

Entwicklung eines reduzierten Modells zur Beschreibung der Zündung und Flammenausbreitung in kompressionsgezündeten Motoren

INSTITUT FÜR TECHNISCHE THERMODYNAMIK

Zur Erlangung des akademischen Grades eines Doktors der Ingenieurwissenschaften von der Fakultät für Maschinenbau des Karlsruher Instituts für Technologie genehmigte Dissertation von
Dipl.-Ing. Marc-Sebastian Benzinger

Hauptreferent: Prof. Dr. rer. nat. habil. Ulrich Maas
Korreferent: Prof. Dr.-Ing. Johannes Janicka

Tag der mündlichen Prüfung: 16. Juni 2016



Dieses Werk ist lizenziert unter einer Creative Commons Namensnennung –
Weitergabe unter gleichen Bedingungen 3.0 Deutschland Lizenz
(CC BY-SA 3.0 DE): <http://creativecommons.org/licenses/by-sa/3.0/de/>

»Was veranlasst Sie zu der Annahme, dass ein Schiff gegen den Wind und gegen die Strömung segeln könnte, wenn man nur ein Feuer unter Deck anzünde? Ich habe keine Zeit, mir so einen Unsinn anzuhören.«

- *Napoleon über Robert Fultons Dampfschiff*

Vorwort

Die vorliegende Arbeit entstand während meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Technische Thermodynamik (ITT) des Karlsruher Instituts für Technologie (KIT). Ich möchte mich ganz herzlich bei allen bedanken, die mich hierbei unterstützt haben und zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben.

Mein besonderer Dank gilt meinem wissenschaftlichen Betreuer und Hauptreferenten Prof. Dr. rer. nat. habil. Ulrich Maas, da er mir die Möglichkeit gegeben hat, die Arbeit an seinem Institut anzufertigen. Er gab mir stets die notwendige Balance zwischen Unterstützung und Freiraum und stand mir geduldig für Gespräche und Diskussionen zur Verfügung. Durch die enge Zusammenarbeit des Fachgebietes Energie- und Kraftwerkstechnik (EKT) der Technischen Universität Darmstadt mit dem ITT begleitete Prof. Dr.-Ing. Johannes Janicka meine Arbeit über den ganzen Zeitraum und übernahm schließlich das Korreferat. Dafür danke ich ihm herzlich. Des Weiteren bedanke ich mich bei Prof. Dr. Michael Hoffmann für die freundliche Übernahme des Prüfungsvorsitzes.

Außerdem bedanke ich mich bei Dr.-Ing. Robert Schießl, ohne dessen Anregungen und Unterstützung meine Arbeit nicht in dieser Form vorliegen würde. Oft genug verzweifelte ich fast, wenn er kurzfristig Vortragsfolien oder ganze Passagen in schriftlichen Veröffentlichungen änderte oder in Frage stellte. Aber ebenso oft fruchteten die folgenden Diskussionen in neuen Ideen und Ansätzen. Weiteren Dank möchte ich an alle aktuellen und ehemaligen Mitarbeiter des ITT aussprechen. Die offene und hilfsbereite Atmosphäre lernte ich zu jeder Zeit zu schätzen. Die zahlreichen Diskussionen und Gespräche halfen mir bei der Lösung unterschiedlichster Fragestellungen und brachten mich stets weiter. Ebenso möchte ich mich für den ganzen Spaß bedanken, den ich in meiner Zeit am ITT mit ihnen hatte. Ich werde diesen Lebensabschnitt in sehr guter Erinnerung behalten.

Bei der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) und der Forschungsvereinigung Verbrennungskraftmaschinen (FVV) bedanke ich mich für die finanzielle Unterstützung im Rahmen der Verbundinitiativen MA1205/15-1 und MA1205/15-2, ohne die diese Arbeit nicht möglich gewesen wäre.

Abschließend möchte ich mich von ganzem Herzen bei meiner Familie bedanken. Insbesondere meine Eltern haben mich immerzu bedingungslos unterstützt

und nicht zuletzt mit ihrer liebevollen Erziehung den Grundstein für meinen heutigen Werdegang gelegt. Meiner Frau Sophie kann ich gar nicht genug danken. Sie freute sich mit mir über Erfolge, sie baute mich auf, wenn ich zweifelte, sie ertrug meine Launen, wenn ich angespannt war, sie ist die Liebe meines Lebens.

Auch wenn ihm das noch nicht bewusst ist, mein Sohn Moritz hat mir vor allen anderen den Ausgleich zur Nervosität und Anspannung der letzten Monaten gegeben: Indem er mich zu jeder Tages- und Nachtzeit anlacht.

Karlsruhe, im Juni 2016

Marc-Sebastian Benzinger

Abstract

With the increasing requirements on internal combustion engine processes, also the demand for advanced simulation tools rises. Hence, reliable modeling and prediction of auto-ignition and combustion is needed. In the literature, there are numerous approaches for the reduced treatment of chemical kinetics. These models often aim at the limiting cases either of solely chemical reaction, or of strong coupling of diffusive processes and reaction. In some engine processes, like *homogeneous charge compression ignition* (HCCI) or *controlled auto-ignition* (CAI) engines, these limiting cases describe the situation only roughly. In such engines, the transition from a purely kinetically driven system to a reaction-diffusion system is essential.

In this work, a model that includes both the limiting cases as well as their transition is introduced and presented. The model is able to describe auto-ignition, burning in quasi homogeneous media as well as chemical reactions which are strongly coupled with molecular transport, like e.g., in flame propagation. A coupling scheme is developed for existing concepts for reduced treatment of combustion, namely a *progress-variable model* (PVM) and the *reaction-diffusion manifold* (REDIM) approach. The PVM, which follows the idea of *trajectory generated low dimensional manifolds* (TGLDM), is tailored for describing auto-ignition in situations where the influence of molecular transport on chemical reaction is weak, like auto-ignition in media with weak scalar gradients. The other approach using the REDIM concept is designed for situations where the interaction of chemistry with molecular transport is essential. A simple, robust method for this coupling is discussed, based on an additional variable, namely the normalized strength of molecular transport.

The implementation and behavior of the resulting coupled model is shown. To demonstrate the performance of the model, numerical simulations of representative combustion scenarios are performed, both with fully detailed calculations and with the reduced model. Results show that the model performs in good agreement with the detailed calculations. In addition, examples from *large eddy simulations* (LES) performed by a project partner are presented. Here, in cooperation the coupled model has been successfully implemented in an application for turbulent combustion.

Inhaltsverzeichnis

Inhaltsverzeichnis	ix
Nomenklatur	xi
1 Einleitung	1
1.1 Motivation	2
1.2 Ziele	4
2 Mathematische Beschreibung reagierender Strömungen	7
2.1 Modellierung der Transportprozesse	8
2.2 Modellierung der Reaktionskinetik	8
2.3 Modellreduktion	10
3 Modellreduktion und -kopplung	17
3.1 Modell für gekoppelte Reaktions-Diffusions-Szenarien	19
3.1.1 Mathematische Beschreibung	19
3.1.2 Anfangs- und Randbedingungen	20
3.1.3 Abschätzung räumlicher Gradienten	21
3.2 Modell für homogene Zündprozesse	23
3.2.1 Mathematische Beschreibung	24
3.3 Kopplung der Modelle zu einer erweiterten Mannigfaltigkeit . .	25
3.3.1 Parameter für die Stärke des molekularen Transports . .	26
3.3.2 Einheitliche Parametrisierung der Mannigfaltigkeiten .	27
3.3.3 Projektionsrichtung für den Übergang zwischen Mannig- faltungen	31
4 Tabellierungsstrategien	35
4.1 Grundlagen der Interpolation	36
4.1.1 Erläuterung für den eindimensionalen Fall	36
4.1.2 Erweiterung für den mehrdimensionalen Fall	39
4.2 Fluch der Dimensionalität	41
4.3 Äquidistante Gitter	42

4.4	Dünne Gitter	44
4.4.1	Hierarchische Basis	44
4.4.2	Konstruktion dünner Gitter	46
4.4.3	Adaptive dünne Gitter	47
5	Konfiguration und Implementierung	55
5.1	Numerische Implementierung	55
5.2	Modellkraftstoff und Reaktionsmechanismus	55
5.3	Konfiguration zur Lösung der REDIM-Entwicklungsgleichung	58
5.4	Linearisierung der Fortschrittsvariablen	61
5.5	Vereinfachungen bei der Kopplung der Modelle zu einer erweiterten Mannigfaltigkeiten	65
5.6	Modifikation der Parameter bei äquidistanter Tabellierung	66
6	Verifizierung der numerischen Implementierung	69
6.1	Bewertung des adaptiven Dünngitter-Algorithmus mithilfe analytischer Beispielfunktionen	70
6.2	Auswirkung der Interpolationsfehler im realen Modell	73
7	Validierung des Modells	85
7.1	Untersuchung homogener Reaktionssysteme	86
7.1.1	Homogener, isobarer, adiabatischer Reaktor	86
7.1.2	Homogener Motorzyklus	87
7.2	Untersuchung eindimensionaler Reaktionssysteme	93
7.2.1	Laminare, nicht vorgemischte Gegenstromflamme	94
7.2.2	Laminare, vorgemischte, freie Flamme	99
7.2.3	Zündung und Flammenausbreitung an einem Hot-Spot	106
8	Anwendung für turbulente Verbrennung	113
8.1	Behandlung von kleinskaligen Fluktuationen	113
8.2	Experimenteller Aufbau und numerische Konfiguration	115
8.3	Ergebnisse der Motorsimulation	117
9	Zusammenfassung und Ausblick	119
	Literatur	123

Nomenklatur

Für die vorliegende Arbeit wurden folgende Konventionen für den mathematischen Formelsatz getroffen:

- Formelzeichen werden grundsätzlich kursiv gedruckt.
- Indices aus Wortabkürzungen werden aufrecht gedruckt.
- Vektoren werden über ein fettes Symbol gekennzeichnet.
- Matrizen werden über ein fettes und aufrechtes Symbol gekennzeichnet.
- Ein hochgestelltes » T « bezeichnet transponierte Matrizen oder Vektoren.
- In der folgenden Übersicht bezeichnet »w. E.« eine willkürliche Einheit.

Lateinische Buchstaben

A	Punkt	
a	Koeffizient	1
B	Basisfunktion, Basis- <i>spline</i>	1
b	Koeffizient	1
b	Bohrungsdurchmesser	m
C	Konstante	1
c	Konzentration	mol m^{-3}
c_p	spezifische Wärmekapazität bei konstantem Druck	$\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$
D	Diffusionskoeffizient	$\text{kg s}^{-1} \text{m}^{-1}$
D	Dimension	1
d	Laufvariable Dimension	1
E_a	Aktivierungsenergie	J mol^{-1}
F	chemischer Quellterm (detaillierte Zustandsgröße)	w. E.
f	Funktion	w. E.
\tilde{f}	Interpolante einer Funktion	w. E.
g	physikalische Größe	w. E.

h	spezifische Enthalpie	J kg^{-1}
h	Kolbenhub	m
\mathbf{I}	Einheitsmatrix	1
i	Laufvariable, Index	1
J	tangentialer Druckgradient	Pa m^{-1}
j	Laufvariable	1
k	Geschwindigkeitskoeffizient einer Reaktion	s^{-1}
k	Polynomordnung	1
L	Hierarchiestufe	1
l	Laufvariable Hierarchiestufe	1
Le	LEWIS-Zahl	1
\mathcal{M}	Mannigfaltigkeit, Unterraum des Zustandsraums	
M	molare Masse	kg mol^{-1}
m	Dimension eines Unterraums des Zustandsraums	1
N	Gesamtanzahl von Spezies oder Gitterpunkten	1
n	Dimension des Zustandsraums	1
n	Drehzahl	s^{-1}
P	Polynom	1
\mathbf{P}	Projektionsoperator	1
P	Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion	w. E.
p	Druck	Pa
R	Gesamtanzahl von Reaktionen	1
r	Laufvariable Reaktion	1
r	Länge der Pleulstange	m
R_u	universelle Gaskonstante	$\text{J mol}^{-1} \text{K}^{-1}$
S	chemischer Quellterm (reduzierte Zustandsgröße)	w. E.
S	stückweise stetiger Polynomzug, <i>spline</i>	1
s	spezifische Entropie	$\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$
\dot{s}	Quellterm der spezifischen Entropie	$\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1} \text{s}^{-1}$
T	Temperatur	K
T_{ad}	adiabate Flammentemperatur	K
T_{ub}	Temperatur im unverbrannten Gemisch	K
t	Zeit	s
t_{ign}	Zündverzugszeit	s
u	hierarchischer Überschuss	1
V	Volumen	m^3
V	Vektorraum eines vollen Gitters	
v	Geschwindigkeit	m s^{-1}
v_{lam}	laminare Flammgeschwindigkeit	m s^{-1}
W	hierarchischer Unterraum	

w	Massenbruch	1
\dot{w}	Quellterm des Massenbruchs	s^{-1}
X	Menge von Stützpunkten	
x	Ortskoordinate, Gitterkoordinate	m
Δx	Maschenweite	w. E.
Y	Menge von Stützpunkten	
y	Gitterkoordinate	w. E.
Z	Mischungsbruch	1
Z_{st}	stöchiometrischer Mischungsbruch	1

Griechische Buchstaben

α	normierte Stärke des molekularen Transports	1
α^*	Normierungsfaktor für die Stärke des molekularen Transports	w. E.
β	präexponentieller Faktor	s^{-1}
γ	Exponent zur Modifikation des präexponentiellen Faktors	1
ε	Toleranz	1
ε_{abs}	absolute Toleranz	1
ε_{ign}	relative Abweichung in der Zündverzugszeit	1
ε_{rel}	relative Toleranz	1
η	Mischungsvariable basierend auf dem Mischungsbruch	1
θ	reduzierte Zustandsgröße	w. E.
κ	Isentropenexponent	1
λ	thermische Wärmeleitfähigkeit	$W m^{-1} K^{-1}$
λ	Luftzahl	1
μ	chemisches Potential	$J mol^{-1}$
ν	stöchiometrischer Koeffizient	1
ξ	Abschätzung räumlicher Gradienten	w. E.
ρ	Dichte	$kg m^{-3}$
τ	beliebige Parametrisierung einer Reaktionstrajektorie	w. E.
Φ	rechte Seite einer Gleichung	w. E.
ϕ	Äquivalenzverhältnis	1
φ	Kurbelwinkel	1
χ	Reaktionsfortschrittsvariable	1
$\dot{\chi}$	Quellterm der Reaktionsfortschrittsvariablen	s^{-1}
Ψ	Zustandsgröße	w. E.

Ψ_{θ}	Ableitung von Ψ nach θ , JACOBI-Matrix	w. E.
Ψ_{θ}^{+}	MOORE-PENROSE-Pseudoinverse der JACOBI-Matrix	w. E.
ω	Bildungsgeschwindigkeit	$\text{mol m}^{-3} \text{s}^{-1}$

Indices

abs	absolut
ad	adiabatisch
chem	chemisch, durch chemische Reaktion
E	Edukt
ign	Zündung bzw. <i>ignition</i>
lam	laminar
lin	linear
max	Maximum
0	Startwert, Anfangslösung
P	Produkt
rel	relativ
\ominus	Standardbedingungen
st	stöchiometrisch
T	Trajektorie
ub	unverbrannt bzw. <i>unburned</i>
\perp	normal, orthogonal
\parallel	tangential, parallel

Akronyme

ASG	adaptive sparse grid
CAI	controlled auto-ignition
CFD	computational fluid dynamics
CSP	computational singular perturbation
DASSL	differential/algebraic system solver
DFG	Deutschen Forschungsgemeinschaft
DNS	direkten numerischen Simulation
FGM	flamelet generated manifold
FORTTRAN	formula translation
FPI	flame prolongation of ILDM

FVV	Forschungsvereinigung Verbrennungskraftmaschinen
GQL	global quasi-linearization
HCCI	homogeneous charge compression ignition
HOMREA	homogeneous reactor
ILDm	intrinsic low-dimensional manifold
INSFLA	instationary flame
LES	large eddy simulation
LIF	laserinduzierte Fluoreszenz
LIMEX	linearly implicit extrapolation integrator
MATLAB	matrix laboratory
MEPT	minimum entropy production trajectory
NTC	negative temperature coefficient
PDF	probability density function
PEA	partial equilibrium assumption
PRF	primary reference fuel
PVM	progress-variable model
QSSA	quasi steady-state approximation
REDIM	reaction-diffusion manifold
RG	regular grid
ROZ	Research-Oktanzahl
SG	sparse grid
SIM	slow invariant manifold
TGLDM	trajectory generated low dimensional manifold
TRF	toluene reference fuel

1

Einleitung

Das Feuer fasziniert den Menschen schon seit seiner frühen Evolution [16, 49]. Dessen Beherrschung war ein wesentlicher Schritt in der Entwicklung vom Frühmenschen zum modernen Menschen [50, 120]. Anfänglich diente das Feuer als Wärmequelle und Hilfsmittel zur Nahrungszubereitung. Mit der fortschreitenden Entwicklung kamen technische Anwendungen, wie das Härten von Werkzeugen und Schmelzen von Metallen hinzu [50], bis zu heutigen Anwendungen von Verbrennungsprozessen in Raketentriebwerken, mit deren Hilfe der Mensch zum Mond fliegen konnte [17, 33]. Im heutigen Zeitalter der fossilen Brennstoffe ist die Präsenz von Verbrennungsprozessen im täglichen Leben größer denn je. Mobilität durch Autos mit Verbrennungsmotoren, Elektrizität erzeugt durch die Verbrennung von Kohle oder Erdgas, Konsumgüter produziert mit Hilfe von verbrennungstechnischen Umwandlungsschritten, überall spielen Verbrennungsprozesse eine entscheidende Rolle in unserem Alltag. Durch die große Anzahl der Anwendungen und die Beschränkung der Ressourcen steigt der Bedarf an Weiterentwicklung. Die Steigerung der Effizienz und die Reduktion der Emissionen sind hierbei die zentralen Forderungen. Umso wichtiger ist dabei ein hohes Verständnis der zugrunde liegenden Prozesse und Phänomene. Längst ist die nahezu eine Million Jahre [16, 49] andauernde Geschichte der Nutzbarmachung und Erforschung des Feuers nicht abgeschlossen.

Die mobile Anwendung von Verbrennungsmotoren in Autos steigt seit deren Erfindung durch BENZ [10] und DAIMLER vor ungefähr 130 Jahren stetig an und stellt damit global die häufigste Form der Automobilität dar. Es existieren zahlreiche Bauformen und Varianten, die in unterschiedliche Kategorien eingeteilt werden können [58]. Heutzutage werden fast ausschließlich Hubkolbenmotoren verbaut, die nach dem Zweitakt- oder Viertaktprinzip arbeiten. Dabei finden Ottomotoren und Dieselmotoren die häufigste Verbreitung. Der grundsätzliche Unterschied dieser beiden Motortypen ist die Fremdzündung des Kraftstoff/Luft-

Gemischs über eine Zündkerze im Ottomotor und die Selbstzündung des in die komprimierte Luft eingespritzten Kraftstoffs im Dieselmotor. Um die Vorteile beider Konzepte zu vereinigen und die Nachteile auszugleichen, wurde das Konzept der *homogeneous charge compression ignition* (HCCI) oder der *controlled auto-ignition* (CAI) entwickelt [58, 95]. Hierbei wird ein nahezu homogenes Kraftstoff/Luft-Gemisch durch die Kompression des Kolbens zur Selbstzündung gebracht. Dieses Motorkonzept ist Gegenstand der vorliegenden Arbeit.

1.1 Motivation

Neben der experimentellen Untersuchung von Versuchsträgern nimmt die Bedeutung von numerischen Simulationen bzw. Anwendungen der *computational fluid dynamics* (CFD) bei der Motorenentwicklung immer weiter zu. Speziell bei der Entwicklung neuer Motorkonzepte, wie der erwähnten HCCI oder CAI, liefern CFD-Anwendungen wertvolle Erkenntnisse. Allerdings sind damit auch Herausforderungen verbunden, die bei der numerischen Beschreibung und Modellierung entstehen.

In der Regel handelt es sich bei technischen Anwendungen, wie etwa Verbrennungsmotoren, um große und komplexe Geometrien mit teils bewegten Bauteilen, wie Kolben oder Ventile. Hinzu kommt, dass Verjüngungen, insbesondere im Ventilspalt auftreten, die die Strömung wesentlich beeinflussen. Des Weiteren handelt es sich meist um eine turbulente Strömung. In der Brennkammer zeigen sich unterschiedliche Verbrennungsszenarien [39], die im Wesentlichen geprägt sind von der unterschiedlich starken Wechselwirkung von chemischer Reaktion und molekularem Transport. In Abbildung 1.1 sind diese verschiedenen Phänomene in einem HCCI/CAI-Motor schematisch dargestellt.

- (a) Kraftstoff wird in Luft oder Abgas eingespritzt und vermischt sich mit diesem. Da die Temperatur und der Druck hier meist noch gering sind, verlaufen die chemischen Reaktionen sehr langsam und es handelt sich dabei um reine Mischungseffekte unter turbulenten Bedingungen.
- (b) In nahezu homogen gemischten Kraftstoff/Luft-Bereichen kommt es aufgrund erhöhter Temperatur zur homogenen Selbstzündung. Dieser Prozess wird allein durch die chemische Kinetik bestimmt, da es wegen der homogenen Mischung keine molekularen Transportprozesse gibt.
- (c) In Bereichen inhomogener Vermischung von Kraftstoff und Luft kann es zur Selbstzündung kommen. Diese ist allerdings von Anfang an geprägt von

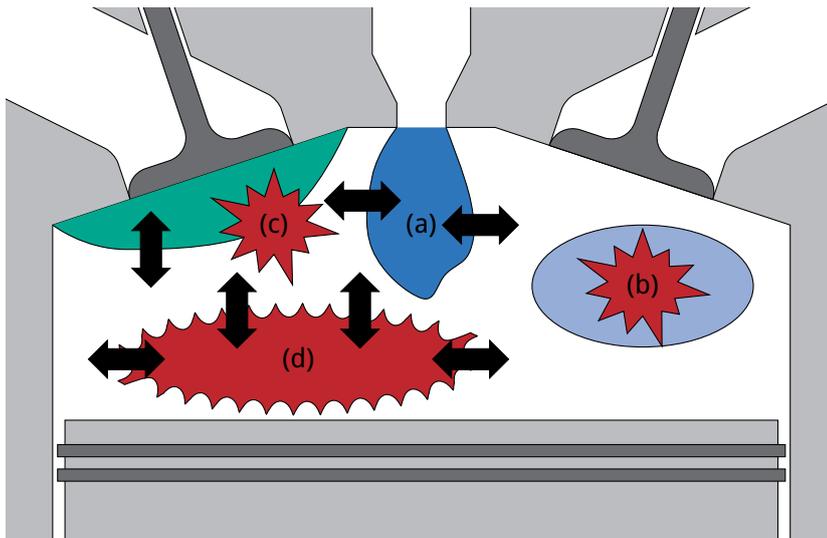


Abbildung 1.1: Phänomene in einem HCCI/CAI-Motor

der Wechselwirkung zwischen den chemischen Reaktionen der Zündung und den Transporteffekten aufgrund der Inhomogenitäten [84].

- (d) Ausgehend von Zündkernen bilden sich Flammenfronten aus, die sich in die unverbrannten Bereiche ausbreiten. In der Flammenfront entstehen steile Anstiege in Temperatur und Stoffkonzentrationen, weswegen die Flammenpropagation von der starken Kopplung der chemischen Kinetik mit molekularen Transportprozessen getrieben ist.

Die mathematische Beschreibung eines solchen Systems mit voller räumlicher und zeitlicher Auflösung und der Berücksichtigung der beschriebenen Phänomene und Szenarien ist mit einer *direkten numerischen Simulation* (DNS) im Prinzip möglich. Doch selbst auf heutigen Supercomputern wäre eine solche Anwendung nicht mit annehmbarem Aufwand und in realistischer Zeit durchführbar. DNS eignet sich für einfachere Geometrien und Problemstellungen im wissenschaftlichen Umfang. Für die industrielle Motorenentwicklung sind aber Werkzeuge gefragt, die schnell und robust eingesetzt werden können. Die Darstellung einzelner Prozesse über vereinfachte Modelle ist ein verbreiteter Ansatz, wobei dieser in zwei Aspekte [98, 115] aufgeteilt werden kann:

- Modellierung der Fluidmechanik und Turbulenz
- Modellierung und Reduktion der chemischen Kinetik

Finanziert durch die Verbundinitiativen MA1205/15-1 und MA1205/15-2 der *Deutschen Forschungsgemeinschaft* (DFG) und der *Forschungsvereinigung Verbrennungskraftmaschinen* (FVV) wird ein solches Gesamtmodell in Zusammenarbeit mit weiteren Forschungsstellen entwickelt [79, 82]. Ferner werden Validierungsdaten mit Hilfe einer sorgfältig abgestimmten Validierungsstrategie generiert, anhand derer das Gesamtmodell validiert wird.

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit als Teil des Projektverbunds wird die Modellierung und Reduktion der chemischen Kinetik erarbeitet. Im Besonderen wird dabei auf die Herausforderung eingegangen, die oben beschriebenen Phänomene und die unterschiedlich starke Wechselwirkung von chemischer Kinetik und molekularem Transport realistisch abzubilden. Zusätzlich wird das Modell für die chemische Kinetik für einfache, jedoch repräsentative Testfälle erprobt und validiert.

Die fluidmechanische Beschreibung eines komplexen Motors, die Modellierung der Turbulenz und die Validierung des Gesamtmodells wird in dieser Arbeit nicht behandelt. BREITENBERGER [19] implementierte im Rahmen des Projektverbunds das in dieser Arbeit vorgestellte Modell für die chemische Kinetik in eine Grobstruktursimulation bzw. *large eddy simulation* (LES). Damit führte er erste Validierungsrechnungen an einem CAI-Motor durch. Seine Ergebnisse [19] werden am Ende dieser Arbeit kurz vorgestellt.

1.2 Ziele

Ziel dieser Arbeit ist die Entwicklung eines Modells zur Beschreibung der Kinetik der Selbstzündung und Flammenausbreitung in Motoren, die nach dem HCCI bzw. CAI-Konzept arbeiten. Der Schwerpunkt liegt dabei auf der Berücksichtigung der unterschiedlich starken Kopplung der chemischen Kinetik und der dissipativen Transportprozesse. Im Rahmen der bearbeiteten Projekte MA1205/15-1 und MA1205/15-2 der DFG/FVV-Verbundinitiative wurden folgende Arbeitsziele aufgestellt:

- Auswahl eines detaillierten Reaktionsmechanismus für den zu verwendenden Modellkraftstoff
- Entwicklung eines reduzierten Modells zur korrekten Vorhersage der Zündverzugszeit (basierend auf dem detaillierten Mechanismus)
- Entwicklung eines reduzierten Modells zur Beschreibung der Flammenausbreitung (basierend auf dem detaillierten Mechanismus)
- Kopplung der Modelle für Selbstzündung und Flammenausbreitung

- Kopplung des Modells mit einer CFD bzw. LES-Anwendung
- Weiterentwicklung der numerischen Implementierung
- Adaption auf die verschiedenen Verbrennungsszenarien und Validierung

2

Mathematische Beschreibung reagierender Strömungen

Ein chemisches Reaktionssystem lässt sich an jedem Ortspunkt \mathbf{x} und zu jedem Zeitpunkt t vollständig mit einem Satz von Zustandsvariablen, dem sogenannten Zustandsvektor Ψ beschreiben $\Psi(\mathbf{x}, t)$. Der Zustandsvektor kann aus den Größen Temperatur, Druck, Strömungsgeschwindigkeit und Massenbrüche der Spezies bestehen. Passend dazu lassen sich für die Erhaltungsgrößen Energie, Masse, Impuls und Speziesmassen aus der Kontinuumsmechanik und der Thermodynamik Erhaltungsgleichungen ableiten, die die Dynamik des chemischen Reaktionssystems beschreiben. Es ergibt sich ein System von partiellen Differenzialgleichungen, einem erweiterten System der NAVIER-STOKES-Gleichungen [59, 77, 117]. Sie beschreiben die zeitliche Änderung der Erhaltungsgrößen aufgrund von diffusivem und konvektivem Transport, chemischer Reaktion und Fernwirkung.

Die Herleitung der Erhaltungsgleichungen und die Vorstellung der notwendigen empirischen Gesetze sowie der zur Schließung benötigten thermischen und kalorischen Zustandsgleichungen wird ausführlich in [77, 117] behandelt.

Im Folgenden wird der thermo-chemische Zustandsvektor

$$\Psi = \left(h, p, \frac{w_1}{M_1}, \dots, \frac{w_N}{M_N} \right)^T, \quad (2.1)$$

mit der Enthalpie h , dem Druck p und dem Massenbruch w_i und der molaren Masse M_i einer Spezies i verwendet (N ist die Anzahl der Spezies), womit sich die Erhaltungsgleichungen in Vektorform darstellen lassen:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \underbrace{F(\Psi)}_{\text{I}} + \frac{1}{\rho} \underbrace{\text{div}(\mathbf{D} \text{grad}(\Psi))}_{\text{II}} - \underbrace{\mathbf{v} \text{grad}(\Psi)}_{\text{III}} \equiv \Phi(\Psi). \quad (2.2)$$

Hierbei beschreiben die einzelnen Terme

- (I) den chemischen Quellterm $F(\Psi)$
- (II) die Änderung aufgrund molekularen Transports, mit der Matrix D der Transportkoeffizienten
- (III) die Änderung aufgrund konvektiven Transports, mit dem Geschwindigkeitsfeld v

Ferner bezeichnet ρ die Dichte und $\Phi(\Psi)$ abkürzend die rechte Seite von Gleichung 2.2. Die Modellierung zur Berechnung des chemischen Quellterms $F(\Psi)$ und der Matrix D der Transportkoeffizienten wird in den folgenden zwei Abschnitten näher erläutert.

2.1 Modellierung der Transportprozesse

In den Erhaltungsgleichungen [77, 117] für Impuls, Energie, Masse und Speziesmasse tauchen Diffusionsstromdichten auf, die über empirische Zusammenhänge beschrieben werden. Insbesondere sind das das NEWTON'sche Schubspannungsgesetz, das FOURIER'sche Wärmeleitungsgesetz und das FICK'sche Diffusionsgesetz sowie die Beschreibung des SORLET-Effekts, des DAFOUR-Effekts und der Druckdiffusion [18, 60]. Diese führen letztendlich zum Transportterm in Gleichung 2.2 mit der Matrix D der Transportkoeffizienten, deren Herleitung ausführlich in [18, 60] beschrieben wird. Weitere Informationen zur Bestimmung von Multikomponenten-Diffusionskoeffizienten aus binären Diffusionskoeffizienten sind in [41] zu finden.

Eine häufig getroffene Vereinfachung ist die Annahme von gleichen Diffusionskoeffizienten D für alle Spezies und LEWIS-Zahl [73] $Le = 1$, mit

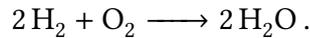
$$Le = \frac{\lambda}{D\rho c_p} . \quad (2.3)$$

Hierbei ist λ die thermische Wärmeleitfähigkeit und c_p die spezifische Wärmekapazität bei konstantem Druck.

2.2 Modellierung der Reaktionskinetik

Zur Berechnung des chemischen Quellterms $F(\Psi)$ werden Informationen über die ablaufenden chemischen Reaktionen und deren Reaktionsgeschwindigkeit

benötigt. Häufig werden chemische Reaktionen als Bruttoreaktionen [6, 117] dargestellt, wie etwa

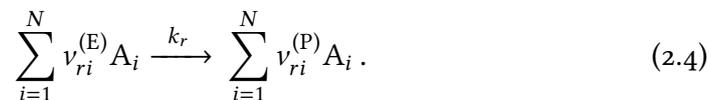


Bruttoreaktionen laufen jedoch auf molekularer Ebene nicht so ab, wie in der Reaktionsgleichung beschrieben. Stattdessen werden in zahlreichen Schritten Bindungen aufgebrochen und neu gebildet und dabei Zwischenprodukte gebildet und wieder abgebaut. Diese grundlegenden Zwischenschritte werden als Elementarreaktion bezeichnet, wenn sie auf molekularer Ebene exakt nach deren jeweiligen Reaktionsgleichung ablaufen und sich auf spezifische, einzelne Moleküle betreffende Prozesse beziehen [6].

Die Reaktionsordnungen von Bruttoreaktionen sind oft gebrochen und die komplizierten Geschwindigkeitsgesetze [6] lassen sich nicht direkt aus den Reaktionsgleichungen ableiten. Im Gegensatz dazu ist die Reaktionsordnung von Elementarreaktionen stets konstant. Sie entspricht der Molekularität der Reaktion und somit der Anzahl der Teilchen, aus denen die Produkte gebildet werden. Die Geschwindigkeitsgesetze für Elementarreaktionen lassen sich daher einfach bestimmen [6, 117]:

- *Unimolekulare* Reaktionen haben ein Zeitgesetz erster Ordnung. Sie beschreiben die Umlagerung oder Dissoziation eines Moleküls.
- *Bimolekulare* Reaktionen haben ein Zeitgesetz zweiter Ordnung. Sie kommen am häufigsten vor.
- *Trimolekulare* Reaktionen haben ein Zeitgesetz dritter Ordnung. Hierbei handelt es sich gewöhnlich um Rekombinationsreaktionen.
- *Höhermolekulare* Reaktionen treten mit einer so geringen Wahrscheinlichkeit auf, dass sie nicht relevant sind.

Ausgehend von den chemischen Spezies A_i kann eine Elementarreaktion r mit den stöchiometrischen Koeffizienten $v_{ri}^{(E)}$ der Edukte (Index »E«) und der Produkte (Index »P«) allgemein formuliert werden:



Dabei bezeichnet k_r den Geschwindigkeitskoeffizienten der Reaktion r . Das Geschwindigkeitsgesetz [62] für die Bildung von Spezies j durch die Elementarreaktion r ergibt sich zu

$$\left(\frac{\partial c_j}{\partial t}\right)_{\text{chem},r} = k_r \left(v_{rj}^{(P)} - v_{rj}^{(E)}\right) \prod_{i=1}^N c_i^{v_{ri}^{(E)}}, \quad (2.5)$$

mit den Konzentrationen c_i der chemischen Spezies i .

Werden nun die Geschwindigkeitsgesetze aller R Elementarreaktionen einer Bruttoreaktion für eine Spezies j aufsummiert, folgt deren Bildungsgeschwindigkeit ω_j :

$$\omega_j = \left(\frac{\partial c_j}{\partial t} \right)_{\text{chem}} = \sum_{r=1}^R k_r \left(v_{rj}^{(P)} - v_{rj}^{(E)} \right) \prod_{i=1}^N c_i^{v_{ri}^{(E)}}. \quad (2.6)$$

Die Geschwindigkeitskoeffizienten der Elementarreaktionen sind stark temperaturabhängig. Die ARRHENIUS-Gleichung [5] beschreibt diese nichtlineare Abhängigkeit mit einem exponentiellen Ansatz:

$$k = \beta \cdot \exp\left(-\frac{E_a}{R_u T}\right), \quad (2.7)$$

bzw. mit einer Modifikation des präexponentiellen Faktors β mit dem Exponent γ :

$$k = \beta' \left(\frac{T}{\text{K}} \right)^\gamma \cdot \exp\left(-\frac{E'_a}{R_u T}\right). \quad (2.8)$$

Dabei entspricht E_a der Aktivierungsenergie, T der Temperatur und R_u der universellen Gaskonstanten. Der präexponentielle Faktor und die Aktivierungsenergie werden auch ARRHENIUS-Parameter genannt.

Des Weiteren gibt es Ansätze, um die Druckabhängigkeit [47, 76] der Geschwindigkeitskoeffizienten zu beschreiben. Im Vergleich zur Temperaturabhängigkeit fällt diese allerdings gering aus.

In der Praxis werden schließlich Elementarreaktionen für ein Bruttoreaktionsszenario mit den entsprechenden ARRHENIUS-Parameter und evtl. weiteren Parametern für die Druckabhängigkeit in einem Reaktionsmechanismus zusammengefasst.

2.3 Modellreduktion

Abhängig vom verwendeten detaillierten Modell für die Reaktionskinetik umfasst der Zustandsvektor schon für kleine Kohlenwasserstoffe eine große Anzahl an Spezies. So wird beispielsweise die Verbrennung von Methan mit Luft mit einem Reaktionsmechanismus von 34 Spezies über 159 Elementarreaktionen beschrieben [57, 116]. Bei technisch relevanten, höheren Kohlenwasserstoffen, wie n-Heptan oder iso-Oktan, ergeben sich so sehr große Reaktionsmechanismen mit über tausend Spezies in mehreren tausend Reaktionen [34, 35]. Für die Beschreibung von mehrkomponentigen Modellkraftstoffen werden oft mehrere Mechanismen zusammengefügt oder erweitert, so werden Mischungen aus n-

Heptan, iso-Oktan und Toluol als *toluene reference fuel* (TRF) bezeichnet und mit sehr umfangreichen Reaktionsmechanismen beschrieben [2, 4, 86]. Entsprechend groß wird damit die Dimension des detaillierten Zustandsvektors Ψ und des zu lösenden Gleichungssystems 2.2. Zusätzlich zur hohen Dimensionalität stellt die Steifigkeit [80, 104], resultierend aus der Vielfalt unterschiedlicher Zeitskalen der chemischen Prozesse, eine weitere Anforderung an die numerische Lösung des Differentialgleichungssystems dar.

Obwohl die Rechenkapazität stetig steigt und die numerischen Verfahren immer effizienter werden, würde die numerische Lösung dieses steifen und hochdimensionalen partiellen Differentialgleichungssystems für komplexe reagierende Strömungen selbst auf aktuellen, leistungsstarken Supercomputern zu extrem langen Rechenzeiten führen und die Speicherplatzanforderungen weit übersteigen. Es besteht daher auch in Zukunft eine erhöhte Nachfrage nach reduzierten Modellen [104], die sowohl die große Dimensionalität als auch die Steifigkeit und Nichtlinearität der chemischen Kinetik bewältigen.

In der Vergangenheit wurden zahlreiche Ansätze zur Modellreduktion entwickelt, von denen hier einige (ohne Anspruch auf Vollständigkeit) aufgeführt werden. Die Vor- und Nachteile der verschiedenen Konzepte werden unter anderem in [51, 104] diskutiert.

Quasi steady-state approximation (QSSA) [100, 117] Bei diesem Konzept wird angenommen, dass die jeweiligen Bildungs- und Zerfallsraten von bestimmten Spezies gleich groß sind und sich deren Konzentrationen somit mit der Zeit quasistationär verhalten. Damit ergeben sich aus den Differentialgleichungen der Bildungsgesetze algebraische Gleichungen, wodurch der Aufwand zur Lösung des gesamten differential-algebraischen Gleichungssystems sinkt.

Partial equilibrium assumption (PEA) [100, 117] Die Annahme, dass sich für einige Elementarreaktionen die Hin- und Rückreaktion im partiellen Gleichgewicht befinden, führt ebenfalls zu algebraischen Gleichungen mit denen das Differentialgleichungssystem zu einem leichter zu lösenden differential-algebraischen Gleichungssystem umgeformt werden kann.

Flamelet-Konzept [96, 97] Die Struktur einer turbulenten Flamme wird lokal durch planare Flammenelemente, sogenannte *flamelets* abgebildet. Damit wird die Behandlung der turbulenten Strömung und der chemischen Kinetik voneinander entkoppelt.

Computational singular perturbation (CSP) [74] Durch eine Eigenwertanalyse der JACOBI-Matrix des beschreibenden Differentialgleichungssystems

können schnelle Prozesse identifiziert werden. Sinkt nach einer gewissen Zeit der Einfluss eines solchen Prozesses auf die Gesamtdynamik kann er für die weitere Entwicklung des Systems vernachlässigt werden. Dadurch wird zusätzlich die Steifigkeit des Differentialgleichungssystems verringert, was größere Zeitschritte bei der numerischen Lösung ermöglicht.

Intrinsic low-dimensional manifold (ILDM) [80, 81] Dieses Konzept basiert ebenfalls auf einer Eigenwertanalyse der JACOBI-Matrix des beschreibenden Differentialgleichungssystems. Allerdings werden hierbei schnelle und langsame chemische Prozesse entkoppelt um eine niedrigdimensionale Mannigfaltigkeit im Zustandsraum zu identifizieren.

Flame prolongation of ILDM (FPI) [46] Ein Nachteil der ILDM-Methode [80, 81] ist, dass die Mannigfaltigkeit im Bereich der langsamen Niedertemperaturkinetik nicht existiert. Der FPI-Ansatz erweitert deshalb die ILDM in diesem Bereich mit laminaren, vorgemischten Flammen.

Flamelet generated manifold (FGM) [93, 114] Ohne die Beschränkungen, etwa auf stationäre Flammen, ist dieses Konzept die Verallgemeinerung des *flamelet*-Ansatzes [96, 97].

Global quasi-linearization (GQL) [27] Das Konzept berechnet eine niedrigdimensionale Mannigfaltigkeit im Zustandsraum auf Basis einer Eigenwertanalyse, ähnlich dem ILDM-Ansatz. Dazu wird das Vektorfeld des Systems linearisiert und die Linearisierungsmatrix, im Gegensatz zur JACOBI-Matrix bei ILDM, für die Eigenwertanalyse verwendet.

Reaction-diffusion manifold (REDIM) [29, 30, 78] Mit Hilfe dieser Reduktionsmethode wird eine niedrigdimensionale Mannigfaltigkeit im Zustandsraum ermittelt, so dass die Dynamik des beschreibenden Differentialgleichungssystems im Tangentialraum der Mannigfaltigkeit liegt. Durch die zusätzliche Vorgabe räumlicher Gradienten wird dabei eine Mannigfaltigkeit berechnet, die neben chemischer Reaktion auch diffusive Transporteffekte berücksichtigt.

Progress-variable model (PVM) [61, 63, 72, 118] Bei diesem empirischen Modellansatz wird die Dynamik einer Reaktionstrajektorie auf eine sogenannte Fortschrittsvariable abgebildet.

Minimum entropy production trajectory (MEPT) [75] Durch die Vorgabe einer minimalen Entropieproduktion wird eine Trajektorie berechnet, bei der

alle Prozesse maximal relaxiert sind, bis auf einen, der Fortschrittsvariablen, der die Trajektorie parametrisiert.

Einige Verfahren lassen sich unter dem Begriff *manifold*-Methoden zusammenfassen [51]. Sie nutzen die natürliche Multiskalenstruktur des Systems aus.

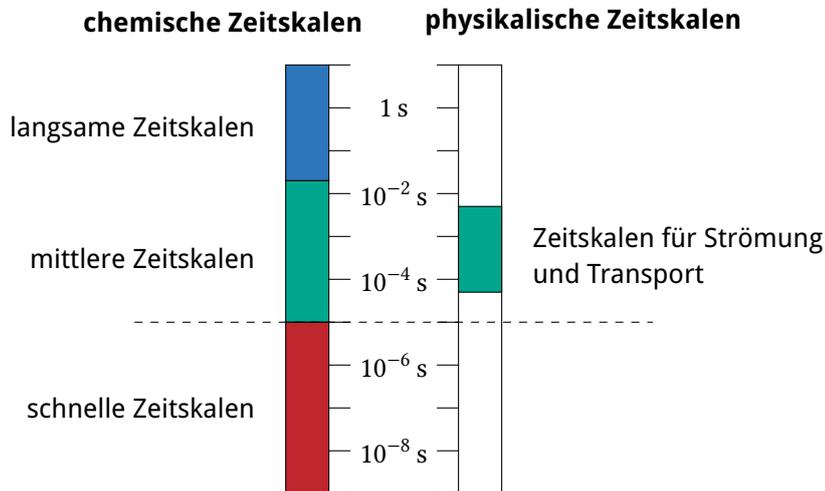


Abbildung 2.1: Schematische Darstellung der chemischen und physikalischen Zeitskalen in einer reagierenden Strömung [117]

Betrachtet man die physikalischen und chemischen Prozesse in einer Flamme (Strömung, molekularer Transport und chemische Reaktion), unterscheiden sich diese hinsichtlich der Zeitskalen in mehreren Größenordnungen. Abbildung 2.1 zeigt schematisch ein typisches Zeitskalenspektrum in einer Flamme [117]. Chemische Reaktionen in Verbrennungsprozessen spielen sich üblicherweise im Bereich zwischen 10^{-9} und 10^2 s ab. Physikalische Prozesse hingegen bewegen sich in einem sehr viel kleineren Zeitskalenbereich.

Ausgehend von einem n -dimensionalen Zustandsraum wird nun angenommen, dass es n^* schnelle Prozesse gibt, die schnell relaxieren und nach einer kurzen Relaxationszeit nur die $m = n - n^*$ langsamen Prozesse die Gesamtdynamik des Systems bestimmen. Daraus folgt, dass die Langzeitentwicklung des Systems in erster Linie durch die Dynamik der langsamen Reaktionen entlang eines stabilen Attraktors im Zustandsraum beschrieben wird. Dieser niedrigdimensionale Unterraum des Zustandsraums wird als Mannigfaltigkeit \mathcal{M} bzw. *manifold* bezeichnet [30]:

$$\mathcal{M} = \{ \Psi : \Psi = \Psi(\theta), \theta \in \mathbb{R}^m, \Psi \in \mathbb{R}^n \} . \quad (2.9)$$

Hierbei ist θ der m -dimensionale Vektor der lokalen Koordinaten auf der Mannigfaltigkeit.

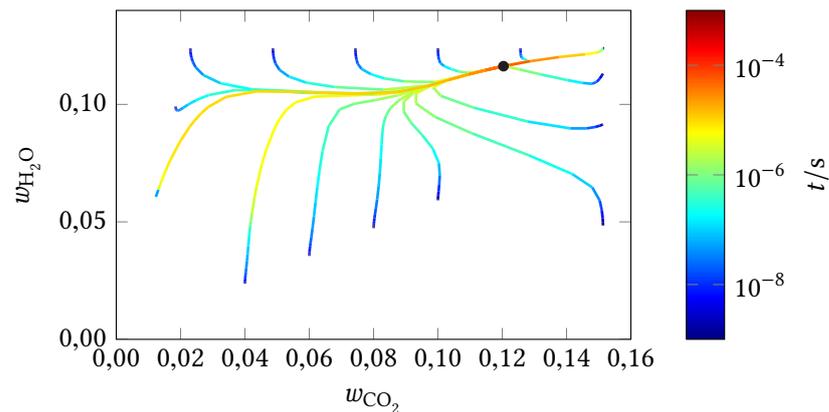


Abbildung 2.2: Schnelle Relaxation auf eine Mannigfaltigkeit am Beispiel von homogenen, adiabatichen, isobaren Reaktionstrajektorien mit unterschiedlichen Anfangszusammensetzungen für ein Methan/Luft-Gemisch [57, 116] bei $\phi = 1$, $T = 1000 \text{ K}$, $p = 10 \text{ bar}$, der schwarze Punkt markiert das chemische Gleichgewicht

Um dieses Verhalten zu veranschaulichen, zeigt Abbildung 2.2 die zeitliche Entwicklung einiger homogener, adiatischer, isobarer Reaktoren für ein Methan/Luft-Gemisch. Die Anfangszusammensetzungen unterscheiden sich unter den Bedingungen konstanter Elementzusammensetzung, Enthalpie und Druck. Damit wird gewährleistet, dass alle Reaktoren im identischen chemischen Gleichgewicht enden. In der zweidimensionalen Darstellung von Abbildung 2.2 ist deutlich zu erkennen, dass, wie oben beschrieben, alle Reaktoren sehr schnell auf eine eindimensionale Struktur relaxieren, auf der die weitere Entwicklung des Systems bis ins chemische Gleichgewicht stattfindet.

Da die schnellen Prozesse sehr schnell auf die m -dimensionale Mannigfaltigkeit relaxieren, können sie als abgeschlossen betrachtet werden [51]. Mit dieser Annahme beschränkt sich die Dynamik des Systems ausschließlich auf die m -dimensionale Mannigfaltigkeit, wodurch eine Beschreibung des Systems mit dem n -dimensionalen Gleichungssystem 2.2 überbestimmt wäre. Die Entwicklung des Systems auf der Mannigfaltigkeit kann somit ohne weiteren Informationsverlust mit der Entwicklung der lokalen Koordinaten der Mannigfaltigkeit bzw. des m -dimensionalen reduzierten Zustandsvektors θ beschrieben werden.

Die Herleitung der Erhaltungsgleichungen für den reduzierten Zustandsvektor erfolgt aus den Erhaltungsgleichungen 2.2 des detaillierten Zustands. Wird dabei der reduzierte Zustandsvektor über konstante Linearkombinationen chemischer Spezies bestimmt, beschreibt die Matrix C den Zusammenhang zwischen

detailliertem und reduziertem Zustand:

$$\boldsymbol{\theta} = \mathbf{C}\boldsymbol{\Psi} . \quad (2.10)$$

In einem Beispiel mit dem thermo-chemischen Zustandsvektor

$$\boldsymbol{\Psi} = \left(h, p, \frac{w_{\text{N}_2}}{M_{\text{N}_2}}, \frac{w_{\text{CO}_2}}{M_{\text{CO}_2}}, \frac{w_{\text{H}_2\text{O}}}{M_{\text{H}_2\text{O}}}, \dots \right)^T \quad (2.11)$$

wird der reduzierte Zustandsvektor für die ($m = 2$)-dimensionale Mannigfaltigkeit etwa über Stickstoff (N_2) und Kohlenstoffdioxid (CO_2) beschrieben:

$$\boldsymbol{\theta} = \left(\frac{w_{\text{N}_2}}{M_{\text{N}_2}}, \frac{w_{\text{CO}_2}}{M_{\text{CO}_2}} \right)^T . \quad (2.12)$$

Die Matrix \mathbf{C} hat in diesem Fall die Form

$$\mathbf{C} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & \dots \end{pmatrix} . \quad (2.13)$$

Die Multiplikation von Gleichung 2.2 mit der Matrix \mathbf{C} [51] führt schließlich auf das System der Erhaltungsgleichungen für den reduzierten Zustandsvektor:

$$\frac{\partial \boldsymbol{\theta}}{\partial t} = \mathbf{C}\mathbf{F}(\boldsymbol{\Psi}(\boldsymbol{\theta})) + \mathbf{C} \frac{1}{\rho} \text{div}(\mathbf{D} \text{grad}(\boldsymbol{\Psi}(\boldsymbol{\theta}))) - \mathbf{v} \text{grad}(\boldsymbol{\theta}) . \quad (2.14)$$

Im Falle des oben genannten Beispiels ergeben sich direkt die zwei Erhaltungsgleichungen für Stickstoff und Kohlenstoffdioxid.

Eine weitere Möglichkeit ist die Herleitung der Erhaltungsgleichungen für einen beliebigen reduzierten Zustandsvektor $\boldsymbol{\theta}$ über die Anwendung der Kettenregel auf Gleichung 2.2 [51]:

$$\frac{\partial \boldsymbol{\Psi}(\boldsymbol{\theta})}{\partial t} = \boldsymbol{\Psi}_\theta \frac{\partial \boldsymbol{\theta}}{\partial t} = \boldsymbol{\Phi}(\boldsymbol{\Psi}(\boldsymbol{\theta})) , \quad (2.15)$$

wobei $\boldsymbol{\Psi}_\theta$ die JACOBI-Matrix bezeichnet:

$$(\boldsymbol{\Psi}_\theta)_{ij} = \frac{\partial \Psi_i}{\partial \theta_j} . \quad (2.16)$$

Durch Multiplikation mit der MOORE-PENROSE-Pseudoinversen $\boldsymbol{\Psi}_\theta^+$ [48] folgt

$$\boldsymbol{\Psi}_\theta^+ \frac{\partial \boldsymbol{\Psi}(\boldsymbol{\theta})}{\partial t} = \frac{\partial \boldsymbol{\theta}}{\partial t} = \boldsymbol{\Psi}_\theta^+ \boldsymbol{\Phi}(\boldsymbol{\Psi}(\boldsymbol{\theta})) . \quad (2.17)$$

Werden die räumlichen Gradienten ebenfalls über die Kettenregel berechnet:

$$\text{grad}(\Psi(\theta)) = \Psi_{\theta} \text{grad}(\theta), \quad (2.18)$$

ergibt sich das System der Erhaltungsgleichungen für den reduzierten Zustandsvektor in Vektorform:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \Psi_{\theta}^+ F(\Psi(\theta)) + \Psi_{\theta}^+ \frac{1}{\rho} \text{div}(\mathbf{D} \Psi_{\theta} \text{grad}(\theta)) - \mathbf{v} \text{grad}(\theta). \quad (2.19)$$

Mit Hilfe der reduzierten Erhaltungsgleichungen lässt sich nun die Entwicklung eines Systems auf einer Mannigfaltigkeit beschreiben. Die Dimension m des beschreibenden Differentialgleichungssystems aus Gleichung 2.14 oder Gleichung 2.19 ist dabei um einiges geringer als die Dimension n der detaillierten Erhaltungsgleichungen 2.2 ($m \ll n$). Die Terme

$$S(\theta) = \mathbf{C}F(\Psi(\theta)) \quad \text{bzw.} \quad S(\theta) = \Psi_{\theta}^+ F(\Psi(\theta)) \quad (2.20)$$

bezeichnen dabei den reduzierten chemischen Quellterm.

Neben der Reduktion der Dimension wird durch das Entfernen der schnellen Prozesse die Steifigkeit des Differentialgleichungssystems verringert [80]. Dies wiederum ermöglicht größere Zeitschritte bei der Integration und löst daher eines der Hauptprobleme der numerischen Integration der chemischen Quellterme.

3

Modellreduktion und -kopplung

Als Motivation für diese Arbeit wurden in Abbildung 1.1 die Phänomene in einem kompressionsgezündeten Motor skizziert und beschrieben. Wie dort erläutert, erscheinen in der Praxis eines CAI-Motors verschiedene Verbrennungsszenarien sowohl räumlich als auch zeitlich parallel. So beginnt die Verbrennung in solchen Motoren mit der Selbstzündung an einem bestimmten Ort, an dem die lokalen Bedingungen diese begünstigen, etwa durch eine leicht erhöhte Temperatur (Hot-Spot) [54]. Die Transportvorgänge an dieser Stelle sind häufig schwach, so dass der Prozess vor und während einer Selbstzündung fast ausschließlich durch die Reaktionsquellterme bestimmt wird. Nach der Zündung erzeugen die schnellen chemischen Reaktionen Verbrennungsprodukte und hohe Temperaturen, wodurch starke Gradienten aufgebaut werden. Die dadurch entstehenden Transportprozesse an der Grenze des Hot-Spots führen dazu, dass sich eine flammenartige Reaktionsfront ausbreitet.

Die in Abschnitt 2.3 genannten Modelle verfügen über teilweise weite Anwendungsbereiche, haben jedoch stets den Nachteil einer sehr starren Behandlung der Wechselwirkung zwischen chemischer Reaktion und molekularem Transport [51, 104]. Die Einleitung der Verbrennung in einem CAI-Motor wird daher durch ein auf homogene Selbstzündung zugeschnittenes Modell gut abgebildet. Die anschließende Flamme, mit durch Transport angetriebenem Ausbreitungsmodus wird jedoch mit einem *flamelet*-ähnlichen Modell besser beschrieben. Im Bild der niedrigdimensionalen Mannigfaltigkeiten [104] würden sich damit Zustandspunkte zwischen den Modelle-Mannigfaltigkeit dieser beiden Extremfälle bewegen. Die große Herausforderung bei der Modellierung der Selbstzündung und Flammenausbreitung liegt somit in der unterschiedlich starken Kopplung von chemischer Reaktion und molekularem Transport.

In dieser Arbeit wird deshalb ein erweiterter Ansatz verfolgt, der die unterschiedliche Stärke der Wechselwirkung von chemischer Kinetik und molekularem

Transport in die Konstruktion von verschiedenen Mannigfaltigkeiten einbezieht [12–14]. Ein erster Ansatz ist die Bereitstellung unterschiedlicher Mannigfaltigkeiten \mathcal{M}^α für verschieden starke Störungen der chemischen Kinetik durch molekularen Transport. Die Stärke der Störung wird dabei über einen Parameter α dargestellt. Dies ist vergleichbar zum *flamelet*-Konzept [97], bei dem die skalare Dissipationsrate verwendet wird, um die Störung der chemischen Reaktion zu charakterisieren. Dieser Ansatz ist für das *flamelet*-Konzept gut geeignet, birgt jedoch im allgemeinen Rahmen der Mannigfaltigkeits-Methoden einige Schwierigkeiten:

- Für verschiedene Verbrennungsregimes könnten unterschiedliche Reduktionsstrategien optimal sein. Das würde zu verschiedenen Darstellungen der Mannigfaltigkeiten führen.
- Für eine erfolgreiche Kopplung der Mannigfaltigkeiten muss ein zusätzlicher Parameter α definiert und damit die verschiedenen Mannigfaltigkeiten charakterisiert werden.
- Verschiedene Mannigfaltigkeiten müssen nicht zwingend über die gleichen Variablen zur Parametrierung verfügen. Dies kann zu Schwierigkeiten führen, wenn die Mannigfaltigkeiten in Kombination verwendet werden. Es ist ein zentraler Punkt, eine einheitliche Parametrierung für alle Mannigfaltigkeiten zu finden.
- Für den Übergang zwischen verschiedenen Mannigfaltigkeiten muss im detaillierten Zustandsraum eine Projektionsrichtung für die reduzierten Variablen gefunden werden. Für eine praktische Implementierung der Methode hängt dieser Punkt in wesentlichem Maße mit der Parametrisierung der Mannigfaltigkeiten zusammen.

Die im Folgenden vorgestellte Methodik ist allgemein anwendbar, wird jedoch im Rahmen dieser Arbeit mit dem Konzept der *reaction-diffusion manifold* (REDIM) [29, 30, 110] veranschaulicht. Des Weiteren wird ein *progress-variable model* (PVM) [61, 118] verwendet, das einen Extremfall in Bezug auf die Stärke der Reaktions-Diffusions-Kopplung darstellt. Dieser Spezialfall wird später behandelt, doch zunächst werden beide Modellansätze näher erläutert. Darüber hinaus werden die oben genannten Schlüsselpunkte behandelt und die Erweiterung der mannigfaltigkeitsbasierten Modelle in Bezug auf variierende Reaktions-Diffusions-Kopplung diskutiert.

3.1 Modell für gekoppelte Reaktions-Diffusions-Szenarien

Das REDIM-Konzept [29, 30, 78] berücksichtigt explizit die Kopplung von chemischer Reaktion mit diffusiven Transportprozessen. Es erlaubt eine sehr flexible Behandlung dieser Kopplung. Das REDIM-Konzept wird im Detail in [29, 30, 78] beschrieben. Hier wird im Folgenden nur ein kurzer Überblick über die Methode aufgezeigt.

3.1.1 Mathematische Beschreibung

Folgt man dem in Abschnitt 2.3 erwähnten Konzept der Zerlegung der Zeitskalen und der invarianten Mannigfaltigkeiten, wird angenommen, dass die Entwicklung eines Reaktionssystems Teil eines m -dimensionalen Unterraums bzw. der Mannigfaltigkeit \mathcal{M} im n -dimensionalen Zustandsraums ist:

$$\mathcal{M} = \{ \Psi : \Psi = \Psi(\theta), \theta \in \mathbb{R}^m, \Psi \in \mathbb{R}^n \}. \quad (3.1)$$

Hier bezeichnet Ψ den n -dimensionalen, detaillierten Zustandsvektor und θ den m -dimensionalen Vektor der lokalen Koordinaten auf der Mannigfaltigkeit, wobei $m \ll n$ ist.

Das bedeutet, dass für Zustände auf der Mannigfaltigkeit das Vektorfeld, das durch die rechte Seite $\Phi(\Psi)$ von Gleichung 2.2 beschrieben wird, im Tangentialraum der Mannigfaltigkeit liegt. Zustände außerhalb der Mannigfaltigkeit relaxieren nach kurzer Zeit aufgrund der schnellen Prozesse auf die Mannigfaltigkeit. Da die Mannigfaltigkeit \mathcal{M} den langsamen Unterraum repräsentiert, entspricht der Normalenraum \mathcal{M}_\perp dem schnellen Unterraum des Zustandsraums. In [30] wird deshalb vorgeschlagen, die rechte Seite $\Phi(\Psi)$ von Gleichung 2.2 mit dem Projektionsoperator \mathbf{P}_\perp in den Normalenraum der schnellen Prozesse zu projizieren. Ausgehend von einer Anfangsmannigfaltigkeit $\Psi_0 \in \mathcal{M}_0$ kann dann die Mannigfaltigkeit über eine Pseudointegrationszeit t nach folgendem partiellen Differentialgleichungssystem entwickelt werden:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \mathbf{P}_\perp \cdot \Phi(\Psi). \quad (3.2)$$

Der Projektionsoperator \mathbf{P}_\perp berechnet sich dabei aus der Projektion \mathbf{P}_\parallel entlang des Normalenraums in den Tangentialraum der Mannigfaltigkeit nach [87] zu

$$\mathbf{P}_\perp = I - \mathbf{P}_\parallel, \quad (3.3)$$

mit

$$\mathbf{P}_{\parallel} = (\Psi_{\theta} \Psi_{\theta}^{\perp}) \begin{pmatrix} \mathbf{I} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} (\Psi_{\theta} \Psi_{\theta}^{\perp})^{-1}, \quad (3.4)$$

$$\mathbf{P}_{\parallel} = \Psi_{\theta} (\Psi_{\theta}^T \Psi_{\theta})^{-1} \Psi_{\theta}^T, \quad (3.5)$$

$$\mathbf{P}_{\parallel} = \Psi_{\theta} \Psi_{\theta}^{+}. \quad (3.6)$$

Dabei stellt \mathbf{I} die Einheitsmatrix dar, Ψ_{θ} die JACOBI-Matrix der Mannigfaltigkeit, Ψ_{θ}^{\perp} deren orthogonales Komplement [87] und Ψ_{θ}^{+} deren MOORE-PENROSE-Pseudoinversen [48].

Schließlich ergibt sich die Entwicklungsgleichung der Mannigfaltigkeit [30, 78]:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = (\mathbf{I} - \Psi_{\theta} \Psi_{\theta}^{+}) \cdot \left(F(\Psi) - \frac{1}{\rho} (D\Psi_{\theta} \xi)_{\theta} \xi \right). \quad (3.7)$$

Hierbei müssen Anfangs- und Randbedingungen festgelegt werden, was in Unterabschnitt 3.1.2 weiter beschrieben wird. Des Weiteren wird eine Abschätzung ξ für die räumlichen Gradienten $\text{grad}(\theta)$ der lokalen Koordinaten θ benötigt. In Unterabschnitt 3.1.3 wird darauf näher eingegangen. Das genaue Vorgehen zur Generierung der Anfangslösung, Abschätzung der räumlichen Gradienten und Lösung der Entwicklungsgleichung wird auch in [30, 110] und insbesondere in [109] ausführlich beschrieben.

Durch Lösen von Gleichung 3.7 für $t \rightarrow \infty$ erhält man die Mannigfaltigkeit \mathcal{M} als stationäre Lösung $\Psi^{\mathcal{M}}$ und als Funktion einer m -dimensionalen, globalen Parametrisierung θ :

$$\Psi^{\mathcal{M}} = \Psi(\theta). \quad (3.8)$$

Da zudem die Invarianzbedingung

$$(\mathbf{I} - \Psi_{\theta} \Psi_{\theta}^{+}) \cdot \Phi(\Psi) = 0 \quad (3.9)$$

erfüllt ist, handelt es sich bei der hier berechneten Mannigfaltigkeit um eine langsame, invariante Mannigfaltigkeit bzw. *slow invariant manifold* (SIM) [31].

3.1.2 Anfangs- und Randbedingungen

Wie erwähnt, wird zum Lösen der REDIM-Entwicklungsgleichung 3.7 eine Anfangslösung benötigt. Die REDIM als stationärer Lösung der Entwicklungsgleichung hängt dabei nicht von der Anfangslösung ab. Allerdings kann durch eine geschickte Wahl der Anfangslösung die Lösung beschleunigt und eine stabile Konvergenz der Integration gewährleistet werden.

In [30] wird vorgeschlagen, eine erweiterte ILDM [28] als Anfangslösung zu verwenden. Eine weitere Möglichkeit ist die Vorgabe einer FGM [114] als Anfangslösung, also einer Zusammenstellung aus Profilen detaillierter, eindimensionaler Flammenrechnungen. Durch Variation eines oder mehrerer Parameter, wie etwa der Streckungsrate oder der Gemischzusammensetzung, lässt sich dabei auch eine zwei- oder mehrdimensionale Anfangslösung für die REDIM-Integration erstellen.

Über lokale Koordinaten θ auf der Mannigfaltigkeit, wie in Abbildung 3.1 dargestellt, können die JACOBI-Matrix Ψ_θ und deren MOORE-PENROSE-Pseudoinverse Ψ_θ^+ berechnet werden.

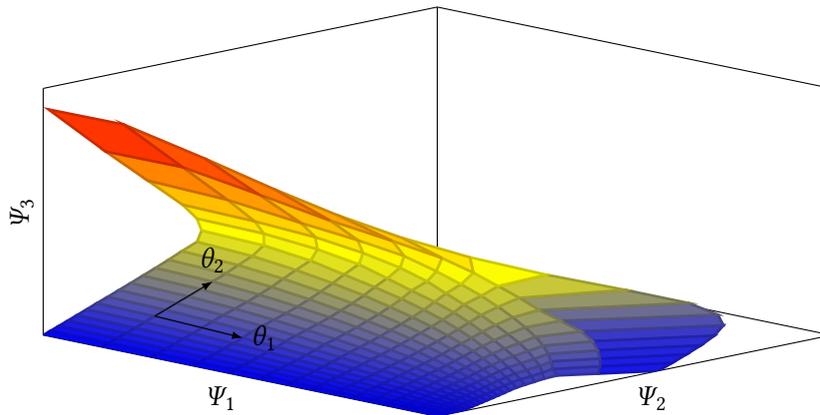


Abbildung 3.1: Lokale Koordinaten auf der REDIM-Anfangslösung

Aufgrund der einfachen Implementierung werden für die Lösung der REDIM-Entwicklungsgleichung 3.7 DIRICHLET-Randbedingungen vorgegeben. Dadurch werden über die Anfangslösung auch die Ränder der Mannigfaltigkeit festgelegt, weswegen eine geschickte Wahl der Anfangslösung umso entscheidender wird. Inwieweit allgemeine Randbedingungen und beliebige Anfangslösungen gewählt werden können und sich auf die Stabilität der Lösung auswirken, muss und wird in weiteren Arbeiten untersucht [89].

3.1.3 Abschätzung räumlicher Gradienten

Neben der Anfangslösung wird zum Lösen der REDIM-Entwicklungsgleichung 3.7 eine Abschätzung ξ der räumlichen Gradienten der lokalen Koordinaten benötigt. Die einfachste Möglichkeit ist die Vorgabe konstanter, globaler Gradienten C des reduzierten Zustands [30]:

$$\xi = C. \quad (3.10)$$

Ferner wird in [27] eine iterative Anpassung der Gradienten vorgeschlagen. Hierbei wird eine REDIM mit einer konstanten Gradientenabschätzung erzeugt, mit der eine reduzierte Berechnung des zu untersuchenden Systems durchgeführt wird. Ist der reduzierte Zustand θ eine globale Parametrisierung der REDIM, lassen sich die aus der reduzierten Rechnung erhaltenen räumlichen Gradienten direkt als genauere Abschätzung für eine weitere REDIM einsetzen:

$$\xi = \text{grad}(\theta) . \quad (3.11)$$

Dieses Vorgehen kann bis zur gewünschten Konvergenz wiederholt werden.

Eine weitere Variante ist das Berechnen der Gradienten der lokalen Koordinaten aus detaillierten Ergebnissen $\hat{\Psi}(\mathbf{x})$, etwa aus einer DNS. \mathbf{x} bezeichnet hier die Ortskoordinate. Die detaillierten Zustände $\hat{\Psi}(\mathbf{x})$ der Gradientenabschätzung liegen allerdings, wie in Abbildung 3.2 vereinfacht dargestellt, nicht zwingend auf der Anfangslösung oder der entwickelten Mannigfaltigkeit \mathcal{M} . Um zunächst einen Zusammenhang zwischen den Zuständen $\Psi^{\mathcal{M}}$ auf der Mannigfaltigkeit und $\hat{\Psi}$ zu finden, wird der minimale quadratische Abstand der Zustände bestimmt. Im Falle von diskreten Zustandspunkten kann dies etwa über eine *Nächster-Nachbar-Suche* [68] erfolgen. Hierbei kann es sinnvoll sein, nur den Abstand bestimmter Komponenten des Zustandsvektors zu berücksichtigen [109], was durch die gestrichelten Pfeile in Abbildung 3.2 angedeutet ist.

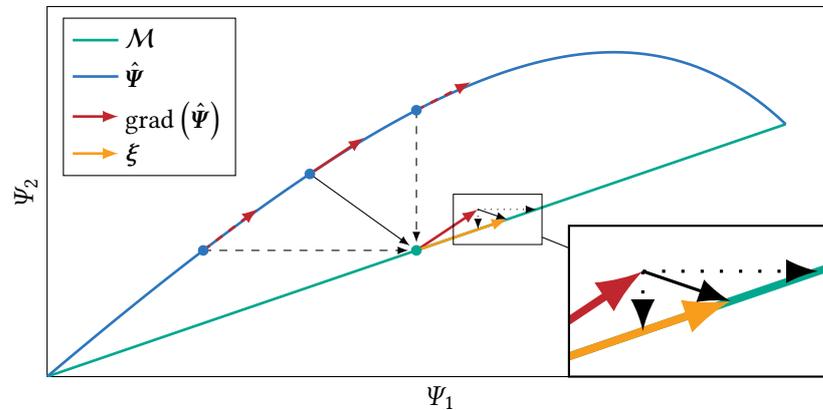


Abbildung 3.2: Veranschaulichung der Projektion einer detaillierten Gradientenabschätzung für die REDIM-Entwicklung in den Tangentialraum der Mannigfaltigkeit, gestrichelt: Projektion der Zustände $\hat{\Psi}$ auf die Mannigfaltigkeit \mathcal{M} , gepunktet: Projektion der Gradienten $\text{grad}(\hat{\Psi})$ in den Tangentialraum der Mannigfaltigkeit

Die detaillierten Gradienten müssen nun in den Tangentialraum der Mannigfaltigkeit projiziert werden. Folgende Beziehung beschreibt entsprechend

den Erläuterungen zu Gleichung 3.3 bis 3.6, eine senkrechte Projektion auf die Mannigfaltigkeit:

$$\xi = \Psi_{\theta}^{+} \text{grad} \left(\hat{\Psi}(\mathbf{x}) \right). \quad (3.12)$$

Alternativ können auch nur die Gradienten bestimmter Komponenten des Zustandsvektors $\hat{\Psi}$ berücksichtigt oder kombiniert und so die Projektionsrichtung angepasst werden [109]. In Abbildung 3.2 wird dies durch die gepunkteten Pfeile angedeutet.

Die beliebige Vorgabe der Gradienten ist ein wesentliches Merkmal des REDIM-Konzepts und stellt dadurch eine enorm flexible Möglichkeit der Anwendung auf unterschiedliche Verbrennungsszenarien dar. Im Kontext dieser Arbeit ist dies ein großer Vorteil, da es dadurch möglich ist, einen Parameter für die räumlichen Gradienten einzuführen. Dies wird in Unterabschnitt 3.3.1 aufgegriffen.

Die Niedertemperaturchemie, wie etwa in der Vorwärmzone einer vorgemischten Flamme, ist sehr komplex und steif und lässt sich daher nur mit höherdimensionalen Mannigfaltigkeiten beschreiben [28, 46]. Da die chemischen Prozesse in diesem Bereich allerdings auch sehr langsam sind, dominieren hier die diffusiven Transportprozesse, was die Beschreibung der Systemdynamik mit einer niedrigdimensionalen REDIM ermöglicht. Für den Fall ohne räumliche Gradienten, also $\xi = 0$ fallen die Transportterme in Gleichung 2.2 weg und es bleibt nur der chemische Quellterm übrig. Die REDIM-Gleichung geht so in die Entwicklungsgleichung der langsamen Mannigfaltigkeit bzw. *slow manifold* [88] über. Dabei tritt die erwähnte Schwierigkeit auf, den Bereich der »langsamen Chemie« zu beschreiben. So ist nicht gewährleistet, dass typische physikalische Randbedingungen, wie etwa ein unverbranntes Kraftstoff/Luft-Gemisch auf der langsamen Mannigfaltigkeit liegen. Eine Projektion der Zustände auf die Mannigfaltigkeit würde dann benötigt.

Für die Beschreibung von Selbstzündungsprozessen ist jedoch die Entwicklung gerade im Bereich der »langsamen Chemie« interessant. Aus diesem Grund wird mit dem PVM ein weiteres Teilmodell in Abschnitt 3.2 eingeführt, das diesen Fall der Zündprozesse ohne Reaktions-Diffusions-Kopplung explizit und robust behandelt.

3.2 Modell für homogene Zündprozesse

Homogene Zündprozesse werden ausschließlich von der chemischen Kinetik bestimmt. Durch die Homogenität existieren keine Transportprozesse, die mit der chemischen Kinetik koppeln und eine räumlich nulldimensionale Beschreibung erlauben. Das PVM [61, 118] basiert auf detaillierten Berechnungen von homogenen, adiabatischen, isobaren Reaktoren und berücksichtigt somit die absolute

Dominanz der chemischen Kinetik, die einem homogenen Zündprozess zugrunde liegt.

Das Modell folgt dem Konzept der *trajectory generated low dimensional manifold* (TGLDM) [106], wobei die Dynamik einer Reaktionstrajektorie auf eine einzige Variable, die Fortschrittsvariable, abgebildet wird. Durch die Berechnung homogener Reaktionssysteme für unterschiedliche Anfangsbedingungen kann ein großer Bereich von physikalischen Bedingungen wie Temperatur, Druck, oder chemische Zusammensetzung in das Modell integriert werden.

3.2.1 Mathematische Beschreibung

Mit dem in Gleichung 2.1 eingeführten thermo-chemischen Zustandsvektor und den Vereinfachungen für ein homogenes, adiabatisches, isobares Reaktionssystem ergibt sich das System der Erhaltungsgleichungen aus Gleichung 2.2 in Vektorform zu:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = F(\Psi) . \quad (3.13)$$

Der chemische Quellterm

$$F(\Psi) = \left(0, 0, \frac{\omega_1}{\rho}, \dots, \frac{\omega_N}{\rho} \right)^T \quad (3.14)$$

berechnet sich für eine Spezies i (N ist die Anzahl der Spezies) aus deren Bildungsgeschwindigkeit ω_i (vgl. Gleichung 2.6).

Durch numerisches Lösen dieses Differentialgleichungssystems für gegebene Anfangsbedingungen $\Psi_0 = \Psi(t=0)$ kann die zeitliche Entwicklung des homogenen Reaktors $\Psi(\Psi_0, t)$ berechnet werden. Damit ist bei festgelegten Anfangsbedingungen die Reaktionstrajektorie mit der Zeit parametrisiert und darüber zu jedem Zeitpunkt der detaillierte Zustand bekannt.

Die Trajektorie kann durch die Wahl einer geeigneten Fortschrittsvariablen χ reparametrisiert werden:

$$\Psi(\Psi_0, t) \rightarrow \Psi(\Psi_0, \chi) . \quad (3.15)$$

Durch die Variation der Anfangsbedingungen über die Parameter

$$\theta^* = (\theta_1^*, \dots, \theta_{m^*}^*)^T , \quad (3.16)$$

wie etwa die Enthalpie h oder das Äquivalenzverhältnis ϕ , wird nun ein *manifold generator* [106] definiert, wodurch die Anfangsbedingungen eine m^* -dimensionale Mannigfaltigkeit bilden. Mit der Reaktionsfortschrittsvariablen χ als zusätzliche

Koordinate ergibt sich der Unterraum der Trajektorien somit als m -dimensionale Mannigfaltigkeit, mit $m = m^* + 1$. Der detaillierte Zustand Ψ lässt sich damit im Unterraum der Trajektorien bzw. auf der Mannigfaltigkeit \mathcal{M} durch den m -dimensionalen reduzierten Zustandsvektor

$$\theta = (\chi, (\theta^*)^T)^T \quad (3.17)$$

beschreiben:

$$\Psi^{\mathcal{M}} = \Psi(\theta) . \quad (3.18)$$

In Abbildung 3.3 ist dies veranschaulicht. Durch Ändern der Anfangsbedingungen Ψ_0 , wie hier über das Äquivalenzverhältnis $\theta^* = \phi$, ergibt sich eine eindimensionale Mannigfaltigkeit. Die einzelnen Trajektorien für diese Anfangsbedingungen werden jeweils mit der Fortschrittsvariablen χ parametrisiert. Es entsteht eine zweidimensionale Mannigfaltigkeit mit

$$\theta = (\chi, \phi)^T . \quad (3.19)$$

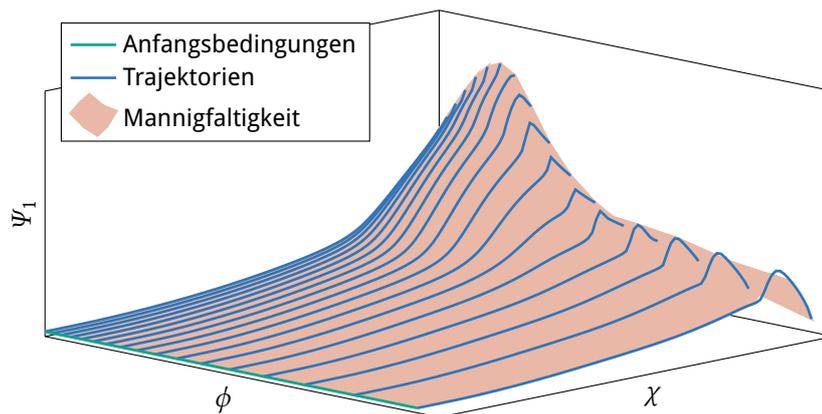


Abbildung 3.3: Generierung einer trajektorienbasierten Mannigfaltigkeit durch Variation der Anfangsbedingungen

3.3 Kopplung der Modelle zu einer erweiterten Mannigfaltigkeit

In Abschnitt 3.2 und Abschnitt 3.1 wurden zwei Modelle zur reduzierten Behandlung der chemischen Kinetik vorgestellt. Das PVM ermöglicht die Beschreibung homogener Zündprozesse ohne den Einfluss molekularer Transporteffekte. Das

REDIM-Modell hingegen berücksichtigt explizit die Wechselwirkung von chemischer Reaktion und molekularem Transport. Beide Modelle basieren auf niedrigdimensionalen Mannigfaltigkeiten im Zustandsraum [104]. Die Vorgehensweise zur Erstellung, Charakterisierung und Kombination mehrerer Mannigfaltigkeiten zu einer erweiterten Mannigfaltigkeit wird im Folgenden erläutert.

3.3.1 Parameter für die Stärke des molekularen Transports

Um verschiedene Mannigfaltigkeiten für unterschiedliche Verbrennungsregime, also mit unterschiedlicher Reaktions-Diffusions-Kopplung zu erstellen, wird ein neuer Parameter α eingeführt. Er beschreibt die Stärke des molekularen Transports. Im Rahmen des REDIM-Verfahrens kann α in Gleichung 3.7 verwendet werden, um die Abschätzung der räumlichen Gradienten der reduzierten Koordinaten anzupassen:

$$\xi(\boldsymbol{\theta}, \alpha) = \alpha \cdot \xi^*(\boldsymbol{\theta}), \quad (3.20)$$

wodurch sich verschiedene Mannigfaltigkeiten $\Psi^\alpha(\boldsymbol{\theta})$ erstellen lassen. α ist dabei auf das Intervall $[0, 1]$ normiert. $\alpha = 1$ entspricht damit den Zuständen auf einer REDIM mit der Gradientenabschätzung ξ^* und entsprechend der maximalen Kopplung von chemischer Reaktion und diffusivem Transport. Des Weiteren repräsentiert $\alpha = 0$ Zustände, resultierend aus chemischer Reaktion ohne dissipativen Transport. Um die erwähnten Probleme bei der Implementierung des REDIM-Verfahrens für diesen Extremfall zu umgehen, wird dieses für $\alpha = 0$ mit dem PVM ersetzt. Durch $0 < \alpha < 1$ werden Zustandspunkte zwischen diesen Extremen beschrieben. Der Übergang von α von 0 zu 1 würde in diesem Bild einer erhöhten Bedeutung der dissipativen Prozesse für das reagierende System entsprechen. Durch die Kopplung verschiedener Mannigfaltigkeiten lässt sich eine erweiterte Mannigfaltigkeit $\Psi(\boldsymbol{\theta}; \alpha)$ erstellen, mit α als zusätzlichem Parameter. Die erweiterte Mannigfaltigkeit bezieht den Unterraum zwischen den einzelnen Mannigfaltigkeiten $\Psi^\alpha(\boldsymbol{\theta})$ mit ein und hat daher eine intrinsische Dimension mehr als diese.

Die Abschätzung des Parameters α in einer reduzierten Anwendung hängt von der Anwendung und den zur Verfügung stehenden Größen ab. Da die verschiedenen Mannigfaltigkeiten auf unterschiedlichen Annahmen bezüglich der Wechselwirkung von chemischer Kinetik mit molekularen Transportprozessen beruhen, wird ein Abschätzung basierend auf Gleichung 3.20 formuliert, die die Stärke der räumlichen Gradienten berücksichtigt:

$$\alpha = \frac{|\text{grad}(\boldsymbol{\theta})|}{|\xi^*(\boldsymbol{\theta})|}. \quad (3.21)$$

Mit genügend feiner räumlicher Auflösung können die lokalen räumlichen Gradienten in einer reduzierten Anwendung ausgewertet und α abgeschätzt werden. In Turbulenzanwendungen wie LES ist dies aufgrund des groben Rechengitters meist nicht möglich, weshalb dort andere Ansätze zur Abschätzung der Stärke der dissipativen Transportprozesse benötigt werden.

3.3.2 Einheitliche Parametrisierung der Mannigfaltigkeiten

In die Generierung der verschiedenen Mannigfaltigkeiten $\Psi^\alpha(\theta)$ sind unterschiedliche Annahmen zur Stärke der molekularen Transporteffekte eingegangen oder sie basieren auf unterschiedlichen Modellansätzen. Ein wichtiger Schritt zur Kopplung dieser Mannigfaltigkeiten ist eine einheitliche Parametrisierung aller Mannigfaltigkeiten. Dies ist für physikalische Erhaltungsgrößen unproblematisch. So sind die spezifische Enthalpie h der Mischung, der Druck p und der Mischungsbruch Z [117] für jeden Zustandspunkt festgelegt. Der Mischungsbruch basiert auf den Elementmassenbrüchen und ist unabhängig von chemischer Reaktion. Daher können die Mannigfaltigkeiten, unabhängig von der ursprünglichen Parametrisierung, direkt in diese Variablen reparametrisiert werden.

Ferner kann bei gegebenem Mischungsbruch Z und Druck p , die Enthalpie h in die Temperatur im unverbrannten Gemisch T_{ub} umgerechnet werden, wobei der Index »ub« für unverbrannt bzw. *unburned* steht:

$$h = h(\mathbf{w}_{\text{ub}}(Z), p, T_{\text{ub}}) . \quad (3.22)$$

Die Zusammensetzung \mathbf{w}_{ub} ist dabei eine Funktion des Mischungsbruchs. Diese Umrechnung ist nicht obligatorisch für die einheitliche Parametrisierung und die Kopplung der Mannigfaltigkeiten. Im Rahmen dieser Arbeit wird jedoch, ohne an Allgemeingültigkeit zu verlieren, die Temperatur des unverbrannten Gemischs T_{ub} als Maß für die Energie verwendet.

Im Gegensatz zu den physikalischen Erhaltungsgrößen ist die Parametrisierung des Reaktionsfortschritts nicht trivial. Es gibt mehrere Ansätze, um eine chemische Fortschrittsvariable zu definieren [52, 61, 63, 72, 94, 102, 107, 118]. Sie alle beruhen auf der Vorstellung von einem Maß für den chemischen Fortschritt. Einige basieren auf der Temperatur oder der durch chemische Reaktion freigesetzten thermischen Energie, andere auf chemischen Spezies oder Linearkombinationen davon. Die Bedeutung der zeitlichen Monotonie dieser Fortschrittsvariablen wird jedoch in vielen dieser Arbeiten strapaziert. Im Allgemeinen werden folgende Anforderungen [94, 118] an eine Fortschrittsvariable χ gestellt:

- Monotonie

- Positivität und Beschränktheit, so dass eine Normierung möglich ist ($\chi = 0$ für unverbranntes Kraftstoff/Luft-Gemisch, $\chi = 1$ für das chemische Gleichgewicht)
- Sensitivität bezüglich wichtiger Phasen der chemischen Reaktion, wie etwa Zündung oder Flammenausbreitung
- Universalität und Anwendbarkeit auf alle Reaktionssysteme

Abbildung 3.4 zeigt beispielhaft die zeitlichen Verläufe einiger normierter Größen χ_i für die Selbstzündung in einem homogenen, adiabatischen, isobaren Reaktor, basierend auf der Temperatur, Speziesmassenbrüchen und der spezifischen, durch chemische Reaktion produzierten Entropie s . Sowohl die Temperatur T als auch der Massenbruch von Kohlenstoffdioxid (CO_2) zeigen für diese Anfangsbedingungen ein nicht monotones Verhalten. Durch eine Linearkombination von Speziesmassebrüchen (hier CO_2 und CO) lässt sich dieses Manko zwar umgehen, kann jedoch für andere Anfangsbedingungen hinfällig werden. Im Rahmen dieser Arbeit wurde keine Kombination von Spezies gefunden, die die oben genannten Anforderungen für alle untersuchten Bereiche der Anfangswerte für Temperatur, Druck und Mischungsbruch für alle anwendungsrelevanten Fälle erfüllt hat. Zudem würde die Verwendung von Spezieskombinationen als Fortschrittsvariable der Forderung nach Universalität widersprechen.

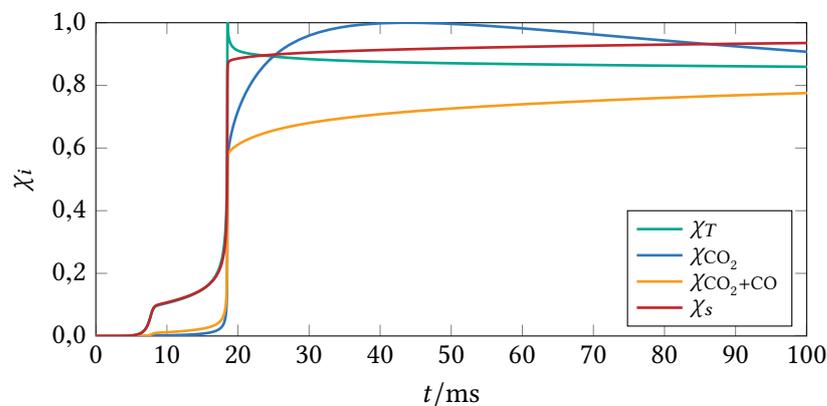


Abbildung 3.4: Zeitliche Verläufe einiger normierter Größen für eine Selbstzündung eines TRF/Luft-Gemischs [4] in einem homogenen, adiabatischen, isobaren Reaktionssystem bei $\phi = 3$, $T_{\text{ub}} = 750 \text{ K}$, $p = 10 \text{ bar}$

Ein weiterer Ansatz ist die Verwendung der Bogenlänge der Reaktionstrajektorie im Zustandsraum [61, 118], die garantiert ein monotones Verhalten hat. Jedoch ist diese Formulierung nicht notwendigerweise sensitiv bezüglich der frühen

Phasen von Zündprozessen, da im Zustandsraum keine Norm mit sinnvoller physikalischer Bedeutung existiert. Um dennoch eine ausreichende Sensitivität zu gewährleisten, müssen daher problemabhängige Normierungsfaktoren vorgegeben werden. Auch mit einer automatischen Definition [94, 107] der Fortschrittsvariablen können die Anforderungen erfüllt werden. Dennoch ist die tatsächliche physikalische Bedeutung der Fortschrittsvariablen problemabhängig. Die Suche nach einer passenden Variablen ist daher nicht trivial [61, 94, 118].

In einem geschlossenen, adiabatischen System steigt die Entropie s gemäß dem zweiten Hauptsatz der Thermodynamik [40] und der Irreversibilität von Zünd- und Verbrennungsprozessen garantiert monoton an. Zudem liefert die Entropie über den logarithmischen Term, hier am Beispiel für ideale Gase [40]:

$$s = \sum_{i=1}^N w_i \left(s_i(T, p^\circ) - \frac{R_u}{M_i} \ln \frac{p_i}{p^\circ} \right), \quad (3.23)$$

eine sinnvolle Gewichtung sowohl der Hauptspezies als auch der Radikale und Zwischenprodukte, die nur in sehr kleinen Konzentrationen bzw. Partialdrücken p_i auftreten. Hier bezeichnet $p^\circ = 10^5$ Pa den Standarddruck, R_u die universelle Gaskonstante, s_i die spezifische Entropie, w_i den Massenbruch und M_i die molare Masse einer Spezies i , wobei N die Anzahl der Spezies ist. Dadurch zeigt die Entropie eine gute Sensitivität bezüglich chemischer Aktivität auch in frühen Phasen der Zündung, was in einer guten Auflösung aller Phasen der Zündprozesse resultiert. Die Verallgemeinerung dieser Überlegung ohne die Beschränkung auf geschlossene, adiabatische Systeme führt zu einer Formulierung der Fortschrittsvariablen χ basierend auf der integrierten Bildungsgeschwindigkeit der spezifischen, durch chemische Reaktion produzierten Entropie \dot{s}_{chem} [12, 14, 15]. Dabei wird die produzierte Entropie vom unverbrannten Zustand (Index 0) bis zum chemischen Gleichgewicht (Index ∞) entlang einer Isolinie konstanter physikalischer Anfangsbedingungen (Z, T_{ub}, p) integriert:

$$\chi(\tau) = \frac{\int_{\tau_0}^{\tau} \dot{s}_{\text{chem}}(\Psi(\tau^*)) \cdot (\dot{\tau}^*)^{-1} d\tau^*}{\int_{\tau_0}^{\tau_\infty} \dot{s}_{\text{chem}}(\Psi(\tau^*)) \cdot (\dot{\tau}^*)^{-1} d\tau^*}. \quad (3.24)$$

τ bezeichnet dabei die Anfangsparametrisierung dieser Isolinie in Reaktionsrichtung und $\dot{\tau}$ deren Quellterm.

Handelt es sich bei der Isolinie um eine zeitliche Entwicklung, also um eine Reaktionstrajektorie, so kann als Anfangsparametrisierung τ die Zeit t gesehen werden. Da $\dot{t} = 1$ gilt, vereinfacht [15] sich Gleichung 3.24 zu

$$\chi(t) = \frac{\int_{t_0}^t \dot{s}_{\text{chem}}(\Psi(t^*)) dt^*}{\int_{t_0}^{t_\infty} \dot{s}_{\text{chem}}(\Psi(t^*)) dt^*}. \quad (3.25)$$

Die Bildungsgeschwindigkeit der spezifischen, durch chemische Reaktion produzierten Entropie lässt sich über die GIBBS'sche Fundamentalgleichung [111] für die spezifische Enthalpie h herleiten:

$$dh = T ds + v dp + \sum_{i=1}^N \frac{\mu_i}{M_i} dw_i. \quad (3.26)$$

Hier bezeichnet w_i den Massenbruch und M_i die molare Masse der Spezies i , wobei N die Anzahl der Spezies ist. Das chemische Potential μ_i der Spezies i berechnet sich für ideale Gase zu [111]:

$$\mu_i = M_i h_i - T \left(M_i s_i^\circ - R_u \ln \frac{p_i}{p^\circ} \right), \quad (3.27)$$

mit der universellen Gaskonstante R_u und der partiellen, spezifische Enthalpie h_i , dem Partialdruck p_i und der partiellen, spezifischen Entropie s_i° beim Standarddruck $p^\circ = 10^5$ Pa der Spezies i .

Mit den Beschränkungen auf »rein chemische«, isenthalpe ($dh = 0$) und isobare ($dp = 0$) Zustandsänderungen, die für die hier betrachteten Isolinien konstanter physikalischer Anfangsbedingungen (Z, T_{ub}, p) gelten, führt dies zu der Bildungsgeschwindigkeit der spezifischen, durch chemische Reaktion produzierten Entropie:

$$\dot{s}_{\text{chem}} = \sum_{i=1}^N \dot{w}_{i,\text{chem}} \left(s_i^\circ - \frac{R_u}{M_i} \ln \frac{p_i}{p^\circ} - \frac{h_i}{T} \right). \quad (3.28)$$

$\dot{w}_{i,\text{chem}}$ beschreibt dabei die Änderung des Massenbruchs von Spezies i aufgrund chemischer Reaktion.

Damit lässt sich sowohl eine REDIM als auch eine trajektorienbasierte Mannigfaltigkeit, wie beim PVM, in Reaktionsrichtung mit der Fortschrittsvariablen χ , basierend auf der integrierten Entropieproduktionsrate reparametrisieren. Das Ergebnis ist zwar nicht mehr identische mit der Entropie des Systems, dennoch steht die Fortschrittsvariable in beiden Fällen in Beziehung zu der chemischen Entropieproduktion. Diese Definition erfüllt alle oben angeführten Anforderungen an eine Fortschrittsvariable. Zu beachten ist, dass die tatsächliche physikalische Bedeutung der Fortschrittsvariablen und der Entropiebezug irrelevant für eine spätere Verwendung in CFD/LES-Anwendungen ist.

Zusammen mit den physikalischen Erhaltungsgrößen, die weiter oben beschrieben wurden, ergibt sich eine einheitliche Parametrisierung der Modell-Mannigfaltigkeiten mit dem reduzierten Zustandsvektor

$$\boldsymbol{\theta} = (\chi, Z, T_{\text{ub}}, p)^T. \quad (3.29)$$

Der chemische Quellterm $\dot{\chi}$ der Fortschrittsvariablen berechnet sich schließlich als Komponente des Quellterms $S(\theta)$ des reduzierten Zustandsvektors θ nach Gleichung 2.20. Abbildung 3.5 stellt den chemischen Quellterm von PVM und REDIM-Modell in der ursprünglichen und der einheitlichen Parametrisierung gegenüber. Der untere und obere Rand bei $\chi = 0$ bzw. $\chi = 1$ entspricht in diesem Beispiel den selben detaillierten Zuständen der unverbrannten Mischung bzw. dem chemischen Gleichgewicht. Es ist deutlich zu erkennen, dass die Quelltermfelder der verschiedenen Mannigfaltigkeiten, die ursprünglich eine unterschiedliche Form haben und in verschiedenen Domänen definiert sind, durch die eingeführte einheitliche Parametrisierung ähnliche Formen und die gleiche physikalische Einheiten und Größenordnung bekommen.

Die einheitliche Parametrisierung der beiden Modelle erleichtert die folgenden Schritte zur Kopplung der Mannigfaltigkeiten zu einer neuen erweiterten Mannigfaltigkeit.

3.3.3 Projektionsrichtung für den Übergang zwischen Mannigfaltigkeiten

Die vorgestellten Modelle basieren auf niedrigdimensionale Mannigfaltigkeiten im Zustandsraum, auf die die Dynamik des Systems begrenzt ist. Jedoch beruhen sie auf unterschiedlichen Annahmen bei der Modellreduktion, was zur Folge hat, dass die niedrigdimensionalen Mannigfaltigkeiten nicht zusammenfallen. In Abbildung 3.6 sind Schnitte der unterschiedlichen Mannigfaltigkeiten im Zustandsraum dargestellt. Für die Kopplung verschiedener Mannigfaltigkeiten ist es somit notwendig, einen Übergang zwischen diesen zu finden, wie es durch die Pfeile in Abbildung 3.6 angedeutet wird. Aufgrund der hohen Dimension des Zustandsraums ist die Richtung dieses Übergangs jedoch nicht vorgegeben und muss daher festgelegt werden.

Wird angenommen, dass der Übergang durch schnelle chemische Prozesse erfolgt, so können Zustände auf den beiden Mannigfaltigkeiten verknüpft werden, die einander in Bezug auf den schnellen chemischen Unterraum entsprechen. Dadurch wird ein reduzierter Zustand auf der einen Mannigfaltigkeit in Richtung der schnellen chemischen Prozesse auf den reduzierten Zustand der anderen projiziert. Diese schnellen Richtungen können mit Hilfe des Konzepts der *global quasi-linearization* (GQL) [27] bestimmt werden. In erster Näherung kann in Richtung konstanter Werte für die spezifische Enthalpie h , dem Druck p und den Massenbrüchen von Stickstoff w_{N_2} und Kohlenstoffdioxid w_{CO_2} projiziert werden.

Unter der Annahme, dass sich die Reaktionsfortschrittsvariable nur merklich innerhalb des langsamen Unterraums ändert, kann in weiterer Näherung auch

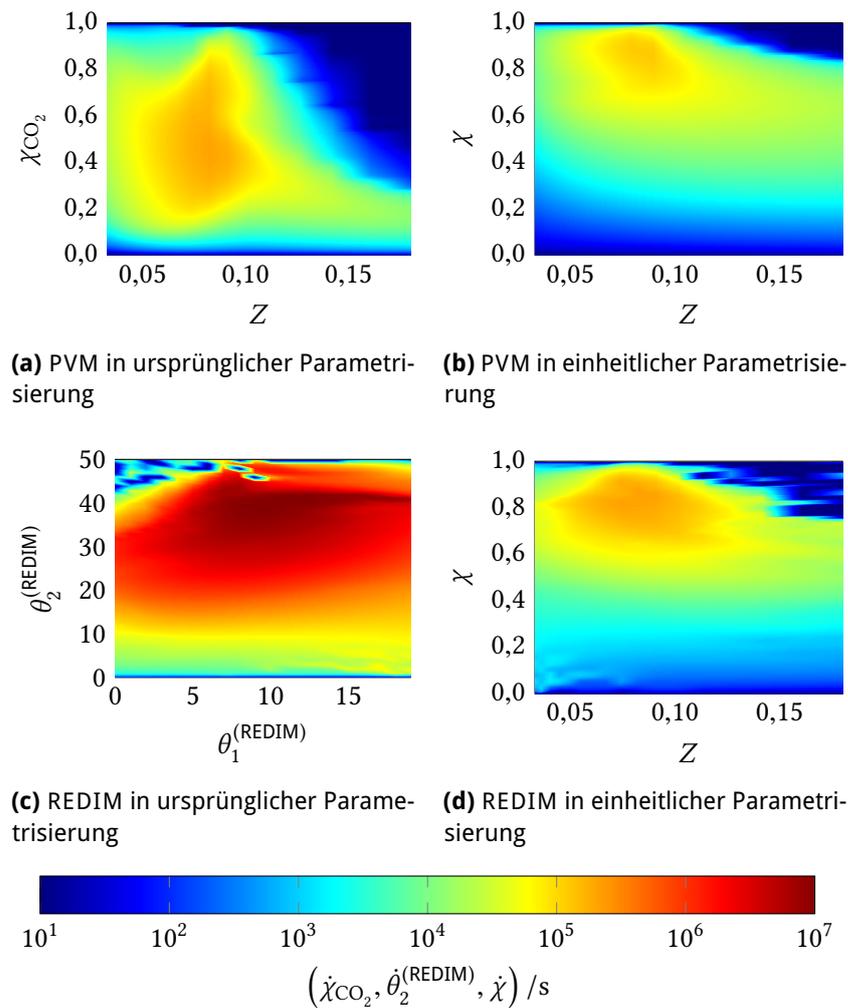


Abbildung 3.5: Gegenüberstellung des chemischen Quellterms von PVM und REDIM-Modell in der ursprünglichen und der einheitlichen Parametrisierung für ein TRF/Luft-System [4] bei $T_{\text{ub}} = 1000 \text{ K}$, $p = 10 \text{ bar}$

entlang konstanter Fortschrittsvariable projiziert werden. Abbildung 3.7 zeigt die Massenbrüche verschiedener Spezies in Abhängigkeit der Fortschrittsvariablen für die PVM-Mannigfaltigkeit und die REDIM bei einem Äquivalenzverhältnis $\phi = 1$, einer Temperatur $T_{\text{ub}} = 1000 \text{ K}$ und einem Druck $p = 10 \text{ bar}$. Es ist ersichtlich, dass bei $\chi = 0$ und $\chi = 1$ die Skalare für beide Mannigfaltigkeiten übereinstimmen; diese Punkte entsprechen den gleichen physikalischen Zustände, nämlich dem unverbrannte Gemisch und dem chemischen Gleichgewicht. Insgesamt werden die Massenbrüche aller betrachteter Spezies als Funktion der Fortschrittsvariablen durch ähnliche Kurven beschrieben.

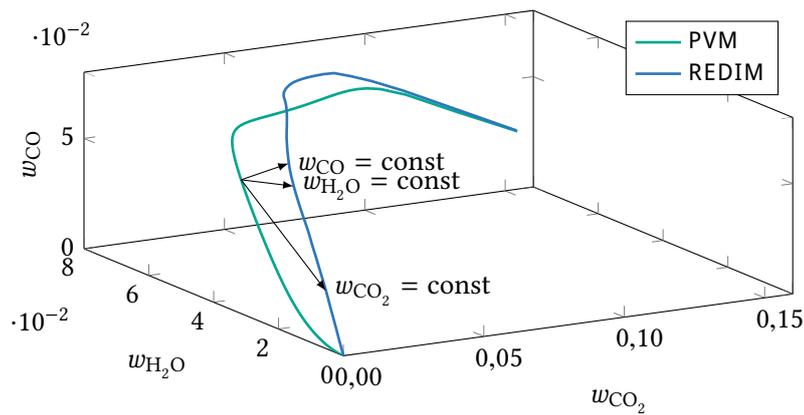


Abbildung 3.6: Mögliche Übergänge zwischen den Mannigfaltigkeiten für ein TRF/Luft-System [4] bei $\phi = 1$, $T_{ub} = 1000$ K, $p = 10$ bar

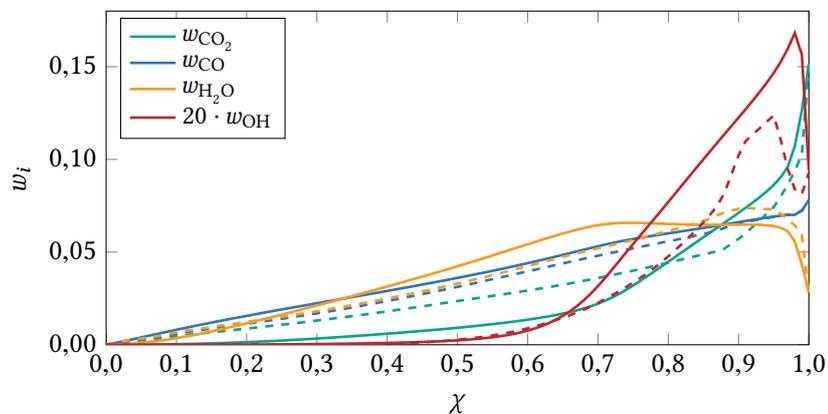


Abbildung 3.7: Spezies Massenbrüche als Funktion der Fortschrittsvariablen (basierend auf der durch chemische Reaktion erzeugten Entropie) für PVM (durchgezogene Linien) und REDIM (gestrichelte Linien) für ein TRF/Luft-System [4] bei $\phi = 1$, $T_{ub} = 1000$ K, $p = 10$ bar

Durch die Verwendung einer einheitlichen Parametrisierung der Mannigfaltigkeiten, einschließlich des Reaktionsfortschritts, kann die Projektion vereinfachend entlang eines konstanten reduzierten Zustands erfolgen, wodurch auf einfache Weise eine gekoppelte Benutzung verschiedener Mannigfaltigkeiten realisiert werden kann. Ausgehend von Abbildung 3.6 ist in Abbildung 3.8 dieser Übergang zwischen den Mannigfaltigkeiten dargestellt.

Eine einheitliche Parametrisierung der beiden Teilmodelle ist für die vorgestellte Kopplungsstrategie nicht obligatorisch, erleichtert diese aber und verringert die Rechenzeit, da eine aufwändige Projektion der Zustände von einer Mannig-

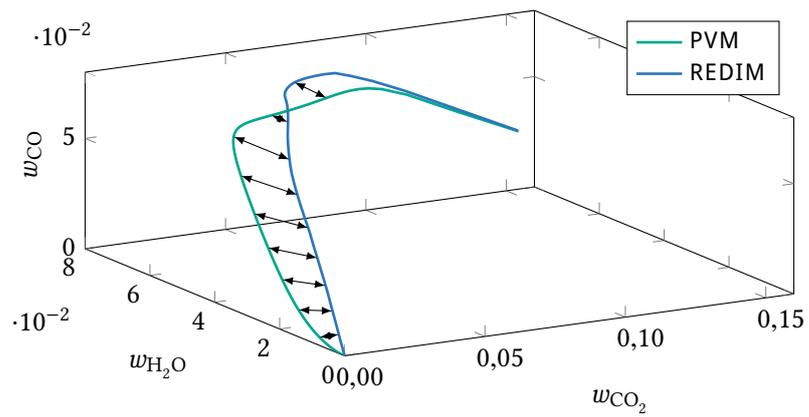


Abbildung 3.8: Übergang zwischen den Mannigfaltigkeiten entlang des konstanten reduzierten Zustands für ein TRF/Luft-System [4] bei $\phi = 1$, $T_{ub} = 1000 \text{ K}$, $p = 10 \text{ bar}$

faltigkeit auf die andere entfällt.

4

Tabellierungsstrategien

In Abschnitt 2.3 wurden Modellansätze angeführt und beschrieben, die auf niedrigdimensionalen Mannigfaltigkeiten im Zustandsraum basieren. Mit deren Hilfe ist eine reduzierte Behandlung der chemischen Reaktionen in CFD/LES-Anwendungen möglich. Üblicherweise werden die Mannigfaltigkeit über die verschiedenen Modellansätze und weiter der reduzierte chemische Quellterm S auf der Mannigfaltigkeit nach Gleichung 2.20 berechnet. Neben den Quelltermen müssen dabei, je nach Ansatz und Anwendung, auch Diffusionskoeffizienten, Projektionsoperatoren oder Stoffwerte der Mischung, wie Dichte, Viskosität oder spezifische Wärmekapazität bereitgestellt werden.

Eine verbreitete Vorgehensweise ist die Vorausberechnung und Tabellierung der Werte als Funktion der Parameter θ . Zur Laufzeit der reduzierten Anwendung werden die Werte aus diesen sogenannten *lookup*-Tabellen abgerufen und interpoliert. In Abbildung 4.1 ist die Implementierung einer reduzierten Berechnung nach Gleichung 2.19 unter Verwendung einer solchen *lookup*-Tabelle schematisch dargestellt.

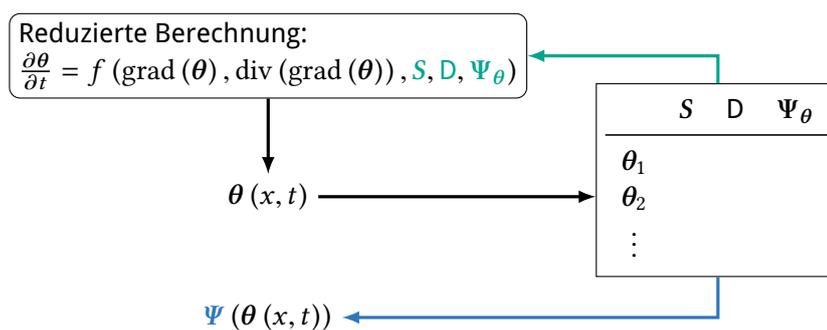


Abbildung 4.1: Implementierung einer reduzierten Simulation mit einer *lookup*-Tabelle [92]

Unabhängig von der Wahl des Modells und der Art der Berechnung der chemischen Quellterme müssen die Daten dabei in geeigneter Weise gespeichert werden und mittels einer möglichst schnellen *lookup*-Prozedur auswertbar sein. Die starke Nichtlinearität der chemischen Quellterme stellt dabei eine besonders hohe Anforderung sowohl an die Datenspeicherung als auch an die Auswertungsprozedur dar. Für die Speicherung und Auswertung der mehrdimensionalen Funktionen gelten die folgenden Anforderungen:

- hohe Genauigkeit der Interpolation bei kleinen Interpolationsfehlern
- schneller und effizienter Tabellen-*lookup*
- geringer Speicherbedarf

Die *in situ* Tabellierung [121] ist ein Ansatz, diese Anforderungen, vor allem die nach geringem Speicherbedarf, zu erfüllen. Dabei werden die detaillierten Quellterme während der Laufzeit einer Simulation berechnet und tabelliert. Werden die Quellterme eines tabellierten Zustands ein weiteres Mal benötigt, wird auf die Tabelle zugegriffen. Ein Vorteil dieser Methode ist die Vermeidung der unnötigen Berechnung von Quelltermen von Zuständen, die nicht in der Simulation vorkommen. Dies ist eine Möglichkeit Simulationen sowohl mit detaillierter als auch reduzierter chemischer Kinetik effizient durchzuführen. Im Rahmen dieser Arbeit wird jedoch nur auf die Tabellierung vorausberechneter, reduzierter Quellterme eingegangen.

4.1 Grundlagen der Interpolation

Bevor verschiedene Strategien für die Tabellierung vorausberechneter, reduzierter Quellterme vorgestellt und bewertet werden, werden im Folgenden einige Grundlagen der diskreten Approximation und der Interpolation behandelt. Zunächst wird dazu auf die eindimensionale Interpolation eingegangen. Anschließend wird die Erweiterung auf den mehrdimensionalen Fall erläutert.

4.1.1 Erläuterung für den eindimensionalen Fall

Die Diskretisierung und Approximation einer Funktion wird zunächst an einem eindimensionalen Beispiel veranschaulicht. Es sei $f(x)$ eine eindimensionale Funktion auf dem Intervall $[x_1, x_N]$, die mit N Stützstellen $X = \{x_1, \dots, x_N\}$ diskretisiert wird. Die Stützstellen müssen dabei nicht zwingend äquidistant sein. Die Interpolante \tilde{f} zwischen den Stützstellen wird über eine Interpolationsvorschrift aus den Funktionswerten an den Stützstellen berechnet [44]. Dabei können etwa

Polynome, Exponentialsummen, rationale oder auch trigonometrische Funktionen verwendet werden [44].

Polynome können Funktionen in einem weiten Intervall interpolieren, neigen jedoch mit höherer Ordnung zum Oszillieren, was als RUNGE-Phänomen [108] bezeichnet wird. Ein einfacher und verbreiteter Ansatz ist, jedes Teilintervall $[x_i, x_{i+1}] \in X$ zwischen zwei Stützstellen über stückweise stetige Polynome $P_{i,k}$ zu interpolieren:

$$P_{i,k}(x) = \sum_{j=1}^k a_j (x - x_i)^{(j-1)} \quad \text{für } x \in [x_i, x_{i+1}], \quad (4.1)$$

mit den Koeffizienten a_j . Des Weiteren bezeichnet k die Ordnung des Polynoms.

Abbildung 4.2 stellt die Interpolante \tilde{f} schematisch auf dem Teilintervall $[x_i, x_{i+1}] \in X$ mit einem Polynom der Ordnung $k = 1$ für eine konstante, $k = 2$ für eine lineare und $k = 3$ für eine quadratische Interpolation dar. Je nach Ordnung der Polynome steigt die Anzahl der Gitterpunkte, die für die Bestimmung deren Koeffizienten benötigt werden. Entsprechend steigt der Rechenaufwand bei der Interpolation. Allerdings unterscheidet sich auch die Genauigkeit der Interpolante \tilde{f} .

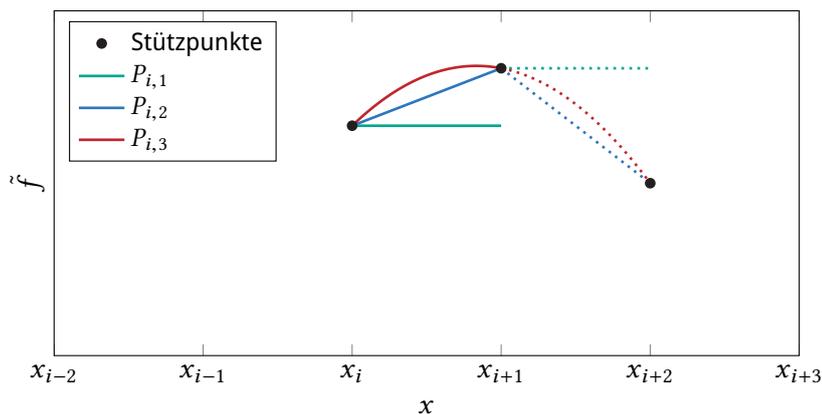


Abbildung 4.2: Schematische Darstellung der stückweisen konstanten, linearen und quadratischen Polynominterpolation zwischen den Stützstellen x_i und x_{i+1}

Ein wesentlicher Punkt bei der stückweisen Definition der Interpolante ist die Frage nach der Differenzierbarkeit an den Stützstellen. Um diese zu gewährleisten, können zusätzliche Kopplungsbedingungen für die einzelnen Teilpolynome angegeben werden. Ein solcher Polynomzug wird als *spline* bezeichnet [36]. Die *spline*-Interpolation ist somit im Gegensatz zur Polynominterpolation nicht lokal beschränkt. Des Weiteren kann jede *spline*-Funktion S_k vom Grad k durch

eine Linearkombination mehrerer Basis-*splines* $B_{i,k}$ des selben Grads mit den Koeffizienten b_i ausgedrückt werden [36, 44]:

$$S_k(x) = \sum_{i=1}^N b_i B_{i,k}(x) . \quad (4.2)$$

Die Basis-*splines* oder auch B-*splines* lassen sich nach einer rekursiven Formel berechnen:

$$B_{i,1}(x) := \begin{cases} 1 & x \in [x_i, x_{i+1}) \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} , \quad (4.3)$$

$$B_{i,k}(x) := \frac{x - x_i}{x_{i+k-1} - x_i} B_{i,k-1}(x) + \frac{x_{i+k} - x}{x_{i+k} - x_{i+1}} B_{i+1,k-1}(x) .$$

Sie haben einen kompakten Träger $\text{supp}(B_{i,k}) := \{x \mid B_{i,k}(x) > 0\}$ [1, 36], das bedeutet, sie sind nur auf einem kleinen Intervall von Null verschieden. Analog zur stückweisen Polynominterpolation aus Abbildung 4.2 zeigt Abbildung 4.3 die Interpolante \tilde{f} schematisch auf dem Teilintervall $[x_i, x_{i+1}] \in X$ für eine *spline*-Interpolation. Zusätzlich sind die für dieses Intervall relevanten B-*splines* dargestellt.

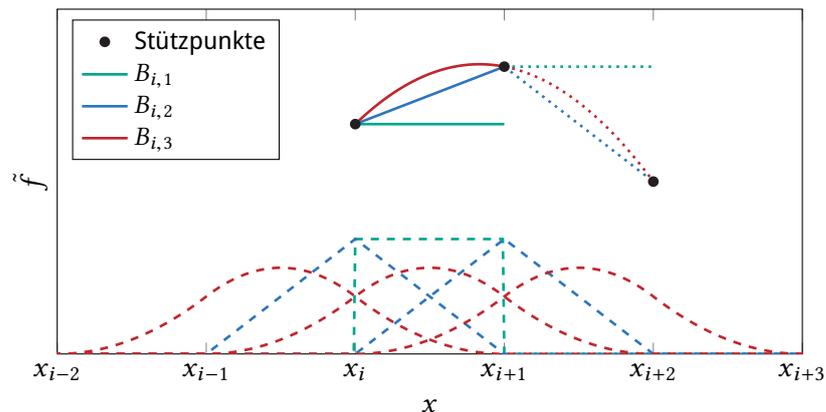


Abbildung 4.3: Schematische Darstellung der stückweisen konstanten, linearen und quadratischen *spline*-Interpolation zwischen den Stützstellen x_i und x_{i+1} , gestrichelt: Basis-*splines*

Die Koeffizienten b_i für Gleichung 4.2 müssen durch Lösen eines linearen Gleichungssystems bestimmt werden. Die Bedingungen dafür müssen je nach Ordnung über die Funktionswerte und Differenzierbarkeit an den Stützstellen formuliert werden. Im Falle der linearen Interpolation vereinfacht sich die Lösung.

Hier entsprechen die Koeffizienten b_i den Funktionswerten $f(x_{i+1})$. Zudem existieren dann an den Stützstellen neben der Stetigkeitsbedingung keine weiteren Kopplungsbedingungen für die Teilpolynome, womit es keinen Unterschied zwischen der stückweisen Polynom- und der *spline*-Interpolation gibt. Im Folgenden wird deshalb ausschließlich die lineare Interpolation verwendet, womit eine einfache, schnelle und effiziente Implementierung möglich ist.

4.1.2 Erweiterung für den mehrdimensionalen Fall

Der Übergang zum D -dimensionalen Fall in Gleichung 4.2 erfolgt mittels eines Tensorprodukt-Ansatzes [7, 24, 53]:

$$S_{1,k_1} \otimes \cdots \otimes S_{D,k_D} = \sum_{i_1=1}^{N_1} \cdots \sum_{i_D=1}^{N_D} b_{i_1, \dots, i_D} \cdot (B_{i_1, k_1} \otimes \cdots \otimes B_{i_D, k_D}) . \quad (4.4)$$

Daraus ergeben sich die mehrdimensionalen Basisfunktionen:

$$B_{\mathbf{i}, \mathbf{k}}(\mathbf{x}) = \prod_{d=1}^D B_{i_d, k_d}(x_d) , \quad (4.5)$$

mit dem Multi-Index $\mathbf{i} = (i_1, \dots, i_D)^T$ und dem Vektor der Ordnungen $\mathbf{k} = (k_1, \dots, k_D)^T$.

Der multidimensionale *spline* $S_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})$ für eine mehrdimensionale Funktion $f(\mathbf{x})$ berechnet sich somit zu:

$$S_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{i} \leq \mathbf{N}} b_{\mathbf{i}} B_{\mathbf{i}, \mathbf{k}}(\mathbf{x}) . \quad (4.6)$$

Im Falle eines stückweisen linearen B-*splines* im Eindimensionalen ergibt sich durch den Tensorprodukt-Ansatz für ein rechtwinkliges Gitter eine D -lineare Basisfunktion. Abbildung 4.4 veranschaulicht dies für den zweidimensionalen Fall. Dabei sind die eindimensionalen B-*splines* in x und y -Richtung dargestellt, sowie die resultierende zweidimensionale Basisfunktion.

Eine zweidimensionale, rechtwinklige Gitterzelle in den Intervallen $[x_1, x_{i+1}]$ und $[y_1, y_{i+1}]$ ist dabei jeweils im Träger von vier zweidimensionalen Basisfunktionen enthalten. Somit hat Gleichung 4.6 vier Summanden. In Abbildung 4.5 sind die Basisfunktionen in der Gitterzelle abgebildet. Vergleichend dazu ist in Abbildung 4.6 die bilineare Interpolation dargestellt. Hierbei werden eindimensionale lineare Polynominterpolationen sequentielle für die x und y -Richtung durchgeführt. Um die Funktion am Punkt A zu interpolieren, wird zunächst an

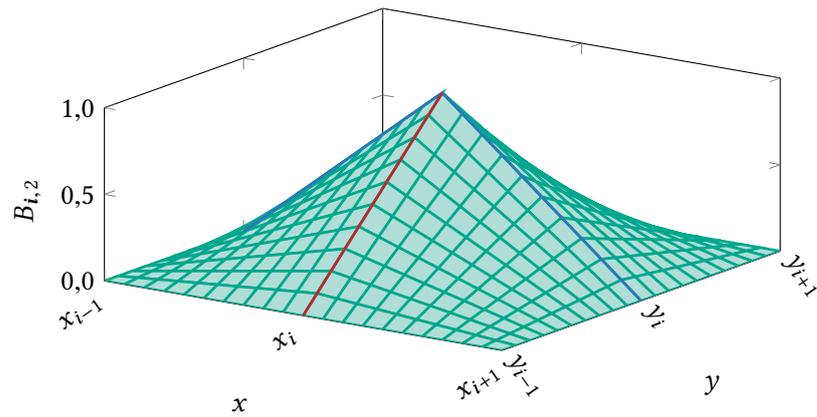


Abbildung 4.4: Veranschaulichung des Tensorprodukt-Ansatzes für den zwei-dimensionalen Fall mit linearen B-splines in x -Richtung (blau) und y -Richtung (rot)

den Punkten A' und A'' linear in x -Richtung und anschließend in y -Richtung am Punkt A interpoliert. Diese Punkte sind zum Vergleich auch in Abbildung 4.5 dargestellt. Durch einfaches Umformen kann gezeigt werden, dass, wie im ein-dimensionalen Fall, zwischen der multilinearen Polynominterpolation und der multidimensionalen *spline*-Interpolation kein Unterschied vorliegt.

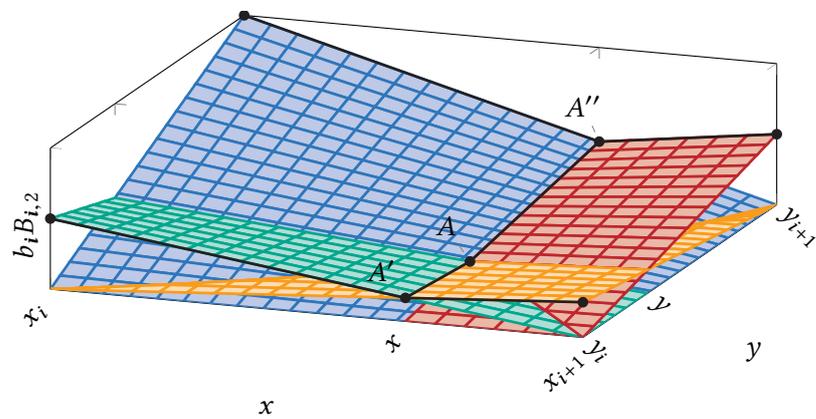


Abbildung 4.5: Schema der zweidimensionalen *spline*-Interpolation mit linearen B-splines in einer rechtwinkligen Gitterzelle

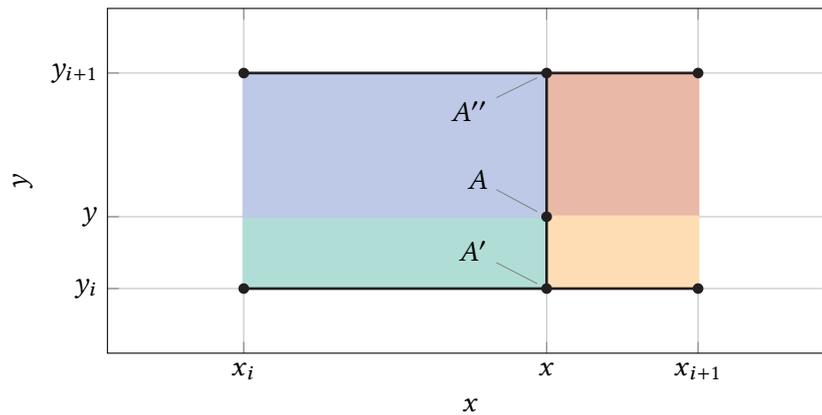


Abbildung 4.6: Schema der bilinearen Polynominterpolation in einer rechteckigen Gitterzelle

4.2 Fluch der Dimensionalität

Der Begriff *Fluch der Dimensionalität* wurde von BELLMAN [9] eingeführt und beschreibt das Phänomen, dass in einem mathematischen Raum durch Erhöhen der Dimension das Volumen exponentiell steigt. So besteht bekanntlich 1 cm aus 10 mm, 1 cm² schon aus 100 mm² und 1 cm³ sogar aus 1000 mm³.

Bei der Tabellierung vorausberechneter chemischer Quellterme muss man sich zwangsläufig mit dem Fluch der Dimensionalität beschäftigen. Mit folgendem Rechenbeispiel wird dies anschaulich verdeutlicht. Eine *lookup*-Tabelle soll für beispielsweise zehn Ausgabegrößen erstellt werden:

- chemischer Quellterm
- Temperatur
- Massenbrüche von chemischen Spezies, wie Kraftstoff, Sauerstoff, Stickstoff, Kohlenstoffdioxid oder Wasser
- Stoffdaten der Mischung wie Dichte, Viskosität oder spezifische Wärmekapazität

Neben den in Unterabschnitt 3.3.2 erwähnten Parametern:

- Fortschrittsvariable
- Mischungsbruch
- Enthalpie

- Druck

soll die *lookup*-Tabelle die Ausgabegrößen auch in Abhängigkeit weiterer CAI-relevanter Parameter, wie

- dem Abgasgehalt der Mischung bei Abgasrückführung [58]
- der Zusammensetzung des Abgases

beschreiben. Ferner werden zur Verwendung der Modell-Tabelle in einer Anwendung mit statistischer Betrachtung der Turbulenz [105] die Abhängigkeiten von sowohl den Mittelwerten als auch den Varianzen dieser sechs Parameter benötigt. Die Mittelwerte werden dabei beispielsweise mit jeweils 30 und die Varianzen mit jeweils 10 Gitterpunkten aufgelöst. Dies würde bei einer Speicherung der Werte in doppelter Genauigkeit (8 byte) einem Speicherbedarf von

$$10 \cdot 30^6 \cdot 10^6 \cdot 8 \text{ byte} \approx 58,32 \cdot 10^{15} \text{ byte} \approx 51,8 \text{ PiB}$$

entsprechen. Auch wenn dieses Beispiel einen etwas überspitzt dargestellten Extremfall beschreibt, zeigt es doch die Tendenz bei immer größer und komplexer werdenden Anforderungen an die Tabellierung. Eine praktische Anwendung ist damit auch in naher Zukunft nicht möglich. Um dennoch umfangreiche, vorausberechnete Datensätze zu verwenden, muss durch intelligente Tabellierungsstrategien der Fluch der Dimensionalität umgangen und der Speicherbedarf reduziert werden. Gleichzeitig darf die Auswertung durch eine *lookup*-Prozedur nicht zu rechenintensiv werden.

4.3 Äquidistante Gitter

Eine einfache Möglichkeit, eine Funktion f in einem D -dimensionalen Parameterbereich mit diskreten Punkten zu approximieren, ist die Benutzung eines rechtwinkligen, äquidistanten Gitters bzw. *regular grid* (RG). Das Gitter wird dabei unabhängig von der zu approximierenden Funktion durch die Vorgabe der Gitterpunktanzahl N_d in den einzelnen Dimensionen $d = 1, \dots, D$ erstellt. Die Interpolation mit einem globalen mehrdimensionalen Polynom ist in Bezug auf die starke Nichtlinearität des chemischen Quellterms und dem oben erwähnten RUNGE-Phänomen der Oszillation von Polynomen höherer Ordnung nicht zielführend. Deshalb wird eine *spline*-Interpolation mit linearen *B-splines* gewählt, wie sie in Abschnitt 4.1 beschrieben wurde.

Auf einem rechtwinkligen, äquidistanten Gitter vereinfachen sich die eindimensionalen *B-splines* mit Grad $k = 2$ aus der rekursiven Gleichung 4.3 und es

ergibt sich die sogenannte *Hutfunktion*:

$$B_{i,2}(x) = \begin{cases} 1 - \left| \frac{x-x_{i+1}}{\Delta x} \right| & x \in [x_i, x_{i+2}) \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} . \quad (4.7)$$

Hierbei bezeichnet Δx die konstante Maschenweite des äquidistanten Gitters:

$$\Delta x = \frac{x_N - x_1}{N - 1} . \quad (4.8)$$

Damit ist der Träger der *B-splines*, also das Intervall auf dem sie von Null verschieden sind, für alle Basisfunktionen gleich groß.

Im Rahmen dieser Arbeit wird jedoch eine veränderte Indizierung der Hutfunktion verwendet. Anstatt mit dem Index der linken Randstelle des Trägerintervalls wird die Basisfunktion mit dem Index des Maximums indiziert. Weiteres Umformen führt zu der Form:

$$B_{i,2}(x) = \begin{cases} 1 - \left| \frac{x-x_1}{x_N-x_1} (N-1) - (i-1) \right| & x \in [x_{i-1}, x_{i+1}) \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} . \quad (4.9)$$

Entsprechend Gleichung 4.6 berechnet sich die Interpolante einer eindimensionalen Funktion auf einem äquidistanten Gitter zu:

$$\tilde{f}(x) = \sum_{i=1}^N f_i B_{i,2}(x) , \quad (4.10)$$

aus den Funktionswerten $f_i = f(x_i)$ an den Stützstellen x_i .

In Abbildung 4.7 ist dies an einem einfachen eindimensionalen Beispiel veranschaulicht. Die Hutfunktionen haben jeweils einen Träger, der der doppelten Maschenweite des äquidistanten Gitters entspricht. Daraus ergibt sich aus der *spline*-Interpolation ein stückweiser linearer Polygonzug. Dies entspricht auf den Teilintervallen einer Polynominterpolation nach Gleichung 4.1 mit dem Grad $k = 2$.

Bei mehrdimensionalen äquidistanten Gittern gilt die in Unterabschnitt 4.1.2 beschriebene multilineare Interpolation mit der Vereinfachung der hier beschriebenen Hutfunktion als eindimensionale *B-splines*:

$$\tilde{f}(\mathbf{x}) = \sum_{i \leq N} f_i B_{i,2}(\mathbf{x}) . \quad (4.11)$$

Doch wie schon in Abschnitt 4.2 erwähnt, unterliegt das rechtwinklige, äquidistante Gitter dem Fluch der Dimensionalität, so dass die Gesamtanzahl der Gitterpunkte $O(N^D)$ mit höheren Dimensionen D rapide ansteigt.

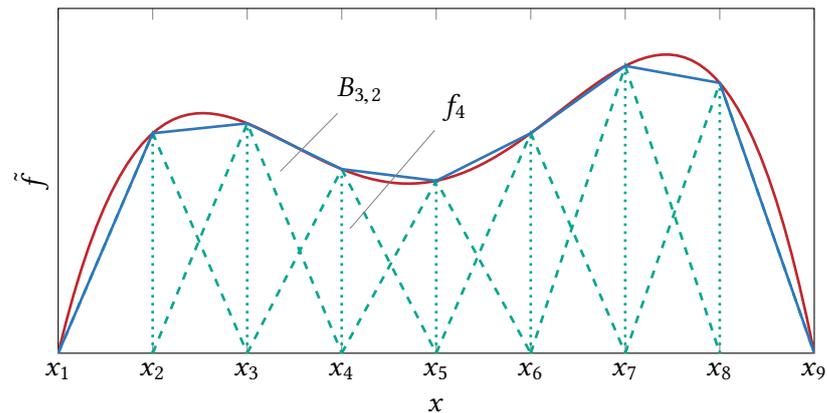


Abbildung 4.7: Diskrete Approximation einer eindimensionalen Funktion mit linearen *B-splines* mit $N = 9$, rot: Funktion $f(x)$, blau: Interpolante $\tilde{f}(x)$, gestrichelt: *B-splines*, gepunktet: Koeffizienten bzw. Funktionswerte an den Gitterpunkten

4.4 Dünne Gitter

Das Prinzip der dünnen Gitter bzw. *sparse grid* (SG) [23–25, 53, 123] ist ein interessanter Ansatz, um den Fluch der Dimensionalität (vgl. Abschnitt 4.2) zu umgehen. Es basiert auf einer *spline*-Interpolation, deren *B-splines*, im Gegensatz zur herkömmlichen Stützpunktbasis bzw. *nodalen* Basis, in *hierarchischer* Basis [42, 122] dargestellt werden.

4.4.1 Hierarchische Basis

Es wird nun zunächst die Darstellung von *B-splines* in hierarchischer Basis erläutert, bevor der Aufbau eines dünnen Gitters betrachtet wird. In hierarchischer Basis wird nicht jeder Stützpunkt gleich behandelt, sondern eine Hierarchie auf den Stützpunkten definiert, indem das Gitter sukzessive verfeinert wird. Bei jedem Verfeinerungsschritt l , auch hierarchische Stufe, wird die Schrittweite verkleinert. Das größte Gitter, das den Randpunkten entspricht, hat dabei die niedrigste Hierarchiestufe $l = 0$. Das feinste Gitter ergibt sich durch die maximale Hierarchiestufe $l = L$. Der Träger der *B-splines*, also das Intervall auf dem sie von Null verschieden sind, ist damit abhängig von der Hierarchiestufe l .

Im Falle der hier verwendeten linearen Interpolation erstreckt sich der Träger eines *B-splines* über zwei Teilintervalle. Es bietet sich daher eine Verfeinerung des Gitters um den Faktor 2 je Hierarchiestufe an. Die Maschenweite ergibt sich

somit in Abhängigkeit der hierarchischen Stufe l :

$$\Delta x_l = (x_N - x_1) 2^{-l}, \quad (4.12)$$

mit den Eckpunkten des vollen Intervalls $[x_1, x_N]$. Ebenso ergeben sich die Hutfunktionen aus der Vereinfachung von Gleichung 4.3 mit $k = 2$ und der veränderten Indizierung aus Abschnitt 4.3:

$$B_{i,2}^{(l)}(x) = \begin{cases} 1 - \left| \frac{x-x_1}{x_N-x_1} 2^l - (i-1) \right| & x \in [x_{i-1}, x_{i+1}) \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}. \quad (4.13)$$

Bei der Indizierung der Gitterpunkte einer Stufe werden alle Gitterpunkte der niedrigeren Stufen mit einbezogen. Dabei gehören Gitterpunkte mit geradem Index $i \in 2n$ zur aktuellen Verfeinerung. Gitterpunkte mit ungeradem Index $i \in 2n + 1$ gehören zu niedrigeren Stufen. Eine Ausnahme stellen jedoch die Randpunkte dar, die beide in der Stufe $l = 0$ enthalten sind:

$$\begin{aligned} X^{(0)} &= \{x_1^{(0)}, x_2^{(0)}\}, \\ X^{(l)} &= \{x_i^{(l)} \mid i \in 2n\} \quad \text{mit } l \geq 1. \end{aligned} \quad (4.14)$$

Durch die Kombination dieser Subgitter ergibt sich die Interpolante für ein eindimensionales hierarchisches Gitter aus der Summe aller Hierarchiestufen l zu:

$$\tilde{f}(x) = \sum_{l \leq L} \sum_{x_i^{(l)} \in X^{(l)}} u_i^{(l)} B_{i,2}^{(l)}(x). \quad (4.15)$$

Die Koeffizienten $u_i^{(l)}$ entsprechen dabei nicht wie bei der nodalen Basis den Funktionswerten an den Stützstellen, sondern der Differenz aus Funktionswert und interpoliertem Wert der vorherigen Hierarchiestufe. Dieser sogenannte *hierarchische Überschuss* korrigiert die Approximation der vorherigen Stufe für die aktuelle Stufe:

$$u_i^{(l)} = f(x_i) - \tilde{f}^{(l-1)}(x_i). \quad (4.16)$$

Abbildung 4.8 zeigt exemplarisch die Approximation einer eindimensionalen Funktion mit linearen B-splines in hierarchischer Basis. Im Gegensatz zur nodalen Basis hängt die Schrittweite der Basisfunktionen (gestrichelte Linien) von der Hierarchiestufe ab. Das bedeutet, dass der Träger der Basisfunktionen bzw. der Einfluss der Stützpunkte auf die Interpolante mit steigender Hierarchiestufe geringer wird. Die Interpolante wird in der jeweiligen Stufe durch die gestrichelten Linien repräsentiert. Es ist deutlich zu erkennen, dass durch die Addition jeder weiteren Hierarchiestufe die Genauigkeit der Interpolante steigt.

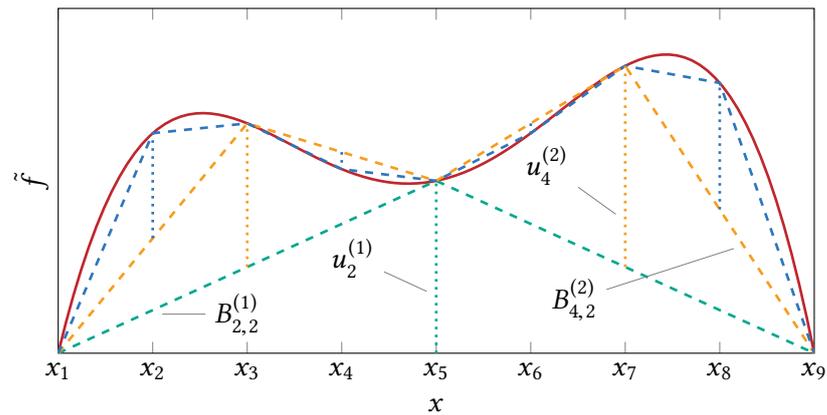


Abbildung 4.8: Diskrete Approximation einer eindimensionalen Funktion mit linearen B-*splines* in hierarchischer Basis mit $L = 3$, rot: Funktion $f(x)$, blau: Interpolante $\tilde{f}(x)$, getrichelt: B-*splines*, gepunktet: Koeffizienten bzw. hierarchische Überschüsse an den Gitterpunkten

Unter Verwendung des in Unterabschnitt 4.1.2 beschriebenen Tensorprodukt-Ansatzes für die hier verwendeten Hutfunktionen als eindimensionale B-*splines* ergibt sich die Interpolante einer mehrdimensionalen Funktion in hierarchischer Basis zu:

$$\tilde{f}(\mathbf{x}) = \sum_{|\mathbf{l}|_{\infty} \leq L} \sum_{\mathbf{x}_i^{(l)} \in X^{(l)}} u_i^{(l)} B_{i,2}^{(l)}(\mathbf{x}), \quad (4.17)$$

mit dem Vektor der Hierarchiestufen $\mathbf{l} = (l_1, \dots, l_D)^T$ und der Definition der Maximumsnorm [22]:

$$|\mathbf{l}|_{\infty} = \max_{1 \leq d \leq D} l_d. \quad (4.18)$$

Letztendlich ergibt sich durch die diskrete Approximation mit linearen B-*splines* in nodaler Basis, wie in Abbildung 4.7, und in hierarchischer Basis, wie in Abbildung 4.8, exakt die gleiche Interpolante mit den selben Stützstellen. Wie jedoch die Darstellung in hierarchischer Basis genutzt werden kann, um sogenannte dünne Gitter zu konstruieren, wird im Folgenden erläutert.

4.4.2 Konstruktion dünner Gitter

Bisher konnte verdeutlicht werden, dass die hierarchische Basis eine alternative Darstellung von Basisfunktionen ist. Im eindimensionalen Beispiel aus Abbildung 4.7 und 4.8 interpolieren die *splines* in nodaler und hierarchischer Basis zwischen den selben Stützstellen exakt gleich. Um die Konstruktion dünner Gitter in hierarchischer Basis zu erläutern, wird nun ein zweidimensionaler Gitterraum

betrachtet. Dabei ist der Vektorraum V_L des vollen Gitters eine Kombination von hierarchischen Unterräumen W_l , die durch die in Unterabschnitt 4.4.1 beschriebene Gitterverfeinerung entstehen:

$$V_L = \bigoplus_{|l|_\infty \leq L} W_l. \quad (4.19)$$

Abbildung 4.9 zeigt schematisch die Konstruktion eines Gitterraumes für die Dimension $D = 2$ und die maximale Hierarchiestufe $L = 3$ als Kombination hierarchischer Unterräume. Für dieses Beispiel wird angenommen, dass die abzubildende Funktion auf dem Rand zu Null wird und die Eckpunkte, die der Stufe $l = 0$ entsprechen, vernachlässigt werden können. Die Gitterpunkte sind mit schwarzen Punkten dargestellt. Die Träger der Basisfunktionen sind mit gestrichelten Linien angedeutet. Wie in Unterabschnitt 4.4.1 beschrieben wird dabei der Träger und somit der Einfluss der Gitterpunkte auf die Interpolante mit steigender Hierarchiestufe geringer. In einem dünnen Gitter werden nun diese Unterräume der Basisfunktionen mit dem kleinsten Träger vernachlässigt, das bedeutet, der rechte untere, grau eingefärbte Teil des Schemas in Abbildung 4.9 wird entfernt. Der Vektorraum V_L^* des dünnen Gitters ist wieder eine Kombination von hierarchischen Unterräumen:

$$V_L^* = \bigoplus_{|l|_1 \leq L+d-1} W_l, \quad (4.20)$$

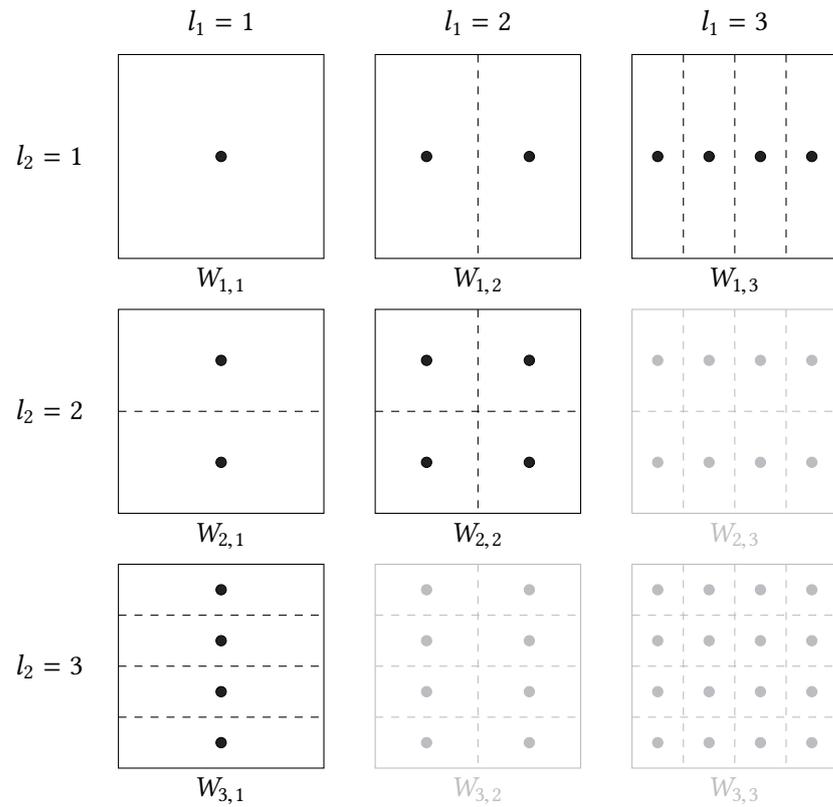
mit der Definition der Summennorm [22]:

$$|l|_1 = \sum_{d=1}^D l_d. \quad (4.21)$$

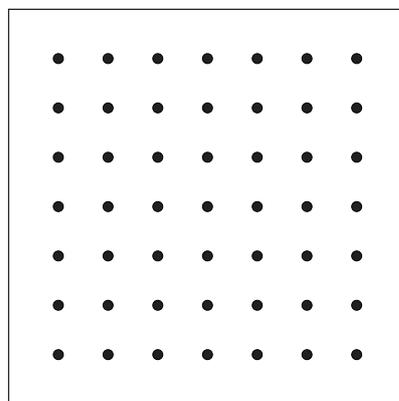
Die Gesamtanzahl der Gitterpunkte $O(N (\log_2(N))^{D-1})$ ist damit geringer als beim vollen Gitter.

4.4.3 Adaptive dünne Gitter

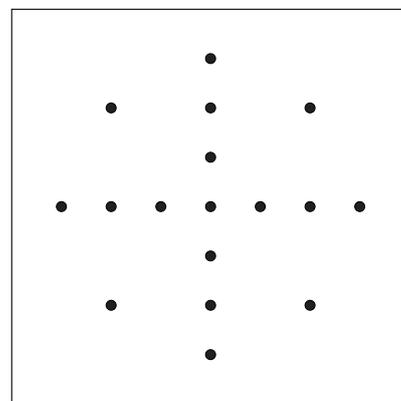
Ebenso wie volle, äquidistante Gitter aus Abschnitt 4.3 werden auch dünne Gitter unabhängig von der darzustellenden Funktion aufgebaut. Einzig die Vorgabe des Benutzers zur Anzahl der Gitterpunkte in den einzelnen Dimensionen bei äquidistanten Gittern oder zur maximalen hierarchischen Stufe bei dünnen Gittern bestimmen die Struktur des Gitters. Dies erfordert die Kenntnis über die Funktion und die Einschätzung der global und lokal zu erwartenden Interpolationsfehler.



(a) Kombination hierarchischer Unterräume W_l



(b) Resultierender Vektorraum des vollen Gitters V_3



(c) Resultierender Vektorraum des dünnen Gitters V_3^*

Abbildung 4.9: Vektorraum eines vollen Gitters V_3 und eines dünnen Gitters V_3^* als Kombination mehrerer hierarchischer Unterräume W_l

Basierend auf dem Prinzip der dünnen Gitter kann die Kombination der Unterräume adaptiv gestaltet werden. Dabei wird die Gitterstruktur mit der darzustellenden Funktion gekoppelt und die resultierenden Interpolationsfehler gesteuert. Das Resultat ist ein adaptives dünnes Gitter bzw. *adaptive sparse grid* (ASG).

Aus Gründen der besseren Lesbarkeit und zur einfacheren Umsetzung auf gängige Programmiersprachen wird die Funktionsweise des Algorithmus und der Funktionen anhand von Pseudocode erläutert. Algorithmus 4.1 beschreibt die Initialisierung des Datensatzes X und den Start der Gittererstellung (Algorithmus 4.2 ADAPTSPARSEGRID). Die Einträge des Vektors der hierarchischen Stufen \mathbf{l} werden für alle D Dimensionen auf Null und die des Multi-Index \mathbf{i} auf Eins gesetzt. Dies entspricht in jeder Dimension dem linken Eckpunkt, auf welchem die Gittererstellung startet. In einem zweidimensionalen Raum wäre dies der linke, untere Eckpunkt. Danach erfolgt der Aufruf der rekursiven Dünngitteradaption (Algorithmus 4.2 ADAPTSPARSEGRID).

Algorithmus 4.1 : Initialisierung und Aufruf der rekursiven Dünngitteradaption

Eingabe : D

$X \leftarrow$ leer

für $d \leftarrow 1$ **bis** D **tue**

$i_d \leftarrow 1$
 $l_d \leftarrow 0$

Ende

ADAPTSPARSEGRID($X, \mathbf{i}, \mathbf{l}, D$)

Durch die Vorgabe eines lokalen und/oder globalen Kriteriums in Algorithmus 4.2 wird die Genauigkeit und der Interpolationsfehler gesteuert. Im Rahmen dieser Arbeit wird die Genauigkeit lokal anhand des hierarchischen Überschusses (vgl. Gleichung 4.16) beurteilt:

$$|u_i^{(l)}| \leq \max(\varepsilon_{\text{rel}} \cdot |f(\mathbf{x}_i^{(l)})|, \varepsilon_{\text{abs}}), \quad (4.22)$$

mit der relativen Toleranz ε_{rel} und der absoluten Toleranz ε_{abs} .

Zusätzlich kann die Gitteradaption in Algorithmus 4.2 durch die Vorgabe einer maximalen Hierarchiestufe und/oder der maximalen Verfeinerung separat für jede Dimension begrenzt werden.

Algorithmus 4.2 beschreibt die eigentliche Gittererstellung bzw. -adaption. Für den aktuellen Gitterpunkt $\mathbf{x}_i^{(l)}$ wird die Funktion f ausgewertet (EVALFUNC muss vom Benutzer zur Verfügung gestellt werden), die Interpolante \tilde{f} berechnet (INTERPSPARSEGRID muss abhängig von der verwendeten Basisfunktion vom

Benutzer zur Verfügung gestellt werden) und daraus der hierarchische Überschuss ermittelt. Abhängig von einem benutzerdefinierten Kriterium wird der Gitterpunkt in den Datensatz X aufgenommen und der hierarchische Überschuss gespeichert, andernfalls wird er verworfen. Anschließend werden in jeder Dimension sequentiell die nachfolgenden Hierarchiestufen durchlaufen. Für den jeweils linken und rechten Nachbarn der nächsten Stufe, die sogenannten *Kinder*, wird Algorithmus 4.2 ADAPTSPARSEGRID rekursiv aufgerufen, wobei die Verfeinerung der Dimension d pausiert wird, bis die Verfeinerung in der Dimension $d - 1$ abgeschlossen ist. Dadurch wird die Verfeinerung eines D -dimensionalen Gitters auf eine Folge eindimensionaler Fälle reduziert.

Da ein Eckpunkte ($l_d = 0$) in der Dimension d keinen linken und rechten Nachbarn hat, müssen Eckpunkte gesondert behandelt werden. Abbildung 4.10 zeigt zur besseren Veranschaulichung die Sequenz einer eindimensionalen Verfeinerung. Ausgehend vom linken Eckpunkt wird in der zweiten Rekursion die Hierarchiestufe $l_d = 0$ beibehalten und der Index $i_d = 2$ auf den rechten Eckpunkt gesetzt. Im dritten Schritt wird die Stufe $l_d = 1$ erhöht; der Index des Mittelpunkts und des rechten Eckpunkts sind identisch. Bei jedem weiteren Schritt wird die Stufe erhöht und der Index auf den linken Nachbarn gesetzt. Erst wenn alle linken Nachbarn abgearbeitet wurden, wird beim Verlassen einer Rekursion der Index auf den rechten Nachbarn gesetzt und die Verfeinerung in dieser Richtung fortgeführt.

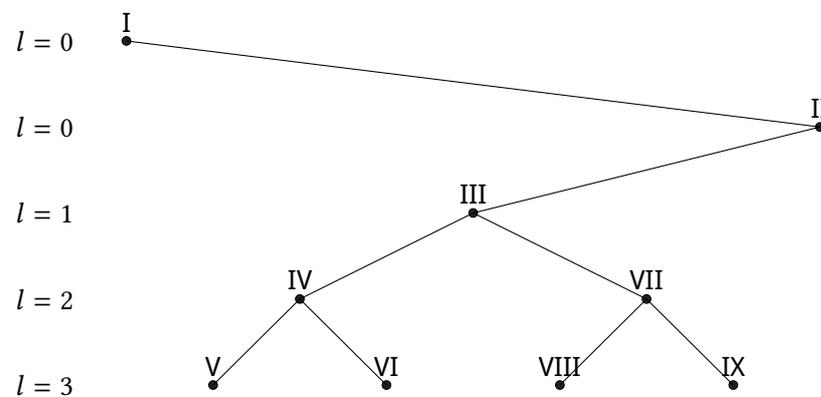


Abbildung 4.10: Schema einer eindimensionalen, sequentiellen Gitterverfeinerung, die römischen Zahlen deuten die Reihenfolge an

Erfüllt die Interpolante an einer überprüften Stelle das Genauigkeitskriterium, wird der Gitterpunkt verworfen und die Gitteradaption kann in dieser Richtung abgebrochen werden. Zuvor muss jedoch überprüft werden, ob durch eine Verfeinerung des Gitters in einer anderen Dimension Kinder in der aktuellen Dimension

Algorithmus 4.2 : Funktion der rekursiven Dünngitteradaption**Funktion** ADAPTSPARSEGRID(X, i, l, D)**Eingabe** : X, i, l, D **Ausgabe** : X **wenn** maximale Hierarchiestufe oder Verfeinerung erreicht **dann**| zurück X **Ende**EVALFUNC(f, i, l) ▷ Funktion am Gitterpunkt auswertenINTERPSPARSEGRID(\tilde{f}, X, i, l) ▷ Interpolante am Gitterpunkt berechnen $u = f - \tilde{f}$ ▷ hierarchischer Überschuss berechnen**wenn** Kriterium für Verfeinerung erfüllt **dann**| Gitterpunkt (i, l) in Datensatz X aufnehmen**Ende****für** $d \leftarrow 1$ **bis** D **tue**| $l^* \leftarrow l$ ▷ Zurücksetzen der Stufe| $i^* \leftarrow i$ ▷ Zurücksetzen des Index**wenn** Randpunkt $l_d^* = 0$ **dann**| **wenn** linker Rand $i_d^* = 1$ **dann**| | $i_d^* \leftarrow 2$ ▷ Index des rechten Eckpunkts| **sonst**| | $l_d^* \leftarrow 1$ ▷ neue hierarchische Stufe| **Ende**| ADAPTSPARSEGRID(X, i^*, l^*, d)| **sonst**| | $l_d^* \leftarrow l_d + 1$ ▷ neue hierarchische Stufe| | **für** $j \leftarrow 1$ **bis** 2 **tue**| | | $i_d^* \leftarrow 2i_d - 4 + 2j$ ▷ Index des linken/rechten Nachbarn| | **wenn** Gitterpunkt (i, l) wurde verworfen **dann**| | | SEARCHPARENTS(X, i^*, l^*, d)| | **Ende**| | **wenn** Gitterpunkt hat Eltern **dann**| | | ADAPTSPARSEGRID(X, i^*, l^*, d)| | **Ende**| **Ende**| **Ende****Ende****Ende**

entstehen könnten, also ob sogenannte *Eltern* in anderen Dimensionen existieren (Algorithmus 4.3 SEARCHPARENTS). In Abbildung 4.11 wird dieses Problem für ein zweidimensionales Beispiel veranschaulicht. Angenommen der grün markierte Punkt wird aus der Verfeinerung in der Dimension $d = 1$ (waagrecht) für $l_2 = 2$ verworfen, so wird der rot markierte Punkt nicht mehr überprüft. Dieser könnte aber auch aus einer Verfeinerung in der Dimension $d = 2$ (senkrecht) aus dem blau markierten Punkt entstehen, oder sogar noch einen Schritt weiter der hellrote aus dem hellblauen Punkt. Existiert der blaue Punkt oder eines seiner Kinder (hellblauer Punkt), gibt es Elternpunkte des roten Punkts oder seiner möglichen Kinder (hellroter Punkt) in einer anderen Dimension (hier $d = 2$). Daher muss die Verfeinerung in der Dimension $d = 1$ für $l_2 = 2$ für den roten Punkt fortgeführt werden, obwohl der grün markierte Punkt verworfen wird. Falls der aktuelle, grün markierte Punkt verworfen wird und die Elternsuche in höheren Dimensionen auch negativ verläuft (die blauen Punkte existieren nicht), wird die Verfeinerung in dieser Richtung für $l_2 = 2$ abgebrochen. Durch die Elternsuche in anderen Dimensionen ist das resultierende Gitter unabhängig von der Reihenfolge der Dimensionen.

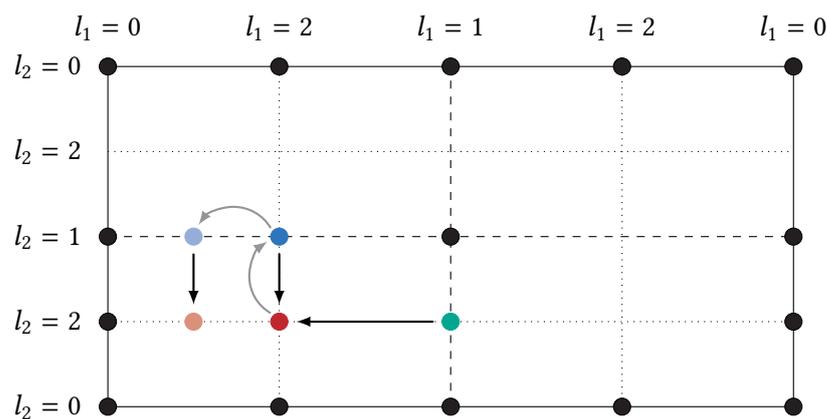


Abbildung 4.11: Schema zur Erläuterung der Eltern eines Gitterpunkts in höheren Dimensionen an einem zweidimensionalen Beispiel

Die Elternsuche in anderen Dimensionen wird in Algorithmus 4.3 beschrieben. Dabei werden nacheinander die direkten Eltern in allen Dimensionen höher als der aktuellen gesucht (entspricht dem blau markierten Punkt in Abbildung 4.11). Jeweils davon ausgehend werden deren mögliche Kinder (Algorithmus 4.4 CALCCHILDREN) in der ursprünglich zu verfeinernden Dimension berechnet, wie in Abbildung 4.11 der hellblau markierte Punkt. Existiert einer dieser Punkte im Datensatz X , wurden demnach Eltern in einer höheren Dimension gefunden, muss die Verfeinerung in der ursprünglichen Dimension fortgeführt werden.

Algorithmus 4.3 : Funktion der Elternsuche in höheren Dimensionen**Funktion** SEARCHPARENTS(X, i, l, D)**Eingabe** : X, i, l, D **Ausgabe** : wahr oder falsch**für** $d > D$ **tue** $l^* \leftarrow l$ $l_d^* \leftarrow l_d - 1$

▷ hierarchische Stufe des Elternteils

 $i^* \leftarrow i$ $i_d^* \leftarrow i_d/2 + 1$

▷ Index des Elternteils

wenn $(i_d^* \bmod 2) > 0$ **dann** $i_d^* \leftarrow i_d^* - 1$ **Ende** CALCCHILDREN(Y, i_d^*, l_d^*)

▷ Kinder suchen

wenn *mindestens ein Punkt aus* $Y \in X$ **dann** **zurück** *wahr*

▷ Eltern in höherer Dimension gefunden

Ende**Ende****zurück** *falsch*

▷ keine Eltern in höheren Dimensionen gefunden

Ende

Die Berechnung der Kinder und Kindeskindern eines Gitterpunkts in einer Dimension d wird in Algorithmus 4.4 erläutert. Ausgehend vom Index i_d und der Hierarchiestufe l_d des Gitterpunkts wird die Stufe schrittweise erhöht und der Index der $2^{(l_d^* - l_d)}$ Kinder in der Stufe l_d^* berechnet. Diese Punkte werden in den temporären Datensatz Y aufgenommen. Anschließend wird für die nachfolgende Hierarchiestufe der neue Index des Startpunkts in der Stufe l_d^* berechnet und der Vorgang wiederholt bis die maximale Hierarchiestufe erreicht wird. Damit sind alle möglichen Kinder im temporären Datensatz Y enthalten.

Algorithmus 4.4 : Funktion der Berechnung der möglichen Kinder eines Punktes in einer Dimension

Funktion CALCCHILDREN(Y, i, l)
 Eingabe : i, l
 Ausgabe : Y
 $Y \leftarrow \text{leer}$
 für $l^* > l$ **tue**
 für $i^* \leftarrow 1$ **bis** $2^{(l^*-l)}$ **tue**
 $i^* \leftarrow i \cdot 2 + i^* \cdot 2 - 4$ ▷ Index der Kinder
 Gitterpunkt in temporären Datensatz Y aufnehmen
 Ende
 $i \leftarrow i \cdot 2 - 2$
 Ende
Ende

5

Konfiguration und Implementierung

5.1 Numerische Implementierung

Für die detaillierten und reduzierten Berechnungen der Reaktionssysteme werden die institutseigenen Programmpakete HOMREA und INSFLA [77, 83] herangezogen. Mit HOMREA lassen sich dabei homogene Systeme untersuchen, wohingegen mit INSFLA räumlich eindimensionale Reaktionssysteme behandelt werden können. Beide Programmpakete bedienen sich zur Lösung der partiellen Differentialgleichungssysteme entweder dem linear impliziten Extrapolationsverfahren LIMEX [37] oder dem Rückwärtsdifferenzenverfahren DASSL [20, 101]

Die Nachbearbeitung der Rohdaten aus den detaillierten Berechnungen und die Erstellung des Modells als multidimensionale Tabellierung werden in MATLAB [85] durchgeführt. Die Interpolation und die Kopplung der Modelle erfolgt mit Hilfe eines in FORTRAN [64] geschriebenen, objektorientierten Moduls. Über dieses modelleigene Schnittstellenprogramm wird das Modell in HOMREA und INSFLA oder auch anderen Anwendungen implementiert.

5.2 Modellkraftstoff und Reaktionsmechanismus

Es gibt unterschiedliche Ansätze für den Betrieb eines HCCI/CAI-Motors [58, 95] mit verschiedenen Kraftstoffen, sowohl basierend auf Ottomotoren als auch auf Dieselmotoren. Für die folgenden Betrachtungen in dieser Arbeit wird davon ausgegangen, dass ein HCCI/CAI-Motor im Serienbetrieb mit Euro Super Benzin [38] mit einer *Research-Oktananzahl* (ROZ) von mindestens 95 betrieben wird. Um die Reproduzierbarkeit und Vergleichbarkeit von experimentellen Untersuchungen

und numerischen Simulationen zu gewährleisten, wird bei der wissenschaftlichen Untersuchung des Brennverfahrens ein Modellkraftstoff verwendet [58]. Reine Mischungen aus iso-Oktan und n-Heptan werden als *primary reference fuel* (PRF) bezeichnet. In manchen Fällen wird zusätzlich Toluol beigemischt, weshalb man dann von *toluene reference fuel* (TRF) spricht. Toluol wird bei der experimentellen Untersuchung von Verbrennungsprozessen mittels *laserinduzierte Fluoreszenz* (LIF) [67, 69, 119] oft als Tracer verwendet. Daher wurde in Zusammenarbeit mit den Projektpartnern [79, 82] eine Mischung aus iso-Oktan, n-Heptan und Toluol als Modellkraftstoff festgelegt. In Tabelle 5.1 ist das Mischungsverhältnis der Kraftstoffkomponenten aufgeführt. Nach den Untersuchungen zu TRF-Mischungen aus [55] wurde für dieses Mischungsverhältnis eine ROZ von 97,9 ermittelt. Zusätzlich ist in Tabelle 5.1 die Zusammensetzung der Luft dargestellt, wie sie für alle Simulationen in dieser Arbeit angenommen wurde.

Tabelle 5.1: Zusammensetzung des Modellkraftstoffs und von Luft

	Komponente	Summenformel	vol-%	mol-%
Kraftstoff	iso-Oktan	C_8H_{18}	82,08	76,99
	n-Heptan	C_7H_{16}	7,92	8,35
	Toluol	$C_6H_5CH_3$	10,00	14,66
Luft	Sauerstoff	O_2		21,00
	Stickstoff	N_2		78,00
	Argon	Ar		1,00

Wie in Abschnitt 3.2 und Abschnitt 3.1 beschrieben, bilden Berechnungen mit detaillierter chemischer Kinetik die Grundlage für sowohl das PVM als auch das REDIM-Modell. Daher wird für die Modellerstellung ein detaillierter Reaktionsmechanismus für den gewählten Modellkraftstoff benötigt. In der Literatur existieren Reaktionsmechanismen sowohl für binäre Mischungen aus iso-Oktan und n-Heptan (PRF) [34, 35] als auch für tertiäre Mischungen aus iso-Oktan, n-Heptan und Toluol (TRF) [2–4, 86]. Tabelle 5.2 gibt eine Übersicht über einige TRF-Mechanismen und deren Umfang an enthaltenen Spezies und Reaktionen. Bei den Mechanismen »Andrae-b«, »Mehl-b« und »Mehl-c« handelt es sich um sogenannte *semi-detaillierte* oder *Skelett*-Mechanismen, die aus den jeweiligen detaillierten Mechanismen »Andrae-a« bzw. »Mehl-a« mittels automatischer Reduktionsmethoden extrahiert wurden.

Alle in Tabelle 5.2 aufgeführten Reaktionsmechanismen sind mit experimentellen Daten validiert. In Abbildung 5.1 sind zusammenfassend die Zündverzugszeiten t_{ign} [117] aus Simulationen mit allen genannten Reaktionsmechanismen und

Tabelle 5.2: Auswahl verschiedener Reaktionsmechanismen für TRF

Mechanismus	Kürzel	Spezies	Reaktionen
ANDRAE et al. [2]	Andrae-a	1083	8854
ANDRAE et al. [4]	Andrae-b	143	675
MEHL et al. [86]	Mehl-a	1389	5935
MEHL et al. [86]	Mehl-b	679	3479
MEHL et al. [86]	Mehl-c	312	1488

Ergebnisse aus Stoßrohrmessungen [45] gegenübergestellt. Als Modellkraftstoff wurde dafür eine iso-Oktan/n-Heptan/Toluol-Mischung mit 69/17/14 vol-% verwendet. Die experimentellen Daten sind, wie in [45] vorgeschlagen, auf einen Druck von $p = 55$ bar skaliert.

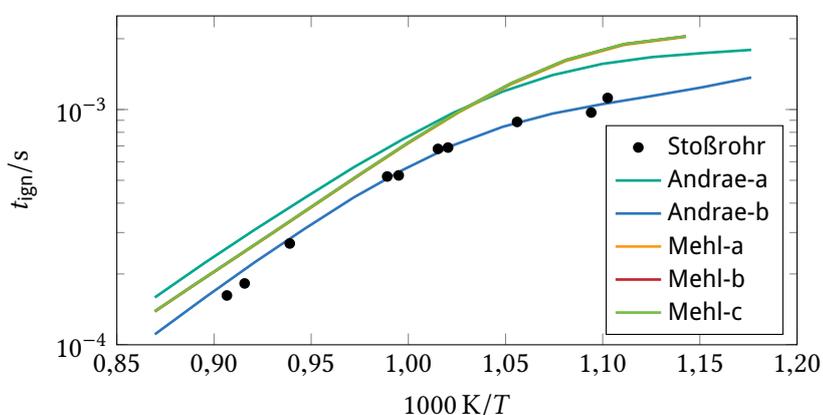


Abbildung 5.1: Vergleich von Zündverzugszeiten aus Stoßrohrexperimenten [45] und der Berechnung mit verschiedenen Reaktionsmechanismen [2, 4, 86] in einem TRF/Luft-System bei $\phi = 1$, $p = 55$ bar

Abbildung 5.2 vergleicht weiter die Zündverzugszeit [117] aus Simulationen für die in Tabelle 5.1 vorgestellte Kraftstoffzusammensetzung bei $\phi = 1$ und $p = 10$ bar bzw. $p = 40$ bar. Für diese spezielle Kraftstoffzusammensetzung liegen allerdings keine experimentellen Vergleichsdaten vor.

Zwischen den einzelnen Ergebnissen sind teilweise Abweichungen zu erkennen, vor allem im Bereich kleiner Temperaturen, wie in Abbildung 5.1. Insgesamt zeigen die Mechanismen vergleichbare Ergebnisse, wobei »Andrae-b« am besten mit den Stoßrohrexperimenten übereinstimmt. Aufgrund der Größe der Mechanismen ergeben sich zudem sehr deutliche Unterschiede in der Rechenzeit. So lagen bei den in Abbildung 5.1 und 5.2 gezeigten Ergebnissen die Rechenzeiten

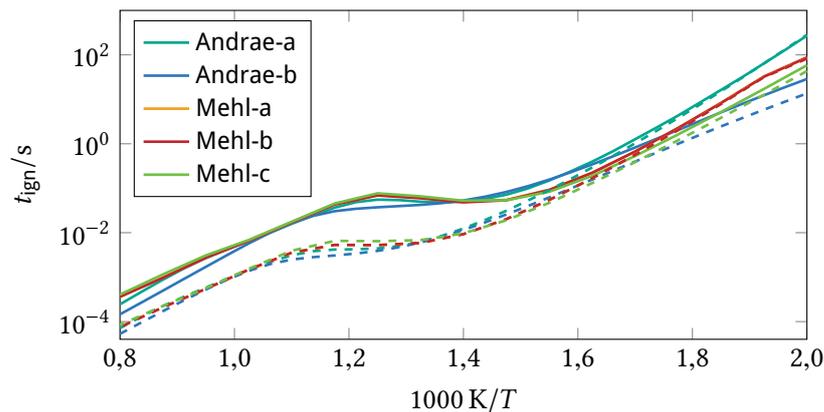


Abbildung 5.2: Vergleich von Zündverzugszeiten aus der Berechnung mit verschiedenen Reaktionsmechanismen [2, 4, 86] in einem TRF/Luft-System bei $\phi = 1$, durchgezogen: $p = 10$ bar, gestrichelt: $p = 40$ bar

mit »Andrae-a« um einen Faktor 30 bis 40 höher als mit »Andrae-b«.

Aufgrund der Validierung speziell für HCCI-relevante Bedingungen und der überschaubaren Rechenzeiten wird in dieser Arbeit der semi-detaillierte Reaktionsmechanismus »Andrae-b« [4] verwendet. Weitere Untersuchungen und Validierungen zu diesem Mechanismus sind in [55, 56] zu finden.

5.3 Konfiguration zur Lösung der REDIM-Entwicklungsgleichung

Für die Lösung der REDIM-Entwicklungsgleichung 3.7 muss, wie in Abschnitt 3.1 beschrieben, eine geeignete Anfangslösung erstellt und eine Abschätzung der räumlichen Gradienten des reduzierten Zustands vorgegeben werden. Dazu ist es hilfreich, das Verbrennungsszenario im realen System über ein einfaches Modellsystem anzunähern.

Bei einem Motor im CAI-Modus erfolgt üblicherweise eine sehr frühe Einspritzung des Kraftstoffs in Luft oder in zurückgehaltenes Abgas. Durch die Kompression steigt die Temperatur von Kraftstoff und Luft im Zylinder gleichermaßen an. Inhomogenitäten in der Mischung zum Zeitpunkt der einsetzenden Verbrennung können daher lokal durch eine Kraftstoff/Luft-Gegenstromanordnung gleicher Temperatur vereinfacht abgebildet werden [99, 117]. Abbildung 5.3 zeigt schematisch eine solche Gegenstromanordnung.

Durch Ausnutzung der Symmetrie und der PRANDTL'schen Grenzschichttheorie kann das Problem auf eine Raumrichtung reduziert werden [77]. Entsprechend

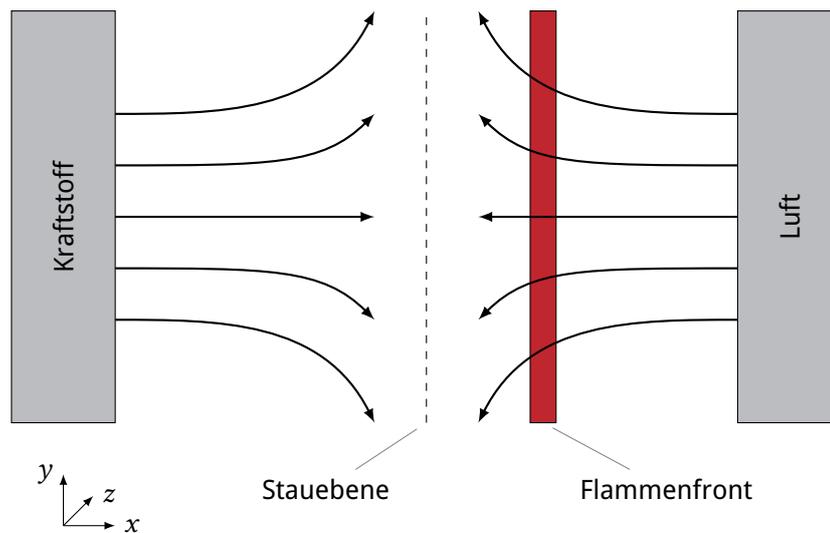
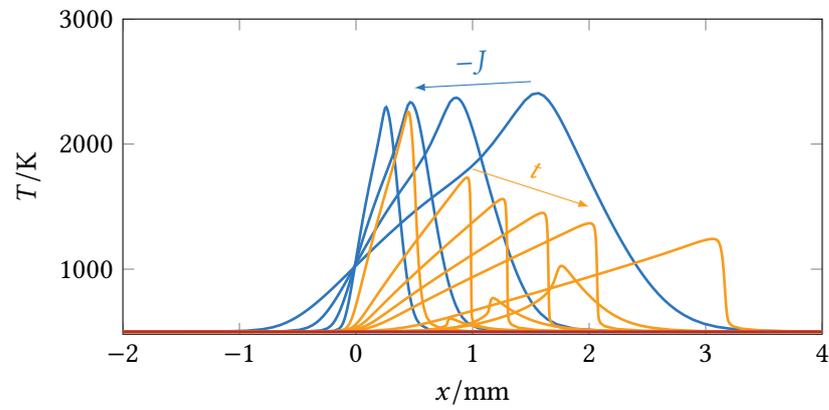


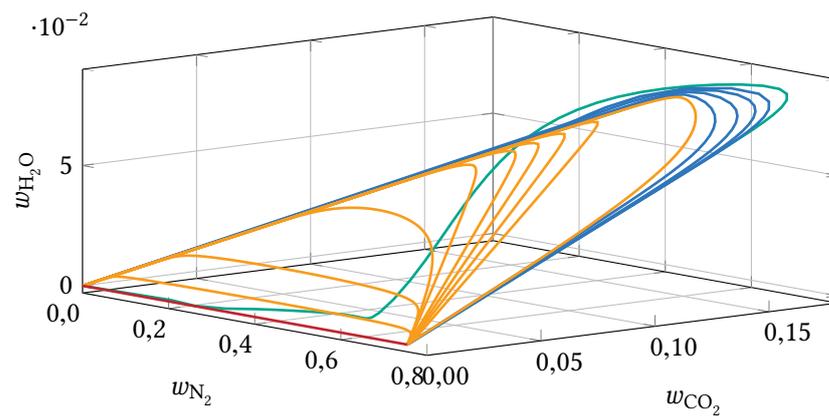
Abbildung 5.3: Schema einer nicht vorgemischten Gegenstromflamme

werden Berechnungen von isobaren, adiabatischen, nicht vorgemischten Gegenstromflammen mit einer planaren Brenneranordnung [117] durchgeführt. Die Temperatur des Kraftstoffs auf der einen und der Luft auf der anderen Seite werden dabei auf den selben Wert gesetzt, mit der zusätzlichen Modellannahme, dass der Kraftstoff bei diesen Bedingungen gasförmig vorliegt. Somit ist neben dem Druck p auch die Temperatur T_{ub} im unverbrannten Gemisch über die Ortskoordinate konstant. Über die Änderung des Druckgradienten J in tangentialer y -Richtung und Anpassen der Ausströmgeschwindigkeiten von Kraftstoff und Luft in axialer x -Richtung wird die Streckung der Flamme variiert. Dadurch werden stationäre Flammenprofile mit unterschiedlicher Streckungsrate bei festem T_{ub} und p bis zur Streckgrenze generiert. Durch weiteres Erhöhen der Streckungsrate kommt es zum Verlöschen der Flamme und der Mischungsgeraden als stationärer Lösung. Die stationären Flammenprofile und die Profile der verlöschenden Flamme bei unterschiedlichen Zeitschritten bilden eine Fläche im Zustandsraum. In Abbildung 5.4a sind die Flammenprofile im Ortsraum und in Abbildung 5.4b in einer Projektion des Zustandsraums beispielhaft für $T_{ub} = 500\text{ K}$ und $p = 10\text{ bar}$ dargestellt. Zur besseren Orientierung ist der Ursprung der Ortskoordinate x in die Staubebene verschoben.

In Richtung geringer Streckungsraten kann diese Fläche durch die BURKE-SCHUMANN-Lösung [26] erweitert werden. Aufgrund der unphysikalischen Zustände kann es dabei jedoch zu Problemen bei der Lösung der REDIM-Entwicklungsgleichung kommen, wenn wie hier DIRICHLET-Randbedingungen angenommen werden. Daher werden mit Hilfe eines Algorithmus [103] das chemische



(a) Flammenprofile einer Gegenstromanordnung im Ortsraum, links: Kraftstoff, rechts: Luft



(b) Flammenprofile einer Gegenstromanordnung in einer Projektion des Zustandsraums

Abbildung 5.4: Flammenprofile für die Anfangslösung der REDIM-Entwicklung für ein TRF/Luft-System [4] bei $T_{ub} = 500 \text{ K}$, $p = 10 \text{ bar}$, grün: Gleichgewichtszustände, blau: stationäre Flammen mit $10^3 \leq -J/\text{Pa m}^{-1} \leq 10^6$, orange: verlöschende Flamme mit $0 \leq t/\text{ms} \leq 1,5$, rot: Mischungsgerade

Gleichgewicht auf Basis der thermodynamischen Größen für verschiedene Mischungsverhältnisse von Kraftstoff und Luft berechnet und zu einem künstlichen Flammenprofil aus Zuständen im chemischen Gleichgewicht zusammengesetzt. Dadurch ergibt sich ein physikalisch sinnvoller Rand für die Anfangslösung. In Abbildung 5.4b ist dieses künstliche Profil ebenfalls dargestellt.

Nun wird über eine Anfangsparametrisierung (χ, Z) ein zweidimensionales Rechengitter erstellt und die Flammenprofile darauf interpoliert, womit die Anfangslösung in der Form $\Psi_0(\theta)$ vorliegt. Die Gradientenabschätzung wird, wie in Unterabschnitt 3.1.3 beschrieben, über Gleichung 3.12 aus den detaillierten Gradienten der Anfangslösung abgeleitet. Ferner werden weitere Details zum Vorgehen und zum Lösungsverfahren der REDIM-Integration in [109] beschrieben.

Durch Ändern der Temperatur des Kraftstoff- und Luftstroms und des Drucks bei der Berechnung der Flammenprofile werden auf diese Weise mehrere zweidimensionale Anfangslösungen für unterschiedliche Parameter T_{ub} und p erstellt. Dies führt, bedingt durch die unterschiedlichen Randbedingungen und Gradienten, zu mehreren zweidimensionalen REDIMs jeweils in den lokalen Koordinaten χ und Z und den zusätzlichen Parametern T_{ub} und p . Wie in Abbildung 5.5 angedeutet, kann so ein REDIM-basiertes Modell für weite Bereiche in T_{ub} und p aus mehreren zweidimensionalen REDIMs aufgebaut werden.

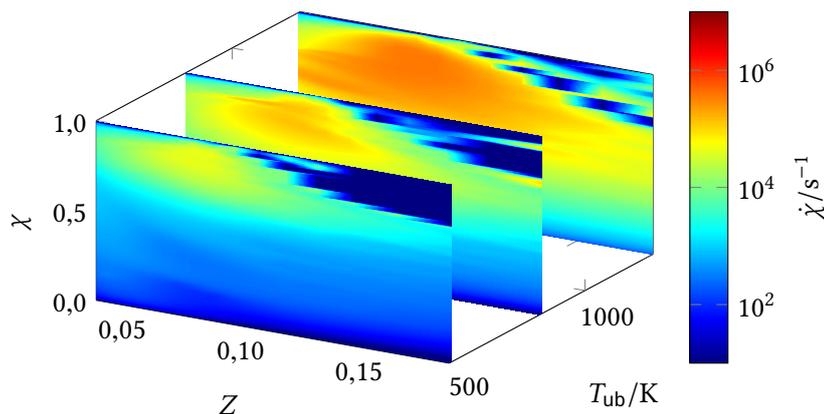


Abbildung 5.5: Dreidimensionale Mannigfaltigkeit für ein TRF/Luft-System [4] aufgebaut aus mehreren zweidimensionalen REDIMs für unterschiedliche Temperaturen T_{ub} im unverbrannten Gemisch bei $p = 10$ bar

5.4 Linearisierung der Fortschrittsvariablen

Im reduzierten Modell beschreibt der chemische Quellterm der Fortschrittsvariablen die chemische Dynamik des Systems. Dabei spielen sehr kleine Werte

eine besonders große Rolle, da sie beispielsweise die Zündverzugszeit in wesentlichem Maße bestimmen [61]. Jedoch führt die numerische Implementierung und die begrenzte Rechengenauigkeit bei der Erstellung des Modells zu numerischen Ungenauigkeiten, besonders bei diesen sehr kleinen Werten des Quellterms. So sind beispielsweise zu Beginn eines Zündprozesses die meisten Spezies (bis auf Kraftstoff und Luft) noch nicht vorhanden, wohingegen die Bildungsraten dieser Spezies merkliche Werte besitzen. Bedingt durch die Singularität der Logarithmusfunktion an der Stelle 0 führen diese Spezies in folgendem Term der Gleichung 3.28 zu Problemen bei der Berechnung der Bildungsgeschwindigkeit der spezifischen, durch chemische Reaktion produzierten Entropie:

$$\dot{w}_{i,\text{chem}} \frac{R_u}{M_i} \ln \frac{p_i}{p^\ominus}, \quad (5.1)$$

wenn für die Spezies i der Partialdruck $p_i = 0$, jedoch $\dot{w}_{i,\text{chem}} \neq 0$ gilt. Entsprechend der numerischen Behandlung der Singularität führt dies zu nahezu willkürlichen Werten für den chemischen Quellterm der entropiebasierten Fortschrittsvariablen bei sehr kleinen Zeitpunkten.

Untersuchungen [61] haben gezeigt, dass die reduzierte Berechnung von Zündverzugszeiten extrem sensitiv auf numerisch bedingte Ungenauigkeiten in den ersten Gitterpunkten des PVM reagiert. Um zu einer Lösung des Problems zu gelangen und eine zuverlässige Vorhersage der Zündverzugszeit zu gewährleisten, wird beim PVM eine Linearisierung des Quellterms für kleine Werte der Fortschrittsvariablen durchgeführt.

In [61] wird eine Linearisierung des zeitlichen Verlaufs der Fortschrittsvariablen bis zu einem festgelegten Zeitpunkt t_{lin} vorgeschlagen, mit der die Werte $\chi^{(T)}$ bzw. Quellterme $\dot{\chi}^{(T)}$ aus der detaillierten Berechnung der Trajektorie in diesem Bereich ersetzt werden:

$$\chi(t) = \begin{cases} a \cdot t & 0 \leq t \leq t_{\text{lin}} \\ \chi^{(T)}(t) & t_{\text{lin}} < t \leq t_\infty \end{cases}, \quad (5.2)$$

$$\dot{\chi}(t) = \begin{cases} a & 0 \leq t \leq t_{\text{lin}} \\ \dot{\chi}^{(T)}(t) & t_{\text{lin}} < t \leq t_\infty \end{cases}. \quad (5.3)$$

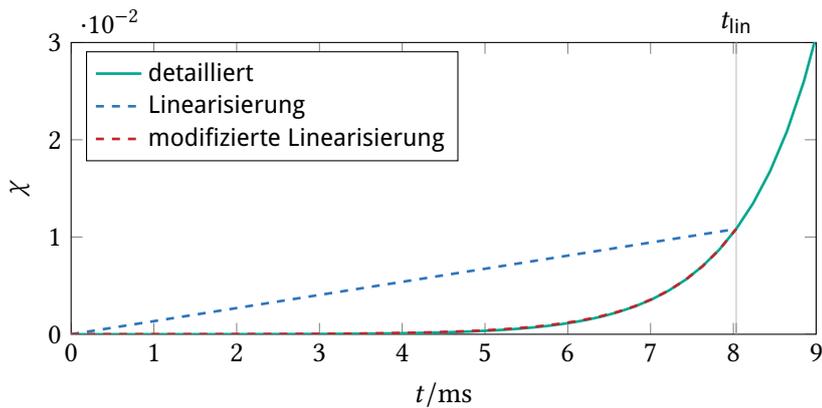
Hier steht der Index T für die Werte der Trajektorie. Die Steigung a der Linearisierung wird dabei so gewählt, dass die Fortschrittsvariable am gewählten Zeitpunkt t_{lin} stetig ist:

$$a = \frac{\chi_{\text{lin}}}{t_{\text{lin}}} \quad \text{mit} \quad \chi_{\text{lin}} = \chi^{(T)}(t_{\text{lin}}). \quad (5.4)$$

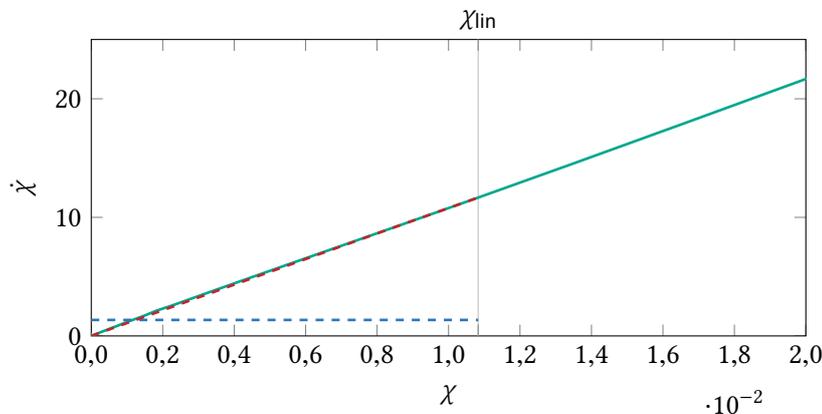
Somit ergibt sich für den chemischen Quellterm:

$$\dot{\chi}(\chi) = \begin{cases} a & 0 \leq \chi \leq \chi_{\text{lin}} \\ \dot{\chi}^{(T)}(\chi) & \chi_{\text{lin}} < \chi \leq 1 \end{cases}. \quad (5.5)$$

Durch diese Linearisierung wird zwar gewährleistet, dass eine Integration der Fortschrittsvariablen wieder $\chi(t_{\text{lin}}) = \chi_{\text{lin}}$ liefert, der detaillierte zeitliche Verlauf, wie in Abbildung 5.6a dargestellt, wird dabei jedoch nicht rekonstruiert. Ein weiteres Manko dieser Methode ist der Sprung des chemischen Quellterms bei χ_{lin} , wie in Abbildung 5.6b deutlich zu sehen ist. Der Bereich der Linearisierung $0 \leq \chi \leq \chi_{\text{lin}}$ stellt bei der Approximation des chemischen Quellterms mit diskreten Gitterpunkten einer Tabelle kein Problem dar. Der Sprung nach der Linearisierung $\chi > \chi_{\text{lin}}$ jedoch erfordert eine sehr feine Auflösung des Tabellierungsgitters, um merkbare Interpolationsfehler zu vermeiden.



(a) Zeitliche Entwicklung der Fortschrittsvariablen



(b) Quellterm der Fortschrittsvariablen zur Tabellierung

Abbildung 5.6: Linearisierung der Fortschrittsvariablen (PVM) für ein TRF/ Luft-Gemisch [4] bei $\phi = 1$, $T = 750 \text{ K}$, $p = 10 \text{ bar}$

Eine Modifikation dieses Ansatzes ist die Linearisierung des Verlaufs des Quell-

terms über der Fortschrittsvariablen selbst:

$$\dot{\chi}(\chi) = \begin{cases} b_1 \cdot \chi + b_0 & 0 \leq \chi \leq \chi_{\text{lin}} \\ \dot{\chi}^{(T)}(\chi) & \chi_{\text{lin}} < \chi \leq 1 \end{cases} . \quad (5.6)$$

Die analytische Lösung dieser Differentialgleichung und somit der zeitliche Verlauf der Fortschrittsvariablen ergibt:

$$\chi(t) = \begin{cases} \frac{b_0}{b_1} (e^{b_1 t} - 1) & 0 \leq t \leq t_{\text{lin}} \\ \chi^{(T)}(t) & t_{\text{lin}} < t \leq t_{\infty} \end{cases} \quad (5.7)$$

und weiter der zeitliche Verlauf des Quellterms:

$$\dot{\chi}(t) = \begin{cases} b_0 e^{b_1 t} & 0 \leq t \leq t_{\text{lin}} \\ \dot{\chi}^{(T)}(t) & t_{\text{lin}} < t \leq t_{\infty} \end{cases} . \quad (5.8)$$

Mit der Forderung nach Stetigkeit, als auch Differenzierbarkeit am gewählten Zeitpunkt t_{lin} , lassen sich die Koeffizienten b_0 und b_1 berechnen:

$$b_0 = \dot{\chi}_{\text{lin}} e^{-b_1 t_{\text{lin}}} , \quad (5.9)$$

$$b_1 = \frac{W(-b_1^* t_{\text{lin}} e^{-b_1^* t_{\text{lin}}})}{t_{\text{lin}}} + b_1^* , \quad (5.10)$$

mit

$$b_1^* = \frac{\dot{\chi}_{\text{lin}}}{\chi_{\text{lin}}} . \quad (5.11)$$

Ferner bezeichnet W die LAMBERT'sche W -Funktion [32], die die Umkehrfunktion von

$$f(x) = x e^x \quad (5.12)$$

darstellt. Die W -Funktion ist auf dem Intervall $[-1/e, 0)$ nicht injektiv. In Abbildung 5.7 sind die beiden Hauptäste W_0 und W_{-1} der Funktion dargestellt.

Abbildung 5.6 vergleicht die beiden Ansätze zur Linearisierung der Fortschrittsvariablen mit den Werten aus der detaillierten Berechnung der Trajektorie. Es ist deutlich zu erkennen, dass durch die modifizierte Linearisierung die oben erwähnten Schwierigkeiten bei der Interpolation beseitigt werden und der daraus resultierende zeitliche Verlauf der Fortschrittsvariablen nahezu identisch mit dem der detaillierten Trajektorie ist.

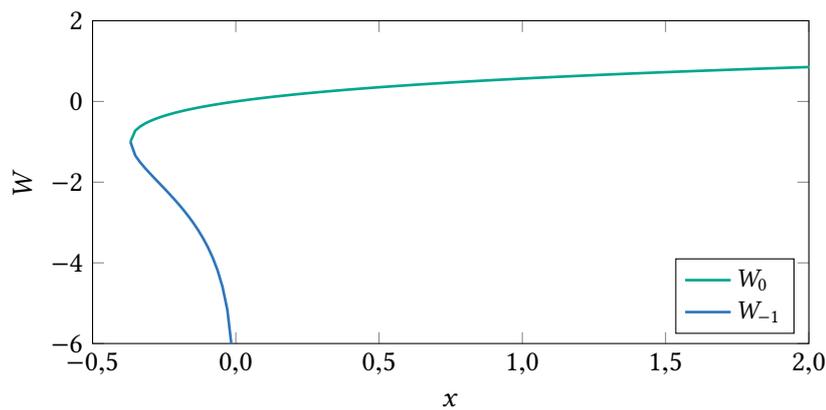


Abbildung 5.7: Die zwei Hauptäste W_0 und W_{-1} der LAMBERT'schen W -Funktion [32]

5.5 Vereinfachungen bei der Kopplung der Modelle zu einer erweiterten Mannigfaltigkeiten

Obwohl die in Abschnitt 3.3 beschriebene Vorgehensweise zur Erweiterung von Mannigfaltigkeiten einen kontinuierlichen Verlauf des Parameters α erlaubt, wird im Rahmen dieser Arbeit ein linearer Ansatz gewählt. Das in Abschnitt 3.1 beschriebene REDIM-Modell und das in Abschnitt 3.2 beschriebene PVM stellen die beiden Extremfälle bezüglich der Stärke der räumlichen Gradienten dar und entsprechen damit im vorgestellten Ansatz der erweiterten Mannigfaltigkeit den Punkten $\alpha = 1$ bzw. $\alpha = 0$. Die Zustände auf der erweiterten Mannigfaltigkeit $\Psi(\theta; \alpha)$ ergeben sich aus der linearen Interpolation zwischen dem REDIM-Modell und dem PVM.

Für die Anwendung in einer reduzierten Berechnung muss schließlich der reduzierte chemische Quellterm aus den detaillierten Zuständen $\Psi(\theta; \alpha)$ berechnet werden. In Abbildung 5.8 ist der Quellterm der Fortschrittsvariablen dargestellt. Für die durchgezogenen Linien wurden die detaillierten Zustände $\Psi(\theta; \alpha)$ interpoliert und anschließend der Quellterm der Fortschrittsvariablen $\dot{\chi}(\Psi(\theta; \alpha))$ berechnet. Für die gestrichelten Linien wurde der Quellterm $\dot{\chi}(\theta; \alpha)$ direkt interpoliert. Trotz der hohen Nichtlinearität der chemischen Quellterme ist die Abweichung dabei im gesamten Bereich sehr klein ist.

Als Vereinfachung wird deshalb in den folgenden Anwendungen des gekoppelten Modells der Quellterm, wie in Abbildung 5.8 dargestellt, direkt aus den Teilmodellen interpoliert. Dadurch kann ein stetiger Übergang zwischen den Mannigfaltigkeiten gewährleistet werden, ohne zusätzlichen Rechenaufwand oder den Bereich zusätzlich zu tabellieren. Dies wird nicht notwendigerweise

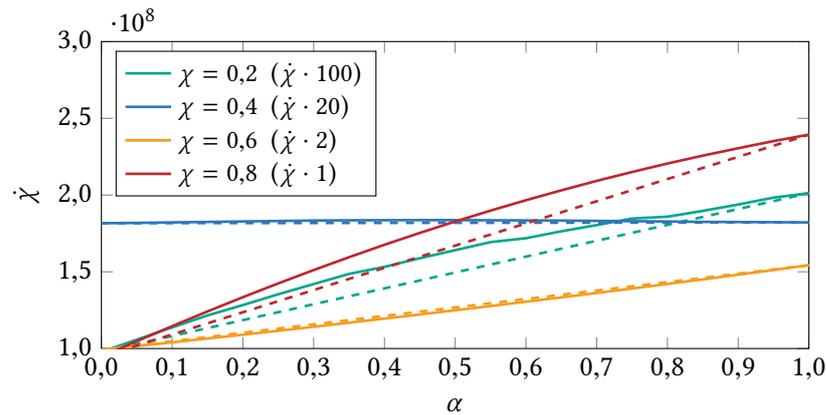


Abbildung 5.8: Quellterm der Fortschrittsvariablen für das gekoppelte Modell für ein TRF/Luft-System [4] bei $\phi = 1$, $T_{ub} = 1000$ K, $p = 10$ bar, durchgezogen: Quellterm berechnet aus interpolierten Zuständen, gestrichelt: interpolierter Quellterm

mit dem genauen physikalischen Verhalten übereinstimmen; jedoch liegt der Fokus darauf, ein praktisches, einfaches und robustes Modell zu erhalten, das die Beschreibung der Selbstzündung und die der Flammenausbreitung vereint.

5.6 Modifikation der Parameter bei äquidistanter Tabellierung

Wie in Abschnitt 4.3 beschrieben, ist die Tabellierung auf einem äquidistanten Gitter eine einfache und vor allem effiziente Möglichkeit der diskreten Approximation mehrdimensionaler Funktionen. Das Abrufen und Interpolieren von Werten ist mit wenig Rechenaufwand verbunden, was bei der Implementierung in reduzierte Verbrennungssimulationen einen wichtigen Faktor darstellt. Der bereits erwähnte Nachteil ist die starke nichtlineare Abhängigkeit der chemischen Kinetik, weshalb in [61] eine Modifikation der Parameter Z , T_{ub} , p für die äquidistante Tabellierungsstrategie vorgeschlagen wird. Die Modifikation der Fortschrittsvariablen χ sollte nicht notwendig sein, da die Forderung nach einer guten Auflösung aller Phasen der chemischen Kinetik bereits in ihre Formulierung eingeflossen ist.

Für den Mischungsbruch wird die folgende Substitution durchgeführt [61]:

$$\eta = \frac{Z_{st}}{Z_{st} + Z}, \quad (5.13)$$

mit dem stöchiometrischen Mischungsbruch Z_{st} .

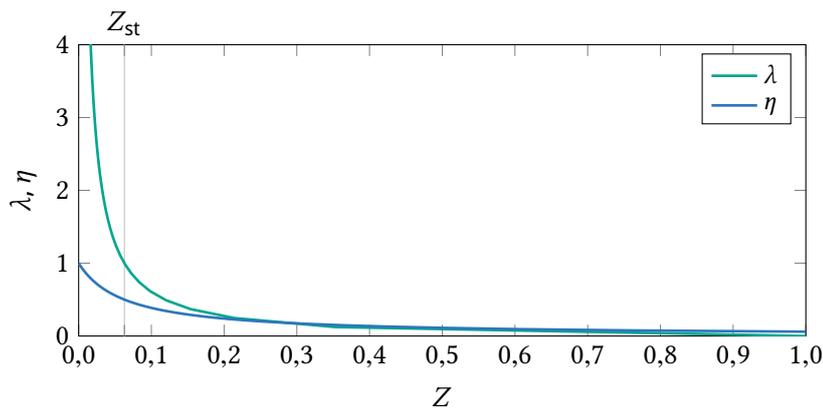


Abbildung 5.9: Funktionen λ und η des Mischungsbruchs für die Tabellierung für ein TRF/Luft-Gemisch, mit einem stöchiometrischen Mischungsbruch $Z_{st} = 0,063$

Abbildung 5.9 zeigt den Zusammenhang der Variablen η und dem Mischungsbruch und vergleicht diesen mit dem der Luftzahl λ . Beide Ansätze haben einen ähnlichen Verlauf, wobei die Luftzahl einen steileren Verlauf zeigt und somit bei äquidistanter Tabellierung das Gitter im Mischungsbruch stärker in Richtung mager verzerrt. Zudem hat die Funktion $\lambda(Z)$ eine Singularität an der Stelle $Z = 0$, was die praktische Anwendung als Tabellierungsparameter erschwert. Die Formulierung aus Gleichung 5.13 ist auf das Wertintervall $[0, 1]$ beschränkt und ist ein guter Kompromiss zwischen der Auflösung im Bereich sowohl magerer als auch fetter Zusammensetzungen.

Begründet durch den ARRHENIUS-Ansatz aus Gleichung 2.7 gilt:

$$\ln \omega_i \propto \frac{1}{T}. \quad (5.14)$$

Deshalb wird für die Tabellierung des chemischen Quellterms die inverse, dimensionslose Temperatur

$$T_{inv} = \frac{1000 \text{ K}}{T_{ub}} \quad (5.15)$$

eingeführt.

Bei Betrachtung der Geschwindigkeitsgesetze aus Gleichung 2.6 kann ein ähnlicher Zusammenhang für den Druck gefunden werden. Die Konzentrationen der Spezies sind proportional zum Gesamtdruck, wodurch dieser mit einem Exponent n aus der Anzahl der Spezies und deren stöchiometrischen Koeffizienten in den Quellterm eingeht:

$$\omega_i \propto p^n. \quad (5.16)$$

Entsprechend wird der Logarithmus des dimensionslosen Drucks als Tabellenparameter verwendet:

$$p_{\log} = \log_{10} \frac{p}{\text{bar}} . \quad (5.17)$$

Daraus folgt der für die Tabellierung im äquidistanten Gitter modifizierte reduzierte Zustandsvektor:

$$\boldsymbol{\theta}_{\text{tab}} = \left(\chi, \eta, T_{\text{inv}}, p_{\log} \right)^T . \quad (5.18)$$

6

Verifizierung der numerischen Implementierung

Im folgenden Kapitel wird die numerische Implementierung des Modells untersucht und die Tabellierungsstrategien bewertet, die in Kapitel 4 beschrieben wurden. Zunächst wird der in Abschnitt 4.4 vorgestellte Algorithmus zur Erstellung adaptiver dünner Gitter und dessen Implementierung mit analytischen Beispielfunktionen getestet. Anschließend wird die Implementierung des in Kapitel 3 entwickelten Modells und die Auswirkung der Interpolationsfehler, abhängig von der Tabellierungsstrategie und der diskreten Auflösung der Modelltablelle, untersucht.

Zur Bewertung der adaptiven Tabellierungsstrategie aus Unterabschnitt 4.4.3 wird ein solches Gitter mit einem äquidistanten Gitter aus Abschnitt 4.3 mit gleicher Genauigkeit verglichen. Nach Gleichung 4.8 und Gleichung 4.12 berechnet sich die Anzahl der äquidistanten Gitterpunkte N_d in einer Dimension d aus der maximalen Hierarchiestufe L_d des adaptiven dünnen Gitters in dieser Dimension:

$$N_d = 2^{L_d} + 1. \quad (6.1)$$

Die Gesamtzahl N der Gitterpunkte des vergleichbaren D -dimensionalen rechteckigen, äquidistanten Gitters ist entsprechend dem in Abschnitt 4.2 beschriebenen Zusammenhang:

$$N = \prod_d^D N_d. \quad (6.2)$$

6.1 Bewertung des adaptiven Dünngitter-Algorithmus mithilfe analytischer Beispielfunktionen

Der in Abschnitt 4.4 vorgestellte Algorithmus wird im Folgenden an drei analytischen Beispielfunktionen getestet. Dabei werden weder die maximale globale Hierarchiestufe, noch die maximale Verfeinerung in den einzelnen Dimensionen begrenzt. Es werden ausschließlich die Interpolationsfehler als Kriterium für die Gitterverfeinerung herangezogen. Hierzu werden in Gleichung 4.22 die relative ε_{rel} und absolute Toleranz ε_{abs} gleichgesetzt und so gewählt, dass in den folgenden Abbildungen die Punktedichte nicht zu hoch und die Adaptivität der dünnen Gitter deutlich zu erkennen ist. Die Anzahl der resultierenden Gitterpunkte wird, wie oben beschrieben, anhand eines jeweils gleichwertigen, äquidistanten Gitters bewertet.

[53] nennt drei zweidimensionale, stark nichtlineare Testfunktionen im Zusammenhang mit adaptiven dünnen Gittern:

1. glatte Funktion auf dem Intervall $[0, 1]^2$

$$f_1(\mathbf{x}) = \frac{\sinh(\pi(1-x_1)) \sin(\pi x_2)}{\sinh(\pi)} \quad (6.3)$$

2. stark nichtlineare Funktion mit angedeuteter Punkt-Singularität auf dem Intervall $[-1, 1]^2$

$$f_2(\mathbf{x}) = \frac{1}{(|10^{-3} - x_1^2 - x_2^2| + 10^{-3})} \quad (6.4)$$

3. stark nichtlineare Funktion mit angedeuteter Linien-Singularität auf dem Intervall $[0, 1]^2$

$$f_3(\mathbf{x}) = \frac{1}{(|0,3 - x_1^2 - x_2^2| + 0,1)} \quad (6.5)$$

Mit einer Toleranz $\varepsilon = 10^{-5}$ ergibt sich für die glatte Testfunktion ein adaptives dünnes Gitter mit der maximalen Hierarchiestufe $L = 9$ in beiden Dimensionen und 1955 Gitterpunkten. Ein äquidistantes Gitter mit gleicher Genauigkeit würde über $263 \cdot 10^3$ Gitterpunkte beinhalten, was einer Reduktion der Gitterpunkte von 99,257 % durch die adaptive Tabellierungsstrategie entspricht. Für die Testfunktion mit angedeuteter Punkt-Singularität ergibt sich bei einer Toleranz von

$\varepsilon = 10^{-2}$ ein adaptives dünnes Gitter mit 2269 Gitterpunkten. Die maximale Hierarchiestufe liegt dabei in beiden Dimensionen bei jeweils $L = 13$. Dies entspricht einem äquidistanten Gitter mit über $67 \cdot 10^6$ Punkten. Damit kann durch das adaptive Gitter die Anzahl der Punkte um 99,997 % reduziert werden. Im Fall der Funktion mit angedeuteter Linien-Singularität erreicht die Hierarchiestufe einen maximalen Wert von $L = 57$, bei einer Toleranz $\varepsilon = 10^{-3}$ und einer Gesamtanzahl von 9263 Gitterpunkten. An dem sehr hohen Wert der maximalen Hierarchiestufe ist zu erkennen, welche extreme Verfeinerung notwendig ist, die angedeutete Linien-Singularität darzustellen. Ein äquidistantes Gitter mit gleicher Verfeinerung hätte rechnerisch ungefähr $2 \cdot 10^{34}$ Gitterpunkte, wäre jedoch aufgrund dieser immensen Größe nicht realistisch. Der Vorteil der adaptiven gegenüber der äquidistanten Tabellierungsstrategie zeigt sich hierbei in überdeutlichem Ausmaß.

Abbildung 6.1, 6.2 und 6.3 zeigen jeweils die Punkteverteilung und die Interpolante des jeweiligen resultierenden adaptiven dünnen Gitters. Es ist deutlich zu erkennen, wie sich die Gitterpunkte im Bereich starker Krümmung und der angedeuteten Singularitäten konzentrieren. Auf der anderen Seite werden teils weite Bereiche, wie etwa einige Randbereiche mit extrem wenigen Punkten beschrieben.

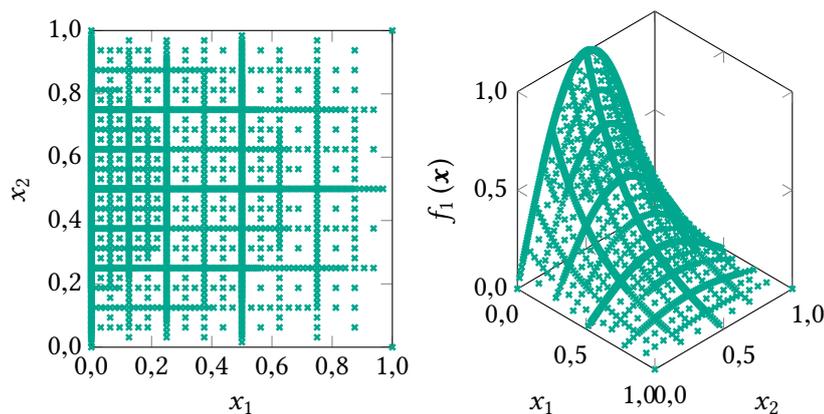


Abbildung 6.1: Adaptives dünnes Gitter für eine glatte Beispielfunktion $f_1(\mathbf{x}) = \sinh(\pi(1-x_1)) \sin(\pi x_2) / \sinh(\pi)$ mit 1955 Gitterpunkten und den Toleranzen $\varepsilon_{\text{abs}} = \varepsilon_{\text{rel}} = 10^{-5}$

Mit dieser Untersuchung konnte der in Unterabschnitt 4.4.3 beschriebene Algorithmus zur Erstellung adaptiver dünner Gitter und dessen Implementierung erfolgreich getestet werden. Es konnte weiter gezeigt werden, dass durch die adaptive Tabellierungsstrategie, im Vergleich zu einer äquidistanten Tabellierung, eine Reduktion der Gitterpunkte und somit des Speicherbedarfs um mehrere

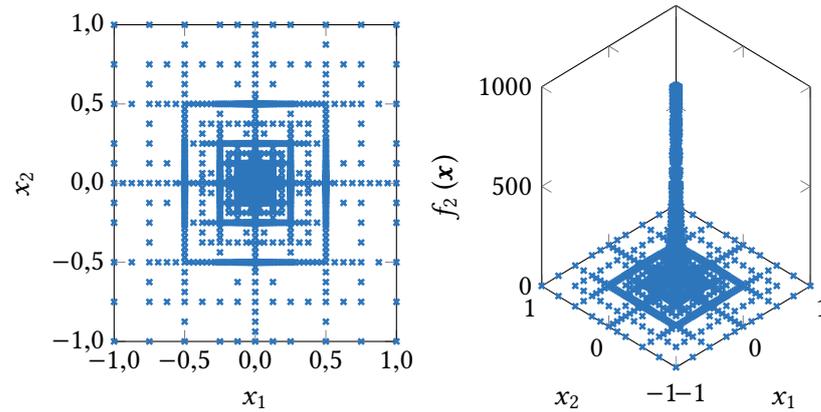


Abbildung 6.2: Adaptives dünnes Gitter für eine Beispielfunktion mit angeedeuteter Punkt-Singularität $f_2(\mathbf{x}) = 1 / (|10^{-3} - x_1^2 - x_2^2| + 10^{-3})$ mit 2269 Gitterpunkten und den Toleranzen $\varepsilon_{\text{abs}} = \varepsilon_{\text{rel}} = 10^{-2}$

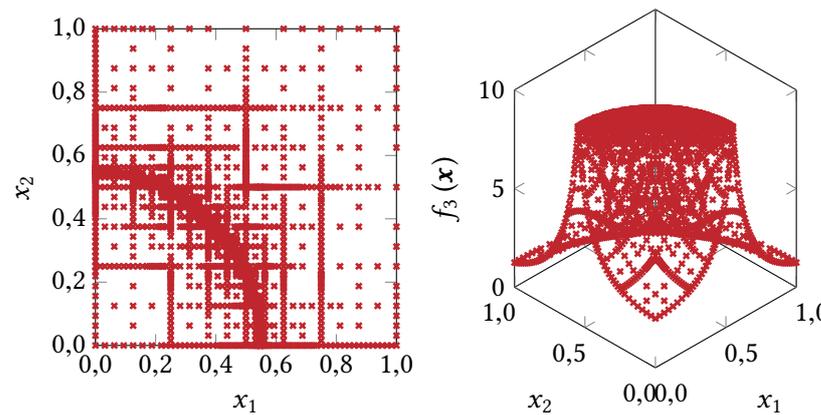


Abbildung 6.3: Adaptives dünnes Gitter für eine Beispielfunktion mit angeedeuteter Linien-Singularität $f_3(\mathbf{x}) = 1 / (|0,3 - x_1^2 - x_2^2| + 0,1)$ mit 9263 Gitterpunkten und den Toleranzen $\varepsilon_{\text{abs}} = \varepsilon_{\text{rel}} = 10^{-3}$

Größenordnungen zu erreichen ist. Es ist zudem zu erwähnen, dass dadurch kein Verlust an Genauigkeit einhergeht. Auch lassen sich auf diese Weise die zu erwartenden Interpolationsfehler durch die Vorgabe der relativen Toleranz im Vorfeld steuern. Im Falle einer äquidistanten Tabellierung können diese erst nachträglich überprüft werden.

6.2 Auswirkung der Interpolationsfehler im realen Modell

Im Folgenden wird die Qualität der Tabellierung anhand des in Kapitel 3 beschriebenen Modells und die Auswirkung der Interpolationsfehler auf die Anwendung des Modells untersucht. Als Testfall wird die reduzierte Berechnung von Zündvorgängen in einem homogenen, isobaren, adiabatischen Reaktor verwendet. Das in Abschnitt 3.2 vorgestellte PVM basiert exakt auf dem selben Szenario und repräsentiert im gekoppelten Modell die Verbrennungsregime, bei denen die chemische Kinetik nicht von molekularem Transport gestört wird. Dieser Grenzfall der Reaktions-Diffusions-Kopplung wird im gekoppelten Modell mit der normierten Stärke $\alpha = 0$ der molekularen Transporteffekte beschrieben. Daher lassen sich mit diesem Anwendungsfall für das gekoppelte Modell Modellfehler ausschließen. Somit können die Auswirkung der Interpolationsfehler und damit die Qualität der Tabellierung beurteilt werden.

Angesichts des reduzierten Zustandsvektors $\boldsymbol{\theta} = (\chi, Z, T_{\text{ub}}, p)^T$ vereinfacht sich das reduzierte System partieller Differentialgleichungen aus Gleichung 2.19 für den Fall eines homogenen, isobaren, adiabatischen Reaktors zu:

$$\frac{\partial \chi}{\partial t} = \dot{\chi}_{\text{chem}}(\boldsymbol{\theta}), \quad (6.6)$$

$$\frac{\partial Z}{\partial t} = 0, \quad (6.7)$$

$$\frac{\partial T_{\text{ub}}}{\partial t} = 0, \quad (6.8)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = 0, \quad (6.9)$$

mit dem chemischen Quellterm der Fortschrittsvariablen $\dot{\chi}_{\text{chem}}(\boldsymbol{\theta})$ und den Anfangsbedingungen $\boldsymbol{\theta}_0 = (\chi_0, Z_0, T_{\text{ub},0}, p_0)^T$. Das Differentialgleichungssystem für die detaillierten Vergleichsrechnungen ist in [77, 117] beschrieben.

Um den Bezug zur Anwendung in HCCI/CAI-Motoren herzustellen, wird die folgende Untersuchung mit dem in Abschnitt 5.2 beschriebenen Modellkraftstoff und dem dort ausgewählten Reaktionsmechanismus [4] durchgeführt. Da jedoch der stöchiometrische Mischungsbruch Z_{st} vom Kraftstoff abhängt und der Mischungsbruch somit auf den ersten Blick etwas unbequem erscheint, wird dieser für die Auswertung und Darstellung in Diagrammen im Folgenden in das Äquivalenzverhältnis ϕ umgerechnet. Für den verwendeten Modellkraftstoff entspricht das stöchiometrische Gemisch $\phi = 1$ einem stöchiometrischen Mischungsbruch $Z_{\text{st}} = 0,0631$. Aus numerischen und experimentellen Untersuchungen [82] eines

HCCI/CAI-Motors wurde außerdem der relevante Parameterbereich für die Tabellierung der chemischen Quellterme durch das gekoppelte Modell bestimmt. Tabelle 6.1 listet die Intervalle der einzelnen Komponenten des reduzierten Zustandsvektors θ auf, die auch für die folgende Untersuchung verwendet werden. Die Reaktions-Diffusions-Kopplung wird hier, wie oben erwähnt, mit einer konstanten normierten Stärke $\alpha = 0$ des molekularen Transports angenommen.

Tabelle 6.1: Parameterbereich für die Tabellierung des gekoppelten Modells für ein TRF/Luft-System

Parameter		Minimum	Maximum
Fortschrittsvariable	χ	0	1
Äquivalenzverhältnis	ϕ	0,5	3,33
Temperatur im unverbrannten Gemisch	T_{ub}/K	500	1250
Druck	p/bar	10	63

Im Folgenden werden Ergebnisse aus detaillierten Berechnungen mit denen aus reduzierten Berechnungen mit unterschiedlichen Tabellierungen verglichen. Dabei wird auf eine äquidistante Tabellierungsstrategie bzw. ein *regular grid* (RG) aus Abschnitt 4.3 zurückgegriffen und verschieden feine Auflösungen getestet. Zusätzlich wird ein adaptives dünnes Gitter bzw. *adaptive sparse grid* (ASG) aus Unterabschnitt 4.4.3 verwendet, dessen maximale Hierarchiestufe L dem feinsten verwendeten äquidistanten Gitter entspricht. Als Kriterium für die Gitterverfeinerung des adaptiven dünnen Gitters werden der chemische Quellterm der Fortschrittsvariablen $\dot{\chi}_{\text{chem}}$ und die Temperatur T mit einer relativen Toleranz $\varepsilon_{\text{rel}} = 5 \cdot 10^{-2}$ bzw. $\varepsilon_{\text{rel}} = 10^{-2}$ betrachtet. Zusätzlich wird durch die Wahl der absoluten Toleranz ε_{abs} der chemische Quellterm der Fortschrittsvariablen nicht feiner als 10^{-8} s^{-1} und die Temperatur nicht feiner als 1 K aufgelöst.

Es stellt sich allerdings die Frage nach einer sinnvollen Auswertung der detaillierten und reduzierten Ergebnisse. Vor allem deren Darstellung im vierdimensionalen Parameterraum des reduzierten Zustandsvektors ist im Rahmen einer schriftlichen Ausarbeitung nicht möglich. Daher wird zunächst an einem exemplarischen Punkt die Auflösung einer einzelnen Reaktionstrajektorie mit der Fortschrittsvariablen unter Verwendung einer eindimensionalen Tabellierung untersucht. In Tabelle 6.2 sind die Daten zu den verschiedenen verwendeten Auflösungen des äquidistanten Gitters aufgeführt. Zusätzlich ist die Anzahl der Gitterpunkte des adaptiven Gitters und die dadurch ermöglichte Ersparnis im Speicherbedarf angegeben.

Die Bedingungen $\phi = 1$, $T_{\text{ub}} = 750 \text{ K}$, $p = 10 \text{ bar}$ sind dabei so gewählt, dass das Phänomen der Mehrstufenzündung [117] auftritt. Die erste Stufe einer Mehr-

Tabelle 6.2: Variation der Anzahl der Gitterpunkte in χ für die Tabellierung des gekoppelten Modells für ein TRF/Luft-System [4] bei $\phi = 1$, $T_{ub} = 750$ K, $p = 10$ bar, $\alpha = 0$

Stufe	äquidistantes Gitter		adaptives dünnes Gitter		
	Kürzel	Punkte	Kürzel	Punkte	Ersparnis
5	χ -RG5	33			
6	χ -RG6	65			
7	χ -RG7	129	χ -ASG7	40	69 %

stufenzündung resultiert aus den Mechanismen der Niedertemperatur-Oxidation [117], die bei geringer Temperaturerhöhung zur Verlangsamung der chemischen Kinetik führen. Die zweite Zündstufe wird ausschließlich durch die langsamere Hochtemperatur-Oxidation [117] bestimmt. Die korrekte Beschreibung dieses Phänomens ist ein wesentliches Qualitätsmerkmal des reduzierten Modells.

Abbildung 6.4 vergleicht die zeitliche Entwicklung der Temperatur und der Massenbrüche von Kohlenstoffdioxid (CO_2), einer Kraftstoffkomponente (C_8H_{18}) und Formaldehyd (CH_2O) aus den reduzierten Berechnungen mit den detaillierten Ergebnissen. Es ist zu erkennen, dass die erste Zündstufe durch die reduzierte Berechnung mit allen verwendeten Gittern sehr gut mit der detailliert berechneten übereinstimmt. Bei der zweiten Zündstufe sind Abweichungen deutlich zu erkennen, wobei diese mit steigender Auflösung geringer werden.

Wie schon in Abschnitt 5.4 erwähnt, wird der Zündverzug vor allem durch die kleinen Werte des chemischen Quellterms der Fortschrittsvariablen beeinflusst [61]. Für die erste Zündstufe gewährleistet die in Abschnitt 5.4 vorgestellte Linearisierung des Quellterms, dass die kleinen Werte des chemischen Quellterms der ersten Tabellierungspunkte zum korrekten Zündverzug führen. Die Interpolationsfehler in den darauffolgenden Punkten sind zwar für den exakten zeitlichen Verlauf entscheidend, nicht jedoch für den Zündverzug der ersten Stufe. Die Abweichung bei der zweiten Zündstufe liegt vor allem an der unterschiedlichen Auflösung des lokalen Minimums des chemischen Quellterms, das in Abbildung 6.5 bei $\chi = 0,1$ zu erkennen ist. Wie bei der ersten Stufe beeinflussen die Interpolationsfehler aller Punkte den zeitlichen Verlauf. Den eigentlichen Zündverzug bestimmen jedoch fast ausschließlich die Fehler bei den kleinsten Werten des chemischen Quellterms. Doch im Gegensatz zur ersten Zündung, bei der diese Werte durch die Linearisierung manipuliert werden, unterliegen sie bei der zweiten Zündung allein der Auflösung durch das Tabellengitter.

Anhand dieser Betrachtung erscheint die Auflösung einer Reaktionstrajektorie mit der Fortschrittsvariablen mit $N_\chi = 129$ Gitterpunkten bzw. einer maximalen

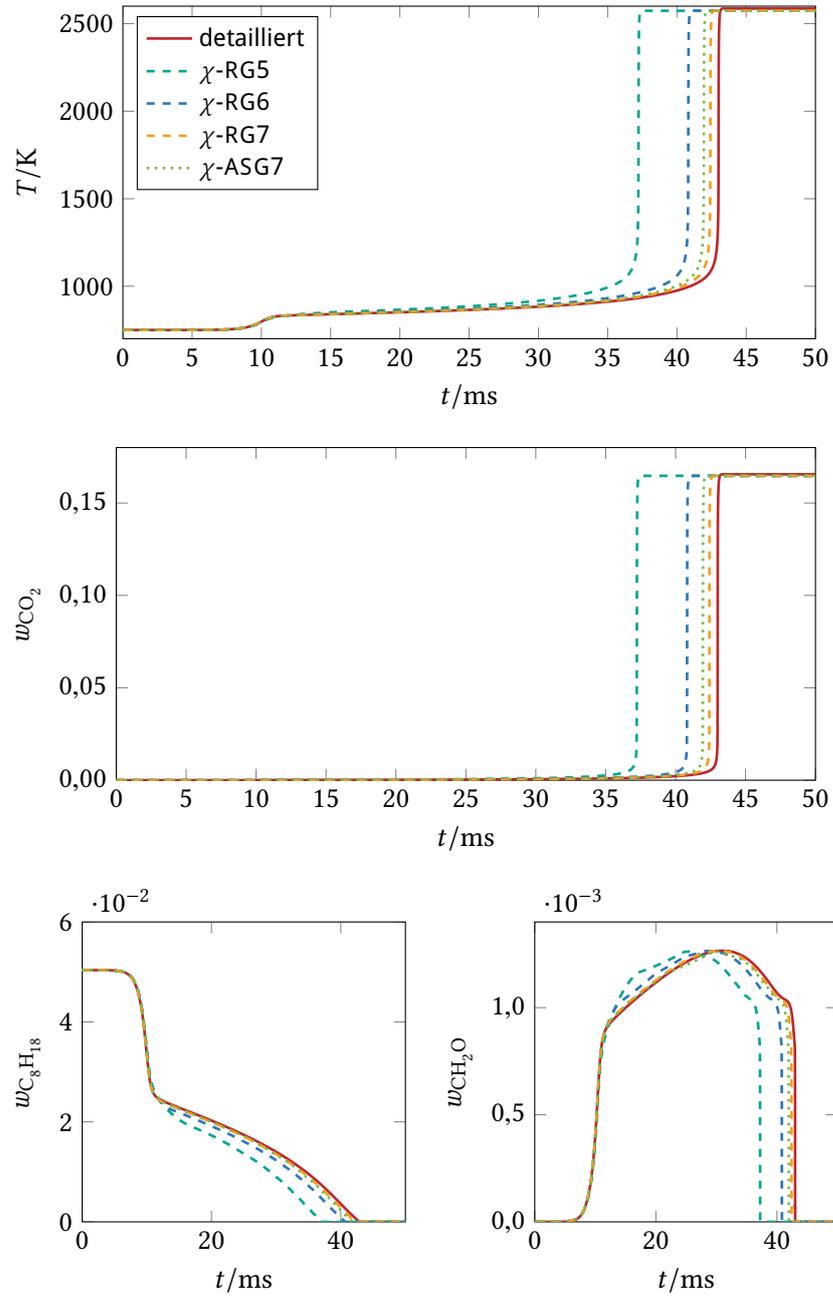


Abbildung 6.4: Variation der Auflösung in χ bei der reduzierten Berechnung homogener, isobarer, adiabatischer Reaktoren für ein TRF/Luft-System [4] bei $\phi = 1$, $T_{ub} = 750 K$, $p = 10 \text{ bar}$

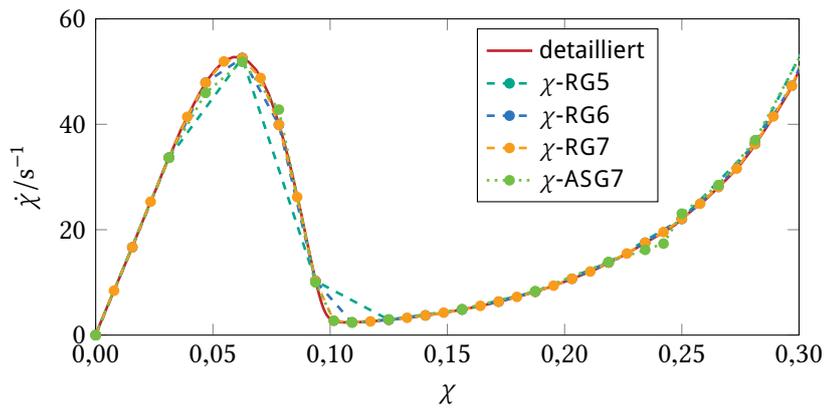


Abbildung 6.5: Auflösung des lokalen Minimums des chemischen Quellterms der Fortschrittsvariable für ein TRF/Luft-System [4] bei $\phi = 1$, $T_{ub} = 750$ K, $p = 10$ bar, $\alpha = 0$

Hierarchiestufe $L_\chi = 7$ ausreichend. In einem weiteren Schritt wird die Auflösung der Parameter Z , T_{ub} , p untersucht. Ausgehend von dem betrachteten Gitterpunkt $\phi = 1$, $T_{ub} = 750$ K, $p = 10$ bar wird dabei jeweils die Auflösung eines Parameters variiert. Die anderen Parameter bleiben konstant. Abbildung 6.6 veranschaulicht das Vorgehen im dreidimensionalen Parameterraum Z , T_{ub} , p .

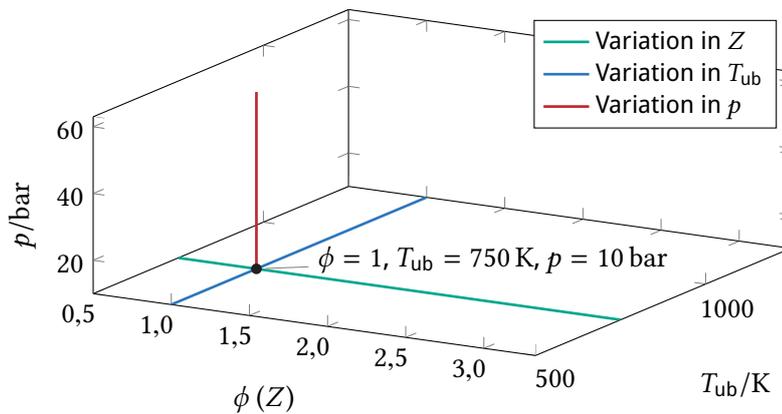


Abbildung 6.6: Veranschaulichung der Variation der Auflösung in Z , T_{ub} , p für die Tabellierung des chemischen Quellterms

Für diese drei Fälle werden nun verschiedene äquidistante und adaptive, zweidimensionale Tabellierungen erstellt. Die Fortschrittsvariable bezeichnet dabei jeweils den zweiten Parameter. Auf diese Weise können repräsentative Bereiche der Tabellierung untersucht und die Ergebnisse anschaulich dargestellt werden. Ausgehend von der vorangegangenen Betrachtung und den Untersuchungen in

[61] wird für die Fortschrittsvariable in den äquidistanten Tabellierungen eine feste Anzahl von $N_\chi = 101$ Gitterpunkten gewählt. In den adaptiven Tabellierungen wird die maximale Hierarchiestufe für die Fortschrittsvariable auf $L_\chi = 7$ begrenzt. In Tabelle 6.3, 6.4 und 6.5 sind die entsprechenden Gitterdaten und die Reduktion des Speicherbedarfs durch das adaptive Gitter aufgelistet.

Zunächst wird die Zündverzugszeit t_{ign} [117] als wichtige Bewertungsgröße eingeführt. Sie ist eine sensitive Größe zur Beurteilung des Zündverhaltens im gesamten Bereich der Tabellierung. Als Definition der Zündverzugszeit wird ein linearer Ansatz gewählt [117]:

$$t_{\text{ign}} = t_{\text{max}} - \frac{g(t_{\text{max}}) - g(t_0)}{\max\left(\frac{\partial g}{\partial t}\right)}, \quad (6.10)$$

mit dem Zeitpunkt t_{max} des maximalen zeitlichen Gradienten $\partial g/\partial t$ einer Größe g . Üblicherweise wird dafür die Temperatur oder ein Speziesmassenbruch verwendet. In den folgenden Betrachtungen wird die Zündverzugszeit auf Basis des Massenbruchs w_{CO_2} von Kohlenstoffdioxid (CO_2) berechnet:

$$g = w_{\text{CO}_2}. \quad (6.11)$$

Um Abweichungen zwischen reduzierten Berechnungen (Index »red«) und detaillierten Vergleichsrechnungen (Index »det«) zu bewerten, wird zusätzlich der relative Fehler ε_{ign} der Zündverzugszeit betrachtet:

$$\varepsilon_{\text{ign}} = \frac{|t_{\text{ign}}^{(\text{det})} - t_{\text{ign}}^{(\text{red})}|}{t_{\text{ign}}^{(\text{det})}}. \quad (6.12)$$

Abbildung 6.7 zeigt detailliert und reduziert berechnete Zündverzugszeiten nach Gleichung 6.10, wobei für die reduzierten Berechnungen die in Tabelle 6.3 aufgelisteten Gitter unterschiedlicher Auflösung in Z verwendet wurden. Ferner ist der relative Fehler für die reduzierten Berechnungen nach Gleichung 6.12 abgebildet. Weitere Ergebnisse für die Variation der Auflösung in T_{ub} bzw. p entsprechend Tabelle 6.4 und 6.5 sind in Abbildung 6.8 und 6.9 dargestellt. Dabei werden jeweils Punkte bezüglich Z , T_{ub} , p untersucht, die zwischen Gitterpunkten der entsprechend feinsten Tabellierung liegen. Dadurch wird gewährleistet, dass sowohl in den adaptiven Gittern, als auch in allen äquidistanten Gittern in dem zu untersuchenden Parameter interpoliert werden muss und die Auswirkung der maximalen Interpolationsfehler überprüft werden kann.

Wie erwartet, kann festgestellt werden, dass eine feinere Auflösung der einzelnen Parameter zur Reduktion der Interpolationsfehler und somit zu geringeren

Tabelle 6.3: Variation der Anzahl der Gitterpunkte in Z für die Tabellierung des gekoppelten Modells für ein TRF/Luft-System [4] bei $T_{ub} = 750\text{ K}$, $p = 10\text{ bar}$, $\alpha = 0$

Stufe	äquidistantes Gitter		adaptives dünnes Gitter		
	Kürzel	Punkte	Kürzel	Punkte	Ersparnis
1	Z-RG1	303			
2	Z-RG2	505			
3	Z-RG3	909	Z-ASG3	283	69 %

Tabelle 6.4: Variation der Anzahl der Gitterpunkte in T_{ub} für die Tabellierung des gekoppelten Modells für ein TRF/Luft-System [4] bei $\phi = 1$, $p = 10\text{ bar}$, $\alpha = 0$

Stufe	äquidistantes Gitter		adaptives dünnes Gitter		
	Kürzel	Punkte	Kürzel	Punkte	Ersparnis
3	T_{ub} -RG3	909			
4	T_{ub} -RG4	1717			
5	T_{ub} -RG5	3333	T_{ub} -ASG5	667	80 %

Abweichungen in der reduzierten Berechnung der Zündverzugszeit t_{ign} führt. Hervorzuheben sind die reduzierten Berechnungen mit der adaptiven Tabellierungsstrategie. Diese zeigen mit dem feinsten äquidistanten Gitter vergleichbar gute Ergebnisse, jedoch benötigen sie dafür nur einen Bruchteil der Gitterpunkte.

Bei der Betrachtung der relativen Fehler ε_{ign} fällt bei den groben Gittern eine Art Wellen- oder Sägezahnform auf, die bei der Temperatur T_{ub} im unverbrannten Gemisch in Abbildung 6.8 am deutlichsten zu erkennen ist. Darin spiegelt

Tabelle 6.5: Variation der Anzahl der Gitterpunkte in p für die Tabellierung des gekoppelten Modells für ein TRF/Luft-System [4] bei $\phi = 1$, $T_{ub} = 750\text{ K}$, $\alpha = 0$

Stufe	äquidistantes Gitter		adaptives dünnes Gitter		
	Kürzel	Punkte	Kürzel	Punkte	Ersparnis
1	p -RG1	303			
2	p -RG2	505			
3	p -RG3	909	p -ASG3	166	82 %

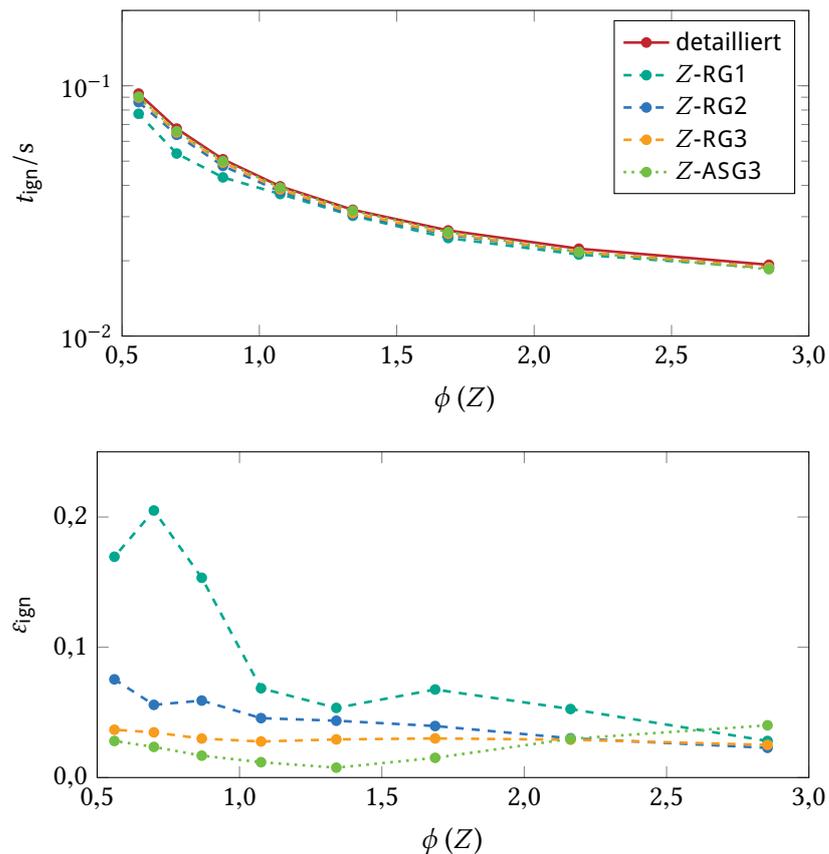


Abbildung 6.7: Auswirkung der Interpolationsfehler in χ und Z bei der reduzierten Berechnung der Zündverzugszeit für ein TRF/Luft-System [4] bei $T_{ub} = 750 \text{ K}$, $p = 10 \text{ bar}$

sich die Nichtlinearität der chemischen Kinetik wider. In Abbildung 6.10 wird dies anschaulich erläutert. Durch die lineare Interpolation des chemischen Quellterms zwischen zwei Gitterpunkten einer Zelle treten vor allem in der Nähe des »unteren« Punkts große relative Abweichungen auf, folglich bei magererer Zusammensetzung in Abbildung 6.7, bei kleineren Temperaturen im unverbrannten Gemisch in Abbildung 6.8 oder bei niedrigeren Drücken in Abbildung 6.7. Je näher am »oberen« Punkt einer Gitterzelle interpoliert wird, desto kleiner wird die relative Abweichung.

Die oben erwähnten Mechanismen zur Mehrstufenzündung führen in einem bestimmten Temperaturbereich zu einem veränderten Zusammenhang von Zündverzugszeit und Temperatur. Statt mit steigender Temperatur abzunehmen, verlängert sich der Zündverzug, weshalb vom Bereich des negativen Temperaturkoeffizienten bzw. *negative temperature coefficient* (NTC) [117] gesprochen wird.

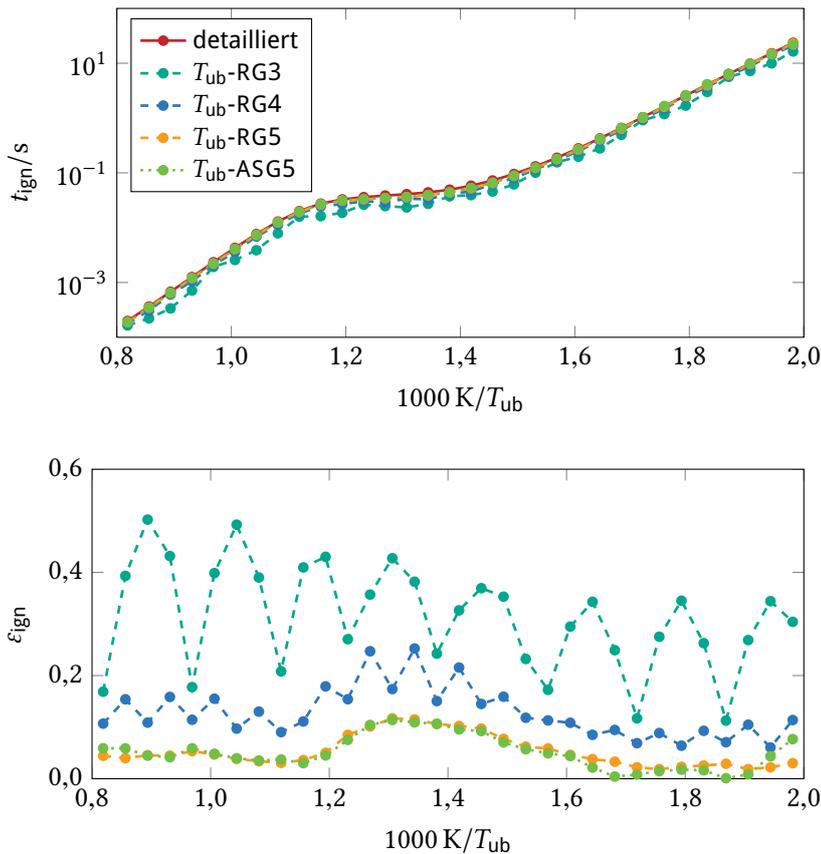


Abbildung 6.8: Auswirkung der Interpolationsfehler in χ und T_{ub} bei der reduzierten Berechnung der Zündverzugszeit für ein TRF/Luft-System [4] bei $\phi = 1, p = 10$ bar

Unabhängig von der Auflösung, ist in Abbildung 6.8 zwischen 700 K und 850 K solch ein leicht ausgeprägter NTC-Bereich erkennbar. Die Abbildung dieses Phänomens in den reduzierten Berechnungen ist ein wesentliches Qualitätsmerkmal des Modells. Allerdings werden in diesem Bereich, auch trotz verfeinerter Auflösung der Temperatur im unverbrannten Gemisch, die größten Abweichungen im Zündverzug festgestellt. Dies lässt sich dadurch erklären, dass in diesem Temperaturbereich das in Abbildung 6.5 dargestellte lokale Maximum und darauffolgende lokale Minimum des chemischen Quellterms der ersten Zündstufe sehr klein werden und in Richtung $\chi = 0$ wandern, bis sie letztendlich verschwinden. Zur Auflösung wäre demnach auch eine Verfeinerung des Gitters in der Fortschrittsvariable notwendig.

Da insgesamt betrachtet die Abhängigkeit des Zündverzugs vom Druck nicht so stark ausgeprägt ist, wird abschließend eine dreidimensionale Tabellierung bei $p =$

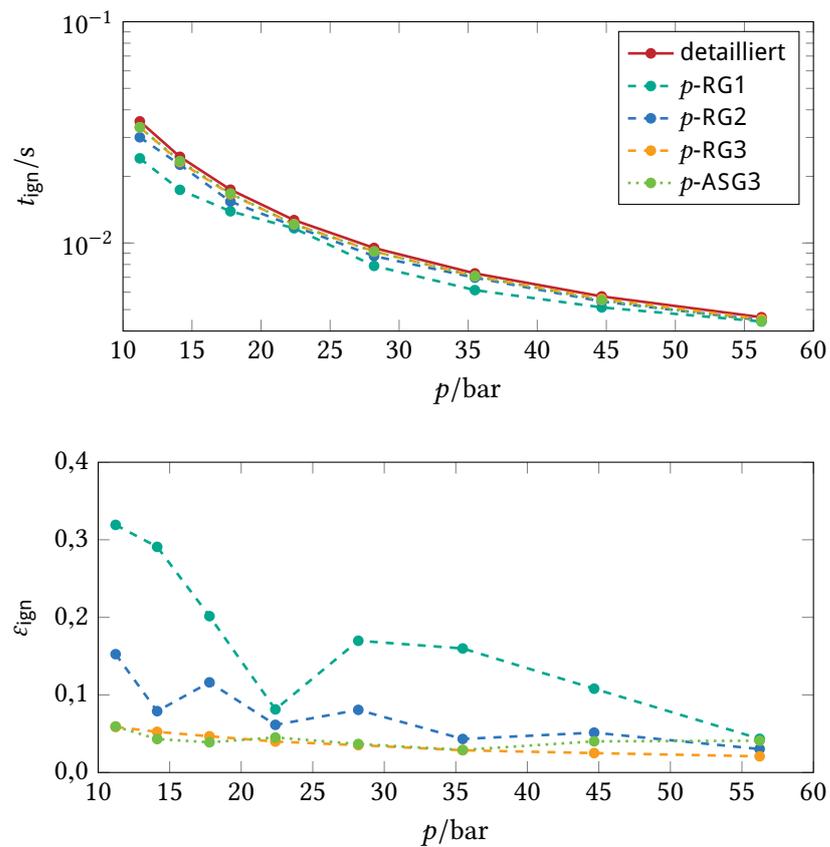


Abbildung 6.9: Auswirkung der Interpolationsfehler in χ und p bei der reduzierten Berechnung der Zündverzugszeit für ein TRF/Luft-System [4] bei $\phi = 1$, $T_{\text{ub}} = 750 \text{ K}$

10 bar untersucht. Hierfür werden, entsprechend den gezeigten Untersuchungen der einzelnen Parameter, ein äquidistantes Gitter mit der feinsten Auflösung von $N_\chi = 101$, $N_Z = 9$, $N_{T_{\text{ub}}} = 33$ Gitterpunkten und ein vergleichbares adaptives dünnes Gitter mit den maximalen Hierarchiestufen $L_\chi = 7$, $L_Z = 3$, $L_{T_{\text{ub}}} = 5$ erstellt. Das äquidistante Gitter hat somit 29997 Gitterpunkte, wohingegen sich das adaptive dünne Gitter aus 5488 Gitterpunkten aufbaut. Das entspricht einer Reduktion des Speicherbedarfs von 82 %.

Abbildung 6.11 zeigt dazu die detailliert und reduziert berechnete Zündverzugszeit und den relativen Fehler in deren reduzierter Berechnung. Da durch diese Untersuchung Modellfehler ausgeschlossen werden können, sind die hier gezeigten Abweichungen ausschließlich die Auswirkung von Interpolationsfehlern und bewerten dadurch die Tabellierungsstrategien. Im untersuchten Bereich ergeben die reduzierten Berechnungen mit sowohl dem äquidistanten Gitter als auch dem

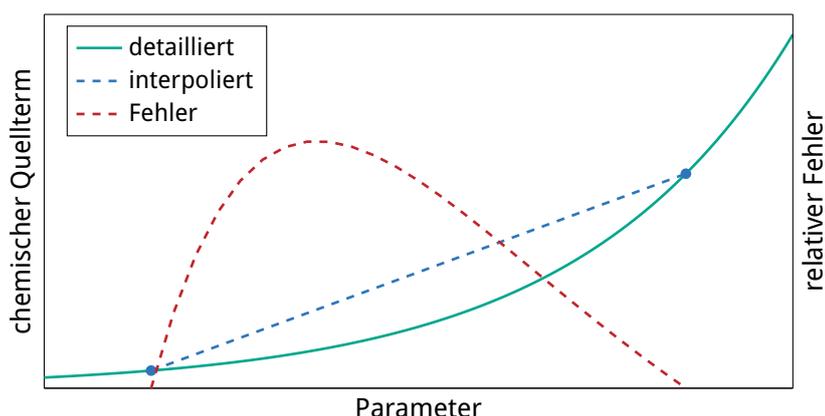


Abbildung 6.10: Veranschaulichung zur Auswirkung der linearen Interpolation des nichtlinearen chemischen Quellterms

adaptiven Gitter fast die gleichen Ergebnisse wie die detaillierten Simulationen. Der NTC-Bereich ist deutlich zu erkennen. Allerdings liegt hier in beiden Fällen der reduzierten Berechnung die maximale relative Abweichung, wie oben schon erwähnt, etwas erhöht bei 14 %. Sonst liegt der Fehler in weiten Bereichen im Bereich von 5 %.

Die Untersuchungen zeigen deutlich, dass die auf adaptiven dünnen Gittern basierende Tabellierungsstrategie eine sehr effiziente und genaue Tabellierung ermöglicht. Die Unterschiede in den Ergebnissen im Vergleich zu der Verwendung äquidistanter Gitter mit vergleichbarer Auflösung sind zu vernachlässigen. Jedoch reduziert sich der Speicherbedarf durch die adaptive Tabellierungsstrategie auf einen Bruchteil.

Die Genauigkeit kann durch die Verwendung von noch feineren Auflösungen für die einzelnen Größen weiter erhöht werden. Allerdings ist die beobachtete Abweichung schon viel kleiner als beispielsweise die typische Abweichung zwischen Voraussagen von zwei verschiedenen detaillierten Reaktionsmechanismen [113], wie auch in Abschnitt 5.2 zu sehen ist. Eine weitere Verfeinerung ist somit in der Praxis kaum lohnenswert.

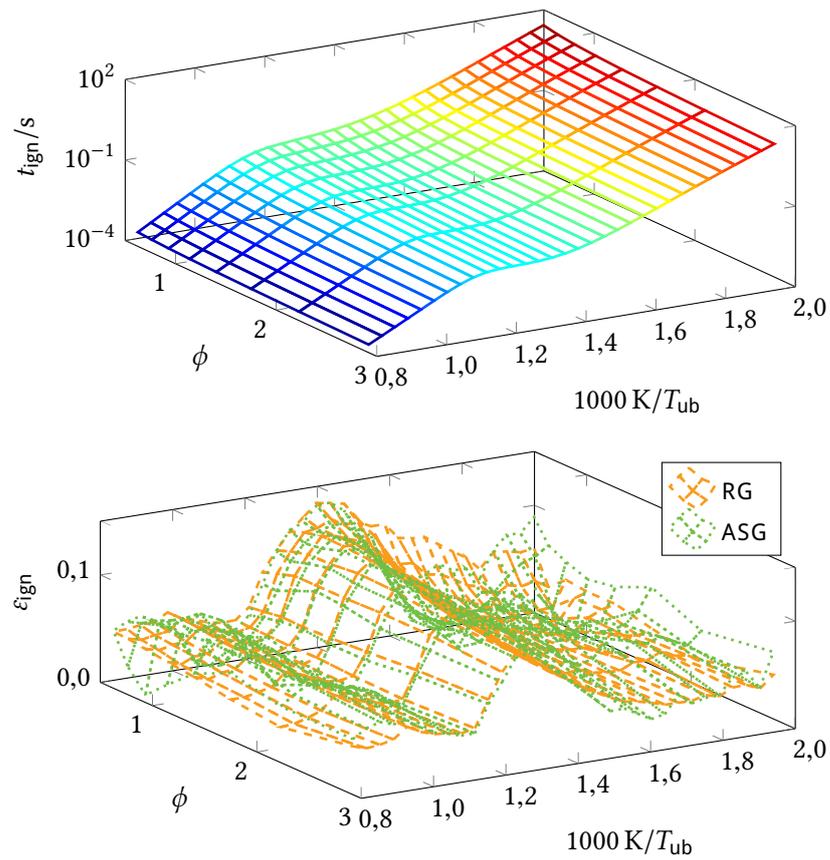


Abbildung 6.11: Auswirkung der Interpolationsfehler in χ , Z und T_{ub} bei der reduzierten Berechnung der Zündverzugszeit für ein TRF/Luft-System [4] bei $p = 10$ bar

7

Validierung des Modells

Anhand mehrerer Testfälle wird das entwickelte Modell im Folgenden für einen weiten Anwendungsbereich validiert. Es werden verschiedene Beispiele und Testfälle für das Modell gezeigt und die Ergebnisse mit detaillierten Berechnungen verglichen. Anhand dieses Vergleichs werden die Anwendungsfälle bewertet und das gekoppelte Modell validiert. Die untersuchten Szenarien und betrachteten Parameter orientieren sich an der Zielsetzung, die Zündung und Flammenausbreitung in kompressionsgezündeten Motoren zu beschreiben. Aus diesem Grund wird sowohl bei der Modellerstellung und den reduzierten Testrechnungen als auch bei den detaillierten Vergleichsrechnungen der in Abschnitt 5.2 beschriebenen Modellkraftstoff und Reaktionsmechanismus [4] verwendet.

Obwohl in Kapitel 6 die Vorteile einer adaptiven Tabellierungsstrategie aufgezeigt wurden, wird in den folgenden Untersuchungen auf eine äquidistante Tabellierung des gekoppelten Modells zurückgegriffen. Entscheidend wird der geringe Speicherbedarf eines adaptiven dünnen Gitters in komplexen Anwendungen mit einem weiten multidimensionalen Parameterbereich. So wurde die adaptive Tabellierungsstrategie vor allem entwickelt, um das gekoppelte Modell effizient in Grobstruktursimulationen eines HCCI/CAI-Motors mit turbulenter Verbrennung zu implementieren. Auf diese praktische Anwendung wird später in Kapitel 8 eingegangen. Für die zum Teil testweisen Implementierungen der verschiedenen Anwendungsfälle in diesem Kapitel werden jedoch jeweils unterschiedliche Parameterbereiche und Tabellenformate benötigt. Daher überwiegt für die Testimplementierungen ein einfaches äquidistantes Tabellengitter gegenüber der aufwändigeren Tabellenerstellung bei adaptiven Gittern. Zudem umfassen die Tabellierungen für die Testfälle nur einige Megabyte und sind, selbst auf einem üblichen Arbeitsplatzrechner, weit entfernt von einer speicherkritischen Größe. Für die Auflösung der jeweiligen Bereiche dienen die in Abschnitt 6.2 gewonnenen Ergebnisse.

7.1 Untersuchung homogener Reaktionssysteme

Zunächst werden homogene Reaktionssysteme untersucht und das Modell anhand verschiedener Testfälle auch für Systeme mit variierenden Bedingungen des Mischungsbruchs Z , der Temperatur T_{ub} im unverbrannten Gemisch und des Drucks p validiert, wie sie in verbrennungsmotorischen Prozessen vorkommen. Da es sich bei den Testfällen in diesem Abschnitt ausschließlich um homogene Systeme handelt, also ohne diffusive Transporteffekte, wird das Modell für den Spezialfall $\alpha = 0$ der in Abschnitt 3.3 erläuterten Reaktions-Diffusions-Kopplung verwendet. Der Parameter α beschreibt im gekoppelten Modell die normierte Stärke der molekularen Transporteffekte.

7.1.1 Homogener, isobarer, adiabatischer Reaktor

Der Testfall des homogenen, isobaren, adiabatischen Reaktors wurde bereits ausführlich in Abschnitt 6.2 bei der Bewertung der Tabellierungsstrategien behandelt. Dort ist auch das zugrundeliegende reduzierte Differentialgleichungssystem beschrieben. Als Ergänzung wird hier noch einmal auf die wesentlichen Merkmale dieses Testfalls eingegangen.

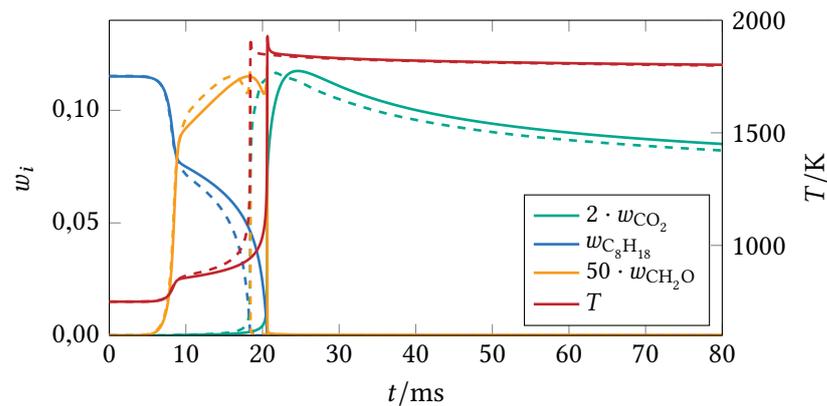


Abbildung 7.1: Vergleich von detaillierter und reduzierter Berechnung eines homogenen, isobaren, adiabatischen Reaktors für ein TRF/Luft-System [4] bei $\phi = 2,5$, $T_{\text{ub}} = 750 \text{ K}$, $p = 10 \text{ bar}$, durchgezogen: detaillierte Berechnung, gestrichelt: reduzierte Berechnung

Abbildung 7.1 vergleicht die zeitliche Entwicklung von Temperatur und den Massenbrüchen verschiedener chemischer Spezies für eine detaillierte und reduzierte Berechnung beispielhaft bei einem Äquivalenzverhältnis $\phi = 2,5$, einer Temperatur $T_{\text{ub}} = 750 \text{ K}$ im unverbrannten Gemisch und einem Druck $p = 10 \text{ bar}$.

Es wird deutlich, dass die mehrstufige Zündung, die ein wichtiges Phänomen bei Zündprozessen ist, durch das reduzierte Modell realistisch abgebildet wird. Zudem wird für fette Mischungen, wie hier $\phi = 2,5$, auch der Temperaturabfall und der Zerfall von Kohlenstoffdioxid (CO_2) in den späteren Stadien der Zündung wiedergegeben. Neben der Temperatur, stimmt der Verlauf der Massenbrüche der Kraftstoffkomponente (C_8H_{18}) und von Kohlenstoffdioxid über beide Zündstufen mit den detaillierten Ergebnissen sehr gut überein. Des Weiteren zeigt auch der Massenbruch von Formaldehyd (CH_2O) eine sehr gute Übereinstimmung.

Zusammenfassend kann festgestellt werden, dass das Modell wichtige Phänomene der Zündung, wie die Mehrstufenzündung für einen weiten Parameterbereich sehr gut abbildet. Ferner wurde in Abschnitt 6.2 gezeigt, dass auch der NTC-Bereich über das Modell reproduziert wird. Abweichungen lassen sich direkt durch Interpolationsfehler begründen und durch feinere Auflösung in der Tabellierung weiter reduzieren.

7.1.2 Homogener Motorzyklus

Um das Modell für instationäre Bedingungen in Bezug auf Enthalpie und Druck zu validieren, wie sie bei motorischen Verbrennungsprozessen vorkommen, werden Berechnungen von homogenen Motorzyklen durchgeführt. Abbildung 7.2 zeigt schematisch die Geometrie eines Motorzylinders. Für diese einfache Geometrie berechnet sich die zeitliche Änderung des Volumens V [58]:

$$\frac{\partial V}{\partial t} = \frac{\pi b^2 h}{8} \left(\sin \varphi + \frac{h \cdot \sin(2\varphi)}{2(4r^2 - h^2 \sin^2 \varphi)^{1/2}} \right) \frac{\partial \varphi}{\partial t}, \quad (7.1)$$

mit dem Bohrungsdurchmesser b , dem Hub h , der Länge der Pleuelstange r und dem Kurbelwinkel φ im Bogenmaß. In Tabelle 7.1 sind die dafür angenommenen Motordaten aufgeführt.

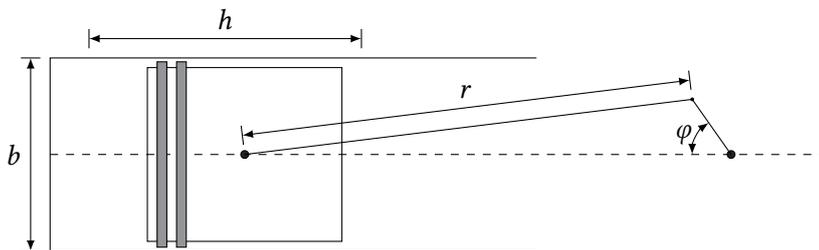


Abbildung 7.2: Schematische Darstellung der Geometrie eines Motorzylinders

Tabelle 7.1: Technische Daten zur Zylindergeometrie

Parameter	Länge/mm	Wert
Bohrungsdurchmesser	b	100
Hub	h	83
Pleuelstange	r	144
Verdichtungsverhältnis		11,5

Der Kurbelwinkel φ und seine zeitliche Änderung berechnen sich wie folgt:

$$\varphi = 2\pi \left(n \cdot t + \frac{\varphi_0}{2\pi} \right), \quad (7.2)$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = 2\pi n. \quad (7.3)$$

Dabei ist n die Drehzahl des Motors. Der Kurbelwinkel (KW) $\varphi = 0$ entspricht dem oberen Totpunkt. Als Startzeitpunkt für die folgenden Berechnungen wird 180° KW vor dem oberen Totpunkt, also $\varphi_0 = -2\pi$ gewählt.

Für die Berechnung von homogenen Motorzyklen ergibt sich das System partieller Differentialgleichungen aus Gleichung 2.19 mit dem reduzierten Zustandsvektor $\boldsymbol{\theta} = (\chi, Z, T_{\text{ub}}, p)^T$ und der instationären Nebenbedingung aus Gleichung 7.1 zu:

$$\frac{\partial \chi}{\partial t} = \dot{\chi}_{\text{chem}}(\boldsymbol{\theta}), \quad (7.4)$$

$$\frac{\partial Z}{\partial t} = 0, \quad (7.5)$$

$$\frac{\partial T_{\text{ub}}}{\partial t} = \frac{p}{\rho} \frac{\kappa}{c_{p,\text{ub}}} \left(\frac{\dot{T}_{\text{chem}}(\boldsymbol{\theta})}{T} - \frac{\dot{M}_{\text{chem}}(\boldsymbol{\theta})}{\bar{M}} - \frac{\dot{V}}{V} \right), \quad (7.6)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = p\kappa \left(\frac{\dot{T}_{\text{chem}}(\boldsymbol{\theta})}{T} - \frac{\dot{M}_{\text{chem}}(\boldsymbol{\theta})}{\bar{M}} - \frac{\dot{V}}{V} \right). \quad (7.7)$$

Hier bezeichnet ρ die Dichte, κ den Isentropenexponent, $c_{p,\text{ub}}$ die spezifische Wärmekapazität der unverbrannten Mischung und \bar{M} die molare Masse der Mischung. Die chemischen Quellterme der Fortschrittsvariablen $\dot{\chi}_{\text{chem}}(\boldsymbol{\theta})$, der Temperatur $\dot{T}_{\text{chem}}(\boldsymbol{\theta})$ und der mittleren molaren Masse der Mischung $\dot{M}_{\text{chem}}(\boldsymbol{\theta})$ müssen vom Modell zur Verfügung gestellt werden. Zusätzlich werden die Anfangsbedingungen $\boldsymbol{\theta}_0 = (\chi_0, Z_0, T_{\text{ub},0}, p_0)^T$ festgelegt. Für die detaillierte mathematische Beschreibung des Systems sei auf [58, 117] verwiesen.

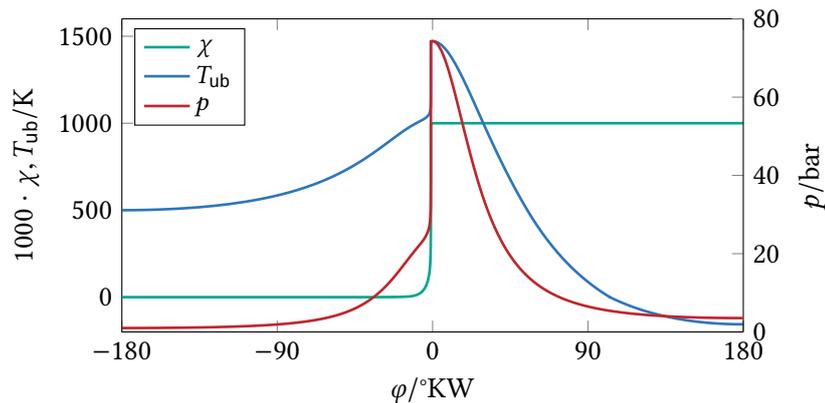


Abbildung 7.3: Entwicklung des reduzierten Zustands bei der reduzierten Berechnung eines homogenen Motorzyklus für ein TRF/Luft-System [4] bei $\phi = 1$, $T_{ub,0} = 500 \text{ K}$, $p_0 = 1 \text{ bar}$ und $n = 2000 \text{ min}^{-1}$

In Abbildung 7.3 ist die zeitliche Entwicklung des reduzierten Zustands bei der Berechnung eines homogenen Motorzyklus dargestellt. Durch die Kompression steigt anfangs der Druck und entsprechend die Temperatur im unverbrannten Gemisch. Kurz vor dem oberen Totpunkt kommt es zur Selbstzündung und die Fortschrittsvariable steigt stark an. Bedingt durch die Wärmefreisetzung steigt der Druck. Zusätzlich ändert sich durch die instationäre Nebenbedingung aus Gleichung 7.1 das Volumen und somit die Enthalpie bzw. die Temperatur im unverbrannten Gemisch. Anschließend erfolgt die Entspannung, bei der der Druck wieder abfällt. Durch die abgegebene Arbeit während der Entspannung sinkt auch die Enthalpie stark ab. Dies führt dann zu negativen Werten für die Temperatur T_{ub} im unverbrannten Gemisch. Dieses Verhalten ist, entgegen der Vermutung keinesfalls unphysikalisch. Da das Gas im Zylinder bei der Entspannung Arbeit verrichtet, sinkt die Enthalpie. Am unteren Totpunkt liegt somit vollständig verbranntes Abgas bei leicht erhöhter Umgebungstemperatur vor. Dieser Zustand kann nicht aus einer adiabatischen Verbrennung aus dem unverbrannten Kraftstoff/Luft-Gemisch entstehen. Eine, wie in Unterabschnitt 3.3.2 vorgeschlagene Umrechnung der Enthalpie h in die Temperatur T_{ub} im unverbrannten Gemisch führt deshalb zu negativen Werten. Da die Zündung und Verbrennung zu diesem Zeitpunkt abgeschlossen ist und keine chemischen Quellterme mehr benötigt werden, stellt das jedoch kein Problem bei der Benutzung des gekoppelten Modells dar.

Abbildung 7.4 zeigt den Verlauf verschiedener Größen eines homogenen Motorzyklus aus detaillierten und reduzierten Berechnungen für verschiedene Motordrehzahlen. In Abbildung 7.5 sind Ergebnisse aus detaillierten und reduzierten

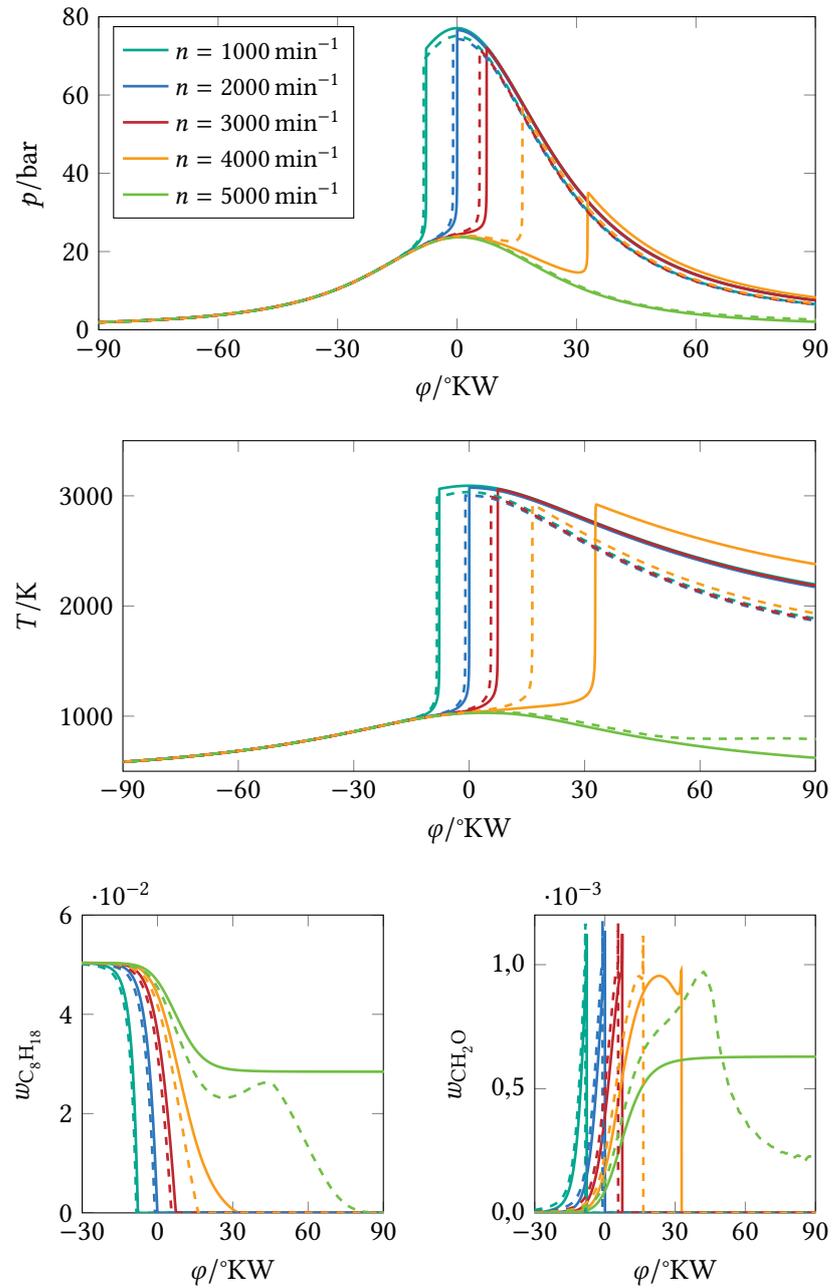


Abbildung 7.4: Variation der Motordrehzahl bei der detaillierten und reduzierten Berechnung eines homogenen Motorzyklus für ein TRF/Luft-System [4] bei $\phi = 1$, $T_{ub,0} = 500 \text{ K}$, $p_0 = 1 \text{ bar}$, durchgezogen: detaillierte Berechnung, gestrichelt: reduzierte Berechnung

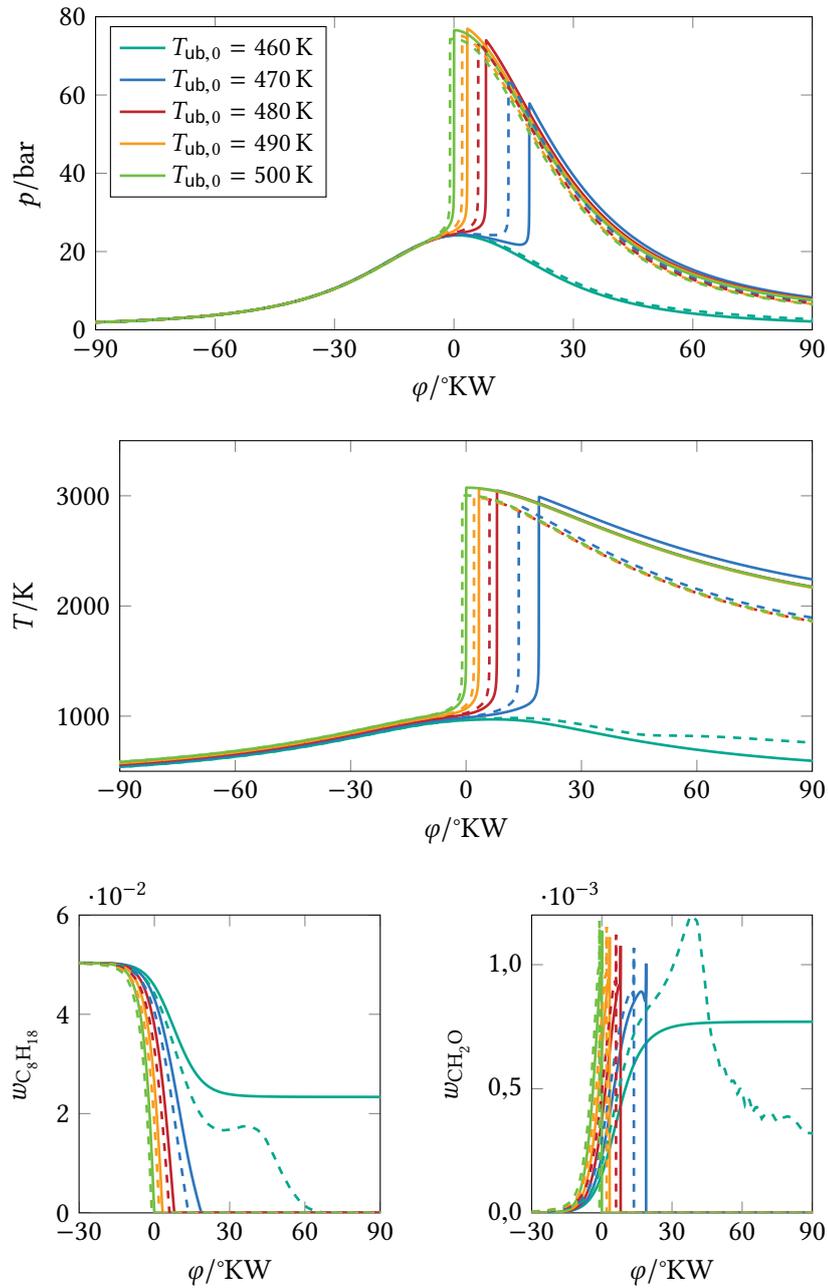


Abbildung 7.5: Variation der Anfangstemperatur bei der detaillierten und reduzierten Berechnung eines homogenen Motorzyklus für ein TRF/Luft-System [4] bei $\phi = 1$, $p_0 = 1$ bar, $n = 2000 \text{ min}^{-1}$, durchgezogen: detaillierte Berechnung, gestrichelt: reduzierte Berechnung

Berechnungen homogener Motorzyklen für unterschiedliche Anfangstemperaturen dargestellt. Für beide Untersuchungen zeigt das Modell für frühe Zündszenarien sehr gute Übereinstimmung mit den detaillierten Ergebnissen sowohl für Druck und Temperatur als auch für die Massenbrüche der Kraftstoffkomponente (C_8H_{18}) und von Formaldehyd (CH_2O). Vor allem, wenn die Zündung vor dem oberen Totpunkt stattfindet, ist die Abweichung des Zündzeitpunkts zwischen detaillierten und reduzierten Berechnungen sehr gering. Durch höhere Motordrehzahlen oder entsprechend geringere Anfangstemperaturen verschiebt sich der Zündzeitpunkt zu späteren Zeiten. Auch für diese späteren Zündzeitpunkte passt die Druckkurve gut zu den detaillierten Ergebnissen. Erst für sehr hohe Motordrehzahlen oder niedrige Anfangstemperaturen, also sehr späte Zündungen nach dem oberen Totpunkt sind deutliche Abweichungen zu erkennen. Im Gegensatz zu frühen Zündzeitpunkten vor und nahe dem oberen Totpunkt, wo die Kompression die Temperatur erhöht und dadurch die Zündung beschleunigt, verzögert die Expansion nach dem oberen Totpunkt die Zündung und weitet die Abweichungen.

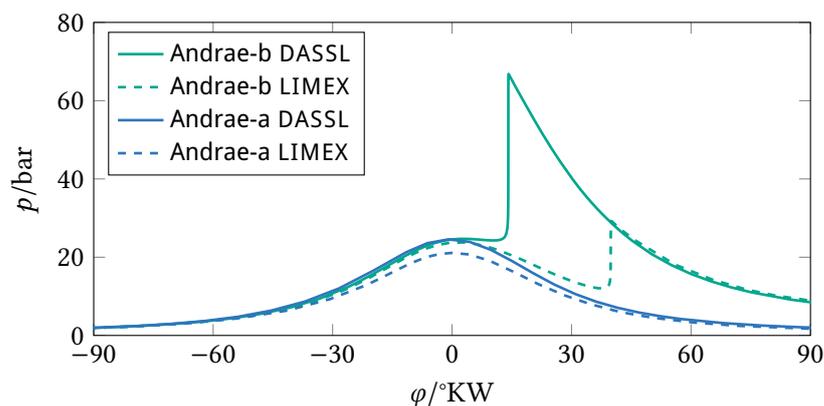


Abbildung 7.6: Auswirkung des Lösungsverfahrens bei der detaillierten Berechnung eines homogenen Motorzyklus für ein TRF/Luft-System bei $\phi = 1$, $T_{ub,0} = 470\text{ K}$, $p_0 = 1\text{ bar}$ und $n = 2000\text{ min}^{-1}$ mit unterschiedlichen Reaktionsmechanismen [2, 4]

Allerdings reagiert das System in dieser Phase generell sehr sensitiv, so dass beispielsweise Änderungen des numerischen Lösungsverfahrens bzw. der Toleranzen des Löser oder die Verwendung eines anderen Reaktionsmechanismus zu ähnlichen Abweichungen führen würden [8, 113]. Abbildung 7.6 vergleicht dazu die Lösungsverfahren DASSL und LIMEX sowohl mit dem in Abschnitt 5.2 ausgewählten Mechanismus »Andrae-b« [4] als auch mit dem dort erwähnten Mechanismus »Andrae-a« [2]. Es ist deutlich zu erkennen, dass die Abweichun-

gen durch die Wahl des Lösungsverfahrens größer sind, als die der reduzierten Berechnungen in Abbildung 7.4 und 7.5. Noch deutlicher sind die Unterschiede zwischen verschiedenen Mechanismen, wie hier »Andrae-b« und »Andrae-a«.

Für die dargestellten, motorrelevanten Parameter wird der Beginn der Selbstzündung durch das Modell gut reproduziert. Zudem hat die Untersuchung gezeigt, dass das Modell auch im Rahmen von instationären Randbedingungen sehr gute Ergebnisse liefert, obwohl das Modell dieses Verhalten nicht impliziert. Durch die sich ändernden Werte der Enthalpie und des Drucks entfernt sich die Anwendung auf homogene Motorzyklen von den Modellannahmen des homogenen, isobaren, adiabatischen Reaktors. Trotzdem beschreibt das gekoppelte Modell die chemische Kinetik dieser Prozesse sehr gut.

7.2 Untersuchung eindimensionaler Reaktionssysteme

Die Validierung des Modells an homogenen Reaktionssystemen im vorhergehenden Abschnitt zeigte gute Resultate. Durch die dort angenommene räumliche Homogenität und der dadurch fehlenden Transportprozesse wurde das gekoppelte Modell für den Spezialfall $\alpha = 0$ der normierten Stärke der molekularen Transporteffekte verwendet. Nun wird das Modell für Anwendungsfälle mit Transporteffekten anhand räumlich inhomogener Systeme untersucht. Symmetrien in der Geometrie erlauben dabei die Reduktion auf eine Raumrichtung x . Die dazu getroffenen Annahmen und zusätzlichen Gleichungen sind in [77, 117] beschrieben. Zusätzlich werden für die folgenden Untersuchungen die Vereinfachungen von LEWIS-Zahl $Le = 1$ und gleichen Diffusivitäten D für alle Spezies getroffen. Das in Abschnitt 2.3 hergeleitete partielle Differentialgleichungssystem für den reduzierten Zustand $\theta = (\chi, Z, T_{ub}, p)^T$ aus Gleichung 2.19 vereinfacht sich damit zu:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = S(\theta) + \Psi_{\theta}^+ \frac{D}{\rho} \operatorname{div}(\Psi_{\theta} \operatorname{grad}(\theta)) - v \operatorname{grad}(\theta), \quad (7.8)$$

wobei nur die Fortschrittsvariable einen chemischen Quellterm

$$S(\theta) = (\dot{\chi}_{\text{chem}}, 0, 0, 0)^T \quad (7.9)$$

besitzt.

Die Anfangslösung wird in den detaillierten Zustandsvariablen $\Psi_0(x)$ vorgegeben und muss dann auf die Mannigfaltigkeit des Modells projiziert werden. Die Projektion erfolgt entlang der reduzierten Koordinaten, nach folgender Vorgehensweise: Z, T_{ub}, p sind Zustandsgrößen und können somit direkt aus dem

detaillierten Zustand Ψ des detaillierten Profils berechnet werden. Die in Unterabschnitt 3.3.2 beschriebene Reaktionsfortschrittsvariable χ jedoch ist eine wegabhängige Variable und kann daher nicht direkt aus dem detaillierten Zustand berechnet werden. Da sie auf der durch chemische Reaktion produzierten Entropie basiert, wird vorgeschlagen, den detaillierten Zustand entlang eines konstanten Wertes der spezifischen Entropie s auf die Mannigfaltigkeit zu projizieren. Die Fortschrittsvariable χ kann so durch Lösen der Gleichung

$$s(\chi) - s(\Psi) = 0 \quad (7.10)$$

mit Hilfe eines iterativen Lösungsverfahrens, etwa des BRENT-Verfahrens [21] bestimmt werden. Damit ist eine sinnvolle Anfangslösung $\theta_0(x)$ gefunden.

Die Einschränkung $\alpha = 0$ für die Reaktions-Diffusions-Kopplung im gekoppelten Modell, wie in Abschnitt 7.1 verwendet, gilt im Folgenden nicht mehr. Ausgehend von Gleichung 3.21 wird die normierte Stärke α der dissipativen Transportprozesse vereinfachend nur über den Gradient der Fortschrittsvariablen abgeschätzt. Aufgrund der eindimensionalen Betrachtung ist zudem nur der Gradient in x -Richtung relevant. Als weitere Vereinfachung von Gleichung 3.21 wird ein konstanter Normierungsfaktor α^* verwendet, der aus der maximalen Gradientenabschätzung ξ^* der REDIM abgeschätzt wird, so dass $0 \leq \alpha \leq 1$ gewährleistet ist:

$$\alpha = \min\left(\frac{1}{\alpha^*} \left| \frac{\partial \chi}{\partial x} \right|, 1\right). \quad (7.11)$$

7.2.1 Laminare, nicht vorgemischte Gegenstromflamme

Die Gegenstromanordnung wurde bereits bei der Beschreibung der REDIM-Anfangslösung in Abbildung 5.3 erläutert. Hier erfolgt nun die Validierung des gekoppelten Modells anhand einer laminaren, nicht vorgemischten Gegenstromflamme. Die detaillierte mathematische Beschreibung dazu ist in [77, 117] erläutert. Kraftstoff und Luft werden in diesem Fall jeweils bei der gleichen Temperatur und mit konstantem Druck eingeströmt, wodurch folgende Vereinfachungen für das partielle Differentialgleichungssystem aus Gleichung 7.8 gelten:

$$\frac{\partial T_{\text{ub}}}{\partial t} = 0, \quad (7.12)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = 0. \quad (7.13)$$

Es werden an beiden Rändern DIRICHLET-Randbedingungen angenommen, wobei sich links die Kraftstoff- und rechts die Luftseite befindet. Als Anfangslösung dient die stationäre Lösung der detaillierten Berechnung, die, wie oben beschrieben, auf die Mannigfaltigkeit projiziert wird.

Da die REDIM-Gradientenabschätzung ebenfalls auf laminaren, nicht vorgemischten Gegenstromflammen basiert, stellt dieser Testfall die maximale Reaktions-Diffusions-Kopplung im Kontext des gekoppelten Modells dar. Deshalb wird das gekoppelte Modell zunächst noch für den Spezialfall $\alpha = 1$ der Stärke dissipativer Transporteffekte verwendet.

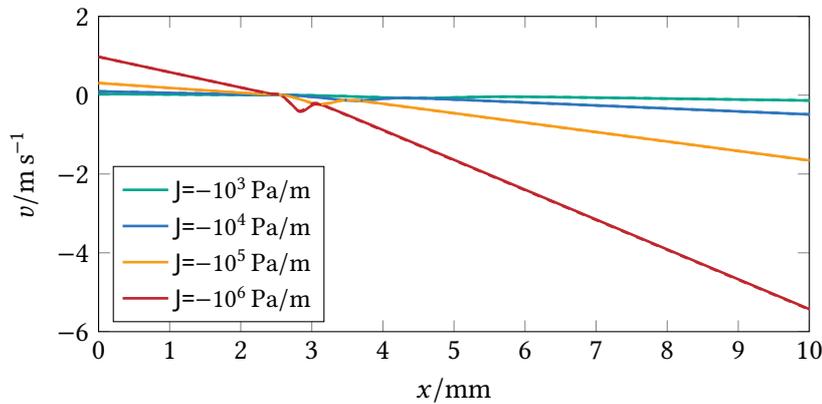


Abbildung 7.7: Stationäre Geschwindigkeitsprofile in axialer Richtung von laminaren, nicht vorgemischten Gegenstromflammen für ein TRF/Luft-System [4] bei $T_{\text{ub}} = 500 \text{ K}$, $p = 10 \text{ bar}$, durchgezogen: detaillierte Berechnung, gestrichelt: reduzierte Berechnung

Die Streckung der Flammen wird über den tangentialen Druckgradienten J variiert. Der tangentielle Druckgradient ist ein Eigenwert des Systems und über das gesamte Rechengebiet konstant [117]. Die Strömungsgeschwindigkeit v in axialer Richtung am linken Rand bei $x = x_0$ wird mit folgender Beziehung abgeschätzt und als DIRICHLET-Randbedingung vorgegeben:

$$v(x_0) = \frac{x_{\text{max}}}{2} \sqrt{\frac{-J}{\rho(x_0)}}. \quad (7.14)$$

Die Strömungsgeschwindigkeit in axialer Richtung am rechten Rand bei $x = x_{\text{max}}$ ergibt sich aus den restlichen Randbedingungen [70, 71]. Dadurch liegt der Stau- punkt der Ströme bei ungefähr einem Viertel des Rechengebiets und es ergeben sich die in Abbildung 7.7 dargestellten stationären Geschwindigkeitsprofile in axialer Richtung für verschiedene laminare, nicht vorgemischte Gegenstromflammen bei $T_{\text{ub}} = 500 \text{ K}$, $p = 10 \text{ bar}$.

Abbildung 7.8 zeigt die stationären Profile der Temperatur und des Massenbruchs von Kohlenstoffdioxid (CO_2) aus detaillierten und reduzierten Berechnungen von gestreckten Gegenstromflammen bei $T_{\text{ub}} = 500 \text{ K}$, $p = 10 \text{ bar}$. Zur

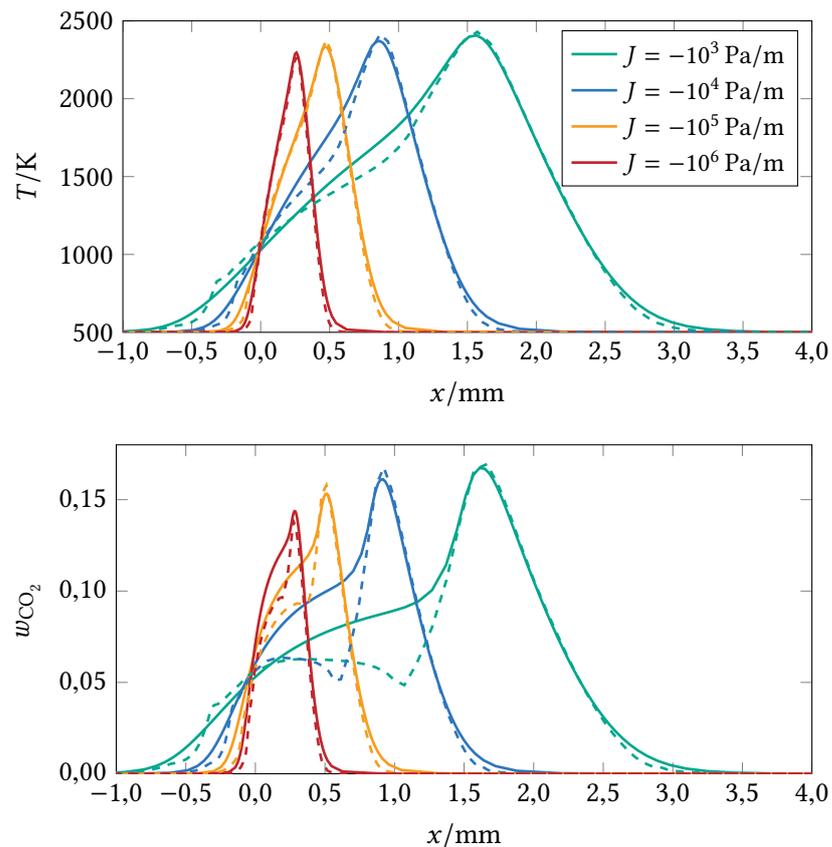


Abbildung 7.8: Vergleich von detaillierter und reduzierter Berechnung einer laminaren, nicht vorgemischten Gegenstromflamme für ein TRF/Luft-System [4] bei $T_{ub} = 500$ K, $p = 10$ bar, durchgezogen: detaillierte Berechnung, gestrichelt: reduzierte Berechnung

besseren Orientierung ist der Ursprung der Ortskoordinate in den Staupunkt der Strömung verschoben. Die Temperaturprofile aus den reduzierten Berechnungen zeigen eine gute Übereinstimmung mit den detaillierten Ergebnissen. Bei den Flammenprofilen mit geringer Streckung weicht die Temperatur auf der Brennstoffseite der Flamme in einem Bereich von den detaillierten Profilen ab. Diese Abweichung ist bei höheren Streckungsraten nicht mehr zu erkennen. Die Profile des CO_2 -Massenbruchs stimmen in weiten Bereichen gut mit den detaillierten Ergebnissen überein, zeigen jedoch, noch deutlicher als die Temperaturprofile, eine Abweichung auf der brennstoffreichen Seite der Flamme.

Wie in Abschnitt 5.3 erläutert, wird die Anfangslösung für die REDIM-Entwicklung aus Gegenstromflammenprofilen zusammengestellt. Diese werden durch Zustände im chemischen Gleichgewicht in Richtung geringer Streckungsraten er-

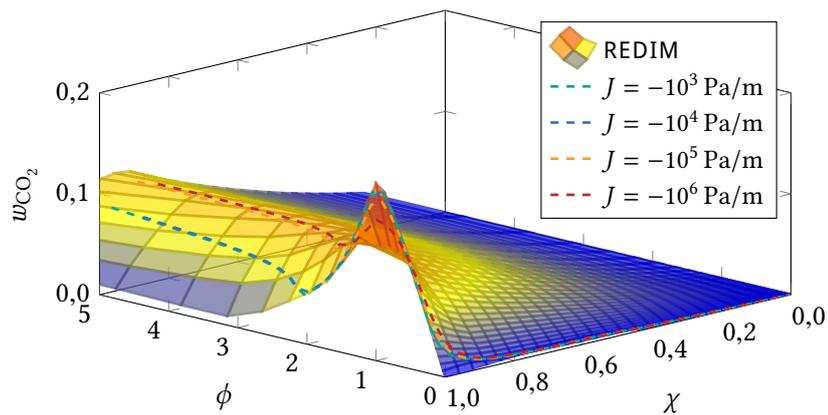


Abbildung 7.9: Profile im Zustandsraum aus der reduzierten Berechnung einer laminaren, nicht vorgemischten Gegenstromflamme für ein TRF/Luft-System [4] bei $T_{ub} = 500\text{ K}$, $p = 10\text{ bar}$

gänzt. Vor allem im Bereich fetter Zusammensetzungen erweitert dies die REDIM etwa zu abfallenden Kohlenstoffdioxidmassenbrüchen. In Abbildung 7.9 ist die REDIM als Fläche dargestellt. Die Teilfläche für $\phi > 1$ zwischen dem Kamm und dem oberen Rand bei $\chi = 1$ entspricht der angesprochenen Erweiterung mit den Gleichgewichtszuständen. Es ist zu erkennen, wie die in Abbildung 7.9 dargestellten Flammenprofile der reduzierten Berechnungen für geringe Streckungsraten im Bereich um $\phi = 2$ entgegen dem realen Verhalten ins chemische Gleichgewicht reagieren. Dies führt zu den in Abbildung 7.8 sichtbaren Abweichungen. Ursache für diese Entwicklung der reduzierten Berechnungen sind Unregelmäßigkeiten im chemischen Quellterm, die durch Abweichungen bei der REDIM-Entwicklung entstehen. Vor allem in diesem Bereich gestaltet sich die Auflösung der REDIM-Anfangslösung mit einem Rechengitter als schwierig. Für höhere Streckungsraten werden die Abweichungen kleiner, da die stärkere Diffusion verhindert, dass sich das Flammenprofil in diese Bereiche der Mannigfaltigkeit mit unregelmäßigen chemischen Quelltermen bewegt.

Ausgehend vom stationären Flammenprofil für einen tangentialen Druckgradienten $J = -10^6\text{ Pa m}^{-1}$ führt ein weiteres Erhöhen der Streckung zum Verlöschen der Flamme. In Abbildung 7.10 ist der instationäre Vorgang der verlöschenden Flamme aus der detaillierten und der reduzierten Lösung abgebildet. Der tangentialer Druckgradient wurde auf $J = -10^7\text{ Pa m}^{-1}$ erhöht. Obwohl dies ein instationärer Prozess ist, wird die zeitliche Änderung der Temperaturprofile in guter Übereinstimmung wiedergegeben. Auch das Wandern der Flamme im Ort wird durch die reduzierte Berechnung sehr gut abgebildet. Die Profile des Massenbruchs von Kohlenstoffdioxid zeigen Abweichungen, wobei der qualitative Verlauf

und die Position im Ort mit den detaillierten Berechnungen übereinstimmen.

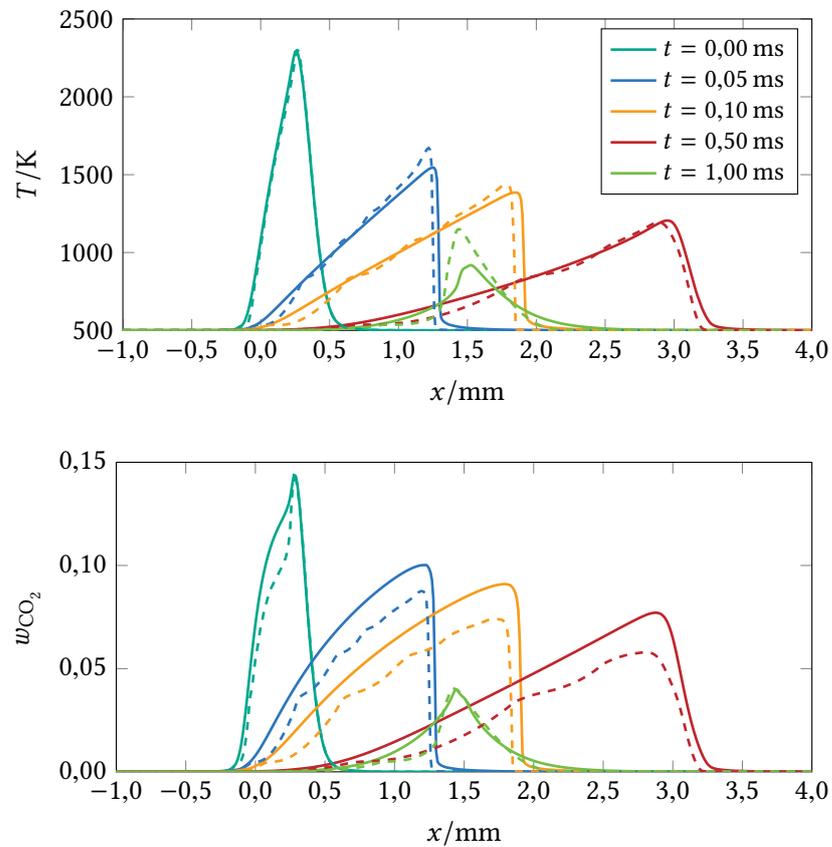


Abbildung 7.10: Vergleich von detaillierter und reduzierter Berechnung einer verlöschenden laminaren, nicht vorgemischten Gegenstromflamme für ein TRF/Luft-System [4] bei $T_{\text{ub}} = 500 \text{ K}$, $p = 10 \text{ bar}$, $J = -10^7 \text{ Pa m}^{-1}$ durchgezogen: detaillierte Berechnung, gestrichelt: reduzierte Berechnung

Die Ergebnisse haben gezeigt, dass stationäre Flammenprofile mit unterschiedlicher Streckung gut mit dem Modell abgebildet werden. Zwar sind Abweichungen zu erkennen, diese lassen sich jedoch, wie bereits erläutert, mit Unregelmäßigkeiten im chemischen Quellterm und groben Rechengittern bei der REDIM-Entwicklung begründen. Verbesserungen bei der numerischen Implementierung und beim Lösungsverfahren der REDIM-Entwicklungsgleichung sollten in dieser Anwendung zur Vermeidung der Abweichungen führen. Darüber hinaus konnte gezeigt werden, dass auch der instationäre Vorgang einer verlöschenden Flamme mit dem Modell beschrieben werden kann.

7.2.2 Laminare, vorgemischte, freie Flamme

In [77, 117] ist die Simulation einer laminaren, vorgemischten, freien Flamme beschrieben. Dies wird als weiterer Testfall zur Validierung des gekoppelten Modells verwendet. Ausgehend von den oben getroffenen Annahmen bezüglich des molekularen Transports resultieren für eine laminare, vorgemischte, freie Flamme keine räumlichen Gradienten im Mischungsbruch, der Enthalpie und im Druck. Damit gelten weitere Vereinfachungen für das partielle Differentialgleichungssystem aus Gleichung 7.8:

$$\frac{\partial Z}{\partial t} = 0, \quad (7.15)$$

$$\frac{\partial T_{\text{ub}}}{\partial t} = 0, \quad (7.16)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = 0. \quad (7.17)$$

Zur Lösung des Differentialgleichungssystems werden am linken Rand des Rechengebiets das vorgemischte Kraftstoff/Luft-Gemisch als DIRICHLET-Randbedingung und am rechten Rand NEUMANN-Randbedingungen vorgegeben. Die stationäre Lösung der detaillierten Berechnung wird, wie oben beschrieben, auf die Mannigfaltigkeit projiziert, wodurch die Anfangslösung für den reduzierten Zustand resultiert.

Abbildung 7.11 vergleicht die stationären Profile aus detaillierter Berechnung und reduzierten Berechnungen mit einem FGM-Modell [114] vorgemischter Flammenprofile und dem gekoppelten Modell bei $\phi = 1$, $T_{\text{ub}} = 500 \text{ K}$, $p = 10 \text{ bar}$. Zusätzlich ist der räumliche Gradient der Fortschrittsvariablen dargestellt, auf dem die Abschätzung der normierten Stärke der dissipativen Transportprozesse bei der Rechnung mit dem gekoppelten Modell basiert. Der hier verwendete Normierungsfaktor $\alpha^* = 10^3 \text{ m}^{-1}$ für die räumlichen Gradienten ist ebenfalls gekennzeichnet. Für Punkte unterhalb dieses Wertes erfolgt eine Interpolation zwischen der PVM-Mannigfaltigkeit und der REDIM. Punkte oberhalb dieses Wertes werden ausschließlich durch das REDIM-Teilmodell bestimmt.

Des Weiteren sind in Abbildung 7.12 die stationären Profile für eine magere Gemischzusammensetzung bei $\phi = 0,74$ und in Abbildung 7.13 für eine fette Gemischzusammensetzung bei $\phi = 1,69$ dargestellt. Diese Rechnungen mit dem gekoppelten Modell wurden ebenfalls mit einem Normierungsfaktor $\alpha^* = 10^3 \text{ m}^{-1}$ durchgeführt. Die Temperatur- und Kraftstoffprofile zeigen für die stöchiometrische und die magere Gemischvariante eine sehr gute Übereinstimmung zwischen den detaillierten und reduzierten Berechnungen.

Leichte Abweichungen sind bei den Kraftstoffprofilen auf der unverbrannten

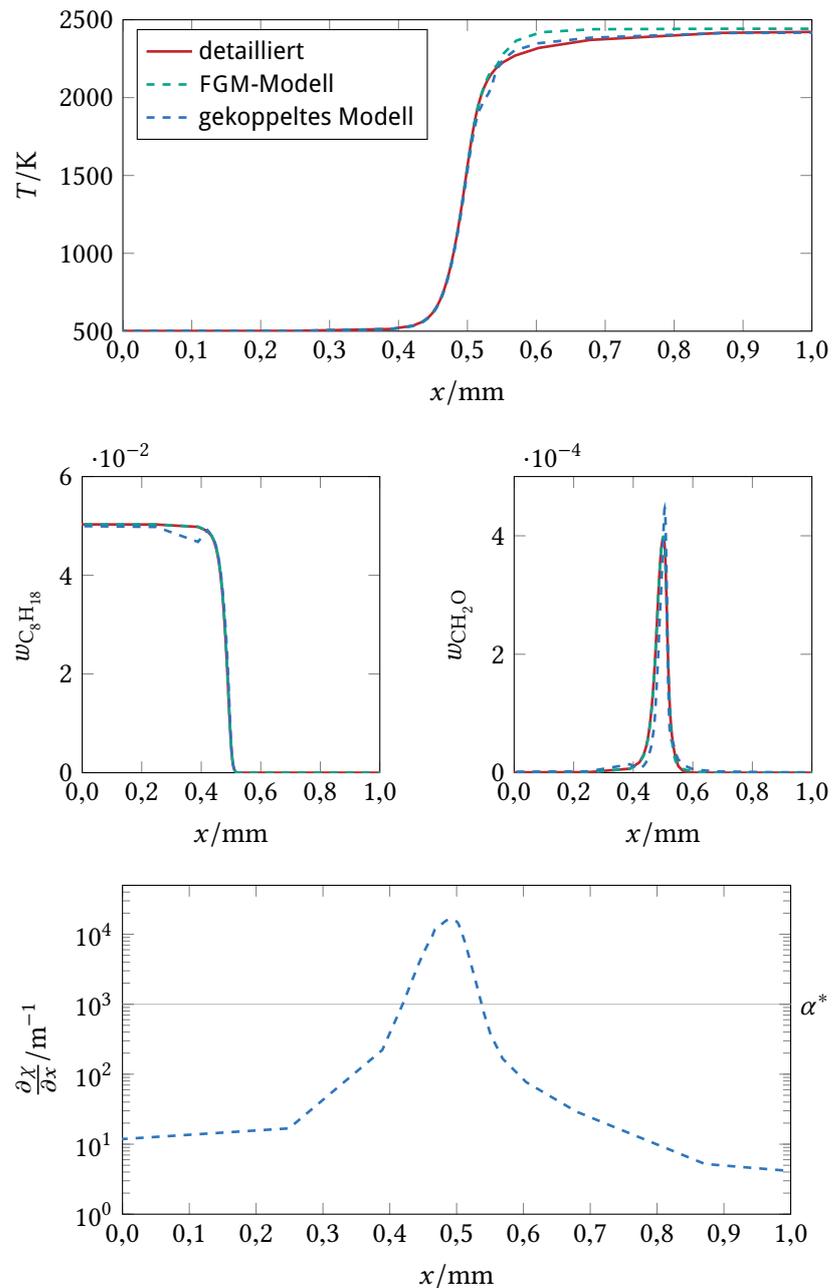


Abbildung 7.11: Vergleich von detaillierter und reduzierter Berechnung einer laminaren, vorgemischten, freien Flamme für ein TRF/Luft-System [4] bei $\phi = 1$, $T_{ub} = 500$ K, $p = 10$ bar, durchgezogen: detaillierte Berechnung, gestrichelt: reduzierte Berechnung

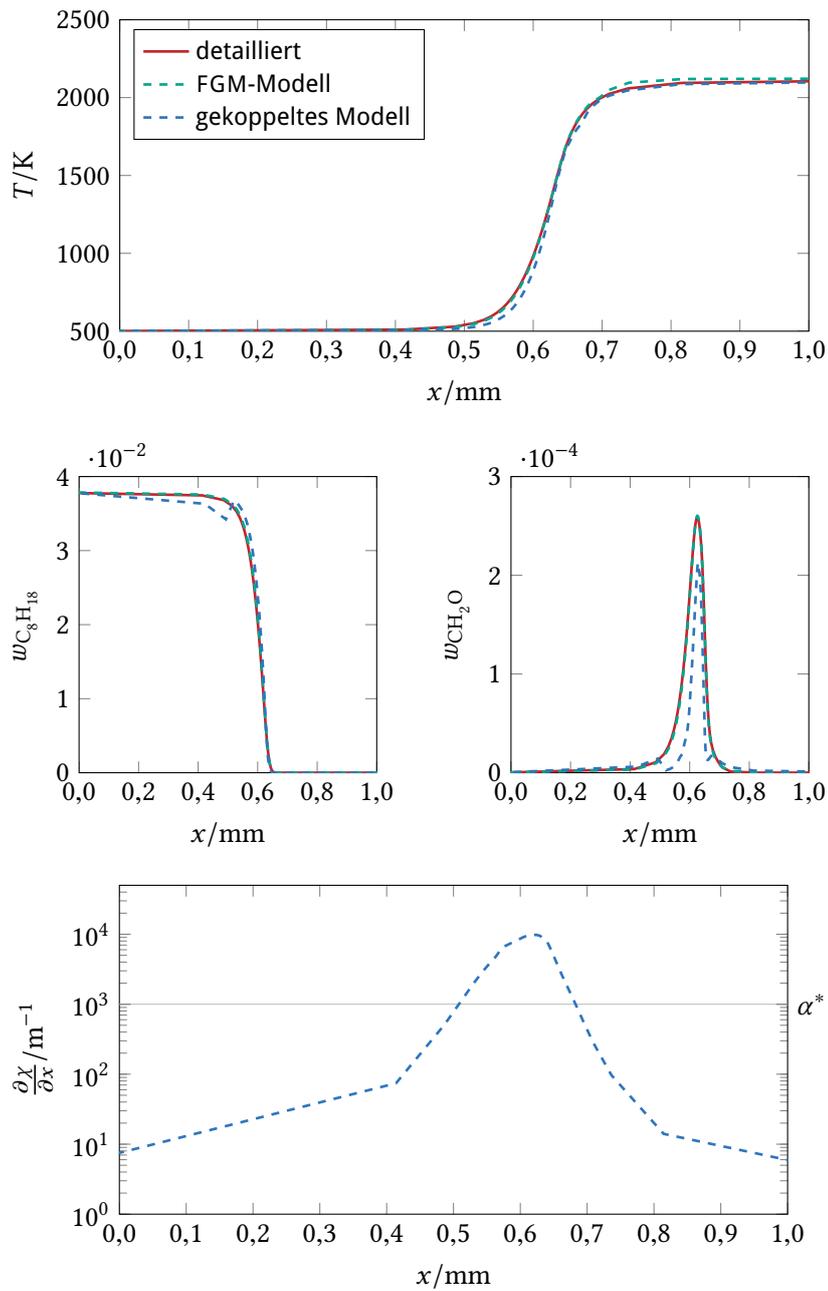


Abbildung 7.12: Vergleich von detaillierter und reduzierter Berechnung einer laminaren, vorgemischten, freien Flamme für ein TRF/Luft-System [4] bei $\phi = 0,74$, $T_{\text{ub}} = 500 \text{ K}$, $p = 10 \text{ bar}$, durchgezogen: detaillierte Berechnung, gestrichelt: reduzierte Berechnung

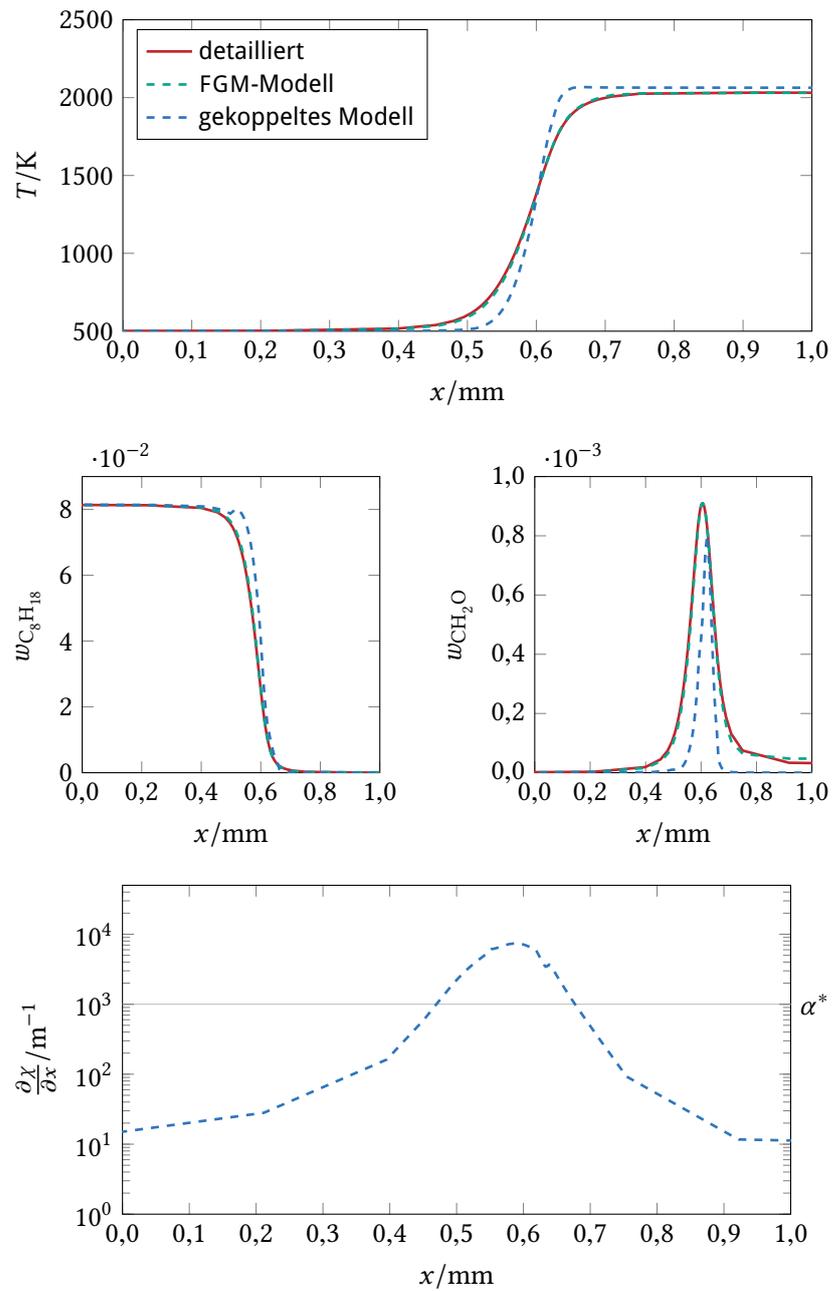


Abbildung 7.13: Vergleich von detaillierter und reduzierter Berechnung einer laminaren, vorgemischten, freien Flamme für ein TRF/Luft-System [4] bei $\phi = 1,69$, $T_{\text{ub}} = 500 \text{ K}$, $p = 10 \text{ bar}$, durchgezogen: detaillierte Berechnung, gestrichelt: reduzierte Berechnung

Seite der Flamme zu erkennen; ebenso wie eine leichte »W-Form« der Formaldehydprofile in der Flamme. Dies spiegelt den Übergang zwischen den Modell-Mannigfaltigkeiten in der reduzierten Berechnung mit dem gekoppelten Modell wider. Auf der unverbrannten und der verbrannten Seite der Flamme existieren keine Gradienten, weshalb hier die Zustände auf der PVM-Mannigfaltigkeit liegen. Die Zustände innerhalb der Flamme befinden sich auf der REDIM, da dort der Gradient der Fortschrittsvariablen über dem Faktor $\alpha^* = 10^3 \text{ m}^{-1}$ liegt. Im Übergangsbereich werden die Zustände zwischen den Mannigfaltigkeiten, wie in Abschnitt 5.5 beschrieben, linear interpoliert. Sind die Zustände auf den beiden Modell-Mannigfaltigkeiten stark unterschiedlich, äußert sich das in den hier sichtbaren Wellen.

Für den brennstoffreichen Fall werden die Profile durch das gekoppelte Modell etwas steiler berechnet als durch das FGM-Modell oder die detaillierte Simulation. Das Profil der Zwischenspezies (CH_2O) hat im Fall des gekoppelten Modells leichte Abweichungen im Maximalwert. Zudem wird die räumliche Ausdehnung der Profile für das fette und magere Gemisch leicht unterschätzt. Allerdings ist zu erwähnen, dass im REDIM-Teilmodell die Reaktions-Diffusions-Kopplung durch die Vorgabe einer Gradientenabschätzung in der REDIM-Entwicklungsgleichung 3.7 berücksichtigt wird. Bei der Vorgabe vorgemischter Gradienten stimmen die detaillierten und reduzierten Profile wesentlich besser überein [90, 91]. Wie in Abschnitt 5.3 erläutert, werden in dieser Arbeit die räumlichen Gradienten jedoch aus einer Gegenstromanordnung abgeschätzt. Die tatsächlichen räumlichen Gradienten in der Anwendung der hier untersuchten laminaren, vorgemischten, freien Flamme entsprechen somit nicht den Gradienten, auf deren Basis die Reaktions-Diffusions-Kopplung in das gekoppelte Modell integriert wird. Trotzdem zeigen die reduzierten Berechnungen mit dem gekoppelten Modell, wie oben dargestellt, gute Ergebnisse. Im Vergleich dazu berücksichtigt das FGM-Modell für diesen speziellen Fall die korrekten Gradienten, jedoch ohne die variable Kopplung von chemischer Reaktion und molekularem Transport, die in Abschnitt 3.3 für das gekoppelte Modell vorgestellt wurde.

Obwohl die räumlichen Gradienten die im gekoppelten Modell angenommen werden, nicht denen in der Testanwendung entsprechen, werden die Modellrechnungen in Bezug auf die Vorhersage der laminaren Flammgeschwindigkeit untersucht. Abbildung 7.14 vergleicht dazu die detailliert und reduziert berechnete laminare Flammgeschwindigkeit v_{lam} für verschiedene Gemischzusammensetzungen. Des Weiteren sind die reduzierten Ergebnisse aus einem FGM-Modell eingefügt. Diese zeigen nahezu keine Abweichung zu den detaillierten Ergebnissen, da sie, wie schon erwähnt, die korrekten räumlichen Gradienten berücksichtigen. Die Ergebnisse des gekoppelten Modells stimmen zumindest bereichsweise gut mit den detaillierten Ergebnissen überein. So zeigen die Modellrechnungen mit

einem Normierungsfaktor $\alpha^* = 10^3 \text{ m}^{-1}$ im Bereich um die Stöchiometrie gute Übereinstimmung mit den detaillierten Berechnungen, zeigen aber für magere und fette Gemische deutliche Abweichungen. Wie oben angemerkt, kann jedoch nicht erwartet werden, dass das gekoppelte Modell in dieser Form, also mit einer Gradientenabschätzung der REDIM, basierend auf detaillierten Simulationen von Gegenstromflammen diesen Testfall ohne Abweichungen beschreibt. Die Annahmen bezüglich der molekularen Transporteffekte entsprechen hier nicht denen, die im Testfall auftreten. Eine Anpassung der Gradientenabschätzung, basierend auf laminaren, flachen Flammen, führt im Grenzfall zum gezeigten FGM-Modell und würde in diesem Anwendungsfall bessere Ergebnisse liefern. Dies ist allerdings nicht als Einschränkung des in Abschnitt 3.3 vorgestellten Kopplungsansatzes zu verstehen. Die flexible Vorgabe von räumlichen Gradienten im REDIM-Kontext oder auch die Integration verschiedener Modellansätze, wie FGM, stellen einen großen Vorteil des vorgestellten Ansatzes dar.

Jedoch zeigt die Untersuchung aus Abbildung 7.14 auch, dass durch die Änderung des Normierungsfaktors α^* das Ergebnis des gekoppelten Modells teilweise angepasst werden kann. Somit kann etwa der Bereich um die Stöchiometrie mit dem gekoppelten Modell, trotz der unpassenden Gradientenabschätzung aus der Gegenstromanordnung, mit einem Normierungsfaktor $\alpha^* = 10^3 \text{ m}^{-1}$ sehr gut beschrieben werden.

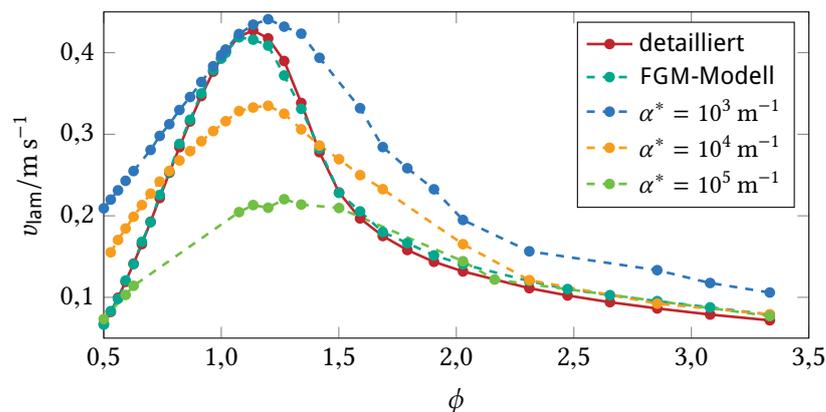


Abbildung 7.14: Detaillierte und reduzierte Berechnung der laminaren Flammgeschwindigkeit für ein TRF/Luft-System [4] bei $T_{ub} = 500 \text{ K}$, $p = 10 \text{ bar}$

In Abbildung 7.15 sind die detailliert und reduziert berechnete adiabatische Flammentemperatur T_{ad} für verschiedene Gemischzusammensetzungen dargestellt. Fast alle Simulationen zeigen vergleichbare Ergebnisse. Abweichungen für die reduzierten Berechnungen mit dem gekoppelten Modell mit einem Normierungsfaktor $\alpha^* = 10^3 \text{ m}^{-1}$ im Bereich fetter und magerer Zusammensetzungen,

wie bei der laminaren Flammgeschwindigkeit in Abbildung 7.14, sind hier nicht zu erkennen. Die adiabatische Flammentemperatur wird auf der Abgasseite der Flamme erreicht, in der keine Gradienten mehr existieren und wird damit vom gekoppelten Modell bei $\alpha = 0$ bestimmt. Die Gradientenabschätzung der REDIM hat somit bei der reduzierten Simulation keinen Einfluss auf die adiabatische Flammentemperatur. Allerdings führt eine ungünstige Bestimmung von α , wie beispielsweise eine Erhöhung des Normierungsfaktors α^* dazu, dass auch Bereiche mit schwachen Gradienten vom REDIM-Modell bestimmt werden. Als Konsequenz bleibt in diesen reduzierten Rechnungen selbst auf der Abgasseite der Flamme die Fortschrittsvariable $\chi < 1$, womit das chemische Gleichgewicht nicht erreicht wird. Entsprechend wird für diese Fälle in Abbildung 7.15 nicht die adiabatische Flammentemperatur dargestellt, wie im Bereich $\phi = 1,5$ bis $\phi = 3$ erkennbar ist. Die Abweichungen lassen sich also dadurch erklären, dass für fette Zusammensetzungen die Spitzentemperatur in der Flamme höher liegt, als die adiabatische Flammentemperatur.

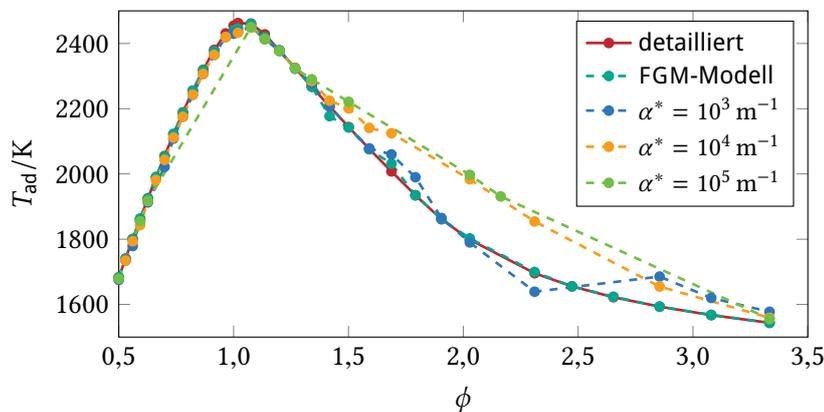


Abbildung 7.15: Detaillierte und reduzierte Berechnung der adiabatischen Flammentemperatur für ein TRF/Luft-System [4] bei $T_{ub} = 500$ K, $p = 10$ bar

Diese Untersuchung zeigt die Grenzen des verwendeten gekoppelten Modells, nicht jedoch des vorgestellten Ansatzes auf. So kann in dem gekoppelten PVM/REDIM-Modell die unterschiedliche Stärke der Reaktions-Diffusions-Kopplung berücksichtigt werden. Die Richtung der Gradienten im Zustandsraum kann jedoch nicht variiert werden. Wie bereits erwähnt, würde ein FGM-Modell für diesen Testfall die korrekten Gradienten berücksichtigen und könnte in das gekoppelte Modell integriert werden.

Es konnte allerdings auch gezeigt werden, dass durch das Anpassen des Normierungsfaktors α^* das Manko der unpassenden Gradienten zum Teil ausgeglichen werden kann. Doch insbesondere im Bereich brennstoffreicher Zusammensetzung

sind Abweichungen in den Ortsprofilen der Temperatur und Speziesmassenbrüchen nicht zu vermeiden. Auch für die laminare Flammgeschwindigkeit und die adiabatische Flammentemperatur konnten in diesem Bereich keine zufriedenstellenden Ergebnisse erreicht werden. Im Bereich der Stöchiometrie hingegen verspricht der Ansatz vielversprechende Resultate.

7.2.3 Zündung und Flammenausbreitung an einem Hot-Spot

Das Szenario einer lokal leicht erhöhten Temperatur (Hot-Spot) in einem sonst homogenen Gemisch ist ein sehr anschaulicher Testfall, um den Übergang zwischen den Mannigfaltigkeiten und deren zugrundeliegende Phänomene zu validieren. Die leichten Temperaturunterschiede im Ausgangsgemisch verursachen kaum merkbare Transporteffekte, führen jedoch zu deutlichen Unterschieden im Zündverzug. Dadurch baut sich lokal eine Reaktionsfront auf, die sich zu einer transportgetriebenen, propagierenden Flamme ausbildet. Somit vereint dieser Testfall den Übergang zwischen den Extremfällen der Reaktions-Diffusions-Kopplung sowohl in der räumlichen als auch der zeitlichen Koordinate.

Die detaillierte mathematische Beschreibung eines solchen eindimensionalen Reaktionssystems wird in [77, 117] erläutert. Durch die Betrachtung eines homogen verteilten Gemischs und die Annahme konstanten Drucks können weitere Vereinfachungen für das partielle Differentialgleichungssystem aus Gleichung 7.8 getroffen werden:

$$\frac{\partial Z}{\partial t} = 0, \quad (7.18)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = 0. \quad (7.19)$$

Für die Lösung werden sowohl am linken als auch am rechten Rand NEUMANN-Randbedingungen angenommen. Als Anfangslösung wird ein homogen verteiltes, unverbranntes, stöchiometrisches Kraftstoff/Luft-Gemisch bzw. $\chi_0(x) = 0$ und $Z_0(x) = Z_{\text{st}}$ vorgegeben. Zusätzlich wird ein Temperaturprofil des unverbrannten Gemischs vorgegeben, das der räumlichen Verteilung der Temperatur in einem sogenannten Hot-Spot entspricht. Dies ist in Abbildung 7.16 veranschaulicht. Die Temperatur im Hot-Spot wird um $\Delta T_{\text{ub}} = 20 \text{ K}$ heißer als das restliche Gemisch angenommen.

Für die Reaktions-Diffusions-Kopplung im Kontext des gekoppelten Modells wird in dieser Anwendung ein Normierungsfaktor $\alpha^* = 10^3 \text{ m}^{-1}$ für die räumlichen Gradienten der Fortschrittsvariable verwendet.

Abbildung 7.17 zeigt die zeitliche und räumliche Entwicklung der Temperatur in einem Hot-Spot bei $\phi = 1$, $T_{\text{ub},0} = 1000 \text{ K}$, $p = 10 \text{ bar}$. Die Temperaturdifferenz

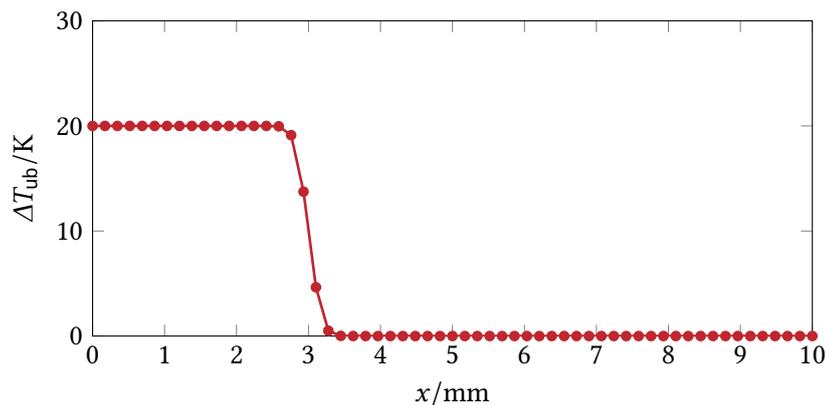
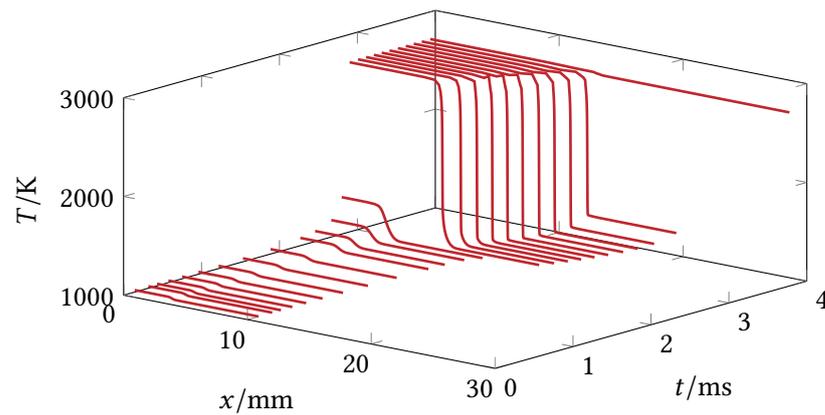


Abbildung 7.16: Typisches Temperaturprofil in einem Hot-Spot als Anfangslösung

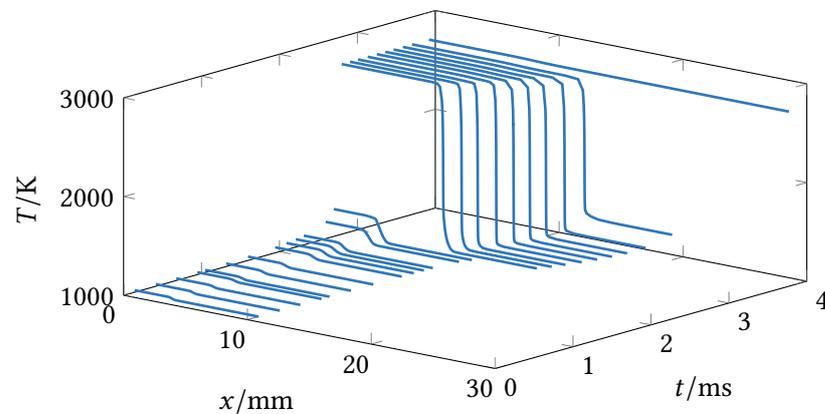
von $\Delta T = 20$ K im Anfangsprofil ist in dieser Darstellung schwer zu erkennen. Es zeigt sich allerdings ein langsamer Temperaturanstieg aufgrund der beginnenden Zündung im heißeren, linken Bereich. Nach der Zündung bei ungefähr $t = 2,8$ ms steigt die Temperatur stark an, aufgrund dessen sich das Rechengebiet nach rechts ausdehnt. Anschließend bildet sich eine Flammenfront aus, die nach rechts in das noch unverbrannte Gemisch propagiert. Unabhängig davon steigt die Temperatur im kühleren, rechten Bereich, bedingt durch eine parallele, spätere Zündung leicht an. Die zweite Zündung führt wieder zu einem starken Anstieg der Temperatur und zu einer weiteren Ausdehnung des Rechengebiets, das letztendlich nur noch aus heißem Abgas besteht.

Zur weiteren Veranschaulichung ist in Abbildung 7.18 die zeitliche und räumliche Entwicklung des Massenbruchs von Formaldehyd (CH_2O) in einem Hot-Spot bei $\phi = 1$, $T_{\text{ub},0} = 1000$ K, $p = 10$ bar dargestellt. Hier ist die beginnende Zündung im heißeren, linken Bereich, genau so wie die spätere Zündung des kühleren, rechten Bereichs noch deutlicher am sich bildenden Formaldehyd zu sehen. Der Formaldehyd-Massenbruch erreicht sein Maximum jeweils vor der vollständigen Zündung des linken bzw. rechten Bereichs. Außerdem ist im Bereich der Flammenfront ein Maximum zu erkennen. Da Formaldehyd als Zwischenprodukt während der Zündung und in der Flammenfront gebildet und auch wieder verbraucht wird, liegt im verbrannten Abgas kein Formaldehyd mehr vor.

Alle beschriebene Phänomene, sowohl die Temperaturanstiege als auch die Änderungen des Formaldehyd-Massenbruchs werden in der reduzierten Berechnung mit dem gekoppelten Modell in guter Übereinstimmung mit der detaillierten Berechnung dargestellt. Damit wird gezeigt, dass durch das gekoppelte Modell der Übergang zwischen Verbrennungsszenarien mit unterschiedlich starker Wechsel-



(a) Detaillierte Berechnung

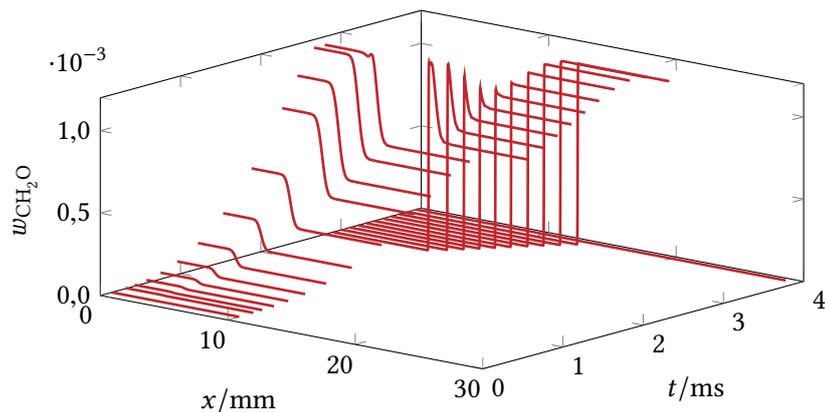


(b) Reduziert Berechnung mit dem gekoppelten Modell

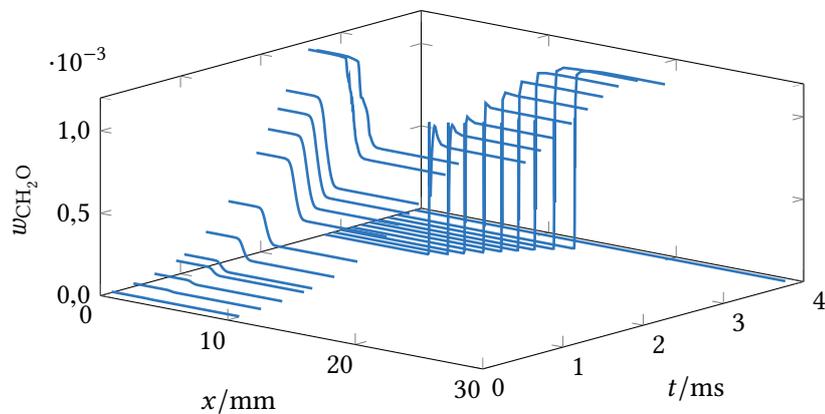
Abbildung 7.17: Zeitliche und räumliche Entwicklung der Temperatur in einem Hot-Spot für ein TRF/Luft-System [4] bei $\phi = 1$, $T_{ub} = 1000$ K, $p = 10$ bar mit $\Delta T = 20$ K

wirkung von chemischer Reaktion und molekularen Transportprozessen realistisch abgebildet wird.

In Abbildung 7.19 ist die zeitliche und räumliche Entwicklung der Temperatur T_{ub} im unverbrannten Gemisch und der Fortschrittsvariablen χ aus der reduzierten Berechnung des Hot-Spots dargestellt. Hier ist deutlich zu sehen, dass die Temperatur im unverbrannten Gemisch nicht durch die chemische Reaktion geändert wird. Einzig die Transportprozesse führen zu einer Abflachung des Anfangsprofils. Die Entwicklung der Fortschrittsvariablen zeigt einen ähnlichen Verlauf wie die Temperatur aus Abbildung 7.17. Die einsetzenden Zündungen zuerst des heißeren, linken und dann des kühleren, rechten Bereichs sind an den



(a) Detailliert



(b) Reduziert Berechnung mit dem gekoppelten Modell

Abbildung 7.18: Zeitliche und räumliche Entwicklung des Massenbruchs von CH_2O in einem Hot-Spot für ein TRF/Luft-System [4] bei $\phi = 1$, $T_{\text{ub}} = 1000 \text{ K}$, $p = 10 \text{ bar}$ mit $\Delta T = 20 \text{ K}$

jeweiligen Anstiegen der Fortschrittsvariablen zu erkennen.

Des Weiteren ist in Abbildung 7.19 die zeitliche und räumliche Entwicklung der normierten Stärke α der dissipativen Transportprozesse dargestellt. Aufgrund der in Abschnitt 3.3 beschriebenen Kopplungsstrategie, spiegelt diese Abbildung auch den Übergang zwischen den Modell-Mannigfaltigkeiten wider. Die homogene Mischung zu Beginn der Rechnung wird ausschließlich von der PVM-Mannigfaltigkeit bestimmt. Durch die einsetzende Zündung werden Gradienten aufgebaut und der Einfluss der REDIM steigt im Randbereich des Hot-Spots. Nach der vollständigen Zündung des heißeren, linken Bereichs bildet sich eine Flammenfront mit starken Gradienten aus, welche vollständig von der REDIM beschrieben wird,

während das umgebende Abgas auf der einen Seite und Frischgas auf der anderen Seite nach wie vor von der PVM-Mannigfaltigkeit bestimmt werden, bis durch die Zündung des kühleren, rechten Bereichs die Gradienten in der Flammenfront und somit der Einfluss der REDIM wieder abgebaut wird.

Dieser Validierungsfall zeigt deutlich, dass das gekoppelte Modell einen automatischen und stetigen Übergang zwischen den Modell-Mannigfaltigkeiten gewährleistet. Die Kopplung des PVM und des REDIM-Modells über einen linearen Ansatz stellt somit eine robuste Implementierung des in Abschnitt 3.3 vorgestellten Ansatzes zur Erweiterung von Mannigfaltigkeiten dar. Damit können Verbrennungsszenarien mit unterschiedlich starker Wechselwirkung zwischen chemischer Reaktion und molekularem Transport sowohl zeitlich als auch räumlich parallel berücksichtigt werden. Die Ergebnisse aus der reduzierten Berechnung stehen qualitativ und quantitativ in sehr guter Übereinstimmung mit der detaillierten Berechnung.

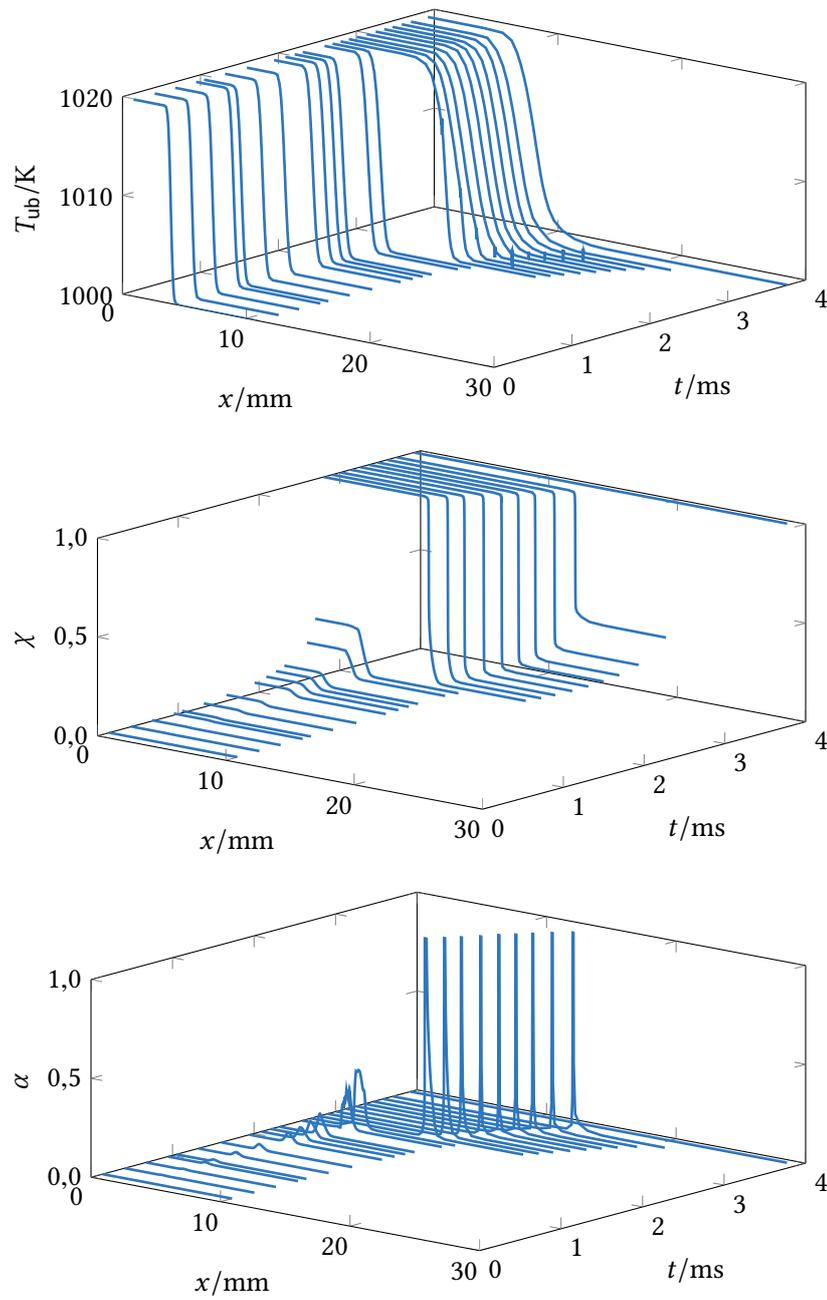


Abbildung 7.19: Zeitliche und räumliche Entwicklung des reduzierten Zustands bei der reduzierten Berechnung eines Hot-Spots für ein TRF/Luft-System [4] bei $\phi = 1$, $T_{\text{ub}} = 1000 \text{ K}$, $p = 10 \text{ bar}$ mit $\Delta T = 20 \text{ K}$

8

Anwendung für turbulente Verbrennung

Das in Kapitel 3 vorgestellte gekoppelte Modell wurde in Kapitel 7 an verschiedenen laminaren Testfällen validiert. Die Anwendung in einer Simulation turbulenter Verbrennung erfolgte im Rahmen der DFG/FVV-Verbundinitiativen MA1205/15-1 und MA1205/15-2 [79, 82]. In Kooperation wurde das gekoppelte Modell in eine Grobstruktursimulation bzw. *large eddy simulation* (LES) implementiert. BREITENBERGER [19] führte schließlich Simulationen mehrerer Zyklen eines CAI-Motors durch. Hier wird ein kurzer Überblick über die Konfiguration und Implementierung und ein Auszug aus den Simulationsergebnissen gezeigt. Weitere Details sind in [11, 19] zu finden.

8.1 Behandlung von kleinskaligen Fluktuationen

Bei der Grobstruktursimulation einer turbulenten Strömung [65] werden die großen Wirbelstrukturen durch das räumliche Rechengitter aufgelöst und direkt berechnet [105]. Dazu werden die NAVIER-STOKES-Gleichungen räumlich mit einem Tiefpassfilter gefiltert. Kleine Wirbelstrukturen, die nicht vom Rechengitter aufgelöst werden, müssen dann innerhalb einer Rechenzelle über ein Feinstrukturmodell modelliert werden. Die Größen werden dabei als statistisch verteilte Zufallsvariablen behandelt und deren Verteilung in einer Rechenzelle über eine Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion P bzw. *probability density function* (PDF) beschrieben [43, 105].

In [11, 19] werden neben den gefilterten NAVIER-STOKES-Gleichungen und der gefilterten Transportgleichung für die innere Energie auch Gleichungen für die FAVRE-gefilterten Größen des Mischungsbruchs und der Fortschrittsvariable

gelöst. Entsprechend wird der FAVRE-gefilterte chemische Quellterm $\widetilde{\omega}_\chi$ der Fortschrittsvariablen aus dem gekoppelten Modell für die chemische Kinetik benötigt.

In einem Vorverarbeitungsschritt wird eine Verbundwahrscheinlichkeit mit angenommenem Verlauf, ein sogenannter *presumed joint* PDF-Ansatz [43], auf das gekoppelte Modell angewandt [11, 19, 61]. Für die Verbund-PDF $P_{\theta\alpha}$ des reduzierten Zustandsvektors $\theta = (\chi, Z, T_{\text{ub}}, p)^T$ und der normierte Stärke α des molekularen Transports wird ein Produktansatz verwendet [43]:

$$P_{\theta\alpha} = P_\chi \cdot P_Z \cdot P_{T_{\text{ub}}} \cdot P_p \cdot P_\alpha, \quad (8.1)$$

mit den PDFs P_χ für die Fortschrittsvariable, $P_{T_{\text{ub}}}$ für die Temperatur im unverbrannten Gemisch, P_p für den Druck und P_α für die normierte Stärke des molekularen Transports. Diese werden jeweils mit einer δ -Funktion [22] modelliert [19]. Für den Mischungsbruch wird eine β -Verteilung [22] angenommen, die neben dem Mittelwert \widetilde{Z} die Varianz \widetilde{Z}''^2 als zweiten Parameter benötigt [43, 105]. Diese Annahme von β - und δ -förmigen Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion ist ein verbreitetes Vorgehen in der Modellierung turbulenter Verbrennung im LES-Kontext [43, 65, 105].

Abbildung 8.1 zeigt die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion P_Z des Mischungsbruchs über der Zufallsvariable \hat{Z} für einen Mittelwert $\widetilde{Z} = 0,063$, der der Stöchiometrie entspricht und verschiedenen Varianzen \widetilde{Z}''^2 .

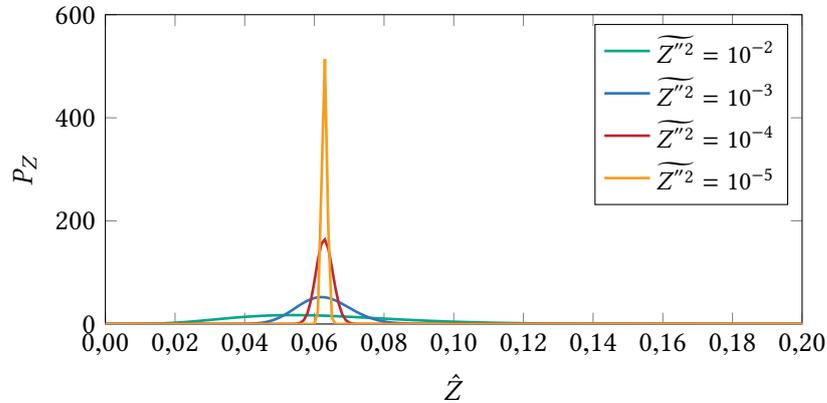


Abbildung 8.1: Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion einer β -Verteilung des Mischungsbruchs mit $\widetilde{Z} = 0,063$ entsprechend $\phi = 1$ und verschiedenen Varianzen \widetilde{Z}''^2

Die Vorgehensweise zur Mittelung durch die Integration der β -Funktion ist in [61] beschrieben. Ausgehend von einer Modell-Tabellierung der Größe $g = g(\theta; \alpha)$

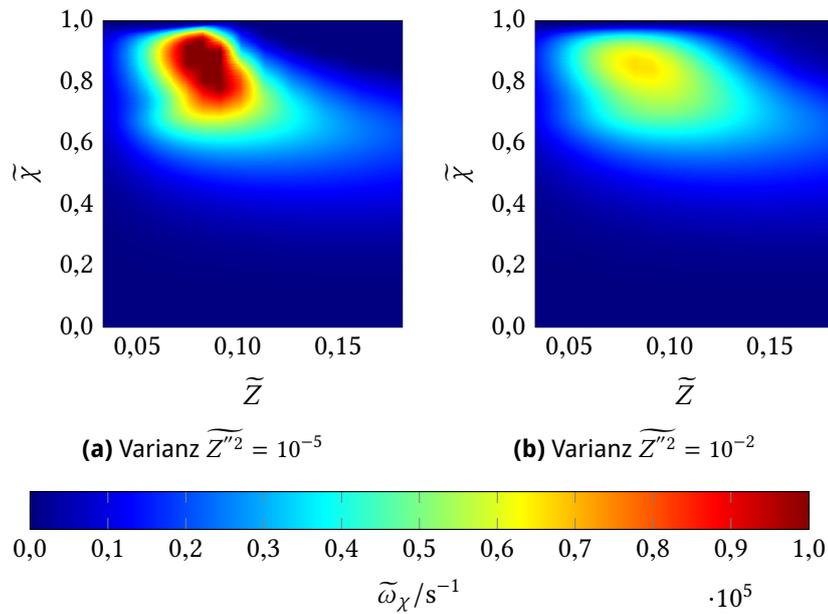


Abbildung 8.2: Gemittelter chemischer Quellterm des gekoppelten Modells bei $\alpha = 0$, $T_{\text{ub}} = 1000 \text{ K}$, $p = 10 \text{ bar}$, $\widetilde{Z} = 0,063$ entsprechend $\phi = 1$ und verschiedenen Varianzen \widetilde{Z}''^2

ergibt sich dadurch eine Bestimmung der gefilterten Größe:

$$\widetilde{g} = \widetilde{g}(\widetilde{\theta}, \widetilde{Z}''^2; \widetilde{\alpha}) . \quad (8.2)$$

In der LES-Anwendung muss daher eine zusätzliche Transportgleichung für die Varianz des Mischungsbruchs gelöst werden [66]. In Abbildung 8.2 ist der resultierende mittlere chemische Quellterm $\widetilde{\omega}_\chi$ des gekoppelten Modells bei $\alpha = 0$, $T_{\text{ub}} = 1000 \text{ K}$, $p = 10 \text{ bar}$, $\widetilde{Z} = 0,063$ entsprechend $\phi = 1$ und verschiedenen Varianzen \widetilde{Z}''^2 dargestellt. Bei der Mittelung mit kleiner Varianz, wie in Abbildung 8.2a, ist ein Bereich mit sehr hohen Quelltermen erkennbar. Die Mittelung mit größeren Varianzen führt, wie in Abbildung 8.2b, zum Abflachen dieser hohen Quellterme, wohingegen die Quellterme im Umfeld der Spitze erhöht werden.

8.2 Experimenteller Aufbau und numerische Konfiguration

Die Durchführung von Grobstruktursimulationen und die Validierung der Ergebnisse mit Experimenten an optisch zugänglichen Versuchsträgern war ein Teil

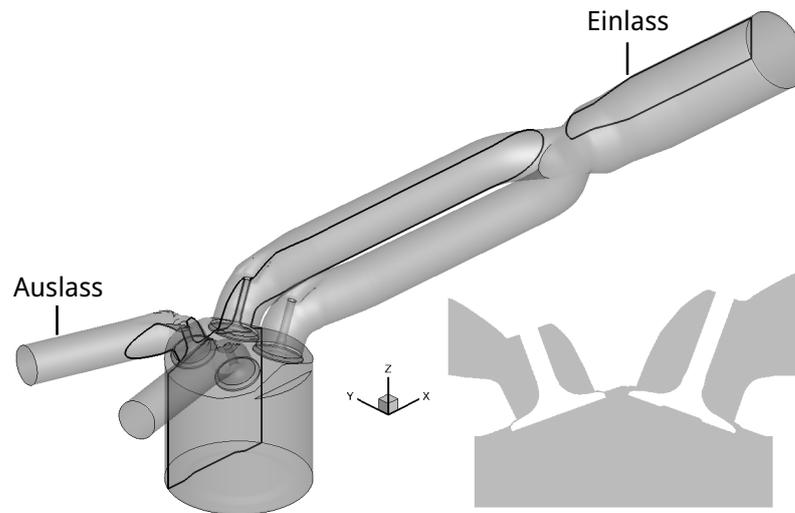


Abbildung 8.3: Motorkonfiguration mit vergrößertem Ausschnitt des Zylinderkopfs [11, 19]

der Kooperation aus dem DFG/FVV-Verbundprojekt [79, 82]. Abbildung 8.3 zeigt die Geometrie des Versuchsträgers, eines Viertakt-Ottomotors mit Direkteinspritzung, der auch für die Simulationen in [11, 19] verwendet wurde. Die wichtigsten Daten zur Geometrie sind in Tabelle 8.1 aufgeführt. Weitere Angaben sind [11, 19] zu entnehmen.

Tabelle 8.1: Technische Daten zur Motorgeometrie

Parameter	Länge/mm	Wert
Bohrungsdurchmesser	100	
Hub	83	
Pleuelstange	149	
Quetschspalt	1,5	
Verdichtungsverhältnis		10,84

Zur numerischen Berechnung wurde in [19] der Strömungslöser KIVA-4mpi [112] mit LES als Turbulenzmodell erweitert. Für Details bezüglich Diskretisierung, Lösungsverfahren und verwendeter Modell, sowie den Randbedingungen sei auf [11, 19] verwiesen. Ferner wurde das in Abschnitt 5.1 erwähnte Schnittstellenprogramm zur Verwendung des gekoppelten Modells für die chemische Kinetik implementiert. Zwar wurde die in Abschnitt 4.4 vorgestellte adaptive Tabellierungsstrategie eigens für diese Anwendung des gekoppelten Kinetikmo-

dells entwickelt, doch war der adaptive Dünngitter-Algorithmus 4.2 und dessen Implementierung zum Zeitpunkt dieser Simulationen noch nicht abgeschlossen. Deshalb erfolgte die Einbindung des gekoppelten Modells für die chemische Kinetik in die LES-Anwendung mittels einer äquidistanten Tabellierung. Zukünftige Arbeiten sollen jedoch mit dem gekoppelten Kinetikmodell in adaptiver Implementierung erfolgen.

8.3 Ergebnisse der Motorsimulation

Der Schwerpunkt der Untersuchung [11, 19] liegt auf dem Vergleich der Zündorte mit experimentellen Daten, weswegen das gekoppelte Modell für den Spezialfall $\alpha = 0$, also keinerlei Reaktions-Diffusions-Kopplung verwendet wurde. Abbildung 8.4 zeigt den zeitlichen Verlauf der Temperatur in einem vertikalen Schnitt durch den Brennraum bei einer Motordrehzahl $n = 2000 \text{ min}^{-1}$. Wie zu Beginn dieser Arbeit beschrieben, zeigt sich in dieser Untersuchung, dass Schwankungen in Temperatur und Zusammensetzung lokal die Selbstzündung begünstigen. Diese Selbstzündungszentren sind in Abbildung 8.4a unter dem Einlassventil zu erkennen. Von dort breitet sich, wie in den darauffolgenden Abbildungen zu sehen, eine Reaktionsfront aus.

BREITENBERGER [19] hat das in dieser Arbeit entwickelte gekoppelte Modell für die chemische Kinetik in eine Anwendung turbulenter Verbrennung implementiert. Sowohl die numerische Implementierung des Schnittstellenprogramms und der multidimensionalen Tabellierung als auch die dem Modell zugrunde liegende reduzierte chemische Kinetik konnte damit im Rahmen einer komplexen turbulenten Verbrennungssimulation erfolgreich getestet werden. Seine Ergebnisse zur Bestimmung von Zündorten im Brennraum lassen sich sehr gut mit experimentellen Daten [79, 82] vergleichen. Obwohl bei dieser frühen Implementierung noch auf die Berücksichtigung der Reaktions-Diffusions-Kopplung im gekoppelten Modell verzichtet wurde, zeigen seine Untersuchungen das Potential des in dieser Arbeit entwickelten Modells. Mit dem gekoppelten Modell steht ein vielseitiges Werkzeug zur Verfügung, mit dem unterschiedliche Verbrennungsszenarien bezüglich der Reaktions-Diffusions-Kopplung in komplexen Anwendungen turbulenter Verbrennung eingebunden werden kann. Zukünftige Arbeiten müssen sich damit beschäftigen, wie die normierte Stärke α der molekularen Transporteffekte in einer LES-Anwendung abgeschätzt werden kann.

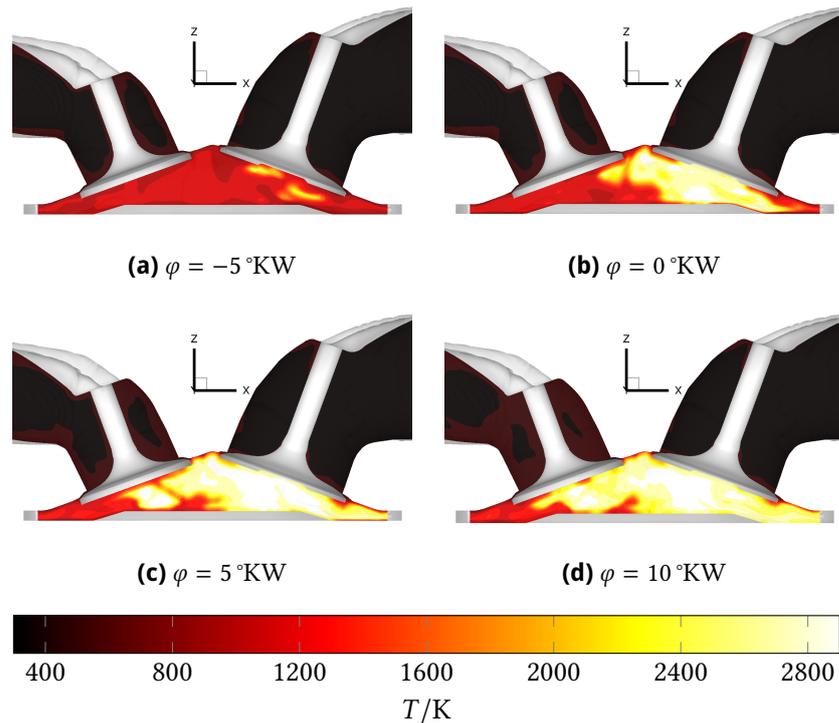


Abbildung 8.4: Zeitliche Entwicklung der Temperatur in einem vertikalen Schnitt durch den Brennraum [11, 19]

9

Zusammenfassung und Ausblick

In der vorliegenden Arbeit wurde ein Modell zur reduzierten Behandlung der chemischen Kinetik von Zündung und Flammenausbreitung in kompressionsgezündeten Motoren beschrieben und diskutiert. Dabei lag der Schwerpunkt auf der Beschreibung der verschiedenen Verbrennungsszenarien mit einem gemeinsamen Modell und somit auf der Berücksichtigung der unterschiedlich starken Kopplung der chemischen Kinetik und der dissipativen Transportprozesse.

Ausgehend von Reduktionsmethoden, basierend auf niedrigdimensionalen Mannigfaltigkeiten im Zustandsraum, wurde ein Parameter zur Beschreibung der Stärke der molekularen Transporteffekte eingeführt, mit dem Mannigfaltigkeiten mit unterschiedlicher Reaktions-Diffusions-Kopplung erstellt und charakterisiert werden können. Für die Kopplung dieser Mannigfaltigkeiten zu einer erweiterten Mannigfaltigkeit ist die einheitliche Parametrisierung der Mannigfaltigkeiten ein zentraler Schritt. Dazu wurde eine universelle Formulierung einer Reaktionsfortschrittsvariablen, basierend auf der durch chemische Reaktion produzierten Entropie, entwickelt. Ferner wurde eine einfache und robuste Projektion der Zustände zwischen den Mannigfaltigkeiten im Zustandsraum gefunden. Diese Projektion basiert auf dem Ansatz der *global quasi-linearization* (GQL) und ist somit physikalisch motiviert. Die resultierende erweiterte Mannigfaltigkeit erlaubt schließlich die Beschreibung verschiedener Verbrennungsregime bezüglich unterschiedlich starker Wechselwirkung von chemischer Reaktion und molekularem Transport. Der eingeführte Parameter parametrisiert die erweiterte Mannigfaltigkeit in Richtung der sich ändernden Reaktions-Diffusions-Kopplung. Die Methodik ist dabei nicht auf eine Reduktionsstrategie beschränkt, sondern kann allgemein auf Mannigfaltigkeitsmethoden angewandt werden, wobei diese innerhalb der Methode auch kombiniert werden können. Im Rahmen dieser Arbeit wurde die Methodik mit einigen Vereinfachungen am Beispiel der Kopplung eines Modells, basierend auf der *reaction-diffusion manifold*-Methode (REDIM),

und eines *progress-variable model*-Ansatzes (PVM) erläutert und aufgezeigt.

Des Weiteren wurde eine Strategie zur multidimensionalen Tabellierung der Modelldaten formuliert. Hierbei wurde ein Algorithmus entwickelt, der aufbauend auf dem Prinzip der dünnen Gitter bzw. *sparse grid* (SG) ein adaptives Tabellierungsgitter generiert. Dadurch lässt sich der Fluch der Dimensionalität umgehen und multidimensionale Daten sehr effektiv speichern. Zudem lässt sich die Größe der Interpolationsfehler auf diese Weise direkt steuern.

Letztendlich wurde die Qualität der entwickelten Methode und des gekoppelten Modells anhand verschiedener Testszenarien bewertet und validiert. Dazu wurden Ergebnisse aus detaillierten und reduzierten Simulationen verglichen. Motiviert durch die Anwendung in Motoren wurde für die Simulationen ein Benzin-Ersatzkraftstoff definiert, für den in der Literatur ein detailliertes Modell für die chemische Kinetik gefunden werden konnte.

Zunächst wurde die Auswirkung der Interpolationsfehler untersucht und die Qualität der Tabellierungsstrategien bewertet. Ein Vergleich der adaptiven Tabellierung mit einer äquidistanten Tabellierungsstrategie zeigte enorme Ersparnis im Speicherbedarf, bei gleichbleibender Genauigkeit. Entsprechend der Zielsetzung der Arbeit, die Selbstzündung und Flammenausbreitung zu beschreiben, konnten zudem diese Szenarien in einzelnen Validierungsfällen nachgestellt und das Modell erfolgreich getestet werden. Ferner wurde mit dem Hot-Spot ein Testfall gewählt, an dem die variierende Stärke der Reaktions-Diffusions-Kopplung demonstriert werden konnte. Hierbei konnte gezeigt werden, dass das gekoppelte Modell einen automatischen Übergang zwischen den Modell-Mannigfaltigkeiten vollzieht und somit die zeitlich und räumlich parallele Beschreibung von chemiedominierten Zündprozessen und transportgetriebenen Flammenausbreitungsprozessen möglich ist.

Abschließend wurden Ergebnisse aus der Anwendung des gekoppelten Modells für turbulente Verbrennung gezeigt. BREITENBERGER [19] führte eine *large eddy simulation* (LES) für Motorzyklen eines CAI-Motors durch. Hier wurde das gekoppelte Modell erfolgreich in einen Strömungslöser für turbulente Verbrennung implementiert. Die Auswirkungen von kleinskaligen Fluktuationen auf die chemische Kinetik wurde über die Annahme einer Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion modelliert. Vorerst wurden hierbei nur Fluktuationen des Mischungsbruchs berücksichtigt.

Es konnte gezeigt werden, dass das gekoppelte Modell die chemische Kinetik sowohl in verschiedenen Testfällen laminarer Verbrennung als auch in der Anwendung turbulenter Verbrennung sehr gut beschreibt. Hierbei konnte der stetige Übergang zwischen den Modell-Mannigfaltigkeiten und die robuste Implementierung erfolgreich getestet werden. Allerdings sollte die Methodik und Implementierung in zukünftigen Arbeiten verbessert und erweitert werden.

Zunächst muss untersucht werden, inwieweit die in dieser Arbeit getroffenen Vereinfachungen das gekoppelte Modell limitieren. Durch das Generieren von REDIMs für unterschiedliche Stärken der räumlichen Gradienten muss der Bereich zwischen den Extremfällen der Reaktions-Diffusions-Kopplung untersucht werden. Der lineare Ansatz, der dafür in dieser Arbeit verfolgt wurde, sollte überprüft und wenn nötig erweitert werden. Des Weiteren müsste die Abschätzung des eingeführten Parameters für die Stärke der molekularen Transporteffekte in den reduzierten Berechnungen überdacht werden. Die Untersuchung laminarer, vorgemischter, freier Flammen hat gezeigt, dass ein konstanter Normierungsfaktor nur in begrenzten Bereichen sinnvoll ist. Dabei müsste zudem eine Abschätzung des Parameters gefunden werden, die auf den Gradienten des gesamten reduzierten Zustands basiert.

Eine weitere Herausforderung ist die Abschätzung des Parameters für die Stärke der molekularen Transporteffekte in Anwendungen turbulenter Verbrennung. Da unter Umständen nur gemittelte oder gefilterte Größen zur Verfügung stehen, lassen sich auch nur gemittelte Gradienten für die Abschätzung der molekularen Transporteffekte auswerten. Bei hohen turbulenten Fluktuationen kann dies zu großen Abweichungen zu den tatsächlichen räumlichen Gradienten führen. Ferner können bei der Berücksichtigung von Fluktuationen für den chemischen Quellterm, neben dem Mischungsbruch, auch andere Größen betrachtet werden. Dazu sind, im Rahmen des in dieser Arbeit verwendeten Ansatzes, Kenntnisse über die Form deren Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion notwendig.

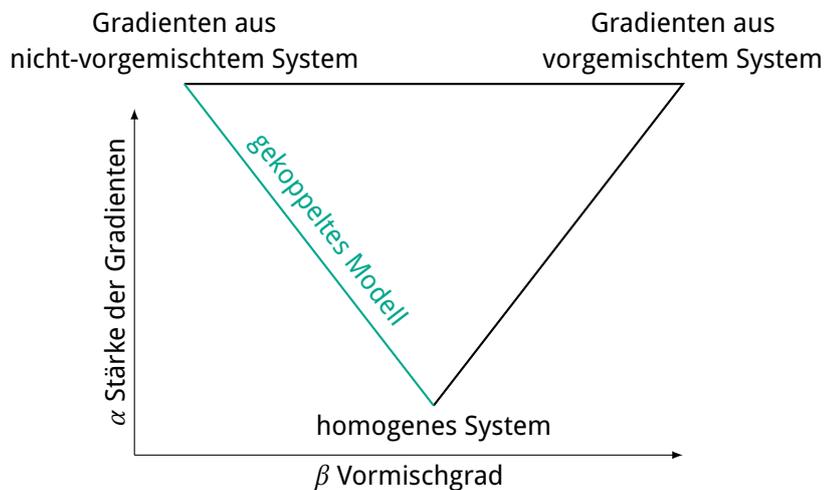


Abbildung 9.1: Erweiterung des gekoppelten Modells

Im Kontext der REDIM-Methode sollte die numerische Implementierung im Hinblick auf feinere Rechengitter und das Lösungsverfahren verbessert werden.

Auch sollten Experimente mit unterschiedlichen Abschätzungen der räumlichen Gradienten gemacht werden. Eine interessante Idee wäre zudem die Erweiterung des Ansatzes der variierenden Reaktions-Diffusions-Kopplung in Bezug auf die »Richtung« des molekularen Transports. Wie in Abbildung 9.1 veranschaulicht, könnten sowohl Gradienten aus nicht-vorgemischten Systemen als auch vorgemischten Systemen in das gekoppelte Modell integriert werden.

Literatur

- [1] H. AMANN und J. ESCHER. *Analysis III*. Basel: Birkhäuser, 2009.
- [2] J. C. G. ANDRAE, P. BJÖRNBOM, R. F. CRACKNELL und G. T. KALGHATGI. "Autoignition of toluene reference fuels at high pressures modeled with detailed chemical kinetics". In: *Combustion and Flame* 149 (2007), S. 2–24.
- [3] J. C. G. ANDRAE, T. BRINCK und G. T. KALGHATGI. "HCCI experiments with toluene reference fuels modeled by a semidetailed chemical kinetic model". In: *Combustion and Flame* 155 (2008), S. 696–712.
- [4] J. C. G. ANDRAE und R. A. HEAD. "HCCI experiments with gasoline surrogate fuels modeled by a semidetailed chemical kinetic model". In: *Combustion and Flame* 156 (2009), S. 842–851.
- [5] S. ARRHENIUS. »Über die Reaktionsgeschwindigkeit bei der Inversion von Rohrzucker durch Säuren«. In: *Zeitschrift für Physikalische Chemie* 4 (1889), S. 226–248.
- [6] P. W. ATKINS und J. DE PAULA. *Physikalische Chemie*. 5. Aufl. Weinheim: Wiley-VCH, 2013.
- [7] V. BARTHELMANN, E. NOVAK und K. RITTER. "High dimensional polynomial interpolation on sparse grids". In: *Advances in Computational Mathematics* 12 (2000), S. 273–288.
- [8] F. BATTIN-LECLERC. "Detailed chemical kinetic models for the low-temperature combustion of hydrocarbons with application to gasoline and diesel fuel surrogates". In: *Progress in Energy and Combustion Science* 34.4 (2008), S. 440–498.
- [9] R. E. BELLMAN. *Adaptive control processes: A guided tour*. Princeton University Press, 1961.
- [10] C. BENZ. »Fahrzeug mit Gasmotorenbetrieb«. Dt. Pat. DRP 37435 (DE). 1886.
- [11] M.-S. BENZINGER, T. BREITENBERGER, R. SCHIESSL, J. JANICKA und U. MAAS. »Large Eddy Simulationen für einen kompressionsgezündeten Motor unter Verwendung eines gekoppelten Modells zur Beschreibung der Selbstzündung und Verbrennung«. In: *27. Deutscher Flammentag*. 2015.

- [12] M.-S. BENZINGER, R. SCHIESSL und U. MAAS. "A unified reduced model for auto-ignition and combustion in premixed systems". In: *Eurasian Chemico-Technological Journal* 16 (2014), S. 107–116.
- [13] M.-S. BENZINGER, R. SCHIESSL und U. MAAS. "A versatile coupled progress variable/REDIM model for auto-ignition and combustion". In: *Proceedings of the Combustion Institute*. 2016.
- [14] M.-S. BENZINGER, R. SCHIESSL und U. MAAS. "A versatile coupled progress variable/REDIM model for auto-ignition and combustion: Parameterization, coupling and implementation strategies". In: *Proc. 7th European Combustion Meeting*. 2015, P1–22.
- [15] M.-S. BENZINGER, R. SCHIESSL und U. MAAS. "Tabulation strategies for simplified chemistry in combustion: Adaptively refined and equidistant approach". In: *Proc. 6th European Combustion Meeting*. 2013, P5–90.
- [16] F. BERNA, P. GOLDBERG, L. K. HORWITZ, J. BRINK, S. HOLT, M. BAMFORD und M. CHAZAN. "Microstratigraphic evidence of in situ fire in the Acheulean strata of Wonderwerk Cave, Northern Cape province, South Africa". In: *Proceedings of the National Academy of Sciences* 109.20 (2012), E1215–E1220.
- [17] R. E. BILSTEIN. *Stages to Saturn: A technological history of the Apollo/Saturn launch vehicle*. DIANE Publishing, 1999.
- [18] R. B. BIRD, W. E. STEWART und E. N. LIGHTFOOT. *Transport phenomena*. Revised 2. ed. New York: Wiley-VCH, 2007.
- [19] T. BREITENBERGER. »Numerische Simulation der Benzinselbstzündung«. Diss. Technische Universität Darmstadt, 2013.
- [20] K. E. BRENAN, S. L. CAMPBELL und L. R. PETZOLD. *Numerical solution of initial-value problems in differential-algebraic equations*. Classics in Applied Mathematics. New York: North-Holland Publishing, 1996.
- [21] R. P. BRENT. *Algorithms for minimization without derivatives*. Dover Books on Mathematics. Dover Publications, 1973.
- [22] I. N. BRONSTEJN und K. A. SEMENDJAEV. *Taschenbuch der Mathematik*. 25. durchges. Aufl. Leipzig: Teubner, 1991.
- [23] H.-J. BUNGARTZ. »Dünne Gitter und deren Anwendung bei der adaptiven Lösung der dreidimensionalen Poisson-Gleichung«. Diss. Technische Universität München, 1992.
- [24] H.-J. BUNGARTZ und T. DORNSEIFER. "Sparse grids: Recent developments for elliptic partial differential equations". In: *Multigrid Methods V* 3 (1997), S. 45–70.

- [25] H.-J. BUNGARTZ und M. GRIEBEL. "Sparse grids". In: *Acta Numerica* 13 (2004), S. 147–269.
- [26] S. P. BURKE und T. E. W. SCHUMANN. "Diffusion flames". In: *Industrial & Engineering Chemistry* 20.10 (1928), S. 998–1004.
- [27] V. BYKOV, V. GOL'DSHTEIN und U. MAAS. "Simple global reduction technique based on decomposition approach". In: *Combustion Theory and Modelling* 12 (2008), S. 389–405.
- [28] V. BYKOV und U. MAAS. "Extension of the ILDM method to the domain of slow chemistry". In: *Proceedings of the Combustion Institute*. Bd. 31. 2007, S. 465–472.
- [29] V. BYKOV und U. MAAS. "Problem adapted reduced models based on reaction-diffusion manifolds (REDIMs)". In: *Proceedings of the Combustion Institute*. Bd. 32. 2009, S. 561–568.
- [30] V. BYKOV und U. MAAS. "The extension of the ILDM concept to reaction-diffusion manifolds". In: *Combustion Theory and Modelling* 11 (2007), S. 839–862.
- [31] E. CHIAVAZZO, A. N. GORBAN und I. V. KARLIN. "Comparison of invariant manifolds for model reduction in chemical kinetics". In: *Communications in Computational Physics* 2.5 (2007), S. 964–992.
- [32] R. M. CORLESS, G. H. GONNET, D. E. G. HARE, D. J. JEFFREY und D. E. KNUTH. "On the Lambert W function". In: *Advances in Computational Mathematics* 5.1 (1996), S. 329–359.
- [33] E. M. CORTRIGHT. *Apollo expeditions to the moon: The NASA history*. Courier Corporation, 2012.
- [34] H. J. CURRAN, P. GAFFURI, W. J. PITZ und C. K. WESTBROOK. "A comprehensive modeling study of iso-octane oxidation". In: *Combustion and Flame* 129 (2002), S. 253–280.
- [35] H. J. CURRAN, P. GAFFURI, W. J. PITZ und C. K. WESTBROOK. "A comprehensive modeling study of n-heptane oxidation". In: *Combustion and Flame* 114 (1998), S. 149–177.
- [36] C. DE BOOR. *A practical guide to splines*. Bd. 27. New York: Springer, 1978.
- [37] P. DEUFLHARD, E. HAIRER und J. ZUGCK. "One-step and extrapolation methods for differential-algebraic systems". In: *Numerische Mathematik* 51.5 (1987), S. 501–516.

- [38] DIN EN 228:2012. *Kraftstoffe für Kraftfahrzeuge – Unverbleite Ottokraftstoffe – Anforderungen und Prüfverfahren*. Norm. Berlin: Deutsches Institut für Normung, 2012.
- [39] M. C. DRAKE und D. C. HAWORTH. “Advanced gasoline engine development using optical diagnostics and numerical modeling”. In: *Proceedings of the Combustion Institute* 31.1 (2007), S. 99–124.
- [40] N. ELSNER. *Grundlagen der technischen Thermodynamik*. 3. bearb. u. erw. Aufl. Braunschweig: Vieweg, 1982.
- [41] A. ERN und V. GIOVANGIGLI. *Multicomponent transport algorithms*. Lecture notes in physics: Monographs. Berlin: Springer, 1994.
- [42] G. FABER. »Über stetige Funktionen«. In: *Mathematische Annalen* 66 (1908), S. 81–94.
- [43] R. O. FOX. *Computational models for turbulent reacting flows*. Cambridge University Press, 2003.
- [44] R. W. FREUND und R. W. HOPPE. *Stoer/Bulirsch: Numerische Mathematik 1*. 10. Aufl. Berlin: Springer, 2007.
- [45] B. M. GAUTHIER, D. F. DAVIDSON und R. K. HANSON. “Shock tube determination of ignition delay times in full-blend and surrogate fuel mixtures”. In: *Combustion and Flame* 139.4 (2004), S. 300–311.
- [46] O. GICQUEL, N. DARABIHA und D. THÉVENIN. “Liminar premixed hydrogen/air counterflow flame simulations using flame prolongation of ILDM with differential diffusion”. In: *Symposium (International) on Combustion*. Bd. 28. 2000, S. 1901–1908.
- [47] R. G. GILBERT, K. LUTHER und J. TROE. “Theory of thermal unimolecular reactions in the fall-off range”. In: *Berichte der Bunsengesellschaft für physikalische Chemie* 87.2 (1983), S. 169–177.
- [48] G. H. GOLUB und C. F. VAN LOAN. *Matrix computations*. 4. Aufl. Johns Hopkins studies in the mathematical sciences. Baltimore, MD: Johns Hopkins University Pr., 2013.
- [49] N. GOREN-INBAR, N. ALPERSON, M. E. KISLEV, O. SIMCHONI, Y. MELAMED, A. BEN-NUN und E. WERKER. “Evidence of hominin control of fire at Geshar Benot Yaaqov, Israel”. In: *Science* 304.5671 (2004), S. 725–727.
- [50] J. GOUDSBLOM. *Feuer und Zivilisation*. 2. Aufl. Berlin: Springer, 2016.

- [51] D. A. GOUSSIS und U. MAAS. "Model reduction for combustion chemistry". In: *Turbulent combustion modeling*. Hrsg. von T. ECHEKKI und E. MASTORAKOS. Bd. 95. Fluid mechanics and its applications. Springer Netherlands, 2011, S. 193–220.
- [52] V. GRAVEMEIER und W. A. WALL. "Variational multiscale methods for premixed combustion based on a progress-variable approach". In: *Combustion and Flame* 158 (2011), S. 1160–1170.
- [53] M. GRIEBEL. "Adaptive sparse grid multilevel methods for elliptic PDEs based on finite differences". In: *Computing* 61 (1998), S. 151–179.
- [54] S. HAJIREZA, F. MAUSS und B. SUNDÉN. "Hot-spot auto-ignition in spark ignition engines". In: *Proceedings of the Combustion Institute*. Bd. 28. 1. 2000, S. 1169–1175.
- [55] M. HARTMANN, I. GUSHTEROVA, M. FIKRI, C. SCHULZ, R. SCHIESSL und U. MAAS. "Auto-ignition of toluene-doped n-heptane and iso-octane/air mixtures: High-pressure shock-tube experiments and kinetics modeling". In: *Combustion and Flame* 158 (2011), S. 172–178.
- [56] M. HARTMANN, I. GUSHTEROVA, R. SCHIESSL, U. MAAS und C. SCHULZ. "Auto-ignition of toluene-doped n-heptane and iso-octane/air mixtures: High-pressure shock-tube experiments and kinetic modeling". In: *Proc. 4th European Combustion Meeting*. 2009.
- [57] C. HEGHES. "C₁-C₄ hydrocarbon oxidation mechanism". Diss. Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, 2006.
- [58] J. HEYWOOD. *Internal combustion engine fundamentals*. New York: McGraw-Hill Education, 1988.
- [59] J. O. HIRSCHFELDER und C. F. CURTISS. "Theory of propagation of flames. Part I: General equations". In: *Symposium on Combustion and Flame, and Explosion Phenomena*. Bd. 3. 1949, S. 121–127.
- [60] J. O. HIRSCHFELDER, C. F. CURTISS und R. B. BIRD. *Molecular theory of gases and liquids*. Corrected printing with notes added. New York: Wiley, 1965.
- [61] C. HOFRATH. »Mathematische Reduktion der detaillierten chemischen Kinetik von Verbrennungsprozessen mittels eines Fortschrittsvariablen-Ansatzes«. Diss. Karlsruher Institut für Technologie, 2014.
- [62] K. H. HOMANN. *Reaktionskinetik*. Darmstadt: Steinkopff, 1975.

- [63] M. IHME, C. M. CHA und H. PITTSCH. "Prediction of local extinction and re-ignition effects in non-premixed turbulent combustion using a flamelet/progress variable approach". In: *Proceedings of the Combustion Institute*. Bd. 30. 2005, S. 793–800.
- [64] ISO/IEC 1539:1991. *Information technology – Programming languages – FORTRAN*. Norm. Genf: International Organization for Standardization, 1991.
- [65] J. JANICKA und A. SADIKI. "Large eddy simulation of turbulent combustion systems". In: *Proceedings of the Combustion Institute*. Bd. 30. 1. 2005, S. 537–547.
- [66] C. JIMÉNEZ, F. DUCROS, B. CUENOT und B. BÉDAT. "Subgrid scale variance and dissipation of a scalar field in large eddy simulations". In: *Physics of Fluids* 13,6 (2001), S. 1748–1754.
- [67] J. L. KINSEY. "Laser-induced fluorescence". In: *Annual Review of Physical Chemistry* 28 (1977), S. 349–372.
- [68] D. E. KNUTH. *The art of computer programming*. Reading, MA: Addison-Wesley, 2006.
- [69] W. KOBAN, J. D. KOCH, R. K. HANSON und C. SCHULZ. "Toluene LIF at elevated temperatures: Implications for fuel air ratio measurements". In: *Applied Physics B* 80 (2005), S. 147–150.
- [70] K. KÖNIG. »Hierarchische Implementierungsstrategien für reduzierte Reaktionsmechanismen basierend auf Intrinsischen Niedrigdimensionalen Mannigfaltigkeiten«. Diss. Universität Karlsruhe, 2008.
- [71] K. KÖNIG. »Untersuchung der Dynamik periodisch gestörter Vormischflammen«. Diplomarbeit. Universität Stuttgart, 2003.
- [72] R. KULKARNI, M. ZELHUBER und W. POLIFKE. "LES based investigation of auto-ignition in turbulent co-flow configurations". In: *Combustion Theory and Modelling* 17 (2013), S. 224–259.
- [73] J. KUNEŠ. *Dimensionless physical quantities in science and engineering*. London: Elsevier, 2012.
- [74] S. H. LAM und D. A. GOUSSIS. "Understanding complex chemical kinetics with computational singular perturbation". In: *Symposium (International) on Combustion*. Bd. 22. 1989, S. 931–941.
- [75] D. LEBIEDZ. "Computing minimal entropy production trajectories: An approach to model reduction in chemical kinetics". In: *Journal of Chemical Physics* 120.15 (2004), S. 6890–6897.

- [76] F. A. LINDEMANN, S. ARRHENIUS, I. LANGMUIR, N. R. DHAR, J. PERRIN und W. C. McC. LEWIS. "Discussion on the radiation theory of chemical action". In: *Transactions of the Faraday Society* 17 (1922), S. 598–606.
- [77] U. MAAS. »Mathematische Modellierung instationärer Verbrennungsprozesse unter Verwendung detaillierter Reaktionsmechanismen«. Diss. Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, 1988.
- [78] U. MAAS und V. BYKOV. "The extension of the reaction/diffusion manifold concept to systems with detailed transport models". In: *Proceedings of the Combustion Institute*. Bd. 33. 2011, S. 1253–1259.
- [79] U. MAAS, J. JANICKA, C. SCHULZ, A. DREIZLER und U. SPICHER. »Numerische Simulation und Validierung der Benzinselbstzündung«. In: *MTZ – Motortechnische Zeitschrift* 75.2 (2014).
- [80] U. MAAS und S. B. POPE. "Implementation of simplified chemical kinetics based on intrinsic low-dimensional manifolds". In: *Symposium (International) on Combustion*. Bd. 24. 1992, S. 103–112.
- [81] U. MAAS und S. B. POPE. "Simplifying chemical kinetics: Intrinsic low-dimensional manifolds in composition space". In: *Combustion and Flame* 88 (1992), S. 239–264.
- [82] U. MAAS, R. SCHIESSL, M.-S. BENZINGER, J. JANICKA, T. BREITENBERGER, C. SCHULZ, S. KAISER, M. SCHILD, A. DREIZLER, N. FUHRMAN, U. SPICHER, H. KUBACH und C. DAHNZ. "Numerical simulation and validation of fuel auto-ignition". In: *Proceedings Aachen Colloquium Automobile and Engine Technology*. Bd. 22. 2013, S. 1099–1144.
- [83] U. MAAS und J. WARNATZ. "Ignition processes in hydrogen/oxygen mixtures". In: *Combustion and Flame* 74 (1988), S. 53–69.
- [84] C. N. MARKIDES und E. MASTORAKOS. "An experimental study of hydrogen autoignition in a turbulent co-flow of heated air". In: *Proceedings of the Combustion Institute*. Bd. 30. 1. 2005, S. 883–891.
- [85] MATLAB. *version 8.5.0 (R2015a)*. Natick, MA: The MathWorks Inc., 2015.
- [86] M. MEHL, W. J. PITZ, C. K. WESTBROOK und H. J. CURRAN. "Kinetic modeling of gasoline surrogate components and mixtures under engine conditions". In: *Proceedings of the Combustion Institute*. Bd. 33. 2011, S. 193–200.
- [87] C. D. MEYER. *Matrix analysis and applied linear algebra*. Bd. 2. Siam, 2000.
- [88] J. NAFFÉ und U. MAAS. "A general algorithm for improving ILDMs". In: *Combustion Theory and Modelling* 6.4 (2002), S. 697–709.

- [89] A. NEAGOS, V. BYKOV und U. MAAS. "Adaptive hierarchical construction of Reaction Diffusion Manifolds for simplified chemical kinetics". In: *Proceedings of the Combustion Institute*. 2016.
- [90] A. NEAGOS, V. BYKOV und U. MAAS. "Investigation of perturbed premixed flame structure using REDIM model reduction concept". In: *Proc. 7th European Combustion Meeting*. 2015, P1–31.
- [91] A. NEAGOS, V. BYKOV und U. MAAS. "REDIM based reduced modeling of transient premixed combustion regimes". In: *Proc. 25th International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems*. 2015.
- [92] A. NEAGOS, V. BYKOV und U. MAAS. "Study of extinction limits of diluted hydrogen-air counter-flow diffusion flames with the REDIM method". In: *Combustion Science and Technology* 186.10–11 (2014), S. 1502–1516.
- [93] P.-D. NGUYEN, L. VERVISCH, V. SUBRAMANIAN und P. DOMINGO. "Multidimensional flamelet-generated manifolds for partially premixed combustion". In: *Combustion and Flame* 157.1 (2010), S. 43–61.
- [94] Y.-S. NIU, L. VERVISCH und P. D. TAO. "An optimization-based approach to detailed chemistry tabulation: Automated progress variable definition". In: *Combustion and Flame* 160.4 (2013), S. 776–785.
- [95] R. J. OSBORNE. "Controlled auto-ignition processes in the gasoline engine". Diss. University of Brighton, 2010.
- [96] N. PETERS. "Laminar diffusion flamelet models in non-premixed turbulent combustion". In: *Progress in Energy and Combustion Science* 10.3 (1984), S. 319–339.
- [97] N. PETERS. "Laminar flamelet concepts in turbulent combustion". In: *Symposium (International) on Combustion*. Bd. 21. 1988, S. 1231–1250.
- [98] N. PETERS. "Multiscale combustion and turbulence". In: *Proceedings of the Combustion Institute*. Bd. 32. 1. 2009, S. 1–25.
- [99] N. PETERS. *Turbulent combustion*. Cambridge: Cambridge university press, 2000.
- [100] N. PETERS und B. ROGG. *Reduced kinetic mechanisms for applications in combustion systems*. Lecture notes in physics: Monographs. Berlin: Springer, 1993.
- [101] L. R. PETZOLD. *Description of DASSL: A differential/algebraic system solver*. Techn. Ber. SAND-82-8637. Sandia National Laboratories, 1982.

- [102] C. D. PIERCE und P. MOIN. “Progress-variable approach for large eddy simulation of non-premixed turbulent combustion”. In: *Journal of Fluid Mechanics* 504 (2004), S. 73–97.
- [103] S. B. POPE. “Gibbs function continuation for the stable computation of chemical equilibrium”. In: *Combustion and Flame* 139.3 (2004), S. 222–226.
- [104] S. B. POPE. “Small scales, many species and the manifold challenges of turbulent combustion”. In: *Proceedings of the Combustion Institute*. Bd. 34. 2013, S. 1–31.
- [105] S. B. POPE. *Turbulent flows*. Cambridge University Press, 2000.
- [106] S. B. POPE und U. MAAS. “Simplifying chemical kinetics: Trajectory-generated low-dimensional manifolds”. In: *Mechanical and Aerospace Engineering Report: FDA* (1993), S. 93–11.
- [107] U. PRÜFERT, S. HARTL, F. HUNGER, D. MESSIG, M. EIERMANN und C. HASSE. “A constrained control approach for the automated choice of an optimal progress variable for chemistry tabulation”. In: *Flow, Turbulence and Combustion* 94.3 (2015), S. 593–617.
- [108] C. RUNGE. »Über empirische Funktionen und die Interpolation zwischen äquidistanten Ordinaten«. In: *Zeitschrift für Mathematik und Physik* 46 (1901), S. 224–243.
- [109] G. STEINHILBER. »Numerische Simulation turbulenter Verbrennungsprozesse mittels statistischer Verfahren und REDIM reduzierter Kinetik«. Diss. Karlsruher Institut für Technologie, 2015.
- [110] G. STEINHILBER und U. MAAS. “Reaction-diffusion manifolds for unconfined, lean premixed, piloted, turbulent methane/air systems”. In: *Proceedings of the Combustion Institute*. Bd. 34. 2013, S. 217–224.
- [111] P. STEPHAN und F. MAYINGER. *Thermodynamik, Band 2 Mehrstoffsysteme und chemische Reaktionen*. 15. Aufl. Berlin: Springer, 2010.
- [112] D. J. TORRES und M. F. TRUJILLO. “KIVA-4: An unstructured ALE code for compressible gas flow with sprays”. In: *Journal of Computational Physics* 219.2 (2006), S. 943–975.
- [113] T. TURÁNYI und A. S. TOMLIN. *Analysis of kinetic reaction mechanisms*. Berlin: Springer, 2014.
- [114] J. A. VAN OIJEN und L. P. H. DE GOEY. “Modelling of premixed laminar flames using flamelet-generated manifolds”. In: *Combustion Science and Technology* 161 (2000), S. 113–137.

- [115] D. VEYNANTE und L. VERVISCH. "Turbulent combustion modeling". In: *Progress in Energy and Combustion Science* 28.3 (2002), S. 193–266.
- [116] J. WARNATZ und C. HEGHES. "Survey of rate coefficients in the C/H/O system". In: *Combustion Chemistry*. Hrsg. von W. C. J. GARDINER. New York: Springer, 1984.
- [117] J. WARNATZ, U. MAAS und R. W. DIBBLE. *Verbrennung: Physikalisch-chemische Grundlagen, Modellierung und Simulation, Experimente, Schadstoffentstehung*. 3. aktualisierte und erw. Aufl. Berlin: Springer, 2001.
- [118] P. WENZEL, R. STEINER, C. KRÜGER, R. SCHIESSL, C. HOFRATH und U. MAAS. *3D-CFD simulation of DI-diesel combustion applying a progress variable approach accounting for detailed chemistry*. Techn. Ber. 2007-01-4137. SAE Technical Paper, 2007.
- [119] J. WOLFRUM. "Lasers in combustion: From basic theory to practical devices". In: *Symposium (International) on Combustion*. Bd. 27. 1998, S. 1–41.
- [120] R. W. WRANGHAM. *Catching fire: How cooking made us human*. Basic Books, 2009.
- [121] B. YANG und S. B. POPE. "Treating chemistry in combustion with detailed mechanisms – *In situ* adaptive tabulation in principal directions – Premixed combustion". In: *Combustion and Flame* 112 (1998), S. 85–112.
- [122] H. YSERENTANT. "Hierarchical bases". In: *Proceedings of the second international conference on Industrial and applied mathematics*. Bd. 2. ICIAM 91. Washington, D.C., USA: Society for Industrial und Applied Mathematics, 1992, S. 256–276.
- [123] C. ZENGER. "Sparse grids". In: *Parallel algorithms for partial differential equations: Proceedings of the sixth GAMM-seminar, Kiel, Germany*. Hrsg. von W. HACKBUSCH. Bd. 31. Notes on numerical fluid mechanics. Braunschweig: Vieweg, 1991, S. 241–251.