-Kriterium).

Im *corrugated flamelets regime* interagieren die Wirbel dynamisch mit der Flammenfront. Die größten Wirbel bis hin zur Gibson-Skala

$$l_G = \frac{s^3}{\epsilon} \quad (4.3)$$

führen zur Aufrauhung der Flammenfront, die durch das Fortschreiten der Flamme nicht mehr völlig geglättet werden kann.

4. *thin reaction zones regime*:

Bei höherer Turbulenz, wenn $\eta_k < \delta$ wird, können die Wirbel in die Vorwärmzone eindringen, aber noch nicht in die eigentliche Reaktionszone δ_R , deren Dicke etwa ein Zehntel der Vorwärmzone beträgt. Die Wirbel, die in die Vorwärmzone eindringen, transportieren heißes Gas nahe der Reaktionszone in entferntere Bereiche und erhöhen so die Mischungsgeschwindigkeit. Die Grenze zu noch höherer Turbulenz ist erreicht, wenn $\eta_k = \delta_R$ gilt.

5. *broken reaction zones regime*:

In diesem Regime können die Wirbel in die Reaktionszone eindringen und die chemischen Reaktionen lokal zum Erlöschen bringen. Die Struktur der vorgemischten Flamme ist zerstört, und abhängig von den Randbedingungen gleicht das System einem Rührreaktor mit homogenem Reaktionsgebiet.

Motorische Verbrennung spielt sich hauptsächlich im Gebiet der *corrugated flamelets* und der *thin reaction zones* ab. Turbulenz ist für die motorische Verbrennung sehr wichtig, da sie die Flammenausbreitung deutlich beschleunigt. Man kann abschätzen, dass ein Motor mit laminarer Verbrennung maximal mit ungefähr 300 1/min betrieben werden könnte, verglichen mit den heutzutage üblichen 500–20000 1/min. Andererseits ist ein zu hohes Turbulenzniveau vor allem an der Zündkerze schädlich, da Flammenlöschungseffekte auftreten können. Im praktischen Einsatz wird Turbulenz durch Erzeugung einer *Tumble*-Strömung generiert, also einer Rotationsströmung mit Rotationsachse senkrecht zur Zylinderachse. Diese wird bei Annäherung des Kolbens an das Brennraumdach zerquetscht und erhöht das Turbulenzniveau zum Zündzeitpunkt.

4.2 Modellierungsansatz

Die Hauptforderung bei der Beschreibung vorgemischter Verbrennung ist die korrekte Ausbreitung der Flammenfront. Um die dazu notwendigen Anforderungen an ein Verbrennungsmodell zu definieren, wird zunächst das Phänomen der turbulenten vorgemischten Verbrennung im *flamelet*-Regime zusammengefasst (vgl. Abbildung 4.2 und Krüger et al. 2002):

1. Mikroskopisch gesehen besteht die Flamme aus sehr dünnen laminaren Flammenfronten, die sich lokal mit laminarer Brenngeschwindigkeit s_l fortpflanzen.
2. Das turbulente Strömungsfeld krümmt und streckt diese, was zu einer vergrößerten Flammenfront mit Fläche A_l und damit zu einer erhöhten Reaktionsrate führt.
3. Nach Durchführung einer turbulenten Mittelung erhält man eine glattere turbulente Flammenfront mit kleinerer Fläche A_t , aber größerer turbulenter Flammendicke und erhöhter Brenngeschwindigkeit s_t .

Es gilt

$$\rho_u \cdot A_l \cdot s_{l,u} = \rho_u \cdot A_t \cdot s_{t,u} \quad , \quad (4.4)$$

der Massenstrom durch die Fläche bleibt also konstant.

4. Die turbulente Flammendicke bewegt sich in der Größenordnung der turbulenten Längenskala, also im Bereich einiger mm.
5. An der laminaren Flammenfront, also am Übergang von verbrannt nach unverbrannt, findet ein Dichtesprung statt und damit verbunden auch ein Sprung der Gasgeschwindigkeit. Nach

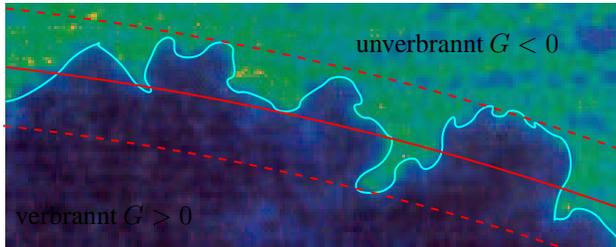


Abb. 4.2: Formaldehyd-LIF Aufnahme einer turbulenten Flamme: laminaire Flammenfront (blau), mittlere turbulente Flammenfront (rot), turbulente Flammendicke (rot gestrichelt).

der turbulenten Mittelung sind beide Zustände, verbrannt und unverbrannt, überlagert.

Basierend auf diesen Tatsachen ergeben sich nun Anforderungen für die Verbrennungsmodellierung, die bisher noch kein Modell zufriedenstellend erfüllt.

- A. Um die Überlagerung von verbranntem und unverbranntem Zustand zu vermeiden, sollte unbedingt ein Zweiphasencode eingesetzt werden. Bisher gibt es aber noch kein Verbrennungsmodell, das mit zwei Phasen arbeitet. Daher muss mindestens sichergestellt werden, dass künstliche Effekte, die aus der Anwendung von Einphasenmodellen resultieren, vermieden werden. Ein großes Problem dabei ist die Verwendung einer mittleren Geschwindigkeit in der turbulenten Flamme.

Seien beispielsweise \mathbf{v}_u und \mathbf{v}_b die Geschwindigkeitsfelder im unverbrannten bzw. verbrannten Gas, und

$$\bar{\mathbf{v}} = (1 - c)\mathbf{v}_u + c\mathbf{v}_b \quad (4.5)$$

die mittlere Geschwindigkeit. Dann kann $\bar{\mathbf{v}}$ große Gradienten aufweisen, auch wenn die verbrannten und unverbrannten Geschwindigkeiten jeweils räumlich konstant sind, infolge dessen ein künstlicher Turbulenzquellterm in der k -Gleichung entsteht. Abhängig von der Dicke der turbulenten Flamme kann dieser Effekt große Änderungen der Ausbreitungsgeschwindigkeit der Flamme zur Folge haben. In dieser Arbeit wird erstmals eine Methodik erarbeitet, um dieses Problem zu lösen.

- B. Verwendung von sehr feinen Netzen ist notwendig, um die turbulente Flamme und damit verbundene Dichte- und Geschwindigkeitsgradienten aufzulösen. Typische PKW-Motorennetze haben eine Zellgröße von kleinstens 0,5 mm. Bei einer Flammendicke von 4 mm entspräche dies nur acht Zellen, noch feinere Netze sind aber aus Gründen der Rechenzeit kaum einsetzbar. Dies kann bei bestimmten Modelltypen sehr kritisch sein, wie z.B. beim ECFM-Modell (Kapitel 4.4). Die Flammenoberflächendichte Σ vor und hinter der Flamme ist null, und der genaue Verlauf in der Flamme ist entscheidend für die ganze Verbrennung, besonders auch die Ausbreitungsgeschwindigkeit der Flamme.

4.3 Eddy-Breakup Modell (EBU)

Das einfachste *flamelet*-Modell (Spalding 1971) verwendet die Annahme, dass die turbulente Strömung die Verbrennung dominiert und die Reaktionsrate ausschließlich durch eine turbulente Zeitskala bestimmt wird. Das EBU-Modell lässt sich durch eine nichtlineare Gleichung für die Fortschrittsvariable \tilde{c} beschreiben.

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{c}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{v}} \tilde{c}) = \nabla \cdot (\bar{\rho} D \nabla \tilde{c}) + \rho_u \alpha \tilde{c} (1 - \tilde{c}) \quad , \alpha = c_{EBU} \frac{\tilde{\epsilon}}{k} \quad (4.6)$$

c_{EBU} ist eine Modellkonstante der Größenordnung eins. Kolmogorov et al. (1937) untersuchten diesen Gleichungstyp und stellten fest, dass sie eine Wellenausbreitung mit einer effektiven normalen Ausbreitungsgeschwindigkeit

$$u \geq \tilde{v}_n + \underbrace{2\sqrt{D\alpha}}_{s_t} \quad (4.7)$$

beschreibt.¹ Die minimale Geschwindigkeit ist die stationäre Endgeschwindigkeit für alle Anfangsbedingungen, für die $\tilde{c}(x \rightarrow -\infty) = 1$ und $\tilde{c}(x \rightarrow \infty) = 0$ gilt und $\tilde{c}(x)$ schnell genug abfällt (s.u.). Es ergibt sich ein stationäres Profil, das sich mit u fortbewegt. Dies bezeichnet man auch als eine solitäre Welle (Abbildung 4.3).

Durch die Netzbewegung und die realen Geometrien leidet immer die Netzqualität, und auch die Auflösung ist aus Rechenzeitgründen meist geringer als eigentlich nötig. Wird die turbulente Flamme ungenügend aufgelöst, so stellt sich ein falsches Profil und damit verbunden auch eine falsche Ausbreitungsgeschwindigkeit ein. Zusätzlich

¹In der Literatur wird dies meist als KPP-Theorem bezeichnet.

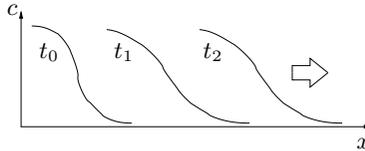


Abb. 4.3: Ausbildung einer solitären Welle.

dazu kann diese auch abhängig von der Initialisierung sein. Gibt man Anfangsbedingungen $\tilde{c}(x \rightarrow \infty) \propto e^{-\xi x}$ vor, so gilt ($D = \alpha = 1$) für die Brenngeschwindigkeit

$$s_t(\xi) = \begin{cases} 2 & \text{für } \xi \geq 1 \\ \xi + 1/\xi & \text{für } \xi < 1 \end{cases} ,$$

siehe auch Sherratt (1998).

Nachteilig erweist sich bei Verwendung des EBU-Modells die ungenügende Abbildung der tatsächlichen Brenngeschwindigkeit s_t an der Wand. Viele Autoren berichten von einer zu schnellen Ausbreitung an der Wand. Unter Verwendung von $D = c_\mu \tilde{k}^2 / \tilde{\epsilon}$ erhalten wir für die Brenngeschwindigkeit s_t

$$s_t = 2\sqrt{D\alpha} = 2\sqrt{c_\mu \frac{\tilde{k}^2}{\tilde{\epsilon}} c_{EBU} \frac{\tilde{\epsilon}}{\tilde{k}}} = 2\sqrt{c_\mu c_{EBU} \tilde{k}} , \quad (4.8)$$

was an der Wand wegen $\tilde{k} \rightarrow k_0$ gegen null geht. Aufgrund numerischer Fehler gilt aber $D \rightarrow D_{num} > 0$ und damit

$$s_t = 2\sqrt{D_{num} c_{EBU} \frac{\tilde{\epsilon}}{\tilde{k}}} \rightarrow \infty \quad \text{wegen} \quad \frac{\tilde{\epsilon}}{\tilde{k}} \rightarrow \infty . \quad (4.9)$$

Wandprobleme in diesem Modell sind also keine grundsätzlichen Modellierungsfehler, sondern numerischer Natur, die aber kaum zu verhindern sind.

4.4 Extended Coherent Flame Model (ECFM)

Basis des ECFM-Modells ist die Lösung einer Differentialgleichung für die Flammenoberflächendichte Σ

$$\frac{\partial \Sigma}{\partial t} + \tilde{\mathbf{v}} \cdot \nabla \Sigma = \nabla \cdot \left(\frac{\mu}{Sc} \left(\nabla \frac{\Sigma}{\bar{\rho}} \right) \right) + P\Sigma - V\Sigma^2 \quad (4.10)$$

und einer Gleichung für die Fortschrittsvariable \tilde{c}

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{c}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{v}} \tilde{c}) = \nabla \cdot (\bar{\rho} D \nabla \tilde{c}) + \rho_u s_l \Sigma \quad (4.11)$$

Die Σ -Gleichung beinhaltet verschiedene Mechanismen zur Bildung ($P = \sum_i P_i$) und Vernichtung (V) der Flammenoberfläche. Im Einzelnen sind dies:

1. Streckung durch turbulente Wirbel $P_1 = a_1 S$, wobei S die Streckungsrate und $a_1 = 1,6$ eine Konstante sind. Im einfachsten Fall gilt $S = \tilde{c}/k$. Ein komplexeres Modell für S ist das *Intermittent Turbulence Net Flame Stretch*-Modell (ITNFS).² Das ITNFS-Modell reduziert die Reaktionsrate bei kleinen Längenskalen und kann durch Einführung in das EBU-Modell auch dessen Wandverhalten verbessern (Poinso 2001).

²siehe Verweise in Duclos et al. (1993).

2. Streckung durch die mittlere Strömung $P_2 = \frac{2}{3} \nabla \cdot \tilde{\mathbf{v}}$
3. Einfluss durch Krümmung und Expansion $P_3 = \frac{2}{3} s_l \frac{1-\tilde{c}}{\tilde{c}} \Sigma$
4. Senke durch die Verbrennung $V = a_2 \frac{s_l}{1-\tilde{c}}$ mit der Konstanten $a_2 = 1$.

Gleichungen (4.10) und (4.11) beschreiben ähnlich wie das EBU-Modell die Ausbreitung einer solitären Welle. Duclos et al. (1993) haben die effektive Ausbreitungsgeschwindigkeit für verschiedene Modellansätze für die Streckungsrate S für eine eindimensionale Flamme mit konstanter Turbulenz berechnet. Prinzipiell weist das ECFM-Modell die gleichen Probleme wie das EBU-Modell auf. Das Problem unzureichender Auflösung ist in diesem Fall eher noch verschärft, weil Σ in der Flamme von null auf ein Maximum wächst und wieder auf null sinkt, während die Fortschrittsvariable im EBU-Modell nur von null auf eins anwächst. Die Wandproblematik wird allerdings durch das ITNFS-Modell gelöst.

4.5 Die G -Gleichung

Die G -Gleichung vollführt den Übergang von einer implizit bestimmten Flammenausbreitung zu einer expliziten. Dadurch soll vor allem die Abhängigkeit von der Netzauflösung reduziert werden. Zunächst wird die Herleitung einer Bewegungsgleichung für eine 2D-Flammenfront wiederholt. Die Gültigkeit des Modells ist aber auch für endlich dicke Flammen durch Einführung einer Flammendicke gewährleistet, die auf der Flammenfront definiert ist und mittels derer die Flamme in den 3D-Raum erweitert werden kann. Die Flammenfront repräsentiert

dann die mittlere Position der Flamme. Es wird gezeigt, dass wegen der Kausalität während der Bewegung der Flammenfront die Gleichung für die Flammendicke nur ganz bestimmte Formen annehmen kann.

4.5.1 Herleitung

Die Flammenfront sei eine Trennfläche, die das verbrannte Gas vom unverbrannten trennt. Sie wird beschrieben durch eine differenzierbare Funktion

$$G(\mathbf{x}, t), \quad \mathbf{x} \in M \subset \mathbb{R}^3, t \in I \subset \mathbb{R} \quad ,$$

deren Isofläche

$$\Gamma = \{\mathbf{x} | G(\mathbf{x}, t) = 0\}$$

zu jedem Zeitpunkt t die Flammenfront darstellt. Üblicherweise wählt man $G < 0$ als unverbrannten, $G > 0$ als verbrannten Zustand.

Um die Kinematik der Flammenfront zu erhalten muss man berücksichtigen, dass die Flamme einerseits durch die Strömung bewegt wird, andererseits eine eigene Ausbreitung normal zu sich selbst besitzt, analog zum Huygenschen Prinzip.

$$\mathbf{u} = \mathbf{v}_u + s_u \mathbf{n}, \quad \mathbf{n} = -\frac{\nabla G(\mathbf{x}, t)}{|\nabla G(\mathbf{x}, t)|} \quad (4.12)$$

Der Normalenvektor \mathbf{n} ist so gewählt, dass er ins unverbrannte Gas zeigt.

Sei P ein Punkt auf der Flammenfront. Dann muss die konvektive Ableitung von G an P verschwinden, da nach der obigen Vereinba-

rung $G_P = 0$ gilt.

$$\frac{dG}{dt}(\mathbf{x}, t) = \frac{\partial G}{\partial t} + \nabla G \cdot \dot{\mathbf{x}} = \frac{\partial G}{\partial t} + \nabla G \cdot (\mathbf{v}_u + s_u \mathbf{n}) = 0$$

Daraus ergibt sich die bekannte G -Gleichung

$$\frac{\partial G}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla G = s_u |\nabla G| \quad , \quad (4.13)$$

die weitverbreitet Verwendung findet. Eine gute Übersicht bietet Sethian (1996), mit Beispielen aus den Bereichen Minimalflächen, Verbrennung, Kristallwachstum, Zweiphasenströmung, Formerkennung. Eine Verallgemeinerung für nicht-euklidische Geometrien wurde von Pasch (1997) erarbeitet.

Die folgenden vier Abschnitte entstanden in Zusammenarbeit mit F. Otto 2001 im Rahmen es EU-Projekts GLEVEL.

4.5.2 Transformationseigenschaften von G

G besitzt nur auf der Flammenfront physikalische Bedeutung. Daher sollten alle physikalisch relevanten Informationen, unter anderem die Flammenfrontposition, unter einer Eichtransformation invariant sein, die G überall außer an der Flammenfront ändert. Solch eine Transformation ist vom Typ

$$\begin{aligned} G(\mathbf{x}, t) &\mapsto \hat{G}_h(\mathbf{x}, t) = G(\mathbf{x}, t) \cdot h(\mathbf{x}, t) \\ &\text{mit } h(\mathbf{x}, t) > 0 \quad \text{für alle } \mathbf{x}, t \quad . \end{aligned} \quad (4.14)$$

Dass dies gilt, lässt sich durch Einsetzen zeigen:

$$\frac{\partial \hat{G}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \hat{G} - s_u |\nabla \hat{G}| = h \cdot \left[\frac{\partial G}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla G - s_u |\nabla G| \right]$$

$$+ G \cdot \left[\frac{\partial h}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla h \right] + |G| \cdot s_u \cdot |\nabla h|$$

Für $G = 0$ erhalten wir

$$\frac{\partial \hat{G}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \hat{G} - s_u |\nabla \hat{G}| = 0 \quad .$$

Die Flammenfrontposition ist also unter der Eichtransformation invariant.

Die Eichtransformationen vom Typ (4.14) bilden eine Abelsche Gruppe \mathcal{H} .

Beschreiben zwei Felder G_1 und G_2 dieselbe Flammenfront und gilt zusätzlich

$$\forall \mathbf{x} \in M, \quad \forall t \in I \quad G_i(\mathbf{x}, t) = 0 \Rightarrow |\nabla G_i(\mathbf{x}, t)| > 0 \quad ,$$

dann liegen beide Felder in derselben Äquivalenzklasse, d.h. es existiert eine Eichtransformation h

$$G_1(\mathbf{x}, t) = h(\mathbf{x}, t) \cdot G_2(\mathbf{x}, t) \quad ,$$

denn

$$h(\mathbf{x}, t) = \frac{G_1(\mathbf{x}, t)}{G_2(\mathbf{x}, t)}$$

ist auch auf der Flammenfront stetig fortsetzbar und nimmt dort nach der de l'Hospitalschen Regel den Wert

$$h(\mathbf{x}, t)|_{G=0} = \frac{|\nabla G_1(\mathbf{x}, t)|}{|\nabla G_2(\mathbf{x}, t)|}$$

an. Daher muss zusätzlich

$$G(\mathbf{x}, t) = 0 \Rightarrow |\nabla G(\mathbf{x}, t)| > 0 \quad (4.15)$$

gefordert werden. Diese Forderung ist durch *Reinitialisierung* (siehe Kapitel 4.5.7) erfüllbar.

4.5.3 Eichfixierung von G

Da G außerhalb der Flammenfront unbestimmt ist, besteht die Möglichkeit, eine Eichung zu wählen. Eine übliche Zusatzforderung ist

$$|\nabla G(\mathbf{x}, t)| = 1 \quad . \quad (4.16)$$

Dann entspricht $G(\mathbf{x}, t)$ an jedem Punkt dem Abstand zur Flammenfront. Gleichung (4.16) ist zeitlich aber nicht erhalten.

$$\frac{\partial G}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla G - s_u |\nabla G| = 0 \Rightarrow \frac{\partial |\nabla G|}{\partial t} \neq const$$

Diese Forderung muss in jedem Zeitschritt wiederhergestellt werden (Reinitialisierung). Man könnte dieses Problem umgehen, wenn die Gültigkeit der G -Gleichung nur schwach, d.h. für $G = 0$ gefordert wird.

$$\frac{\partial G}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla G - s_u |\nabla G| \approx 0 \Rightarrow \frac{\partial G}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla G - s_u |\nabla G| = G \cdot K(G, \mathbf{x}, t)$$

Aus der Bedingung

$$\frac{\partial}{\partial t} [(\nabla G)^2] = 0$$

lässt sich dann ein Ausdruck für K ableiten. Wir finden

$$(\nabla G)^2 K + G(\nabla G) \cdot (\nabla K) = \nabla G \cdot \nabla ((\mathbf{v} \cdot \nabla)G + s_u |\nabla G|) \quad .$$

Unter Ausnutzung der Eichbedingung (4.16) geht die Gleichung in die schwach gültige Lösung

$$K \approx \nabla G \cdot \nabla ((\mathbf{v} \cdot \nabla)G + s_u |\nabla G|) \quad (4.17)$$

über. Löst man die G -Gleichung plus Eichbedingung mittels ständiger Reinitialisierung, so ist dies äquivalent zu der Gleichung

$$\frac{\partial G}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla G - s_u |\nabla G| = G \cdot K \quad . \quad (4.18)$$

4.5.4 Felder F auf der Flammenfront

Betrachten wir nun Größen $F(\mathbf{x}, t)$, die nur auf der Flammenfront eine physikalische Bedeutung haben, z.B. die Brenngeschwindigkeit s_u oder Flammenfaltungsfaktoren, aber auch im ganzen Raum definiert sind. Auf ihnen lässt sich eine Operation der Eichgruppe \mathcal{H} folgendermaßen definieren, so dass ihr physikalischer Gehalt unverändert bleibt:

$$F(\mathbf{x}, t) \mapsto \hat{F}_h(\mathbf{x}, t) = F(\mathbf{x}, t) + G(\mathbf{x}, t) \cdot h(\mathbf{x}, t) \quad (4.19)$$

Umgekehrt kann man sich überlegen, dass dies auch schon die allgemeinst mögliche Form einer Transformation von F , die die physikalische Information invariant lässt, darstellt. Denn eine beliebige Transformation von F , die nur auf der Flammenfront selbst verschwindet, lässt sich über eine Funktion H abbilden:

$$F(\mathbf{x}, t) \mapsto \hat{F}_h(\mathbf{x}, t) = F(\mathbf{x}, t) + H(\mathbf{x}, t),$$

$$G(\mathbf{x}, t) = 0 \Rightarrow H(\mathbf{x}, t) = 0$$

Damit lässt sich wieder eine Funktion h definieren mit

$$h(\mathbf{x}, t) = \frac{H(\mathbf{x}, t)}{G(\mathbf{x}, t)},$$

die auch auf der Flammenfront stetig fortsetzbar ist (de l'Hospitalsche Regel).

Welche Kinematik kann F nun besitzen? Wir erhalten dadurch Einschränkungen, dass die Werte von F zumindest auf der Flammenfrontfläche selbst nicht eichabhängig sein dürfen. Vorstellbar wären folgende Möglichkeiten:

1. Algebraische Relationen (d.h. keine Kinematik) für verschiedene Größen F_i :

$$A(F_i(\mathbf{x}, t)) = 0 \quad (4.20)$$

Diese Gleichung bleibt unter Transformationen (4.19) für $G = 0$ invariant.

2. F hat dieselbe Ausbreitungsrichtung wie die Flammenfront selbst:

$$\frac{\partial F}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla F - s_u \frac{\nabla F \cdot \nabla G}{|\nabla G|} = A(F) \quad (4.21)$$

3. Addition eines zusätzlichen Pseudo-Diffusionsterms:

$$\frac{\partial F}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla F - s_u \frac{\nabla F \cdot \nabla G}{|\nabla G|} + G \cdot D \cdot \Delta F = A(F) \quad (4.22)$$

Die Transportgleichung für F muss auf jeden Fall dieselbe Charakteristik für $G = 0$ haben wie das G -Feld selbst. Nicht zulässig ist unter anderem:

A Ausbreitung in Normalenrichtung von F

$$\frac{\partial F}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla F - s_u \cdot |\nabla F| = A(F)$$

B Transportgleichung mit Ausbreitungsgeschwindigkeit \mathbf{v}

$$\frac{\partial F}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla F + D \cdot \Delta F = A(F)$$

Bei einer Eichtransformation fällt auch für $G = 0$ der eichvariante h -abhängige Term nicht weg. Hier würde das F -Feld $F(\mathbf{x}, t + dt)$ auf der Flammenfront über den Transport von unphysikalischen Größen $F(\hat{\mathbf{x}}, t)$ außerhalb der Flammenfront abhängen.

4.5.5 Eichfixierung von F

Auch für Variablen wie F lässt sich eine Eichung fixieren, z.B. mit

$$\nabla G \cdot \nabla F = 0, \quad (4.23)$$

d.h. F ist konstant normal zur Flammenfront. Dies führt zu folgendem Gleichungssystem:

$$\frac{\partial F}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla F - s_u \frac{\nabla F \cdot \nabla G}{|\nabla G|} \approx A(F)$$

bzw.

$$\frac{\partial F}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla F - s_u \frac{\nabla F \cdot \nabla G}{|\nabla G|} = A(F) + G \cdot L \quad .$$

Damit ergibt sich wieder eine Bestimmungsgleichung für L :

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{\partial}{\partial t} (\nabla G \cdot \nabla F) \\ &= \nabla \left(\frac{\partial G}{\partial t} \right) \cdot \nabla F + \nabla G \cdot \nabla \left(\frac{\partial F}{\partial t} \right) \\ &= \nabla \left(\frac{\partial G}{\partial t} \right) \cdot \nabla F \\ &\quad + \nabla G \cdot \nabla \left[-\mathbf{v} \cdot \nabla F + s_u \frac{\nabla F \cdot \nabla G}{|\nabla G|} + A(F) \right] \\ &\quad + \underbrace{(\nabla G)^2}_{=1} L + \underbrace{G(\nabla G \cdot \nabla L)}_{\approx 0} \end{aligned}$$

Umgekehrt lässt sich fragen, ob man eine Eichtung derart wählen kann, dass die Transportgleichung eine gewünschte Form annimmt, z.B. mit einem Diffusionsterm:

$$\frac{\partial F}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla F - \nabla \cdot (D \nabla F) = A(F)$$

Damit dies zur Transportgleichung (4.22) äquivalent ist, benötigt man die Eichtung

$$-s_u \frac{\nabla F \cdot \nabla G}{|\nabla G|} + D \cdot \Delta F = 0.$$

4.5.6 Favre-gemittelte Gleichungen

Wie üblich teilen wir den Momentanwert von G in einen Mittelwert und dessen Varianz auf:

$$G = \tilde{G} + G''$$

Für das gemittelte \tilde{G} ergibt sich dann (vgl. Peters 2000)

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{G}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{v} \tilde{G}) = \rho s_t |\nabla \tilde{G}| \quad (4.24)$$

Bei Peters (2000) taucht auf der rechten Seite noch ein weiterer Term $-\bar{\rho} D \tilde{\kappa} |\nabla \tilde{G}|$ auf. Dieser repräsentiert den Einfluss der Krümmung $\tilde{\kappa}$ auf die turbulente Brenngeschwindigkeit s_t . Wie aber oben ausgeführt, betrachten wir s_t als die effektive Ausbreitungsgeschwindigkeit von \tilde{G} relativ zum unverbrannten Gas. Daher darf kein weiterer Term diese ändern. Es gilt also $s_t = s_t' - D\kappa$, wenn s_t' die Peterssche Brenngeschwindigkeit ist.³

$\tilde{G} = G_0 = 0$ repräsentiert nun zunächst die mittlere Flammenfront. Es hat allerdings einige Vorteile, G_0 umzudefinieren, so dass es die vordere, dem unverbrannten Gas am nächsten liegende Kante der turbulenten Flamme darstellt. Dies ist durchaus zulässig, denn die Ausbreitungsgeschwindigkeit von \tilde{G} bezieht sich auf das unverbrannte Gas und wird daher durch die Position von \tilde{G} innerhalb der

³Allerdings degeneriert die G -Gleichung, die eine Hamilton-Jacobi-Gleichung und deshalb von parabolischem Charakter ist, bei Vernachlässigung der Krümmung zu einer hyperbolischen Gleichung, deren Lösungen nicht eindeutig sind und selbst bei glatten Anfangsbedingungen Ecken ausbilden können. Der Einfluss der Krümmung bei der fortschreitenden Welle hat, analog zur Viskosität bei den Navier-Stokes-Gleichungen, eine glättende Wirkung.

Flamme nicht beeinflusst. Im Gegenteil „sieht“ \tilde{G} die unverbrannten Größen durch die vordere Lage und man ist nicht mehr gezwungen, auf diese rückzurechnen.

Die Varianz $\widetilde{G''^2}$ ist ein Maß für die turbulente Flammendicke δ_t , und zwar definiert man (Peters 2000)

$$\delta_t = \frac{\sqrt{\widetilde{G''^2}}}{|\nabla \tilde{G}|} \Big|_{\tilde{G}=0} . \quad (4.25)$$

Um eine Gleichung für $\widetilde{G''^2}$ herzuleiten, wird Gleichung (4.24) von Gleichung (4.13) abgezogen und eine Reynoldsmittelung durchgeführt. Man erhält

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho} \widetilde{G''^2}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{v} \widetilde{G''^2}) - \rho_u s_u \frac{\nabla \widetilde{G''^2} \cdot \nabla \tilde{G}}{|\nabla \tilde{G}|} \\ = 2\bar{\rho} D_t (\nabla \tilde{G})^2 - c_s \bar{\rho} \frac{\tilde{\epsilon}}{k} \widetilde{G''^2} . \end{aligned} \quad (4.26)$$

Dabei wurde der Diffusionsterm tangential zur Flammenfront vernachlässigt.⁴ Der dritte Term auf der linken Seite trägt der Argumentation in Kapitel 4.5.4 Rechnung (Gl. 4.21) und ist der wesentliche Unterschied zur Petersschen Gleichung.

4.5.7 Reinitialisierung

Im G -Gleichungs-Verbrennungsmodell ist der Abstand zur Flammenfront für die Berechnung der Reaktionsrate notwendig. Daher muss

⁴Der Beitrag der Diffusion normal zur Flammenfront ist wegen der Einschränkung durch Gleichung (4.21) und den dort aufgeführten Argumenten nicht zulässig.

die Eichbedingung (4.16) in jedem Zeitschritt erfüllt sein. Einerseits könnte man dies durch Lösung von Gleichung (4.18) erreichen, die aber nur Gültigkeit um $G = 0$ hat. Das Konzept der Flammenfrontdicke aber erfordert, dass die Eichbedingung auch außerhalb der Flammenfront erhalten ist. Daher muss man, sobald das G -Feld nicht mehr der Eichbedingung genügt, diese wiederherstellen. Man nennt dies Reinitialisierung des G -Feldes.

Reinitialisierung durch Lösung einer Differentialgleichung

Eine elegante Lösung entwickelten Sussman et al. (1994), bei der die Flammenfront nicht explizit gesucht wird, sondern ausgenutzt wird, dass die Lösung im neuen Zeitschritt sehr nah an der Eichbedingung liegt. Durch iterative Lösung der Gleichung

$$\frac{\partial G}{\partial \tau} = \text{sign}(G)(1 - |\nabla G|) \quad (4.27)$$

in jedem Zeitschritt wird die Abstandsfunktion wieder hergestellt. Konvergenz wird erreicht, wenn $|\nabla G| = 1$ gilt. Die geglättete sign-Funktion ist dabei

$$\text{sign}(G) = \frac{G}{\sqrt{G^2 + \epsilon^2}} \quad ,$$

wobei ϵ in der Größenordnung einer Zelldimension liegt. Typischerweise benötigten die Autoren eine Iteration bis zur Konvergenz. Das Konvergenzkriterium für die Iteration ist dabei

$$E = \frac{\sum_{i,j,k} |G_{i,j,k}^{N+1} - G_{i,j,k}^N|}{M} < \delta \tau h^2 \quad , \quad (4.28)$$

M ist die Zahl der Zellen, h die Zellkantenlänge und $\delta\tau$ die Zeitschrittweite für die Iterationen.

Problematisch ist, dass die Reinitialisierung alle G -Werte ändert, auch die an der Flammenfront selbst (Sethian 1996). Ist der Gradient von G an der Flammenfront nicht nahe eins, erhöht sich einerseits die Zahl der Iterationen zur Konvergenz, andererseits kann bei zu großem Gradienten die Flammenfront um eine Zelle verschoben werden. Peng et al. (1999) führten eine sign-Funktion ein, bei der der Glättungsparameter ϵ vom Gradienten von G abhängt, um so die Problematik zu lösen. Russo et al. (2000) verbesserten die Gradientenberechnung an der Flammenfront um zu vermeiden, dass Information von der anderen Seite der Fläche das *upwind*-Schema verfälscht. Reinecke (2001) vermied eine Positionsänderung der Flammenfront durch Einführung einer Dämpfungsfunktion, die null nahe der Flammenfront und eins weiter weg ist.

In der vorliegenden Arbeit wurde der Ansatz von Reinecke adaptiert. Für einfache Testfälle mit quadratischen oder kubischen Zellen genügte ein Zeitschritt $\delta\tau = h/2$ und maximal zehn Iterationen bis zur Konvergenz. In den Motorfällen jedoch war ein wesentlich kleinerer Zeitschritt $\delta\tau' \approx h/50$ bis $h/100$ nötig, um nach erheblich mehr Iterationen wenigstens für einen Großteil der Zellen eine konvergente Lösung zu erhalten. Für divergente Zellen musste noch ein zweites Verfahren implementiert werden, welches im folgenden erläutert wird.

Reinitialisierung durch explizite Bestimmung der Flammenfront

Ein robustes Verfahren verwenden Reinecke et al. (1999), wo zuerst eine diskrete Repräsentation der Flammenfront bestimmt wird und

dann zu jedem Punkt außerhalb der Flammenfront der minimale Abstand zu dieser. Das zunächst recht zeitintensive Verfahren kann beschleunigt werden, wenn sich die Berechnungen auf einen kleinen Bereich um die Flammenfront beschränken. Obgleich es sehr aufwändig und langsam ist, ist es jedoch für Zellen, die nach dem obigen Verfahren nicht konvergiert sind, unerlässlich.

Redistribution

Eine Rechnung zeigt, dass gilt

$$\mathbf{n} \cdot \nabla u = \mathbf{n} \cdot \nabla(\mathbf{v}\mathbf{n} + s_t) = 0 \Rightarrow \frac{\partial(\nabla G)^2}{\partial t} = 0 \quad (4.29)$$

Ist die normale Ausbreitungsgeschwindigkeit der Flammenfront in Normalenrichtung konstant, bleibt die Abstandsfunktion erhalten. Dies ist eine mögliche Eichfixierung für die Ausbreitungsgeschwindigkeit. Doch die Erhaltung der Eichbedingung für G erkaufte man sich durch eine Eichbedingung für u , die zeitlich nicht erhalten ist. D.h. man muss die Eichung $\mathbf{n} \cdot \nabla u = 0$ ständig wiederherstellen, analog zur Reinitialisierung von G . Dazu wird die Gleichung (Chen et al. 1997, Peng et al. 1999)

$$\frac{\partial u}{\partial \tau} + \text{sign}(G)\nabla u \cdot \mathbf{n} = 0 \quad (4.30)$$

iterativ in jedem Zeitschritt gelöst. Die $\text{sign}(G)$ -Funktion sorgt dafür, dass der Normalenvektor von der Flammenfront wegweist, so dass F ausgehend von dieser in den Raum verteilt wird. Dieses Vorgehen wird in der Literatur als *Redistribution* bezeichnet und kann allgemein für alle Größen F , die der Eichbedingung (4.23) genügen sollen,

verwendet werden. Dieses Vorgehen wird in der vorliegenden Arbeit allerdings nicht verfolgt.

4.5.8 Konvektion

Bei der Flammenausbreitung existieren zwei unterschiedliche Ausbreitungsgeschwindigkeiten: die Strömungsgeschwindigkeit des Gases, die relevant für Massen-, Energie- und Impulstransport ist, sowie die Brenngeschwindigkeit der Flammenfront, die sich aus der Strömungsgeschwindigkeit und einer Ausbreitung relativ zu dieser zusammensetzt. Kommerzielle CFD-Codes sind im allgemeinen nicht in der Lage, diese unterschiedliche Ausbreitungsrichtungen zu berücksichtigen. Da der Kiva3v-Code jedoch als Quellcode vorlag, konnte eine zusätzliche Konvektionsgleichung für die Ausbreitung von \tilde{G} und \tilde{G}''^2 implementiert werden.

4.5.9 Reaktionsrate

Um die Reaktionsrate in der turbulenten Flamme zu berechnen, wird auf eine Reaktionsfortschrittsvariable c zurückgegriffen. Ein Vergleich mit einer großen Zahl von experimentellen Daten (siehe z.B. Bray et al. 2001) ergab, dass ein Verlauf

$$c(z) = \frac{1}{2} \left[1 - \operatorname{erf} \left\{ 2,5 \left(\frac{z - z_{1/2}}{z_0 - z_{1/2}} \right) \right\} \right]$$

mit

$$c(z_{1/2}) = \frac{1}{2} \quad \text{und} \quad z_{1/2} = \frac{1}{2}(z_0 + z_1)$$

diese gut wiedergibt. Dabei sind z_0 und z_1 die Grenzen der Reaktionszone zum Unverbrannten und zum Verbrannten hin. In unserem Fall gilt:

$$z_0 = G_0 = 0 \quad \text{und} \quad z_1 = \delta_t$$

Daher erhält man für die Fortschrittsvariable

$$c(G, \delta_t) = \frac{1}{2} \left[1 - \operatorname{erf} \left\{ 2,5 - \frac{5G}{\delta_t} \right\} \right] . \quad (4.31)$$

Aus der Definition der Fortschrittsvariablen wird die Änderung der Kraftstoffmasse berechnet,

$$\frac{d}{dt} m_{\text{burnt fuel}} = \frac{d}{dt} (c \cdot m_{\text{fuel},0}) . \quad (4.32)$$

Die ursprüngliche Kraftstoffmasse $m_{\text{fuel},0}$ wird aus der momentanen Kraftstoffmasse und dem Verbrennungsprodukt berechnet.

4.6 Weller-Modelle

Ein relativ weit verbreitetes, in StarCD integriertes Verbrennungsmodell, das in dieser Arbeit als Vergleichsbasis dient, ist das Weller-Modell. Zentrale Größen bei dem von Weller (1993) entwickelten *flame wrinkling*-Verbrennungsmodell sind Reaktionsregressvariable $b = 1 - c$, und eine die Reaktion beschleunigende Flammenfaltung Ξ .

$$\Xi = \frac{A_l}{A_t} = \frac{s_t}{s_l} , \quad (4.33)$$

mit A_l als tatsächliche und A_t als die in Ausbreitungsrichtung projizierte Flammenoberfläche, die im gleichen Verhältnis zur turbulenten

und laminaren Brenngeschwindigkeit stehen (vgl. Gleichung (4.4)). Es gilt:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{b}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{U} \tilde{b}) &= \nabla \cdot (\bar{\rho} D_b \nabla \tilde{b}) \\ &- (\bar{\rho} \Xi + (\rho_u - \bar{\rho}) \min(\Xi, \Xi_{eq})) s_u |\nabla \tilde{b}| \end{aligned} \quad (4.34)$$

Ξ_{eq} entspricht dabei dem Gleichgewichtswert der Flammenfaltung für eine vollentwickelte (stationäre) Flamme. Solange dieser Wert nicht erreicht ist ($\Xi < \Xi_{eq}$), reduziert sich die Gleichung zu

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{b}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{U} \tilde{b}) = \nabla \cdot (\bar{\rho} D_b \nabla \tilde{b}) - \rho_u \Xi s_u |\nabla \tilde{b}| \quad . \quad (4.35)$$

Die ursprünglich vorgeschlagene Ξ -Gleichung hat sich als praktisch nicht implementierbar erwiesen. Vor allem der sog. *cusp*-Term, der durch einen starken Anstieg der Flammenfaltung (Spitzenbildung) innerhalb der Flamme für eine endliche Dicke sorgt, ist von der Bedeutung her unerlässlich, wurde aber immer vernachlässigt.

Neuere Versionen des Modells versuchen daher, die Wirkung des Terms auf andere Art zu simulieren (Weller 1998). Dort wird vorgeschlagen:

$$\frac{\partial \Xi}{\partial t} + \bar{U}_s \cdot \nabla \Xi = G \Xi - R(\Xi - 1) + (w_s - w_t) \Xi \quad , \quad (4.36)$$

wobei

$$G = R \frac{\Xi_{eq} - 1}{\Xi_{eq}}, \quad R = \frac{0,28}{\Xi} \frac{\Xi_{eq}^*}{\Xi_{eq}^* - 1} \quad (4.37)$$

und

$$\begin{aligned}\Xi_{eq} &= 1 + 2(1 - b)(\Xi_{eq}^* - 1) \\ \Xi_{eq}^* &= 1 + 0,62\sqrt{\frac{u'}{s_u}}\mathcal{R} \quad ,\end{aligned}\quad (4.38)$$

mit $\mathcal{R} = u' / \sqrt{\epsilon\tau_k}$.

Damit gilt

$$\begin{aligned}\Xi_{eq} &= 1 \quad \text{für } b = 1 \text{ (unverbrannt)} \\ \Xi_{eq} &= 2\Xi_{eq}^* \quad \text{für } b = 0 \text{ (verbrannt)},\end{aligned}$$

d.h. im Unverbrannten ist die Flamme ungefalted und hinter der Flamme steigt die Faltung stark an, so dass sich die Verbrennung in einem endlich breiten Gebiet abspielt. \bar{U}_s ist die Ausbreitungsgeschwindigkeit der Flammenoberfläche, w_s und w_t simulieren die Änderung der Flammenfaltung durch Scherung.

Setzt man die Flammenfaltung ins Gleichgewicht, also $\Xi = \Xi_{eq}$, so reduziert sich das Modell auf eine Gleichung:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{b}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{U} \tilde{b}) = \nabla \cdot (\bar{\rho} D_b \nabla \tilde{b}) - \rho_u \Xi_{eq} s_u |\nabla \tilde{b}| \quad (4.39)$$

Das sog. Eingleichungs-Weller-Modell besticht durch seine einfache Implementierbarkeit bei gleichzeitig relativ guten Ergebnissen (Weller et al. 1994). Man kann das Modell auch im Sinne einer G -Gleichung interpretieren, bei dem der Diffusionsterm als Flammendickenmodell dient. Allerdings hat es den unphysikalischen Nachteil, dass es keine stationäre Lösung gibt, denn die Flammendicke wächst durch den Diffusionsterm proportional $\sqrt{D_b \cdot t}$. Ebenso ist der Diffusionsterm unverträglich mit einer Schichtladeverbrennung (Kaube 1999).

4.7 Turbulenz und Zwei-Phasenproblematik

Eine Verbrennung sollte durch einen Zweiphasenansatz beschrieben werden, denn die Überlagerung von verbranntem und unverbranntem Zustand zu einem mittleren Zustand erzeugt mehrere Probleme. Erstens benötigen alle die Verbrennung betreffenden Gleichungen die unverbrannten Größen, hauptsächlich die Dichte und die Temperatur, zweitens führt die Superposition der Geschwindigkeiten zur Produktion künstlicher Turbulenz.

4.7.1 Auswirkungen auf das k - ϵ -Modell

Seien $v_{n,u}$, $v_{n,b}$ die Normalenkomponenten der Geschwindigkeiten des (un-)verbrannten Gases, dann ist die mittlere normale Gasgeschwindigkeit \bar{v}_n nach der turbulenten Mittelung eine Superposition

$$\bar{v}_n = (1 - c)v_{n,u} + cv_{n,b} \quad (4.40)$$

Weiter gilt

$$\nabla \bar{v}_n = (1 - c)\nabla v_{n,u} + c\nabla v_{n,b} + (v_{n,b} - v_{n,u})\nabla c \quad (4.41)$$

Der letzte Term tritt nur wegen der Superposition von verbranntem und unverbranntem Gas auf und ist umso größer, je größer der Gradient von c , also je schmaler die Flamme ist. Sowohl die k - wie auch die ϵ -Gleichung enthalten Quellterme dieser Art, was zu einem künstlichen Anwachsen der turbulenten kinetischen Energie in der Flamme führt. Dies erhöht wiederum die turbulente Brenngeschwindigkeit, was zu einer zu schnellen Flammenausbreitung führt. Prinzipiell könnte man denken, dass dies nicht der Fall sein kann, da ja $G = 0$

die vorderste Kante der Flamme ist und somit noch die unverbrannte Turbulenz sieht. Steigt aber die Turbulenz innerhalb der Flamme zu stark an, so wird durch Diffusion auch der Bereich um $G = 0$ erfasst.

4.7.2 Methode 1: Einführung einer zweiten Turbulenzgleichung

Um dies zu umgehen, wird eine zweite Turbulenzgleichung eingeführt, die zur Berechnung der turbulenten Brenngeschwindigkeit herangezogen wird. Diese Turbulenz im Unverbrannten \tilde{k}_u ändert sich ab $G = 0$ nicht mehr, d.h. die Quellterme werden auf null gesetzt. Die Standard-Turbulenz \tilde{k} weist dann zwar immer noch erhöhte Werte an der Flammenfront auf, die für die Verbrennung relevante \tilde{k}_u -Gleichung aber nicht, denn durch das Ausblenden der Quellterme wird auch durch Diffusionsprozesse keine künstliche Erhöhung der unverbrannten Turbulenz an und vor der Flammenfront stattfinden.⁵ Die Gleichung lautet

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{k}_u}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{v}} \tilde{k}_u) &= \nabla \cdot \left[\left(\frac{\mu}{\text{Pr}_k} \right) \nabla \tilde{k}_u \right] \\ &+ \left[\sigma : \nabla \tilde{\mathbf{v}} + -\frac{2}{3} \bar{\rho} \tilde{k}_u \nabla \cdot \tilde{\mathbf{v}} - \bar{\rho} \tilde{\epsilon} \right] \cdot \alpha \end{aligned} \quad (4.42)$$

wobei $\alpha = 1$ im unverbrannten und $\alpha = 0$ im verbrannten Gas ist.

⁵Den gleichen Effekt könnte man auch durch Ausblenden der \tilde{k} -Quellterme in der Flamme erreichen. Da das G -Gleichungsmodell sehr schmale Flammen simuliert, wären die Auswirkungen auf die restliche Strömung gering und würden das rasante Ansteigen des Turbulenzniveaus verhindern.

4.7.3 Methode 2: Rekonstruktion beider Phasen

Eine bessere Lösung wird durch die direkte Berechnung der Turbulenzquellterme aus den Geschwindigkeiten des verbrannten und unverbrannten Gases erreicht. Dazu wird der Ansatz von Smiljanovski et al. (1997) und Reinecke (2001) unter der Annahme übernommen, dass im partiell verbrannten Bereich in jeder Zelle sowohl verbranntes als auch unverbranntes Gas vorliegt. Dann gilt für die Masse, die innere Energie und den Impuls in der Zelle:

$$\bar{\rho} = (1 - \alpha)\rho_u + \alpha\rho_b \quad (4.43)$$

$$\bar{\rho}\bar{e} = (1 - \alpha)\rho_u e_u + \alpha\rho_b e_b \quad (4.44)$$

$$\bar{\rho}\bar{\mathbf{v}} = (1 - \alpha)\rho_u \mathbf{v}_u + \alpha\rho_b \mathbf{v}_b \quad (4.45)$$

Dabei ist $\alpha = V_b/V$ das Verhältnis von verbranntem Volumen zum Gesamtvolumen einer Zelle. Da sich nur die Geschwindigkeitskomponente normal zur Flammenoberfläche ändert, vereinfacht sich die letzte Gleichung, wenn man die Geschwindigkeit in Normal- und Tangentialkomponente aufspaltet:

$$\bar{\mathbf{v}} = \bar{v}_n \mathbf{n} + \bar{\mathbf{v}} - \bar{v}_n \mathbf{n} = \bar{v}_n \mathbf{n} + \bar{\mathbf{v}}_t \quad (4.46)$$

Mit $\mathbf{v}_{t,u} = \mathbf{v}_{t,b}$ erhält man

$$\bar{\rho}\bar{v}_n = (1 - \alpha)\rho_u v_{n,u} + \alpha\rho_b v_{n,b} \quad (4.47)$$

Die *Rankine-Hugoniot*-Sprungbedingungen an der Flammenfront lauten:

$$v_{n,b} - v_{n,u} = s_t \left(1 - \frac{\rho_u}{\rho_b}\right) \quad (4.48)$$

$$e_b - e_u = q - \frac{p_u + p_b}{2} \left(\frac{1}{\rho_b} - \frac{1}{\rho_u} \right) \quad (4.49)$$

$$(\rho_u s_t)^2 = - \frac{p_b - p_u}{\frac{1}{\rho_b} - \frac{1}{\rho_u}} \quad (4.50)$$

Des weiteren gelten:

$$p_u = \mathcal{R}T_u \sum_i \frac{\rho_{u,i}}{W_i} \quad (4.51)$$

und

$$p_b = \mathcal{R}T_b \sum_i \frac{\rho_{b,i}}{W_i} . \quad (4.52)$$

Schließlich wird noch α benötigt, das aus der Fortschrittsvariablen c berechnet wird. Per Definition gilt für $\lambda = 1$

$$m_b = c \cdot \bar{m} \quad (4.53)$$

Also folgt

$$\begin{aligned} \rho_b V_b &= c \cdot \bar{\rho} V \\ \frac{V_b}{V} &= \alpha = c \cdot \frac{\bar{\rho}}{\rho_b} \end{aligned} \quad (4.54)$$

Da die turbulente Flamme eine endliche Dicke hat, wird s_t auch noch in einem gewissen Abstand von der Flammenoberfläche benötigt. In dieser Arbeit wird eine algebraische Gleichung für s_t gelöst. Dies beeinflusst, wie oben gezeigt, nicht die Ausbreitung der $G = 0$ -Isofläche, verfälscht aber das Ergebnis für $G \neq 0$, da der Geschwindigkeitssprung aus der lokalen Brenngeschwindigkeit berechnet wird.

Um den physikalisch richtigen Sprung zu berechnen, muss die Brenngeschwindigkeit der Flammenfront in die Flamme „exportiert“ werden. Die Forderung lautet daher

$$\mathbf{n} \cdot \nabla s_t = 0 \quad . \quad (4.55)$$

Dies erreicht man durch Lösung der Gleichung (4.30) mit $u = s_t$.

Das Gleichungssystem lässt sich noch etwas vereinfachen. Typische Werte für innermotorische Verbrennung sind $s_t \approx 4$ m/s, $\rho_u/\rho_b \approx 4$, $\rho_u \approx 0,005$ g/cm³ und $\bar{p} \approx 10$ bar. Unter Verwendung von Gleichung (4.50) erhält man

$$\frac{\Delta p}{\bar{p}} = \frac{p_b - p_u}{\bar{p}} \approx 10^{-4} \quad , \quad (4.56)$$

so dass die Annahme $p_b = p_u = \bar{p}$ gerechtfertigt ist.

Zur Lösung des Gleichungssystems wird ein iteratives Newton-Verfahren verwendet (Press et al. 1992).

4.7.4 Zweiphasige Turbulenzquellterme

Zur Berechnung der korrekten Turbulenzquellterme wird bei der gesamten turbulenten kinetischen Energie einer Zelle begonnen:

$$\bar{\rho k} = (1 - \alpha)\rho_u k_u + \alpha\rho_b k_b \quad (4.57)$$

Dann gilt für die zeitliche Änderung

$$\frac{d}{dt}(\bar{\rho k}) = \frac{d}{dt}((1 - \alpha)\rho_u k_u + \alpha\rho_b k_b)$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{(1-\alpha)\rho_u}{\bar{\rho}} \frac{d}{dt}(\bar{\rho}k_u) + \frac{\alpha\rho_b}{\bar{\rho}} \frac{d}{dt}(\bar{\rho}k_b) \\
&+ \bar{\rho}(k_b - k_u) \frac{d}{dt} \left(\frac{\alpha\rho_b}{\bar{\rho}} \right)
\end{aligned}$$

Unbekannt in dieser Gleichung ist der letzte Summand, der Sprung der Turbulenzenergie an der Flammenfront. Wären aber k_u und k_b verschieden, so müsste die Energie aus der mittleren Strömung genommen worden sein und Gleichungen (4.48) oder (4.49) einen dementsprechenden Term aufweisen. Es gilt daher $k_u = k_b = \bar{k}$ und

$$\frac{d}{dt}(\bar{\rho}\bar{k}) = (1-\alpha)\frac{\rho_u}{\bar{\rho}} \frac{d}{dt}(\bar{\rho}k_u) + \alpha\frac{\rho_b}{\bar{\rho}} \frac{d}{dt}(\bar{\rho}k_b) \quad (4.58)$$

Für die Quellterme der k -Gleichung wird

$$-\frac{2}{3}\bar{\rho}\bar{k}\nabla \cdot \mathbf{v} \rightarrow -\frac{2}{3}\bar{k} [(1-\alpha)\rho_u\nabla \cdot \mathbf{v}_u + \alpha\rho_b\nabla \cdot \mathbf{v}_b] \quad (4.59)$$

und

$$\sigma_{ij} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \rightarrow (1-\alpha)\frac{\rho_u}{\bar{\rho}} \left(\sigma_{ij} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \right)_u + \alpha\frac{\rho_b}{\bar{\rho}} \left(\sigma_{ij} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \right)_b \quad (4.60)$$

ersetzt, wobei $(\cdot)_{u,b}$ den mit der (un-)verbrannten Geschwindigkeit berechneten Dissipationsterm bezeichnet. Die übrigen Terme bleiben unverändert. Ganz analog wird die ϵ -Gleichung behandelt.

4.8 Turbulente Brenngeschwindigkeit

Die turbulente Brenngeschwindigkeit ist ein Schlüsselement der turbulenten Verbrennung. Darunter versteht man, wie im laminaren Fall,

die Fortpflanzungsgeschwindigkeit der Flammenfront relativ zum (unverbrannten) Gas. Qualitativ beobachtet man mit wachsender Turbulenz zunächst einen etwa linearen Anstieg, danach bleibt s_t konstant (*bending*), bis schließlich Flammenlöschung bei sehr großen u' auftritt.

4.8.1 Phänomenologische Modelle

Als erster beschrieb Damköhler (1940) dieses Verhalten durch den Ansatz

$$\frac{s_t}{s_l} = 1 + \frac{u'}{s_l} . \quad (4.61)$$

Die meisten heutzutage verwendeten Korrelationen lassen sich auf eine Form

$$\frac{s_t}{s_l} = 1 + A \left(\frac{u'}{s_l} \right)^n \quad (4.62)$$

bringen, mit dem Grenzwert

$$s_t \rightarrow s_l \quad \text{für} \quad u' \rightarrow 0 .$$

Die Konstante n liegt zwischen 0,5 und 1. Eine große Schwierigkeit bei der Validierung der Ansätze ist die enorme Streuung der in der Literatur angegebenen Messwerte. Einen Vergleich verschiedener Modellierungsansätze mit einer großen Zahl von Messdaten findet man in Gülder (1990). In Abbildung 4.4 sind einige Ansätze dargestellt, die Referenzen finden sich entweder im Anhang oder in Gülder (1990). In dieser Arbeit wird Gleichung (4.62) mit $n = 5/6$ und $A \approx 2-3$ verwendet, was der Gleichung von Herweg (1992) im Grenzfall einer vollentwickelten Flamme entspricht.

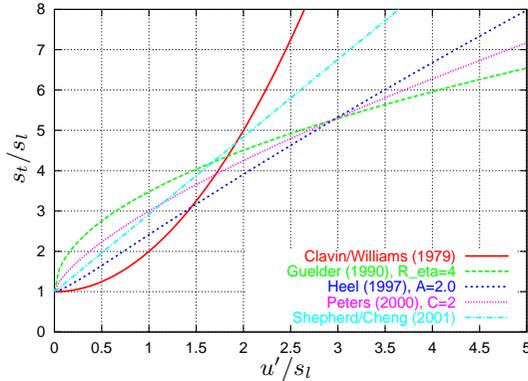


Abb. 4.4: Verschiedene Ansätze zur Modellierung der Abhängigkeit der turbulenten Flammgeschwindigkeit von der Turbulenz.

4.8.2 Fraktale Modelle

Gouldin (1987) schreibt der Flammenoberfläche eine fraktale Natur zu, d.h., dass die Flammenoberfläche innerhalb gewisser Grenzen abhängig ist von dem Maßstab, den man zur Messung anlegt. Je kleiner der Maßstab, desto feinere Verwinkelungen kann man vermessen und desto größer die Flammenoberfläche. Für ein physikalisches Objekt gibt es aber einen kleinsten und einen größten Maßstab, jenseits derer sich die Fläche nicht mehr ändert. Anders ausgedrückt gilt für das

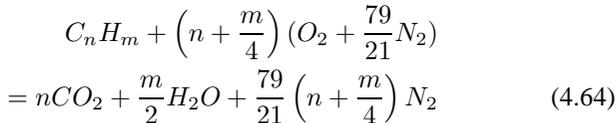
Verhältnis der Flächen

$$\frac{A_l}{A_t} = \frac{s_t}{s_l} = \left(\frac{l_{in}}{l_{out}} \right)^{2-D} \quad (4.63)$$

mit der fraktalen Dimension D . Für eine glatte Oberfläche gilt $D = 2$, während für eine fraktale Oberfläche D eine reelle Zahl ist. Die begrenzenden Maßstäbe l_{in} und l_{out} liegen (als Orientierung) in der Größenordnung der Kolmogorov- und der integralen Längenskala, wobei Messungen größere Abweichungen davon belegen. Die fraktale Dimension D liegt zwischen 2 und 3, je nach Experiment. Eine Übersicht darüber bietet Johansson (1995).

4.9 Reaktionsmodell

In dieser Arbeit wird eine Einschritt-Brutto-Reaktion (Heywood 1988)



mit fünf beteiligten Spezies verwendet. Da die stöchiometrischen Koeffizienten für einen bestimmten Kraftstoff konstant sind, kann man mit einem auf drei Spezies (Kraftstoff, Luft, Verbrennungsprodukt) reduzierten Mechanismus auskommen.

Dies erscheint zunächst sehr vereinfacht, wenn man bedenkt, dass schon bei einer relativ einfachen Verbrennung von Wasserstoff mit Sauerstoff ungefähr 40 Elementarreaktionen stattfinden (Warnatz 2001), während bei der Verbrennung eines realen Otto-Kraftstoffs

mehrere tausend Elementarreaktionen ablaufen. Dies überfordert aber zum einen jegliche Rechnerleistung, zum anderen spielen die meisten Reaktionen nur eine untergeordnete Rolle. Durch geeignete Methoden, z.B. Identifikation geschwindigkeitsbestimmender Reaktionen, lassen sich überschaubare Reaktionsmechanismen konstruieren. Diese sind aber immer noch sehr komplex und für die 3D-Simulation ungeeignet. Eine solche reaktionskinetische Auflösung würde nämlich auch eine ebenso detaillierte Ortsauflösung des *flamelets* voraussetzen.

Für die Simulation turbulenter Flammen, wo chemische und strömungsmechanische Prozesse entkoppelt sind, wird zunächst angenommen, dass die chemischen Reaktionen unendlich schnell ablaufen, so dass jeder Reaktionsmechanismus in eine einzige Bruttoreaktion übergeht. Die im Abgas enthaltene Energie der Zwischenprodukte CO und HC muss jedoch vom Heizwert des Kraftstoffs abgezogen werden, da sonst die Energiefreisetzung zu hoch sein würde. In Fällen, wo die Bedingungen nicht so homogen sind, wie z.B. für eine Schichtladeverbrennung, sollte aber ein 7-Spezies Mechanismus benutzt werden, um die Wärmefreisetzung durch Berücksichtigung von Zwischenprodukten detaillierter beschreiben zu können.

Kapitel 5

Ergebnisse

Zur Berechnung der Ergebnisse für die verschiedenen Verbrennungsmodelle wurden zwei CFD-Codes verwendet. Zum einen Kiva3v, in den das G -Gleichungsmodell und das ECFM-Modell (im Rahmen des EU-Projekts GLEVEL, Angelberger et al. 2002) implementiert wurden, zum anderen StarCD, in den im Rahmen einer früheren Dissertation (Heel 1997) das Weller-Eingleichungsmodell implementiert wurde. Ebenfalls lag in der StarCD-Version 3150.919 das ECFM-Modell vor.

5.1 Einfache Testfälle

Die Berechnungen in diesem Abschnitt wurden mit Kiva3v durchgeführt. Anhand einiger Testfälle wurde zunächst die Plausibilität der

Modelle überprüft.

5.1.1 Eingleichungs-Weller-Modell ohne Diffusion

Um den problematischen Einfluss der Diffusion im Eingleichungs-Weller-Modell zu vermeiden, wurde dieser Term zunächst abgeschaltet. Was für eine Schichtladeverbrennung zwingend notwendig ist (Kaube 1999), erwies sich bei einer vorgemischten Verbrennung als fatal: große Netzabhängigkeit, bei sehr feinen Netzen fast explosionsartige Verbrennung (Abbildung 5.1). Als Testfall wurde ein Quader mit Kantenlänge 1,5 cm verwendet, der im Zentrum gezündet wurde.

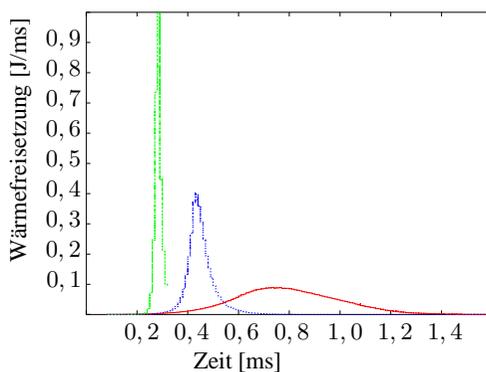


Abb. 5.1: Wärmefreisetzung für drei verschiedene Netzfeinheiten $\Delta h=0,5$ mm (rot); 0,25 mm (blau); 0,19 mm (grün).

Der Grund liegt in der strengen Kopplung von Verbrennung und Turbulenzproduktion. Künstliche Mechanismen wie z.B. die Verwendung von nur einer Phase oder echte Turbulenzproduktion durch die Expansion des verbrannten Gases erhöhen die turbulente Brenngeschwindigkeit nach Gleichung (4.62). Da die Turbulenz innerhalb der Flamme anwächst, steigt auch die Brenngeschwindigkeit der hinteren Bereiche stärker an als die der vorderen Bereiche, und damit sinkt die Flammendicke. Als Folge steigen die Geschwindigkeitsgradienten, es wird noch mehr Turbulenz produziert, und die Brenngeschwindigkeit steigt weiter. Dieser Kreislauf setzt sich fort, bis die Flammendicke nicht mehr weiter verringert werden kann, also genau eine Zellschicht breit ist. Je feiner das verwendete Rechenetz ist, desto schmaler wird die Flamme, desto mehr Turbulenz wird produziert und desto höher wird die letztendliche Brenngeschwindigkeit.

Um die Numerik zu stabilisieren, benötigt man ein Flammendickenmodell, ohne das die vorgemischte Verbrennung nicht korrekt beschrieben werden kann. D.h. konkret, dass dieses Modell nur mit Diffusionsterm eingesetzt werden kann.

5.1.2 Validierung der Zwei-Phasen Rekonstruktion

Zur Evaluierung der G -Gleichung mit Zwei-Phasen Rekonstruktion wurde ein quasi-eindimensionaler Testfall herangezogen, da ein echter 1D-Fall mit Kiva3v nicht berechnet werden kann. Realisiert wurde dieser durch eine ebene Verbrennung in einem Kubus mit 1,5 cm Kantenlänge. Modelliert wurde ein halber Kubus mit Symmetrieebene, als Wandrandbedingungen wurden adiabatische Wände gewählt. Die Auflösung betrug $30 \times 15 \times 30$ Zellen. Gezündet wurde derart, dass sich eine (bis auf Wandeffekte) ebene Flamme nach rechts ausbreitete

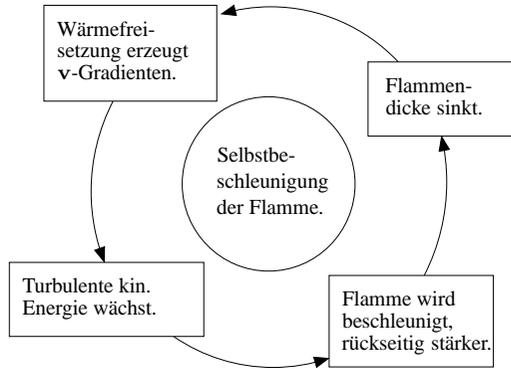


Abb. 5.2: Mechanismus der Selbstbeschleunigung.

(siehe Abbildung 5.3), so dass entlang der Schnittgeraden in ausreichend guter Näherung eindimensionale Bedingungen vorlagen.

Abbildungen 5.4 und 5.5 zeigen die Ergebnisse für zwei verschiedene Zeitpunkte. In der linken Spalte sind die Ergebnisse dargestellt, die ohne Turbulenzkorrektive erzielt wurden. Bei der Berechnung der mittleren Spalte wurde die Gleichung für die Turbulenz im Unverbrannten verwendet, ganz rechts die Berechnung der Turbulenzquellterme über die rekonstruierten Gasgeschwindigkeiten. Beginnend bei der linken Spalte beobachten wir eine von links nach rechts wandernde Flamme, der Bereich $0 < c < 1$ im oberen Bild kennzeichnet die Zone des partiell verbrannten Gases. Ein Bild darunter ist der Geschwindigkeitsverlauf dargestellt. An den Wänden links und rechts ist das Gas in Ruhe, die Geschwindigkeit also null, im Bereich der

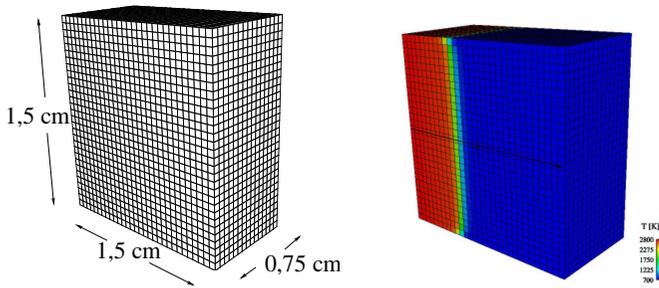


Abb. 5.3: Modellgeometrie für den quasi-1D-Testfall.

Flamme erkennen wir einen verschmierten Geschwindigkeitssprung vom Übergang unverbrannt nach verbrannt. Durch diesen Geschwindigkeitsgradienten erhalten wir, erkennbar im darunterliegenden Bild, eine stark anwachsende turbulente kinetische Energie innerhalb der Flamme. Hinter der Flamme wächst die Turbulenz durch die Kompression des verbrannten Gases weiter.

Die Einführung der Turbulenz im Unverbrannten k_u (mittlere Spalte) ändert qualitativ nichts an den Ergebnissen. Man erkennt, dass die Flamme zum gleichen Zeitpunkt noch nicht so weit fortgeschritten ist. Erst ein Blick auf die Skalierung der turbulenten kinetischen Energie zeigt, dass die Beschleunigung der Flamme im linken Fall durch die Produktion künstlicher Turbulenz erfolgt. Diese wird jetzt erfolgreich vermieden, auch wenn der Turbulenzsprung in der Flamme immer noch vorhanden ist.

Dieser ist erst in der Spalte ganz rechts beseitigt. In der mittleren

Abbildung sind zusätzlich zur mittleren Geschwindigkeit (schwarz) die Geschwindigkeit des unverbrannten Gases (grün) und des verbrannten Gases (violett) dargestellt. Vor der Flamme ist die unverbrannte Gasgeschwindigkeit identisch mit der mittleren, hinter der Flamme die verbrannte Gasgeschwindigkeit. Jede für sich ändert sich innerhalb der Flamme nur leicht, so dass die daraus berechneten Quellterme erheblich kleiner werden. Damit wurde gezeigt, dass dieses Vorgehen zielführend ist und daher auf einen echten Zweiphasencode verzichtet werden kann. Mangels Existenz eines solchen konnte dieser Ansatz leider nicht mit „echten“ zweiphasigen Ergebnissen verglichen werden. Im EU-Projekt MinKnock, das Anfang 2003 begonnen wurde, wird zur Zeit der kommerzielle CFD-Code Fire für die zweiphasige Verbrennung erweitert, so dass sich bald die Möglichkeit bieten wird, Vergleiche anzustellen.

Alle folgenden Ergebnisse wurden unter Verwendung der Gleichung für die unverbrannte Turbulenz k_u gewonnen.

5.1.3 Netzabhängigkeit

Um die Modelle auf Abhängigkeit von der Netzfeinheit zu überprüfen, wurde ein Zylinder mit bewegtem flachem Kolben herangezogen, von dem aus Symmetriegründen nur ein $0,5^\circ$ Sektor modelliert wurde. Die Netzabhängigkeit hängt entscheidend von der Auflösung der turbulenten Flamme ab, deren Dicke mit der turbulenten Längenskala skaliert. Um verschiedene Flammendicken zu realisieren, wurde der Testfall mit unterschiedlicher Längenskala initialisiert, wie sie auch unter realen Motorbedingungen vorkommen. Die Anfangsbedingungen waren wie folgt:

- Anfangstemperatur $T_0=620$ K
- Anfangsdruck $p_0=8,6$ bar
- Turbulente kinetische Energie $k_0=4$ m²/s²
- Anfängliche Längenskala $l_t=10$ mm, 5 mm, 1 mm
- Homogen vorgemischtes stöchiometrisches Benzin-Luft-Gemisch
- Zündzeitpunkt -25° KW
- Start der Rechnung -25° KW
- Drehzahl 1200 1/min

Es wurden drei unterschiedliche Netzfeinheiten verwendet, $\Delta h_1 = 1$ mm, $\Delta h_2 = 0,5$ mm, $\Delta h_3 = 0,25$ mm.

Abbildung 5.6 zeigt die Ergebnisse für das ECFM-Modell und das G -Gleichungsmodell. Für beide Modelle nimmt die Netzabhängigkeit mit abnehmender Längenskala, also dünner werdender Flamme, zu. Auffallend deutlich wird der Unterschied bei einer anfänglichen Längenskala von 1 mm, wo sowohl Lage des Spitzendrucks wie Maximalwert beim größten Netz für das ECFM-Modell nicht akzeptabel sind. Hält man sich vor Augen, dass aus Rechenzeitgründen Netze mit Feinheiten 2–3 mm verwendet werden, scheint das ECFM-Modell hier einen echten Nachteil zu haben. Insgesamt fällt auf, dass die Ausbreitungsgeschwindigkeit und damit die Lage des Spitzendrucks der Flamme sich beim G -Gleichungsmodell weniger ändert als beim ECFM-Modell. Während beim G -Gleichungsmodell die Ausbreitungsgeschwindigkeit nach Gleichung (4.62) bei allen Fällen etwa gleich bleibt, verhält sich das ECFM-Modell bei kleiner

Längenskala deutlich anders. Um dies zu verstehen, betrachten wir die Ergebnisse von Duclos et al. (1993). Bei konstanter Dichte und Turbulenz gilt für eine eindimensionale Flamme $s_t \propto \sqrt{k^2/\epsilon} \propto k^{2/3}\sqrt{l_t}$, d.h. die Brenngeschwindigkeit sinkt mit der Längenskala. Daher verschiebt sich das Druckmaximum nach spät. Als Konsequenz muss aber der Schluss gezogen werden, dass Netzfeinheiten von 0,5 mm und kleiner für die Motorrechnungen verwendet werden sollten.

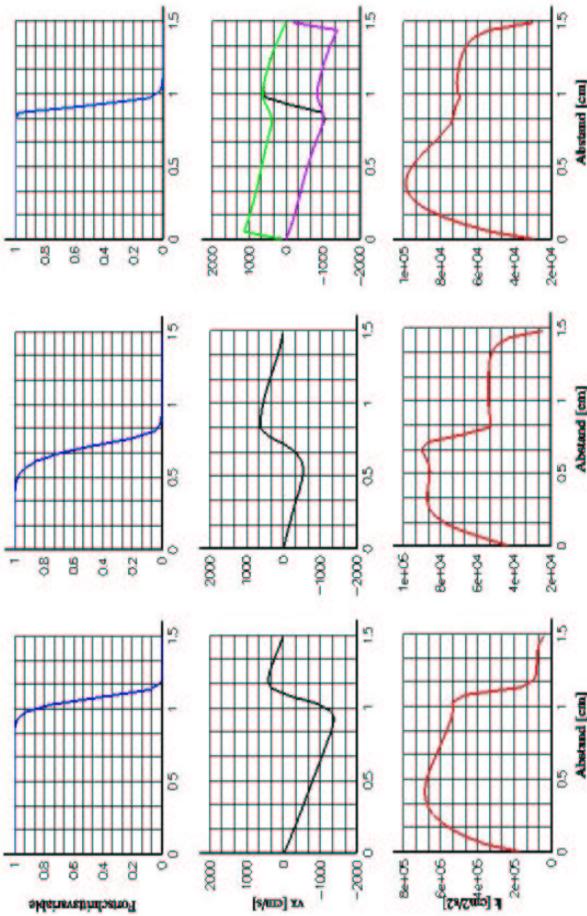


Abb. 5.4: Fortschrittsvariable, Gasgeschwindigkeit und turbulente kinetische Energie für die Ansätze ohne k_u /ohne Rekonstruktion (links), mit k_u /ohne Rekonstruktion (Mitte) und ohne k_u /mit Rekonstruktion (rechts) zum Zeitpunkt $t = 0,6$ ms.

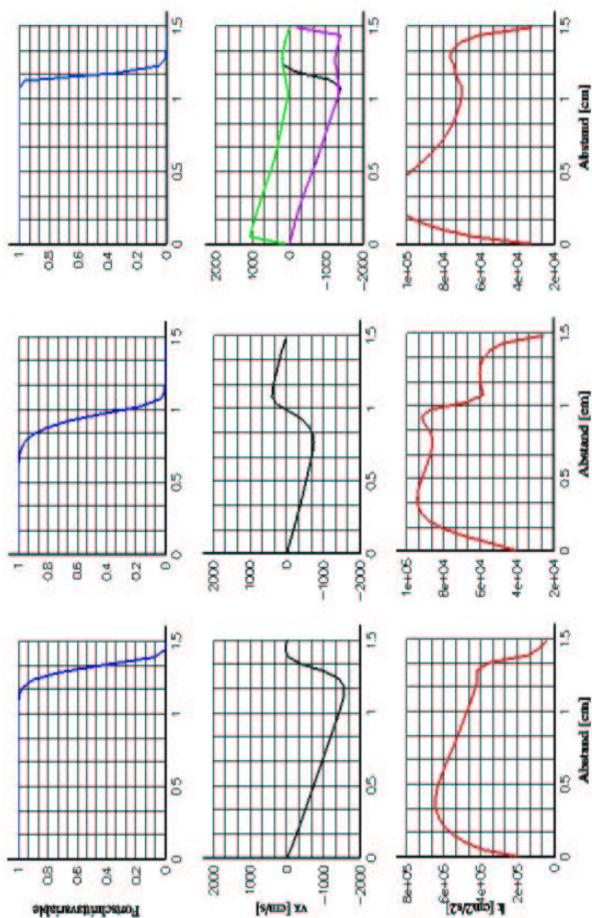


Abb. 5.5: Fortschrittsvariable, Gasgeschwindigkeit und turbulente kinetische Energie für die Ansätze ohne k_u /ohne Rekonstruktion (links), mit k_u /ohne Rekonstruktion (Mitte) und ohne k_u /mit Rekonstruktion (rechts) zum Zeitpunkt $t = 0,8$ ms.

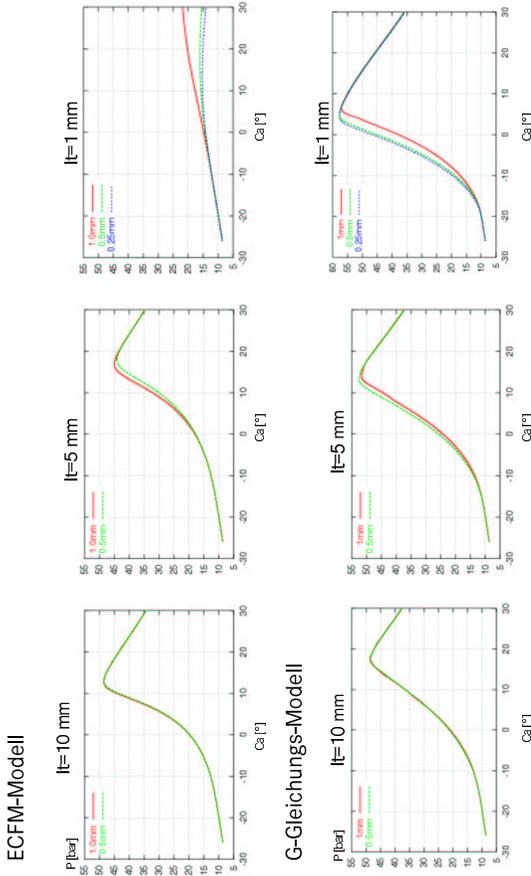


Abb. 5.6: Netzabhängigkeit bei Variation der turbulenten Längenskala l_t für das ECFM-Modell und das G -Gleichungsmodell in Kiva3v.

5.2 Motorergebnisse

Zur Validierung standen Messergebnisse eines Einzylinderaggregats auf Basis des A-Klassenmotors A 140 zur Verfügung. Aus der Datenbasis wurden drei Fälle ausgewählt, die mit allen Modellen berechnet wurden.

5.2.1 Generelles Vorgehen

Zunächst wurde der Ladungswechsel mit StarCD simuliert, beginnend bei 340° KW (20° KW v. LOT), kurz bevor die Einlassventile öffnen. Die Ventilbewegung stellt eigene Ansprüche an die Netztopologie, weswegen bei 680° KW (40° KW v. ZOT) auf ein zweites Netz gemappt wurde, das eine für die Verbrennung günstigere Netztopologie und -feinheit besitzt. Die Verbrennungsrechnungen für das Weller-Eingleichungs- und das ECFM-Modell wurden weiterhin in StarCD durchgeführt, die Berechnungen mit dem G -Gleichungsmodell in Kiva3v. StarCD wurde für die beiden ersten Modelle deshalb gewählt, weil es parallelisiert ist und daher einen Geschwindigkeitsvorteil bietet.

Für die Verbrennungssimulation müssen noch einige Besonderheiten berücksichtigt werden: Der gemessene Zündzeitpunkt stellt nur den Ansteuerbeginn der Zündkerze dar. Von den betrachteten Verbrennungsmodellen berücksichtigt nur das ECFM-Modell eine Flammenkernbildungszeit. Für die anderen Modelle ist der numerische Zündzeitpunkt daher meist etwas später zu wählen.

Eine große Schwierigkeit stellt die Berechnung der Energieverluste durch die Zylinderwände dar. Die Berechnung des Wandwärmeebergangskoeffizienten erfolgt üblicherweise mit Hilfe des loga-

rhythmischen Wandgesetzes. Vergleicht man aber die simulierten Werte mit Berechnungen aus einer Druckverlaufsanalyse, so sind diese meist höher. In dieser Arbeit wurde daher das Woschni-Modell (siehe z.B. Merker et al. 2004) verwendet, berechnet mit der lokalen Gastemperatur. Da es sich aber dabei um kein 3D-Modell handelt, musste der Vorfaktor an einem Betriebspunkt so angepasst werden, dass der integrale Wandwärmeverlust dem der Druckverlaufsanalyse entsprach. Diese wurde mit dem Programm DISMO (Schöttke 2002) durchgeführt, das für Ottomotoren angepasst wurde.

Bei der Verwendung von 3-Spezies-Modellen (Weller-Eingleichungsmodell, G -Gleichungsmodell) ist zu beachten, dass Zwischenprodukte wie z.B. CO nicht abgebildet werden können, sondern immer vollständig zu CO₂ verbrannt werden. Daher muss man vom Heizwert des Kraftstoffes die Energie, die durch die vollständige Umsetzung zusätzlich frei wird, entsprechend der CO-Konzentration im Abgas abziehen, denn sonst wäre die Wärmefreisetzung im Zylinder zu hoch. Diese Massnahme muss für jeden Betriebspunkt separat durchgeführt werden.

Schon aus früheren Untersuchungen ist bekannt, dass das Niveau der turbulenten kinetischen Energie des k - ϵ -Modells, das durch die Einlassströmung berechnet wird, netzabhängig ist (Gildein et al. 1995). Daher müssen die die turbulente Brenngeschwindigkeit beeinflussenden Parameter A und α (Gleichungen (4.62) und (4.10)) in einem Fall angepasst werden, bleiben dann aber für die anderen Fälle konstant.

5.2.2 Betriebspunkte

Tabelle 5.1 listet die berechneten Betriebspunkte auf. Um ein möglichst homogenes Gemisch im Zylinder zu erreichen, wurde der Ein-

Nr.	p_{mi} [bar]	Drehzahl [min^{-1}]	Kompression [-]	Kraftstoff	λ [-]	ZZP [° v. ZOT]
1	9.8	1500	9.83	PRF 90	1	14
2	10.2	2000	9.83	PRF 90	1	18
3	2.9	2000	10.48	Super	1	27

Tab. 5.1: Betriebspunkte des Einzylinderaggregats.

spritzort im Saugrohr sehr weit vorgelagert, so dass angenommen werden konnte, dass an den Einlassrändern des Berechnungsnetzes Kraftstoff und Luft vollständig gemischt waren. Der für die Punkte 1 und 2 verwendete Kraftstoff PRF 90 besteht aus einer Mischung von 90% iso-Oktan und 10% n-Heptan.

5.2.3 Ladungswechsel

Abbildung 5.7 zeigt das Rechenetz für die Ladungswechselrechnung. Damit die Ventilbewegung im Bereich nahe des oberen Totpunkts das Netz nicht zu sehr verzerrt, muss das Innere den Ventilen angepasst vernetzt werden. Im Bild rechts sind die drei *o-grids* zu sehen, die sich vom Zylinderkopf bis zum Kolben durchziehen. Die Ventilsteuerzeiten kann man in Abbildung 5.8 ablesen. Zu sehen sind die Ventilhubkurven der Einlass- und des Auslassventils. Kurz vor Öffnen des Einlassventils, bei 340° KW, ist Rechenbeginn, nach Schließen desselben kann auf das neue Netz gemappt werden, in unserem Fall bei 680° KW. Die beispielhaft in Abbildung 5.8 gezeigten Druckverläufe für die Druckrandbedingungen gehören zum Teillastfall Nr. 3. Durch die Drosselklappe wird der Druck in den Einlasska-

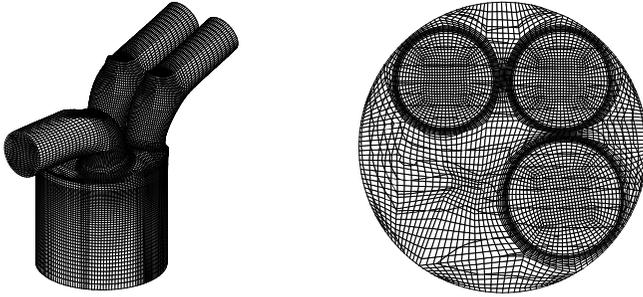


Abb. 5.7: Rechenetz für die Einlassströmung, 460000 Zellen. Rechts ist ein Schnitt durch den Brennraum dargestellt. Die Bohrung beträgt 80 mm.

nälen auf ca. 0,4 bar verringert.

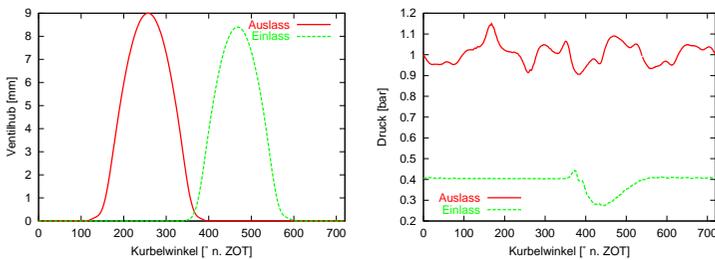


Abb. 5.8: Ventilhubkurven und Druckrandbedingungen für den Teillastfall 3.

Die Ergebnisse der Einlassströmung für den Teillastfall sind in Abbildung 5.9 dargestellt. Die Schnittebene liegt mittig im (in Strö-

mungsrichtung gesehen) rechten Einlasskanal. Man sieht zunächst einmal die Ventilbewegung und den sich bewegenden Kolben. Nach Öffnen des Einlassventils formiert sich eine turbulente Strömung in den Brennraum hinein, an den Ventilen reißt die Strömung ab und bildet Wirbel und Gegenwirbel. Nach einiger Zeit zerfallen die kleineren Wirbel und es setzt sich ein großräumiger Tumble im Uhrzeigersinn durch, der bei Annäherung an den oberen Totpunkt zerfällt. Dieser Zerfall erhöht die turbulente kinetische Energie und ist die Methode der Wahl, um die Energie der Einlassströmung zu konservieren, um damit die Verbrennung zu beschleunigen.

Die über den Zylinder gemittelten globalen Größen sind in Tabelle 5.2 zusammengefasst. Temperatur und Restgasanteil wurden nicht gemessen. Insgesamt werden die Massen gut getroffen, beim mittleren Zylinderdruck sind die Abweichungen kleiner als 5%. Um für die Verbrennungssimulation eine gute Ausgangsbasis zu schaffen, wurde beim Mapping der Druck durch Skalierung der Temperatur dem experimentellen Wert angepasst.

p_{mi} [bar]/Drehzahl [1/min]	9,8/1500		10,2/2000		2,9/2000	
	Sim.	Exp.	Sim.	Exp.	Sim.	Exp.
Druck [bar]	3,63	3,80	3,99	3,81	1,64	1,60
Temperatur [K]	461	-	495	-	560	-
Gesamtmasse [mg]	404	-	397	-	141	-
Masse ohne Restgas [mg]	393	382	380	379	127	128
Restgasanteil [%]	2,6	-	4,4	-	9,8	-

Tab. 5.2: Mittlere Werte nach der Einlassströmung bei 60° v. ZOT im Zylinder.

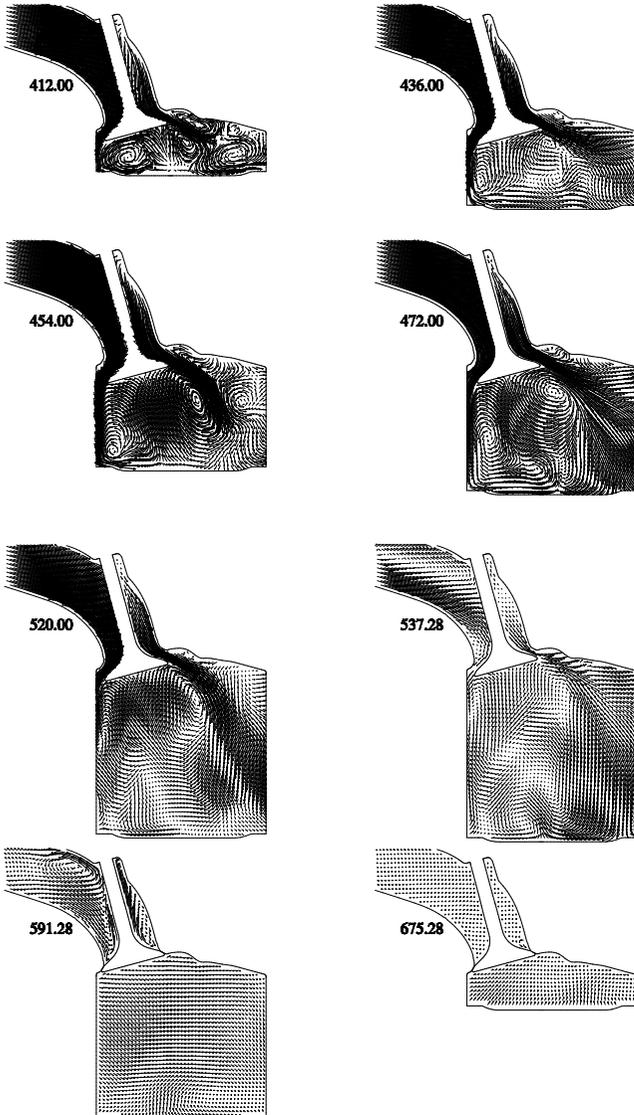


Abb. 5.9: Einlassströmung im Teillastfall 3, Geschwindigkeitsfeld in einer Schnittebene durch den rechten Einlasskanal.

5.2.4 Verbrennung

Während der Verbrennung kann der Druckverlauf eines einzelnen Zyklus' durchaus nennenswert von dem mittleren Zyklus abweichen. Diese Zyklenschwankungen können von der Simulation nicht wiedergegeben werden, da sie von Änderungen der Randbedingungen, z.B. des tatsächlichen Zündzeitpunktes, herrühren. Strenggenommen stimmt nicht einmal der zyklengemittelte Druck mit dem simulierten Ensemblemitteldruck überein. Für kleiner werdende Zyklenschwankungen gehen allerdings beide ineinander über. Es ist letztlich nicht das Ziel der Simulation, alle Druckkurven auf Strichstärke genau nachzurechnen, im Mittelpunkt des Interesses stehen Unabhängigkeit von der Netzfeinheit und Wiedergabe von Tendenzen und Trends bei Änderung der Betriebsbedingungen. In Abbildung 5.10 sind einige Einzelzyklen zusammen mit ihrem Mittelwert für den ersten Betriebspunkt dargestellt.

Abbildung 5.11 zeigt das Rechennetz für die Verbrennung, das nun von der von den Ventilen erzwungenen Netzstruktur befreit ist. Die durchschnittliche Kantenlänge einer Netzzelle beträgt ca. 0,5 mm. Die Zündung erfolgt nahe der Zylinderachse.

Die Abhängigkeit von der Netzfeinheit wurde in StarCD noch einmal untersucht. Dort stand zusätzlich ein Verbrennungsnetz mit 260000 Zellen zur Verfügung. Abbildung 5.12 zeigt die Ergebnisse bei sonst gleichen Parametern. Wie schon bei den einfachen Testfällen zeigt sich auch hier eine relativ große Netzabhängigkeit des ECFM-Modells, während das Weller-Eingleichungsmodell auf dem gröberen Netz schon eine gut auskonvergierte Lösung liefert.

Als nächstes folgte die Einstellung der Parameter A bzw. α . Die Abhängigkeit der Verbrennung des Weller-Eingleichungsmodells da-

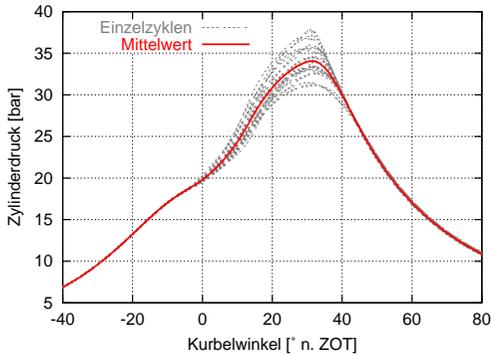


Abb. 5.10: Gemessene Einzelzyklen und gemittelter Druckverlauf für den Fall 9,8 bar p_{mi} , 1500 1/min.

von und vom Zündzeitpunkt ist in Abbildung 5.13 dargestellt. Vor allem beim Zündzeitpunkt fällt auf, dass die Verschiebung von einem Grad Kurbelwinkel schon beträchtliche Veränderungen bewirkt. Zukünftig sollte daher nicht auf ein geeignetes Zündmodell verzichtet werden.¹ Tabelle 5.3 listet die letztendlich verwendeten Parameter auf. Bemerkenswert ist, dass das Weller-Modell und das G -Gleichungsmodell verschiedene Werte für A verwenden, obwohl die gleiche Korrelation für die turbulente Brenngeschwindigkeit verwendet wird. Dies ist auf die Selbstbeschleunigung durch die Turbulenzproduktion zurückzuführen, die nur für das G -Gleichungsmodell beseitigt ist. Wegen des höheren Turbulenzniveaus muss für das Weller-

¹Ein interessanter Ansatz ist z.B. in Tan et al. (2003) beschrieben.

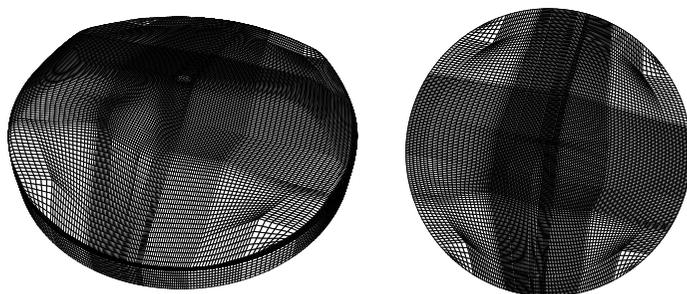


Abb. 5.11: Rechennetz für die Verbrennung, 500000 Zellen. Rechts ein Schnitt unterhalb des Zylinderkopfes. Die Zellkantenlänge in den Außenbereichen beträgt ca. 1 mm, im Zentrum ca. 0,3 mm.

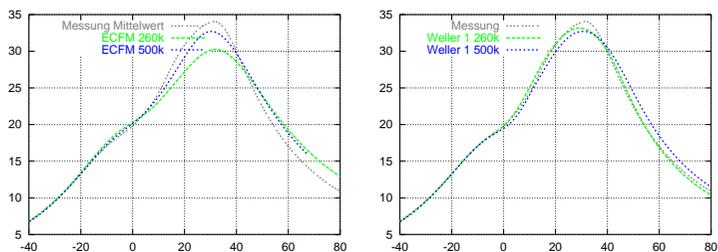


Abb. 5.12: Netzabhängigkeit des EC FM-Modells (links) und des Weller-Eingleichungsmodells auf zwei Motornetzen mit 500000 Zellen bzw. 260000 Zellen für den ersten Betriebspunkt.

Modell der A -Faktor kleiner gewählt werden, um die gleiche Aus-

	A bzw. α	ZZP 1	ZZP 2	ZZP 3
ECFM	1,7	14	18	27
Weller 1	2,65	14	18	25,9
G -Gleichung	3,0	13	18	25,9

Tab. 5.3: Entgültige Parameter für die Motorvalidierung.

breitungsgeschwindigkeit zu erreichen.

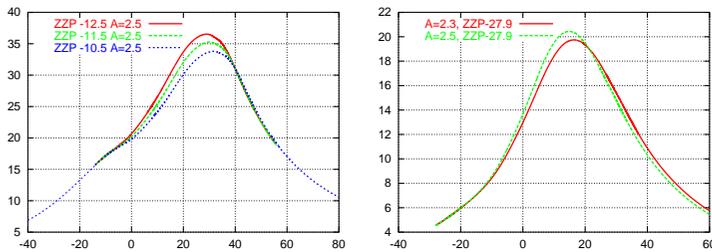


Abb. 5.13: Abhängigkeit des Druckverlaufs vom Zündzeitpunkt am Beispiel von Betriebspunkt 1 (links), Abhängigkeit des Druckverlaufs vom A-Faktor am Beispiel von Betriebspunkt 3, jeweils für das Weller-Eingleichungsmodell.

In Abbildung 5.14 sind die simulierten Druckverläufe zusammen mit dem experimentellen Verlauf dargestellt. Das Eingleichungs-Weller-Modell und das ECFM-Modell wurden mit Lastfall 1 abgeglichen, das G -Gleichungsmodell mit Lastfall 2. Insgesamt ist die Übereinstimmung für alle Modelle zufriedenstellend, sollte doch eine

gewisse Unabhängigkeit vom Verbrennungsparameter gewährleistet sein. Im Detail zeigen sich aber Unterschiede: liegt der Spitzendruck beim G -Gleichungsmodell generell zu hoch, ist beim Weller-Modell und beim ECFM-Modell ein Fall zu hoch und einer zu niedrig, interessanterweise aber bei beiden nicht die gleichen Fälle.

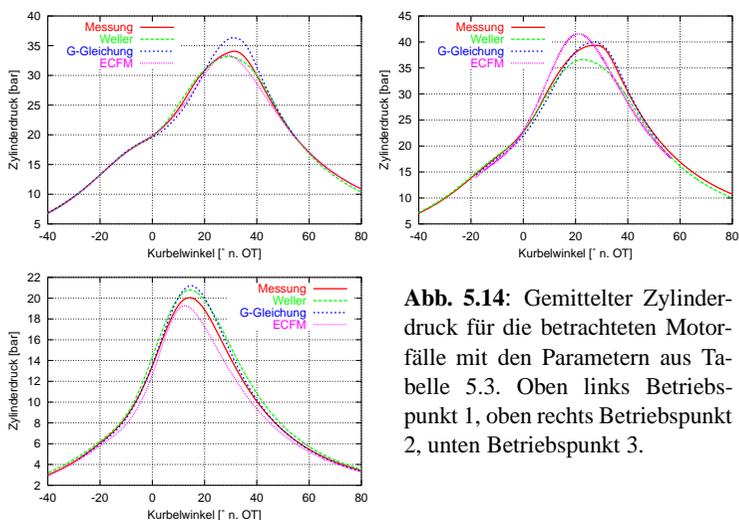


Abb. 5.14: Gemittelter Zylinderdruck für die betrachteten Motorfälle mit den Parametern aus Tabelle 5.3. Oben links Betriebspunkt 1, oben rechts Betriebspunkt 2, unten Betriebspunkt 3.

Ein klareres Bild kann anhand des Brennverlaufs gewonnen werden, der über eine Druckverlaufsanalyse bestimmt wird. Die berechneten Brennverläufe sind in Abbildung 5.15 dargestellt. Die Übereinstimmung für das G -Gleichungsmodell und das Weller-Modell ist anfangs jeweils sehr gut, aber der Ausbrand beim Weller-Modell ist langsamer. Das liegt daran, dass die Turbulenzproduktion durch die

Verbrennung mit breiter werdender Flamme sinkt, und als Folge davon auch die Ausbreitungsgeschwindigkeit. Das ECFM-Modell zeigt schon von Anfang an Abweichungen vom Experiment, was am verwendeten Zündmodell liegt. Doch auch der Ausbrand ist in allen Fällen zu schleppend.

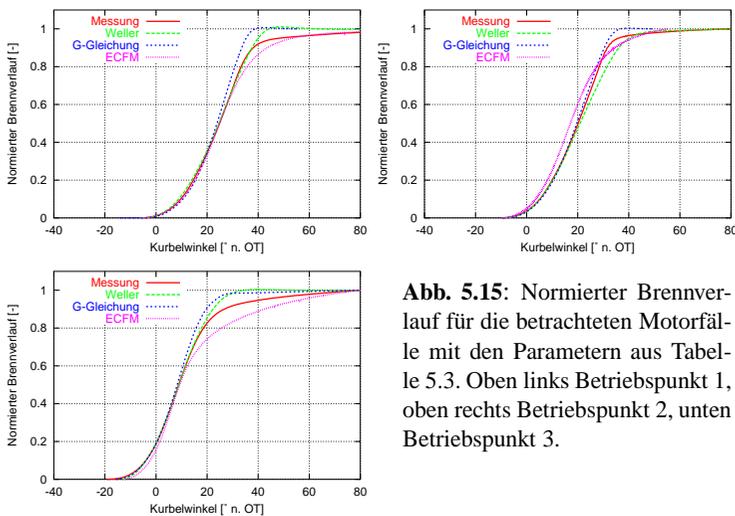


Abb. 5.15: Normierter Brennverlauf für die betrachteten Motorfälle mit den Parametern aus Tabelle 5.3. Oben links Betriebspunkt 1, oben rechts Betriebspunkt 2, unten Betriebspunkt 3.

Der lokale Flammenfortschritt zeigt für alle Modelle recht ähnliche Ergebnisse. In Abbildung 5.16 ist die zeitliche Entwicklung der mittleren Flammenposition, repräsentiert durch einen Reaktionsumsatz von 50%, für den zweiten Fall dargestellt. Die Flamme bleibt recht lange formstabil und wird erst bei Annäherung an die Zylinderwand durch das Strömungsfeld gestört.

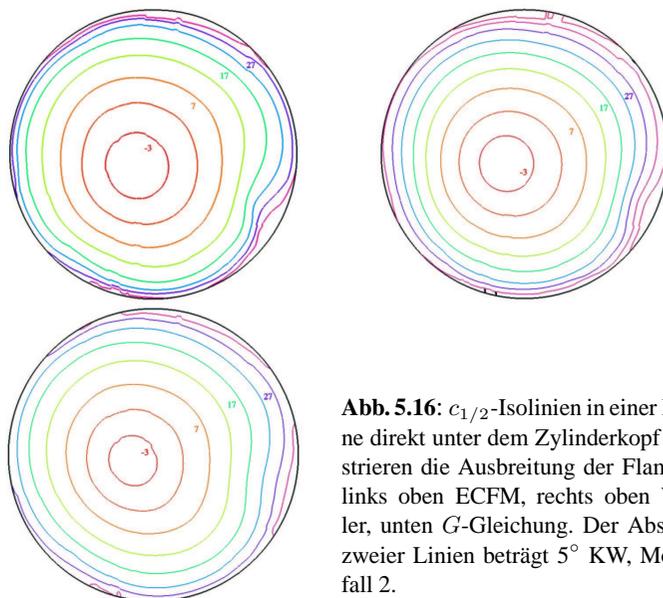


Abb. 5.16: $c_{1/2}$ -Isolinien in einer Ebene direkt unter dem Zylinderkopf illustrieren die Ausbreitung der Flamme: links oben ECFM, rechts oben Weller, unten G -Gleichung. Der Abstand zweier Linien beträgt 5° KW, Motorfall 2.

Ein wesentlicher Unterschied bei den Modellen ist die Flammendicke, die sich entwickelt. Während beim G -Gleichungsmodell die Flammendicke über die Varianzgleichung bestimmt wird, wächst beim Eingleichungs-Weller-Modell die Flammendicke durch den Diffusionsterm. In Abbildung 5.17 ist die Fortschrittsvariable im Bereich $0,01 < c < 0,99$ dargestellt. Die mehr als doppelt so breite Flamme reduziert zwar die Netzabhängigkeit des Modells, ist physikalisch aber fragwürdig. Auch beim ECFM Modell stellt sich eine recht brei-

te Flamme in der Größenordnung $3\text{--}10 l_t$ ein.

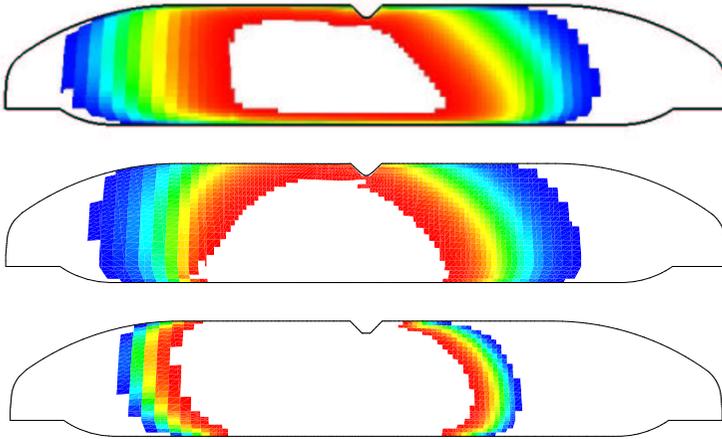


Abb. 5.17: Flammendicken im zweiten Motorfall 7° n. OT für ECFM (oben), Weller (mitte) und G -Gleichung (unten). Dargestellt ist die Fortschrittsvariable im Bereich $0,01 < c < 0,99$.

Die Antwort auf die Frage, wie dick denn eine turbulente Flamme in der Realität ist, ist bis heute leider ungeklärt (Poinsot 2002). Experimentelle Ergebnisse sind aufgrund der Zyklenschwankungen wenig aussagekräftig, DNS Berechnungen zeigen auch Flammendicken sehr viel größer als die integrale Längenskala, verursacht z.B. durch Instabilitäten. Letztendlich wird in einer RANS-Simulation die Flam-

mendicke jedoch nicht von der Physik bestimmt, sondern von dem verwendeten Modell, z.B. durch die turbulente Diffusion in der Gleichung der Progressvariablen oder die G -Varianzgleichung. Solange die Physik diesbezüglich ungeklärt ist, wird die Flammendicke als Modelleigenschaft betrachtet, die von manchen Modellen ganz vernachlässigt wird (z.B. Tan et al. 2003 für den Vormischanteil einer Schichtladeverbrennung) oder die auch unbegrenzt wachsen kann, da im Motor kein vollentwickelter Zustand erreicht würde (Lipatnikov et al. 2003). Abschliessend kann man feststellen, dass das G -Gleichungsmodell dünne Flammen ermöglicht, während das ECFM-Modell Schwierigkeiten damit hat und das Weller-Modell durch einen numerischen Trick, nämlich unter Zuhilfenahme der Diffusion, stabilisiert wird. Problematisch wird dies bei der Schichtladeverbrennung.

Kapitel 6

Zusammenfassung und Ausblick

Zielsetzung der Dissertation war die Erarbeitung eines konsistenten Modellansatzes für die ottomotorische vorgemischte Verbrennung und deren Validierung an einem Einzylinder-Forschungsmotor. Als Vergleichsbasis dienten die bisher eingesetzten ECFM- und Weller-Modelle. Das hier betrachtete G -Gleichungsmodell beschreibt zunächst die Ausbreitung einer unendlich dünnen Flamme. Durch Einführung zusätzlicher Eigenschaften wie z.B. der Flammendicke kann die Gültigkeit des Modells in den 3D-Raum erweitert werden. Es wurde gezeigt, dass der Transport dieser Eigenschaften konsistent zu der Ausbreitung der Flamme selbst erfolgen muss. Eine große Schwierigkeit bei der Modellierung stellt die Interaktion von Verbrennung und Tur-

bulenz dar. Die Rückkopplung über die turbulente Brenngeschwindigkeit kann zu einer numerischen Selbstbeschleunigung der Flamme führen, die unbedingt vermieden werden muss. Es wurde gezeigt, dass dies eine zweite Turbulenzgleichung für das unverbrannte Gemisch erfüllen kann. Alternativ dazu wurde eine Methodik zur genaueren Berechnung der Turbulenzproduktion in der Flamme eingeführt. Durch die Rekonstruktion beider Phasen—verbrannt und unverbrannt—können die Beiträge mit Hilfe der Sprungbedingungen an der Flammenfront separat berechnet werden, so dass der künstliche Produktionsterm aus der Überlagerung beider Phasen beseitigt wird.

Die Validierung hat gezeigt, dass sowohl das Weller-Modell als auch das G -Gleichungsmodell eine geringere Abhängigkeit von der Netzfeinheit zeigen als das ECFM-Modell. Dies liegt, im Gegensatz zur impliziten Ausbreitungsgeschwindigkeit beim ECFM-Modell, an der expliziten Vorgabe der Ausbreitungsgeschwindigkeit beider Modelle. Um eine möglichst hohe Netzqualität zu gewährleisten und die daraus entstehenden numerischen Fehler zu minimieren, ist der Einsatz spezieller „Verbrennungsnetze“ erforderlich, auf die nach Berechnung der Einlassströmung gewechselt wird. Diese sind im Bereich der Zündung verfeinert und weisen in einem größtmöglichen Teil des Brennraums eine kartesische Gitterstruktur auf.

Um die Abhängigkeit von den Modellkonstanten, d.h. der Konstanten für die Ausbreitungsgeschwindigkeit, gering zu halten, darf sich die turbulente kinetische Energie nicht durch unphysikalische Effekte erhöhen. Die Auswirkungen kann man durch den Vergleich des Weller-Modells mit dem G -Gleichungsmodell direkt zeigen: Obwohl beide Modelle die gleiche Korrelation für die turbulente Brenngeschwindigkeit verwenden, muss der tatsächliche Wert beim Weller-Modell verringert werden, da das Turbulenzniveau und damit die Aus-

breitungsgeschwindigkeit in der Flamme künstlich erhöht werden. In der späteren Verbrennungsphase verschwindet der Effekt allmählich, wenn sich die Flamme genügend aufgeweitet hat. Der Mechanismus des Flammendickenwachstums über einen Diffusionsterm im Weller-Modell ist allerdings höchst problematisch. Zum einen wächst die Flammendicke dadurch unbegrenzt, also gibt es z.B. auch keine stationären Lösungen. Zum anderen gibt es bei Schichtladeverbrennungen Rückreaktionen, d.h. aus dem Verbrennungsprodukt entsteht unverbrannter Kraftstoff.

Insgesamt ist das G -Gleichungsmodell beiden alternativen Modellen vorzuziehen, wobei es noch Verbesserungen bedarf, deren Realisierung zukünftigen Arbeiten vorbehalten bleibt. Als erster Punkt wäre die Modellierung der Zündphase zu erwähnen, die in keinem Modell zufriedenstellend gelöst ist. Im Hinblick auf die Modellierung einer zweiphasigen Verbrennung hat diese Arbeit den Grundstein gelegt, obgleich manche Fragen offen bleiben mussten, deren Lösungen im Rahmen einer weiteren Dissertation erarbeitet werden. Als großer Nachteil hat sich die benötigte Reinitialisierung der Abstandsfunktion erwiesen, weitere Anstrengungen sollten auf die Erarbeitung einer reinitialisierungsfreien G -Gleichung, möglicherweise mit Hilfe von *extension velocities*, zielen.

Literaturverzeichnis

- [1] Adalsteinsson D., Sethian J. A.: The Fast Construction of Extension Velocities in Level Set Methods, *J.Comput.Phys.* 148:2–22, 1999.
- [2] Amsden A. A., O'Rourke P. J., Butler T. D.: *Kiva-II: A Computer Program for Chemically Reactive Flows with Sprays*, Los Alamos National Laboratory, Los Alamos NM, LA-11560-MS, 1989.
- [3] Amsden A. A.: *Kiva-3: A KIVA Program with Block-Structured Mesh for Complex Geometries*, Los Alamos National Laboratory, Los Alamos NM, LA-12503-MS, 1993.
- [4] Amsden A. A.: *Kiva-3V: A Block-Structured KIVA Program for Engines with Vertical or Canted Valves*, Los Alamos National Laboratory, Los Alamos NM, LA-13313-MS, 1997.
- [5] Angelberger C., Servera G., Benkenida A., Le Coz J.-F.: *Delivery of the final version of the ECFM combustion model*, G-Level report, G3RD-CT-1999-00010, 2002.

- [6] Borghi R.: On the structure and morphology of turbulent pre-mixed flames. In *Recent Advances in the Aerospace Sciences*, (C. Casci, Ed.), Plenum Publishing Corporation, New York, 117–138, 1985.
- [7] Borghi R.: Turbulent Combustion Modelling, *Prog. Energy Combust. Sci.*, 14:245–292, 1988.
- [8] Bray K. N. C., Champion M., Libby P. A.: Pre-Mixed Flames in Stagnating Turbulence. Part V—Evaluation of Models for the Chemical Source Term, *Comb. and Flame*, 127:2023–2040, 2001.
- [9] Chen S., Merriman B., Osher S., Smereka P.: A Simple Level Set Method for Solving Stefan Problems, *J.Comput.Phys.*, 135:8–29, 1997.
- [10] Clavin P.: Dynamic Behavior of Premixed Flame Fronts in Laminar and Turbulent Flows, *Prog. Energy Combust. Sci.* 11:1–59, 1985.
- [11] Damköhler G.: Der Einfluss der Turbulenz auf die Flammengeschwindigkeit in Gasmischen, *Z. f. Elektroch.* 46:601–652, 1940.
- [12] Duclos J. M., Veynante D., Poinso T.: A comparison of Flamelet Models for Premixed Turbulent Combustion, *Comb. and Flame*, 95:101–117, 1993.
- [13] Gildein H., Riegler U. G., Rumez W.: *Simulation der instationären 3D-Strömung am M112 Dreiventil Triebwerk*, Daimler Benz – Technischer Bericht, F1M/ST 95-0037, 1995.

- [14] Gouldin F. C.: An Application of Fractals to Modelling Premixed Turbulent Flames, *Comb. and Flame*, 68:249–266, 1987.
- [15] Gülder Ö. L.: Correlations of Laminar Combustion Data for Alternative S.I. Engine Fuels, *SAE Paper 841000*, 1984.
- [16] Gülder Ö. L.: Turbulent Premixed Flame Propagation Models for Different Combustion Regimes, *Twenty-Third Symposium (International) on Combustion*, The Combustion Institute, 1990.
- [17] Heel B.: *Dreidimensionale Simulation der Strömung und Verbrennung im Zylinder eines Otto-Forschungsmotors*, Dissertation, Universität Karlsruhe, 1997.
- [18] Herweg R.: *Die Entflammung brennbarer, turbulenter Gemische durch elektrische Zündanlagen—Bildung von Flammkernen*, Dissertation, Universität Stuttgart, 1992.
- [19] Heywood J. B.: *Internal Combustion Engine Fundamentals*, McGraw-Hill, New York, 1988.
- [20] Huang, Y., Sung, C. J., Eng, J. A.: Laminar flame speeds of primary reference fuels and reformer gas mixtures, *Comb. and Flame*, 139:239–251, 2004.
- [21] Johansson B.: *On Cycle to Cycle Variations in Spark Ignition Engines*, PhD Thesis, Lund Institute of Technology, 1995.
- [22] Kaube O.: *3D-Simulation der Verbrennung im direkteinspritzenden Ottomotor bei Schichtladebetrieb*, Diplomarbeit, Universität Stuttgart, 1999.

- [23] Kolmogoroff A., Petrovsky I., Piscounoff N.: *Study of the Diffusion Equation with Growth of the Quantity of matter and its Application to a Biology Problem*, Bull. Univ. Moscou, Sér. Int., A 1, 1937. Translated in: P. Pelcé, *Dynamics of curved fronts*, Academic Press, New York, 1988.
- [24] Krüger C., Steiner R., Kraus E., Otto F.: *Demands on CFD models of mixture preparation and combustion in IC engines for industrial purposes*, Fifth World Congress On Computational Mechanics, Wien, 2002.
- [25] Landau L. D., Lifschitz E. M.: *Lehrbuch der Theoretischen Physik Band 6, Hydrodynamik*, Akademie Verlag, Berlin, 1991.
- [26] Lipatnikov A. N., Chomiak J.: *Premixed Turbulent Flame Theory and Simulations of Combustion in SI Engines: Connections, Discrepancies, and Practical Solutions*, 13th International Multidimensional Engine Modeling User's Group Meeting, Detroit, 2003.
- [27] Markstein G. H.: *Nonsteady flame propagation*, Pergamon Press, Oxford, 1964.
- [28] Metghalchi, M., Keck, J. C.: Burning Velocities of Mixtures of Air with Methanol, Iso-octane, and Indolene at High Pressure and Temperature, *Comb. and Flame*, 48:191–210, 1982.
- [29] Merker G. P., Schwarz C., Stiesch G., Otto F.: *Verbrennungsmotoren*, 2. Auflage, Teubner, Stuttgart, 2004.

- [30] Pasch E.: *The level set method for the mean curvature flow on (\mathbb{R}, g)* , SFB 382, Report Nr. 63, 1997.
- [31] Peng D., Merriman B., Osher S., Zhao H., Kang M.: A PDE-Based Fast Local Level Set Method, *J.Comput.Phys.* 155:410–438, 1999.
- [32] Peters N.: Laminar flamelet concepts in turbulent combustion, *Twenty-first Symposium (International) on Combustion*, The Combustion Institute, 1986.
- [33] Peters N., Williams F. A.: The asymptotic structure of stoichiometric methane-air flames, *Comb. and Flame*, 68:185-207, 1987.
- [34] Peters N.: *Turbulent Combustion*, Cambridge University Press, 2000.
- [35] Poinso T., Veynante D.: *Theoretical and Numerical Combustion*, Edwards, 2001.
- [36] Poinso T.: Private Mitteilung, 2002.
- [37] Pope S. B.: PDF methods for turbulent reactive flows, *Prog. Energ. Combust. Sci.* 11:119–192, 1985.
- [38] Pope S. B.: *Turbulent flows*, Cambridge University Press, 2000.
- [39] Press W. H., Teukolsky S. A., Vetterling W. T., Flannery B. P.: *Numerical Recipes in Fortran 77: The Art of Scientific Computing*, 2nd ed., Cambridge University Press, 1992.

- [40] Reinecke M., Hillebrandt W., Niemeyer J. C., Klein R., Gröbl A.: A new model for deflagration fronts in reactive fluids, *Astronomy and Astrophysics*, 347:724–733, 1999.
- [41] Reinecke M.: *Modeling and simulation of turbulent combustion in Type Ia supernovae*, Dissertation, Technische Universität München, 2001.
- [42] Reynolds O.: On the dynamical theory of incompressible viscous fluids and the determination of the criterion, *Philosophical Transactions of the Royal Society of London, Series A*, 186:123, 1895.
- [43] Rotta J. C.: *Turbulente Strömungen*, B. G. Teubner, Stuttgart, 1972.
- [44] Russo G., Smereka P.: A Remark on Computing Distance Functions, *J.Comput.Phys.* 163:51–67, 2000.
- [45] Schöttke G.: *Programm zur Druckverlaufsanalyse für Dieselmotoren*, DaimlerChrysler-Sachnummer 3960008560-F03, 2002.
- [46] Sethian J. A.: *Level Set Methods*, Cambridge University Press, 1996.
- [47] Sherratt J. A.: *On the transition from initial data to travelling waves in the Fisher-KPP equation*, Dynamics and Stability of Systems, Vol. 13, No. 2, 1998.
- [48] Smiljanovski V., Moser V., Klein R.: A Capturing/Tracking Hybrid Scheme for Deflagration Discontinuities, *Comb. Theory and Modeling*, 1:183–215, 1997.

- [49] Spalding D. B.: *Mixing and chemical reaction in steady confined turbulent flames*, 13th Symp. (Int.) on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh, 649–657, 1971.
- [50] Sussman M., Smereka P., Osher S. : A Level Set Approach for Computing Solutions to Incompressible Two-Phase Flow, *J.Comput.Phys.* 114:146–159, 1994.
- [51] Tan Z., Reitz R. D.: *Development of G-Equation Combustion Model for Direct Injection SI Engine Simulations*, 13th International Multidimensional Engine Modeling User’s Group Meeting, Detroit, 2003.
- [52] Taylor G. I.: Statistical theory of turbulence, *Proceedings of the Royal Society of London, Series A*, 151:421, 1935.
- [53] Weller H. G.: *The Development of a New Flame Area Combustion Model Using Conditional Averaging*, Thermo-Fluids Section Report TF/9307, Imperial College of Science Technology and Medicine, London, 1993.
- [54] Weller H. G., Uslu S., Gosman A. D., Maly R. R., Herweg R., Heel B.: Prediction of Combustion in Homogeneous-Charge Spark-Ignition Engines, in *International Symposium COMO-DIA 94*, The Japan Society of Mechanical Engineers, 1994.
- [55] Weller H. G., Tabor G., Gosman A. D.: Application of a Flame-Wrinkling LES Combustion Model to a Turbulent Mixing Layer, *Twenty-seventh Symposium (International) on Combustion*, The Combustion Institute, 1998.

- [56] Weller H. G.: *Derivation and Behaviour of the Simplified Weller Two-Equation Combustion Model*, Department of Mechanical Engineering, Imperial College of Science Technology and Medicine, London, 1999.
- [57] Williams F. A.: in *The Mathematics of Combustion* (J.Buckmaster, Ed.) SIAM, Philadelphia, 1985.
- [58] Williams F. A.: *Combustion Theory*, The Benjamin/ Cummings Publishing Company, 1985.

Danksagung

Ich bedanke mich herzlich bei Herrn Dr. Frank Otto für seine intensive Betreuung, sein Interesse und seine ständige Diskussionsbereitschaft bei der Durchführung der Arbeit. Ebenso gebührt mein Dank Herrn Prof. Dr. Hanns Ruder für seine Unterstützung und die Übernahme der Hauptberichterstattung, sowie Herrn Prof. Dr.-Ing. Dr. h. c. Dr.-Ing. E. h. Norbert Peters und Herrn Prof. Dr. Wolfgang Hillebrandt für die bereitwillige Übernahme der Gutachten.

Ferner sei allen Mitarbeitern und ehemaligen Mitarbeitern des Teams Verbrennungsanalyse für die gute Arbeitsatmosphäre und für viele Anregungen und Tipps gedankt.

Lebenslauf

Eberhard Kraus

geboren am 25.10.1971 in Göppingen

Schule und Studium

1978-1982	Grundschule in Eislingen/Fils
1982-1991	Erich-Kästner-Gymnasium Eislingen, Abschluss: Abitur
1991-1992	Zivildienst beim Deutschen Roten Kreuz in Göppingen
10/1992-2/1999	Studium an der Eberhard-Karls-Universität zu Tübingen, Abschluss: Diplom-Physiker

Berufliche Tätigkeiten

1996	Wissenschaftliche Hilfskraft am Physikalischen Institut
1997-1998	Wissenschaftliche Hilfskraft am Institut für Angewandte Physik
1998-1999	Wissenschaftliche Hilfskraft am Institut für Astronomie und Astrophysik
1999-2001	Doktorand bei der DaimlerChrysler AG im Bereich Verbrennungsmotorische Antriebe
seit 2002	Wissenschaftlicher Mitarbeiter bei der DaimlerChrysler AG

Akademische Lehrer

M. Baumann, A. Buchmann, K. Bräuer, H. Fischer, D. Großer, R. Hübener, H. Kaul, H. Mütter, H. Pfister, H. Ruder, W. Schweizer, R. Staubert, G. Staudt, G. Wagner