
Inhaltsverzeichnis

Teil I Turbulente Strömung und Verbrennung

1	Einleitung	3
1.1	Bemerkungen zur Verbrennungssimulation	5
1.1.1	Brutto-Reaktionen und Flame-Sheet-Modell	6
1.1.2	Eddy-Breakup- und Eddy-Dissipation-Modell	6
1.1.3	Chemisches Gleichgewicht	6
1.1.4	Tabellierungstechniken	7
1.2	Zu diesem Buch	9
2	Grundlagen der Verbrennung	11
2.1	Bilanzgleichungen reaktiver Strömungen	11
2.1.1	Wahl des Gleichungssystems	14
2.1.2	Vernachlässigung unbedeutender Terme	16
2.1.3	Kompressibilität	17
2.2	Thermodynamische Beziehung	19
2.3	Diffusiver Transport	20
2.4	Stoffwerte	23
2.4.1	Reine Stoffe	24
2.4.2	Gasgemische	24
2.5	Chemische Kinetik	25
2.5.1	Chemische Umsatzraten	25
2.5.2	Reaktionsmechanismen	30
3	Grundlagen turbulenter Strömungen	35
3.1	Ursachen und Auswirkungen der Turbulenz	35
3.1.1	Energiekaskade	36
3.1.2	Kleinste turbulente Strukturen	37
3.2	Zerlegung fluktuierender Größen	39
3.2.1	Reynolds-Zerlegung	39
3.2.2	Favre-Zerlegung	39

3.3	Mittelung fluktuierender Größen	40
3.3.1	Zeitliche Mittelung	40
3.3.2	Ensemble-Mittelung	41
3.4	Mittelung der Bilanzgleichungen	42
4	Grundlagen der PDF-Verfahren	43
4.1	Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion	44
4.1.1	Erwartungswerte und höhere Momente	47
4.1.2	Rand-PDF und bedingte PDF	49
4.1.3	Momentane PDF	51
4.1.4	Favre-gemittelte PDF	52
4.2	Massendichtefunktion	54
4.3	Lagrange'sche Formulierung	55
4.3.1	Konditionierte Lagrange-PDF	56
4.3.2	Momentane Lagrange-PDF	56
4.4	Diskrete Darstellung einer PDF/MDF	57
4.4.1	Diskrete PDF	57
4.4.2	Diskrete MDF	58
4.5	Intermittenz und PDF-Strukturen	59

Teil II Momentenverfahren

5	Erste Momente	65
5.1	Bilanzgleichungen erster Momente	65
5.2	Schließungsproblem für den chemischen Quellterm	67
6	Zweite Momente	71
6.1	Reynolds-Komponentenfluss	72
6.1.1	Direkte Modellierung	72
6.1.2	Transportgleichung	73
6.2	Molekulare Diffusion	75
6.3	Reynolds-Spannungen	75
6.3.1	Direkte Modellierung	76
6.3.2	Transportgleichung	78
6.4	Mittlerer Spannungstensor	79
6.5	Reynolds-Energiefluss	80
6.5.1	Direkte Modellierung	80
6.5.2	Transportgleichung	80
6.6	Molekulare Diffusion und turbulenter Transport	81
6.7	Mittlerer Energiefluss	82
6.8	Turbulenzmodellierung	82
6.8.1	Turbulente kinetische Energie	85
6.8.2	Dissipationsrate der turbulenten kinetischen Energie	86
6.9	Varianz der Temperatur	88

6.9.1	Direkte Modellierung	88
6.9.2	Transportgleichung	88
6.10	Varianz einer Energievariable	90
6.10.1	Modellierung und geschlossene Transportgleichung.....	91
6.10.2	Zusammenhang zwischen Temperatur- und Energievarianz	93
6.10.3	Wahl der Energievarianz-Variable	95
6.11	Varianzen und Kovarianzen der Komponenten.....	96
6.11.1	Direkte Modellierung	96
6.11.2	Transportgleichung	97
6.12	Summe der Komponentenvarianzen	99
6.13	Temperatur-Komponenten-Korrelationen	101
6.13.1	Direkte Modellierung	101
6.13.2	Transportgleichung	101
7	Gemittelte Transportgleichungen	103

Teil III Assumed-PDF-Verfahren

8	Mathematische Beschreibung einer assumed-PDF	107
8.1	Eindimensionale stetige Gleichverteilung	109
8.2	Einfache ein- und zweidimensionale Verteilungen	113
8.3	Verbund-PDF aus Delta-Funktionen	114
8.4	Gauß-PDF	114
8.4.1	Eindimensionale Gauß-PDF	115
8.4.2	Mehrdimensionale Gauß-PDF	117
8.5	Beta-PDF	118
8.5.1	Eindimensionale Beta-PDF	119
8.5.2	Mehrdimensionale Beta-PDF	122
8.5.3	Vereinfachte Massenanteil-Beta-PDF	122
8.5.4	Vereinfachte Komponentendichten-Beta-PDF	127
8.5.5	Vereinfachte Molanteil-Beta-PDF	128
8.6	Verbund-PDF aller Quelltermvariablen	128
8.6.1	Statistische Unabhängigkeit aller Variablen	129
8.6.2	Statistische Unabhängigkeit von Gruppen von Variablen	129
9	Statistisch optimale Verteilungen	133
9.1	Entropie einer Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion	133
9.1.1	PDF inerter Zufallsvariablen	137
9.1.2	PDF reagierender Zufallsvariablen	141

10	Berechnung mittlerer Quellterme	143
10.1	Geschwindigkeitskoeffizienten	143
10.1.1	Berechnungsmethoden	145
10.2	Komponentenproduktionsterm	147
10.3	Temperatur- und Energievarianz-Produktionsterm	150
10.4	Komponentenvarianz-Produktionsterm	151
10.5	Untersuchung des assumed-PDF-Ansatzes	153
10.5.1	Einfluss der Temperatur-PDF	153
10.5.2	Einfluss der Komponenten-PDF	155
10.5.3	Anwendungsbeispiel	159
10.6	Temperatur-Komponenten-Korrelationen	164
10.6.1	Modellierung der Korrelationskoeffizienten	165

Teil IV Transportgleichungs-PDF-Verfahren

11	Herleitung der PDF-Transportgleichung	171
11.1	Allgemeines Vorgehen	172
11.2	Geschwindigkeits-PDF	174
11.3	Thermochemische PDF	176
11.3.1	Kompressible Strömung	181
11.4	Verbund-PDF skalarer und vektorieller Größen	183
11.5	Verbund-MDF skalarer und vektorieller Größen	185
11.6	Zusammenhänge mit Gleichungen erster Momente	185
11.6.1	Transportgleichungen erster Momente	186
11.6.2	Transportgleichungen zweiter Momente	187
12	Modellierung ungeschlossener Terme	189
12.1	Konditionierte Beschleunigung	189
12.2	Turbulente Konvektion	190
12.3	Turbulente Mischung	191
12.3.1	Modellierung des turbulenten Mischungsterms	194
12.3.2	IEM-Modell	195
12.3.3	Curl-Modell	196
12.3.4	Testfall zu Mischungsmodellen	198
13	Lösung der PDF-Transportgleichung	201
13.1	Partikelverfahren	201
13.2	Operator-Splitting	202
13.3	Chemische Reaktionen	203
13.4	Euler-PDF-Verfahren	204
13.4.1	Transport im physikalischen Raum	206
13.4.2	Hybrid-Verfahren	208
13.5	Lagrange-PDF-Verfahren	209
13.5.1	Lagrange'sche Partikelverfahren	209

13.5.2 Stochastische Modellierung 210
 13.5.3 Thermochemische Lagrange-MDF 213
 13.5.4 Lagrange-MDF des Geschwindigkeitsvektors und
 thermochemischer Skalare 214
 13.5.5 Allgemeine Aspekte Lagrange'scher PDF-Verfahren 215

Teil V Numerische Lösungsverfahren

14 Homogene Reaktionssysteme 219
 14.1 Sonderfälle homogener Reaktionssysteme 220
 14.2 Physikalische Ursache steifer Gleichungssysteme 221
 14.3 Zeitskalen linearer Gleichungssysteme 222
 14.3.1 Allgemeines lineares Problem 223
 14.3.2 Prädiktionierung 224
 14.4 Zeitskalen nichtlinearer Gleichungssysteme 225
 14.5 Definition von Steifigkeit 226
 14.6 Eigenwerte von Verbrennungsgleichungssystemen 227
 14.7 Numerische Stabilität 229
 14.7.1 Modellgleichungen und Modellgleichungssysteme 229
 14.7.2 Definition numerischer Stabilität 231
 14.7.3 Stabilitätsanalysen 231
 14.7.4 Konvergenzvoraussetzungen 232
 14.8 Ein- und Mehrschrittverfahren 233
 14.8.1 Stabilität von Ein- und Mehrschrittverfahren 234
 14.8.2 Stabilitätseigenschaften ausgewählter Verfahren 236
 14.9 Zeitintegration des Verbrennungsgleichungssystems 239

15 Mehrdimensionale Verbrennungssimulationen 243
 15.1 Räumliche Diskretisierung 243
 15.1.1 Finite-Differenzen-Verfahren 244
 15.1.2 Finite-Volumen-Verfahren 244
 15.2 Zeitliche Diskretisierung 245
 15.2.1 Das Newton-Raphson-Verfahren 245
 15.2.2 Linearisierung 246
 15.3 Punkt-implizite Verfahren 247
 15.3.1 Punkt-implizites Euler-Verfahren 247
 15.3.2 Punkt-semi-implizites Euler-Verfahren 248
 15.4 Implizite Einzelschrittverfahren 249
 15.4.1 Implizites Euler-Verfahren 249
 15.4.2 Semi-implizites Euler-Verfahren 250
 15.5 Implizite Mehrschritt-Verfahren 250
 15.5.1 Implizite BDF-Verfahren 250
 15.5.2 Semi-implizite BDF-Verfahren 252
 15.6 Stabilisierung von Verbrennungssimulationen 252

- 15.6.1 Eigenwerte mit positiven Realteilen 253
- 15.6.2 Fehler bei stark nichtlinearen Prozessen 254
- 16 Verbrennungs-Jacobi-Matrizen 257**
 - 16.1 Analytische Quellterm-Jacobi-Matrix 257
 - 16.2 Numerische Quellterm-Jacobi-Matrix 258
 - 16.3 Vereinfachte Quellterm-Jacobi-Matrizen 260
 - 16.3.1 Untere Dreiecksmatrix 260
 - 16.3.2 Diagonalmatrizen 261
- 17 Konvergenzverhalten iterativer Verfahren 263**
 - 17.1 Grundlagen iterativer Verfahren 263
 - 17.1.1 Sternnotation 264
 - 17.1.2 Matrixnotation 265
 - 17.2 Fourier-Analyse 267
 - 17.2.1 Grundlagen der Fourier-Analyse 267
 - 17.2.2 Eindimensionale Fourier-Reihe 268
 - 17.2.3 Zweidimensionale Fourier-Reihe 270
 - 17.2.4 Verstärkungsfaktor und Dämpfungseigenschaften 271
 - 17.3 Wärmeleitgleichung 272
 - 17.3.1 Testfall und Modellgleichung 273
 - 17.3.2 Punkt-Jacobi-Verfahren 274
 - 17.3.3 Explizites Euler-Verfahren 279
 - 17.3.4 Punkt-Gauß-Seidel-Verfahren 280
 - 17.3.5 Linien-Gauß-Seidel-Verfahren 281
 - 17.4 Konvektions-Diffusionsgleichung 284
 - 17.4.1 Modellgleichung und Diskretisierung 285
 - 17.4.2 Punkt-Gauß-Seidel-Verfahren 286
 - 17.4.3 Linien-Gauß-Seidel-Verfahren 290

Teil VI Mehrgitterverfahren

- 18 Grundlagen der Mehrgittertechnik 293**
 - 18.1 Fehlerdämpfung 294
 - 18.1.1 Unterteilung der Fehlermoden 296
 - 18.1.2 Glättung hochfrequenter Fehlermoden 296
 - 18.1.3 Glättung niederfrequenter Fehlermoden 297
 - 18.1.4 Transfer von Fehlermoden 298
 - 18.2 Lineare Probleme 300
 - 18.2.1 Grobgitterkorrektur und Zweigitterverfahren 300
 - 18.2.2 Mehrgitterverfahren 303
 - 18.2.3 Mehrgitterzyklen 304
 - 18.2.4 Aufwand und Bewertung 306
 - 18.2.5 Testfall 307

18.3	Nichtlineare Probleme	309
18.3.1	FAS-Grobgitterkorrektur und FAS-Zweigiterverfahren	309
18.3.2	FAS-Mehrgitterverfahren	311
18.4	Grobgitterbildung	312
18.4.1	Voll-Vergrößerung	313
18.4.2	Semi-Vergrößerung	315
18.5	Transferoperatoren	317
18.5.1	Restriktion	317
18.5.2	Prolongation	319
18.6	Lokale Fourier-Analyse	320
18.6.1	Zusammenfallen von Fehlermoden	321
18.6.2	Zweigitteranalyse	322
18.7	Testfälle	327
19	Praktische Anwendungen	329
19.1	Überschallströmungen mit Verdichtungsstößen	331
19.1.1	Auf Charakteristiken basierende Transferoperatoren	332
19.1.2	Vereinfachte Aufwind-Transferoperatoren	335
19.1.3	Residuumsabhängige Restriktion	335
19.1.4	Dämpfung des restringierten Defekts	335
19.2	Nichtlineare Quellterme in Turbulenzmodellen	341
19.2.1	Low-Reynolds-Number- q - ω -Turbulenzmodell	341
19.3	Chemische Quellterme	346
19.3.1	Zeitschrittbeschränkung aus der Chemie	347
19.3.2	Differenzen zwischen dem Fein- und Grobgitterproblem	348
19.3.3	Fehler ist auf dem groben Gitter nicht darstellbar	350
19.3.4	Lokales Dämpfen des restringierten Defekts	352
19.3.5	Filterung und lokales Dämpfen des Defekts	356
Anhang		359
A.1	Reaktionsmechanismen	359
A.1.1	Wasserstoff-Luft-Verbrennung	359
A.1.2	Methan-Luft-Verbrennung	360
A.2	Herleitung von Transportgleichungen	362
A.2.1	Varianz der thermischen Energie	362
A.2.2	Summe der Massenanteilvarianzen	364
A.3	Quellterm-Jacobi-Matrizen	365
A.3.1	Laminare Verbrennung	365
A.3.2	Assumed PDF-Modellierung	368
Literaturverzeichnis		375
Index		389