

Simulation einer turbulenten reaktiven Kanalströmung mit Monte-Carlo-PDF-Methoden

Zur Erlangung des akademischen Grades
eines

Doktors der Ingenieurwissenschaften

von der Fakultät für Maschinenbau der
Universität Karlsruhe

genehmigte

Dissertation

von

Dipl.-Ing. Tillman Katzenmeier
aus Hamburg

Tag der mündlichen Prüfung: 14.2.2005

Hauptreferent: Prof. Dr. Ulrich Maas
Mitreferent: Prof. Dr. Dr.h.c. Jürgen Warnatz

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung	7
2. Theoretische Grundlagen	10
2.1. Strömungsmechanische Grundlagen	10
2.2. Mittelung der Transportgleichungen	13
2.3. Turbulenzmodellierung	16
2.3.1. Zweigleichungsmodell	17
2.3.2. Reynolds-Stress-Modell	22
2.3.3. Kanalströmung	30
2.4. Chemische Grundlagen	37
2.4.1. Globalreaktionen	39
2.4.2. Elementarreaktionen	40
2.4.3. Reduzierte Mechanismen	42
2.4.4. Heterogen katalysierte Reaktionen	43
2.5. Grundlagen der Monte-Carlo-PDF-Methode	44
2.5.1. Monte-Carlo-PDF	46
2.5.2. Herleitung der PDF-Transportgleichung	49
2.5.3. Modellierung der ungeschlossenen Terme	54

3. Implementierung	61
3.1. Beschreibung des zu simulierenden Systems	61
3.2. Lösungsalgorithmus	63
3.2.1. Erster Teilschritt	64
3.2.2. Zweiter Teilschritt	67
3.2.3. Dritter Teilschritt	69
3.2.4. Randbedingungen	71
3.2.4.1. Randbedingungen in der Kanalmitte	71
3.2.4.2. Randbedingungen an der Wand	72
3.2.5. Bestimmung des Zeitschritts	80
3.2.6. Bestimmung der Mittelwerte	82
3.2.7. Steuerung der Partikelanzahl	87
4. Ergebnisse	89
4.1. Nichtreaktive Strömung	89
4.1.1. Randbedingungen	89
4.1.2. Simulation mit einem Turbulenzmodell von Launder und Shima	90
4.1.3. Simulation mit den unveränderten Koeffizienten des MCL-Modells	95
4.1.4. Simulation mit modifizierten Koeffizienten im MCL-Modell	99
4.2. Reaktive Strömung	103
4.2.1. Randbedingungen	103
4.2.2. Heterogen katalysierte reaktive Strömung ohne Gasphasenreaktionen	105
4.2.2.1. $C_\phi = 2$	105
4.2.2.2. $C_\phi = 2(1 + 81,6 \cdot A \cdot e^{-10A})$	109

4.2.2.3. $C_\phi = 2(1 + 136 \cdot A \cdot e^{-10A})$	113
4.2.3. Heterogen katalysierte reaktive Strömung mit Gasphasen- reaktionen	117
4.2.3.1. $C_\phi = 2$	117
4.2.3.2. $C_\phi = 2(1 + 81,6 \cdot A \cdot e^{-10A})$	120
4.2.3.3. $C_\phi = 2(1 + 136 \cdot A \cdot e^{-10A})$	124
5. Zusammenfassung	129
A. Anzahl möglicher Reaktionen mit neun Spezies	140
B. Koeffizientenvergleich	148
C. Randbedingung für $\frac{\epsilon}{k}$ an der Wand	159
D. Tabellierung der Reaktionsgeschwindigkeiten	161
D.1. Bestimmung der Koeffizienten a und d	161
D.2. Behandlung von Randzellen des Tabellierungsgitters	164

1. Einleitung

Bei vielen chemischen Prozessen spielen Strömungen eine Rolle, die von Wänden begrenzt werden. Dabei werden die Strömungen an den Wänden durch Vorgänge wie Wärmeübertragung, Stoffübertragung und katalytische Aktivität beeinflusst. Ein Beispiel für solche Prozesse ist die Verbrennung in einer Brennkammer zur Freisetzung von Wärme oder mechanischer Arbeit [1]. Die Produktion flüssiger oder gasförmiger Substanzen in Rohrreaktoren ist ein anderes Beispiel [2]. Die Wände des Rohrreaktors können inert oder katalytisch aktiv sein. Die große volumenspezifische Oberfläche eines Rohres wird dabei zur Temperaturregelung ausgenutzt und die enge Verweilzeitverteilung in der Rohrströmung ist vorteilhaft für eine hohe Ausbeute an Zwischenprodukten bei chemischen Systemen mit Folgereaktionen, durch die bei Fortsetzung der Reaktion die Zwischenprodukte wieder abgebaut würden. Auch in Ätz- und Dotierungsreaktoren ablaufende Vorgänge, wie sie bei der Herstellung von elektronischen Halbleiterbausteinen und bei der Abscheidung verschleißresistenter Schichten auf Werkzeugoberflächen auftreten, gehören zu diesen Prozessen.

Bei diesen Vorgängen treten Wechselwirkungen zwischen chemischen Reaktionen, Wärme- und Stofftransport und der Strömung auf. In der Strömung auftretende Turbulenz beschleunigt Transportprozesse, wodurch wiederum die ablaufenden chemischen Reaktionen beeinflusst werden.

Die Simulation solcher Reaktionssysteme ist ein wichtiges Werkzeug sowohl für das Design von Reaktoren als auch für das Verständnis der ablaufenden Vorgänge, wobei im Wechsel Experimente Ansätze für mathematische Modelle liefern, die in einer Simulation eingesetzt werden, deren Ergebnisse wiederum durch Versuche validiert werden.

1. Einleitung

Ein Weg zur numerischen Simulation turbulenter Strömungen führt ausgehend von den Navier-Stokes-Gleichungen zu Transportgleichungen für die Mittelwerte der Geschwindigkeiten, der chemischen Spezies und der Enthalpie in der Strömung sowie deren Kovarianzen. Zur Schließung des Gleichungssystems muss außerdem eine turbulente Zeitskala mit modelliert werden. Problematisch ist dabei, dass wegen der exponentiellen Temperaturabhängigkeit der chemischen Quellterme die Temperaturverteilung, und nicht nur ihr Mittelwert erheblichen Einfluss auf die chemischen Reaktionen hat. Im Modell anzunehmen, dass die Reaktionen bei einer mittleren Temperatur ablaufend, ist deshalb nicht zulässig. Deshalb müssen die chemischen Quellterme bei diesem Ansatz modelliert werden.

Eine Möglichkeit bietet die empirische Konstruktion einer Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (PDF), deren Variable die Massenbrüche der chemischen Spezies, die Temperatur und die Dichte sind [1]. Für die Bestimmung der mittleren chemischen Quellterme wird diese Dichtefunktion integriert. Für die Beschreibung dieser PDF werden oft Produktansätze gewählt, wobei die multidimensionale PDF aller skalaren Größen als Produkt von eindimensionalen Dichtefunktionen einzelner Skalare gebildet wird. Korrelationen zwischen den chemischen Spezies können damit nur unvollständig wiedergegeben werden und müssen wiederum modelliert werden. Außerdem ist es erforderlich, der PDF eine Form vorzugeben, wie z.B. die einer Gauß'schen Glockenkurve oder einer Beta-Funktion [51]. Mit der Wahl der Klasse der Funktion ist auch festgelegt, welche Formen die Verteilung und die Dichtefunktion beim Fortschreiten der Reaktionen annehmen können.

Dies lässt sich vermeiden, wenn die Dichtefunktion der Verteilung durch ein Ensemble stochastischer Partikel dargestellt wird. Für diese PDF wird eine Transportgleichung gelöst. Da die Mittelwertbildung hier durch eine Monte-Carlo-Integration [4] ausgeführt wird, wird eine solche Dichtefunktion als Monte-Carlo-PDF bezeichnet. Solche Dichtefunktionen sind in ihrer Dimensionalität und Form nicht eingeschränkt.

Wie bei den anderen beschriebenen Verfahren ist es auch mit dem letztgenannten möglich, die Geschwindigkeiten und die turbulente Zeitskala weiterhin durch Lösung der auf einem Gitter diskretisierten Transportgleichungen ihrer Mittelwerte und Kovarianzen zu bestimmen [5].

Ebenso ist es aber auch möglich, die Geschwindigkeiten und die turbulente Zeit-

skala als zusätzliche Variablen in die Monte-Carlo-PDF mit aufzunehmen [6] und somit Strömung und Reaktionen ausschließlich mit stochastischen Prozessen zu behandeln. In der vorliegenden Arbeit wird dieser Ansatz gewählt.

Die Gliederung der Arbeit ist wie folgt: In Kapitel 2 werden die theoretischen Grundlagen zur Behandlung von kalten und reaktiven Strömungen und der Turbulenzmodellierung angeführt. Anschließend ist in Kapitel 3 die Implementierung der Modelle und der dafür verwendete Lösungsalgorithmus beschrieben. Dann wird in Kapitel 4 zunächst eine nichtreaktive turbulente Strömung in einem Kanal bei verschiedenen Reynoldszahlen simuliert. Danach werden die Ergebnisse einer Simulation einer reaktiven Strömung dargestellt. Es handelt sich dabei um eine heterogen durch Platin katalysierte Wasserstoffoxidation in einer turbulenten Kanalströmung mit einem Gemisch aus Wasserstoff und Luft. Abschließend werden in Kapitel 5 die Ergebnisse zusammengefasst und ein Ausblick auf eine mögliche Weiterentwicklung gegeben.

2. Theoretische Grundlagen

2.1. Strömungsmechanische Grundlagen

Um reaktive Strömungen zu beschreiben, werden Felder für die Geschwindigkeit \vec{u} , die Dichte ρ , die Massenbrüche der chemischen Spezies Y_α , $\alpha = 1..N$, mit N als Anzahl der Spezies und der Temperatur T verwendet. Diese Felder sind im allgemeinen orts- und zeitabhängig. Oft wird an Stelle der Temperatur die spezifische Enthalpie h benutzt [1,3], da sie wie die Massenbrüche als Erhaltungsgröße behandelt werden kann, was die Modellierung des Wärmetransports vereinfacht. Der Massenbruch Y_α einer Spezies α ist definiert als der Quotient der Masse m_α der Spezies α und der Gesamtmasse m aller Spezies: $Y_\alpha = m_\alpha/m$. Um die systematische Darstellung zu erleichtern, werden die Enthalpie und die Massenbrüche in einem Vektor $\vec{\phi}$ als skalare Größen zusammengefasst.

Die Bilanzgleichungen, die für die Bestimmung der Felder gelöst werden müssen, bestehen aus Termen für Akkumulation, Transport und außerdem einem Quell- bzw Senkenterm.

Im Einzelnen handelt es sich um die Gleichungen

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = 0 \quad , \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_j} - \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} - \rho g_i + \frac{\partial p}{\partial x_i} = 0 \quad \text{und} \quad (2.2)$$

$$\frac{\partial \rho \phi_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j \phi_\alpha}{\partial x_j} + \frac{\partial j_j^\alpha}{\partial x_j} - \rho S_\alpha = 0. \quad (2.3)$$

Die Indizes i und j beziehen sich dabei auf die drei Raumrichtungen; der Index α

2.1. Strömungsmechanische Grundlagen

bezeichnet eine skalare Größe. Der Term $\frac{\partial p}{\partial x_i}$ ist der Druckgradient in i -Richtung. Es wird zur Verkürzung die Einsteinsche Summenkonvention angewandt.

Gleichung 2.1 heißt Kontinuitätsgleichung. Sie beinhaltet, dass die Gesamtmasse des betrachteten Systems konstant bleibt. Dementsprechend ist der Quell-/Senkenterm gleich 0.

Gleichung 2.2 beschreibt die Impulserhaltung. Bei Gasen wird der Term ρg_i , der die Wirkung der von außen angreifenden Kräfte, wie z.B. der Erdanziehung, darstellt, wegen des geringen Einflusses im Vergleich zu den anderen Termen meistens vernachlässigt. Der Spannungstensor τ_{ij} hängt bei Newtonschen Fluiden ab von Geschwindigkeitsgradienten und der dynamischen Viskosität μ nach

$$\tau_{ij} = -\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \frac{2}{3} \mu \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \quad . \quad (2.4)$$

Dabei ist δ_{ij} das Kronecker-Delta. Da Gleichung 2.2 für jede Raumrichtung formuliert wird, handelt es sich hierbei um ein System aus drei Gleichungen. Es wird als Navier-Stokes-Gleichungssystem bezeichnet [7, 8].

In Gleichung 2.3 wird der Transport der chemischen Spezies beschrieben. Der Quellterm ρS_α gibt dabei die Änderung der Spezies aufgrund chemischer Reaktionen wieder. Beim diffusionsbedingten Stofftransport gilt für den Diffusionsstrom j_j^α nach dem Fick'schen Gesetz unter Vernachlässigung der wärmebedingten Diffusion [1, 2]

$$j_j^\alpha = -\rho D \frac{\partial \phi_\alpha}{\partial x_j} \quad . \quad (2.5)$$

Vereinfachend wird angenommen, dass der Diffusionskoeffizient D für alle Spezies gleich ist. Diese Annahme ist in turbulenter Strömung näherungsweise erfüllt, da dann der turbulente Transport, der vom Zustand der Strömung und nicht von den Eigenschaften des Fluids abhängt, um ein Vielfaches größer ist als die Diffusion in einer laminaren Strömung, in der für jede Spezies im Gemisch ein eigener Diffusionskoeffizient für jedes Paar Spezies angenommen werden muss, woraus dann ein Diffusionskoeffizient für die betreffende Spezies im Gemisch gebildet werden kann [1].

Diese Gleichungen sind generell für alle Strömungen kompressibler Newtonscher Fluide gültig [7, 8]; sowohl laminare als auch turbulente Strömungen können damit berechnet werden. Die analytische Lösung dieser Gleichungen ist aber nur für

2. Theoretische Grundlagen

sehr einfache Fälle möglich; im Allgemeinen muss auf numerische Lösungsverfahren zurückgegriffen werden. Eine wesentliche Eigenschaft der Turbulenz besteht darin, dass sich zufällige Störungen der Strömung aufschaukeln. Vergleicht man die Bahn zweier Fluidelemente, die sich mit der Strömung mitbewegen, und die sich zum Zeitpunkt $t = t_0$ nahe beieinander befanden, so lässt sich feststellen, dass ihre Bahnlinien im Falle einer laminaren Strömung annähernd parallel verlaufen und die Partikel sich zu einem späteren Zeitpunkt $t = t_1$ immer noch relativ nah beieinander befinden, während im turbulenten Fall die Bahnlinien aufgrund von zufälligen Störungen sehr unterschiedlich sein können und sich auch kreuzen können, wie dies zur Veranschaulichung in Abbildung 2.1 dargestellt ist. Die zunächst benachbarten Partikel (blau und schwarz) sind bei der laminaren Strömung auch am Ende der aufgetragenen Zeit noch benachbart, im Fall der turbulenten Strömung hingegen nicht.

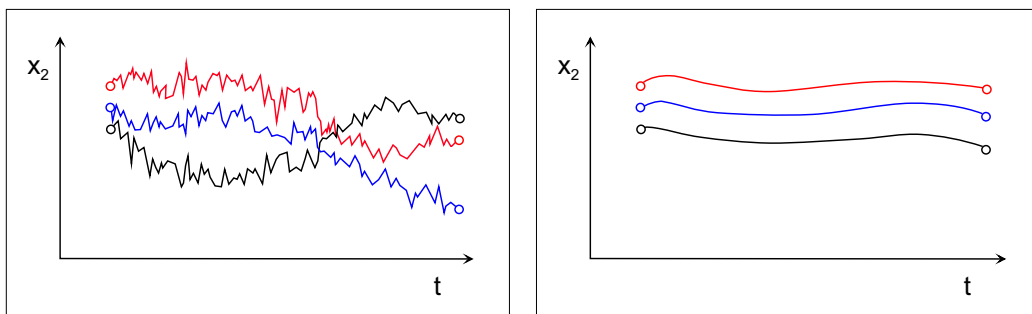


Abbildung 2.1.: Typische Bahnlinien in turbulenter (links) und laminarer Strömung (rechts). Dargestellt ist die zeitliche Entwicklung der Raumkoordinate senkrecht zur Strömungsrichtung.

Während zufällig auftretende Störungen in einer laminaren Strömung durch die Viskosität des Fluids gedämpft werden, überwiegen in einer turbulenten Strömung die Trägheitskräfte in so starkem Maße, dass diese Dämpfung nicht ausreicht. Durch das dimensionslose Verhältnis von kinetischer Energie zur durch Viskosität transportierten Energie kann somit der globale Strömungszustand charakterisiert werden. Die dafür definierte Kennzahl ist die Reynoldszahl

$$Re = \frac{Ul}{\nu} \quad , \quad (2.6)$$

wobei l eine charakteristische Länge ist, U eine charakteristische Geschwindigkeit und ν die kinematische Viskosität. Die Verwendung des Begriffs „charakteristisch“

2.2. Mittelung der Transportgleichungen

deutet bereits an, dass hierbei die jeweiligen Randbedingungen der betrachteten Strömung eine Rolle spielen. So sind beispielsweise bei einer Rohrströmung als Geschwindigkeit der Quotient aus Volumenstrom und Rohrquerschnitt und als Länge der Rohrdurchmesser zu wählen. Bei einer Kugelumströmung dagegen werden die Geschwindigkeit der ungestörten Strömung bzw der Kugeldurchmesser verwendet. Weiter gibt es für jeden Strömungsfall eine kritische Reynoldszahl Re_{krit} , bei deren Überschreitung die betrachtete Strömung turbulent wird. Bei den oben angeführten Beispielen sind dies [7]: $Re_{\text{krit,Rohr}} = 2300$ und $Re_{\text{krit,Kugel}} = 0,25$.

2.2. Mittelung der Transportgleichungen

Sollen die Gleichungen 2.1, 2.2 und 2.3 numerisch auf einem Rechengitter gelöst werden, so wird dabei für die räumliche Auflösung eine charakteristische Längenskala benötigt. Im Falle einer laminaren Strömung liegt diese Skala in der Größenordnung der äußeren Abmessung der Strömung [1]; sie ist also von der Größenordnung im Bereich 0,1 m einzuordnen. Bei einer turbulenten Strömung hingegen ist nach [8] diese Skala die sogenannte Kolmogorovlänge

$$l_k = \left(\frac{\nu^3}{\epsilon}\right)^{1/4} ; \quad (2.7)$$

dabei ist ϵ die Dissipationsgeschwindigkeit der turbulenten kinetischen Energie. Bei der Kanalströmung mit einer Reynoldszahl von 12300 [24], die in Kapitel 4.1 zum Vergleich herangezogen wird, liegt die Kolmogorovlänge im Bereich von etwa 0,0001 m. Diese Skala l_k ist um etwa den Faktor 1000 kleiner als die Skala einer laminaren Strömung [1]. Bei der Simulation einer dreidimensionalen turbulenten Strömung durch direktes Lösen der Navier-Stokes-Gleichungen für alle drei Raumrichtungen werden deshalb um den Faktor 10^9 mehr Rechenpunkte benötigt als bei einer laminaren Strömung, da nur so die kleinsten turbulenten Strukturen auf dem Rechengitter aufgelöst werden können [1, 9]. Bei der Lösung der Gleichungen ist man deshalb auf kleine Gebiete beschränkt, wenn wie bei der direkten numerischen Simulation (DNS) auf die Verwendung von Turbulenzmodellen verzichtet wird.

Häufig ist nicht die zeitliche Entwicklung eines einmalig auftretenden Strömungs-

2. Theoretische Grundlagen

bildes von Interesse, sondern vielmehr die Entwicklung der Mittelwerte der die Strömung beschreibenden Größen. Dies ist vor allem bei technischen Anwendungen, wie z.B. Brennern, der Fall. Dann werden nicht die oben beschriebenen Gleichungen gelöst, sondern aus ihnen abgeleitete Transportgleichungen für die Mittelwerte.

Bei der Reynoldsschen Mittelung wird der Momentanwert jeder Größe ϕ aufgespalten in einen Mittelwert $\langle \phi \rangle$ und einen fluktuierenden Anteil ϕ' gemäß

$$\phi = \langle \phi \rangle + \phi' \quad . \quad (2.8)$$

Der Zusammenhang zwischen Momentanwert, Mittelwert und Fluktuation ist auf Abbildung 2.2 dargestellt.

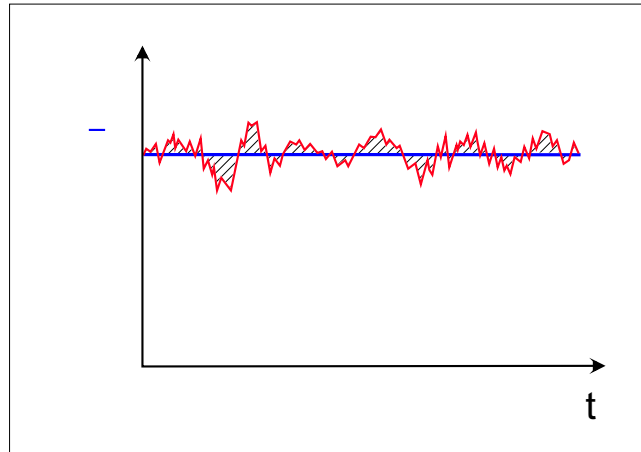


Abbildung 2.2.: Zeitlich schwankender Verlauf und Mittelwert einer Größe

Wie in Abbildung 2.2 dargestellt, ist die Reynolds-Mittelung eine zeitliche Mittelwertbildung. Da der Mittelwert sich mit der Zeit ändern kann, ist die Wahl des Zeitintervalls von großer Bedeutung: Ist es zu groß gewählt, wird der zeitliche Verlauf falsch wiedergegeben; ist es zu klein gewählt, wird die Überlagerung durch die Fluktuationen nicht beseitigt. Der zeitliche Mittelwert einer Größe im Zeitintervall von t_0 bis t_1 ist definiert als

$$\langle \phi \rangle = \frac{1}{t_1 - t_0} \int_{t=t_0}^{t_1} \phi \, dt \quad . \quad (2.9)$$

Die schraffierten Flächen oberhalb des Mittelwertes in Abbildung 2.2 sind genauso groß wie die schraffierten Flächen unterhalb des Mittelwertes. Für die Fluktua-

2.2. Mittelung der Transportgleichungen

tionen gilt deshalb

$$\langle \phi' \rangle = \frac{1}{t_1 - t_0} \int_{t=t_0}^{t_1} \phi' dt = 0 \quad . \quad (2.10)$$

Weiter gelten folgende Regeln:

$$\langle \langle \phi \rangle \rangle = \langle \phi \rangle \quad (2.11)$$

$$\langle C \rangle = C \quad (2.12)$$

$$\langle C \phi' \rangle = C \langle \phi' \rangle = 0 \quad (2.13)$$

C sei dabei eine beliebige Konstante. Treten Fluktuationen bei der Mittelwertbildung im Produkt mit anderen Fluktuationen auf, so ist der Mittelwert dieses Produktes dagegen in der Regel nicht 0:

$$\langle \phi' \xi' \rangle \neq 0 \quad \text{i.a.} \quad (2.14)$$

Treten in der zu betrachtenden Strömung Dichtegradienten auf, so wird statt der Reynolds-Mittelung die Favre-Mittelung verwendet, bei der der Mittelwert über das Produkt aus Dichte und zu mittelnder Größe bestimmt wird. Zur Unterscheidung wird ein Reynolds-Mittelwert mit einem Querbalken und ein Favre-Mittelwert mit einer Tilde gekennzeichnet. Die Aufspaltung einer Größe in Mittelwert und Fluktuation ist formal wie bei der Reynoldsmittelung

$$\phi = \tilde{\phi} + \phi'' \quad . \quad (2.15)$$

Der Favre-Mittelwert ist dabei definiert durch

$$\tilde{\phi} = \frac{\langle \rho \phi \rangle}{\langle \rho \rangle} \quad . \quad (2.16)$$

Für die Fluktuationen gilt

$$\langle \rho \phi'' \rangle = 0 \quad . \quad (2.17)$$

Der Vorteil der Favre-Mittelung bei Strömungen, in denen die Dichte nicht konstant ist, liegt in der einfacheren Darstellung der gemittelten Transportgleichungen. Dies wird bei der Mittelung über den einfachen Term $\rho\phi$, wie er an vielen Stellen vorkommt, deutlich. Bei der Reynoldsmittelung ergibt sich dafür

$$\begin{aligned} \langle \rho \phi \rangle &= \overline{(\bar{\rho} + \rho')(\bar{\phi} + \phi')} \\ &= \bar{\rho}\bar{\phi} + \bar{\rho}\phi' + \rho'\bar{\phi} + \rho'\phi' \\ &= \bar{\rho}\bar{\phi} + \overline{\rho'\phi'} \quad . \end{aligned} \quad (2.18)$$

2. Theoretische Grundlagen

Bei der Favre-Mittelung hingegen ergibt sich dafür nach 2.16

$$\langle \rho \phi \rangle = \bar{\rho} \tilde{\phi} \quad . \quad (2.19)$$

Bei komplexeren Termen wie $\rho \phi u$ zeigt sich dieser Vorteil noch deutlicher. Mit Reynolds-Mittelwerten ergibt sich dabei

$$\begin{aligned} \langle \rho \phi u \rangle &= \overline{(\bar{\rho} + \rho')(\bar{\phi} + \phi')(\bar{u} + u')} & (2.20) \\ &= \overline{\bar{\rho} \bar{\phi} \bar{u} + \bar{\rho} \bar{\phi} u' + \bar{\rho} \phi' \bar{u} + \bar{\rho} \phi' u' + \bar{\rho} \phi' u' + \bar{\rho} \phi' u' + \rho' \phi' \bar{u} + \rho' \phi' u'} \\ &= \bar{\rho} \bar{\phi} \bar{u} + \overline{\bar{\rho} \phi' u'} + \overline{\phi' \rho' u'} + \overline{\bar{u} \rho' \phi'} + \overline{\rho' \phi' u'} \quad . \end{aligned}$$

Mit Favre-Mittelwerten vereinfacht sich die Darstellung zu

$$\begin{aligned} \langle \rho \phi u \rangle &= \overline{\rho(\tilde{\phi} + \phi'')(\tilde{u} + u'')} & (2.21) \\ &= \overline{\rho \tilde{\phi} \tilde{u} + \rho \tilde{\phi} u'' + \rho \phi'' \tilde{u} + \rho \phi'' u''} \\ &= \bar{\rho} \tilde{\phi} \tilde{u} + \overline{\bar{\rho} \phi'' u''} \quad . \end{aligned}$$

Mittelt man die Gleichungen 2.1 - 2.3, so erhält man Transportgleichungen für die Mittelwerte

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial x_i} = 0 \quad (2.22)$$

$$\bar{\rho} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial t} + \bar{\rho} \tilde{u}_j \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} - \frac{\partial \bar{\tau}_{ij}}{\partial x_j} = \bar{\rho} g_i - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} - \frac{\partial \widetilde{\bar{\rho} u_j'' u_i''}}{\partial x_j} \quad (2.23)$$

$$\bar{\rho} \frac{\partial \tilde{\phi}_\alpha}{\partial t} + \bar{\rho} \tilde{u}_j \frac{\partial \tilde{\phi}_\alpha}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{j}_j^\alpha}{\partial x_j} = \bar{\rho} \tilde{S}_\alpha - \frac{\partial \widetilde{\bar{\rho} u_j'' \phi_\alpha}}{\partial x_j} \quad . \quad (2.24)$$

Die Terme $\frac{\partial \widetilde{\bar{\rho} u_j'' u_i''}}{\partial x_j}$ und $\frac{\partial \widetilde{\bar{\rho} u_j'' \phi_\alpha}}{\partial x_j}$ in Gl. 2.23 bzw. 2.24 stellen die turbulenten Ströme dar und sind im aufgestellten Gleichungssystem nicht geschlossen. Sie müssen deshalb modelliert werden. Dies wird als Schließungsproblem der Turbulenz bezeichnet. Die Schließung dieser Terme ist Gegenstand der Turbulenzmodellierung, die im nächsten Abschnitt behandelt wird.

2.3. Turbulenzmodellierung

Zur Modellierung der bisher ungeschlossenen Terme werden neue Transportgleichungen aufgestellt. Für den Ausdruck $\frac{\partial \widetilde{\bar{\rho} u_j'' u_i''}}{\partial x_j}$ wird nach [8, 9] folgendermaßen

vorgegangen: Gl. 2.23 wird von Gl. 2.2 subtrahiert, jeweils für die Komponenten in i -Richtung. Anschließend wird die neue Gleichung mit der Fluktuationgeschwindigkeit u_j'' multipliziert. Die Subtraktion wird für die Komponente in j -Richtung wiederholt und danach wird diese Gleichung mit u_i'' multipliziert. Beide Gleichungen werden nun addiert. Nach Mittelung ergibt sich

$$\begin{aligned} \bar{\rho} \frac{\partial \widetilde{u_i'' u_j''}}{\partial t} + \bar{\rho} \widetilde{u_k} \frac{\partial \widetilde{u_i'' u_j''}}{\partial x_k} = & - \frac{\partial \bar{\rho} \widetilde{u_i'' u_j'' u_k''}}{\partial x_k} - \left(\frac{\partial \overline{u_j'' p''}}{\partial x_i} + \frac{\partial \overline{u_i'' p''}}{\partial x_j} \right) + \overline{p'' \left(\frac{\partial u_i''}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j''}{\partial x_i} \right)} \\ & - \bar{\rho} \left(\overline{u_i'' u_k''} \frac{\partial \widetilde{u_j}}{\partial x_k} + \overline{u_j'' u_k''} \frac{\partial \widetilde{u_i}}{\partial x_k} \right) + \mu \frac{\partial^2 \widetilde{u_i'' u_j''}}{\partial x_k^2} - 2\mu \frac{\partial u_i''}{\partial x_k} \frac{\partial u_j''}{\partial x_k} \quad . \quad (2.25) \end{aligned}$$

In Gl. 2.25 tauchen wieder ungeschlossene Terme auf, die weiter unten dargestellt werden und wiederum modelliert werden müssen. Zur Lösung dieser Gleichung sollen nun zwei Modelle beschrieben werden: Ein Zweigleichungsmodell und ein Reynoldsstressmodell (RSM).

2.3.1. Zweigleichungsmodell

Bei einem Zweigleichungsmodell werden zwei Transportgleichungen aufgestellt und die Kovarianzen der Geschwindigkeiten, die sogenannten Reynoldsspannungen, über einen algebraischen Ausdruck gelöst. Als prominentester Vertreter dieser Gattung soll das k - ϵ -Modell nun etwas näher betrachtet werden.

Ausgangspunkt für das Standard- k - ϵ -Modell ist die Transportgleichung für die Reynoldsspannungen, die unter Verwendung der Reynolds-Mittelung und für konstante Dichte lautet [8–10]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \overline{u_i' u_j'}}{\partial t} + \bar{u}_k \frac{\partial \overline{u_i' u_j'}}{\partial x_k} = & - \frac{\partial \overline{u_i' u_j' u_k'}}{\partial x_k} - \frac{1}{\bar{\rho}} \left(\frac{\partial \overline{u_i' p'}}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{u_j' p'}}{\partial x_i} \right) \\ & + \frac{1}{\bar{\rho}} \left(\overline{p' \frac{\partial u_i'}{\partial x_j}} + \overline{p' \frac{\partial u_j'}{\partial x_i}} \right) + \nu \frac{\partial^2 \overline{u_i' u_j'}}{\partial x_k^2} \\ & - 2\nu \frac{\partial \overline{u_i'}}{\partial x_k} \frac{\partial \overline{u_j'}}{\partial x_k} - \overline{u_i' u_k'} \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_k} - \overline{u_j' u_k'} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_k} \quad . \quad (2.26) \end{aligned}$$

Definiert man als turbulente kinetische Energie

$$k = \frac{1}{2} \overline{u_i' u_i'} \quad , \quad (2.27)$$

2. Theoretische Grundlagen

so lässt sich aus Gleichung 2.26 eine Transportgleichung für k ableiten [9]. Dazu werden in Gleichung 2.26 für die Indizes $i = j$ eingesetzt und über die verschiedenen Raumrichtungen addiert. Das Ergebnis wird halbiert. Dies führt zu

$$\frac{\partial k}{\partial t} + \bar{u}_i \frac{\partial k}{\partial x_i} = -\frac{1}{2} \frac{\overline{\partial u'_i u'_j u'_j}}{\partial x_i} - \frac{1}{\bar{\rho}} \frac{\overline{\partial u'_i p'}}{\partial x_i} - \frac{\overline{u'_i u'_j}}{\partial x_j} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \nu \frac{\partial^2 k}{\partial x_i^2} - \epsilon \quad . \quad (2.28)$$

Dabei ist

$$\epsilon = \nu \frac{\overline{\partial u'_i}}{\partial x_k} \frac{\overline{\partial u'_i}}{\partial x_k} \quad (2.29)$$

die Dissipationsgeschwindigkeit von k , die für die turbulente kinetische Energie einen Senkenterm aufgrund von Viskosität darstellt. Um eine Lösung für die ungeschlossenen Ausdrücke in dieser Gleichung zu finden, wird für die turbulente Diffusion in Analogie zur Diffusion im laminaren Fall die Annahme eingeführt, dass es eine Wirbelviskosität μ_t gibt, mit deren Hilfe die Reynoldsspannungen $\overline{u'_i u'_j}$ als proportional zum Gradienten der mittleren Geschwindigkeit bestimmt werden können [8] mit

$$-\overline{\rho u'_i u'_j} = \mu_t \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \bar{\rho} k \delta_{ij} \quad . \quad (2.30)$$

Weiter wird für die Diffusion von k angenommen, dass es auch hier einen proportionalen Zusammenhang zwischen μ_t und einem Gradienten gibt, hier allerdings dem Gradienten von k nach

$$-\frac{1}{2} \frac{\overline{\partial u'_i u'_j u'_j}}{\partial x_i} - \frac{\overline{\partial u'_i p'}}{\partial x_i} = \frac{\mu_t}{\sigma_k} \frac{\partial k}{\partial x_i} \quad . \quad (2.31)$$

Die Größe σ_k muss dabei durch Vergleich mit Experimenten bestimmt werden. Im Standardmodell wird für σ_k der Wert 1 angenommen [8]. Der viskose Diffusionsterm $\nu \frac{\partial^2 k}{\partial x_i^2}$ ist bei einer Strömung mit hoher Reynoldszahl gegenüber der turbulenten Diffusion zu vernachlässigen.

Mit diesen drei Annahmen ergibt sich für die Transportgleichung von k [9]

$$\frac{\partial k}{\partial t} + \bar{u}_i \frac{\partial k}{\partial x_i} = \frac{1}{\bar{\rho}} \frac{\mu_t}{\sigma_k} \frac{\partial k}{\partial x_i} + \left[\frac{\mu_t}{\bar{\rho}} \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} k \delta_{ij} \right] \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} - \epsilon \quad . \quad (2.32)$$

Nun soll μ_t in Abhängigkeit von den Größen k und ϵ ausgedrückt werden. Bei Betrachtung von Gleichung 2.30 und Gleichung 2.29, ergibt eine Dimensionsanalyse den Zusammenhang [8, 10]

$$\mu_t = c_\mu \bar{\rho} \frac{k^2}{\epsilon} \quad , \quad (2.33)$$

2.3. Turbulenzmodellierung

mit $c_\mu = 0,09$.

Um ϵ bestimmen zu können, muss wieder eine Transportgleichung aufgestellt werden. Wie schon bei der Transportgleichung für k , wird Gleichung 2.23 von Gleichung 2.2 subtrahiert, jeweils für die Komponenten in i -Richtung und für den Fall konstanter Dichte formuliert. Dann wird das Ergebnis nach x_l abgeleitet [9]. Nach Multiplikation mit $2\nu \frac{\partial u'_i}{\partial x_l}$ und anschließender Mittelung ist das Ergebnis

$$\begin{aligned} \frac{\partial \epsilon}{\partial t} + \bar{u}_i \frac{\partial \epsilon}{\partial x_i} &= -2\nu \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_k} \left(\overline{\frac{\partial u'_i}{\partial x_l} \frac{\partial u'_k}{\partial x_l} + \frac{\partial u'_l}{\partial x_i} \frac{\partial u'_l}{\partial x_k}} \right) - 2\nu \frac{\partial^2 \bar{u}_i}{\partial x_k \partial x_l} \overline{u'_k \frac{\partial u'_i}{\partial x_l}} \\ &\quad - 2\nu \overline{\frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \frac{\partial u'_i}{\partial x_l} \frac{\partial u'_k}{\partial x_l}} - 2 \left(\overline{\nu \frac{\partial^2 u'_i}{\partial x_k \partial x_l}} \right)^2 \\ &\quad - \nu \frac{\partial}{\partial x_k} \left[\overline{u'_k \left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_j} \right)^2} \right] - \frac{\nu}{\bar{\rho}} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\overline{\frac{\partial p'}{\partial x_l} \frac{\partial u'_i}{\partial x_l}} \right) \quad . \quad (2.34) \end{aligned}$$

Die Terme dieser Gleichung sind wiederum nicht geschlossen und müssen durch Ausdrücke modelliert werden, die nur Funktionen von \bar{u}_i , $\overline{u'_i u'_j}$, k und ϵ enthalten. Der erste Term auf der rechten Seite stellt die Produktion durch die Hauptströmung dar. Er wird vernachlässigt, was bei hohen Reynoldszahlen zulässig ist [8, 9]. Die zweite Zeile der Gleichung ist die Differenz zwischen Produktion durch Streckung der Wirbelfäden und Dissipation durch Viskosität. Sie wird modelliert durch

$$-2\nu \overline{\frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \frac{\partial u'_i}{\partial x_l} \frac{\partial u'_k}{\partial x_l}} - 2 \left(\overline{\nu \frac{\partial^2 u'_i}{\partial x_k \partial x_l}} \right)^2 = c_{\epsilon 1} \frac{\epsilon}{k} P_k - c_{\epsilon 2} \frac{\epsilon^2}{k} \quad , \quad (2.35)$$

$$\text{mit } P_k = -\overline{u'_i u'_j} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \quad . \quad (2.36)$$

Dabei ist P_k die Produktionsgeschwindigkeit von k . Die letzte Zeile schließlich stellt die Diffusion dar und wird mit einem Gradientenansatz analog zur Diffusion von k wiedergegeben mit

$$-\nu \frac{\partial}{\partial x_k} \left[\overline{u'_k \left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_j} \right)^2} \right] - \frac{\nu}{\bar{\rho}} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\overline{\frac{\partial p'}{\partial x_l} \frac{\partial u'_i}{\partial x_l}} \right) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{1}{\bar{\rho}} \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \frac{\partial \epsilon}{\partial x_i} \right) \quad . \quad (2.37)$$

Die modellierte Transportgleichung lautet damit

$$\frac{\partial \epsilon}{\partial t} + \bar{u}_i \frac{\partial \epsilon}{\partial x_i} = c_{\epsilon 1} \frac{\epsilon}{k} P_k - c_{\epsilon 2} \frac{\epsilon^2}{k} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{1}{\bar{\rho}} \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \frac{\partial \epsilon}{\partial x_i} \right) \quad . \quad (2.38)$$

2. Theoretische Grundlagen

Hierbei sind $c_{\epsilon 1}$, $c_{\epsilon 2}$ und σ_ϵ empirische Konstanten, die durch Experimente bestimmt wurden. Im Standardmodell haben sie folgende Werte [8, 10]:

$$c_{\epsilon 1} = 1,44, \quad c_{\epsilon 2} = 1,92, \quad \sigma_\epsilon = 1,3$$

Anstatt für ϵ kann auch eine Transportgleichung für die turbulente Frequenz ω aufgestellt werden. Dafür wird

$$\omega = \frac{\epsilon}{k} \quad (2.39)$$

definiert. Unter der Annahme konstanter Dichte, hoher Reynoldszahl und einer Wirbelviskosität

$$\mu_t = \bar{\rho} c_\mu \frac{k}{\omega}, \quad (2.40)$$

gelangt man mit dem für ϵ beschriebenen Verfahren zu einer Transportgleichung für ω [8, 11]

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + \bar{u}_i \frac{\partial \omega}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\mu_t}{\sigma_\omega} \frac{\partial \omega}{\partial x_i} \right) + c_{\omega 1} \frac{\omega}{k} P_k - c_{\omega 2} \omega^2 \quad (2.41)$$

Der Vorteil bei der Verwendung von ω als zweiter Größe zeigt sich bei der Modellierung von Strömungen, bei denen der Impulstransport aufgrund von Viskosität einen erheblichen Einfluss hat [8, 9]. Dies ist bei Strömungen, die von Wänden begrenzt werden der Fall, da im wandnahen Bereich der Transport durch Viskosität größer ist als der turbulente Transport, weil hier die Reynoldsspannungen klein sind. Deshalb müssen bei den Gleichungen 2.32, 2.38 und 2.41 die Terme $\frac{\mu_t}{\sigma_k}$, $\frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon}$ bzw. $\frac{\mu_t}{\sigma_\omega}$ ersetzt werden durch $\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k}$, $\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon}$ bzw. $\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\omega}$. Bei der Gleichung für ϵ muss darüber hinaus der Ausdruck, der die Differenz zwischen Produktion durch gegenseitige Streckung der Wirbelfäden und Vernichtung durch Viskosität darstellt, verändert werden, weil die Koeffizienten $c_{\epsilon 1}$ und $c_{\epsilon 2}$ dann nicht mehr konstant sind, sondern definiert werden als

$$c_{\epsilon 1} P_k \frac{\epsilon}{k} - c_{\epsilon 2} \frac{\epsilon^2}{k} \rightarrow c_{\epsilon 1} f_1 P_k \frac{\epsilon}{k} - c_{\epsilon 2} f_2 \frac{\epsilon^2}{k} \quad .$$

Die Funktionen f_1 bzw. f_2 werden so gewählt, dass f_1 mit zunehmender lokaler Turbulenz sinkt, während f_2 steigt. Bei einigen Low-Reynolds- k - ϵ -Modellen [12, 13] werden noch weitere, beim Standardmodell als konstant angenommene Koeffizienten, wie z.B. c_μ , als variabel angenommen und weitere Terme hinzugenommen, um den Übergang zur laminaren Strömung besser beschreiben zu können.

2.3. Turbulenzmodellierung

Beim k - ω -Modell dagegen ist eine Modifikation von $c_{\omega 1}$ und $c_{\omega 2}$ nicht nötig. Es gibt aber auch hier Low-Reynolds-Varianten [14], in denen zusätzliche Terme auftauchen. Allerdings zeigt das k - ω -Modell eine Schwäche beim Übergang zur freien Strömung, bei der die Werte von ω von der Geschwindigkeit in der freien Strömung abhängen [15]. Deshalb gibt es auch gemischte Modelle, die an der Wand die Wirbelviskosität mit dem k - ω -, im Bereich der freien Strömung bzw. in der Mitte aber das k - ϵ -Modell verwenden [16]. Eine gute Übersicht über verschiedene Low-Reynolds-Modelle bietet [17]. Die geeignete Wahl der Randbedingungen für diese Modelle ist immer noch Gegenstand der Forschung [18].

Der Übergang zu einer kompressiblen Strömung kann durch Ersetzen von Reynolds- durch Favremittelwerte und die Verwendung der lokalen Dichte erfolgen [10]. Für Favre-Mittelung ergeben sich die Transportgleichungen [11, 19]

$$\begin{aligned} \bar{\rho} \frac{\partial k}{\partial t} + \bar{\rho} \tilde{u}_i \frac{\partial k}{\partial x_i} &= \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\mu_t}{\sigma_k} \frac{\partial k}{\partial x_i} \right) \\ &+ \left[\mu_t \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \bar{\rho} k \delta_{ij} \right] \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} - \bar{\rho} \epsilon \end{aligned} \quad (2.42)$$

und

$$\bar{\rho} \frac{\partial \epsilon}{\partial t} + \bar{\rho} \tilde{u}_i \frac{\partial \epsilon}{\partial x_i} = c_{\epsilon 1} \bar{\rho} \frac{\epsilon}{k} P_k - c_{\epsilon 2} \bar{\rho} \frac{\epsilon^2}{k} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \frac{\partial \epsilon}{\partial x_i} \right) , \quad (2.43)$$

mit

$$P_k = -\widetilde{\bar{\rho} u_i'' u_j''} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} . \quad (2.44)$$

Für den Ansatz der Diffusion der Reynoldsspannungen mit der Wirbelviskosität gilt jetzt

$$-\widetilde{\bar{\rho} u_i'' u_j''} = \mu_t \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial \tilde{u}_l}{\partial x_l} \delta_{ij} \right) - \frac{2}{3} \bar{\rho} k \delta_{ij} . \quad (2.45)$$

Um den turbulenten Transport einer skalaren Größe ϕ zu bestimmen, benutzt man wieder, wie bei k und ϵ , einen Gradientenansatz, mit dem der Transport als Funktion von μ_t und dem Gradienten von $\bar{\phi}$ bestimmt wird [8]. Bei Verwendung der Reynoldsmittelung und bei konstanter Dichte lautet der Ansatz analog zu Gleichung 2.30

$$-\overline{\bar{\rho} u_i' \phi'} = \frac{\mu_t}{\sigma_\phi} \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial x_i} , \quad (2.46)$$

wobei σ_ϕ wiederum eine empirische Konstante ist, die den Standardwert 2 hat.

2. Theoretische Grundlagen

Bei Favre-Mittelung und variabler Dichte wird obige Gleichung ohne weitere Änderungen mit Favre-Mittelwerten verwendet:

$$-\overline{\rho u_i' \phi''} = \frac{\mu_t}{\sigma_\phi} \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial x_i} \quad (2.47)$$

2.3.2. Reynolds-Stress-Modell

Der turbulente Transport der Reynoldsspannungen lässt sich auch ohne Verwendung der Annahme einer Wirbelviskosität bestimmen. Dazu werden je eine Transportgleichung für die Reynoldsspannungen und für die Dissipation oder die turbulente Frequenzgelöst, da für die Lösung die Information über eine turbulente Zeitskala benötigt wird [8]. Für den Fall konstanter Dichte ist die erste Gleichung gegeben durch Gleichung 2.26.

Ein oft verwendetes Modell ist das von Launder und Shima entwickelte [20], das nun als Beispiel für solche Modelle vorgestellt werden soll. Die Transportgleichung 2.26 lautet in abgekürzter Form

$$\frac{D \overline{u_i' u_j'}}{Dt} = P_{ij} - \epsilon_{ij} + \phi_{ij} + d_{ij} + \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\frac{\nu \partial \overline{u_i' u_j'}}{\partial x_k} \right) \quad (2.48)$$

Der Operator $\frac{D}{Dt}$ wird als substantielle Ableitung bezeichnet und steht für

$$\frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \bar{u}_i \frac{\partial}{\partial x_i} \quad (2.49)$$

Der erste Term auf der rechten Seite von Gleichung 2.48 ist die Produktion durch die Hauptströmung. Wie beim k - ϵ -Modell ist er definiert als

$$P_{ij} = -\overline{u_i' u_k'} \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_k} - \overline{u_j' u_k'} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_k} \quad (2.50)$$

Da er, ebenso wie der letzte Ausdruck auf der rechten Seite, die viskose Diffusion, nur von bekannten gemittelten Größen und deren Gradienten abhängt, muss er nicht modelliert werden.

Die Größe d_{ij} ist die turbulente Diffusion. Ihre exakte Definition ist

$$d_{ij} = -\frac{\partial \overline{u_i' u_j' u_k'}}{\partial x_k} - \frac{1}{\bar{\rho}} \left(\frac{\partial \overline{u_i' p'}}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{u_j' p'}}{\partial x_i} \right) \quad (2.51)$$

2.3. Turbulenzmodellierung

Da hier ungeschlossene Terme vorkommen, muss d_{ij} modelliert werden. In diesem Modell wird dazu ein Gradientendiffusionsansatz verwendet, ähnlich, wie er auch schon beim k - ϵ -Modell verwendet wurde, da er einfach zu implementieren ist. Der Ansatz lautet

$$d_{ij} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(c_s \frac{k}{\epsilon} \overline{u'_k u'_l} \frac{\partial \overline{u'_i u'_j}}{\partial x_l} \right) . \quad (2.52)$$

Die turbulente kinetische Energie kann direkt aus den Reynoldsspannungen mit Gleichung 2.27 berechnet werden. Für die Dissipationsgeschwindigkeit von k muss dagegen die Transportgleichung

$$\frac{D\epsilon}{Dt} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left[\left(c_\epsilon \frac{k}{\epsilon} \overline{u'_k u'_l} + \nu \delta_{kl} \right) \frac{\partial \epsilon}{\partial x_l} \right] + (c_{\epsilon 1} + \psi_1 + \psi_2) \frac{\epsilon}{k} P - c_{\epsilon 2} \frac{\epsilon \epsilon_h}{k} \quad (2.53)$$

gelöst werden. Dabei ist P die Produktionsgeschwindigkeit von k : $P = 0,5P_{kk}$. Im Vergleich mit dem Standard- k - ϵ -Modell [8, 9] (s. Gleichung 2.38) fallen hier zwei Unterschiede auf: Es gibt zusätzliche Koeffizienten, ψ_1 und ψ_2 , und eine neue Größe, ϵ_h . ψ_1 und ψ_2 dienen dazu, die Produktion aufgrund der gegenseitigen Streckung der Wirbelfäden an die Verhältnisse im wandnahen Bereich der Strömung anzupassen und die Anisotropie der Turbulenz in diesem Bereich zu berücksichtigen. Sie werden definiert als

$$\psi_1 = 2,5A \left(\frac{P}{\epsilon} - 1 \right) \quad \text{und} \quad \psi_2 = 0,3(1 - 0,3A_2)e^{-0,002Re_t^2} . \quad (2.54)$$

Hierbei ist A ein Indikator für die Anisotropie der Turbulenz. Bei isotroper Turbulenz, d.h. wenn $\overline{u'_1 u'_1} = \overline{u'_2 u'_2} = \overline{u'_3 u'_3}$, nimmt er den Wert 1 an, während er an der Wand, wenn die Turbulenz ihren Zweikomponenten-Zustand erreicht, da die Fluktuationen senkrecht zur Wand schneller abnehmen als in den anderen Richtungen, gegen 0 strebt. Er wird bestimmt aus den zweiten und dritten Invarianten A_2 und A_3 des dimensionslosen anisotropen Reynolds-Stress-Tensors a_{ij}

$$a_{ij} = \frac{\overline{u'_i u'_j}}{k} - \frac{2}{3} \delta_{ij} . \quad (2.55)$$

Es gilt dafür

$$A_2 = a_{ik} a_{ki} \quad , \quad A_3 = a_{ik} a_{kj} a_{ij} \quad , \quad A = 1 - \frac{9}{8}(A_2 - A_3) . \quad (2.56)$$

Re_t ist die turbulente Reynoldszahl, die den lokalen Turbulenzzustand anzeigt. Sie ist definiert als $Re_t = \frac{k^2}{\nu \epsilon}$. Die Konstanten c_ϵ , $c_{\epsilon 1}$ und $c_{\epsilon 2}$ haben die Werte

$$c_\epsilon = 0,18 \quad , \quad c_{\epsilon 1} = 1,45 \quad \text{und} \quad c_{\epsilon 2} = 1,9 \quad ,$$

2. Theoretische Grundlagen

die wiederum durch Vergleich mit experimentellen Ergebnissen ermittelt wurden. Die neu eingeführte Größe $\epsilon_h = \epsilon - 2\nu \left(\frac{\partial \sqrt{k}}{\partial x_j} \right)^2$ dient dazu, den Betrag der Ver-nichtung von ϵ durch Viskosität an der Wand zu begrenzen. ϵ_h nimmt an der Wand den Wert 0 an; in der Mitte der Strömung hat es denselben Wert wie ϵ .

Für den Dissipationsterm in Gleichung 2.48 wird lokale Isotropie angenommen; das bedeutet, dass die Dissipationsgeschwindigkeit für alle Haupt-Reynolds-Spannungen gleich groß ist gemäß $\epsilon_{ij} = \frac{2}{3}\epsilon\delta_{ij}$.

Der Ausdruck ϕ_{ij} steht für den Einfluss der Druckfluktuationen auf Produktion und Umlagerungsprozesse der Reynoldsspannungen und wird als Pressure-Strain-Term bezeichnet. Er ist bei allen RSM am aufwändigsten zu modellieren. Exakt lautet er wie in Gleichung 2.26

$$\phi_{ij} = \frac{1}{\bar{\rho}} \left(\overline{p' \frac{\partial u'_i}{\partial x_j}} + \overline{p' \frac{\partial u'_j}{\partial x_i}} \right) . \quad (2.57)$$

Zur Modellierung wird er in vier Terme aufgespalten nach

$$\phi_{ij} = \phi_{ij1} + \phi_{ij2} + \phi_{ij1}^w + \phi_{ij2}^w . \quad (2.58)$$

Der Ausdruck ϕ_{ij1} wird als Slow-Pressure-Strain-Term bezeichnet. Er stellt eine Abhängigkeit von den Reynoldsspannungen her und wird hier modelliert durch

$$\begin{aligned} \phi_{ij1} &= c_1 \epsilon a_{ij} , \\ \text{mit } c_1 &= 1 + 2,58AA_2^{0,25} (1 - e^{-(0,0067Re_t)^2}) . \end{aligned} \quad (2.59)$$

Die Größe ϕ_{ij2} ist der Rapid-Pressure-Strain-Term und ändert sich mit den Geschwindigkeitsgradienten der Hauptströmung nach

$$\begin{aligned} \phi_{ij2} &= -c_2 \left(P_{ij} - \frac{2}{3}P\delta_{ij} \right) , \\ \text{mit } c_2 &= 0,75\sqrt{A} . \end{aligned} \quad (2.60)$$

Die Terme ϕ_{ij1}^w und ϕ_{ij2}^w geben den Effekt von Reflexion an einer Wand auf ϕ_{ij1} und ϕ_{ij2} wieder. Sie lauten hier

$$\phi_{ij1}^w = c_1^w \frac{\epsilon}{k} \left(\overline{u'_k u'_m n_k n_m} \delta_{ij} - 1,5 \overline{u'_k u'_i n_k n_j} - 1,5 \overline{u'_k u'_j n_k n_i} \right) f_w \quad (2.61)$$

$$\phi_{ij2}^w = c_2^w \left(\phi_{km2} n_k n_m \delta_{ij} - 1,5 \phi_{ik2} n_k n_j - 1,5 \phi_{jk2} n_k n_i \right) f_w . \quad (2.62)$$

2.3. Turbulenzmodellierung

In die Dämpfungsfunktion f_w geht der Abstand von der Wand, x_2 , ein: $f_w = 0,4 \frac{k^{1,5}}{\epsilon x_2}$. Hierbei bezeichnet n_i die Komponenten des Richtungsvektors senkrecht zur Wand. Die Koeffizienten c_1^w und c_2^w sind

$$c_1^w = -\frac{2}{3}c_1 + 1,67 \quad \text{und} \quad c_1^w = \max \left[\frac{\frac{2}{3}c_2 - \frac{1}{6}}{c_2}, 0 \right] . \quad (2.63)$$

Die Verwendung von Dämpfungsfunktionen ist bei der Modellierung kritisch zu betrachten. Als Nachteil fällt bei der hier verwendeten Form auf, dass die Funktion f_w explizit vom Wandabstand abhängt. Außerdem ist es bei einer komplexeren Wandgeometrie im allgemeinen schwierig, den wandnormalen Richtungsvektor zu bestimmen. Weiter führt die Sensibilisierung des Modells für das Verhältnis von Produktion von k zur Dissipationsgeschwindigkeit ϵ dazu, dass bei starken Druckgradienten die Geschwindigkeitsfluktuationen abklingen und nicht wieder ansteigen [21].

Ein Modell, das Favre-Mittelwerte verwendet und auch wegen seiner Turbulenzindikatoren für komplexere Geometrien geeignet ist und keine explizite Abhängigkeit vom Wandabstand aufweist, ist das RSM von Batten et al. [21]. Es ist eine Erweiterung des Modells von Craft und Launder [22] für variable Dichte. Die Transportgleichung, die hier gelöst wird, ist Gleichung 2.25, die in verkürzter Form

$$\frac{D}{Dt} \left(\overline{\rho u_i'' u_j''} \right) = P_{ij} + d_{ij} + \phi_{ij}^* - \epsilon_{ij} \quad (2.64)$$

lautet. Hier ist in d_{ij} die turbulente mit der viskosen Diffusion zusammengefasst. Ansonsten ist die Bedeutung der einzelnen Terme dieselbe wie in Gleichung 2.48. Die Diffusion der Reynoldsspannungen wird hier modelliert als

$$d_{ij} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\mu \frac{\partial \overline{u_i'' u_j''}}{\partial x_k} + 0,22 \frac{\bar{\rho} k}{\epsilon} \left[\overline{u_k'' u_l''} \frac{\partial \overline{u_i'' u_j''}}{\partial x_l} \right] \right) + \frac{d_{kk}^p \overline{\rho u_i'' u_j''}}{2k} . \quad (2.65)$$

Der Term d_{kk} kommt durch eine von Gleichung 2.25 abweichende Zerlegung des Druckterms zustande; in seiner exakten Form ist dieser Term gegeben durch

$$d_{kk} = -\frac{1}{\bar{\rho}} \frac{\partial \overline{p' u_k'}}{\partial x_k} . \quad (2.66)$$

Dabei wird $\overline{p' u_k'}$ modelliert als

$$\overline{p' u_k'} = -\bar{\rho}(1 - A)(0,5d_k + 1,1d_k^A) \sqrt{(\nu \epsilon k A A_2)} c_{pd} , \quad (2.67)$$

$$\text{mit } c_{pd} = (1 + 2e^{-Re_t/40})A_2 + 0,4Re_t^{-0,25}e^{-Re_t/40} . \quad (2.68)$$

2. Theoretische Grundlagen

Die Turbulenzindikatoren d_i und d_i^A werden auch bei der Modellierung der weiteren Terme verwendet. Sie dienen dazu, sowohl die Richtung als auch die Größe des Gradienten der Intensität und der Inhomogenität der Turbulenz zu bestimmen. Gegenüber der turbulenten Längenskala $l = \frac{k^{1,5}}{\epsilon}$ haben die hier verwendeten Indikatoren den Vorteil, dass sie normiert sind. Sie sind definiert als

$$d_i = \frac{N_i}{0,5\sqrt{N_k N_k}} \quad , \quad N_i = \frac{\partial(lA)}{\partial x_i} \quad (2.69)$$

$$d_i^A = \frac{N_i^A}{0,5\sqrt{N_k N_k}} \quad , \quad N_i^A = \frac{\partial(l\sqrt{A})}{\partial x_i} \quad . \quad (2.70)$$

Die Größen A und A_2 sind wie bereits in Gleichung 2.56 definiert, Lumley's Stress-Flatness-Indikator und die zweite Invariante des dimensionslosen anisotropen Reynoldsstresstensors a_{ij} (s. Gleichung 2.55).

Der Druckkorrelationsterm ϕ_{ij}^* entstammt einem kubischen RSM von Fu [23]. Er wird wieder aufgespalten zu

$$\phi_{ij}^* = \phi_{ij1}^* + \phi_{ij2}^* + \phi_{ij1}^{\text{inh}} + \phi_{ij2}^{\text{inh}} \quad . \quad (2.71)$$

Den Stern tragen diese Ausdrücke, um kenntlich zu machen, dass hier eine andere Aufspaltung des Druckterms vorgenommen wurde [22]. Der erste Teil der rechten Seite von Gleichung 2.71 entspricht dem Slow-Pressure-Strain-Term

$$\phi_{ij1}^* = -c_1 \bar{\rho} \epsilon_h \left[a_{ij} + c'_1 (a_{ik} a_{kj} - \frac{1}{3} A_2 \delta_{ij}) \right] - \bar{\rho} \epsilon_h A^{\frac{1}{2}} a_{ij} \quad , \quad (2.72)$$

wobei $\epsilon_h = \epsilon - 2\nu \left(\frac{\partial \sqrt{k}}{\partial x_i} \right)^2$ hier die homogene Dissipationsgeschwindigkeit der turbulenten kinetischen Energie k ist, wie sie bereits beim RSM von Launder und Shima verwendet wurde. Die Koeffizienten c_1 und c'_1 sind

$$c_1 = 3,2 f_A \sqrt{A_2} \min [(Re_t/160)^2, 1] \quad , \quad \text{bzw.} \quad c'_1 = 1,1 \quad .$$

Mit f_A ist eine Funktion bezeichnet, die die Koeffizienten in Abhängigkeit von der Anisotropie der Turbulenz bringt. Sie wird bei mehreren Termen benutzt und ist definiert als

$$f_A = \begin{cases} \sqrt{\frac{A}{14}} & \text{für } A < 0,05 \\ \frac{A}{\sqrt{0,7}} & \text{für } 0,05 < A < 0,7 \\ \sqrt{A} & \text{für } A > 0,7 \end{cases} \quad . \quad (2.73)$$

2.3. Turbulenzmodellierung

Der nächste Ausdruck, ϕ_{ij2}^* , ist der Rapid-Pressure-Strain-Term; da er Abhängigkeiten von Geschwindigkeitsgradienten enthält, reagiert er schneller als ϕ_{ij1}^* auf Änderungen in der Strömung. Er wird modelliert als

$$\begin{aligned}
\phi_{ij2}^* = & -0,6 \left(P_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} P_{kk} \right) + 0,3 a_{ij} P_{kk} \\
& - \frac{0,2}{k} \bar{\rho} \left[\widetilde{u_k'' u_j'' u_l'' u_i''} \left(\frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_l} + \frac{\partial \tilde{u}_l}{\partial x_k} \right) - \widetilde{u_l'' u_k''} \left(\widetilde{u_i'' u_k''} \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_l} + \widetilde{u_j'' u_k''} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_l} \right) \right] \\
& - c_2 [A_2 (P_{ij} - D_{ij}) + 3 a_{mi} a_{nj} (P_{mn} - D_{mn})] \\
& + c_2' \left\{ \left(\frac{7}{15} - \frac{A_2}{4} \right) \left(P_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} P_{kk} \right) \right. \\
& + 0,1 \left[a_{ij} - \frac{1}{2} \left(a_{ik} a_{kj} - \frac{1}{3} \delta_{ij} A_2 \right) \right] P_{kk} - 0,05 a_{ij} a_{lk} P_{kl} \\
& + \frac{0,1}{k} \left[\left(\widetilde{u_i'' u_m''} P_{mj} + \widetilde{u_j'' u_m''} P_{mi} \right) - \frac{2}{3} \delta_{ij} \widetilde{u_l'' u_m''} P_{ml} \right] \\
& + \frac{0,1}{k^2} \left[\widetilde{u_l'' u_i'' u_k'' u_j''} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \widetilde{u_l'' u_m'' u_k'' u_m''} \right] \left[6 D_{lk} + 13 k \bar{\rho} \left(\frac{\partial \tilde{u}_l}{\partial x_k} + \frac{\partial \tilde{u}_l}{\partial x_k} \right) \right] \\
& \left. + \frac{0,2}{k^2} \widetilde{u_l'' u_i'' u_k'' u_j''} (D_{lk} - P_{lk}) \right\} , \tag{2.74}
\end{aligned}$$

$$\text{mit } D_{ij} = -\bar{\rho} \left(\widetilde{u_i'' u_k''} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_j} + \widetilde{u_j'' u_k''} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_i} \right) , \tag{2.75}$$

$$P_{ij} = -\bar{\rho} \left(\widetilde{u_i'' u_k''} \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_k} + \widetilde{u_j'' u_k''} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_k} \right) , \tag{2.76}$$

$$c_2 = \min \left[0,55 \left(1 - e^{-A^{1,5} Re_t / 100} \right) , \frac{3,2A}{1+S} \right] \quad \text{und} \tag{2.77}$$

$$c_2' = \min \left[0,6 , \sqrt{A} \right] + 3,5 \frac{S - \Omega}{3 + S + \Omega} - 4 \min (S_I , 0) . \tag{2.78}$$

Die normalisierten mittleren Scher- bzw. Rotationsraten S und Ω hängen ihrerseits wiederum ab vom mittleren Scher- bzw Rotationsratentensor S_{ij} bzw. Ω_{ij} [8]

$$S = \frac{k}{\epsilon} \sqrt{\frac{1}{2} S_{ij} S_{ij}} , \quad S_{ij} = \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \tag{2.79}$$

$$\Omega = \frac{k}{\epsilon} \sqrt{\frac{1}{2} \Omega_{ij} \Omega_{ij}} , \quad \Omega_{ij} = \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} - \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} . \tag{2.80}$$

Hierbei ist S_I eine Invariante von S_{ij}

$$S_I = \sqrt{6} \frac{S_{ij} S_{jk} S_{ki}}{(S_{ln} S_{ln})^{1,5}} . \tag{2.81}$$

2. Theoretische Grundlagen

und nimmt S_1 bei axialsymmetrischer Kontraktion oder Expansion, wie etwa in einem Freistrahle, den Wert $+1$ bzw. -1 an; nähert sich die Turbulenz einem Zweikomponenten-Zustand an, z.B. in Wandnähe, wo die Fluktuationen in wandnormaler Richtung schneller abklingen als in andere Richtungen, so geht sie gegen 0 .

Für die beiden Pressure-Strain-Terme gibt es die beiden Korrekturterme ϕ_{ij1}^{inh} und ϕ_{ij2}^{inh} , die den Einfluss von Inhomogenitäten, wie z.B. Wände, auf den Druckkorrelationsterm wiedergeben. Sie sind festgelegt als

$$\begin{aligned} \phi_{ij1}^{\text{inh}} = & f_{w1} \frac{\bar{\rho} \epsilon_h}{k} \left(\widetilde{u_l'' u_k'' d_l^A d_k^A} \delta_{ij} - \frac{3}{2} \widetilde{u_i'' u_k'' d_j^A d_k^A} - \frac{3}{2} \widetilde{u_j'' u_k'' d_i^A d_k^A} \right) \\ & + f_{w2} \frac{\bar{\rho} \epsilon_h}{k^2} \left(\widetilde{u_m'' u_n'' u_m'' u_l'' d_n^A d_l^A} \delta_{ij} - \frac{3}{2} \widetilde{u_i'' u_m'' u_m'' u_l'' d_j^A d_l^A} \right. \\ & \left. - \frac{3}{2} \widetilde{u_j'' u_m'' u_m'' u_l'' d_i^A d_l^A} \right) \quad \text{und} \end{aligned} \quad (2.82)$$

$$\phi_{ij2}^{\text{inh}} = f_1 \bar{\rho} k \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_n} d_l d_n \left(d_i d_j - \frac{1}{3} d_k d_k \delta_{ij} \right) . \quad (2.83)$$

Die Funktionen f_{w1} und f_{w2} sind wiederum abhängig von der Anisotropie der Turbulenz. Sie, und damit auch ϕ_{ij1}^{inh} , werden nur im wandnahen Bereich bei etwa $Re_t < 100$ wirksam. Sie sind gegeben durch

$$f_{w1} = 2,35(1 - \sqrt{A}) \min \left[0, \max \left(1 - \frac{Re_t - 55}{70} \right) \right] \quad \text{und} \quad (2.84)$$

$$f_{w2} = 0,6A_2(1 - \sqrt{A}) \min \left[0, \max \left(1 - \frac{Re_t - 50}{85} \right) \right] + 0,1 \quad . \quad (2.85)$$

Dagegen ist die Funktion $f_1 = 3f_A$ über die ganze Strömung hinweg wirksam; an der Wand ist sie gleich 0 , bei isotroper Turbulenz, wenn $A = 1$, hat sie den Wert 1 .

Der Dissipationstensor ϵ_{ij} ist hier nicht unter der Annahme lokaler Isotropie der Dissipation festgelegt, sondern für alle Reynoldsspannungen unter Verwendung von Gradienten der turbulenten kinetischen Energie und der Indikatoren d_i^A mo-

delliert durch

$$\epsilon_{ij} = \frac{1 - f_\epsilon}{D} \bar{\rho} (\epsilon'_{ij} + \epsilon''_{ij}) + \frac{2}{3} f_\epsilon \bar{\rho} \epsilon_h \delta_{ij} \quad , \quad (2.86)$$

$$\begin{aligned} \text{mit} \quad \epsilon'_{ij} &= \epsilon_h \frac{\widetilde{u''_i u''_j}}{k} + 2\nu \frac{\widetilde{u''_l u''_n}}{k} \frac{\partial \sqrt{k}}{\partial x_l} \frac{\partial \sqrt{k}}{\partial x_n} \delta_{ij} \\ &\quad + 2\nu \left(\frac{\widetilde{u''_l u''_i}}{k} \frac{\partial \sqrt{k}}{\partial x_j} \frac{\partial \sqrt{k}}{\partial x_l} + \frac{\widetilde{u''_l u''_j}}{k} \frac{\partial \sqrt{k}}{\partial x_i} \frac{\partial \sqrt{k}}{\partial x_l} \right) \quad , \\ \epsilon''_{ij} &= f_R \epsilon_h \left(2 \frac{\widetilde{u''_l u''_k}}{k} d_l^A d_k^A \delta_{ij} - \frac{\widetilde{u''_l u''_i}}{k} d_l^A d_j^A - \frac{\widetilde{u''_l u''_j}}{k} d_l^A d_j^A \right) \quad , \\ D &= \frac{\epsilon'_{kk} + \epsilon''_{kk}}{2\epsilon} \quad , \\ f_\epsilon &= \sqrt{A} \quad \text{und} \\ f_R &= (1 - A) \min \left[\left(\frac{Re_t}{80} \right)^2 \quad , \quad 1 \right] \quad . \end{aligned}$$

Dabei begrenzt ϵ'_{ij} den Wert von ϵ_{ij} in Wandnähe, während ϵ''_{ij} einen leichten Einbruch von ϵ_{ij} in der viskosen Pufferschicht der Strömung wiedergibt. Für isotrope Turbulenz nimmt ϵ_{ij} dann dieselbe Form an wie schon im RSM von Launder und Shima. Der Übergang dorthin wird durch f_ϵ beschrieben.

Die für das RSM benötigte Transportgleichung für die Dissipationsgeschwindigkeit von k wird hier für die homogene Dissipationsgeschwindigkeit ϵ_h formuliert

$$\begin{aligned} \frac{D}{Dt}(\bar{\rho}\epsilon_h) &= \frac{\partial}{\partial x_l} \left[\left(\mu \delta_{lk} + c_\epsilon \bar{\rho} \widetilde{u''_l u''_k} \frac{k}{\epsilon} \right) \frac{\partial \epsilon_h}{\partial x_k} \right] + \frac{c_{\epsilon 1} \bar{\rho} P_k}{\tau} - \frac{c_{\epsilon 2} \bar{\rho} \epsilon_h}{\tau} \\ &\quad - \frac{c_{\epsilon 3} \bar{\rho} (\epsilon - \epsilon_h) \epsilon_h}{k} + c_{\epsilon 4} \mu \tau \widetilde{u''_i u''_j} \frac{\partial^2 \tilde{u}_k}{\partial x_i \partial x_l} \frac{\partial^2 \tilde{u}_k}{\partial x_j \partial x_l} + \frac{c_{\epsilon 5} \bar{\rho} \epsilon_h}{\tau} Y_P \quad . \quad (2.87) \end{aligned}$$

Dabei ist $\tau = \frac{k}{\epsilon}$ die turbulente Zeitskala. Die Anpassung an den Einfluss der Inhomogenität der Turbulenz auf die homogene Dissipationsgeschwindigkeit wird mit dem Term

$$Y_P = 0,2 \min \{ \max[F(F+1)^2 \quad , \quad 0] \quad , \quad 20 \} \quad \text{mit} \quad (2.88)$$

$$F = \frac{\sqrt{\left(\frac{\partial l}{\partial x_j} \right) \left(\frac{\partial l}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial l_e}{\partial Y}}}{c_1} \quad \text{und}$$

$$\frac{\partial l_e}{\partial Y} = c_1 (1 - e^{-B_\epsilon Re_t} + B_\epsilon Re_t e^{-B_\epsilon Re_t})$$

2. Theoretische Grundlagen

vorgenommen. Die konstanten Koeffizienten dieser Transportgleichung sind

$$\begin{aligned} c_{\epsilon 1} = 1,44 & \quad , \quad c_{\epsilon 2} = 1,92 & \quad , \quad c_{\epsilon 3} = 1,0 & \quad , \quad c_{\epsilon 4} = 0,4 & \quad , \\ c_{\epsilon 5} = 0,2 & \quad , \quad c_{\epsilon} = 0,18 & \quad , \quad c_l = 2,55 & \quad , \quad B_{\epsilon} = 0,1069 & \quad . \end{aligned}$$

2.3.3. Kanalströmung

Bei den beschriebenen Turbulenzmodellen handelt es sich um Gleichungssysteme, mit denen im Prinzip beliebige dreidimensionale Strömungen beschrieben werden können. Die Verwendung von dreidimensionalen Gittern zur Simulation verursacht aber einen immensen Rechenaufwand. Der Aufwand lässt sich erheblich verringern, wenn das Gebiet des zu simulierenden Problems eine einfache, regelmäßige Geometrie aufweist, da dann durch Ausnutzung von Symmetrieeigenschaften die Dimensionalität verringert werden kann. So herrscht beispielsweise selbst in einem so einfachen geometrischen Gebiet wie einem Kanal mit Rechteckquerschnitt eine dreidimensionale Strömung. Ist aber das Verhältnis von Breite zu Höhe des Kanals groß genug, so kann man davon ausgehen, dass der Einfluss der Seitenwände, die die Höhe des Kanals festlegen, auf die Strömung vernachlässigt werden kann. Somit ist es dann ausreichend, die Strömung als nur zweidimensional zu beschreiben, weil es in einer Richtung keinerlei Gradienten gibt. Das Seitenverhältnis sollte dazu mindestens 10:1 betragen [24]. Dies gilt aber nur für die Mittelwerte der Geschwindigkeiten, denn auch bei einer mittleren Geschwindigkeit von 0 ist die Varianz dieser Geschwindigkeit bei einer turbulenten Strömung ungleich 0, es Schwankungen der Geschwindigkeit um den Mittelwert 0 gibt. Ist der Kanal sehr lang und ist nur das Profil der Strömung am Kanalende von Interesse, so verringert sich die Dimensionalität der Hauptströmung um eine weitere Dimension. Dieser Zustand einer Strömung, in dem sich die Mittelwerte der Größen und deren Varianzen nicht mehr mit dem weiteren Verlauf der Strömung ändern, nennt man auch „Steady State“. Dies ist der statistisch stationäre Zustand; bei nichtgemittelten Transportgleichungen kann es bei turbulenten Strömungen eine solche Stationarität wegen der ständigen turbulenten Schwankungen, die im Detail mitberechnet werden, nicht geben.

Wie wichtig ein ausreichend großes Seitenverhältnis für die Reduzierung der Dimensionalität einer Kanalströmung ist, kann man auf Abbildung 2.3 erkennen. Hier sind die experimentellen Ergebnisse einer vollentwickelten Strömung in ei-

2.3. Turbulenzmodellierung

nem Kanal mit einem Seitenverhältnis von 1:2,5 [25] im Vergleich mit Ergebnissen einer Direkten Numerischen Simulation (DNS), die eine zweidimensionale Strömung annimmt [26], bei gleicher Reynoldszahl dargestellt.

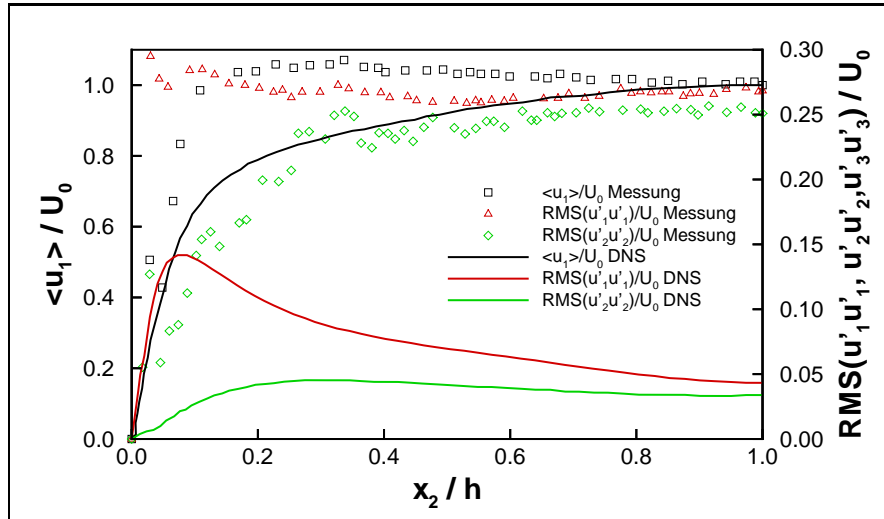


Abbildung 2.3.: Abhängigkeit des Steady State einer Kanalströmung vom Seitenverhältnis. Kreise: Experiment in einem Kanal mit einem Seitenverhältnis von 1:2,5 [25]. Linien: DNS einer zweidimensionalen Kanalströmung [26]. Aufgetragen sind die mittlere Geschwindigkeit in Hauptströmungsrichtung und die Varianzen der Geschwindigkeiten. Alle Werte wurden mit der Geschwindigkeit in der Kanalmitte normiert.

Die Gründe für die Unterschiede liegen in einer Verzerrung der Geschwindigkeitsprofile durch den Einfluss der Seitenwände einerseits und der Ausbildung einer Sekundärströmung durch den Einfluss der Ecken andererseits [27], wie dies aus Abbildung 2.4 hervorgeht.

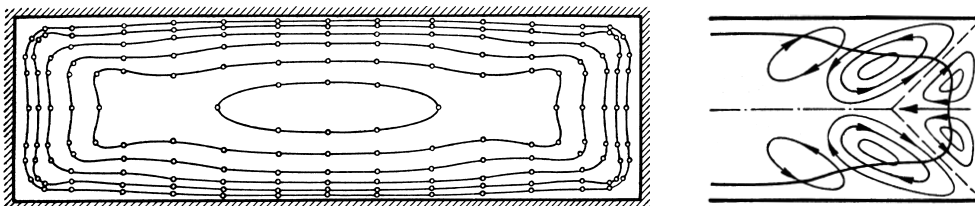


Abbildung 2.4.: Links: Isotachenlinien (geometrische Orte gleicher Geschwindigkeit) einer Strömung in einem Kanal mit Rechteckquerschnitt nach Nikuradse [28], entnommen aus [27], rechts: Sekundärströmung in den Ecken, entnommen aus [27]

Mit der Einführung der Grenzschichtannahme, in der vom statistisch stationären Zustand ausgegangen wird, wird eine Kanalströmung vereinfacht zu einer Strömung zwischen zwei planparallelen, unendlich ausgedehnten Platten, zwischen

2. Theoretische Grundlagen

denen sich das Fluid nur in einer Hauptströmungsrichtung, parallel zu den Platten, bewegt. Das bedeutet, dass die mittleren Geschwindigkeiten in Richtung senkrecht zu den Platten (\tilde{u}_2) einerseits und senkrecht zur Strömung, aber parallel zu den Platten (\tilde{u}_3) andererseits, vernachlässigt werden. Weiter gibt es, mit Ausnahme des Druckgradienten, der die Strömung aufrecht erhält, nur Gradienten senkrecht zur Wand. Die Geschwindigkeit des Fluids an der Wand wird der Geschwindigkeit der Wand gleichgesetzt; bewegen sich die Platten nicht, so ist die Geschwindigkeit des Fluids dort also gleich 0. Nach Definition eines Koordinatensystems, in dem x_1 für die Koordinate in Strömungsrichtung, x_2 für die Richtung senkrecht zur Wand und x_3 in einer Richtung parallel zur Wand, aber senkrecht zur Strömung steht und das seinen Ursprung an einer Wand hat, lassen sich diese Vereinfachungen für einen nicht bewegten Kanal folgendermaßen formulieren:

$$\left. \begin{aligned} \tilde{u}_2 = \tilde{u}_3 = 0 \quad \forall x_1, x_2, x_3 \\ \tilde{u}_1|_{x_2=0} = 0 \\ \frac{\partial \tilde{Q}}{\partial x_1} = \frac{\partial \tilde{Q}}{\partial x_3} = 0, \quad \tilde{Q} \in \{\tilde{u}_i, \widetilde{u_i'' u_j''}, \tilde{\phi}, \widetilde{u_i'' \phi''}\} \\ \frac{\partial \tilde{p}}{\partial x_3} = 0 \end{aligned} \right\} \quad (2.89)$$

Um verschiedene Strömungen miteinander vergleichen zu können, wird eine Reynoldszahl definiert. Dazu werden entweder die mittlere Strömungsgeschwindigkeit in der Mitte des Kanals U_0 und dem halben Plattenabstand h als charakteristischen Größen verwendet, woraus sich ergibt

$$Re_h = \frac{U_0 h}{\nu} \quad , \quad (2.90)$$

oder die mittlere Raumgeschwindigkeit U_A , die sich aus dem Quotienten von Volumenstrom und Strömungsquerschnittsfläche ergibt, und der Plattenabstand $2h$, um als Reynoldszahl zu definieren

$$Re_b = \frac{2U_A h}{\nu} \quad . \quad (2.91)$$

Im Falle einer laminaren Strömung sind beide Reynoldszahlen gleich, da bei dem parabelförmigen Geschwindigkeitsprofil $U_0 = 2U_A$ gilt [29]. Bei einem vollkommenen Blockprofil gilt dagegen $U_0 = U_A$ und somit steigt bei einer stark turbulenten Strömung Re_b auf das Doppelte von Re_h an. Um Profile direkt zu vergleichen, werden die mittleren Geschwindigkeiten und die Wurzel aus den gemittelten turbulenten Normalspannungen mit U_0 , die gemittelte Scherspannung dagegen mit

2.3. Turbulenzmodellierung

U_0^2 normiert, da sie bei einer Kanalströmung negativ ist. Der wandnormale Abstand wird durch den halben Plattenabstand dividiert. Somit lassen sich alle Größen dimensionslos darstellen. Vergleicht man die in dieser Weise dargestellten Ergebnisse für Reynoldszahlen von $Re_h = 12300, 30800$ und 61600 von Laufer [24] in Abbildung 2.5, so ist zu erkennen, dass die mittlere Strömungsgeschwindigkeit mit zunehmender Reynoldszahl immer steiler ansteigt. Die Maximalwerte der normierten Fluktuationen sinken dabei und verlagern sich zur Wand hin.

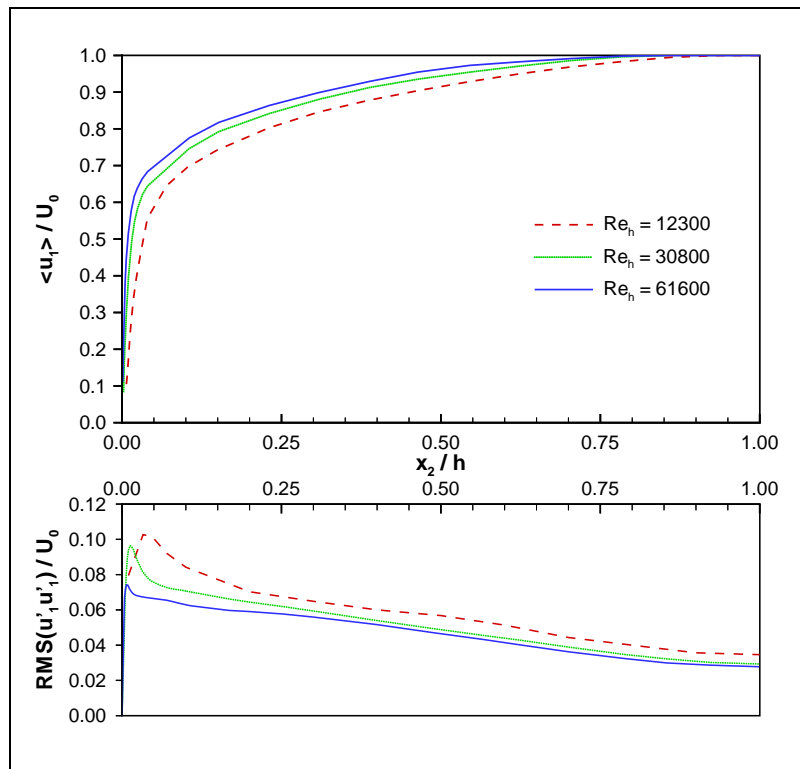


Abbildung 2.5.: Vollentwickelte turbulente Kanalströmung bei verschiedenen Reynoldszahlen [24]. Oben: Mittlere Strömungsgeschwindigkeit, unten: Root Mean Square (RMS)-Werte der turbulenten Fluktuationen der Strömungsgeschwindigkeit, jeweils normiert mit der Geschwindigkeit in der Kanalmitte U_0 , aufgetragen über dem mit der halben Kanalbreite h normierten Wandabstand.

Zur Charakterisierung der verschiedenen Bereiche in einer Grenzschichtströmung kann durch Normierung der mittleren Strömungsgeschwindigkeit und des Wandabstandes ein selbstähnliches Profil ermittelt werden [7, 8, 29], wie im Folgenden dargestellt wird. In einer voll entwickelten, statistisch stationären Kanalströmung gilt mit der Grenzschichtannahme (s. Gl.2.89) für die Impulstransportgleichung

2. Theoretische Grundlagen

(Gl.2.23) in Richtung senkrecht zur Wand

$$\frac{\partial \widetilde{\bar{\rho} u_2''^2}}{\partial x_2} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_2} \quad , \quad (2.92)$$

wenn die Gravitation vernachlässigt wird. Wie sich aus der Integration von Gleichung 2.92 ergibt, ist der Druckgradient in Längsrichtung über den Querschnitt konstant. Somit gilt für den Impuls in Hauptströmungsrichtung der Zusammenhang

$$-\mu \frac{\partial^2 \tilde{u}_1}{\partial x_2^2} + \frac{\partial \widetilde{\bar{\rho} u_1'' u_2''}}{\partial x_2} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_1} \quad . \quad (2.93)$$

Definiert man als Gesamtscherspannung

$$\tau = \mu \frac{\partial \tilde{u}_1}{\partial x_2} - \widetilde{\bar{\rho} u_1'' u_2''} \quad , \quad (2.94)$$

so ergibt sich ein linearer Verlauf von τ über die halbe Kanalhöhe h , wobei an der Wand die Gesamtscherspannung ihren höchsten Wert τ_w annimmt und in der Mitte gleich Null ist:

$$-\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_1} = \frac{\tau_w}{h} \quad , \quad (2.95)$$

$$\tau(x_2) = \tau_w \left(1 - \frac{x_2}{h}\right) \quad . \quad (2.96)$$

An der Wand, wo die Reynoldsspannungen verschwinden, liefert nur der viskose Teil einen Beitrag zu τ . Es muss deshalb die Beziehung

$$\tau_w = \mu \left(\frac{\partial \tilde{u}_1}{\partial x_2} \right) \Big|_{x_2=0} \quad (2.97)$$

gelten. Als charakterisierende Größen lassen sich nun die Wanschubspannungsgeschwindigkeit u_τ und die viskose Längenskala δ_ν definieren als

$$u_\tau = \sqrt{\frac{\tau_w}{\bar{\rho}}} \quad \text{und} \quad (2.98)$$

$$\delta_\nu = \frac{\nu}{u_\tau} \quad . \quad (2.99)$$

Mit diesen beiden Skalen wird nun eine Reynoldszahl

$$Re_\tau = \frac{u_\tau h}{\nu} = \frac{h}{\delta_\nu} \quad (2.100)$$

2.3. Turbulenzmodellierung

definiert. Damit lässt sich der Zustand einer Strömung auch durch das Verhältnis von halber Kanalhöhe (h) und viskoser Längenskala (δ_ν) charakterisieren.

Setzt man in Gleichung 2.100 statt der halben Kanalhöhe h den Abstand von der Wand x_2 ein, so erhält man einen dimensionslosen Wandabstand

$$y^+ = \frac{u_\tau x_2}{\nu} \quad . \quad (2.101)$$

Für den Verlauf des Geschwindigkeitsprofils in unmittelbarer Wandnähe ergibt sich aus den Gleichungen 2.101, 2.98 und einer Randbedingung nach Gleichung 2.97 mit der Integration nach x_2 die Beziehung

$$\frac{\tilde{u}_1}{u_\tau} = y^+ \quad . \quad (2.102)$$

Bei einer statistisch vollentwickelten turbulenten Kanalströmung eines newtonschen Fluids mit konstanter Dichte und Viskosität ist also die mittlere Strömungsgeschwindigkeit direkt an der Wand linear abhängig vom Wandabstand.

In etwas größerem Abstand von der Wand wird nach dem Prandtlschen Mischungswegansatz [29] angenommen, dass es eine linear vom Wandabstand abhängige Variable gibt, mit deren Hilfe sich die Gesamtschubspannung zu

$$\tau = \bar{\rho}(\kappa x_2)^2 \left(\frac{\partial \bar{u}_1}{\partial x_2} \right)^2 \quad (2.103)$$

bestimmen lässt. Nach Integration und unter Verwendung der Definitionen für y^+ und u_τ ergibt sich für den Verlauf des Geschwindigkeitsprofils

$$\frac{\tilde{u}_1}{u_\tau} = \frac{1}{\kappa} \ln y^+ + c \quad . \quad (2.104)$$

Die Konstanten κ und c müssen experimentell bestimmt werden. Nach v. Karman [30] haben sie folgende Werte: $\kappa = 0,41$, $c = 5,2$. Die Beziehung nach Gleichung 2.104 wird als logarithmisches Wandgesetz bezeichnet. Der logarithmische Zusammenhang kann überprüft werden, indem die gemittelte Geschwindigkeit wie in Gleichung 2.104 mit der Wandschubspannungsgeschwindigkeit normiert und über dem dimensionslosen Wandabstand y^+ halblogarithmisch aufgetragen wird. Wie in Abbildung 2.6 zu sehen ist, gilt dieses Gesetz nicht über den ganzen Querschnitt der Strömung: In unmittelbarer Wandnähe gibt es keinen logarithmischen, sondern einen linearen Zusammenhang, und in der Mitte der Strömung

2. Theoretische Grundlagen

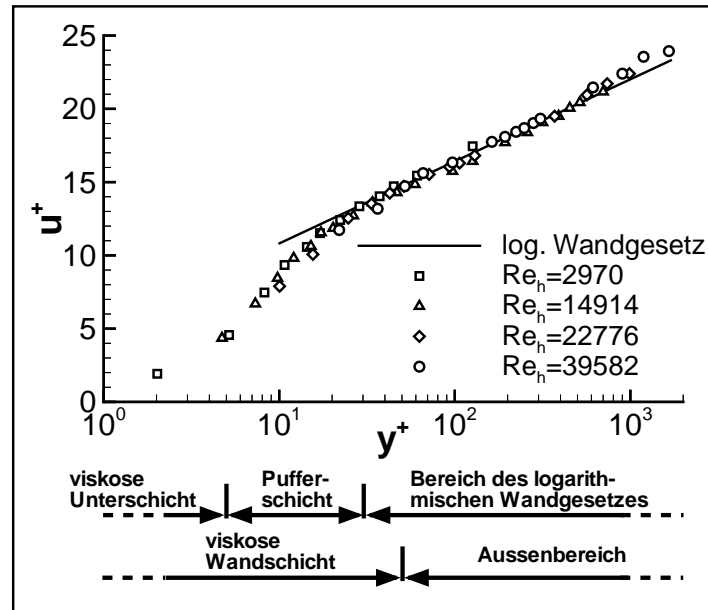


Abbildung 2.6.: Vollentwickelte turbulente Kanalströmung bei verschiedenen Reynoldszahlen, dargestellt in Universalkoordinaten. Entnommen aus [26].

weicht der Verlauf ebenfalls von einer Geraden in der halblogarithmischen Darstellung ab.

Anders als bei der mit U_0 normierten Darstellung ist aber in dieser Auftragung der Verlauf des Geschwindigkeitsprofils an der Wand für alle Re_h gleich; lediglich die Ausdehnung bei steigendem y^+ ändert sich mit steigender Reynoldszahl. Deshalb wird die Darstellung der Größen y^+ und $u^+ = \frac{\tilde{u}_1}{u_\tau}$ universelles Geschwindigkeitsprofil genannt. Die Reynoldsspannungen lassen sich in der gleichen Weise mit u_τ normiert auftragen. Aus Abbildung 2.6 geht hervor, dass eine Kanalströmung mit steigendem y^+ in mehrere Bereiche unterteilt werden kann [8]: Bei $y^+ < 5$ spricht man von der viskosen Unterschicht. In diesem Bereich dominiert der Einfluss der Viskosität gegenüber den turbulenten Scherspannungen, die in diesem Bereich vernachlässigbar sind. Daran schließt sich der Bereich der sogenannten Pufferschicht an, der sich bis $y^+ = 30$ erstreckt. Hier findet der Übergang vom linearen Verlauf zum logarithmischen Wandgesetz statt, das ab $y^+ > 30$ gilt. Ab $y^+ > 50$ kann der Einfluss der Viskosität auf die Gesamtschubspannung vernachlässigt werden. Deshalb bezeichnet man den Bereich $y^+ > 50$ auch als Aussenbereich, den Bereich $y^+ < 50$ als viskose Wandschicht.

2.4. Chemische Grundlagen

Allgemein lassen sich chemische Reaktionen formal als Bilanzgleichung darstellen mit

$$\nu_{E,1}A_1 + \nu_{E,2}A_2 + \cdots + \nu_{E,n}A_n = \nu_{P,1}A_1 + \cdots + \nu_{P,n}A_n \quad , \quad (2.105)$$

oder

$$\sum_{i=1}^N \nu_{E,i}A_i = \sum_{i=1}^N \nu_{P,i}A_i \quad .$$

Dabei ist A_i eine chemische Spezies, wie z.B. H_2 , und ν_i der zur Spezies i gehörende stöchiometrische Koeffizient. Der Index E bezeichnet Edukte, der Index P Produkte der Reaktion. Für Edukte ist ν_i negativ, für Produkte der Reaktion dagegen positiv. Das chemische System besteht aus N Spezies, die zugleich als Edukte und Produkte vorkommen können.

Für den zeitlichen Verlauf der Änderung der Konzentration einer Spezies bei einer einfachen Reaktion wird als Reaktionsgeschwindigkeit definiert

$$\frac{dc_i}{dt} = (\nu_{P,i} - \nu_{E,i})k_f \prod_{j=1}^N c_j^{a_{E,j}} \quad , \quad (2.106)$$

mit k_f als Geschwindigkeitskoeffizient und a_i als Reaktionsordnung bezüglich der Spezies i . Ist die betrachtete Reaktion reversibel, so kann auch für die Rückreaktion eine solche Reaktionsgeschwindigkeit definiert werden. Befindet sich das System im chemischen Gleichgewicht, so muss die Geschwindigkeit der Hinreaktion genau so groß sein wie die der Rückreaktion. Daraus ergibt sich für das Verhältnis der Geschwindigkeitskoeffizienten k_f und k_r

$$\frac{k_f}{k_r} = \prod_{i=1}^N c_i^{a_{P,i} - a_{E,i}} \quad . \quad (2.107)$$

Dieses Verhältnis wird als Gleichgewichtskonstante K_c bezeichnet. Sie kennzeichnet die Lage des Systems im chemischen Gleichgewicht. Sie kann auch aus thermodynamischen Größen bestimmt werden [1, 2] durch

$$K_c = \left(\frac{p_0}{RT} \right)^{\sum_{i=1}^N (\nu_{P,i} - \nu_{E,i})} e^{\left(\frac{\Delta_R S^0}{R} - \frac{\Delta_R \bar{H}^0}{RT} \right)} \quad . \quad (2.108)$$

2. Theoretische Grundlagen

Hierin sind $\Delta_R \bar{S}^0$ bzw. $\Delta_R \bar{H}^0$ die Standardentropie bzw. die Standardbildungsenthalpie der Spezies i . Somit kann bei Kenntnis des Geschwindigkeitskoeffizienten der Hinreaktion der Koeffizient der Rückreaktion berechnet werden.

Die Geschwindigkeitskoeffizienten der Reaktionen sind temperaturabhängig. Für diese Abhängigkeit wird der Arrheniusansatz

$$k = k_0 e^{-\frac{E_a}{RT}} \quad (2.109)$$

verwendet, wobei k_0 als präexponentieller Faktor bezeichnet wird. Auch er ist von der Temperatur abhängig. Diese Abhängigkeit ist schwächer als die von k . Man verwendet deshalb auch einen modifizierten Arrheniusansatz [1]

$$k = k'_0 T^b e^{-\frac{E'_a}{RT}} \quad (2.110)$$

Dabei ist E_a bzw. E'_a die Aktivierungsenergie, die nötig ist, um die Reaktion in Gang zu setzen.

Mit dem ersten Hauptsatz der Thermodynamik und der Definition der Enthalpie als Zustandsgröße des betrachteten Systems [1, 31] gilt

$$dH = \delta Q + \delta W \quad (2.111)$$

Bei stationären Verbrennungsprozessen, bei denen keinerlei Arbeit verrichtet wird, ist $\delta W = 0$. Damit ist die Änderung der Enthalpie dH gleich der mit der Umgebung ausgetauschten Wärme δQ . Um die numerische Lösung zu vereinfachen, wird bei der Zeitintegration der eigentlich gleichzeitig mit der Reaktion stattfindende Wärmeaustausch von der Reaktion getrennt betrachtet und die Reaktion als adiabat angenommen. Somit bleibt die Enthalpie des Systems bei der Reaktion erhalten. Wird als Enthalpie für den Zustand des Systems vor der Reaktion definiert

$$H_1 = \sum_{i=1}^N \nu_i \Delta H_i^0 + \int_{T_0}^{T_1} C_p dT \quad (2.112)$$

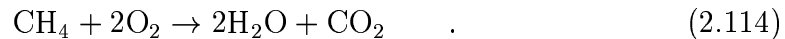
und analog für den Zustand nach der Reaktion

$$H_2 = \sum_{i=1}^N \nu_i \Delta H_i^0 + \int_{T_0}^{T_2} C_p dT + \Delta H_R \quad (2.113)$$

so ergibt sich aus der Änderung des Zustands, dass bei einer adiabaten Reaktion, bei der gilt $\delta Q = 0$, die freiwerdende Reaktionsenthalpie ΔH_R zu einer Temperaturänderung des Systems dT führt. Bei der Verbrennung eventuell auftretende Phasenübergänge und Mischungsvorgänge wurden bei dieser vereinfachten Darstellung vernachlässigt.

2.4.1. Globalreaktionen

Die ablaufenden Reaktionen können nun in unterschiedlich detaillierter Art betrachtet werden. Wird nur eine einzige Reaktion zur Beschreibung des chemischen Quellterms verwendet, so spricht man dabei von einer Global- oder Bruttoreaktion. Dabei wird in vereinfachender Weise angenommen, dass das chemische System ohne Zwischenschritte vom Ausgangszustand, den Edukten vor der Reaktion, in den Endzustand, den Produkten nach der Reaktion, übergeht. Ein Beispiel dafür ist die Bruttoreaktion für die Oxidation von Methan



Ausgehend von einer solchen Gleichung zur Beschreibung der Reaktion können die Geometrie einer Flamme und darüber hinaus auch die Profile für die Temperatur und die in der Gleichung enthaltenen Spezies bestimmt werden [32]. Da aber nur die Hauptkomponenten in die Berechnung der Spezieskonzentrationen eingehen, kann damit keinerlei Aussage über die Entstehung von Schadstoffen wie z.B. Stickoxiden oder Ruß und von Radikalen gemacht werden. Da bei Verbrennungsreaktionen die in der Flamme entstehenden Radikale, die im Experiment [33] durch Messung nachweisbar sind, eine große Rolle für die Zündung und die Flammenausbreitung spielen [1], hierbei völlig vernachlässigt werden, kann dabei ein großer Fehler auftreten. Da es darüberhinaus möglich ist, dass die Reaktion zu den in der Gleichung angegebenen Produkten nur in einem bestimmten Temperaturbereich stattfindet, bei einer Temperatur außerhalb dieses Bereiches jedoch ganz andere Produkte gebildet werden, ist die Verwendung einer solchen Bruttoreaktion auf einen geeigneten Bereich der Reaktionstemperatur beschränkt.

2. Theoretische Grundlagen

2.4.2. Elementarreaktionen

Bei einer eingehenderen Analyse der chemischen Zusammensetzung eines Reaktionsgemisches zeigt sich, dass die tatsächlich ablaufenden Vorgänge bei der chemischen Reaktion meist nicht durch eine einzige Globalreaktion, sondern durch eine Vielzahl von nacheinander und parallel verlaufenden Reaktionen zu beschreiben sind. Ein solches System von Reaktionsgleichungen wird als komplexer Reaktionsmechanismus bezeichnet. Bei immer tiefer gehender Verfeinerung der Reaktionsanalyse gelangt man schließlich zu einem Satz von Reaktionen, die die ablaufenden Vorgänge so beschreiben, wie sie auf molekularer Ebene tatsächlich auftreten. Solche Elementarreaktionen zeichnen sich dadurch aus, dass ihre Reaktionsordnung der Molekularität der beteiligten chemischen Spezies entspricht, wogegen die Ordnung für eine Globalreaktion immer experimentell bestimmt werden muss und oft nicht ganzzahlig und variabel ist. Der in Tabelle 2.1 dargestellte Mechanismus für die Wasserstoffoxidation zeigt, wie komplex die tatsächlich ablaufenden Vorgänge in Wirklichkeit sind: In ihm sind neun chemische Spezies enthalten, mit denen 19 reversible Reaktionen formuliert werden [1], [34].

Theoretisch sind noch mehr Reaktionen möglich: Insgesamt sind es 276; eine vollständige Liste ist im Anhang zu finden.

Aber nur die 38 im Mechanismus verwendeten sind relevant, da die restlichen unter den Bedingungen, wie sie bei der Verbrennung auftreten, nicht beobachtet werden; die Beschränkung auf diesen Satz von Reaktionen stellt damit praktisch keine Einschränkung der Verwendbarkeit des Mechanismus dar.

Ist ein solcher Satz von Elementarreaktionen vollständig, d.h. beinhaltet er alle möglichen Spezies und Reaktionen, so kann er für jede Temperatur verwendet werden. Er ist dann auch als Teilmechanismus für einen anderen Reaktionsmechanismus verwendbar, in dem zusätzlich noch weitere Spezies hinzukommen. So ist beispielsweise ein Mechanismus für die Oxidation von Wasserstoff ein Teilmechanismus eines Reaktionsmechanismus für die Oxidation von Methan und vollständig in diesem enthalten [1].

2.4. Chemische Grundlagen

Reaktion		A [mol,cm,s]	b	E_a [kJ/mol]	
O ₂ + H	⇌	OH + O	2,00·10 ¹⁴	0,0	70,3
H ₂ + O	⇌	OH + H	5,06·10 ⁴	2,67	26,3
H ₂ + OH	⇌	H ₂ O + H	1,00·10 ⁸	1,6	13,8
OH + OH	⇌	H ₂ O + O	1,50·10 ⁹	1,14	0,42
H + H + M*	⇌	H ₂ + M*	1,80·10 ¹⁸	-1,0	0,00
O + O + M*	⇌	O ₂ + M*	2,90·10 ¹⁷	-1,0	0,00
H + OH + M*	⇌	H ₂ O + M*	2,20·10 ²²	-2,0	0,00
H + O ₂ + M*	⇌	HO ₂ + M*	2,30·10 ¹⁸	-0,8	0,00
HO ₂ + H	⇌	OH + OH	1,50·10 ¹⁴	0,0	4,20
HO ₂ + H	⇌	H ₂ + O ₂	2,50·10 ¹³	0,0	2,90
HO ₂ + H	⇌	H ₂ O + O	3,00·10 ¹³	0,0	7,20
HO ₂ + O	⇌	OH + O ₂	1,80·10 ¹³	0,0	-1,70
HO ₂ + OH	⇌	H ₂ O + O ₂	6,00·10 ¹³	0,0	0,00
HO ₂ + HO ₂	⇌	H ₂ O ₂ + O ₂	2,50·10 ¹¹	0,0	-5,20
OH + OH + M*	⇌	H ₂ O ₂ + M*	3,25·10 ²²	-2,0	0,00
H ₂ O ₂ + H	⇌	H ₂ + HO ₂	1,70·10 ¹²	0,0	15,7
H ₂ O ₂ + H	⇌	H ₂ O + OH	1,00·10 ¹³	0,0	15,0
H ₂ O ₂ + O	⇌	OH + HO ₂	2,80·10 ¹³	0,0	26,8
H ₂ O ₂ + OH	⇌	H ₂ O + HO ₂	5,40·10 ¹²	0,0	4,20

Tabelle 2.1.: Reaktionsmechanismus für die Gasphase: H₂/Luft – Gemisch, entnommen aus [1]. Geschwindigkeitskoeffizienten für die Hinreaktionen: $k_f = A \cdot T^b \cdot e^{(-E_a/RT)}$; $[M^] = [H_2] + 6,5[H_2O] + 0,4[O_2] + 0,4[N_2]$; Geschwindigkeitkoeffizienten für die Rückreaktionen: $k_r = k_f/K_c$, K_c : Gleichgewichtskonstante*

Zur Berechnung von Bildungsgeschwindigkeiten der Spezies muss nun über alle Reaktionen (Index j) summiert werden

$$\frac{dc_i}{dt} = \sum_{j=1}^{n_r} (\nu_{P,ij} - \nu_{E,ij}) k_{f,j} \prod_{k=1}^N c_k^{\nu_{E,kj}} \quad . \quad (2.115)$$

Nachteilig bei der Verwendung von Elementarreaktionsmechanismen ist der wegen der großen Anzahl an Spezies und Reaktionen enorme Rechenaufwand im Vergleich mit Globalreaktionen. Dafür ist mit diesen Mechanismen auch die Simulation so komplexer Vorgänge wie der Schadstoffentstehung bei motorischer Verbrennung [5] und der katalytischen Stickoxidreduktion [35] möglich, da hier

2. Theoretische Grundlagen

auch kurzlebige, sehr reaktive Spezies wie z.B. Radikale, die bei der Schadstoffentstehung eine wichtige Rolle spielen, und deren Reaktionen enthalten sind, die bei der Verwendung einer Globalreaktion, die nur Edukte und Produkte berücksichtigt, vernachlässigt werden.

2.4.3. Reduzierte Mechanismen

Um den Rechenaufwand, der mit der Verwendung von Elementarreaktionsmechanismen verbunden ist, zu verringern, werden auch sogenannte reduzierte Mechanismen verwendet. Eine Möglichkeit zur Vereinfachung von komplexen, aus Elementarreaktionen bestehenden Reaktionsmechanismen ist eine Analyse hinsichtlich der Zeitskalen mit der sich das chemische System entwickelt. Da sich die Zeitskalen der einzelnen Reaktionen bei Verbrennungsprozessen um mehrere Größenordnungen unterscheiden, kann bei sehr schnellen Reaktionen angenommen werden, dass sich das System bezüglich dieser Reaktionen im Gleichgewicht befindet. Dann müssen nur die langsamer ablaufenden Reaktionen berechnet werden. Das schnelle Einstellen eines partiellen Gleichgewichts macht sich im Phasenraum des Systems, der durch die Massenbrüche der chemischen Spezies aufgespannt wird, dadurch bemerkbar, dass die Entwicklung des Systems auf den Gleichgewichtszustand hin entlang einer Kurve verläuft, die nur zu Beginn der Reaktionen dieselbe hohe Dimensionalität besitzt wie der vollständige Phasenraum. Nach kurzer Zeit werden nur noch wenige Dimensionen zur Beschreibung benötigt. Bei Vernachlässigung der schnellen Zeitskalen kann also die Entwicklung des chemischen Systems durch eine Kurve beschrieben werden, die als Funktion von nur wenigen Fortschrittsvariablen dargestellt werden kann. Dieses Verfahren wird ILDM (intrinsic low dimensional manifold) genannt [1, 36]. Für die Darstellung werden gewöhnlich die Enthalpie und ein oder zwei chemische Spezies als unabhängige Variable verwendet, in deren Abhängigkeit dann die Bildungsgeschwindigkeiten für alle Spezies tabelliert werden. Solche Tabellen kommen erfolgreich bei der Simulation von Wasserstoff/Luft-, Methan/Luft- und Heptan/Luft-Flammen [5, 36–39] zur Anwendung.

2.4.4. Heterogen katalysierte Reaktionen

Bei vielen in der technischen Anwendung interessanten Reaktionen werden Katalysatoren eingesetzt, um eine Reaktion bei bestimmten Reaktionsbedingungen überhaupt ablaufen zu lassen oder bei komplexen Reaktionen die Ausbeute an erwünschtem Zielprodukt im Vergleich zu unerwünschten Nebenprodukten zu steigern, in dem selektiv erwünschte Reaktionspfade bei Parallelreaktionen begünstigt werden. Die Wirkungsweise eines Katalysators besteht darin, die Aktivierungsenergie einer Reaktion herabzusetzen, wie dies in Abbildung 2.7 dargestellt ist.

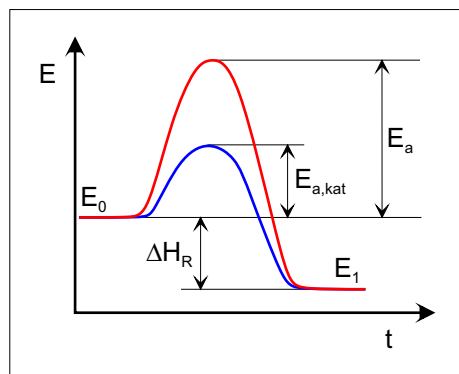


Abbildung 2.7.: Herabsetzung der Aktivierungsenergie (E_a bzw. $E_{a,kat}$) durch einen Katalysator. Rote Kurve: Reaktion ohne Katalysator, blaue Kurve: mit Katalysator. Die Reaktionsenthalpie ΔH_R ist in beiden Fällen gleich.

Liegt der Katalysator als vom Reaktionsgemisch verschiedene Phase vor, so wird der Vorgang als heterogene Katalyse bezeichnet. Bei detaillierter Betrachtung der ablaufenden Vorgänge zeigt sich, dass diese Herabsetzung durch Zwischenreaktionen bewirkt wird. Eine Beschreibung dieser Reaktionen ist auf die gleiche Weise möglich wie im vorangehenden Abschnitt beschrieben. So gibt es beispielsweise detaillierte Mechanismen für die Oxidation von Wasserstoff auf Platin, die partielle Oxidation von Methan auf Platin oder die Reduktion von Stickoxiden auf Platin und Rhodium [40–45]. Der Mechanismus für die Wasserstoff-Oxidation auf Platin ist in Tabelle 2.2 dargestellt.

Zusätzlich zu den homogenen Reaktionen müssen dabei Adsorptions- und Desorptionsreaktionen sowie und Vorgänge auf der Katalysatoroberfläche wie Oberflächendiffusion und Oberflächenreaktionen berücksichtigt werden. Liegt der Ka-

2. Theoretische Grundlagen

Reaktion	A [mol, cm, s]	E_a [kJ/mol]	γ
$H_2 + 2Pt(s) \rightarrow 2H(s)$			0,046
$2H(s) \rightarrow H_2 + 2Pt(s)$	$3,7 \cdot 10^{21}$	$67,4 - 6\Theta_H$	
$H + Pt(s) \rightarrow H(s)$			1,0
$O_2 + Pt(s) \rightarrow 2O(s)$			0,07
$2O(s) \rightarrow O_2 + Pt(s)$	$3,7 \cdot 10^{21}$	$213,2 - 60\Theta_O$	
$O + Pt(s) \rightarrow O(s)$			1,0
$H_2O + Pt(s) \rightarrow H_2O(s)$			0,75
$H_2O(s) \rightarrow H_2O + Pt(s)$	$1,0 \cdot 10^{13}$	40,3	
$OH + Pt(s) \rightarrow OH(s)$			1,0
$OH(s) \rightarrow OH + Pt(s)$	$1,0 \cdot 10^{13}$	192,8	
$H(s) + O(s) \rightleftharpoons OH(s) + Pt(s)$	$3,7 \cdot 10^{21}$	11,5	
$H(s) + OH(s) \rightleftharpoons H_2O(s) + Pt(s)$	$3,7 \cdot 10^{21}$	17,4	
$OH(s) + OH(s) \rightleftharpoons H_2O(s) + O(s)$	$3,7 \cdot 10^{21}$	48,2	

Tabelle 2.2.: Detaillierter Mechanismus für die Oxidation von H_2 mit Luft auf einem Platin-Katalysator. Entnommen aus [41]. γ ist der Haftkoeffizient, θ der Bedeckungsgrad. Der Geschwindigkeitskoeffizient der Rückreaktion wird aus der Gleichgewichtskonstanten berechnet wie bei Tabelle 2.1.

talysator nicht als glatte Fläche vor, so treten darüberhinaus auch Unterschiede in der Reaktivität der Adsorptionsplätze auf [46–48]. Bei Katalysatoren, die auf ein poröses Medium aufgebracht wurden, sind auch Transportvorgänge in den Poren zu betrachten [45].

2.5. Grundlagen der Monte-Carlo-PDF-Methode

Wegen der im vorhergehenden Abschnitt dargestellten nichtlinearen Abhängigkeit der Geschwindigkeitskoeffizienten ist die Behandlung des gemittelten chemischen Quellterms $\bar{\rho}\bar{S}_\alpha$ problematisch. Wegen des exponentiellen Zusammenhangs gilt nämlich $\bar{\rho}\bar{S}_\alpha(T, \phi_\alpha) \neq \bar{\rho}S_\alpha(\bar{T}, \bar{\phi}_\alpha)$.

Um die Probleme, die sich durch die Mittelung des chemischen Quellterms ergeben zu vermeiden, kann anstelle der gemittelten Navier-Stokes-Gleichungen 2.22, 2.23 und 2.24 eine Transportgleichung der Wahrscheinlichkeitsdichtefunk-

2.5. Grundlagen der Monte-Carlo-PDF-Methode

tion (engl. PDF = probability density function) der das System beschreibenden Größen aufgestellt und gelöst werden. Mittelwerte und Varianzen der Variablen werden dann durch Integration dieser PDF über den Zustandsraum bestimmt, der durch die Variablen aufgespannt wird. Es ist dabei möglich, nur einen Teil der zur Beschreibung der Strömung nötigen Größen durch eine PDF-Transportgleichung zu berechnen und für die anderen Variablen die Navier-Stokes-Gleichungen auf einem Rechengitter zu lösen. Je nachdem, welche Größen in der PDF enthalten sind, wird sie als PDF für Skalare (engl. scalar PDF), gebundene PDF für Skalare und Geschwindigkeiten (engl. scalar-velocity-joint-PDF) oder gebundene PDF für Skalare, Geschwindigkeiten und turbulentes Zeitmaß (engl. scalar-velocity-turbulent-frequency-joint-PDF) bezeichnet. So gibt es hybride Computerprogramme zur Simulation turbulenter reaktiver Strömungen, die nur die chemischen Spezies in Form einer PDF behandeln, die Strömung aber mit einem Navier-Stokes-Löser berechnen [5, 49, 50]. Für die Bestimmung der benötigten Felder der Mittelwerte der die Strömung beschreibenden Größen wird die PDF, die für jeden Ort und für jeden Zeitpunkt der Rechnung aufgestellt werden kann, an den Gitterknoten ausgewertet.

Wegen der hohen Dimensionalität des Zustandsraums und der komplexen Abhängigkeiten der chemischen Spezies voneinander kann im Allgemeinen keine analytische Form für die PDF angegeben werden. Meist werden Annahmen über die Form der PDF getroffen, die ihr Aussehen und ihre Eigenschaften festlegen. Oft werden dafür Gauss- oder β -Funktionen verwendet [51, 52]. Dabei werden zusätzlich noch Annahmen über die Kovarianzen der verschiedenen Variablen gemacht, wie z.B. die stochastische Unabhängigkeit der chemischen Spezies, indem ein Produktansatz verwendet wird. Solche Annahmen schränken aber die PDF ein. Ist einmal ein Ansatz gewählt worden, kann die PDF nur Formen annehmen, die mit diesem Ansatz darstellbar sind.

Alternativ kann aber die PDF auch als Ensemble stochastischer Partikel realisiert werden, für die dann eine Transportgleichung gelöst wird [3]. Die Eigenschaften der stochastischen Partikel sind durch die Variablen definiert. Eine feste Form wird der PDF dabei nicht vorgegeben. Aus den Partikeln können durch Ensemble-Mittelung die Momente der PDF, wie Mittelwerte, Varianzen und Kovarianzen der Variablen, berechnet werden. Die Eigenschaften der stochastischen Partikel

2. Theoretische Grundlagen

ändern sich gemäß der Transportgleichung der PDF. Auch bei dieser Methode sind gemischte Modelle möglich [5].

Monte-Carlo-Methoden werden auch in anderen Gebieten wie z.B. zur Simulation von Polymerisationen, Schmelzprozessen und quantenphysikalischen Vorgängen verwendet [53–55].

2.5.1. Monte-Carlo-PDF

Die zur Beschreibung des Systems verwendeten stochastischen Partikel werden formal als Diracsche δ -Funktionen dargestellt. Die Dirac-Funktion gehört zur Klasse der verallgemeinerten Funktionen [56] und ist auf verschiedene Arten definierbar.

Eine Möglichkeit der Definition der δ -Funktion bietet die Heavisidefunktion [3, 56]

$$H(z) = \begin{cases} 0 & \text{für } z \leq 0 \\ 1 & \text{für } z > 0 \end{cases} . \quad (2.116)$$

H wird auch als Sprungfunktion bezeichnet und gehört wie die δ -Funktion zu den verallgemeinerten Funktionen [56]. Ein Sprung der Höhe a an der Stelle b kann mit Hilfe der Heaviside-Funktion dargestellt werden als $aH(z-b)$. Ausgehend von der Sprungfunktion kann die Dirac-Funktion definiert werden als verallgemeinerte Ableitung [56] mit

$$\delta(z) = \frac{dH(z)}{dz} . \quad (2.117)$$

Eine wichtige Eigenschaft der δ -Funktion, die ebenfalls zur Definition herangezogen werden kann [3, 56], ist das „Ausblenden“ bei Anwendung mit anderen Funktionen $g(z)$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(z) g(z) dz = g(0) . \quad (2.118)$$

Analog zum Sprung der Heaviside-Funktion gilt für die δ -Funktion

$$\int_{-\infty}^{\infty} a\delta(b-c) g(c) dc = ag(b) . \quad (2.119)$$

2.5. Grundlagen der Monte-Carlo-PDF-Methode

Zusätzlich wird für sie festgelegt [56], dass gelten soll

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(z) dz = 1 \quad . \quad (2.120)$$

Ihre Form kann anschaulich dargestellt werden [56] durch eine Approximation $\delta^\#$

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \delta^\#(\epsilon, z) = \begin{cases} 0 & \text{für } z \neq 0 \\ \infty & \text{für } z = 0 \end{cases} \quad . \quad (2.121)$$

Andere Eigenschaften der Delta- und Heaviside-Funktion sind zu finden in [56].

Sei nun $F_z(\zeta)$ eine Wahrscheinlichkeitsverteilung für die Zufallsgröße z , mit der die Wahrscheinlichkeit P bestimmt werden kann, dass ein Ereignis $A : z < \zeta$ eintritt, also z kleiner als ein vorgegebener Wert ζ ist. Es sei somit

$$P(A) = F_z(\zeta) \quad , \quad (2.122)$$

und die zugehörige Dichte der Wahrscheinlichkeitsverteilung sei

$$f_z(\zeta) = \frac{\partial F_z(\zeta)}{\partial \zeta} \quad . \quad (2.123)$$

Bei Definition des Mittelwertes als Erwartungswert einer Zufallsgröße gilt dann für eine beliebige Funktion der Zufallsgröße g

$$\int_{-\infty}^{\infty} g(\zeta) f_z(\zeta) d\zeta = \langle g(z) \rangle \quad . \quad (2.124)$$

Die Heaviside-Funktion nimmt bei Eintreten des oben beschriebenen Ereignisses A den Wert 1 an; tritt A nicht ein, so ist sie gleich Null. Für den Erwartungswert von H gilt dann [3]

$$\begin{aligned} \langle H(\zeta - z) \rangle &= 1 \cdot P(A) + 0 \cdot (1 - P(A)) \\ &= F_z(\zeta) \quad . \end{aligned} \quad (2.125)$$

Differentiation beider Seiten von Gleichung 2.125 führt zu

$$\langle \delta(\zeta - z) \rangle = f_z(\zeta) \quad . \quad (2.126)$$

2. Theoretische Grundlagen

Somit ist der Erwartungswert der Delta-Funktion an einer Stelle ζ gleich der PDF.

Für ein Ensemble aus N Partikeln, von denen jedes mit einem Wert der Zufallsgröße z belegt ist, ist der Ensemble-Mittelwert definiert [3] als

$$\langle z \rangle_N = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N z^{(n)} \quad . \quad (2.127)$$

dabei ist $z^{(n)}$ der Wert von z , den das Partikel n hat. Für den Ensemble-Mittelwert einer Funktion $g(z)$ gilt analog

$$\langle g(z) \rangle_N = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N g(z^{(n)}) \quad . \quad (2.128)$$

Damit lässt sich als diskretisierte PDF $f_z(\zeta)_N$ angeben

$$\begin{aligned} f_z(\zeta)_N &= \langle \delta(\zeta - z) \rangle_N \\ &= \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \delta(\zeta - z^{(n)}) \quad . \end{aligned} \quad (2.129)$$

Die zugehörige Wahrscheinlichkeitsverteilung lautet

$$\begin{aligned} F_z(\zeta)_N &= \langle H(\zeta - z) \rangle_N \\ &= \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N H(\zeta - z^{(n)}) \quad . \end{aligned} \quad (2.130)$$

Die Zufallsgröße z ist gemäß $F_z(\zeta)$ verteilt. Damit sind $f_z(\zeta)_N$ und $F_z(\zeta)_N$ Schätzwerte für $f_z(\zeta)$ und $F_z(\zeta)$. Die stetigen Funktionen sind Erwartungswerte der diskreten Funktionen. Gleichgültig, wie groß die Partikelanzahl wird, sind die diskretisierten Funktionen nie glatt: Die Dichtefunktion bleibt ein Ensemble von Dirac-Peaks, die Verteilung bleibt ein Treppenzug. Bei großem Partikelensemble nähert sich aber der Verlauf des Treppenzugs der diskreten Verteilung dem Verlauf der stetigen Verteilung an. Die beiden Formen der Funktionen liefern für genügend große N dieselben statistischen Momente.

Für mehrere Zufallsgrößen z_1, z_2, \dots, z_M , die zur kürzeren Darstellung zu einem Vektor \vec{z} zusammengefasst werden, ist die Wahrscheinlichkeit, dass jede Komponente von \vec{z} kleiner ist als die entsprechende Komponente von $\vec{\zeta}$ gegeben durch

2.5. Grundlagen der Monte-Carlo-PDF-Methode

die Wahrscheinlichkeitsverteilung

$$F_{\vec{z}}(\vec{\zeta}) = P(\vec{z} < \vec{\zeta}) \quad . \quad (2.131)$$

Die dazugehörige Dichte der Verteilung hat die Form

$$f_{\vec{z}}(\vec{\zeta}) = \frac{\partial^M}{\prod_{m=1}^M \partial z_m} F_{\vec{z}}(\vec{\zeta}) \quad . \quad (2.132)$$

Entsprechend lässt sich eine diskretisierte gebundene PDF für mehrere Zufallsvariablen definieren als

$$\begin{aligned} f_{\vec{z}}(\vec{\zeta})_N &= \langle \delta(\vec{\zeta} - \vec{z}) \rangle \\ &= \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \left[\prod_{m=1}^M (\delta(\zeta_m^{(n)} - z_m^{(n)})) \right] \quad . \end{aligned} \quad (2.133)$$

Diese Zusammenhänge sind in Abbildung 2.8 dargestellt.

Für das Beispiel wurden die Geschwindigkeiten U und V der stochastischen Partikel verwendet, die sich während eines Zeitschritts eines Durchlaufs des in dieser Arbeit erstellten Simulationsprogramms in einer Zelle des Rechengitters befanden (rote Punkte). Zum Vergleich wurde eine Joint-PDF erzeugt, die die Form einer Gaußschen Glockenkurve (Linien) hat und denselben Mittelwert und dieselben Varianzen und Kovarianz aufweist wie die durch die Partikel repräsentierte Monte-Carlo-PDF. Für den Vergleich der Randverteilungen und deren Dichten (auf der rechten Seite) wurde wegen der besseren Übersichtlichkeit in der Darstellung die Anzahl der Partikel reduziert.

2.5.2. Herleitung der PDF-Transportgleichung

Bei Verwendung einer PDF zur Beschreibung einer reaktiven Strömung ist die gebundene Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion für die Geschwindigkeiten in alle Raumrichtungen \vec{u} , die skalaren Größen, d.h. die insgesamt $\sigma - 1$ chemischen Spezies sowie die Enthalpie oder die Temperatur zusammengefasst in $\vec{\phi}$ und die turbulente Frequenz ω^* . Die PDF ist zu jedem Zeitpunkt t der Simulation an jedem Ort \vec{x} des Rechengebiets bestimmbar. Zeit und Ort sind für eine Ein-Punkt-PDF, wie sie hier beschrieben und verwendet wird [3], Parameter. Eine solche PDF enthält zu jeder Zeit und für jeden Ort getrennt Informationen

2. Theoretische Grundlagen

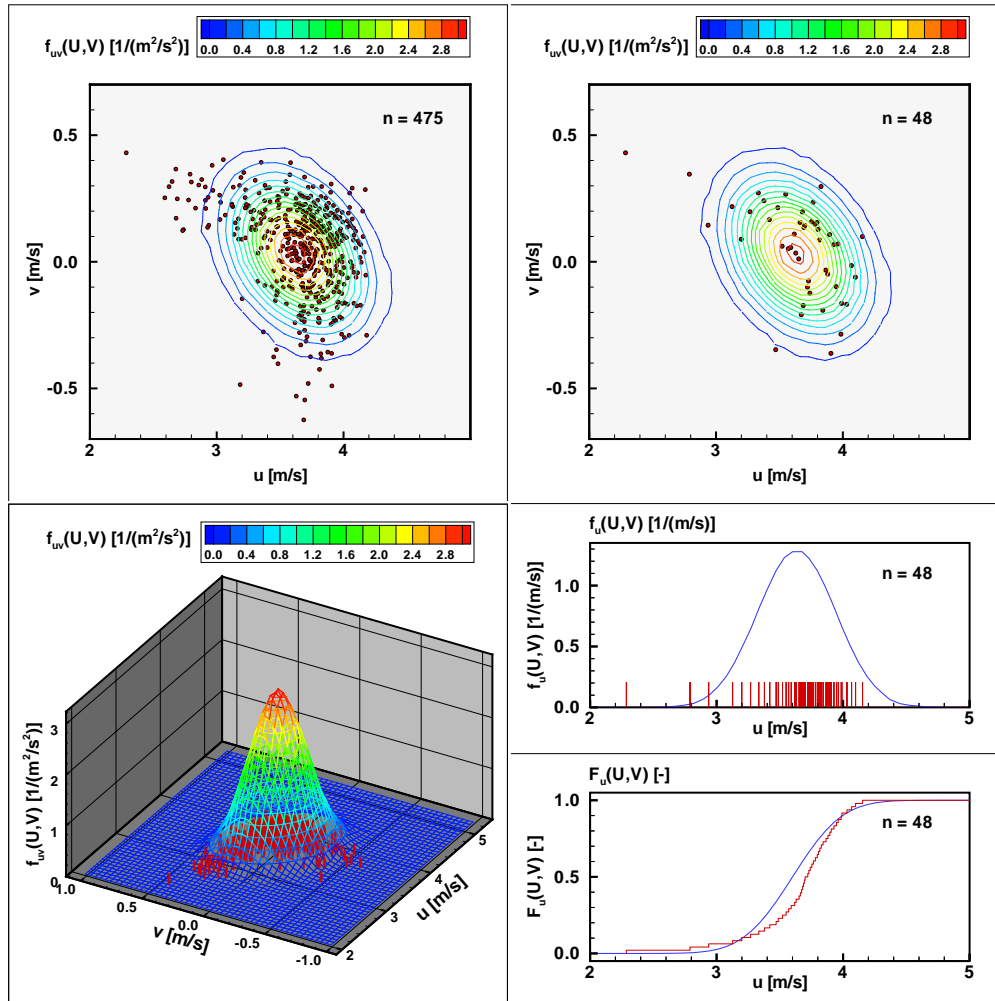


Abbildung 2.8.: Stetige und diskrete Repräsentation einer Wahrscheinlichkeitsverteilung und einer Dichtefunktion. Links: Ensemble aus 475 Partikeln (rot). Rechts oben: Joint-PDF, Ensemble aus 48 Partikeln. Rechts unten: Randverteilung und dazugehörige Dichtefunktion

über die Verteilung der Variablen. Über den Zusammenhang zwischen mehreren Punkten ist keine Information enthalten. Zur Kennzeichnung dieser Abhängigkeit wird die gebundene Geschwindigkeits-Skalar-Frequenz-PDF geschrieben als $f_{\vec{u}\vec{\phi}\omega^*}(\vec{V}, \vec{\psi}, \Omega; \vec{x}, t)$. Der Übersichtlichkeit wegen werden die Zufallsgrößen als Index von jetzt an weggelassen. Die diskrete Repräsentation dieser PDF lautet

$$f_N(\vec{V}, \vec{\psi}, \Omega; \vec{x}, t) = \left\langle \left(\prod_{i=1}^3 \delta(u_i - V_i) \right) \left(\prod_{\alpha=1}^{\sigma} \delta(\phi_\alpha - \psi_\alpha) \right) \delta(\omega^* - \Omega) \right\rangle . \quad (2.134)$$

2.5. Grundlagen der Monte-Carlo-PDF-Methode

Als Abkürzung für die Produkte der Delta-Funktionen sei

$$f^\# = \left(\prod_{i=1}^3 \delta(u_i - V_i) \right) \left(\prod_{\alpha=1}^{\sigma} \delta(\phi_\alpha - \psi_\alpha) \right) \delta(\omega^* - \Omega) \quad (2.135)$$

definiert. Nach der Kettenregel gilt bei der partiellen Ableitung für $f^\#$

$$\frac{\partial f^\#}{\partial t} = \frac{\partial f^\#}{\partial u_j} \frac{\partial u_j}{\partial t} + \frac{\partial f^\#}{\partial \phi_\alpha} \frac{\partial \phi_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial f^\#}{\partial \omega^*} \frac{\partial \omega^*}{\partial t} \quad (2.136)$$

und

$$\frac{\partial f^\#}{\partial x_i} = \frac{\partial f^\#}{\partial u_j} \frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial f^\#}{\partial \phi_\alpha} \frac{\partial \phi_\alpha}{\partial x_i} + \frac{\partial f^\#}{\partial \omega^*} \frac{\partial \omega^*}{\partial x_i} . \quad (2.137)$$

Die Differentiation nach den Variablen u_j , ϕ_α und ω^* kann nach der Kettenregel ersetzt werden durch die Ableitung nach den Variablen V_j , ψ_α bzw. Ω , da

$$\begin{aligned} g &= g(a - b) \\ \frac{\partial g}{\partial a} &= \frac{\partial g}{\partial(a - b)} \frac{\partial(a - b)}{\partial a} = \frac{\partial g}{\partial(a - b)} \\ \frac{\partial g}{\partial b} &= \frac{\partial g}{\partial(a - b)} \frac{\partial(a - b)}{\partial b} = -\frac{\partial g}{\partial(a - b)} = -\frac{\partial g}{\partial a} . \end{aligned}$$

Damit gilt für die partiellen Ableitungen von $f^\#$

$$\frac{\partial f^\#}{\partial t} = -\frac{\partial f^\#}{\partial V_j} \frac{\partial u_j}{\partial t} - \frac{\partial f^\#}{\partial \psi_\alpha} \frac{\partial \phi_\alpha}{\partial t} - \frac{\partial f^\#}{\partial \Omega} \frac{\partial \omega^*}{\partial t} \quad (2.138)$$

und

$$\frac{\partial f^\#}{\partial x_i} = -\frac{\partial f^\#}{\partial V_j} \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{\partial f^\#}{\partial \psi_\alpha} \frac{\partial \phi_\alpha}{\partial x_i} - \frac{\partial f^\#}{\partial \Omega} \frac{\partial \omega^*}{\partial x_i} . \quad (2.139)$$

Gleichung 2.139 wird mit u_i multipliziert, zu Gleichung 2.138 addiert und das Ergebnis mit ρ multipliziert. Dies führt zu

$$\begin{aligned} \rho \left(\frac{\partial f^\#}{\partial t} + u_i \frac{\partial f^\#}{\partial x_i} \right) &= -\frac{\partial f^\#}{\partial V_j} \left(\rho \frac{\partial u_j}{\partial t} + \rho u_i \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \\ &\quad - \frac{\partial f^\#}{\partial \psi_\alpha} \left(\rho \frac{\partial \phi_\alpha}{\partial t} + \rho u_i \frac{\partial \phi_\alpha}{\partial x_i} \right) \\ &\quad - \frac{\partial f^\#}{\partial \Omega} \left(\rho \frac{\partial \omega^*}{\partial t} + \rho u_i \frac{\partial \omega^*}{\partial x_i} \right) . \end{aligned} \quad (2.140)$$

2. Theoretische Grundlagen

Werden die Gleichungen 2.1, 2.2 und 2.3 in die letzte Gleichung eingesetzt und der Drucks p in Mittelwert \bar{p} und Schwankung p' zerlegt, so ergibt sich

$$\begin{aligned} & \rho \left(\frac{\partial f^\#}{\partial t} + u_i \frac{\partial f^\#}{\partial x_i} \right) + \frac{\partial f^\#}{\partial V_j} \left(\rho g_j - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j} \right) + \frac{\partial f^\#}{\partial \psi_\alpha} (\rho S_\alpha) \\ & = \frac{\partial f^\#}{\partial V_j} \left(\frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + \frac{\partial p'}{\partial x_j} \right) + \frac{\partial f^\#}{\partial \psi_\alpha} \left(\frac{\partial J_j^\alpha}{\partial x_j} \right) \\ & - \frac{\partial f^\#}{\partial \Omega} \left(\rho \frac{\partial \omega^*}{\partial t} + \rho u_i \frac{\partial \omega^*}{\partial x_i} \right) . \end{aligned} \quad (2.141)$$

Da außer $f^\#$ keine Variable von V_j , ψ_α oder Ω abhängt, können die Ausdrücke in den Klammern in die partiellen Ableitungen hineingezogen werden. Nun wird der Erwartungswert gebildet. Er ist, wie weiter oben festgestellt, gleich dem Mittelwert. Für die linke Seite der Gleichung ist das ohne Probleme möglich, da alle Ausdrücke geschlossen sind: Haben die Variablen u_j und ϕ_α bestimmte Werte V_j bzw ψ_α angenommen, so sind alle anderen Terme festgelegt. Anders sieht es auf der rechten Seite der Gleichung aus: Da mit der verwendeten Ein-Punkt-PDF Informationen an jedem Ort und für jede Zeit separat zur Verfügung stehen, aber keinerlei Informationen über Beziehungen zu anderen Orten und Zeiten, sind alle Terme, die von Gradienten von Zufallsvariablen abhängen, bei der Mittelung nicht geschlossen. Dies gilt für die diffusiven Transportterme, die nach der Mittelung als bedingte Mittelwerte dargestellt werden [3, 19, 57]. So steht

$$\left\langle f^\# \frac{\partial J_j^\alpha}{\partial x_j} \right\rangle = f \left\langle \frac{\partial J_j^\alpha}{\partial x_j} \Big|_{\vec{u}=\vec{V}, \vec{\phi}=\vec{\psi}, \omega^*=\Omega} \right\rangle \quad (2.142)$$

für den mittleren diffusiven Stoffstrom J_j^α unter der Bedingung, dass \vec{u} , $\vec{\phi}$ und ω^* bestimmte Werte \vec{V} , $\vec{\psi}$ bzw. Ω annehmen. Analog gilt für den diffusiven Impulstransport

$$\left\langle f^\# \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + \frac{\partial p'}{\partial x_j} \right\rangle = f \left\langle \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + \frac{\partial p'}{\partial x_j} \Big|_{\vec{u}=\vec{V}, \vec{\phi}=\vec{\psi}, \omega^*=\Omega} \right\rangle . \quad (2.143)$$

Der Ausdruck, der die turbulente Frequenz enthält, ist nicht geschlossen, weil für die Größe ω^* bisher noch keine Transportgleichung definiert wurde. Für die Mittelung von allen Ausdrücken auf der rechten Seite müssen deshalb Modelle

2.5. Grundlagen der Monte-Carlo-PDF-Methode

verwendet werden. Die Transportgleichung für die PDF f lautet somit [3]

$$\begin{aligned}
 & \rho \left(\frac{\partial f}{\partial t} + u_i \frac{\partial f}{\partial x_i} \right) + \frac{\partial}{\partial V_j} \left[f \left(\rho g_j - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} [f (\rho S_\alpha)] \\
 &= \frac{\partial}{\partial V_j} \left(f \left\langle \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + \frac{\partial p'}{\partial x_j} \Big|_{\vec{u}=\vec{V}, \vec{\phi}=\vec{\psi}, \omega^*=\Omega} \right\rangle \right) \\
 &+ \frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} \left(f \left\langle \frac{\partial J_j^\alpha}{\partial x_j} \Big|_{\vec{u}=\vec{V}, \vec{\phi}=\vec{\psi}, \omega^*=\Omega} \right\rangle \right) \\
 &- \frac{\partial}{\partial \Omega} \left(f \left\langle \rho \frac{\partial \omega^*}{\partial t} + \rho u_i \frac{\partial \omega^*}{\partial x_i} \Big|_{\vec{u}=\vec{V}, \vec{\phi}=\vec{\psi}, \omega^*=\Omega} \right\rangle \right) . \tag{2.144}
 \end{aligned}$$

Für kompressible Strömungen wird eine dichtegewichtete PDF

$$\tilde{f} = \frac{\rho f}{\langle \rho \rangle} \tag{2.145}$$

definiert, um analog zu den gemittelten Navier-Stokes-Gleichungen Favre-Mittelwerte verwenden zu können. Davon ausgehend wird eine Massen-Dichte-Funktion (engl. mass-density-function, MDF) formuliert [3, 57]

$$\begin{aligned}
 \mathcal{F} &= f \rho \\
 &= \langle \rho \rangle \tilde{f} . \tag{2.146}
 \end{aligned}$$

Wegen der Ortsabhängigkeit der Dichte ist $\mathcal{F} = \mathcal{F}(\vec{V}, \vec{\psi}, \Omega, \vec{x}; t)$. Da \mathcal{F} die Normierungsbedingung nicht erfüllt, ist sie keine PDF:

$$\begin{aligned}
 \iiint \mathcal{F} d\vec{V} d\vec{\psi} d\Omega &= \langle \rho \rangle \quad \text{und deshalb} \\
 \iiint \mathcal{F} d\vec{V} d\vec{\psi} d\Omega d\vec{x} &= M . \tag{2.147}
 \end{aligned}$$

M ist dabei die Gesamtmasse des Systems. Durch Normierung mit M kann \mathcal{F} aber zu einer PDF umgeformt werden. Für \mathcal{F} gilt analog zu Gleichung 2.124

$$\iiint g \mathcal{F} d\vec{V} d\vec{\psi} d\Omega = \langle \rho \rangle \tilde{g} , \tag{2.148}$$

wobei g eine beliebige Funktion von \vec{V} und $\vec{\psi}$ ist. Somit sind aus der MDF Felder von Favre-Mittelwerten bestimmbar. Die diskrete Repräsentation von \mathcal{F} ist

2. Theoretische Grundlagen

definiert durch

$$\mathcal{F}_N = \frac{M}{N} \left(\prod_{i=1}^3 \delta(u_i - V_i) \right) \left(\prod_{\alpha=1}^{\sigma} \delta(\phi_\alpha - \psi_\alpha) \right) \cdot \left(\prod_{i=1}^3 \delta(x_i - \xi_i) \right) \delta(\omega^* - \Omega) \quad . \quad (2.149)$$

Da auch in \mathcal{F} keine Informationen über Gradienten enthalten sind, lassen sich die bedingten Mittelwerte nicht auflösen, wenn analog zu Gleichung 2.144 eine Transportgleichung für \mathcal{F} formuliert wird [3, 57]:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial t} + u_i \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial V_j} \left[\mathcal{F} \left(g_j - \frac{1}{\rho} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} [\mathcal{F} (S_\alpha)] \\ &= \frac{\partial}{\partial V_j} \left(\frac{\mathcal{F}}{\rho} \left\langle \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + \frac{\partial p'}{\partial x_j} \Big|_{\vec{u}=\vec{V}, \vec{\phi}=\vec{\psi}, \omega^*=\Omega} \right\rangle \right) \\ &+ \frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} \left(\frac{\mathcal{F}}{\rho} \left\langle \frac{\partial J_j^\alpha}{\partial x_j} \Big|_{\vec{u}=\vec{V}, \vec{\phi}=\vec{\psi}, \omega^*=\Omega} \right\rangle \right) \\ &- \frac{\partial}{\partial \Omega} \left(\frac{\mathcal{F}}{\rho} \left\langle \frac{\partial \omega^*}{\partial t} + u_i \frac{\partial \omega^*}{\partial x_i} \Big|_{\vec{u}=\vec{V}, \vec{\phi}=\vec{\psi}, \omega^*=\Omega} \right\rangle \right) \quad . \quad (2.150) \end{aligned}$$

Um diese Transportgleichung zu lösen, werden auf das Partikelensemble, welches das strömende Fluid repräsentiert, stochastische Prozesse angewendet, die später im Abschnitt über die Implementierung aufgeführt werden.

2.5.3. Modellierung der ungeschlossenen Terme

Der erste Term auf der rechten Seite von Gleichung 2.150

$$\frac{\partial \mathcal{F}_{\text{Diss}}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial V_j} \left(\frac{\mathcal{F}}{\rho} \left\langle \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + \frac{\partial p'}{\partial x_j} \Big|_{\vec{u}=\vec{V}, \vec{\phi}=\vec{\psi}, \omega^*=\Omega} \right\rangle \right) \quad (2.151)$$

stellt die Dissipation der turbulenten Fluktuationen durch Viskosität und die Isotropisierung der Turbulenz durch Druckschwankungen dar. Er entspricht gewissermaßen einem Mischungsmodell für Geschwindigkeiten. Zur Schließung dieses Ausdrucks wird das verallgemeinerte Langevin-Modell (eng. Generalized Langevin Model, GLM) [8] verwendet. Der modellierte Term lautet

$$\frac{\partial \mathcal{F}_{\text{Diss}}}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial V_i} [(V_j - \tilde{u}_j) \mathcal{F} G_{ij}] + \frac{1}{2} C_0 \epsilon \frac{\partial^2 \mathcal{F}}{\partial V_i^2} \quad , \quad (2.152)$$

2.5. Grundlagen der Monte-Carlo-PDF-Methode

wobei G_{ij} und C_0 Modellparameter des GLM sind. Durch Aufstellen einer Transportgleichung für eine MDF für Geschwindigkeiten analog der MDF-Transportgleichung 2.150, Multiplikation dieser Gleichung mit $(V_i - \tilde{u}_i)(V_j - \tilde{u}_j)$, Einsetzen von Gleichung 2.152 und anschließender Integration über \vec{V} lässt sich eine Transportgleichung für die Reynoldsspannungen ableiten [57]

$$\begin{aligned} \bar{\rho} \frac{D}{Dt} (\widetilde{u_i'' u_j''}) + \frac{\partial \bar{\rho} \widetilde{u_i'' u_j'' u_k''}}{\partial x_k} \\ = P_{ij} + G_{il} \bar{\rho} \widetilde{u_l'' u_j''} + G_{jl} \bar{\rho} \widetilde{u_i'' u_l''} + \mu \frac{\partial^2 \widetilde{u_i'' u_j''}}{\partial x_k^2} + C_0 \bar{\rho} \epsilon_h \delta_{ij} \end{aligned} \quad (2.153)$$

Wie beim Vergleich dieser Transportgleichung mit Gleichung 2.64 zu sehen ist, entspricht das GLM einer Übertragung eines Reynoldsstressmodells auf die MDF-Ebene. Wegen dieser Beziehung besteht die Möglichkeit, die Koeffizienten G_{ij} und C_0 so zu wählen, dass das die Eigenschaften von ganz bestimmten RSM wiedergegeben werden [8, 19, 58]. Dabei ist zu beachten, dass G_{ij} und C_0 des GLM nur zusammen die Terme ϕ_{ij} und ϵ_{ij} modellieren; es hat nicht jeder Modellparameter für sich getrennt einen entsprechenden Term im RSM. Für die Bestimmung der Modellparameter kann nun C_0 fest vorgegeben werden. Meist wird dafür $C_0 = 2.0$ verwendet. Dieser Wert beruht auf einem Vergleich mit einem einfachen RSM von Rotta [59]. Daraufhin wird G_{ij} so angepasst, dass das Verhalten des GLM dem eines bestimmten RSM entspricht. Eine andere Möglichkeit zur Festlegung von G_{ij} und C_0 bietet ein direkter Koeffizientenvergleich [57], wie er im Anhang dargestellt ist. Diese unterschiedlichen Vorgehensweisen sind möglich, weil zwar jedem GLM genau ein RSM entspricht, aber umgekehrt ein RSM nicht durch nur eine einzige Wahl von G_{ij} und C_0 dargestellt werden kann, sondern durch unendlich viele mögliche Kombinationen [8].

Da hier Ausdrücke in Abhängigkeit von der Dissipationsgeschwindigkeit ϵ verwendet werden, ist das GLM nicht vollständig. Information über ϵ muss entweder durch das separate Lösen einer Transportgleichung für ϵ oder die turbulente Frequenz ω oder alternativ dazu durch die Erweiterung der PDF für Geschwindigkeiten zu einer gebundenen PDF für Geschwindigkeiten und turbulente Frequenz und Mittelwertbildung für diese Variable gewonnen werden. Die Behandlung als weitere Variable in einer PDF wird weiter unten beschrieben.

Als nächstes soll der diffusive Transportterm für die skalaren Variablen betrachtet

2. Theoretische Grundlagen

werden. Es ist der zweite Term auf der rechten Seite von Gleichung 2.150

$$\frac{\partial \mathcal{F}_{\text{Diff}}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} \left(\frac{\mathcal{F}}{\rho} \left\langle \frac{\partial J_j^\alpha}{\partial x_j} \Big|_{\vec{u}=\vec{v}, \vec{\phi}=\vec{\psi}, \omega^*=\Omega} \right\rangle \right) . \quad (2.154)$$

Dieser Ausdruck muss als Mischungsmodell so abgebildet werden, dass der Mittelwert der Skalare durch das Mischen nicht verändert wird, was der Massenerhaltung entspricht. Weiter müssen die Varianzen mit der Zeit abklingen und Gradienten und Krümmungen abgebaut werden [8]. Ein einfaches Modell, das oft verwendet wird, ist das IEM-Modell (IEM=Interaction by exchange with the mean). Dieses Modell verwendet für $\mathcal{F}_{\text{Diff}}$ die Entwicklung [19]

$$\frac{\partial \mathcal{F}_{\text{Diff}}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} \left[\mathcal{F} \left(-\frac{C_\phi}{2\tau} (\psi_\alpha - \tilde{\phi}_\alpha) \right) \right] . \quad (2.155)$$

Dabei nähern sich die skalaren Werte ihrem lokalen Mittelwert an. Die Geschwindigkeit dieser Annäherung wird durch $\frac{C_\phi}{2\tau}$ bestimmt: Die Zeitskala für das Mischen der Skalare wird mit dem Proportionalitätsfaktor C_ϕ , für den der Wert 2 verwendet wird, mit dem turbulenten Zeitmaß $\tau = k/\epsilon$ verbunden. Nachteilig an diesem Modell ist, dass ausgehend von einem Anfangszustand einer Verteilung, die nur zwei Werte annimmt, also aus zwei δ -Peaks besteht, die zeitliche Entwicklung dieses Modells in einem Aufeinanderzubewegen der beiden Peaks besteht, während mittels DNS gezeigt wurde, dass die Peaks beim Mischen nicht erhalten bleiben, sondern zu einer Gauss-förmigen Kurve relaxieren, bevor der Endzustand, der einen Peak beim Mittelwert darstellt, erreicht wird [8].

Speziell für die Verwendung von Partikelmethode wie der Monte-Carlo-PDF-Verfahren gibt es die Klasse der C/D-Modelle (C/D = Coalescence/Dispersion). Der bekannteste Vertreter dieser Klasse ist das Mischungsmodell von Curl [60], von dem es auch einige verfeinerte Varianten gibt. Diese Modelle sind, auf Partikelebene betrachtet, sehr anschaulich: Beim Originalmodell werden zwei Partikel p und q mit den Werten für einen Skalar $\phi^{(p)}$ bzw. $\phi^{(q)}$, die zur Mischung ausgewählt wurden, miteinander vereinigt. Das dadurch entstandene Partikel besitzt für den Skalar den Wert $\phi^{(p+q)} = \frac{1}{2}(\phi^{(p)} + \phi^{(q)})$. Hierauf wird das Partikel wieder geteilt. Die Partikel p und q haben für die skalare Variable beide den Wert $\phi^{(p+q)}$ angenommen. Dieser Vorgang kann auch für mehrere skalare Variablen verwendet werden. Das simultane Mischen für zwei Skalare ist in Abbildung 2.9 dargestellt.

2.5. Grundlagen der Monte-Carlo-PDF-Methode

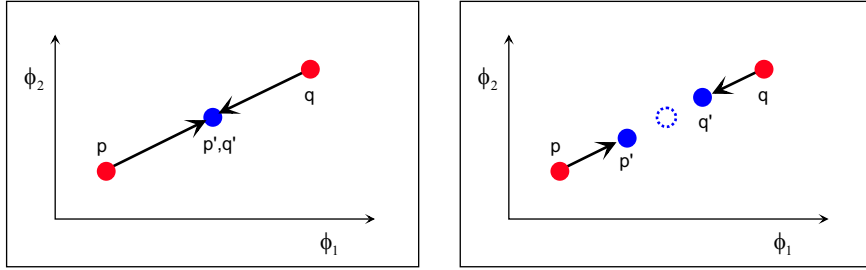


Abbildung 2.9.: Mischung zweier Partikel mit dem Curl-Modell. Links: Originalmodell, vollständiges Mischen. Rechts: Modifiziertes Curl-Modell, partielles Mischen. $p(\phi_1, \phi_2)$, $q(\phi_1, \phi_2)$: Partikel vor dem Mischen; p' , q' : Partikel nach dem Mischen

Die Anzahl der Partikel N_C , die für jeden Zeitschritt zum Mischen ausgewählt werden, wird aus der Anzahl der Partikel in der Zelle N , dem Zeitschritt Δt und der turbulenten Zeitskala τ bestimmt nach $N_C = 2\frac{C_\phi}{\tau}\Delta t N$. Für C_ϕ wird meistens wie beim IEM-Modell der Wert 2 verwendet, der aus der Analyse der Diffusion bei homogener Turbulenz stammt. Es sind jedoch auch schon andere Werte vorgeschlagen worden, da C_ϕ keine universelle Konstante darstellt, sondern ein Modellparameter ist, der zur Anpassung der Geschwindigkeit der Relaxation der Verteilung dient. Der Diffusionsterm wird mit diesem Modell auf der Ebene der MDF wiedergegeben durch [61, 62]

$$\frac{\partial \mathcal{F}_{\text{Diff}}}{\partial t} = -2C_\phi \mathcal{F} + 2C_\phi \int \int \mathcal{F}(\psi^{(p)}) \mathcal{F}(\psi^{(q)}) K(\psi, \psi^{(p)}, \psi^{(q)}) d\psi^{(p)} d\psi^{(q)}$$

mit $K(\psi, \psi^{(p)}, \psi^{(q)}) = \delta\left(\psi - \frac{1}{2}(\psi^{(p)} + \psi^{(q)})\right)$. (2.156)

Für den oben geschilderten Testfall sind bei diesem Modell durch das vollständige Mischen nur bestimmte Werte der Skalare möglich. Um diesen Defekt zu beseitigen, wurde das Modell abgeändert. Im Modified Curl's Modell wird der Mischungsgrad als Zufallszahl α bestimmt, die gleichmäßig im Intervall $[0, 1]$ verteilt ist [62]. Dadurch sind bei jedem Mischvorgang beliebige Zwischenwerte erreichbar, und nicht nur der gemeinsame Mittelwert der beiden zu mischenden Partikel, wie in Abbildung 2.9 dargestellt. Bei der Transportgleichung 2.156 ändert sich dadurch K zu

$$K = \delta\left(\psi - (1 - \alpha)\psi^{(p)} - \frac{1}{2}\alpha(\psi^{(p)} + \psi^{(q)})\right) . \quad (2.157)$$

Der Vorfaktor des Integrals wird von 2 auf 3 erhöht, um das Abklingen der Varianzen mit der korrekten Geschwindigkeit ablaufen zu lassen [62]. Dieses Modell gibt die Entwicklung ausgehend vom oben angeführten Testfall gut wieder. Es

2. Theoretische Grundlagen

gibt aber immer noch einen Fehler, der z. B. für nicht-vorgemischte Flammen problematisch sein kann: Der Mischungsgrad α ist vom Zeitschritt unabhängig. Damit ist es auch bei noch so kurzen Zeitschritten möglich, dass zwei Partikel vollständig gemischt werden. Dies kann bei nicht-vorgemischten Flammen dazu führen, dass durch das Mischen im Modell Zustände erreicht werden, die wegen schneller Reaktionen in der Realität nicht erreichbar sind. Dies entspricht dem Mischen durch eine Flammenfront hindurch. Außerdem ist es möglich, dass einige Partikel für längere Zeit überhaupt nicht mit anderen gemischt werden. Diese Fehler sind in einer weiteren Variante, dem Continuous Curl's Modell [63], behoben. Dabei werden bei jedem Zeitschritt alle Partikel zufällig in Paare eingeteilt. Der Mischungsgrad α wird für jedes Paar individuell bestimmt nach

$$\alpha = C_\phi \alpha' \Delta t \omega \quad . \quad (2.158)$$

Dabei ist α' eine im Intervall $[0, 1]$ gleichmäßig verteilte Zufallszahl. War bei den beiden vorherigen Varianten jeder Mischungsgrad für jeden Zeitschritt gleich wahrscheinlich, so gibt es nun eine exponentielle Abhängigkeit vom Zeitschritt. Eine vollständige Mischung ist damit nur bei großen Zeitschritten wahrscheinlich. Mischen durch Flammenfronten kann damit wirksam verhindert werden. Allerdings stimmt mit diesem Modell die zeitliche Entwicklung der Relaxation für den Testfall der anfangs auf zwei δ -Peaks verteilten Skalare nicht so gut mit Ergebnissen aus der DNS überein wie bei der vorher beschriebenen Variante. Das Vermeiden von nicht möglichen Punkten im Phasenraum ist aber oft so wichtig, dass sogar das weiter oben vorgestellte IEM-Modell den Curl-Modellen vorgezogen wird. Bei der Auswahl des Mischungsmodells muss abgewogen werden, welcher Aspekt der wichtigere ist.

Ein weiteres alternatives Mischungsmodell, das das Mischen durch Flammenfronten vermeidet, stellt das sogenannte Ordered-Pairing-Modell (OP-Modell) [64] dar. Bei diesem Modell werden für jeden Zeitschritt acht Partikel ausgewählt und nach der Größe ihres skalaren Werts sortiert. Dann werden sie paarweise, wie sie in der Reihe auftauchen, gemischt. Dadurch werden nur Partikel miteinander gemischt, die in ihrer Zusammensetzung ähnlich sind. Dieses Verfahren ist allerdings nicht für das simultane Mischen mehrerer Skalare formulierbar.

Weitere Modelle sind das Age Biased Curl Modell [61], das die Nichtbeteiligung einzelner Partikel am Mischen verhindert und das Euklidean Minimum Spanning

2.5. Grundlagen der Monte-Carlo-PDF-Methode

Tree Modell [65], das ähnlich wie das OP-Modell nur im Phasenraum benachbarte Partikel paarweise zum Mischen verwendet.

Der letzte ungeschlossene Term der MDF-Transportgleichung 2.150 beinhaltet die Entwicklung einer turbulenten Frequenz:

$$\frac{\partial \mathcal{F}_{\text{Freq}}}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial \Omega} \left(\frac{\mathcal{F}}{\rho} \left\langle \frac{\partial \omega^*}{\partial t} + u_i \frac{\partial \omega^*}{\partial x_i} \Big|_{\vec{u}=\vec{v}, \vec{\phi}=\vec{\psi}, \omega^*=\Omega} \right\rangle \right) . \quad (2.159)$$

Ohne Informationen über eine turbulente Zeitskala ist das Modell nicht vollständig, weil wegen der Modellierung der Reynoldsstress-Terme die Dissipationsgeschwindigkeit der turbulenten kinetischen Energie ϵ benötigt wird. Diese Information kann durch Lösen einer Transportgleichung für eine mittlere turbulente Frequenz, wie z.B. im k - ω -Modell, auf einem Rechengitter gewonnen werden und damit sozusagen „von außen“ ins Modell hineingesteckt werden. Dabei wird dieser Term aus der MDF-Transportgleichung herausgenommen; für die verwendete MDF gibt es dann keine Variable ω^* . Die andere Möglichkeit besteht darin, für ω^* ein stochastisches Modell zu verwenden [6, 66]. $\mathcal{F}_{\text{Freq}}$ wird modelliert als

$$\mathcal{F}_{\text{Freq}} = c_3 \omega \frac{\partial}{\partial \Omega} [\mathcal{F}(\Omega - \omega)] + S_\omega \omega \frac{\partial \Omega \mathcal{F}}{\partial \Omega} + c_3 c_4 \omega^2 \frac{\partial^2 \Omega \mathcal{F}}{\partial \Omega^2} . \quad (2.160)$$

Dabei wird der Quellterm S_ω für die mittlere turbulente Frequenz ω bestimmt durch

$$S_\omega = c_{\omega 2} - c_{\omega 1} \frac{P}{\epsilon} + c_5 \max \left(0; 1 - \frac{P}{\epsilon} \right)^3 . \quad (2.161)$$

Hierbei ist P die Produktionsgeschwindigkeit der turbulenten kinetischen Energie, wie sie auch beim k - ω -Modell verwendet wird. Die Koeffizienten $c_{\omega 1}$, $c_{\omega 2}$, c_3 , c_4 und c_5 sind Modellparameter, die so festgelegt werden, dass die zeitliche Entwicklung der mittleren Frequenz ω der Entwicklung nach dem k - ω -Modell [11] entspricht. Die Dissipationsgeschwindigkeit ϵ kann daraus bestimmt werden nach

$$\epsilon = \omega (k + \nu c_T^2 \omega) , \quad (2.162)$$

mit c_T als einem weiterem Modellparameter. Nach diesem Modell ist ω^* gemäß einer Gamma-Funktion verteilt [8, 66, 67]. Die Modellparameter haben folgende Werte [6]:

$$\begin{aligned} c_{\omega 1} = 0,44 & , & c_{\omega 2} = 0,73 & , & c_3 = 5,0 \\ c_4 = 0,25 & , & c_5 = 0,3 & , & c_T = 6,0 \end{aligned} .$$

2. *Theoretische Grundlagen*

Wie die Ähnlichkeit der Gleichungen für die stochastischen Modelle bereits vermuten lässt, ist die Implementierung als stochastischer Prozess auf Partikelebene ähnlich der Implementierung des GLM und wird im nächsten Abschnitt erläutert.

3. Implementierung

3.1. Beschreibung des zu simulierenden Systems

In diesem Abschnitt wird die hier angewandte Vorgehensweise beschrieben, um mit den bisher dargestellten Methoden eine reaktive Strömung zu simulieren. Der Fall, der hier wegen seiner einfachen Geometrie betrachtet wird, ist die Kanalströmung, wie sie bereits in Abschnitt 2.3.3 beschrieben wird.

Die Richtungen des Koordinatensystems sind wie folgt festgelegt: x_1 ist die Richtung längs der Strömung, parallel zur Wand, x_2 ist die Richtung senkrecht zur Wand, und x_3 ist die Richtung parallel zur Wand und senkrecht zur Strömung. Unter der Grenzschichtannahme wird zur Vereinfachung angenommen, dass, mit Ausnahme des Druckgradienten $\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_1}$, alle Gradienten von Mittelwerten in x_1 - und x_3 -Richtung gleich Null sind (siehe Gleichung 2.89). Ein Druckgradient in x_1 -Richtung erhält die Strömung aufrecht. Sie wird begrenzt durch zwei planparallele Platten, die in x_1 - und x_3 -Richtung unendlich weit ausgedehnt sind. Die Symmetrie der Strömung wird ausgenutzt, um das Rechengebiet weiter zu reduzieren. Schließlich wird ein eindimensionales Rechengitter, das das Gebiet nur in x_2 -Richtung auflöst, verwendet, da statistische Stationarität vorausgesetzt wird. Das Rechengitter wird zur Wand hin in zwei Stufen verfeinert, um die steilen Gradienten, die in Wandnähe auftreten, auflösen zu können und gleichzeitig die Anzahl der Gitterzellen klein zu halten. Der Koordinatenursprung $x_2 = 0$ befindet sich an der Wand; in der Kanalmitte ist $x_2 = h$. Bei der Erzeugung des Gitters ist darauf zu achten, dass die viskose Wandschicht ausreichend fein unterteilt wird. Der erste Gitterpunkt sollte sich bei $y^+ < 1$ (s. Gleichung 2.101) befinden [18, 68]. Auf die Zellen dieses Gitters werden nun die Partikel verteilt, die das strömende

3. Implementierung

Fluid repräsentieren sollen. Die Eigenschaften dieser Partikel werden zu Beginn der Rechnung initialisiert und im weiteren Verlauf durch stochastische Prozesse verändert. Durch Ensemblemittelung der Partikel in den Zellen können auf dem Gitter die Mittelwerte der Feldgrößen bestimmt werden. Das zu simulierende System und seine Übertragung auf die stochastischen Partikel ist in Abbildung 3.1 dargestellt.

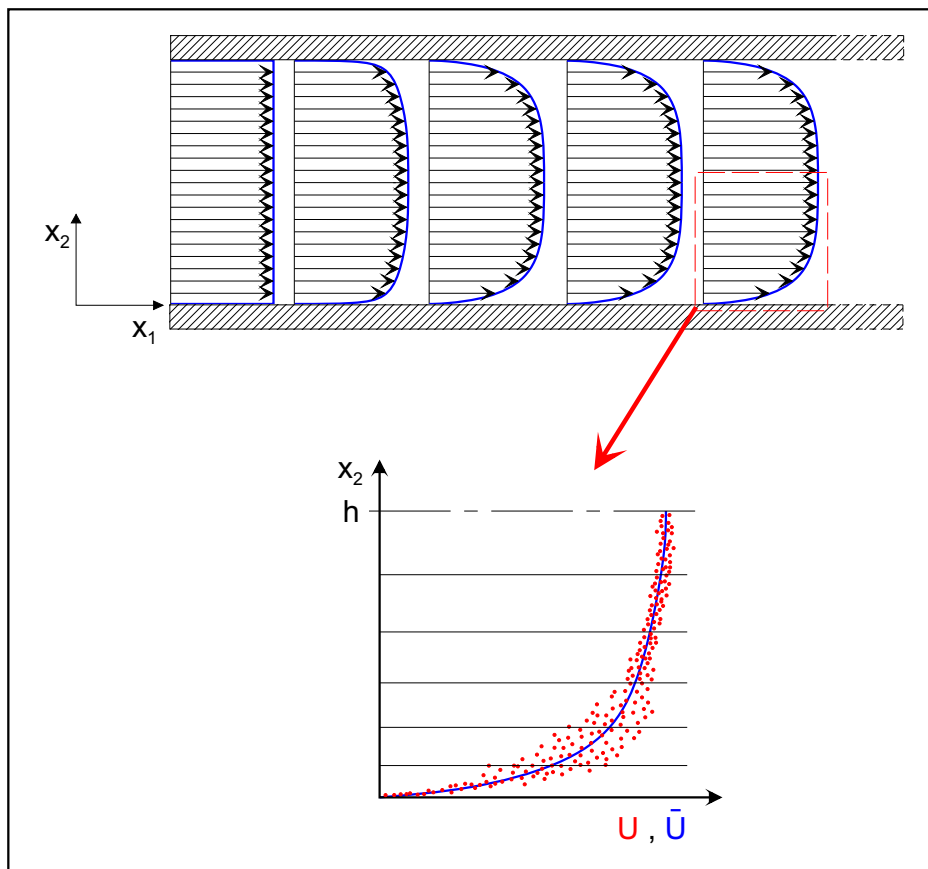


Abbildung 3.1.: Kanalströmung: Räumliches System und Repräsentation als Partikelensemble. Dargestellt ist das Profil der mittleren Geschwindigkeit in Strömungsrichtung. Oben: Kanalströmung, Entwicklung ausgehend von einem blockförmigen Geschwindigkeitsprofil am Eintritt zum statistisch stationären Zustand. Unten: in der Simulation verwendeter Bereich nach Erreichen des Steady State.

Das Dichtefeld kann aus der räumlichen Verteilung der Partikel bestimmt werden [3]. Da sich in einem Gitter mit nichtkonstanten Gitterabständen in kleinen Zellen in Wandnähe aber weniger Partikel aufhalten als in großen Zellen in der Mitte des Kanals, bedeutet bereits eine kleine Schwankung in der Partikelanzahl, wie sie ständig auftreten kann, eine Schwankung in der Dichte. Auch bei einer

nichtreaktiven Strömung eines Fluids konstanter Dichte können solche Schwankungen der Partikelanzahl in einzelnen Zellen auftreten. In diesen Zellen ergibt sich dann daraus fälschlicherweise eine Schwankung in der Dichte des Fluids. Dies lässt sich nur durch eine sehr große Partikelanzahl ausgleichen, was den Rechenaufwand stark vergrößert. Deshalb wird hier die Dichte als Partikeleigenschaft definiert und das Dichtefeld wie die Felder der anderen skalaren Größen durch Mittelung bestimmt [57]. Um die Partikelanzahl zu begrenzen erhalten die Partikel unterschiedliche numerische Gewichte, die zu Beginn der Simulation so gewählt werden, dass sich in jeder Zelle dieselbe Anzahl von Partikeln befindet. Auch während der Rechnung muss darauf geachtet werden, dass eine Mindestanzahl von Partikeln in allen Zellen vorhanden ist, um die statistischen Fehler klein zu halten. Die dazu angewendeten Prozesse, das sogenannte Clustern und Klonen, werden weiter unten beschrieben. An dieser Stelle soll nur darauf hingewiesen werden, dass nicht alle Partikel dasselbe Gewicht haben und dass dies bei der Mittelwertbildung und den stochastischen Prozessen berücksichtigt werden muss.

Mit diesem Partikelsystem soll nun die Transportgleichung der MDF, Gleichung 2.150, gelöst werden.

3.2. Lösungsalgorithmus

Zur Lösung der MDF-Transportgleichung wird das Verfahren der drei Teilschritte [3] verwendet. Die MDF \mathcal{F} wird dazu durch eine Näherung erster Ordnung bezüglich der zeitlichen Entwicklung $\hat{\mathcal{F}}$ ersetzt. Durch Ansetzen einer Taylor-Reihe und unter Vernachlässigung der Terme höherer Ordnung bezüglich des Zeitschritts Δt ergibt sich die Transportgleichung der Näherung $\hat{\mathcal{F}}$ [3]

$$\frac{\partial \hat{\mathcal{F}}}{\partial t} = \frac{\partial \hat{\mathcal{F}}_1}{\partial t} + \frac{\partial \hat{\mathcal{F}}_2}{\partial t} + \frac{\partial \hat{\mathcal{F}}_3}{\partial t} + \mathcal{O}(\Delta t) \quad . \quad (3.1)$$

Die Terme $\frac{\partial \hat{\mathcal{F}}_1}{\partial t}$, $\frac{\partial \hat{\mathcal{F}}_2}{\partial t}$ und $\frac{\partial \hat{\mathcal{F}}_3}{\partial t}$ stellen die einzelnen Teilschritte dar, die im Folgenden vorgestellt werden sollen.

3. Implementierung

3.2.1. Erster Teilschritt

Im ersten Teilschritt werden die Turbulenz und der chemische Quellterm behandelt. Wie schon im Abschnitt 2.5.3 beschrieben, findet dafür ein GLM und das stochastische Äquivalent zum k - ω -Modell Anwendung [3, 6]. Der Term $\frac{\partial \hat{\mathcal{F}}_1}{\partial t}$ lautet damit

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{\mathcal{F}}_1}{\partial t} = & -\frac{\partial}{\partial V_i} [(V_j - \tilde{u}_j) \mathcal{F} G_{ij}] + \frac{1}{2} C_0 \epsilon \frac{\partial^2 \mathcal{F}}{\partial V_i^2} \\ & + c_3 \omega \frac{\partial}{\partial \Omega} [\mathcal{F} (\Omega - \omega)] + S_\omega \omega \frac{\partial \Omega \mathcal{F}}{\partial \Omega} + c_3 c_4 \omega^2 \frac{\partial^2 \Omega \mathcal{F}}{\partial \Omega^2} \\ & + \frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} [\mathcal{F} (S_\alpha)] \end{aligned} \quad (3.2)$$

mit den Bezeichnungen und Koeffizienten wie in Kapitel 2.5.2.

Diese Entwicklungsgleichung wird nun in Form von stochastischen Prozessen auf die Partikel übertragen. Nach Integration über die Zeit mittels einer expliziten Euler-Methode ergeben sich für die Partikeleigenschaften, die durch einen Stern gekennzeichnet sind, nach dem ersten Teilschritt die Zusammenhänge

$$u_i^{*(1)}(t + \Delta t) = u_i^* + \Delta t G_{ij} (u_j^* - \tilde{u}_j) + \sqrt{C_0 \epsilon \Delta t} (W_i)_t \quad (3.3)$$

$$\phi_\alpha^{*(1)}(t + \Delta t) = \phi_\alpha^* + \Delta t S_\alpha(\vec{\phi}^*) \quad (3.4)$$

$$\begin{aligned} \omega^{*(1)}(t + \Delta t) = & \omega^* - c_3 \omega (\omega^* - \omega) \Delta t - S_\omega \omega \omega^* \Delta t \\ & + \sqrt{2 c_3 c_4 \omega^2 \omega^* \Delta t} (W')_t \end{aligned} \quad (3.5)$$

$$x_i^{*(1)}(t + \Delta t) = x_i^* \quad (3.6)$$

Die Änderung der Partikelgeschwindigkeiten wird hier bestimmt durch eine Relaxation zum lokalen Mittelwert, die von einem isotropen Diffusionsprozess überlagert wird. Der Koeffizient C_0 und die Matrix \mathbf{G} werden durch einen Koeffizientenvergleich mit einem RSM, hier dem MCL-Modell, gewonnen. Der Vergleich ist ausführlich im Anhang dargestellt. Die Koeffizienten lauten:

$$\begin{aligned}
 G_{ij} = & \frac{d_{kk}^p}{4k} \delta_{ij} - (c_1 + A^{\frac{1}{2}}) \epsilon_h \frac{1}{2} \frac{1}{k} - c_1 c_1' \epsilon_h \left(\frac{1}{2} \frac{\widetilde{u_i'' u_j''}}{k^2} - \frac{2}{3} \frac{1}{k} \delta_{ji} \right) \\
 & + 0,6 \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + 0,15 \frac{1}{\bar{\rho} k} \delta_{ij} P_{kk} \\
 & - \frac{0,2}{k} \left[\frac{1}{2} \widetilde{u_k'' u_i''} \left(\frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_k} \right) - \widetilde{u_m'' u_j''} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_m} \right] \\
 & - c_2 \left[\left(A_2 + \frac{4}{3} \right) \left(\frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} - \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} \right) + 3 \left(\frac{1}{2} \frac{\widetilde{u_n'' u_i''}}{k^2} - \frac{2}{3} \frac{1}{k} \delta_{ni} \right) \frac{(P_{jn} - D_{jn})}{\bar{\rho}} \right] \\
 & + c_2' \left\{ \left(\frac{7}{15} - \frac{A_2}{4} \right) \left(- \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} \right) \right. \\
 & \left. + \frac{0,1}{\bar{\rho} k} \left[\left(\delta_{ij} - \frac{1}{4} \frac{\widetilde{u_i'' u_j''}}{k} \right) P_{kk} - \frac{1}{4} \frac{\widetilde{u_m'' u_n''}}{k} P_{nm} \delta_{ij} + P_{ij} \right] \right\} \\
 & + \frac{0,1}{k^2} c_2'' \left[\frac{1}{2} \widetilde{u_o'' u_i''} \left(6 \frac{D_{jo}}{\bar{\rho}} + 13k \left(\frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_o} + \frac{\partial \tilde{u}_o}{\partial x_j} \right) \right) + \widetilde{u_n'' u_i''} \frac{(D_{jn} - P_{jn})}{\bar{\rho}} \right] \\
 & + \frac{3}{2} \frac{\epsilon}{k} \left(- f_{w1} d_i^A d_j^A - f_{w2} \frac{\widetilde{u_j'' u_n''}}{k} d_i^A d_n^A \right) \\
 & - \frac{1 - f_\epsilon}{D} \left(\frac{1}{2} \frac{\epsilon}{k} \delta_{ij} + 2 \frac{\nu}{k} \frac{\partial \sqrt{k}}{\partial x_i} \frac{\partial \sqrt{k}}{\partial x_j} - \frac{f_R \epsilon}{k} d_j^A d_i^A \right) \\
 \\
 C_0 = & \frac{2}{3} (c_1 + A^{\frac{1}{2}}) \frac{\epsilon_h}{\epsilon} - c_1 c_1' \left(\frac{4}{9} - \frac{1}{3} A_2 \right) \frac{\epsilon_h}{\epsilon} \\
 & + \frac{c_2'}{\bar{\rho} \epsilon} \left\{ - \frac{1}{3} P_{kk} \left(\frac{7}{15} - \frac{A_2}{4} \right) \right. \\
 & \left. + 0,1 \left[\left(- \frac{10}{9} + \frac{1}{6} A_2 \right) P_{kk} - \frac{1}{3} \frac{\widetilde{u_m'' u_n''}}{k} P_{nm} \right] \right\} \\
 & - \frac{1}{3} \frac{0,1}{\epsilon k^2} c_2'' \left[6 \frac{D_{no}}{\bar{\rho}} + 13k \left(\frac{\partial \tilde{u}_n}{\partial x_o} + \frac{\partial \tilde{u}_o}{\partial x_n} \right) \right] \\
 & + \frac{1}{k} \left(f_{w1} \widetilde{u_i'' u_k''} d_i^A d_k^A + f_{w2} \frac{1}{k} \widetilde{u_m'' u_n''} \widetilde{u_m'' u_i''} d_n^A d_i^A \right) \\
 & - \frac{1 - f_\epsilon}{D} \left(\frac{2\nu}{\epsilon} \frac{\widetilde{u_m'' u_n''}}{k} \frac{\partial \sqrt{k}}{\partial x_m} \frac{\partial \sqrt{k}}{\partial x_n} + 2 f_R \frac{\widetilde{u_m'' u_n''}}{k} d_m^A d_n^A \right) - \frac{2}{3} f_\epsilon \quad . \quad (3.7)
 \end{aligned}$$

Die Indizes i bis o laufen dabei jeweils von 1 bis 3. Bei den Indizes k bis o handelt es sich um stumme Indizes, über die aufsummiert wird, da sie innerhalb eines Terms in einem Produkt zweimal vorkommen. Die Koeffizienten c_2' und c_2'' werden

3. Implementierung

hier gegenüber dem MCL-Modell modifiziert, um ein Ansteigen der Geschwindigkeitsfluktuationen senkrecht zur Wand zur Kanalmitte hin zu verhindern. Dieser Anstieg liegt an der Unterschätzung der Dissipationsrate ϵ durch die Verwendung des stochastischen Modells für die turbulente Frequenz ω anstelle der Entwicklungsgleichung des MCL-Modells für ϵ . Beim MCL-Modell wird festgelegt [21]

$$c'_2 = c2'' = \min[0,6; \sqrt{A}] \quad . \quad (3.8)$$

Hier wird dagegen verwendet

$$c'_2 = \min[0,6; f_A] \quad \text{und} \quad (3.9)$$

$$c''_2 = \min[0,78; \sqrt{A}] \quad . \quad (3.10)$$

Durch diese Modifikation konnte das Einschwingverhalten bei der Entwicklung der Strömung zum Steady State verbessert werden, wie später noch dargestellt wird.

Zur Modellierung der Diffusion der Geschwindigkeit in Gleichung 3.3 wird ein isotroper Wiener-Prozess verwendet, wie er auch für die Darstellung der Brownschen Molekularbewegung benutzt wird [4]. Die Inkremente des Prozesses haben folgende Eigenschaften:

$$\langle \Delta_{\Delta t}(W_i)_t \rangle = 0 \quad (3.11)$$

$$\langle \Delta_{\Delta t}(W_i)_t \Delta_{\Delta t}(W_j)_t \rangle = \Delta t \delta_{ij} \quad . \quad (3.12)$$

Für die Inkremente werden im Intervall $[-\sqrt{3\Delta t}; \sqrt{3\Delta t}]$ gleichverteilte Zufallszahlen verwendet [57]. Auch andere Verteilungen sind möglich [6].

Die Änderung der turbulenten Frequenz der Partikel ω^* wird durch das ebenfalls im Abschnitt 2.5.3 vorgestellte Modell beschrieben. Auch hier wird ein Wiener-Prozess für den isotropen Diffusionsterm verwendet. Dieser Prozess ist von dem oben beschriebenen unabhängig, hat aber dieselbe Verteilung der Inkremente.

Die Integration des Quell- bzw. Senkenterms der chemischen Spezies lässt sich nicht durch Multiplikation mit einem Zeitschritt realisieren. Stattdessen wird ein Runge-Kutta-Verfahren zweiter Ordnung [69] mit adaptivem Zeitschritt gewählt. Als Startzeitschritt wird ein Fünftel des Zeitschritts der Strömung verwendet. Zur Simulation wird als reaktives System ein Gemisch von Wasserstoff und Luft

gewählt. An der Wand wird die Reaktion durch Platin katalysiert. Die Implementierung der Wandreaktionen wird weiter unten beschrieben. Die Reaktionsgeschwindigkeiten der chemischen Spezies sowie der Temperatur in der Gasphase werden zu Beginn der Integration für die Gasphasenreaktion von Wasserstoff mit Luft nach dem in Tabelle 2.1 beschriebenen Mechanismus bestimmt. Dazu werden dieselben Routinen verwendet, wie sich auch zur Berechnung von ILDM-Tabellen zum Einsatz kommen [39]. Mit diesen Geschwindigkeiten werden die neuen Massenbrüche der chemischen Spezies und die Temperatur nach einem halben Integrationszeitschritt bestimmt. In Abhängigkeit der neuen Zusammensetzung werden dann wieder die Quellterme ermittelt. Unterscheiden sich die Geschwindigkeiten beim Zwischenschritt um mehr als fünf Prozent von den Quelltermen zu Beginn der Iteration, so wird der Zeitschritt verkleinert und der Vorgang wiederholt. Auf diese Weise können auch in einem engen Bereich steil ansteigende Reaktionsgeschwindigkeiten integriert werden, ohne den Rechenaufwand durch Verwendung eines starren Zeitschritts, der sehr klein sein muss, zu erhöhen. Bei einer Testrechnung in einem homogenen Reaktor konnte die Anzahl der Iterationen von einem kalten Gemisch als Ausgangspunkt bis zum Erreichen eines stationären Zustands mit dem adaptiven Zeitschritt um etwa 65% im Vergleich zum starren Zeitschritt reduziert werden. Da die Diffusion erst im nächsten Teilschritt behandelt wird, wird die Kopplung zur Diffusion dadurch nicht beeinflusst.

Nach jeder Integration muss die Dichte der Partikel in Abhängigkeit von Zusammensetzung und Temperatur neu berechnet werden.

Der Ort der Partikel x_i^* im physikalischen Raum wird durch den ersten Teilschritt nicht verändert, wie aus Gleichung 3.6 hervorgeht.

3.2.2. Zweiter Teilschritt

Im zweiten Teilschritt werden die Diffusionsprozesse behandelt. Für die Geschwindigkeiten und die Position sind dies die Terme, die Abhängigkeiten von der laminaren kinematischen Viskosität und Ableitungen der mittleren Geschwindigkeiten beinhalten. Bei den skalaren Größen wird ein C/D-Mischungsmodell, hier das Continuous Curl Model, verwendet. Die Entwicklungsgleichung dieses Teilschritts lautet [19, 61]

3. Implementierung

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{\mathcal{F}}_2}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial V_j} \left(\frac{\mathcal{F}}{\rho} \frac{\partial \overline{\tau_{ij}}}{\partial x_j} \right) - 2C_\phi \mathcal{F} \\ &\quad + 3C_\phi \int \int \mathcal{F}(\psi^{(p)}) \mathcal{F}(\psi^{(q)}) K(\psi, \psi^{(p)}, \psi^{(q)}) d\psi^{(p)} d\psi^{(q)} \end{aligned} \quad (3.13)$$

mit $K(\psi, \psi^{(p)}, \psi^{(q)}) = \delta(\psi - \frac{1}{2}(\psi^{(p)} + \psi^{(q)}))$. Die Indizes p und q beziehen sich auf zwei Partikel, die miteinander gemischt werden. Bei hohen Reynoldszahlen kann der auf der laminaren Viskosität beruhende Anteil an der Diffusion vernachlässigt werden; bei Low-Reynolds-Strömungen, wie im vorliegenden Fall einer Kanalströmung, muss er aber berücksichtigt werden. Die stochastischen Prozesse auf Partikelebene lauten

$$u_i^{*(2)}(t + \Delta t) = u_i^{*(1)} + 2\nu \frac{\partial^2 \tilde{u}_i}{\partial x_j^2} + \sqrt{2\nu} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} \Delta_{\Delta t}(W_j)_t \quad (3.14)$$

$$\begin{aligned} \phi_\alpha^{*(2)}(t + \Delta t) &= \phi_\alpha^{*(1)} + \frac{w_{\text{MP}}^*}{w^* + w_{\text{MP}}^*} \left(\phi_{\alpha\text{MP}}^{*(1)} - \phi_\alpha^{*(1)} \right) \\ &\quad \cdot \left(1 - e^{-\frac{N(w^* + w_{\text{MP}}^*)}{\sum_i^N w_i^*} C \Delta t} \right) \end{aligned} \quad (3.15)$$

$$\omega^{*(2)}(t + \Delta t) = \omega^{*(1)} \quad (3.16)$$

$$x_i^{*(2)}(t + \Delta t) = x_i^{*(1)} + \sqrt{2\nu} \Delta_{\Delta t}(W_j)_t \quad (3.17)$$

Der Index MP bezeichnet dabei den Mischungspartner des betrachteten Partikels. Die Geschwindigkeitsänderung in diesem Zeitschritt hat einen deterministischen und einen zufälligen Anteil. Der deterministische Teil, $2\nu \frac{\partial^2 \tilde{u}_i}{\partial x_j^2}$, gibt den Effekt der Diffusion wieder, Krümmungen abzubauen. Der zufällige Anteil, $\sqrt{2\nu} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} \Delta_{\Delta t}(W_j)_t$, beschreibt die isotropisierende Wirkung der viskositätsbedingten Diffusion. Die Inkremente des Wiener-Prozesses stammen aus der Diffusion im physikalischen Raum und sind deshalb mit den Inkrementen für die Ortsänderung, die einer Brown'schen Molekularbewegung entspricht, identisch [6, 57].

Für die Diffusion im Phasenraum der chemischen Spezies müssen die unterschiedlichen Gewichte der stochastischen Partikel berücksichtigt werden. Die angegebene Gleichung ist eine analytische Lösung des Differentialgleichungssystems [70]

$$\frac{d\phi_\alpha^*}{dt} = \frac{Nw_{\text{MP}}^*}{\sum_i^N w_i^*} C(\phi_{\alpha\text{MP}}^* - \phi_\alpha^*) \quad (3.18)$$

$$\frac{d\phi_{\alpha\text{MP}}^*}{dt} = \frac{Nw^*}{\sum_i^N w_i^*} C(\phi_\alpha^* - \phi_{\alpha\text{MP}}^*) \quad (3.19)$$

3.2. Lösungsalgorithmus

das dem Continuous Curl's Mixing-Modell [63] zugrunde liegt. Der Parameter, der den Grad des Mischens bestimmt, ist $C = \frac{\xi}{\tau_\phi}$ mit $\tau_\phi = \frac{\tau}{C_\phi}$; ξ ist dabei eine Zufallszahl, die gleichmäßig im Intervall $[0; 1]$ verteilt ist. Für homogene Turbulenz ist $C_\phi = 2$. Bei einer Kanalströmung, in der die Turbulenz wegen der Wände nicht isotrop, geschweige denn homogen ist, führt diese Annahme zu einer starken Unterschätzung des diffusiven Stofftransports. Deshalb wird hier für C_ϕ eine Funktion in Abhängigkeit vom Stress-Flatness-Indikator A gewählt, die bei isotroper Turbulenz, also $A = 1$, den Wert 2 erreicht und in Wandnähe ein Vielfaches dieses Wertes annehmen kann. Direkt an der Wand, wo die Strömung laminaren Charakter hat, muss diese Funktion wieder abnehmen. Die hier für die Simulation der reaktiven Strömung verwendete Funktion ist

$$C_\phi = 2(1 + 136 \cdot A \cdot e^{-10A}) \quad . \quad (3.20)$$

Der Ablauf bei der Anwendung dieses Modells ist wie folgt: In jeder Zelle werden aus den N Partikeln zufällige Paare gebildet. Dabei muss darauf geachtet werden, dass kein Partikel innerhalb eines Zeitschritts mehrmals ausgewählt wird. Für jedes Partikelpaar wird dann mit der Zufallszahl ξ , der lokalen turbulenten Zeitskala τ und dem lokalen C_ϕ der individuelle Mischungsgrad C bestimmt. Dann werden die Zusammensetzungen der Partikel für alle Spezies mit diesem Mischungsgrad nach Gleichung 3.15 verändert. Bei dieser Vorgehensweise wird impliziert, dass alle Spezies mit der gleichen Geschwindigkeit diffundieren. Wegen der Massenerhaltung der Partikel ist eine Formulierung mit für jede Spezies individuellen effektiven Diffusivitäten bei C/D-Modellen nicht möglich. Zur Bestimmung der Partikeltemperatur wird der Mischungsprozess auf die Enthalpie der Partikel angewendet und die Temperatur T durch implizites Lösen der Gleichung 2.112 berechnet.

3.2.3. Dritter Teilschritt

Der konvektive Transport aufgrund von Gradienten des mittleren Druckfeldes wird schließlich im dritten Teilschritt behandelt. Der Term $\frac{\partial \mathcal{F}_3}{\partial t}$ ist gegeben durch

$$\frac{\partial \mathcal{F}_3}{\partial t} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial V_j} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j} \quad . \quad (3.21)$$

3. Implementierung

Die Änderungen der Position und der Geschwindigkeit eines stochastischen Partikels ergeben sich nach der Integration über den Zeitschritt Δt . Die Prozesse auf Partikelebene werden beschrieben durch

$$u_i^{*(3)}(t + \Delta t) = u_i^{*(2)} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} \quad (3.22)$$

$$\phi_\alpha^{*(3)}(t + \Delta t) = \phi_\alpha^{*(2)} \quad (3.23)$$

$$\omega^{*(3)}(t + \Delta t) = \omega^{*(2)} \quad (3.24)$$

$$x_i^{*(3)}(t + \Delta t) = x_i^{*(2)} + u_i^{*(2)} \Delta t \quad (3.25)$$

Der Druckgradient in Strömungsrichtung wird als über den ganzen Strömungsquerschnitt konstant angenommen. Um eine zeitlich konstante Massenstromdichte zu gewährleisten, wird bei jeder Iteration die Massenstromdichte über den Querschnitt integriert und der Druckgradient daran angepasst. Der Druckgradient senkrecht zur Wand lässt sich im Fall einer statistisch stationären Kanalströmung bestimmen zu

$$\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_2} = - \frac{\partial \widetilde{\bar{\rho} u_2'' u_2''}}{\partial x_2} \quad (3.26)$$

Bei der Simulation einer reaktiven Strömung zeigte sich, dass es wegen Diskretisierungsfehlern und Vernachlässigung der axialen Transportterme zu Schwingungen in wandnormaler Richtung kommen kann. Um diese Schwingungen zu begrenzen, wird ein geschwindigkeitsproportionaler Dämpfungsterm [71, 72] der Form $\Delta u_{2\text{damp}}^* = -c_{\text{damp}} \tilde{u}_2$ eingesetzt. Hier wird $c_{\text{damp}} = 0,001$ gesetzt. Da dieser Dämpfungsterm in seiner Wirkung auf die Geschwindigkeit der Partikel ebenso wirkt wie der wandnormale Druckgradient, wurde er an dieser Stelle zusätzlich eingefügt. Der modifizierte wandnormale Druckgradient wird hier deshalb berechnet mit

$$\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_2} = - \frac{\partial \widetilde{\bar{\rho} u_2'' u_2''}}{\partial x_2} - c_{\text{damp}} \bar{\rho} \tilde{U}_{2\text{damp}} / \Delta t \quad (3.27)$$

Für die Änderung der Partikelposition wird als Geschwindigkeit das arithmetische Mittel der Geschwindigkeit vor und nach der Beschleunigung durch den mittleren Druckgradienten verwendet [6].

Die restlichen Partikeleigenschaften bleiben bei diesem Teilschritt unverändert.

3.2.4. Randbedingungen

Das verwendete Rechengitter besitzt zwei Ränder: Die Wand und die Mitte des Kanals. An diesen Stellen müssen Randbedingungen für die Partikeleigenschaften und die gemittelten Feldgrößen erfüllt werden.

3.2.4.1. Randbedingungen in der Kanalmitte

Die Randbedingungen in der Mitte der Strömung ergeben sich aus der Symmetrie des Kanals. Für alle Feldgrößen außer \tilde{u}_2 und $\widetilde{u_1''u_2''}$ gilt an dieser Stelle $\frac{\partial}{\partial x_2} = 0$. Wegen der Impulserhaltung muss für \tilde{u}_2 gelten: $\tilde{u}_2 = 0$. Für die Geschwindigkeitskomponente in wandnormaler Richtung gilt demnach eine ungerade Symmetriebedingung. Die Reynoldsspannung $\widetilde{u_1''u_2''}$ weist auch eine Punktsymmetrie zur Ebene in der Kanalmitte auf und ist deshalb an dieser Stelle gleich 0 [8]. Auf die Partikel angewendet bedeutet dies, dass für jedes Partikel, das während eines Zeitschritts die Grenze der letzten Zelle in der Kanalmitte in Richtung der Wand bei $x_2 = 2h$ überschreitet und somit das Rechengebiet verlässt, ein Partikel mit denselben Eigenschaften, aber mit einer wandnormalen Geschwindigkeit mit entgegengesetztem Vorzeichen, aus der Nachbarzelle außerhalb des Rechengebiets in die Zelle, die an die Mitte des Kanals angrenzt, eintritt, wie dies in Abbildung 3.2 dargestellt ist. Die Position des Partikels wird an der Symmetrieebene bei $x_2 = h$ gespiegelt.

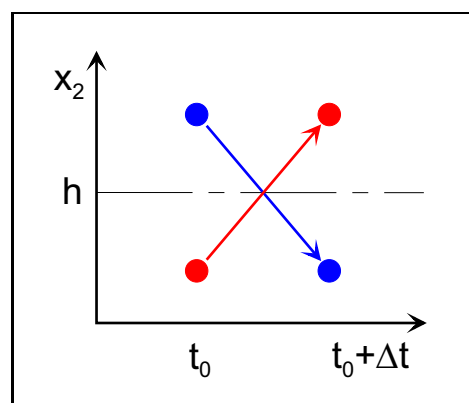


Abbildung 3.2.: Partikelaustausch in den Zellen in der Kanalmitte. Für jedes Partikel, das das Rechengebiet verlässt, tritt ein mit diesem bezüglich der Eigenschaften identisches Partikel in die Zelle ein.

Für die Partikel, deren x_2 -Koordinate nach der Anwendung der drei oben darge-

3. Implementierung

stellten Teilschritte größer ist als die halbe Kanalbreite h , gilt damit

$$u_2^*(t + \Delta t) = -u_2^{*(3)} \quad (3.28)$$

$$x_2^*(t + \Delta t) = 2h - x_2^{*(3)} \quad . \quad (3.29)$$

Alle anderen Partikeleigenschaften bleiben unverändert.

3.2.4.2. Randbedingungen an der Wand

An der Wand gibt es zunächst einmal die Undurchlässigkeitsbedingung. Die Partikel können das Rechengebiet an dieser Stelle nicht verlassen. Weiter gilt an der Wand die Haftbedingung, wonach die Geschwindigkeit an der Wand gleich der Wandgeschwindigkeit ist; im betrachteten Fall ist sie gleich 0. Diese Bedingung gilt für die Mittelwerte der Geschwindigkeitskomponenten in alle Richtungen wie für die Partikeleigenschaft Geschwindigkeit gleichermaßen. Die Auswahl der Partikel, auf die diese Randbedingungen angewendet werden, ist allerdings nicht so einfach anhand der x_2 -Koordinate der Partikel zu treffen, wie in der Mitte der Strömung. Außer den Partikeln, die eine negative x_2 -Koordinate aufweisen, können auch Partikel mit positiver Koordinate während des Zeitschritts an die Wand gestoßen sein; ob auf die Partikel die Randbedingungen an der Wand anzuwenden sind, hängt also davon ab, welchen Weg die Partikel während des Zeitschritts genommen haben, wie auf Abbildung 3.3 zu sehen ist.

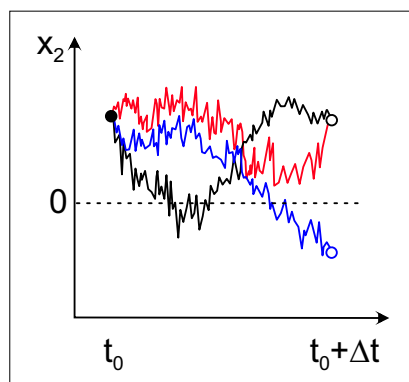


Abbildung 3.3.: Mögliche Wege der Partikel in Wandnähe während eines Zeitschritts.

Während in Abbildung 3.3 ein Partikel nach dem Zeitschritt seine Position mit $x_2 > 0$ erreicht hat, ohne die Wand bei $x_2 = 0$ zu berühren (rote Linie), ist das andere Partikel mit positiver x_2 -Koordinate auf seinem Weg an die Wand gestoßen

3.2. Lösungsalgorithmus

(schwarze Linie). Da bei der beim Teilschritt-Algorithmus verwendeten Zeitintegration nur die Position nach dem Zeitschritt, nicht aber die Bahn während des Zeitschritts bestimmt wird, muss dieser Vorgang mit einem weiteren stochastischen Prozess modelliert werden. Der hierfür verwendete Prozess geht davon aus, dass die Wahrscheinlichkeit für ein Partikel, das sich zu Beginn des Zeitschritts an der Position $x_{2,0}$ befindet, auf seinem Weg nach $x_{2,1}$ während des Zeitschritts Δt die Wand zu berühren, bestimmen lässt [73] mit

$$P[\min\{x_{2,\Delta t} < 0 | x_2(t=0) = x_{2,0}, x_2(t=\Delta t) = x_{2,1}\}] = e^{-\frac{x_{2,0} x_{2,1}}{\nu \Delta t}} \quad . \quad (3.30)$$

Die Randbedingungen werden deshalb auf die Partikel angewendet, die eine negative x_2 -Koordinate besitzen und zusätzlich auf alle Partikel in der wandnächsten Zelle mit $x_2 > 0$, bei denen $\eta < e^{-\frac{x_{2,0} x_{2,1}}{\nu \Delta t}}$, wobei η eine im Intervall $[0;1]$ gleichmäßig verteilte Zufallsvariable ist [6].

Die Geschwindigkeitskomponenten der mittels dieses Prozesses bestimmten Partikel werden gleich null gesetzt und ihre Position auf den Betrag ihrer x_2 -Koordinate.

Für die mittlere turbulente Frequenz ω lässt sich aus der Transportgleichung 2.38 herleiten, dass an der Wand

$$\nu \frac{\partial^2 k}{\partial x_2^2} - \epsilon = 0 \quad (3.31)$$

gelten muss. Da weiter gilt: $k(0) = 0$ und $\frac{\partial k}{\partial x_2} = 0$, ist ω an der Wand mit Gleichung 2.162

$$\omega(x_2 = 0) = \frac{1}{c_T} \frac{\partial \sqrt{2k}}{\partial x_2} \quad . \quad (3.32)$$

Die mittlere turbulente Frequenz wird an der Wand auf diesen Wert gesetzt. Die Partikeleigenschaft ω^* wird für die Partikel, die die Wand berührt haben, durch eine Zufallsvariable mit einer Gammaverteilung mit dem Mittelwert der turbulenten Frequenz an der Wand bestimmt [6,8].

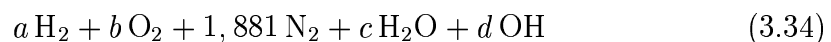
Die Werte der für die Bestimmung der Koeffizienten des GLM benötigten Größen sind an der Wand entweder gleich null oder durch den Satz von l'Hospital zur Bestimmung von Grenzwerten [56] erhältlich. Wie im Anhang dargestellt ist, kann auch der Ausdruck $\frac{\epsilon}{k}$ an der Wand angenähert werden durch

$$\frac{\epsilon}{k} \Big|_{x_2=0} \approx \frac{\epsilon}{k} \Big|_{x_2=0,5\Delta s_1} \quad , \quad (3.33)$$

wobei Δs_1 der Gitterabstand der ersten Zelle ist.

3. Implementierung

Im Fall einer durch die Wand heterogen katalysierten reaktiven Strömung gibt es auch eine Randbedingung für die chemischen Spezies, da dann an der Wand Reaktionen stattfinden, für die ein eigener Reaktionsmechanismus angewendet werden muss. Bei der hier betrachteten reaktiven Strömung wurde dafür der in Tabelle 2.2 beschriebene Mechanismus verwendet. Zur Reduzierung des Rechenaufwands wurden die Reaktionsgeschwindigkeiten für alle an der Wand vorkommenden Spezies in Abhängigkeit vom Massenbruch für OH-Radikale und H₂-Moleküle sowie der Temperatur tabelliert und für jedes Partikel, das an die Wand stößt, interpoliert. Die Schlüsselkomponenten zur Tabellierung wurden in Übereinstimmung mit der Sensitivitätsanalyse in [41] gewählt. Damit zwei chemische Spezies als Schlüsselkomponenten zur Beschreibung des chemischen Systems ausreichen, wurde bei der Tabellierung für die Gemischzusammensetzung vereinfacht angenommen, das System enthalte ausschließlich H₂, O₂, H₂O, OH und die inerte Komponente N₂. Zu Beginn bestehe das System aus einem unverbrannten Gemisch aus ϕ Mol H₂ und 2,381 Mol Luft. Der Faktor ϕ ist das Brennstoff/Luft-Äquivalenzverhältnis, das kennzeichnet, ob das Verbrennungsgemisch Brennstoff im Überschuss enthält, also ein fettes Gemisch ($\phi > 1$) vorliegt, oder die Verbrennung unter Luftüberschuss, also in einem mageren Gemisch ($\phi < 1$), stattfindet. Gebräuchlich für die Charakterisierung ist auch der Kehrwert $\lambda = \frac{1}{\phi}$, der als Luftzahl bezeichnet wird. Ausgehend vom eben beschriebenen Anfangszustand des Gemisches kann die Zusammensetzung des Systems zu jedem späteren Zeitpunkt mit



dargestellt werden. Die Koeffizienten a , b , c und d sind die Stoffmengen der chemischen Spezies im reduzierten chemischen System. Zu Beginn der Reaktion ist a gleich ϕ , dem Verhältnis von eingesetztem Brennstoff zum für stöchiometrische Reaktion benötigten Brennstoff; nach vollständigem Verbrauch von H₂ ist a gleich 0. Damit lassen sich für die an der Reaktion beteiligten Elemente Bilanzgleichungen aufstellen

$$\text{für H} \quad : \quad 2a + 2c + d = 2\phi \quad \text{und} \quad (3.35)$$

$$\text{für O} \quad : \quad 2b + c + d = 1 \quad . \quad (3.36)$$

Auf der linken Seite der Bilanzgleichungen steht die momentane Verteilung auf die verschiedenen chemischen Spezies, auf der rechten Seite die Menge zu Beginn.

3.2. Lösungsalgorithmus

Da Pt und N₂ bei der Reaktion nicht verbraucht werden, sind dafür keine Erhaltungsgleichungen nötig. Beim hier simulierten System herrschen magere Verbrennungsbedingungen; $\phi = 0,24$. Nach Vorgabe von zwei Koeffizienten, a und d , können die restlichen Koeffizienten, b und c , mit

$$b = \frac{1}{2} \left(1 - \phi + a - \frac{1}{2}d \right) \quad \text{und} \quad (3.37)$$

$$c = \frac{1}{2}(2\phi - 2a - d) \quad (3.38)$$

bestimmt werden.

Da in der Simulation Massenbrüche verwendet werden, ist es zweckmäßig, auch für die Tabellierung Massenbrüche einzusetzen. Die Massenbrüche der reaktiven chemischen Spezies lassen sich für das oben beschriebene System formulieren als

$$Y_{\text{H}_2} = \frac{a M_{\text{H}_2}}{\phi M_{\text{H}_2} + 0,5 M_{\text{O}_2} + 0,5 \cdot 3,762 M_{\text{N}_2}} \quad , \quad (3.39)$$

$$Y_{\text{O}_2} = \frac{b M_{\text{O}_2}}{\phi M_{\text{H}_2} + 0,5 M_{\text{O}_2} + 0,5 \cdot 3,762 M_{\text{N}_2}} \quad , \quad (3.40)$$

$$Y_{\text{H}_2\text{O}} = \frac{c M_{\text{H}_2\text{O}}}{\phi M_{\text{H}_2} + 0,5 M_{\text{O}_2} + 0,5 \cdot 3,762 M_{\text{N}_2}} \quad \text{und} \quad (3.41)$$

$$Y_{\text{OH}} = \frac{d M_{\text{OH}}}{\phi M_{\text{H}_2} + 0,5 M_{\text{O}_2} + 0,5 \cdot 3,762 M_{\text{N}_2}} \quad . \quad (3.42)$$

Der Massenbruch von N₂ bleibt vom Anfang bis zum Ende der Reaktion konstant bei

$$Y_{\text{N}_2} = \frac{0,5 \cdot 3,762 M_{\text{N}_2}}{\phi M_{\text{H}_2} + 0,5 M_{\text{O}_2} + 0,5 \cdot 3,762 M_{\text{N}_2}} \quad . \quad (3.43)$$

Dabei sind M_α die molaren Massen der chemischen Spezies. Für vorgegebene Massenbrüche von H₂ und OH können die Koeffizienten a und d wie im Anhang beschrieben bestimmt werden zu

$$a = \left\{ Y_{\text{H}_2} \left[\frac{1}{2}(1 - \phi)M_{\text{O}_2} + \frac{1}{2} \cdot 3,762M_{\text{N}_2} + \phi M_{\text{H}_2\text{O}} \right] \right. \\ \cdot Y_{\text{OH}} \left[\left(-\frac{1}{4}M_{\text{O}_2} - \frac{1}{2}M_{\text{H}_2\text{O}} \right) + (Y_{\text{OH}} - 1) M_{\text{OH}} \right] \\ - Y_{\text{H}_2} \left(-\frac{1}{4}M_{\text{O}_2} - \frac{1}{2}M_{\text{H}_2\text{O}} + M_{\text{OH}} \right) \\ \left. \cdot Y_{\text{OH}} \left[\frac{1}{2}(1 - \phi)M_{\text{O}_2} + \frac{1}{2}3,762M_{\text{N}_2} + \phi M_{\text{H}_2\text{O}} \right] \right\} \cdot \frac{1}{\Delta} \quad (3.44)$$

3. Implementierung

und

$$\begin{aligned}
 d = & \left\{ Y_{\text{H}_2} \left[\left(\frac{1}{2} M_{\text{O}_2} - M_{\text{H}_2\text{O}} \right) + (Y_{\text{H}_2} - 1) M_{\text{H}_2} \right] \right. \\
 & \cdot Y_{\text{OH}} \left[\left(-\frac{1}{4} M_{\text{O}_2} - \frac{1}{2} M_{\text{H}_2\text{O}} \right) + (Y_{\text{OH}} - 1) M_{\text{OH}} \right] \\
 & - Y_{\text{H}_2} \left[\frac{1}{2} (1 - \phi) M_{\text{O}_2} + \frac{1}{2} \cdot 3,762 M_{\text{N}_2} + \phi M_{\text{H}_2\text{O}} \right] \\
 & \left. \cdot Y_{\text{OH}} \left(M_{\text{H}_2} + \frac{1}{2} M_{\text{O}_2} - M_{\text{H}_2\text{O}} \right) \right\} \cdot \frac{1}{\Delta} \quad , \quad (3.45)
 \end{aligned}$$

mit

$$\begin{aligned}
 \Delta = & Y_{\text{H}_2} \left[\left(\frac{1}{2} M_{\text{O}_2} - M_{\text{H}_2\text{O}} \right) + (Y_{\text{H}_2} - 1) M_{\text{H}_2} \right] \\
 & \cdot Y_{\text{OH}} \left[\left(-\frac{1}{4} M_{\text{O}_2} - \frac{1}{2} M_{\text{H}_2\text{O}} \right) + (Y_{\text{OH}} - 1) M_{\text{OH}} \right] \\
 & - Y_{\text{H}_2} \left(-\frac{1}{4} M_{\text{O}_2} - \frac{1}{2} M_{\text{H}_2\text{O}} + M_{\text{OH}} \right) \\
 & \cdot Y_{\text{OH}} \left[\left(-\frac{1}{4} M_{\text{O}_2} - \frac{1}{2} M_{\text{H}_2\text{O}} \right) + (Y_{\text{OH}} - 1) M_{\text{OH}} \right] \quad . \quad (3.46)
 \end{aligned}$$

Mit a und d werden die verbleibenden abhängigen Koeffizienten b und c nach den Gleichungen 3.37 und 3.38 berechnet. Für die Koeffizienten a , b , c und d gibt es Grenzen, die von der Anfangszusammensetzung des Gemisches abhängen. Für die Tabellierung ist daher zu beachten, dass a und d die Bedingungen

$$a \leq \phi \quad (3.47)$$

und

$$d \leq 2(\phi - a) \quad (3.48)$$

erfüllen.

Für die Erzeugung der Tabelle wird das Programm DETCHEMS [74] verwendet. Die Tabelle enthält die Reaktionsgeschwindigkeiten für alle im System vorkommenden Spezies, auch für die, die nicht als Eingangsgröße zu ihrer Bestimmung verwendet wurden. Die Temperatur wird als Parameter vorgegeben und ausgehend von einer unteren Grenze $T_{\min} = 400 \text{ K}$ bis zu einer Höchsttemperatur $T_{\max} = 1240 \text{ K}$ in Schritten von $\Delta T = 10 \text{ K}$ erhöht. Bei jeder Temperatur wird

3.2. Lösungsalgorithmus

ein trapezförmiges Gebiet tabelliert, das begrenzt wird durch Minimal- und Maximalwerte für Y_{H_2} und Y_{OH} , wobei $Y_{\text{H}_2, \text{min}} = 0$, $Y_{\text{OH}, \text{min}} = 0$ und die entsprechenden Maximalwerte bestimmt werden durch die Gleichungen 3.35 und 3.36 unter Verwendung der Randbedingungen gemäß den Gleichungen 3.47 bzw. 3.48. Weiter wird noch ein Höchstwert für Y_{OH} unabhängig von Y_{H_2} vorgegeben, der das Gebiet auf der Y_{OH} -Achse nach oben begrenzt. Dieser Wert wird hier auf $Y_{\text{OH}, \text{limit}} = 1 \cdot 10^{-3}$ gesetzt. Als Inkremente werden $\Delta Y_{\text{H}_2} = 2 \cdot 10^{-4}$ und $\Delta Y_{\text{OH}} = 2 \cdot 10^{-5}$ verwendet. Die Reaktionsgeschwindigkeiten r_α^s der chemischen Spezies haben die Dimension $[r_\alpha^s] = \frac{\text{kg}}{\text{m}^2 \text{s}}$.

Für die Anwendung auf das Monte-Carlo-System wird ein dynamisches Gleichgewicht zwischen der reaktiven Oberfläche und der angrenzenden Gasphase vorausgesetzt. Beteiligt an Reaktionen an der Wand sind die Partikel in der wandnächsten Zelle, die während eines Zeitschritts an die Wand gestoßen sind. Die Stoffmengenänderung Δn_α einer Spezies α während eines Zeitschritts Δt in einem Volumenelement V_{R} an der Wand, in dem sich die Partikel, die an der Wand reagieren, aufhalten, ist

$$\Delta n_\alpha = V_{\text{R}} \frac{\Delta c_\alpha}{\Delta t} \quad . \quad (3.49)$$

Für die auf der Wand auf der Fläche A_{R} während des Zeitschritts umgesetzte Stoffmenge gilt:

$$\Delta n_\alpha = A_{\text{R}} \frac{r_\alpha^s}{M_\alpha} \quad . \quad (3.50)$$

Da die Stoffmengenänderung der an die Wand gestoßenen Partikel durch die Oberflächenreaktionen verursacht werden, gilt

$$V_{\text{R}} \frac{\Delta c_\alpha}{\Delta t} = A_{\text{R}} \frac{r_\alpha^s}{M_\alpha} \quad . \quad (3.51)$$

Dabei ist M_α die molare Masse der Spezies α . Mit $Y_\alpha = \frac{c_\alpha M_\alpha}{\rho}$ gilt damit unter der Annahme, dass die Dichte während des Zeitschritts konstant bleibt, für die Änderung des Massenbruchs der Spezies α

$$\Delta Y_\alpha = \frac{r_\alpha^s}{\rho s_{\text{R}}} \Delta t \quad . \quad (3.52)$$

Das Längenmaß s_{R} ist das Verhältnis von reagierendem Volumen zu reaktiver Oberfläche. Es wird aus dem Volumenanteil der N_{wall} an den Oberflächenreaktionen beteiligten stochastischen Partikeln am Gesamtvolumen der N_1 in der

3. Implementierung

wandnächsten Zelle befindlichen Partikeln und der Gitterweite der Zelle Δs_1 bestimmt mit

$$s_R = \frac{\sum_{i=1}^{N_{\text{wall}}} \frac{1}{\rho_i^*} w_i^*}{\sum_{i=1}^{N_1} \frac{1}{\rho_i^*} w_i^*} \Delta s_1 \quad . \quad (3.53)$$

Die Partikelgrößen ρ_i^* und w_i^* sind die Dichte bzw. das numerische Gewicht des Partikels i . Bei der Bestimmung von s_R wird die tatsächliche räumliche Verteilung der Partikel, die während eines Zeitschritts an die Wand stoßen und reagieren, zu einer Anordnung in zwei Schichten vereinfacht, wie auf Abbildung 3.4 veranschaulicht ist.

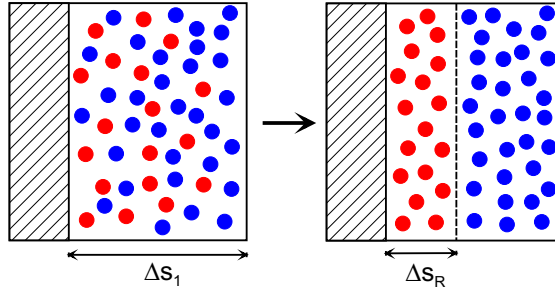


Abbildung 3.4.: Vereinfachung der räumlichen Verteilung der an der Wand reagierenden Partikel. Rote Punkte stehen für an die Wand stoßende Partikel, blaue Punkte für nicht an der Reaktion beteiligte Partikel.

Bei der Interpolation der Reaktionsgeschwindigkeiten für die Partikel werden ausgehend von ihrer Zusammensetzung und ihrer Temperatur die umgebenden Punkte der Tabelle gesucht und die Geschwindigkeiten mittels eines gewichteten Differenzen-Verfahrens interpoliert. Die zur Interpolation verwendete Formel lautet

$$r_\alpha^{s*} = \sum_{i=1}^{n_{\text{points}}} \left\{ \frac{r_\alpha^{s_i} \left(1 - \frac{\Delta Y_{\text{OH}}^i}{\Delta Y_{\text{OH}}}\right) \left(1 - \frac{\Delta Y_{\text{H}_2}^i}{\Delta Y_{\text{H}_2}}\right) \left(1 - \frac{\Delta T^i}{\Delta T}\right)}{\sum_{i=1}^{n_{\text{points}}} \left[\left(1 - \frac{\Delta Y_{\text{OH}}^i}{\Delta Y_{\text{OH}}}\right) \left(1 - \frac{\Delta Y_{\text{H}_2}^i}{\Delta Y_{\text{H}_2}}\right) \left(1 - \frac{\Delta T^i}{\Delta T}\right) \right]} \right\} \quad . \quad (3.54)$$

Dabei sind ΔY_{OH} , ΔY_{H_2} und ΔT die Gitterabstände der Zelle der Tabelle, in der sich das Partikel, für das interpoliert werden soll, befindet. Weiter sind ΔY_{OH}^i , $\Delta Y_{\text{H}_2}^i$ und ΔT^i die Abstände der unabhängigen Variablen des Partikels von denjenigen des zur Interpolation verwendeten Eckpunktes i der Zelle der Tabelle, die das Partikel umgibt. Die Geschwindigkeit der Spezies α , die beim Gitterpunkt i tabelliert ist, wird mit $r_\alpha^{s_i}$ bezeichnet und die an der Stelle des Partikels interpolierte Geschwindigkeit heißt r_α^{s*} .

3.2. Lösungsalgorithmus

Zur Ermittlung der zur Interpolation benötigten n_{points} Punkte können insgesamt 20 Fälle unterschieden werden, die sich zur weiteren Behandlung zu acht Kategorien zusammenfassen lassen, die in Tabelle 3.1 dargestellt sind. Dabei wird nur die $Y_{\text{OH}} - Y_{\text{H}_2}$ -Ebene betrachtet, da in Richtung der dritten unabhängigen Variablen, T , keine Besonderheiten zu beachten sind. Diese Vielzahl von möglichen Fällen ergibt sich aus der Form der Tabelle, die in der $Y_{\text{OH}} - Y_{\text{H}_2}$ -Ebene auch nichtrechteckige Randzellen aufweist.

1 :	$[Y_{\text{OH}}^{\text{max}}(Y_{\text{H}_2}^1) \geq Y_{\text{OH}}^2 \wedge Y_{\text{OH}}^{\text{max}}(Y_{\text{H}_2}^2) \geq Y_{\text{OH}}^2]$ $\vee \{ [Y_{\text{OH}}^{\text{max}}(Y_{\text{H}_2}^1) \leq Y_{\text{OH}}^2 \wedge Y_{\text{OH}}^{\text{max}}(Y_{\text{H}_2}^1) > Y_{\text{OH}}^1]$ $\wedge [Y_{\text{OH}}^{\text{max}}(Y_{\text{H}_2}^2) \leq Y_{\text{OH}}^2 \wedge Y_{\text{OH}}^{\text{max}}(Y_{\text{H}_2}^2) > Y_{\text{OH}}^1] \}$
2 :	$[Y_{\text{OH}}^{\text{max}}(Y_{\text{H}_2}^1) < Y_{\text{OH}}^2 \wedge Y_{\text{OH}}^{\text{max}}(Y_{\text{H}_2}^1) > Y_{\text{OH}}^1]$ $\wedge [Y_{\text{OH}}^{\text{max}}(Y_{\text{H}_2}^2) < Y_{\text{OH}}^2 \wedge Y_{\text{OH}}^{\text{max}}(Y_{\text{H}_2}^2) > Y_{\text{OH}}^1]$
3 :	$[Y_{\text{OH}}^{\text{max}}(Y_{\text{H}_2}^1) \leq Y_{\text{OH}}^1 \wedge Y_{\text{OH}}^{\text{max}}(Y_{\text{H}_2}^2) > Y_{\text{OH}}^2]$
4 :	$[Y_{\text{OH}}^{\text{max}}(Y_{\text{H}_2}^1) \leq Y_{\text{OH}}^1] \wedge [Y_{\text{OH}}^{\text{max}}(Y_{\text{H}_2}^2) \leq Y_{\text{OH}}^2 \wedge Y_{\text{OH}}^{\text{max}}(Y_{\text{H}_2}^2) > Y_{\text{OH}}^1]$
5 :	$[Y_{\text{OH}}^{\text{max}}(Y_{\text{H}_2}^1) = Y_{\text{OH}}^1] \wedge [Y_{\text{OH}}^{\text{max}}(Y_{\text{H}_2}^2) = Y_{\text{OH}}^2]$
6 :	$[Y_{\text{OH}}^{\text{max}}(Y_{\text{H}_2}^1) > Y_{\text{OH}}^2] \wedge [Y_{\text{OH}}^{\text{max}}(Y_{\text{H}_2}^2) < Y_{\text{OH}}^2 \wedge Y_{\text{OH}}^{\text{max}}(Y_{\text{H}_2}^2) > Y_{\text{OH}}^1]$
7 :	$[Y_{\text{OH}}^{\text{max}}(Y_{\text{H}_2}^1) > Y_{\text{OH}}^2] \wedge [Y_{\text{OH}}^{\text{max}}(Y_{\text{H}_2}^2) \leq Y_{\text{OH}}^1]$
8 :	$[Y_{\text{OH}}^{\text{max}}(Y_{\text{H}_2}^1) \leq Y_{\text{OH}}^2 \wedge Y_{\text{OH}}^{\text{max}}(Y_{\text{H}_2}^1) > Y_{\text{OH}}^1] \wedge [Y_{\text{OH}}^{\text{max}}(Y_{\text{H}_2}^2) \leq Y_{\text{OH}}^1]$

Tabelle 3.1.: Fälle bei der Bestimmung der zur Interpolation zu verwendenden Punkte.

Die Indizes 1 und 2, in der Tabelle hochgestellt, stehen für den Wert des Massenbruchs der entsprechenden Spezies an der unteren bzw. oberen Zellgrenze. $Y_{\text{OH}}^{\text{max}}(Y_{\text{H}_2})$ ist die durch Gleichung 3.48 festgelegte Grenzlinie. Bei Fall 1 in der Tabelle ist der Normalfall einer rechteckigen Zelle enthalten; in den anderen Fällen schneidet die Linie von $Y_{\text{OH}}^{\text{max}}(Y_{\text{H}_2})$ die Zelle. Dann wird der Schnittpunkt der Linie mit den Gitterlinien zur Interpolation verwendet. Eine Übersicht über alle möglichen Fälle und die Auswahl der zur Interpolation herangezogenen Punkte ist im Anhang enthalten. Liegt der Punkt, an dem die Geschwindigkeiten bestimmt werden sollen außerhalb des tabellierten Bereichs, so werden die Geschwindigkeiten gleich null gesetzt.

Die Zeitintegration der Reaktionsgeschwindigkeiten erfolgt wie im Fall der homogenen Reaktion in der Gasphase durch ein Runge-Kutta-Verfahren zweiter Ordnung mit der bereits weiter oben beschriebenen Zeitschrittsteuerung.

3. Implementierung

Auch für die Temperatur der Partikel muss eine Randbedingung an der Wand vorgegeben werden. Die Temperatur der Wand selbst liegt konstant bei $T_{\text{wall}} = 1220 \text{ K}$. Für die Varianz der Partikeltemperatur gilt an der Wand, wie für die Varianzen der Geschwindigkeiten, $\widetilde{T''T''} = 0$. Somit liegt nahe, analog zur Randbedingung für die Geschwindigkeit der an die Wand gestoßenen Partikel, die Temperatur der Partikel der Wandtemperatur gleichzusetzen. Anders als beim Wärme- und Stoffaustausch zwischen den Partikeln gibt es aber hier die Möglichkeit, den Wärmetransport zwischen Wand und Partikeln mit einer anderen Geschwindigkeit ablaufen zu lassen als den Stofftransport. Im vorliegenden Fall hat die Lewiszahl Le , die das Verhältnis von Stoff- zu Wärmetransport angibt, den Wert 0,3 [83]. Das bedeutet, dass der diffusive Stofftransport für den Brennstoff Wasserstoff deutlich schneller abläuft, als der Wärmetransport. Dieses Ungleichgewicht kann für die Partikel, die an die Wand stoßen und dort reagieren, dadurch berücksichtigt werden dass jedes dieser Partikel für die Partikeleigenschaft Temperatur nicht den Wert der als konstant angenommenen Wandtemperatur T_{wall} zugewiesen bekommt, sondern

$$T_{\text{wall}}^* = T^* + Le (T_{\text{wall}} - T^*) \quad . \quad (3.55)$$

Hierbei ist T_{wall}^* bzw. T^* die Partikeltemperatur nach bzw. vor der Berührung der Wand.

3.2.5. Bestimmung des Zeitschritts

Bei der Festlegung des Zeitschritts muss beachtet werden, dass sich kein Partikel während dieses Zeitschritts weiter als in eine benachbarte Zelle bewegt. Explizite Verfahren, wie das hier verwendete, sind sonst nicht mehr stabil. Zur Berechnung des Zeitschritts wird der konvektive und diffusive Transport jedes Partikels berücksichtigt. Der Zeitschritt Δt_{konv} , der sich bei ausschließlich konvektivem Transport ergibt, ist

$$\Delta t_{\text{konv}} = \frac{\Delta s}{u_2^{*,\text{max}}} \quad , \quad (3.56)$$

wobei Δs den kleineren der beiden Gitterabstände der beiden Nachbarzellen darstellt und $u_2^{*,\text{max}}$ der Betrag der größten Geschwindigkeit in wandnormaler Richtung aller Partikel in der betrachteten Zelle ist. Für den diffusiven Transport lässt

3.2. Lösungsalgorithmus

sich ein Zeitschritt Δt_{Fo} aus einer Gitter-Fourierzahl bestimmen [75] nach

$$\Delta t_{\text{Fo}} = \frac{1}{2} \frac{\Delta s^2}{\nu_{\text{eff}}} \quad . \quad (3.57)$$

Die effektive Viskosität ν_{eff} ist dabei nach dem verwendeten RSM

$$\nu_{\text{eff}} = \nu + 0,12 k^2 \epsilon \quad . \quad (3.58)$$

Der Gesamtzeitschritt ergibt sich aus diesen beiden Teilzeitschritten analog dem Gesetz zur Parallelschaltung von Ohmschen Widerständen, da beide Vorgänge gleichzeitig, also parallel, ablaufen zu

$$\Delta t = \frac{1}{\frac{1}{\Delta t_{\text{konv}}} + \frac{1}{\Delta t_{\text{Fo}}}} \quad . \quad (3.59)$$

Der so bestimmte Zeitschritt wird durch Multiplikation mit einem Sicherheitsfaktor $S_t < 1$ reduziert, da zusätzliche Schwankungen durch die Verwendung von endlich vielen Partikeln induziert werden können, die den zulässigen Bereich für den Zeitschritt weiter verkleinern. Die Wahl des Sicherheitsfaktors ist abhängig von den Gitterabständen sowie der Reynoldszahl und muss durch Ausprobieren getroffen werden.

Ein solcher Zeitschritt wird für jede Zelle bestimmt und der kleinste von allen schließlich als Zeitschritt für alle Zellen verwendet.

Würde für jede Zelle ein eigener Zeitschritt benutzt, so käme es zum Verschwinden und zur Verdopplung von stochastischen Partikeln durch eine nicht mehr eindeutige Zuordnung der Partikel zu den Zellen beim Sortiervorgang. Dies soll an folgendem Beispiel eingehender erläutert werden. Zur Illustration dient Abbildung 3.5. Bei einem Gitter, das aus drei Zellen besteht, sei der Zeitschritt in Zelle 1 der kleinste und der von Zelle 3 der größte, so dass gilt $\Delta t_1 < \Delta t_2 < \Delta t_3$. Nun soll für die Bewegung und das Sortieren der jeweils kleinste Zeitschritt der gerade betrachteten Zelle und ihrer Nachbarzelle gewählt werden. Das bedeutet, bei Zelle 1 und 2 wird Δt_1 verwendet, bei Zelle 3 Δt_2 . In Zelle 2 werden nun die Partikel einsortiert, welche die Zelle während Δt_1 nicht verlassen und die, die während Δt_1 aus Zelle 1 oder Zelle 3 in Zelle 2 überwechseln. Dabei kann es vorkommen, dass ein Partikel – in Abbildung 3.5 ist dies Partikel 5 –, das zu Beginn in Zelle 2 ist und sich in Richtung Zelle 3 bewegt, bei Δt_1 die Zellgrenze

3. Implementierung

zwischen Zelle 2 und 3 noch nicht überschreitet, während er bei Verwendung von $\Delta t_2 > \Delta t_1$ bereits in die Zelle 3 gelangen würde. Dies hätte zur Folge, dass dieses Partikel einmal in Zelle 2 und dann nochmal in Zelle 3 einsortiert würde. Umgekehrt könnte ein Partikel – in der Abbildung 3.5 Partikel 7 –, das zu Beginn in Zelle 3 ist und sich in Richtung Zelle 2 bewegt, bei Δt_1 noch in Zelle 3 bleiben, aber bei Δt_2 , der zur Sortierung in Zelle 3 verwendet wird, bereits die Zelle 3 verlassen haben. Die Folge wäre, dass dieses Partikel weder in Zelle 2 noch in Zelle 3 einsortiert würde, sondern einfach verschwunden wäre.

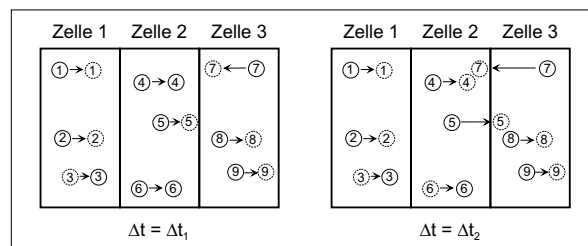


Abbildung 3.5.: Bewegung und Sortierung der Partikel bei Verwendung von unterschiedlichen Zeitschritten für jede Zelle.

Die dadurch verursachten Schwankungen in der Partikelanzahl und Gesamtmasse des betrachteten Systems (in der Größenordnung von etwa 1⁰/₀₀ pro Zeitschritt) sind in kalten Strömungen mit konstanter Dichte, bei denen nur der Steady State bestimmt werden soll, noch vertretbar [57], aber bei einer reaktiven Strömung, bei der eine zeitliche Entwicklung berechnet wird, nicht akzeptabel.

Ein für jedes Partikel individuell bestimmter Zeitschritt hingegen wäre prinzipiell möglich, ist wegen des damit verbundenen enormen Rechenaufwands aber praktisch nicht anwendbar.

3.2.6. Bestimmung der Mittelwerte

Die Ensemblemittelung zu verschiedenen Zeitpunkten wird hier als Schätzwert und somit als Näherung für die zeitliche Mittelung verwendet. Zur Berechnung der Ensemblemittelwerte der Feldgrößen \vec{u} , $\bar{\rho}$ und $\vec{\phi}$ wird die räumliche Verteilung der Partikel in den Zellen berücksichtigt, indem eine Bestimmung der gemittelten Größen an den Zellgrenzen durch Linear-Least-Square-Splines erster Ordnung durchgeführt wird [19]. Dabei wird der Abstand des Partikels zur Zellgrenze bei der Mittelung als Gewichtungsfaktor benutzt. Je näher ein Partikel

3.2. Lösungsalgorithmus

an der Zellgrenze ist, desto höher ist dieser Faktor, der maximal den Wert 1 annehmen kann, wenn sich ein Partikel exakt auf der Zellgrenze befindet. Zur Veranschaulichung dient Abbildung 3.6.

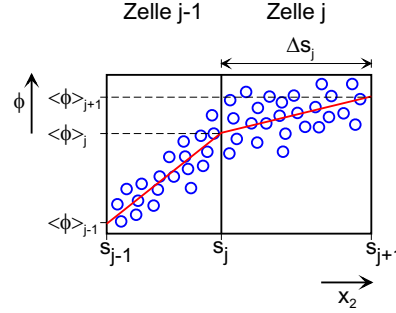


Abbildung 3.6.: Mittelung durch Linear Least Square Splines.

Für jeden Gitterpunkt s_j werden die Partikel in der Zelle links und rechts von diesem Gitterpunkt, also Zelle $j - 1$ und Zelle j , verwendet. Der Gewichtungsfaktor w^i ist für jedes Partikel i gegeben durch

$$w^i = 1 - \left| \frac{s_j - x_2^i}{\Delta s_j^i} \right| . \quad (3.60)$$

Dabei ist x_2^i die x_2 -Koordinate des Partikels i und Δs_j^i der Gitterabstand der Zelle j , in der sich das Partikel i befindet. Der Favre-Mittelwert $\tilde{\Phi}_j$ einer Größe Φ an der Zellgrenze s_j wird dann bestimmt nach

$$\tilde{\Phi}_j = \frac{\sum_{i=1}^{n_{j-1}+n_j} (\rho^i \Phi^i w_{\text{num}}^i w^i)}{\bar{\rho}(s_j) \sum_{i=1}^{n_{j-1}+n_j} (w_{\text{num}}^i w^i)} . \quad (3.61)$$

Hierbei sind ρ^i und w_{num}^i die Dichte bzw. das numerische Gewicht des Partikels i . Ein ähnliches Verfahren wurde bereits weiter oben bei der Interpolation der Reaktionsgeschwindigkeiten an der Wand benutzt. Bei der Bestimmung der mittleren Dichte ist zu beachten, dass nicht direkt über die Partikeldichte, sondern über den Kehrwert der Partikeldichte gemittelt werden und zum Schluss wieder der Kehrwert dieses mittleren spezifischen Volumens gebildet werden muss. Die mittlere Dichte $\bar{\rho}$ wird somit berechnet mittels

$$\bar{\rho}(s_j) = \left[\frac{\sum_{i=1}^{n_{j-1}+n_j} \left(\frac{1}{\rho^i} w_{\text{num}}^i w^i \right)}{\sum_{i=1}^{n_{j-1}+n_j} (w_{\text{num}}^i w^i)} \right]^{-1} . \quad (3.62)$$

3. Implementierung

Eine ausführliche Beschreibung der Eigenschaften von Least Square Splines ist in [76] zu finden.

Die Reynoldsspannungen werden auf eine andere Weise bestimmt, da es sich bewährt hat, für deren Bestimmung ein zu den Knotenpunkten, die zur Bestimmung der gemittelten Geschwindigkeiten benutzt werden, versetztes Gitter zu verwenden [68]. Hier wird das Gitter, das durch die Zellmittelpunkte aufgestellt wird, zur Lokalisierung der Mittelwerte herangezogen. Die Favre-gemittelten Reynoldsspannungen $\widetilde{u_k'' u_l''}$ an den Zellmittelpunkten s_j^m der Zelle j werden berechnet nach

$$\widetilde{u_k'' u_l''}(s_j^m) = \frac{\sum_{i=1}^{n_j} [\rho^i w_{\text{num}}^i (u_k^i - \tilde{u}_k^i)(u_l^i - \tilde{u}_l^i)]}{\bar{\rho}^i \sum_{i=1}^{n_j} w_{\text{num}}^i} . \quad (3.63)$$

Dabei ist $\bar{\rho}^i$ die mittlere Dichte und \tilde{u}_k^i die mittlere Geschwindigkeit an der Stelle des Partikels i , die durch lineare Interpolation zwischen den Werten an den Zellgrenzen der Zelle j bestimmt werden.

Die Interpolation vom Gitter der Zellmittelpunkte auf das Gitter der Zellgrenzen erfolgt durch ein MLU-Verfahren [68], das die Eigenschaft besitzt, lokale Maxima nicht weiter zu verstärken und somit Oszillationen, wie sie bei gewöhnlichen Upwind- oder Central-Difference-Diskretisierungen auftreten können, zu verhindern. Bei diesem Verfahren, das zur Klasse der Delimiter-Upwind-Verfahren [77] gehört, wird die mittlere Geschwindigkeit in Richtung der Zellgrenzen bei der Bestimmung der zur Interpolation verwendeten Steigung berücksichtigt. Dabei wird zunächst die Steigung a der Geraden berechnet, die die Mittelwerte einer Größe Φ vom Zellmittelpunkt s_j^m zum Mittelpunkt der benachbarten Zelle s_{j+1}^m verbindet nach

$$a = \frac{\Phi(s_{j+1}^m) - \Phi(s_j^m)}{s_{j+1}^m - s_j^m} . \quad (3.64)$$

Eine zweite Steigung, b , wird in Abhängigkeit vom Vorzeichen der Geschwindigkeit in Richtung der Zellgrenzen, hier \tilde{u}_2 , bestimmt. Ist das Vorzeichen positiv, so ist diese Steigung

$$b = \frac{\Phi(s_j^m) - \Phi(s_{j-1}^m)}{s_j^m - s_{j-1}^m} , \quad (3.65)$$

andernfalls ist

$$b = \frac{\Phi(s_{j+2}^m) - \Phi(s_{j+1}^m)}{s_{j+2}^m - s_{j+1}^m} . \quad (3.66)$$

Weiter wird eine Funktion minmod definiert durch

$$\text{minmod}(a, b) = \begin{cases} a & \text{für } |a| \leq |b| \wedge a \cdot b > 0 \\ b & \text{für } |a| > |b| \wedge a \cdot b > 0 \\ 0 & \text{für } a \cdot b \leq 0 \end{cases} . \quad (3.67)$$

Damit wird dann die Steigung si für die Interpolation auf die Zellgrenze s_{j+1} ermittelt mit

$$si = \text{minmod} \left(0,5(a + b); 1 + \frac{\Delta s_j}{\Delta s_{j+1}} \text{minmod}(a, b) \right) , \quad (3.68)$$

wenn $\tilde{u}_2 > 0$, bzw. im Fall $\tilde{u}_2 < 0$

$$si = \text{minmod} \left(0,5(a + b); 1 + \frac{\Delta s_{j+1}}{\Delta s_j} \text{minmod}(a, b) \right) . \quad (3.69)$$

Diese Unterscheidung wird benötigt wegen des Gitters mit nicht gleichförmigem Gitterabstand. Die Größe Φ wird dann an der Zellgrenze s_{j+1} , wieder in Abhängigkeit des Vorzeichens von \tilde{u}_2 , berechnet nach

$$\Phi(s_{j+1}) = \begin{cases} \Phi(s_j^m + si) \frac{1}{2} \Delta s_j & \text{für } \tilde{u}_2 > 0 \\ \Phi(s_{j+1}^m - si) \frac{1}{2} \Delta s_{j+1} & \text{für } \tilde{u}_2 < 0 \end{cases} . \quad (3.70)$$

Im Fall $\tilde{u}_2 = 0$ wird linear zwischen den Zellmittelpunkten interpoliert. Durch die Verwendung der verschiedenen Steigungen und der Funktion minmod wird gewährleistet, dass bei einer Änderung des Vorzeichens des Gradienten von Φ an der Stelle des Vorzeichenwechsels der Gradient auch tatsächlich den Wert 0 annimmt. Dadurch können Über- und Unterschwingen vermieden werden. Dieser Fall des Vorzeichenwechsels ist in der folgenden Abbildung 3.7 dargestellt.

Die so erhaltenen Mittelwerte werden dann noch zu den Mittelwerten der vergangenen Zeitschritte relaxiert. Der dabei benutzte Relaxationsfaktor ist 0,05 , d.h. es wird ein gleitender Durchschnitt über die letzten 20 Zeitschritte gebildet.

Das Profil der turbulenten Frequenz ω kann auf die gleiche Art und Weise berechnet werden wie die Felder der mittleren Geschwindigkeiten. Es zeigt sich aber, dass bei einer Bestimmung analog zu den Reynoldsspannungen und anschließender Interpolation auf das Gitter der Zellgrenzen ein glättender Effekt aller Profile erreicht werden kann und die Reynoldsspannungen dadurch insgesamt etwas geringere Werte annehmen.

3. Implementierung

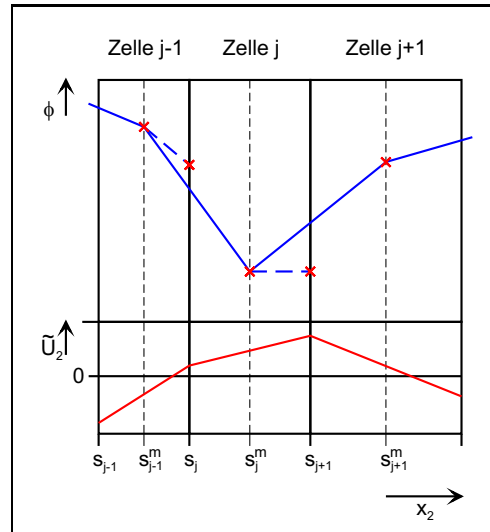


Abbildung 3.7.: Interpolation einer Größe Φ mittels MLU-Verfahrens bei Vorzeichenwechsel des Gradienten von Φ .

Im Fall der reaktiven Strömung, bei welcher der zeitliche Verlauf dargestellt werden soll, werden die Felder der Mittelwerte aller Größen mit dem Programmpaket LOESS [78, 79] leicht geglättet. Der dabei verwendete geringe Wert von 0,06 bis 0,15, abhängig von der zu glättenden Größe, für den Glättungsparameter α stellt sicher, dass die Kurven durch die Glättung nicht verfälscht werden.

Die kinematische Viskosität ν wird bei der reaktiven Strömung als Funktion der Temperatur T mittels der Sutherland-Formel [80]

$$\nu = \frac{1}{\rho} b \frac{T^{1,5}}{S + T} \quad (3.71)$$

berechnet, wobei die Koeffizienten b und S durch lineare Regression aus Messwerten für die Viskosität von Luft [81] bestimmt wurden zu $b = 1,488 \cdot 10^{-6}$ und $S = 115,8909$. Die Übereinstimmung ist im gesamten betrachteten Temperaturbereich gut, wie auf Abbildung 3.8 zu sehen ist. Die relative Abweichung ist überall kleiner als 2,7 %, der absolute Fehler ist kleiner als $2 \cdot 10^{-6} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}$.

Alle Gradienten von gemittelten Feldgrößen werden durch Vorwärtsdifferenzen bestimmt und innerhalb einer Zelle aus den Werten an den Zellgrenzen linear interpoliert. Die Krümmungen werden aus Vorwärtsdifferenzen der Gradienten berechnet und in den Zellen ebenso interpoliert.

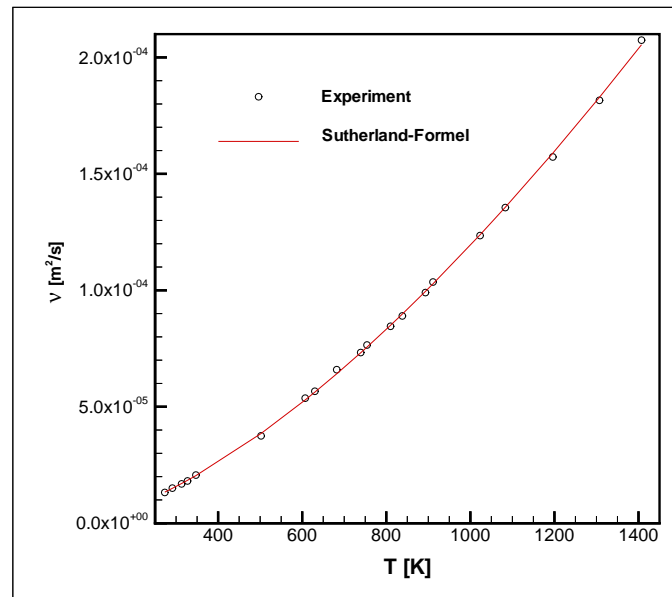


Abbildung 3.8.: Vergleich der gemessenen Werte der Viskosität ν mit nach der Sutherland-Formel bestimmten Werten in Abhängigkeit von der Temperatur.

3.2.7. Steuerung der Partikelanzahl

Um einerseits zu gewährleisten, dass in jeder Zelle ausreichend Partikel vorhanden sind, um die Mittelwerte mit einem geringen statistischen Fehler bestimmen zu können, andererseits aber die Partikelanzahl gering zu halten, um den Rechenaufwand zu begrenzen, muss auf eine gleichmäßige Verteilung der Partikel auf die Zellen geachtet werden.

Die zur Kontrolle der Anzahl der Partikel verwendeten Mechanismen werden als Clustern bzw. Clonen bezeichnet [5, 57].

Beim Clustern werden, um ein zu starkes Anwachsen der Partikelzahl in einer Zelle zu verhindern, beim Überschreiten einer vorher festgelegten Grenze aus den leichtesten Partikeln in der Zelle zufällig Paare gebildet. Bei jedem Paar wird das numerische Gewicht eines der beiden Partikel dann verdoppelt und die Werte für seine skalaren Partikeleigenschaften auf das arithmetische Mittel der beiden Partikel gesetzt, um die Massenerhaltung zu erfüllen. Die Geschwindigkeitskomponenten bleiben unverändert, da es sich zeigte, dass bei der Verwendung des gemeinsamen Mittelwerts die Reynoldsspannungen beeinflusst werden. Das zweite Partikel des Paares wird danach gelöscht.

3. Implementierung

Durch das Clonen werden in Zellen, in denen die Partikelanzahl unter einen Schwellenwert sinkt, die schwersten Partikel geteilt und so neue Partikel erzeugt. Dabei wird das numerische Gewicht halbiert und das Partikel mit allen seinen Eigenschaften kopiert.

Um das Teilen und Vereinigen der Partikel möglichst einfach durchführen zu können, werden als numerische Gewichte Zweier-Potenzen verwendet.

4. Ergebnisse

Mit den bisher beschriebenen Methoden wurden verschiedene reaktive und nicht-reaktive Fälle von Kanalströmungen simuliert, deren Ergebnisse weiter unten dargestellt werden.

4.1. Nichtreaktive Strömung

4.1.1. Randbedingungen

Für die hier betrachtete kalte Strömung wurden zum Vergleich eine direkte numerische Simulation [26] und verschiedene Messungen [24] herangezogen. Die DNS bzw. die Experimente unterscheiden sich bezüglich der Reynoldszahlen: Bei der DNS wurde, auf einen Kanal mit einem Plattenabstand von zwei Zentimetern übertragen, eine Reynoldszahl $Re_h = 3400$, bei den Experimenten dagegen wurden $Re_h = 12300, 30800$ und 61600 verwendet. Alle Experimente wurden in einem Kanal mit einem Plattenabstand von $2h = 0,127$ m durchgeführt. Ergebnis der DNS wie auch der Experimente waren Profile für den statistisch stationären Zustand, den sogenannten Steady State der Strömung. Zur Normierung der Ortskoordinate x_2 dient der halbe Plattenabstand h , wobei an der Wand $x_2/h = 0$ und in der Mitte des Kanals $x_2/h = 1$ ist. Die mittlere Strömungsgeschwindigkeit und die Root-Mean-Square-Werte der Geschwindigkeitsfluktuationen werden mit der Strömungsgeschwindigkeit U_0 in der Kanalmitte normiert, um eine dimensionslose Darstellung der Ergebnisse zu ermöglichen.

Da in diesen Fällen nur der statistisch stationäre Zustand der Strömung von

4. Ergebnisse

Belang ist, der nicht vom Anfangszustand der Strömung abhängt, gibt es bei der Wahl der Startwerte kaum Einschränkungen. Deshalb werden hier einfach zu erzeugende Formen verwendet: Es wird zur Initialisierung der Partikel ein nahezu blockförmiges Profil der mittleren Strömungsgeschwindigkeit vorgegeben. Der Turbulenzgrad, der angibt, wie groß die turbulente kinetische Energie im Vergleich zur mittleren kinetischen Energie der Hauptströmung ist, wird auf 10% festgesetzt. Die Form des Profils der turbulenten kinetischen Energie ist deshalb gleich der Form des mittleren Geschwindigkeitsprofils. Es wird isotrope Turbulenz angenommen und die Geschwindigkeitskomponenten der Partikel mit einem Zufallsgenerator gemäß einer gebundenen Gaußverteilung initialisiert. Der Druckgradient in Hauptströmungsrichtung wird nach

$$\frac{\Delta \bar{p}}{\Delta x_1} = - \frac{\lambda}{2d_h} \frac{\bar{\rho} U_A^2}{2} \quad , \quad (4.1)$$

$$\text{mit } \lambda = 0,3164 Re^{-0,25} \quad , \quad (4.2)$$
$$Re = \frac{U_A d_h}{\nu} \quad \text{und} \quad d_h = 4h$$

abgeschätzt [82]. U_A ist die mittlere Raumgeschwindigkeit wie in Gleichung 2.91 verwendet. Für die über den ganzen Querschnitt konstante Dichte wird $\bar{\rho} = 1,205 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$ [81] verwendet.

Nach der Initialisierung wird das im vorhergehenden Kapitel beschriebene Verfahren angewendet und die Rechnung bis zum Erreichen eines statistisch stationären Zustands fortgesetzt.

4.1.2. Simulation mit einem Turbulenzmodell von Launder und Shima

Zunächst soll der Stand des Programms zu Beginn dieser Arbeit dargestellt werden. Das Programm von A. Wölfert [57] verwendet eine M-C-PDF für die Geschwindigkeiten und bestimmt die Dissipationsgeschwindigkeit der turbulenten kinetischen Energie, ϵ , aus einer Transportgleichung, die diskretisiert auf einem Rechengitter gelöst wird. Die Koeffizienten für das Generalized Langevin Modell bilden ein Reynolds Stress Modell von Launder und Shima [20] nach. Es wird für jede Zelle ein individueller Zeitschritt verwendet, wie dies in Abschnitt 3.2.5

4.1. Nichtreaktive Strömung

und Abbildung 3.5 beschrieben ist. Die Umstellung auf einen Zeitschritt, der für alle Zellen des Gitters benutzt wird, ist im Programm als Alternative vorgesehen. Das Rechengitter besteht aus 30 Zellen [57]. Zur Simulation werden 30000 stochastische Partikel verwendet. Näheres zur Implementierung ist in [57] zu finden.

Die Simulation bei der $Re_h = 3400$ war mit diesem Programm nicht möglich, da die turbulenten Fluktuationen im Laufe der Rechnung abklingen. Der Grund dafür liegt in einer Eigenheit des zugrundeliegenden Turbulenzmodells: Wegen der Abhängigkeit vom Quotienten der Produktions- und der Dissipationsgeschwindigkeit neigt es dazu, nach einem Anstieg des Druckgradienten die Fluktuationen übermäßig stark zu dämpfen [21]. Zu Beginn der Simulation steigen die Kovarianzen $\langle u'_1 u'_2 \rangle$ stark an. Dieser Anstieg wird wegen Gleichung 2.23 als Anstieg des Druckgradienten interpretiert. In der Folge klingen alle Fluktuationen langsam ab. Die mittlere Geschwindigkeit in x_1 -Richtung steigt immer weiter an. Das Geschwindigkeitsprofil flacht dabei an der Wand ab. Ein statistisch stationärer Zustand wird nicht erreicht.

Bei $Re_h = 12300$ funktioniert die Simulation, allerdings nur bei Verwendung des für jede Zelle individuellen Zeitschritts. Die mittlere Strömungsgeschwindigkeit in der Kanalmitte sinkt im Laufe der Simulation vom Startwert 2,71 m/s zunächst ab bis auf einen Wert von 1,08 m/s und steigt anschließend wieder an. Der Wert, der einer Reynoldszahl von 12300 entspricht, ist 3 m/s. Er wird nach etwa 160000 Iterationen für eine kurze Zeit erreicht. Die Geschwindigkeit in der Mitte der Strömung sinkt danach wieder ab und verläuft während der ganzen Simulation schwingend im Bereich zwischen 2,5 und 2,8 m/s, mit der eben erwähnten Spitze bei 3 m/s. In der folgenden Abbildung sind die gemittelten Profile über 34000 Iterationen dargestellt; der Bereich mit der höchsten Geschwindigkeit ist darin enthalten. Die Simulation wurde nach 200000 Iterationen abgebrochen.

Die Varianzen werden an der Wand deutlich überschätzt, während das mittlere Geschwindigkeitsprofil hier zu flach verläuft. Auch im weiteren Verlauf, bis zur Mitte, liegen die Varianzen zu hoch. Auch die Kovarianz $\langle u'_1 u'_2 \rangle$ nimmt dem Betrag nach zu große Werte an. Dadurch wird in diesem Bereich die Produktionsgeschwindigkeit der turbulenten kinetischen Energie überschätzt, was zu den zu hohen Werten der Varianzen führt. Die mittlere Strömungsgeschwindigkeit in der Kanalmitte liegt (gemittelt über die 34000 Iterationen, die der Darstellung

4. Ergebnisse

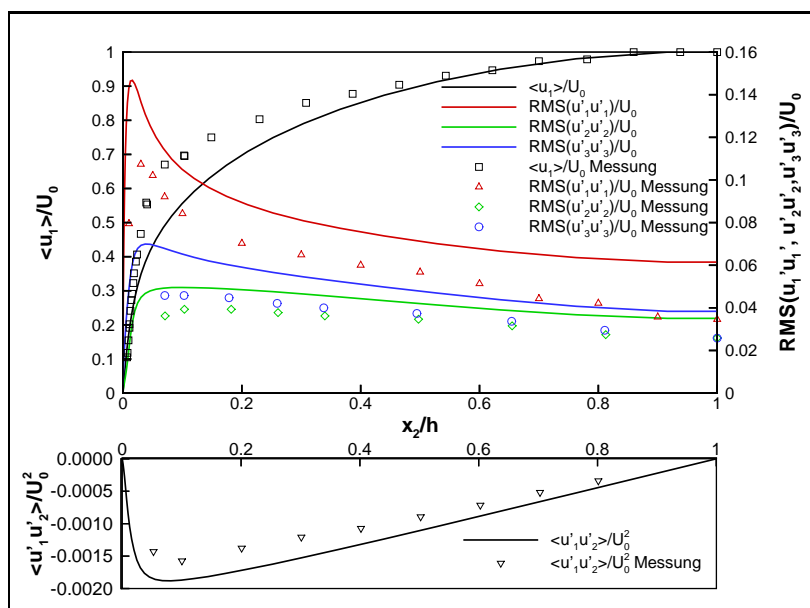


Abbildung 4.1.: $Re_h = 12300$. Oben: Normierte Profile der mittleren Strömungsgeschwindigkeit $\langle u_1 \rangle$ und der Root-Mean-Square-Werte der Varianzen der Geschwindigkeiten, aufgetragen über dem normierten Wandabstand. Unten: Normiertes Profil von $\langle u'_1 u'_2 \rangle$. Linien: M-C-Simulation Wölfert, Kreise: Messung, Laufer.

zugrunde liegen) bei 2,72 m/s. Sie liegt damit um etwa 10% zu niedrig.

Bei Verwendung eines Zeitschritts für alle Zellen klingen wiederum alle Fluktuationen langsam ab, wie schon bei der Simulation bei $Re_h = 3400$ beobachtet. Da das Programm mit dem individuellen Zeitschritt für jede Zelle funktioniert, deutet dies darauf hin, dass durch das Verdoppeln und Eliminieren von Partikeln beim individuellen Zeitschritt zusätzlich Fluktuationen induziert werden.

Die Simulation bei $Re_h = 30800$ zeigt dasselbe Verhalten: Die Strömungsgeschwindigkeit in der Kanalmitte sinkt vom Startwert 6,72 m/s auf 3,08 m/s ab und steigt anschließend an. Der höchste Wert beträgt 6,86 m/s und wird nach etwa 90000 Iterationen für kurze Zeit erreicht. Im weiteren Verlauf schwingt die Geschwindigkeit in der Mitte zwischen 6,2 und 6,7 m/s. Die in Abbildung 4.2 dargestellten Ergebnisse sind die über 37000 Iterationen gemittelten Profile. Die Strömungsgeschwindigkeit in der Kanalmitte beträgt dabei 6,7 m/s und liegt damit ebenfalls um etwa 10% zu tief.

Die Abbildung ist nahezu deckungsgleich mit der Simulation bei $Re_h = 12300$. Dies steht im Widerspruch zum Experiment [24], wie auf Abbildung 2.5 zu sehen

4.1. Nichtreaktive Strömung

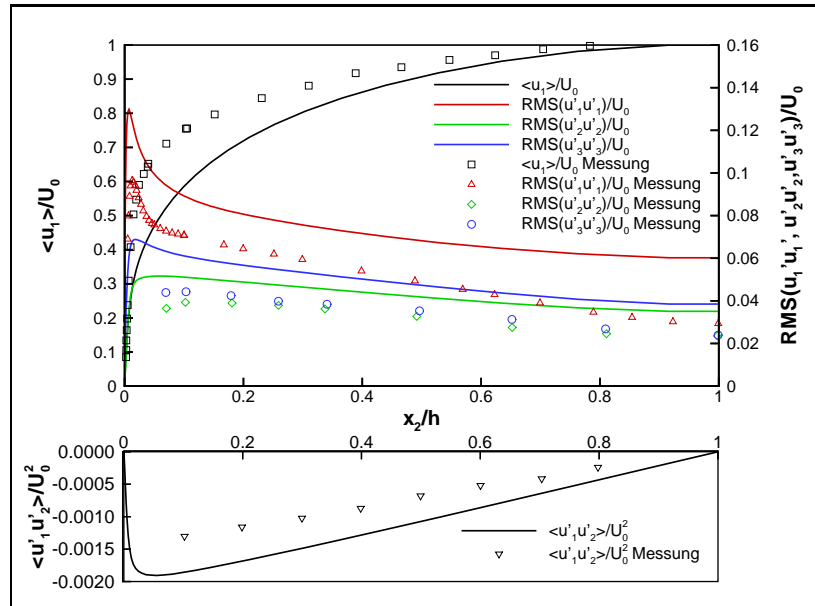


Abbildung 4.2.: $Re_h = 30800$. Die Art der Darstellung entspricht Abbildung 4.2. Linien: M-C-Simulation, Kreise: Gemessene Werte.

ist: Die normierten Geschwindigkeitsprofile sollten mit steigender Reynoldszahl an der Wand steiler werden. Die normierten Fluktuationen dagegen sollten insgesamt niedriger ausfallen. Hier sind dagegen alle Werte nahezu unverändert.

Im Unterschied zum Fall $Re_h = 12300$ ist hier der Einsatz eines für alle Zellen gleichen Zeitschritts möglich. Das Einschwingverhalten ist hier anders: Die Strömungsgeschwindigkeit in der Kanalmitte sinkt nur kurz ab und steigt danach langsam bis auf 7,2 m/s an. Danach schwingt sie, aber nur im engen Bereich zwischen 7,1 und 7,2 m/s. Hier wird somit ein statistisch stationärer Zustand erreicht. Die Geschwindigkeit wird um nur etwa 5% unterschätzt. Die Profile der Varianzen liegen geringfügig tiefer, das normierte Profil der mittleren Strömungsgeschwindigkeit ist unverändert, wie auf der folgenden Abbildung 4.3 zu erkennen ist.

4. Ergebnisse

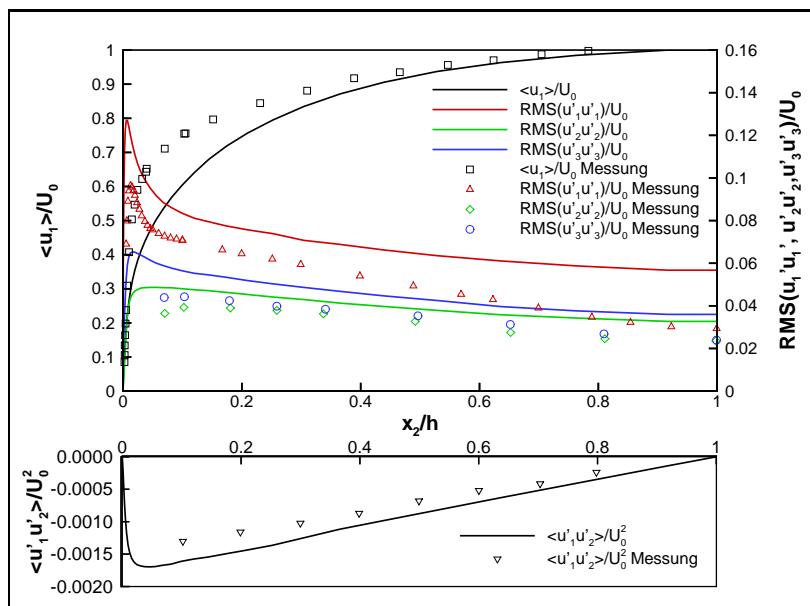


Abbildung 4.3.: $Re_h = 30800$, Variante mit gleichem Zeitschritt für alle Zellen. Die Art der Darstellung entspricht Abbildung 4.2. Linien: M-C-Simulation, Kreise: Gemessene Werte.

Bei $Re_h = 61600$ schlägt die Simulation fehl, da der Löser für die Transportgleichung für ϵ von Beginn an keine Lösung findet und daher die Startwerte für ϵ einsetzt.

Eine reaktive Strömung kann damit auf diese Weise nicht simuliert werden, da die Verwendung eines für alle Zellen einheitlichen Zeitschritts nicht immer möglich ist und beim Einschwingen die Strömungsgeschwindigkeit stark absinken kann.

Nun sollen die Ergebnisse nach Austausch des Turbulenzmodells und Erweiterung der PDF zu einer gebundenen PDF für Spezies, Geschwindigkeiten und Turbulenzfrequenz gezeigt werden.

Für jede Reynoldszahl wurde die Simulation je einmal mit den unveränderten Koeffizienten und dann noch einmal mit den modifizierten Koeffizienten c'_2 und c''_2 , wie sie in Kapitel 3.2.1 aufgeführt sind, durchgeführt.

4.1.3. Simulation mit den unveränderten Koeffizienten des MCL-Modells

Die bei dieser Monte-Carlo-Simulation verwendeten Gitter haben 58 ($Re_h = 3400$) bzw. 54 ($Re_h = 12300, 30800$ und 61600) Zellen. Zur Simulation werden in allen Fällen 30000 stochastische Partikel benutzt. Die Initialisierung der Geschwindigkeiten der Partikel erfolgt in der gleichen Weise wie oben. Für die mittlere turbulente Frequenz ω wird der Wert an der Wand nach Formel 3.32 bestimmt und ein zur Kanalmitte hin quadratisch abnehmender Verlauf angenommen. Die turbulente Frequenz der Partikel wird auf den Wert der mittleren turbulenten Frequenz in der Mitte der Zelle gesetzt, in der sich die Partikel jeweils befinden. Es wird für alle Zellen der gleiche Zeitschritt verwendet. Dieser wird so bestimmt, wie im Abschnitt 3.2.5 beschrieben.

Die Ergebnisse der Simulation mit der niedrigsten Reynoldszahl von 3400 sind in Abbildung 4.4 dargestellt. Es ist zu erkennen, dass das mittlere Geschwindigkeitsprofil wie auch die Profile der Reynoldsspannungen in unmittelbarer Wandnähe gut getroffen werden. Der Anstieg der Varianz der Geschwindigkeit senkrecht zur Wand ist an dieser Stelle zu steil. In etwas größerem Abstand von der Wand, aber immer noch in Wandnähe werden die Fluktuationen in Strömungsrichtung unterschätzt. Zusammen mit der im gleichen Bereich auftretenden Überschätzung der Fluktuationen in x_3 -Richtung deutet dies auf eine Ungenauigkeit in einem Umverteilungsterm des verwendeten Turbulenzmodells. Die Unterschätzung des Maximums der Fluktuationen in x_1 -Richtung tritt auch bei der Verwendung eines parabolischen Lösers auf einem Gitter anstelle einer Monte-Carlo-Simulation auf, wie in [21] zu sehen ist.

Zur Mitte hin werden schließlich alle Fluktuationen überschätzt, was, wie bereits erwähnt, an der Verwendung des k - ω -Modells zur Bestimmung der Dissipationsgeschwindigkeit anstelle der beim MCL-Modell implementierten Entwicklungsgleichung für ϵ liegt. Die Werte für die Dissipationsgeschwindigkeit ϵ sind zur Mitte hin zu klein. Die Fluktuationen in Richtung senkrecht zur Wand steigen zur Kanalmitte hin sogar etwas an.

Die Kovarianz der Geschwindigkeiten in x_1 - und x_2 -Richtung, $\langle u'_1 u'_2 \rangle$, wird in einem großen Bereich etwas unterschätzt; in der Mitte und in unmittelbarer

4. Ergebnisse

Wandnähe wird sie gut wiedergegeben.

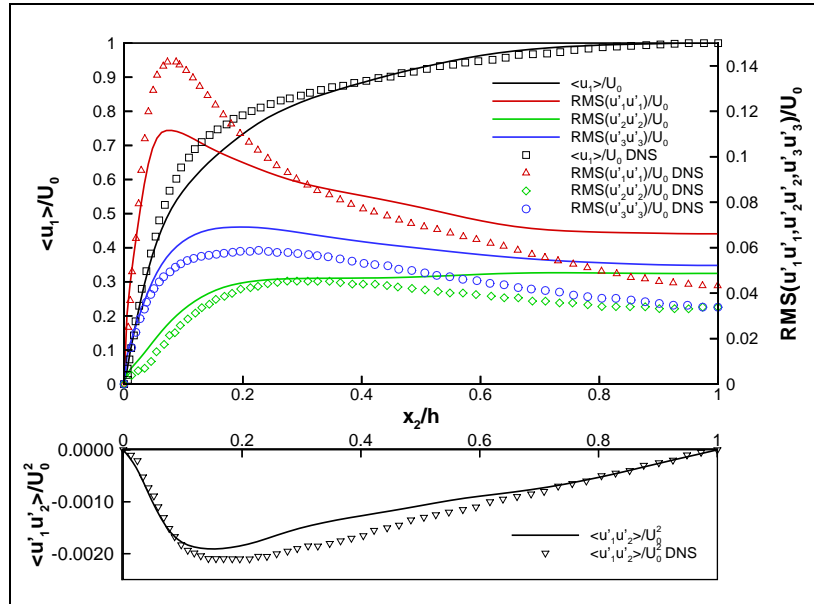


Abbildung 4.4.: $Re_h = 3400$. Oben: Normierte Profile der mittleren Strömungsgeschwindigkeit $\langle u \rangle$ und der Root-Mean-Square-Werte der Varianzen der Geschwindigkeiten, aufgetragen über dem normierten Wandabstand. Unten: Normiertes Profil von $\langle u'_1 u'_2 \rangle$. Linien: M-C-Simulation, Kreise: DNS.

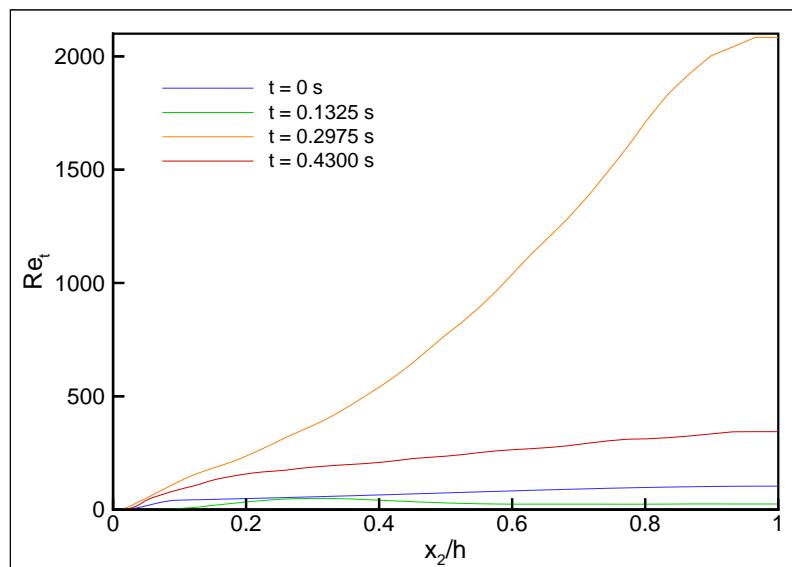


Abbildung 4.5.: Zeitliche Entwicklung der Turbulenten Reynoldszahl Re_t .

Der Anstieg des Profils von $\langle u'_2 u'_2 \rangle$ in wandnormaler Richtung zur Kanalmitte hin bewirkt eine Überschätzung des Druckgradienten $\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_2}$. Dies führt in der zeitlichen Entwicklung vom Anfangszustand hin zum Steady State bei einer niedrigen

4.1. Nichtreaktive Strömung

Reynoldszahl wie in diesem Fall zu einem starken Überschwingen, wie dies in Abbildung 4.5 zu sehen ist.

Dort ist die turbulente Reynoldszahl $Re_t = \frac{k^2}{\nu\epsilon}$, die den lokalen Turbulenzzustand beschreibt über dem normierten Wandabstand für verschiedene Zeitpunkte aufgetragen. Nachdem sie ausgehend vom Anfangszustand (blaue Linie) Re_t zunächst auf ein minimales Niveau absinkt (grüne Linie), wird erst nach einem starken Überschwingen (orange Linie) das Turbulenzniveau des Steady State (rote Linie) erreicht.

Bei höheren Reynoldszahlen bleibt die Tendenz des Profils von $\langle u'_2 u'_2 \rangle$, zur Mitte des Kanals hin anzusteigen, gleichfalls erhalten, wie in den folgenden Abbildungen 4.6, 4.7 und 4.8 zu sehen ist. Bei diesen Simulationen wurden dieselben experimentell bestimmte Profile [24] zum Vergleich herangezogen wie im vorangehenden Abschnitt.

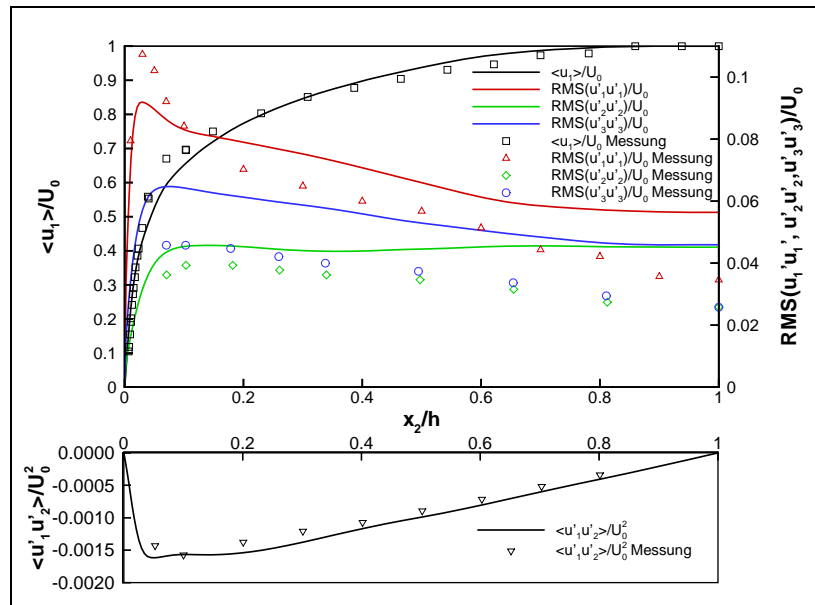


Abbildung 4.6.: $Re_h = 12300$. Die Art der Darstellung entspricht Abbildung 4.4. Linien: M-C-Simulation, Kreise: Gemessene Werte.

Es zeigt sich, dass mit zunehmender Reynoldszahl die Reynoldsspannung $\langle u'_1 u'_2 \rangle$ in immer größerem Maße überschätzt wird. Ein starkes Überschwingen bis zum Erreichen des Steady States wie im Fall der langsamsten Strömung tritt bei keiner der drei restlichen Fälle auf. Genau wie bei der Strömung mit $Re_h = 3400$ werden alle Varianzen der Geschwindigkeiten und damit die turbulente kinetische

4. Ergebnisse

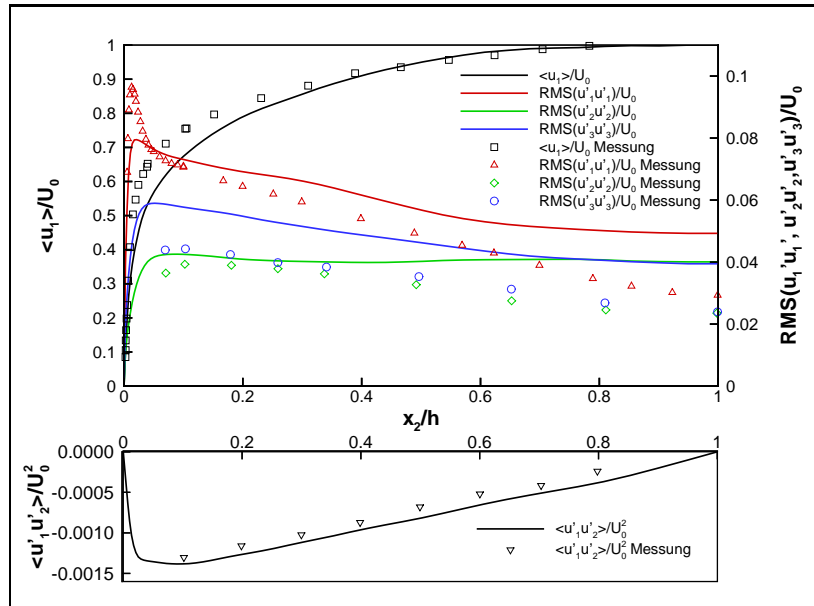


Abbildung 4.7.: $Re_h = 30800$. Die Art der Darstellung entspricht Abbildung 4.4. Linien: M-C-Simulation, Kreise: Gemessene Werte.

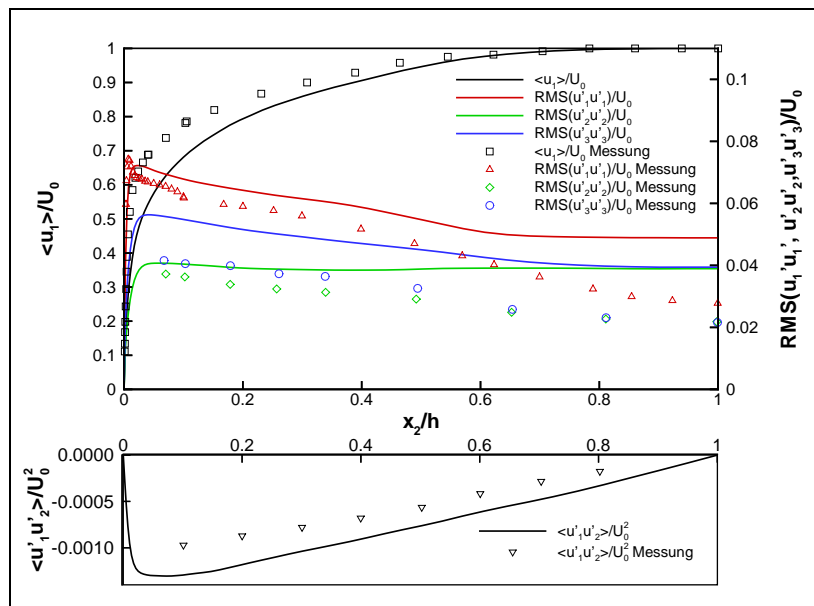


Abbildung 4.8.: $Re_h = 61600$. Die Art der Darstellung entspricht Abbildung 4.4. Linien: M-C-Simulation, Kreise: Gemessene Werte.

Energie zur Mitte der Strömung hin überschätzt. Auch der Anstieg der mittleren Strömungsgeschwindigkeit an der Wand ist etwas zu flach. Die Lage der Maxima der Reynoldsspannungen bezüglich des Abstands von der Wand wird korrekt wiedergegeben, ebenso wie die Tendenz, dass das Niveau der normierten Pro-

file der Geschwindigkeitsvarianzen und der Kovarianz $\langle u'_1 u'_2 \rangle$ mit zunehmender Reynoldszahl sinkt und sich die Maxima dieser Profile zur Wand hin verschieben.

4.1.4. Simulation mit modifizierten Koeffizienten im MCL-Modell

Bereits bei ersten Versuchen, eine Strömung mit nichtkonstanter Dichte zu simulieren, zeigte sich, dass der wegen des Anstiegs von $\langle u'_2 u'_2 \rangle$ zur Mitte hin schon dem Vorzeichen nach falsch berechnete Druckgradient in wandnormaler Richtung und das Überschwingen sich bei der Simulation einer heißen Strömung sehr nachteilig auswirken können. Eine Möglichkeit der Verbesserung bietet die in Kapitel 3.2.1 beschriebene Modifikation der Koeffizienten c'_2 und c''_2 des MCL-Modells. Verwendet werden hier $c'_2 = \min[0,6; f_A]$ und $c''_2 = \min[0,76; \sqrt{A}]$. Für die Simulationen werden für alle Reynoldszahlen ansonsten dieselben Randbedingungen eingesetzt wie bei den Rechnungen mit den Originalkoeffizienten.

Bei der niedrigsten Reynoldszahl, $Re_h = 3400$, zeigt sich beim Steady State im Großen und Ganzen ein ähnliches Bild wie bei den ursprünglichen Koeffizienten, wie auf der nachfolgenden Abbildung 4.9 zu erkennen ist.

Die Profile der mittleren Strömungsgeschwindigkeit und der Geschwindigkeitsfluktuationen in Strömungsrichtung sind an der Wand etwas zu flach, während zur Kanalmitte hin die Varianzen aller Geschwindigkeitskomponenten überschätzt werden. Aber $\langle u'_2 u'_2 \rangle$ steigt nicht weiter an. Der Verlauf der Kovarianz $\langle u'_1 u'_2 \rangle$ wird an der Wand und in der Mitte gut getroffen, ansonsten aber insgesamt etwas stärker unterschätzt als mit den Originalkoeffizienten.

Beim zeitlichen Verlauf tritt nun kein Überschwingen mehr auf. Außerdem wird der Steady State schon nach deutlich kürzerer Zeit erreicht, wie auf Abbildung 4.10 zu sehen ist: Ausgehend vom Anfangszustand (blaue Linie) wird nach einer im Vergleich zu den unveränderten Koeffizienten kürzeren Phase des Abklings zunächst ein minimales Turbulenzniveau erreicht (grüne Linie). Zum selben Zeitpunkt, an dem sich im Fall mit Originalkoeffizienten die höchsten Werte für Re_t einstellen (orange Linie), ist hier bereits fast der Steady State (rote Linie) ohne Überschwingen erreicht.

4. Ergebnisse

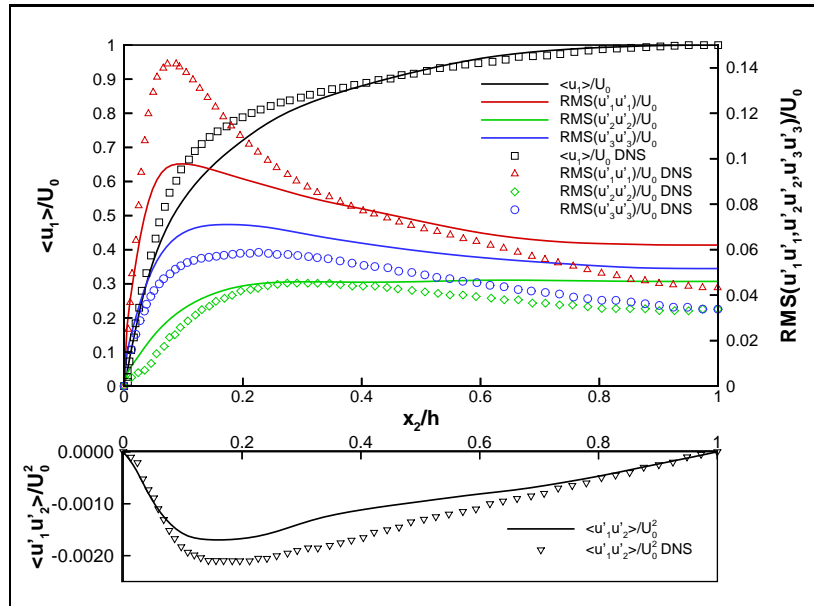


Abbildung 4.9.: $Re_h = 3400$. Oben: Normierte Profile der mittleren Strömungsgeschwindigkeit $\langle u \rangle$ und der Root-Mean-Square-Werte der Varianzen der Geschwindigkeiten, aufgetragen über dem normierten Wandabstand. Unten: Normiertes Profil von $\langle u'_1 u'_2 \rangle$. Linien: M-C-Simulation, Kreise: DNS.

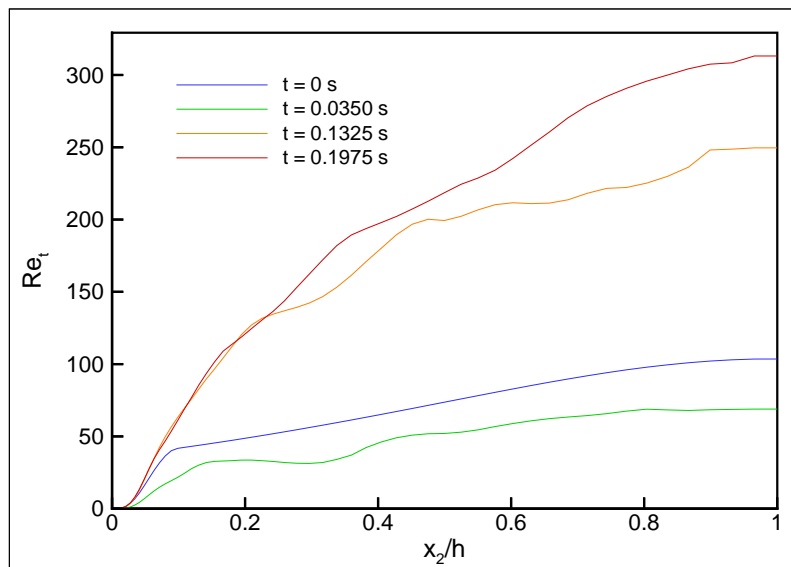


Abbildung 4.10.: Zeitliche Entwicklung der turbulenten Reynoldszahl Re_t .

Bei den höheren Reynoldszahlen fällt auf, dass die Reynoldsspannung $\langle u'_1 u'_2 \rangle$ sehr gut wiedergegeben wird. Die Profile von $\langle u'_2 u'_2 \rangle$ zeigen einen zur Mitte hin abfallenden Verlauf. Wie bei den vorhergehenden Beispielen werden die Tendenz, dass die normierten Fluktuationen mit steigender Reynoldszahl abnehmen und

4.1. Nichtreaktive Strömung

sich die Lage ihrer Maxima zur Wand hin verschiebt, korrekt wiedergegeben, wie auf den Abbildungen 4.11, 4.12 und 4.13 dargestellt ist.

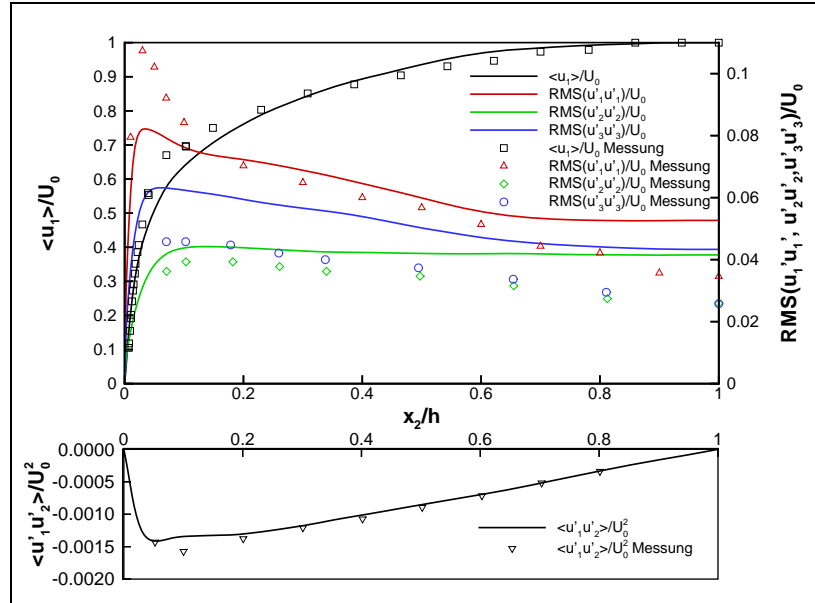


Abbildung 4.11.: $Re_h = 12300$. Die Art der Darstellung entspricht Abbildung 4.9. Linien: M-C-Simulation, Kreise: Gemessene Werte.

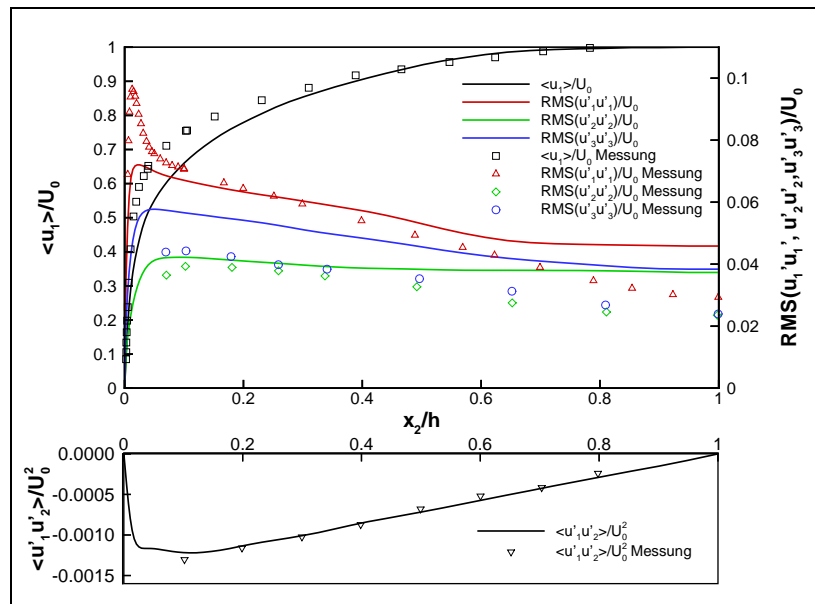


Abbildung 4.12.: $Re_h = 30800$. Die Art der Darstellung entspricht Abbildung 4.9. Linien: M-C-Simulation, Kreise: Gemessene Werte.

4. Ergebnisse

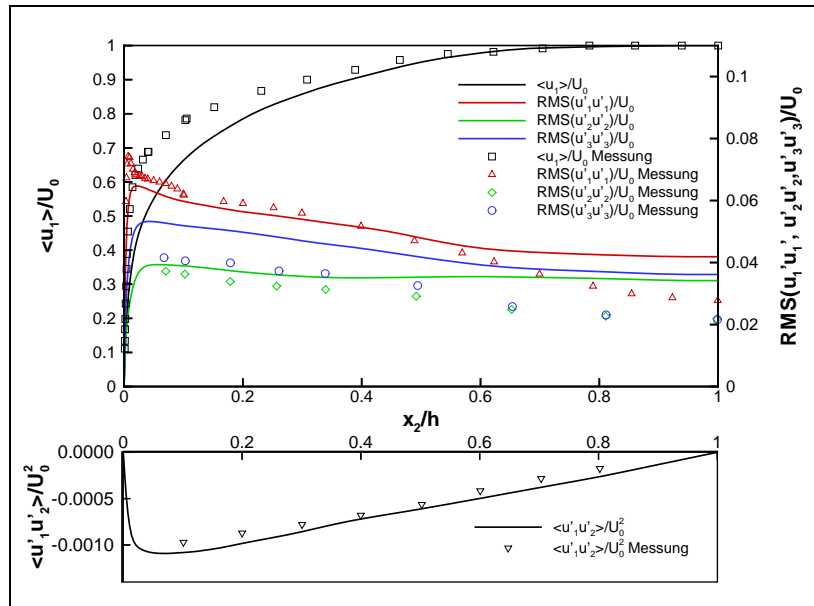


Abbildung 4.13.: $Re_h = 61600$. Die Art der Darstellung entspricht Abbildung 4.9. Linien: M-C-Simulation, Kreise: Gemessene Werte.

4.2. Reaktive Strömung

4.2.1. Randbedingungen

Für den Fall einer reaktiven Strömung wird eine Wasserstoff/Luft-Strömung betrachtet. Die Kanalwand besteht hierbei aus Platin, wodurch die Wasserstoffoxidation heterogen katalysiert wird. Da in der Literatur bis zum Abschluss der Simulationen in dieser Arbeit keinerlei experimentelle Daten für eine reaktive Kanalströmung zu finden waren, wird zum Vergleich eine andere Simulation herangezogen [83], die zur Lösung der Gleichungssysteme einen elliptischen Löser auf einem zweidimensionalen Gitter einsetzt. Es wird dabei ein Zweischichten- k - ϵ -Modell für die Turbulenz und eine vorangenommene Gauß-PDF zur Beschreibung der chemischen Reaktionen verwendet. Der Plattenabstand $2h$ beträgt zehn Millimeter, die Kanallänge ist 150 mm. Die Wandtemperatur wird konstant auf 1220 K gehalten. Die Strömungsgeschwindigkeit beträgt am Eintrittsrand über den ganzen Querschnitt 15 m/s, die turbulente kinetische Energie $k = 1,5 \text{ m}^2/\text{s}^2$ und ihre Dissipationsgeschwindigkeit ϵ ist zu Beginn $\epsilon = k^{1,5}/(0,1 \cdot 2 \cdot h)$. Das Reaktionsgemisch ist sehr mager mit einem Äquivalenzverhältnis von $\phi = 0,24$, seine Eintrittstemperatur beträgt 400 K. Als Reaktionsmechanismen für die heterogen katalysierten bzw. die homogenen Reaktionen werden die weiter vorne beschriebenen Mechanismen von Deutschmann bzw. Warnatz eingesetzt. Die Simulation wird einmal unter Verwendung beider Mechanismen und einmal ohne die homogenen Gasphasenreaktionen durchgeführt.

Der Code zur Monte-Carlo-Simulation verwendet dagegen ein eindimensionales Gitter, wie schon bei der kalten Strömung beschrieben. Um aus der Simulation auch Informationen in der zweiten Raumdimension, in Längsrichtung der Strömung, zu erhalten, muss die Auflösung in die zusätzliche Raumrichtung (x_1) durch Integration der Geschwindigkeit in diese Richtung gewonnen werden. Für jede Zelle die mittlere Geschwindigkeit im Zellmittelpunkt für die Integration zu verwenden, ist wegen der Entwicklung der Geschwindigkeitsprofile im Verlauf der Simulation nicht möglich, weil das Abflachen des Geschwindigkeitsprofils an der Wand dazu führt, dass die durch Integration gewonnenen Profile Knicke und Sprünge aufweisen. Somit muss für die Integration für alle Zellen zusammen eine repräsentative Geschwindigkeit gefunden werden. Die Strömungsgeschwindigkeit

4. Ergebnisse

in der Mitte der Strömung gibt die Verhältnisse in der Kanalmitte gut wieder, ist aber für die Gebiete in Wandnähe zu hoch. Wegen des nahezu blockförmigen Profils ist auch die mittlere Raumgeschwindigkeit, der Quotient von Volumenstrom und Querschnittsfläche, dicht an der Geschwindigkeit in der Mitte der Strömung; deshalb ist auch sie zu hoch. Die Geschwindigkeit in der wandnächsten Zelle hingegen ist für die wandnahen Zellen geeignet, für größere Entfernung von der Wand hingegen ist sie zu niedrig. Außerdem würde dadurch eine Gitterabhängigkeit hervorgerufen. Ein möglicher Kompromiss besteht in der Verwendung eines gewichteten Mittelwerts aus der über den ganzen Querschnitt gemittelten Geschwindigkeit und einer nach Möglichkeit gitterunabhängigen Geschwindigkeit, die die Verhältnisse an der Wand beschreibt. Hierfür bietet sich die Wandschubspannungsgeschwindigkeit u_τ an, für die mit den Gleichungen 2.97 und 2.98 gilt: $u_\tau \propto \frac{\partial \widetilde{u}_1}{\partial x_2}$. Die Gewichtung der beiden Geschwindigkeiten zur Bestimmung der repräsentativen Geschwindigkeit wird durch einen Vergleich der Profile der gemittelten Größen und ihrer zeitlichen Entwicklung gewählt. Die Integration erfolgt durch Multiplikation mit dem Zeitschritt.

Diese vereinfachte Integration in Längsrichtung kann die Lösung der Gleichungssysteme in dieser Richtung nur unvollkommen ersetzen, da hierbei die Integration über alle Zellen zur selben Zeit, aber nicht an der selben Stelle (in Längsrichtung) durchgeführt wird.

Abweichend von den oben angegebenen Anfangsbedingungen wird kein Rechteckprofil für die Geschwindigkeit und die turbulente kinetische Energie verwendet, sondern die Ecken dabei etwas abgerundet, so dass erst bei einer Entfernung von $100\mu\text{m}$ von der Wand der Maximalwert erreicht wird, weil sonst an der Wand zu starke Gradienten auftreten würden, die für die Simulation problematisch wären. Wegen der Verwendung des eindimensionalen Gitters wird der Gradient der mittleren Strömungsgeschwindigkeit in axialer Richtung bei der Berechnung der Produktion an kinetischer Energie nicht berücksichtigt. Als Folge davon wird dieser Produktionsterm unterschätzt. Deshalb muss die Dissipationsgeschwindigkeit ϵ zu Beginn reduziert werden auf $\epsilon = k^{1,5}/(0,4 \cdot 2 \cdot h)$. Ebenfalls wegen des eindimensionalen Rechengitters erfolgt der Transport von Wärme und chemischen Spezies in dieser Richtung bei dieser M-C-Simulation nur durch die Strömung, nicht aber durch diffusive Prozesse. Die Auswirkung dieser Annahmen sind weiter

unten zu sehen.

Die übrigen Bedingungen sind wie oben angegeben gesetzt. Es wird das MCL-Modell mit den modifizierten Koeffizienten benutzt, da gerade für die Simulation der zeitlichen Entwicklung einer Strömung das Vermeiden von Überschwingern von großer Bedeutung ist. Die M-C-Simulation wurde mit unterschiedlichen Koeffizienten C_ϕ für das Mischen der skalaren Größen mit dem Curl-Modell durchgeführt. Das Gitter wird wie zuvor bei der kalten Strömung in zwei Stufen zur Wand hin verfeinert und besteht aus 58 Zellen. Es werden 30000 stochastische Partikel zur Lösung der M-C-PDF verwendet.

4.2.2. **Heterogen katalysierte reaktive Strömung ohne Gasphasenreaktionen**

Im Fall der ausschließlich heterogen katalysiert ablaufenden Wasserstoffoxidation werden die Gasphasenreaktionen in der Simulation abgeschaltet. Reaktionen finden in diesem Fall nur an der Wand statt. Da deshalb die Verhältnisse an der Wand für die zeitliche Entwicklung der reaktiven Strömung dominierend sind, wird der Wert der repräsentativen Geschwindigkeit, die den Ort in x_1 -Richtung bestimmt, stark von der Wandschubspannungsgeschwindigkeit bestimmt. Für die nachfolgend beschriebenen Fälle, bei denen unterschiedliche Funktionen für den Koeffizienten C_ϕ beim Curl-Mischungsmodell verwendet werden, muss hierbei für jeden Fall separat eine geeignete Zusammensetzung dieser Geschwindigkeit bestimmt werden.

4.2.2.1. $C_\phi = 2$

Die Verwendung von $C_\phi = 2$ stellt den Standardfall dar, wie er für homogene Turbulenz entwickelt wurde und für Freistrahlfammen eingesetzt wird. Dieser Fall wird hier als Referenz zum Vergleich mit den Simulationen benutzt, bei denen C_ϕ vom Turbulenzzustand abhängig gemacht wird. Da in der Gasphase keine Reaktionen ablaufen, verhalten sich alle skalare Größen im inneren Bereich der Strömung beim Transport wie inerte Skalare. Lediglich an der Wand gibt es Quellterme für die Temperatur und die chemischen Spezies. Für die repräsentative

4. Ergebnisse

Geschwindigkeit wird hier

$$U_{\text{rep}} = 0,42 \cdot u_{\tau} + 0,58 \cdot U_{\text{vol}} \quad (4.3)$$

eingesetzt, weil sich für diesen Wert unter den vorliegenden Bedingungen die beste Übereinstimmung ergab. Die Ergebnisse der Simulation sind auf den folgenden Abbildungen 4.14 bis 4.18 dargestellt.

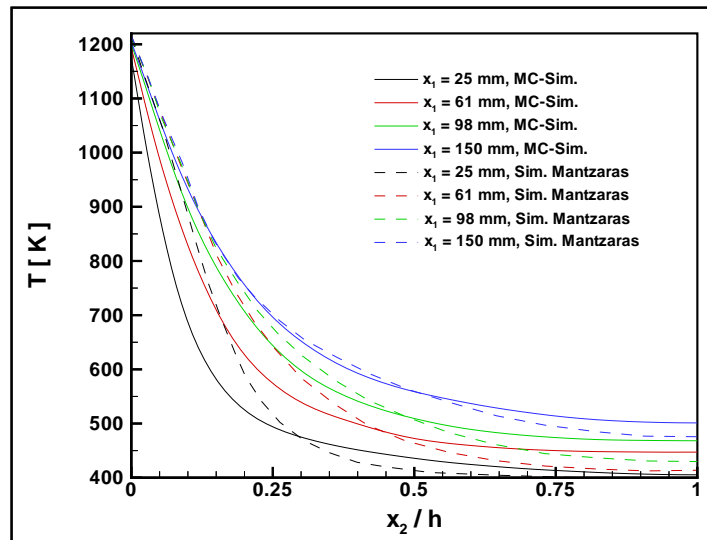


Abbildung 4.14.: Profil der mittleren Temperatur. Durchgezogene Linien: 1D-MC-Simulation, gestrichelte Linien: 2D-Simulation. Die Angaben für x_1 in der Legende beziehen sich auf den Abstand vom Einströmrand des Kanals, der sich bei $x_1 = 0$ befindet.

Wie in Abbildung 4.14 dargestellt, ist der Wärmetransport in der M-C-Simulation deutlich langsamer, später liegen die Profile beider Simulationen näher beieinander. Dies liegt einerseits an der zu Beginn deutlich kleineren turbulenten Frequenz im Fall der eindimensionalen M-C-Simulation im Vergleich zur zweidimensionalen Simulation, andererseits an dem in Wandnähe zu kleinen Wert von C_{ϕ} , wie noch weiter unten zu sehen sein wird. Weiter hat auch das bei der 2-D-Simulation verwendete Turbulenzmodell einen Einfluss auf den Wärme- und Stofftransport. Die Turbulenz wird hierbei in Form eines Zwei-Gleichungs-Modells behandelt, wobei von der Wand bis zum vollturbulenten Kern das Modell auf ein Ein-Gleichungs-Modell reduziert wird, bei dem nur eine Transportgleichung für die turbulente kinetische Energie k gelöst wird und ihre Dissipationeschwindigkeit ϵ aus einem algebraischen Ausdruck bestimmt wird. Die Profile von k weisen deshalb, wie noch weiter unten zu sehen sein wird, in diesem Bereich deutliche Unterschiede

zu denen der M-C-Simulation auf, die aus einem RSM resultiert. Dies hat auch Auswirkungen auf die turbulente Zeitskala $\tau = \frac{\epsilon}{k}$, die für die Mischprozesse der PDF für die Enthalpie und der chemischen Spezies verwendet wird und somit das Verhalten beim Abklingen der Varianzen und den Transport der Mittelwerte beeinflusst.

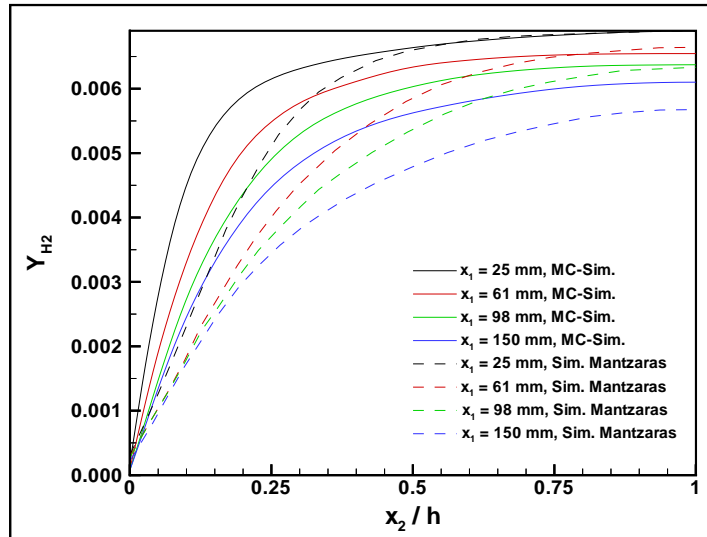


Abbildung 4.15.: Massenbruch von Wasserstoff. Die Notation entspricht Abbildung 4.14.

Der Transport von Wasserstoff an die Wand ist ebenfalls deutlich langsamer. Außer den bereits weiter oben angeführten Gründen kommt hier noch hinzu, dass sich die im Vergleich mit anderen Komponenten höhere Diffusivität von Wasserstoff mit dem Curl-Modell nicht wiedergegeben werden kann, ohne entweder die Masse der stochastischen Partikel oder die Diffusivität der anderen Spezies zu verändern.

Das oben beschriebene Defizit, den Transport des Wasserstoffs korrekt wiederzugeben, beeinflusst auch die Profile der OH-Radikale. Die Quelle der OH-Radikale ist die Oxidation von Wasserstoff. Wegen der geringen molekularen Masse des Wasserstoffs im Vergleich zu der des Sauerstoffs wirkt sich bereits ein kleiner Fehler beim Massenbruch des Wasserstoffs und einer Verschiebung des lokalen chemischen Gleichgewichts stark bei den OH-Radikalen aus. Da Reaktionen nur an der Wand stattfinden, werden die OH-Radikale im Kern der Strömung nicht mehr abgebaut. Der OH-Massenbruch steigt deshalb immer weiter an, wie bei beiden Simulationen zu sehen ist. Bei den skalaren Größen gibt es insgesamt eine

4. Ergebnisse

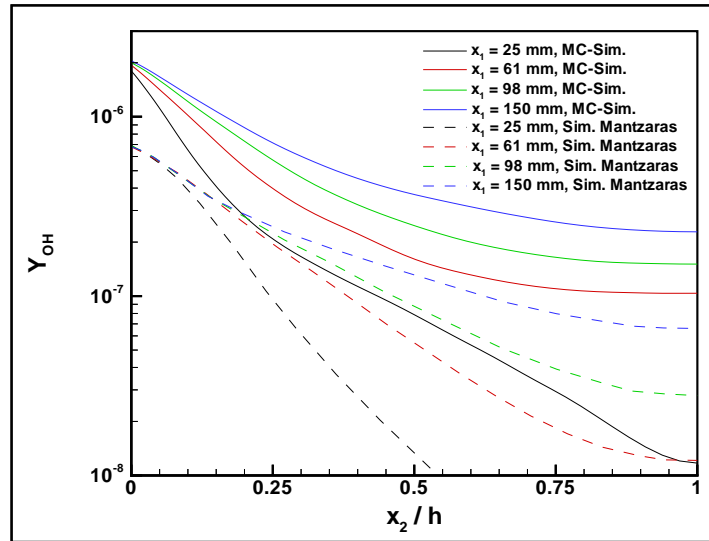


Abbildung 4.16.: Massenbruch der OH-Radikale. Die Notation entspricht Abbildung 4.14.

qualitative Übereinstimmung.

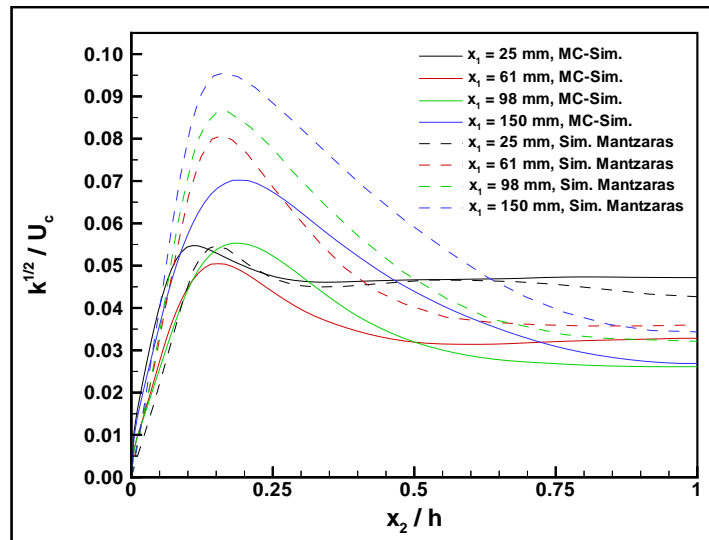


Abbildung 4.17.: Mit der Strömungsgeschwindigkeit in der Kanalmitte normierte turbulente kinetische Energie. Die Notation entspricht Abbildung 4.14

Wie auf Abbildung 4.17 zu sehen, liegen die zeitlichen Entwicklungen der turbulenten kinetischen Energie bei beiden Simulationen zu Beginn dicht beieinander. Später ist die 1D-Simulation etwas langsamer. Das deutet darauf hin, dass bei der M-C-Simulation die wegen der Vernachlässigung des Geschwindigkeitsgradienten in axialer Richtung verringerte Produktionsterme P_{ij} (s. Gleichung 2.76)

zu Beginn der Simulation durch die Wahl der Gewichtungsfaktoren bei der Bestimmung der repräsentativen Geschwindigkeit teilweise kompensiert wird. Die insgesamt deutlich höheren Maximalwerte in der Nähe der Wand bei der 2-D-Simulation sind zumindest teilweise durch den weiter oben beschriebenen Effekt des verwendeten Zwei-Zonen- k - ϵ -Modells in diesem Bereich erklärbar. Die Maxima liegen im weiteren zeitlichen Verlauf tiefer. Insgesamt ist die qualitative Übereinstimmung der zeitlichen Entwicklung gut.

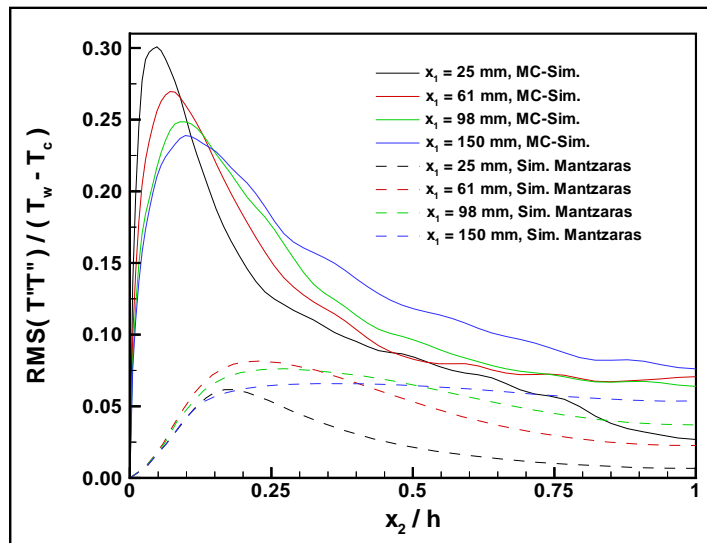


Abbildung 4.18.: Mit der Temperaturdifferenz von Wand und Mitte der Strömung normierte Fluktuationen der Temperatur.

Bei den Temperaturfluktuationen macht sich das bei der M-C-Simulation schwächere Mischen am deutlichsten bemerkbar. Während in der Kanalmitte, wo annähernd homogene Turbulenz angenommen werden kann, die Fluktuationen bei beiden Simulationen gut übereinstimmen, werden sie in Wandnähe, wo die Turbulenz einen Zweikomponentenzustand erreicht, langsamer abgebaut und erreichen deshalb einen höheren Maximalwert. Die Verschiebung des Maximums zur Kanalmitte hin und das Ansteigen der Fluktuationen ist aber hier in Übereinstimmung mit der zweidimensionalen Simulation zu erkennen.

4.2.2.2. $C_\phi = 2(1 + 81,6 \cdot A \cdot e^{-10A})$

In einer von Wänden begrenzten turbulenten Strömung ist die Annahme homogener Turbulenz nicht zutreffend: Zur Wand hin steigen die Fluktuationen zunächst

4. Ergebnisse

an und erreichen einen Maximalwert, um dann noch dichter zur Wand hin auf null abzusinken. Ein zeitlich und räumlich konstanter Mischungskoeffizient kann diesem Zustand nicht gerecht werden [62]. Deshalb soll hier versucht werden, eine bessere Übereinstimmung der Ergebnisse durch die Verwendung eines variablen Mischungskoeffizienten zu erreichen. Als Parameter, der den Zustand der Turbulenz bezüglich der Anisotropie beschreibt, bietet sich Lumleys Stress-Flatness-Indikator A an, der bereits bei der Beschreibung des MCL-Modells eingeführt wurde. Als Funktion für C_ϕ wird nun gewählt

$$C_\phi = 2(1 + 81,6 \cdot A \cdot e^{-10A}) \quad . \quad (4.4)$$

Damit kann C_ϕ maximal den Wert acht annehmen; dieses Maximum wird bei $A = 0,1$ erreicht. Zur Kanalmitte hin, wenn A zunimmt und bei isotroper Turbulenz maximal den Wert eins annimmt, geht C_ϕ gegen zwei. Die gewählte Funktion, ein Produkt aus Potenz- und Exponentialfunktion, kann bezüglich der Lage des Maximums durch die Wahl der Exponenten von A und der e-Funktion angepasst werden [56].

Die Gewichtungsfaktoren für die Bestimmung der repräsentativen Geschwindigkeit wurden den geänderten Verhältnissen beim Mischen neu gewählt. Die Wahl wird wieder nach einem Vergleich aller Profile der Simulationen getroffen. Für die Bestimmung der axialen Position wird hier verwendet:

$$U_{\text{rep}} = 0,45 \cdot u_\tau + 0,55 \cdot U_{\text{vol}} \quad . \quad (4.5)$$

Im Vergleich zum vorher beschriebenen Fall mit $C_\phi = 2$ wird die repräsentative Geschwindigkeit U_{rep} somit kleiner, da die Gewichtung bei der Mittelwertbildung von U_{vol} zu u_τ hin verschoben wird.

Die Ergebnisse sind auf den folgenden Abbildungen 4.19 bis 4.23 zu sehen.

Die Entwicklung der Temperaturprofile ist zu Beginn wie bei konstantem C_ϕ langsamer als bei der 2D-Simulation; der zeitliche Verlauf ist aber, wie durch das beschleunigte Mischen, bei der M-C-Simulation nun rascher als im vorangehenden Fall für $C_\phi = 2$. Die Temperaturprofile liegen deshalb etwas näher an denjenigen der 2D-Simulation, deren Mischungsprozesse wegen des dort verwendeten Turbulenzmodells anscheinend in diesem Bereich noch schneller ablaufen. Die Übereinstimmung ist insgesamt aber gut.

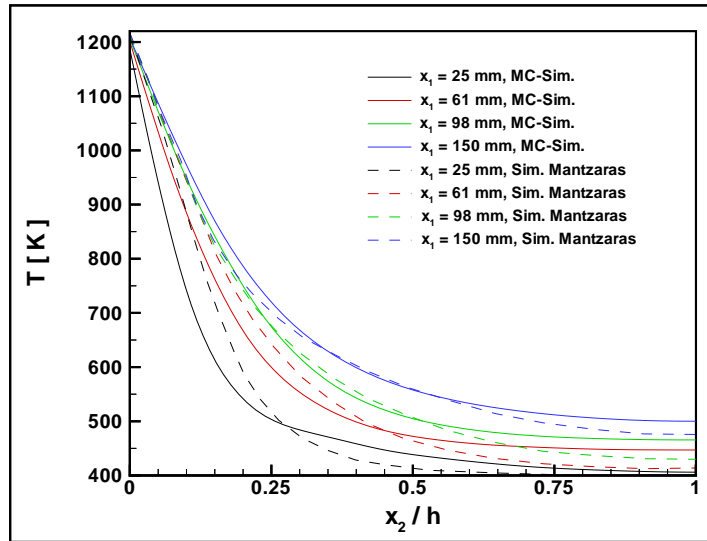


Abbildung 4.19.: Profil der mittleren Temperatur. Die Angaben für x_1 in der Legende beziehen sich auf den Abstand vom Einströmrand des Kanals, der sich bei $x_1 = 0$ befindet.

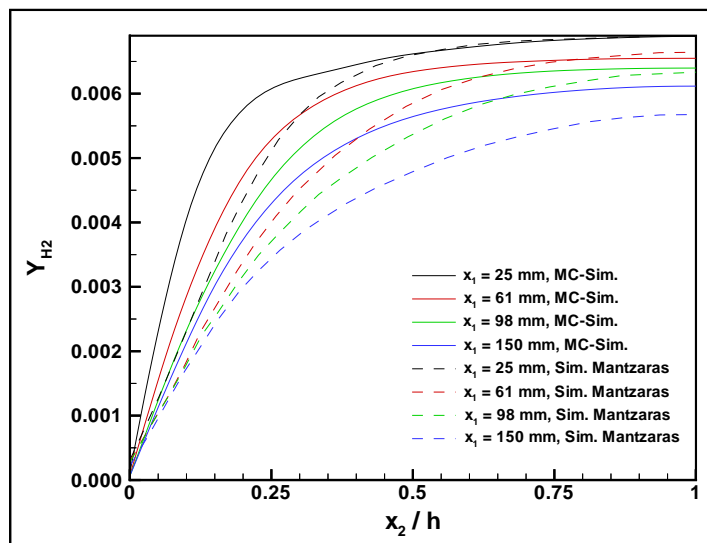


Abbildung 4.20.: Massenbruch von Wasserstoff. Die Notation entspricht Abbildung 4.14.

Das Gleiche gilt für den Massenbruch von Wasserstoff und OH-Radikalen. Die Gradienten an der Wand fallen mit $C_\phi = f(A)$ an der Wand etwas kleiner aus und sind damit näher an den Vergleichswerten als bei Verwendung eines konstantem Mischungskoeffizienten.

Die zeitliche Entwicklung der turbulenten kinetischen Energie liegt auch näher an der 2D-Simulation als im Fall vorher. Zwar sind die Maximalwerte an den ver-

4. Ergebnisse

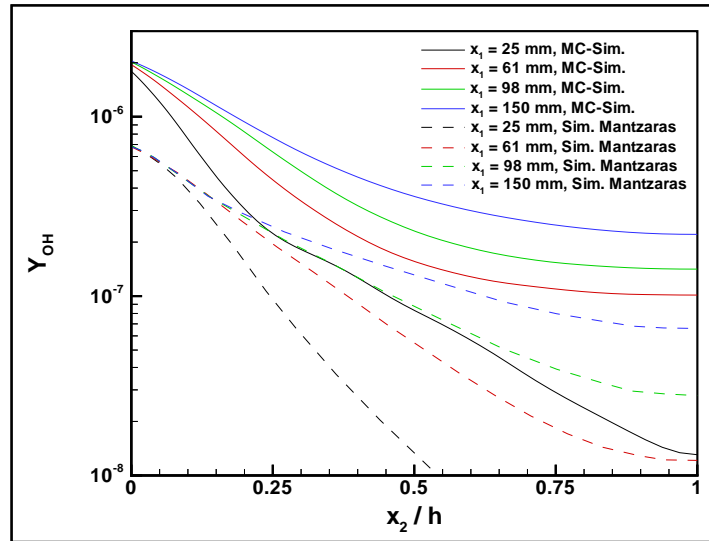


Abbildung 4.21.: Massenbruch der OH-Radikale. Die Notation entspricht Abbildung 4.14.

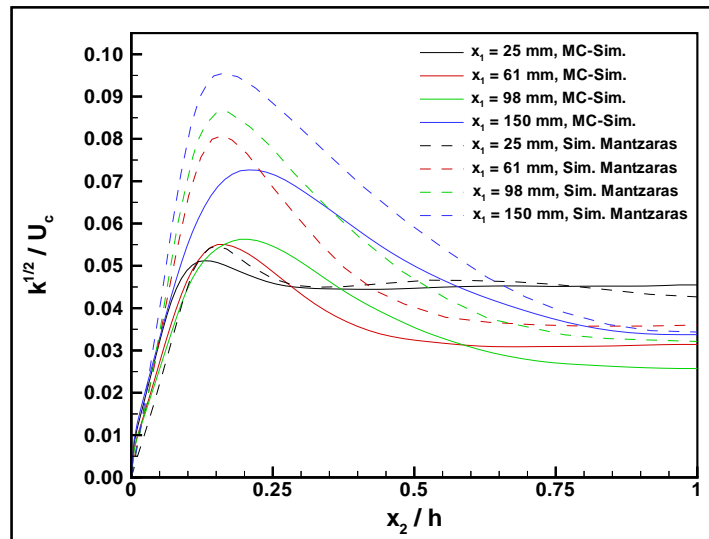


Abbildung 4.22.: Mit der Strömungsgeschwindigkeit in der Kanalmitte normierte turbulente kinetische Energie. Die Notation entspricht Abbildung 4.14.

schiedenen axialen Positionen auch hier kleiner, aber die Phase des Abklingens von k ist früher beendet, sodass wie in der zum Vergleich herangezogenen Simulation das Ansteigen der Maxima bereits vor der zweiten dargestellten axialen Position beginnt. Dies ist vor allem durch den geringeren Wert von U_{rep} zu erklären: Wird für die Bestimmung der axialen Position durch Integration von U_{rep} nach der Zeit ein kleinerer Wert für die Geschwindigkeit zugrunde gelegt, verstreicht bis zum Erreichen der festgelegten axialen Positionen mehr Zeit. Die Profile sind also

zu einem etwas späteren Zeitpunkt in der Entwicklung der Strömung entstanden.

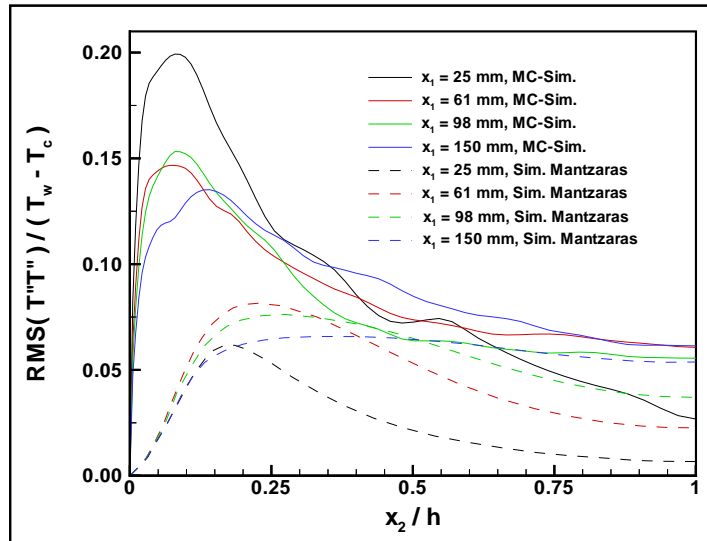


Abbildung 4.23.: Mit der Temperaturdifferenz von Wand und Mitte der Strömung normierte Fluktuationen der Temperatur.

Bei den Fluktuationen der Temperatur ist deutlich zu sehen, dass die Maximalwerte geringer ausfallen als bisher. Sie liegen aber immer noch über denen der 2D-Simulation. Als Grund für das Absinken der Maxima ist wiederum das verstärkte Mischen der stochastischen Partikel in Wandnähe auszumachen.

4.2.2.3. $C_\phi = 2(1 + 136 \cdot A \cdot e^{-10A})$

Wie im vorhergehenden Abschnitt dargestellt, bewirkt eine Vergrößerung des Mischungskoeffizienten C_ϕ eine Annäherung der Lage der Profile der gemittelten Größen an die Ergebnisse der 2D-Simulation. Um festzustellen, wie sich eine weitere Erhöhung von C_ϕ auswirkt, wird nun der Vorfaktor der Exponentialfunktion vergrößert. Es wird eingesetzt

$$C_\phi = 2(1 + 136 \cdot A \cdot e^{-10A}) \quad . \quad (4.6)$$

Das Maximum von C_ϕ liegt damit bei zwölf. Es wird wieder für $A = 0,1$ erreicht.

Die repräsentative Geschwindigkeit wird nach einem Vergleich der Profile der gemittelten Feldgrößen der Simulationen wieder neu gewählt mit:

$$U_{\text{rep}} = 0,46 \cdot u_\tau + 0,54 \cdot U_{\text{vol}} \quad . \quad (4.7)$$

4. Ergebnisse

Im Vergleich zum vorangehenden Fall wird das Gewicht somit noch stärker zu niedrigeren Geschwindigkeiten verschoben, da die Verhältnisse an der Wand sich wegen der schneller ablaufenden Mischvorgänge geändert haben, während das Mischen im Kern der Strömung nicht beschleunigt wird. Weitere Änderungen wurden nicht vorgenommen.

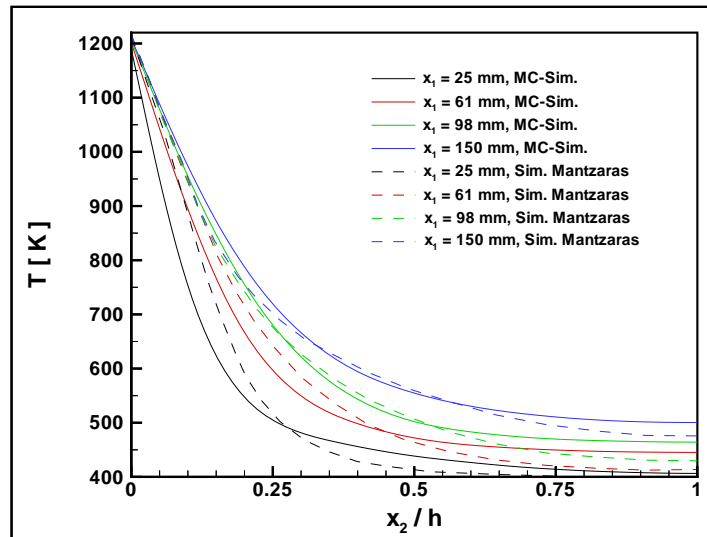


Abbildung 4.24.: Profil der mittleren Temperatur. Die Angaben für x_1 in der Legende beziehen sich auf den Abstand vom Einströmrand des Kanals, der sich bei $x_1 = 0$ befindet.

Bei den Profilen der mittleren Temperatur und der Massenbrüche von Wasserstoff und OH-Radikalen ist, wie auf den Abbildungen 4.24, 4.25 bzw. 4.26 dargestellt ist, im wandnahen Bereich die Entwicklung etwas schneller, was an den etwas kleineren Gradienten in dieser Region zu erkennen ist. Wieder ist der Grund dafür in der weiteren Erhöhung des Mischungskoeffizienten C_ϕ zu suchen.

Anders als im vorangehenden Fall entwickelt sich das Profil der turbulenten kinetischen Energie k , die im wandnahen Bereich nun etwas länger absinkt, bevor sie wieder ansteigt. Der dämpfende Einfluss der infolge der stärkeren Temperaturerhöhung in Wandnähe gestiegenen Viskosität übersteigt hier die wegen des höheren Geschwindigkeitsgradienten gleichfalls gestiegene Produktionsgeschwindigkeit von k . Im späteren Verlauf wird dies wieder ausgeglichen, wie am im Vergleich zum vorangehend dargestellten Fall höheren Maximalwert erkennbar ist.

Bei den Temperaturfluktuationen ist eine deutliche Abnahme des Maximalwertes

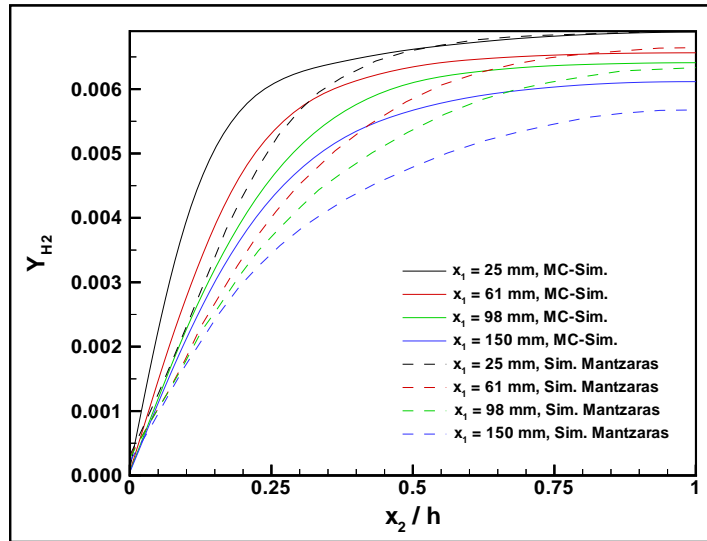


Abbildung 4.25.: Massenbruch von Wasserstoff. Die Notation entspricht Abbildung 4.14.

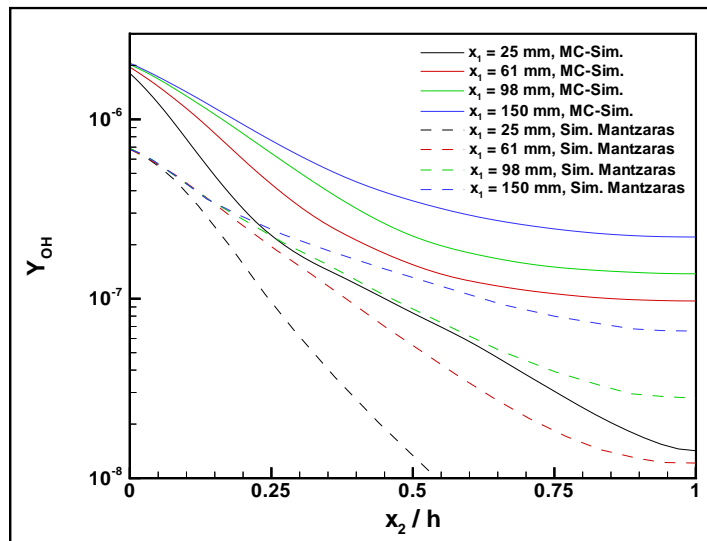


Abbildung 4.26.: Massenbruch der OH-Radikale. Die Notation entspricht Abbildung 4.14.

in Wandnähe festzustellen, wie auf Abbildung 4.28 zu sehen ist. In größerem Abstand von der Wand wird der Anstieg im zeitlichen Verlauf zu Beginn dafür beschleunigt; ab einer axialen Position von $x_1 = 98$ mm ist dieses Überschwingen abgeklungen.

Ingesamt ergibt sich mit der Wahl von $C_\phi = 2(1 + 136 \cdot A \cdot e^{-10A})$ für den Fall der ausschließlich heterogen katalysierten Wasserstoff-Oxidation die beste Überein-

4. Ergebnisse

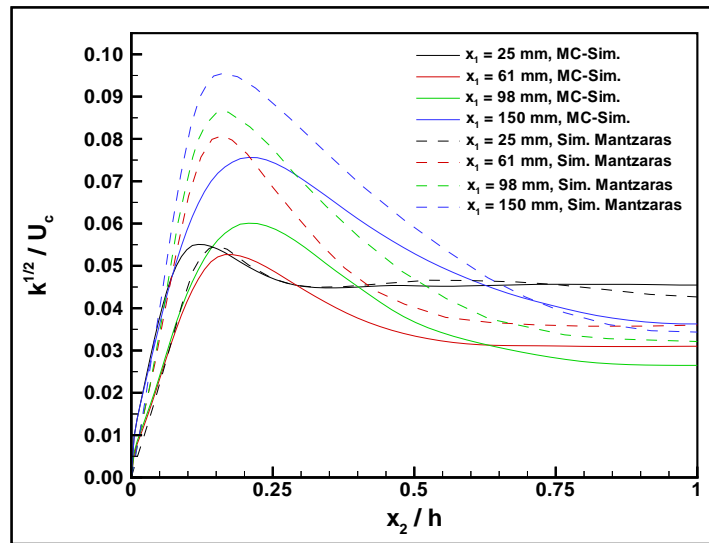


Abbildung 4.27.: Mit der Strömungsgeschwindigkeit in der Kanalmitte normierte turbulente kinetische Energie. Die Notation entspricht Abbildung 4.14.

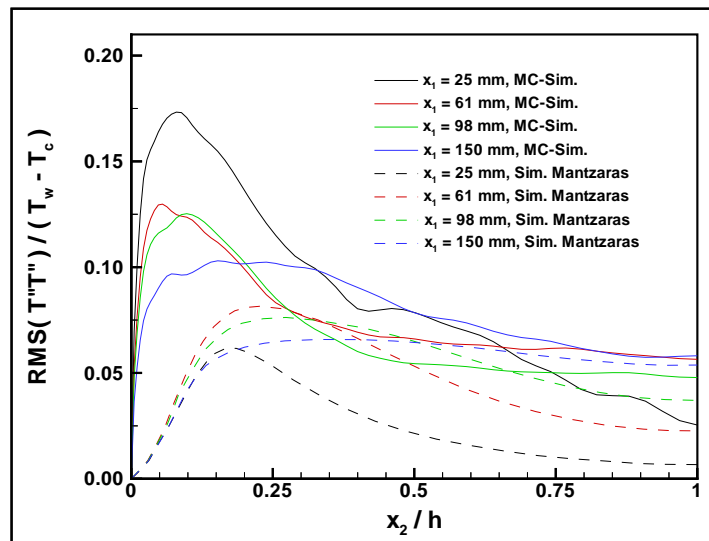


Abbildung 4.28.: Mit der Temperaturdifferenz von Wand und Mitte der Strömung normierte Fluktuationen der Temperatur.

stimmung zwischen 1D- und 2D-Simulation. Dies deutet darauf hin, dass durch das in der 2D-simulation verwendete Turbulenzmodell die Mischung in Wandnähe stark beschleunigt wird, was von der Reduzierung des Modells in diesem Bereich auf ein Ein-Gleichungs-Modell herrühren dürfte, wie weiter oben beschrieben.

4.2.3. Heterogen katalysierte reaktive Strömung mit Gasphasenreaktionen

Für die in diesem Abschnitt beschriebenen Fälle der Simulation wird nun der im vorangehenden Abschnitt abgeschaltete Gasphasenreaktionsmechanismus aktiviert. Wie vorher sollen nun die drei verschiedenen Funktionen für den Mischungskoeffizienten C_ϕ bezüglich ihres Einflusses auf die MC-Simulation der Strömung hin betrachtet werden.

4.2.3.1. $C_\phi = 2$

Im Vergleich zur ausschließlich heterogen katalysiert ablaufenden Reaktion hat hier die reaktive Kernströmung einen größeren Einfluss auf die zeitliche Entwicklung. Deshalb ist der Anteil der volumengemittelten Geschwindigkeit U_{vol} an U_{rep} deutlich größer als bisher, wie ein Vergleich der Profile der gemittelten Größen beider Simulationen zeigt. Für die repräsentative Geschwindigkeit zur Bestimmung der axialen Position wird hier eingesetzt

$$U_{\text{rep}} = 0,2 \cdot u_\tau + 0,8 \cdot U_{\text{vol}} \quad . \quad (4.8)$$

Wie auf Abbildung 4.29 dargestellt, gibt es bei den Temperaturprofilen der M-C-Simulation kaum einen erkennbaren Unterschied zu den Profilen im ausschließlich heterogen katalysierten Fall. Wegen des langsamen Mischens der stochastischen Partikel im wandnahen Bereich kann sich die Reaktionsfront nicht von der Wand aus zum Kern der Strömung ausbreiten. Bei der 2D-Simulation wird, wegen des weiter oben bereits beschriebenen deutlich intensiveren Mischens in diesem Bereich, das Gemisch in Wandnähe gezündet und die Temperatur steigt in diesem Bereich auf einen Wert an, der oberhalb der Wandtemperatur liegt.

Zur Unterschätzung des Mischens wandnahen Bereich wegen des niedrigen Wertes für den Mischungskoeffizienten C_ϕ kommt hinzu, dass durch die Vernachlässigung von Gradienten in axialer Richtung, die im Fall homogener Reaktionen zumindest zu Beginn größer sind als im heterogen katalysierten Fall, auch die Mischung in axialer Richtung völlig ausgeschlossen wird. War die Auswirkung der Vernachlässigung der Rückvermischung im vorigen Fall noch vergleichsweise gering, so führt sie nun zusammen mit dem langsameren Mischen in wandnormaler

4. Ergebnisse

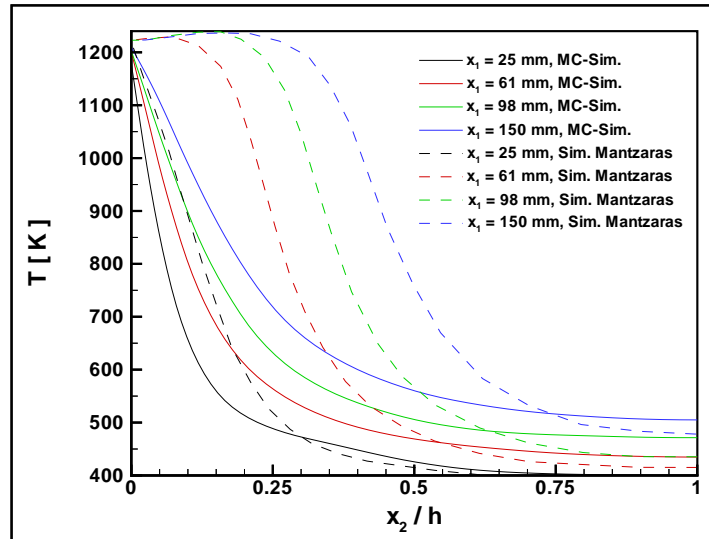


Abbildung 4.29.: Profil der mittleren Temperatur. Durchgezogene Linien: 1D-MC-Simulation, gestrichelte Linien: 2D-Simulation. In der Legende ist x_1 der Abstand vom Einströmrand des Kanals, der sich bei $x_1 = 0$ befindet.

Richtung zu einem viel langsameren Verbrauch von Brennstoff und damit auch zu einer langsameren Entwicklung in den Temperatur- und OH-Profilen als bei der 2D-Simulation, bei der wegen des zweidimensionalen Gitters und des elliptischen Löser auch Gradienten und Krümmungen in axialer Richtung berücksichtigt werden. Dies ist auf den Abbildungen 4.30 und 4.31 erkennbar.

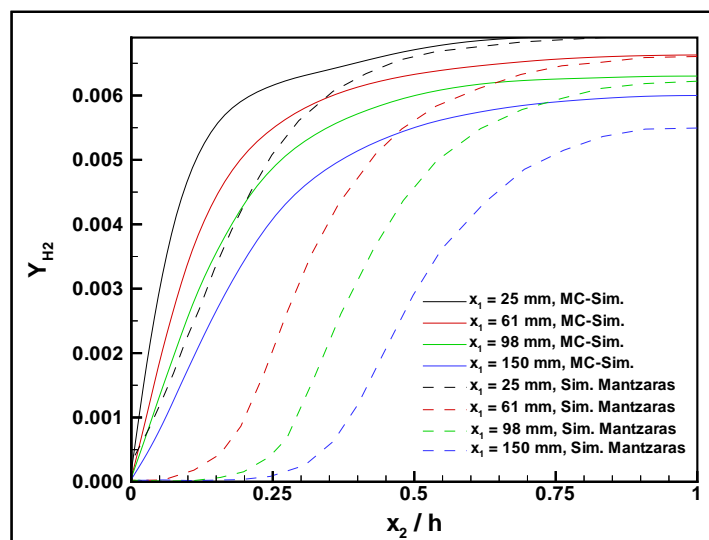


Abbildung 4.30.: Massenbruch von Wasserstoff. Die Notation entspricht Abbildung 4.29.

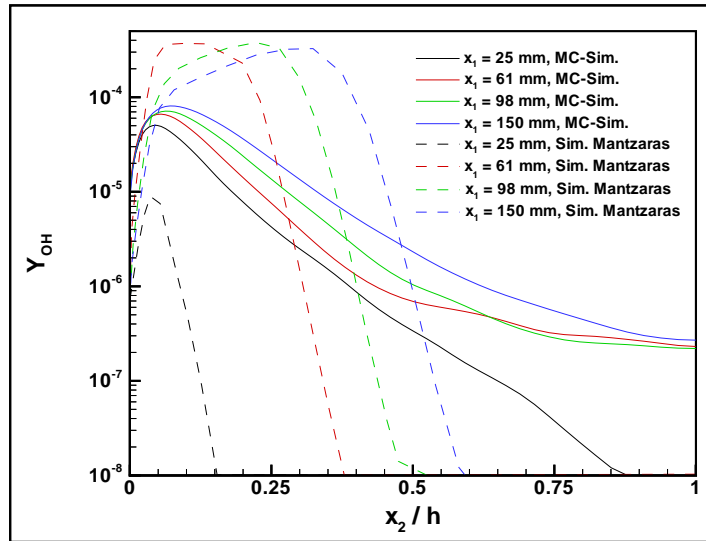


Abbildung 4.31.: Massenbruch der OH-Radikale. Die Notation entspricht Abbildung 4.29.

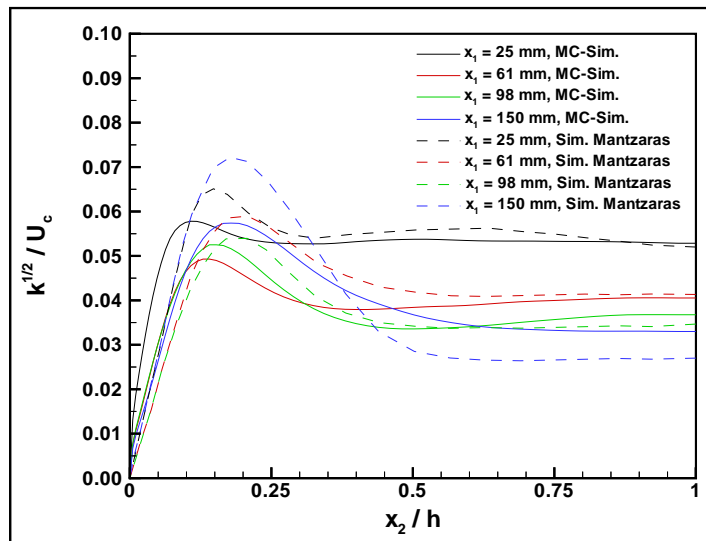


Abbildung 4.32.: Mit der Strömungsgeschwindigkeit in der Kanalmitte normierte turbulente kinetische Energie. Die Notation entspricht Abbildung 4.29

Die zeitliche Entwicklung der turbulenten kinetischen Energie ist im wandnahen Bereich schneller als vorher, ohne die Reaktionen in der Gasphase. In Übereinstimmung mit der zweidimensionalen Simulation liegen alle Profile auf einem etwas niedrigeren Niveau im Vergleich zur Situation bei den Wandreaktionen.

Wie schon im ausschließlich heterogen katalysierten Fall liegen die Temperaturluktuationen im Vergleich zur 2D-Simulation hoch, wofür wiederum das langsame

4. Ergebnisse

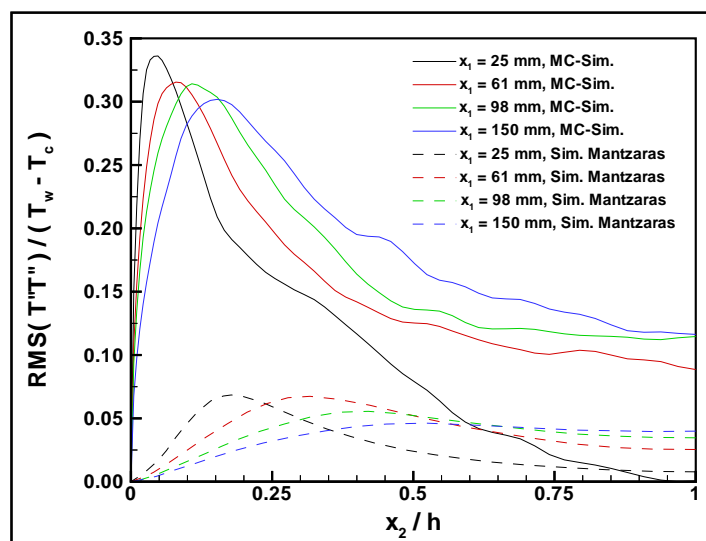


Abbildung 4.33.: Mit der Temperaturdifferenz von Wand und Mitte der Strömung normierte Fluktuationen der Temperatur.

Mischen verantwortlich ist. Die zeitliche Entwicklung bezüglich des Sinkens und der Verschiebung der Maxima und des Anstiegs der Fluktuationen im Kern der Strömung entspricht derjenigen der zweidimensionalen Simulation.

4.2.3.2. $C_\phi = 2(1 + 81,6 \cdot A \cdot e^{-10A})$

Da die Entwicklung insgesamt schneller vor sich geht als beim Einsatz eines konstanten Mischungskoeffizienten, wird als repräsentative Geschwindigkeit zur Bestimmung der axialen Position benutzt

$$U_{\text{rep}} = 0,15 \cdot u_\tau + 0,85 \cdot U_{\text{vol}} \quad . \quad (4.9)$$

Wie auf den folgenden Abbildungen 4.34 bis 4.38 ersichtlich wird, hat die Erhöhung von C_ϕ im wandnahen Bereich einen starken Einfluss auf die zeitliche Entwicklung.

Bei den Temperaturprofilen in Abbildung 4.34 ist eine deutliche Verschiebung der Kurven zur Kanalmitte hin festzustellen. Die Profile fallen an der Wand flacher ab als im Fall der ausschließlich heterogen katalysierten Reaktion, wie auch bei der 2D-Simulation. Die Temperatur fällt an der Wand aber immer noch deutlich steiler. Ein Temperaturanstieg auf eine Gastemperatur, die oberhalb der Wandtemperatur liegt, wird bei der M-C-Simulation nicht erreicht. Wie bereits

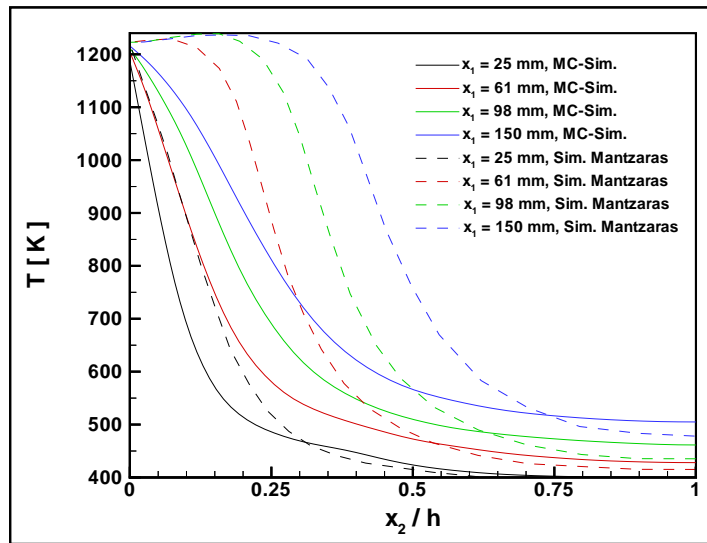


Abbildung 4.34.: Profil der mittleren Temperatur. Durchgezogene Linien: 1D-MC-Simulation, gestrichelte Linien: 2D-Simulation. Die Angaben für x_1 in der Legende beziehen sich auf den Abstand vom Einströmrand des Kanals, der sich bei $x_1 = 0$ befindet.

im vorangehenden Fall ist die Ursache dafür das insgesamt langsame Mischen der stochastischen Partikel bei der M-C-Simulation.

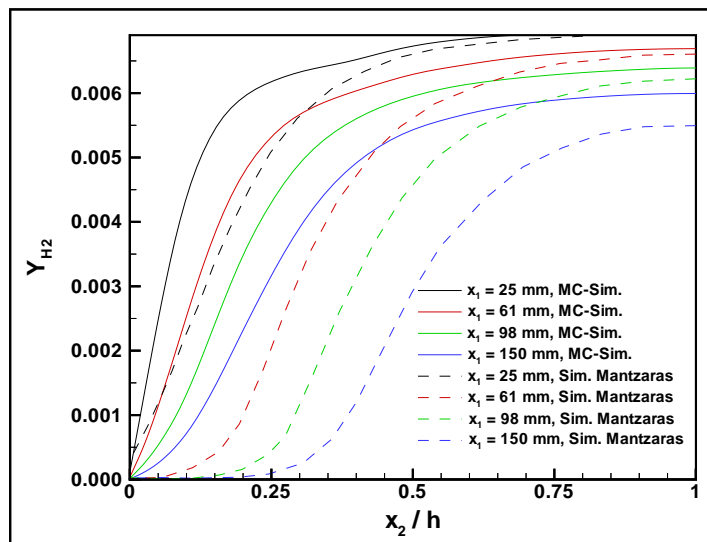


Abbildung 4.35.: Massenbruch von Wasserstoff. Die Notation entspricht Abbildung 4.34.

Wie bei der Temperatur ist auch beim Profil des Massenbruchs von Wasserstoff eine Verschiebung zur Kanalmitte hin in Abbildung 4.35 zu sehen. Der Anstieg an der Wand ist aber erheblich steiler; der Umsatz an Wasserstoff ist bei der 1D-

4. Ergebnisse

Simulation geringer als bei der 2D-Simulation. Wie in der 2D-Simulation nimmt bei der M-C-Simulation der Massenbruch von Wasserstoff in der Kanalmitte im Vergleich zum ausschließlich heterogen katalysierten Fall nur geringfügig niedrigere Werte an.

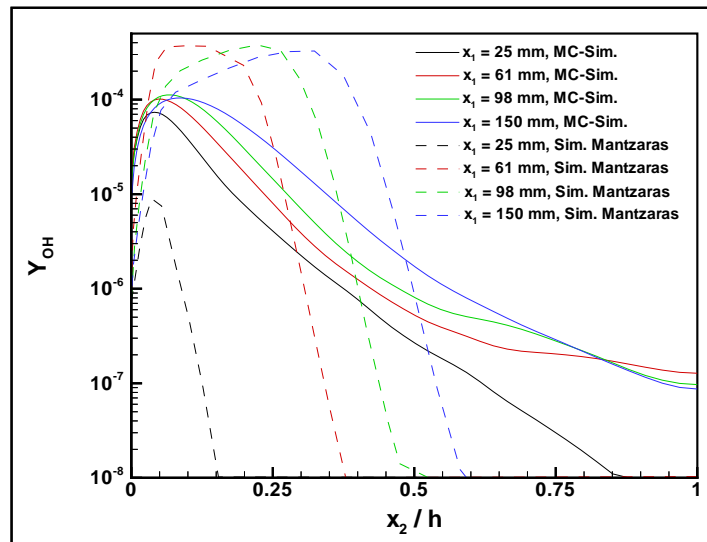


Abbildung 4.36.: Massenbruch der OH-Radikale. Die Notation entspricht Abbildung 4.34.

Beim Massenbruch der OH-Radikale zeigt sich ein ähnliches Bild wie im Fall des konstanten C_ϕ . Die Maxima liegen ein wenig höher, sind aber immer noch niedriger als bei der 2D-Simulation. Die Tendenz der zeitlichen Entwicklung, dass die Maxima ansteigen und sich von der Wand entfernen, wird bei beiden Simulationen in gleicher Weise wiedergegeben. Die Maxima sind jedoch bei der M-C-Simulation näher an der Wand.

Die turbulente kinetische Energie steigt in Wandnähe wie schon bei konstantem Mischungskoeffizienten im Fall der 1D-Simulation früher wieder an. Zur Mitte hin verlaufen die Entwicklungen beider Simulationen ähnlicher. Insgesamt liegen auch hier die Kurven auf einem niedrigeren Niveau.

Die Fluktuationen der Temperatur erreichen wie bei konstantem C_ϕ über den ganzen Kanalquerschnitt und die ganze Kanallänge bei der M-C-Simulation höhere Werte, was durch die langsamere Mischung und das Fehlen der Rückvermischung verursacht wird. Im wandnahen Bereich verschieben sich die Maxima aber nicht wie vorher nur von der Wand weg, sondern sinken nun auch mit steigender Ent-

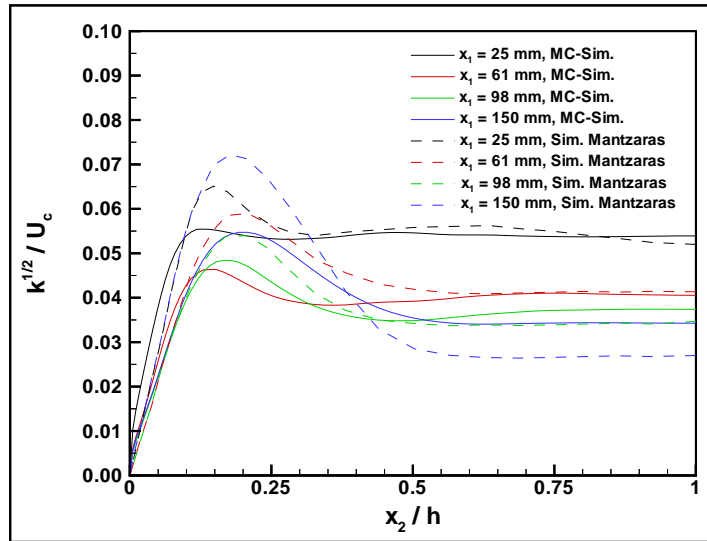


Abbildung 4.37.: Mit der Strömungsgeschwindigkeit in der Kanalmitte normierte turbulente kinetische Energie. Die Notation entspricht Abbildung 4.34

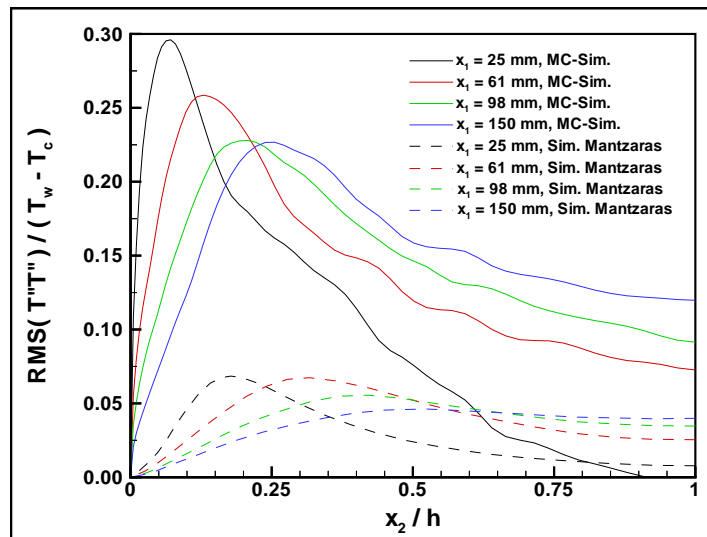


Abbildung 4.38.: Mit der Temperaturdifferenz von Wand und Mitte der Strömung normierte Fluktuationen der Temperatur.

fernung vom Kanaleintritt; die qualitative Übereinstimmung mit der zweidimensionalen Simulation ist deutlicher als im vorhergehenden Fall. Für das Abklingen der Maxima bei der 1D-Simulation ist der in diesem Bereich größere Mischungskoeffizient verantwortlich. Wie beim entsprechenden Fall ohne Gasphasenreaktionen deutet dies darauf hin, dass die Annahme eines C_ϕ , das nicht über den ganzen Querschnitt einen konstanten Wert hat, sondern in Wandnähe deutlich größer ist als für den Fall homogener Turbulenz, dem Mischungsverhalten der

4. Ergebnisse

1D-Simulation näher kommt.

4.2.3.3. $C_\phi = 2(1 + 136 \cdot A \cdot e^{-10A})$

Anders als bei den bisher betrachteten Fällen der Simulation zeigt ein Vergleich der Profile, dass trotz des in Wandnähe vergrößerten Mischungskoeffizienten die repräsentative Geschwindigkeit zur Bestimmung der axialen Position nicht weiter zur volumetrischen Geschwindigkeit verschoben, i.e. erhöht werden muss. U_{rep} wird hier genauso bestimmt wie im vorangehenden Fall mit

$$U_{\text{rep}} = 0,15 \cdot u_\tau + 0,85 \cdot U_{\text{vol}} \quad . \quad (4.10)$$

Wie im Fall der ausschließlich heterogen katalysiert reaktiven Strömung setzt sich auch hier der Trend fort: Die Erhöhung des Mischungskoeffizienten in Wandnähe steigert die Ähnlichkeit der eindimensionalen M-C-Simulation mit der zweidimensionalen Simulation, wie auf den nachfolgenden Abbildungen 4.39 bis 4.43 dargestellt ist.

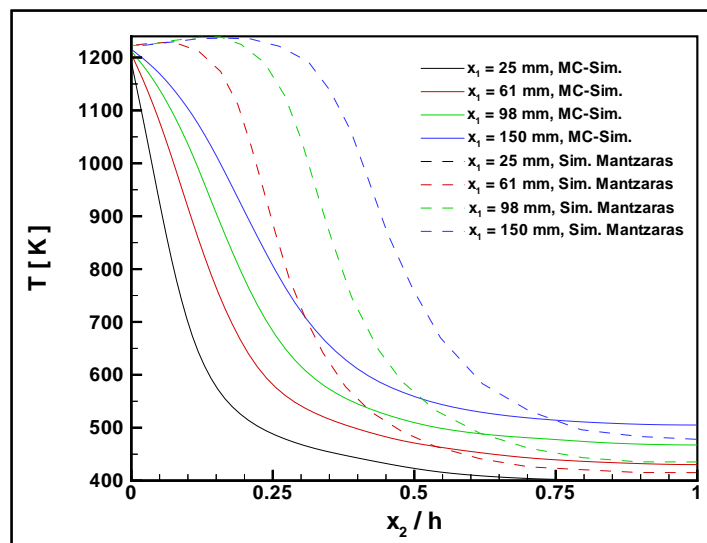


Abbildung 4.39.: Profil der mittleren Temperatur. Durchgezogene Linien: 1D-MC-Simulation, gestrichelte Linien: 2D-Simulation. Die Angaben für x_1 in der Legende beziehen sich auf den Abstand vom Einströmrand des Kanals, der sich bei $x_1 = 0$ befindet.

Bei den Temperaturprofilen ist im Vergleich zum variablen Mischungskoeffizienten mit geringerem Vorfaktor eine weitere Verschiebung der Linien zur Kanalmitte hin und ein flacherer Abfall in Wandnähe festzustellen, wie auf Abbildung

4.39 zu erkennen ist. Der Anstieg der Gastemperatur auf Werte oberhalb der Wandtemperatur wie in der zweidimensionalen Simulation wird auch hier in der M-C-Simulation nicht erreicht. Wie auch die Profile des Massenbruchs an Wasserstoff zeigen, liegt dies daran, dass sich wie vorher die Reaktionsfront nur langsam von der Wand zur Kanalmitte verlagert. Der Mischungsprozess läuft bei der M-C-Simulation somit immer noch deutlich langsamer ab als bei der 2D-Simulation, was sich bereits bei entsprechenden Fall ohne Reaktionen in der Gasphase angedeutet hat.

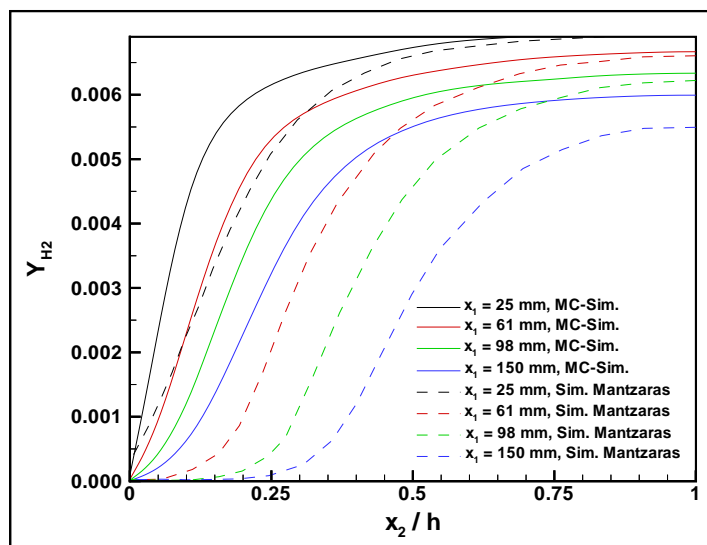


Abbildung 4.40.: Massenbruch von Wasserstoff. Die Notation entspricht Abbildung 4.39.

Der Umsatz an Wasserstoff ist nun etwas größer als bisher, wie in Abbildung 4.40 zu sehen, der Anstieg an der Wand aber noch flacher als bei der 2D-Simulation. Wie im vorhergehenden Fall sinkt der Massenbruch von Wasserstoff in der Kanalmitte nur wenig, wie auch in der zum Vergleich herangezogenen Simulation.

Beim Massenbruch der OH-Radikale liegen die Maxima noch etwas höher als im vorangehenden Fall. Sonst ist kein Unterschied festzustellen, wie in Abbildung 4.41 zu sehen ist.

Die Entwicklung der turbulenten kinetischen Energie verläuft etwas schneller als bei der zweidimensionalen Simulation und ist nahezu identisch mit der des vorangehenden Falls, wie auf Abbildung 4.42 zu erkennen ist. Da U_{rep} auf die gleiche Weise bestimmt wird wie im vorangehenden Fall, bedeutet dies, dass der größere

4. Ergebnisse

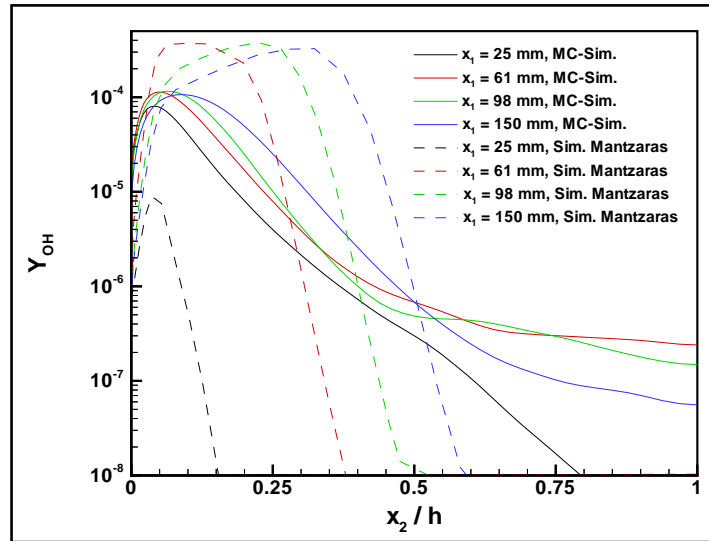


Abbildung 4.41.: Massenbruch der OH-Radikale. Die Notation entspricht Abbildung 4.39.

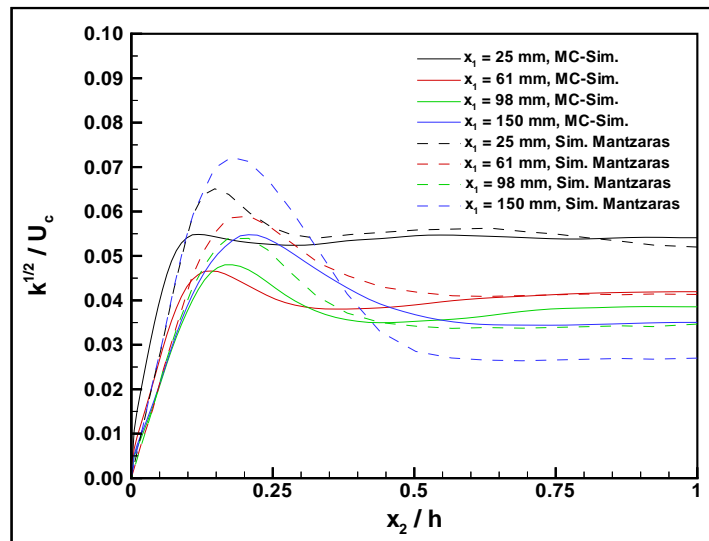


Abbildung 4.42.: Mit der Strömungsgeschwindigkeit in der Kanalmitte normierte turbulente kinetische Energie. Die Notation entspricht Abbildung 4.39

Maximalwert für C_ϕ und der dadurch beschleunigte Wärme- und Stofftransport sich kaum auf die Turbulenz auswirkt.

Bei den Temperaturfluktuationen ist im Vergleich zum variablen C_ϕ mit geringem Maximalwert eine weitere deutlich Reduzierung der Maxima in Wandnähe festzustellen. Auch in der Kanalmitte liegen die Linien tiefer. Die Fluktuationen liegen aber immer noch auf höherem Niveau, was von der Vernachlässigung der

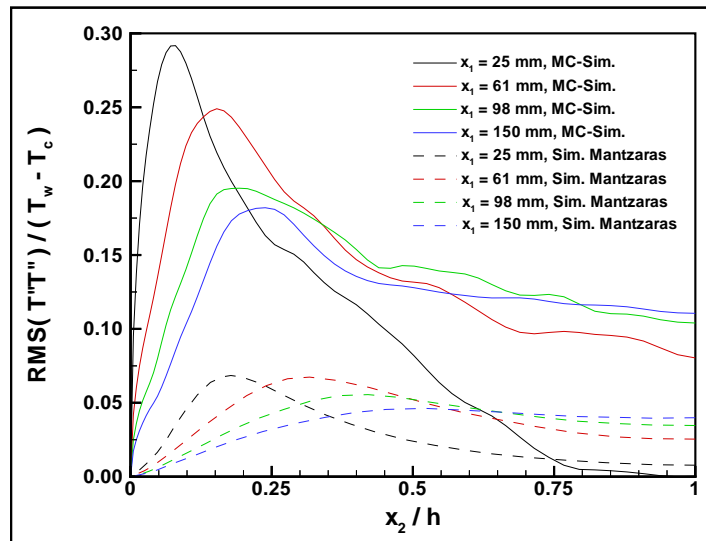


Abbildung 4.43.: Mit der Temperaturdifferenz von Wand und Mitte der Strömung normierte Fluktuationen der Temperatur.

Rückvermischung herrührt.

Eine weitere Erhöhung von C_ϕ kann die Turbulenz wegen der Vernachlässigung der Gradienten in axialer Richtung und der damit verbundenen Verringerung der Produktionsgeschwindigkeit der turbulenten kinetischen Energie zum Abklingen bringen.

Für die Unterschiede zwischen der M-C-Simulation und der zum Vergleich verwendeten Simulation sind, wie eingangs kurz beschrieben, vor allem zwei Gründe auszumachen: Zum einen ist dies die Reduktion auf nur eine Dimension im Raum bei der M-C-Simulation. Dadurch wird die Rückvermischung in Strömungsrichtung in der Strömung ausgeschlossen, die zu einer schnelleren Entwicklung am Kanalbeginn führt. Ist dies bei laminaren Strömungen noch vernachlässigbar, so kann der Einfluss bei einer turbulenten Strömung dagegen von großer Bedeutung sein. Außerdem ist die Übertragung der eindimensionalen Ergebnisse auf ein zweidimensionales Gitter mit Fehlern behaftet, da die Verwendung einer einzigen Geschwindigkeit nicht allen Bereichen in der Strömung gerecht werden kann. Darüber hinaus werden die Feldgrößen und deren Gradienten zum selben Zeitpunkt, nicht am selben Ort bestimmt. In einer Strömung, die den statistisch stationären Zustand erreicht hat, ist dies unerheblich, nicht aber in einer instationären Strömung, wie sie hier vorliegt. Darüber hinaus führt die Vernachlässigung

4. *Ergebnisse*

des Geschwindigkeitsgradienten in axialer Richtung gerade am Kanaleintritt, wo diese Gradienten groß sind, zur Unterschätzung der Produktionsgeschwindigkeit der turbulenten kinetischen Energie. Um ein Abklingen zu verhindern, muss die turbulente Frequenz reduziert werden, was wiederum die Mischungsgeschwindigkeit verringert und die Entwicklung in diesem Bereich verzögert.

Zum Zweiten ist zu erwarten, dass sich durch die Verwendung unterschiedlicher Turbulenzmodelle bei beiden Simulationen auch unterschiedliche turbulente Zeitskalen ergeben, wodurch sich sogar bei gleichen Mischungskoeffizienten voneinander verschiedene Mischungsgeschwindigkeiten ergeben.

Es sollte aber auch nicht die Tatsache übersehen werden, dass es sich bei den zum Vergleich herangezogenen Daten auch um eine Simulation handelt. Wie gut sie ein mit den angenommenen Randbedingungen durchgeführtes Experiment wiedergibt, kann erst dann bewertet werden, wenn experimentelle Daten vorliegen, die unter den gleichen Randbedingungen bestimmt wurden.

5. Zusammenfassung

Ziel dieser Arbeit war die Erweiterung eines Programms von A. Wölfert [57] zur Simulation einer nichtreaktiven turbulenten Kanalströmung mittels Monte-Carlo-Methoden um Modelle, mit denen reaktive Strömungen berechnet werden können.

Im ursprünglichen Programm wurden stochastischen Partikeln Geschwindigkeiten als Eigenschaften zugewiesen, der Ort und die Geschwindigkeiten durch Modelle für konvektive und diffusive Prozesse verändert und das Geschwindigkeitsfeld durch räumliche Mittelwertbildung bestimmt. Die Information über die Zeitskala, welche die turbulenten Vorgänge charakterisiert, wurde durch ein k - ϵ -Modell von B.E. Launder und N.T. Shima [20] bestimmt.

Um eine reaktive Strömung zu beschreiben, wurde in der vorliegenden Arbeit durch die Definition neuer Partikeleigenschaften die Monte-Carlo-Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion zu einer gebundenen Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion für Geschwindigkeit, chemische Spezies und turbulente Frequenz erweitert. Dazu wurde ein stochastisches Äquivalent zum k - ω -Modell implementiert, weil damit die turbulente Zeitskala auch bei nichtkonstanter Dichte bestimmt werden kann. Zur Schließung der gemittelten chemischen Quellterme wurden detaillierte Reaktionsmechanismen für homogene Gasphasenreaktionen und heterogen katalysierte Reaktionen an der Wand verwendet, die dazu dienen, die Änderungen der Massenbrüche der chemischen Spezies zu berechnen. Schließlich wurde wegen der bei reaktiven Strömungen auftretenden Dichtegradienten das ursprünglich verwendete Turbulenzmodell, ein Reynoldsstress-Modell nach Launder und Shima, ausgetauscht. Durch Veränderung der beschreibenden Parameter konnte das dafür eingesetzte Generalized-Langevin-Modell an ein Modified-Craft-Launder-Modell

5. Zusammenfassung

angepasst werden. Auch hier wurden die Felder der Mittelwerte und Varianzen der Geschwindigkeiten, der chemischen Spezies und der turbulenten Frequenz durch räumliche Mittelwertbildung bestimmt.

Mit dem in dieser Weise modifizierten Programm wurden zunächst die statistisch stationären Zustände von Kanalströmungen bei verschiedenen Reynoldszahlen von $Re = 3400$ bis $Re = 61600$ simuliert und mit den Ergebnissen einer direkten numerischen Simulation ($Re = 3400$) bzw mit experimentell bestimmten Werten verglichen. Es zeigte sich über diesen großen Bereich der Reynoldszahlen eine gute qualitative Übereinstimmung zwischen der Monte-Carlo-Simulation und der direkten numerischen Simulation bzw. den Experimenten. Der Gradient der mittleren Strömungsgeschwindigkeit wurde in Wandnähe aber etwas unterschätzt, ebenso wie die Varianz der Strömungsgeschwindigkeit in Hauptströmungsrichtung, während die Varianzen der Geschwindigkeit in der Richtung senkrecht zur Wand und der Geschwindigkeit in der Richtung parallel zur Wand, aber senkrecht zur Strömung überschätzt wurden.

Als Beispiel für eine reaktive Strömung folgte eine durch Platin heterogen katalysierte Wasserstoff-Oxidation für ein mageres Wasserstoff/Luft-Gemisch. Die Ergebnisse wurden mit einer anderen Simulation verglichen, da in der Literatur keinerlei experimentelle Ergebnisse für eine turbulente reaktive Kanalströmung zu finden waren.

In beiden Simulationen fanden dieselben Mechanismen für die Wandreaktionen bzw die Gasphasenreaktionen Anwendung. Die Zündung des Gemisches erfolgte durch die Wand, die konstant bei einer Temperatur von 1220 K gehalten wurde. Es wurden die Profile für die Geschwindigkeit, die mittlere Temperatur und die wichtigsten chemischen Spezies berechnet. Die zum Vergleich herangezogene Simulation verwendet einen elliptischen zweidimensionalen Löser für die Erhaltungsgleichungen, während bei der vorliegenden Arbeit ein eindimensionales explizites Verfahren zum Einsatz kommt. Die Position in Strömungsrichtung für die Auswertung der Profile musste deshalb durch die Zeitintegration einer repräsentativen Geschwindigkeit ermittelt werden. Es wurde zunächst nur der Mechanismus für die heterogen katalysierten Wandreaktionen aktiviert. Nach Variation einzelner im stochastischen Mischungsmodell für skalare Größen verwendeter Koeffizienten konnte zumindest eine qualitative Übereinstimmung erzielt werden. Im

Vergleich mit der zweidimensionalen Simulation verläuft der Transport der chemischen Spezies von der Wand in den Kern der Strömung bei der Monte-Carlo-Simulation langsamer. Anschließend wurden auch die Gasphasenreaktionen aktiviert. Hier zeigte sich dasselbe Bild: Die qualitative Übereinstimmung ist gut, im Detail werden die Transportprozesse aber zu langsam wiedergegeben. Der Grund dafür liegt in der unterschiedlichen Dimensionalität der verwendeten Rechengitter bei den beiden Simulationen: Beim eindimensionalen Löser wird der Gradient der Strömungsgeschwindigkeit in Strömungsrichtung, der zu Beginn der Rechnung erheblichen Einfluss haben kann, vernachlässigt. Darüber hinaus ist auch die Übertragung in die fehlende zweite Dimension mittels repräsentativer Geschwindigkeit fehlerbehaftet. Als weiterer Grund für die Unterschiede zwischen den Ergebnissen beider Simulationen sind die unterschiedlichen Turbulenzmodelle auszumachen, wodurch sich verschiedene turbulente Zeitskalen ergeben, die sich bei der Geschwindigkeit der Mischprozesse auswirken.

Bei der zukünftigen Weiterentwicklung des Programms sollte deshalb der nächste Schritt der Ausbau auf ein zweidimensionales Gitter sein. Damit wäre auch die Verbesserung des stochastischen Modells für den Wärme- und Stoffübergang von der Strömung an die Wand möglich. Um komplexere chemische Systeme beschreiben zu können, sollten dann reduzierte Reaktionsmechanismen oder Methoden, die die intrinsischen niedrigdimensionalen Mannigfaltigkeiten eines reaktiven Systems nutzen und sich für Wandreaktionen in der Entwicklung befinden, eingebaut werden. Darüber hinaus sind zur Validierung der Simulation für die weitere Entwicklung experimentelle Untersuchungen notwendig.

Literaturverzeichnis

- [1] J. Warnatz, U. Maas, R. W. Dibble. *Verbrennung*. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 2. Ausgabe, 1997.
- [2] M. Baerns, M. Hofmann, A. Renken. *Chemische Reaktionstechnik*. Georg Thieme Verlag, Stuttgart, 3. Ausgabe, 1999.
- [3] S. B. Pope. *Pdf methods for turbulent reactive flows*. Prog. Energy Combust. Sci. **11**, 119–192 1985.
- [4] J. Honerkamp. *Stochastische Dynamische Systeme*. VCH, 1990.
- [5] C. Taut. *Simulation turbulenter reaktiver Strömungen mittels Monte-Carlo-PDF-Methoden in drei Raumdimensionen am Beispiel motorischer Verbrennung*. Dissertation, Universität Heidelberg, 1999.
- [6] T. D. Dreeben. *Pdf modeling of near-wall turbulent flows*. Dissertation, Cornell University, 1997.
- [7] J. H. Spurk. *Strömungslehre: Einführung in die Theorie der Strömungen*. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 4. Ausgabe, 1996.
- [8] S.B. Pope. *Turbulent Flows*. Cambridge University Press, New York, 2000.
- [9] W. Rodi. *Turbulenzmodelle und ihre Anwendung mit Hilfe von Differenzenverfahren*. Vorlesungsskript, Universität Karlsruhe.
- [10] W. Rodi (Hrsg.). *Numerische Berechnung turbulenter Strömungen in Forschung und Praxis*. Universität Karlsruhe, 1996.

- [11] D.C. Wilcox. *Turbulence Modelling for CFD*. D.C.W. Industries, La Canada, California, 1993.
- [12] C.K.G. Lam, K. A. Bremhorst. *Modified Form of the k - ϵ -Model for predicting Wall Turbulence*. Journal of Fluids Engineering **103**, 456–460 1981.
- [13] B. E. Launder, B.I. Sharma. *Application of the Energy-Dissipation Model of Turbulence to the Calculation of Flow near a Spinning Disc*. Letters in Heat and Mass Transfer **1**(10), 131–138 1974.
- [14] D.C. Wilcox. *Progress in Turbulence Modelling for Complex Flow Fields Including Effects of Compressibility*. NASA Technical Report, 1517, 1980.
- [15] J. C. Kok. *Resolving the Dependence on Freestream Values for the $k - \omega$ Turbulence Model*. AIAA Journal **38**(7), 1292–1295 2000.
- [16] F.R. Menter. *Zonal Two Equation k - ω Turbulence Models for Aerodynamic Flows*. AIAA Technical Report, 93-2906, 1993.
- [17] C. Patel, W. Rodi, G. Scheurer. *Turbulence Models for Near-Wall and Low Reynolds Number Flows: A Review*. AIAA journal **23**(9), 1308–1319 1984.
- [18] P. Rautahaimo, T. Siikonen. *Improved Solid-Wall Boundary Treatment in Low-Reynolds-Number Turbulence Models*. AIAA Journal **39**(5), 824–830 2001.
- [19] H.A. Wouters. *Lagrangian Models for Turbulent Reacting Flows*. Dissertation, Universität Delft, 1998.
- [20] B. E. Launder, N. T. Shima. *Second-Moment-Closure for the Near-Wall Sublayer. Development and Application*. AIAA Journal **27**(10), 1319–1325 1989.
- [21] P. Batten, T. J. Craft, M. A. Leschziner, H. Loyau. *Reynolds-Stress-Transport Modeling for Compressible Aerodynamics Applications*. AIAA Journal **37**(7), 785–797 1999.
- [22] T. J. Craft, B. E. Launder. *A Reynolds-Stress Closure Designed for Complex Geometries*. Int. J. of Heat and Fluid Flow **19**, 245–254 1996.

Literaturverzeichnis

- [23] S. Fu. *Computational Modelling of Turbulent Swirling Flows with Second Moment Closures*. Dissertation, University of Manchester, 1988.
- [24] J. Laufer. *Investigation of Turbulent Flow in a Two-Dimensional Channel*. NACA Technical Report, 1053, 1951.
- [25] C. Orlemann. *Entwicklung von Verfahren zur zeitlich und räumlich hochaufgelösten Visualisierung von laminaren Grenzschichten turbulenter Strömungen*. Dissertation, Universität Heidelberg, 1999.
- [26] J. Kim, P. Moin, R. Moser. *Turbulence Statistics in Fully Developed Channel Flow at Low Reynolds Number*. J. of Fluid Mechanics **177**, 133–166 1987.
- [27] H. Schlichting. *Grenzschicht-Theorie*. Verlag G. Braun, Karlsruhe, 8. Ausgabe, 1982.
- [28] J. Nikuradse. *Untersuchungen über die Geschwindigkeitsverteilung in turbulenten Strömungen*. Dissertation, Universität Göttingen, 1926.
- [29] J. Zierep (Hrsg.). *Grundzüge der Strömungslehre*. Springer Verlag, Heidelberg, 1993.
- [30] T. v. Karman. *Mechanische Ähnlichkeit und Turbulenz*. Nach. Ges. Wiss. Göttingen **1930**, 58–76 1930.
- [31] H. D. Baehr. *Thermodynamik*. Springer-Verlag, Heidelberg, 2000.
- [32] A. Kaltayev, U. Riedel, J. Warnatz. *The Hydrodynamic Structure of a Methane-Air Tulip Flame*. In 17th International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems, Heidelberg. 1999.
- [33] S. Einecke. *Quantitative laserspektroskopische Charakterisierung von Temperatur- und Konzentrationsfeldern in einem Zweitakt-Ottomotor*. Dissertation, Universität Heidelberg, 1999.
- [34] C. Chevalier, J. Warnatz, H. Melenk. *Automatic Generation of Reaction Mechanisms for the Description of the Oxidation of Higher Hydrocarbons*. Ber. Bunsenges. Phys. Chem. **94**, 1362 1990.

- [35] J. Braun, T. Hauber, H. Többen, P. Zacke, D. Chatterjee, O. Deutschmann, J. Warnatz. *Influence of Physical and Chemical Parameters on the Conversion Rate of a Catalytic Converter: A Numerical Simulation Study*. SAE Technical Paper Series **2000-01-0211**, 2000.
- [36] Ulrich Maas. *Automatische Reduktion von Reaktionsmechanismen zur Simulation reaktiver Strömungen*. Habilitationsschrift, Universität Stuttgart, 1993.
- [37] D. Schmidt. *Modellierung reaktiver Strömungen unter Verwendung automatisch reduzierter Reaktionsmechanismen*. Dissertation, Universität Heidelberg, 1996.
- [38] H. Niemann. *Niedrigdimensionale Modellierung dynamischer Systeme am Beispiel reduzierter Reaktionsmechanismen*. Dissertation, Universität Heidelberg, 2003.
- [39] B. Schramm. *Erstellung reduzierter Reaktionsmechanismen und deren Anwendung bei der Simulation turbulenter Flammen*. Diplomarbeit, Universität Heidelberg, 1999.
- [40] O. Deutschmann, F. Behrendt, J. Warnatz. *Modelling and Simulation of Heterogeneous Oxidation of Methane on a Platinum Foil*. *Catal. Today* **21**, 461 1994.
- [41] O. Deutschmann. *Modellierung von Reaktionen an Oberflächen und deren Kopplung mit chemisch reagierenden Strömungen*. Dissertation, Universität Heidelberg, 1996.
- [42] O. Deutschmann, L. D. Schmidt. *Modelling the Partial Oxidation of Methane on Rhodium in a Short-Contact-Time Reactor*. In *Proc. Combust. Inst.*, Band 27, 2283–2291, Pittsburgh. 1998.
- [43] O. Deutschmann, R. Schmidt, F. Behrendt, J. Warnatz. *Numerical Modelling of Catalytic Ignition*. In *Proc. Combust. Inst.*, Band 26, Pittsburgh. 1996.
- [44] O. Deutschmann, L. D. Schmidt. *Modelling the Partial Oxidation of Methane in a Short-Contact-Time Reactor*. *AIChE J.* **44**, 2465 1998.

Literaturverzeichnis

- [45] D. Chatterjee. *Detaillierte Modellierung von Abgaskatalysatoren*. Dissertation, Universität Heidelberg, 2001.
- [46] R. Kissel-Osterrieder. *Numerische Simulation der Kohlenmonoxid-Oxidation auf Platin -111)-Oberflächen*. Diplomarbeit, Universität Heidelberg, 1997.
- [47] R. Kissel-Osterrieder, F. Behrendt, J. Warnatz, U. Metka, H. R. Volpp, J. Wolfrum. *Experimental and Theoretical Investigation of the CO-Oxidation on Platinum: Bridging the Pressure and Materials Gap*. In Twenty-Eight Symposium (International) on Combustion, Pittsburgh. The Combustion Institute, 2000.
- [48] R. Kissel-Osterrieder. *Detaillierte Modellierung heterogener Katalyse am Beispiel der Oxidation von CO auf Platinoberflächen*. Dissertation, Universität Heidelberg, 2000.
- [49] M. Nau, A. Wölfert, U. Maas, J. Warnatz. *Application of a combined PDF/finite Volume scheme on turbulent methane diffusion flames*. In 8th International Symposium on Transport Phenomena in Combustion, 605–616, San Francisco. Pacific Center of Thermal-Fluids Engineering, 1995.
- [50] M. Nau. *Berechnung turbulenter Diffusionsflammen mit Hilfe eines Verfahrens zur Bestimmung der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion und automatisch reduzierter Reaktionsmechanismen*. Dissertation, Universität Stuttgart, 1997.
- [51] T. G. Hämmerle. *Vergleich statistischer Modelle mit Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen (PDFs) bei der Simulation turbulenter Methan-Luft-Flammen*. Diplomarbeit, Universität Heidelberg, 1997.
- [52] O. Fohrmann. *Berechnung zweidimensionaler turbulenter reaktiver Strömungen mit vorangenen Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen*. Diplomarbeit, Universität Heidelberg, 1998.
- [53] K. Binder (Hrsg.). *Monte Carlo Method in Statistical Physics*. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 1984.
- [54] K. Binder, D.W. Heermann. *Monte Carlo simulation in statistical physics: an introduction*. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 1988.

- [55] J. Honerkamp. *Statistical Physics*. Springer, 2. Ausgabe, 2002.
- [56] I. N. Bronstein, K. A. Semendjajew, G. Musiol, H. Mühlig. *Taschenbuch der Mathematik*. Verlag Harri Deutsch, Frankfurt a. M., 5. Ausgabe, 2001.
- [57] A. Wölfert. *Verwendung von PDF-Methoden zur Modellierung turbulenter reaktiver Strömungen*. Dissertation, Universität Stuttgart, 1997.
- [58] S. B. Pope. *On the relationship between stochastic Lagrangian models of turbulence and second-moment closures*. Phys. Fluids **6**(2), 973–985 1993.
- [59] J. C. Rotta. *Statistische Theorie nichthomogener Turbulenz*. Z. Phys **129**, 547–572 1951.
- [60] R. I. Curl. *Dispersed phase mixing theory and effects in simple reactors*. AIChEJl **9**(2), 175–181 1963.
- [61] S. B. Pope. *An Improved Turbulent Mixing Model*. Combustion Sci. and Techn. **28**, 131–135 1982.
- [62] H. J. Moon, E. Bidaux, R. Borghi. *Micromixing Characteristic Time and Closure Models for Premixed Turbulent Combustion at Moderate Damköhler Numbers*. Combust. Sci. and Tech. **130**, 49–78 1997.
- [63] A. T. Hsu, Y.-L. P. Tsai, M. S. Raju. *Probability Density Function Approach for Compressible Turbulent Reacting Flows*. AIAA Journal **32**(7), 1407–1415 1994.
- [64] A. T. Norris, S. B. Pope. *Turbulent Mixing Model Based on Ordered Pairing*. Combustion and Flame **83**, 27–42 1991.
- [65] A. R. Masri. *A Mixing Model to Improve the PDF Simulation of Turbulent Diffusion Flames*. In Proc. Combust. Inst., Band 26, Pittsburgh. 1996.
- [66] Jayesh, S.B. Pope. *Stochastic model for turbulent frequency*. Cornell University Technical Report, FDA 95-05, 1995.
- [67] P.R. van Slooten, S.B. Pope. *Application of PDF Modeling to Swirling and Nonswirling Turbulent Jets*. Flow, Turbulence and Combustion **62**, 295–333 1999.

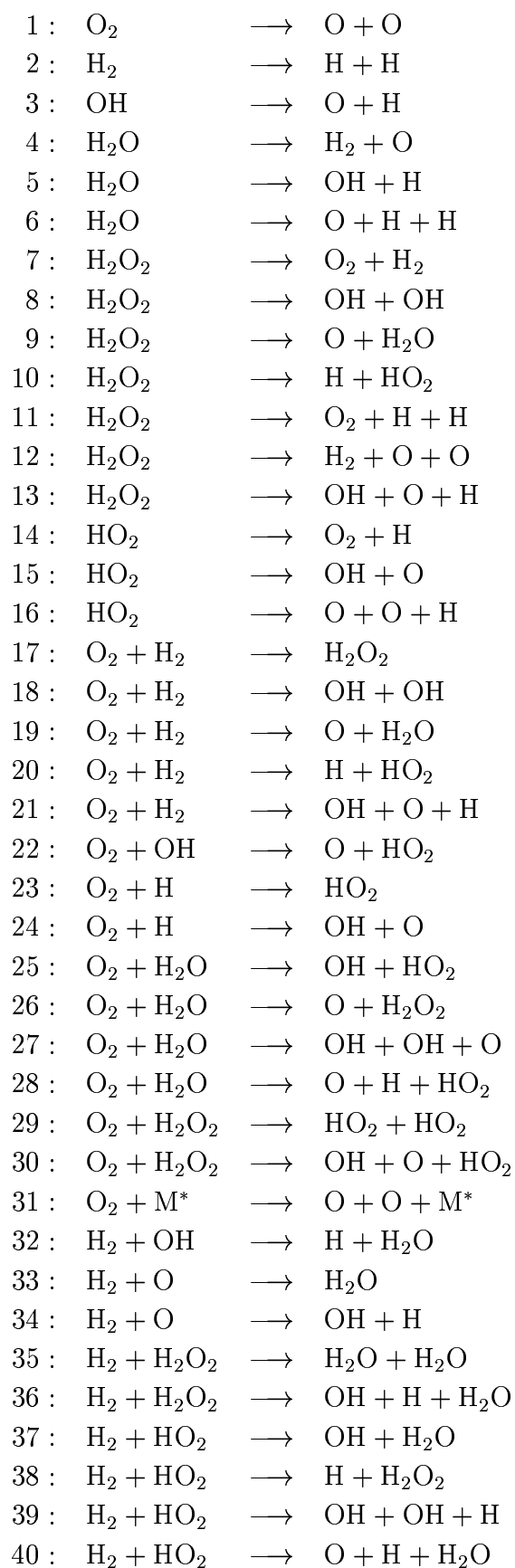
Literaturverzeichnis

- [68] B. Noll. *Numerische Strömungsmechanik*. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 1993.
- [69] W. H. Press et al. *Numerical Recipes in Fortran 77*. Cambridge University Press, New York, 2. Ausgabe, 1992.
- [70] H. Möbus, P. Gerlinger, D. Brüggemann. *Comparison of Eulerian and Lagrangian Monte Carlo PDF Methods for Turbulent Diffusion Flames*. *Combustion and Flame* **124**, 519–534 2001.
- [71] H. Schlitt. *Regelungstechnik*. Vogel Verlag, Würzburg, 2. Ausgabe, 1993.
- [72] H. Kuchling. *Taschenbuch der Physik*. Verlag Harri Deutsch, Frankfurt a.M., 12. Ausgabe, 1989.
- [73] I. Karatzas, S.E. Shreve (Hrsg.). *Brownian Motion and Stochastic Calculus*. Springer Verlag, New York, 2. Ausgabe, 1991.
- [74] O. Deutschmann et al. *DETCHEM Package Ver. 1.4.2*. User Manual, 2001.
- [75] R. Marek, W. Götz. *Numerische Lösung von partiellen Differentialgleichungen mit finiten Differenzen*. Moreno-Verlag, Buchloe, 1995.
- [76] P. Dierckx. *Curve and Surface Fitting with Splines*. Clarendon Press, Oxford, 1993.
- [77] M. H. Hussaini, Bram van Leer, J. Van Rosendale (Hrsg.). *Upwind- and High-Resolution Schemes*. Springer-Verlag, New York, 1997.
- [78] W.S. Cleveland. *Robust Locally Weighted Regression and Smoothing Scatterplots*. *J. Amer. Statist. Assoc.* **74**, 829–836 1979.
- [79] W.S. Cleveland, S.J. Devlin. *Locally Weighted Regression: An Approach to Regression Analysis by Local Fitting*. *J. Amer. Statist. Assoc.* **83**, 596–610 1980.
- [80] R. C. Reid, T. K. Sherwood (Hrsg.). *The Properties of Gases and Liquids*. Mc Graw - Hill, New York, 1966.
- [81] R. C. West (Hrsg.). *CRC Handbook of Chemistry and Physics*. CRC Press, Boca Raton, 1982.

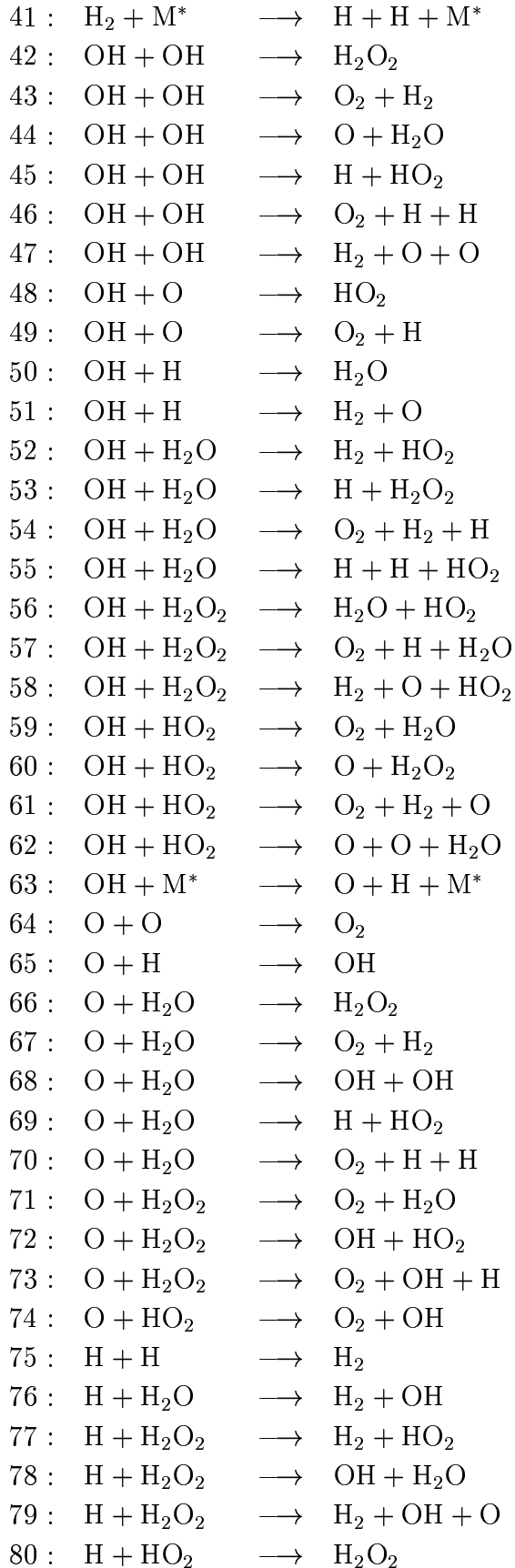
- [82] W. Beitz, K.-H. Küttner (Hrsg.). *Taschenbuch für den Maschinenbau*. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 18. Ausgabe, 1995.
- [83] J. Mantzaras, C. Appel, P. Benz, U. Dogwiler. *Numerical modelling of turbulent catalytically stabilized channel flow combustion*. *Catalysis Today* **59**, 3–17 2000.
- [84] G. Merziger, Th. Wirth. *Repetitorium der höheren Mathematik*. Feldmann Verlag, Hannover, 1991.

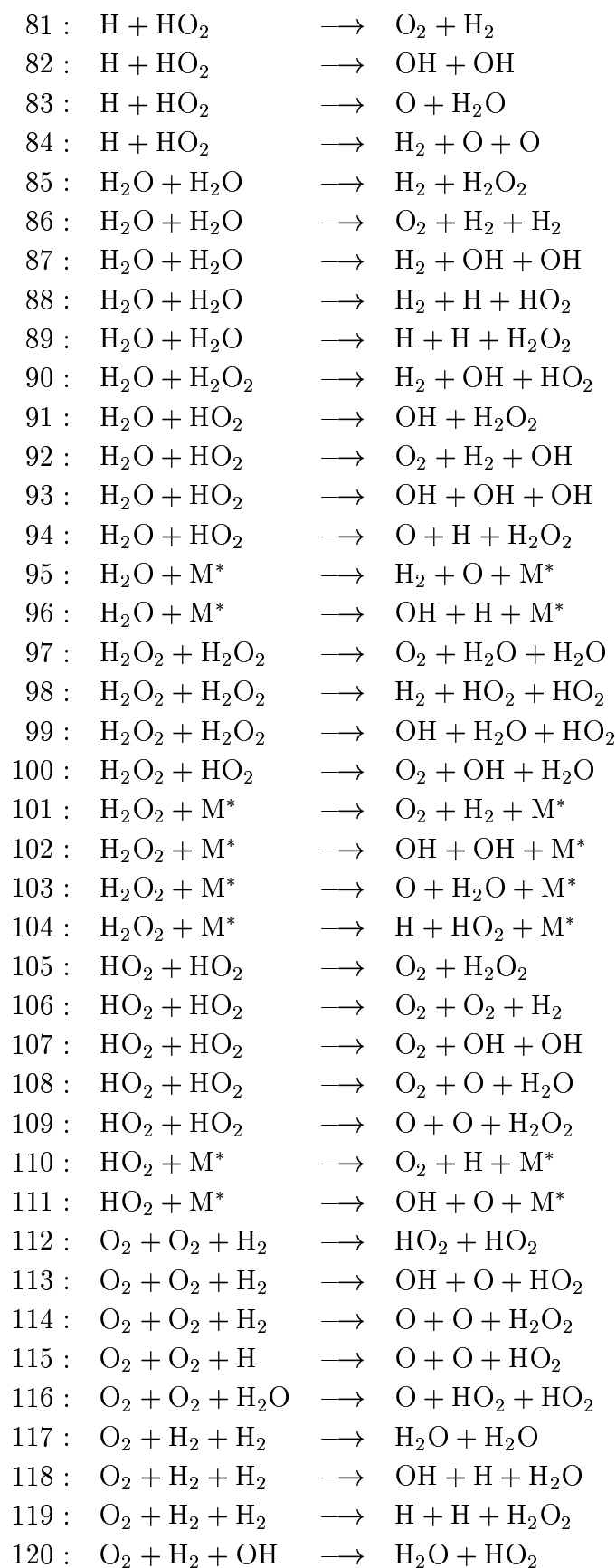
A. Anzahl möglicher Reaktionen mit neun Spezies

Beschränkt auf maximal drei Edukte in jeder Reaktion gibt es mit N chemischen Spezies insgesamt $n_{max} = N + N^2 + N^3$ Möglichkeiten, eine, zwei oder drei Edukte zusammenzustellen. Bei neun Spezies gibt es 819 mögliche Kombinationen. Da die Reihenfolge der Edukte bei den Kombinationen keine Rolle spielt, müssen die mehrfach vorkommenden Zusammenstellungen eliminiert werden; dadurch reduziert sich die Anzahl der Kombinationen auf 219. Gelten für die Produkte die gleichen Einschränkungen, so gibt es auch 219 Produktkombinationen. Nun kann jede Eduktkombination mit jeder Produktkombination zu einer Reaktion verbunden werden. Damit ergeben sich 47961 mögliche Reaktionen. Das hier betrachtete System besteht aus den Spezies O_2 , H_2 , OH , O , H , H_2O , H_2O_2 , HO_2 und M^* . Mit diesen Spezies sind nur bei 975 der 47961 möglichen Reaktionen die Atombilanzen erfüllt. Davon sind 219 identische Abbildungen, d.h., es wird eine Kombination von Edukten mit derselben Auswahl an Produkten zusammengestellt, was bedeutet, dass keine Reaktion stattfindet. Von den verbleibenden 756 Reaktionen müssen zum Schluss noch die aussortiert werden, bei denen einzelne Spezies auf der linken und auf der rechten Seite der Reaktion vorkommen, da dies nur für den Stoßpartner M^* , der einzigen inerten Spezies, zulässig ist. Es verbleiben 276 mögliche Reaktionen:

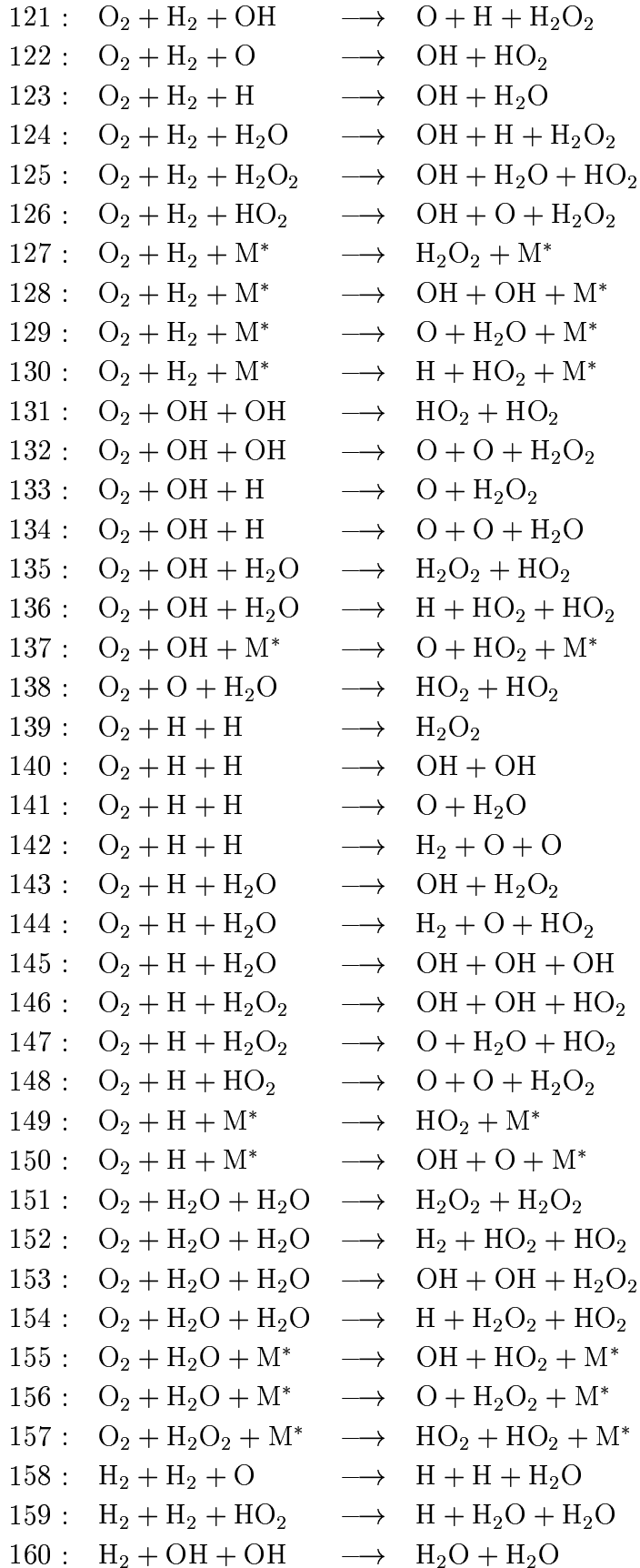


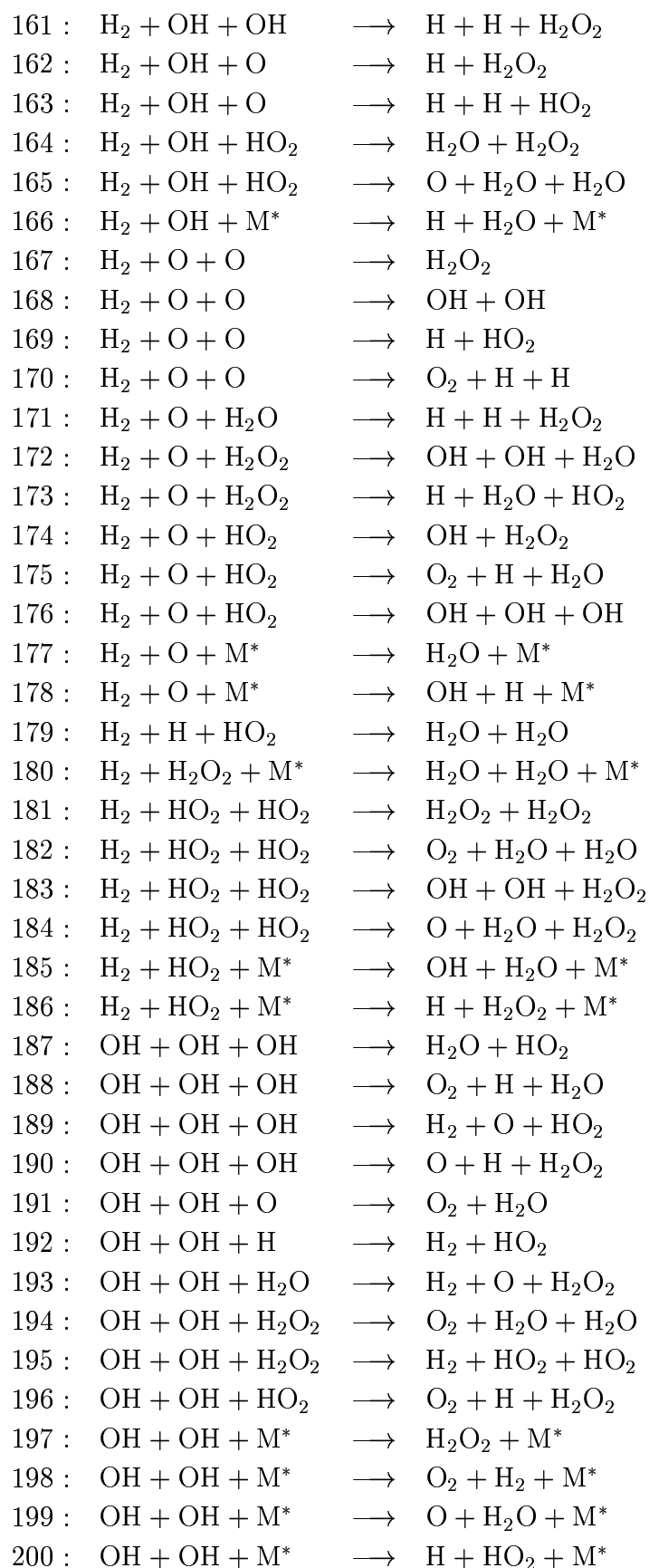
A. Anzahl möglicher Reaktionen mit neun Spezies



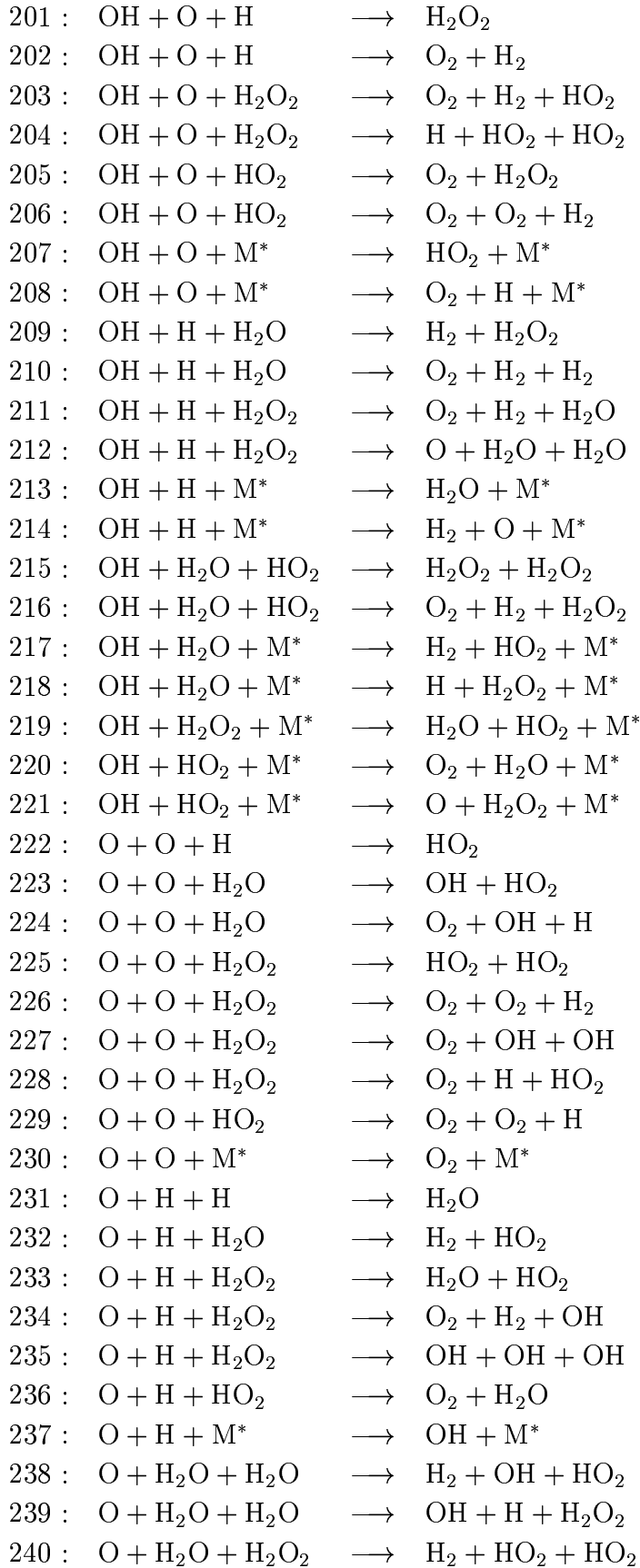


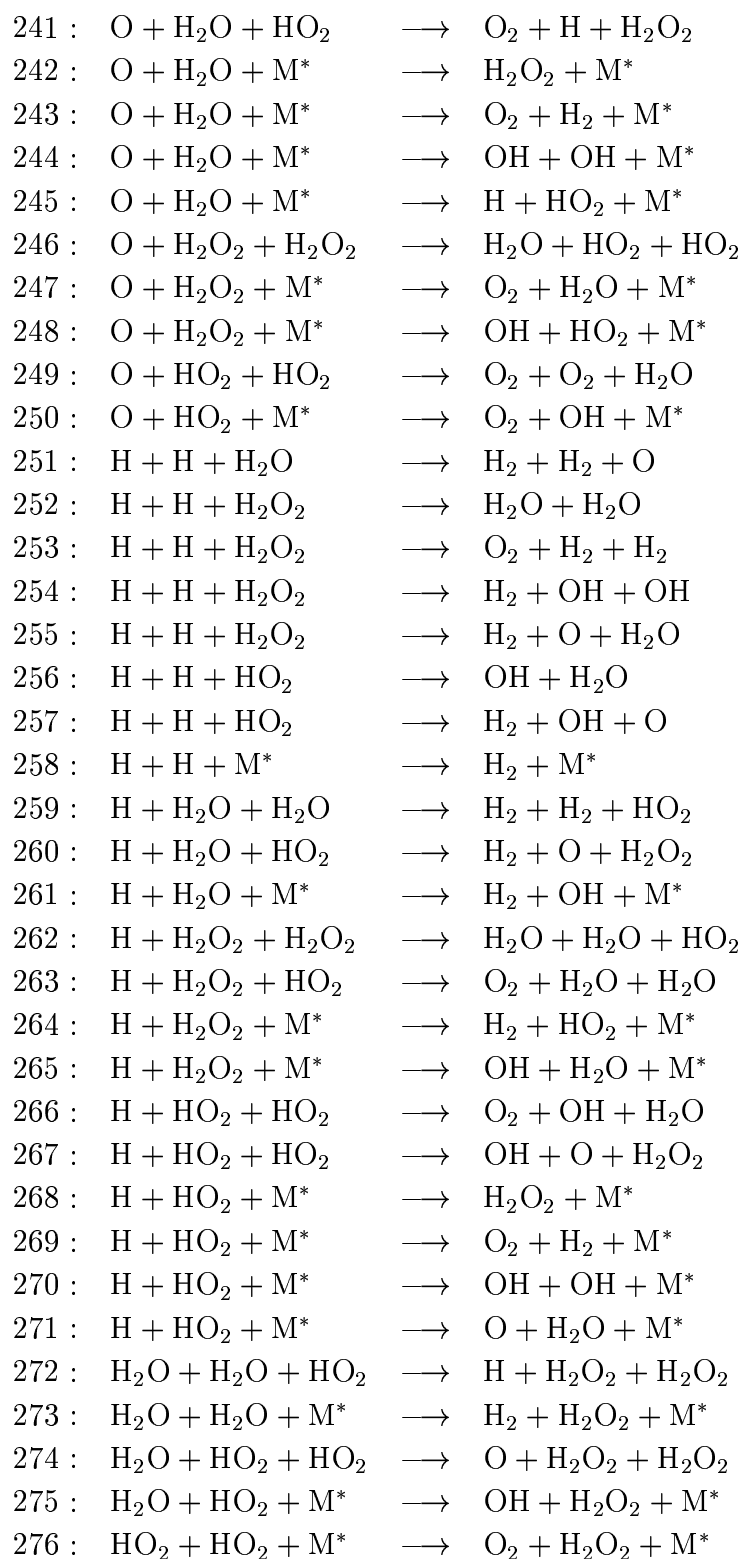
A. Anzahl möglicher Reaktionen mit neun Spezies





A. Anzahl möglicher Reaktionen mit neun Spezies





B. Koeffizientenvergleich

Die für das GLM benötigten Koeffizienten G_{ij} und C_0 können durch einen Koeffizientenvergleich mit einem Reynoldsstressmodell, hier dem MCL-Modell, bestimmt werden.

Die Transportgleichung nach dem GLM lautet

$$\bar{\rho} \frac{D}{Dt} (\widetilde{u_i'' u_j''}) + \frac{\partial \bar{\rho} \widetilde{u_i'' u_j'' u_k''}}{\partial x_k} = P_{ij} + G_{il} \bar{\rho} \widetilde{u_l'' u_j''} + G_{jl} \bar{\rho} \widetilde{u_l'' u_i''} + \mu \frac{\partial^2 \widetilde{u_i'' u_j''}}{\partial x_k^2} + C_0 \bar{\rho} \epsilon \delta_{ij} \quad .$$

Für das MCL-Modell lautet sie

$$\bar{\rho} \frac{D}{Dt} (\widetilde{u_i'' u_j''}) = P_{ij} + d_{ij} + \phi_{ij}^* - \epsilon_{ij} \quad .$$

Die Terme $\bar{\rho} \frac{D}{Dt} (\widetilde{u_i'' u_j''})$ und P_{ij} sind bei beiden Gleichungen identisch. Der Term d_{ij} beim MCL-Modell stellt die Diffusion der Geschwindigkeitsfluktuationen dar. Er wird modelliert als

$$d_{ij} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\mu \frac{\partial \widetilde{u_i'' u_j''}}{\partial x_k} + 0,22 \frac{\bar{\rho} k}{\epsilon} \left[\widetilde{u_k'' u_l''} \frac{\partial \widetilde{u_i'' u_j''}}{\partial x_l} \right] \right) + \frac{d_{kk}^p \bar{\rho} \widetilde{u_i'' u_j''}}{2k} \quad .$$

Da der Term $\frac{\partial}{\partial x_k} \left(\mu \frac{\partial \widetilde{u_i'' u_j''}}{\partial x_k} + 0,22 \frac{\bar{\rho} k}{\epsilon} \left[\widetilde{u_k'' u_l''} \frac{\partial \widetilde{u_i'' u_j''}}{\partial x_l} \right] \right)$ einer Modellierung der exakten Diffusionsterme entspricht, die im GLM auch in ihrer vollständigen Form enthalten sind, muss dieser Teil für den Koeffizientenvergleich nicht berücksichtigt werden. Der letzte Teil von obiger Gleichung stammt von einer alternativen Zerlegung des Pressure-Strain-Terms und liefert im Koeffizientenvergleich einen

Beitrag zu G_{ij} mit

$$\begin{aligned}
\frac{d_{kk}^p \bar{\rho} \widetilde{u_i'' u_j''}}{2k} &= \frac{d_{kk}^p \bar{\rho}}{2k} \left(\frac{1}{2} \widetilde{u_i'' u_j''} + \frac{1}{2} \widetilde{u_i'' u_j''} \right) \\
&= \frac{d_{kk}^p \bar{\rho}}{2k} \left(\frac{1}{2} \widetilde{u_i'' u_l''} \delta_{jl} + \frac{1}{2} \widetilde{u_l'' u_j''} \delta_{il} \right) \\
&= \frac{d_{kk}^p \bar{\rho}}{4k} \widetilde{u_i'' u_l''} \delta_{jl} + \frac{d_{kk}^p \bar{\rho}}{4k} \widetilde{u_j'' u_l''} \delta_{il} \quad .
\end{aligned}$$

Durch Vergleich mit dem Term des GLM, der bei $\bar{\rho} \widetilde{u_i'' u_l''}$ steht, ergibt sich, daß der Beitrag von d_{ij} zu G_{jl} dargestellt werden kann durch

$$G_{jl}^{d_{ij}} = \frac{d_{kk}^p}{4k} \delta_{jl} \quad .$$

Durch Einsetzen der Indizes j und l erhält man die Beiträge für alle Komponenten von G_{ij} .

ϕ_{ij}^* stellt den Druckkorrelationsterm dar und ist im MCL-Modell aufgeteilt in vier Komponenten: $\phi_{ij}^* = \phi_{ij1}^* + \phi_{ij2}^* + \phi_{ij1}^{\text{inh}} + \phi_{ij2}^{\text{inh}}$

Der erste Term ϕ_{ij1}^* gibt die isotropisierende Wirkung der Druckfluktuationen wieder. Er wird beschrieben durch

$$\phi_{ij1}^* = -c_1 \bar{\rho} \epsilon_h \left[a_{ij} + c_1' (a_{ik} a_{kj} - \frac{1}{3} A_2 \delta_{ij}) \right] - \bar{\rho} \epsilon_h A^{\frac{1}{2}} a_{ij} \quad .$$

Mit

$$\begin{aligned}
a_{ij} &= \frac{\widetilde{u_i'' u_j''}}{k} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \\
&= \frac{1}{2} \frac{\widetilde{u_i'' u_j''}}{k} + \frac{1}{2} \frac{\widetilde{u_i'' u_j''}}{k} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \\
&= \frac{1}{2} \widetilde{u_i'' u_l''} \delta_{jl} \frac{1}{k} + \frac{1}{2} \widetilde{u_j'' u_l''} \delta_{il} \frac{1}{k} - \frac{2}{3} \delta_{ij}
\end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned}
a_{il} a_{lj} &= \left(\frac{\widetilde{u_i'' u_l''}}{k} - \frac{2}{3} \delta_{il} \right) \left(\frac{\widetilde{u_j'' u_l''}}{k} - \frac{2}{3} \delta_{jl} \right) \\
&= \frac{1}{2} \widetilde{u_i'' u_l''} \frac{\widetilde{u_j'' u_l''}}{k^2} + \frac{1}{2} \widetilde{u_j'' u_l''} \frac{\widetilde{u_i'' u_l''}}{k^2} - \frac{2}{3} \widetilde{u_i'' u_l''} \frac{1}{k} \delta_{lj} - \frac{2}{3} \widetilde{u_j'' u_l''} \frac{1}{k} \delta_{il} + \frac{4}{9} \delta_{ij} \\
&= \widetilde{u_i'' u_l''} \left[\frac{1}{2} \frac{\widetilde{u_j'' u_l''}}{k^2} - \frac{2}{3} \frac{1}{k} \delta_{lj} \right] + \widetilde{u_j'' u_l''} \left[\frac{1}{2} \frac{\widetilde{u_i'' u_l''}}{k^2} - \frac{2}{3} \frac{1}{k} \delta_{il} \right] + \frac{4}{9} \delta_{ij}
\end{aligned}$$

B. Koeffizientenvergleich

läßt sich ϕ_{ij1}^* umformen zu

$$\begin{aligned}\phi_{ij1}^* &= -(c_1 + A^{\frac{1}{2}})\bar{\rho}\epsilon_h \left(\frac{1}{2} \widetilde{u_i'' u_l''} \delta_{jl} \frac{1}{k} + \frac{1}{2} \widetilde{u_j'' u_l''} \delta_{il} \frac{1}{k} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \right) \\ &\quad - c_1 c_1' \bar{\rho} \epsilon_h \left[\widetilde{u_i'' u_l''} \left(\frac{1}{2} \frac{\widetilde{u_j'' u_l''}}{k^2} - \frac{2}{3} \frac{1}{k} \delta_{lj} \right) + \widetilde{u_j'' u_l''} \left(\frac{1}{2} \frac{\widetilde{u_i'' u_l''}}{k^2} - \frac{2}{3} \frac{1}{k} \delta_{il} \right) \right. \\ &\quad \left. + \left(\frac{4}{9} - \frac{1}{3} A_2 \right) \delta_{ij} \right] .\end{aligned}$$

Der Beitrag von ϕ_{ij1}^* zu G_{jl} ist damit

$$G_{jl}^{\phi_{ij1}^*} = -(c_1 + A^{\frac{1}{2}})\epsilon_h \frac{1}{2} \frac{1}{k} - c_1 c_1' \epsilon_h \left(\frac{1}{2} \frac{\widetilde{u_j'' u_l''}}{k^2} - \frac{2}{3} \frac{1}{k} \delta_{lj} \right) .$$

Analog zum Vorgehen bei G_{jl} ergibt sich für den Beitrag von ϕ_{ij1}^* zu C_0 durch Vergleich mit $\bar{\rho}\epsilon\delta_{ij}$

$$C_0^{\phi_{ij1}^*} = \frac{2}{3} (c_1 + A^{\frac{1}{2}}) \frac{\epsilon_h}{\epsilon} - c_1 c_1' \left(\frac{4}{9} - \frac{1}{3} A_2 \right) \frac{\epsilon_h}{\epsilon} .$$

ϕ_{ij2}^* gibt die Produktion der turbulenten kinetischen Energie und deren Verteilung auf die verschiedenen Geschwindigkeitskomponenten durch die Druckfluktuationen wieder. Dieser Term ist sehr komplex. Für die weitere Behandlung wird er deshalb in kleinere Einheiten aufgeteilt, die auf den nächsten Seiten einzeln behandelt werden:

$$\begin{aligned}
\phi_{ij2}^* = & \underbrace{-0,6 \left(P_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} P_{kk} \right) + 0,3 a_{ij} P_{kk}}_{\text{Term 1}} \\
& - \underbrace{\frac{0,2}{k} \bar{\rho} \left[\widetilde{u''_k u''_j u''_l u''_i} \left(\frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_l} + \frac{\partial \tilde{u}_l}{\partial x_k} \right) - \widetilde{u''_l u''_k} \left(\widetilde{u''_i u''_k} \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_l} + \widetilde{u''_j u''_k} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_l} \right) \right]}_{\text{Term 2}} \\
& - \underbrace{c_2 [A_2 (P_{ij} - D_{ij}) + 3 a_{mi} a_{nj} (P_{mn} - D_{mn})]}_{\text{Term 3}} \\
& + \underbrace{c'_2 \left(\frac{7}{15} - \frac{A_2}{4} \right) \left(P_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} P_{kk} \right)}_{\text{Term 4}} \\
& + \underbrace{0,1 c'_2 \left[a_{ij} - \frac{1}{2} \left(a_{ik} a_{kj} - \frac{1}{3} \delta_{ij} A_2 \right) \right] P_{kk} - 0,05 c'_2 a_{ij} a_{lk} P_{kl}}_{\text{Term 5}} \\
& + \underbrace{\frac{0,1}{k} c'_2 \left[\left(\widetilde{u''_i u''_m} P_{mj} + \widetilde{u''_j u''_m} P_{mi} \right) - \frac{2}{3} \delta_{ij} \widetilde{u''_l u''_m} P_{ml} \right]}_{\text{Term 6}} \\
& + \underbrace{\frac{0,1}{k^2} c'_2 \left[\widetilde{u''_l u''_i u''_k u''_j} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \widetilde{u''_l u''_m} \widetilde{u''_k u''_m} \right] \left[6 D_{lk} + 13 k \bar{\rho} \left(\frac{\partial \tilde{u}_l}{\partial x_k} + \frac{\partial \tilde{u}_l}{\partial x_k} \right) \right]}_{\text{Term 7}} \\
& + \underbrace{\frac{0,2}{k^2} c'_2 \widetilde{u''_l u''_i u''_k u''_j} (D_{lk} - P_{lk})}_{\text{Term 8}}
\end{aligned}$$

Dabei ist $P_{ij} = -\bar{\rho} \left(\widetilde{u''_i u''_k} \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_k} + \widetilde{u''_j u''_k} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_k} \right)$ die Produktionsgeschwindigkeit für $\widetilde{u''_i u''_j}$.
Die einzelnen Terme liefern folgende Beiträge zu G_{ij} und C_0 :

B. Koeffizientenvergleich

$$\begin{aligned}
\text{Term 1} &= -0,6 \left(P_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} P_{kk} \right) + 0,3 a_{ij} P_{kk} \\
&= -0,6 \left(-\widetilde{\rho u_i'' u_l''} \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_l} - \widetilde{\rho u_j'' u_l''} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_l} - \frac{1}{3} \delta_{ij} P_{kk} \right) \\
&\quad + 0,3 \left(\frac{1}{2} \widetilde{\rho u_i'' u_l''} \frac{1}{k} \delta_{jl} + \frac{1}{2} \widetilde{\rho u_j'' u_l''} \frac{1}{k} \delta_{il} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \right) P_{kk} \\
&= \widetilde{\rho u_i'' u_l''} \left(0,6 \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_l} + 0,15 \frac{1}{\rho k} \delta_{jl} P_{kk} \right) + \widetilde{\rho u_j'' u_l''} \left(0,6 \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_l} + 0,15 \frac{1}{\rho k} \delta_{il} P_{kk} \right)
\end{aligned}$$

$$G_{jl}^{\phi_{ij2}^*, \text{Term 1}} = 0,6 \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_l} + 0,15 \frac{1}{\rho k} \delta_{jl} P_{kk}$$

$$C_0^{\phi_{ij2}^*, \text{Term 1}} = 0$$

$$\begin{aligned}
\text{Term 2} &= -\bar{\rho} \frac{0,2}{k} \left[\widetilde{u_k'' u_j'' u_l'' u_i''} \left(\frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_l} + \frac{\partial \tilde{u}_l}{\partial x_k} \right) - \widetilde{u_l'' u_k''} \left(\widetilde{u_i'' u_k''} \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_l} + \widetilde{u_j'' u_k''} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_l} \right) \right] \\
&= -\bar{\rho} \frac{0,2}{k} \left[\widetilde{u_i'' u_l''} \left(\frac{1}{2} \widetilde{u_k'' u_j''} \left(\frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_l} + \frac{\partial \tilde{u}_l}{\partial x_k} \right) - \widetilde{u_m'' u_l''} \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_m} \right) \right. \\
&\quad \left. + \widetilde{u_j'' u_l''} \left(\frac{1}{2} \widetilde{u_i'' u_k''} \left(\frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_l} + \frac{\partial \tilde{u}_l}{\partial x_k} \right) - \widetilde{u_m'' u_l''} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_m} \right) \right]
\end{aligned}$$

$$G_{jl}^{\phi_{ij2}^*, \text{Term 2}} = -\frac{0,2}{k} \left[\frac{1}{2} \widetilde{u_k'' u_j''} \left(\frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_l} + \frac{\partial \tilde{u}_l}{\partial x_k} \right) - \widetilde{u_m'' u_l''} \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_m} \right]$$

$$C_0^{\phi_{ij2}^*, \text{Term 2}} = 0$$

$$\begin{aligned}
\text{Term 3} &= -c_2 [A_2(P_{ij} - D_{ij}) + 3a_{mi}a_{nj}(P_{mn} - D_{mn})] \\
&= -c_2 \left[A_2(P_{ij} - D_{ij}) + 3 \left(\frac{1}{2} \widetilde{u_m'' u_i''} \frac{\widetilde{u_n'' u_j''}}{k^2} + \frac{1}{2} \widetilde{u_n'' u_j''} \frac{\widetilde{u_m'' u_i''}}{k^2} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - \frac{2}{3} \frac{\widetilde{u_m'' u_i''}}{k} \delta_{nj} - \frac{2}{3} \frac{\widetilde{u_n'' u_j''}}{k} \delta_{mi} + \frac{4}{9} \delta_{mi} \delta_{nj} \right) (P_{mn} - D_{mn}) \right]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\text{Term 3} &= -c_2 \left[\left(A_2 + \frac{4}{3} \right) (P_{ij} - D_{ij}) \right. \\
&\quad + 3 \left(\widetilde{u_i'' u_l''} \left(\frac{1}{2} \frac{\widetilde{u_n'' u_j''}}{k^2} - \frac{2}{3} \frac{1}{k} \delta_{nj} \right) (P_{ln} - D_{ln}) \right. \\
&\quad \left. \left. + \widetilde{u_j'' u_l''} \left(\frac{1}{2} \frac{\widetilde{u_m'' u_i''}}{k^2} - \frac{2}{3} \frac{1}{k} \delta_{mi} \right) (P_{ml} - D_{ml}) \right) \right]
\end{aligned}$$

$$\text{Mit: } D_{ij} = -\bar{\rho} \left(\widetilde{u_i'' u_k''} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_j} + \widetilde{u_j'' u_k''} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_i} \right) :$$

$$\begin{aligned} \text{Term 3} &= -c_2 \left[\left(A_2 + \frac{4}{3} \right) \left(\bar{\rho} \widetilde{u_i'' u_l''} \left(\frac{\partial \tilde{u}_l}{\partial x_j} - \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_l} \right) + \bar{\rho} \widetilde{u_j'' u_l''} \left(\frac{\partial \tilde{u}_l}{\partial x_i} - \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_l} \right) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + 3 \left(\widetilde{u_i'' u_l''} \left(\frac{1}{2} \frac{u_n'' u_j''}{k^2} - \frac{2}{3} \frac{1}{k} \delta_{nj} \right) (P_{ln} - D_{ln}) \right. \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \left. + \widetilde{u_j'' u_l''} \left(\frac{1}{2} \frac{u_m'' u_i''}{k^2} - \frac{2}{3} \frac{1}{k} \delta_{mi} \right) (P_{ml} - D_{ml}) \right) \right) \right] \\ &= \widetilde{u_i'' u_l''} \left[-c_2 \left(\bar{\rho} \left(A_2 + \frac{4}{3} \right) \left(\frac{\partial \tilde{u}_l}{\partial x_j} - \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_l} \right) + 3 \left(\frac{1}{2} \frac{u_n'' u_j''}{k^2} - \frac{2}{3} \frac{1}{k} \delta_{nj} \right) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. (P_{ln} - D_{ln}) \right) \right] \\ &\quad + \widetilde{u_j'' u_l''} \left[-c_2 \left(\bar{\rho} \left(A_2 + \frac{4}{3} \right) \left(\frac{\partial \tilde{u}_l}{\partial x_i} - \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_l} \right) + 3 \left(\frac{1}{2} \frac{u_m'' u_i''}{k^2} - \frac{2}{3} \frac{1}{k} \delta_{mi} \right) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. (P_{ml} - D_{ml}) \right) \right] \end{aligned}$$

$$G_{jl}^{\phi_{ij2}, \text{Term 3}} = -c_2 \left[\left(A_2 + \frac{4}{3} \right) \left(\frac{\partial \tilde{u}_l}{\partial x_j} - \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_l} \right) + 3 \left(\frac{1}{2} \frac{u_n'' u_j''}{k^2} - \frac{2}{3} \frac{1}{k} \delta_{nj} \right) \frac{(P_{ln} - D_{ln})}{\bar{\rho}} \right]$$

$$C_0^{\phi_{ij2}, \text{Term 3}} = 0$$

$$\begin{aligned} \text{Term 4} &= c_2' \left(\frac{7}{15} - \frac{A_2}{4} \right) \left(P_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} P_{kk} \right) \\ &= c_2' \left(\frac{7}{15} - \frac{A_2}{4} \right) \left(-\bar{\rho} \widetilde{u_i'' u_l''} \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_l} - \bar{\rho} \widetilde{u_j'' u_l''} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_l} - \frac{1}{3} \delta_{ij} P_{kk} \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{Term 4} &= \bar{\rho} \widetilde{u_i'' u_l''} \left[c_2' \left(\frac{7}{15} - \frac{A_2}{4} \right) \left(-\frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_l} \right) \right] \\ &\quad + \bar{\rho} \widetilde{u_j'' u_l''} \left[c_2' \left(\frac{7}{15} - \frac{A_2}{4} \right) \left(-\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_l} \right) \right] \\ &\quad + \delta_{ij} \left(-\frac{1}{3} P_{kk} \right) c_2' \left(\frac{7}{15} - \frac{A_2}{4} \right) \end{aligned}$$

$$G_{jl}^{\phi_{ij2}, \text{Term 4}} = c_2' \left(\frac{7}{15} - \frac{A_2}{4} \right) \left(-\frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_l} \right)$$

$$C_0^{\phi_{ij2}, \text{Term 4}} = -\frac{1}{3} P_{kk} c_2' \left(\frac{7}{15} - \frac{A_2}{4} \right) \frac{1}{\bar{\rho} \epsilon}$$

B. Koeffizientenvergleich

$$\text{Term 5} = c'_2 \left[0,1 \left[a_{ij} - \frac{1}{2} \left(a_{ik} a_{kj} - \frac{1}{3} \delta_{ij} A_2 \right) \right] P_{kk} - 0,05 a_{ij} a_{lk} P_{kk} \right]$$

$$\begin{aligned} \text{Mit: } a_{lk} P_{kl} &= \left(\frac{\widetilde{u_l'' u_k''}}{k} - \frac{2}{3} \delta_{lk} \right) P_{kl} \\ &= \frac{\widetilde{u_l'' u_k''}}{k} P_{kl} - \frac{2}{3} P_{kk} \quad : \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{Term 5} &= c'_2 \left[0,1 \left(\frac{4}{3} a_{ij} - \frac{1}{2} \left(a_{ik} a_{kj} - \frac{1}{3} \delta_{ij} A_2 \right) \right) P_{kk} - 0,05 a_{ij} \frac{\widetilde{u_l'' u_k''}}{k} P_{kl} \right] \\ &= 0,1 c'_2 \left[\left(\frac{4}{3} a_{ij} - \frac{1}{2} \left(a_{ik} a_{kj} - \frac{1}{3} \delta_{ij} A_2 \right) \right) P_{kk} - \frac{1}{2} a_{ij} \frac{\widetilde{u_m'' u_n''}}{k} P_{nm} \right] \\ &= 0,1 c'_2 \left[\left(\frac{2}{3} \frac{\widetilde{u_i'' u_l''}}{k} \delta_{jl} + \frac{2}{3} \frac{\widetilde{u_j'' u_l''}}{k} \delta_{il} - \frac{8}{9} \delta_{ij} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \frac{1}{2} \left(\widetilde{u_i'' u_l''} \left(\frac{1}{2} \frac{\widetilde{u_j'' u_l''}}{k^2} - \frac{2}{3} \frac{1}{k} \delta_{lj} \right) + \widetilde{u_i'' u_l''} \left(\frac{1}{2} \frac{\widetilde{u_j'' u_l''}}{k^2} - \frac{2}{3} \frac{1}{k} \delta_{lj} \right) \right. \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{4}{9} \delta_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} A_2 \right) \right) P_{kk} \\ &\quad \left. - \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} \widetilde{u_i'' u_l''} \frac{1}{k} \delta_{jl} + \frac{1}{2} \widetilde{u_j'' u_l''} \frac{1}{k} \delta_{il} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \right) \frac{\widetilde{u_m'' u_n''}}{k} P_{nm} \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{Term 5} &= \widetilde{u_i'' u_l''} 0,1 c'_2 \left[\left(\frac{1}{k} \delta_{jl} - \frac{1}{4} \frac{\widetilde{u_j'' u_l''}}{k^2} \right) P_{kk} - \frac{1}{4} \frac{\widetilde{u_m'' u_n''}}{k^2} P_{nm} \delta_{jl} \right] \\ &\quad + \widetilde{u_j'' u_l''} 0,1 c'_2 \left[\left(\frac{1}{k} \delta_{il} - \frac{1}{4} \frac{\widetilde{u_i'' u_l''}}{k^2} \right) P_{kk} - \frac{1}{4} \frac{\widetilde{u_m'' u_n''}}{k^2} P_{nm} \delta_{il} \right] \\ &\quad + \delta_{ij} 0,1 c'_2 \left[\left(-\frac{10}{9} + \frac{1}{6} A_2 \right) P_{kk} + \frac{1}{3} \frac{\widetilde{u_m'' u_n''}}{k} P_{nm} \right] \end{aligned}$$

$$G_{jl}^{\phi_{ij2}^*, \text{Term 5}} = \frac{0,1 c'_2}{\bar{\rho}} \left[\left(\frac{1}{k} \delta_{jl} - \frac{1}{4} \frac{\widetilde{u_j'' u_l''}}{k^2} \right) P_{kk} - \frac{1}{4} \frac{\widetilde{u_m'' u_n''}}{k^2} P_{nm} \delta_{jl} \right]$$

$$C_0^{\phi_{ij2}^*, \text{Term 5}} = \frac{0,1 c'_2}{\bar{\rho}} \left[\left(-\frac{10}{9} + \frac{1}{6} A_2 \right) P_{kk} + \frac{1}{3} \frac{\widetilde{u_m'' u_n''}}{k} P_{nm} \right] \frac{1}{\epsilon}$$

$$\begin{aligned}
\text{Term 6} &= \frac{0,1}{k} c'_2 \left[\widetilde{(u''_i u''_l P_{lj} + u''_j u''_l P_{li})} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \widetilde{u''_m u''_n P_{nm}} \right] \\
&= \widetilde{u''_i u''_l} \left(\frac{0,1}{k} c'_2 P_{lj} \right) + \widetilde{u''_j u''_l} \left(\frac{0,1}{k} c'_2 P_{li} \right) + \delta_{ij} \left(-\frac{2}{3} \widetilde{u''_m u''_n P_{nm}} \right) \left(\frac{0,1}{k} c'_2 \right)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
G_{jl}^{\phi_{ij2}^*, \text{Term 6}} &= \frac{0,1}{\bar{\rho} k} c'_2 P_{lj} \\
C_0^{\phi_{ij2}^*, \text{Term 6}} &= -\frac{2}{3} \widetilde{u''_m u''_n P_{nm}} \frac{1}{\bar{\rho} \epsilon} \frac{0,1}{k} c'_2
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\text{Term 7} &= \frac{0,1}{k^2} c'_2 \left(\widetilde{u''_n u''_i u''_o u''_j} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \widetilde{u''_n u''_m u''_o u''_m} \right) \\
&\quad \cdot \left[6D_{no} + 13\bar{\rho} k \left(\frac{\partial \tilde{u}_n}{\partial x_o} + \frac{\partial \tilde{u}_o}{\partial x_n} \right) \right] \\
&= \frac{0,1}{k^2} c'_2 \left[\frac{1}{2} \widetilde{u''_n u''_i u''_o u''_j} \left(6D_{no} + 13\bar{\rho} k \left(\frac{\partial \tilde{u}_n}{\partial x_o} + \frac{\partial \tilde{u}_o}{\partial x_n} \right) \right) \right. \\
&\quad \left. + \frac{1}{2} \widetilde{u''_o u''_j u''_n u''_i} \left(6D_{no} + 13\bar{\rho} k \left(\frac{\partial \tilde{u}_n}{\partial x_o} + \frac{\partial \tilde{u}_o}{\partial x_n} \right) \right) \right. \\
&\quad \left. - \frac{1}{3} \delta_{ij} \widetilde{u''_n u''_m u''_o u''_m} \left(6D_{no} + 13\bar{\rho} k \left(\frac{\partial \tilde{u}_n}{\partial x_o} + \frac{\partial \tilde{u}_o}{\partial x_n} \right) \right) \right]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\text{Term 7} &= \widetilde{u''_l u''_i} \left[\frac{0,1}{k^2} c'_2 \frac{1}{2} \widetilde{u''_o u''_j} \left(6D_{lo} + 13\bar{\rho} k \left(\frac{\partial \tilde{u}_l}{\partial x_o} + \frac{\partial \tilde{u}_o}{\partial x_l} \right) \right) \right] \\
&\quad + \widetilde{u''_l u''_j} \left[\frac{0,1}{k^2} c'_2 \frac{1}{2} \widetilde{u''_n u''_i} \left(6D_{nl} + 13\bar{\rho} k \left(\frac{\partial \tilde{u}_n}{\partial x_l} + \frac{\partial \tilde{u}_l}{\partial x_n} \right) \right) \right] \\
&\quad - \delta_{ij} \frac{1}{3} \frac{0,1}{k^2} c'_2 \left[6D_{no} + 13\bar{\rho} k \left(\frac{\partial \tilde{u}_n}{\partial x_o} + \frac{\partial \tilde{u}_o}{\partial x_n} \right) \right]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
G_{jl}^{\phi_{ij2}^*, \text{Term 7}} &= \frac{0,1}{k^2} c'_2 \frac{1}{2} \widetilde{u''_o u''_j} \left(6 \frac{D_{lo}}{\bar{\rho}} + 13k \left(\frac{\partial \tilde{u}_l}{\partial x_o} + \frac{\partial \tilde{u}_o}{\partial x_l} \right) \right) \\
C_0^{\phi_{ij2}^*, \text{Term 7}} &= -\frac{1}{3} \frac{0,1}{k^2} c'_2 \left[6 \frac{D_{no}}{\bar{\rho}} + 13k \left(\frac{\partial \tilde{u}_n}{\partial x_o} + \frac{\partial \tilde{u}_o}{\partial x_n} \right) \right] \frac{1}{\epsilon}
\end{aligned}$$

B. Koeffizientenvergleich

$$\begin{aligned}
\text{Term 8} &= \frac{0,2}{k^2} c'_2 \widetilde{u''_l u''_i u''_k u''_j} (D_{lk} - P_{lk}) \\
&= \frac{0,2}{k^2} c'_2 \left[\frac{1}{2} \widetilde{u''_m u''_i u''_n u''_j} (D_{mn} - P_{mn}) + \frac{1}{2} \widetilde{u''_m u''_i u''_n u''_j} (D_{mn} - P_{mn}) \right] \\
&= \widetilde{u''_l u''_i} \frac{0,2}{k^2} c'_2 \frac{1}{2} \widetilde{u''_n u''_j} (D_{ln} - P_{ln}) + \widetilde{u''_l u''_j} \frac{0,2}{k^2} c'_2 \frac{1}{2} \widetilde{u''_m u''_i} (D_{ml} - P_{ml}) \\
G_{jl}^{\phi_{ij2}, \text{Term 8}} &= \frac{0,1}{k^2} c'_2 \widetilde{u''_n u''_j} \frac{(D_{ln} - P_{ln})}{\bar{\rho}} \\
C_0^{\phi_{ij2}, \text{Term 8}} &= 0
\end{aligned}$$

ϕ_{ij1}^{inh} beschreibt den Einfluß von Wänden auf die Reynoldsspannungen durch Umverteilungsprozesse. Von diesem Term gehen folgende Beiträge ein:

$$\begin{aligned}
\phi_{ij1}^{\text{inh}} &= f_{w1} \frac{\bar{\rho} \epsilon}{k} \left(\widetilde{u''_l u''_k d_l^A d_k^A} \delta_{ij} - \frac{3}{2} \widetilde{u''_i u''_k d_j^A d_k^A} - \frac{3}{2} \widetilde{u''_j u''_k d_i^A d_k^A} \right) \\
&\quad + f_{w2} \frac{\bar{\rho} \epsilon}{k^2} \left(\widetilde{u''_m u''_n u''_m u''_l d_n^A d_l^A} \delta_{ij} - \frac{3}{2} \widetilde{u''_i u''_m u''_m u''_l d_j^A d_l^A} - \frac{3}{2} \widetilde{u''_j u''_m u''_m u''_l d_i^A d_l^A} \right) \\
&= \widetilde{u''_i u''_l} \frac{3 \bar{\rho} \epsilon}{2 k} \left(- f_{w1} d_j^A d_l^A - f_{w2} \frac{\widetilde{u''_i u''_n}}{k} d_j^A d_n^A \right) \\
&\quad + \widetilde{u''_j u''_l} \frac{3 \bar{\rho} \epsilon}{2 k} \left(- f_{w1} d_i^A d_l^A - f_{w2} \frac{\widetilde{u''_i u''_n}}{k} d_i^A d_n^A \right) \\
&\quad + \delta_{ij} \frac{\bar{\rho} \epsilon}{k} \left(f_{w1} \widetilde{u''_l u''_k d_l^A d_k^A} + f_{w2} \frac{1}{k} \widetilde{u''_m u''_n u''_m u''_l d_n^A d_l^A} \right) \\
G_{jl}^{\phi_{ij1}^{\text{inh}}} &= \frac{3 \epsilon}{2 k} \left(- f_{w1} d_j^A d_l^A - f_{w2} \frac{\widetilde{u''_i u''_n}}{k} d_j^A d_n^A \right) \\
C_0^{\phi_{ij1}^{\text{inh}}} &= \frac{1}{k} \left(f_{w1} \widetilde{u''_l u''_k d_l^A d_k^A} + f_{w2} \frac{1}{k} \widetilde{u''_m u''_n u''_m u''_l d_n^A d_l^A} \right)
\end{aligned}$$

Der zweite Term, der den Einfluss von Wänden berücksichtigen soll, ist ϕ_{ij2}^{inh}

$$\phi_{ij2}^{\text{inh}} = f_1 \bar{\rho} k \frac{\partial \tilde{u}_l}{\partial x_n} d_l d_n \left(d_i d_j - \frac{1}{3} d_k d_k \delta_{ij} \right),$$

wobei d_i einen Indikator für den Gradienten der turbulenten kinetischen Energie

darstellt mit

$$\begin{aligned} d_i &= \frac{N_i}{0,5 + \sqrt{N_k N_k}}; \\ N_i &= \frac{\partial(lA)}{\partial x_i}; \\ l &= \frac{\tilde{k}^{1,5}}{\epsilon}. \end{aligned}$$

Unter Verwendung der Grenzschichtannahme gilt: $\frac{\partial}{\partial x_1} = \frac{\partial}{\partial x_3} = 0$, wenn x_2 die wandnormale Richtung angibt. Somit ergibt sich: $d_1^\Delta = d_3^\Delta = 0$. Weiter werden die mittleren Geschwindigkeiten senkrecht zur Wand und senkrecht zur Strömung, \tilde{u}_2 bzw. \tilde{u}_3 , vernachlässigt. Somit gilt: $\phi_{ij2}^{\text{inh}} = 0$. Dieser Term liefert also keine Beiträge zu G_{ij} und C_0 . Läßt man die Grenzschichtannahme fallen, muß der Beitrag dieses Terms modelliert werden, da er dann nicht vollständig ins GLM übertragen werden kann.

Der letzte Term ist der Dissipationstensor ϵ_{ij}

$$\epsilon_{ij} = \frac{1 - f_\epsilon}{D} \bar{\rho} (\epsilon'_{ij} + \epsilon''_{ij}) + \frac{2}{3} f_\epsilon \bar{\rho} \epsilon \delta_{ij},$$

$$\begin{aligned} \text{mit: } \epsilon'_{ij} &= \epsilon \frac{\widetilde{u''_i u''_j}}{k} + 2\nu \frac{\widetilde{u''_l u''_n}}{k} \frac{\partial \sqrt{k}}{\partial x_l} \frac{\partial \sqrt{k}}{\partial x_n} \delta_{ij} \\ &\quad + 2\nu \left(\frac{\widetilde{u''_l u''_i}}{k} \frac{\partial \sqrt{k}}{\partial x_j} \frac{\partial \sqrt{k}}{\partial x_l} + \frac{\widetilde{u''_l u''_j}}{k} \frac{\partial \sqrt{k}}{\partial x_i} \frac{\partial \sqrt{k}}{\partial x_l} \right) \\ \epsilon''_{ij} &= f_R \epsilon \left(2 \frac{\widetilde{u''_l u''_k}}{k} d_l^\Delta d_k^\Delta \delta_{ij} - \frac{\widetilde{u''_l u''_i}}{k} d_l^\Delta d_j^\Delta - \frac{\widetilde{u''_l u''_j}}{k} d_l^\Delta d_j^\Delta \right). \end{aligned}$$

B. Koeffizientenvergleich

Damit läßt sich ϵ_{ij} umformen:

$$\begin{aligned}
\epsilon_{ij} &= \frac{1-f_\epsilon}{D} \bar{\rho} \left[\epsilon \frac{\widetilde{u''_i u''_j}}{k} + 2\nu \frac{\widetilde{u''_l u''_n}}{k} \frac{\partial \sqrt{k}}{\partial x_l} \frac{\partial \sqrt{k}}{\partial x_n} \delta_{ij} \right. \\
&\quad + 2\nu \left(\frac{\widetilde{u''_l u''_i}}{k} \frac{\partial \sqrt{k}}{\partial x_j} \frac{\partial \sqrt{k}}{\partial x_l} + \frac{\widetilde{u''_l u''_j}}{k} \frac{\partial \sqrt{k}}{\partial x_i} \frac{\partial \sqrt{k}}{\partial x_l} \right) \\
&\quad \left. + f_R \epsilon \left(2 \frac{\widetilde{u''_l u''_k}}{k} d_l^\Delta d_k^\Delta \delta_{ij} - \frac{\widetilde{u''_l u''_i}}{k} d_l^\Delta d_j^\Delta - \frac{\widetilde{u''_l u''_j}}{k} d_l^\Delta d_j^\Delta \right) \right] \\
&\quad + \frac{2}{3} f_\epsilon \bar{\rho} \epsilon \delta_{ij} \\
&= \frac{\widetilde{u''_i u''_l}}{D} \frac{1-f_\epsilon}{\bar{\rho}} \left(\frac{1}{2} \frac{\epsilon}{k} \delta_{jl} + 2 \frac{\nu}{k} \frac{\partial \sqrt{k}}{\partial x_j} \frac{\partial \sqrt{k}}{\partial x_l} - \frac{f_R \epsilon}{k} d_l^\Delta d_j^\Delta \right) \\
&\quad + \frac{\widetilde{u''_j u''_l}}{D} \frac{1-f_\epsilon}{\bar{\rho}} \left(\frac{1}{2} \frac{\epsilon}{k} \delta_{il} + 2 \frac{\nu}{k} \frac{\partial \sqrt{k}}{\partial x_i} \frac{\partial \sqrt{k}}{\partial x_l} - \frac{f_R \epsilon}{k} d_l^\Delta d_i^\Delta \right) \\
&\quad + \bar{\rho} \epsilon \delta_{ij} \left[\frac{1-f_\epsilon}{D} \left(\frac{2\nu}{\epsilon} \frac{\widetilde{u''_m u''_n}}{k} \frac{\partial \sqrt{k}}{\partial x_m} \frac{\partial \sqrt{k}}{\partial x_n} + 2 f_R \frac{\widetilde{u''_m u''_n}}{k} d_m^\Delta d_n^\Delta \right) + \frac{2}{3} f_\epsilon \right] \\
G_{jl}^{\epsilon_{ij}} &= -\frac{1-f_\epsilon}{D} \left(\frac{1}{2} \frac{\epsilon}{k} \delta_{jl} + 2 \frac{\nu}{k} \frac{\partial \sqrt{k}}{\partial x_j} \frac{\partial \sqrt{k}}{\partial x_l} - \frac{f_R \epsilon}{k} d_l^\Delta d_j^\Delta \right) \\
C_0^{\epsilon_{ij}} &= -\frac{1-f_\epsilon}{D} \left(\frac{2\nu}{\epsilon} \frac{\widetilde{u''_m u''_n}}{k} \frac{\partial \sqrt{k}}{\partial x_m} \frac{\partial \sqrt{k}}{\partial x_n} + 2 f_R \frac{\widetilde{u''_m u''_n}}{k} d_m^\Delta d_n^\Delta \right) - \frac{2}{3} f_\epsilon
\end{aligned}$$

C. Randbedingung für $\frac{\epsilon}{k}$ an der Wand

Für das GLM wird ein Ausdruck für $\frac{\epsilon}{k}$ an der Wand benötigt. Da aber

$$\epsilon(x_2 = 0) = 2\nu \frac{\partial \sqrt{k^2}}{\partial x_2} \neq 0 \wedge k(x_2 = 0) = 0 \quad ,$$

kann ein solcher Wert nicht direkt nach l'Hospital bestimmt werden, da hierzu ein Ausdruck der Form $\frac{0}{0}$ Voraussetzung ist [56, 84]. Unter Zuhilfenahme der homogenen Dissipationsgeschwindigkeit $\epsilon_h = \epsilon - 2\nu \frac{\partial \sqrt{k^2}}{\partial x_2}$, für die gilt $\epsilon_h(x_2) = 0$, kann formuliert werden

$$\begin{aligned} \frac{\epsilon_h}{k} &= \frac{\epsilon - 2\nu \frac{\partial \sqrt{k^2}}{\partial x_2}}{k} \\ &= \frac{\epsilon \left(1 - \frac{2\nu \frac{\partial \sqrt{k^2}}{\partial x_2}}{\epsilon} \right)}{k} \quad , \text{ und somit} \end{aligned}$$

$$\frac{\epsilon}{k} = \frac{\epsilon_h}{k \left(1 - \frac{2\nu \frac{\partial \sqrt{k^2}}{\partial x_2}}{\epsilon} \right)} \quad .$$

Dies wiederum ist mit den Werten der einzelnen Terme an der Wand bei $x_2 = 0$ ein Ausdruck der Form $\frac{0}{0}$, sodass nach l'Hospital angesetzt werden kann

$$\lim_{x_2 \rightarrow 0} \frac{\epsilon}{k} = \lim_{x_2 \rightarrow 0} \frac{\frac{\partial \epsilon_h}{\partial x_2}}{\frac{\partial k}{\partial x_2} - \frac{\partial}{\partial x_2} \left(2 \frac{\nu k}{\epsilon} \frac{\partial \sqrt{k^2}}{\partial x_2} \right)} \quad .$$

C. Randbedingung für $\frac{\epsilon}{k}$ an der Wand

Nach Festlegung von $\frac{\epsilon}{k}|_{x_2=0} = \lim_{x_2 \rightarrow 0} \frac{\epsilon}{k}$ und Einsetzen der Terme an der Stelle $x_2 = 0$ ist damit

$$\frac{\epsilon}{k}|_{x_2=0} = \frac{\frac{\partial \epsilon_h}{\partial x_2}|_{x_2=0}}{\frac{\partial k}{\partial x_2}|_{x_2=0} - \frac{\partial}{\partial x_2} \left(2 \frac{\nu k}{\epsilon} \frac{\partial \sqrt{k^2}}{\partial x_2} \right)|_{x_2=0}} .$$

Nach Ersetzen der Gradienten durch Differenzenquotienten gemäß einer Diskretisierung durch Vorwärtsdifferenzen gilt näherungsweise

$$\frac{\epsilon}{k}|_{x_2=0} = \frac{\frac{\epsilon_h|_{x_2=s_1^m} - \epsilon_h|_{x_2=0}}{\Delta x_2}}{\frac{k|_{x_2=s_1^m} - k|_{x_2=0}}{\Delta x_2} - 2 \frac{\frac{\nu k}{\epsilon} \frac{\partial \sqrt{k^2}}{\partial x_2}|_{x_2=s_1^m} - \frac{\nu k}{\epsilon} \frac{\partial \sqrt{k^2}}{\partial x_2}|_{x_2=0}}{\Delta x_2}} .$$

Hierbei sind alle Terme an der Stelle $x_2 = 0$ gleich Null. Nach Kürzen von Δx_2 , dem Abstand von der Wand zum Zellmittelpunkt s_1^m der ersten Zelle, ergibt sich

$$\frac{\epsilon}{k}|_{x_2=0} = \frac{\epsilon_h|_{x_2=s_1^m}}{k|_{x_2=s_1^m} - 2 \frac{\nu k}{\epsilon} \frac{\partial \sqrt{k^2}}{\partial x_2}|_{x_2=s_1^m}} .$$

Ausklammern von k und Zusammenfassen der Terme im Nenner führt zu

$$\begin{aligned} \frac{\epsilon}{k}|_{x_2=0} &= \frac{\epsilon_h|_{x_2=s_1^m}}{k|_{x_2=s_1^m} \left(\frac{\epsilon_h}{\epsilon} \right)|_{x_2=s_1^m}} \\ &= \frac{\epsilon}{k}|_{x_2=s_1^m} . \end{aligned}$$

D. Tabellierung der Reaktionsgeschwindigkeiten

D.1. Bestimmung der Koeffizienten a und d

Wegen der Massenerhaltung bei chemischen Reaktionen gilt:

$$\begin{aligned}\phi M_{\text{H}_2} + 0,5 M_{\text{O}_2} + 1,881 M_{\text{N}_2} &= \\ &= a M_{\text{H}_2} + b M_{\text{O}_2} + c M_{\text{H}_2\text{O}} + d M_{\text{OH}} + 1,881 M_{\text{N}_2}\end{aligned}$$

und weiter mit den Gleichungen 3.37 und 3.38:

$$\begin{aligned}\phi M_{\text{H}_2} + 0,5 M_{\text{O}_2} + 1,881 M_{\text{N}_2} &= \\ &= a M_{\text{H}_2} + \frac{1}{2} \left(1 - \phi + a - \frac{1}{2}d \right) M_{\text{O}_2} \\ &\quad + \frac{1}{2} (2\phi - 2a - d) M_{\text{H}_2\text{O}} + d M_{\text{OH}} + 1,881 M_{\text{N}_2} \quad .\end{aligned}$$

Die Gleichungen 3.39 und 3.42 lassen sich damit umformen zu:

$$\begin{aligned}Y_{\text{H}_2} &= a M_{\text{H}_2} / \left[a M_{\text{H}_2} + \frac{1}{2} \left(1 - \phi + a - \frac{1}{2}d \right) M_{\text{O}_2} \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} (2\phi - 2a - d) M_{\text{H}_2\text{O}} + d M_{\text{OH}} + 1,881 M_{\text{N}_2} \right]\end{aligned}$$

D. Tabellierung der Reaktionsgeschwindigkeiten

bzw

$$Y_{\text{OH}} = d M_{\text{OH}} / \left[a M_{\text{H}_2} + \frac{1}{2} \left(1 - \phi + a - \frac{1}{2} d \right) M_{\text{O}_2} + \frac{1}{2} (2\phi - 2a - d) M_{\text{H}_2\text{O}} + d M_{\text{OH}} + 1,881 M_{\text{N}_2} \right] .$$

Die Gleichungen lassen sich umstellen zu

$$\begin{aligned} & a \underbrace{\left[Y_{\text{H}_2} \left(\frac{1}{2} M_{\text{O}_2} - M_{\text{H}_2\text{O}} \right) + (Y_{\text{H}_2} - 1) M_{\text{H}_2} \right]}_{\text{Term A}} \\ & + d \underbrace{\left[Y_{\text{H}_2} \left(-\frac{1}{4} M_{\text{O}_2} - \frac{1}{2} M_{\text{H}_2\text{O}} + M_{\text{OH}} \right) \right]}_{\text{Term B}} = \\ & - Y_{\text{H}_2} \underbrace{\left[\frac{1}{2} (1 - \phi) M_{\text{O}_2} + 1,881 M_{\text{H}_2} + \phi M_{\text{H}_2\text{O}} \right]}_{\text{Term C}} \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} & a \underbrace{\left[Y_{\text{OH}} \left(M_{\text{H}_2} + \frac{1}{2} M_{\text{O}_2} - M_{\text{H}_2\text{O}} \right) \right]}_{\text{Term D}} \\ & + d \underbrace{\left[Y_{\text{OH}} \left(-\frac{1}{4} M_{\text{O}_2} - \frac{1}{2} M_{\text{H}_2\text{O}} \right) + (Y_{\text{OH}} - 1) M_{\text{OH}} \right]}_{\text{Term E}} = \\ & - Y_{\text{OH}} \underbrace{\left[\frac{1}{2} (1 - \phi) M_{\text{O}_2} + 1,881 M_{\text{N}_2} + \phi M_{\text{H}_2\text{O}} \right]}_{\text{Term F}} \end{aligned}$$

Die beiden Gleichungen lassen sich als lineares Gleichungssystem in Matrixschreibweise zusammenfassen:

$$\begin{pmatrix} A & B \\ D & E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C \\ F \end{pmatrix}$$

Die Lösung dieses Gleichungssystems mit Hilfe der Cramer'schen Regel [56] lautet:

D.1. Bestimmung der Koeffizienten a und d

$$a = \frac{CE - BF}{AE - BD}$$

$$d = \frac{AF - CD}{AE - BD}$$

Die Terme A bis F eingesetzt, ist das Ergebnis:

$$a = \left\{ Y_{\text{H}_2} \left[\frac{1}{2}(1 - \phi)M_{\text{O}_2} + \frac{1}{2} \cdot 3,762M_{\text{N}_2} + \phi M_{\text{H}_2\text{O}} \right] \right. \\ \cdot Y_{\text{OH}} \left[\left(-\frac{1}{4}M_{\text{O}_2} - \frac{1}{2}M_{\text{H}_2\text{O}} \right) + (Y_{\text{OH}} - 1) M_{\text{OH}} \right] \\ - Y_{\text{H}_2} \left(-\frac{1}{4}M_{\text{O}_2} - \frac{1}{2}M_{\text{H}_2\text{O}} + M_{\text{OH}} \right) \\ \left. \cdot Y_{\text{OH}} \left[\frac{1}{2}(1 - \phi)M_{\text{O}_2} + \frac{1}{2} \cdot 3,762M_{\text{N}_2} + \phi M_{\text{H}_2\text{O}} \right] \right\} \cdot \frac{1}{\Delta}$$

und

$$d = \left\{ Y_{\text{H}_2} \left[\left(\frac{1}{2}M_{\text{O}_2} - M_{\text{H}_2\text{O}} \right) + (Y_{\text{H}_2} - 1) M_{\text{H}_2} \right] \right. \\ \cdot Y_{\text{OH}} \left[\left(-\frac{1}{4}M_{\text{O}_2} - \frac{1}{2}M_{\text{H}_2\text{O}} \right) + (Y_{\text{OH}} - 1) M_{\text{OH}} \right] \\ - Y_{\text{H}_2} \left[\frac{1}{2}(1 - \phi)M_{\text{O}_2} + \frac{1}{2} \cdot 3,762M_{\text{N}_2} + \phi M_{\text{H}_2\text{O}} \right] \\ \left. \cdot Y_{\text{OH}} \left(M_{\text{H}_2} + \frac{1}{2}M_{\text{O}_2} - M_{\text{H}_2\text{O}} \right) \right\} \cdot \frac{1}{\Delta} \quad ,$$

mit

$$\Delta = Y_{\text{H}_2} \left[\left(\frac{1}{2}M_{\text{O}_2} - M_{\text{H}_2\text{O}} \right) + (Y_{\text{H}_2} - 1) M_{\text{H}_2} \right] \\ \cdot Y_{\text{OH}} \left[\left(-\frac{1}{4}M_{\text{O}_2} - \frac{1}{2}M_{\text{H}_2\text{O}} \right) + (Y_{\text{OH}} - 1) M_{\text{OH}} \right] \\ - Y_{\text{H}_2} \left(-\frac{1}{4}M_{\text{O}_2} - \frac{1}{2}M_{\text{H}_2\text{O}} + M_{\text{OH}} \right) \\ \cdot Y_{\text{OH}} \left[\left(-\frac{1}{4}M_{\text{O}_2} - \frac{1}{2}M_{\text{H}_2\text{O}} \right) + (Y_{\text{OH}} - 1) M_{\text{OH}} \right] \quad . \quad (\text{D.1})$$

D.2. Behandlung von Randzellen des Tabellierungsgitters

Bei der Tabellierung der Reaktionsgeschwindigkeiten in Abhängigkeit von den Massenbrüchen der chemischen Spezies wird ein regelmäßiges Gitter verwendet, dessen Randlinien wegen der in Kapitel 3.2.4.2 Randbedingungen auf dem Gitter schräg verlaufen. Dadurch entstehen am Rand des Gitters Zellen, die nicht rechteckig sind. Die Interpolation für Punkte in diesen Zellen erfordert deshalb besondere Maßnahmen. In der nachfolgenden Abbildung D.1 sind die verschiedenen möglichen Fälle dieser Zellen dargestellt, wie sie kurz schon in Tabelle 3.1 aufgeführt sind. Zur Interpolation werden dabei in Zellen, die durch die Randlinie abgeschnitten werden, Schnittpunkte dieser Begrenzungslinie mit dem regulären Gitter bestimmt und die Geschwindigkeiten aus den für die Bestimmung dieser Punkte verwendeten tabellierten Werten berechnet. Somit sind alle Ecken der Zelle und die Geschwindigkeiten an diesen Stellen bekannt. Aus diesen Werten wird anschließend durch Gewichtung mit dem Abstand der Ecken von dem Punkt, an dem die Geschwindigkeiten bestimmt werden sollen, die Interpolation durchgeführt.

D.2. Behandlung von Randzellen des Tabellierungsgitters

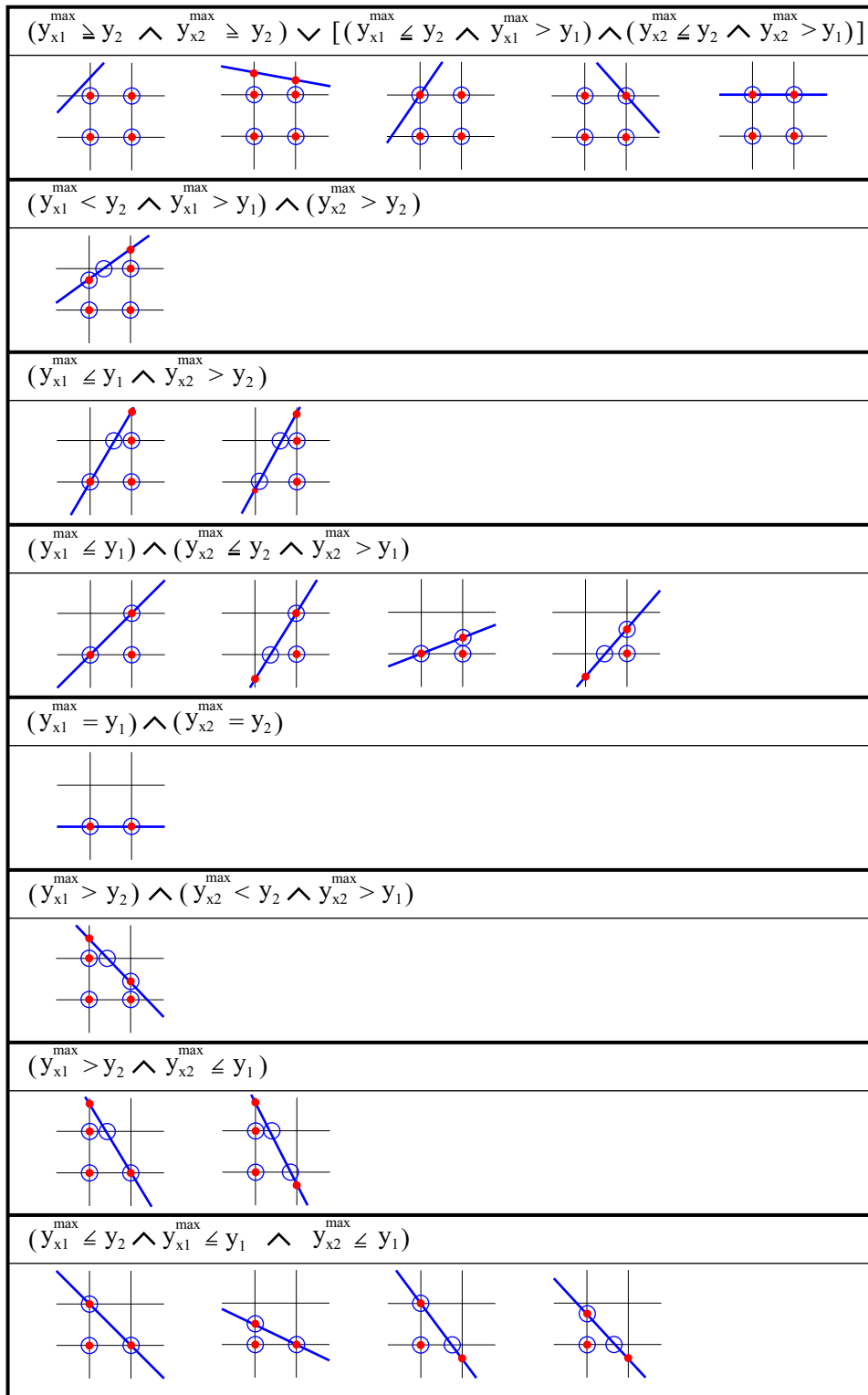


Abbildung D.1.: Mögliche Fälle der Randzellen bei der Tabellierung der Reaktionsgeschwindigkeiten. Schwarze Linien: Tabellierungsgitter, blaue Linie: maximaler Massenbruch der abhängigen Spezies y , rote Punkte: tabellierte Werte, blaue Kreise: zur Interpolation verwendete Punkte.

Danksagung

Zum Schluss möchte ich allen danken, die zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben:

Prof. Dr. Dr.h.c. Jürgen Warnatz und Prof. Dr. Ulrich Maas für das anspruchsvolle Thema, die Freiheit bei der Gestaltung und die Unterstützung beim Einstieg in die Welt der Monte-Carlo-Simulation,

meinem Kollegen Dr. Christian Taut, der viele hilfreiche Antworten auf meine Fragen bezüglich PDF hatte,

Dr. Berthold Schramm, der mich bei den chemischen Reaktionen unterstützte,

Dipl.-Phys. Markus Vogelgesang, Prof. Dr. Olaf Deutschmann und Dr.-Ing. Thomas Hubner, die mit Korrekturlesen zur Reduzierung der Anzahl der Fehler beigetragen haben,

Frau Ingrid Hellwig für ihre freundliche Hilfe bei allfälligen Verwaltungsvorgängen, meinen Eltern und meiner Schwester für moralische Unterstützung während zwischenzeitlich zähen Vorankommens bei der Arbeit,

und allen Mitgliedern der Arbeitsgruppe Reaktive Strömungen für eine schöne Zeit in Heidelberg.

Erklärung

Hiermit versichere ich, dass ich die Arbeit selbstständig verfasst und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel verwendet habe.

Ravensburg, den 20.10.2004

Tillman Katzenmeier

Lebenslauf

Tillman Katzenmeier

Geboren am 21.10.1969 in Hamburg

- 1980 - 1989 Schulzeit am Humanistischen Gymnasium bei St. Stephan, Augsburg
- 1989 - 1990 Wehrdienst beim Fernmeldebataillon der Gebirgsdivision, Murnau
- 1990 - 1996 Studium des Chemieingenieurwesens an der Friedrich-Alexander-Universität, Erlangen
Abschlussrichtung: Verfahrenstechnik
Thema der Diplomarbeit: Inbetriebnahme einer Laboranlage zur Immobilisierung von Schwermetallen durch Brennen im Drehrohröfen
- 1996 - 1997 Wissenschaftlicher Mitarbeiter am Lehrstuhl für Apparate- und Chemiemaschinenbau an der Friedrich-Alexander-Universität, Erlangen
- 1997 - 2002 Wissenschaftlicher Mitarbeiter am Interdisziplinären Zentrum für Wissenschaftliches Rechnen an der Karl-Ruprecht-Universität, Heidelberg in der Arbeitsgruppe „Reaktive Strömungen“
Arbeit an einer Dissertation zum Thema „Simulation einer turbulenten reaktiven Kanalströmung mit Monte-Carlo-PDF-Methoden“
Als Nebenaufgabe Betreuung der Workstations und Server der Arbeitsgruppe
- Seit 2002 Ingenieur im Bereich Forschung und Entwicklung bei der Firma Voith Paper Fiber Systems, Ravensburg.