

Modellbildung für die 3D-Simulation der Gemischbildung und Verbrennung in Ottomotoren mit Benzin-Direkteinspritzung

Zur Erlangung des akademischen Grades
Doktor der Ingenieurwissenschaften
der Fakultät für Maschinenbau
Universität Karlsruhe (TH)

genehmigte
Dissertation
von

Dipl.-Ing. Andreas Hermann
aus Ellwangen a. d. Jagst

Tag der mündlichen Prüfung: 5. August 2008

Hauptreferent:

Prof. Dr.-Ing. Ulrich Spicher

Korreferent:

Prof. Dr.-Ing. Martin Gabi

Vorwort

Die vorliegende Arbeit entstand während meiner Tätigkeit als Doktorand bei der Daimler AG im Ressort Forschung & Technologie in Stuttgart-Untertürkheim.

Mein besonderer Dank gebührt Herrn Prof. Dr.-Ing. Ulrich Spicher für sein Interesse an der Arbeit und die freundliche Übernahme des Hauptreferats. Ebenso bedanke ich mich herzlich bei Herrn Prof. Dr.-Ing. Martin Gabi für seine Bereitschaft zur Übernahme des Koreferats und bei Herrn Prof. Dr.-Ing. habil. Thomas Böhlke für die Übernahme des Prüfungsvorsitzes.

Herrn Dr.-Ing. Velji möchte ich meinen besonderen Dank für die Förderung, seine Unterstützung und die wissenschaftliche Betreuung der Arbeit aussprechen.

Mein ganz besonderer Dank richtet sich an Herrn Dr.-Ing. Christian Krüger und Herrn Dr. rer. nat. Frank Otto, die mit wertvollen Anregungen wesentlich zum Gelingen der Arbeit beigetragen haben. Allen Kollegen und ehemaligen Mitarbeiter des Teams Verbrennungsanalyse danke ich für die vielfältige Unterstützung und die gute Zusammenarbeit.

Andreas Hermann

Ellwangen, im August 2008

Eigenständigkeitserklärung

Hiermit erkläre ich, dass ich die vorliegende Arbeit selbständig angefertigt und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt sowie die wörtlich und inhaltlich übernommenen Stellen als solche kenntlich gemacht und die Satzung der Universität Karlsruhe (TH) zur Sicherung guter wissenschaftlicher Praxis in der jeweils gültigen Fassung beachtet habe.

Ellwangen, den 5. August 2008

Andreas Hermann

Kurzfassung

Die Senkung des Kraftstoffverbrauchs und der Schadstoffemissionen sind die zentralen technologischen Schwerpunkte bei der ottomotorischen Brennverfahrensentwicklung. Ein richtungweisendes Konzept zur Erfüllung der ambitionierten CO₂-Emissionsziele stellt die Benzin-Direkteinspritzung mit strahlgeführtem Brennverfahren und nach außen öffnender Piezo-A-Düse dar. Aufgrund der Komplexität dieses neuen Brennverfahrens, die nicht zuletzt in der Gemischbildung begründet ist, sowie den immer kürzer werdenden Entwicklungszeiten müssen zwangsweise vorhersagefähige und recheneffiziente 3D-Simulationsmethoden zur Analyse und Vorauswahl von motorischen Parametern in den Entwicklungsprozess eingebunden werden.

In der vorliegenden Arbeit wird ein neues Modellierungskonzept präsentiert, welches eine durchgängige 3D-Berechnung, beginnend beim Ladungswechsel über die Düseninnenströmung und Gemischbildung bis hin zur Verbrennung, von Ottomotoren mit strahlgeführtem Brennverfahren und Piezo-A-Düse erlaubt. Um die von der Düseninnenströmung sensitive Strahlausbreitung numerisch abzubilden, wurde ein Strahlmodell entwickelt, dessen tragende Säulen die Kopplung aus quasi-stationärer Düseninnenströmungs- und transients Gemischbildungsberechnung, der turbulenz-induzierte Primärzerfall und die turbulente Dispersion sind. Den Einfluss der realen Kraftstoffzusammensetzung auf die Verdampfung wird in statistischer Form durch ein Modell auf Basis der kontinuierlichen Thermodynamik berücksichtigt. Den numerisch kritischen Diskretisierungsgesichtspunkten von Raum und Statistik des Lagrange'schen Strahlmodells wird durch ein hochauflösendes strahladaptives Rechengitter und angepasster Partikelanzahl Rechnung getragen. Für die Beschreibung der teilweise und vollkommen vorgemischten Verbrennung bei Teil- bzw. Vollast wird ein 7-Spezies-PDF-Flammenfaltungsmodell vorgestellt, welches ein Modell für die turbulente Flammenfrontausbreitung der Vormischverbrennung mit einem „Flamelet“-Modell für die turbulente Diffusionsverbrennung koppelt.

Die Modellvalidierung wird nach physikalischen Einzelprozessen untergliedert. In Abgleich mit optischer Strahldiagnostik in einer Hochdruckkammer wird am Beispiel von zwei Piezo-A-Düsen gezeigt, dass mit dem an die Düseninnenströmung gekoppelten Strahlmodell die unterschiedliche Strahlausbreitung und Randwirbelbildung aufgrund kleinster geometrischer Unterschiede der Düseninnengeometrie in der Simulation abgebildet wird. Die Validierung des Mehrkomponentenverdampfungsmodells zeigt gegenüber dem Einzeltropfenexperiment eine quantitativ gute Übereinstimmung. Auch unter virtuellen motorischen Bedingungen spiegelt sich die plausible Abbildung der Volatilität des Kraftstoffes wider. Abschließend wird das Gesamtmodell an einem Einzylinderaggregat mit Benzin-Direkteinspritzung und strahlgeführtem Brennverfahren mit Piezo-A-Düse an vier Teillastbetriebspunkten mit Schichtladung validiert. Die Güte und Qualität des erzielten Simulationsergebnisses kann im Vergleich zu den zugrunde liegenden Indizierdaten als ausgesprochen gut bewertet werden. Die für ottomotorische Brennverfahren charakteristischen Kenngrößen, wie Lage und Betrag des Druckmaximums, Lage des Verbrennungsschwerpunkts und integrale chemische Energieumsetzung werden quantitativ richtig abgebildet.

Inhaltsverzeichnis

Nomenklatur	iii
Abbildungsverzeichnis	xiv
Tabellenverzeichnis	xv
1 Einleitung	1
1.1 Motivation	1
1.2 Problemstellung und Zielsetzung	3
1.3 Aufbau der Arbeit	4
2 Beschreibung von turbulenten, reaktiven Zweiphasenströmungen	5
2.1 Klassifizierung des innermotorischen Strömungsfeldes	5
2.2 Eigenschaften von turbulenten Strömungen	6
2.3 Mathematische Beschreibung der Gasphase	6
2.3.1 Mittelung der Strömungsvariablen	7
2.3.2 Gemittelte Erhaltungsgleichungen der Gasphase	7
2.3.3 Schließungsansatz für turbulente Gasströmungen	9
2.4 Mathematische Beschreibung der Flüssigphase	10
3 Phänomenologische und numerische Betrachtung des Einspritzstrahls	15
3.1 Phänomenologie des Einspritzstrahls	15
3.2 Numerische Gesichtspunkte zur Modellierung von Einspritzprozessen	17
3.2.1 Räumliche Diskretisierung und Netztopologie	17
3.2.2 Statistische Konvergenz	21
3.2.3 Vorgehensweise bei der 3D-Simulation der Gemischbildung	24
4 Strahldynamische Mechanismen der Gemischbildung	25
4.1 Strahlaufbruch und Tropfenzerfall	25
4.1.1 Mechanismen des Primärzerfalls	26
4.1.2 Modelle für den Primärzerfall	28
4.1.3 Mechanismen des Sekundärzerfalls	30
4.1.4 Modelle für den Sekundärzerfall	32
4.2 Tropfenkollision und Tropfenkoaleszenz	34
4.3 Bewegungsgleichungen des Tropfens	35
4.4 Turbulente Dispersion	37
4.4.1 Klassifizierung der turbulenten Dispersionsregimes	37
4.4.2 Konventionelle turbulente Dispersionsmodelle	39
4.5 Modellbildung für die Strahldynamik bei A-Düsen	40

4.5.1	Kopplung von Düseninnenströmung und Gemischbildung	40
4.5.2	Turbulenter Primärzerfall	42
4.5.3	Modellierung der turbulenten Dispersion	47
4.5.4	Schließung des Strahlmodells für A-Düsen	50
5	Verdampfungsmechanismen der Gemischbildung	51
5.1	Mechanismen der Tropfenverdampfung	51
5.2	Konventionelle Tropfenverdampfungsmodelle	53
5.3	Modellbildung für die Verdampfung von Mehrkomponentenkraftstoffen	54
5.3.1	Modellierung der Kraftstoffzusammensetzung	54
5.3.2	Beschreibung der Gasphase in der Tropfenumgebung	55
5.3.3	Gleichgewichtsbeziehungen an der Phasengrenze	58
5.3.4	Beschreibung des Tropfeninneren	59
5.3.5	Transport der Kraftstoffzusammensetzung in der Gasphase	60
5.4	Verdampfung von überhitzten Flüssigkeiten	62
5.4.1	Mechanismen bei überhitzter Einspritzung	62
5.4.2	Modellierung der überhitzten Einspritzung	63
6	Ottomotorische Verbrennung	65
6.1	Charakterisierung der ottomotorischen Verbrennung	66
6.2	Klassifizierung der motorischen Verbrennungsregimes	67
6.3	Modellierung der Verbrennung	68
6.3.1	Vorgemischte Verbrennung	69
6.3.2	Diffusionsverbrennung	71
6.3.3	Teilweise vorgemischte Verbrennung	75
7	Validierung	83
7.1	Validierung des Strahldynamikmodells	83
7.1.1	Methodische Vorgehensweise und Randbedingungen	83
7.1.2	Düseninnenströmung als Randbedingung der Gemischbildung	85
7.1.3	Strahlausbreitung und Randwirbelbildung	88
7.2	Validierung des Mehrkomponentenverdampfungsmodells	91
7.2.1	Validierung am Einzeltropfen	91
7.2.2	Numerische Modellverifikation am Benzin-Einzeltropfen	93
7.2.3	Numerische Analyse der Verdampfung des Einspritzstrahls	94
7.3	Validierung des Gesamtmodells am Motor	96
7.3.1	Betriebspunkte und Randbedingungen	96
7.3.2	Rechenetzstrategie	97
7.3.3	Modellauswahl und Modellparameter	98
7.3.4	Validierungsergebnisse	102
8	Zusammenfassung und Ausblick	111
8.1	Zusammenfassung	111
8.2	Ausblick	113
	Literaturverzeichnis	115
	Anhang	127

Nomenklatur

Lateinische Formelzeichen

Symbol	Einheit	Bezeichnung
a	[m/s ²]	Beschleunigung
b	[m;-;-]	Tropfenabstand; Stoßparameter; Regressvariable
b_i	[g/kWh]	innerer (indizierter) spezifischer Kraftstoffverbrauch
c	[-; kmol/m ³]	Flammenfortschrittsvariable; molare Dichte
c_p	[J/(kgK)]	spezifische Wärmekapazität bei konstantem Druck
c_v	[J/(kgK)]	spezifische Wärmekapazität bei konstantem Volumen
c_w	[-]	Widerstandsbeiwert
$c_{w,def}$	[-]	korrigierter Widerstandsbeiwert für deformierte Tropfen
$c_{w,Verd}$	[-]	korrigierter Widerstandsbeiwert für verdampfende Tropfen
$c_{w,F}$	[-]	Formwiderstandsbeiwert
$c_{w,Kugel}$	[-]	Widerstandsbeiwert einer Kugel
d	[m]	Durchmesser; Flammendicke
f	[div.]	Funktion
\dot{f}	[1/s]	Quellterm für diskontinuierliche Tropfenprozesse
h	[J/kg;m]	spezifische Enthalpie; Nadelhub
h_f	[J/kg]	Bildungsenthalpie
i_{th}	[J/kg]	spezifische thermische innere Energie
i,j,k	[-]	Gitter-Index; kartesische Koordinatenrichtungen
k	[m ² /s ²]	(spezifische) turbulente kinetische Energie
l	[m]	Längenskala
$l = 1/\sqrt{2}\pi\sigma^2n$	[m]	mittlere freie Weglänge
m	[kg]	Masse
n	[1/m ³ ;-]	Anzahldichte; Konstante der turb. Brenngeschwindigkeit
\vec{n}	[-]	Flächennormalenvektor
p	[N/m ²]	Druck
p_{mi}	[N/m ²]	indizierter Mitteldruck
\dot{q}_{konv}	[J/(m ² s)]	konvektiver Wärmestrom
\dot{q}_{zu}	[J/(m ² s)]	zugeführter Wärmestrom
r	[m]	Radius
r_{st}	[m]	stabiler Tropfenradius
s	[m/s]	Brenngeschwindigkeit
t	[s]	Zeit
$\vec{u} = (u, v, w)$	[m/s]	Geschwindigkeitsvektor in kartesischen Koordinaten
$\vec{x} = (x, y, z)$	[m]	Ortsvektor in kartesischen Koordinaten
y	[-;m]	Massenanteil; Amplitude der Tropfenschwingung

Symbol	Einheit	Bezeichnung
A	[m ²]	Fläche
A_1, A_2	[div.]	Konstanten des Sutherland-Gesetzes
A_{Fl}	[-]	Konstante der turbulenten Brenngeschwindigkeit
B	[-]	vollständige β -Funktion
B_0, B_1, B_2	[-]	Konstanten des Zerfallsmodells
B_{5-50}, B_{50-90}	[°KW]	Brenndauer zwischen 5 – 50% bzw. 50 – 90% Energieumsatz
C_a	[-]	Kontraktionsbeiwert
C_d	[-]	Durchflussbeiwert
C_v	[-]	Geschwindigkeitsbeiwert
C_{Exp}	[1/K]	Expansionskoeffizient
C_W, C_Z	[-]	kraftstoffspezifische Konstanten
$C_{\epsilon_1}, C_{\epsilon_2}, C_{\epsilon_3}, C_\mu$	[-]	Konstanten des k - ϵ -Turbulenzmodells
D_1, D_2	[-]	Zerfallskonstanten nach Nicholls [91]
D	[m ² /s;-]	Diffusionskoeffizient; Modellkonstante
$D_{\vec{x}\vec{x}}, D_{\vec{x}\vec{v}}, D_{\vec{v}\vec{v}}$	[-]	Diffusionskoeffizient im Orts- und/oder Geschwindigkeitsraum
$D_a = 1/\tau_a$	[1/s]	inverse aerodynamische Relaxationszeit
$E_{kin}, E_{rot}, E_\sigma$	[J]	kinetische Energie; Rotations-/Oberflächenspannungsenergie
E_{12}	[-]	Kollisionswirksamkeit
E_{Kool}	[-]	Koaleszenzeffektivität
E_O	[-]	Eötvös-Zahl
F	[div.]	kummulative Verteilungsfunktion
\vec{F}	[N]	Kraft
\vec{F}_D	[N]	Druckkraft
\vec{F}_m	[N]	Massenkraft
\dot{F}^s	[N/m ³]	Strahlquellterm in der Impulserhaltung
$Fr = v^2/lg$	[-]	Froude-Zahl
G	[1/s]	Produktion der Flammenfaltung durch Turbulenz
H_U	[J/kg]	unterer Heizwert
$\vec{I} = (I_x, I_y, I_z)$	[kgm/s]	Impulsvektor in kartesischen Koordinaten (x, y, z)
$\mathbf{I} = (\vec{e}_x, \vec{e}_y, \vec{e}_z)$	[-]	Einheitsmatrix
\vec{J}	[J/s]	Wärmestromdichte
K	[m ²]	Konstante des aerodynamischen Strahlaufbruchsmodells
K_c, K_ϵ	[-]	Konstanten des Zerfallsmodells nach Huh et al. [68]
K_F, K_k, K_d	[-]	Konstanten des TAB-Zerfallsmodells
K_W	[-]	Koeffizient für den Wandwärmeübergang nach Woschni [167]
Kn	[-]	Knudsen-Zahl
L	[m]	(makroskopische) Länge
$L_{st} = (y_L/y_K)_{st}$	[-]	stöchiometrische Luftzahl
Le	[-]	Lewis-Zahl
M	[kg/kmol]	Molmasse
M_M	[kg/kmol]	mittlere Molmasse des Gemisches
N	[-]	(Partikel-) Anzahl
N_K	[1/m ³]	Keimzahl
\dot{N}	[kmol/(m ² s)]	Molenstrom bezogen auf die Tropfenoberfläche
Nu	[-]	Nusselt-Zahl
Oh	[-]	Ohnesorge-Zahl

Symbol	Einheit	Bezeichnung
P	[-]	normierte β -Funktion; Parachor
Pr	[-]	Prandtl-Zahl
Pr_k, Pr_ϵ	[-]	Prandtl-Zahlen für die turb. kin. Energie k und die Dissipation ϵ
\dot{Q}^c	[N/(m ² s)]	chemischer Quellterm in der Energieerhaltung
\dot{Q}^s	[N/(m ² s)]	Strahlquellterm in der Energieerhaltung
\dot{Q}^W	[N/(m ² s)]	Wandwärmequellterm in der Energieerhaltung
R	[m;-]	(Kavitations-) Blasenradius; Korrelationsfunktion
R	[1/s]	Vernichtung der Flammenfaltung durch den Flammenfortschritt
$R = \Re/M$	[J/(kgK)]	spezifische Gaskonstante
Re	[-]	Reynoldszahl
Sc	[-]	Schmidt-Zahl
Sh	[-]	Sherwood-Zahl
St	[-]	Stokes-Zahl
T	[K;-]	Temperatur; Taylor-Zahl
V	[m ³]	Volumen
W	[N]	Widerstandskraft
We	[-]	Weber-Zahl
\dot{W}^s	[N/(m ² s)]	Strahlquellterm in den Turbulenzgleichungen
X	[-]	Zufallsvariable im Intervall [0, 1]
Y	[-]	Molenbruch
Z	[-]	Mischungsbruch
Z_{st}	[-]	stöchiometrischer Mischungsbruch

Griechische Formelzeichen

Symbol	Einheit	Bezeichnung
α	[°;-;-]	Kurbelwinkel; Volumenanteil; Formparameter
α	[W/(m ² K)]	Wärmeübergangskoeffizient
β	[-]	Formparameter
χ	[1/s]	skalare Dissipationsrate
δ	[m]	Dicke der Reaktionszone
δ_{ij}	[-]	Kronecker-Delta ($\delta_{ij} = 1$ für $i = j$ und $\delta_{ij} = 0$ für $i \neq j$)
ϵ	[m ² /s ³]	turbulente Dissipation
γ	[-]	Formparameter
η	[-;m]	Wirkungsgrad; Wellenamplitude
$\kappa = c_p/c_v$	[-]	Isentropenexponent
$\lambda = \frac{(y_L/y_K)}{L_{st}}$	[-]	Verbrennungsluftverhältnis oder Luftzahl
λ	[W/(mK)]	Wärmeleitfähigkeit
λ_k	[m]	Weglänge zwischen zwei Tropfenkollisionen
μ_i	[J/kg]	chemisches Potential (partielle molare Gibbs-Energie)
μ	[kg/(ms)]	dynamische Viskosität
ν	[m ² /s]	kinematische Viskosität
ν_{12}	[1/s]	Stoßfrequenz

Symbol	Einheit	Bezeichnung
π	[-]	Ludolph'sche Zahl ($\pi = 3.1415927$)
ρ	[kg/m ³]	Dichte
ρ^c	[kg/(m ³ s)]	chemischer Quellterm in der Spezieserhaltungsgleichung
ρ^s	[kg/(m ³ s)]	Strahlquellterm in der Spezies- bzw. Massenerhaltungsgleichung
θ	[°;kg/kmol]	Strahlkegelwinkel; mittlere Molmasse
σ	[N/m ² ;div.]	Newton'scher Spannungstensor; Standardabweichung
σ^2	[div.]	Varianz
σ_{xx}^2	[m ²]	Varianz im Ortsraum
σ_{xv}^2	[m ² /s]	Kovarianz im Orts- und Geschwindigkeitsraum
σ_{uu}^2	[m ² /s ²]	Varianz im Geschwindigkeitsraum
σ_{Fl}	[N/m ²]	Oberflächenspannung
τ	[N/m ²]	Reynolds-Spannungstensor
τ	[s]	Zeitskala
τ_a	[s]	aerodynamische Relaxationszeit
τ_{diff}	[s]	Zeitskala der Diffusion
τ_k	[s]	Zeit zwischen zwei Tropfenkollisionen
τ_{konv}	[s]	Zeitskala der Konvektion
τ_{korr}	[s]	turbulente Korrelationszeit
τ_{verd}	[s]	Zeitskala der Verdampfung
τ_B	[s]	Zeitskala für den Tropfenzerfall
ψ	[-;kg ² /kmol ²]	Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion; 2. Moment einer Verteilungsfunktion
Δh_v	[J/(mol s)]	Verdampfungsenthalpie
$\Delta x, \Delta y$	[m;m]	Kantenlänge einer Rechenzelle
Δs_v	[J/kmolK]	Verdampfungsentropie
$\Delta \theta$	[°]	Dispersionswinkel
Γ	[-]	Γ -Funktion $\Gamma(x) = \int_0^\infty e^{-t} t^{x-1} dt$
Φ	[-;div.]	Äquivalenzverhältnis; Strömungsvariable
Λ	[m]	Wellenlänge
Ξ, Ξ_{GG}	[-]	Flammenfaltungsfaktor (im Gleichgewicht)
\mathcal{M}	[div.]	Moment einer Verteilungsfunktion
Ω	[1/s]	Wachstumsrate
$\mathcal{R} = 8.3143$	[J/molK]	universelle Gaskonstante

Indizes

Indize	Bedeutung
a	aerodynamisch
atm	atmosphärisch
b	verbrannter Zustand
ch	chemisch
eff	effektiv
geo	geometrisch
i,j,k	Zählindex in Koordinatenrichtung

Indize	Bedeutung
k	turbulente kinetische Energie
kin	kinetisch
krit	kritisch
l	laminar
max, min	Maximum, Minimum
n	normal
num	numerisch
opt	Optimum
ref	Referenzzustand
rel	relativ
s	Strahl
t	turbulent
y	Wandabstand
u	unverbrannter Zustand
A	Aufbruch
ASB	Ansteuerbeginn
B	Bernoulli, (Kavitations-) Blase
D	Kraftstoffdampf
E	Einspritzung
Exp	Experiment
F	Flüssigkeitsfilm
Fl	Flüssig
G	Gas
Ges	Gesamt
H	Hub
HD	Hochdruckzyklus
I	Instabilität
K	Kolmogorov'sche Größenskala, Kavitation, Kraftstoff
Koal	Koaleszenz
Koll	Kollision
L	Luft, Ligament
N	Nadel
O	Tropfenoberfläche
T	Temperatur
Tr	Tropfen
Verd	Verdampfung
W	Wand
Z	Rechenzelle
α, β	Ortsraum \vec{x} , Geschwindigkeitsraum \vec{v}
ϕ	Zustand im Grenzwert (Fettwert)
0	Zeitpunkt zu Beginn eines Zeitschrittes, Zustand am Düsenaustritt
12	binär
32	Sauter-gemittelt
5	Messwert in 5 mm axialer Entfernung vom Injektor
∞	Umgebungszustand

Symbole und Operatoren

Symbol	Bedeutung
Df/Dt	Differential-Operator ($\frac{Df}{Dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \vec{x}}(f\vec{u})$)
∂	Partielle Ableitung
∇	Nabla-Operator ($\nabla = [\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}]$)
Δ	Laplace-Operator ($\Delta = [\frac{\partial^2}{\partial x^2}, \frac{\partial^2}{\partial y^2}, \frac{\partial^2}{\partial z^2}]$)
$ (\cdot) $	Betrag eines Vektors
(\cdot)	erste zeitliche Ableitung
$(\cdot)''$	zweite zeitliche Ableitung
(\cdot)	Favre-gemittelte Größe
(\cdot)	gemittelte Größe
$(\cdot)', (\cdot)''$	fluktuierende Größe
$(\cdot)^*$	charakteristische Größe (Referenzgröße)
$(\cdot)^T$	Transponierung

Abkürzungen

Abkürzung	Bedeutung
AGR	A bgas r ückführung
ACEA	Verband der europäischen Automobilhersteller (franz. „ A ssociation des C onstructeurs E uropéens D' Automobiles“)
AIAA	engl. „ A merican I nstitute of A er n autics and A stronauts“
ASME	engl. „ A merican S ociety of M echanical E ngineering“
BP	B etriebspunkt
CFD	numerische Strömungsmechanik (engl. C omputational F luid D ynamics)
CFL	C ourant- F riedrichs- L ewy
C_nH_m	Kohlenwasserstoff mit n Kohlenstoff- und m Wasserstoffatomen
CO	chemische Bezeichnung für Kohlenmonoxid
CO ₂	chemische Bezeichnung für Kohlendioxid
DDB	engl. „ D roplet D eformation and B reakup“
DDM	diskretes Tropfenmodell (engl. „ D iscrete D roplet M odel“)
DE	D irekteinspritzung
DNS	D irekte N umerische S imulation
DVA	D ruckverlaufs a nalyse
EBU	Wirbelzerfallsmodell (engl. „ E ddy B reakup“)
ESB	E inspritz b eginn
EU	E uropäische U nion
H ₂	chemische Bezeichnung für das Wasserstoff-Molekül
H ₂ O	chemische Bezeichnung für Wasser
HC	chemische Bezeichnung für unverbrannte Kohlenwasserstoffe
HCCI	H omogeneous C harge C ompression I gnition
$k - \epsilon$	(Turbulentes) Kinetisches Energie/Dissipations-Modell

Abkürzung	Bedeutung
ICAS	I nteractive C ross- S ection A veraged S pray
KW	K urbel w inkel
LI(E)F	L aser i nduzierte (E xciplex) F luoreszenz
LES	Grobstruktursimulation (engl. „ L arge E ddy S imulation“)
LHF	lokale homogene Strömung (engl. „ L ocally H omogeneous F low“)
LOT	O berer T otpunkt beim L adungswechsel
MIE	Streuung elektromagnetischer Wellen an sphärischen Objekten, benannt nach dem deutschen Physiker Gustav Mie
NEFZ	N euer E uropäischer F ahrzyklus
NS	N avier- S tokes
N ₂	chemische Bezeichnung für das Stickstoff-Molekül
NO _x	Sammelbegriff für die Stickoxide NO und NO ₂ (im Sinne des Gesetzgebers)
O ₂	chemische Bezeichnung für das Sauerstoff-Molekül
OT	O berer T otpunkt
PDA	P hasen D oppler A nemometrie
PDF	Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (engl. „ P robability D ensity F unction“)
PIV	P article I mage V elocimetry
RANS	Reynolds-gemittelte Navier-Stokes (engl. „ R eynolds- a veraged N avier- S tokes“)
ROZ	R esearch O ktanzahl
RZV	R aum z ünd v erbrennung (engl. „ C ontrolled A uto- I gnition“, CAI)
SAE	S ociety of A utomotive E ngineers
SF	Separierte Strömung (engl. „ S eperated F low“)
(E)TAB	(E nhanced) T aylor A nalogy B reakup
UBA	U mwelt b undesamt
UT	U nterer T otpunkt
(S)ULEV	engl. „(S uper) U ltra L ow E mission V ehicle“
VDI	V erein D eutscher I ngenieur e
ZOT	O berer T otpunkt bei Z ündung
ZZP	Z ündzeitpunkt
1D	1 -dimensional
2D	2 -dimensional
3D	3 -dimensional

Abbildungsverzeichnis

1.1	a) Schadstoffgrenzwerte für Pkw-Ottomotoren in Europa (NEFZ) und den USA [41]. b) CO ₂ -Grenzwerte für den Fahrzeugflottenverbrauch nach ACEA [2] und der EU [28].	1
1.2	Strahlgeführtes Brennverfahren mit zentraler Injektor- und Zündkerzenlage [6].	3
1.3	Schnittdarstellung einer Piezo-A-Düse mit charakteristischen Kenngrößen.	3
2.1	Das Tropfenensemble wird durch eine statistische Verteilung beschrieben und durch stochastische Partikel diskretisiert.	13
3.1	Strahlausbreitung bei einer A-Düse nach $t_{ASB} = 0.8 \text{ ms}$ unter Hochdruckbedingungen $p_K = 6 \text{ bar}$: Geschwindigkeitsfeld der Gasphase hinterlegt mit Massenanteil der Flüssigphase (links) und statische Druckverteilung (rechts) im Vertikalschnitt (x - z -Ebene).	16
3.2	Durch Auflösung des Düsenaustritts wird die überschätzte Relativgeschwindigkeit grober Gitter vermieden.	17
3.3	Strahladaptives Rechenetz mit Düsenaustrittsauflösung für einen vereinfachten ottomotorischen Brennraum: a) 3D Rechenetz, b) Rotationssymmetrisches 0.5° Sektorrechenetz (siehe Tab. 3.2, Nr. 2), c) Strahladaptierung und Auflösung des Düsenaustrittsbereichs.	18
3.4	Einfluss der Feinheit und Topologie des Rechengitters auf a) die turbulente kinetische Energie \tilde{k} in einem Schnitt normal zur Strahlmittellinie in 1 mm Entfernung vom Düsenaustritt und b) den Dispersionswinkel $\Delta\theta_5$ des Einspritzstrahls bei $t = 0.6 \text{ ms}$ n.ASB.	20
3.5	Einfluss der Feinheit und Topologie des Rechenetzes auf die axiale (oben) und radiale (unten) Penetration des Einspritzstrahls einer A-Düse.	21
3.6	Gegenüberstellung von Diagnostik und 3D-Simulation für das adaptive Gitter mit $\Delta x_0 = 10 \mu\text{m}$ (rechts: 3D-Partikeldarstellung und 2D-Flüssigkeitsmassenbruch).	21
3.7	a) Lagrange-Ansatz: Bei Netzverfeinerung nimmt die Anzahl der Partikel pro Zelle ab und der Diskretisierungsgrad der Verteilungsfunktion ψ verringert sich. b) Euler-Ansatz: Die Diskretisierung der Verteilungsfunktion ψ ist unabhängig von der Netzauflösung.	22
3.8	Einfluss der Netzauflösung (grob: $\Delta x_0 = 100 \mu\text{m}$, fein: $\Delta x_0 = 10 \mu\text{m}$) und der Gesamtpartikelanzahl N auf die mittlere Partikelanzahl \bar{N}_Z pro Rechenzelle für den Einspritzstrahl einer A-Düse bei Ansteuerende ($t = 0.7 \text{ ms}$ n.ASB.).	23
4.1	Klassifizierung der Zerfallsbereiche nach Hiroyasu et al. [63, 64] und Haenlein [52].	26

4.2	Modellvorstellungen über den Primärzerfall: a) „Blob“-Methode nach Reitz und Diwakar [119], b) Tropfengrößenspektrum, c) aerodynamisch-induzierter Primäraufbruch nach Dombrowski und Johns [35] und d) turbulenter Zerfall nach Wu et al. [168].	28
4.3	Aerodynamische Zerfallsmechanismen nach Pilch und Erdman [103]	31
4.4	Konkurrierende Instabilitäten im Katastrophen-Zerfallsregime nach [125].	31
4.5	Kollisionsbereiche für binäre Tropfenkollisionen nach Jiang et al. [71].	34
4.6	Turbulente Dispersionsregimes für a) $St \gg 1$, b) $St \approx 1$ und c) $St \ll 1$	38
4.7	Wechselwirkung zwischen Tropfen und Gas nach Elghobashi [40].	38
4.8	Kopplung von quasi-stationärer Düseninnenströmungsberechnung und transienter Gemischbildungssimulation.	41
4.9	Impulsvektor (links) und Geschwindigkeitsprofil (rechts) am Düsenaustritt.	42
4.10	Vorstellung über den turbulenten Strahlaufbruch.	43
4.11	Die turbulenten Längenskalen am Düsenaustritt werden durch Gewichtung mit dem Massenstrom in eine turbulente Längenskalenverteilung transformiert.	44
4.12	Einspritzstrahlberechnung für eine A-Düse auf einem düsenauflösenden Gitter: a) ohne Dispersionsmodell und b) unphysikalisches „Zerplatzen“ des Strahls mit dem Modell von O’Rourke [96] (Partikeldarstellung: links 3D, rechts 2D-Schnitt).	47
5.1	Prinzipbild der Tropfenverdampfung.	52
5.2	Siedelinie für reales Benzin [135], Benzin als einkomponentiger Modellkraftstoff und n-Heptan [7] unter Atmosphärendruck.	52
5.3	Kontinuierliche mono- und bimodale Verteilungsfunktion für Benzin	55
5.4	Vergleich a) der Siedetemperatur $T_S(M)$ nach Gl. (5.23) und b) des Dampfdrucks $p_D(T)$ nach Gl. (5.22) für die Gruppe der n-Alkane mit Werten von Vargaftik [152].	59
5.5	Thermodynamische Zustandsänderung bei überhitzter Einspritzung im p - h -Diagramm nach Oza et al. [98].	62
5.6	Modellierung des Übergangs von unter- zur überkritischen Verdampfung.	64
6.1	Klassifizierung der (motorischen) Verbrennungsszenarien nach Otto [97].	65
6.2	a) OH-LIF Aufnahme einer turbulenten Flamme: laminare (—) und mittlere turbulente Flammenfront (— · —); b) Gemittelte turbulente Flamme einer RANS-Simulation.	66
6.3	Teilweise vorgemischte Verbrennung nach Peters [102]: Turbulente Flammfrontausbreitung und Diffusionsverbrennung.	66
6.4	Regimes der vorgemischten Verbrennung nach Peters [102].	67
6.5	Laminare Brenngeschwindigkeit für Iso-Oktan bei $p = 1bar$, $T_u = 298K$ und $\Phi = 1$	70
6.6	Exemplarischer Vergleich der tatsächlichen Gemischverteilung mit dem Ensemble-Mittelwert der RANS-Simulation nach Steiner [139].	72
6.7	Mögliche Formen der β -Funktion für verschiedene Mischungszustände	74
6.8	Burke-Schumann-Lösung der Reaktanten im Mischungsbruchraum einer Zweistrom-Diffusionsflamme.	75
6.9	Diffusionseinfluss auf den Flammenfortschritt in einem inhomogenen Gemisch.	78
6.10	Gleichgewichtsmassenbrüche der sieben Spezies im Z -Raum für $p = 40bar$, $T = 2000K$ und PDF für $Z = Z_{st}$ und $Z''^2 = 0.01$	81
6.11	Interaktion zwischen 3D-CFD-Löser und 1D-„Flamelet“-Löser.	82

7.1	Kriterien zur Charakterisierung des Strahls und Bewertung der Güte des Simulationsergebnisses.	83
7.2	Vergleich der Einspritzstrahlen von Injektor A (links) und Injektor B (rechts) anhand von Schattenrissaufnahmen zum Zeitpunkt $t_{ASB} = 0.7 \text{ ms}$	84
7.3	Randbedingungen und spezifische Kenngrößen der Piezo-Injektoren A und B. . .	84
7.4	Nadelhubverlauf für die Piezo-Injektoren A und B.	84
7.5	Quasi-2D-0.5°-Sektornetze zur a) stationären Düseninnenströmungssimulation für Injektor A bei einem Nadelhub $h = 30 \text{ }\mu\text{m}$ (7788 Zellen) und b) transienten Simulation der Einspritzung (18634 Zellen) mit adaptiver Gitterausrichtung und Düsenaustrittsauflösung.	85
7.6	Strömungsgrößen am Austritt von <i>Injektor A</i> (links) und <i>Injektor B</i> (rechts) bei diskreten Nadelhuben h : a) Geschwindigkeit \tilde{u} , b) turbulente Längenskalenverteilung L_t entlang der dimensionslosen Düsenaustrittskoordinate (Sitz: $d_n = 0$; Nadel: $d_n = 1$) und c) turbulentes Längenskalenspektrum $F(L_t)$ nach Gl. (4.48).	86
7.7	Mittlere Strömungsgeschwindigkeit \bar{u} und Austrittswinkel $\bar{\theta}$ des mittleren Impulsvektors am Düsenaustritt als Funktion vom Nadelhub h für <i>Injektor A</i> und <i>B</i>	87
7.8	Gegenüberstellung von Strahldiagnostik (jeweils links: gemittelte Schattenrissaufnahmen) und 3D-Simulation (jeweils rechts: 3D-Partikeldarstellung und 2D-Flüssigkeitsmassenbruch) für <i>Injektor A</i> und <i>Injektor B</i>	88
7.9	Zeitliche Entwicklung der Strahlkenngrößen aus Messung und 3D-Simulation für <i>Injektor A</i> (links) und <i>Injektor B</i> (rechts): a) Axiale und radiale, über die Strahlfront gemittelte Penetration, b) Strahlkegelwinkel θ_5 bei 5 mm unterhalb der Abspritzkante und c) Randwirbelhöhe (vgl. dazu Abb. 7.1).	89
7.10	Statische Druckverteilung (jeweils linke Schnittebene) und Geschwindigkeitsvektorfeld und Flüssigkeitsmassenbruch (jeweils rechte Schnittebene) bei <i>Injektor A</i> und <i>Injektor B</i>	90
7.11	Zeitlicher Regressionsverlauf eines Kerosin-Einzeltropfens unter Hochdruckatmosphäre nach Hiroyasu et al. [62].	92
7.12	Zeitliche Entwicklung der Tropfenregression und Tropfentemperatur eines Benzin-Einzeltropfens.	93
7.13	Zeitliche Entwicklung der Zusammensetzung von Flüssig- und Dampfphase eines Benzin-Einzeltropfens.	93
7.14	Zeitliche Entwicklung von Dampf- und Flüssigmasse des Ein- und Mehrkomponentenverdampfungsmodells.	95
7.15	Gegenüberstellung der lokalen Gemisch- und Kompositionsverteilung in Flüssig- und Dampfphase von Ein- und Mehrkomponentenverdampfungsmodell für den Einspritzstrahl einer A-Düse in 2D-Schnittdarstellung.	95
7.16	Ventilhubkurven des mechanischen Ventiltriebssystems des Einzylinderaggregats.	97
7.17	Druckrandbedingungen für Ein- und Auslasskanal aus der 1D-Simulation.	97
7.18	Nadelhubkurve der Piezo-A-Düse bei Doppeleinspritzung.	97
7.19	Schnittdarstellung der Rechengitter mit optimierter Netztopologie zur 3D-Simulation des Ladungswechsels mit <i>StarCD</i> [22] (links, 691122 Zellen im UT) sowie der Einspritzung und Verbrennung mit <i>Kiva-3v</i> [8] (rechts, 198920 Zellen im ZOT).	98
7.20	Gegenüberstellung der 3D-Simulation (Partikeldarstellung, links) und Strahldiagnostik (rechts) in der Hochdruckkammer ($p_K = 6 \text{ bar}$ und $T_K = 293 \text{ K}$).	99
7.21	Axiale Strahlpenetration auf motorischem Rechennetz mit fixiertem Kolben.	99
7.22	Radiale Strahlpenetration auf motorischem Rechennetz mit fixiertem Kolben.	99

7.23	Vorgehensweise bei der 3D-CFD-Simulation des Ladungswechsels, Gemischbildung und Verbrennung bei Ottomotoren mit Benzin-Direkteinspritzung.	101
7.24	Zylinderdruckverlauf für Einlass- und Kompressionsphase von BP 1.	102
7.25	Geschwindigkeitsvektorfeld der 3D-Ladungswechselberechnung für die Betriebspunkte 1 und 2 aus Tab. 7.6.	103
7.26	Wechselwirkung von Einspritzstrahl und Tumble-Strömung für BP 1 aus Tab. 7.6: Einspritzstrahl in Partikeldarstellung und Geschwindigkeitsvektorfeld in einer Schnittebene durch die Brennraummitte für die Haupteinspritzung (links) und Nacheinspritzung (rechts).	104
7.27	Experimentell ermittelter Druckverlauf der Einzelzyklen und des gemittelten Zyklus für den Betriebspunkt 1 aus Tab. 7.6.	104
7.28	Zylinderdruckverläufe: a) Variation des Zündzeitpunkts (Betriebspunkt 1 und 2) und b) Variation der externen Abgasrückführungsrate (Betriebspunkt 3 und 4). . .	105
7.29	Summenbrennverläufe: a) Variation des Zündzeitpunkts (Betriebspunkt 1 und 2) und b) Variation der externen Abgasrückführungsrate (Betriebspunkt 3 und 4). . .	105
7.30	Abweichung der Brenndauer B_{5-50} bzw. B_{50-90} aus der Simulation gegenüber der Messung.	106
7.31	Abweichung des indizierten Mitteldrucks des Hochdruckteils aus der Simulation gegenüber der Hochdruckindizierung.	106
7.32	Temperaturverteilung und -Isofläche $T = 2000K$: a) Betriebspunkt 1 und b) Betriebspunkt 2 aus Tab. 7.6.	107
7.33	Temperaturverteilung und -Isofläche $T = 2000K$: a) Betriebspunkt 3 und b) Betriebspunkt 4 aus Tab. 7.6.	108
A.1	Diffusivität der Gasphase für n-Alkane bei $p = 1 \text{ bar}$ und $T = 293 \text{ K}$ nach Fuller (siehe [112]) und Vargaftik [152].	128
A.2	Kritische Temperatur für n-Alkane nach Tanim und Hallett [147] und Vargaftik [152].	128
A.3	Flüssigkeitsviskosität für n-Alkane nach Gl. (A.10) und <i>Kiva-3v</i> [7].	130
A.4	Oberflächenspannung für n-Alkane nach Gl. (A.11) und Vargaftik [152].	130

Tabellenverzeichnis

2.1	Empirische Konstanten des k - ϵ -Turbulenzmodells in <i>Kiva-3v</i> [7]	10
3.1	Randbedingungen und spezifische Kenngrößen der Piezo-A-Düse.	19
3.2	Gittereigenschaften der Netzstudie	19
5.1	Konventionelle Modellierungsansätze für die Verdampfung von Einzeltröpfen. . .	53
5.2	Formparameter und Stoffeigenschaften verschiedener Kraftstoffe.	55
6.1	Konstanten für die laminare Brenngeschwindigkeit von Iso-Oktan nach Gülder [51]	71
7.1	Parameter für das A-Düsen-Strahlmodell.	88
7.2	Randbedingungen des Einzeltröpfenexperiments von Hiroyasu et al. [62].	92
7.3	Randbedingungen des numerischen Experiments für einen Benzin-Einzeltröpfen.	93
7.4	Randbedingungen für die Verdampfungsanalyse des Einspritzstrahls einer Piezo-A-Düse in der Hochtemperaturkammer.	94
7.5	Technische Daten des Einzylinder-Forschungsmotors	96
7.6	Betriebsdaten des Einzylinder-Forschungsmotors	96
7.7	Modellparameter für die 3D-Simulation der Gemischbildung und Verbrennung .	102
A.1	Atomare Diffusionsvolumen nach Reid et al. [113].	127
A.2	Konstanten für die spezifische Wärmeleitfähigkeit nach Tanim und Hallett [147] .	129
A.3	Konstanten für die spezifische Wärmekapazität der Flüssigphase nach Tanim und Hallett [147]	129
A.4	Konstanten für die spezifische Wärmekapazität der Dampfphase nach Tanim und Hallett [147]	129

Kapitel 1

Einleitung

1.1 Motivation

Seit Einführung des Automobils ist der weltweite Individualverkehr mit zunehmendem Wohlstand unserer Gesellschaft kontinuierlich gewachsen. Dieser Trend wird sich auch in Zukunft mit der rasanten wirtschaftlichen Entwicklung fortsetzen, die derzeit vor allem in den Schwellenländern in Asien und Osteuropa beobachtet werden kann. Trotz der Fortschritte auf dem Gebiet der alternativen Antriebssysteme, wie der Brennstoffzelle, wird der Verbrennungsmotor auch in naher Zukunft überwiegend als Antriebstechnologie des Automobils dienen.

Die Forderung nach umweltverträglicher individueller Mobilität setzt damit zunehmenden Handlungsbedarf in die Senkung von Schadstoffemissionen und Kraftstoffverbrauch voraus. Neben der heute geltenden Abgasgesetzgebung führt die Europäische Union (EU) im Jahr 2009 mit Euro 5 bzw. im Jahr 2014 mit Euro 6 eine weitere Verschärfung der Emissionsgrenzwerte ein [41] (siehe Abb. 1.1 a)). Ferner hat sich die europäische Automobilindustrie in einer freiwilligen Verpflichtung bereits dazu bekannt, den Ausstoß des für den Treibhauseffekt mitverantwortlichen Gases Kohlendioxid (CO_2) ihrer Fahrzeugflotten bis zum Jahr 2008 auf $140 \text{ g CO}_2/\text{km}$ zu senken. Darüber hinaus strebt die EU für das Jahr 2012 die generelle Einführung von CO_2 -Grenzwerten an [28] (siehe Abb. 1.1 b)).

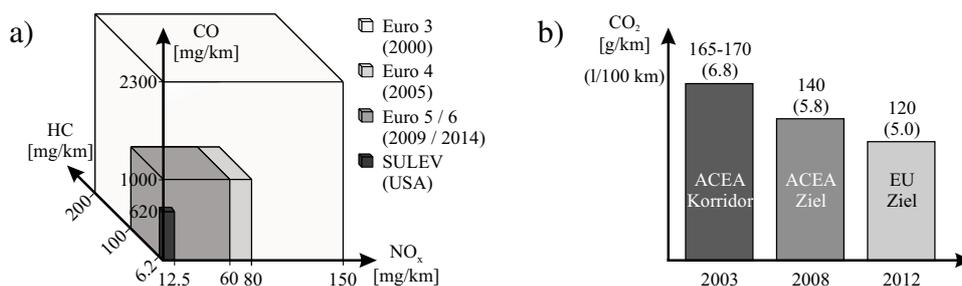


Abb. 1.1: a) Schadstoffgrenzwerte für Pkw-Ottomotoren in Europa (NEFZ) und den USA [41]. b) CO_2 -Grenzwerte für den Fahrzeugflottenverbrauch nach ACEA [2] und der EU [28].

Der Kraftstoffverbrauch heutiger Dieselmotoren konnte durch neue Einspritztechnologien (Pumpe-Düse- und Common-Rail-Systeme) deutlich gesenkt werden, während Schadstoffemissionen, im Besonderen von Partikeln und Stickoxiden, nach wie vor problematisch sind. Beim Ottomotor hingegen lassen sich mit konventionellem Drei-Wege-Katalysator bereits heute die in Euro 5 bzw. 6 und SULEV¹ vorgeschriebenen Schadstoffgrenzwerte einhalten. Zunehmender Handlungsbedarf besteht in der Entwicklung verbrauchsarmer Antriebskonzepte.

¹engl. „Super Ultra Low Emission Vehicle“

Schwerpunkte der Brennverfahrensentwicklung bei Ottomotoren sind vor allem die Wirkungsgradsteigerung in der Teillast. Neben indirekten Maßnahmen, wie „Down-Sizing“ in Kombination mit Aufladung, werden Konzepte wie (voll-) variable Ventilsteuerung, homogene Selbstzündung² und Benzin-Direkteinspritzung mit Ladungsschichtung verfolgt. Das größte Potenzial zur nachhaltigen Verbesserung der Thermodynamik des Ottomotors sprechen die Experten der Benzin-Direkteinspritzung mit strahlgeführtem Brennverfahren zu [134, 137, 153, 85, 45].

Die Vorteile der Benzin-Direkteinspritzung in Ottomotoren lassen sich auf die reduzierten Ladungswechselperluste in der Teillast zurückführen. Da die Leistungsanpassung analog zum Dieselmotor qualitätsgeregelt erfolgt, kann der Motor mit Ladungsschichtung entdrosselt betrieben werden. Gleichzeitig trägt der Betrieb mit Luftüberschuss über einen höheren Isentropenexponenten sowie geringeren Wandwärmeverlusten durch die zentrale Verbrennung zur Steigerung des Prozesswirkungsgrades bei. Aber auch im Homogenbetrieb bei Volllast wird infolge der Kühlwirkung des direkt eingespritzten Kraftstoffes die Füllung erhöht und die Klopfneigung verringert. Dadurch ermöglichen höhere Verdichtungsverhältnisse eine thermodynamisch günstigere Verbrennung [136]. Allerdings kann im Magerbetrieb in der Teillast die Reduktion der Stickoxide (NO_x) mit einem konventionellen Drei-Wege-Katalysator nicht mehr gewährleistet werden, so dass im Hinblick auf zukünftige Emissionsvorschriften eine Abgasnachbehandlung mit NO_x -Speicherkatalysatoren unumgänglich ist. Dies erhöht zum einen die Systemkomplexität und Kosten und erfordert zum anderen schwefelfreie Kraftstoffe [39].

Die steigende Komplexität moderner Brennverfahren, deren zunehmendes Maß an innermotorischen Freiheitsgraden sowie die immer kürzeren Entwicklungszeiten erfordern zwangsweise die Einbindung von computergestützten Simulationsmethoden³ in die Entwicklungsprozesskette. Null- und eindimensionale Realkreisprozess- und Ladungswechselmodelle sind bereits fester Entwicklungsbestandteil. Die 3D-Simulation, deren Anwendung in der Vergangenheit meist auf die reine Analyse von Strömung und Verbrennung beschränkt war, wird zunehmend zur Vorauswahl von Parametern (z.B. Kanal-, Kolben- und Brennraumgeometrie, Einspritzverlaufsform und -taktung, etc.) und damit zur Reduzierung der kostenintensiven Motorversuche eingesetzt.

Den Grundstein hierfür setzte die 3D-Simulation bei der Brennverfahrensentwicklung der Benzin-Direkteinspritzung der ersten Generation. Bei diesem auch als wandgeführt bekanntem Brennverfahren mit seitlicher Injektor- und zentraler Zündkerzenlage wird der Gemischtransport durch eine ausgeprägte Kolbenmulde unterstützt. Bei der Brennverfahrensentwicklung hat die 3D-Simulation bereits mit den klassischen Modellen entscheidend zum Verständnis der Gemischbildungsmechanismen beigetragen, wie z.B. dem Strahlkontraktionsverhalten von Drallinjektoren, und daraus richtungsweisende Maßnahmen abgeleitet. Für die zweite Generation der Benzin-Direkteinspritzung, das so genannte strahlgeführte Brennverfahren, ergeben sich weitaus höhere Anforderungen an die Gemischbildung. Die räumlich enge, zentrale Anordnung von Injektor und Zündkerze (siehe Abb. 1.2) und die daraus resultierenden kurzen Gemischbildungswege und -zeiten offenbaren die hohen Strahlqualitätsansprüche hinsichtlich Stabilität, Zerstäubungsgüte und Mischung. In Kombination mit hoch-modernen Piezo-A-Düsen⁴, wie sie Abb. 1.3 zeigt, nimmt aufgrund der kleinen geometrischen Abmessungen mit einem Nadelhub von nur etwa $35 \mu\text{m}$ die Sensitivität des Strahls zur Einspritzdüse in hohem Maße zu. Für eine vorhersagefähige 3D-Simulation der Gemischbildung von strahlgeführten Brennverfahren stoßen die „einfach-

²in der Literatur auch als „Controlled Auto-Ignition“ (CAI) oder Raumzündverbrennung (RZV) bezeichnet.

³engl. „computer aided engineering“ (CAE)

⁴Nach außen öffnende Piezo-Düsen werden aufgrund ihrer geometrischen Form als A-Düsen bezeichnet.

chen“ klassischen Modellierungsansätze sehr schnell an ihre Grenzen der Applizierbarkeit. Mit den wachsenden Anforderungen moderner Brennverfahren müssen daher auch die Modelle und Methoden der 3D-Simulation weiterentwickelt werden.

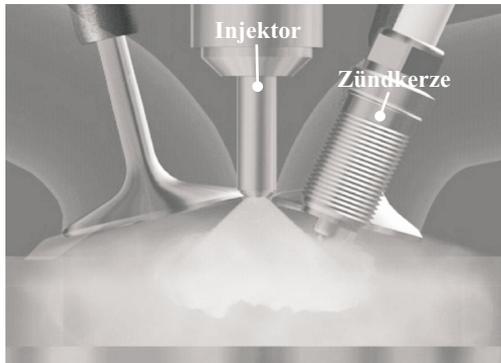


Abb. 1.2: Strahlgeführtes Brennverfahren mit zentraler Injektor- und Zündkerzenlage [6].

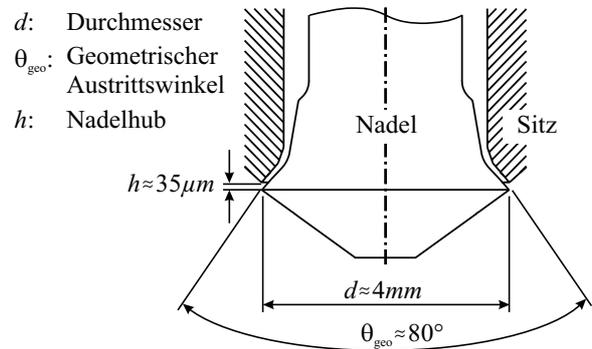


Abb. 1.3: Schnittdarstellung einer Piezo-A-Düse mit charakteristischen Kenngrößen.

1.2 Problemstellung und Zielsetzung

Die vorhersagefähige 3D-Simulation der Benzin-Direkteinspritzung mit strahlgeführtem Brennverfahren und einer Piezo-A-Düse erfordert die Entwicklung problemorientierter Modelle sowie die Adaption existierender Ansätze zur Beschreibung der hoch komplexen physikalisch-chemischen Prozesse. Die Zielsetzung im Rahmen der vorliegenden Arbeit liegt in der Entwicklung und Validierung eines vorhersagefähigen Gesamtmodells für die praktische Anwendung, welches, beginnend beim Ladungswechsel über die Düseninnenströmung sowie der Einspritzung und Gemischbildung bis hin zur Verbrennung, eine physikalisch fundierte Beschreibung mit wirtschaftlich vertretbaren Rechenzeiten erlaubt.

Die grundlegende Problematik bei der Gemischbildung von strahlgeführten Brennverfahren mit Piezo-A-Düsen liegt in den außergewöhnlich kleinen geometrischen Abmessungen der Düse. Bei einem Nadelhub von lediglich $h \approx 35 \mu\text{m}$ haben bereits geringfügige Änderungen der Düseninnengeometrie, die nahezu in der Größenordnung von Fertigungstoleranzen liegen können, extreme Auswirkungen auf die für das Brennverfahren entscheidende Randwirbelbildung. Um dieser Sensitivität auch in der Simulation mit einem aus industrieller Sicht vertretbarem Aufwand Rechnung zu tragen, wird in dieser Arbeit ein Ansatz vorgestellt, welcher die Düseninnenströmung mit der Gemischbildung koppelt. Der mehrphasigen Düseninnenströmung wird ein Zwei-Fluid-Modell zugrunde gelegt, während bei der Gemischbildung auf das klassische stochastische Tropfenmodell zurückgegriffen wird. Der primäre Strahlauflbruch, d.h. der Übergang von der kontinuierlichen zur diskreten Phase, wird über die strömungsmechanische Information aus der Düseninnenströmung abgebildet. Aerodynamischer Zerfall wird über die konventionelle Modellierungsmethodik nach Reitz [120] berücksichtigt. Für die weitere Ausbreitung der fein zerstäubten Tropfen und deren Interaktion mit der Turbulenz der Gasphase wird ein turbulenter Dispersionsansatz appliziert, der, fern von der konventionellen deterministischen Beschreibungsweise, die turbulente Tropfendynamik statistisch betrachtet. Im Hinblick auf die Verdampfung kommt der Kraftstoffzusammensetzung eine zentrale Bedeutung zu. Klassische Verdampfungsmodelle für einkomponentige Ersatzkraftstoffe eignen sich mangels physikalischer Beschreibung des Siedeverhaltens ebenso wenig wie diskrete Mehrkomponentenmodelle aufgrund ihrer intensiven Rechenzeiten. Als sinnvolle Alternative wird in dieser Arbeit auf einen (statistischen) Mehrkomponentenansatz auf Basis der kontinuierlichen Thermodynamik (siehe z.B. [147]) zurückgegrif-

fen und für die ottomotorische Applikation erweitert. Für den Homogenbetrieb in der Teillast mit saugsynchroner Direkteinspritzung, wie er z.B. bei der Regeneration des Katalysators vorliegt, wird der Modellansatz für die überhitzte Verdampfung (engl. „Flash-Boiling“) ergänzt.

Die Schwierigkeit bei der 3D-Simulation der teilweise vorgemischten Verbrennung, wie sie im Ottomotor mit Schichtladung vorherrscht, liegt zum einen in der Beschreibung der gekoppelt auftretenden Regimes aus turbulenter Vormisch- und Diffusionsverbrennung. Zum anderen stellt die korrekte Abbildung der chemischen Wärmefreisetzung, im Besonderen in den lokal fetten Zonen, eine große Herausforderung dar. In dieser Arbeit wird zur numerischen Berechnung der teilweise vorgemischten Verbrennung ein 7-Spezies-PDF-Flammenfaltungsmodell vorgestellt. Dieser Ansatz koppelt das Flammenfaltungsmodell von Weller [159] für die turbulente Flammenfrontausbreitung mit einem „Flamelet“- (dt. Flämmchen) Ansatz für die turbulente Diffusionsverbrennung. Die chemischen Reaktionsabläufe werden in Analogie zu Steiner [139] auf Basis der thermochemischen Gleichgewichtsbetrachtung über sieben elementare Spezies erfasst und der Turbulenzeinfluss über eine Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion⁵ abgebildet. Der homogen-vorgemischte Betrieb, wie er z.B. in der Vollast vorliegt, stellt dabei einen Grenzfall dar.

Aus physikalischen und numerischen Gründen werden in dieser Arbeit drei CFD⁶-Programme herangezogen. Die mehrphasige Berechnung der Düseninnenströmung erfolgt mit *Fire* [11], während der rechenzeitintensive Ladungswechsel mit dem mehrprozessorfähigen *StarCD* [22] simuliert wird. Die eigentliche Implementierung und Validierung der oben beschriebenen Modelle erfolgt mit *Kiva-3v* [8], das sich durch seine offene Quelltext-Struktur auszeichnet.

1.3 Aufbau der Arbeit

Die vorliegende Arbeit gliedert sich in acht Kapitel. Nach den einleitenden Worten werden in Kapitel 2 die allgemeinen theoretischen Grundlagen zur numerischen Berechnung von innermotorischen, turbulent-reaktiven Zweiphasenströmungen vorgestellt. In Kapitel 3 wird zunächst auf die Phänomenologie des Einspritzstrahls von A-Düsen eingegangen. Anschließend werden die numerischen Sensitivitäten bei der 3D-Strahlsimulation anhand von umfangreichen Einspritzstrahlsimulationen erörtert. Auf Basis der gewonnenen Erkenntnisse wird abschließend die Vorgehensweise für eine fundierte und konvergente numerische Beschreibung von Zweiphasenströmungen erarbeitet. Kapitel 4 behandelt die strahldynamischen Gemischbildungsmechanismen. Ausgehend von der Phänomenologie der einzelnen Teilprozesse werden die in der Literatur veröffentlichten Modelle und deren Applizierbarkeit auf A-Düsen diskutiert. Daran anknüpfend wird das in der vorliegenden Arbeit entwickelte Strahlmodell für A-Düsen vorgestellt, dessen zentrale Bestandteile die Kopplung von Düseninnenströmung und Gemischbildung, der Primärzerfall und die turbulente Dispersion sind. Kapitel 5 widmet sich den Verdampfungsmechanismen der Gemischbildung von Mehrkomponentenkraftstoffen. Es wird ein in der Literatur veröffentlichtes Mehrkomponentenverdampfungsmodell zur Applikation auf die ottomotorische Gemischbildung erweitert. Kapitel 6 beschreibt die teilweise vorgemischte Verbrennung strahlgeführter Brennverfahren, beginnend bei der Phänomenologie über die aktuellen Modellierungsmethoden bis hin zu dem im Rahmen dieser Arbeit entwickelten 7-Spezies-PDF-Flammenfaltungsmodell. Die Validierung der in Kapitel 4 bis 6 vorgestellten Modellierungsansätze erfolgt in Kapitel 7 anhand von optischer Diagnostik und Indizierdaten an einem Einzylinder-Forschungsmotor. Die Arbeit schließt mit einer Zusammenfassung und einem Ausblick in Kapitel 8.

⁵engl. „Probability Density Function“, PDF

⁶numerische Strömungssimulation, engl. „Computational Fluid Dynamics“

Kapitel 2

Beschreibung von turbulenten, reaktiven Zweiphasenströmungen

Das vorliegende Kapitel behandelt die theoretischen Grundlagen der innermotorischen Strömungsmechanik. Hierbei handelt es sich um instationäre, kompressible, chemisch reaktive, turbulente, dreidimensionale Zweiphasenströmungen mit bewegten Gittern. Die zugrunde liegenden Gleichungen bilden das Fundament für die in den nachfolgenden Kapiteln vorgestellten Modellierungsmethoden der Gemischbildung und Verbrennung. Auf eine ausführliche Darstellung wird dabei verzichtet (siehe dazu Standardwerke der Strömungsmechanik, z.B. [102, 127, 151]).

2.1 Klassifizierung des innermotorischen Strömungsfeldes

Strömungen lassen sich in die Typen laminar, transitional und turbulent klassifizieren. Laminare Strömungen sind Schichtenströmungen ohne Bewegung normal zur Hauptströmung. Transitionale Strömungen entstehen, wenn laminare Strömungen durch Störungen instabil werden. Dabei gewinnt der konvektive Prozess gegenüber der molekularen Diffusion, die Störungen stabilisierend entgegen wirkt, an Dominanz. Verläuft der konvektive Prozess deutlich schneller als der diffusive, ist die Strömung turbulent. Das Verhältnis aus molekularer Diffusionszeit $\tau_{diff} \sim L^2/\nu$ und Konvektionszeit $\tau_{konv} \sim L/u$ führt auf die Reynolds-Zahl.

$$\frac{\tau_{diff}}{\tau_{konv}} \sim \frac{L^2 u}{\nu L} = \frac{uL}{\nu} = Re \quad (2.1)$$

Die Größe L stellt die charakteristische Länge, u die Geschwindigkeit und ν die kinematische Viskosität des Fluids dar. Die Reynolds-Zahl Re beschreibt das Verhältnis aus Trägheits- und viskosen Kräften und dient als Kennzahl zur Charakterisierung des Strömungstyps. Der laminar-turbulente Übergangsbereich wird durch die kritische Reynolds-Zahl beschrieben, die z.B. für die Rohrströmung bei $Re_{krit} \approx 2300$ liegt [127]. Bei innermotorischen Strömungen überschreitet die Reynolds-Zahl $Re = 28 \cdot 10^3$ (bei gerade geschlossenem Einlassventil: $L = 86 \text{ mm}$, $u = 6 \text{ m/s}$, $\nu = 18.4 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$) die kritische Reynolds-Zahl deutlich und die Strömung ist damit turbulent.

Für innermotorische Prozesse ist die Turbulenz von besonderer Bedeutung. So wird z.B. die Aufweitung des Einspritzstrahls durch den turbulenten Impulsaustausch zwischen den Phasen stark beeinflusst. Ebenso wird der Fortschritt der Flammenfront maßgeblich durch die turbulente Flammenfaltung bestimmt. Aufgrund der sich in der Modellierung wiederfindenden Relevanz der Turbulenz werden im Folgenden die wichtigsten Eigenschaften und Kenngrößen turbulenter Strömungen vorgestellt.

2.2 Eigenschaften von turbulenten Strömungen

Turbulente Strömungen sind unregelmäßige, dreidimensionale, instationäre, wirbelbehaftete Strömungen. Die stochastischen Geschwindigkeitsbewegungen in Zeit und Raum, die der Hauptströmung überlagert sind, führen zu Fluktuationen der skalaren Größen wie Dichte, Temperatur und Konzentrationen. Eine Charakterisierung der Turbulenz erfolgt über Zeit- und Längenskalen. Die größten Turbulenzelemente, die durch die Berandungen des Strömungsgebiets (z.B. Brennraum) begrenzt sind, werden durch das integrale Längenmaß l_t beschrieben. Dieses lässt sich über die (Zwei-Punkt-) Korrelation zweier Geschwindigkeitsschwankungen u' an zwei im Abstand \vec{r} entfernten Raumpunkten \vec{x} und $\vec{x} + \vec{r}$ bestimmen.

$$R(\vec{x}, \vec{r}) = \frac{\overline{u'(\vec{x}) u'(\vec{x} + \vec{r})}}{\sqrt{\overline{u'^2(\vec{x})}} \sqrt{\overline{u'^2(\vec{x} + \vec{r})}}} \quad (2.2)$$

Die Integration führt auf das integrale Längenmaß l_t und das zugehörige integrale Zeitmaß τ_t .

$$l_t = \int_0^\infty R(\vec{x}, \vec{r}) dr \quad \text{und} \quad \tau_t \sim \frac{l_t}{\sqrt{\overline{u'^2}}} \quad (2.3)$$

Die großen Turbulenzstrukturen stehen in direkter Wechselwirkung mit dem Hauptströmungsfeld, wobei sie diesem (turbulente) kinetische Energie k entziehen. Durch Wirbelstreckung wird die Energie an immer kleinere Wirbelstrukturen weitergegeben, bis schließlich viskose Kräfte die mechanische Energie in Wärme dissipieren. Dieser Transfer wird in der Energiekaskade abgebildet. Nach der Kolmogorov'schen Theorie, die ein Gleichgewicht von transferierter und dissipierter Energie voraussetzt, wird die Dissipation

$$\epsilon = \frac{k}{\tau_t} \sim \frac{\overline{u'^2}^{\frac{3}{2}}}{l_t} \quad (2.4)$$

durch die großskalige Bewegung bestimmt, obwohl sie selbst aus einem viskositätsgesteuerten Prozess auf kleinskaliger Ebene resultiert [123]. Die kleinsten Turbulenzelemente, die in einem Strömungsfeld aufrechterhalten werden, sind in Abhängigkeit von der Dissipation ϵ und der kinematischen Viskosität ν durch die Kolmogorov'sche Längen- l_K und Zeitskala τ_K definiert.

$$l_K \equiv \left(\frac{\nu^3}{\epsilon} \right)^{\frac{1}{4}} \quad \text{und} \quad \tau_K \equiv \left(\frac{\nu}{\epsilon} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (2.5)$$

Die integrale und Kolmogorov'sche Längen- und Zeitskala sind über die turbulente Reynolds-Zahl $Re_t = u' l_t / \nu$ miteinander korreliert.

$$\frac{l_t}{l_K} \propto Re_t^{3/4} \quad \text{und} \quad \frac{\tau_t}{\tau_K} \propto Re_t^{1/2} \quad (2.6)$$

2.3 Mathematische Beschreibung der Gasphase

Die numerische Berechnung turbulenter Strömungen richtet sich nach dem Detaillierungsgrad, wie die turbulenten Skalen erfasst werden. Die *direkte numerische Simulation* (DNS) beinhaltet die Auflösung aller Skalen und ist bis auf numerische Fehler exakt. Da sich die motorisch relevanten physikalischen Längenskalen bei Motoren mit Direkteinspritzung über die Größenordnungen von 10^{-6} bis 10^{-2} m und die chemischen Zeitskalen von 10^{-10} bis 10 s [157] erstrecken, wäre eine extrem feine Zeit- und Raumdiskretisierung (Gitterpunkte $N > Re_t^{9/4}$) erforderlich. Aufgrund der damit verbundenen immensen Rechenzeiten ist die DNS auch in absehbarer Zukunft nicht für innermotorische Strömungen applizierbar und bleibt somit auf akademische Fragestellungen bei

kleinen Reynolds-Zahlen und einfachen Geometrien beschränkt. Bei der *Grobstruktursimulation* (engl. „Large Eddy Simulation“, LES) werden über Filter die großen Skalen aufgelöst, während die kleineren modelliert werden. LES gewinnt für rein strömungsmechanische Probleme gerade an Bedeutung. Für motorische Anwendungen mit Einspritzung, Verbrennung und bewegten Gittern ist auch hier der Rechenaufwand noch zu hoch. Für die industrielle 3D-Simulation motorischer Problemstellungen hat sich die statistische Beschreibung der Turbulenz durch Lösung der *Reynolds-gemittelten Navier-Stokes-Gleichungen* (RANS) etabliert.

2.3.1 Mittelung der Strömungsvariablen

Für die statistische Beschreibung der Turbulenz wird bei instationären Strömungen auf eine Ensemble-Mittelung zurückgegriffen. Der Ensemble-Mittelwert $\bar{\Phi}$ einer Größe Φ stellt das arithmetische Mittel einer Vielzahl von Messungen N mit identischen Anfangs- und Randbedingungen dar.

$$\bar{\Phi}(\vec{x}, t) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \Phi_n(\vec{x}, t) \quad (2.7)$$

Für kompressible Strömungen lassen sich die Dichtefluktuationen in den Erhaltungsgleichungen eliminieren, indem eine mit der Dichte ρ gewichtete Mittelung der Strömungsvariable Φ nach Favre [43] vorgenommen wird.

$$\tilde{\Phi} = \frac{\overline{\rho\Phi}}{\bar{\rho}} \quad (2.8)$$

Der Momentanwert Φ setzt sich aus gemitteltem $\tilde{\Phi}$ und fluktuierendem Anteil Φ'' zusammen.

$$\Phi = \tilde{\Phi} + \Phi'' \quad \text{mit} \quad \overline{\rho\Phi''} = 0 \quad (2.9)$$

Messungen am Motorprüfstand liegen zu einem Großteil Schwankungen der Randbedingungen (z.B. Einspritzstrahl, Restgasgehalt des vorherigen Zyklus) zugrunde. Dadurch ergeben sich zusätzlich zur Turbulenz Schwankungen, die in der 3D-Simulation nicht abgebildet werden.

2.3.2 Gemittelte Erhaltungsgleichungen der Gasphase

Die Grundlage zur Beschreibung von Kontinuumsströmungen eines kompressiblen Newton'schen Fluids¹ bilden die Erhaltungsgleichungen für die extensiven Größen Spezies- und Gesamtmasse sowie Impuls und Energie. Im Folgenden werden die dem CFD-Programm *Kiva-3v* zugrunde liegenden Gleichungen in differentieller, konservativer Form dargestellt (siehe Amsden et al. [7]).

Für ein Gasgemisch aus I verschiedenen Komponenten lässt sich die Erhaltungsgleichung für die Spezies i formulieren als:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{y}_i) + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{y}_i \tilde{\vec{u}}) = \nabla \cdot (\bar{\rho} D \nabla \tilde{y}_i) + \dot{\rho}_i^c + \dot{\rho}_i^s \quad (2.10)$$

Darin bezeichnen t die Zeit, $\bar{\rho}$ die Dichte und $\tilde{\vec{u}}$ den Vektor der mittleren Strömungsgeschwindigkeit. Der Spezies-Massenbruch $\tilde{y}_i = \bar{\rho}_i / \bar{\rho}$ ist über die Partialdichte $\bar{\rho}_i$ definiert, wobei für die Summe $\sum_i \tilde{y}_i = 1$ gilt. Der binäre Massendiffusionskoeffizient D darf unter der Annahme stark

¹Newton'sche (normalviskose) Fluide sind durch einen linearen Zusammenhang von Schubspannung τ und Schergeschwindigkeit du/dy charakterisiert, d.h. die dynamische Viskosität μ ist unabhängig von der Schergeschwindigkeit [127].

verdünnter Gase für alle Spezies einheitlich gewählt werden [157]. Die Terme $\dot{\rho}_i^s$ und $\dot{\rho}_i^c$ repräsentieren die Quellen bzw. Senken aus der Tropfenverdampfung und den chemischen Reaktionen. Die Summation über alle Spezies führt auf die Kontinuitätsgleichung, welche die Erhaltung der Gesamtmasse des Systems beschreibt.

$$\frac{\partial}{\partial t} \bar{\rho} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}}) = \dot{\rho}^s \quad (2.11)$$

Der Massenaustausch zwischen Flüssig- und Gasphase durch Verdampfung oder Kondensation wird durch den Quell- bzw. Senkenterm $\dot{\rho}^s$ beschrieben. Chemische Reaktionen liefern keinen Beitrag in der Massenbilanz, da sie weder Masse erzeugen noch vernichten.

Die Impulsgleichungen in den drei Raumrichtungen (x, y, z) leiten sich aus dem 1. Newton'schen Gesetz ab, nach dem die Änderung des Impulses der Summe aller äußeren Kräfte entspricht.

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}}) + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \tilde{\mathbf{u}}) = -\nabla \bar{p} - \frac{2}{3} \nabla (\bar{\rho} \tilde{k}) + \nabla \cdot \sigma + \nabla \cdot \tau + \dot{F}^s + \bar{\rho} \tilde{\mathbf{g}} \quad (2.12)$$

Die äußeren Kräfte bilden der Druck \bar{p} , die isotropen Turbulenzkräfte, die viskosen und turbulenten Kräfte σ bzw. τ , die dynamischen Kräfte der Flüssigphase \dot{F}^s und die Gravitationskräfte durch das Schwerfeld $\tilde{\mathbf{g}}$ der Erde². Die viskosen Kräfte, d.h. der Impulsaustausch durch die Molekülbewegung des Gases, werden durch den Newton'schen Spannungstensor σ beschrieben.

$$\sigma = \mu_l \left(\nabla \tilde{\mathbf{u}} + (\nabla \tilde{\mathbf{u}})^T \right) - \frac{2}{3} \mu_l \nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}} \mathbf{I} \quad (2.13)$$

Darin bezeichnen μ_l die molekulare dynamische Viskosität und \mathbf{I} die Einheitsmatrix. Der turbulenzbedingte Impulsaustausch wird durch den Reynolds-Spannungstensor τ dargestellt. Diese unbekannte Korrelation resultiert aus der Mittelung der nicht-linearen Impulsgleichungen (2.12) und muss zur Schließung des Gleichungssystems modelliert werden (siehe Kap. 2.3.3).

Die Energieerhaltung wird über die spezifische thermische innere Energie \tilde{i}_{th} formuliert

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{i}_{th}) + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \tilde{i}_{th}) = -\bar{p} \nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}} - \nabla \cdot \tilde{\mathbf{J}} + \bar{\rho} \tilde{\epsilon} + \dot{Q}^c + \dot{Q}^s + \dot{Q}^W, \quad (2.14)$$

worin $\tilde{\mathbf{J}}$ die Wärmestromdichte und ϵ die Dissipation der Turbulenzenergie bezeichnen. Der Term \dot{Q}^s berücksichtigt den Entzug von Verdampfungsenthalpie durch die Kraftstoffverdampfung, \dot{Q}^c die chemische Wärmefreisetzung und \dot{Q}^W den Wandwärmeübergang im Zylinder.

Die Wärmestromdichte³ $\tilde{\mathbf{J}}$ setzt sich aus der Fourier'schen Wärmeleitung mit der Wärmeleitfähigkeit λ und der Enthalpiediffusion nach dem Fick'schen Gesetz zusammen.

$$\tilde{\mathbf{J}} = -\lambda \nabla \tilde{T} - \bar{\rho} D \sum_i h_i \nabla \tilde{y}_i \quad (2.15)$$

Für ein ideales Gas lässt sich die spezifische thermische innere Energie \tilde{i}_{th} mit Hilfe der kalorischen Zustandsgleichung als Funktion der Temperatur \tilde{T} , der Spezies-Konzentrationen \tilde{y}_i und den zugehörigen spezifischen Wärmekapazitäten $\bar{c}_{v,i}$ bei konstantem Volumen ermitteln.

$$\tilde{i}_{th} = \sum_i \tilde{y}_i \tilde{i}_{th,i} \quad \text{mit} \quad \tilde{i}_{th,i} = \tilde{i}_{th,i}^0 + \int_{T_0}^{\tilde{T}} \bar{c}_{v,i}(\tilde{T}) d\tilde{T} \quad (2.16)$$

²Gravitationseinflüsse lassen sich über die nach William Froude benannte Froude-Zahl $Fr = v^2/\sqrt{lg}$ abschätzen. In motorischen Strömungen ist $Fr \gg 1$, so dass Gravitationseinflüsse vernachlässigbar sind.

³Der Austausch von thermischer Energie durch Temperatur- (Soret-Effekt), Druck- (Druckdiffusion) und Konzentrationsgradienten (Dufour-Effekt) kann bei innermotorischen Prozessen vernachlässigt werden [157].

$\tilde{i}_{th,i}^0$ ist die zugehörige spezifische innere Energie im thermodynamischen Referenzzustand bei der Temperatur T_0 . Zwischen spezifischer thermischer innerer Energie $\tilde{i}_{th,i}$ und spezifischer thermischer Enthalpie $\tilde{h}_{th,i}$ gilt per Definition der Zusammenhang

$$\tilde{h}_{th,i} = \tilde{i}_{th,i} + \frac{\Re \tilde{T}}{M_i}, \quad (2.17)$$

worin $\Re = 8.3143 \text{ J/molK}$ die universelle Gaskonstante und M_i die Molmasse der Spezies i darstellen. In weiten Bereichen der technischen Anwendungen können intermolekulare Phänomene (z.B. Binnendruck, Kovolumen) vernachlässigt werden, so dass das Fluid als ideales Gas über die thermische Zustandsgleichung $p = f(\rho, T)$ behandelt werden kann.

$$\bar{p} = \bar{\rho} \Re \tilde{T} \sum_i \frac{\tilde{y}_i}{M_i} \quad (2.18)$$

Die molekulare Viskosität μ_l und die Wärmeleitfähigkeit λ sind im Allgemeinen von Druck und Temperatur abhängig. Die Druckabhängigkeit spielt bei Gasen unter mäßig hohen Drücken jedoch eine untergeordnete Rolle, so dass die Viskosität in Abhängigkeit von der Temperatur über die Sutherland-Beziehung

$$\mu_l = \frac{A_1 \tilde{T}^{\frac{3}{2}}}{\tilde{T} + A_2} \quad (2.19)$$

mit den stoffspezifischen Konstanten $A_1 = 1.457 \cdot 10^{-5} \text{ kg/msK}^{\frac{1}{2}}$ und $A_2 = 110 \text{ K}$ angegeben werden kann. Die Wärmeleitfähigkeit λ berechnet sich aus der spezifischen Wärmekapazität bei konstantem Druck $c_p(T) = \sum_i \tilde{y}_i c_{pi}(T)$ und der Prandtl-Zahl Pr .

$$\lambda = \frac{\mu c_p}{Pr} \quad (2.20)$$

Die laminare Prandtl-Zahl Pr_l ist eine stoffabhängige Größe. Sie bildet das Verhältnis aus Impuls- und Wärmetransport ab und korreliert damit die Geschwindigkeits- und Temperaturgrenzschichtdicken. Das Verhältnis aus Impuls- und Stoffdiffusion beschreibt die Schmidt-Zahl.

$$Sc = \frac{\mu}{\bar{\rho} D} \quad (2.21)$$

Der Zusammenhang aus Stoff- und Wärmediffusion, d.h. zwischen Schmidt- und Prandtl-Zahl, wird durch die Lewis-Zahl $Le = Pr/Sc$ beschrieben. Für das Medium Luft werden diese im Allgemeinen als identisch angesehen ($Le = 1$), wobei die laminare Schmidt- bzw. Prandtl-Zahl mit $Sc_l = Pr_l \approx 0.74$ und die entsprechenden turbulenten Größen mit $Sc_t = Pr_t \approx 0.9$ approximiert werden.

2.3.3 Schließungsansatz für turbulente Gasströmungen

Der Reynolds-Spannungstensor τ in Gl. (2.12) enthält aufgrund seiner symmetrischen Eigenschaften sechs unbekannte Komponenten, die modelliert werden müssen. Einer der älteste Ansätze der klassischen Turbulenztheorie beruht auf dem so genannten *Wirbelviskositätsprinzip* nach Boussinesq [18]. In Analogie zum Newton'schen Ansatz für den molekülbedingten Impulsaustausch in laminarer Strömung (siehe Gl. (2.13)) wird der durch turbulente Geschwindigkeitsfluktuationen bedingte Impulsaustausch durch Einführung einer Wirbelviskosität μ_t formuliert.

$$\tau = -\bar{\rho} \widetilde{\vec{u}'' \vec{u}''} = \mu_t \left(\nabla \tilde{\vec{u}} + \left(\nabla \tilde{\vec{u}} \right)^T \right) - \frac{2}{3} \left(\bar{\rho} \tilde{k} + \mu_t \nabla \cdot \tilde{\vec{u}} \right) \mathbf{I} \quad (2.22)$$

Die turbulente Viskosität μ_t ist im Gegensatz zur laminaren Viskosität μ_l eine Zustandsgröße der Strömung und wird daher auch als *Scheinviskosität* bezeichnet. Aus dimensionsanalytischen Gründen lässt sich die turbulente (kinematische) Viskosität $\nu_t = \mu_t/\rho \propto u_t l_t$ als Produkt einer charakteristischen Geschwindigkeit u_t und Länge l_t des impulstransportierenden, turbulenten Wirbels darstellen. Für deren Berechnung wird im Rahmen der vorliegenden Arbeit auf das Zwei-Gleichungs- k - ϵ -Modell zurückgegriffen, das von Launder und Spalding [79] für voll turbulente Strömungen abgeleitet wurde. Darin werden das turbulente Geschwindigkeitsmaß $u_t = \tilde{k}^{1/2}$ und die turbulente Längenskala $l_t = \tilde{k}^{3/2}/\tilde{\epsilon}$ unter der Annahme von lokal homogener und isotroper Turbulenz über zwei Transportgleichungen für die (spezifische) turbulente kinetische Energie⁴ $\tilde{k} = \frac{3}{2}\tilde{u}'^2$ und deren Dissipation $\tilde{\epsilon}$ bestimmt.

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho}\tilde{k}) + \nabla \cdot (\bar{\rho}\tilde{u}\tilde{k}) = -\frac{2}{3}\bar{\rho}\tilde{k}\nabla \cdot \tilde{u} + \tau : \nabla\tilde{u} + \nabla \cdot \left(\frac{\mu_{eff}}{Pr_k} \nabla\tilde{k} \right) - \bar{\rho}\tilde{\epsilon} + \dot{W}^s \quad (2.23)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho}\tilde{\epsilon}) + \nabla \cdot (\bar{\rho}\tilde{u}\tilde{\epsilon}) &= -\left(\frac{2}{3}C_{\epsilon_1} - C_{\epsilon_3} \right) \bar{\rho}\tilde{\epsilon} \nabla \cdot \tilde{u} + \nabla \cdot \left(\frac{\mu_{eff}}{Pr_\epsilon} \nabla\tilde{\epsilon} \right) \\ &+ \frac{\tilde{\epsilon}}{\tilde{k}} \left(C_{\epsilon_1} \tau : \nabla\tilde{u} - C_{\epsilon_2}\bar{\rho}\tilde{\epsilon} + C_s\dot{W}^s \right) \end{aligned} \quad (2.24)$$

Der Einfluss des Impulses der Flüssigphase auf die Turbulenz der Gasphase wird durch den Senkenterm \dot{W}^s berücksichtigt. Die zugehörigen Modellkonstanten in Gl. (2.23)-(2.24) sind in Tabelle 2.1 dargestellt. Die effektive Viskosität μ_{eff} setzt sich additiv aus laminarer und turbulenter Viskosität zusammen, wobei die turbulente Viskosität die dominante Größe ist ($\mu_t \gg \mu_l$) [151].

$$\mu_{eff} = \mu_l + \mu_t \quad \text{mit} \quad \mu_t = \bar{\rho} \nu_t = \bar{\rho} C_\mu \frac{\tilde{k}^2}{\tilde{\epsilon}} \quad (2.25)$$

C_μ	C_{ϵ_1}	C_{ϵ_2}	C_{ϵ_3}	Pr_k	Pr_ϵ	C_s
0.09	1.44	1.92	-1.0	1.0	1.3	1.5

Tab. 2.1: Empirische Konstanten des k - ϵ -Turbulenzmodells in *Kiva-3v* [7]

In Wandnähe verliert das k - ϵ -Modell seine Gültigkeit, da sich infolge der Reibungskräfte die Strömung laminarisiert und die Geschwindigkeit sowie deren Fluktuation unmittelbar an der Wand zu Null werden. Die Berücksichtigung des Grenzschichtcharakters erfolgt über Wandfunktionen (siehe dazu Amsden et al. [7]).

2.4 Mathematische Beschreibung der Flüssigphase

Ausgangspunkt der mathematischen Beschreibung der Flüssigphase stellt die Charakterisierung der Strömungsregimes der Flüssigphase dar und deren Kopplung an die Gasphase. In Einphasenströmungen werden nach der kinetischen Gastheorie die Regimes aus freier Molekularbewegung und Kontinuumsströmung durch die Knudsen-Zahl Kn beschrieben. Sie ist definiert als Verhältnis aus mittlerer freier Weglänge l und einer makroskopischen Längenskala L .

$$Kn = \frac{l}{L} \quad (2.26)$$

⁴Streng genommen stellt \tilde{k} die spezifische turbulente kinetische Energie dar, wird aber meist in der Literatur wie auch in dieser Arbeit als turbulente kinetische Energie bezeichnet.

Für große Knudsen-Zahlen $Kn > 10$ dominieren Stöße mit der Berandung des Strömungsgebiets und das Regime wird als freie Molekularbewegung bezeichnet. Für kleine Knudsen-Zahlen $Kn < 0.01$ sind Kollisionen im Gas treibende Kräfte und die Strömung darf als Kontinuum behandelt werden [47].

Für Zweiphasenströmungen ist eine analoge Charakterisierung der Strömungsregimes möglich [30, 31]. Die zur Knudsen-Zahl äquivalente Kenngröße ist die Stokes-Zahl St . Sie ist definiert als Verhältnis der aerodynamischen Relaxationszeit τ_a , die das dynamische Ansprechverhalten des Tropfens auf eine veränderte Strömung in seiner Umgebung beschreibt, und der mittleren Zeit τ_k zwischen zwei aufeinander folgenden Stößen zweier benachbarter Tropfen.

$$St = \frac{\tau_a}{\tau_k} = \frac{u_{Tr} \tau_a}{\lambda_k}. \quad (2.27)$$

Mit der Tropfengeschwindigkeit u_{Tr} kann die Stokes-Zahl auch mit charakteristischen Längen formuliert werden, wobei λ_k eine Art mittlere freie Weglänge zwischen Stößen in Analogie zur kinetischen Gastheorie darstellt. Bei Stokes-Zahlen $St > 1$ wird die Tropfendynamik durch Kollisionen kontrolliert, und es wird von einem *dichtem* Strahl gesprochen. Bei Stokes-Zahlen $St < 1$ liegt ein *verdünnter* Strahl vor. In diesem Fall besteht für die Tropfen ausreichend Zeit, sich dynamisch der Gasströmung anzupassen, ehe sie in Kollisionen eingehen.

An die Art der Kopplung von Flüssig- und Gasphase ist auch die Vorgehensweise bei der Modellfindung angelehnt. Grundsätzlich ist eine Klassifizierung der Modelle in *lokal homogene Zweiphasenströmung* und *getrennte Zweiphasenströmung* möglich.

Lokal homogene Zweiphasenströmung (engl. „locally homogeneous flow“, LHF)

Die LHF-Methode setzt dynamisches Phasengleichgewicht voraus, d.h. eine Relativbewegung zwischen Tropfen und Gas existiert nicht. Diese restriktive Annahme ist für hinreichend kleine Tropfen erfüllt. Die Berechnung der Flüssigphase erfolgt analog zum Einphasenfluid mit variabler Dichte (siehe Faeth [42]). Thermodynamisches Gleichgewicht muss nicht zwangsweise bestehen, so dass ein Energieaustausch zwischen den Phasen möglich ist.

Getrennte Zweiphasenströmung (engl. „separated flow“, SF)

Die SF-Methode berücksichtigt den Austausch von Masse, Impuls und Energie zwischen den Phasen. Eine direkte deterministische⁵ Behandlung dieser Prozesse ist für motorische Einspritzstrahlen mit vielen Millionen Tropfen aus Rechenzeitgründen nicht möglich. Darüber hinaus erschweren die unbekanntenen mikroskopischen Anfangs- und Randbedingungen eine DNS. Die Tropfendynamik wird daher statistisch durch Einführung einer Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion ψ beschrieben.

$$\psi(\vec{x}, \vec{u}_{Tr}, r_{Tr}, T_{Tr}, t) = \frac{d^8 N}{d\vec{x} d\vec{u}_{Tr} dr_{tr} dT_{Tr}} \quad (2.28)$$

Sie gibt die Wahrscheinlichkeit an, N Tropfen im Volumenelement $d\vec{x}$ am Ort \vec{x} zur Zeit t mit der Geschwindigkeit $(\vec{u}_{Tr}, \vec{u}_{Tr} + d\vec{u}_{Tr})$, dem Radius $(r_{Tr}, r_{Tr} + dr_{Tr})$ und der Temperatur $(T_{Tr}, T_{Tr} + dT_{Tr})$ vorzufinden. Mindestens diese acht Dimensionen sind für eine minimale Abbildung der motorisch relevanten Prozesse erforderlich. Je nach Detaillierungsgrad lässt sich der

⁵d.h. auf Basis jedes einzelnen Tropfens

8-dimensionale Phasenraum um zusätzliche Freiheitsgrade erweitern, wie z.B. um turbulente Eigenschaften der Tropfen.

Die Beschreibung der räumlichen und zeitlichen Entwicklung der PDF ψ erfolgt in Anlehnung an die Boltzmann-Gleichung der kinetischen Gastheorie, welche die mikroskopische Dynamik von Atomen und Molekülen beschreibt. Williams [166] hat die Boltzmann-Gleichung auf die Tropfendynamik übertragen und daraus die *Strahlgleichung* (engl. „spray equation“) abgeleitet.

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} + \nabla_{\vec{x}} \cdot (\psi \dot{\vec{x}}_{Tr}) + \nabla_{\vec{u}} \cdot (\psi \dot{\vec{u}}_{Tr}) + \frac{\partial}{\partial r_{Tr}} (\psi \dot{r}_{Tr}) + \frac{\partial}{\partial T_{Tr}} (\psi \dot{T}_{Tr}) = \dot{f} \quad (2.29)$$

Die Terme auf der linken Seite beinhalten neben der Zeitableitung selbst die zeitlichen Änderungen von Ort $\dot{\vec{x}}_{Tr}$, Geschwindigkeit $\dot{\vec{u}}_{Tr}$, Radius \dot{r}_{Tr} und Temperatur \dot{T}_{Tr} der Tropfen. Sie repräsentieren die kontinuierlichen Prozesse, bis auf die turbulente Dispersion, die über die momentane Gasgeschwindigkeit explizit in der Tropfenbeschleunigung $\dot{\vec{u}}_{Tr}$ (siehe Kap. 4.4) enthalten ist. Der Term \dot{f} auf der rechten Seite beschreibt alle diskontinuierlichen Prozesse wie Tropfenbildung während der Einspritzung, Zerfall, Koaleszenz und Kollision, durch welche die Tropfenanzahl nicht erhalten bleibt. Eine ausführliche Darstellung des Stoßterms \dot{f} ist bei Subramaniam [145] zu finden.

Die Strahlgleichung (2.29) stellt eine hochdimensionale partielle Integro-Differentialgleichung dar. Eine analytische Lösung ist nur unter äußerst restriktiven Annahmen möglich. Zur numerischen Lösung der Strahlgleichung existieren zwei Ansätze:

1. *Zwei-Fluid-Modell* (engl. „Two-Fluid Model“)
2. *Stochastisches Tropfenmodell* (engl. „Stochastic Droplet Model“)

Die Vor- und Nachteile beider Ansätze werden ausführlich von Crowe [30], Durst et al. [38] und Stock [141] diskutiert und hier zusammenfassend vorgestellt.

Das *Zwei-Fluid-Modell* behandelt Flüssig- und Gasphase als interagierende und sich durchdringende Kontinua. Die Euler'sche Formulierung (ortsfestes Bezugssystem) der dispersen Phase erlaubt eine durchgängige Diskretisierung der PDF ψ in allen Dimensionen des Phasenraums. Die Rechenzeitanforderung ist jedoch extrem hoch. Zum einen resultiert diese aus der hohen Dimensionalität von ψ und zum anderen aus dem numerisch diffusiven Charakter, dessen Reduzierung wiederum eine feine Diskretisierung erfordert. Für motorische Einspritzstrahlen stellt diese Methode keine Alternative dar. Stattdessen finden sich in der Literatur vereinfachte Formen des Zwei-Fluid-Modells wieder, welche die PDF ψ lediglich im Ortsraum (\vec{x}) mit Euler'schen und den Phasenraum ($\vec{u}_{Tr}, r_{Tr}, T_{Tr}$) mit Lagrange'schen Koordinaten diskretisieren. Ein solches, als Euler-Euler-Methode bezeichnetes Konzept stellt z.B. das „Interactive Cross-Section Averaged Spray“ (ICAS) Modell dar, das von Krüger [77] auf dieselmotorische Einspritzstrahlen appliziert wurde. Diese Pilotapplikation wurde als Einbettungsverfahren umgesetzt, in welchem der Einspritzstrahl eindimensional entlang der Strahlachse mit einem eigenständigen Löser berechnet wird und durch Austausch von Masse, Impuls und Energie an das motorische CFD-Programm gekoppelt ist. Gegenwärtig wird auch an 3D-Euler-Ansätzen gearbeitet (z.B. Berg et al. [14]).

Im *stochastischen Tropfenmodell* wird die PDF ψ durch eine endliche Anzahl repräsentativer Teilchen, so genannten Partikeln (engl. „parcels“, [29]), diskretisiert. Diese Vorgehensweise ist exemplarisch in Abb. 2.1 veranschaulicht. Das Ensemble der Partikel repräsentiert das Tropfenensemble mit identischen physikalischen Eigenschaften (Ort, Geschwindigkeit und Temperatur der

Tropfen). Die statistische Gewichtung der jeweiligen Eigenschaft erfolgt über die Partikelmasse. Entsprechend sind für eine repräsentative Aussage über die PDF ψ hinreichend viele Partikel erforderlich. Die Partikelanzahl richtet sich folglich nach der statistischen Konvergenz, d.h. der ausreichend genauen Diskretisierung von ψ . Die Bewegung der Partikel wird in tropfenfesten Bezugskoordinaten (Lagrange'sche Betrachtungsweise) durch explizite Zeitintegration entlang der Tropfentrajektorie berechnet, wodurch Konvergenzprobleme vermieden werden. Die kontinuierlichen Prozesse von Gl. (2.29) werden deterministisch auf Partikel-Ebene gelöst, während die diskontinuierlichen Prozesse sowie die turbulente Dispersion nach Dukowicz [37] mittels eines Monte-Carlo-Verfahrens stochastisch bestimmt werden. Das Partikel sieht dem realen Tropfen zwar sehr ähnlich, jedoch ist nicht zu vergessen, dass es lediglich statistischen Charakter hat. Die üblicherweise in der Literatur veröffentlichten Simulationen zeigen den Einspritzstrahl in Partikel-Darstellung, welche lediglich Aufschluss über die räumliche Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Tropfen gibt. Da die Tropfenanzahl von Partikel zu Partikel unterschiedlich sein kann, würde eine Aussage über die physikalischen Eigenschaften, wie z.B. der Flüssigmasse, schnell zur Missinterpretation des Ergebnisses führen. Der Gasströmung liegt nach wie vor ein ortsfestes Bezugssystem (Euler'sche Betrachtungsweise) zugrunde.

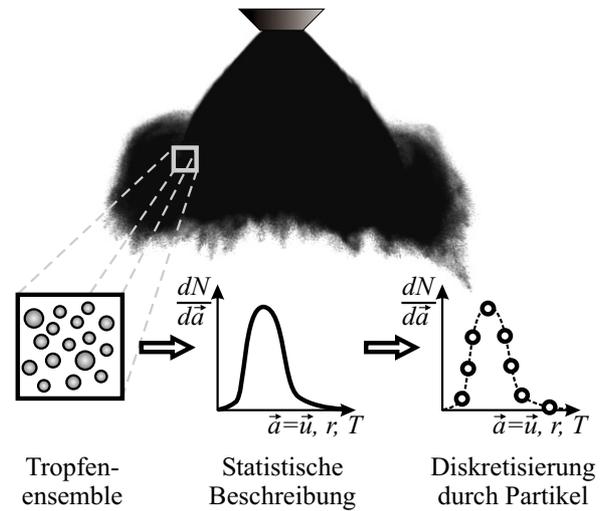


Abb. 2.1: Das Tropfenensemble wird durch eine statistische Verteilung beschrieben und durch stochastische Partikel diskretisiert.

Aufgrund der angesprochenen hohen Rechenzeitanforderungen der Zwei-Fluid-Methode hat sich das diskrete Tropfenmodell zur Simulation von Einspritzprozessen etabliert. Es ist in vielen CFD-Programmen (z.B. *Kiva-3v* [8], *StarCD* [22], *Fire* [11]) verfügbar und dient auch im Rahmen der vorliegenden Arbeit als Fundament für die Modellierung der Einspritzung mit A-Düsen. Um auf Basis dieser Beschreibungsweise zu einer vollständig geschlossenen Form der Strahlgleichung zu gelangen, müssen die unbestimmten Terme (\vec{u}_{Tr} , r_{Tr} , T_{Tr} und f) von Gl. (2.29) unter Berücksichtigung der Gasströmung modelliert werden. Derartige Modelle, welche die problemrelevanten physikalischen Prozesse der Benzin-Direkteinspritzung abbilden, werden in den folgenden Kapiteln vorgestellt. Zunächst werden jedoch die Einspritzstrahlcharakteristik sowie die numerischen Gesichtspunkte für eine realistische Beschreibung der Einspritzung diskutiert.

Kapitel 3

Phänomenologische und numerische Betrachtung des Einspritzstrahls

In diesem Kapitel werden die Phänomenologie des Einspritzstrahls von A-Düsen vorgestellt und die grundlegenden numerischen Gesichtspunkte diskutiert, die es bei der 3D-Simulation von Einspritzvorgängen zu berücksichtigen gilt. Zur Veranschaulichung der Abhängigkeiten wurden im Rahmen dieser Arbeit numerische Einspritzstrahlberechnungen für A-Düsen durchgeführt. Das Hauptaugenmerk der numerischen Sensitivitätsstudie ist auf die Diskretisierung des Rechengitters sowie die Konvergenz der Zweiphasenströmung gerichtet. Anhand der gewonnenen Erkenntnisse wird abschließend die Vorgehensweise für eine konsistente und numerisch fundierte 3D-Simulation der Einspritzung und Gemischbildung mit A-Düsen erarbeitet.

3.1 Phänomenologie des Einspritzstrahls

Die Piezo-A-Düse (siehe Abb. 1.3) ist eine nach außen öffnende Düse. Angesteuert durch einen Piezo-Aktuator gibt die Düsennadel einen kegelstumpfförmigen Ringspalt frei, über den sich der ausbreitende Kraftstoff zu einem Hohlkegelstrahl formiert. Dessen Ausbreitungsverhalten ist stark abhängig von der Dichte des Mediums, in das er eingespritzt wird. Unter atmosphärischen Bedingungen, wie sie nahezu bei saugsynchroner Einspritzung vorliegen, sind die auf die Tropfen wirkenden aerodynamischen Kräfte gering und der Strahl dringt gegen nur geringen Widerstand in seine Umgebung ein. Mit zunehmender Dichte nehmen die aerodynamischen Kräfte zu und Zerfallsprozesse (siehe Kap. 4.1.3) gewinnen an Bedeutung. Zudem kommt es zu einem verstärkten Impulsaustausch zwischen Strahl und Gas, wodurch sich im inneren und äußeren Bereich des Hohlkegelstrahls Rezirkulationsgebiete in Torusform bilden, die so genannten Randwirbel. Für das strahlgeführte Brennverfahren sind diese von entscheidender Bedeutung. Zum einen führt die Wirbelbewegung zu einer intensiven Durchmischung von Kraftstoff und Luft, wodurch sich die lokal fetten Zonen abmagern. Zum anderen wirken sich die im Vergleich zum Strahlkern niedrigeren Geschwindigkeiten und das geringere Turbulenzniveau in den Rezirkulationsgebieten günstig auf die Entflammung des Gemisches aus. Die Mechanismen, die zur Randwirbelentstehung führen, werden im folgenden Abschnitt erörtert.

Im Injektor wird der flüssige Kraftstoff durch die anliegende Druckdifferenz beschleunigt und tritt am Austritt, sofern Kavitationseffekte vernachlässigbar sind, als rein flüssiger, lamellenförmiger Strahlkern aus. Der sich anschließende primäre Strahlaufbruch führt zu fein zerstäubten Tropfen mit hoher Tropfenkonzentration im Düsennahbereich. Durch den hohen Strahlimpuls wird die Gasphase verdrängt und infolge viskoser Kräfte mit den Tropfen beschleunigt. In Ana-

logie zum ebenen Freistrah¹ einphasiger Fluide (siehe Schlichting und Gersten [127]) bilden sich an den Strahlrändern durch die großen Geschwindigkeitsgradienten Scherschichten aus, die eine Zunahme der turbulenten Schwankungsbewegung der Gasphase zur Folge haben. Die Interaktion der Turbulenz der Gasphase mit der dispersen Phase führt zu einem turbulenten Impulsaustausch, durch den die Aufweitung des Einspritzstrahles resultiert. Infolge der turbulenten Vermischung werden stromab zunehmend größere Luftmassen mitgerissen, was das Einsaugen von Luft in den Strahlbereich (engl. „entrainment“) und eine dadurch induzierte Gasströmung bewirkt (siehe Abb. 3.1). Dadurch nimmt stromab der Massenstrom zu, während sich durch aerodynamische Wechselwirkung von Tropfen und Gas der Impuls der Flüssigphase reduziert. Nachfliegende Tropfen erfahren aufgrund der bereits beschleunigten Strömung durch den Impulsübertrag der vorausfliegenden Tropfen einen geringeren Widerstand, wodurch es während der Einspritzung zu permanenten Überholvorgängen kommt. An der Strahlspitze findet eine zunehmende Akkumulation von Tropfen statt, im Besonderen der größeren Tropfen. Die kleineren Tropfen befinden sich aufgrund ihres großen Widerstands-Trägheits-Verhältnisses annähernd im dynamischen Gleichgewicht mit der Gasphase. Sie werden mit der induzierten Gasbewegung in den äußeren und inneren Hohlkegelbereich mit bewegt. Die größeren Tropfen mit höherer Trägheit bewegen sich dagegen erst allmählich mit der Gasströmung mit. Mit zunehmender Einspritzdauer und damit nachfließendem Impuls wird dieser Effekt verstärkt, und es bildet sich der Randwirbel aus. Das Phänomen Randwirbel ist, wenn auch von geringer Intensität, bei Vollkegelstrahlen, wie z.B. der dieselmotorischen Einspritzung, anhand der „Pilzform“ des Einspritzstrahles zu beobachten.

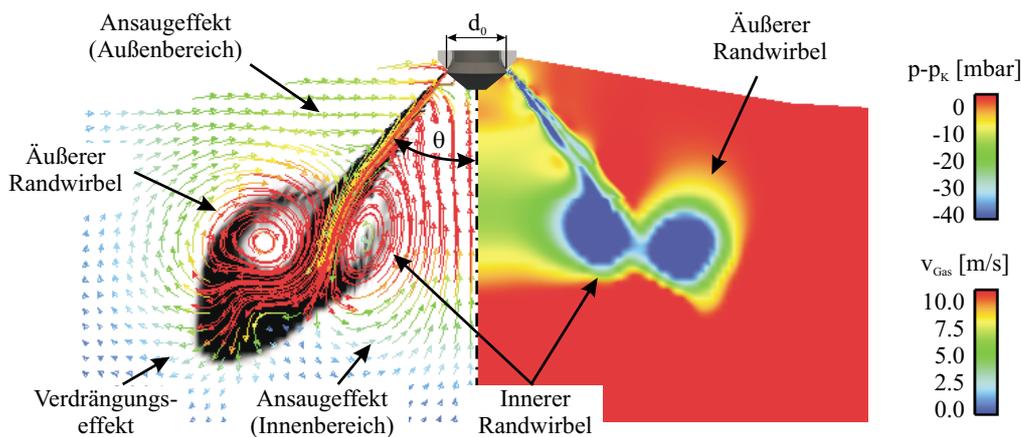


Abb. 3.1: Strahlausbreitung bei einer A-Düse nach $t_{ASB} = 0.8 \text{ ms}$ unter Hochdruckbedingungen $p_K = 6 \text{ bar}$: Geschwindigkeitsfeld der Gasphase hinterlegt mit Massenanteil der Flüssigphase (links) und statische Druckverteilung (rechts) im Vertikalschnitt (x - z -Ebene).

Die Form und Lage des Randwirbels wird maßgeblich durch die eingesaugte Luftmenge bestimmt. Begrenzende Faktoren für die Ansaugmengen sind die Zuströmflächen im Innen- und Außenbereich des Hohlkegels. Bei A-Düsen mit einem Strahlwinkel $\theta \approx 80^\circ$ und einem Nadeldurchmesser $d_0 \approx 4 \text{ mm}$ liegt im äußeren Bereich des Hohlkegelstrahls eine über doppelt so große Fläche vor als im inneren. Dadurch kann außen genügend Luft zuströmen, während sich im Inneren die vom Strahl angesaugte Luftmenge nur über eine höhere Strömungsgeschwindigkeit bereitstellen lässt. Folglich sinkt der statische Druck im Inneren und durch das anliegende Druckgefälle zwischen Außen- und Innenbereich kommt es zur Strahlablenkung in Richtung der Düsenachse (siehe Abb. 3.1). Entsprechend ist die Ausprägung des äußeren Randwirbels deutlich größer als die des inneren.

¹Da der Nadeldurchmesser deutlich größer als der Hub $d_0 \gg h$ ist, kann die azimutale Strahlkrümmung vernachlässigt und der Hohlkegelstrahl von A-Düsen als ebener Strahl betrachtet werden.

Die laminare Viskosität ist in turbulenten Strömungen vergleichsweise klein ($\mu_l \ll \mu_t$) und kann vernachlässigt werden. Die turbulente Viskosität ist die dominante netzabhängige Größe, da sie die turbulente kinetische Energie \tilde{k} beinhaltet, welche sich gemäß Gl. (2.23) quadratisch zum Geschwindigkeitsgradienten $\nabla \tilde{u}$ verhält. Werden in den Scherschichten aufgrund von mangelnder Netzfeinheit die Geschwindigkeitsgradienten nicht aufgelöst, wird die Produktion der turbulenten kinetischen Energie \tilde{k} unterschätzt. Die Folge ist ein zu geringer turbulenter Impulsaustausch, der schließlich zu einer geringeren Aufweitung und größeren Eindringung des Strahls führt. Dem entgegen wirkt die numerische Viskosität μ_{num} . Sie resultiert aus den Abbruch- und Rundungsfehlern der verwendeten Diskretisierungsschemata. Die Größenordnung der numerischen Fehler ist stark abhängig von der Gitterfeinheit, der Strömungsrichtung relativ zur Netzzelle und der Ordnung der Diskretisierungsschemata. Um eine konvergente Lösung zu erzielen, muss die numerische Viskosität sehr viel geringer als die physikalische Viskosität sein ($\mu_{num} \ll \mu_l + \mu_t$). Ansonsten werden nicht-aufgelöste physikalische Prozesse durch numerische Fehler kompensiert, wobei es sich keinesfalls um einen definierten Ausgleichsprozess handelt, der unabhängig von der Ortsauflösung ein Gleichgewicht von numerischer und turbulenter Diffusion beinhaltet.

Eine aus numerischer Sicht höhere Genauigkeit bei gleichzeitig reduzierter Zellanzahl ist mit adaptiven Gittern zu erzielen. Gerade bei Einspritzprozessen, bei denen die Strömung eine eindeutige Vorzugsrichtung aufweist, führen strahlangepasste Rechennetze zu einer erheblichen Reduzierung des numerisch diffusiven Verhaltens. Gleichzeitig erlaubt diese Art der Netztopologie gegenüber konventionellen kartesischen Rechennetzen eine räumlich sehr feine Diskretisierung von Bereichen mit kleinsten Längenskalen und umgekehrt eine gröbere Auflösung unkritischer Bereiche. A-Düsen weisen die besondere Eigenschaft auf, dass unter der Voraussetzung von Homogenität der Strömungsvariablen in Umfangsrichtung ihr Strahlbild eine Rotationssymmetrie aufweist. Unter Ausnutzung der Symmetrie lässt sich gemäß Abb. 3.3 das 3D-Problem auf ein quasi-2D-Problem² mit zyklischen Randbedingungen reduzieren, so dass über eine feinere räumliche Diskretisierung selbst der Düsenaustritt aufgelöst werden kann.

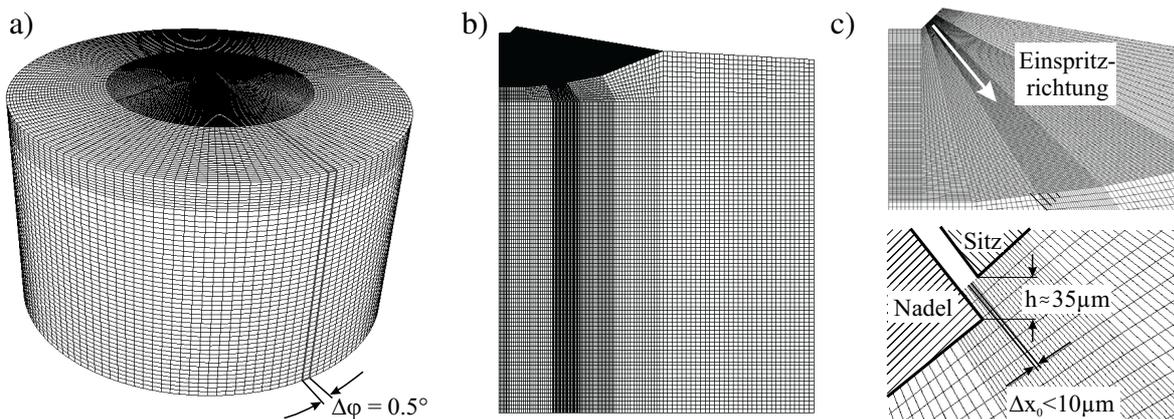


Abb. 3.3: Strahladaptives Rechennetz mit Düsenaustrittsauflösung für einen vereinfachten ottomotorischen Brennraum: a) 3D Rechennetz, b) Rotationssymmetrisches 0.5° Sektorrechennetz (siehe Tab. 3.2, Nr. 2), c) Strahladaptierung und Auflösung des Düsenaustrittsbereichs.

Die angesprochene Diskretisierungsproblematik wird im Folgenden am Beispiel des Einspritzstrahls einer Piezo-A-Düse diskutiert und anhand von diagnostischen Messdaten in einer Hochdruckkammer verifiziert. Die charakteristischen Kenngrößen des Versuchsinjektors sowie die zugehörigen Randbedingungen sind in Tab. 3.1 dargestellt. Zur Modellierung wurde das an die Düseninnenströmung gekoppelte Strahlmodell für A-Düsen aus Kap. 4.5 herangezogen.

²Die Gültigkeit dieser Annahme ist auf RANS-Simulationen (siehe Kap. 2.3) beschränkt.

Gaszusammensetzung	Luft
Kammertemperatur T_K	293 K
Kammerdruck p_K	6 bar
Kraftstofftyp	n-Heptan (C ₇ H ₁₆)
Kraftstofftemperatur T_F	293 K
Einspritzdruck p_R	100 bar
Turbulente kinetische Energie k_0	1 m ² /s ²
Turbulente Längenskala $L_{t,0}$	1 mm
Düsenadeldurchmesser d	4.3 mm
Geometrischer Austrittswinkel θ	80°

Tab. 3.1: Randbedingungen und spezifische Kenngrößen der Piezo-A-Düse.

Zur Veranschaulichung des Einflusses der Gitterauflösung und -topologie auf die physikalischen Größen werden fünf Rechenetze (siehe Tab. 3.2) herangezogen. Die Simulationen wurden unter Voraussetzung von Rotationssymmetrie in Analogie zu dem in Abb. 3.3 dargestellten Gitter auf einer 0.5°-Zellschicht mit zyklischen Randbedingungen durchgeführt.

Nr.	Topologie	Zellgröße a.d. Düse $\Delta x_0 \times \Delta y_0$	Zellanzahl
1	adaptiv	0.005 × 0.075 mm	27148
2	adaptiv	0.01 × 0.1 mm	21028
3	adaptiv	0.1 × 0.125 mm	6184
4	kartesisch	0.1 × 0.1 mm	36612
5	kartesisch	0.5 × 0.5 mm	6290

Tab. 3.2: Gittereigenschaften der Netzstudie

In Abb. 3.4 a) ist die turbulente kinetische Energie \tilde{k} normal zur Strahlmittellinie in 1 mm Entfernung vom Düsenaustritt dargestellt. Der Netzeinfluss auf die Turbulenz der Gasphase ist gravierend. Die detaillierteste physikalische Beschreibung ist erwartungsgemäß mit dem feinen strahladaptiven Rechenetz mit einer Düsenaustrittsauflösung von $\Delta x_0 = 5 \mu\text{m}$ zu erzielen und spiegelt sich in den beiden für Scherschichtenströmungen charakteristischen Turbulenzmaxima wider. Nahezu identisch verhält sich das adaptive Gitter mit einer Zellkantenlänge von $\Delta x_0 = 10 \mu\text{m}$, was auf die Auflösung des Düsenaustritts zurückzuführen ist. Auf dem groben adaptiven Gitter ($\Delta x_0 = 0.1 \text{ mm}$) ist das Turbulenzniveau ähnlich, jedoch ist eine Auflösung der Scherschichten nicht möglich. Mit kartesischen Gittern lassen sich solche Netzfeinheiten mit vergleichbarer Zellanzahl aus topologischen Gründen nicht realisieren (vgl. Tab. 3.2). Auch unter Inkaufnahme einer höheren Zellanzahl wird bei gleicher Auflösung ($\Delta x_0 = 0.1 \text{ mm}$) auf dem kartesischen Gitter, allein aufgrund der Einspritzrichtung relativ zum Netz, die turbulente kinetische Energie \tilde{k} überschätzt. Für das grobe kartesische Gitter, welches mit einer Auflösung von $\Delta x_0 = 0.5 \text{ mm}$ eine für motorische 3D-Rechenetze typische Zellgröße aufweist, zeigt sich ein unphysikalischer Verlauf von \tilde{k} , gekennzeichnet durch eine falsche Lage des Maximums sowie ein überhöhtes Turbulenzniveau über einen zu breiten Strahlbereich. Die Folge ist ein zu hoher effektiver Impulsaustausch normal zur Strömungsrichtung, der sowohl aus dem zu breiten Turbulenzverlauf als auch dem numerisch diffusiven Verhalten resultiert und nach Abb. 3.4 b) zu einer deutlichen Überschätzung des Dispersionswinkels³ $\Delta\theta_5$ führt. Auch für das feine kartesische Gitter ($\Delta x_0 = 0.1 \text{ mm}$) wird aufgrund der zu hohen Turbulenz die Strahlaufweitung überbewertet. Erst mit der Abbildung der Scherströmung, also der Auflösung des Düsenaustritts und der Gitteraus-

³Der Dispersionswinkel $\Delta\theta_5$ dient als Maß für die Strahlaufweitung und wird 5 mm unterhalb der Abspritzkante der Düse ermittelt.

richtung in Einspritzrichtung, ergibt sich eine realistische Berechnung der Strahlaufweitung, die für die beiden Gitter mit $\Delta x_0 = 5 \mu\text{m}$ bzw. $10 \mu\text{m}$ nahezu identisch ist.

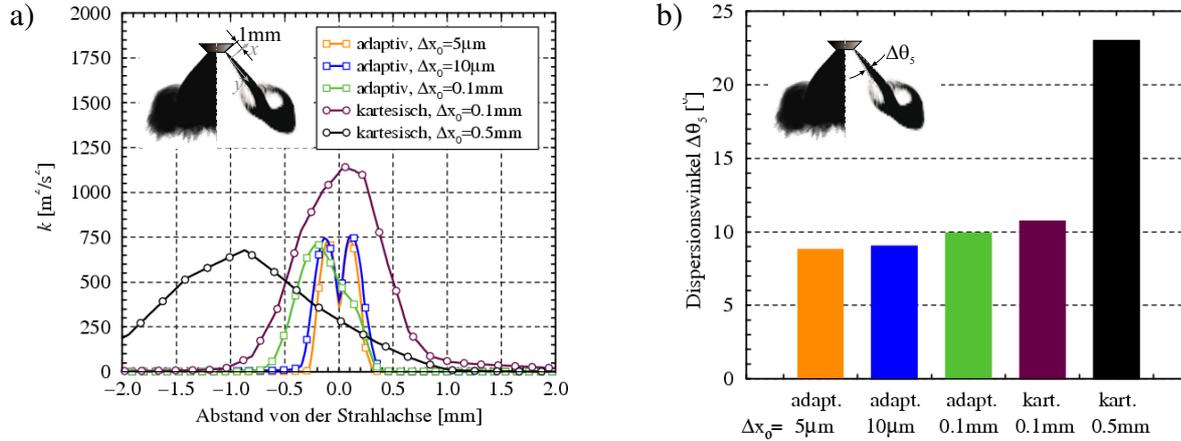


Abb. 3.4: Einfluss der Feinheit und Topologie des Rechengitters auf a) die turbulente kinetische Energie \tilde{k} in einem Schnitt normal zur Strahlmittellinie in 1 mm Entfernung vom Düsenaustritt und b) den Dispersionswinkel $\Delta\theta_5$ des Einspritzstrahls bei $t = 0.6 \text{ ms}$ n.ASB.

Die Auswirkung der Feinheit und Topologie des Gitters auf die Strahleindringung ist nach den dargestellten Wirkungsmechanismen im Düsennahbereich naheliegend. In Abb. 3.5 ist die berechnete axiale und radiale Eindringung des Hohlkegelstrahls den experimentellen, über die Strahlfront und den Umfang gemittelten Werten gegenübergestellt. Je größer das Rechenetz diskretisiert ist, desto größer ist der Fehler bei der Berechnung der Relativgeschwindigkeit und der Strahlaufweitung. Zudem nimmt, wie von Abraham [1] anhand numerischer Untersuchungen an Freistrahlen gezeigt wurde, mit abnehmender Netzfeinheit die Abhängigkeit der Strahlstruktur signifikant von den anfänglichen turbulenten Längen- und Zeitskalen zu. Als Folge der unzureichenden Diskretisierung wird die axiale und radiale Strahleindringung zu gering berechnet. Der auf groben Gittern unphysikalischen Abhängigkeit der Strahlform von der Umgebungsturbulenz kann durch Einführung einer Längenskalen⁴-Begrenzung indirekt entgegengewirkt werden [77]. Die direkte Maßnahme, die gleichzeitig die korrekte Berechnung der Relativgeschwindigkeit beinhaltet, liegt in der Verwendung von düsenaustrittsauflösenden, strahladaptiven Gittern. Mit ihnen ist, wie der Verlauf der Eindringkurven für die adaptiven Gitter mit $\Delta x_0 = 5 \mu\text{m}$ bzw. $10 \mu\text{m}$ Zellgröße in Abb. 3.5 zeigt, die beste Übereinstimmung gegenüber dem Experiment zu erzielen. Dies bestätigt zudem der qualitative Strahlvergleich der Simulation mit dem feinen adaptiven Gitter $\Delta x_0 = 10 \mu\text{m}$ und den Schattenrissaufnahmen in Abb. 3.6. Beide Rechenetze bilden die Prozesse im Düsennahbereich ähnlich detailliert ab, so dass sich auch ihre axialen und radialen Strahlpenetrationen nahezu identisch verhalten. Demzufolge ist für das adaptive Gitter die numerische Lösung bereits mit einer Zellkantenlänge von $\Delta x_0 = 10 \mu\text{m}$ am Düsenaustritt, d.h. mit drei Zellen pro Zellschicht, gegenüber der Netzfeinheit konvergiert. Zusammen mit den hier und in der Literatur (siehe [1, 77]) gewonnenen Erkenntnissen ist festzuhalten, dass eine vorhersagefähige Simulation der Einspritzung nur mit düsenaustrittsauflösenden, strahladaptiven Gittern sowie einem räumlichen Diskretisierungsschema mit höherer Ordnung erzielbar ist.

Subramaniam und O'Rourke [144] verweisen darauf, dass das starke netzabhängige Verhalten u.a. aus unzureichend genauen Interpolationsverfahren resultiert, welche einerseits die mittleren Tropfeneigenschaften und die Quellterme auf das Gasphasen-Rechenetz und umgekehrt die Strömungsvariablen auf den Partikelort projizieren. In erster Linie ist der numerischen Berech-

⁴Die berechnete turbulente Längenskala wird auf ihren Maximalwert, den Strahldurchmesser, begrenzt.

nung der Relativgeschwindigkeit die wesentliche Bedeutung beizumessen. Bei den hier verwendeten feinen, düsenaustrittsauflösenden Rechennetzen konnte unter Verwendung eines Interpolationsverfahrens mit linearen Ansatzfunktionen kein Einfluss festgestellt werden.

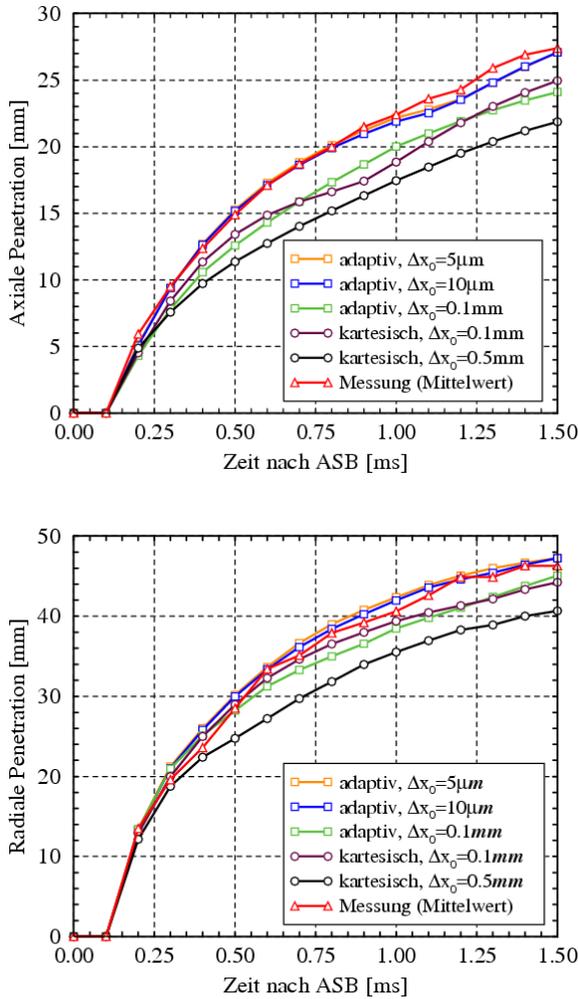


Abb. 3.5: Einfluss der Feinheit und Topologie des Rechnetzes auf die axiale (oben) und radiale (unten) Penetration des Einspritzstrahls einer A-Düse.

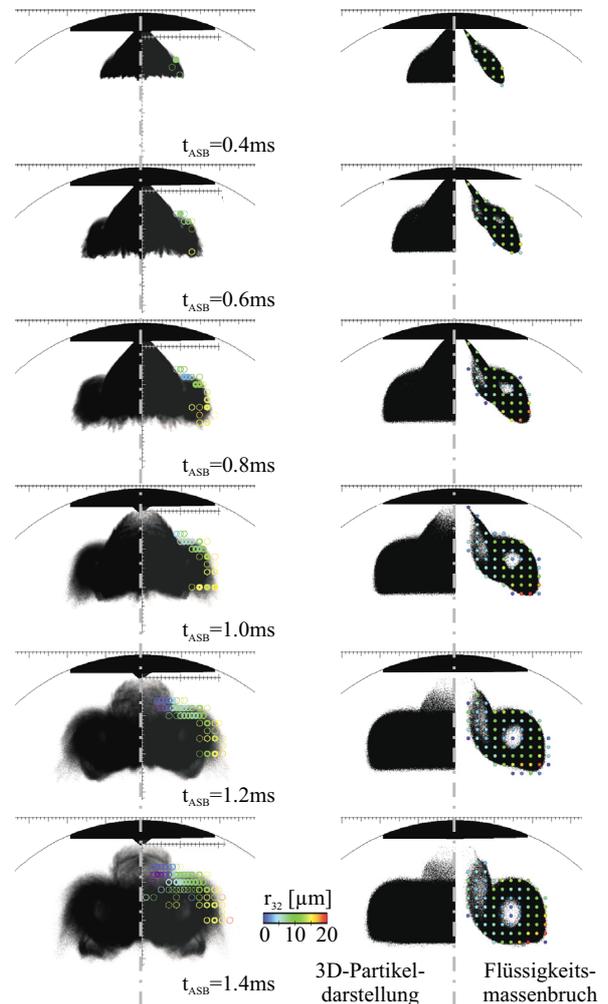


Abb. 3.6: Gegenüberstellung von Diagnostik und 3D-Simulation für das adaptive Gitter mit $\Delta x_0 = 10 \mu m$ (rechts: 3D-Partikeldarstellung und 2D-Flüssigkeitsmassenbruch).

3.2.2 Statistische Konvergenz

Bei zweiphasigen Strömungen müssen zur Erzielung einer konvergenten numerischen Lösung Kriterien in zweierlei Hinsicht erfüllt werden. Einerseits erfordert die für die Gasphase applizierte Finite-Volumen-Methode, dass die Kantenlänge der Rechenzellen gegen Null ($\Delta x \rightarrow 0$) strebt. Andererseits verlangt das diskrete Tropfenmodell zur Erlangung einer konvergenten Lösung der statistischen Eigenschaften eine infinitesimal kleine Diskretisierungsschrittweite der PDF ψ aus Gl. (2.28) durch eine gegen unendlich strebende Anzahl an numerischen Partikeln ($N_Z \rightarrow \infty$). Die für die statistische Konvergenz relevante Größe stellt also die Partikelanzahl N_Z pro Rechenzelle dar. In der Simulation muss daher stets eine hohe Partikelanzahl pro Zelle gewährleistet sein.

Das statistische Konvergenzverhalten ist zudem abhängig vom abzubildenden Einzelprozess. Besonders kritisch sind Stoßprozesse, da sie über langsam konvergierende Zweipunkt-Korrelationen abgebildet werden und dadurch extrem viele Partikeln erfordern. Gerade im Düsenbereich ist

bei feinen Gittern die Partikelanzahl pro Zelle zur Abbildung der Stoßprozesse zu gering. Gleiches gilt für die deterministische Beschreibung der turbulenten Dispersion, bei der die Partikel die turbulenten Fluktuationen wiedergeben müssen. Andere statistische Eigenschaften, wie z.B. der mittlere Tropfendurchmesser, konvergieren deutlich schneller und lassen sich mit entsprechend weniger Partikeln abbilden.

Die Schwierigkeit bei der Erzielung einer statistisch konvergenten Lösung liegt darin, dass sich die Partikelanzahl pro Zelle nur indirekt über die Gesamtpartikelanzahl steuern lässt, mit denen der Einspritzstrahl abgebildet werden soll. Mit zunehmend feinerer Auflösung des Rechengebiets nimmt, wie in Abb. 3.7 a) schematisch dargestellt, die Partikelanzahl pro Zelle ab. Als Folge der mangelnden statistischen Diskretisierung ist die PDF ψ nicht mehr definiert und die Tropfeneigenschaften $\vec{a}_{Tr} = (\vec{u}_{Tr}, r_{Tr}, T_{Tr})$ werden unzureichend aufgelöst. In diesem Zusammenhang werden sehr schnell die Vorteile des Euler-Ansatzes aus Kap. 2.4 deutlich. Gegenüber dem diskreten Tropfenmodell wird hier die PDF ψ in jeder Rechenzelle mit einer einheitlichen Anzahl an so genannten Tropfenklassen diskretisiert. Die statistische Konvergenz ist somit unabhängig von der Gittergröße (siehe Abb. 3.7 b)). Unter diesem Aspekt eignet sich der Ansatz vor allem für dichte Strahlen im Düsenbereich.

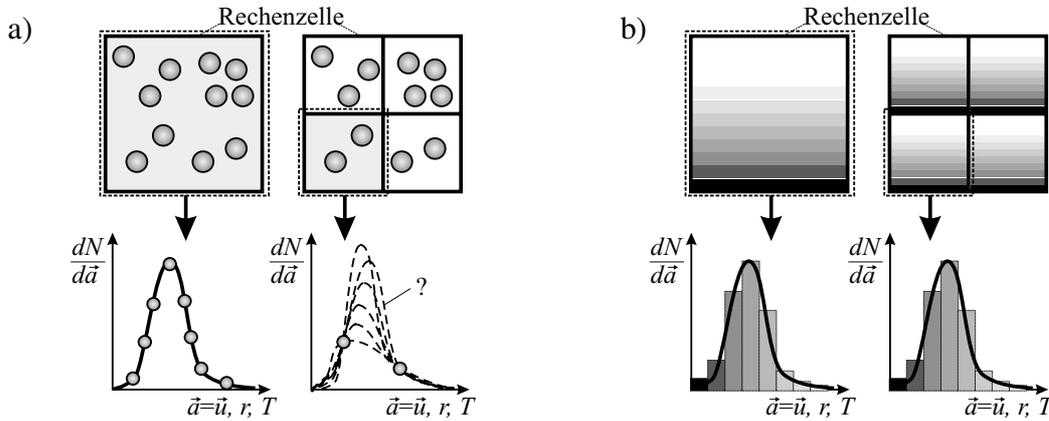


Abb. 3.7: a) Lagrange-Ansatz: Bei Netzverfeinerung nimmt die Anzahl der Partikel pro Zelle ab und der Diskretisierungsgrad der Verteilungsfunktion ψ verringert sich. b) Euler-Ansatz: Die Diskretisierung der Verteilungsfunktion ψ ist unabhängig von der Netzauflösung.

Beim diskreten Tropfenmodell treten aufgrund des stochastischen Charakters des Verfahrens sowohl bei stationären als auch instationären Einspritzbedingungen Fluktuationen der Partikelanzahl in der Rechenzelle auf. Um den statistischen Fehler gering zu halten und eine im Mittel ausreichend feine Diskretisierung der PDF ψ zu gewährleisten, soll nach Merker et al. [87] die Partikelanzahl pro Rechenzelle mindestens 30 betragen. In Analogie zur CFL-Bedingung⁵ müssen demzufolge bei einer Einspritzgeschwindigkeit v_0 über die n -Zellen am Düsenaustritt $30 \cdot n$ Partikel in der Zeit $\Delta t = \Delta y_0 / v_0$ eingespritzt werden, sofern sich die Kantenlänge Δy_0 der Rechenzellen in Strahlrichtung nicht ändert. Die Gesamtpartikelanzahl für den gesamten Einspritzvorgang berechnet sich aus

$$N = 30 n \frac{\Delta t_E}{\Delta y_0 / v_0} \quad (3.2)$$

Für den im vorangegangenen Kapitel 3.2.1 untersuchten Fall müssen bei Verwendung des feinen adaptiven Gitters (siehe Tab. 3.2, Netz Nr. 2 mit $\Delta y_0 = 0.1 \text{ mm}$), welches den Düsenaustritt mit

⁵Die Courant-Friedrichs-Lewy-Bedingung (CFL) $\alpha = \frac{v \cdot \Delta t}{\Delta x} \leq 1$ besagt, dass sich ein Teilchen mit der Strömungsgeschwindigkeit v innerhalb eines Rechenzeitschrittes Δt aus numerischen Stabilitätsgründen maximal über Gitterweite Δx fortbewegen darf.

$n = 3$ Zellen auflöst, bei einer Einspritzgeschwindigkeit $v_0 = 120 \text{ m/s}$ über die Einspritzdauer $\Delta t_E = 0.8 \text{ ms}$ mindestens $N = 86400$ Partikel pro Zellschicht eingespritzt werden.

Für den Hohlkegelstrahl einer A-Düse ist die mittlere Partikelanzahl \bar{N}_Z pro Rechenzelle in Abb. 3.8 für die beiden strahladaptiven Netze mit einer Zellkantenlänge von $\Delta x_0 = 10 \mu\text{m}$ und $100 \mu\text{m}$ (siehe Tab. 3.2) und einer Gesamtpartikelanzahl von 5.000 bzw. 100.000 dargestellt. Die Simulation wurde wie in Kap. 3.2.1 auf einer 0.5° -Zellschicht mit zyklischen Randbedingungen durchgeführt. Im 3D-Fall würden sich für das feine Rechenetz hochgerechnet 15 Millionen Zellen und 72 Millionen Partikeln ergeben. Zusätzlich steigt mit dem applizierten „WAVE“-Zerfallsmodell (siehe Kap. 4.1.4) die Partikelanzahl weiter an.

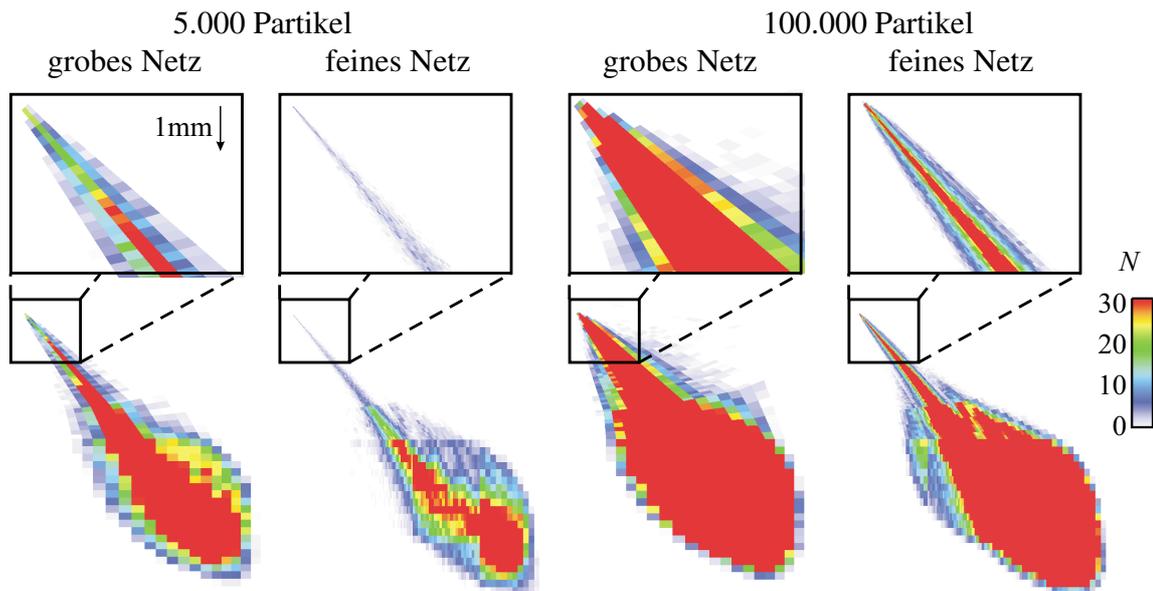


Abb. 3.8: Einfluss der Netzauflösung (grob: $\Delta x_0 = 100 \mu\text{m}$, fein: $\Delta x_0 = 10 \mu\text{m}$) und der Gesamtpartikelanzahl N auf die mittlere Partikelanzahl \bar{N}_Z pro Rechenzelle für den Einspritzstrahl einer A-Düse bei Ansteuerende ($t = 0.7 \text{ ms}$ n.ASB.).

Wie aus Abb. 3.8 hervorgeht, sind für das feine und grobe adaptive 0.5° -Sektornetz 5.000 Partikel nicht annähernd ausreichend, um im Düsenbereich eine mittlere Partikelanzahl von 30 Partikel pro Rechenzelle zu realisieren. Erst mit 100.000 Partikeln kann für das feine Gitter über weite Strahlbereiche eine ausreichend hohe mittlere Partikelanzahl dargestellt werden, um sinnvolle Ergebnisse im statistischen Sinne zu erzielen. In den Randzonen des Strahls nimmt \bar{N}_Z zwar ab, allerdings ist dort der statistische Fehler von geringerer Brisanz, da die Flüssigkeitsmasse gegenüber dem Strahlkern ebenfalls niedrig ist.

Bei den feinen Gittern können auch Tropfen auftreten, deren Durchmesser die Zellgröße überschreitet. Ein Widerspruch zur mathematischen Formulierung in *Kiva-3v* besteht dadurch nicht, da das Partikel selbst kein Volumen besitzt und somit keine Verdrängung des Umgebungsgases induziert. Die Tropfengröße ist dabei als „innerer“ Freiheitsgrad der statistischen Betrachtung zu verstehen. Unter Berücksichtigung des Tropfenvolumenanteils in der Gasphase würde die numerische Stabilität des Gasphasen-Lösers abnehmen. Gleiches gilt bei Netzverfeinerung und konstanter Partikelgesamanzahl, da der Quellterm des Partikels auf eine Zelle mit kleinerem Volumen verteilt wird. Bei feinen Gittern muss nicht nur aus Gründen der statistischen Konvergenz, sondern zwangsweise aus Stabilitätsgesichtspunkten, eine Erhöhung der Partikelanzahl einhergehen. Dabei nimmt die Tropfenanzahl pro Partikel ab und der Quellterm, als Maß für die „Größe“ eines Partikels, wird auf mehrere Partikel und somit auch auf mehrere Zellen verteilt.

3.2.3 Vorgehensweise bei der 3D-Simulation der Gemischbildung

Angesichts der in den beiden vorangegangenen Abschnitten geschilderten Auflösungsgesichtspunkte scheint aus Rechenzeitgründen eine physikalisch sinnvolle Applikation des stochastischen Strahlmodells ebenso wenig praktikabel zu sein wie die Euler-Euler-Methode. Letztere befindet sich noch in der Entwicklungsphase. In kommerziellen CFD-Programmen, wie sie in der Industrie zum Einsatz kommen, gibt es bislang keine Alternativen zum stochastischen Strahlmodell. Für eine physikalisch fundierte und numerisch konvergierte Beschreibung der Einspritzvorgänge muss sich daher die Vorgehensweise an der zu beantwortenden Fragestellung orientieren. Grundsätzlich muss zwischen zwei Gesichtspunkten differenziert werden:

1. Gemischbildung im Motor unter realen Bedingungen
2. Grundlagenuntersuchung zur Strahlcharakteristik und -ausbreitung

Bei der *Gemischbildung im Motor unter realen Bedingungen* stehen Fragestellungen wie z.B. die Wechselwirkung zwischen Einspritzstrahl und Zylinderinnenströmung oder der Strahleinfluss auf Zündung und Verbrennung im Mittelpunkt des Interesses. Hierbei ist die detailgetreue Abbildung der Brennraumgeometrie unverzichtbar. Aufgrund der Asymmetrie des ottomotorischen Brennraums, bedingt durch die Dachform des Zylinderkopfes sowie möglicher Quetschflächen, stellt die motorische Simulation ein komplexes 3D-Problem dar, welches aus Rechenzeitgründen keine räumliche Diskretisierung des Düsenaustritts mehr erlaubt und die in Kap. 3.2.1 angesprochene Problematik zum Tragen kommt. Die einzig zielführende Vorgehensweise für eine sinnvolle Berechnung der Gemischbildung im Motor muss somit in zwei Schritte untergliedert werden. Im ersten Schritt wird die Simulation über Modellparameter iterativ mit diagnostischen Untersuchungen in Hochdruckkammern übereinstimmend angepasst. Um Netzabhängigkeiten zu vermeiden, muss bereits diese Abstimmung auf dem motorischem Rechnernetz (mit fixiertem Kolben) erfolgen. Die so ermittelten Parameter können dann im zweiten Schritt im Gültigkeitsbereich der zugrunde liegenden thermodynamischen Randbedingungen auf die reale Motorsimulation übertragen werden. Dieses Vorgehen stellt eine physikalisch sinnvolle Berechnung der Gemischbildung und nachfolgenden Prozesse, wie Zündung und Verbrennung, sicher und schafft damit eine Vergleichsmöglichkeit mit indizierten Motorversuchsdaten. Trotz limitierter Netzfeinheit sind im Hinblick auf den numerisch diffusiven Charakter strahladaptive Netze zu bevorzugen.

Bei *Grundlagenuntersuchungen zur Strahlcharakteristik und -ausbreitung*, in denen z.B. der Einfluss der Düseninnenströmung auf die Randwirbelbildung bei A-Düsen im Vordergrund steht, müssen physikalische Prozesse durch eine angepasste Modellierungstiefe in numerisch konvergenter Form wiedergegeben werden. Die Auflösung des Düsenaustritts ist dabei ebenso unerlässlich, wie eine angepasst hohe Partikelanzahl. Um den hohen Diskretisierungsanforderungen zu genügen, können einschränkend rotationssymmetrische Strahleigenschaften angenommen werden, um so das 3D auf ein quasi-2D-Problem zu reduzieren. Prinzipiell ist auch die Berücksichtigung von Strömungsinhomogenitäten über den Umfang am Düsenaustritt denkbar, wie z.B. durch die Nadelführung bedingte inhomogene Kraftstoffzuführung. In Analogie zu experimentellen Strahluntersuchungen, die aufgrund der günstigeren optischen Zugänglichkeit überwiegend in Hochdruckkammern durchgeführt werden, lassen sich auch die numerischen Ergebnisse auf den Motor übertragen. Wie bereits Abraham [1] durch numerische Simulation von Gasfreistrahlen auf düsenlochauflösenden Rechnernetzen zeigte, generiert der Einspritzstrahl seine eigene Turbulenz und ist unabhängig von der Umgebungsturbulenz.

Kapitel 4

Strahldynamische Mechanismen der Gemischbildung

In der Vergangenheit wurden zahlreiche experimentelle und numerische Untersuchungen zur innermotorischen Gemischbildung durchgeführt. Bei der Modellierung lagen die Schwerpunkte hauptsächlich bei Mehrlochinjektoren unter dieselmotorischen Randbedingungen (z.B. [77, 115]). Bei der Benzin-Direkteinspritzung fokussierten sich die Arbeiten auf wand- und zum Teil auf strahlgeführte Brennverfahren mit Dralldüsen (z.B. [56, 118, 128]). Für die Gemischbildung mit Piezo-A-Düsen (siehe Abb. 1.3) existieren nur wenige Veröffentlichungen, deren Fokus überwiegend experimentell ausgerichtet ist (z.B. [3, 12, 46, 106]). Erste Ansätze in der Simulation gehen auf [70, 131] zurück, welche die Modellierung des primären Strahlaufbruchs von Drall- auf A-Düsen übertragen haben. Für die Berücksichtigung von Sensitivitäten der Strahlausbreitung von der Düseninnenströmung, die gerade bei A-Düsen aufgrund der geringen geometrischen Abmessungen von besonderer Bedeutung ist, existieren keine in der Literatur veröffentlichten Modellansätze. Einen Überblick über die Phänomenologie der strahldynamischen Gemischbildungsmechanismen sowie der publizierten Modelle wird in Kap. 4.1 bis 4.4 gegeben. In Kap. 4.5 wird das im Rahmen dieser Arbeit entwickelte Modellierungskonzept für A-Düsen vorgestellt, welches die gekoppelte Berechnung von Düseninnenströmung und Gemischbildung, den Primärzerfall und die turbulente Dispersion als zentrale Bestandteile beinhaltet.

4.1 Strahlaufbruch und Tropfenzerfall

Der Zerfall im Nah- und Fernbereich des Injektors ist für die Gemischbildung bei strahlgeführten Brennverfahren von grundlegender Bedeutung, da die Randwirbelbildung entscheidend von der Tropfengröße abhängt. Im Allgemeinen wird eine Unterteilung in Primär- und Sekundärzerfall vorgenommen, wobei deren Abgrenzung nach zwei Gesichtspunkten erfolgen kann:

1. In der *phänomenologischen Betrachtung* wird unter Primärzerfall der reine Aufbruch des flüssigen Strahlkerns aus der Düse verstanden. Der weitere Zerfall der aus dem Primärzerfall gebildeten Tropfen wird dem Sekundärzerfall zugeordnet.
2. In der *Unterscheidung nach Wirkungsmechanismen* werden unter dem Begriff Primärzerfall der Aufbruch des flüssigen Strahlkerns und zusätzlich diejenigen Tropfenzerfallsmechanismen zusammengefasst, die aus der Düseninnenströmung resultieren (z.B. Turbulenz- und Kavitationseffekte). Der Sekundärzerfall beinhaltet den rein aerodynamischen Zerfall.

In beiden Betrachtungsweisen wird der Zerfall als Aufbruch eines intakten, flüssigen Strahlkerns in disperse Tropfen und deren weiteren Zerfall beschrieben. Nur die letztere erscheint sinnvoll, da nur sie die räumliche Überlagerung der Zerfallsmechanismen berücksichtigt.

4.1.1 Mechanismen des Primärzerfalls

Die Zerfallsmechanismen bei der motorischen Gemischbildung sind nicht zuletzt aufgrund der unbekanntenen Bedingungen am Düsenaustritt sowie der Unzugänglichkeit des dichten Strahlkerns mit optischer Diagnostik unzureichend verstanden. Eine Charakterisierung des Strahlzerfalls muss daher über die Dimensionsanalyse der relevanten Größen – Strahlaustrittsgeschwindigkeit u_{FL} , Flüssigkeitsviskosität μ_{FL} , Oberflächenspannung σ_{FL} , Gasdichte ρ_G und der Größe des Düsenaustritts d_0 – erfolgen (siehe [92, 109, 114]). Anhand dieser physikalischen Größen lassen sich im Rahmen der Ähnlichkeitstheorie drei charakteristische Kennzahlen definieren.

$$We_G = \frac{\rho_G d_0 u_{rel}^2}{\sigma_{FL}}, \quad Re_{FL} = \frac{\rho_{FL} d_0 u_{rel}}{\mu_{FL}} \quad \text{und} \quad Oh = \frac{\mu_{FL}}{\sqrt{\rho_{FL} d_0 \sigma_{FL}}} = \frac{\sqrt{We_G}}{Re_{FL}} \quad (4.1)$$

Die Weber-Zahl We_G ist definiert als das Verhältnis der Trägheitskräfte der umgebenden Gasströmung und Oberflächenspannungskräfte, die Reynolds-Zahl Re_{FL} als Verhältnis von Trägheits- und Zähigkeitskräften und die Ohnesorge-Zahl Oh als Verhältnis von Zähigkeitskräften und der Wurzel aus dem Produkt von Trägheits- und Oberflächenspannungskräften. Mit diesen Kenngrößen lassen sich die Zerfallsregimes in fünf Bereiche – Abtropfen, Zertropfen, 1. luftunterstütztes Regime sowie Zerstäuben – unterteilen. Eine Übersicht der Regimes zeigt Abb. 4.1 anhand der Aufbruchlänge des flüssigen Strahlkerns in Abhängigkeit von der Strahlgeschwindigkeit für eine Einspritzung in ruhende Umgebung. Die zugehörigen Weber-Zahlen wurden von Ranz [108], Miesse [90] und Reitz [114] experimentell abgeleitet, wobei die Abgrenzungen keinesfalls scharfe Trennlinien darstellen, sondern vielmehr die Lage von fließenden Übergängen.

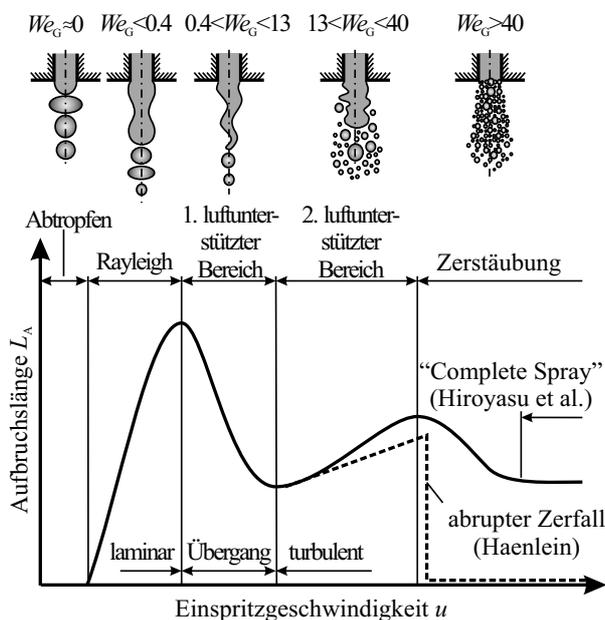


Abb. 4.1: Klassifizierung der Zerfallsbereiche nach Hiroyasu et al. [63, 64] und Haenlein [52].

Im Bereich des *Abtropfens* wird der Zerfall durch Gravitationskräfte eingeleitet. Im Regime des *Zertropfens*, erstmals im Jahre 1878 von Rayleigh [111] theoretisch beschrieben, sind Oberflächenspannungen die dominanten Zerfallskräfte. Kleinste Störungen führen zum Wachstum von symmetrischen Oberflächenwellen und schließlich zum Zerfall in disperse Tropfen, deren Größe $d_{Tr} = 1.89 \cdot d_D$ den Düsenaustrittsdurchmesser d_D überschreiten. Im *1. luftunterstützten Bereich* nehmen aufgrund der erhöhten Relativgeschwindigkeit zwischen Tropfen und Gas die aerodynamischen Kräfte zu. Lokale Druckunterschiede an der Flüssigkeitsoberfläche führen zum Zerwellen des Strahls und beschleunigen den Zerfall. Nach Haenlein [52] resultiert die abnehmende Aufbruchlänge aus dem Wechsel von symmetrischen in asymmetrische Oberflächenwellen. Der *2. luftunterstützte Bereich* ist durch die Instabilität kurzweiliger Störungen charakterisiert. Die Aufbruchlänge nimmt mit steigender Einspritzgeschwindigkeit zu, wobei sich bereits an der Düsenmündung Tropfen vom Strahlkern abscheren können. Eine weitere Erhöhung der Einspritzgeschwindigkeit führt ins Regime der *Zerstäubung*. Hiroyasu et al. [63, 64] bezeichnen dieses Regime als „Complete Spray“, in dem die Aufbruchlänge konstant bleibt. Nach Haenlein [52] dagegen folgt ein abrupter Abfall der Aufbruchlänge, womit der Zerfall unmittelbar am Düsenaustritt abgeschlossen ist.

Die widersprüchlichen Erkenntnisse deuten darauf hin, dass die Interaktion des Strahls mit seiner Umgebung nicht allein der treibende Aufbruchmechanismus ist. Vielmehr gewinnt bei Hochdruckeinspritzung die Vorgeschichte der Strömung zunehmend an Bedeutung [5, 23, 59, 60, 81, 117, 168]. Zu den Wirkungsmechanismen, die aus der Düseninnenströmung resultieren, zählen:

- **Grenzschicht-Relaxation:** Das plötzliche Fehlen der Wand beim Austritt des Flüssigkeitsstrahls aus der Düse führt zu einer schlagartigen Beschleunigung der Grenzschicht durch den Strahlkern. Durch die starken Druckgradienten kommt es zur Destabilisierung der Strahloberfläche [80]. Die Relaxation des Geschwindigkeitsprofils ist praktisch unabhängig vom Gaszustand und wird ausschließlich von der Düseninnenströmung bestimmt.
- **Druckpulsation:** Häufig wird der Strahlaufbruch mit Druckschwankungen im Einspritzsystem in Verbindung gebracht. Numerische Untersuchungen an Hohlkegelstrahlen von Albina et al. [5] mit künstlich angeregter Düseninnenströmung bestätigen, dass in Abhängigkeit der angebrachten Störung das Zerstäubungsverhalten deutlich beeinflusst wird.
- **Nadelhub und -desachsierung:** Bei A-Düsen wird die Strömung in der Düse bis zum Austritt direkt durch die Nadelbewegung beeinflusst. Neben der Düseninnenströmung selbst beeinflusst der Hub auch die geometrische Düsenaustrittsfläche, wodurch sich die Strahleigenschaften ändern. Eine Desachsierung der Nadel führt ähnlich wie der Nadelhub über eine veränderte Strömung und Geometrie zu nicht-rotationssymmetrischen Austrittsbedingungen, die sich in einem asymmetrischen Strahlbild (z.B. Verkipfung) widerspiegeln.
- **Wandrauigkeit:** Insbesondere bei A-Düsen ist aufgrund der kleinen geometrischen Dimensionen die Wandrauigkeit als Strahlaufbruchmechanismus nicht zu vernachlässigen. Anhand hochauflösender Röntgenmessungen führen Wenyi et al. [163] die Strähnigkeit des Einspritzstrahls von A-Düsen auf die Wandrauigkeit zurück.
- **Turbulenz und Kavitation:** Schweitzer [130] verwies erstmals darauf, dass die radialen Geschwindigkeitsfluktuationen der turbulenten Düseninnenströmung unmittelbare Störungen an der Strahloberfläche initiieren und den Zerfall einleiten können. Heukelbach et al. [59, 60] zeigten experimentell an ebenen Flachwasserstrahlen, dass bei erhöhter Turbulenzintensität die turbulenten Fluktuationen die aerodynamischen Kräfte übersteigen und sich Tropfen vom Strahlkern ablösen. Bei Kavitation¹ kommt es mit wieder ansteigendem Druck zur Kondensation in den Dampfblasen, wodurch diese kollabieren. Dabei wird die freigesetzte Energie in kinetische Energie der Flüssigphase umgewandelt. Strömung und Turbulenz werden gleichermaßen beeinflusst, was eine eindeutige Trennung der Wirkungsmechanismen durch Turbulenz und Kavitation unmöglich macht.

Die Kräfte, die ein flüssiger Strahlkern nach Verlassen der Düse erfährt, lassen sich über die Dimensionsanalyse der relevanten Kenngrößen abschätzen. Dazu zählen Gravitation, Oberflächenspannungen, Trägheit der Gasphase sowie die Turbulenz der Flüssigphase. Laminare und turbulente Spannungen der Gasphase sind aufgrund der extremen Dichteunterschiede ($\rho_{Fl} \gg \rho_G$) vernachlässigbar klein. Für eine A-Düse² zeigt der Vergleich der relevanten Kräfte

- Gravitation: $\rho_{Fl} g h_n = 0.15 \text{ N/m}^2$
- Oberflächenspannung: $\sigma_{Fl}/h_n = 1.08 \cdot 10^3 \text{ N/m}^2$
- Trägheit der Gasphase: $\rho_G u_{rel}^2 = 6.95 \cdot 10^4 \text{ N/m}^2$
- Turbulente Spannungen: $\rho_{Fl} u_{Fl}^{\prime 2} = 1.37 \cdot 10^5 \text{ N/m}^2$,

¹Unter Kavitation wird die Bildung von Gasblasen in einer Flüssigkeit verstanden. Lokal unterschreitet dabei der statische Druck den Dampfdruck ($p < p_D$), z.B. durch Beschleunigung der Strömung (siehe dazu Isay [69]).

²Charakteristische Kennwerte und numerische Strömungsgrößen für eine A-Düse: $h = 35 \mu\text{m}$, $\theta = 80^\circ$, $u_{Fl} = 190 \text{ m/s}$, $k_{Fl} = 300 \text{ m}^2/\text{s}^2$, $u_{rel} = 100 \text{ m/s}$, $\sigma_{Fl} = 20.9 \cdot 10^{-3} \text{ N/m}$ und $\rho_G = 6.95 \text{ kg/m}^3$ (vgl. auch Kap. 7.1).

dass Oberflächenspannungs- und Gravitationskräfte gegenüber den Trägheitskräften der Gasphase vernachlässigbar klein sind. Die für den primären Strahlzerfall von A-Düsen dominierenden Kräfte resultieren jedoch aus der Turbulenz der Flüssigphase.

4.1.2 Modelle für den Primärzerfall

Die grundlegende Problematik bei der Modellierung des Primärzerfalls liegt in der durchgängigen physikalischen und numerischen Beschreibung des Übergangs von kontinuierlicher Düseninnenströmung zur dispersen Tropfenbewegung außerhalb der Düse. Die allgemeine Vorgehensweise sieht empirische Modelle für den Primäraufbruch vor, welche die nicht-aufgelösten physikalischen Prozesse über die Phasengrenzfläche in integraler Form abbilden. LES-Simulationen mit Oberflächenmethoden, wie sie beispielsweise von Villiers et al. [154] und Kim et al. [75] durchgeführt wurden, beschränken sich nur auf den unmittelbaren Nahbereich der Düse. Aufgrund der fehlenden diagnostischen Information über den Strahlkern beruht die Modellvalidierung auf experimentelle Vergleiche weit stromab vom relevanten Nahbereich der Düse sowie auf Plausibilitätsüberprüfungen bzgl. Strahlcharakteristik und Tropfengrößen. In der Literatur ist eine Vielzahl von Modellansätzen zu finden. Die gängigsten phänomenologischen Ansätze werden im Folgenden beschrieben und sind in Abb. 4.2 dargestellt.

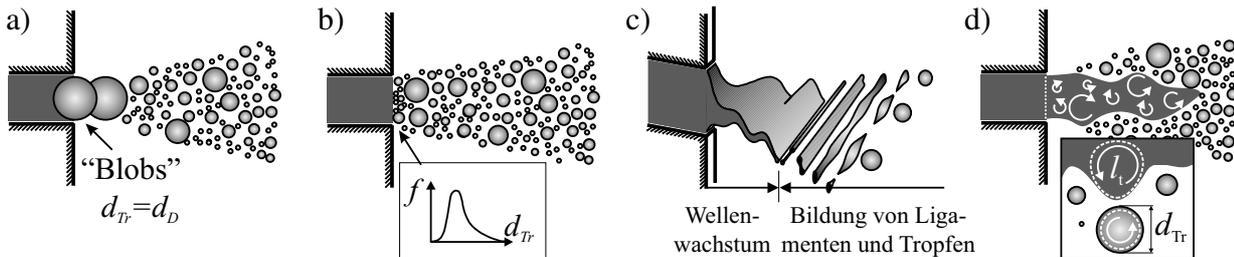


Abb. 4.2: Modellvorstellungen über den Primärzerfall: a) „Blob“-Methode nach Reitz und Diwakar [119], b) Tropfengrößenspektrum, c) aerodynamisch-induzierter Primäraufbruch nach Dombrowski und Johns [35] und d) turbulenter Zerfall nach Wu et al. [168].

„Blob“-Modell: In der von Reitz und Diwakar [119] vorgestellten Methode sind Zerstäubung und Tropfenzerfall im Düsennahbereich nicht unterscheidbare Prozesse. Als numerische Randbedingung können demnach düsenlochgroße Tropfen ($d_{Tr} = d_D$), so genannte „blobs“, initialisiert werden. Der weitere Zerfall der „blobs“ wird durch aerodynamische Modelle des Sekundärzerfalls beschrieben (siehe Abb. 4.2 a).

Tropfengrößenspektrum: Die Abbildung des Strahlaufbruchs durch ein Tropfengrößenspektrum nach Reitz und Diwakar [118] gemäß Abb. 4.2 b) beruht auf keiner physikalischen Auflösung des Zerstäubungsprozesses. Das Tropfengrößenspektrum ist vielmehr ein Freiheitsgrad der 3D-Simulation, welcher rein iterativ durch Abgleich der numerischen Einspritzstrahlberechnung mit strahldiagnostischen Aufnahmen ermittelt werden muss. Eine Vorausberechenbarkeit des Einspritzstrahls ist folglich nicht gegeben.

Lineare Stabilitätsanalyse: Mit Hilfe der Analyse linearer Instabilitäten an der Strahloberfläche ebener Flüssigkeitsfilme wird das Wachstum infinitesimaler Anfangsstörungen beschrieben. Die Stabilitätsanalyse berücksichtigt die destabilisierende Wirkung von Trägheits- und aerodynamischen Kräften sowie die dem Wellenwachstum entgegenwirkenden Kräfte aus Oberflächenspannung und Zähigkeit. Die Vorstellung des Wellenwachstums und der schlussendliche Flüssigkeitszerfall in Ligamente und Tropfen ist in Abb. 4.2 c) dargestellt.

Den Ausgangspunkt der linearen Stabilitätsanalyse stellt die Dispersions-Relation dar, die das Wachstum der Störungen in Abhängigkeit von der Wellenlänge beschreibt. Der Zerfall selbst wird bei der Wellenlänge mit maximaler Wachstumsrate vermutet. Für ebene, nicht-viskose Flüssigkeitsstrahlen zeigte Squire [138], dass die Instabilität asymmetrischer Störungen³ für den Zerfall verantwortlich ist. Durch Lösung der Dispersions-Relation erhält er für einen Flüssigkeitsfilm der Dicke h_F die Wellenlänge $\Lambda_{F,\Omega_{opt}}$ bei maximaler Wachstumsrate Ω_{opt} :

$$\Lambda_{F,\Omega_{opt}} = \frac{4\pi\sigma_{Fl}}{\rho_{Fl}u_{Fl}^2} \quad \text{für} \quad \frac{\Omega_{opt}h_F}{u_{Fl}} = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\rho_G}{\rho_{Fl}}We_G} \quad (4.2)$$

Den Zerfall des Flüssigkeitsfilms in Ligamente vermuten Clark und Dombrowski [26] an seiner dünnsten Stelle, die nach der Theorie bei halber Wellenlänge $\Lambda_{F,\Omega_{opt}}$ vorliegt. Dem weiteren Zerfall der Ligamente in disperse Tropfen liegt Weber's Theorie [158] zugrunde, wonach der Einfluss der Gasströmung durch die transversale Bewegung der Ligamente vernachlässigbar ist und der Zerfall rein aus Oberflächenspannungskräften (Rayleigh-Zerfall) resultiert. Unter der Annahme, dass die Amplitude der instabilsten Welle dem Ligamentdurchmesser d_L entspricht, wird pro Wellenlänge $\Lambda_{L,\Omega_{opt}}$ ein Tropfen mit dem Durchmesser d_{Tr} gebildet.

$$d_{Tr}^3 = \frac{3}{2}d_L^2\Lambda_{L,\Omega_{opt}} \quad \text{mit} \quad \Lambda_{L,\Omega_{opt}} = \pi d_L \sqrt{2(1+3Oh)} \quad \text{und} \quad d_L = \sqrt{\frac{2}{\pi}} h_F \Lambda_{F,\Omega_{opt}} \quad (4.3)$$

Die Filmlänge L_A bestimmten Dombrowski und Hooper [34] durch eine empirische Korrelation

$$L_A = u_{Fl}\tau = \frac{u_{Fl}}{\Omega_{opt}} \ln\left(\frac{\eta_A}{\eta_0}\right) = D \sqrt[3]{\frac{\rho_{Fl}\sigma_{Fl}K \ln(\eta_A/\eta_0)}{\rho_G u_{Fl}^2}}, \quad (4.4)$$

in der $K = h_F L \cos\frac{\theta}{2}$ eine Konstante und h_F die Filmdicke im Abstand L vom Düsenaustritt beschreiben. Die Konstante D geben Han et al. [56] mit $D = 3$ und Reitz und Diwakar [118] mit $D = 20$ an. Das Verhältnis der Wellenamplituden beim Zerfall wurde mit $\ln(\eta_A/\eta_0) = 12$ experimentell ermittelt.

Turbulente Zerfallsmodelle: Für die Hochdruck-Benzin-Direkteinspritzung mit A-Düsen zeigt die Analyse der Zerfallskräfte aus Kap. 4.1.1, dass im Besonderen Kräfte aus der Turbulenz der Flüssigphase für den Strahlaufbruch von Bedeutung sind. Einer der ersten Ansätze für den turbulenten Strahlaufbruch geht auf Huh und Gosman [67] zurück (vgl. Abb. 4.2 d). Sie postulieren, dass die initialen Störungen der Flüssigkeitsoberfläche die Folge von turbulenten Fluktuationen aus der Düseninnenströmung sind und mit der Wellenlänge in der Größe der turbulenten Längenskala durch Kelvin-Helmholtz-Instabilitäten anwachsen und schließlich in disperse Tropfen aufbrechen. Die Größe der resultierenden Tropfen D_{Tr} wird dabei proportional zur turbulenten Längenskala l_t (siehe Gl. 2.3) der Zuströmung vermutet.

$$D_{Tr} = C_{l_t} l_t \quad (4.5)$$

Für dieselmotorische Einspritzstrahlen fanden Huh et al. [68] sowie Bianchi und Pelloni [15, 16] die Modellkonstante $C_{l_t} = 2$. Die kleinsten Tropfengrößen schätzten Wu et al. [168] über eine Bilanzierung von Oberflächenspannungs- und Turbulenzenergie ab. Die Zerfallszeitskala τ_A bestimmten Huh et al. [68] aus einer Linearkombination der Zeitskala des (aerodynamischen) Instabilitätenwachstums τ_I und der turbulenten Zeitskala $\tau_t = k_{Fl}/\epsilon_{Fl}$.

$$\tau_A = B_1\tau_I + B_2\tau_t \quad (4.6)$$

³Im Fall asymmetrischer Störungen sind die Phasengrenzflächen um den Faktor π phasenverschoben.

Die Zeitskala für das Wellenwachstum τ_I wurde auf Basis der Kelvin-Helmholtz-Instabilitätstheorie für einen ebenen, nicht-viskosen Flüssigkeitsstrahl abgeleitet.

$$\tau_I = \left[\frac{\rho_{Fl} \rho_G}{(\rho_{Fl} + \rho_G)^2} \left(\frac{u_{rel}}{L_I} \right)^2 - \frac{\sigma_{Fl}}{(\rho_{Fl} + \rho_G) L_I^3} \right]^{-0.5} \quad (4.7)$$

Die turbulenten Skalen l_t und τ_t leiteten Huh und Gosman [67] ohne explizite Berechnung der Düseninnenströmung aus einer Kraft-Energie-Bilanz am Düsenaustritt ab. Für eine Lochdüse bestimmten sie die turbulente kinetische Energie k_{Fl} und deren Dissipationsrate ϵ_{Fl} mit:

$$k_{Fl} = \frac{u_{eff}^2}{8l/d} \left(\frac{1}{C_d^2} - K_c - 1 \right) \quad \text{und} \quad \epsilon_{Fl} = \frac{K_\epsilon u_{eff}^3}{2l} \left(\frac{1}{C_d^2} - K_c - 1 \right) \quad (4.8)$$

Darin bezeichnen l die Länge und d den Durchmesser des Düsenlochs, C_d den Durchflussbeiwert, K_c und K_ϵ empirische Konstanten. Die Dämpfung der Turbulenz ϵ_{Fl} wird durch eine mit der Zeit linear wachsende Zeitskala modelliert.

Zusammenfassend ist festzuhalten, dass als einziger Ansatz das turbulente Zerfallsmodell die Vorgeschichte der Strömung berücksichtigt und damit dem Einfluss düsenspezifischer Größen (z.B. Düseninnengeometrie) Rechnung trägt. Die Sensitivität, mit welcher sich Einflüsse aus der Düseninnenströmung abbilden lassen, ist für den vorgestellten Ansatz aufgrund der reinen Mittelwertbetrachtung der stark vereinfachten turbulenten Anfangsrandbedingungen beschränkt.

4.1.3 Mechanismen des Sekundärzerfalls

Der Sekundärzerfall beinhaltet den weiteren aerodynamischen Zerfall der aus dem Primäraufbruch hervorgehenden dispersen Tropfen. Durch die Einwirkung von aerodynamischen Kräften aus der Relativbewegung des Tropfens zum umgebenden Gas wird der Zerfall in kleinere stabile Fragmente eingeleitet. Der ablaufende Zerfallsvorgang kann über mehrere Stufen erfolgen und wird analog zum primären Strahlaufbruch durch die Kennzahlen aus Gl. (4.1) charakterisiert, wobei die relevante Längenskala durch den Tropfendurchmesser d_{Tr} repräsentiert wird. Die treibende Kraft steigt proportional zur Relativgeschwindigkeit u_{rel} . Stabilisierend wirken sich die Oberflächenspannung und die Viskosität des flüssigen Tropfens aus. Letztere verzögert die Verformung und angeregte Schwingung des Tropfens. Experimentelle Untersuchungen von Wallis [155] zeigen, dass aerodynamischer Zerfall erst ab einer kritischen Weber-Zahl $We_{G,krit}$ auftritt.

$$We_{G,krit} = 12 \left(1 + Oh^{0.72} \right) \quad (4.9)$$

Pilch und Erdman [103] klassifizierten in Abhängigkeit von der Weber-Zahl We_G fünf Zerfallsbereiche, die in Abb. 4.3 dargestellt sind. Im Regime des *Schwingungszerfalls*⁴ ($We_G \leq 12$) wird der Zerfall durch die Eigenschwingung des Tropfens in wenige, ähnlich große Tropfen eingeleitet. Bei überkritischen Weber-Zahlen $We_G > 12$ verursacht der erhöhte Druck im Bereich des Staupunkts eine scheibenartige Verformung des Tropfens, die sich beim *Blasenzerfall* zu einer Blase weiterentwickelt, umgeben von einem torusförmigen Ring. Gel'Fand et al. [48] beobachteten für diesen Zerfallstyp in Experimenten ein bimodales Tropfengrößenspektrum und schlussfolgerten, dass die kleineren Tropfen aus Zerfall der Membran und die größeren Tropfen aus dem Ringzerfall resultieren. Ein ähnliches Verhalten zeigt der *Keulenzzerfall*, wobei zusätzlich entlang der Tropfenachse eine Flüssigkeitssäule auftritt, die schließlich in Ligamente zerfällt. Ein grundlegend andersartiges Zerfallsbild weist der *Streifenzerfall* auf. Am äußeren Rand des

⁴Die kritische Weber-Zahl $We_G = 12$ gilt, insofern die Viskosität nur untergeordneten Einfluss hat ($Oh \leq 0.1$).

scheibenförmigen Tropfens bildet sich ein Flüssigkeitsstreifen, von dem kleinere Fragmente abgesichert werden.

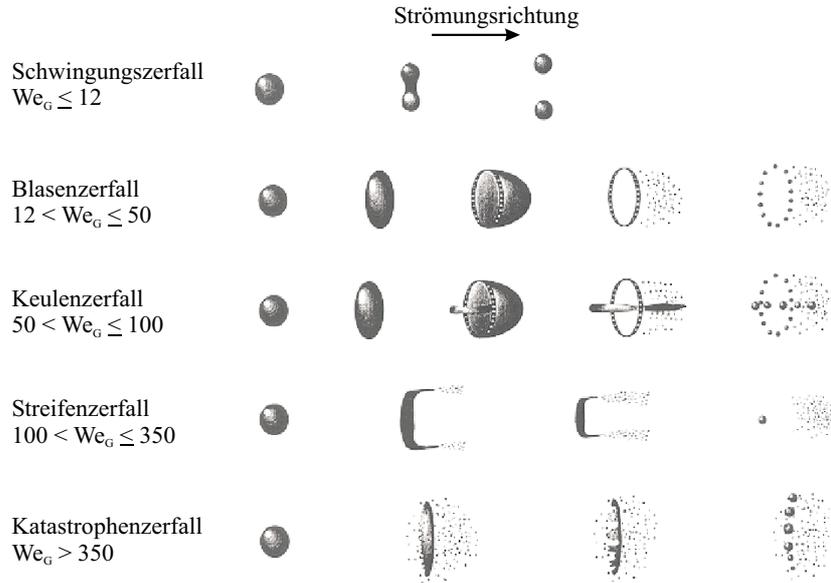


Abb. 4.3: Aerodynamische Zerfallsmechanismen nach Pilch und Erdman [103]

Nach Experimenten von Nicholls [91] zur Folge tritt Blasenzerfall bereits ab einer Weber-Zahl von $We_G > 6$ auf, während der charakteristische Wechsel des Zerfallstyp zum Streifenzerfall bei $We_G/\sqrt{Re_{Fl}} > 0.5$ erfolgt. Die Reynolds-Zahl deutet darauf hin, dass der viskose Abschervorgang der dominante Zerfallsmechanismus ist. Die zugehörigen Zerfallszeiten, d.h. die Zeit zwischen Tropfendeformation und Fragmentbildung, gibt er mit den Konstanten D_1 und D_2 an:

$$\tau_B = \begin{cases} D_1 \sqrt{\frac{\rho_{Fl} r_{Tr}}{\sigma_{Fl}}} & \text{für Blasenzerfall: } We_G > 6 \\ D_2 \frac{r_{Tr}}{u_{rel}} \sqrt{\frac{\rho_{Fl}}{\rho_G}} & \text{für Streifenzerfall: } \frac{We_G}{\sqrt{Re_{Fl}}} > 0.5 \end{cases} \quad (4.10)$$

Beim *Katastrophenzerfall* zerfällt der Tropfen kaskadenähnlich in immer kleinere Produkte. Die verantwortlichen Mechanismen liegen in den *Kelvin-Helmholtz-* (KH) und *Rayleigh-Taylor*⁵- (RT) Instabilitäten, die konkurrierend zueinander vorliegen (s. Abb. 4.4). KH-Instabilitäten entstehen zwischen zwei parallelen Strömungen mit unterschiedlicher Geschwindigkeit. Kleinste Störungen in der Grenzfläche führen zu lokalen Druckunterschieden, welche die Tropfendeformation senkrecht zur Strömungsrichtung verstärkt und schließlich das Abscheren von kleinen Fragmenten eintritt. RT-Instabilitäten treten bei starker Beschleunigung/Abbremsung eines dichten Mediums durch ein weniger dichtes Medium in der Grenzfläche senkrecht zur Strömungsrichtung auf. Auch hier führen kleinste Störungen zu instabilem Wachstum von langwelligigen RT-Finger (Deformation parallel zur Strömungsrichtung), die ein Aufbrechen des Tropfens in größere Fragmente nach sich zie-

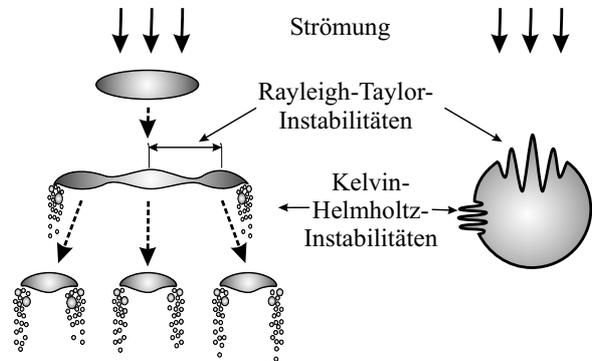


Abb. 4.4: Konkurrierende Instabilitäten im Katastrophen-Zerfallsregime nach [125].

⁵entdeckt von L. Rayleigh und von G.I. Taylor [150] für beschleunigte Strömungen erweitert.

hen. Für motorische Einspritzstrahlen ist das Katastrophen-Zerfallsregime von untergeordneter Bedeutung, da den hohen Einspritzgeschwindigkeiten die am Tropfen lokal beschleunigte Gasströmung entgegenwirkt, wodurch die Relativgeschwindigkeit abnimmt.

Die diskrete Abgrenzung der Regimes in Abb. 4.3 beruht auf sphärischen Tropfenausgangszustand. Nicht-ideale Anfangsbedingungen (z.B. Verformung) führen zum Verwaschen der Regimes. Experimenten liegen meist Einzeltropfenuntersuchungen zugrunde, welche den Einfluss benachbarter Tropfen nicht berücksichtigen. Messungen von Zajac [170] zur Folge nimmt die Zerfallsrate mit dem Tropfenabstand ab. Als Ursache sind Nachlaufeffekte vorausfliegender Tropfen zu vermuten, welche die aerodynamische Einwirkung der Gasströmung reduzieren.

4.1.4 Modelle für den Sekundärzerfall

In der Literatur sind zahlreiche Ansätze zur Beschreibung des aerodynamischen Tropfenzerfalls zu finden. Die wichtigsten Modelle werden im Folgenden zusammenfassend vorgestellt.

Reitz-Diwakar-Modell: Das Modell von Reitz und Diwakar [118, 119] basiert auf den von Nicholls [91] abgeleiteten Zerfallsregimes (siehe Gl. (4.10)). Darin wird strikt zwischen Blasen- und Streifenzerfall unterschieden. Während Reitz und Diwakar [118] von einem diskontinuierlichen Zerfall ausgehen, wird in [119] eine kontinuierliche Beschreibung analog zu Gl. (4.17) verwendet, worin der stabile Tropfenradius aus Gl. (4.1) mit den Bedingungen $We_G = 6$ für den Blasenzerfall bzw. mit $We_G/\sqrt{Re_{Fl}} = 0.5$ für den Streifenzerfall ermittelt wird.

TAB-Modell: Das 'Taylor-Analogy-Breakup'-Modell beruht auf dem Phänomen der Tropfendeformation durch Druckkräfte an Staupunkt und Tropfenäquator. Infolge der Tropfenverformung resultiert ein zunehmend ungünstiges Oberflächen-Volumen-Verhältnis. Die dynamische Tropfenschwingung leitet schließlich den Zerfall ein. Die mathematische Beschreibung der Tropfenschwingung geht auf Taylor [149] zurück, der eine Analogie zu einem Feder-Masse-System zugrunde legte. Darin entspricht die Oberflächenspannung σ_{Fl} der Rückstellkraft mit der Federkonstanten k und die aerodynamische Kraft der Deformationskraft F . O'Rourke und Amsden [95] erweiterten den Ansatz durch einen Dämpfungsterm d , um den Einfluss der Viskosität μ_{Fl} zu berücksichtigen. Die Schwingungsgleichung des Tropfens mit der Amplitude y lautet:

$$\ddot{y} + \frac{d}{m_{Tr}} \dot{y} + \frac{k}{m_{Tr}} y = \frac{F}{m_{Tr}} \quad \text{mit} \quad \frac{F}{m_{Tr}} = K_F \frac{\rho_G u_{rel}^2}{\rho_{Fl} r_{Tr}^2}, \quad \frac{k}{m_{Tr}} = K_k \frac{\sigma_{Fl}}{\rho_{Fl} r_{Tr}^3} \quad \text{und} \quad \frac{d}{m_{Tr}} = K_d \frac{\mu_{Fl} u_{rel}^2}{\rho_{Fl} r_{Tr}^2} \quad (4.11)$$

Die Modellkonstanten $K_F = \frac{1}{3}$, $K_k = 8$ und $K_d = 5$ wurden mit Hilfe von Experimenten angepasst [95]. Für den Zerfall ist die Vorgeschichte des Tropfens bezüglich seiner Relativgeschwindigkeit zum umgebenden Gas entscheidend. Eine kritische Weberzahl existiert nicht [149]. Nach O'Rourke und Amsden [95] tritt der Zerfall genau dann ein, wenn die Tropfendeformation y den Tropfenradius r_{Tr} überschreitet. Die resultierende Tropfengröße wird über eine Energiebetrachtung der Oberflächenspannungs- und Schwingungsenergien vor und nach dem Zerfall berechnet. Daraus ergibt sich das Verhältnis von Ausgangs- und Sauter-Radius⁶ r_{Tr} bzw. r_{32} .

$$\frac{r_{Tr}}{r_{32}} = \frac{7}{3} + \frac{\rho_{Fl} r_{Tr}^3}{8\sigma_{Fl}} \dot{y}^2 \quad (4.12)$$

⁶Der Sauter-Radius r_{32} charakterisiert den Radius eines repräsentativen Tropfens, dessen Volumen- zu Oberflächenverhältnis dem Verhältnis von Gesamtvolumen zu Gesamtoberfläche aller Tropfen entspricht.

Die Geschwindigkeit der Zerfallsprodukte senkrecht zur Tropfentrajektorie wird durch die Oszillationsgeschwindigkeit \dot{y} des Tropfens zum Zerfallszeitpunkt bestimmt. Nach O'Rourke und Amsden [95] ist damit die Strahlaufweitung implizit enthalten.

Hsiang-Faeth-Modell: Hsiang und Faeth [65] entwickelten auf der Basis experimenteller Untersuchungen für den in Abb. 4.3 dargestellten Streifenzerfall eine empirische Tropfengrößen-Korrelation. Sie nahmen an, dass aus der Grenzschicht des zerfallenden Tropfens kleinere Fragmente abgeschert werden, deren Größe von der Reynolds-Zahl Re_{Fl} abhängig ist.

$$\frac{d_{Tr,s}}{d_{Tr,0}} = 6.2 \left(\frac{\rho_{Fl}}{\rho_G} \right)^{\frac{1}{4}} \cdot Re_{Fl}^{\frac{1}{2}} = 6.2 \sqrt{\frac{Oh}{We_G^{1/2}}} \quad (4.13)$$

Hsiang und Faeth [65] leiteten in Anlehnung an Untersuchungen für frei fallende Tropfen von Clift et al. [27] ein Kriterium für das Ende des Streifenzerfalls her. Danach ist das Abscheren von Fragmenten beendet, wenn die von der Tropfenbeschleunigung $|a_{Tr}|$ abhängige Eötvös-Zahl Eo kleiner ist als $Eo < 16$.

$$Eo = |a_{Tr}| \frac{d_{Tr,0}}{\sigma_{Fl}} (\rho_{Fl} - \rho_G) \quad (4.14)$$

Wave-Modell: Die Ursprünge des „Wave“-Modells gehen auf die Analyse linearer (Kelvin-Helmholtz) Instabilitäten zurück. Gegenüber dem ebenen Flüssigkeitsstrahl in Kap. 4.1.2 wird eine rotationssymmetrische Flüssigkeitssäule betrachtet, die sich relativ zu einem stationären inkompressiblen Gas bewegt. Durch numerische Lösung der Dispersions-Relation ermittelte Reitz [120] in Abhängigkeit von der Ohnesorge-Zahl Oh und der Weber-Zahl We_G nach Gl. (4.1), der Weber-Zahl der Flüssigphase $We_{Fl} = We_G \rho_{Fl}/\rho_G$ sowie der Taylor-Zahl $T = Oh\sqrt{We_G}$ Regressionskurven für die Wellenlänge $\Lambda_{\Omega_{opt}}$ bei maximaler Wachstumsrate Ω_{opt} .

$$\frac{\Lambda_{\Omega_{opt}}}{r_{Tr}} = 9.02 \frac{(1 + 0.45 Oh^{0.5})(1 + 0.5 T^{0.7})}{(1 + 0.87 We_{Fl}^{1.67})^{0.6}} \quad (4.15)$$

$$\Omega_{opt} \sqrt{\frac{\rho_{Fl} r_{Tr}^3}{\sigma_{Fl}}} = \frac{0.34 + 0.38 We_G^{1.5}}{(1 + Oh)(1 + 1.4 T^{0.6})} \quad (4.16)$$

Die Änderung der Tropfengröße beschreibt Reitz [120] über ein logarithmisches Zerfallsgesetz.

$$\dot{r}_{Tr,a} = \frac{dr_{Tr}}{dt} = -\frac{r_{Tr} - r_{Tr,a}}{\tau_B} \quad (4.17)$$

Der stabile Tropfenradius $r_{Tr,a}$ wird proportional zur Wellenlänge $\Lambda_{\Omega_{opt}}$ bei maximaler Wachstumsrate angenommen.

$$r_{Tr,a} = \begin{cases} B_0 \Lambda_{\Omega_{opt}} & \text{für } B_0 \Lambda_{\Omega_{opt}} \leq r_{Tr} \\ \min \left[\left(\frac{3\pi r_{Tr}^2 u_{rel}}{2\Omega_{opt}} \right)^{0.33}, \left(\frac{3r_{Tr}^2 \Lambda_{\Omega_{opt}}}{4} \right)^{0.33} \right] & \text{für } B_0 \Lambda_{\Omega_{opt}} > r_{Tr} \end{cases} \quad (4.18)$$

Reitz [120] gibt die Modellkonstante mit $B_0 = 0.61$ an. Die aerodynamische Zerfallszeitskala

$$\tau_B = 3.726 B_1 \frac{r_{Tr}}{\Lambda_{\Omega_{opt}} \Omega_{opt}} \quad (4.19)$$

ergibt sich aus der Zeitskala der Instabilitäten. Mit der Zerfallskonstanten B_1 werden düsenspezifische Eigenschaften erfasst, die durch die Stabilitätsanalyse nicht abgebildet werden. In der Literatur sind Werte zwischen $B_1 = 1.73 \dots 30$ zu finden [91, 95, 100, 119].

Rayleigh-Taylor-Modell: In Ergänzung zum Kelvin-Helmholtz-Zerfall leiteten Bellman et al. [13] für den Rayleigh-Taylor-Zerfall einer nicht-viskosen Flüssigkeit mit Hilfe der linearen Stabilitätsanalyse Gleichungen für die Wellenlänge $\Lambda_{\Omega_{opt}}$ bei maximaler Wachstumsrate Ω_{opt} ab.

$$\Omega_{opt} = \sqrt{\frac{2}{3}} |\vec{a}_{Tr}| \left(\frac{|\vec{a}_{Tr}| (\rho_{Fl} - \rho_G)}{3\sigma_{Fl}} \right)^{\frac{1}{4}} \quad \text{und} \quad \Lambda_{\Omega_{opt}} = 2\pi \sqrt{\frac{3\sigma_{Fl}}{|\vec{a}_{Tr}| (\rho_{Fl} - \rho_G)}} \quad (4.20)$$

Darin beschreibt $|\vec{a}_{Tr}|$ den Betrag der Tropfenbeschleunigung. Die Zerfallszeit τ_B wird proportional zum Kehrwert der maximalen Wachstumsrate der Oberflächeninstabilitäten angenommen.

$$\tau_B = \Omega_{opt}^{-1} \quad (4.21)$$

Patterson [101] koppelte die konkurrierend zueinander wirkenden Rayleigh-Taylor- und Kelvin-Helmholtz-Mechanismen mit Hilfe des „Wave“-Zerfallsmodells. Den für den Zerfall dominanten Mechanismus bestimmte er aus der kleineren Zerfallszeitskala von Gl. (4.19) und Gl. (4.21). Die Zerfallsrate $\dot{r}_{Tr,a}$ beschrieb er analog zu Gl. (4.17), wobei er den stabilen Tropfenradius $r_{Tr} = B_0 \Lambda_{\Omega_{opt}}$ proportional zur instabilsten Wellenlänge $\Lambda_{\Omega_{opt}}$ annahm.

Zusammenfassend ist festzuhalten, dass sich trotz der verschiedenartigen Modellformulierungen das Ergebnis aus der Dimensionsanalyse der relevanten Größen mit unterschiedlichen Vorfaktoren ableiten lässt. Nahezu alle Modelle beschränken sich in ihrem Anwendungsbereich auf nur einen Zerfallstyp, wie z.B. das TAB-Modell auf den Schwingungserfall, das Hsiang-Faeth-Modell auf den Streifenzerfall oder das Reitz-Diwakar-Modell auf den Blasen- und Streifenzerfall. Als einziger Ansatz bildet das „Wave“-Modell [120] die Zerfallsprozesse regimeübergreifend ab und ist daher für die motorische Anwendung am besten geeignet.

4.2 Tropfenkollision und Tropfenkoaleszenz

Stoßprozesse sind in dichten Strahlen ($St \gg 1$, vgl. Kap. 2.4) von Bedeutung, wie sie innermotorisch nur im Düsenbereich vorherrschen [93]. Anhand von Experimenten für binäre Kollisionen mit Kohlenwasserstofftropfen nahmen Jiang et al. [71] eine Klassifizierung der Stoßregimes in Abhängigkeit von den relevanten Kenngrößen aus Stoßparameter⁷ b und der Weber-Zahl We_{Koll} des kleineren Stoßpartners vor.

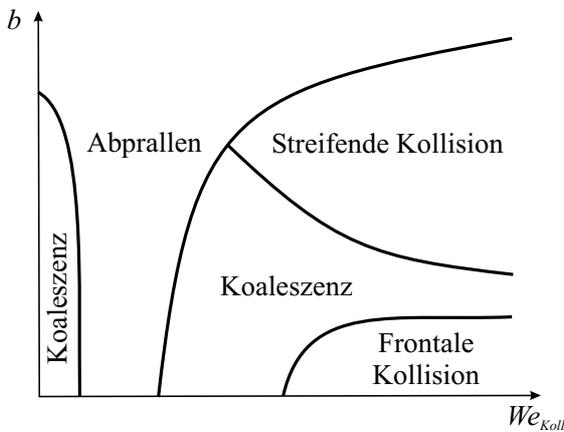


Abb. 4.5: Kollisionsbereiche für binäre Tropfenkollisionen nach Jiang et al. [71].

$$We_{Koll} = \frac{\rho_{Fl} d_{Tr} u_{rel}^2}{\sigma_{Fl}}, \quad (4.22)$$

Sie unterscheiden prinzipiell vier Bereiche – Abprallen, Koaleszenz, frontale und streifende Kollision. Beim Abprallen verhindert ein Gaspolster den Oberflächenkontakt der Tropfen, während bei Koaleszenz die Stoßpartner vollständig verschmelzen. Bei frontaler und streifender Kollision erfolgt jeweils ein kurzzeitiges Verschmelzen, ehe die Stoßpartner wieder zerfallen. Mit zunehmender Weber-Zahl treten zusätzlich

⁷Der Stoßparameter $b = x / (r_{Tr,1} + r_{Tr,2})$ ist definiert als Verhältnis aus der Entfernung x des Tropfenmittelpunkts mit dem Relativgeschwindigkeitsvektor des anderen Tropfens und der Summe der Tropfenradien [71].

Satellitentropfen auf. Der Unterschied der beiden Kollisionsregimes liegt im Verlauf der Tropfentrajektorien, die entweder eine frontale oder streifende Kollision zur Folge haben.

Die Stoßmodellierung gliedert sich in zwei Teile. Im *Kollisionsmodell* wird die Häufigkeit der Stöße berechnet. Das *Koaleszenzmodell* legt die Art der Tropfeninteraktion fest. In Anlehnung an die kinetische Gastheorie wird eine diskretisierungsinvariante Stoßfrequenz

$$\nu_{12} = n_2 \pi (r_{Tr,1} + r_{Tr,2})^2 E_{12} |\vec{u}_{Tr,1} - \vec{u}_{Tr,2}| \quad (4.23)$$

definiert, in der n die Tropfenanzahldichte, r_{Tr} den Radius und \vec{u}_{Tr} die Geschwindigkeit der Tropfen in Partikel 1 bzw. 2 beschreiben. In viskosen Strömungen kann die Änderung der Gasgeschwindigkeit dazu führen, dass gegenüber der idealen, geradlinigen Tropfentrajektorie die Tropfen abgelenkt werden und sich damit die Wirksamkeit der Kollision $E_{12} < 1$ reduziert. E_{12} ist definiert als Verhältnis der Volumina des tatsächlichen und des idealen Kollisionszylinders, der aus $\pi (r_{Tr,1} + r_{Tr,2})^2 u_{rel} \Delta t$ mit dem Zeitschritt Δt gebildet wird. O'Rourke und Bracco [93] legten für Kollisionsanzahl n eine Poisson-Verteilung zugrunde.

$$\psi(n) = \frac{(\nu_{12} \Delta t)^n}{n!} e^{-\nu_{12} \Delta t} \quad (4.24)$$

Kollisionen treten dann auf, wenn die Wahrscheinlichkeit $\psi(n)$ für keine Kollision ($n = 0$) kleiner ist als eine stochastisch ermittelte Zufallszahl $X \in [0, 1]$. Die Art der Tropfeninteraktion kann nach Brazier-Smith et al. [19] durch Vergleich der Rotationsenergie des Agglomerats E_{rot} mit der Oberflächenspannungsenergie E_σ , welche für die erneute Trennung erforderlich ist, bestimmt werden. Die Bilanzierung beider Energien $E_{rot} = E_\sigma$ führt auf einen kritischen Tropfenabstand.

$$b_{krit} = \sqrt{\frac{12 (r_{Tr,1} + r_{Tr,2})^2}{5 W e_{Koll}}} f(\gamma) \quad \text{mit} \quad f(\gamma) = \frac{(\gamma^3 + 1)^{\frac{11}{3}}}{\gamma^6 (\gamma + 1)^2} \left[\gamma^2 + 1 - (\gamma^3 + 1)^{\frac{2}{3}} \right] \quad (4.25)$$

Darin beschreibt $\gamma = r_{Tr,1}/r_{Tr,2} \geq 1$ das Verhältnis der Tropfenradien. Zur eindeutigen Differenzierung von Kollision und Koaleszenz führte O'Rourke [94] eine Koaleszenzeffektivität

$$E_{Kool} = \frac{b}{b_{krit}} \quad (4.26)$$

ein, worin der Stoßparameter $b = X (r_{Tr,1} + r_{Tr,2})$ mit einer Zufallsvariablen $X \in [0, 1]$ stochastisch bestimmt wird. Koaleszenz tritt dann auf, wenn die Oberflächenspannungsenergie überwiegt ($E_{Kool} > 1$). Im Fall $E_{Kool} < 1$ trennen sich die Tropfen nach dem Verschmelzen wieder.

Die numerische Beschreibung der Stoßprozesse ist äußerst rechenzeitintensiv, da die Kollisionsfrequenz ν_{12} aus Gl. (4.23) eine Zweipunkt-Korrelation beinhaltet (siehe dazu Krüger [77]). Sie konvergiert äußerst langsam und muss aus Gründen der statistischen Konvergenz durch eine extrem hohe Partikelanzahl aufgelöst werden. Für praxisnahe motorische Anwendungen ist eine sinnvolle Abbildung der Stoßprozesse nicht möglich.

4.3 Bewegungsgleichungen des Tropfens

Die Bewegungsgleichungen für einen sphärischen Tropfen, der sich mit der Geschwindigkeit $\vec{u}_{Tr} = (u_{Tr}, v_{Tr}, w_{Tr})$ in einem Strömungsfeld bewegt, leiten sich aus dem zweiten Newton'schen Gesetz mittels der Bilanzierung von äußeren Kräften und der Massenträgheitskraft ab.

$$\frac{\vec{F}}{m_{Tr}} = \frac{d\vec{u}_{Tr}}{dt} = -\frac{3}{8} \frac{\rho_G}{\rho_{Fl}} \frac{c_w}{r_{Tr}} |\vec{u}_{Tr} - \vec{u}_G| (\vec{u}_{Tr} - \vec{u}_G) \quad (4.27)$$

Der Term auf der rechten Seite beschreibt die spezifische Beschleunigungskraft aus der Relativbewegung $\vec{u}_{rel} = \vec{u}_{Tr} - \vec{u}_G$ zwischen Tropfen und Gas mit dem Widerstandsbeiwert c_w . Kräfte durch Gravitation, lokale Druckgradienten und Auftrieb aufgrund asymmetrischer Anströmung, wie sie bei merklichem Drall des Tropfens (Magnus-Auftrieb) oder Geschwindigkeitsgradienten quer zur Anströmung (Saffmann-Auftrieb) vorliegen, werden nicht berücksichtigt.

Für den Tropfenwiderstand muss, aufgrund der Komplexität der Strömungsvorgänge, auf experimentelle Untersuchungen und daraus abgeleitete empirische Beziehungen zurückgegriffen werden. Im Grenzfall sphärischer Tropfen und sehr kleiner Reynolds-Zahl der Gasphase $Re_G \rightarrow 0$ folgt der Widerstandsbeiwert dem Stokes'schen Gesetz [142]:

$$c_w = \frac{24}{Re_G} \quad (4.28)$$

Mit *steigender Reynolds-Zahl* verändert sich das Strömungsfeld um den Tropfen (siehe [127]). Von einer anfangs anliegenden Strömung ($Re_G < 20$) nimmt die Asymmetrie der Strömung zu, und es treten Ablösungen auf. Bei $Re_G > 130$ entstehen Instabilitäten im Rückströmgebiet, verbunden mit periodisch abgelösten Wirbeln (Kármán'sche Wirbelstrasse). Im unterkritischen Bereich $400 < Re_G < 3.5 \cdot 10^5$ steigt die Frequenz der Wirbelablösungen an und der Ablösepunkt beginnt um den Tropfen zu rotieren. Im überkritischen Bereich $Re_G > 3.5 \cdot 10^5$ treten markante Wechsel im Strömungsfeld ein, wodurch die bislang laminare Grenzschicht in eine turbulente Grenzschicht umschlägt, bevor diese sich vom Körper ablöst. Dieses Verhalten kann nach Putnam [104] für eine starre⁸ Kugel im unterkritischen Bereich näherungsweise durch folgende Korrelation für den Widerstandsbeiwert abgebildet werden.

$$c_{w,Kugel} = \begin{cases} \frac{24}{Re_G} \left(1 + \frac{1}{6} Re_G^{\frac{2}{3}} \right) & \text{für } Re_G \leq 1000 \\ 0.424 & \text{für } Re_G > 1000 \end{cases} \quad (4.29)$$

Mit *zunehmender Volumenkonzentration der Tropfen* wird der Widerstand des Einzeltropfens stark vom benachbarten Tropfen beeinflusst. Tropfen, die in Richtung ihrer Anströmung in Tandemanordnung ausgerichtet sind, erfahren aufgrund von Nachlaufeffekten einen reduzierten Widerstand. Eine Reihe von Ansätzen zur Ermittlung des Widerstandsbeiwertes für Tropfen- oder auch Partikelkollektive geht davon aus, dass durch die benachbarten Teilchen die Anströmung und damit die Reynolds-Zahl beeinflusst wird. Dem kann z.B. durch Einführung einer modifizierten Fluidviskosität $\tilde{\mu}_G = \mu_G f(\alpha_{Fl})$ Rechnung getragen werden. Demgegenüber zeigen Untersuchungen von Rowe [126] an fixierten, symmetrisch angeordneten Kugeln eine Zunahme des Widerstandsbeiwertes mit wachsendem Volumenanteil der dispersen Phase. Unter diesem Gesichtspunkt korrigieren O'Rourke und Bracco [93] für dichte Strahlen den Widerstandsbeiwert c_w für $Re_G \leq 1000$ aus Gl. (4.29) mit dem Volumenanteil der Flüssigphase $\alpha_{Fl} = V_{Fl}/V_{Ges}$.

$$c_w = \frac{24}{Re_G} \left((1 - \alpha_{Fl})^{-2.65} + \frac{1}{6} Re_G^{2/3} (1 - \alpha_{Fl})^{-1.78} \right) \quad (4.30)$$

Im Grenzfall $\alpha_{Fl} \rightarrow 0$ konvergiert der Ausdruck aus Gl. (4.30) hin zu Gl. (4.29) für $Re_G \leq 1000$.

Die Gültigkeit von Gl. (4.29) und Gl. (4.30) ist beschränkt auf sphärische Tropfen. Eine *Tropfenverformung* führt jedoch zu veränderten Strömungsverhältnissen, die wiederum den Tropfenwiderstand beeinflussen. Liu et al. [84] verwendeten das TAB-Modell (siehe Kap. 4.1.4) zur

⁸d.h. ohne tropfeninterne Strömung (siehe dazu auch Kap. 5.1)

Korrektur des Widerstandsbeiwertes mit dem Formwiderstandsbeiwert $c_{w,F}$, der sich aus der Schwingungsamplitude y des Tropfens errechnet.

$$c_{w,def} = c_{w,Kugel} + c_{w,F} \quad \text{mit} \quad c_{w,F} = 2.632 y c_{w,Kugel} \quad (4.31)$$

Am Beispiel deformierter Wassertropfen entwickelte Wiegand [164] eine empirische Korrelation für den Formwiderstandsbeiwert.

$$c_{w,F} = We_G (0.2319 - 0.1579 \log(Re_G) + 0.0471 \log(Re_G)^2 - 0.0042 \log(Re_G)^3) \quad (4.32)$$

Die *Tropfenverdampfung* führt durch den abdampfenden Massenstrom zu einer Krümmung der Stromlinien (*Stefan-Strömung*), wodurch ein veränderter Tropfenwiderstand resultiert. Renksizblut und Yuen [122] quantifizierten diesen Effekt in numerischen Untersuchungen mit dem Faktor $(1 + B_M)$ mit der Massentransportzahl B_M , um den sich der Widerstandsbeiwert ändert.

$$c_{w,Verd} = \frac{c_w}{1 + B_M} \quad (4.33)$$

Demnach verringert sich der Tropfenwiderstand bei Verdampfung ($B_M > 0$) und vergrößert sich bei Kondensation ($B_M < 0$).

4.4 Turbulente Dispersion

4.4.1 Klassifizierung der turbulenten Dispersionsregimes

Bei der Hochdruck-Benzin-Direkteinspritzung in Ottomotoren induziert der eingespritzte Kraftstoff im umgebenden Gas eine Strömung, die sowohl bei früher Einspritzung im Saughub als auch bei später Einspritzung im Kompressionstakt turbulent ist. Neben dem Austausch von Impuls durch die Relativbewegung des Tropfens zur mittleren Gasströmung erfolgt ein Impulsaustausch durch die turbulenten Fluktuationen des Umgebungsgases. Aufgrund des stochastischen Charakters der Turbulenz nimmt der mittlere Tropfenabstand zu, so dass die Tropfen effektiv auseinander streben. Der Mechanismus wird als turbulente Dispersion bezeichnet. Er ist im Düsennahbereich von besonderer Bedeutung, da es in den Scherschichten der Gasphase zur Turbulenzproduktion kommt, wodurch die Aufweitung des Einspritzstrahls und folglich das Eindringverhalten sowie die Strahlstruktur maßgeblich beeinflusst werden.

Die Charakterisierung der turbulenten Dispersion erfolgt anhand von zwei Gesichtspunkten – zum einen an der Richtung der Wirkungsmechanismen und zum anderen an der Art der Kopplung zwischen Tropfendynamik und der Turbulenz der Gasphase. Letztere wird durch die Stokes-Zahl St beschrieben (siehe Crowe [30]).

$$St \equiv \frac{\tau_a}{\tau_G} \quad (4.34)$$

Die aerodynamische Relaxationszeit τ_a stellt das Ansprechverhalten des Tropfens auf die Fluktuationen der turbulenten Gasströmung dar. Gegenüber der Definition von St nach Gl. (2.27) ist die Kollisionszeitskala τ_K durch eine charakteristische Zeitskala der Gasphase τ_G ersetzt. Entspricht τ_G dem integralen Zeitmaß τ_t der turbulenten Strömung nach Gl. (2.3), reflektiert die Stokes-Zahl St das Ansprechverhalten der Tropfen auf die größeren, energiereicheren turbulenten Wirbel. In Abhängigkeit von St ist eine grobe Klassifizierung in drei Regimes möglich, die in Abb. 4.6 dargestellt sind. Das erste Regime (siehe Abb. 4.6 a) beschreibt den Grenzfall großer Stokes-Zahlen $St \gg 1$, bei dem sich die Tropfen aufgrund ihres geringen Widerstands-Trägheits-Verhältnisses unbeeinflusst von der turbulenten und der mittleren Gasströmung bewegen.

Im zweiten Regime ($St \approx 1$) liegt eine stärkere kinematische Kopplung der Phasen vor und die Tropfen folgen der mittleren Gasströmung (siehe Abb. 4.6 b). Im dritten Regime (siehe Abb. 4.6 c), d.h. im Grenzfall kleiner Stokes-Zahlen $St \ll 1$, zeigen die Tropfen eine äußerst schnelle Anpassung an die turbulente Gasströmung und befinden sich in dynamischem Gleichgewicht mit der Umgebung.

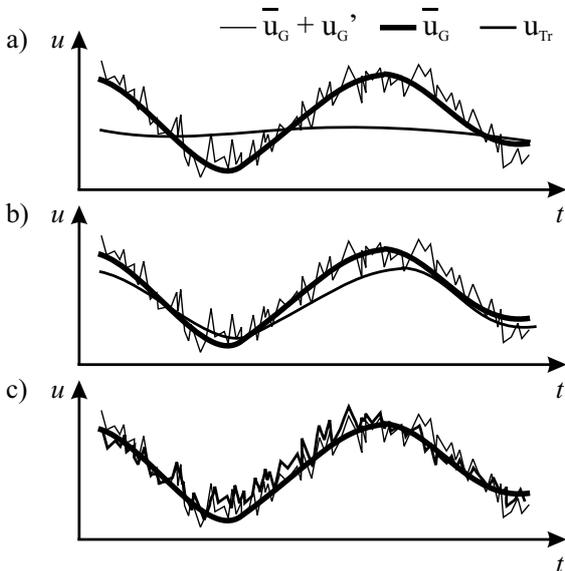


Abb. 4.6: Turbulente Dispersionsregimes für a) $St \gg 1$, b) $St \approx 1$ und c) $St \ll 1$.

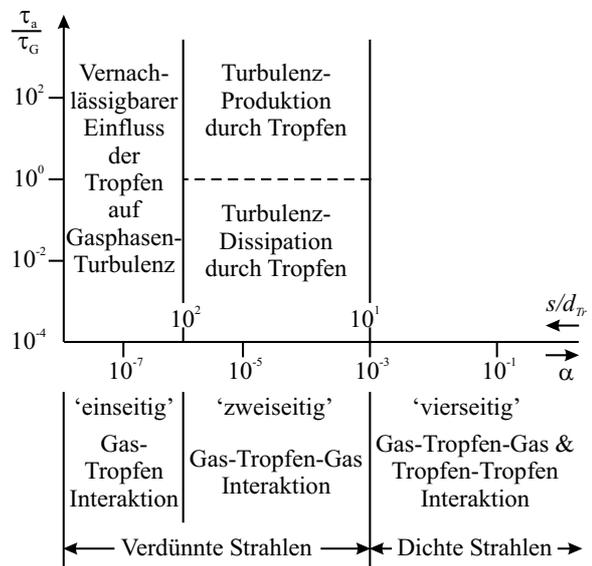


Abb. 4.7: Wechselwirkung zwischen Tropfen und Gas nach Elghobashi [40].

Die Richtung der Wirkungsmechanismen von turbulenter Gasströmung und Tropfenbewegung ist abhängig vom Volumenanteil α_{Fl} der Flüssigphase bzw. dem Verhältnis aus dem Abstand benachbarter Tropfen und dem Tropfendurchmesser s/d_{Tr} . Elghobashi [40] nahm mit Hilfe dieser Größen eine Unterteilung in ein-, zwei- und vierseitige Kopplung von Gas- und Flüssigphase vor. Die verschiedenen Regimes sind in Abb. 4.7 dargestellt. Bei geringem Flüssigkeitsvolumenanteil α_{Fl} oder großem s/d_{Tr} -Verhältnis wird die Tropfendynamik durch die Turbulenz der Gasphase beeinflusst, während Rückwirkungen auf die Gasphasen-Turbulenz vernachlässigbar sind. Mit zunehmendem α_{Fl} bzw. reduziertem s/d_{Tr} nehmen Rückkopplungseffekte zu. Neben dem Einfluss der Turbulenz der Gasphase auf die Tropfenbewegung führt der höhere volumetrische Flüssigkeitsanteil zu einer Änderung der Turbulenzstruktur der Gasströmung. Bei konstantem Volumenanteil bewirken kleine Tropfen aufgrund ihrer größeren Flüssigkeitsoberfläche eine Zunahme der Dissipation der turbulenten kinetischen Energie. Große Tropfen hingegen begünstigen die Turbulenzproduktion. Elghobashi [40] gibt als Grenze $\tau_a/\tau_G = 1$ an. Gore und Crowe [49] fanden durch Zusammenfassung experimenteller Untersuchungen verschiedener Autoren den Wert $\tau_a/\tau_G \approx 0.1$. Während in verdünnten Strahlen die Dispersion durch aerodynamische Kräfte kontrolliert wird, liegt bei dichten Strahlen eine vierseitige Kopplung vor. Für letztere muss neben der Wechselwirkung zwischen Tropfen und Gas zusätzlich die erhöhte Wahrscheinlichkeit für Tropfenkollisionen berücksichtigt werden.

Bei der motorischen Direkteinspritzung wird von verdünnten Strahlen ausgegangen (siehe [7]), die eine ein- bzw. zweiseitige Kopplung beinhaltet. Ferner liegt aufgrund der ablaufenden Zerfallsvorgänge ein breites Tropfengrößenspektrum vor, so dass die in Abb. 4.6 dargestellten Regimes gemeinsam auftreten. Die physikalische Modellierung der Mechanismen wird im nachfolgenden Kapitel zusammenfassend dargestellt (siehe auch Crowe et. al [32] und O'Rourke [96]).

4.4.2 Konventionelle turbulente Dispersionsmodelle

Den Ausgangspunkt der mathematischen Beschreibung der turbulenten Dispersion bildet die Tropfenbewegungsgleichung (4.27). Durch Aufteilung des Momentanwertes der Gasphasengeschwindigkeit $\vec{u}_G = \vec{\tilde{u}}_G + \vec{u}'_G$ in eine gemittelte und fluktuierende Komponente $\vec{\tilde{u}}_G$ bzw. \vec{u}'_G ergibt sich die so genannte Langevin-Gleichung, deren linearisierte Form lautet:

$$\frac{d\vec{u}_{Tr}}{dt} = D_a \left(\vec{\tilde{u}}_G + \vec{u}'_G - \vec{u}_{Tr} \right) \quad \text{mit} \quad D_a = \frac{3}{8} \frac{\rho_G}{\rho_{Fl}} \frac{c_w}{r_{Tr}} |\vec{\tilde{u}}_{G,0} + \vec{u}'_{G,0} - \vec{u}_{Tr,0}| \quad (4.35)$$

$$\frac{d\vec{x}_{Tr}}{dt} = \vec{u}_{Tr} \quad (4.36)$$

Darin beschreibt $D_a = 1/\tau_a$ den Kehrwert der aerodynamischen Relaxationszeit τ_a . Die turbulente Dispersion ist in Gl. (4.35) über die stochastische (Langevin-) Kraft aus der turbulenten Schwankungsgeschwindigkeit \vec{u}'_G der Gasphase enthalten.

Unter der Voraussetzung isotroper Turbulenz bestimmten Gosman und Ioannides [50] die turbulenten Fluktuationen der Gasphase \vec{u}'_G stochastisch aus einer Gauß-Verteilung, deren Varianz σ^2 sich proportional zur mittleren turbulenten kinetischen Energie \tilde{k} der Gasphase verhält.

$$\psi(u'_G) = \frac{1}{(\sqrt{2\pi}\sigma)^3} \exp\left(-\frac{u'^2_G}{2\sigma^2}\right) \quad \text{mit} \quad \sigma^2 = \frac{2}{3}\tilde{k} \quad (4.37)$$

Die zeitliche Dauer der Interaktion zwischen Tropfen und der Turbulenz der Gasphase wird durch die Korrelationszeit τ_{korr} beschrieben. Für kleine Tropfen, die unmittelbar der Turbulenz folgen, entspricht τ_{korr} dem integralen Zeitmaß τ_t der turbulenten Gasströmung. Größere Tropfen hingegen passieren aufgrund ihres geringen Widerstands-Trägheitsverhältnisses die turbulenten Wirbel in einer kürzeren Zeit (engl. „crossing trajectory effect“). Im Ansatz nach Dukowicz [37] wird die turbulente Gasgeschwindigkeit \vec{u}'_G über τ_{korr} konstant angenommen. Die Korrelationszeit τ_{korr} bildet er aus dem Minimum der turbulenten Zeitskala τ_t und der Zeit τ_c , die ein Tropfen zum Durchqueren eines Wirbels benötigt.

$$\tau_t = C_\mu \frac{\tilde{k}}{\epsilon} \quad \text{und} \quad \tau_c = \frac{l_t}{|\vec{u}_G - \vec{u}_{Tr}|} \quad \text{mit} \quad l_t = C_\mu^{\frac{3}{4}} \frac{\tilde{k}^{3/2}}{\epsilon} \quad (4.38)$$

Die direkte Lösung von Gl. (4.35) ist im Fall, dass die Korrelationszeit kleiner als der Rechenzeitschritt ($\tau_{korr} < \Delta t$) ist, nicht mehr möglich, da der Tropfen während eines Zeitschrittes mehr als eine stochastische Kraft erfährt.

O'Rourke [96] entwickelte hierfür einen Ansatz, welcher die Zeitintervalle Δt und τ_{korr} relativ zueinander betrachtet. Für den Fall $\tau_{korr} > \Delta t$ wird, wie oben beschrieben, Gl. (4.35) mittels Gl. (4.37) direkt stochastisch gelöst. Für $\tau_{korr} < \Delta t$ berücksichtigt O'Rourke die zeitliche Dauer der Geschwindigkeitskorrelationen. Unter der Voraussetzung, dass für homogen-isotrope Turbulenz die Geschwindigkeitskomponenten \vec{u}'_G gaußverteilt sind und $D_a = const.$ über der Korrelationszeit τ_{korr} ist, erhält er durch analytische Integration von Gl. (4.35) die Lösung

$$\vec{u}_{Tr} = \vec{u}_G [1 - \exp(-D_a t)] + \exp(-D_a t) \left(\vec{u}_{Tr,0} + \int_{t_0}^t \exp(D_a \tau) D_a \vec{u}'_G d\tau \right) \quad (4.39)$$

und folgende Varianzen für Ort und Geschwindigkeit des Tropfens.

$$\sigma_{xx}^2 = \sigma^2 \left[\frac{\sigma_{uu}^2}{D_a^2 \sigma^2} - \frac{2\tau_{korr}}{D_a} (1 - \exp(-D_a \Delta t)) + \tau_{korr} \Delta t \right] \delta_{ij} \quad (4.40)$$

$$\sigma_{uu}^2 = \sigma^2 \frac{1 - \exp(-D_a \tau_{korr})}{1 + \exp(-D_a \tau_{korr})} [1 - \exp(-2D_a \Delta t)] \delta_{ij} \quad (4.41)$$

Die Berücksichtigung des unterschiedlichen Ansprechverhaltens der Tropfen auf eine veränderte Gasströmung ist über die Stokes-Zahl $D_a \tau_{korr} = 1/St$ in Gl. (4.41)-(4.40) implizit enthalten. Für die in Abb. 4.6 dargestellten Grenzfälle reduzieren sich die Varianzen zu:

$$\begin{aligned} St \gg 1 : \quad \sigma_{uu}^2 &= \frac{\sigma^2}{2} D_a \tau_{korr} \delta_{ij} & \text{und} & \quad \sigma_{xx}^2 = \sigma^2 \tau_{korr} \Delta t \delta_{ij} \\ St \ll 1 : \quad \sigma_{uu}^2 &= \sigma^2 \delta_{ij} & \text{und} & \quad \sigma_{xx}^2 = \sigma^2 \tau_{korr} \Delta t \delta_{ij} \end{aligned} \quad (4.42)$$

Gegenwärtig stellt das turbulente Dispersionsmodell von O'Rourke [96] das Standardmodell im CFD-Programm *Kiva-3v* [7] dar.

4.5 Modellbildung für die Strahldynamik bei A-Düsen

In den vorangegangenen Kapiteln wurden die Grenzen der konventionellen Strahlmodellansätze für ihre ottomotorische Anwendung auf strahlgeführte Brennverfahren aufgezeigt. Die Bereitstellung geeigneter Lösungsansätze ist das Ziel der vorliegenden Arbeit. Dabei ist der Fokus auf die Modellierung der folgenden drei Mechanismen gerichtet:

- Kopplung von Düseninnenströmung und Gemischbildung
- Turbulenter Strahlaufbruch und Tropfenzerfall
- Turbulente Dispersion

Die zur Abbildung dieser Prozesse entwickelten Teilmodelle werden mit verfügbaren Ansätzen aus der Literatur zu einem vollständig geschlossenen Strahldynamikmodell zusammengeführt. Eine detaillierte Beschreibung der Modelle wird in den folgenden Kapiteln gegeben.

4.5.1 Kopplung von Düseninnenströmung und Gemischbildung

Die konventionelle 3D-Simulation von Einspritzvorgängen beginnt am Düsenaustritt unter der Annahme, dass die Flüssigphase bereits in Form von diskreten Tropfen vorliegt. Die Anfangsrandbedingungen, wie Tropfengröße und -geschwindigkeit, sind dabei unbekannt und müssen durch sinnvolle Annahmen abgeschätzt werden. Mit Hilfe der Düseninnenströmungssimulation können einerseits die strömungsmechanischen Startbedingungen definiert und andererseits auch die Anfangstropfengröße mit geeigneten Primärzerfallsansätzen abgeleitet werden.

Eine kontinuierliche Einspritzberechnung, beginnend mit der Flüssigphase in der Düse über den Aufbruch bis hin zu diskreten Tropfen, ist aufgrund der stark unterschiedlichen physikalischen Größenskalen (siehe Kap. 3.2.1 und 4.1.2) nicht möglich. Ein alternatives Konzept ist in Abb. 4.8 dargestellt und besteht aus der diskontinuierlichen Kopplung von Düseninnenströmung und Gemischbildung. Dabei erfolgt die Simulation der mehrphasigen Düseninnenströmung⁹ unter konstanten Randbedingungen im ersten Schritt entkoppelt von der Gemischbildung. Die lokalen Strömungsvariablen am Düsenaustritt werden dann in Form einer Matrix in Abhängigkeit des Nadelhubs abgelegt. Im zweiten Schritt wird diese lokale Information in integrale, zeitabhängige Größen transformiert und als Anfangsrandbedingung der Gemischbildungsrechnung aufgeprägt.

⁹Die Mehrphasigkeit berücksichtigt aus numerischer Sicht neben der reinen Kraftstoffflüssigkeit in einer zweiten Phase den Kraftstoffdampf infolge von Kavitation sowie in der dritten Phase die in der Düse eingeschlossene/ingesaugte Umgebungsluft. Im physikalischen Sinne existieren zwei Phasen – Gas- und Flüssigphase.

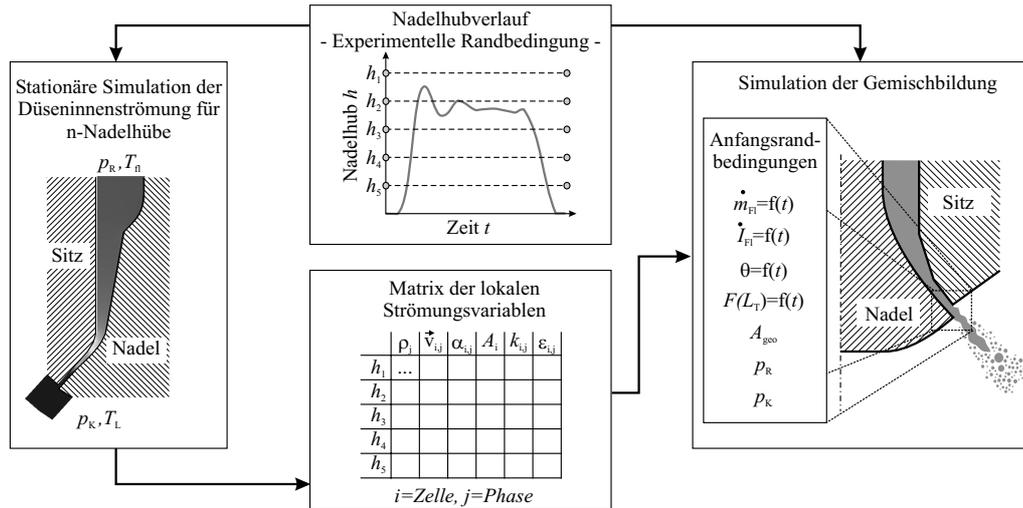


Abb. 4.8: Kopplung von quasi-stationärer Düseninnenströmungsberechnung und transienter Gemischbildungssimulation.

Die Art der Kopplung könnte prinzipiell sowohl auf instationärer als auch quasi-stationärer Berechnung der Düseninnenströmung beruhen. Da die Strömungsgeschwindigkeit in der Düse $v_D \approx 100 \dots 200 \text{ m/s}$ aber deutlich größer als die Nadelhubgeschwindigkeit $v_N \approx 0.2 \text{ m/s}$ ist, „sieht“ die Strömung in der Düse die veränderte Geometrie als Folge der Nadelbewegung nicht und kann daher als quasi-stationär behandelt werden. In der quasi-stationären Behandlung wird die Düseninnenströmung stationär für diskrete Nadelhübe berechnet. Die Auswahl der charakteristischen Nadelhübe richtet sich an die Anforderung, den Nadelhubverlauf möglichst detailliert abzubilden, wie z.B. Öffnungs- und Schließflanke, maximaler Hub und stationäre Öffnungsphase.

Die in der Ergebnismatrix der Düseninnenströmungsberechnung abgelegte lokale Information beinhaltet Dichte $\rho_{i,j}$, Geschwindigkeitsvektor $\vec{v}_{i,j}$, Volumenfraktion $\alpha_{i,j}$, Fläche A_i , turbulente kinetische Energie $k_{i,j}$ und Dissipation $\epsilon_{i,j}$ der Rechenzelle i für die Phase j . Für die einphasige Gemischbildungsrechnung, welche ausschließlich die reine Flüssigphase berücksichtigt, wird die mehrphasige, räumliche Information gemittelt. Bei den integralen Größen handelt es sich um den über die Düsenaustrittsfläche A aufintegrierten Massen- und Impulsstrom \dot{m}_{Fl} bzw. \dot{I}_{Fl} . Für eine mehrphasige Strömung, bestehend aus Flüssigkeit, Dampf und Umgebungsluft, setzen sich der integrale Massen- und Impulsstrom aus der Summe der einzelnen Phasen zusammen.

$$\dot{m}_{Fl} = \int_A \sum_{j=Fl,D,L} \rho_{i,j} \alpha_{i,j} u_{i,j} dA \quad \text{und} \quad \dot{I}_{Fl} = \int_A \sum_{j=Fl,D,L} \rho_{i,j} \alpha_{i,j} u_{i,j}^2 dA \quad (4.43)$$

Nach Gl. (4.43) verhält sich der Massenstrom \dot{m}_{Fl} proportional zur Strömungsgeschwindigkeit u , während die Geschwindigkeit u quadratisch in den Impulsstrom \dot{I}_{Fl} mit einfließt. Zur Erhaltung von integralem Massen- und Impulsstrom wird daher eine gegenüber der geometrischen Düsenaustrittsfläche A_{geo} reduzierte effektive Fläche A_{eff} eingeführt (siehe Abb. 4.9). Über die dadurch erhöhte effektive Strömungsgeschwindigkeit u_{eff} wird gewährleistet, dass das effektive Profil in Abb. 4.9 den selben Massen- und Impulsstrom aufweist wie das reale Geschwindigkeitsprofil.

$$\dot{m}_{Fl} = \rho_{Fl} u_{eff} A_{eff} \quad \text{und} \quad \dot{I}_{Fl} = \rho_{Fl} u_{eff}^2 A_{eff} \quad (4.44)$$

Die Bestimmung der effektiven Größen A_{eff} und u_{eff} erfolgt mit Hilfe der dimensionslosen Düsenbeiwerte für Durchfluss C_d , Kontraktion C_a und Geschwindigkeit C_v

$$C_d = \frac{\bar{u}}{u_B} = C_a C_v, \quad C_a = \frac{A_{eff}}{A_{geo}} \quad \text{und} \quad C_v = \frac{1}{u_B} u_{eff} = \frac{1}{u_B} \frac{\dot{I}_{Fl}}{\dot{m}_{Fl}}, \quad (4.45)$$

wobei die mittlere und maximale Strömungsgeschwindigkeit definiert sind durch:

$$\bar{u} = \frac{\dot{m}_{Fl}}{\rho_{Fl} A_{geo}} \quad \text{und} \quad u_B = \sqrt{\frac{2(p_R - p_K)}{\rho_{Fl}}}. \quad (4.46)$$

Die Bernoulli-Geschwindigkeit u_B tritt bei verlustfreier Durchströmung der Düse auf und wird aus der Differenz der Drücke aus „Rail“ p_R und Kammer (Brennraum) p_K bestimmt.

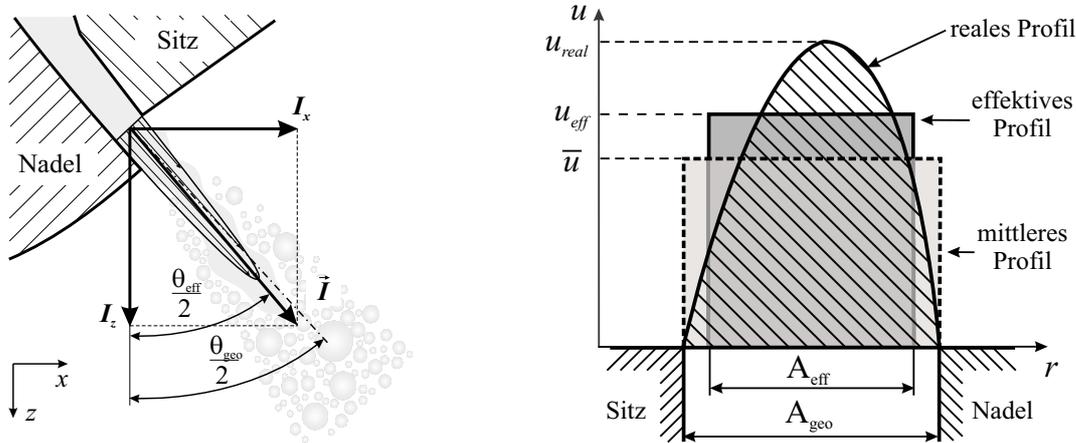


Abb. 4.9: Impulsvektor (links) und Geschwindigkeitsprofil (rechts) am Düsenaustritt.

Bei der Hochdruck-Benzin-Direkteinspritzung darf Kavitation nicht gänzlich ausgeschlossen werden. Ihr Auftreten innerhalb der Düse kann weitreichende Konsequenzen für die Gemischbildung außerhalb der Düse haben (siehe auch Kap. 4.1.1). Beispielsweise kann Kavitation aufgrund der extremen Dichteunterschiede zu einer Massenungleichverteilung am Austritt führen. Als Resultat geht ein deformiertes Geschwindigkeitsprofil hervor, dessen effektive Ausbreitungsrichtung von der geometrischen abweicht. In der integralen Beschreibung fließt die lokale Form des Geschwindigkeitsprofils nicht mit ein. Der effektive Austrittswinkel θ_{eff} muss daher zeitlich aufgelöst über die Richtung des mittleren Impulsvektors $\vec{I} = (I_x, I_y, I_z)$ berücksichtigt werden (vgl. Abb. 4.9).

$$\theta_{eff} = 2 \arctan(I_x/I_z) \quad (4.47)$$

Darüber hinaus lassen sich auch Strömungsinhomogenitäten über den Umfang des Düsenaustritts erfassen, wie z.B. durch eine inhomogene Kraftstoffzuführung über die Nadelführung. Massen- und Impulsstrom aus Gl. (4.43) müssen dazu mit dem Diskretisierungsgrad der Düseninnenströmungssimulation in Umfangsrichtung als stückweise konstant betrachtet werden. Zusammen mit Gl. (4.44) und (4.45) lässt sich daraus ein über den Umfang inhomogenes, effektives Geschwindigkeitsprofil als Randbedingung für die Gemischbildungssimulation bestimmen.

4.5.2 Turbulenter Primärzerfall

4.5.2.1 Turbulenter Aufbruch des flüssigen Strahlkerns

Bei Einspritzdrücken, wie sie in modernen Ottomotoren mit Hochdruck-Benzin-Direkteinspritzung vorherrschen, nimmt der Einfluss der Vorgeschichte der Strömung auf den Strahlaufbruch eine zentrale Bedeutung ein. Der entscheidende Beitrag für den Primärzerfall ist dabei der Turbulenz der Flüssigphase aus der Düseninnenströmung zu zuschreiben, wie aus der Dimensionsanalyse der wirkenden Kräfte in Kap. 4.1.1 hervorgeht. Heukelbach et al. [59, 60] zeigten sowohl experimentell als auch numerisch an ebenen Flachwasserstrahlen, dass sich durch die Turbulenz

aus der Düseninnenströmung disperse Tropfen vom Strahlkern ablösen und den Aufbruch des intakten, flüssigen Strahlkerns einleiten. Ein ähnliches Verhalten beobachteten bereits Wu et al. [168, 169] in ihren experimentellen Untersuchungen an zylindrischen Wasserstrahlen. Der Mechanismus des turbulenzinduzierten Primäraufbruchs ist auf die turbulenten Normalspannungen der Düseninnenströmung zurückzuführen, die unmittelbar nach dem Düsenaustritt die initialen Störungen auf der Oberfläche des Flüssigkeitsstrahls verursachen (siehe Abb. 4.10). Sie werden durch die turbulenten Fluktuationen der Zuströmung soweit verstärkt, bis sie schließlich Flüssigkeitsligamente vom Strahlkern ablösen und disperse Tropfen bilden. Dabei wird vermutet, dass die charakteristische Längenskala beim Aufbruch proportional zur turbulenten Längenskala ist, mit der die initialen Störungen zu wachsen beginnen (siehe z.B. [67, 168, 68, 15]).

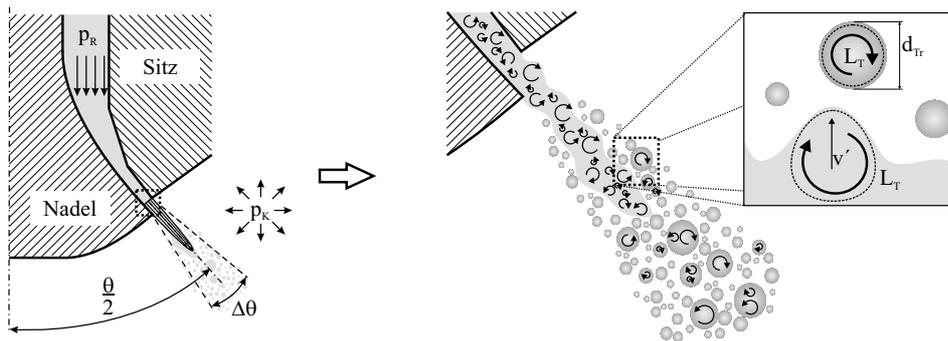


Abb. 4.10: Vorstellung über den turbulenten Strahlaufbruch.

In Kap. 4.1.2 wurde bereits ein Ansatz für den turbulenten Strahlaufbruch nach Huh und Gosman [67] vorgestellt. Die reine Mittelwertbetrachtung der turbulenten Anfangsrandbedingungen, die in [67] über einfache empirische Korrelationen für die Turbulenzgrößen abgeleitet werden, erlauben nur eine äußerst restriktive Abbildung von düsen-spezifischen Sensitivitäten. Wu et al. [168] berichteten bereits darüber, dass die kleinskaligen Oberflächenstörungen und die daraus resultierenden Tropfengrößen stark von der Reynolds-Zahl und damit der Strömung abhängen, während die großskaligen Störungen im Wesentlichen davon unbeeinträchtigt sind. Demzufolge muss für eine detaillierte Modellierung des turbulenten Strahlaufbruchs die Breite des Spektrums der turbulenten Größenskalen berücksichtigt werden. In dieser Arbeit werden die charakteristischen Turbulenzgrößen k und ϵ am Düsenaustritt direkt über die Düseninnenströmungsberechnung als räumlich aufgelöste, nadelhubabhängige Größen berücksichtigt und zusammen mit dem in Kap. 4.5.1 vorgestellten Konzept als Anfangsrandbedingung der Gemischbildungssimulation vorgegeben. Dazu wird die lokale Information der Turbulenz aufgrund der Diskontinuität zwischen kontinuierlicher Düseninnenströmung und disperser Tropfenphase in eine statistische Verteilung für die relevanten turbulenten Längenskalen überführt.

Die Vorgehensweise bei der Ermittlung des turbulenten Längenskalenspektrums am Düsenaustritt ist in Abb. 4.11 schematisch dargestellt. Den Ausgangspunkt bildet die Annahme, dass die Turbulenzeigenschaften (k und ϵ) der drei Phasen für Kraftstoffflüssigkeit, Kraftstoffdampf und Luft identisch sind (phasen-homogene Turbulenz, d.h. $k_{Fl} = k_D = k_L$ und $\epsilon_{Fl} = \epsilon_D = \epsilon_L$)¹⁰. Jeder Rechenzelle i am Düsenaustritt lässt sich über die Turbulenzgrößen $k_{Fl,i}$ und $\epsilon_{Fl,i}$ ein turbulentes Längenmaß $l_{t,i}$ zuordnen. Durch Gewichtung der turbulenten Längenskalen $l_{t,i}$ mit dem Massenstrom \dot{m}_i jeder einzelnen Rechenzelle kann das Spektrum in eine kumulative Verteilung $F(l_t)$ überführt werden. Die in den Schranken $0 \leq F(l_t) \leq 1$ normierte, kumulative Verteilung $F(l_t)$

¹⁰Grundsätzlich ist auch die Berücksichtigung von unterschiedlichen Turbulenzeigenschaften möglich (mehrphasige Turbulenz).

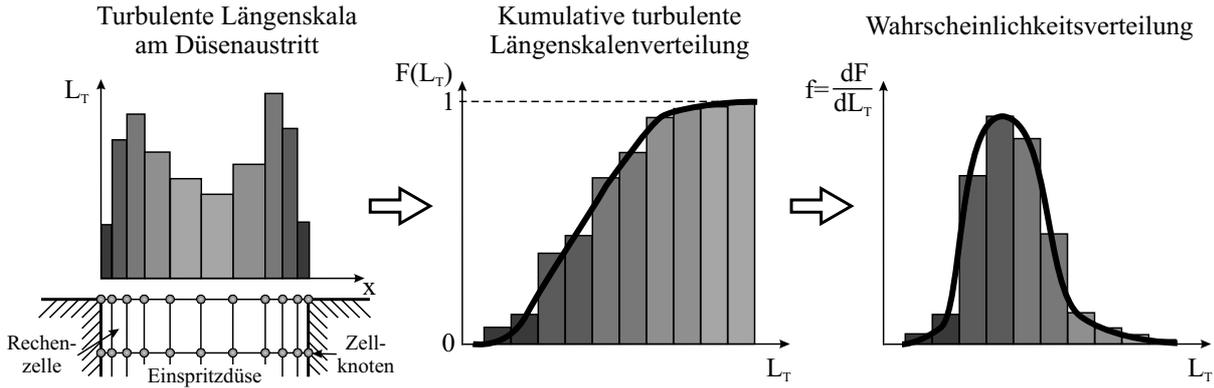


Abb. 4.11: Die turbulenten Längenskalen am Düsenaustritt werden durch Gewichtung mit dem Massenstrom in eine turbulente Längenskalenverteilung transformiert.

lässt sich schreiben als:

$$F(l_t) = \frac{\int_0^{l_t} l_{t,i} \dot{m}_i dl_t}{\int_0^{l_{t,max}} l_{t,i} \dot{m}_i dl_t} \quad \text{mit} \quad \dot{m}_i = \sum_{j=Fl,D,L} \rho_j \alpha_{i,j} u_{i,j} A_i \quad \text{und} \quad l_{t,i} = \frac{k_{i,Fl}^{3/2}}{\epsilon_{i,Fl}} \quad (4.48)$$

Die korrespondierende Wahrscheinlichkeitsverteilung ergibt sich aus Differentiation von $F(l_t)$.

$$f(l_t) = \frac{dF(l_t)}{dl_t} \quad \text{mit} \quad \int_0^{l_{t,max}} f(l_t) dl_t = 1 \quad (4.49)$$

Für jeden charakteristischen Nadelhub der stationären Düseninnenströmungssimulation werden die zugehörigen turbulenten Längenskalenspektren gemäß der oben beschriebenen Methodik ermittelt. In der 3D-Simulation der Einspritzung können dann über den Nadelhubverlauf die Zustände zwischen den charakteristischen Nadelhüben durch lineare Interpolation approximiert werden. Dieses Vorgehen stellt sicher, dass auch über den Einspritzverlauf das transiente Strömungsverhalten in der Düse und die damit verbundene Änderung der turbulenten Skalen am Düsenaustritt berücksichtigt wird.

Einen Sonderfall stellt der Zustand bei infinitesimal kleiner Nadelöffnung dar, da hier laminare Strömung ($Re \rightarrow 0$ für $h \rightarrow 0$) vorliegt. Dieser Zustand wird jedoch aufgrund der steilen Öffnungs- und Schließflanken des Piezo-Aktuators der A-Düse zeitlich sehr schnell durchlaufen, so dass die Relevanz des laminaren Strömungsregimes gegenüber dem turbulenten vernachlässigt werden darf. Die turbulente kinetische Energie k_{Fl} und die Dissipation ϵ_{Fl} können demnach im Zustand $h \rightarrow 0$ durch Extrapolation der beiden nächst größeren Nadelhübe angenähert werden.

Die Inhomogenität der Turbulenz über den Umfang des Düsenaustritts kann in Analogie zum Kopplungskonzept für Massen- und Impulsstrom berücksichtigt werden (siehe Kap. 4.5.1). Mit der Auflösung der Düseninnenströmungsberechnung in Umfangsrichtung werden sektorweise konstante turbulente Längenskalenverteilungen nach Gl. (4.49) bestimmt und für die Gemischbildungssimulation als Anfangsrandbedingung vorgegeben.

Die Tropfengröße wird dem Ansatz von Huh und Gosman [67] folgend proportional zur turbulenten Längenskala l_t angenommen.

$$r_{Tr} = C_{l_t} l_t \quad (4.50)$$

Die turbulente Längenskala l_t selbst wird stochastisch aus der zum Ort und Nadelhub korrespondierenden Längenskalenverteilung ermittelt. Die Modellkonstante C_{l_t} muss iterativ durch

Abgleich der 3D-Simulation mit strahldiagnostischen Aufnahmen ermittelt werden. Mit der Proportionalität von Tropfengröße und turbulentem Längenmaß korreliert Gl. (4.50) gleichzeitig den Tropfenradius mit dem Nadelhub $r_{Tr} \sim h$.

Die Länge des intakten flüssigen Strahlkerns ermittelt sich aus der effektiven Einspritzgeschwindigkeit u_{eff} (siehe Gl. (4.44)) und der Zerfallszeitskala τ_A , die für den turbulenten Strahlaufbruch mit der turbulenten Zeitskala τ_t gleichgesetzt wird.

$$L_A = u \tau = u_{eff} \tau_A \quad \text{mit} \quad \tau_A = \tau_t \quad (4.51)$$

Infolge der turbulenten Fluktuation normal zur Hauptströmungsrichtung ändert sich folglich auch die Bewegungsrichtung der abgelösten Tropfen. Dem wird durch den initialen Öffnungswinkel (Dispersionswinkel) $\Delta\theta$ des Strahls Rechnung getragen.

$$\Delta\theta = 2 \arctan \left(\frac{u'_{Fl}}{|\vec{u}_{Fl}|} \right) \quad \text{mit} \quad u'_{Fl} = \sqrt{\frac{2}{3} k_{Fl}} \quad (4.52)$$

4.5.2.2 Turbulenter Zerfall disperser Tropfen

Auch nach dem Aufbruch des Flüssigkeitsstrahls unterliegen die gebildeten dispersen Tropfen der Wirkung turbulenter Fluktuationen aus der Düseninnenströmung bis hin zur vollständigen Dissipation der Turbulenzenergie. Somit ist auch nach der Tropfenbildung von turbulenzinduziertem Zerfall der Tropfen auszugehen. Nach der in Kap. 4.1 beschriebenen Betrachtungsweise des Primärzerfalls nach Wirkungsmechanismen ist der durch die Turbulenz der Düseninnenströmung verursachte Zerfallsmechanismus weiterhin dem Primärzerfall zu zuordnen.

Die Vorstellung des turbulenten Tropfenzerfalls steht in direkter Analogie zum turbulenten Strahlaufbruch. Infolge turbulenter Fluktuationen im Tropfeninneren wird der selbe in einen Schwingungszustand versetzt, bis Tropfendeformationskräfte die Oberflächenspannungskräfte übersteigen und den Zerfall einleiten. Die Berücksichtigung der Turbulenz als Tropfenzerfallsmechanismus erfordert Kenntnisse über das zeitliche Verhalten der turbulenten kinetischen Energie k_{Fl} und deren Dämpfung ϵ_{Fl} . In Analogie zum k - ϵ -Turbulenzmodell der Gasphase führten Huh et al. [68] Transportgleichungen für die Turbulenzgrößen k_{Fl} und ϵ_{Fl} der Tropfen ein, die von Tatschl et al. [148] um den Kavitationseinfluss aus der Düseninnenströmung erweitert wurden.

$$\frac{dk_{Fl}}{dt} = -\epsilon_{Fl} + S_K \quad \text{und} \quad \frac{d\epsilon_{Fl}}{dt} = -C_{\epsilon 2} \frac{\epsilon_{Fl}}{k_{Fl}} (\epsilon_{Fl} - S_K) \quad (4.53)$$

Die Modellkonstante $C_{\epsilon 2} = 1.92$ wurde vom k - ϵ -Turbulenzmodell übernommen. Die vereinfachten Gleichungen beinhalten keine Diffusions- und Produktionsterme, bis auf einen Kavitationsquellterm S_K . Die durch die Implosion der Kavitationsblasen hervorgerufene Turbulenzenergie geht als Quelle in die k_{Fl} -Gleichung bzw. als Senke in die ϵ_{Fl} -Gleichung ein. Für den Fall, dass keine Kavitation auftritt ($S_K = 0$) sind Gl. (4.53) analytisch lösbar.

$$k_{Fl}(t) = k_{Fl,0} \left(\frac{\epsilon_{Fl,0}}{k_{Fl,0}} (C_{\epsilon 2} - 1) t + 1 \right)^{-\frac{1}{C_{\epsilon 2} - 1}} \quad \text{und} \quad \epsilon_{Fl}(t) = \epsilon_{Fl,0} \left(\frac{k_{Fl}(t)}{k_{Fl,0}} \right)^{C_{\epsilon 2}} \quad (4.54)$$

Die Anfangswerte für $k_{Fl,0} = k_{Fl}(t_0)$ und $\epsilon_{Fl,0} = \epsilon_{Fl}(t_0)$ können aufgrund der hohen Einspritzgeschwindigkeiten und der sich daraus ergebenden kurzen Verweilzeit der Flüssigkeit im intakten Strahlbereich mit den gemittelten Werten am Düsenaustrittsbereich gleichgesetzt werden.

Wird Kavitation berücksichtigt, muss zur Lösung von Gl. (4.53) der Radius der Kavitationsblasen R sowie deren Zerfallsgeschwindigkeit \dot{R} bekannt sein. Unter der Betrachtung von rein mechanischen Effekten wird die zeitliche Änderung des Blasenradius durch die nicht-lineare Rayleigh-Plesset-Gleichung¹¹ beschrieben (siehe Isay [69]).

$$\frac{p_B(t) - p_\infty(t)}{\rho_{Fl}} = R \ddot{R} + \frac{3}{2} \dot{R}^2 + \frac{4\nu_{Fl}}{R} \dot{R} + \frac{2\sigma_{Fl}}{\rho_{Fl}R} \quad (4.55)$$

Darin sind p_B der Druck in der Blase, p_∞ der Umgebungsdruck, ρ_{Fl} die Dichte, ν_{Fl} die kinematische Viskosität und σ_{Fl} die Oberflächenspannung. Die Annahme, dass neben thermischen Effekten auch der Trägheitsterm, die Viskosität und die Oberflächenspannung in Gl. (4.55) vernachlässigbar sind, führt zur von Rayleigh hergeleiteten linearen Differentialgleichung, die analytisch lösbar ist.

$$\dot{R}^2 = \frac{2}{3} \frac{p_B(t) - p_\infty(t)}{\rho_{Fl}} \quad (4.56)$$

Als Anfangsrandbedingung kann der Kavitationsblasenradius $R(t_0)$ zur Zeit $t = t_0$ über die Keimzahl N_K und dem Volumenanteil des Kraftstoffdampfes $\alpha_D = V_D/V_{Ges}$ unter der Annahme konstanter Blasengröße abgeschätzt werden.

$$R(t_0) = \sqrt[3]{\frac{3}{4} \frac{\alpha_D}{\pi N_K}} \quad (4.57)$$

Durch das Kollabieren der Blase wird die umgebende Flüssigkeit schlagartig in Bewegung versetzt. Die freigesetzte kinetische Energie E_{kin} der Flüssigkeit ergibt sich aus:

$$E_{kin} = \frac{\rho_{Fl}}{2} \int_{R_L=R}^{R_L=\infty} 4\pi R_L^2 v_L^2 dR_L = 2\pi \rho_{Fl} R^3 \dot{R}^2 \quad \text{mit} \quad v_L(R_L) = \left(\frac{R}{R_L}\right)^2 \dot{R} \quad (4.58)$$

Darin beschreiben v_L die Geschwindigkeit und R_L den Radius des Ligaments bzw. Tropfens. Tatschl et al. [148] setzten in ihrem Ansatz voraus, dass die gesamte kinetische Energie E_{kin} der in Bewegung versetzten Flüssigkeit in Turbulenzenergie umgewandelt wird. Der Kavitationsquellterm S_K in Gl. (4.53) lässt sich damit aus der zeitlichen Änderung der Energie aller im Ligament der Masse m_L enthaltenen Blasen n_L bestimmen.

$$S_K = \dot{E}_{kin} \frac{n_L}{m_L} \quad (4.59)$$

Der turbulente Tropfenzerfall wird in Analogie zum aerodynamischen Zerfall [120] über ein logarithmisches Zerfallsgesetz für die zeitliche Änderung des Tropfenradius r_{Tr} beschrieben.

$$\dot{r}_{Tr,t} = \left(\frac{dr_{Tr}}{dt}\right)_t = -\frac{r_{Tr} - r_{Tr,t}}{\tau_B} \quad (4.60)$$

Der stabile Tropfenradius $r_{Tr,t}$ und die turbulente Zerfallszeitskala τ_B müssen modelliert werden. Dabei wird angenommen, dass $r_{Tr,t}$ proportional zum turbulenten Längenmaß l_t und τ_B proportional zur turbulenten Zeitskala τ_t ist.

$$r_{Tr,t} = A_t C_\mu^{\frac{3}{4}} \frac{k_{Fl}^{3/2}}{\epsilon_{Fl}} \quad \text{und} \quad \tau_B = B_t \frac{k_{Fl}}{\epsilon_{Fl}} \quad (4.61)$$

Darin beschreibt $C_\mu = 0.09$ eine Konstante aus dem Turbulenzmodell. A_t stellt eine Modellkonstante für den stabilen Tropfenradius und B_t eine Konstante für die Tropfenzerfallszeitskala analog zum aerodynamischen Zerfallsmodell von Reitz [120] dar. Für dieselmotorische Einspritzstrahlen geben Tatschl et al. [148] die Werte der Modellkonstanten mit $A_t = 2$ und $B_t = 10$ an.

¹¹Abgeleitet von L. Rayleigh und von M.S. Plesset auf die Kavitationsblasendynamik übertragen.

Für die ottomotorische Einspritzung ist eine eigene Anpassung der Modellparameter erforderlich.

Der Übergang von Primär- und Sekundärzerfall erfolgt über die Aufbruchsraten des turbulenten und aerodynamischen Zerfalls. Es wird angenommen, dass die höchste Aufbruchrate \dot{r}_{Tr} aus Gl. (4.17) und (4.60) den Zerfallsmechanismus bestimmt.

$$\max(\dot{r}_{Tr,a}, \dot{r}_{Tr,t}) \quad (4.62)$$

4.5.3 Modellierung der turbulenten Dispersion

Die fundamentale Bedeutung der turbulenten Dispersion und deren Einfluss auf die Strahlausbreitung wurde bereits in Kap. 3.2 diskutiert. Exemplarisch ist in Abb. 4.12 die zeitliche Folge eines Einspritzstrahls einer A-Düse¹² ohne und mit Berücksichtigung der turbulenten Dispersion dargestellt. Im Fall mit deaktiviertem turbulenten Dispersionsmodell findet kein Impulsaustausch durch turbulente Interaktion statt, so dass die Aufweitung des Einspritzstrahls lediglich durch den vorgegebenen Strahlöffnungswinkel bestimmt wird und es zu einer charakteristischen „Schnurstrahlbildung“ kommt. Demgegenüber tritt mit dem deterministischen Modell von O’Rourke [96] aus Kap. 4.4.2 ein nicht physikalisches „Zerplatzen“ des Einspritzstrahls auf. Die Ursache ist auf die für A-Düsen typischen kleinen Tropfengrößen zurückzuführen (vgl. Regime 3 in Abb. 4.6). Aufgrund ihrer geringen Trägheit interagieren sie zeitlich lange mit ein und dem selben turbulenten Wirbel, d.h. über große Korrelationszeiten τ_{korr} wirkt die selbe turbulente Schwankungsgeschwindigkeit u' . Mit noch kleineren Tropfen verstärkt sich sogar dieser Effekt des „Zerplatzens“.

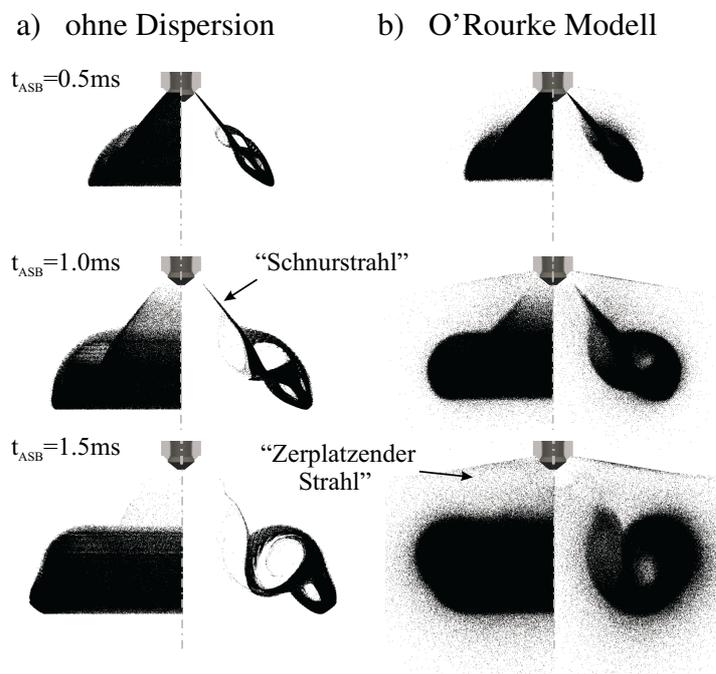


Abb. 4.12: Einspritzstrahlberechnung für eine A-Düse auf einem düsenauflösenden Gitter: a) ohne Dispersionsmodell und b) unphysikalisches „Zerplatzen“ des Strahls mit dem Modell von O’Rourke [96] (Partikeldarstellung: links 3D, rechts 2D-Schnitt).

Die grundlegende Problematik der Modellierungsmethodik von O’Rourke liegt in der „direkten“ Berechnung der Tropfenfluktuation durch die Gasphasenturbulenz. Da aus Auflösungsgesichtspunkten bereits die Gasphase nur statistisch beschrieben werden kann, ist auch für die Flüssigphase eine deterministische Berechnung der turbulenten Fluktuationen nicht sinnvoll zu applizieren (siehe Kap. 3.2.2). Eine alternative Beschreibung der turbulenten Dispersion, welche die explizite Berechnung der turbulenten Fluktuationen umgeht, beruht auf einer Analogie zur kinetischen Gastheorie. Der Beschreibungsweise der Brown’schen Molekularbewegung folgend wird angenommen, dass die Statistik der turbulenten Partikelbewegung die Fokker-Planck-Gleichung¹³ er-

¹²Randbedingungen für die 3D-Simulation der Einspritzung gemäß Kap. 3.2.1.

¹³benannt nach den Physikern Adriaan Daniël Fokker und Max Planck.

füllt. Sie lässt sich aus der auf den Einspritzstrahl übertragenen Boltzmann-Gleichung (Strahlgleichung (2.29)) und der Langevin-Gleichung (4.35) herleiten.

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi}{\partial t} + \nabla_{\vec{x}} \cdot (\psi \dot{\vec{x}}_{Tr}) + \nabla_{\vec{u}} \cdot (\psi \dot{\vec{u}}_{Tr}) + \frac{\partial}{\partial r_{Tr}} (\psi \dot{r}_{Tr}) + \frac{\partial}{\partial T_{Tr}} (\psi \dot{T}_{Tr}) \\ = \nabla_{\vec{x}} \cdot (D_{\vec{x}\vec{x}} \nabla_{\vec{x}} \psi) + \nabla_{\vec{x}} \cdot (D_{\vec{x}\vec{u}} \nabla_{\vec{u}} \psi) + \nabla_{\vec{u}} \cdot (D_{\vec{u}\vec{u}} \nabla_{\vec{u}} \psi) + \dot{f} \end{aligned} \quad (4.63)$$

Darin beinhaltet die Tropfenbeschleunigung $\dot{\vec{u}}_{Tr}$ nun die mittlere Gasgeschwindigkeit \vec{u}_G , während die turbulente Schwankungsgeschwindigkeit u'_G in den drei neu eingeführten Diffusionstermen mit den Koeffizienten $D_{\vec{x}\vec{x}}$, $D_{\vec{x}\vec{u}}$ und $D_{\vec{u}\vec{u}}$ als statistische Information enthalten ist. Die weiteren Terme sind denen der Strahlgleichung (2.29) äquivalent. Die ursprüngliche Fokker-Planck-Gleichung wurde zur Beschreibung der Brown'schen Bewegung, d.h. der Molekülbewegung in einem Gas unter dem Einfluss thermischer Fluktuationen, abgeleitet. Analog hierzu beschreibt Gl. (4.63) die Tropfendynamik in einem Fluid unter der Wirkung turbulenter Fluktuationen.

Krüger [77] verfolgte diesen Ansatz und leitete auf Basis der Fokker-Planck-Gl. (4.63) ein Modell für den Grenzfall großer Tropfen ($St \gg 1$) ab. Allerdings ist gerade aufgrund dieser Annahme die Anwendung für A-Düsen nicht geeignet. Eine allgemeingültige Formulierung der turbulenten Dispersion, welche eine übergreifende Beschreibung der Dispersionsregimes nach Abb. 4.6 erlaubt, basiert auf dem Transport der auf den Tropfen einwirkenden Turbulenzgrößen der Gasphase. Den Ausgangspunkt bei der Herleitung der Tropfentransporteigenschaften bilden die Gleichungen für die zeitliche Änderung der Varianzen für Tropfengeschwindigkeit σ_{uu}^2 und -ort σ_{xx}^2 sowie der Kovarianz σ_{xu}^2 . Mit Hilfe von Gl. (4.35)-(4.36) ergeben sie sich zu:

$$\frac{d}{dt} \sigma_{uu}^2 = \frac{d}{dt} (\overline{u_{Tr,i} u_{Tr,j}} - \overline{u_{Tr,i}} \overline{u_{Tr,j}}) = 2D_a (\overline{u_{Tr,ij} u'_G} - \sigma_{uu}^2) \delta_{ij} \quad (4.64)$$

$$\frac{d}{dt} \sigma_{xu}^2 = \frac{d}{dt} (\overline{x_{Tr,i} u_{Tr,j}} - \overline{x_{Tr,i}} \overline{u_{Tr,j}}) = D_a \left(\frac{\sigma_{uu}^2}{D_a} + \overline{x_{Tr,ij} u'_G} - \sigma_{xu}^2 \right) \delta_{ij} \quad (4.65)$$

$$\frac{d}{dt} \sigma_{xx}^2 = \frac{d}{dt} (\overline{x_{Tr,i} x_{Tr,j}} - \overline{x_{Tr,i}} \overline{x_{Tr,j}}) = 2 \sigma_{xu}^2 \delta_{ij} \quad (4.66)$$

Zusammen mit der Lösung der linearisierten Langevin-Gleichung (4.39) lassen sich die unbekannt Korrelationen in Gl. (4.64) und (4.65)

$$\overline{u_{Tr,ij} u'_G} = \sigma^2 \frac{D_a \tau_{korr}}{2 + D_a \tau_{korr}} \left[1 - \exp \left(-t \left(D_a + \frac{2}{\tau_{korr}} \right) \right) \right] \quad \text{und} \quad (4.67)$$

$$\begin{aligned} \overline{x_{Tr,ij} u'_G} &= \sigma^2 \frac{D_a \tau_{korr}}{2 + D_a \tau_{korr}} \left[\frac{\tau_{korr}}{2} \left(1 - \exp \left(-\frac{2t}{\tau_{korr}} \right) \right) \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{D_a} \left(\exp \left(-t \left(D_a + \frac{2}{\tau_{korr}} \right) \right) - \exp \left(-\frac{2t}{\tau_{korr}} \right) \right) \right] \end{aligned} \quad (4.68)$$

bestimmen, wobei für die turbulenten Gasphasenfluktuationen, die auf den Tropfen entlang seiner Trajektorie einwirken, eine kontinuierliche Korrelationsfunktion angenommen wurde.

$$\overline{u'_G(\tau_1) u'_G(\tau_2)} = \sigma^2 \exp \left(-2 \frac{|\tau_1 - \tau_2|}{\tau_{korr}} \right) \delta_{ij} \quad (4.69)$$

Im dynamischen Gleichgewicht ($t \rightarrow \infty$) konvergieren die Ausdrücke in Gl. (4.67)-(4.68) zu:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \overline{u_{Tr,ij} u'_G} = \sigma^2 \frac{D_a \tau_{korr}}{2 + D_a \tau_{korr}} \quad \text{und} \quad (4.70)$$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \overline{x_{Tr,ij} u'_G} = \frac{\sigma^2}{2} \frac{D_a \tau_{korr}^2}{2 + D_a \tau_{korr}} \quad (4.71)$$

Eine anschauliche Darstellung für die Transportgleichungen (4.64)-(4.65) erschließt sich durch Substitution der Varianz der Tropfengeschwindigkeit mit $k_{Tr} = \sigma_{uu}^2$ und $k_{Tr,\infty} = \overline{(u_{Tr,ij} u'_G)}_\infty$ sowie der Kovarianz mit $D_{Tr} = \sigma_{xu}^2$ und $D_{Tr,\infty} = \overline{(x_{Tr,ij} u'_G)}_\infty$.

$$\dot{k}_{Tr} = 2D_a (k_{Tr,\infty} - k_{Tr}) \quad \text{und} \quad (4.72)$$

$$\dot{D}_{Tr} = k_{Tr} + D_a (D_{Tr,\infty} - D_{Tr}) \quad (4.73)$$

Die Größe k_{Tr} ist als turbulente kinetische Energie und D_{Tr} als Diffusionskonstante der Tropfenphase (siehe dazu Gl. (4.66)) zu interpretieren, die beide aus der Interaktion mit der Turbulenz der Gasphase resultieren und nicht mit Tropfenturbulenzgrößen aus Kap. 4.5.2 zu verwechseln sind. $k_{Tr,\infty}$ und $D_{Tr,\infty}$ beschreiben den Gleichgewichtszustand, zu dem die Tropfeneigenschaften k_{Tr} und D_{Tr} streben, wie es die analytische Lösung von Gl. (4.72) und (4.73) zeigt.

$$k_{Tr}(t) = k_{Tr,\infty} + (k_{Tr,0} - k_{Tr,\infty}) \exp(-2D_a(t - t_0)) \quad (4.74)$$

$$D_{Tr}(t) = k_{Tr,\infty}(t - t_0) + \frac{1}{2D_a}(k_{Tr,0} - k_{Tr}(t)) \\ + D_{Tr,\infty} + (D_{Tr,0} - D_{Tr,\infty}) \exp(-D_a(t - t_0)) \quad (4.75)$$

Unmittelbar nach dem Primärzerfall wirkt auf den Tropfen keine Gasfluktuation, so dass die Anfangsrandbedingungen mit $k_{Tr}(t = 0s) = 0m^2/s^2$ und $D_{Tr}(t = 0s) = 0m^2/s$ gegeben sind.

Während k_{Tr} und D_{Tr} als Eigenschaft mit den Tropfen transportiert werden und damit implizit für den turbulenten Dispersionsprozess berücksichtigt sind, muss der Tropfenort explizit berechnet werden. Durch Integration von Gl. (4.66) lässt sich der Tropfenort mit der Varianz

$$\sigma_{xx}^2(t) = 2 \int_{t_0}^t \sigma_{xu}^2 dt = 2D_{Tr}(t - t_0) \delta_{ij} \quad (4.76)$$

stochastisch aus einer Gauß-Verteilung nach Gl. (4.37) bestimmen. Die Diffusionskoeffizienten der Fokker-Planck-Gleichung (4.63) ergeben sich aus dem Abgleich der Varianzen und Kovarianzen mit denen der Langevin-Gleichung.

$$D_{\vec{x}\vec{x}} = 0 \quad , \quad D_{\vec{x}\vec{u}} = \frac{\sigma^2}{2} \frac{(D_a \tau_{korr})^2}{2 + D_a \tau_{korr}} \quad \text{und} \quad D_{\vec{u}\vec{u}} = \sigma^2 \frac{D_a^2 \tau_{korr}}{2 + D_a \tau_{korr}} \quad (4.77)$$

Die Grenzfallbetrachtung für den Gleichgewichtszustand (∞) der Tropfeneigenschaften zeigt, dass für große Tropfen ($St \gg 1$) die Varianzen für Geschwindigkeit und Ort sowie die Kovarianz identisch mit denen von O'Rourke [96] und Krüger [77] abgeleiteten Gleichungen sind. Ebenso ist die Formulierung für kleine Tropfen ($St \ll 1$) konsistent mit der von O'Rourke [96].

$$St \gg 1 : \quad \sigma_{uu}^2 = \frac{\sigma^2}{2} D_a \tau_{korr} \delta_{ij} \quad , \quad \sigma_{xu}^2 = \frac{\sigma^2}{2} \tau_{korr} \delta_{ij} \quad \text{und} \quad \sigma_{xx}^2 = \sigma^2 \tau_{korr} \Delta t \delta_{ij} \quad (4.78)$$

$$St \ll 1 : \quad \sigma_{uu}^2 = \sigma^2 \delta_{ij} \quad , \quad \sigma_{xu}^2 = \frac{\sigma^2}{2} \tau_{korr} \delta_{ij} \quad \text{und} \quad \sigma_{xx}^2 = \sigma^2 \tau_{korr} \Delta t \delta_{ij}$$

Im Grenzfall kleiner Tropfen ($St \ll 1$) ist von dynamischem Gleichgewicht zwischen Tropfen und Gasphase auszugehen, d.h. der Tropfen folgt ohne Relativbewegung der Fluktuation der Gasphase (siehe Abb. 4.6 c). Die turbulente Dispersion kann somit analog zur Gasphase durch eine Art Boussinesq-Ansatz über einen Diffusionsprozess im Ort abgebildet werden. In kontinuierlicher Formulierung beschreibt das 2. Fick'sche Gesetz (im Sinne einer „Operator-Split“-Methode wurden die weiteren Terme weggelassen)

$$\frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{x}_{Tr}, t) - D_{Tr} \Delta_{\vec{x}} \psi(\vec{x}_{Tr}, t) = 0 \quad (4.79)$$

mit der Lösung

$$\psi(\vec{x}_{Tr}, t) = \frac{1}{(\sqrt{4\pi D_{Tr}t})^3} \exp\left(-\frac{(\vec{x}_{Tr} - \bar{\vec{x}}_{Tr})^2}{4D_{Tr}t}\right) \quad (4.80)$$

den Diffusionsprozess exakt. Aufgrund der Annahme homogener Turbulenz zwischen den Phasen „diffundieren“ die Tropfen mit gleicher turbulenter Impulsdiffusivität wie die Gasphase.

$$D_{Tr} = \nu_t \quad (4.81)$$

In Analogie zur Brown'schen Molekularbewegung lässt sich der turbulente Diffusionsprozess in Lagrange'scher Betrachtungsweise durch eine ungerichtete Zufallsbewegung (engl. „random-walk“) der Tropfen abbilden. Unter der Voraussetzung, dass die Geschwindigkeitsfluktuationen u' mit der Varianz $\sigma_{uu}^2 = \sigma^2$ gaußverteilt sind, folgt die Zufallsbewegung im Ort \vec{x} einer Gauß-Verteilung.

$$\psi(\vec{x}_{Tr}, t) = \frac{1}{(\sqrt{2\pi}\sigma_{xx}(t))^3} \exp\left(-\frac{(\vec{x}_{Tr} - \bar{\vec{x}}_{Tr})^2}{2\sigma_{xx}^2(t)}\right) \quad (4.82)$$

Eine charakteristische Eigenschaft von Diffusionsprozessen ist, dass die Varianz im Ort σ_{xx}^2 , also der mittlere quadratische Abstand des diffundieren Tropfens von seinem Ausgangspunkt, proportional mit der Zeit t anwächst. Der Vergleich der Koeffizienten der exakten Lösung der Diffusionsgleichung (4.80) und Gl. (4.82) zeigt zudem, dass sich die Varianz im Ortsraum

$$\sigma_{xx}^2(t) = 2D_{Tr}(t - t_0)\delta_{ij} = 2\nu_t(t - t_0)\delta_{ij} \quad (4.83)$$

proportional zur turbulenten Viskosität $\nu_t = C_\mu k^2/\epsilon = \sigma^2\tau_t$ verhält und damit äquivalent zu Gl. (4.78) für den Grenzfall kleiner Tropfen ($St \ll 1$) ist. Diese Formulierung ist auch gegenüber dem O'Rourke'schen Modell (siehe Gl. (4.42)) physikalisch konsistent, in der numerischen Beschreibung jedoch verschieden.

4.5.4 Schließung des Strahlmodells für A-Düsen

Für die vollständige Schließung der strahldynamischen Modellbildung für A-Düsen müssen Ansätze für den Sekundärzerfall, Tropfenwiderstand und Stoßprozesse gefunden werden. Die dafür verwendeten Modelle werden im Folgenden zusammengefasst.

- **Sekundärzerfall:** Für die Simulation des aerodynamischen Zerfalls wird das „Wave“-Modell aus Kap. 4.1.4 herangezogen, da es die komplexen Zerfallsprozesse regimeübergreifend in kontinuierlicher Form abbildet. Für die ottomotorische Einspritzung jedoch bedarf die Zerfallskonstante B_1 aus Gl. (4.19) einer Anpassung. Der Übergang vom Primär- zum Sekundärzerfall wird nach Gl. (4.62) modelliert.
- **Tropfenwiderstand:** Der Tropfenwiderstand c_w wird nach Gl. (4.29) und Gl. (4.30) in Abhängigkeit von der Reynolds-Zahl und dem Volumenanteil der Flüssigphase berechnet. Zusätzlich wird die Tropfenverformung über Gl. (4.31) berücksichtigt, wobei für den Formwiderstandsbeiwert Gl. (4.32) zugrunde gelegt wird. Dem Effekt der Stefan-Strömung wird durch die Korrektur des Widerstandsbeiwertes nach Gl. (4.33) Rechnung getragen.
- **Tropfenkollision und -koaleszenz:** Aufgrund der unzureichenden Auflösbarkeit der Stoßprozesse (vgl. Kap. 4.2) werden Tropfenkollisionen und -koaleszenz nicht explizit berechnet. Koaleszenz ist ein zum Zerfall gegenläufiger Prozess und wird implizit über die Anpassung der Zerfallskonstanten berücksichtigt. Die aus dem Stoßprozess resultierende Impulsdiffusion wird gleichermaßen implizit über eine effektive turbulente Dispersion abgebildet.

Kapitel 5

Verdampfungsmechanismen der Gemischbildung

Ottomotorische Kraftstoffe wie Normalbenzin und Eurosuper bilden ein komplexes Gemisch aus einer Vielzahl verschiedener Kohlenwasserstoffkomponenten. Meist wird ihr Verdampfungsvorgang aus Gründen der Komplexität und des Rechenaufwandes mit Modellen für einkomponentige (Ersatz-) Kraftstoffe beschrieben. Das Verdampfungsverhalten des realen Kraftstoffes lässt sich damit nur unzureichend beschreiben, da die Flüchtigkeit der verschiedenen Komponenten nicht berücksichtigt ist. Gerade bei strahlgeführten Brennverfahren, bei denen Zündung und Verbrennung extrem sensitiv auf die lokale Gemischzusammensetzung reagieren, spielen Realkraftstoffeigenschaften eine wichtige Rolle.

Das vorliegende Kapitel befasst sich mit der Modellierung der Mehrkomponentenverdampfung. Hierzu wird auf ein von Tanim und Hallett [147] vorgestellter Ansatz zurückgegriffen, der auf Basis der kontinuierlichen Thermodynamik die Kraftstoffzusammensetzung in statistischer Form beschreibt. Der Schwerpunkt in dieser Arbeit ist es, das ursprünglich für die Destillation entwickelte Modell auf die motorische Gemischbildung zu übertragen und in einer neuen Form mit den strömungsmechanischen Gleichungen zu koppeln. Zunächst werden in Kap. 5.1 und 5.2 die Mechanismen der Tropfenverdampfung diskutiert und Modellierungsmethoden gegenübergestellt. Anschließend wird in Kap. 5.3 das Mehrkomponentenverdampfungsmodell in einer für innermotorische Strömungen weiterentwickelten Form vorgestellt. Darüber hinaus wird in Kap. 5.4 die überhitzte Verdampfung diskutiert, wie sie bei strahlgeführten Brennverfahren im Teillastbetrieb mit saugsynchroner Direkteinspritzung bei Regeneration des Katalysators vorliegt.

5.1 Mechanismen der Tropfenverdampfung

Der Verdampfungsvorgang stellt aufgrund des Phasenwechsels ein instationäres Problem dar. Zu Beginn der Verdampfung bildet sich an der Tropfenoberfläche eine Dampfhülle, deren Partialdruck dem Dampfdruck entspricht. Die Dampfkonzentration an der Oberfläche ist dabei noch gering. Durch die konvektive Wärmezufuhr steigen die Tropfentemperatur und damit auch die Dampfkonzentration an der Tropfenoberfläche an. Dies erhöht das den Verdampfungsprozess treibende Konzentrationsgefälle zwischen Tropfenoberfläche und Umgebungsgas und führt unmittelbar zu einer Zunahme des Massenaustausches. Schließlich wird die so genannte Kühlgrenztemperatur¹ erreicht, bei welcher der Partialdruck des Kraftstoffdampfes dem Dampfdruck des Tropfens entspricht und die Flüssigkeit siedet. In motorischen Fällen wird der Verdampfungsvor-

¹In diesem Zustand wird die gesamte dem Tropfen zugeführte Wärme zur Verdampfung aufgebracht. Die Tropfentemperatur erreicht damit einen stationären Wert, der geringfügig unterhalb der Siedetemperatur liegt.

gang zusätzlich durch die Relativbewegung des Tropfens zum umgebenden Gas beschleunigt. Die maßgebliche Wirkung liegt im konvektiven Abtransport der Dampfmasse, wodurch sich das Konzentrationsgefälle von Tropfen und Gas vergrößert. Im Tropfen selbst wird eine Strömung induziert, so genannte „Hills“-Wirbel, die für eine intensive Durchmischung sorgen und die Homogenisierung von Temperatur und Stoffeigenschaften fördern (siehe Abb. 5.1).

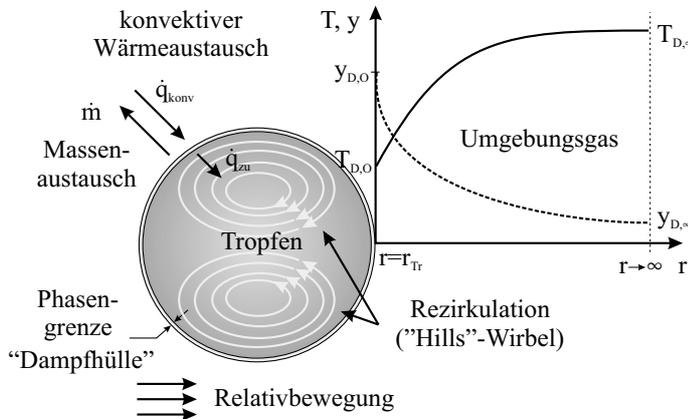


Abb. 5.1: Prinzipbild der Tropfenverdampfung.

Das Verdampfungsverhalten von Kraftstoffen hängt neben Druck und Temperatur grundlegend von ihrer Stoffzusammensetzung ab. Ottomotorische Kraftstoffe, wie z.B. Normalbenzin oder Eurosper, setzen sich aus mehreren hundert verschiedenen Kohlenwasserstoffen zusammen. Dazu zählen vor allem Alkane² (35-65%), aber auch Alkene³ (0-35%) und Aromaten⁴ (23-55%) (siehe Wenck et al. [162]). Die Komponenten unterscheiden sich bezüglich Molekülgröße und -struktur und haben demzufolge unterschiedliche physikalische und chemische Eigenschaften.

Der Einfluss der Kraftstoffzusammensetzung lässt sich anhand der Siedekurve verdeutlichen. Sie beschreibt den Volumenanteil des verdampften Kraftstoffes bei der jeweiligen Temperatur. In Abb. 5.2 sind für n-Heptan (C_7H_{16}) und Benzin als Realkraftstoff sowie als einkomponentigen Modellkraftstoff die Siedelinien⁵ dargestellt. Während die Siedetemperatur der beiden Einkomponentenkraftstoffe konstant verläuft, erstreckt sich der Siedebereich von realem Benzin über

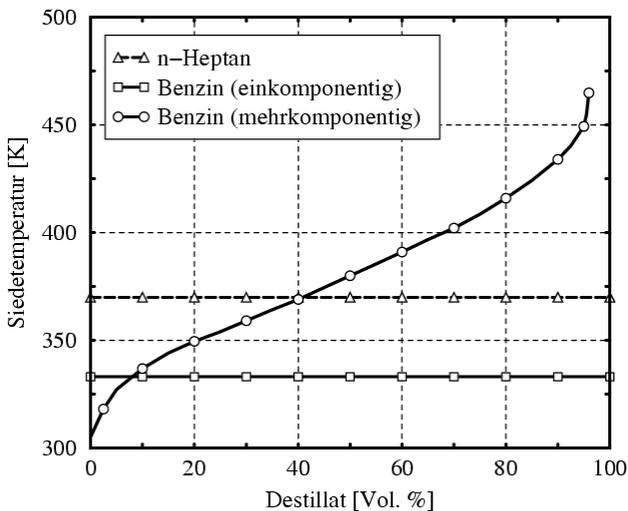


Abb. 5.2: Siedelinie für reales Benzin [135], Benzin als einkomponentiger Modellkraftstoff und n-Heptan [7] unter Atmosphärendruck.

einen breiten Temperaturbereich. Dabei verdampfen bei niedrigen Temperaturen die leichtflüchtigen und bei höheren Temperaturen die schwerflüchtigen Komponenten. Das Ende der Siedelinie wird durch Rückstandsbildung bestimmt. Die Güte des Ottokraftstoffes wird an drei Punkten ausgemacht. Der 10%-Punkt, bei dessen Temperatur 10% des Kraftstoffes verdampft sind, dient zur Bewertung des Kaltstartverhaltens, der 50%-Punkt charakterisiert das Instationärverhalten und der 90%-Punkt beurteilt die Neigung des Kraftstoffes zur Rückstandsbildung (z.B. Verkokungen, Rückkondensation) im Brennraum. Für die ottomotorische Gemischbildung ist von einem maßgeblichen Einfluss des Siedeverhaltens auf die Gemischbildung

²Alkane C_nH_{2n+2} sind gesättigte, kettenförmig aufgebaute Kohlenwasserstoffe mit Einfachbindungen.

³Alkene C_nH_{2m} mit $m \leq n$ sind ungesättigte Kohlenwasserstoffe mit mindestens einer Doppelbindung.

⁴Aromaten sind ungesättigte, ringförmig aufgebaute Kohlenwasserstoffe mit konjugierten Doppelbindungen.

⁵Der Siedebereich ist neben der Kraftstoffzusammensetzung zusätzlich vom Druck abhängig, d.h. dass sich mit zunehmendem Druck auch der Siedebereich zu höheren Siedetemperaturen verschiebt.

auszugehen. Sowohl für homogen-vorgemischte Brennverfahren, bei denen der Kraftstoff mit früher Einspritzlage in eine „kalte“ Umgebung eingebracht wird und sich dadurch die Aufheizphase verlängert sowie der Verdampfungsvorgang verlangsamt, als auch für das zur Gemischbildung sensitive, strahlgeführte Brennverfahren muss das Siedeverhalten des Kraftstoffes für die detaillierte Abbildung des Verdampfungsprozesses mit berücksichtigt werden.

5.2 Konventionelle Tropfenverdampfungsmodelle

Tropfenverdampfungsmodelle werden mit Experimenten an ruhenden Einzeltropfen⁶ validiert. Die abgeleiteten Ansätze unterschieden sich dabei stark in ihrer Komplexität. Während die einfacheren Modelle von einkomponentigen Kraftstoffen ausgehen und tropfeninterne Transportvorgänge vernachlässigen, berücksichtigen die komplexen und rechenzeitintensiven Ansätze tropfeninterne Strömungen und die Kraftstoffzusammensetzung. Ähnlich wie bei allen anderen innermotorischen Prozessen muss bei der Modellierung der Tropfenverdampfung ein Kompromiss zwischen Detaillierungsgrad und Rechenzeit gefunden werden. Üblicherweise wird von einem kugelsymmetrischen Tropfenverdampfungsprozess ausgegangen, wodurch sich das 3D- auf ein 1D-Problem entlang der Radiuskoordinate reduziert. Ferner wird eine konvektive Anströmung durch empirische Korrekturen berücksichtigt. Weitere Annahmen, welche die Modellbildung vereinfachen, sind isobare Verdunstung, keine Löslichkeit von Luft im Tropfen, Vernachlässigung von Wärmeströmen durch Konzentrationsgradienten (Dufour-Effekt) und Massendiffusion durch Temperaturgradienten (Soret-Effekt) sowie die Vernachlässigung von Wärmeübertragung durch

Modell	d^2 -Modell	Uniform-Temperature-Modell	Rapid Mixing-Modell	Conduction-Limit-Modell	Diffusion-Limit-Modell	Direkte numerische Simulation
Gasphase	Integrale Beschreibung. Berücksichtigung der Konvektion durch empirische Korrekturen für Wärme- und Stofftransport.					3D-Lösung der Navier-Stokes Gleichungen für Gas- und Tropfeninnenströmung
Tropfeninneres	Aufheizung & Verdampfung zeitlich getrennt, homogene Temperatur und Stoffeigenschaften	unendlich schnelle Mischung und Wärmeleitung, homogene Tropfentemperatur und Stoffeigenschaften	1D konduktiver Wärme-transport, Stoffmodelle	1D konduktiver Wärme- und diffusiver Stofftransport, Stoffmodelle		
Komponenten	eine	eine	mehrere	eine	mehrere	mehrere
Symmetrieannahme	Kugelsymmetrie. Asymmetrie bei umströmten Tropfen in konvektiven Korrekturen enthalten.					keine
Diskretisierung	keine	keine	keine	1D (radial)	1D (radial)	3D
Motorische Applikation	keine	Standard	akademisch	akademisch	akademisch	keine
Rechenzeit	gering	vertretbar	hoch	sehr hoch	sehr hoch	extrem hoch

Tab. 5.1: Konventionelle Modellierungsansätze für die Verdampfung von Einzeltropfen.

⁶Einzeltropfen werden in akustischen Levitatoren durch eine stehende Welle bzw. in optischen Levitatoren durch einen Laser ortsfest gehalten und die Änderung der Tropfengröße gemessen.

Strahlung. Ein Überblick über die gängigsten Modelle ist in Tab. 5.1 dargestellt. Eine detaillierte Beschreibung sowie ein Vergleich der Modelle ist in Stengele [140] zu finden.

Aufgrund der stark unterschiedlichen Stoffeigenschaften wird bei der Modellierung der Verdampfung eine räumliche Unterteilung vorgenommen, welche die Gasphase um den Tropfen, die Phasengrenze und das Tropfeninnere beinhaltet. Im ersten Schritt werden die Gleichungen der Gasphase gelöst. Über die Erhaltungs- und Gleichgewichtsbeziehungen an der Phasengrenzfläche werden dann die Differentialgleichungen der Gasphase mit denen des Tropfens gekoppelt.

5.3 Modellbildung für die Verdampfung von Mehrkomponentenkraftstoffen

Die wichtige Bedeutung der Kraftstoffzusammensetzung und deren Einfluss auf die Verdampfung wurde bereits in Kap. 5.1 diskutiert. Für die Berechnung des Verdampfungsvorgangs mehrkomponentiger Kraftstoffe stehen nach Tab. 5.1 prinzipiell zwei Modelle – das „Rapid-Mixing“- und „Diffusion-Limit“-Modell – zur Verfügung. In beiden Ansätzen wird die Kraftstoffzusammensetzung über eine endliche Anzahl diskreter Komponenten abgebildet. Da sowohl für den Tropfen als auch für die Gasphase Erhaltungsgleichungen der einzelnen Komponenten gelöst werden müssen, steigt der Rechenaufwand überproportional zur Komponentenanzahl an. Für otomotorische Kraftstoffe ist damit eine aus industrieller Sicht sinnvolle Applikation dieser Modelle nicht mehr gegeben. Sie bleiben aus Rechenzeitgründen auf bi- oder trinäre Gemische limitiert.

Ein alternativer Ansatz zur Berechnung der Verdampfung mehrkomponentiger Kraftstoffe wurde von Tanim und Hallett [147] auf Basis der kontinuierlichen Thermodynamik abgeleitet. Darin wird die Kraftstoffzusammensetzung statistisch durch eine kontinuierliche Verteilung beschrieben. Der entscheidende Vorteil dieser Methode liegt in der reduzierten Anzahl der zu lösenden Gleichungen. Während in der diskreten Thermodynamik eine extensive Größe von Temperatur T , Druck p und der Anzahl der Kraftstoffkomponenten n_1, \dots, n_s abhängt, bildet die kontinuierliche Thermodynamik die s -Komponenten durch eine Verteilungsfunktion f ab. Eine extensive Größe ist damit lediglich eine Funktion von Temperatur, Druck und der Verteilung selbst.

Nach ersten Untersuchungen am Einzeltropfen von Tanim und Hallett [147] folgten diesem Ansatz u.a. Hallett [53, 54, 55], Harstad et al. [57] und Zhu et al. [171]. Die motorische Anwendung wurde im Wesentlichen von Lippert [82, 83] und Reitz et al. [121] geprägt, deren Fokus auf die dieselmotorische Einspritzung unter Kaltstartbedingungen gerichtet war.

5.3.1 Modellierung der Kraftstoffzusammensetzung

Die Zusammensetzung eines Mehrkomponentenkraftstoffes lässt sich nach Tanim und Hallett [147] durch eine halb-unendliche Verteilungsfunktion f_{Mol} in Abhängigkeit der Molmasse M abbilden.

$$f_{Mol}(M) = \frac{(M - \gamma)^{\alpha-1}}{\beta^\alpha \Gamma(\alpha)} \exp\left(-\frac{(M - \gamma)}{\beta}\right) \quad \text{mit} \quad \int_0^\infty f_{Mol}(M) dM = 1 \quad (5.1)$$

Die Normierung der Verteilung $f_{Mol}(M)$ erfolgt mit der Γ -Funktion. Die Größen α , β und γ stellen die Formparameter der Funktion dar. Sie müssen an die molare Zusammensetzung des

zugrunde liegenden Kraftstoffes angepasst werden. Charakterisiert wird die molare Verteilungsfunktion durch deren Mittelwert θ und Varianz σ^2 . Aufgrund der Gewichtung der Varianz σ^2 mit $(M - \theta)$ ist für eine einfachere mathematische Formulierung der Grundgleichungen die Beschreibung der Verteilungsfunktion aus Gl. (5.1) über das 2. Moment ψ vorzuziehen [147]. Mittelwert θ und 2. Moment ψ berechnen sich durch Integration von $f_{Mol}(M)$ gewichtet mit M bzw. M^2 .

$$\theta = \int_0^{\infty} f_{Mol}(M) M dM = \alpha \beta + \gamma \quad \text{und} \quad (5.2)$$

$$\psi = \int_0^{\infty} f_{Mol}(M) M^2 dM = \theta^2 + \sigma^2 \quad \text{mit} \quad \sigma^2 = \alpha \beta^2 \quad (5.3)$$

Im Grenzfall $\sigma \rightarrow 0$ konvergiert $f_{Mol}(M)$ zu einer diskreten Verteilung, so dass sich auch ein-komponentige Kraftstoffe wie n-Heptan darstellen lassen. Für Benzin ist die molare Verteilung $f_{Mol}(M)$ exemplarisch in Abb. 5.3 veranschaulicht. Die zugehörigen Formparameter sind Tab. 5.2 entnommen. Grundsätzlich können auch

unter in Inkaufnahme von höherem Rechenaufwand mehrere Verteilungen, z.B. für Alkane und Aromaten, verwendet werden. Durch Superposition ergibt sich ein bimodales Spektrum (siehe Abb. 5.3). Erste Untersuchungen hierzu wurden von Hallett und Grimwood [55] sowie Harstad et al. [57] an ruhenden Einzeltropfen durchgeführt. Für die motorische Gemischbildung müssen die Effekte einer bimodalen Verteilung noch genauer analysiert werden. In dieser Arbeit wird aus Rechenzeitgründen zur Simulation der ottomotorischen Gemischbildung auf eine monomodale Verteilung zurückgegriffen.

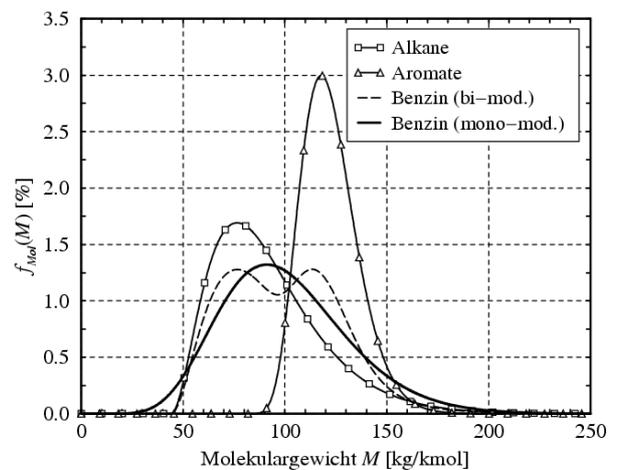


Abb. 5.3: Kontinuierliche mono- und bimodale Verteilungsfunktion für Benzin

	α_{FL}	β_{FL}	γ	$\theta_{FL} [\frac{kg}{kmol}]$	$\sigma_{FL} [\frac{kg}{kmol}]$	$\rho_{FL} [\frac{kg}{m^3}]$	Quelle
n-Heptan	100	0.1	90.2	100.2	1	683.75	Tanim und Hallett [147]
Benzin	10.28	9.82	0	100.95	31.49	751	Hallett [54]
Kerosin	50.0	3.525	0	176.25	24.9	819	Lippert [82]

Tab. 5.2: Formparameter und Stoffeigenschaften verschiedener Kraftstoffe.

Im Hinblick auf die thermophysikalischen Stoffeigenschaften offenbart sich die Schwierigkeit, dass die Stoffeigenschaften einer allgemeinen und kontinuierlichen Form genügen müssen, die neben dem thermodynamischen Zustand auch die Abhängigkeit von der Molmasse beinhaltet. Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wird hierzu meist auf einfache empirische Stoffkorrelationen zurückgegriffen, wie sie von Tanim und Hallett [147] und Lippert [82] vorgestellt wurden. Eine ausführliche Dokumentation über die zugrunde liegenden Stoffkorrelationen ist, sofern sie in den folgenden Abschnitten nicht beschrieben wird, in Anhang A zu finden.

5.3.2 Beschreibung der Gasphase in der Tropfenumgebung

Die Gasphase kann instationär oder quasi-stationär beschrieben werden. Die quasi-stationäre Betrachtung beruht auf einer integralen, analytischen Beschreibung mit vertretbarem Rechen-

aufwand. Im Gegensatz dazu führt die instationäre Betrachtung zu partiellen Differentialgleichungen, die analytisch nicht lösbar und demzufolge mit höheren Rechenzeiten verbunden sind.

Als Kriterium zur Abschätzung der instationären Einflüsse dient bei ruhendem Tropfen in ruhendem Gas die Diffusionszeit $\tau_{diff} = d_{Tr}^2/D_G$. Sie ist ein Maß für die zeitliche Dauer des Massentransports in der Gasphase. Unter ruhenden Bedingungen sind quasi-stationäre Modelle dann anwendbar, wenn die Diffusionszeit gegenüber der Verdunstungszeit des Tropfens klein ist ($\tau_{diff} < \tau_{verd}$). Nach Hubbard et al. [66] ist diese Bedingung bis zu Drücken von $p = 10$ bar erfüllt. Bei relativer Bewegung des Tropfens zum Gas dominiert nach Stengele [140] die konvektive Zeitskala $\tau_{konv} = d_{Tr}/u_{rel}$, welche die zeitliche Dauer für den Abtransport des Kraftstoffdampfes beschreibt. Bei der Benzin-Direkteinspritzung ist die konvektive Zeitskala wesentlich geringer als die Lebensdauer des Tropfens ($\tau_{konv} \ll \tau_{verd}$), so dass die Anwendung quasi-stationärer Modelle trotz Hochdruckatmosphäre gerechtfertigt ist.

Die quasi-stationäre Betrachtung führt auf gewöhnliche Differentialgleichungen. Für einen sphärischen Tropfen ist aus Symmetriegründen die Strömung radial gerichtet, wodurch sich die Beschreibung auf eine Dimension entlang der Radiuskoordinate r reduziert. Unter Vernachlässigung von Auftriebskräften und thermischer Diffusion sowie mit der Annahme von konstanten Stoffwerten lauten die zugrunde liegenden Erhaltungsgleichungen in der Tropfenumgebung [54]:

$$\text{Gesamt mole:} \quad c_G v_r r^2 = \dot{N} r_{Tr}^2 \quad (5.4)$$

$$\text{Kraftstoffmolenbruch:} \quad c_G v_r \frac{\partial Y_D}{\partial r} = \frac{c_G \bar{D}}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial Y_D}{\partial r} \right) \quad (5.5)$$

$$\text{1. Moment:} \quad c_G v_r \frac{\partial (Y_D \theta_D)}{\partial r} = \frac{c_G \hat{D}}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial (Y_D \theta_D)}{\partial r} \right) \quad (5.6)$$

$$\text{2. Moment:} \quad c_G v_r \frac{\partial (Y_D \psi_D)}{\partial r} = \frac{c_G \tilde{D}}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial (Y_D \psi_D)}{\partial r} \right) \quad (5.7)$$

$$\text{Energie:} \quad c_G v_r c_{p,D} \frac{\partial T}{\partial r} = \frac{\lambda_{G,ref}}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial T}{\partial r} \right) \quad (5.8)$$

Darin beschreibt \dot{N} den auf die Tropfenoberfläche bezogenen Molenstrom, $c_G = \rho_G/\theta_G$ die molare Dichte des Gasmisches und v_r die radiale Geschwindigkeit. Die mittleren Diffusionskoeffizienten \bar{D} , \hat{D} und \tilde{D} sind nach Tanim und Hallett [147] von gleicher Größenordnung. Die Integration von Gl. (5.5) führt zusammen mit Gl. (5.4) zum Molenstrom.

$$\dot{N} = \frac{(c_G \bar{D})_{ref}}{r_{Tr}} \ln(1 + B_M) \quad \text{mit} \quad B_M = \frac{Y_{D,O} - Y_{D,\infty}}{1 - Y_{D,ref}} \quad (5.9)$$

Analog führt die Integration der Energie-Gl. (5.8) mit Gl. (5.4) auf den konvektiven Wärmestrom.

$$\dot{q}_{konv} = \frac{\lambda_{G,ref}}{2r_{Tr}} Nu (T_{G,\infty} - T_{G,O}) \quad \text{mit} \quad Nu = 2 \frac{\ln(1 + B_T)}{B_T} \quad (5.10)$$

$\lambda_{G,ref}$ stellt die Wärmeleitfähigkeit und Nu die Nusselt-Zahl dar. B_M und B_T werden in der Literatur als „Spalding“-Zahl für Stoff- und Wärmetransport bezeichnet.

Der dem Tropfen zugeführte Wärmestrom \dot{q}_{zu} setzt sich aus dem zur Aufheizung führenden konvektiven Wärmestrom \dot{q}_{konv} und der für den Phasenwechsel aufzubringenden Verdampfungsenthalpie Δh_v zusammen.

$$\dot{q}_{zu} = \dot{q}_{konv} - \dot{N} \Delta h_v \quad (5.11)$$

Die Stoffwerte werden nach Sparrow und Gregg [133] bei einer Referenztemperatur $T_{G,ref} = \frac{2}{3}T_{G,O} + \frac{1}{3}T_{G,\infty}$ und Referenzkonzentration $Y_{D,ref} = \frac{2}{3}Y_{D,O} + \frac{1}{3}Y_{D,\infty}$ nach der 1/3-Regel zwischen der Tropfenoberfläche (Index O) und dem Umgebungszustand (Index ∞) bestimmt.

Berücksichtigung des Konvektionseinflusses:

Gegenüber einem ruhenden Tropfen führt die Relativbewegung des Tropfens durch den konvektiven Abtransport von Masse und Energie zu einer Erhöhung des Wärme- und Stoffübergangs. Ranz und Marschall [107] berücksichtigten diesen Effekt durch empirische Korrekturen der Nusselt- und Sherwood-Zahl.

$$Nu_0 = 2 + 0.6 Re^{1/2} Pr^{1/3} \quad \text{und} \quad Sh_0 = 2 + 0.6 Re^{1/2} Sc^{1/3} \quad (5.12)$$

Darin beschreiben Re die Reynolds-Zahl, Sc die Schmidt-Zahl und Pr die Prandtl-Zahl.

$$Re = \frac{u_{rel} d_{Tr} \rho_{G,\infty}}{\mu_{G,ref}}, \quad Sc = \frac{\mu_{G,ref}}{(\rho_G D_G)_{ref}} \quad \text{und} \quad Pr = \frac{\mu_{G,ref} c_{p,G,ref}}{\lambda_{G,ref}} \quad (5.13)$$

Unter Berücksichtigung der Konvektionskorrekturen lässt sich der molare Fluss aus Gl. (5.9) in der Form

$$\dot{N}^* = \frac{(c_G \bar{D})_{ref}}{2r_{Tr}} Sh_0 \ln(1 + B_M) \quad (5.14)$$

darstellen. Für die dem Tropfen zugeführte Wärme aus Gl. (5.11) ergibt sich mit dem konvektiven Wärmestrom aus Gl. (5.10) zusammen mit den Korrekturfaktoren aus Gl. (5.12) folgende Formulierung:

$$\dot{q}_{zu}^* = \dot{q}_{konv}^* - \dot{N}^* \Delta h_v \quad \text{mit} \quad \dot{q}_{konv}^* = \frac{\lambda_{G,ref}}{2r_{Tr}} Nu_0 (T_{G,\infty} - T_{G,O}) \frac{\ln(1 + B_T)}{B_T} \quad (5.15)$$

Die Integration der Energiegleichung (5.8) liefert ebenso eine Beziehung für den molaren Fluss.

$$\dot{N}^* = \frac{\lambda_{G,ref}}{2c_{p,D,ref} r_{Tr}} Nu_0 \ln(1 + B_T) \quad (5.16)$$

Das Gleichsetzen der Ausdrücke aus Gl. (5.14) und (5.16) führt auf einen Zusammenhang zwischen Massen- und Wärmetransportzahl B_M und B_T .

$$B_T = (1 + B_M)^\chi - 1 \quad (5.17)$$

$$\text{mit} \quad \chi = \frac{1}{Le_{G,ref}} \frac{Sh_0}{Nu_0} \frac{c_{p,D,ref}}{c_{p,G,ref}} \quad \text{und} \quad Le_{G,ref} = \frac{\lambda_{G,ref}}{(c_G \bar{D})_{ref} c_{p,G,ref}} \quad (5.18)$$

Die Lewis-Zahl Le_G des Gases stellt die charakteristische Kennzahl für das Verhältnis aus Wärme- und Massentransport dar und wird mit $Le_G = 1$ approximiert.

5.3.3 Gleichgewichtsbeziehungen an der Phasengrenze

Unter der Voraussetzung, dass der Phasenübergang wesentlich schneller abläuft als der diffusive Stofftransport des Dampfes in die Umgebung bzw. des gelösten Gases in den Tropfen hinein, darf an der Phasengrenze thermodynamisches Gleichgewicht angenommen werden. An der Phasengrenze müssen neben Temperatur T und Druck p auch die chemischen Potentiale μ der einzelnen Komponenten i im Gleichgewicht sein.

$$\begin{aligned}\mu_{i,G,O} &= \mu_{i,Tr,O} \\ T_{G,O} &= T_{Tr,O} \\ p_{G,O} &= p_{Tr,O}\end{aligned}\quad (5.19)$$

Da von einem isobaren Verdampfungsvorgang ausgegangen wird, ist die Bedingung für Druckgleichheit ohnehin erfüllt. Nach dem Raoult'schen Gesetz entspricht bei relativ geringen Drücken und damit idealem Verhalten der Gas- und Flüssigkeitskomponenten der Partialdruck des Kraftstoffdampfes dem Dampfdruck bei Oberflächentemperatur des Tropfens $p_D(T_{Tr,O})$. In kontinuierlicher Schreibweise lautet das Raoult'sche Gesetz:

$$Y_{D,O} f_{Mol,D,O}(M) p_G = Y_{Fl,O} f_{Mol,Fl,O}(M) p_D(T_{Tr}, M) \quad (5.20)$$

Darin beschreiben $f_{Mol,D,O}$ und $f_{Mol,Fl,O}$ die molaren Verteilungsfunktionen des Dampfes bzw. der Flüssigkeit an der Tropfenoberfläche. Unter der Voraussetzung, dass keine Löslichkeit von Gas im Tropfen auftritt, ist der Molenbruch der Flüssigphase an der Phasengrenze $Y_{Fl,O} = 1$, wodurch sich Gl. (5.20) vereinfacht.

$$Y_{D,O} = \int_0^\infty f_{Mol,Fl,O}(M) \frac{p_D(T_{Tr}, M)}{p_G} dM \quad (5.21)$$

Der Dampfdruck p_D lässt sich aus der Clausius-Clapeyron'schen Gleichung und dem Trouton'schen Gesetz⁷

$$p_D = p_{atm} \exp\left[\frac{\Delta s_v}{\Re} \left(1 - \frac{T_S(M)}{T_{Tr}}\right)\right] \quad (5.22)$$

bestimmen, worin $p_{atm} = 1.01325$ bar den Atmosphärendruck, $\Delta s_v = 87.9$ kJ/kmolK die Verdampfungsentropie und $\Re = 8.3143$ J/kmolK die universelle Gaskonstante beschreiben. Für die Siedetemperatur T_S wird ein linearer Zusammenhang mit der Molmasse angenommen.

$$T_S(M) = a_S + b_S M \quad (5.23)$$

Tanim und Hallett [147] geben die Konstanten mit $a_S = 241.4$ K und $b_S = 1.45$ Kkmol/kg an. Für n-Alkane sind die Korrelationen für Siedetemperatur und Dampfdruck in Abb. 5.4 den experimentellen Werten von Vargaftik [152] gegenübergestellt. Der Molenbruch des Dampfes an der Tropfenoberfläche bestimmt sich aus der Integration von Gl. (5.21) mit Gl. (5.22)-(5.23).

$$Y_{D,O} = \frac{p_{atm}}{p_G} \frac{\exp[A(1 - \gamma B)]}{(1 + AB\beta_{Fl})^{\alpha_{Fl}}} \quad \text{mit} \quad A = \frac{\Delta s_v}{\Re} \left(1 - \frac{a_S}{T_{Tr}}\right) \quad \text{und} \quad B = \frac{b_S}{T_{Tr} - a_S} \quad (5.24)$$

In der selben Weise ergeben sich durch Gewichtung von Gl. (5.21) mit M bzw. M^2 die Momente $\theta_{D,O}$ bzw. $\psi_{D,O}$ der Verteilungsfunktion an der Tropfenoberfläche [147].

$$\theta_{D,O} = \gamma + \frac{\theta_{Fl} - \gamma}{1 + \frac{AB\sigma_{Fl}^2}{\theta_{Fl} - \gamma}} \quad \text{und} \quad \sigma_{D,O}^2 = \sigma_{Fl}^2 \left(\frac{\theta_{D,O} - \gamma}{\theta_{Fl} - \gamma}\right)^2 = \theta_{D,O}^2 + \psi_{D,O} \quad (5.25)$$

⁷Das Trouton'sche Gesetz beschreibt den Zusammenhang zwischen Siedetemperatur T_S und Verdampfungsenthalpie $\Delta h_v = \Delta s_v T_S$, wobei für die Verdampfungsentropie $\Delta s_v \approx const.$ gilt.

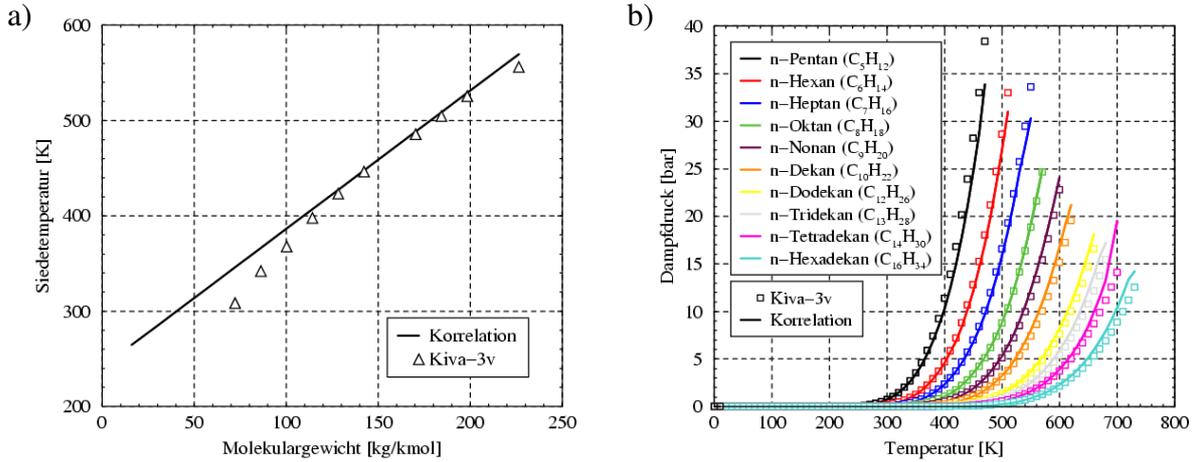


Abb. 5.4: Vergleich a) der Siedetemperatur $T_S(M)$ nach Gl. (5.23) und b) des Dampfdrucks $p_D(T)$ nach Gl. (5.22) für die Gruppe der n-Alkane mit Werten von Vargaftik [152].

5.3.4 Beschreibung des Tropfeninneren

Die Beschreibung der flüssigen Phase basiert auf der Annahme, dass im Tropfen eine unendlich schnelle Durchmischung stattfindet, so dass von einer räumlich konstanten Tropfentemperatur ausgegangen werden kann. In Analogie zur Gasphase führt die Bilanzierung der Mole am Tropfen auf eine Gleichung für den Molenstrom

$$\dot{N}^* = -\frac{1}{A_{Tr}} \frac{d}{dt} (c_{Fl} V_{Tr}), \quad (5.26)$$

in der $c_{Fl} = \rho_{Fl}/\theta_{Fl}$ die molare Dichte der Flüssigphase, A_{Tr} die Oberfläche und V_{Tr} das Volumen des Tropfens beschreiben. Unter der Voraussetzung einer konstanten Dichte lässt sich zusammen mit Gl. (5.26) die Änderung des Tropfenradius bestimmen.

$$\frac{dr_{Tr}}{dt} = \frac{r_{Tr}}{3\theta_{Fl}} \frac{d\theta_{Fl}}{dt} - \frac{\dot{N}^*}{c_{Fl}} \quad (5.27)$$

Die Änderungsrate der Tropfentemperatur lässt sich aus der Energieerhaltungsgleichung

$$\frac{1}{A_{Tr}} \frac{d}{dt} (c_{Fl} V_{Tr} h_{Tr}) = \dot{q}_{konv} - \dot{N}^* \Delta h_v \quad (5.28)$$

ableiten. Für den isobaren Verdampfungsprozess ergibt sie sich mit $dh_{Tr} = c_{p,Fl} dT_{Tr}$ zu:

$$\frac{dT_{Tr}}{dt} = \frac{3}{c_{Fl} c_{p,Fl} V_{Tr}} \left(\dot{q}_{konv} - \dot{N}^* \Delta h_v \right). \quad (5.29)$$

Die Änderung des Mittelwertes und des 2. Momentes der Flüssigphase wurden von Tanim und Hallett [147] in folgender Form abgeleitet.

$$\begin{aligned} \frac{d\theta_{Fl}}{dt} = \frac{A_{Tr}}{c_{Fl} V_{Tr}} \left[\dot{N} (\theta_{Fl} - Y_D \theta_D) + c_G \bar{D} \frac{\partial}{\partial r} (Y_D \theta_D) \right. \\ \left. + Y_D \theta_D \frac{\partial}{\partial r} (c_G \bar{D}) - \int_0^\infty f_{Mol}(M) M \frac{\partial (c_G D)}{\partial r} dM \right]_0 \end{aligned} \quad (5.30)$$

$$\begin{aligned} \frac{d\psi_{Fl}}{dt} = \frac{A_{Tr}}{c_{Fl} V_{Tr}} \left[\dot{N} (\psi_{Fl} - Y_D \psi_D) + c_G \bar{D} \frac{\partial}{\partial r} (Y_D \psi_D) \right. \\ \left. + Y_D \psi_D \frac{\partial}{\partial r} (c_G \bar{D}) - \int_0^\infty f_{Mol}(M) M^2 \frac{\partial (c_G D)}{\partial r} dM \right]_0 \end{aligned} \quad (5.31)$$

Hallett [53] postuliert, dass die beiden letzten Terme auf der rechten Seite in Gl. (5.30) und (5.31) von derselben Größenordnung und daher vernachlässigbar sind. Die Profile der Kraftstoffkonzentration und der Momente in der Gasphase entlang der radialen Tropfenkoordinate r leiten sich aus der Integration der quasi-stationären Lösung von Gl. (5.5)-(5.7) ab.

$$Y_D(r) = 1 - (1 - Y_{D,\infty}) (1 + B_M)^{-R/r} \quad (5.32)$$

$$Y_D \theta_D(r) = Y_{D,O} \theta_{D,O} - \frac{1}{B_M} \left(\frac{(1 + B_M)}{(1 + B_M)^{r_{Tr}/r}} - 1 \right) (Y_{D,O} \theta_{D,O} - Y_{D,\infty} \theta_{D,\infty}) \quad (5.33)$$

$$Y_D \psi_D(r) = Y_{D,O} \psi_{D,O} - \frac{1}{B_M} \left(\frac{(1 + B_M)}{(1 + B_M)^{r_{Tr}/r}} - 1 \right) (Y_{D,O} \psi_{D,O} - Y_{D,\infty} \psi_{D,\infty}) \quad (5.34)$$

Zusammen mit Gl. (5.32)-(5.34) lassen sich schließlich durch Integration von Gl. (5.30) und (5.31) die Änderungsraten des 1. Moments θ_{Fl} und des 2. Moments ψ_{Fl} in der Flüssigphase bestimmen.

$$\frac{d\theta_{Fl}}{dt} = \frac{3\dot{N}}{c_{Fl} r_{Tr}} \left[(\theta_{Fl} - Y_{D,O} \theta_{D,O}) + \frac{1}{B_M} (Y_{D,\infty} \theta_{D,\infty} - Y_{D,O} \theta_{D,O}) \right] \quad (5.35)$$

$$\frac{d\psi_{Fl}}{dt} = \frac{3\dot{N}}{c_{Fl} r_{Tr}} \left[(\psi_{Fl} - Y_{D,O} \psi_{D,O}) + \frac{1}{B_M} (Y_{D,\infty} \psi_{D,\infty} - Y_{D,O} \psi_{D,O}) \right] \quad (5.36)$$

5.3.5 Transport der Kraftstoffzusammensetzung in der Gasphase

Die Bilanzgleichungen für den Einzeltropfen in der Flüssigphase sind, wie sie in den vorangegangenen Abschnitten beschrieben wurden, über die Verteilungsfunktion nach Gl. (5.1) auf molarer Basis formuliert. In *Kiva-3v* [7] müssen zur Bestimmung der räumlichen und zeitlichen Änderung der Kraftstoffkonzentration und Zusammensetzung in der Gasphase die aus der Tropfenverdampfung resultierenden molaren Quellterme in die massenbezogene Betrachtung transformiert werden. Der Zusammenhang zwischen massen- und molbezogener Betrachtungsweise ist für eine diskrete Komponente i über die Molmassen M definiert.

$$y_i = \frac{M_i}{M_M} Y_i \quad (5.37)$$

Darin beschreibt M_i die Molmasse des Reinstoffes i und M_M die mittlere Molmasse des Gasgemisches. In kontinuierlicher Form leitet sich der Zusammenhang aus der Integration der Massen- und Molanteile über die jeweilige Verteilungsfunktion ab.

$$\int_0^\infty f_{Masse}(M) dM = \int_0^\infty f_{Mol}(M) \frac{M}{M_M} dM \quad (5.38)$$

Allgemein ergibt sich die Beziehung zwischen massen- und molbezogenen Momenten \mathcal{M}_{Masse} bzw. \mathcal{M}_{Mol} durch Gewichtung von Gl. (5.38) mit M^n für das jeweilige Moment.

$$\mathcal{M}_{Masse}^n = \frac{1}{M_M} \mathcal{M}_{Mol}^{n+1} = \frac{1}{M_M} \int_0^\infty f_{Mol}(M) M^{n+1} dM \quad (5.39)$$

Für den Momententransport in der Gasphase beruhen die in der Literatur veröffentlichten Ansätze, wie sie z.B. von Lippert et al. [82, 83] vorgestellt wurden, auf der direkten Transformation der molaren Verdampfungsquellterme in die massenbezogene Beschreibung. Dies impliziert die Lösung von Transportgleichungen für die Momente \mathcal{M}_{Masse}^n mit $n = 0, 1, 2$, d.h. für die Partialdichte des Kraftstoffdampfes (ρy_D) sowie deren Produkt mit der mittlerem Molmasse ($\rho y_D \theta_D$)

bzw. dem 2. Moment ($\rho y_D \psi_D$). Die Schwierigkeit dieser Methode liegt darin, dass im Sättigungszustand $y_{D,O} = y_{D,\infty}$, also wenn die Massentransportzahl aus Gl. (5.9) gegen $B_M \rightarrow 0$ strebt, der Quellterm für das 2. massenbezogene Moment \mathcal{M}_{Masse}^2 eine Singularität aufweist.

Eine in dieser Arbeit vorgeschlagene Lösung für diese Problematik beruht darauf, dass nach Gl. (5.39) das n -te massenbezogene Moment \mathcal{M}_{Masse}^n dem nächst höheren molaren Moment \mathcal{M}_{Mol}^{n+1} entspricht und damit massenbezogene Transportgrößen für die Mole \mathcal{M}_{Masse}^{-1} ($n = -1$), den Massenbruch \mathcal{M}_{Masse}^0 ($n = 0$) und die mittlere Molmasse \mathcal{M}_{Masse}^1 ($n = 1$) in Abhängigkeit von den molaren Größen formuliert werden können.

$$n = -1 : \quad \mathcal{M}_{Masse}^{-1} = \frac{1}{M_M} \int_0^\infty f_{Mol}(M) M^0 dM = \frac{1}{M_M} Y_D = y_D \frac{1}{\theta_D} \quad (5.40)$$

$$n = 0 : \quad \mathcal{M}_{Masse}^0 = \frac{1}{M_M} \int_0^\infty f_{Mol}(M) M^1 dM = \frac{1}{M_M} Y_D \theta_D = y_D \quad (5.41)$$

$$n = 1 : \quad \mathcal{M}_{Masse}^1 = \frac{1}{M_M} \int_0^\infty f_{Mol}(M) M^2 dM = \frac{1}{M_M} Y_D \psi_D = y_D \frac{\psi_D}{\theta_D} \quad (5.42)$$

Die räumliche und zeitliche Änderung der Momente \mathcal{M}_{Masse}^n aus Gl. (5.40)-(5.42) in der Gasphase wird über konventionelle skalare Transportgleichungen beschrieben.

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\tilde{\rho} \tilde{y}_D \frac{1}{\theta_D} \right) + \nabla \cdot \left(\tilde{\rho} \tilde{u} \tilde{y}_D \frac{1}{\theta_D} \right) = \nabla \cdot \left[\tilde{\rho} D \nabla \left(\tilde{y}_D \frac{1}{\theta_D} \right) \right] + \left(\dot{\rho} \tilde{y}_D \frac{1}{\theta_D} \right)^s \quad (5.43)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\tilde{\rho} \tilde{y}_D) + \nabla \cdot (\tilde{\rho} \tilde{u} \tilde{y}_D) = \nabla \cdot [\tilde{\rho} D \nabla \tilde{y}_D] + (\dot{\rho} \tilde{y}_D)^s \quad (5.44)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\tilde{\rho} \tilde{y}_D \frac{\psi_D}{\theta_D} \right) + \nabla \cdot \left(\tilde{\rho} \tilde{u} \tilde{y}_D \frac{\psi_D}{\theta_D} \right) = \nabla \cdot \left[\tilde{\rho} D \nabla \left(\tilde{y}_D \frac{\psi_D}{\theta_D} \right) \right] + \left(\dot{\rho} \tilde{y}_D \frac{\psi_D}{\theta_D} \right)^s \quad (5.45)$$

Gegenüber der laminaren Tropfenumgebung wird in der Gasphase die Diffusivität durch die Turbulenz kontrolliert, weshalb für die Diffusionskoeffizienten $D \approx D_t \gg \bar{D}$, \tilde{D} , \hat{D} gilt. Die mit den Indizes s versehenen Terme stellen Quellen bzw. Senken aus der Verdampfung dar. Darüber hinaus können chemische Quellterme aus der Verbrennung entstehen, die jedoch hier nicht berücksichtigt werden. Die aus der Verdampfung resultierenden Quellterme bestimmen sich aus dem effektiven Molenstrom \dot{N} von Tropfenoberfläche zur Gasphase sowie dessen Gewichtung mit dem jeweiligen Moment θ_D und ψ_D . Mit den radialen Konzentrationsprofilen in der Gasphase nach Gl. (5.32)-(5.34) lassen sich die Quellterme aus Gl. (5.43)-(5.45) schreiben als:

$$\left(\dot{\rho} \tilde{y}_D \frac{1}{\theta_D} \right)^s = \frac{A_{Tr}}{V_{Tr}} \dot{N} = \frac{A_{Tr}}{V_{Tr}} \left[\dot{N} Y_{D,O} - c_G \tilde{D} \frac{\partial (Y_D)}{\partial r} \Big|_O \right] \quad (5.46)$$

$$\begin{aligned} (\dot{\rho} \tilde{y}_D)^s &= \frac{A_{Tr}}{V_{Tr}} \dot{N} \theta_D^s = \frac{A_{Tr}}{V_{Tr}} \left[\dot{N} Y_{D,O} \theta_{D,O} - c_G \tilde{D} \frac{\partial (Y_D \theta_D)}{\partial r} \Big|_O \right] \\ &= \frac{A_{Tr}}{V_{Tr}} \dot{N} \left[Y_{D,O} \theta_{D,O} - \frac{1}{B_M} (Y_{D,\infty} \theta_{D,\infty} - Y_{D,O} \theta_{D,O}) \right] \end{aligned} \quad (5.47)$$

$$\begin{aligned} \left(\dot{\rho} \tilde{y}_D \frac{\psi_D}{\theta_D} \right)^s &= \frac{A_{Tr}}{V_{Tr}} \dot{N} \psi_D^s = \frac{A_{Tr}}{V_{Tr}} \left[\dot{N} Y_{D,O} \psi_{D,O} - c_G \tilde{D} \frac{\partial (Y_D \psi_D)}{\partial r} \Big|_O \right] \\ &= \frac{A_{Tr}}{V_{Tr}} \dot{N} \left[Y_{D,O} \psi_{D,O} - \frac{1}{B_M} (Y_{D,\infty} \psi_{D,\infty} - Y_{D,O} \psi_{D,O}) \right] \end{aligned} \quad (5.48)$$

Zusammen mit dem molaren Fluss aus Gl. (5.9) sind mit der hier vorgestellten Formulierung der Transportgleichungen alle Momentenquellterme der Gasphase auch im Grenzfall des Sättigungszustandes ($B_M \rightarrow 0$) eindeutig definiert.

5.4 Verdampfung von überhitzten Flüssigkeiten

Die Verdampfung von überhitzten Flüssigkeiten stellt gegenüber dem konventionellen Verdampfungsprozess, beschrieben in Kap. 5.1, einen Extremfall dar. Aus motorischer Sicht kommt der Einspritzung überhitzter Flüssigkeiten⁸ im homogen-stöchiometrischen Teillastbetrieb mit früher (saugsynchroner) Direkteinspritzung eine zentrale Bedeutung zu. Bei strahlgeführten Brennverfahren ist diese Betriebsart z.B. bei Regeneration des Katalysators von Relevanz. Die grundlegenden Wirkungsmechanismen sowie deren Modellierungsmöglichkeiten werden im Folgenden diskutiert.

5.4.1 Mechanismen bei überhitzter Einspritzung

Bei der Einspritzung wird der flüssige Kraftstoff im Injektor durch die anliegende Druckdifferenz zwischen Düse und Brennraum expandiert. Wird im Verlauf der Beschleunigungsphase die Siedelinie überschritten, liegt die Flüssigkeitstemperatur T_{Fl} über der Sättigungstemperatur T_S des Druckes im Brennraum und es wird von überhitzter Einspritzung gesprochen. Abb. 5.5 zeigt diesen Expansionsvorgang, beginnend bei dem unter hohem Druck gehaltenen flüssigen Kraftstoff (Zustand 1) bis hin zum Brennraumzustand 4. Die Zustandsänderung 1 \rightarrow 2 entspricht dem Verdampfungsvorgang einer konventionellen Einspritzung bis zum Sieden. Mit Überschreiten der Siedelinie kommt es im metastabilen⁹ Bereich (2 \rightarrow 3) durch Siedekeimbildung zum Wachstum von Dampfblasen in der Flüssigkeit (Kavitation).

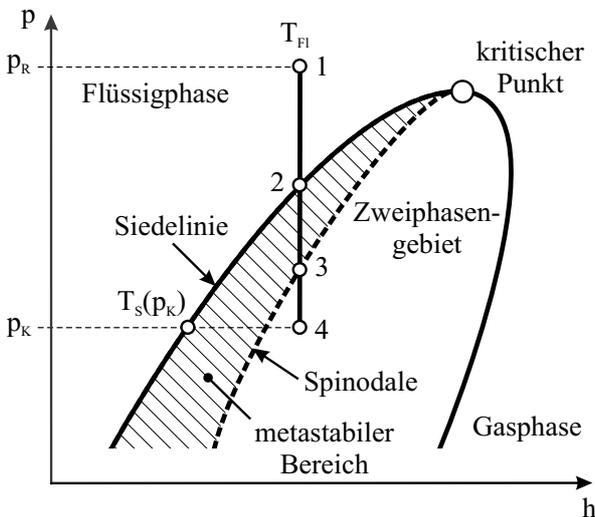


Abb. 5.5: Thermodynamische Zustandsänderung bei überhitzter Einspritzung im p - h -Diagramm nach Oza et al. [98].

Bei der Keimbildung wird zwischen homogener und heterogener Keimbildung unterschieden. Während die erst genannte durch Molekülfuktuationen in idealen Flüssigkeiten ohne gelöste Stoffe und jegliche Verunreinigungen auftritt, entspricht letztere der Realität und resultiert gerade aus diesen Stoffunreinheiten. Mit weiterer Expansion nimmt nach Überschreiten der Spinodalen¹⁰ (3 \rightarrow 4) die Wachstumsrate der Dampfblasenbildung stark zu, wodurch der Verdampfungsvorgang explosionsartig erfolgt. Bei extremer Überhitzung tragen so genannte Mikroexplosionen zusätzlich zum Strahlerfall bei. Die Flüssigkeit befindet sich dabei im thermodynamischen Ungleichgewicht und ist bestrebt, durch Verdampfen das Gleichgewicht

⁸in der Literatur auch mit dem engl. Begriff „Flash-Boiling“ bzw. „Flashing“ bezeichnet.

⁹Im metastabilen Bereich ist der einphasige Zustand stabil gegenüber kleinen Störungen. Bei großen Störungen klappt der metastabile einphasige Zustand unter Entropiezunahme in den stabilen zweiphasigen Zustand um.

¹⁰Die Spinodale ist durch die Extremwerte $(\partial p / \partial v)_T = 0$ einer Isothermen im p - v -Diagramm definiert. Nach ihrem Übergang muss zwingend ein Phasenübergang erfolgen.

wieder herzustellen. Dabei gibt sie ihre Energie in Form von Verdampfungsenthalpie an die Umgebung ab, wobei sie sich selbst isobar abkühlt. Der kontrollierende Mechanismus stellt dabei die Zeitskala der Wärmeleitung im Tropfen dar.

Experimentelle Untersuchungen von Oza et al. [98] zeigten, dass gegenüber unterkritischen Bedingungen durch die Überhitzung eine höhere Strahlqualität mit kleineren Tropfen als Folge der thermodynamischen Fragmentierung erzielt wird, ein größerer Strahlkegelwinkel am Düsenaustritt aufgrund der Expansionswirkung sowie eine geringere Penetration der Flüssigphase. Oza et al. [98] untersuchten ferner den Grad der Überhitzung durch Erhöhung der Kraftstofftemperatur bzw. der Verringerung des Gegendrucks und identifizierten eine Verstärkung oben genannter Effekte mit zunehmender Überhitzung. LI(E)F¹¹-Untersuchungen an Drall- und Mehrlochinjektoren von Schmitz [129] zeigten eine zusätzliche zentrale Dampfkonzentration als Folge der Strahlkontraktion. Ferner zeigte er durch Verwendung von Iso-Oktan und eines aromatenfreien Mehrkomponentenkraftstoffes, dass aufgrund der Volatilität des Mehrkomponentenkraftstoffes der „Flash-Boiling“-Effekt bei bereits geringerem Überhitzungsgrad einsetzt. Aus motorischer Sicht ergibt sich daraus die positive Bilanz, dass mittels der aus der Überhitzung resultierenden Mechanismen eine bessere Homogenisierung der Ladung sowie eine geringere Kolben- und Wandbenetzung mit geringeren HC-Emissionen möglich ist [99].

5.4.2 Modellierung der überhitzten Einspritzung

Die Berechnung des Verdampfungsvorgangs von überhitzten Flüssigkeiten gestaltet sich aus physikalischer und numerischer Sicht schwierig. Zum einen ist aufgrund des sehr raschen, gar explosionsartigen Vorgangs und der damit verbundenen Expansion eine zeitlich und räumlich feine Diskretisierung erforderlich, die mit sehr hohen Rechenzeiten verbunden ist. Zum anderen aber verliert auch das physikalische Verdampfungsmodell, wie es in Kap 5.3 beschrieben ist, seine Gültigkeit, da die Temperatur T_{Tr} an der Tropfenoberfläche den Wert der Siedetemperatur T_S annimmt. Bedingt dadurch strebt mit dem Molenbruch an der Tropfenoberfläche $Y_{D,O} = 1$ der Stofftransport und damit der Verdampfungsmassenstrom gegen unendlich (siehe Abb. 5.6).

$$B_M \rightarrow \infty \quad \text{und} \quad \dot{m} \rightarrow \infty \quad (5.49)$$

Die Herausforderung bei der Modellierung liegt in einer physikalisch plausiblen und numerisch stabilen Umgehung der Singularität an der Siedelinie ($\Delta T = T_S - T_{Tr} = 0$). Folgt man dem Ansatz nach Sparrow und Gregg [133], kann für den Stofftransport die Referenzkonzentration $y_{D,ref}$ nach der 1/3-Regel zwischen der Tropfenoberfläche und dem Umgebungszustand bestimmt werden. Unter unterkritischen Bedingungen strebt damit bei Siedetemperatur $T_{Tr} = T_S$ der Verdampfungsmassenstrom \dot{m} bzw. Stofftransport B_M gegen den Grenzwert:

$$\lim_{y_{D,O} \rightarrow 1} B_M = \lim_{y_{D,O} \rightarrow 1} \frac{y_{D,O} - y_{D,\infty}}{1 - y_{D,ref}} = 3 \quad \text{mit} \quad y_{D,ref} = \frac{2}{3} y_{D,O} + \frac{1}{3} y_{D,\infty} \quad (5.50)$$

Damit ist der unterkritische Verdampfungsbereich einschließlich der Siedelinie kontinuierlich definiert. Daran anknüpfend muss, wie in Abb. 5.6 dargestellt ist, der überhitzte Verdampfungsbe- reich formuliert und der unterkritischen Verdampfung überlagert werden. Bei der „Flash-Boiling“-Modellierung wird auf die detailgetreue Abbildung der hoch-komplexen Prozesse wie Instabilitäten an der Tropfenoberfläche, Tropfendeformation und Tropfenzerfall durch interne Phänomene

¹¹Laserinduzierte (Exciplex-) Fluoreszenz

(z.B. Mikroexplosionen) verzichtet. Stattdessen wird der kontrollierende Mechanismus der überhitzten Verdampfung, also die Wärmeleitung zwischen Tropfeninnerem und Tropfenoberfläche, analytisch über eine effektive Wärmeleitung beschrieben. Für die rein überhitzte Verdampfung bestimmt sich die Verdampfungsrates aus:

$$\dot{m}_f = \alpha_f \frac{(T_{Tr} - T_S)}{\Delta h_v(T_S)} A_{Tr} \quad (5.51)$$

Darin bezeichnet α_f den Wärmeübergangskoeffizienten vom Inneren zur Oberfläche des Tropfens und wird maßgeblich durch den Grad der Überhitzung bestimmt. Adachi et al. [4] leiteten auf Basis ihrer experimentellen Untersuchungen eine empirische Korrelation für den Wärmeübergangskoeffizienten in Abhängigkeit von Tropfen- und Siedetemperatur T_{Tr} bzw. T_S ab.

$$\alpha_f = \begin{cases} 0.76 (T_{Tr} - T_S)^{0.26} & \text{für } 0 \leq T_{Tr} - T_S < 5 \\ 0.027 (T_{Tr} - T_S)^{2.33} & \text{für } 5 \leq T_{Tr} - T_S < 25 \\ 13.8 (T_{Tr} - T_S)^{0.39} & \text{für } 25 \leq T_{Tr} - T_S \end{cases}$$

Die Verdampfungsrates ergibt sich aus der Massenbilanz am Tropfen und setzt sich additiv aus den Massenstromanteilen aus unterkritischer und überhitzter Verdampfung \dot{m}_u bzw. \dot{m}_f zusammen.

$$\dot{m} = \dot{m}_u + \dot{m}_f \quad (5.52)$$

Den unterkritischen Anteil bestimmten Zuo et al. [172] unter der zulässigen Annahme, dass der gesamte Wärmestrom aus der Umgebung und dem Tropfeninneren zur Tropfenoberfläche für die Verdampfung des Tropfens aufgebracht wird. Für sphärische Tropfen erhalten sie für die unterkritische Verdampfungsrates:

$$\dot{m}_u = 4\pi r_{Tr} \frac{\lambda_{G,ref}}{c_{p,ref}} \frac{Nu}{1 + \dot{m}_f/\dot{m}_u} \ln \left[1 + \left(1 + \frac{\dot{m}_f}{\dot{m}_u} \right) \frac{h_{G,\infty} - h_S}{\Delta h_v} \right] \quad (5.53)$$

Darin beschreiben $h_{G,\infty}$ und h_S die Enthalpien des Umgebungsgases in der Gasmischung bzw. an der Tropfenoberfläche und Δh_v die Verdampfungsenthalpie bei Siedetemperatur. Die Wärmeleitfähigkeit $\lambda_{G,ref}$ und spezifische Wärmekapazität $c_{p,ref}$ werden nach Sparrow und Gregg [133] bei Referenzbedingungen nach der 1/3-Regel bestimmt. Konvektive Einflüsse durch die Relativbewegung des Tropfens zum Gas sind in Gl. (5.53) über empirische Korrekturen der Nusselt-Zahl Nu analog zu den Ausführungen in Kap. 5.3.2 berücksichtigt.

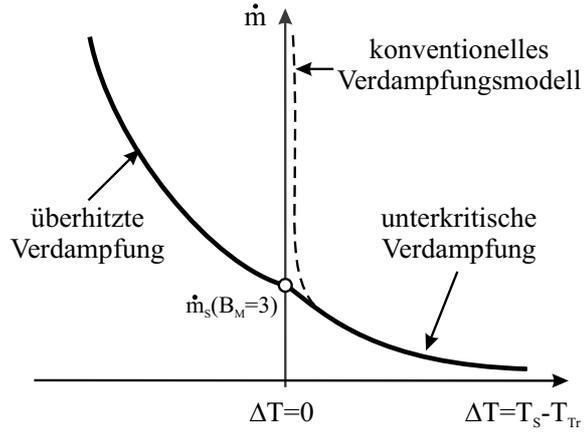


Abb. 5.6: Modellierung des Übergangs von unter- zur überkritischen Verdampfung.

Kapitel 6

Ottomotorische Verbrennung

Die innermotorische Verbrennung lässt sich im Allgemeinen in drei Verbrennungstypen klassifizieren – die turbulente Vormisch- und Diffusionsflamme sowie die homogene Instantanflamme. Abb. 6.1 zeigt die drei Verbrennungsszenarien zusammen mit den zugehörigen motorischen Brennverfahren. Bei der turbulenten Vormischflamme handelt es sich um eine Deflagration, bei der ausgehend vom Zündort eine Flammenfront subsonisch fortschreitet. Sie ist vom klassischen (homogenen) Ottomotor mit saugsynchroner Kanal- bzw. Direkteinspritzung bekannt. Bei Volllast kann zusätzlich klopfende Verbrennung auftreten, bei der sich durch unkontrollierte Selbstzündung des Endgases Druckwellen ausbreiten, die sich bis hin zu Detonationswellen mit Überschall ohne Druckausgleich ausbilden können. Die homogene Instantanflamme wird in der Literatur oftmals als „kontrolliertes Klopfen“ bezeichnet. Sie wird über die Kompression des Endgases durch gleichmäßig verteilte Niedertemperaturreaktionen bis hin zur druckausgeglichenen (homogenen) Selbstzündung initiiert. Stellvertretend sei hier die ottomotorische Raumzündverbrennung (RZV) zu nennen. Turbulente Diffusionsflammen, auch nicht-vorgemischte Flammen genannt, sind dadurch charakterisiert, dass Kraftstoff und Oxidator erst in der Reaktionszone vermischt werden. Sie stellen zusammen mit dem Selbstzündungsmechanismus die wesentliche Verbrennungserscheinung in heutigen Dieselmotoren dar. In der vorliegenden Arbeit ist der Fokus auf die Schichtladungsverbrennung gerichtet, wie sie bei modernen Ottomotoren mit Benzin-Direkteinspritzung und strahlgeführten Brennverfahren vorliegt. Sie beinhaltet die turbulente Vormisch- und Diffusionsflamme in überlagerter Form und wird daher auch als teilweise vorgemischte Verbrennung bezeichnet.

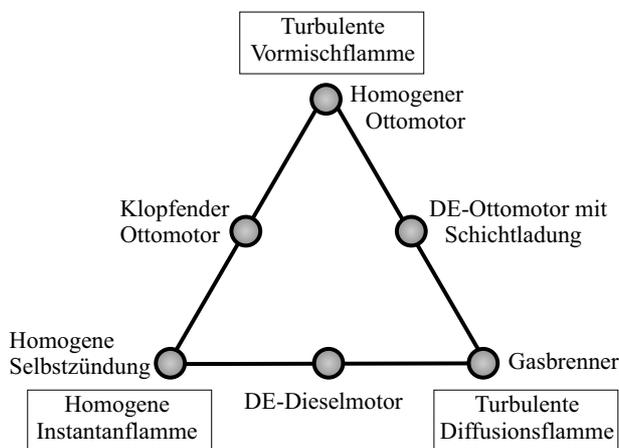


Abb. 6.1: Klassifizierung der (motorischen) Verbrennungsszenarien nach Otto [97].

Die Zielsetzung der in diesem Kapitel beschriebenen Arbeit liegt in der Entwicklung eines Modells, welches die Regimes aus turbulenter Vormisch- und Diffusionsverbrennung zusammenführt und für beliebige Mischungszustände eine physikalisch-chemisch korrekte Abbildung der Wärme-freisetzung erlaubt. Dazu wird in Kap. 6.1 auf die Charakterisierung der ottomotorischen Verbrennung und in Kap. 6.2 auf die Klassifizierung der Verbrennungsregimes eingegangen, bevor in Kap. 6.3.1 und 6.3.2 die Modellansätze für die „Grenzfälle“ der Vormisch- und Diffusionsverbrennung diskutiert werden. Auf dieser Grundlage wird in Kap. 6.3.3 ein neues Modell zur Beschreibung der sowohl teilweise als auch vollkommen vorgemischten Verbrennung in Otto-

motoren mit Direkteinspritzung vorgestellt, wie sie im Schichtbetrieb in der Teillast bzw. im Homogenbetrieb in der Vollast vorliegen.

6.1 Charakterisierung der ottomotorischen Verbrennung

Die Einleitung der Verbrennung in Ottomotoren erfolgt durch Funkenentladung und Plasma-bildung an der Zündkerze. Durch die herbeigeführte Temperaturerhöhung wird die chemische Reaktion initiiert, wodurch ein Flammkern entsteht. Zwischen verbranntem und unverbranntem Gas bildet sich eine Flammenfront aus, die der konvektiven Strömung überlagert mit einer charakteristischen Geschwindigkeit in Richtung des unverbrannten Gases fortschreitet. Die Flamme selbst kann räumlich in drei Bereiche unterteilt werden – eine Vorwärmzone, eine dünne Reaktionszone¹, in der die eigentliche Kraftstoffumsetzung erfolgt, sowie eine dazu vergleichsweise dickere Oxidationszone, in der Zwischenprodukte abgebaut werden. Die Ausbreitung der laminaren Flamme wird durch den molekularen Wärme- und Stofftransport aus der Reaktionszone in die Vorwärmzone bestimmt. Mit fortschreitender Reaktion treten mehr und mehr turbulente Strukturen mit der anfangs laminaren Flamme in Wechselwirkung, wodurch sich die Flamme faltet und ihre Oberfläche, d.h. die Reaktionszone, vergrößert (vgl. Abb. 6.2 a). Es entwickelt sich eine tur-

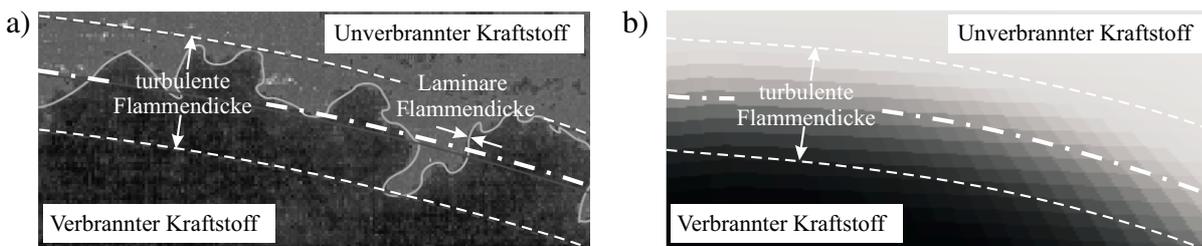


Abb. 6.2: a) OH-LIF Aufnahme einer turbulenten Flamme: laminare (—) und mittlere turbulente Flammenfront (- · -); b) Gemittelte turbulente Flamme einer RANS-Simulation.

eine turbulente Flammenfront, die sich unter homogen vorgemischten Bedingungen „gleichmäßig“ über den gesamten Brennraum ausbreitet. Im (Teillast-) Betrieb mit Schichtladung bleibt die

Flammenausbreitung auf den mit Gemisch erfassten Bereich beschränkt. In dieser mit inhomogenem Gemisch erfassten Zone wird die Flammenausbreitung maßgeblich durch die Gemischzusammensetzung bestimmt. Die laminare Brenngeschwindigkeit (siehe Kap. 6.3.1.2) weist nahe der stöchiometrischen Mischungslinie $Z \approx Z_{st}$ ein Maximum auf und nimmt in den mageren ($Z < Z_{st}$ bzw. $\lambda > 1$) und fetten Zonen ($Z > Z_{st}$ bzw. $\lambda < 1$) wieder ab. Demzufolge ist der Flammenfortschritt um Z_{st} am größten, während sich die in Richtung der mageren und fetten Zone ausbreitende magere bzw. fette vorgemischte turbulente Flammenfront mit geringerer Brenngeschwindigkeit fortpflanzt. Hinter den beiden Flammenfronten entwickelt sich um die Stöchiome-

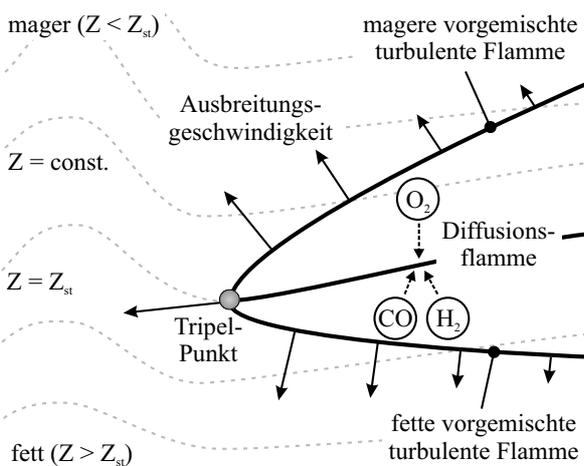


Abb. 6.3: Teilweise vorgemischte Verbrennung nach Peters [102]: Turbulente Flammfrontausbreitung und Diffusionsverbrennung.

¹Die Dicke der Reaktionszone schätzt Peters [102] mit $\delta_l \approx 0.1 d_l$ der gesamten laminaren Flammendicke d_l ab.

triegrenze Z_{st} eine Diffusionsflamme, in der Zwischenprodukte (CO , H_2) aus der fetten Vormischverbrennung und nicht-oxidiertes Sauerstoff (O_2) aus der mageren Vormischverbrennung miteinander reagieren. Aufgrund der gekoppelten Struktur von Vormisch- und Diffusionsverbrennung wird dieser Flammentyp in der Literatur auch als „Tripelflamme“ bezeichnet (siehe Abb. 6.3).

6.2 Klassifizierung der motorischen Verbrennungsregimes

Den Ausgangspunkt für die Formulierung eines Verbrennungsmodells bildet die Klassifizierung der Verbrennungsregimes. In der Literatur werden dazu häufig die Ansätze von Borghi [17] und Peters [102] zitiert. Für die vorgemischte Verbrennung nahm Peters [102] eine Unterteilung der Verbrennung in fünf Bereiche vor und stellte sie als Verhältnis aus turbulenter Fluktuation und laminarer Brenngeschwindigkeit u'/s_l in Abhängigkeit vom Verhältnis aus turbulenter Längenskala und laminarer Flammendicke l_t/d_l dar. Abb. 6.4 zeigt diese Regimes für die Vormischverbrennung. Für die Diffusionsverbrennung ist eine ähnliche Darstellung in Peters [102] zu finden.

Im Bereich unterhalb der Reynolds-Zahl $Re_t < 1$ liegen *laminare Flammen* vor, oberhalb von $Re_t > 1$ wird von turbulenten Flammen gesprochen. Im „Flamelet“-Regime, d.h. im Bereich der *gewellten* und *gefalteten Flammen*, ist die kleinste turbulente Struktur l_K größer als die laminare Flammendicke d_l ($d_l < l_K$) und kann nicht in die laminare Flammenfront eindringen und sie zerstören. Die chemische Reaktion verläuft deutlich schneller als die turbulente Bewegung, so dass die Verbrennung durch die Turbulenz kontrolliert wird. Wird die turbulente Skala l_K kleiner als die laminare Flammendicke d_l und bleibt gleichzeitig größer als die Dicke der Reaktionszone δ_l ($\delta_l < l_K < d_l$), liegen dünne Reaktionszonen vor. Hier können die turbulenten Wirbel in die Vorwärmzone eindringen, nicht aber in die eigentliche Reaktionszone. Dadurch bleibt die Struktur der Reaktionszone unbeeinflusst von der Turbulenz, die Vorwärmzone hingegen wird stark vergrößert. Im Bereich der *aufgebrochenen Reaktionszonen* sind die Kolmogorov'schen Größenskalen kleiner als die der Reaktionszone ($l_K < \delta_l$) und dringen in ihre innere Struktur ein, so dass keine definierte Flammenstruktur mehr vorhanden ist. Der Verbrennungsvorgang gleicht einem homogenen Reaktionsgebiet, wie es im Fall der ottomotorischen Raumzündverbrennung (siehe Abb. 6.1) vorliegt.

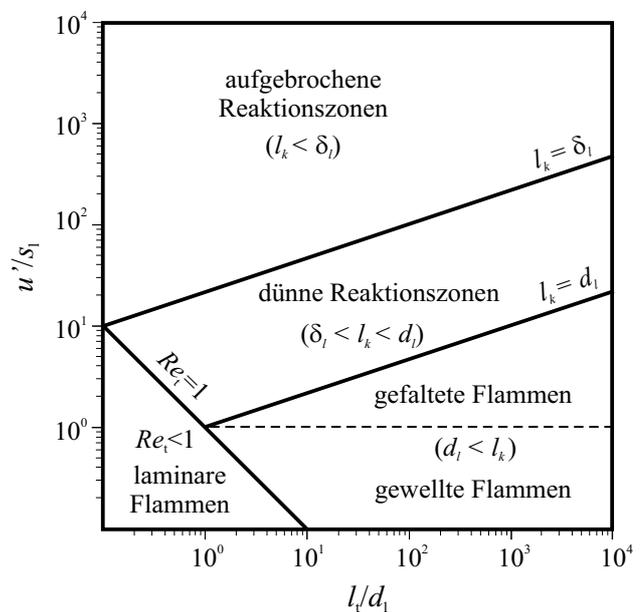


Abb. 6.4: Regimes der vorgemischten Verbrennung nach Peters [102].

Die teilweise vorgemischte Verbrennung, wie sie in Ottomotoren mit strahlgeführten Brennverfahren vorliegt, spielt sich hauptsächlich im „Flamelet“-Regime ab (siehe Peters [102] und War-natz et al. [157]). Die verbrennungsdiagnostische Aufnahme in Abb. 6.2 a) zeigt exemplarisch die Struktur einer gefalteten turbulenten Flamme des „Flamelet“-Regimes.

6.3 Modellierung der Verbrennung

Heutige Modelle für die teilweise vorgemischte Verbrennung von ottomotorischen Brennverfahren beruhen im Allgemeinen auf vier grundlegenden Annahmen, welche die Beschreibung des physikalisch-chemisch hoch komplexen Verbrennungsprozesses vereinfachen:

- Reduzierte Reaktionsmechanismen
- Thermochemisches Gleichgewicht hinter der Flammenfront
- „Flamelet“-Ansatz
- Einphasige Verbrennungsmodellierung (im Geschwindigkeitsfeld)

Die Reaktionskinetik erfordert Kenntnisse über die chemischen Mechanismen. Ottokraftstoffe setzen sich aus mehreren hundert Komponenten zusammen (vgl. Kap. 5.1), so dass eine detaillierte Modellierung der Reaktionskinetik nicht möglich ist. Für motorische Anwendungen werden *reduzierte Reaktionsmechanismen* für die reaktionsbestimmenden Gleichungen und Spezies herangezogen. Oft handelt es sich dabei um Einschritt-Bruttoreaktionen.

Die Annahme von *thermochemischem Gleichgewicht* macht sich die Eigenschaft zu Nutze, dass thermodynamische Systeme einen Gleichgewichtszustand anstreben. Dieser ist dadurch charakterisiert, dass die Reaktionsraten der Hin- und Rückreaktionen identisch sind und somit die „Netto“-Reaktionsrate null ist und die Stoffzusammensetzung unverändert bleibt [87]. Der Gleichgewichtszustand ist eindeutig durch Druck, Temperatur und die Konzentrationen des Ausgangsgemisches definiert und lässt sich mit Hilfe der klassischen Thermodynamik beschreiben.

Den Ausgangspunkt des „*Flamelet*“-Ansatzes für vorgemischte Flammen bildet das Regime der gewellten und gefalteten Flammen, wie in Kap. 6.2 beschrieben. Allgemein kann für Vormisch- und Diffusionsflammen im „*Flamelet*“-Regime unter den Voraussetzungen, dass die

- Dicke der Reaktionszone d_l kleiner als das Kolmogorov-Längenmaß l_K ($d_l < l_K$) ist
- und die Verbrennung turbulenz-kontrolliert verläuft ($\tau_t > \tau_{ch}$),

die komplexe 3D-Struktur der turbulenten Flamme als Ensemble von dünnen, laminaren 1D-Flammen beschrieben werden. Die Wirkung der Turbulenz liegt in der Krümmung und Streckung der laminaren Flamme, ohne ihre innere Struktur zu zerstören. Durch turbulente Mittelung wird die turbulente Flammenfront in eine Flamme mit gegenüber der laminaren Flammenfront verringerter Oberfläche $A_t < A_l$, jedoch vergrößerter Dicke $d_t > d_l$ und Brenngeschwindigkeit $s_t > s_l$ übergeführt (siehe Abb. 6.2 b). Aus Massenkonservierungsgründen gilt:

$$\rho_u A_l s_l = \rho_u A_t s_t \quad (6.1)$$

An der laminaren Flammenfront, d.h. beim Übergang vom unverbrannten zum verbrannten Gas, tritt durch die chemische Reaktion ein Sprung in der Dichte ($\bar{\rho}_b \neq \bar{\rho}_u$) auf und damit verbunden auch in der Geschwindigkeit normal zur Flammenfront ($\vec{u}_b \neq \vec{u}_u$). In der *einphasigen Verbrennungsmodellierung*, wie sie heute im Allgemeinen zugrunde gelegt wird, bestimmt sich die mittlere Gasgeschwindigkeit \vec{u}_m nach der turbulenten Mittelung durch das Superpositionsprinzip.

$$\vec{u}_m = (1 - c) \vec{u}_u + c \vec{u}_b \quad (6.2)$$

Darin bezeichnet c die Flammenfortschrittsvariable (siehe Kap. 6.3.1.1), die verbranntes und unverbranntes Gas voneinander trennt. Durch partielle Ableitung von Gl. (6.2) ergibt sich der Gradient von \vec{u}_m zu:

$$\nabla \vec{u}_m = (1 - c) \nabla \vec{u}_u + c \nabla \vec{u}_b + (\vec{u}_b - \vec{u}_u) \nabla c, \quad (6.3)$$

Der letzte Term resultiert allein aus der Superpositionsbildung und nimmt bei kleinen Flammendicken, also starken Gradienten ∇c , große Werte an. Da die Turbulenzgleichungen (2.23)-(2.24) des k - ϵ -Modells Quellterme enthalten, die sich proportional zum mittleren Geschwindigkeitsgradienten $\nabla \vec{u}_m$ verhalten, führt dies zu einem unphysikalischen Anwachsen der turbulenten kinetischen Energie k in der Flamme. Dies wiederum erhöht die turbulente Brenngeschwindigkeit s_t aus Gl. (6.12) und führt schließlich zu einer Selbstbeschleunigung der Flamme. Eine Lösung für diese Problematik stellen zweiphasige Verbrennungsmodelle dar. Da diese bislang nicht existieren, werden in der Praxis, wie auch in der vorliegenden Arbeit, einphasige Verbrennungsansätze herangezogen, in denen die Zustände aus unverbranntem und verbranntem Gas nach der turbulenten Mittelung überlagert vorliegen.

6.3.1 Vorgemischte Verbrennung

Bei der vorgemischten Verbrennung sind unter idealen Bedingungen Kraftstoff und Oxidator vollkommen und homogen durchmischt. Die chemische Reaktion führt zur Ausbildung einer sich selbst erhaltenden Flammenfront, die der Strömung überlagert mit einer charakteristischen Brenngeschwindigkeit fortschreitet. In der Literatur ist eine Vielzahl an Modellen zur Beschreibung des Flammenfortschritts zu finden, die sich in ihrer Komplexität und Modellierungstiefe stark unterscheiden. Die gängigsten unter ihnen sind das „Eddy-Breakup“-Modell (EBU, siehe Spalding [132]), „Extended Coherent Flame“-Modell (ECFM, siehe Duclos et al. [36]), „Level-Set“-Modell (siehe Peters [102]) und das „Flame-Wrinkling“-Modell (Flammenfaltungsmodell, siehe Weller [159]). Letzteres wird für die Flammenfortschrittsmodellierung der Schichtladungsverbrennung in Kap. 6.3.3 herangezogen und wird im folgenden Kapitel ausführlich beschrieben.

6.3.1.1 Das Flammenfaltungsmodell

Den Ausgangspunkt bei der Formulierung des Flammenfaltungsmodells von Weller [159] bilden die Fortschrittsvariable² \tilde{c} und der Flammenfaltungsfaktor Ξ . Die Fortschrittsvariable $\tilde{c} \in [0, 1]$ ($\tilde{c} = 0$: unverbranntes Gas; $\tilde{c} = 1$ verbranntes Gas) gibt die Wahrscheinlichkeit an, vollständig verbranntes Gas vorzufinden. Der Flammenfaltungsfaktor Ξ beschreibt das Flammenoberflächenverhältnis aus tatsächlicher (laminarer) und in Ausbreitungsrichtung projizierter (turbulenter) Flammenoberfläche A_l bzw. A_t . Mit Gl. (6.1) lässt sich Ξ auch als Verhältnis von turbulenter und laminarer Brenngeschwindigkeit s_l bzw. s_t ausdrücken.

$$\Xi = \frac{A_l}{A_t} = \frac{s_t}{s_l} \quad (6.4)$$

Für die räumliche und zeitliche Entwicklung von Flammenfortschritt \tilde{c} und -faltung Ξ leitete Weller [159] skalare Transportgleichungen ab. Die Gleichung für die Flammenfaltungsvariable Ξ hat sich aufgrund des so genannten „Cusp“-Terms, der durch einen starken Anstieg innerhalb der Flamme für eine endliche Flammendicke sorgt, als numerisch äußerst diffizil erwiesen. In einem modifizierten Ansatz nach Weller et al. [161] wird für den Fortschritt \tilde{c} und die Faltung Ξ der Flamme folgende Formulierung vorgeschlagen:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{c}) + \nabla \cdot (\bar{\rho} \vec{u} \tilde{c}) = \nabla \cdot (\bar{\rho} D_t \nabla \tilde{c}) + \bar{\rho}_u \Xi s_l |\nabla \tilde{c}| \quad (6.5)$$

$$\frac{\partial \Xi}{\partial t} + \vec{u}_s \cdot \nabla \Xi = G \Xi - R (\Xi - 1) + (w_s - w_t) \Xi \quad (6.6)$$

²Weller's [159] Formulierung beruht auf einer Regressvariablen \tilde{b} , wobei der Zusammenhang $\tilde{b} = 1 - \tilde{c}$ gilt.

In Gl. (6.6) beschreibt \vec{u}_s die Ausbreitungsgeschwindigkeit der Flammenoberfläche. Die Quellterme beinhalten die Änderung der Flammenfaltung durch Scherung (w_s und w_t), die Produktion (G) durch Turbulenz sowie die Vernichtung (R) durch den Flammenfortschritt.

$$G = R \frac{\Xi_{GG} - 1}{\Xi_{GG}}, \quad R = \frac{0.28}{\Xi} \frac{\Xi_{GG}^*}{\Xi_{GG}^* - 1} \quad \text{mit} \quad (6.7)$$

$$\Xi_{GG} = 1 + 2\tilde{c}(\Xi_{GG}^* - 1) \quad \text{und} \quad \Xi_{GG}^* = 1 + 0.62 \sqrt{\frac{u'}{s_t}} R_{t,K} \quad (6.8)$$

Mit $R_{t,K} = u' l_K / \nu$ wird die mit dem Kolmogorov-Längenmaß l_K (siehe Gl. (2.5)) gebildete turbulente Reynolds-Zahl bezeichnet. Unter der Voraussetzung, dass sich die Flammenfaltung stets im lokalen Gleichgewicht³ $\Xi = \Xi_{GG}$ befindet, reduziert sich das Flammenfaltungsmodell auf eine Differentialgleichung für die Flammenfortschrittsvariable \tilde{c} .

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{c}) + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{u} \tilde{c}) = \nabla \cdot (\bar{\rho} D_t \nabla \tilde{c}) + \bar{\rho}_u \bar{s}_t | \nabla \tilde{c} | \quad (6.9)$$

6.3.1.2 Laminare und turbulente Flammgeschwindigkeit

Die laminare Brenngeschwindigkeit ist definiert als die Geschwindigkeit normal zur laminaren Flammenoberfläche, mit der sich die Flamme ausbreitet. Sie ist eine Funktion von Druck, Temperatur und Gemischzusammensetzung. Über Experimente in so genannten „Verbrennungsbomben“ und an stationären, laminaren Bunsenflammen wurden diverse empirische Korrelationen abgeleitet (siehe z.B. Gülder [51], Metgalchi und Keck [88]). Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wird auf die empirische Korrelation von Gülder [51] zurückgegriffen.

$$s_l(\Phi, p, T_u, Y_R) = Z W \Phi^\eta e^{-\xi(\Phi - \Phi^*)^2} \left(\frac{T_u}{T_{ref}} \right)^\alpha \left(\frac{p}{p_{ref}} \right)^\beta (1 - f Y_R) \quad (6.10)$$

Darin beschreiben Φ das Äquivalenzverhältnis, Φ^* das Äquivalenzverhältnis bei maximaler Brenngeschwindigkeit, T_u die Temperatur im unverbrannten Gas. Den auf s_l hemmenden Einfluss von zunehmendem Restgas wird durch einen linearen Zusammenhang über den Molenbruch des Restgases Y_R und den zugehörigen Proportionalitätsfaktor f abgebildet. Die Größen Z , W , η , ξ , α und β stellen kraftstoffspezifische Konstanten bei Referenzbedingungen dar und sind für Iso-Oktan⁴ in Tab. 6.1 dargestellt. Abb. 6.5 zeigt den Vergleich der Korrelation nach Gl. (6.10) mit Messwerten aus „Verbrennungsbomben“ sowie den Einfluss unterschiedlicher Restgaskonzentrationen unter Normbedingungen.

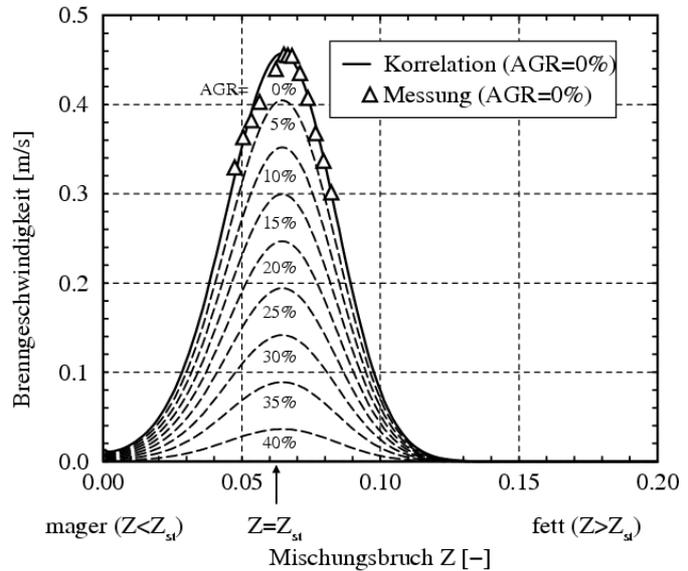


Abb. 6.5: Laminare Brenngeschwindigkeit für Iso-Oktan bei $p = 1 \text{ bar}$, $T_u = 298 \text{ K}$ und $\Phi = 1$.

³Im Gleichgewicht entspricht die Produktion von zusätzlicher Flammenoberfläche aufgrund von Turbulenz der Vernichtung von Flammenoberfläche durch den Flammenfortschritt [159].

⁴Nach Heywood [61] sind die Brenngeschwindigkeiten für Iso-Oktan und Benzin vergleichbar

Z [-]	W [m/s]	η [-]	ξ [-]	α [-]	β [-]	f [-]	T_{ref} [K]	p_{ref} [bar]
1.0	0.4658	-0.326	4.48	1.56	-0.22	2.3	298.15	1.0

Tab. 6.1: Konstanten für die laminare Brenngeschwindigkeit von Iso-Oktan nach Gülder [51]

Die turbulente Brenngeschwindigkeit s_t (siehe Gl. (6.4)) ist eine durch die turbulente Mittelung eingeführte „Scheingröße“. Sie beschreibt analog zu ihrem laminaren Pendant die Flammenfortschrittsgeschwindigkeit relativ zum unverbrannten Gas. Neben der laminaren Brenngeschwindigkeit wird sie maßgeblich durch die Turbulenz der Strömung bestimmt. Damköhler [33] beschrieb als erster den Zusammenhang der turbulenten Brenngeschwindigkeit s_t in Abhängigkeit von der laminaren Brenngeschwindigkeit s_l und der turbulenten Schwankungsbewegung u' .

$$s_t = s_l + u' \quad (6.11)$$

Ein heute weit verbreiteter Ansatz geht auf Herweg [58] zurück. Er gibt für eine voll ausgebildete turbulente Flamme die Korrelation

$$\frac{s_t}{s_l} = 1 + A_{Fl} \sqrt{\frac{u'}{u' + s_l}} \left(\frac{u'}{s_l}\right)^n \quad (6.12)$$

mit den Konstanten A_{Fl} und n an. In Gl. (6.12) hat der Wurzel-Term im Bereich niedriger Turbulenz eine auf die turbulente Brenngeschwindigkeit dämpfende Wirkung. Für den Grenzfall der laminaren Verbrennung geht die turbulente Brenngeschwindigkeit s_t aus Gl. (6.12) in die laminare Brenngeschwindigkeit s_l über.

$$s_t \rightarrow s_l \quad \text{für} \quad u' \rightarrow 0 \quad (6.13)$$

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wird auf die Korrelation von Herweg [58] nach Gl. (6.12) zurückgegriffen. Darin wird der Exponent mit $n = 5/6$ vorgegeben. Der Vorfaktor A_{Fl} bewegt sich im Allgemeinen in der Größenordnung $A_{Fl} \approx 2 \dots 3$ und muss individuell für die zugrunde liegende Motorkonfiguration angepasst werden (siehe dazu auch Kap. 7.3.3).

6.3.2 Diffusionsverbrennung

Die Diffusionsverbrennung, in der Literatur auch als nicht-vorgemischte Verbrennung bezeichnet, stellt den der vorgemischten Verbrennung entgegengesetzten Grenzfall dar. Dabei werden Kraftstoff und Oxidator durch Diffusion erst in der Reaktionszone miteinander vermischt. Zentrale Bedeutung kommt der turbulenten Mischung zu, da sie im „Flamelet“-Regime den geschwindigkeitsbestimmenden Prozess darstellt. In Abb. 6.6 ist exemplarisch die Gemischverteilung für eine turbulente Brennerströmung dargestellt. Das linke Bild zeigt die Momentaufnahme der Gemischverteilung, während das rechte die RANS-Simulation repräsentiert, in der die Information über die tatsächlich vorliegende inhomogene Gemischverteilung durch die Ensemble-Mittelung verloren ging. Anhand dieses Vergleichs wird offensichtlich, dass die Berechnung der chemischen Quellterme für die Spezies und die Energie in Gl. (2.10) und (2.14) auf Basis von Mittelwerten zu unphysikalisch großen Fehlern führt, da gilt:

$$\tilde{\rho}^c \neq \dot{\rho}^c(\bar{p}, \tilde{T}, \tilde{y}_i) \quad \text{und} \quad \tilde{Q}^c \neq \dot{Q}^c(\bar{p}, \tilde{T}, \tilde{y}_i) \quad (6.14)$$

Für die Modellierung ist es daher entscheidend, neben der Chemie vor allem die turbulenten Fluktuationen der Konzentrationen und thermodynamischen Zustandsgrößen zu charakterisieren.

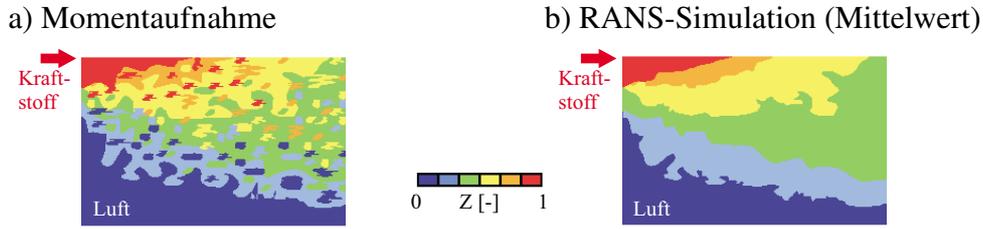


Abb. 6.6: Exemplarischer Vergleich der tatsächlichen Gemischverteilung mit dem Ensemble-Mittelwert der RANS-Simulation nach Steiner [139].

6.3.2.1 Beschreibung des Mischungszustandes

Unter der Voraussetzung gleicher Diffusivität für alle Spezies lässt sich der Mischungsbruch mit nur einer charakteristischen Größe, dem Mischungsbruch Z , beschreiben [157]. Der Mischungsbruch Z ist auf Basis der Elementenmassenbrüche definiert, welche den Massenanteil eines Elements j an der Gesamtmasse darstellen.

$$Z_j = \sum_{i=1}^{N_S} \frac{a_{ij} M_j}{M_i} y_i \quad j = 1, \dots, N_E \quad (6.15)$$

Darin gibt N_S die Anzahl der Stoffe, N_E die Anzahl der Elemente und die Koeffizienten a_{ij} die Anzahl der Atome des Elements j in einem Mol der Spezies i mit der Molmasse M an. Für ein Gemisch bestehend aus zwei Gasen, z.B. Kraftstoff (Index: 1) und Oxidator (Index: 2) lässt sich zusammen mit den Elementenmassenbrüchen Z_j der Mischungsbruch Z definieren.

$$Z = \frac{Z_j - Z_{j,2}}{Z_{j,1} - Z_{j,2}} \quad \text{mit} \quad Z \in [0, 1] \quad (6.16)$$

Aufgrund der elementenbezogenen Definition bleibt Z gegenüber den molekularen Stoffgrößen während der Verbrennung erhalten und ist unabhängig vom Verbrennungsfortschritt.

Das Äquivalenzverhältnis Φ bzw. das Verbrennungsluftverhältnis λ , auch Luftzahl genannt, lässt sich im unverbrannten Gas als Funktion des Mischungsbruchs Z ausdrücken

$$\Phi = \frac{1}{\lambda} = \frac{Z}{1-Z} \frac{1-Z_{st}}{Z_{st}} \quad \text{mit} \quad Z_{st} = \frac{1}{1+L_{st}}, \quad (6.17)$$

worin L_{st} die stöchiometrische Luftzahl darstellt. Unter stöchiometrischen Bedingungen ($\lambda = 1$) gilt $Z = Z_{st}$, während magere Bereiche $\lambda > 1$ durch $Z < Z_{st}$ bzw. fette Zonen $\lambda < 1$ durch $Z > Z_{st}$ charakterisiert sind.

Die zeitliche und räumliche Änderung des Mischungsbruchs \tilde{Z} und dessen durch turbulente Schwankung verursachte Varianz $\widetilde{Z'^2}$ wird in Analogie zu den Spezies-Erhaltungsgleichungen (2.10) über skalare Transportgleichungen beschrieben.

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{Z}) + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{u} \tilde{Z}) = \nabla \cdot (\bar{\rho} D \nabla \tilde{Z}) + \dot{\rho}_i^s \quad (6.18)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \widetilde{Z'^2}) + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{u} \widetilde{Z'^2}) = \nabla \cdot (\bar{\rho} D \nabla \widetilde{Z'^2}) + 2\bar{\rho} D_t (\nabla \tilde{Z})^2 - \bar{\rho} \tilde{\chi} + \dot{\rho}_{Z'^2}^s \quad (6.19)$$

Der Einfluss der Tropfenverdampfung wird in Gl. (6.18) für den Mischungsbruch durch den Massenquellterm $\dot{\rho}_i^s$ erfasst und in der Gl. (6.19) für die Mischungsbruchvarianz durch $\dot{\rho}_{Z''2}^s$. Für letzteren werden die Modellierungsansätze ausführlich von Subramaniam et al. [146] diskutiert. Als weitere Quellterme beinhaltet Gl. (6.19) neben der Produktion von $\widetilde{Z''2}$ die Vernichtung in Form der turbulenten mittleren skalaren Dissipationsrate $\tilde{\chi}$. Nach Jones [72] wird diese durch die Beziehung

$$\tilde{\chi} = C_\chi \frac{\tilde{\epsilon}}{k} \widetilde{Z''2} \quad (6.20)$$

modelliert, wobei das Verhältnis aus skalarer und Strömungszeitskala C_χ für motorische Prozesse meist mit $C_\chi = 2$ angenommen wird [102]. Gl. (6.18) und (6.19) enthalten keinen chemischen Quellterm, da durch chemische Reaktionen weder Elemente gebildet noch vernichtet werden.

6.3.2.2 PDF-Modellierung

Zu Beginn von Abschnitt 6.3.2 wurde diskutiert, dass die reine Mittelwertbetrachtung der Konzentrationen zu erheblichen Fehlern bei der Berechnung der chemischen Quellterme führt und folglich der Einfluss turbulenter Fluktuationen auf die Gemischzusammensetzung einbezogen werden muss [157]. Zum einen ist dies in der turbulenten Brenngeschwindigkeit für die Flammenfortschrittsrate zu berücksichtigen. Zum anderen erfordert das „Flamelet“-Konzept aufgrund der Auflösung der Reaktionszone im Mischungsbruchraum zwangsläufig die Kenntnis über das Mischungsfeld, um so die „Flamelet“-Lösung in den physikalischen 3D-Raum zu transformieren.

Gemischverteilungen können durch Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen (engl. „probability density function“, PDF) beschrieben werden. Bei der Bestimmung der PDF wird zwischen zwei Ansätzen unterschieden:

- Modelle mit transportierter PDF (engl. „transported-PDF“-Modelle)
- Modelle mit angenommener PDF (engl. „presumed-PDF“-Modelle)

Bei „*transported-PDF*“-Modellen wird der lokale Gemischzustand durch ein Ensemble homogener Reaktoren beschrieben. Jeder homogene Reaktor wird durch ein numerisches Partikel repräsentiert. Die grundlegende Idee, aber auch Problematik, dieser Beschreibungsweise ist identisch zum stochastischen Tropfenmodell aus Kap. 2.4, was sie heute für die motorische Verbrennungssimulation als wenig praktikabel macht. Mit zukünftig zunehmenden Rechenkapazitäten wäre die Berechnung der Selbstzündung (z.B. homogene Kompressionszündung und Klopfen) eine mögliche Anwendung.

In dieser Arbeit wird der Ansatz der „*presumed-PDF*“-Modelle gewählt. Sie beruhen auf einer vordefinierten, analytischen Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion, die über eine limitierte Anzahl an statistischen Momenten beschrieben wird. In der Literatur hat sich die Verwendung einer β -PDF etabliert [102]. Mit nur zwei statistischen Momenten (Mittelwert und Varianz) deckt sie eine große Bandbreite an unterschiedlichen Verteilungsformen ab. Mögliche Formen der β -Funktion sind in Abb. 6.7 dargestellt.

Die normierte, Favre-gemittelte β -Funktion $\tilde{P}(Z)$ ist definiert als:

$$\tilde{P}(Z; \vec{x}, t) = \frac{1}{B(\alpha, \beta)} Z^{\alpha-1} (1 - Z)^{\beta-1} \quad \text{mit} \quad \tilde{P} \in [0, 1] \quad (6.21)$$

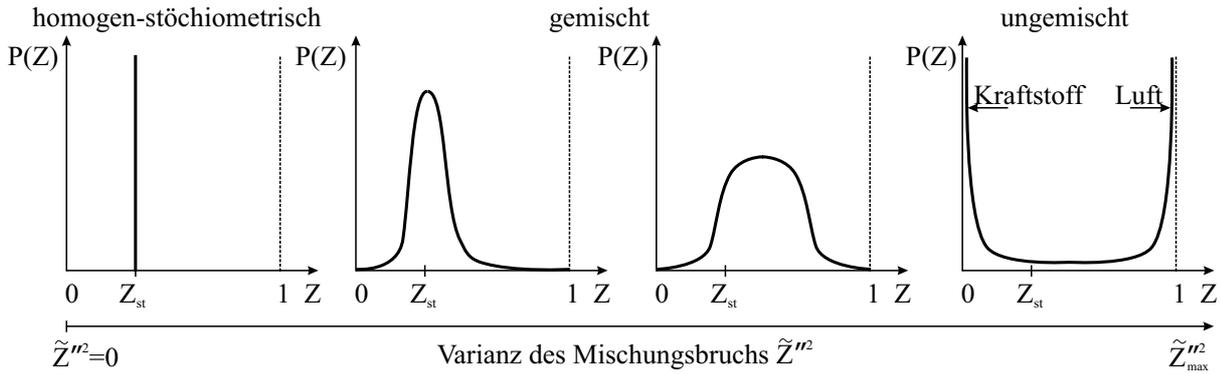


Abb. 6.7: Mögliche Formen der β -Funktion für verschiedene Mischungszustände

Die Exponenten α , β und γ stellen die Formparameter der β -Funktion dar und lassen sich aus dem Favre-gemittelten Mischungsbruch \tilde{Z} und dessen Varianz \tilde{Z}''^2 ermitteln.

$$\alpha = \tilde{Z} \gamma, \quad \beta = (1 - \tilde{Z}) \gamma \quad \text{und} \quad \gamma = \alpha + \beta = \frac{\tilde{Z}(1 - \tilde{Z})}{\tilde{Z}''^2} - 1 \geq 0 \quad (6.22)$$

Der Vorfaktor $B(\alpha, \beta)$ in Gl. (6.21), der auch als vollständige β -Funktion bezeichnet wird, stellt den Normierungsfaktor dar und kann mit Hilfe der Γ -Funktion analytisch bestimmt werden.

$$B(\alpha, \beta) = \int_{Z=0}^{Z=1} Z^{\alpha-1} (1 - Z)^{\beta-1} dZ = \frac{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)}{\Gamma(\alpha + \beta)} \quad (6.23)$$

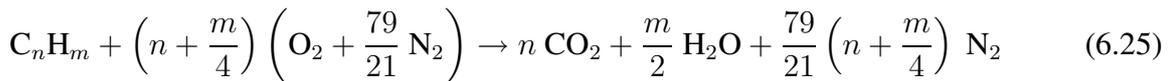
Der statistische Mittelwert⁵ $\tilde{\psi}(\vec{x}, t)$ einer beliebigen Größe $\psi(Z)$ lässt sich durch deren Gewichtung mit der β -Funktion bestimmen.

$$\tilde{\psi}(\vec{x}, t) = \int_{Z=0}^{Z=1} \psi(Z) \tilde{P}(Z; \tilde{Z}(\vec{x}, t), \tilde{Z}''^2(\vec{x}, t)) dZ \quad (6.24)$$

Die numerische Berechnung des Integrals in Gl. (6.24) erfolgt in dieser Arbeit durch einen semi-analytischen Ansatz nach Steiner [139].

6.3.2.3 Reaktions- und Mischungsmodell

Die chemische Reaktionskinetik wird für heutige ottomotorische Anwendungen durch reduzierte Reaktionsmechanismen beschrieben (siehe Kap. 6.3). In der Literatur wird dabei meist von einer Einschritt-Bruttoreaktionsgleichung für eine vollständige Verbrennung von Kraftstoff und Luft in Kohlendioxid und Wasser ausgegangen (siehe Heywood [61]).



Die fünf beteiligten Komponenten (Kraftstoff $C_n H_m$ bestehend aus n Kohlenstoff- und m Wasserstoffatomen, Sauerstoff O_2 , Stickstoff N_2 , Kohlendioxid CO_2 und Wasser H_2O) lassen sich aufgrund der konstanten Stöchiometriekoeffizienten für einen bestimmten Kraftstoff auf drei reaktive Spezies (Kraftstoff, Luft und Verbrennungsprodukt) reduzieren. Für die turbulente Verbrennung wird angenommen, dass die chemischen Reaktionen irreversibel und unendlich schnell ab-

⁵Gültig sofern die mittlere skalare Dissipationsrate $\tilde{\chi}$ keiner turbulenten Schwankung unterliegt.

laufen, so dass aus dem mit Luft vermischten Kraftstoff unmittelbar das Verbrennungsprodukt hervorgeht („gemischt=verbrannt“-Prinzip). Der gemischte Kraftstoffanteil lässt sich am Beispiel einer Zweistrom-Diffusionsflamme bestimmen, bei dem Strom 1 aus reinem Kraftstoff und Strom 2 aus reiner Luft besteht. Dabei sind zwei Bereiche zu unterscheiden, die durch die Stöchiometriegrenze ($Z = Z_{st}$) voneinander getrennt werden. Im mageren Bereich ($Z < Z_{st}$) ist der gesamte Kraftstoff $y_K = Z\rho$ gemischt und im fetten Bereich ($Z > Z_{st}$) die gesamte Luft $y_L = (1 - Z)\rho$. Die mit Luft gemischte Kraftstoffmenge ρ_m lässt sich nach der Burke-Schumann Lösung [20] bestimmen (siehe Abb. 6.8):

$$\rho_m(Z) = \begin{cases} Z \rho & \text{für } 0 \leq Z \leq Z_{st} \quad (\text{mager}) \\ \frac{Z_{st}}{1 - Z_{st}} (1 - Z) \rho & \text{für } Z_{st} \leq Z \leq 1 \quad (\text{fett}) \end{cases} \quad (6.26)$$

Der Einfluss turbulenter Fluktuationen auf $\rho_m(Z)$ muss über die statistische Gemischverteilung des „presumed“-PDF-Ansatzes (siehe Kap. 6.3.2.2) berücksichtigt werden. Die Integration von Gl. (6.26) über die β -Funktion aus Gl. (6.21) ist in Anhang B beschrieben.

Der Nachteil dieses Ansatzes liegt darin, dass gerade die in den fetten Zonen gebildeten Zwischenprodukte, wie CO und HC, nicht berücksichtigt werden. Die Folge ist eine Überschätzung der chemischen Wärmefreisetzung, der häufig durch eine Reduktion des unteren Heizwertes über die im Abgas enthaltene Energie Rechnung getragen wird.

6.3.3 Teilweise vorgemischte Verbrennung

In Ottomotoren mit Benzin-Direkteinspritzung und strahlgeführten Brennverfahren erfolgt im Teillastbetrieb die Kraftstoffzufuhr erst spät im Kompressionstakt. In der kurzen Gemischbildungsphase wird nur ein Teil des Kraftstoffs mit dem Oxidator zu einem zündfähigen Gemisch aufbereitet. Zusätzlich liegen fette und magere Zonen vor. Der Verbrennungsprozess wird daher als teilweise vorgemischte Verbrennung bezeichnet und beinhaltet die vom herkömmlichen Otto- und Dieselmotor bekannten Regimes aus turbulenter Vormisch- und Diffusionsverbrennung in überlagerter Form.

Neben den bereits bei der Vormisch- und Diffusionsverbrennung in Kap. 6.3.1 bzw. 6.3.2 diskutierten Problemen liegt die Schwierigkeit bei der Modellierung der teilweise vorgemischten Verbrennung darin, die auf ähnlichen Skalen ablaufenden Prozesse aus turbulenter Flammenfrontausbreitung und Diffusionsverbrennung in gekoppelter Form zu beschreiben. Erschwerend kommt hinzu, dass beliebig viele Mischungszustände, von vollständig über teilweise vorgemischt bis hin zur reinen Diffusionsflamme, unter Berücksichtigung von turbulenten Gemischfluktuationen abzubilden sind. Der physikalisch-chemisch korrekten Abbildung der Wärmefreisetzung ist dabei die entscheidende Bedeutung beizumessen. Im Besonderen gilt es dafür, die in den fetten

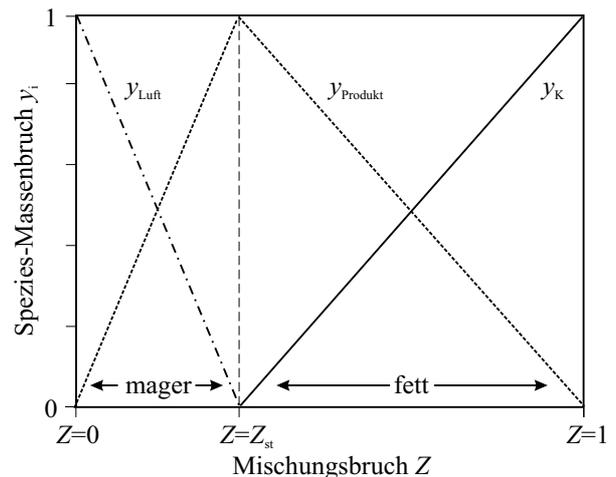


Abb. 6.8: Burke-Schumann-Lösung der Reaktanten im Mischungsbruchraum einer Zweistrom-Diffusionsflamme.

Zonen gebildeten Zwischenprodukte, wie sie bei Schichtladung vorliegen, auf eine repräsentative Weise wiederzugeben.

Dieser Problematik soll durch ein neues Modell, dem *7-Spezies-PDF-Flammenfaltungmodell*, Rechnung getragen werden. Es stellt bezüglich seiner grundlegenden Formulierung eine Weiterentwicklung des in Otto [97] und Kaube [73] beschriebenen Konzepts mit einem Einschritt-Reaktionsmechanismus und drei reaktiven Spezies dar. Der neue Ansatz verknüpft das Flammenfaltungmodell von Weller [159] aus Kap. 6.3.1 zur Beschreibung der turbulenten Flammenfrontausbreitung mit dem laminaren „Flamelet“-PDF-Ansatz basierend auf dem in Kap. 6.3.2 beschriebenen Konzept von Steiner [139] zur Abbildung der turbulenten Diffusionsverbrennung.

Das hier vorgestellte Modell verwendet sieben elementare Spezies (Kraftstoff C_nH_m , Sauerstoff O_2 , Stickstoff N_2 , Wasser H_2O , Kohlendioxid CO_2 , Kohlenmonoxid CO und Wasserstoff H_2), die in guter Näherung die tatsächlich vorliegende Gemischzusammensetzung bezüglich Masse und Energie in allen Verbrennungsphasen wiedergeben. In den fetten Zonen ($\lambda < 1$) ist damit die detaillierte Beschreibung der chemischen Wärmefreisetzung aus den Zwischenreaktionen in die unvollständigen Produkte aus CO und H_2 sichergestellt. Für die mageren und stöchiometrischen Zonen ($\lambda \geq 1$), in denen der gesamte Kraftstoff mit dem vorhandenen Sauerstoff vollständig zu CO_2 und H_2O reagiert, ist die korrekte Abbildung der chemischen Wärmefreisetzung ohnehin gewährleistet. Für die Bestimmung der chemischen Quellterme in den Bilanzgleichungen der Spezies und Energie wird nach dem „Flamelet“-Ansatz eine Trennung von Strömung und Chemie vorgenommen. Die chemischen Prozesse werden im Mischungsbruchraum aufgelöst und unter Annahme von thermochemischem Gleichgewicht in Abhängigkeit von Temperatur, Druck und Gemischzusammensetzung berechnet. Dem Einfluss der Turbulenz auf die Gemischverteilung wird durch eine „presumed-PDF“-Modellierung mit einer β -Funktion Rechnung getragen, wie sie in Kap. 6.3.2.2 vorgestellt wurde. Der gewählte Ansatz zeichnet sich zugleich durch eine hohe Recheneffizienz aus und ist damit prädestiniert für die praktische Anwendung bei der ottomotorischen Brennverfahrensentwicklung.

In den folgenden Abschnitten wird das 7-Spezies-PDF-Flammenfaltungmodell detailliert beschrieben. Dabei werden folgende fünf Modellbestandteile ausführlich diskutiert:

- Kopplung der Modelle für Vormisch- und Diffusionsverbrennung
- Modellierung des Flammenfortschritts
- Bestimmung der Spezies-Konzentrationen im unverbrannten Zustand
- Bestimmung der Spezies-Konzentrationen im thermochemischen Gleichgewicht
- Bestimmung der Gleichgewichtstemperatur

6.3.3.1 Kopplung der Modelle für Vormisch- und Diffusionsverbrennung

Den Ausgangspunkt für die Kopplung der Modelle aus turbulenter Vormisch- und Diffusionsverbrennung stellt die Fortschrittsvariable \tilde{c} dar. Sie ist definiert als Verhältnis der momentanen Stoffumsetzung der Spezies i zur vollständigen Umsetzung bei Erreichen des Gleichgewichtszustandes.

$$\tilde{c} = \frac{\tilde{y}_i - \tilde{y}_{i,u}}{\tilde{y}_i^* - \tilde{y}_{i,u}} \quad \text{mit} \quad \tilde{c} \in [0, 1] \quad (6.27)$$

Die gemittelten Spezies-Massenbrüche beschreiben darin mit \tilde{y}_i den Momentanwert, \tilde{y}_i^* den lokalen, statistisch gemittelten thermochemischen Gleichgewichtswert und $\tilde{y}_{i,u}$ den unverbrannten Zustand. Die Umformulierung von Gl. (6.27) führt zu

$$\tilde{y}_i = \tilde{y}_{i,u} + \tilde{c} (\tilde{y}_i^* - \tilde{y}_{i,u}), \quad (6.28)$$

deren Differentiation wiederum einen Ausdruck für die Gesamtbildungsraten $\tilde{\dot{y}}_i$ der einzelnen Spezies liefert.

$$\frac{d\tilde{y}_i}{dt} = \underbrace{(\tilde{y}_i^* - \tilde{y}_{i,u}) \frac{d\tilde{c}}{dt}}_{\text{Vormischverbrennung}} + \underbrace{\tilde{c} \frac{d\tilde{y}_i^*}{dt}}_{\text{Diffusionsverbrennung}} \quad (6.29)$$

Dabei zerfällt die Gesamtbildungsrate der Spezies i in die Anteile aus turbulenter Vormisch- und Diffusionsverbrennung und koppelt so die beiden Verbrennungsregimes. Die Quellterme in den über Partialdichten $\tilde{\rho}_i$ definierten Spezies-Bilanzgleichungen (2.10) ergeben sich durch Gewichtung der Gesamtbildungsrate aus Gl. (6.29) mit der Dichte $\bar{\rho}$.

$$\dot{\rho}_i^c = \bar{\rho} \frac{d\tilde{y}_i}{dt} \quad (6.30)$$

Der chemische Quellterm \dot{Q}^c in der Erhaltungsgleichung (2.14) der spezifischen inneren Energie i_{th} ergibt sich durch Summation des Produkts der statistisch gemittelten Bildungsrate $\tilde{\dot{y}}_i$ und der zugehörigen spezifischen Bildungsenthalpie $h_{f,i}^0$ über alle sieben Spezies.

$$\dot{Q}^c = \bar{\rho} \sum_{i=1}^7 \left(h_{f,i}^0 \frac{d\tilde{y}_i}{dt} \right) \quad (6.31)$$

6.3.3.2 Modellierung des Flammenfortschritts

Für die Beschreibung der turbulenten Flammenfrontausbreitung im teilweise vorgemischtem Gas wird im Rahmen der vorliegenden Arbeit das Eingleichungs-Flammenfaltungsmodell von Weller [160] aus Kap. 6.3.1.1 herangezogen. Das Modell überzeugt nicht zuletzt durch seine Einfachheit und Robustheit, sondern vor allem aufgrund der erzielten Ergebnisse für die ottomotorische Vormischverbrennung mit qualitativ guter Übereinstimmung zu experimentellen Motoruntersuchungen (siehe [78, 159, 160]). Die Anwendung auf die teilweise vorgemischte Verbrennung erfordert jedoch Modifikationen gegenüber der Originalformulierung aus Kap. 6.3.1.1, die einerseits die Formulierung des Flammenfortschritts selbst und andererseits den Einfluss turbulenter Gemischfluktuationen auf die Brenngeschwindigkeit betreffen.

In Bezug auf den Flammenfortschritt liegt die grundlegende Problematik des modifizierten Modellansatzes von Weller [161] im Diffusionsterm von Gl. (6.9) für die Flammenfortschrittsvariable \tilde{c} . Die Schwierigkeiten ergeben sich aus zweierlei Hinsicht und werden im Folgenden anhand von Abb. 6.9 diskutiert. Eine Flammenfront, die sich in einer inhomogenen Kraftstoff-Luft-Mischung ausbreitet, kommt nach vollständiger Umsetzung des Kraftstoffes ($\tilde{Z} = 0$) am Rand der Gemischwolke zum Verlöschen. Ohne (turbulente) Diffusion wird die Peripherie der Gemischwolke durch eine scharfe Trennfläche beschrieben (vgl. Abb. 6.9 a). Unter Berücksichtigung der (turbulenten) Diffusion hingegen „zerfließen“ sowohl der Randbereich der Mischung Z als auch der der Flammenfortschrittsvariable \tilde{c} (siehe Abb. 6.9 b). Die Folge des Diffusions-

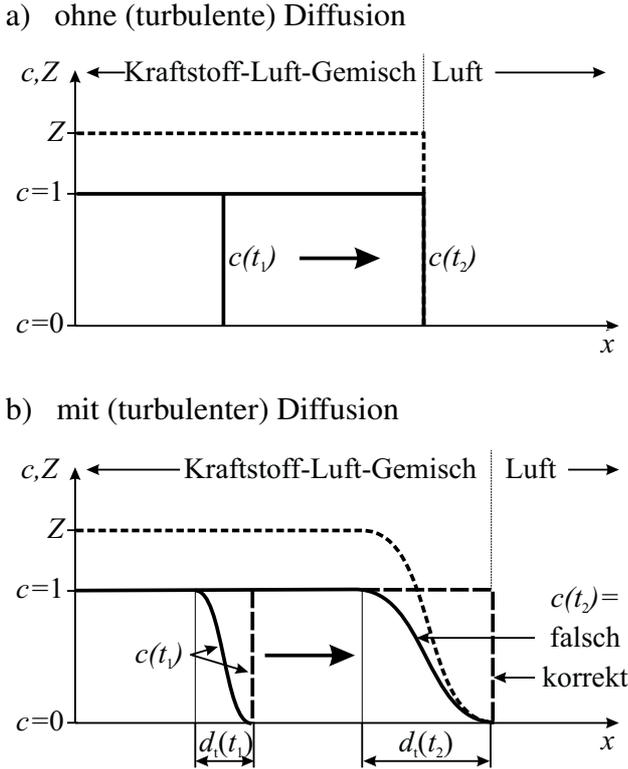


Abb. 6.9: Diffusionseinfluss auf den Flammenfortschritt in einem inhomogenen Gemisch.

nicht-diffusive skalare Transportgleichung für die Flammenfortschrittsvariable \tilde{c} , die formal einer G -Gleichung entspricht (siehe dazu Kraus [78]).

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{c}) + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{u} \tilde{c}) = \bar{\rho}_u \bar{s}_t |\nabla \tilde{c}| \quad (6.32)$$

Durch den „scharfen“ Übergang von unverbranntem und verbranntem Gas (siehe Abb. 6.9 b) beschreibt Gl. (6.32) die Flammenfront als dünne Zone, innerhalb der die Wärmefreisetzung erfolgt. Die Flammendicke und das zugehörige Profil wird dabei maßgeblich durch ihre Initialisierung bei der Zündung bestimmt.

Der Flammenfortschritt wird durch die turbulente Brenngeschwindigkeit s_t bestimmt, die im Quellterm der Flammenfortschrittsgleichung (6.32) enthalten ist. Nach ihrer Definition gemäß Gl. (6.12) ist s_t abhängig von der laminaren Brenngeschwindigkeit s_l (siehe Gl. (6.10)) und damit eine Funktion des Mischungsbruchs Z bzw. des Äquivalenzverhältnisses Φ . Dem Einfluss von turbulenten Gemischfluktuationen muss hier über die statistische Verteilung des Mischungsbruchs Rechnung getragen werden. Die mit dem Mischungsbruch gewichtete turbulente Mittelung der turbulenten Brenngeschwindigkeit s_t aus Gl. (6.12) mit Hilfe von Gl. (6.24) führt zu:

$$\bar{s}_t(\vec{x}, t) = \frac{1}{\tilde{Z}(\vec{x}, t)} \int_0^1 s_t(\Phi; \vec{x}, t) \tilde{P}(Z; \tilde{Z}(\vec{x}, t), \widetilde{Z''^2}(\vec{x}, t)) Z dZ \quad (6.33)$$

Die numerische Integration der turbulenten Brenngeschwindigkeit über die β -Funktion $\tilde{P}(Z; \vec{x}, t)$ erfolgt mit Hilfe der Sattelpunktmethode und ist in Anhang C ausführlich beschrieben.

prozesses wäre eine unphysikalische Rückreaktion in der Flamme, so dass unverbrannter Kraftstoff im bereits verbrannten Gemisch entsteht (siehe Kaube [73]). Der zweite nachteilige Aspekt des Diffusionsterms liegt darin, dass die Dicke d_t der turbulenten Flammenfront in der Zeit t proportional zur turbulenten Diffusionskonstanten D_t anwächst ($d_t \sim \sqrt{D_t t}$) und demzufolge die turbulente Flammendicke keine stationäre Lösung ($\lim_{t \rightarrow \infty} d_t \rightarrow \infty$) besitzt.

Ein möglicher Lösungsansatz würde sich durch den Transport des Produkts aus Mischungsbruch und Flammenfortschrittsvariable ($\tilde{c}\tilde{Z}$) anbieten. Allerdings enthält die durch Superposition von Gl. (6.9) und (6.18) abgeleitete Transportgleichung einen Zusatzterm, der aufgrund seiner umgekehrten Proportionalität zum Mischungsbruch numerisch schwierig zu handhaben ist. Ein Ausweg aus dieser Problematik liefert die

6.3.3.3 Bestimmung der Spezies-Konzentrationen im unverbrannten Zustand

Die Konzentrationen im unverbrannten Zustand $\tilde{y}_{i,u}$ lassen sich durch die „Entmischung“ von Kraftstoff und Oxidator bestimmen. Der ungemischte Zustand dieser Spezieskomposition liegt bei maximaler Varianz des Mischungsbruchs $\widetilde{Z''^2}_{max} = \tilde{Z}(1 - \tilde{Z})$ vor, wie er als Grenzfall in Abb. 6.7 illustriert ist. Mathematisch berechnen sich die zugehörigen Spezies-Massenbrüche $y_{i,u}$ durch Integration der Ausgangskonzentrationen y_i über die korrespondierende β -Funktion nach Gl. (6.24).

$$\tilde{y}_{i,u}(\vec{x}, t) = \int_0^1 y_i(Z; \vec{x}, t) \tilde{P}(Z; \tilde{Z}(\vec{x}, t), \widetilde{Z''^2}_{max}(\vec{x}, t)) dZ \quad (6.34)$$

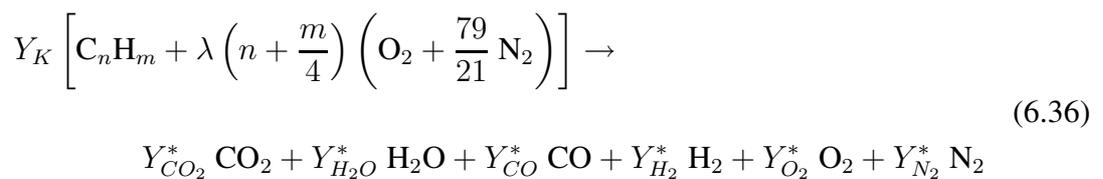
6.3.3.4 Bestimmung der Spezies-Konzentrationen im thermochemischen Gleichgewicht

In einem chemisch-reaktiven System bewegt sich die Konzentration einer Spezies i stets zwischen ihrem Ausgangszustand $\tilde{y}_i = \tilde{y}_{i,u}$ (keine chemische Reaktion) und dem (Gleichgewichts-) Zustand $\tilde{y}_i = \tilde{y}_i^*$ nach einer vollständigen Reaktion. Die Konzentrationen \tilde{y}_i^* der sieben Spezies im thermochemischen Gleichgewicht lassen sich unter der Annahme von unendlich schnellem Reaktionsumsatz in Abhängigkeit von Druck \bar{p} , Gleichgewichtstemperatur \bar{T}^* und den Konzentrationen \tilde{y}_i des Ausgangsgemisches bestimmen. Für die Berechnung der Gleichgewichtskonzentrationen \tilde{y}_i^* im Mischungsbruchraum wird ein Ansatz zugrunde gelegt, wie er schon von Steiner [139] mit dem *7-Spezies PDF-Timescale-Modell* vorgestellt und erfolgreich auf die dieselmotorische Diffusionsverbrennung appliziert wurde. Darin wird der Mischungsbruchraum in zwei Bereiche unterteilt, wobei der Grenzwert (Fettwert)

$$Z_\phi = \left(1 + \frac{n}{n + \frac{m}{4}} \frac{1 - Z_{st}}{2Z_{st}} \right)^{-1} \quad (6.35)$$

durch den Mischungsbruch definiert ist, bei dem der gesamte Kraftstoff mit dem vorhandenen Sauerstoff vollständig zu Kohlenmonoxid und Wasserstoff reagiert.

Im „mageren“ Bereich, in dem der Mischungsbruch kleiner als der Grenzwert ($Z < Z_\phi$ bzw. $\lambda > \lambda_\phi$) ist, wird die Gleichgewichtschemie durch den von Reitz und Bracco [116] vorgestellten Ansatz beschrieben. Darin wird davon ausgegangen, dass der gesamte Kraftstoff C_nH_m mit einer Zusammensetzung aus n Kohlenstoff- und m Wasserstoffatomen mit der vorhandenen Luft bestehend aus 21% Sauerstoff O_2 und 79% Stickstoff N_2 reagiert. Je nach Gemischzusammensetzung können dabei insgesamt sechs Produkte entstehen, die fünf reaktive Komponenten CO_2 , H_2O , CO , H_2 , O_2 sowie den inerten Stickstoff N_2 enthalten. Die zugrunde liegende Bruttoreaktionsgleichung für den „mageren“ Bereich ($Z < Z_\phi$) lautet in der Formulierung mit Molenbrüchen:



Darin beschreiben λ die Luftzahl, Y_i^* die Molenbrüche der Spezies i im thermochemischen Gleichgewicht und Y_K den Kraftstoffmolenbruch im Ausgangszustand, aus dem genau ein Mol Produktspezies entsteht. Die sieben Unbekannten Y_i^* bestimmen sich neben der Bedingung, dass

die Summe der Molenbrüche der Produktspezies $\sum_i Y_i^* = 1$ ergeben muss, aus vier Elementenbilanzgleichungen für die Atome C, H, O und N.

$$\text{C-Atom :} \quad Y_{CO_2}^* + Y_{CO}^* = n Y_K \quad (6.37)$$

$$\text{H-Atom :} \quad Y_{H_2O}^* + Y_{H_2}^* = \frac{m}{2} Y_K \quad (6.38)$$

$$\text{O-Atom :} \quad 2Y_{CO_2}^* + Y_{H_2O}^* + Y_{CO}^* + 2Y_{O_2}^* = \lambda \left(n + \frac{m}{4} \right) Y_K \quad (6.39)$$

$$\text{N-Atom :} \quad Y_{N_2}^* = \lambda \left(n + \frac{m}{4} \right) \frac{79}{21} Y_K \quad (6.40)$$

Die beiden fehlenden Gleichungen leiten sich aus dem Massenwirkungsgesetz ab, wobei zwischen CO und CO₂ bzw. H₂ und H₂O chemisches Gleichgewicht vorausgesetzt wird.

$$\text{CO} + \frac{1}{2} \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{CO}_2 \quad : \quad K_{p,C}(\bar{T}^*) = \frac{Y_{CO_2}^*}{Y_{CO}^* \sqrt{Y_{O_2}^*} p} \quad (6.41)$$

$$\text{H}_2 + \frac{1}{2} \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O} \quad : \quad K_{p,H}(\bar{T}^*) = \frac{Y_{H_2O}^*}{Y_{H_2}^* \sqrt{Y_{O_2}^*} p} \quad (6.42)$$

Die Gleichgewichtskonstanten $K_{p,C}(\bar{T}^*)$ und $K_{p,H}(\bar{T}^*)$ werden in Abhängigkeit von der Gleichgewichtstemperatur \bar{T}^* bzw. der transformierten Gleichgewichtstemperatur $\bar{T}_A^* = \bar{T}^* \cdot 10^{-3}$ mit einer Reihenentwicklung berechnet.

$$\log K_{p,j}(\bar{T}^*) = A_j \ln \bar{T}_A^* + \frac{B_j}{\bar{T}_A^*} + C_j + D_j \bar{T}_A^* + E_j \bar{T}_A^{*2} \quad \text{für} \quad 600K \leq \bar{T}^* \leq 4000K \quad (6.43)$$

Die reaktionsspezifischen Konstanten A_j, B_j, C_j, D_j und E_j mit $j = C, H$ sind den JANAF-Tabellen entnommen (siehe Stull [143]).

Im „fetten“ Bereich, in dem der Mischungsbruch größer als der Grenzwert ($Z > Z_\phi$ bzw. $\lambda < \lambda_\phi$) ist, wird die Gleichgewichtsschemie durch einen linearen Ansatz beschrieben. Dabei wird im Gleichgewichtszustand gerade soviel Kraftstoff aufgebraucht, dass die gesamte Luft zu Kohlenmonoxid CO und Wasserstoff H₂ reagiert. Zusätzlich verbleibt als Produkt unverbrannter Kraftstoff C_nH_m. Die zugehörige Bruttoreaktionsgleichung für den „fetten“ Bereich ($Z > Z_\phi$) lautet in der Formulierung mit Molenbrüchen:



Darin beschreibt λ_ϕ die Luftzahl im korrespondierenden Fettwert Z_ϕ (siehe Gl. (6.35)) und kann mit Hilfe von Gl. (6.17) berechnet werden. In Analogie zum „mageren“ Bereich bestimmen sich die vier unbekanntes Produktspezieskonzentrationen Y_{CO}^* , $Y_{H_2}^*$, Y_K^* und $Y_{N_2}^*$ im thermochemischen Gleichgewicht durch vier Elementenbilanzgleichungen für die Atome C, H, O und N.

$$\text{C-Atom :} \quad Y_{CO}^* + n Y_K^* = n Y_K \quad (6.45)$$

$$\text{H-Atom :} \quad 2 Y_{H_2}^* + m Y_K^* = m Y_K \quad (6.46)$$

$$\text{O-Atom :} \quad Y_{CO}^* = n \frac{\lambda}{\lambda_\phi} Y_K \quad (6.47)$$

$$\text{N-Atom :} \quad 2 Y_{N_2}^* = n \frac{\lambda}{\lambda_\phi} \frac{79}{21} Y_K \quad (6.48)$$

Die Transformation der Molenbrüche zu Massenbrüche erfolgt zusammen mit den Molmassen M_i der jeweiligen Spezies i und der mittleren Molmasse M_M .

$$y_i^* = \frac{M_i}{M_M} Y_i^* \quad \text{mit} \quad \frac{1}{M_M} = \sum_{i=1}^7 \frac{Y_i^*}{M_i} \quad (6.49)$$

Exemplarisch sind in Abb. 6.10 die Konzentrationen der sieben Spezies im thermochemischen Gleichgewicht als Massenbrüche y_i^* im Mischungsbruchraum unter vordefinierten Randbedingungen illustriert. Zu erkennen ist auch die durch den Fettwert Z_ϕ gekennzeichnete Abgrenzung des „mageren“ ($Z < Z_\phi$) und „fetten“ ($Z > Z_\phi$) Bereichs.

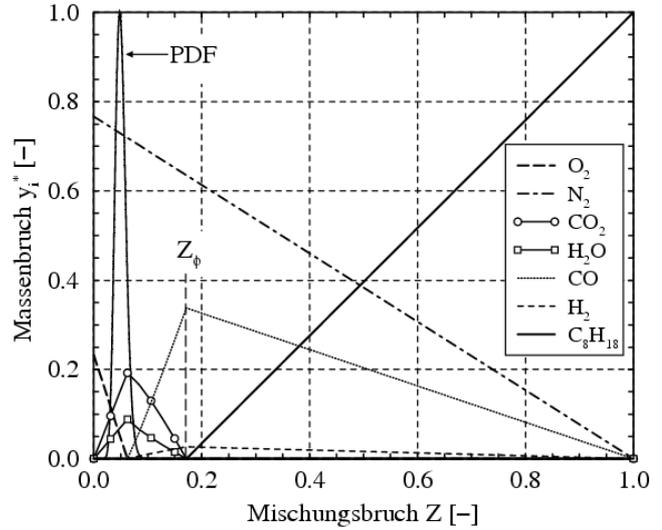


Abb. 6.10: Gleichgewichtsmassenbrüche der sieben Spezies im Z -Raum für $p = 40\text{bar}$, $T = 2000\text{K}$ und PDF für $Z = Z_{st}$ und $Z''^2 = 0.01$.

Die Berücksichtigung des Einflusses turbulenter Gemischfluktuationen auf die mittleren Gleichgewichtskonzentrationen \tilde{y}_i^* erfolgt durch Integration der Spezies-Konzentrationen $y_i^*(Z)$ im thermochemischen Gleichgewicht über die β -Funktion $\tilde{P}(Z)$ aus Gl. (6.24).

$$\tilde{y}_i^*(\vec{x}, t) = \int_0^1 y_i^*(Z, \bar{p}, \bar{T}^*; \vec{x}, t) \tilde{P}(Z; \tilde{Z}(\vec{x}, t), \tilde{Z}''^2(\vec{x}, t)) dZ \quad (6.50)$$

In Abb. 6.10 ist neben den Spezies-Massenbrüchen beispielhaft die β -PDF $\tilde{P}(Z)$ für eine stöchiometrische Zusammensetzung des Ausgangsgemisches ($Z = Z_{st}$) und einer Mischungsbruchvarianz von $Z''^2 = 0.01$ im Mischungsbruchraum dargestellt. Nimmt beispielsweise die Gemischinhomogenität zu (gleichbedeutend mit steigender Mischungsbruch-Varianz Z''^2), wird ein zunehmend breiterer Gemischbereich von der β -PDF erfasst und umgekehrt nimmt mit abnehmender Mischungsbruch-Varianz Z''^2 der von der β -PDF erfasste Gemischbereich ab.

6.3.3.5 Bestimmung der Gleichgewichtstemperatur

Die Berechnung des thermochemischen Gleichgewichtszustandes beruht auf der Betrachtung einer mittleren Gleichgewichtstemperatur \bar{T}^* im Mischungsbruchraum zu den korrespondierenden mittleren Gleichgewichtskonzentrationen \tilde{y}_i^* . Den Ausgangspunkt bei der Herleitung der Gleichgewichtstemperatur bildet der erste Hauptsatz der Thermodynamik. Unter der Voraussetzung, dass die chemische Wärmefreisetzung der Vormisch- und Diffusionsverbrennung lokal durch eine isobare Zustandsänderung ($d\bar{p} = 0$) beschrieben werden kann, lautet der erste Hauptsatz:

$$d\bar{h}_{th} = d\bar{q}_{ch} \quad (6.51)$$

Damit entspricht die Änderung der thermischen Enthalpie \bar{h}_{th} des Gasgemisches

$$d\bar{h}_{th} = \bar{h}_{th}^* - \bar{h}_{th} \quad \text{mit} \quad \bar{h}_{th} = \sum_{i=1}^7 \left(\tilde{y}_i \int_{T_0}^T c_{p,i}(T) dT \right) \quad (6.52)$$

der chemisch freigesetzten Wärme $d\bar{q}_{ch}$ des Verbrennungsvorgangs.

$$d\bar{q}_{ch} = \sum_{i=1}^7 [(\tilde{y}_i - \tilde{y}_i^*) h_{f,i}^0] \quad (6.53)$$

In Gl. (6.53) stellt $h_{f,i}^0$ die chemische Bildungsenthalpie der i -ten Stoffkomponente dar. Durch einfache mathematische Umformulierung von Gl. (6.51) lässt sich die thermische Enthalpie \bar{h}_{th}^* der Mischung im thermochemischen Gleichgewicht bestimmen

$$\bar{h}_{th}^*(\bar{T}^*) = \bar{h}_{th}(\bar{T}) + d\bar{q}_{ch} \quad (6.54)$$

und zusammen mit der spezifischen Wärmekapazität des Gasgemisches $\bar{c}_p = \sum_i \tilde{y}_i c_{p,i}$ auch die zugehörige mittlere Gleichgewichtstemperatur \bar{T}^* .

$$\bar{T}^* = \bar{T}_0 + \frac{1}{\bar{c}_p} (\bar{h}_{th}^* - \bar{h}_{th}^0) \quad (6.55)$$

Da die thermische Gleichgewichtsenthalpie $\bar{h}_{th}^*(\bar{T}^*)$ der Mischung implizit von den Gleichgewichtskonzentrationen \tilde{y}_i^* abhängt (siehe Gl. (6.52)), muss die Gleichgewichtstemperatur \bar{T}^* iterativ berechnet werden. Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wird hierzu auf ein Newton-Iterationsverfahren zurückgegriffen. Das iterative Lösungsschema sowie das Zusammenspiel mit dem 1D-„Flamelet“- und dem 3D-CFD-Löser ist in Abb. 6.11 illustriert.

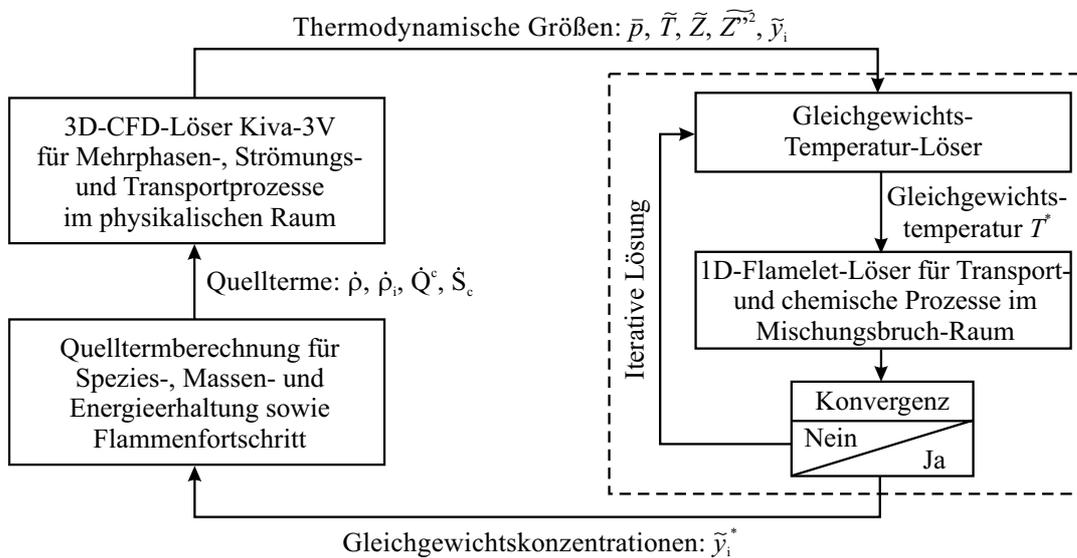


Abb. 6.11: Interaktion zwischen 3D-CFD-Löser und 1D-„Flamelet“-Löser.

Kapitel 7

Validierung

Im vorliegenden Kapitel wird die Validierung der in Kap. 4 bis 6 vorgestellten Modelle zur Simulation der Gemischbildung und Verbrennung in Ottomotoren mit strahlgeführten Brennverfahren behandelt. Die Vorgehensweise bei der Validierung orientiert sich dabei am zu beschreibenden physikalischen/chemischen Mechanismus, um so die Wechselwirkung einzelner Prozesse auszuschließen. In Analogie zur strukturellen Gliederung der Modellbeschreibungen aus den drei vorangegangenen Kapiteln wird nach Strahldynamik, Verdampfung und Verbrennung differenziert. Die Validierung des Strahlmodells für A-Düsen (s. Kap. 4.5) erfolgt anhand von optischer Strahldiagnostik in Kap. 7.1. Das Mehrkomponentenverdampfungsmodell (s. Kap. 5.1) wird in Kap. 7.2 am ruhenden Einzeltropfen validiert und in einem numerischen Experiment für die Gemischbildung mit einer A-Düse verifiziert. In Kap. 7.3 wird das 7-Spezies-PDF-Flammenfaltungsmodell (s. Kap. 6.3.3) als Teil des hier vorgestellten Gesamtmodells anhand von Indizierdaten für den Teillastbetrieb mit Schichtladung eines Einzylinder-Forschungsaggregats validiert.

7.1 Validierung des Strahldynamikmodells

7.1.1 Methodische Vorgehensweise und Randbedingungen

Das Ausbreitungsverhalten von Einspritzstrahlen kann im Allgemeinen in Hochdruckkammern und Transparentmotoren mit optischer Strahldiagnostik untersucht werden. Um die Phänomene der Strahlausbreitung vom Strömungseinfluss der Ladungsbewegung und der Verdampfung zu entkoppeln, werden im Zuge dieser Arbeit Messungen in Hochdruckkammern herangezogen. Der motorische Betriebszustand wird dabei durch Anpassung des Gegendrucks so nachgebildet, dass der Strahl in der Hochdruckkammer in ein Medium mit gegenüber dem Motor identischer Dichte eingespritzt wird. Mit der numerischen Nachbildung des Experiments in der Hochdruckkammer lassen sich Simulationsmodelle für die strahldynamische Ausbreitung von Einspritzstrahlen validieren.

Die Bewertung der Güte des Simulationsergebnisses lässt sich anhand ausgewählter Qualitätskriterien ausmachen, die den Strahl hinreichend charakterisieren. Als qualitative Kriterien werden die Strahlstruktur und die Randwirbelform herangezogen. Als quantitative Bewertungskriterien dienen, wie in Abb. 7.1 zu sehen ist, die axiale (1) und radiale Strahlpenetration (2), die

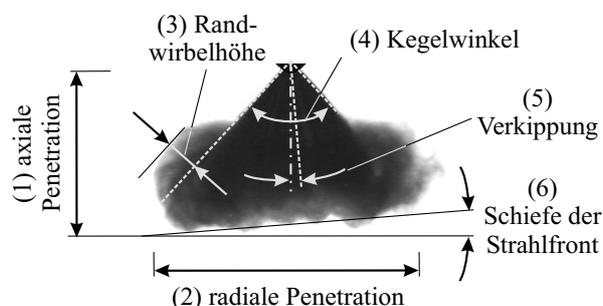


Abb. 7.1: Kriterien zur Charakterisierung des Strahls und Bewertung der Güte des Simulationsergebnisses.

Randwirbelhöhe (3), der äußere Winkel des Hohlkegelstrahls (4), die Verkipfung der Strahlachse (5) sowie die Schiefe der Strahlfront (6). Im Allgemeinen erfüllen heutige Piezo-A-Düsen, wie im folgenden Kapitel noch ausführlich gezeigt wird, die Gemischaufbereitung in einer solch idealen Weise, dass in guter Näherung von einem rotationssymmetrischen Strahl ausgegangen werden kann und somit sowohl die Verkipfung der Strahlachse als auch die Schiefe der Strahlfront verschwindend klein sind und demzufolge als Strahlqualitätskriterien vernachlässigt werden können.

Für die umfassende Validierung des in Kap. 4.5 beschriebenen Strahlmodells, die darüber hinaus auch Aussagen über Modellsensitivitäten erlaubt, werden zwei Piezo-A-Düsen herangezogen. Die beiden Injektoren, die im Folgenden als *Injektor A* und *B* bezeichnet werden, sind vom Bautyp identisch. Die einzigen Unterscheidungsmerkmale liegen in einem geringfügig unterschiedlichen Nadeldurchmesser und Austrittswinkel (siehe Tab. 7.3 und vgl. Abb. 1.3) sowie der geometrischen Formgebung im unmittelbaren Düsenaustrittsbereich mit maximalen Größenunterschieden von $4 \mu m$. Aus diesen kleinen geometrischen Unterschieden resultiert jedoch ein von Grund auf verschiedenes Strahlbild, wie es Abb. 7.2 zeigt. Während sich der Einspritzstrahl bei Injektor A durch einen stabilen Strahlkegelwinkel auszeichnet, kontrahiert dieser im Fall von Injektor B, so dass bei gleicher Zündkerzenposition kein zündfähiges Gemisch am Entflammungsort vorhanden ist. Bei der Brennverfahrensentwicklung ist es für die 3D-Simulation entscheidend, ein solches Verhalten sensitiv wiederzugeben. Für die hier durchgeführten Untersuchungen sind die thermodynamischen Randbedingungen in Tab. 7.3 dargestellt. Als Versuchskraftstoff wurde n-Heptan zugrunde gelegt, der sich hinsichtlich der strahldynamisch relevanten Stoffeigenschaften (Oberflächenspannung und Viskosität) ähnlich zu Benzin verhält. Der Nadelhubverlauf für die beiden Injektoren A und B ist aus einer Messung entnommen und in Abb. 7.4 dargestellt.



Abb. 7.2: Vergleich der Einspritzstrahlen von Injektor A (links) und Injektor B (rechts) anhand von Schattenrissaufnahmen zum Zeitpunkt $t_{ASB} = 0.7 \text{ ms}$.

Injektor:	A	B
Gaszusammensetzung	Luft	
Kammertemperatur T_K	293 K	
Kammerdruck p_K	6 bar	
Kraftstofftyp	n-Heptan (C_7H_{16})	
Kraftstofftemperatur T_F	293 K	
Kraftstoffdichte ρ_F	685 kg/m^3	
Einspritzdruck p_R	200 bar	
Turb. kin. Energie k_0	$1 \text{ m}^2/\text{s}^2$	
Turb. Längenskala $l_{t,0}$	1 mm	
Nadeldurchmesser d	3.9 mm	3.7 mm
Geom. Austrittswinkel θ	82°	83°

Abb. 7.3: Randbedingungen und spezifische Kenngrößen der Piezo-Injektoren A und B.

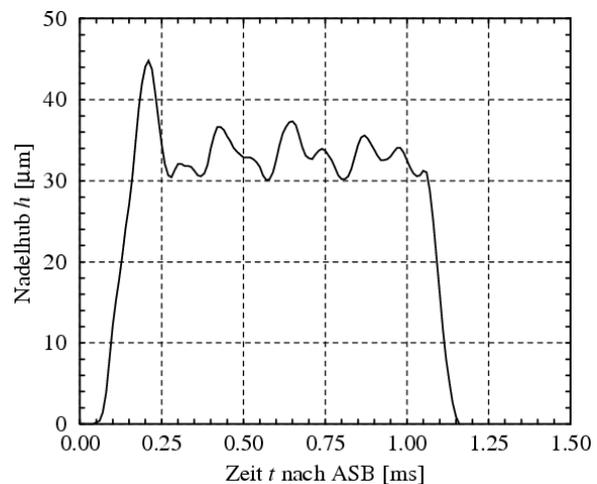


Abb. 7.4: Nadelhubverlauf für die Piezo-Injektoren A und B.

Für die Simulation von Düseninnenströmung und Strahlausbreitung werden zwei CFD-Programme herangezogen. Das Programm *Fire* [11] hat sich zur Berechnung der Düseninnenströmung erfolgreich etabliert (siehe z.B. Michels et al. [89]). Unter Verwendung von drei (numerischen) Phasen – flüssiger und dampfförmiger Kraftstoff sowie Luft – ermöglicht der mehrphasige Strömungslöser die Berücksichtigung von Kavitationseffekten sowie von Phasenwechselwirkungsprozessen von Kraftstoff und Umgebungsgas am Düsenaustritt. Turbulente Wechselwirkungsprozesse zwischen den drei Phasen werden lokal als homogen betrachtet. Die Simulation der Strahlausbreitung erfolgt mit dem CFD-Programm *Kiva-3v* [8] unter Verwendung der in dieser Arbeit entwickelten Modelle. Die Vorgehensweise der hier vorgestellten Strahlsimulation orientiert sich an der in Kap. 3.2.3 vorgestellten Methodik für eine numerisch konvergente Berechnung. Aus Gesichtspunkten der Gitterauflösung und Recheneffizienz werden die rotationsymmetrischen Eigenschaften der A-Düse genutzt und die Düseninnenströmung sowie die Einspritzung auf einem quasi-2D-0.5°-Sektorrechenetz mit zyklischen Randbedingungen durchgeführt (vgl. Kap. 3.2.1). In Abb. 7.5 ist exemplarisch das Rechengitter für die stationäre Düseninnenströmungssimulation bei einem Nadelhub $h = 30 \mu\text{m}$ dargestellt sowie das adaptive, düsenaustrittsaflösende Rechengitter für die transiente Strahlsimulation. Für beide Injektoren sind die Rechengitter bezüglich ihrer Topologie und Gitterfeinheit $\Delta x_0 \times \Delta y_0$ am Düsenaustritt von $1 \mu\text{m} \times 10 \mu\text{m}$ für die Düseninnenströmung und $10 \mu\text{m} \times 100 \mu\text{m}$ für die Strahlausbreitung nahezu identisch.

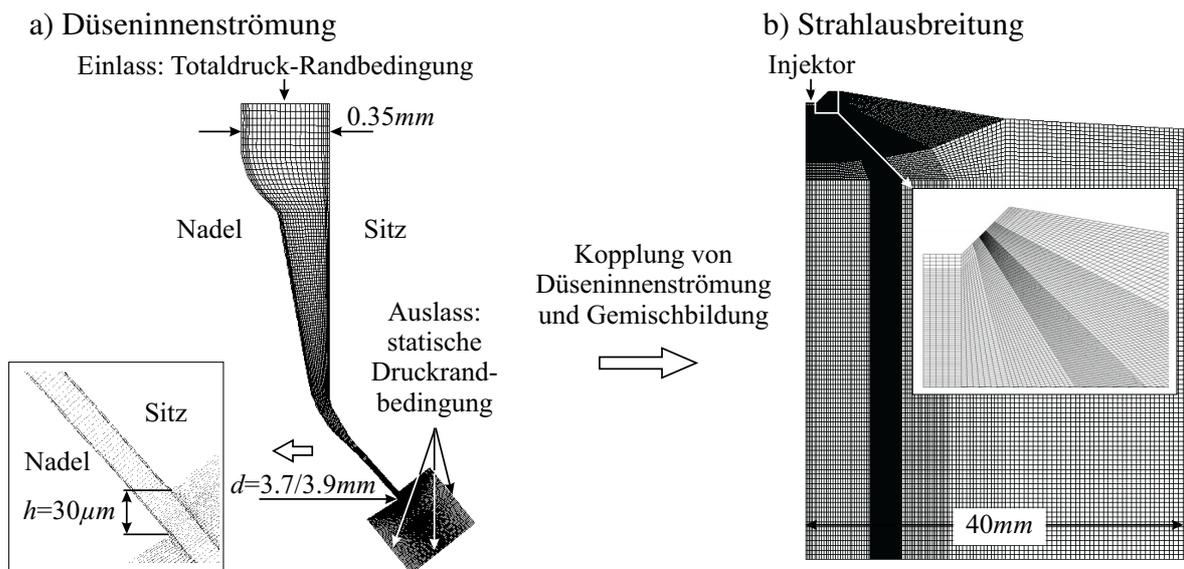


Abb. 7.5: Quasi-2D-0.5°-Sektornetze zur a) stationären Düseninnenströmungssimulation für Injektor A bei einem Nadelhub $h = 30 \mu\text{m}$ (7788 Zellen) und b) transienten Simulation der Einspritzung (18634 Zellen) mit adaptiver Gitterausrichtung und Düsenaustrittsaflösung.

7.1.2 Düseninnenströmung als Randbedingung der Gemischbildung

Die Zielsetzung bei der (quasi-stationären) Simulation der Düseninnenströmung liegt in der Bereitstellung von detaillierten Randbedingungen für die sich anschließende Berechnung der Gemischbildung. Entscheidend hierbei ist es, die Anzahl an diskreten Nadelhuben für die stationäre Düseninnenströmungsberechnung so zu wählen, dass der Nadelhubverlauf bezüglich seiner Öffnungs- und Schließflanken sowie der stationären Öffnungsphase in einer repräsentativen Form abgebildet wird (vgl. Kap. 4.5.1). Für die beiden Versuchsinjektoren wird dazu der Nadelhubverlauf aus Abb. 7.4 mit vier Hubpositionen $h = 20, 30, 40$ und $50 \mu\text{m}$ aufgelöst. In der quantitativen Gegenüberstellung von 3D-Simulation und Messung bestätigt sich, dass mit dieser Diskretisie-

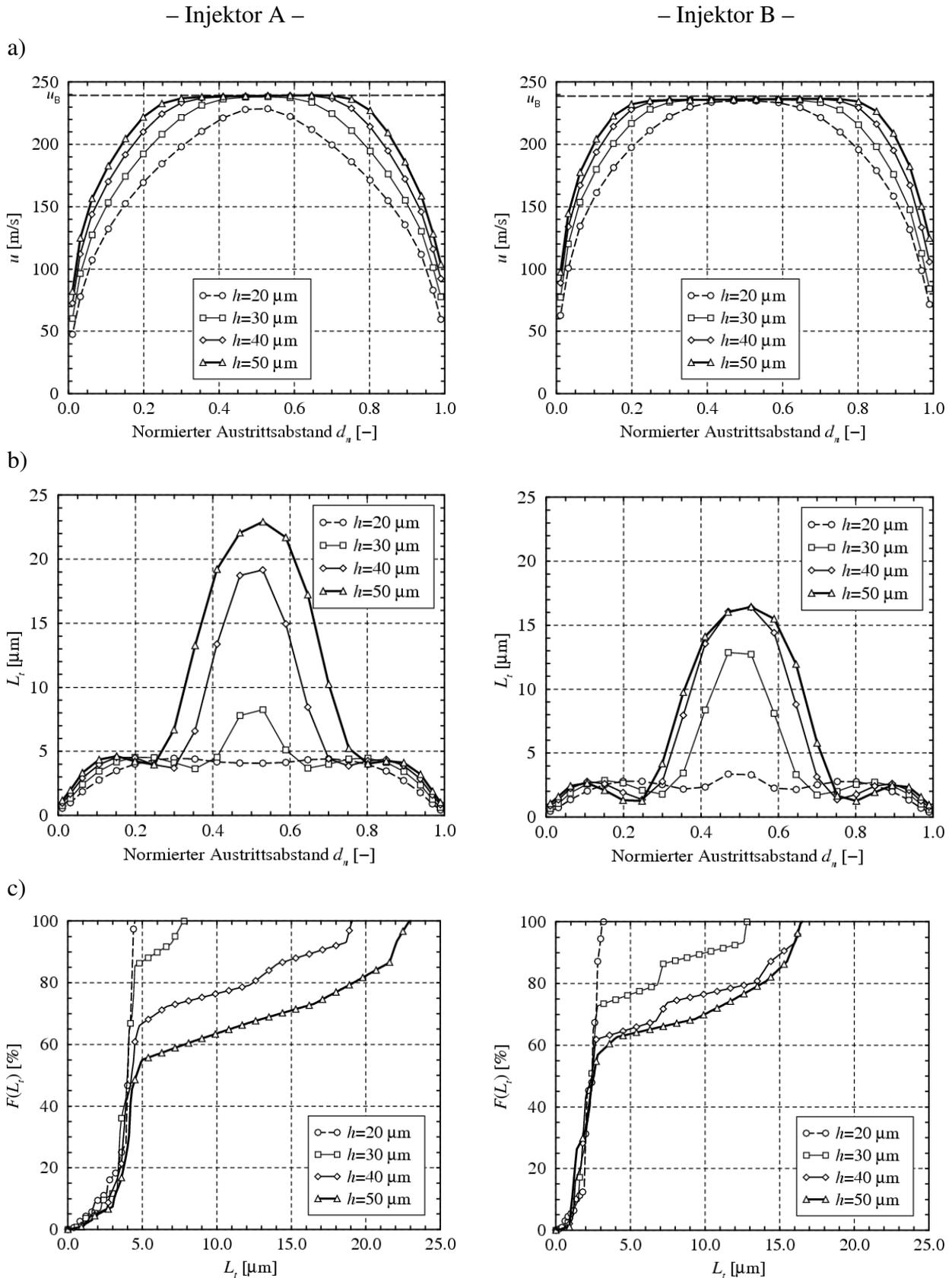


Abb. 7.6: Strömungsgrößen am Austritt von *Injektor A* (links) und *Injektor B* (rechts) bei diskreten Nadelhuben h : a) Geschwindigkeit \tilde{u} , b) turbulente Längenskalenverteilung L_t entlang der dimensionslosen Düsenaustrittscoordinate (Sitz: $d_n = 0$; Nadel: $d_n = 1$) und c) turbulentes Längenskalenspektrum $F(L_t)$ nach Gl. (4.48).

rung des Nadelhubverlaufs die Rechnung die gemessene Einspritzmenge mit einer überaus zufriedenstellenden Genauigkeit von $\Delta m \leq 1\%$ wiedergibt.

Die Ergebnisse der Düseninnenströmungssimulationen sind für die beiden Injektoren A und B in Abb. 7.6 und 7.7 dargestellt. In Abb. 7.6 a) und b) sind für die vier Nadelhübe die Geschwindigkeit \tilde{u} und die turbulente Längenskala l_t über den Düsenaustritt entlang einer dimensionslosen Koordinate veranschaulicht. Dabei handelt es sich um gemittelte Größen über die Phasen aus Kraftstoffflüssigkeit und -dampf. Abb. 7.6 c) zeigt die nach Gl. (4.48) abgeleiteten turbulenten Längenskalenspektren als normierte, kumulative Verteilungen.

Ein Vergleich der Strömungsgrößen für die vier Nadelhubpositionen von Injektor A in Abb. 7.6 zeigt, dass bei kleinem Nadelhub der Wandeinfluss den dominierenden Effekt darstellt. Aufgrund der ausgeprägten Wandschichten weist das Geschwindigkeitsprofil am Düsenaustritt einen parabolischen Verlauf auf und die turbulenten Längenskalen sind verhältnismäßig klein. Mit wachsendem Nadelhub entwickelt sich die Geschwindigkeitsverteilung zunehmend zu einem „Block“-Profil. In der von Wandeffekten unbeeinflussten Kernströmung nehmen die turbulenten Längenskalen mit dem Nadelhub zu, während die turbulente Bewegung in Wandnähe aufgrund der starken Scherkräfte deutlich kleinskaliger ist. Als Ergebnis resultiert ein turbulentes Längenskalenspektrum, in dem sich die kleinen turbulenten Längenskalen unabhängig vom Nadelhub verhalten und der Anteil der größeren Skalen mit dem Nadelhub zunimmt. Ein prinzipiell ähnliches Verhalten ist für Injektor B zu beobachten.

Im Vergleich der Injektoren zueinander zeigt sich, dass aufgrund der unterschiedlichen Düseninnengeometrie für alle berechneten Nadelhübe die Geschwindigkeitsprofile bei Injektor B stärker zu einem „Block“-Profil tendieren und damit im Mittel höhere Strömungsgeschwindigkeiten am Düsenaustritt sowie ein geringfügig geringerer Austrittswinkel des mittleren Strömungsimpulses vorliegen (siehe Abb. 7.7). Die turbulenten Längenskalenverteilungen sowie das zugehörige Spektrum weisen bezüglich des Nadelhubs ein gegenüber Injektor A ähnliches Verhalten auf, sind für Injektor B jedoch insgesamt von kleinerer Größenordnung (siehe Abb. 7.6 c). Da sich nach der Modellvorstellung aus Kap. 4.5 die turbulenten Längenskalen proportional zur Tropfengröße verhalten, ist für Injektor B auf eine geringere Größe der resultierenden Tropfen zu schließen. In beiden Fällen ist für die untersuchten Nadelhübe die Düseninnenströmung kavitationsfrei.

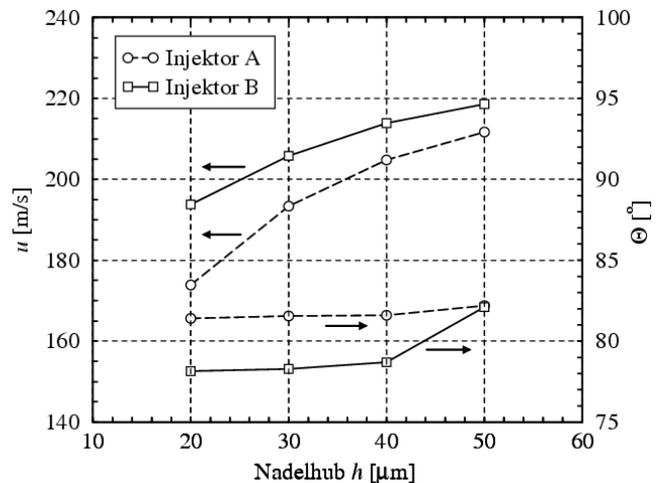


Abb. 7.7: Mittlere Strömungsgeschwindigkeit \bar{u} und Austrittswinkel $\bar{\theta}$ des mittleren Impulsvektors am Düsenaustritt als Funktion vom Nadelhub h für Injektor A und B.

Anhand der Ergebnisse der Düseninnenströmungssimulation ist zusammenfassend festzuhalten, dass als Randbedingung für die Gemischbildungssimulation

- die Strömungsgeschwindigkeit bei Injektor B größer als bei Injektor A ist ($u^B > u^A$),
- die Tropfengrößen bei Injektor B kleiner als bei Injektor A sind ($d_{Tr}^B < d_{Tr}^A$) und
- der Austrittswinkel des Impulses bei Injektor B kleiner als bei Injektor A ist ($\theta^B < \theta^A$).

7.1.3 Strahlausbreitung und Randwirbelbildung

Ein zentraler Grundbaustein des Strahlmodells für A-Düsen aus Kapitel 4.5 stellt die Simulation der Düseninnenströmung dar. Die in ihr berechneten Strömungsgrößen werden, so wie sie im vorangegangenen Kapitel vorgestellt wurden, am Austritt des Injektors der Gemischbildungsrechnung als Anfangsrandbedingung vorgegeben. Der sich anschließende Strahlaufbruch- und zerfall ist neben den numerischen Konvergenzgesichtspunkten ein weiterer elementarer Bestandteil des hier vorgestellten A-Düsen-Strahlmodells. Die dafür offenen Parameter für Primär- und Sekundärzerfall wurden bereits für die in Kapitel 3.2.1 vorgestellte Piezo-A-Düse kalibriert und werden nun für die Validierung des Strahlmodells auf die beiden Injektoren A und B übertragen. Die Gesamtpartikelanzahl wird im Hinblick auf eine statistisch konvergente Lösung nach Gl. (3.2) berechnet. Die Werte sind Tab. 7.1 zu entnehmen.

Primärzerfallskonstante Gl. (4.50):	$C_{lt} = 3$
Turbulente Zerfallskonstante Gl. (4.61):	$B_t = 12$
Aerodynamische Zerfallskonstante Gl. (4.19):	$B_1 = 12$
Partikelanzahl:	$N = 200.000$

Tab. 7.1: Parameter für das A-Düsen-Strahlmodell.

Die qualitative Gegenüberstellung der Simulation und Diagnostik für die beiden Injektoren A und B in drei für den Schichtladungsbetrieb relevanten Zeitpunkten zeigt Abb. 7.8. Darin ist das Experiment als gemittelttes Schattenrissbild abgebildet. Die Simulation repräsentiert sich in einer zweigeteilten Darstellung, in der auf der linken Hälfte die Partikel in 3D-Form und auf der rechten Hälfte der Massenanteil der Flüssigphase in einer 2D-Schnittebene abgebildet sind. Abb. 7.9 a)-c) zeigt den dazugehörigen quantitativen Vergleich von axialer und radialer, über die Strahlfront gemittelten Penetration, des Strahlkegelwinkels θ_5 , gemessen in 5 mm Entfernung von der Abspritzkante des Nadelsitzes, sowie der Randwirbelhöhe.

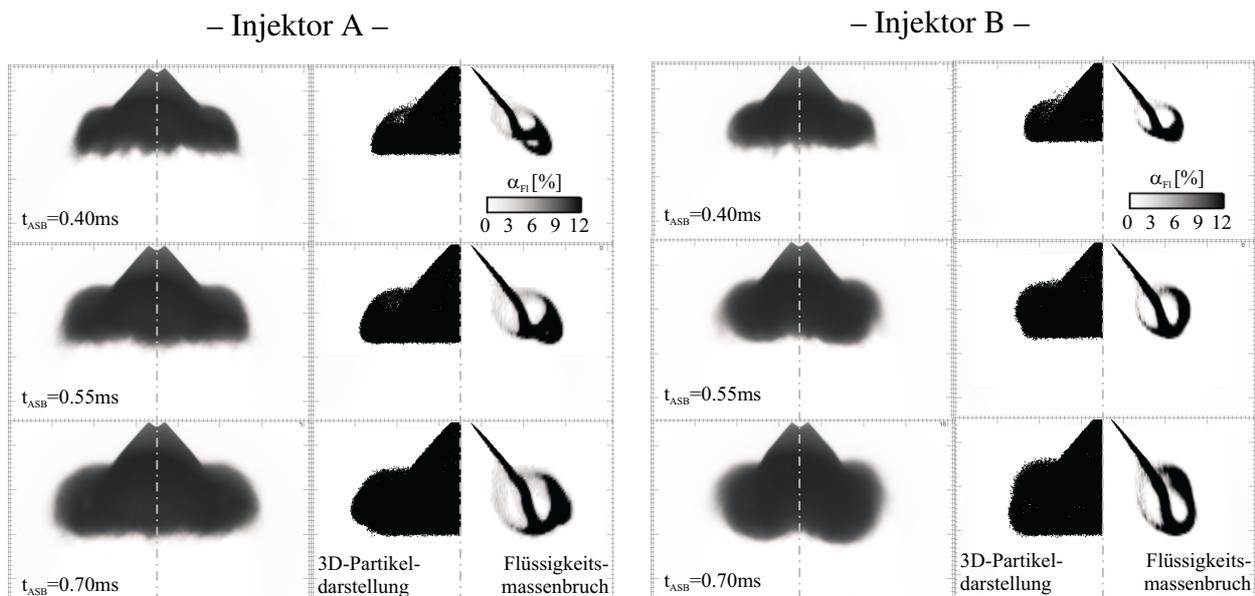


Abb. 7.8: Gegenüberstellung von Strahldiagnostik (jeweils links: gemittelte Schattenrissaufnahmen) und 3D-Simulation (jeweils rechts: 3D-Partikeldarstellung und 2D-Flüssigkeitsmassenbruch) für *Injektor A* und *Injektor B*.

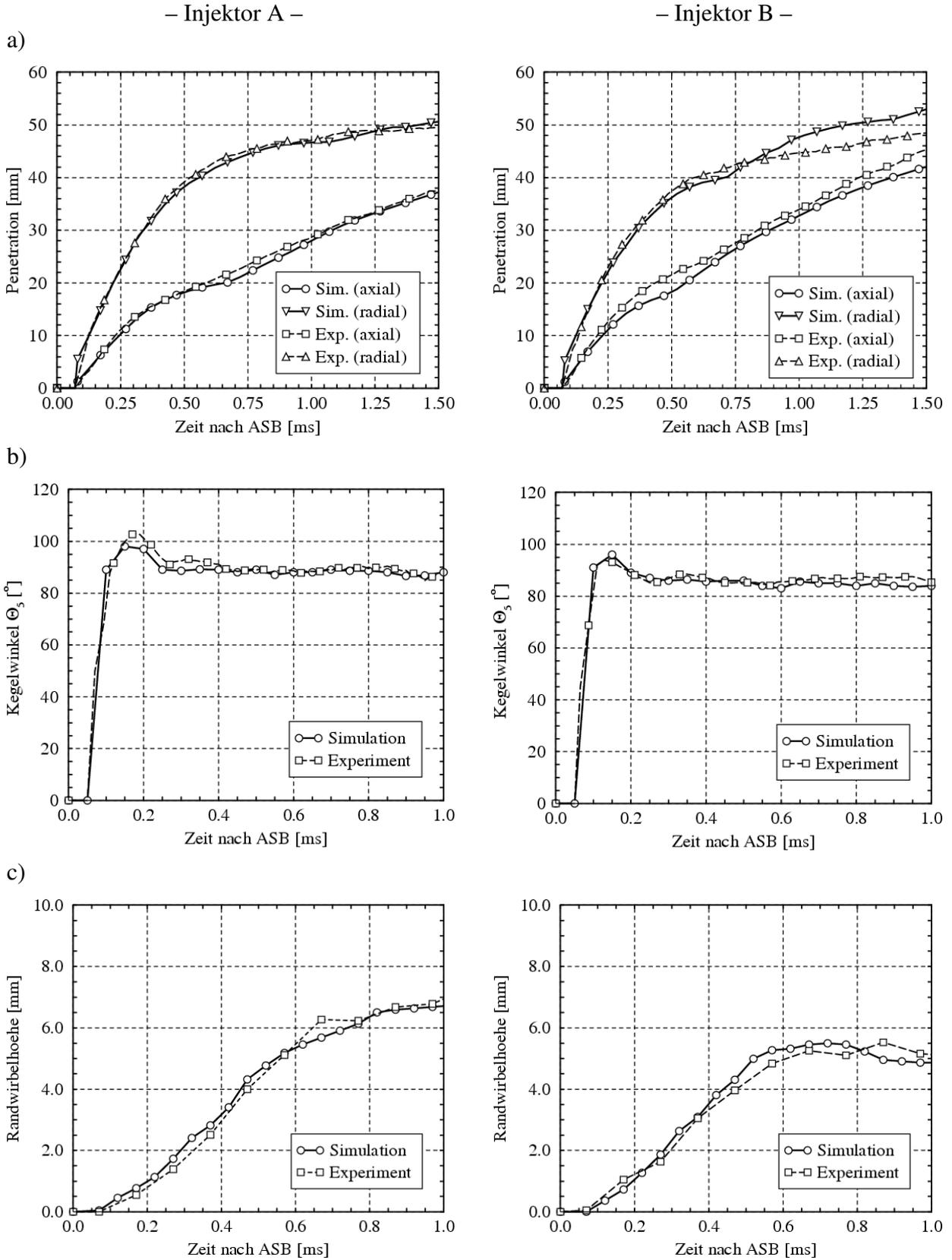


Abb. 7.9: Zeitliche Entwicklung der Strahlkenngrößen aus Messung und 3D-Simulation für *Injektor A* (links) und *Injektor B* (rechts): a) Axiale und radiale, über die Strahlfront gemittelte Penetration, b) Strahlkegelwinkel θ_5 bei 5 mm unterhalb der Abspritzkante und c) Randwirbelhöhe (vgl. dazu Abb. 7.1).

Die Gegenüberstellung von Simulation und Diagnostik in Abb. 7.8 zeigt für beide Injektoren, dass qualitativ die Strahlstruktur und Randwirbelform über den zeitlichen Verlauf der Einspritzung sehr gut wiedergegeben wird. Sowohl das Ausbreitungsverhalten für Injektor A mit einer stabilen Strahlkegelform als auch die Strahlkontraktion mit dem stark eingeschnürten Randwirbelgebiet für Injektor B wird durch die Berechnung sehr detailliert abgebildet. Dies spiegelt sich auch in quantitativer Form anhand des Vergleichs des axialen und radialen Penetrationsverhaltens mit den experimentellen Befunden in Abb. 7.9 a) wider. Der Strahlkegelwinkel θ_5 in Abb. 7.9 b) entspricht dem äußersten Winkel, den der Hohlkegelstrahl aufspannt. Im zeitlichen Verlauf ist zu Beginn eine starke Zunahme zu erkennen, da der anfängliche Randwirbel in den Messbereich bei 5 mm unterhalb der Abspritzkante des Injektors fällt. Im weiteren Verlauf bleibt der Strahlkegelwinkel näherungsweise konstant. Für beide Injektoren gibt die Simulation den experimentellen Verlauf wieder. Im Besonderen zeigt die Gegenüberstellung der berechneten und gemessenen Randwirbelhöhe in Abb. 7.9 c) eine gute Übereinstimmung und veranschaulicht in quantitativer Form die gute Abbildbarkeit des sehr differenzierten Strahlausbreitungsverhaltens. Während die Randwirbelhöhe für Injektor A kontinuierlich anwächst, wird bei Injektor B bereits ab einer Zeit $t_{ASB} = 0.6\text{ ms}$ ein Plateau mit einer Randwirbelhöhe unterhalb der bei Injektor A erreicht.

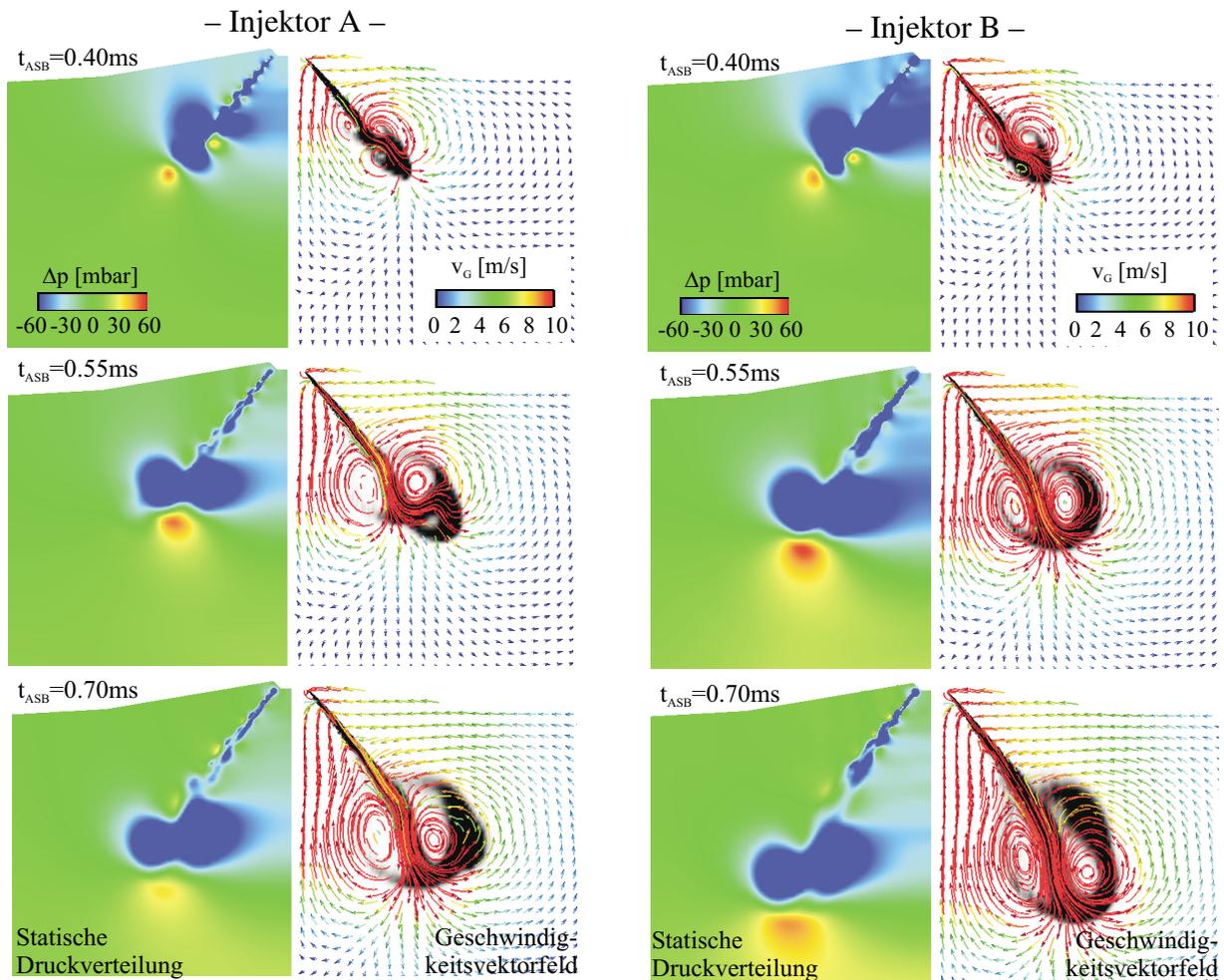


Abb. 7.10: Statische Druckverteilung (jeweils linke Schnittebene) und Geschwindigkeitsvektorfeld und Flüssigkeitsmassenbruch (jeweils rechte Schnittebene) bei *Injektor A* und *Injektor B*.

Besonders hervorzuheben ist hierbei die Sensitivität der 3D-Simulation, mit der ausgehend von der unterschiedlichen Düseninnenströmung das stark unterschiedliche Ausbreitungsverhalten bei beiden Injektoren A und B wiedergegeben wird. Die verantwortlichen Faktoren für die differenzierten Strahlbilder lassen sich allen voran an den resultierenden Tropfengrößen ausma-

chen, die für Injektor B deutlich geringer als für Injektor A ausfallen. So beträgt der Sauter-Durchmesser über den gesamten Nadelhubverlauf für Injektor A $d_{32}^A = 20 \mu\text{m}$ und für Injektor B mit $d_{32}^B = 14 \mu\text{m}$. Mit den höheren Strömungsgeschwindigkeiten bei Injektor B nimmt zusätzlich die Relativgeschwindigkeit zwischen Tropfen und Gas zu und führt damit zu einer höheren aerodynamischen Zerfallsrate. Da sich der Tropfenwiderstand umgekehrt proportional zum Tropfendurchmesser verhält, kommt es zu einem stärkeren Impulsaustausch zwischen der Flüssig- und Gasphase und damit verbunden auch zu einem stärkeren Einsaugen von Luft in den Strahlbereich bei Injektor B. Um im Inneren des Hohlkegelstrahls den Luftbedarf zu decken, nimmt die Strömungsgeschwindigkeit zu und der statische Druck fällt. Aufgrund des anliegenden Druckgradienten normal zur Ausbreitungsrichtung wird der Hohlkegelstrahl bei Injektor B „zusammengedrückt“ und kontrahiert im weiteren Verlauf. Dieser Mechanismus ist für die beiden Injektoren A und B in Abb. 7.10 anhand der statischen Druckverteilung und des Geschwindigkeitsvektorfeldes in einer vertikalen Schnittebene veranschaulicht. Zusätzlich unterstützend auf diesen Effekt wirken zum einen der geringere Düsenaustrittsdurchmesser (siehe Tab. 7.3) und zum anderen der etwas geringere Strahlkegelwinkel als Folge des niedrigeren Austrittswinkels des mittleren Impulsvektors aus der Düseninnenströmung. Beides hat eine beschränkende Wirkung auf den erforderlichen Luftbedarf im Strahlkegelinneren zur Folge und fördert damit das Strahlkontraktionsverhalten.

Zusammenfassend ist festzuhalten, dass mit dem vorgestellten Konzept die Strahlcharakteristik von A-Düsen sehr genau beschrieben werden kann. Darüber hinaus erlaubt das Strahlmodell eine sehr detaillierte Abbildung von Sensitivitäten aus den Anfangsrandbedingungen.

7.2 Validierung des Mehrkomponentenverdampfungsmodells

Für die quantitative Validierung von Tropfenverdampfungsmodellen, gleichgültig ob Ein- oder Mehrkomponentenmodell, bieten sich Experimente an ruhenden Einzeltröpfen an. Die Einzeltröpfenuntersuchung stellt jedoch keine Validierung im motorischen Sinne dar, da sie weder den Einfluss der Relativbewegung des Tropfens zum umgebenden Gas noch des Tropfenkollektivs berücksichtigt. Unter motorischen Bedingungen kann das Verdampfungsverhalten des Strahls lediglich qualitativ anhand von Laserinduzierten Exciplex-Fluoreszenz- (LIEF) Untersuchungen verifiziert werden. Aufgrund der begrenzten experimentellen Untersuchungen ist in dieser Arbeit der Schwerpunkt bei der Validierung des Mehrkomponentenverdampfungsmodells (siehe Kap. 5.3) auf einen Kerosin-Einzeltröpfen gerichtet. Anschließend wird das Verdampfungsverhalten von Benzin an einem ruhenden Einzeltröpfen sowie am Einspritzstrahl unter motorisch relevanten thermodynamischen Bedingungen numerisch verifiziert. Zur Plausibilisierung werden alle numerischen Untersuchungen den Ergebnissen mit dem in *Kiva-3v* [8] verfügbaren Standardverdampfungsmodell („Uniform Temperature“-Modell, siehe Tab. 5.1) für Einkomponentenkraftstoffe und zugehörigen thermophysikalischen Stoffeigenschaften nach Vargaftik [152] gegenübergestellt. Der Fokus bei der Modellierung der Verdampfung von Realkraftstoffen ist in dieser Arbeit allein auf die physikalischen Aspekte gerichtet. Der Einfluss der Kraftstoffzusammensetzung auf die Reaktionskinetik soll aufgrund seiner Komplexität hier nicht behandelt werden.

7.2.1 Validierung am Einzeltröpfen

Die Validierung von Verdampfungsmodellen für Realkraftstoffe zeigt sich mangels experimenteller Daten schwierig. Messungen liegen meist nur für einkomponentige Stoffe vor, zum Teil auch

für bi- und trinäre Gemische diskreter Komponenten (z.B. [140, 165]). Für reale ottomotorische Kraftstoffe, wie z.B. Benzin, sind in der Literatur keine Messungen veröffentlicht. Daher wird in dieser Arbeit zur Modellvalidierung an einem Realkraftstoff auf das Experiment von Hiroyasu et al. [62] an einem ruhenden Einzeltropfen aus Kerosin zurückgegriffen. Die Randbedingungen des unter Hochdruckatmosphäre durchgeführten Experiments sind in Tab. 7.2 dargestellt.

Kraftstofftyp:	Kerosin (siehe Tab. 5.2)
Tropfendurchmesser:	$d_{Tr,0} = 1.45 \text{ mm}$
Tropfentemperatur:	$T_{Tr,0} = 300 \text{ K}$
Umgebungsdruck:	$p_{\infty} = 30 \text{ bar}$
Umgebungstemperatur:	$T_{\infty} = 573 \text{ K}$

Tab. 7.2: Randbedingungen des Einzeltropfenexperiments von Hiroyasu et al. [62].

Aufgrund der Größe des untersuchten Tropfens ist die Temperaturabhängigkeit der Flüssigkeitsdichte $\rho_{Fl}(T_{Fl})$ nicht mehr vernachlässigbar. Der Dichteabnahme mit zunehmender Temperatur wird mit einer empirischen Korrelation nach Chin et al. [24] Rechnung getragen.

$$\rho_{Fl}(T_{Tr}) = \rho_{Fl}^{ref} \cdot \left[1 - 1.8 \cdot C_{Exp} \cdot (T_{Tr} - T_{ref}) - 0.09 \cdot \frac{(T_{Tr} - T_{ref})^2}{(T_{krit} - T_{ref})^2} \right] \quad (7.1)$$

Darin bezeichnen $C_{Exp} = 4.928 \cdot 10^{-4} \text{ K}^{-1}$ den Expansionskoeffizienten, $T_{ref} = 288.6 \text{ K}$ die Referenztemperatur und $\rho_{Fl}^{ref} = 819 \text{ kg/m}^3$ die Flüssigkeitsdichte bei Referenztemperatur. Der Einfluss der natürlichen Konvektion¹ wird durch empirische Korrekturen berücksichtigt (siehe Lippert [82]). Die Zusammensetzung des Kerosin-Kraftstoffs wird nach Gl. (5.1) mit den Formparametern aus Tab. 5.2 vorgegeben.

In Abb. 7.11 ist der mit dem Tropfenanfängsdurchmesser $d_{Tr,0}$ normierte zeitliche Verlauf der Tropfenregression $d_{Tr}^2/d_{Tr,0}^2$ der Messung und der 3D-Simulation unter Verwendung eines Ein- und Mehrkomponentenmodells dargestellt. Der Beginn des Verdampfungsvorgangs ist durch die thermische Ausdehnungsphase gekennzeichnet, in der sich der Tropfen ohne nennenswerte Verdampfungsrate aufheizt. Die Volumenvergrößerung ist dabei auf die Dichteabnahme durch die Wärmezufuhr zum Tropfen zurückzuführen. Im Scheitelpunkt befinden sich Tropfen aufheizung und -verdampfung im Gleichgewicht. Im weiteren Verlauf entwickelt sich die Tropfenregression näherungsweise linear gemäß dem d^2 -Gesetz. Mit zunehmend kleinerem Tropfendurchmesser verbleiben mehr und mehr schwer flüchtigere Komponenten mit höherer Siedetemperatur zurück, wodurch sich der Verdampfungsprozess verlangsamt. Die Tropfenlebensdauer im Experiment ist durch lineare Extrapolation in Abb. 7.11 skizziert. Der Vergleich mit dem Mehrkomponentenmodell zeigt über den gesamten Ver-

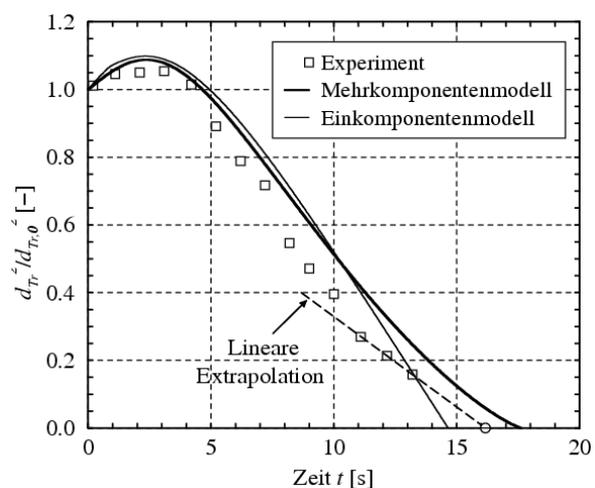


Abb. 7.11: Zeitlicher Regressionsverlauf eines Kerosin-Einzeltropfens unter Hochdruckatmosphäre nach Hiroyasu et al. [62].

¹Sie beschreibt den Einfluss der Schwerkraftzirkulation durch Temperatur-/Dichtegradienten und führt zur Erhöhung des Stoff- und Wärmetransports.

lauf eine sehr gute Übereinstimmung mit dem Experiment. Das Einkomponentenmodell gibt lediglich in der Anfangsphase den Verlauf der Tropfenregression wieder und folgt dann bis zur vollständigen Verdampfung dem d^2 -Gesetz. Das verzögerte Verdampfungsverhalten bei zunehmender Tropfenlebensdauer kann erwartungsgemäß nicht wiedergegeben werden und führt zu einer Unterschätzung der Lebensdauer des Tropfens um 17 % gegenüber dem Mehrkomponentenmodell.

7.2.2 Numerische Modellverifikation am Benzin-Einzeltropfen

Das Verdampfungsverhalten von Benzin wird nun an einem ruhenden Einzeltropfen mit für DE-Ottomotoren typischen Tropfengrößen und für den Schichtladungsbetrieb relevanten thermodynamischen Bedingungen numerisch analysiert. Die Randbedingungen des numerischen Experiments sind in Tab. 7.3 gegeben. Die Eigenschaften von Benzin sind Tab. 5.2 zu entnehmen.

Kraftstofftyp:	Benzin (siehe Tab. 5.2)
Tropfendurchmesser:	$d_{Tr,0} = 30 \mu m$
Tropfentemperatur:	$T_{Tr,0} = 293 K$
Umgebungsdruck:	$p_\infty = 7.0 bar$
Umgebungstemperatur:	$T_\infty = 593 K$

Tab. 7.3: Randbedingungen des numerischen Experiments für einen Benzin-Einzeltropfen.

In Abb. 7.12 ist der Verlauf der normierten Tropfenregression $d_{Tr}^2/d_{Tr,0}^2$ und der Tropfentemperatur T_{Tr} des Ein- und Mehrkomponentenmodells dargestellt. Der Vergleich zeigt ein dem Hiroyasu-Experiment aus Kap. 7.2.1 tendenziell ähnliches Verhalten. Das Einkomponentenmodell folgt nach anfänglicher Tropfenaufheizung einem linearen Verlauf nach dem d^2 -Gesetz und unterschätzt gegenüber dem Mehrkomponentenmodell die Tropfenlebensdauer um 19 %. Dies ist darauf zurückzuführen, dass das Einkomponentenmodell aufgrund seiner physikalischen Formulierung die Volatilität von Benzin nicht wiedergeben kann. Dabei geht die vorhergesagte Tropfentemperatur in den Kühlgrenzzustand über, der geringfügig unterhalb der Siedetemperatur für den einkomponentigen Ersatzkraftstoff liegt und sich am unteren Ende der Siedekurve des realen

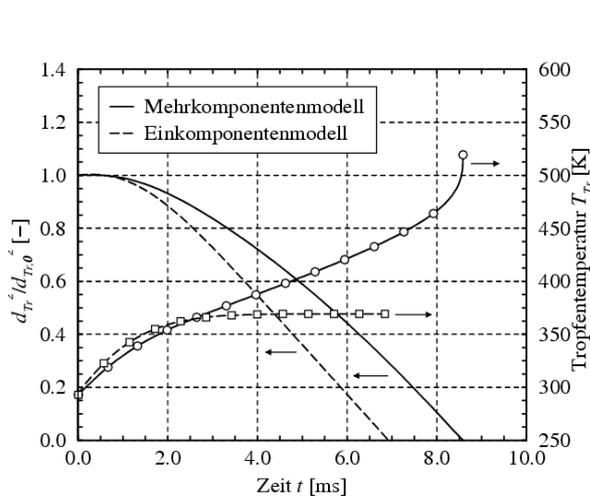


Abb. 7.12: Zeitliche Entwicklung der Tropfenregression und Tropfentemperatur eines Benzin-Einzeltropfens.

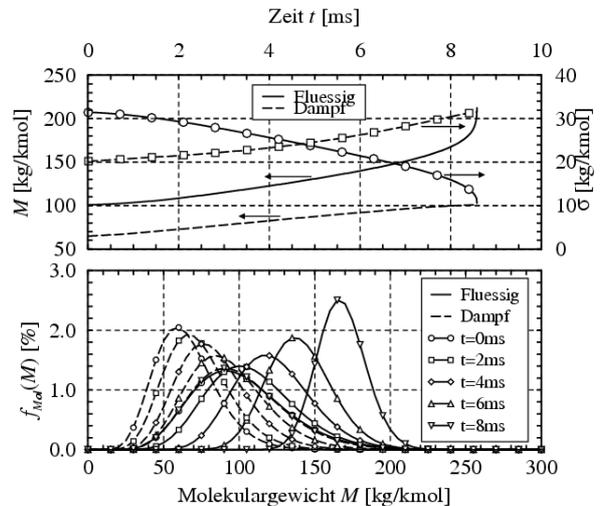


Abb. 7.13: Zeitliche Entwicklung der Zusammensetzung von Flüssig- und Dampfphase eines Benzin-Einzeltropfens.

Kraftstoffes befindet (vgl. Abb. 5.2). Das Mehrkomponentenmodell hingegen gibt auf plausible Weise den typischen Siedeverlauf und damit die Flüchtigkeit der Komponenten wieder. Dies bestätigt die zeitliche Entwicklung der Verteilungsfunktion (siehe Gl. (5.1)) sowie deren Mittelwert θ und Standardabweichung σ von Flüssig- und Dampfphase, die zusammen in Abb. 7.13 dargestellt sind. Zunächst verdampfen die leicht flüchtigen Kraftstoffkomponenten und mit zunehmender Tropfenlebensdauer die schwer flüchtigen. Dadurch nimmt in der Flüssigphase die mittlere Molmasse θ_{Fl} zu und die Standardabweichung σ_{Fl} ab. In der Dampfphase ist ein entsprechend umgekehrtes Verhalten zu beobachten, wonach θ_D sowie σ_D mit der Tropfenlebensdauer anwachsen und bei vollständiger Verdampfung in den Anfangszustand der Flüssigphase übergehen. Ferner wird auch die in Kap. 7.2.1 erhobene Aussage bestätigt, dass mit den in DE-Ottomotoren relevanten Tropfengrößen die thermische Ausdehnungsphase, d.h. die reine Aufheizung des Tropfens ohne nennenswerte Verdampfungsrate, vernachlässigbar ist.

7.2.3 Numerische Analyse der Verdampfung des Einspritzstrahls

Auf Basis der plausiblen Abbildung des Mehrkomponentenverdampfungsmechanismus von Benzin am ruhenden Einzeltropfen wird nun dessen Verdampfungsverhalten am Einspritzstrahl unter Berücksichtigung der Effekte aus der Relativbewegung des Tropfens und des Tropfenkollektivs numerisch verifiziert. Im Fokus der Untersuchung stehen strahlgeführte Brennverfahren mit Piezo-A-Düsen. Die Gemischbildung wird dazu für die in Kap. 3.2.1 vorgestellte A-Düse in einer Hochtemperaturkammer simuliert. Die thermodynamischen Randbedingungen der numerischen Untersuchung sind an die typischen Bedingungen im Schichtladungsbetrieb angepasst (siehe Tab. 7.4). Die Modellierung der Strahldynamik erfolgt mit dem in Kap. 4.5 vorgestellten Ansatz und auf Basis des numerischen Konzepts zur detaillierten Strahlanalyse aus Kap. 3.2.3 in Analogie zur Validierung des Strahlmodells in Kap. 7.1. Dazu wird das strahladaptive Rechengitter mit Düsenaustrittsauflösung aus Abb. 3.3 herangezogen.

Injektortyp:	Piezo-A-Düse
Kraftstofftyp:	Benzin (siehe Tab. 5.2)
Raildruck:	$p_R = 100 \text{ bar}$
Kraftstofftemperatur:	$T_K = 333 \text{ K}$
Kammerdruck:	$p_K = 7 \text{ bar}$
Kammertemperatur:	$T_K = 593 \text{ K}$

Tab. 7.4: Randbedingungen für die Verdampfungsanalyse des Einspritzstrahls einer Piezo-A-Düse in der Hochtemperaturkammer.

Das globale Verdampfungsverhalten ist für das Mehrkomponentenmodell anhand der zeitlichen Entwicklung der integralen Flüssig- und Dampfmasse in Abb. 7.14 illustriert. Dem sind die Ergebnisse mit dem Standardverdampfungsmodell („Uniform Temperature“-Modell) in *Kiva-3v* [8] für Einkomponentenkraftstoffe gegenübergestellt. In Analogie zum Einzeltropfen zeigt sich beim Strahl das zu rasche Verdampfungsverhalten des Einkomponentenmodells gegenüber dem Realkraftstoffmodell. Die Ursache ist auch hier auf die unzureichende Abbildung der Volatilität und die damit bedingte Verdampfung auf niedrigem Siedetemperaturniveau (vgl. Abb. 5.2) zurückzuführen. Ein entsprechendes Bild zeigt auch die lokale Betrachtung, die in Abb. 7.15 für das Ein- und das Mehrkomponentenmodell anhand der Verteilung für die Luftzahl λ und den Flüssigkeitsmassenanteil veranschaulicht ist. Unter Berücksichtigung der Realkraftstoffeigenschaften ist in den Rezirkulationsgebieten, in denen schließlich die Zündung eingeleitet wird, bei höherem Flüssig-

siganteil das Gasgemisch „magerer“. Ein sehr interessantes Bild zeigt auch die lokale Verteilung der mittleren Molmasse in Abb. 7.15. Daraus geht hervor, dass aufgrund der kürzeren Verweilzeiten der Tropfen im Strahlkern nur die leicht flüchtigen Komponenten verdampfen, während im äußeren und inneren Randwirbel die schwer flüchtigen Komponenten mit höherer Molmasse in Flüssig- und Gasphase verbleiben. Im Hinblick auf die Entflammung des Gemisches stellt allein der physikalische Mechanismus der Mehrkomponentenverdampfung einen nicht zu vernachlässigenden Effekt dar. Darüber hinaus ist grundsätzlich nicht auszuschließen, dass aufgrund der stark inhomogenen Molmassenverteilung in der Gasphase auch die chemischen Prozesse, d.h. die Reaktionskinetik, im Hinblick auf die Zündung und Verbrennung beeinflusst werden.

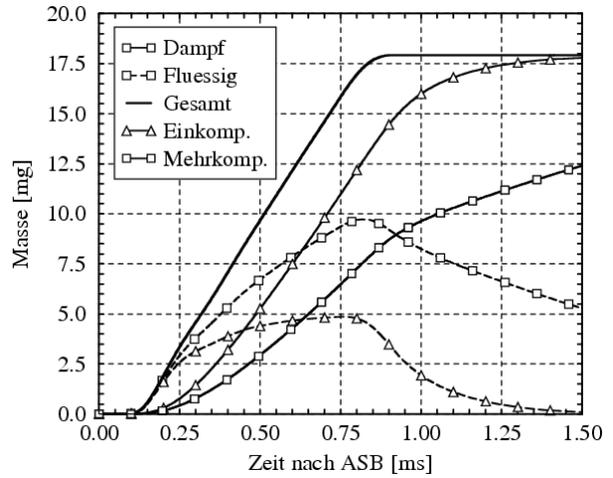


Abb. 7.14: Zeitliche Entwicklung von Dampf- und Flüssigmasse des Ein- und Mehrkomponentenverdampfungsmodells.

Das Verdampfungsverhalten am ruhenden Einzeltropfen und im Besonderen am Einspritzstrahl zeigt, dass nicht nur für langsame Verdampfungsvorgänge, wie sie unter atmosphärischen Bedingungen vorkommen, die detaillierte Abbildung der Kraftstoffzusammensetzung hinsichtlich einer vorhersagefähigen Gemischbildungssimulation von Bedeutung ist, sondern auch unter Hochdruckatmosphäre im Schichtladungsbetrieb.

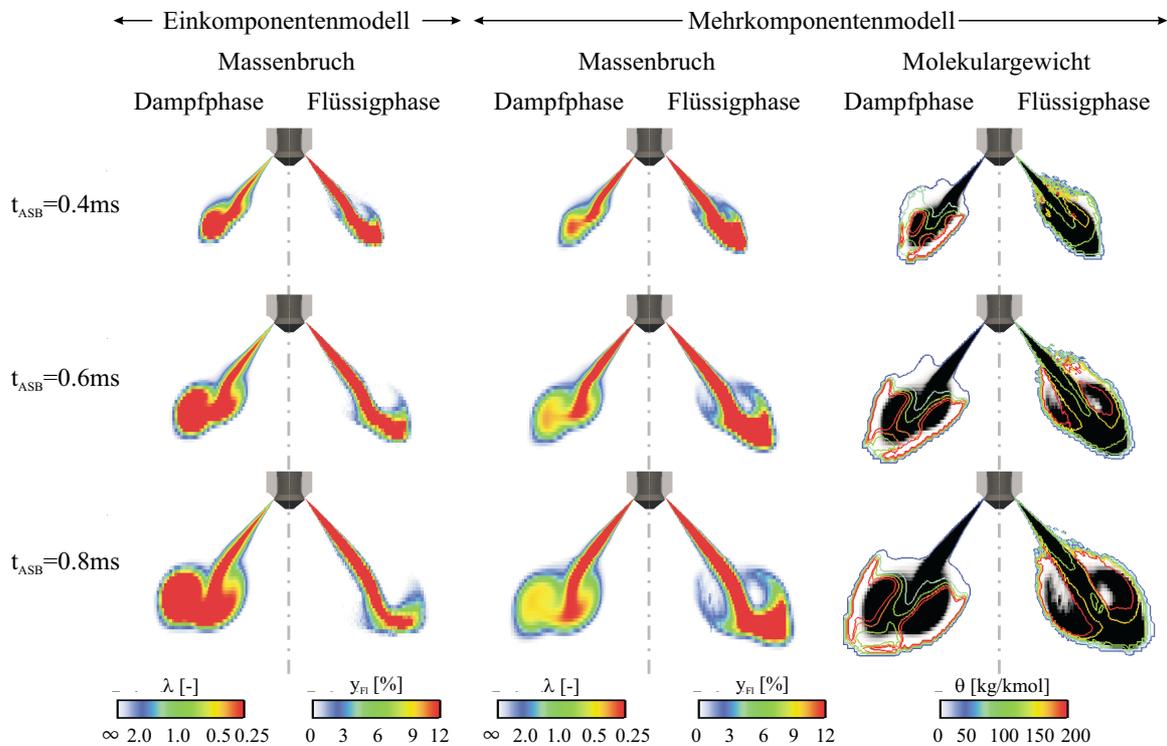


Abb. 7.15: Gegenüberstellung der lokalen Gemisch- und Kompositionsverteilung in Flüssig- und Dampfphase von Ein- und Mehrkomponentenverdampfungsmodell für den Einspritzstrahl einer A-Düse in 2D-Schnittdarstellung.

7.3 Validierung des Gesamtmodells am Motor

Die Validierung des Gesamtmodells wird in dieser Arbeit an einem 4-Ventil-Einzylinder-Forschungsaggregat mit Common-Rail-Hochdruck-Benzin-Direkteinspritzung und einer Piezo-A-Düse vollzogen. Das Aggregat zeichnet sich durch eine für das strahlgeführte Brennverfahren typische zentrale Injektor- und Zündkerzenlage aus (siehe dazu auch Abb. 7.19). Der für die Untersuchung herangezogene Piezo-Injektor entspricht in seiner Bauform dem in Kap. 7.1 vorgestellten Injektor A. Die technischen Daten des Aggregats sind in Tab. 7.5 dargestellt.

Bohrung:	92.8 mm
Hub:	86.0 mm
Pleuellänge:	146.5 mm
Quetschspalthöhe:	0.75 mm
Kompressionsverhältnis:	12 : 1

Tab. 7.5: Technische Daten des Einzylinder-Forschungsmotors

In den folgenden Abschnitten wird zunächst auf die Betriebspunkte und die zugehörigen Randbedingungen der Untersuchung eingegangen, die Rechenetzstrategie vorgestellt, die applizierten Modelle und Parameter sowie die Einspritzstrahlabstimmung auf das motorische Rechenetz angesprochen, ehe abschließend die erzielten Simulationsergebnisse diskutiert und den Indizierdaten am Einzylinderaggregat gegenübergestellt werden.

7.3.1 Betriebspunkte und Randbedingungen

Im Rahmen der Validierungsstudie werden vier Teillast-Betriebspunkte im Schichtladungsbetrieb herangezogen, die sich bezüglich des Einspritz- und Zündzeitpunkts sowie der externen Abgasrückführungsrate differenzieren. Einen detaillierten Überblick zu den Betriebsdaten gibt Tab. 7.6.

BP Nr.	Motor-drehzahl n [min^{-1}]	Indizierter Mitteldruck p_{mi} [bar]	Einspritzbeginn ESB [°KW]	Zündzeitpunkt ZZP [°KW]	Äußere AGR [%]	Einspritzmenge m_K [mg]	Globale Luftzahl λ [-]
1	2000	3.0	-38	-29	0	10.3	3.71
2	2000	3.0	-30	-21	0	10.3	3.71
3	2000	3.0	-35	-26	10	10.3	3.36
4	2000	3.0	-35	-26	30	10.4	2.56

Tab. 7.6: Betriebsdaten des Einzylinder-Forschungsmotors

Für die 3D-Ladungswechselberechnung werden für die beiden Ein- und Auslassventile die Ventilhubkurven aus Abb. 7.16 zugrunde gelegt. An Ein- und Auslass werden als Randbedingungen der statische Druck und die Temperatur vorgegeben. Deren momentane Verläufe sind einem 1D-Arbeitsprozessrechnungsmodell entnommen, welches mit GT-Power erstellt und mit Ergebnissen aus Niederdruckindizierungen abgeglichen wurde. Exemplarisch ist in Abb. 7.17 der Druckverlauf für den Betriebspunkt 1 aus Tab. 7.6 abgebildet.

In Bezug auf die Stoffzusammensetzung an den Randbedingungen sowie der Initialisierung bei Rechenbeginn wird von vollständiger Umsetzung des eingespritzten Kraftstoffes ausgegangen.

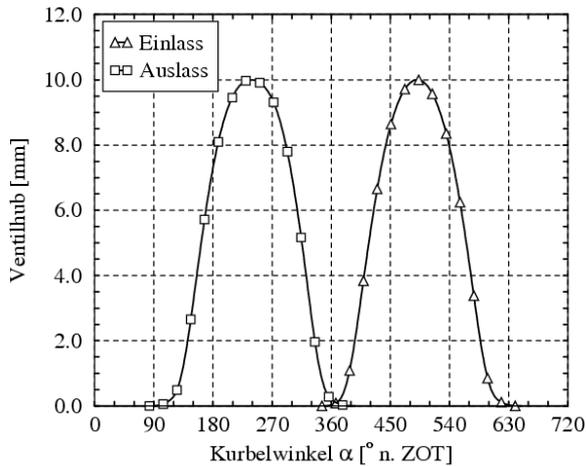


Abb. 7.16: Ventilhubkurven des mechanischen Ventiltriebssystems des Einzylinderaggregats.

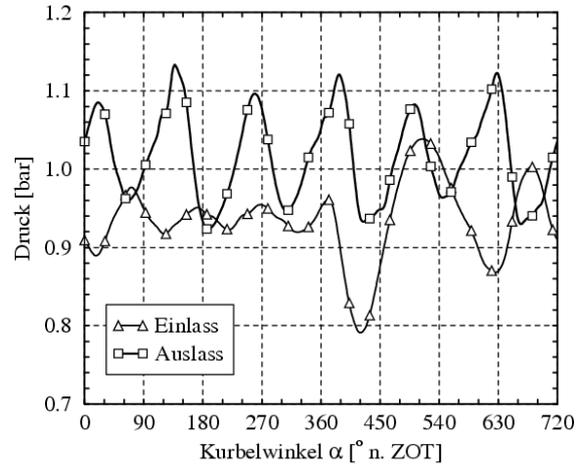


Abb. 7.17: Druckrandbedingungen für Ein- und Auslasskanal aus der 1D-Simulation.

Für Zylinder und Auslass wird demnach Verbrennungsgas, bestehend aus Kohlendioxid CO_2 , Wasser H_2O , Sauerstoff O_2 und Stickstoff N_2 , mit entsprechendem Kraftstoff-Luftverhältnis λ aus dem vorhergehenden Zyklus vorgegeben.

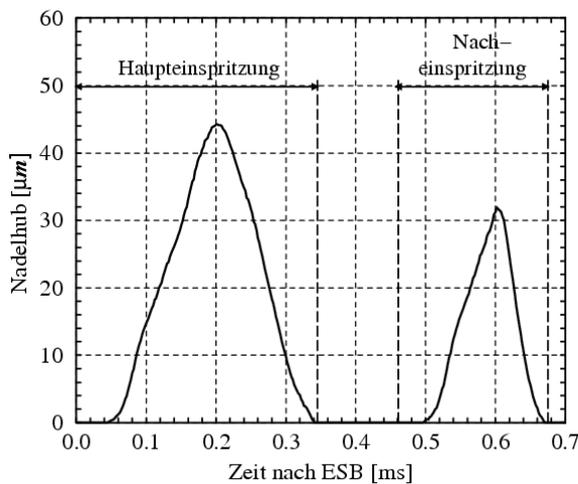


Abb. 7.18: Nadelhubkurve der Piezo-A-Düse bei Doppelspritzung.

Unverbrannte Kohlenwasserstoffe und Zwischenprodukte bleiben unberücksichtigt. Am Einlass wird von reiner Frischluft, bestehend aus Sauerstoff O_2 und Stickstoff N_2 , ausgegangen. Bei externer Abgasrückführung wird zusätzlich Verbrennungsgas in der Zusammensetzung des Abgases beigemischt. Die Einspritzung erfolgt über eine Doppelspritzung. Der zugehörige experimentell ermittelte Nadelhubverlauf ist in Abb. 7.18 dargestellt und wird in der 3D-Simulation explizit als Randbedingung vorgegeben. Als Kraftstoff wird Super Plus mit einer Oktanzahl 98 (ROZ), einem unteren Heizwert $H_U = 42.8 \text{ MJ/kg}$ und einer stöchiometrischen Luftzahl $L_{st} = 14.35$ verwendet.

7.3.2 Rechennetzstrategie

Die 3D-Simulation des Ladungswechsels wird aus Gründen der komplexen Gitterbewegung und der Rechenzeit mit dem CFD-Programm *StarCD* [22] auf 8 Prozessoren durchgeführt. Der Simulationsbeginn liegt aus Konvergenzgründen bei 26° KW vor Öffnung der Einlassventile (40° KW v. LOT). Die Ladungswechselberechnung selbst verlangt aufgrund der Ventilbewegung eine spezielle Netztopologie, der mit einem *ES-ICE*-Gitter [21] Rechnung getragen wird. Die 3D-Simulation der Einspritzung und Verbrennung erfolgt mit dem CFD-Programm *Kiva-3v* [8]. Gegenüber dem Ladungswechsel stellt sie andere Ansprüche an die Gitterauflösung und -topologie, welche die Ausbreitungsrichtung des Einspritzstrahls und der Flammenfront betrifft. Aus diesem Grund wird die Lösung der Ladungswechselrechnung bei 40° KW vor ZOT (bei geschlossenen Ventilen) auf ein blockstrukturiertes *ICEM*-Gitter [9] mit einer für die Einspritzung und Ver-

brennung günstigeren Netztopologie mit rein hexagonalen Zellen übertragen. Die Gitterweite des *ICEM*-Rechnetzes ist dabei auf die zu beschreibenden physikalischen Prozesse unter Berücksichtigung der Recheneffizienz optimiert. Mit einer Zellgröße von $\Delta x = 100 \mu\text{m}$ löst das Rechengitter den Düsenaustritt nicht auf, jedoch wirkt die strahladaptive Gittertopologie dem in Kap. 3.2.1 beschriebenen numerisch diffusiven Charakter entgegen. Abb. 7.19 zeigt die beiden Rechengitter in Schnittdarstellung.

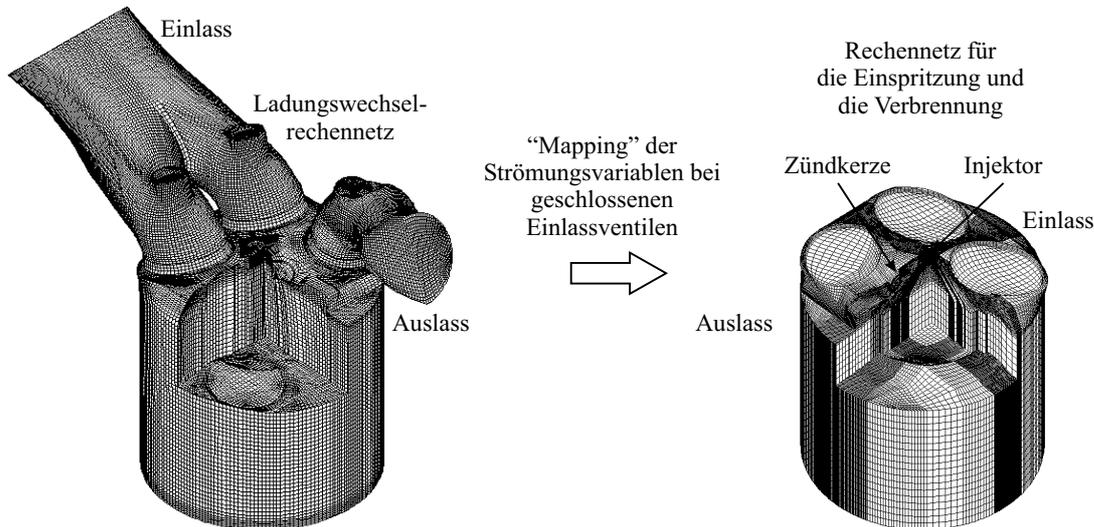


Abb. 7.19: Schnittdarstellung der Rechengitter mit optimierter Netztopologie zur 3D-Simulation des Ladungswechsels mit *StarCD* [22] (links, 691122 Zellen im UT) sowie der Einspritzung und Verbrennung mit *Kiva-3v* [8] (rechts, 198920 Zellen im ZOT).

7.3.3 Modellauswahl und Modellparameter

In der motorischen 3D-Simulation von Gemischbildung und Verbrennung mit dem CFD-Programm *Kiva-3v* [8] wird die Strahldynamik mit dem *A-Düsen-Strahlmodell* aus Kap. 4.5, die Verdampfung mit dem *Mehrkomponentenverdampfungsmodell* aus Kap. 5.1 und die Schichtladungsverbrennung mit dem in Kap. 6.3.3 vorgestellten *7-Spezies-PDF-Flammenfaltungsmodell* abgebildet. Zur vollständigen Schließung der Gesamtmodellierung sind weitere Teilmodelle heranzuziehen sowie Modellparameter problemangepasst zu definieren. Auf deren Beschreibung wird im Folgenden eingegangen.

Modellierung des thermodynamischen Gasverhaltens:

Für die Schließung der kompressiblen Erhaltungsgleichungen (2.10)-(2.14) werden die kalorische und die thermische Zustandsgleichung (2.16) bzw. (2.18) herangezogen. Für deren Berechnung wird sowohl im CFD-Programm *StarCD* [22] als auch in *Kiva-3v* [8] von Idealgasverhalten ausgegangen, welches mit Hilfe der *JANAF*-Tabellen [143] bestimmt wird.

Strahlabstimmung auf motorischem Rechennetz:

In Kap. 3.2 wurde bereits die Problematik bei der Berechnung der Einspritzung ausführlich diskutiert und eine geeignete Vorgehensweise für die motorische Simulation erarbeitet. Die Strahlmodellparameter aus Kap. 7.1.3 werden für die Doppeleinspritzung (siehe Abb. 7.18) anhand optischer Strahldiagnostik in der Hochdruckkammer unter den Randbedingungen aus

Tab. 7.3 überprüft. Dafür erfolgt die 3D-Simulation der Einspritzung aus Gesichtspunkten der Übertragbarkeit auf dem *ICEM*-Rechengitter, wobei der Kolben bei 40° KW v. ZOT so fixiert ist, dass die Netzstruktur in guter Näherung derer zum Einspritzzeitpunkt des realen Motorbetriebs entspricht.

Bei der Strahlabstimmung konnte für die Parameter von Primär- und Sekundärerfall gegenüber den in Kap. 7.1.3 ermittelten Werten (siehe Tab. 7.1) keine Abweichung festgestellt werden. Das zeigt das 3D-Simulationsergebnis der Einspritzung, das in Abb. 7.20 als Partikeldarstellung den optischen Schattenrissaufnahmen gegenübergestellt ist. Die nebenstehenden Abb. 7.21 und 7.22 zeigen zusätzlich den quantitativen Vergleich von Simulation und Diagnostik für die axiale und radiale Strahl Eindringung. Als Ergebnis lässt sich zusammenfassend festhalten, dass sowohl die globalen Größen, d.h. die axiale und die radiale Strahlpenetration, als auch die lokale Strahl- und Randwirbelstruktur im zeitlichen Verlauf sehr gut mit der Messung übereinstimmen. Für die motorische 3D-Simulation werden daher die Strahlmodellparameter gemäß Tab. 7.1 übernommen.

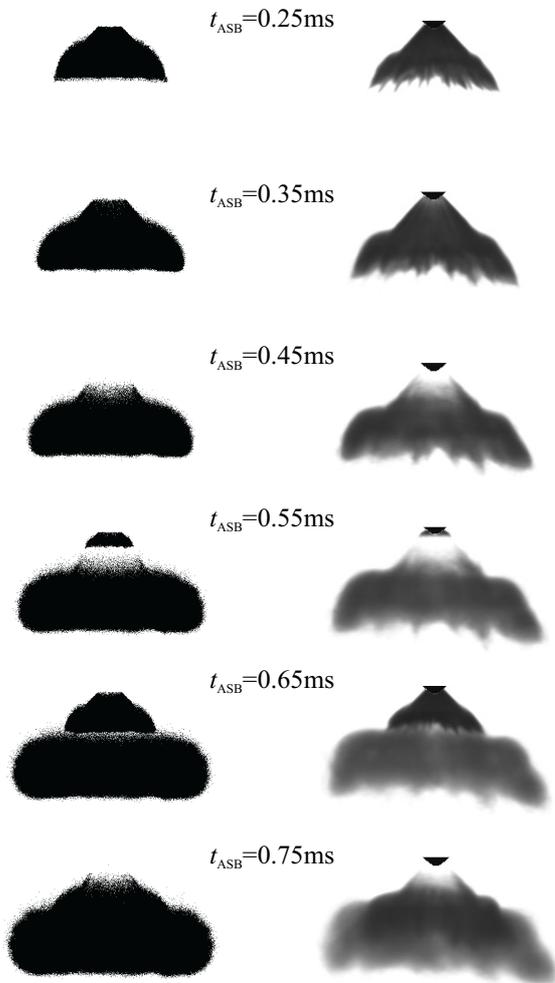


Abb. 7.20: Gegenüberstellung der 3D-Simulation (Partikeldarstellung, links) und Strahl-diagnostik (rechts) in der Hochdruckkammer ($p_K = 6bar$ und $T_K = 293K$).

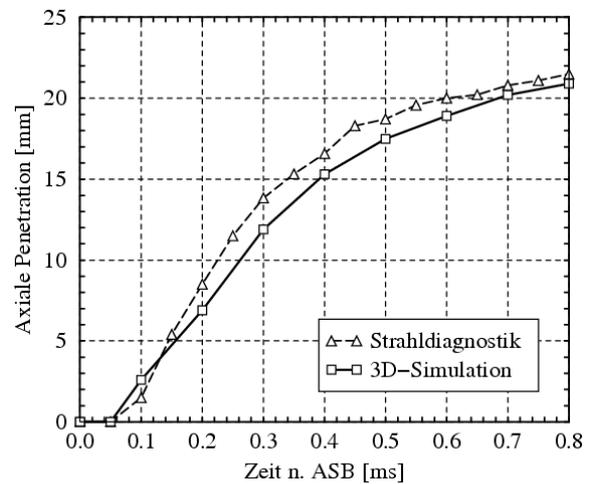


Abb. 7.21: Axiale Strahlpenetration auf motorischem Rechenetz mit fixiertem Kolben.

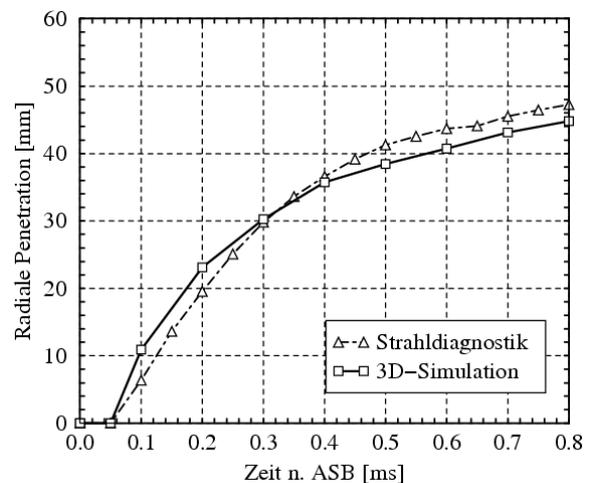


Abb. 7.22: Radiale Strahlpenetration auf motorischem Rechenetz mit fixiertem Kolben.

Modellierung der Zündung:

Die Einleitung der Verbrennung erfolgt durch Funkenentladung an der Zündkerze. Mangels physikalischer Kenntnisse über den hoch komplexen Flammenkernbildungs- und Flammenwachstumsprozess wird auf eine detaillierte Modellierung der Zündung verzichtet. Stattdessen wird während der frühen Zündphase der Verlauf der Flammenfortschrittsvariablen \tilde{c} (siehe Gl. (6.32)) innerhalb einer charakteristischen Zündzeitskala vorgegeben.

Modellierung der turbulenten Brenngeschwindigkeit:

Die Korrelation für die turbulente Brenngeschwindigkeit s_t enthält nach Gl. (6.12) den Modellparameter A_{Fl} , der in Abhängigkeit von der Motorkonfiguration und vom zugrunde liegenden Rechengitter ermittelt werden muss. Die Anpassung des Koeffizienten A_{Fl} erfolgt durch iterativen Abgleich des Druckanstiegs aus der 3D-Simulation mit der Hochdruckindizierung vom Motorprüfstand nach Einleitung der Zündung. Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurde der Modellparameter mit $A_{Fl} = 2.6$ für den Betriebspunkt 1 aus Tab. 7.6 bestimmt. Für die 3D-Verbrennungssimulationen der weiteren Betriebspunkte an der selben Motorkonfiguration wird der angepasste Wert für A_{Fl} beibehalten.

Modellierung des Wandwärmübergangs:

Der Wandwärmübergang ist bei Ottomotoren mit Schichtladung ($\lambda > 1$) gegenüber konventionellen $\lambda = 1$ -Brennverfahren aufgrund der zentralen Verbrennung vergleichsweise gering, leistet jedoch in der energetischen Bilanzierung einen signifikanten Beitrag. Der Wandwärmübergang setzt sich aus einem konvektiven und einem Strahlungsanteil zusammen, wobei letzterer meist dem konvektiven Wärmübergangskoeffizienten zugeschlagen wird [87]. Die Berechnung des Wandwärmebeitrags in der Energiebilanzgleichung (2.14) erfolgt nach dem Newton'schen Gesetz für Konvektion.

$$\tilde{Q}^W = \sum_{i=1}^3 \bar{\alpha} \cdot (\tilde{T}_{W,i} - \tilde{T}_G) \cdot A_i \quad (7.2)$$

Darin beschreiben A_i die Oberfläche, \tilde{T}_G und $\tilde{T}_{W,i}$ die lokale Gas- und Wandtemperatur. Die Brennraumwand wird in drei Bereiche ($i = 1, 2, 3$) – Zylinderkopf, Kolben und Laufbuchse – eingeteilt, wobei für jeden der drei Bereiche zeitlich und örtlich konstante Wandtemperaturen angenommen werden. Der Wandwärmübergangskoeffizient $\bar{\alpha}$ wird durch den semiempirischen Ansatz nach Woschni [167] berechnet. $\bar{\alpha}$ wird über die gesamte Brennraumwand als konstant betrachtet und stellt damit nur eine Näherungslösung dar. Die Kalibrierung des Modells im Hochdruckzyklus ($-90^\circ \leq \alpha \leq +90^\circ KW$) erfolgt durch Anpassung des zeitlich integralen Wandwärmestroms der 3D-CFD-Rechnung an die Druckverlaufsanalyse (DVA) der Messung über den Koeffizienten K_W .

$$K_W \cdot \int dQ_{3D}^W \approx \int dQ_{DVA}^W \quad (7.3)$$

Der Koeffizient $K_W = 1.53$ wurde für den Betriebspunkt 1 aus Tab. 7.6 ermittelt und bleibt für die anderen drei Betriebspunkte unverändert.

Einen Überblick über die in der vorliegenden Arbeit zugrunde liegende Vorgehensweise bei der 3D-CFD-Simulation vom Ladungswechsel bis zur Verbrennung von Ottomotoren mit Benzin-Direkteinspritzung zeigt Abb. 7.23. Alle Modellparameter für die 3D-Simulation der Gemischbildung und Verbrennung der vier Betriebspunkte aus Tab. 7.6 sind zusammenfassend in Tab. 7.7 dargestellt.

3D-CFD-Simulationprozess für Ottomotoren

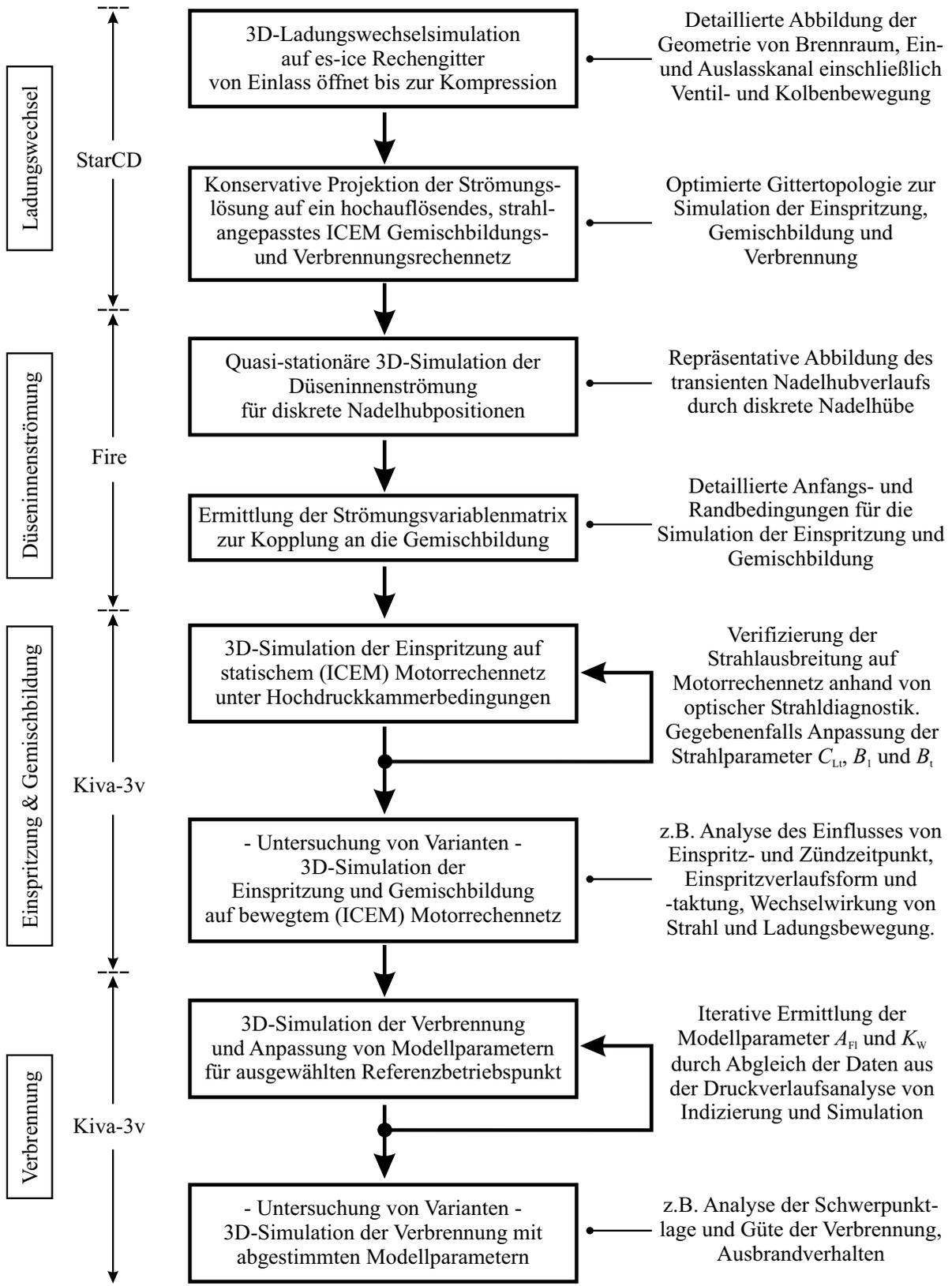


Abb. 7.23: Vorgehensweise bei der 3D-CFD-Simulation des Ladungswechsels, Gemischbildung und Verbrennung bei Ottomotoren mit Benzin-Direkteinspritzung.

Strahldynamik:	Primärzerfallskonstante:	$C_{l_t} = 3$	Gl. (4.50)
	Turbulente Zerfallskonstante:	$B_t = 12$	Gl. (4.61)
	Aerodynamische Zerfallskonstante:	$B_1 = 12$	Gl. (4.19)
Verbrennung:	Brenngeschwindigkeitsfaktor:	$A_{Fl} = 2.6$	Gl. (6.12)
Wandwärmeübergang:	Woschni-Koeffizient:	$K_W = 1.53$	Gl. (7.3)

Tab. 7.7: Modellparameter für die 3D-Simulation der Gemischbildung und Verbrennung

7.3.4 Validierungsergebnisse

Die Anfangsrandbedingungen für die Gemischbildung und Verbrennung werden durch den Ladungswechsel definiert. Da der Ladungswechsel als solcher nicht im Fokus der Untersuchung dieser Arbeit steht, wird das generelle Verhalten der Einlassströmung exemplarisch für den Betriebspunkt 1 bzw. 2 aus Tab. 7.6 diskutiert. Für beide Punkte ist die Einlassströmung identisch. Auch das Strömungsverhalten bei den Betriebspunkten 3 und 4 unterscheidet sich davon nur wenig, da es sich im Wesentlichen nur um veränderte Gemischzusammensetzungen handelt. Geringfügige Unterschiede treten durch die veränderte Thermodynamik des in diesen Fällen etwas heißeren Arbeitsgases durch die externe Abgasrückführung auf.

Das globale thermodynamische Verhalten spiegelt sich im Druckverlauf wider. Er wird daher auch als Maß zur Quantifizierung der Genauigkeit der 3D-Ladungswechselsimulation herangezogen und mit der 1D-Simulation verglichen. Der Vergleich der Druckverläufe von 3D-CFD- und 1D-Ladungswechselsimulation für den Betriebspunkt 1 in Abb. 7.24 zeigt eine tendenziell

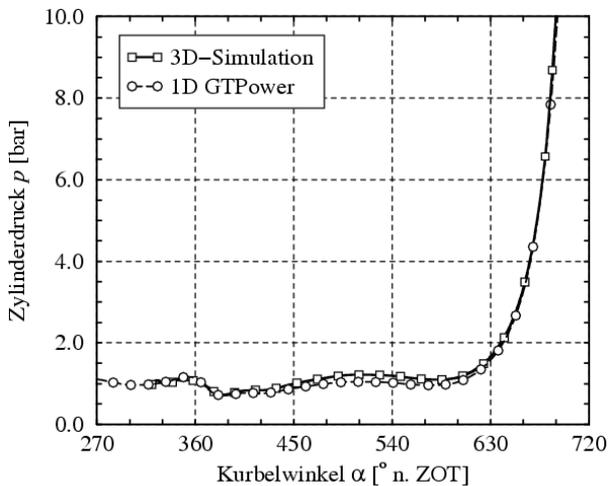


Abb. 7.24: Zylinderdruckverlauf für Einlass- und Kompressionsphase von BP 1.

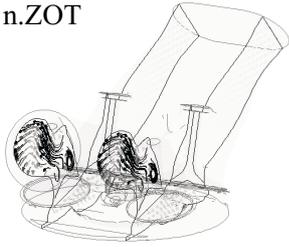
gute Übereinstimmung. Geringe Unterschiede zu Beginn der Einlassphase kompensieren sich bis zur Kompressionsphase wieder.

Das lokale Strömungsverhalten während der Einlassphase ist anhand des Geschwindigkeitsvektorfeldes in Abb. 7.25 dargestellt. Die beiden darin abgebildeten Schnittebenen liegen in Strömungsrichtung gesehen mittig in den Einlassventilen. Mit Öffnen der Einlassventile strömt das Frischgas in den Brennraum. Dabei reißt die Strömung an den Ventilen ab und es formieren sich zwei gegenläufige Wirbel (vgl. 450° KW n.ZOT). Im späten Saughub (vgl. 500° KW n.ZOT) fallen diese Wirbelgebiete in einen großvolumigen Tumble zusammen. In der späten Kompression

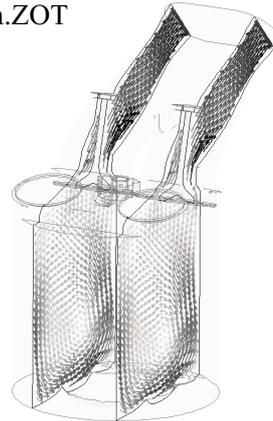
zerfällt die großskalige Tumble-Bewegung und setzt turbulente kinetische Energie frei, die dann zur Beschleunigung der Flammenausbreitung und damit des Verbrennungsvorgangs dient.

Neben dem Ladungswechsel leistet die späte Einspritzung im Schichtbetrieb zusätzlich einen wichtigen Beitrag zur Turbulenzerzeugung. Dabei trägt die Mehrfacheinspritzung neben der Vergrößerung des Zündfensters wesentlich zur Stabilität des Strahls und des Randwirbels bei (siehe auch Abb. 7.20). Durch die diskontinuierliche Zufuhr von Strömungsimpuls zwischen Haupt-

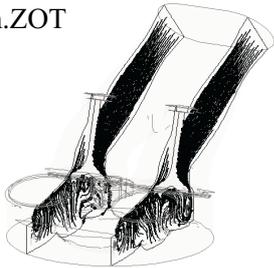
350°KW n.ZOT



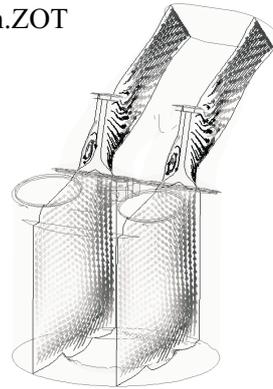
550°KW n.ZOT



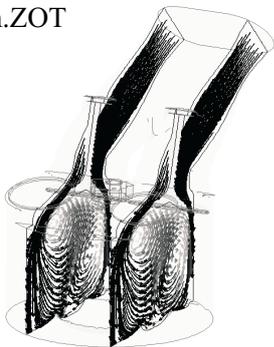
400°KW n.ZOT



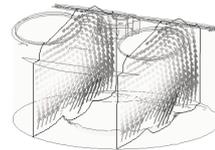
600°KW n.ZOT



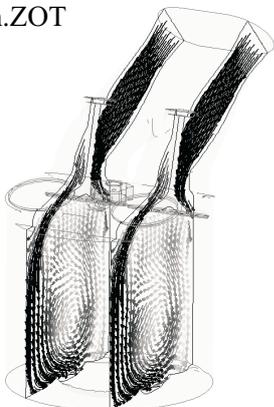
450°KW n.ZOT



650°KW n.ZOT



500°KW n.ZOT



680°KW n.ZOT

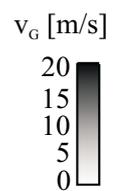
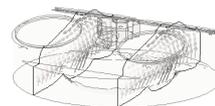


Abb. 7.25: Geschwindigkeitsvektorfeld der 3D-Ladungswechselberechnung für die Betriebspunkte 1 und 2 aus Tab. 7.6.

und Nacheinspritzung findet stets ein Druckausgleich zwischen innerem und äußerem Hohlkegelbereich statt, wodurch die Neigung zur Kontraktion des Strahls minimiert wird. Die Wechselwirkung des Einspritzstrahls mit der Zylinderinnenströmung ist in Abb. 7.26 dargestellt. Die großskalige Tumble-Bewegung führt zur Deformation des sich ausbreitenden Randwirbels in Richtung Zündkerze. Während der Haupteinspritzung bleibt der Strahl bzgl. seiner Verkipfung aufgrund seines hohen Impulses stabil. Erst in der Nacheinspritzung verkippt die Strahlfront durch die bereits induzierte Gasströmung.

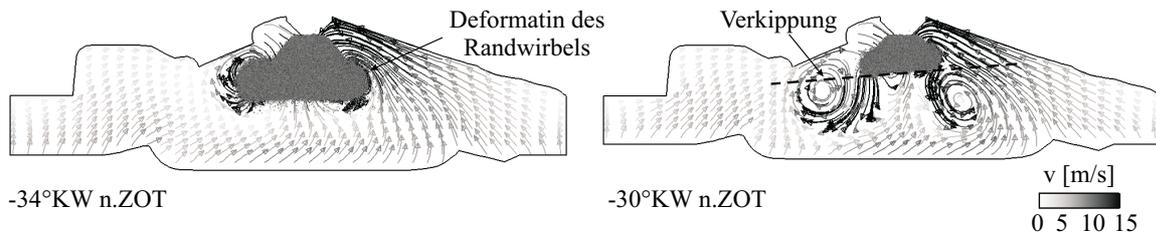


Abb. 7.26: Wechselwirkung von Einspritzstrahl und Tumble-Strömung für BP 1 aus Tab. 7.6: Einspritzstrahl in Partikeldarstellung und Geschwindigkeitsvektorfeld in einer Schnittebene durch die Brennraummitte für die Haupteinspritzung (links) und Nacheinspritzung (rechts).

Sowohl durch die Einlassströmung als auch die Hochdruck-Einspritzung und Zündung resultieren von Zyklus zu Zyklus Schwankungen in Gemischzusammensetzung und -verteilung, welche die Flammenkernbildung und Verbrennung gleichermaßen beeinflussen. Die Folge sind neben

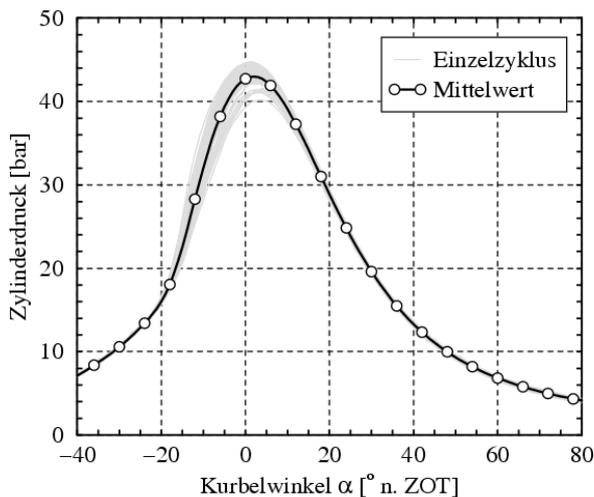


Abb. 7.27: Experimentell ermittelter Druckverlauf der Einzelzyklen und des gemittelten Zyklus für den Betriebspunkt 1 aus Tab. 7.6.

unruhigem Motorlauf vor allem Zündaussetzer und eine unvollständige Verbrennung mit entsprechend hohen Emissionen (Fischer et al. [44]). Zyklenschwankungen charakterisieren sich durch nennenswerte Abweichungen vom gemittelten Zyklus. Exemplarisch ist in Abb. 7.27 für den Betriebspunkt 1 der Druckverlauf mehrerer Einzelzyklen dem gemittelten Zyklus gegenübergestellt. RANS-Simulationen geben solche Zyklenschwankungen nicht wieder. Sie ermöglichen zu den zugehörigen Randbedingungen die Berechnung des mittleren Zyklus und erlauben damit Aussagen bei Änderungen der Betriebsbedingungen, wie im Folgenden für die in Tab. 7.6 dargestellten Betriebspunkte gezeigt wird.

Die Analyse der Verbrennung erfolgt anhand der aus dem Motorprüfstand gewonnenen Indizierdaten. Die thermodynamische Analyse der Druckindizierung (Druckverlaufsanalyse) liefert zusätzlich wichtige energetische Aussagen, wie z.B. über Brennverlauf oder Wandwärmeverluste. Zur Validierung der Simulation werden in gleicher Weise Druck- und Brennverläufe herangezogen. Für die vier Betriebspunkte ist in Abb. 7.28 der Zylinderdruckverlauf des Hochdruckzyklus aus der Simulation dem gemittelten Druckverlauf der Messung gegenübergestellt. Abb. 7.29 zeigt das Integral von berechnetem und gemessenem Brennverlauf (Summenbrennverlauf), die alle auf Basis des selben Druckverlaufsanalyseprogramms ermittelt wurden.

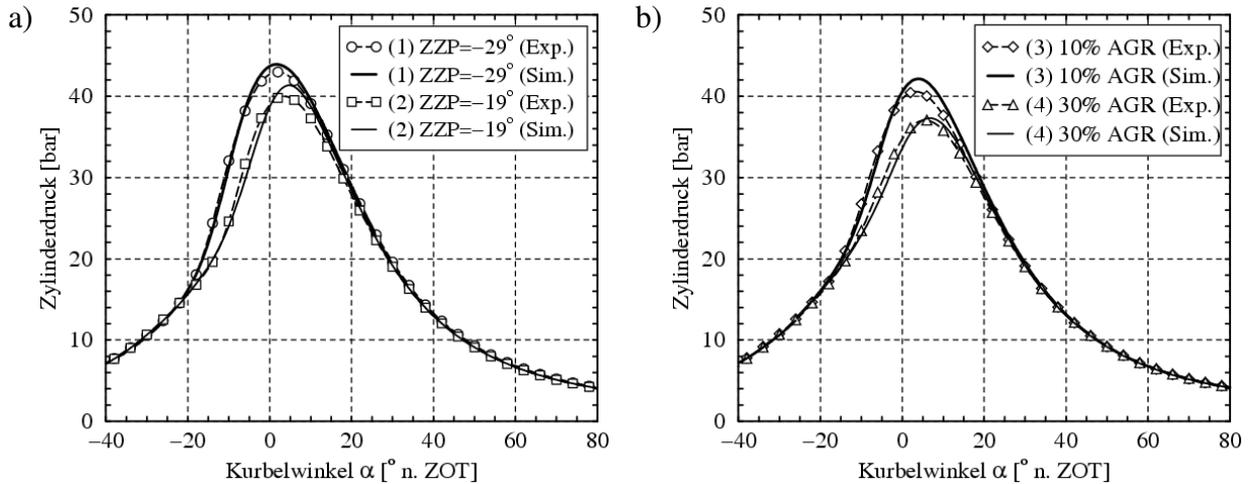


Abb. 7.28: Zylinderdruckverläufe: a) Variation des Zündzeitpunkts (Betriebspunkt 1 und 2) und b) Variation der externen Abgasrückführungsrate (Betriebspunkt 3 und 4).

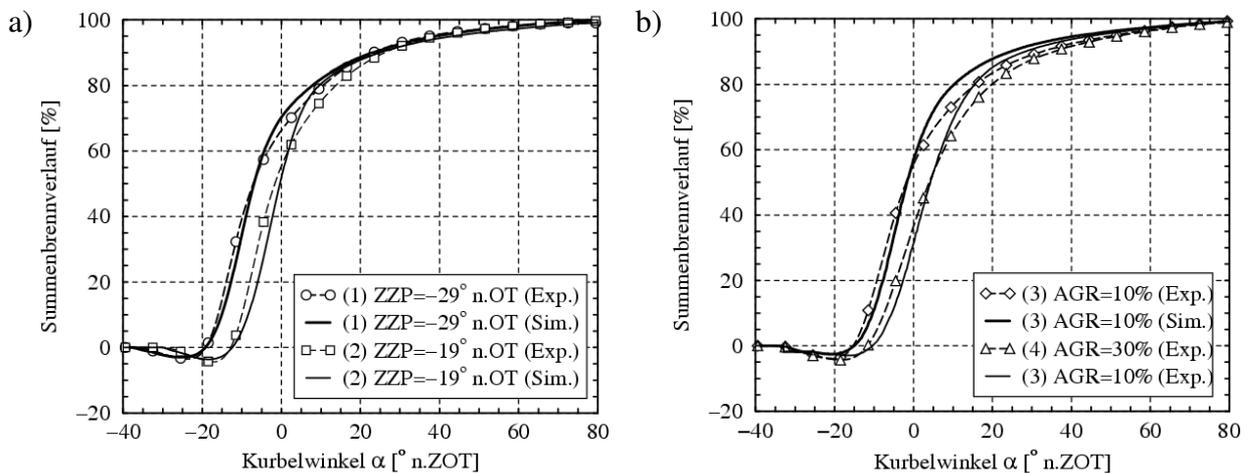


Abb. 7.29: Summenbrennverläufe: a) Variation des Zündzeitpunkts (Betriebspunkt 1 und 2) und b) Variation der externen Abgasrückführungsrate (Betriebspunkt 3 und 4).

Die Übereinstimmung zwischen 3D-Simulation und Messung ist für die vier Betriebspunkte als gut zu bewerten. Die charakteristischen Verbrennungskenngrößen wie Höhe und Lage des Spitzendrucks, 50%-Energieumsatzpunkt sowie die chemische Wärmefreisetzung werden mit einer zufriedenstellenden Genauigkeit abgebildet. Die maximalen Abweichungen der Simulation gegenüber den Messwerten liegen quantitativ bei:

- Maximaldruck: $\Delta p_{max} \leq 1.6 \text{ bar}$
- Lage des Maximaldrucks: $\Delta \alpha_{p_{max}} \leq 2.5^\circ \text{ KW}$
- 50%-Energieumsatzpunkt: $\Delta B_{50} \leq 2.0^\circ \text{ KW}$
- Chemische Wärmefreisetzung: $\Delta Q^c / Q_{Exp}^c \leq 2.5\%$

Die quantitative Bewertung des Summenbrennverlaufs erfolgt an drei charakteristischen Punkten des Energieumsatzes. Der 5%-Umsatzpunkt stellt nach dem eingeleiteten Zündverzug den Brennbeginn und der 90%-Umsatzpunkt das Brennende dar. Der 50%-Umsatzpunkt wird in der Literatur oft als Verbrennungsschwerpunkt² bezeichnet, der wirkungsgradoptimal bei ca. 8° KW

²Strenggenommen ist der Schwerpunkt der Verbrennung durch den geometrischen Flächenschwerpunkt $\alpha_S = A^{-1} \int_{\alpha} \alpha dB$ des Brennverlaufs definiert.

n. ZOT angenommen wird (siehe Spicher [135]). Bei DE-Ottomotoren, die mit Ladungsschichtung betrieben werden, liegt der 50%-Punkt im Allgemeinen früher. Die strenge Kopplung von Einspritz- und Zündzeitpunkt erfordert hier eine Kompromisslösung, die einerseits eine ausreichend frühe Einspritzung mit einer guten Gemischaufbereitung für ein schnelles Ausbrandverhalten mit niedrigen HC-Emissionen beinhaltet und andererseits eine späte Einspritzung für eine verbrauchsoptimale Schwerpunktlage erlaubt.

Die Abweichung von Rechnung und Messung für die drei charakteristischen Umsatzpunkte zeigt Abb. 7.30 anhand der Brenndauern B_{5-50} bzw. B_{50-90} , d.h. der Dauer zwischen 5% und 50% bzw. 50% und 90% Energieumsatz. Daraus geht hervor, dass im Besonderen die erste Hälfte der Verbrennung sehr präzise mit einer Genauigkeit von $\Delta B_{5-50} \leq 1^\circ \text{KW}$ abgebildet wird. Größere Unterschiede treten erst in der zweiten Hälfte der Verbrennung bei zunehmenden Restgasrückföhrtraten auf, die jedoch in einer Größenordnung von maximal $\Delta B_{50-90} \leq 7^\circ \text{KW}$ und für die gesamte Brenndauer von maximal $\Delta B_{5-90} \leq 8^\circ \text{KW}$ vertretbar sind. Als Ursache hierfür ist die Restgasabhängigkeit in der Gleichung (6.10) der laminaren Brenngeschwindigkeit s_l zu nennen, die über einen einfachen linearen Zusammenhang $s_l \sim (1 - f Y_R)$ beschrieben wird.

Als Maß zur Charakterisierung der (spezifischen) Arbeit dient der indizierte Mitteldruck p_{mi} . Er beschreibt die auf das Hubvolumen V_H bezogene Gasarbeit W_{KA} je Arbeitsspiel und berechnet sich für den Hochdruckteil ($-90^\circ \leq \alpha \leq +90^\circ \text{KW n.ZOT.}$) aus:

$$p_{mi,HD} = \frac{W_{KA,HD}}{V_H} \quad \text{mit} \quad W_{KA,HD} = \int_{V(\alpha=-90^\circ)}^{V(\alpha=+90^\circ)} p dV_\alpha \quad (7.4)$$

Für die vier Betriebspunkte sind die Abweichungen des berechneten indizierten Mitteldrucks des Hochdruckteils $p_{mi,HD}$ gegenüber der Prüfstandsindizierung in Abb. 7.31 dargestellt. Die bereits geschilderte gute Übereinstimmung von Simulation und Messung spiegelt sich erwartungsgemäß im indizierten Mitteldruck mit einer maximalen Abweichung von $\frac{\Delta p_{mi,HD}}{p_{mi,HD,Exp}} = \pm 2.2\%$ wider.

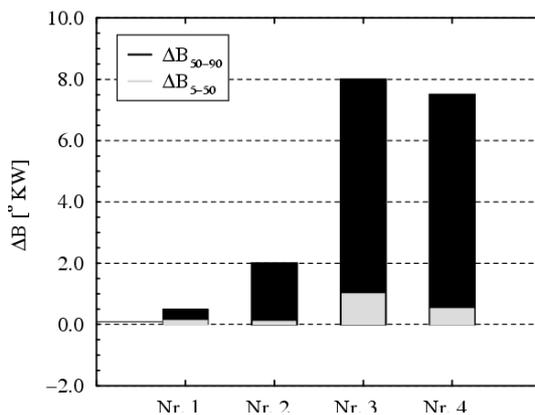


Abb. 7.30: Abweichung der Brenndauer B_{5-50} bzw. B_{50-90} aus der Simulation gegenüber der Messung.

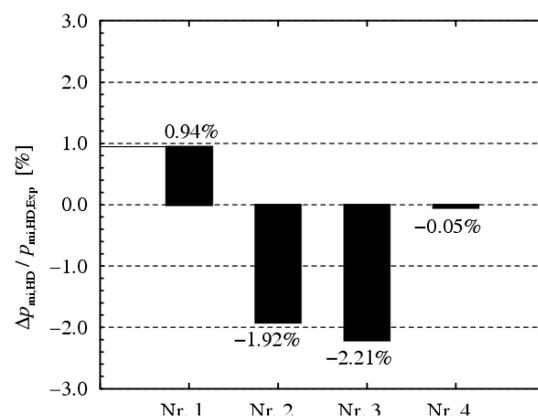


Abb. 7.31: Abweichung des indizierten Mitteldrucks des Hochdruckteils aus der Simulation gegenüber der Hochdruckindizierung.

Ein entscheidender Mehrwert, den die 3D-Simulation in der Brennverfahrensentwicklung gegenüber experimentellen Untersuchungen liefern kann, liegt in der Analyse der lokalen chemischen Reaktionsabläufe und dem daraus gewonnenen Verständnis über die Wirkmechanismen. In Abb. 7.32 und 7.33 sind für die Variation des Zündzeitpunktes und der externen Abgasrückföhrtrate in fünf Schnitten in der Tumble-Ebene die lokale Temperaturverteilung und eine Isofläche der Temperatur $T = 2000 \text{ K}$ für fünf Zeitpunkte von -20° bis $+30^\circ \text{KW n.ZOT}$ dargestellt. Wie

a) $ESB = 38^\circ$ und $ZZP = 29^\circ$ KW v.ZOT
 -20° KW n.ZOT

b) $ESB = 30^\circ$ und $ZZP = 21^\circ$ KW v.ZOT

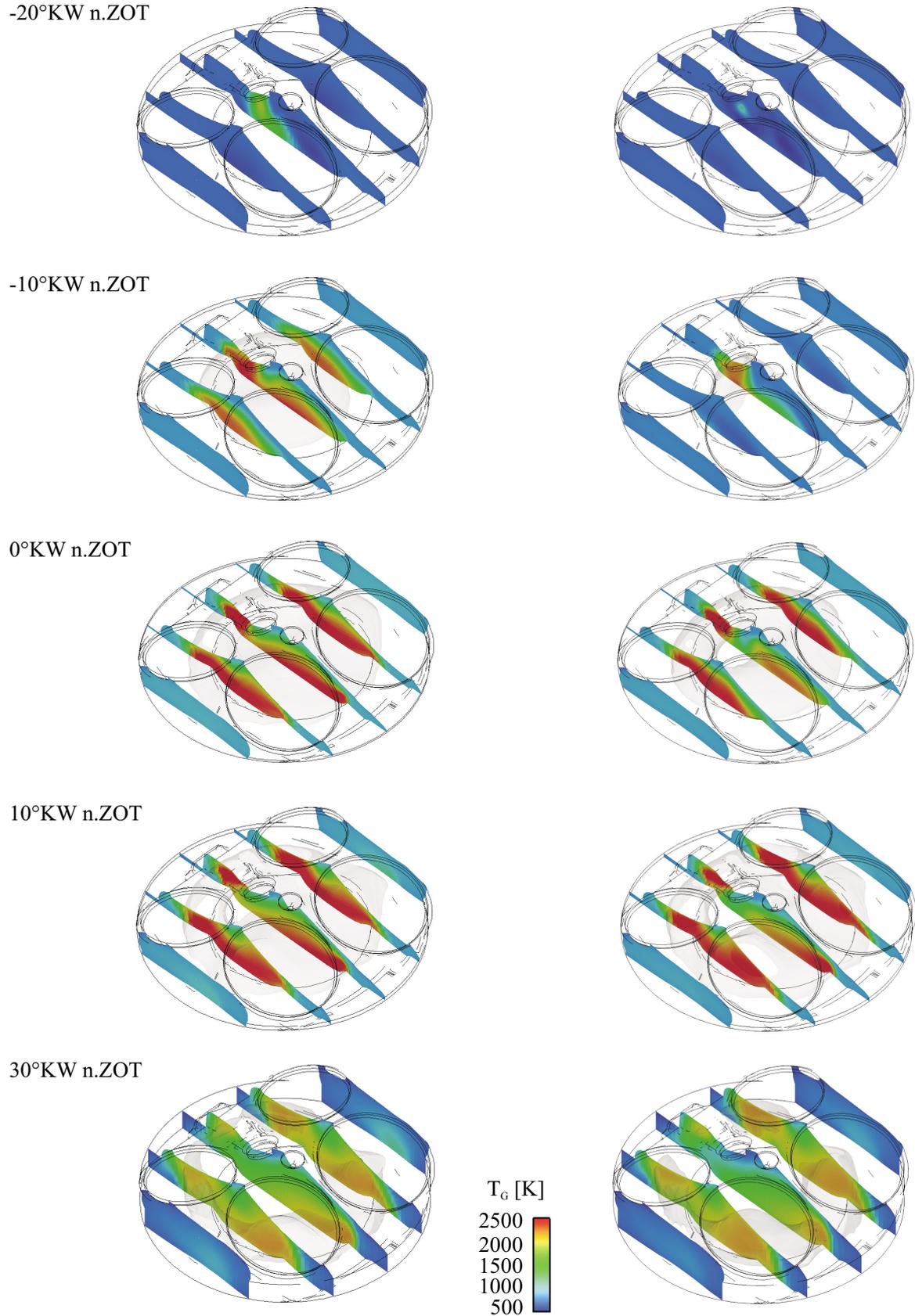
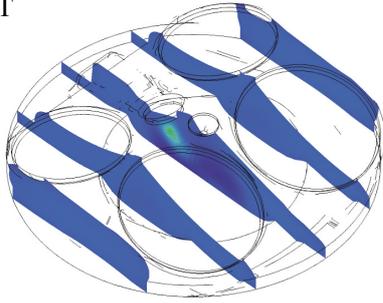
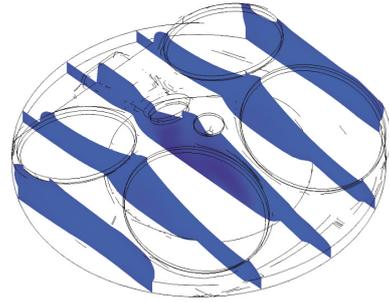


Abb. 7.32: Temperaturverteilung und -Isofläche $T = 2000$ K: a) Betriebspunkt 1 und b) Betriebspunkt 2 aus Tab. 7.6.

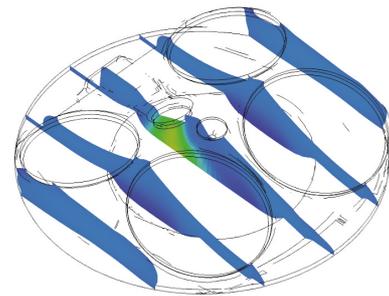
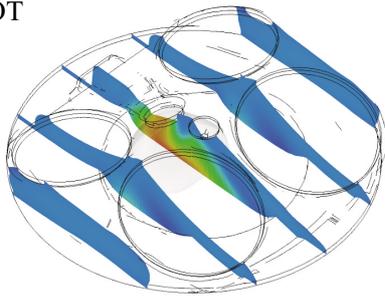
a) $AGR = 10 \%$
 -20°KW n.ZOT



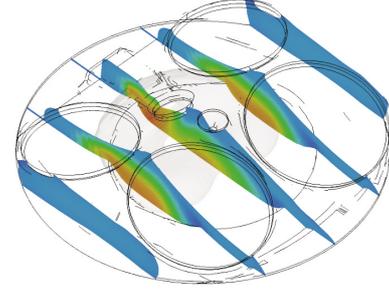
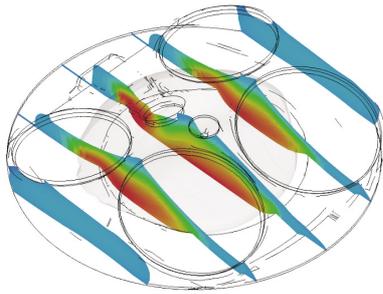
b) $AGR = 30 \%$



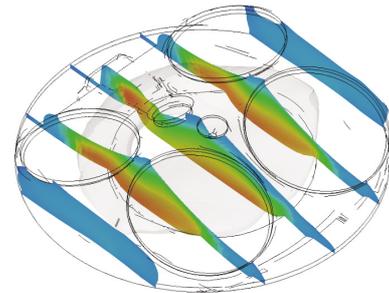
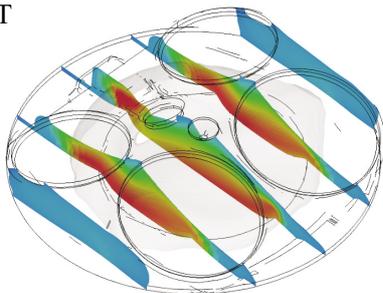
-10°KW n.ZOT



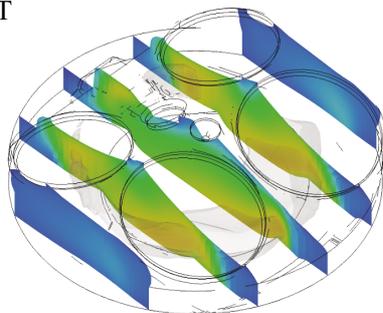
0°KW n.ZOT



10°KW n.ZOT



30°KW n.ZOT



T_g [K]
 2500
 2000
 1500
 1000
 500

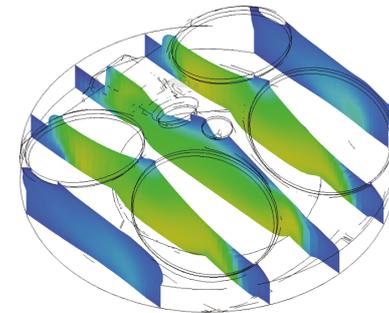


Abb. 7.33: Temperaturverteilung und -Isofläche $T = 2000\text{K}$: a) Betriebspunkt 3 und b) Betriebspunkt 4 aus Tab. 7.6.

daraus zu erkennen ist, bildet sich mit der Einleitung der Verbrennung an der Zündkerze eine turbulente Flammenfront aus, die entlang der durch den Hohlkegelstrahl der Piezo-A-Düse gebildeten torusförmigen Gemischwolke fortschreitet und sich an der zur Zündkerze gegenüberliegenden Seite wieder schließt. Die Verbrennung läuft in allen vier Betriebspunkten zentral mit geringen Wandwärmeverlusten ab. Im Vergleich der Betriebspunkte 1 und 2 in Abb. 7.32 ist in beiden Fällen eine ungünstig frühe Schwerpunktlage mit bis zu $H_{50} = -7^\circ$ KW v.ZOT zu beobachten. Auch die lokalen Temperaturen liegen im Hinblick auf die NO_x -Emissionen ungünstig hoch. Eine deutlich günstigere Lage des Verbrennungsschwerpunkts sowie eine Abnahme der Verbrennungstemperaturen ist mit zunehmender externer Restgasrückführrate zu sehen (siehe Abb. 7.33). Bereits bei 10% und im Besonderen bei 30% externem Restgasgehalt ist eine deutliche Senkung der lokalen Temperaturen zu erkennen. Allerdings verzögert sich die Flammenfrontausbreitung aufgrund des höheren Restgasgehalts bereits während ihrer Entstehung bei der Zündung sowie im weiteren Verbrennungsablauf. Als Folge stellen sich entsprechend lange Brenndauern ein.

Dieses Beispiel zeigt die Möglichkeiten für die operative Anwendung der 3D-CFD-Simulation in der Brennverfahrensentwicklung. Über die standardmäßige Anwendung hinaus, die heute vorwiegend die Analyse der „kalten“ Strömung während des Ladungswechsels betrifft, können nun auch Einflüsse von Gemischbildungs- und Verbrennungsparameter in jeweils unterschiedlichen Brennraumgeometrien und Betriebsbedingungen analysiert, interpretiert und schließlich optimiert werden. Hierzu zählen beispielsweise Untersuchungen zum Restgaseinfluss, Einspritzzeitpunkt, -taktung und -verlaufsform, der Wechselwirkung des Einspritzstrahls mit der Ladungsbewegung sowie die Einleitung der Zündung hinsichtlich einer günstigen Verbrennungsschwerpunktlage bei gleichzeitig günstigem Ausbrandverhalten.

Kapitel 8

Zusammenfassung und Ausblick

8.1 Zusammenfassung

Die Senkung des Kraftstoffverbrauchs und der Schadstoffemissionen von verbrennungsmotorischen Antrieben sind die zentralen technologischen Schwerpunkte bei der Brennverfahrensentwicklung. Bei Ottomotoren ist die Benzin-Direkteinspritzung mit strahlgeführtem Brennverfahren ein richtungweisendes Konzept zur Erfüllung der ambitionierten CO₂-Emissionsziele. Im Entwicklungsprozess dieser neuen Brennverfahren ist es unumgänglich, 3D-CFD-Simulationen zur Vorauswahl von Parametern und zur Gewinnung eines verbesserten Verständnisses über die komplexen Mechanismen innermotorischer Phänomene einzusetzen. Den hohen Anforderungen, die dadurch an die 3D-Simulation bezüglich Vorhersagefähigkeit und Effizienz gestellt werden, muss durch ein problemorientiertes Modellierungskonzept Rechnung getragen werden. Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurde ein konsistentes Gesamtmodell vorgestellt, welches eine durchgängige 3D-Berechnung, beginnend bei der Düseninnenströmung über die Gemischbildung bis hin zur Verbrennung, von Ottomotoren mit strahlgeführten Brennverfahren und Piezo-A-Düsen erlaubt.

Der Gemischbildung kommt bei strahlgeführten Brennverfahren die entscheidende Bedeutung zu, da nachfolgende Prozesse wie Zündung und Verbrennung maßgeblich davon abhängen. Moderne nach außen öffnende Piezo-A-Düsen erfüllen die hohen Anforderungen hinsichtlich Zerstäubungsgüte und Strahlstabilität. Aufgrund ihrer extrem kleinen Abmessungen nimmt mit ihnen aber auch die Sensitivität der Strahlausbreitung und Randwirbelbildung von der Düseninnenströmung zu. Der Herausforderung, die sensitiven Strömungsphänomene numerisch abzubilden, wurde durch ein neues Konzept Rechnung getragen, dessen tragende Säulen die Kopplung aus Düseninnenströmung und Gemischbildung, der Primärzerfall und die turbulente Dispersion sind. Die mehrphasige Düseninnenströmung wird über Betrag und Richtung des mittleren Strömungsimpulses sowie der turbulenten Längenskalenverteilung am Düsenaustritt an die Gemischbildung angekoppelt. Die Lagrange'sche Modellierung des sich anschließenden primären Strahlaufbruchs und Tropfenzerfalls erfolgt unter der Annahme, dass die Strömungsturbulenz aus der Düse den verantwortlichen Zerfallsmechanismus darstellt. Die resultierenden Tropfengrößen stehen dabei in Korrelation mit dem Spektrum turbulenter Längenskalen aus der Düseninnenströmung. Dieses Modellierungskonzept beschreibt in integraler Form den Primärzerfall unter Berücksichtigung der wesentlichen Kenngrößen der Düseninnenströmung und ermöglicht so die Abbildung von düsenspezifischen Sensitivitäten bei akzeptablen Rechenzeiten.

Eine entscheidende Bedeutung bei der Simulation der Einspritzung kommt der turbulenten Dispersion zu, da sie maßgeblich die Strahlausbreitung prägt. In dieser Arbeit wurde ein neues

Konzept vorgestellt, welches die turbulente Dispersion in Analogie zur Brown'schen Molekularbewegung über eine Fokker-Planck-Gleichung beschreibt. Für die Verdampfung wurde ein Mehrkomponentenansatz nach Tanim und Hallett [147] gewählt und für die innermotorische Anwendung weiterentwickelt. Auf Basis der kontinuierlichen Thermodynamik beschreibt das Modell die Kraftstoffkomposition statistisch und bietet eine recheneffiziente Lösung bei angemessenem Detaillierungsgrad. Den numerisch kritischen Diskretisierungsgesichtspunkten von Raum und Statistik des Lagrange'schen Strahlmodells wurde durch ein strahladaptives Rechengitter mit Düsenaustrittsauflösung und einer angepasst hohen Partikelanzahl Rechnung getragen.

Die ottomotorische Verbrennung von strahlgeführten Brennverfahren ist im Teillastbetrieb mit Schichtladung durch eine Überlagerung von Vormisch- und Diffusionsverbrennung im teilweise vorgemischten Gas charakterisiert. Die Schwierigkeit liegt darin, die stark gekoppelten physikalisch-chemischen Prozesse so zu beschreiben, dass die Wärmefreisetzung korrekt wiedergegeben wird. Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurde hierfür das 7-Spezies-PDF-Flammenfaltungsmodell entwickelt, welches das Eingleichungs-Flammenfortschrittsmodell von Weller [159] in einer modifizierten Form für die turbulente Vormischverbrennung und ein „Flamelet“-Modell basierend auf dem Konzept von Steiner [139] für die turbulente Diffusionsverbrennung kombiniert. Mit sieben Spezies erlaubt das Modell die repräsentative Abbildung der chemischen Wärmefreisetzung, das auch die Zwischenproduktbildung in den kraftstoffreichen Zonen beinhaltet. Der Turbulenzeinfluss auf den lokalen Mischungszustand wird sowohl für Flammenfortschritt als auch im „Flamelet“ statistisch durch eine vordefinierte PDF berücksichtigt.

Für die Modellvalidierung wurde eine Untergliederung nach Einzelprozessen vorgenommen. Das Strahlmodell für A-Düsen wurde anhand von optischer Diagnostik in einer Hochdruckkammer am Beispiel von zwei Injektoren validiert. Mit dem gekoppelten Konzept aus Düseninnenströmung und Gemischbildung wurde gezeigt, dass sich die nur geringen geometrischen Unterschiede der beiden Injektoren in Form unterschiedlicher Strömungsgeschwindigkeiten und Turbulenzverteilungen am Düsenaustritt wiederfinden. Zusammen mit den aus dem unterschiedlichen Primäraufbruchsverhalten resultierenden Tropfengrößen wurde das stark differenzierte diagnostisch beobachtete Strahlausbreitungsverhalten qualitativ und quantitativ gut abgebildet. Das Mehrkomponentenverdampfungsmodell wurde am ruhenden Einzeltropfen erfolgreich validiert und für die Einspritzung unter motorischen Bedingungen plausibilisiert. Die im Experiment beobachtete Volatilität des Kraftstoffs wurde qualitativ wiedergegeben.

Die Validierung des Gesamtmodells erfolgte an einem Einzylinderaggregat mit Benzin-Direkteinspritzung und strahlgeführtem Brennverfahren mit Piezo-A-Düse. Um die Gültigkeit des Modells für einen breiten Anwendungsbereich sicherzustellen, wurden vier Teillast-Betriebspunkte im Schichtladungsbetrieb mit variiertem Einspritz- und Zündzeitpunkt sowie unterschiedlicher externer Restgasrückführrate untersucht. Die Güte und Qualität des Simulationsergebnisses kann im Vergleich zu den Indizierdaten vom Motorprüfstand als ausgesprochen gut bewertet werden. Die für ottomotorische Brennverfahren charakteristischen Kenngrößen, wie Lage und Betrag des Druckmaximums, Lage des Verbrennungsschwerpunkts und integrale chemische Energieumsetzung, werden quantitativ richtig abgebildet.

Abschließend bleibt festzuhalten, dass das in dieser Arbeit vorgestellte Modellierungskonzept sowohl in der frühen Konzept- und Designphase als auch im seriennahen Optimierungsprozess von ottomotorischen Brennverfahren mit Schichtladung gewinnbringend eingesetzt werden kann.

8.2 Ausblick

Im Rahmen der durchgeführten Validierungsstudie konnten auch Potenziale identifiziert werden, die auf eine noch bessere numerische und physikalische Beschreibung der Einzelprozesse schließen lassen. Sie betreffen die Modellierung der Strahldynamik und des Flammenfortschritts.

Die strahldynamische Modellierung erfordert, wie alle anderen physikalischen Prozesse auch, eine angepasst feine räumliche Diskretisierung zur Auflösung der relevanten Längenskalen. Für die Flüssigphase ergibt sich in Lagrange'scher Betrachtungsweise die Schwierigkeit, dass mit der Netzfeinheit auch die Anzahl an numerischen Partikeln hinsichtlich einer konvergenten statistischen Lösung der Tropfeneigenschaften zunimmt und damit natürlich auch die Rechenzeit. Eine Lösung für diese Problematik versprechen gekoppelte Konzepte, welche für die disperse Phase im Fernbereich der Düse nach wie vor eine konventionelle Lagrange'sche Formulierung verwenden, im kritischen Nahbereich hingegen die Flüssigphase in Euler'scher Betrachtungsweise beschreiben.

Die Modellierung des Flammenfortschritts mit dem Ansatz von Weller [159] hat für die Schichtladungsverbrennung gezeigt, dass es durch den Diffusionsterm zu Rückreaktionen in der Flamme kommt, d.h. unverbrannter Kraftstoff aus verbranntem Gemisch entsteht. Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurde diese Problematik durch Elimination des Diffusionsterms umgangen. Für eine zukünftige Lösung wäre ein G -Gleichungsmodell zu bevorzugen, wie es von Kraus [78] vorgestellt wurde. Darüber hinaus wäre als sinnvolle Erweiterung des hier vorgestellten Ansatzes die Modellierung von Schadstoffen, wie z.B. von Stickoxiden NO_x , vorstellbar.

Literaturverzeichnis

- [1] Abraham, J. (1997): „*What is Adequate Resolution in the Numerical Computations of Transient Jets*“, SAE 970051
- [2] ACEA (1999): „*ACEA's CO₂ Commitment*“, WWW-Server <http://www.acea.be>, Belgien
- [3] Achleitner, E., Kendlbacher, C., Klepatsch, M., Pasqui, R. und Schmitt, B. (2001): „*Gasoline Direct Injection Systems for High Performance Engines*“, ATA Seminar, 01A5015
- [4] Adachi, M., McDonell, V.G., Tanaka, D., Senda, J. und Fujimoto, H. (1997): „*Characterization of Fuel Vapor Concentration Inside a Flash Boiling Spray*“, SAE 970871
- [5] Albina, F.O., Muzaferija, S. und Peric, M. (2001): „*Numerische Simulation von Düseninnenströmungen und vom Strahlzerfall*“, Spray 2001, TU Hamburg-Harburg
- [6] Altenschmidt, F., Bertsch, D., Bezner, M., Laudenbach, N., Zahn, M., Schaupp, U., Kaden, A. und Reinhardt, N. (2006): „*Die Analyse des Entflammungsvorganges von Ottomotoren mit Direkteinspritzung im Schichtbetrieb*“, 7. Int. Symp. für Verbrennungsdiagnostik
- [7] Amsden, A., O'Rourke, P.O. und Butler, T.D. (1985): „*KIVA-II: A Computer Program for Chemically Reactive Flows*“, Los Alamos National Laboratory, New Mexico, LA-11560-MS
- [8] Amsden, A. (1993): „*KIVA-3 - A KIVA Program with Block-Structured Mesh for Complex Geometries*“, Los Alamos National Laboratory, New Mexico 87545
- [9] Ansys Inc. (2005): „*Ansys ICEM CFD 5.1 User Manual*“, Benutzerhandbuch
- [10] Arkhipov, V.A., Ratanov, G.S. und Trofimov, V.F. (1978): „*Experimental Investigation of the Interaction of Colliding Droplets*“, J. Appl. Mech. Tech. Phys., Band 2, S. 73-77
- [11] AVL List (2004): „*FIRE Version 8 - CFD Solver*“, Benutzerhandbuch
- [12] Befrui, B., Kneer, R., Breuer, S., Reckers, W., Robart, D., Wanlin, H. und Weiten, C. (2002): „*Investigation of a DISI Fuel Injector for a Close-Arranged Spray-Guided Combustion System*“, SAE 2002-01-1133, SP-1693
- [13] Bellman, R. und Pennington, R.H. (1954): „*Effects of Surface Tension and Viscosity on Taylor Instability*“, Quarterly of Appl. Math., Band 12
- [14] Berg, E.v., Alajbegovic, A., Tatschl, R., Krüger, C. und Michels, U. (2001): „*Multiphase Modelling of Diesel Sprays with the Eulerian/Eulerian Approach*“, ILASS Europe 2001
- [15] Bianchi, G.M. und Pelloni, P. (1999): „*Modeling the Diesel Fuel Spray Breakup by using a Hybrid Model*“, SAE 1999-01-0226

- [16] Bianchi, G.M., Pelloni, P., Corcione, F.E., Alloca, L. und Luppino, F. (2001): „*Modeling Atomization of High-Pressure Diesel Sprays*“, J. of Eng. for Gas Turbines and Power, Band 123, S. 419-427
- [17] Borghi, R. (1985): *On the Structure and Morphology of Turbulent Premixed Flames*“, Recent Advances in the Aerospace Sciences, (C. Casci, Ed.), Plenum Publishing Corporation, New York, S. 117-138
- [18] Boussinesq, J. (1877): „*Theorie de l'Écoulement Tourbillant*“, Memoires presents par Divers Savants Sciences Math. et Phys., Academie de Sciences, Paris, Band 23, S. 46
- [19] Brazier-Smith, P.R., Jennings, S.G. und Latham, J. (1975): „*The Interaction of Falling Water Drops: Coalescence*“, Proc. R. Soc. London A., Band 326, S. 393-408
- [20] Burke, S.D., Schumann, T.E.W. (1928): „*Diffusion Flames*“, Ind. Eng. Chem., 20, p.998
- [21] CD-Adapco (2003): „*The es-ice User Manual*“, Benutzerhandbuch
- [22] CD-Adapco (2004): „*StarCD Methodology*“, Benutzerhandbuch
- [23] Chigier, N. und Reitz, R.D. (1996): „*Regimes of Jet Breakup and Breakup Mechanisms*“, AIAA Series Progress in Astronautics and Aeronautics, Recent Advances in Spray Combustion: Spray Atomization and Drop Burning Phenomena, Band 1
- [24] Chin, J.S. und Lefebvre, A.H. (1983): „*Steady-State Evaporation Characteristics of Hydrocarbon Fuel Drops*“, AIAA, Band 21, Nr. 10, S. 1437-1443
- [25] Chou, G.F. und Prausnitz, J.M. (1986): „*Adiabatic Flash Calculations for Continuous and Semi-Continuous Mixtures using an Equation of State*“, Fluid Phase Equilibria, Band 30, S. 75-82
- [26] Clark, C.J. und Dombrowski, N. (1972): „*Aerodynamic Instability and Disintegration of Inviscid Liquid Sheets*“, Proc. R. Soc. Lond. A., Band 329, S. 467-478
- [27] Clift, R., Grace, J.R. und Weber, M.E. (1978): „*Bubbles, Drops and Particles*“, Academic Press, New York, S. 26 & S. 339-347
- [28] Commission of the European Communities (2004): „*Implementing the Community Strategy to reduce CO₂ Emissions from Cars: Fourth annual report on the effectiveness of the strategy*“, Comm. from the Commission to the Council and the European Parliament, Brüssel
- [29] Crowe, C.T., Sharma, M.P. und Stock, D.E. (1977): „*The Particle-Source-in-Cell Method for Gas Droplet Flow*“, ASME J. of Fluids Eng., Band 99, S. 325-332
- [30] Crowe, C.T. (1982): „*Review - Numerical Models for Dilute Gas-Particle Flows*“, ASME J. of Fluids Eng., Band 104, S. 297-303
- [31] Crowe, C.T. (1986): „*Two-Fluids vs. Trajectory Models: Range of Applicability*“, ASME FED, Band 35, S. 91-95
- [32] Crowe, C.T., Troutt, T.R. und Chung, J.N. (1996): „*Numerical Models for Two-Phase Turbulent Flows*“, Annual Review of Fluid Mech., Band 28, S. 11-43

- [33] Damköhler, G. (1940): „*Der Einfluss der Turbulenz auf die Flammgeschwindigkeit in Gasgemischen*“, In Zeitschrift für Elektrochemie, Band 46, Nr. 11, S. 601-652
- [34] Dombrowski, N. und Hooper, P.C. (1962): „*The Effect of Ambient Density on Drop Formation in Sprays*“, Chem. Eng. Science, Band 17, S. 291-305
- [35] Dombrowski, N. und Johns, W.R. (1963): „*The Aerodynamic Instability and Disintegration of Viscous Liquid Sheets*“, Chem. Eng. Science, Band 18, S. 203-214
- [36] Duclos, J.-M., Zolver, M. und Baritaud, T. (1999): „*3-D Modeling of Combustion for DI-SI Engines*“, Oil & Gas Science and Technology, Band 54, Nr. 2, S. 259-264
- [37] Dukowicz, J.K. (1980): „*A Particle-Fluid Numerical Model for Liquid Sprays*“, J. Comp. Phys., Band 35, S. 229-253
- [38] Durst, F., Milojevic, D. und Schönung, R. (1984): „*Eulerian and Lagrangian Predictions of Particulate Two-Phase Flows: A Numerical Study*“, Appl. Math. Modelling, S. 101-115
- [39] Eichlseder, H., Baumann, E., Müller, P. und Neugebauer, S. (2000): „*Chancen und Risiken von Ottomotoren mit Direkteinspritzung*“, MTZ, Nr. 61
- [40] Elghobashi, S. (1991): „*Particle-Laden Turbulent Flows: Direct Simulation and Closure Models*“, Appl. Scientific Research, Band 48, S. 301-314
- [41] Europäisches Parlament (2006): „*Strengere Abgasnormen für Kraftfahrzeuge: EP beschließt Euro 5 und Euro 6 Normen*“, Pressebericht, REF: 20061207IPR01151, <http://www.europarl.europa.eu>
- [42] Faeth, G.M. (1979): „*Spray Combustion Models - A Review*“, 17th Aerospace Sc. Meeting, AIAA 79-0293
- [43] Favre, A. (1969): „*Statistical Equations of Turbulent Gases*“, Problems of Hydrodynamics and Continuum Mechanics, S. 231-266
- [44] Fischer, J., Kettner, M., Spicher, U. und Velji, A. (2005): „*Zylinderinnenströmung und zyklische Schwankungen bei der Benzin-Direkteinspritzung*“, MTZ, März 2005
- [45] Fraidl, K., Kappus, P., Piock, W. und Fürhapter, A. (2003): „*Zukünftige Ottomotoren - High Tech oder Low Cost*“, 5. Int. Stuttgarter Symposium, S. 173-189
- [46] Fröhlich, K., Borgmann, K. und Liebl, J. (2003): „*Potenziale zukünftiger Verbrauchstechnologien*“, 24. Int. Wiener Motorensymposium
- [47] Frohn, A. (1988): „*Einführung in die kinetische Gastheorie*“, 2. Aufl., AULA-Verlag, ISBN 3-89104-478-X
- [48] Gel'Fand, B.E. Gubin, S.A. und Kogarko, S.M. (1974): „*Various Forms of Drop Fractionation in Shock Waves and their Special Characteristics*“, Inzh.-Fiz. Zh., Band 27, S. 119-126
- [49] Gore, R.A. und Crowe, C.T. (1989): „*Effect of Particle Size on Modulating Turbulence Intensity*“, Int. J. Multiphase Flow, Band 15, S. 279-285

- [50] Gosman, A.D. und Ionnides, E. (1981): „*Aspects of Computer Simulation of Liquid-Fuelled Combustors*“, 19th Aerospace Science Meeting, St. Louis, AIAA 81-0323
- [51] Gülder, Ö.L. (1984): „*Correlation of Laminar Combustion Data for Alternative S.I. Engine Fuels*“, SAE 841000
- [52] Haenlein, A. (1932): „*Über den Zerfall eines Flüssigkeitsstrahls*“, NACA TM 659
- [53] Hallett, W.L.H. (1997): „*A Simple Quasi-Steady Droplet Evaporation Model Using Continuous Thermodynamics*“, The Comb. Inst., Canadian Section, Spring Technical Meeting
- [54] Hallett, W.L.H. (2000): „*A Simple Model for the Vaporization of Droplets with Large Number of Components*“, Combustion and Flame, Band 121, S. 334-344
- [55] Hallett, W.L.H. und Grimwood, C. (2001): „*A Simple Continuous Mixture Droplet Evaporation Model with Multiple Distribution Functions*“, The Comb. Inst., Canadian Section, Spring Technical Meeting, S. 31.1-31.6
- [56] Han, Z., Parrish, S., Patrick, V.F. und Reitz, R.D. (1997): „*Modeling Atomization Processes of Pressure-Swirl Hollow-Cone Fuel Sprays*“, Atom. & Sprays, Band 7, S. 663-684
- [57] Harstad, K.G., Le Clerq, P.C. und Bellan, J. (2002): „*A Statistical Model of Multi-Component Fuel Drop Evaporation for Many-Droplet Gas-Liquid Flow Simulations*“, Int. J. Multiphase Flow
- [58] Herweg, R. (1992): „*Die Entflammung brennbarer, turbulenter Gemische durch elektrische Zündanlagen - Bildung von Flammkernen*“, Dissertation, Universität Stuttgart
- [59] Heukelbach, K. und Tropea, C. (2001): „*Influence of the Inner Flow Field of Flat Fan Pressure Atomizers on the Disintegration of the Liquid Sheet*“, ILASS Europe, Zürich, Schweiz
- [60] Heukelbach, K., Jakirlić, S., Nakić R. und Tropea, C. (2002): „*Influence of Turbulence on the Stability of Liquid Sheets*“, ILASS Europe, Zaragoza, Spanien
- [61] Heywood, J.B. (1988): „*Internal Combustion Engine - Fundamentals*“, McGraw-Hill Verlag, ISBN 0-07-028637-X
- [62] Hiroyasu, H., Kadota, T. und Arai, M. (1974): „*Fuel Spray Characterization in Diesel Engines*“, Universität Hiroshima, Japan, S. 388-392
- [63] Hiroyasu, H., Shimizu, M. und Arai, M. (1982): „*The Breakup of High Speed Jets in a High Pressure Gaseous Atmosphere*“, Proceedings of ICLASS-82
- [64] Hiroyasu, H., Arai, M. und Shimizu, M. (1991): „*Breakup Length of a Liquid Jet and Internal Flow in a Nozzle*“, Proceedings of ICLASS-91
- [65] Hsiang, L.-P. und Faeth, G.M. (1993): „*Drop Properties after Secondary Breakup*“, Int. J. Multiphase Flow, Band 18, S.635-652
- [66] Hubbard, G.L., Denny, V.E. und Mills, A.F. (1975): „*Droplet Evaporation: Effects of Transient and Variable Properties*“, Int. J. Heat and Mass Transfer, Band 18, S. 1003-1008

- [67] Huh, K.Y. und Gosman, A.D. (1991): „*A Phenomenological Model of Diesel Spray Atomization*“, Int. Conf. on Multiphase Flow, Tsukuba
- [68] Huh, K.Y., Lee, E. und Koo, J.-Y. (1998): „*Diesel Spray Atomization Model considering Nozzle Exit Turbulence Conditions*“, Atom. & Sprays, Band 8, S. 453-469
- [69] Isay, W.H. (1981): „*Kavitation*“, Schiffahrts-Verlag Hansa C. Schroedter & Co Hamburg, ISBN 3-8770-0035-5
- [70] Iyer, C.O. und Han, Z. (2002): „*Fuel Spray Modeling of Outward-Opening Pintle Injectors*“, 15th ILASS America, Madison
- [71] Jiang, Y., Umemura, A. und Law, C.K. (1992): „*An Experimental Investigation on the Collision Behaviour of Hydrocarbon Drops*“, J. Fluid Mech., Band 234, S. 171-190
- [72] Jones, W.P. und Whitelaw, J.H. (1982): „*Calculation Methods for Turbulent Flows: A Review*“, Comb. and Flame, Band 48, S. 1-26
- [73] Kaube, O. (1999): „*3D-Simulation der Verbrennung im direkteinspritzenden Ottomotor bei Schichtladebetrieb*“, Diplomarbeit, Universität Stuttgart
- [74] Kemmler, R., Frommelt, A., Kaiser, T., Schaupp, U., Schommers, J. und Waltner, A. (2002): „*Thermodynamischer Vergleich ottomotorischer Brennverfahren unter dem Fokus minimalen Kraftstoffverbrauchs*“, 11. Aachener Kolloquium
- [75] Kim, D., Desjardins, O., Herrmann, M. und Moin, P. (2006): „*Toward Two-Phase Simulation of the Primary Breakup of a Round liquid Jet by Coaxial Flow of Gas*“, Center for Turb. Res., Ann. Res. Briefs
- [76] Kong, S.C., Han, Z. und Reitz, R.D. (1995): „*The Development and Application of a Diesel Ignition and Combustion Model for Multidimensional Engine Simulation*“, SAE 950278
- [77] Krüger, Ch. (2001): „*Validierung eines 1-D-Spraymodells zur Simulation der Gemischbildung in direkteinspritzenden Dieselmotoren*“, Dissertation, RWTH Aachen
- [78] Kraus, E. (2006): „*Simulation der vorgemischten Verbrennung in einem realen Motor mit dem Level-Set-Ansatz*“, Dissertation, Universität Tübingen
- [79] Launder, B.E. and Spalding, D.B. (1974): „*Numerical Computation of Turbulent Flows*“, Comp. Meth. in Appl. Mech. and Eng., Band 3, S. 269-289
- [80] Lefebvre, A.H. (1989): „*Atomization and Sprays*“, Hemisphere Publication, ISBN 0-89116-603-3
- [81] Lin, S.P. und Reitz, R.D. (1998): „*Drop and Spray Formation from a Liquid Jet*“, Annual Review Fluid Mech., Band 30, S. 85-105
- [82] Lippert, A.M. (1999): „*Modeling of Multicomponent Fuels with Application to Sprays and Simulation of Diesel Engine Cold Start*“, Dissertation, Eng. Research Center, University of Wisconsin, Madison
- [83] Lippert, A.M., Stanton, D.W., Reitz, R.D., Rutland, C.J. und Hallett, W.L.H. (2000): „*Investigating the Effect of Spray Targeting and Impingement on Diesel Engine Cold Start*“, SAE 2000-01-0269

- [84] Liu, A.B., Mather, D. und Reitz, R.D. (1993): „*Mechanism of Air-Assisted Liquid Atomization*“, Atom. & Sprays, Band 3, S. 55-75
- [85] Lückert, P., Rau, E., Schaupp, U., Vent, G. und Waltner A. (2004): „*Weiterentwicklung der Benzin-Direkteinspritzung bei Mercedes-Benz*“, 13. Aachener Kolloquium
- [86] Mansour, A. und Chigier, N. (1994): „*Effect of Turbulence on the Stability of Liquid Jets and the Resulting Droplet Size Distributions*“, Atom. & Sprays, Band 4, S. 583-604
- [87] Merker, G.P., Schwarz, Ch., Stiesch, G. und Otto, F. (2004): „*Verbrennungsmotoren: Simulation der Verbrennung und Schadstoffbildung*“, Teubner-Verlag, ISBN 3-519-16382-9
- [88] Metgalchi, M. und Keck, J.C. (1982): „*Burning Velocities of Mixtures of Air with Methanol, Isooctane and Indolene at High Pressure and Temperature*“, Comb. & Flame, Band 48, S. 191-210
- [89] Michels, U., Krüger, Ch., König, G., Blessing, M., Schwarz, V. und Merker, G.P. (2004): „*Analysis of the Influence of the Injection Strategy on Cavitating Nozzle Flow, Spray Formation and Combustion in a Heavy Duty Truck Engine. Effects on Spray and Mixture Formation.*“, Thiesel Conf. on Thermo- and Fluid Dynamic Processes in Diesel Engines
- [90] Miesse, C.C. (1955): „*Correlation of Experimental Data on the Disintegration of Liquid Jets*“, Ind. Eng. Chem., Band 47, S. 1690
- [91] Nicholls, J.A. (1972): „*Stream and Droplet Breakup by Shock Waves*“, NASA-SP-194, Eds. D.T. Harris and F.H. Reardon, S. 126-128
- [92] Ohnesorge, W. (1936): „*Die Bildung von Tropfen an Düsen und die Auflösung flüssiger Strahlen*“, Zeitschrift für angewandte Mathematik und Mechanik, Bd. 16, S. 355-358
- [93] O'Rourke, P.J. und Bracco, F.V. (1980): „*Modeling Drop Interactions in Thick Sprays and a Comparison with Experiments*“, I. Mech. E. Conference Publications, S. 101-116
- [94] O'Rourke, P.J. (1981): „*Collective Drop Effects on Vaporization Liquid Sprays*“, Dissertation, University of Princeton
- [95] O'Rourke, P.J. und Amsden, A.A. (1987): „*The TAB Method for Numerical Calculation of Spray Droplet Breakup*“, SAE 872089
- [96] O'Rourke, P.J. 1989: „*Statistical Properties and Numerical Implementation of a Model for Droplet Dispersion in a Turbulent Gas*“, J. of Comp. Phys., Band 83, S. 345-360
- [97] Otto, F. (2000): „*Strömungsmechanische Simulation zur Berechnung motorischer Prozesse*“, Vorlesungsmanuskript, Institut fuer Technische Verbrennung, Universität Hannover
- [98] Oza, R.D. und Sinnamon, J.F. (1983): „*An Experimental and Analytical Study of Flash Boiling Fuel Injection*“, SAE 830596
- [99] Oza, R.D. (1984): „*On the mechanism of Flashing Injection of Initially Subcooled Fuels*“, J. of Fluids Engineering, Band 106, S. 105-109

- [100] Patterson, M.A., Borman, G.L., El Wakil, M.M.O., Uyehara, A. und Myers, P.S. (1994): „*Modeling the Effects of Fuel Injection Characteristics on Diesel Engine Soot and NOx Emissions*“, SAE 940523
- [101] Patterson, M.A. (1997): „*Modeling the Effects of Fuel Injection Characteristics on Diesel Combustion and Emission*“, Dissertation, University of Wisconsin, Madison
- [102] Peters, N. (2000): „*Turbulent Combustion*“, Cambridge University Press, United Kingdom, ISBN 0-521-66082-3
- [103] Pilch, M. und Erdman, C.A. (1987): „*Use of Breakup Time Data and Velocity History Data to predict the Maximum Size of Stable Fragments for Acceleration-Induced Breakup of a Liquid Drop*“, Int. J. of Multiphase Flow, Band 13, S. 741-757
- [104] Putnam, A (1961): „*Integratable Form of Droplet Drag Coefficient*“, ARS J. 31, S. 1467
- [105] Ra, Y. und Reitz, R.D. (2002): „*A Model for Droplet Vaporization for Use in Gasoline and HCCI Engine Applications*“, 15th Annual Conf. on Liq. Atom. & Spray Sys., Madison
- [106] Raimann, J., Arndt, S., Grzeszik, R. und Wörner, P. (2003): „*Vergleich von Zerstäubungskonzepten für die Benzin-Direkteinspritzung*“, Direkteinspritzung im Ottomotor, 4. Tagung, Haus der Technik, Essen
- [107] Ranz, W.E. und Marshall, W.R. Jr. (1952): „*Evaporation from Drops: Part I + II*“, Chem. Eng. Prog., Band 48, S. 173-180
- [108] Ranz, W.E. (1958): „*Some Experiments on Orifice Sprays*“, Can. J. Chem. Eng., Band 36
- [109] Ranz, W.E. (1965): „*On Sprays and Spraying*“, Dept. Eng. Res., Penn. State University, Bulletin 65
- [110] Rao, S., Rutland, C.J. (2002): „*A Flamelet Time Scale Combustion Model for Turbulent Combustion in KIVA*“, 12th Int. Multidim. Eng. Modeling User's Group Meeting, Detroit
- [111] Rayleigh, L. (1878): „*On the Stability of Jets*“, Proc. Lond. Math. Soc.
- [112] Reid, R.D. (1987): „*Modeling Atomization Processes in High-Pressure Vaporizing Spray*“, Atom. & Spray Tech., Band 3, S. 309
- [113] Reid, R.C., Prausnitz, J.M. und Poling, B.E. (1987): „*The Properties of Gases and Liquids*“, McGraw-Hill Verlag, ISBN 0-0705-1799-1
- [114] Reitz, R.D. (1978): „*Atomization and other Breakup Regimes of a Liquid Jet*“, Dissertation, University of Princeton
- [115] Reitz, R.D. und Bracco, F.V. (1982): „*Mechanism of Atomization of a Liquid Jet*“, Phys. Fluids 25 (10), S. 1730-1742
- [116] Reitz, R.D. und Bracco, F.V. (1983): „*Global Kinetics Model and Lack of Thermodynamic Equilibrium*“, Comb. and Flame, Band 53, S. 141
- [117] Reitz, R.D. und Bracco, F.V. (1986): „*Mechanisms of Breakup of Round Liquid Jets*“, Encyclopedia of Fluid Mechanics, S. 233-249

- [118] Reitz, R.D. und Diwakar, R. (1986): „*Effect of Drop Breakup on Fuel Sprays*“, SAE 860469
- [119] Reitz, R.D. und Diwakar, R. (1987): „*Structure of High-Pressure Fuel Spray*“, SAE 870598
- [120] Reitz, R.D. (1987): „*Modeling Atomization Processes in High-Pressure Vaporizing Sprays*“, Atom. & Spray Tech., Band 3, S. 309-337
- [121] Reitz, R.D., Xim, J. und Takabayashi, T. (2001): „*Characteristics of Vaporizing Continuous Multi-Component Fuel Sprays in a Port Fuel Injection Gasoline Engine*“, SAE 2001-01-1231
- [122] Renksizblut, M. und Yuen, M.C (1983): „*Numerical Study of Droplet Evaporation in a High Temperature Air Stream*“, J. Heat Transfer, Band 105, S. 389-397
- [123] Rodi, W. (1978): „*Turbulenzmodelle und ihre Anwendung auf Probleme des Wasserbaus*“, Habilitationsschrift, Universität Karlsruhe
- [124] Rothenwöhrer, M. (2003): „*Einfluss thermodynamisch metastabiler Zustände auf den Zerfall und das Mischungsverhalten von Flüssigkeitsstrahlen*“, Dissertation, TU München
- [125] Rotondi, R., Bella, G., Grimaldi, C. und Postriotti, L. (2001): „*Atomization of High-Pressure Diesel Spray: Experimental Validation of a New Breakup Model*“, SAE 2001-01-1070
- [126] Rowe, P.N. (1961): „*Drag Forces in a Hydraulic Model of Fluidized Bed - Part II*“, Trans. Inst. Chem. Eng. Band 39, S. 175-180
- [127] Schlichting, H., und Gersten, K. (1997): „*Grenzschicht-Theorie*“, 9. Aufl., Springer-Verlag, ISBN 3-540-55744-X
- [128] Schmidt, D.P., Idriss, N., Senecal, P.K., Hoffmann, J., Rutland, C.J., Martin, J. und Reitz, R.D. (1998): „*Pressure-Swirl Atomization in the Near Field*“, Eng. Research Center, University of Wisconsin, Madison
- [129] Schmitz, I., Ipp, W. und Leipertz, A. (2003): „*Einfluss des Kraftstoffes und seiner Temperatur auf das Verdampfungsverhalten bei der Benzin-Direkteinspritzung*“, Direkteinspritzung im Ottomotor IV, Expert-Verlag, ISBN 3-831-692255-4
- [130] Schweitzer, P.H. (1937): „*Mechanism of Disintegration of Liquid Jets*“, J. Appl. Phys., Band 8, S. 513
- [131] Senecal, P.K., Schmidt, D.P., Nouar, I., Rutland, C.J., Reitz, R.D. und Corradini, M.L. (1999): „*Modeling High-Speed Viscous Liquid Sheet Atomization*“, Int. J. Multiphase Flow, Band 25, S. 1073-1097
- [132] Spalding, D.B. (1971): „*Mixing and Chemical Reaction in Steady Confined Turbulent Flames*“, 13th Symp. (Int.) on Comb., The Comb. Inst., Pittsburgh, S. 649-657
- [133] Sparrow, E.M. und Gregg, J.L. (1958): „*The variable Fluid Property Problem in Free Convection*“, Trans. of the ASME, Band 80, S. 879-886

- [134] Spicher, U. und Weimar, H.-J. (1997): „*Stand der Direkteinspritzung bei Ottomotoren*“, Tagung „Motorische Verbrennung“, Haus der Technik, Essen
- [135] Spicher, U. (1998): „*Verbrennungsmotoren*“, Vorlesungsumdruck, Inst. f. Kolbenmaschinen, Universität Karlsruhe (TU)
- [136] Spicher, U. und Weimar, H.-J. (1999): „*Die Benzin-Direkteinspritzung: Zukunftstechnologie für den Ottomotor?*“, Tagung „Motorische Verbrennung“, Haus der Technik, Essen
- [137] Spicher, U., Kölmel, A., Kubach, H. und Töpfer, G. (2000): „*Combustion in Spark Ignition Engines with Direct Injection*“, SAE 2000-01-0649
- [138] Squire, H.B. (1953): „*Investigation of the Instability of a Moving Liquid Film*“, J. Appl. Phys., Band 4, S. 167-169
- [139] Steiner, R. (2004): „*Modellbildung und strömungsmechanische Simulation der dieselmotorischen Verbrennung*“, Dissertation, Universität Karlsruhe
- [140] Stengele, J.-F. (1998): „*Tropfenverdunstung in Hochdruckatmosphäre*“, Dissertation, Universität Karlsruhe
- [141] Stock, D.E. (1996): „*Particle Dispersion in Flowing Gases*“, ASME J. of Fluids Eng., 118, S. 4-17
- [142] Stokes, G.G. (1856): „*On the Effect of the Internal Friction of Fluids on the Motion of Pendulums*“, Trans. Cambr. Phil. Soc., Band 9, Teil 2, S. 8-106
- [143] Stull, D.R., und Prophet, H. (1974): „*JANAF Thermochemical Tables*“, 2nd Ed., NSRDS-NBS 37
- [144] Subramaniam, S. und O'Rourke, P.J. (1998): „*Numerical Convergence of the KIVA-3 Code for Sprays and its Implications for Modeling*“, Theoretical Division, Group T3, Los Alamos National Laboratory
- [145] Subramaniam, S. (2001): „*Statistical Modeling of Sprays using the Droplet Distribution Function*“, Phys. Fluids, Band 13, Nr. 3, S. 624-642
- [146] Subramaniam, S., Colin, C., Pirez da Cruz, A., Vervisch, L. und Bruneaux, G. (2005): „*Modeling Turbulent Mixing of an Evaporating Spray*“, 20th Int. Colloquim on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems (ICDERS), Montreal
- [147] Tanim, J. und Hallett, W.L.H. (1995): „*Continuous Thermodynamics Model for Multicomponent Vaporization*“, Chem. Eng. Science, Band 50, Nr. 18, S. 2933-2942
- [148] Tatschl, R., Künsberg Sarre, C., Alajbegovic, A. und Winklhofer, E. (2000): „*Diesel Spray Breakup Modelling including Multidimensional Cavitation Nozzle Effect*“, 16th ILASS Europe 2000, Darmstadt
- [149] Taylor, G.I. (1963): „*The Shape and Acceleration of a Drop in a High-Speed Air Stream*“, The Scientific Papers of G.I. Taylor, Band III, University Press, Cambridge, S. 457-464
- [150] Taylor, G.I. (1963): „*The Instability of Liquid Surfaces when Accelerated in a Direction Perpendicular to Their Planes*“, The Scientific Papers of G.I. Taylor, Band 3, University Press, Cambridge

- [151] Truckenbrodt, E. (1996): „*Fluidmechanik - Band 1*“, 4. Aufl., Springer-Verlag, ISBN 3-540-58512-5
- [152] Vargaftik, N.B. (1975): „*Tables on the Thermophysical Properties of Liquids and Gases: In Normal and Dissociated States*“, Hemisphere Publication, ISBN 0-470-90310-4
- [153] Velji, A., Günthner, M. und Spicher, U. (2003): „*Direkteinspritzung im Ottomotor mit Fremd- und Kompressionszündung - Brennverfahren der Zukunft?*“, Direkteinspritzung im Ottomotor IV, 5. Tagung, Haus der Technik, Essen
- [154] de Villiers, E., Gosman, A.D. und Weller, H.G. (2004): „*Large Eddy Simulation of Primary Diesel Spray Atomization*“, SAE 2004-01-0100
- [155] Wallis, G.B. (1969): „*One-Dimensional and Two-Dimensional Phase Flow*“, McGraw-Hill Verlag
- [156] Waltner, A., Bezner, M., Lückert, P., Schaupp, U. und Vent, G. (2005): „*Anforderungen und Entwicklungsschwerpunkte für Ottomotoren mit Direkteinspritzung bei Mercedes-Benz*“, 6. Int. Stuttgarter Symposium, Stuttgart
- [157] Warnatz, J., Maas, U. und Dibble, R.W. (1996): „*Verbrennung - Physikalisch-Chemische Grundlagen, Modellierung und Simulation, Experimente, Schadstoffentstehung*“, 2. Auflage, Springer-Verlag, ISBN 3-540-61546-6
- [158] Weber, C. (1931): „*Zum Zerfall eines Flüssigkeitsstrahls*“, Zeitschrift für angewandte Mathematik und Mechanik, Dresden
- [159] Weller, H.G. (1993): „*The Development of a New Flame Area Combustion Model using Conditional Averaging*“, Thermo-Fluids Section Report TF/9307, Imp. College, London
- [160] Weller, H.G., Uslu, S., Gosman, A.D., Maly, R.R., Herweg, R. und Heel, R. (1994): „*Prediction of Combustion in Homogeneous-Charge Spark Ignition Engines*“, Proc. Comodia '94, Yokohama
- [161] Weller, H.G., Tabor, G., Gosman, A.D. (1998): „*Application of a Flame-Wrinkling LES Combustion Model to a Turbulent Mixing Layer*“, 27th Symp. (Int.) on Combustion, The Comb. Inst.
- [162] Wenck, H. und Schnieder, Ch. (1993): „*Chemisch-physikalische Daten von Otto- und Dieselmotoren*“, DGMK Deutsche Wissenschaftliche Gesellschaft für Erdöl, Erdgas und Kohle e.V., ISBN 3-9281-6463-5
- [163] Wenyi, C., Powell, C.F., Yue, Y., Narayanan, S., Tate, M.W., Renzi, M.J., Ercan, A., Fontes, E. und Gruner, S.M. (2003): „*Quantitative analysis of highly transient fuel sprays by time-resolved x-radiography*“, Appl. Phys. Letters, Band 83, Nr. 8, S. 1671-1673
- [164] Wiegand, H. (1985): „*Die Einwirkung eines ebenen Strömungsfeldes auf frei beweglichen Tropfen und ihren Widerstandsbeiwert im Reynoldszahlbereich von 50 bis 2000*“, Fortschrittsberichte VDI, Reihe 7, Nr. 120, VDI-Verlag, Düsseldorf, 1987
- [165] Wilms, J. (2005): „*Evaporation of Multicomponent Droplets*“, Dissertation, Universität Stuttgart, ISBN 3-89963-255-9

- [166] Williams, F.A. (1958): „*Spray Combustion and Atomization*“, Phys. Fluids, Band 1, S. 541-545
- [167] Woschni, G. (1970): „*Die Berechnung der Wandwärmeverluste und der thermischen Belastung der Bauteile von Dieselmotoren*“, MTZ 31(12), S. 491-499
- [168] Wu, K.J., Tseng, L.-K. und Faeth, G.M. (1992): „*Primary Breakup in Gas/Liquid Mixing Layers for Turbulent Liquids*“, Atom. & Sprays, Band 2, S. 295-317
- [169] Wu, K.J. und Faeth, G.M. (1993): „*Aerodynamic Effects on Primary Breakup of Turbulent Liquids*“, Atom. & Sprays, Band 3, S. 265-289
- [170] Zajac, L.J. (1979): „*Droplet Breakup in Accelerating Gas Flows, Part 2: Secondary Atomization*“, NASA CR-134479
- [171] Zhu, G.S. und Reitz, R.D. (2002): „*A Model for High-Pressure Vaporization of Droplets of Complex Liquid Mixtures using Continuous Thermodynamics*“, Int. J. Heat and Mass Transfer, Band 45, S. 495-507
- [172] Zuo, B., Gomes, A.M. und Rutland, C.J. (2001): „*Modeling Superheated Fuel Sprays and Vaporization*“, Eng. Research Center, University of Wisconsin, Madison

A Stoffkorrelationen für Realkraftstoffe

In der kontinuierlichen Thermodynamik müssen die thermophysikalischen Eigenschaften des Mehrkomponentenkraftstoffes durch Integration der Stoffkorrelationen für die reinen Stoffe mit Hilfe der zugrunde liegenden kontinuierlichen Verteilungsfunktion bestimmt werden. Im Rahmen der vorliegenden Arbeit werden Stoffkorrelationen herangezogen, wie sie von Tanim und Hallett [147] und Lippert [82] vorgeschlagen wurden.

Laminare Diffusivität der Dampfphase:

Die laminare Diffusion ist eine stoffspezifische Größe. Sie ist gegenüber der turbulenten Diffusion, die stoffunabhängig ist, vergleichsweise klein. Für den Verdampfungsprozess kommt der laminaren Diffusion an der Tropfenoberfläche jedoch die entscheidende Bedeutung zu. Nach Tanim und Hallett [147] können für die drei in Kap. 5 beschriebenen Momente die laminaren Diffusionskoeffizienten aufgrund ihrer ähnlichen Größenordnung als identisch betrachtet werden ($\bar{D} = \hat{D} = \tilde{D}$). Lippert [82] schlägt zur Bestimmung des laminaren Diffusionskoeffizienten den nicht-linearen Ansatz von Fuller (siehe Reid et al. [112]) vor.

$$D = \frac{1.43 \cdot 10^{-7} T^{1.75}}{p \sqrt{M_{L,K}} \left[\sqrt[3]{\sum_{\nu,L}} + \sqrt[3]{\sum_{\nu,K}} \right]^2} \quad \text{mit} \quad M_{L,K} = 2 \left(\frac{1}{M_L} + \frac{1}{\theta_D} \right)^{-1} \quad (\text{A.1})$$

Darin beschreiben T die Temperatur, p den Druck, M_L und θ_D die mittlere Molmasse des Umgebungsgases bzw. Kraftstoffdampfes. Die Summe der atomaren Diffusionsvolumen \sum_{ν} von Luft und Kraftstoff berechnet sich durch

$$\sum_{\nu} = \sum_{i=1}^N \left(n_i \sum_{\nu,i} \right), \quad (\text{A.2})$$

worin n_i die Anzahl der Atome des Elements i beschreibt. Die elementspezifischen atomaren Diffusionsvolumina $\sum_{\nu,i}$ sind in Tab. A.1 gegeben. Ein Vergleich der Diffusivitäten von n-Alkanen nach Fuller und experimentellen Messwerten von Vargaftik [152] zeigt Abb. A.1.

Element:	C	H	Luft
\sum_{ν}	15.9	2.31	19.7

Tab. A.1: Atomare Diffusionsvolumen nach Reid et al. [113].

Kritische Temperatur:

Die kritische Temperatur T_{krit} wird in Analogie zur Siedetemperatur T_S (siehe Gl. (5.23)) über einen linearen Zusammenhang mit der Molmasse θ_{Fl} des Kraftstoffes berechnet [147].

$$T_{krit}(\theta_{Fl}) = a_{krit} + b_{krit} \theta_{Fl} \quad \text{mit} \quad a_{krit} = 440.8 \text{ K}, b_{krit} = 1.21 \frac{\text{K}}{\text{kmol}} \quad (\text{A.3})$$

Ein Vergleich der Korrelation mit Werten aus der Literatur nach Vargaftik [152] zeigt Abb. A.2.

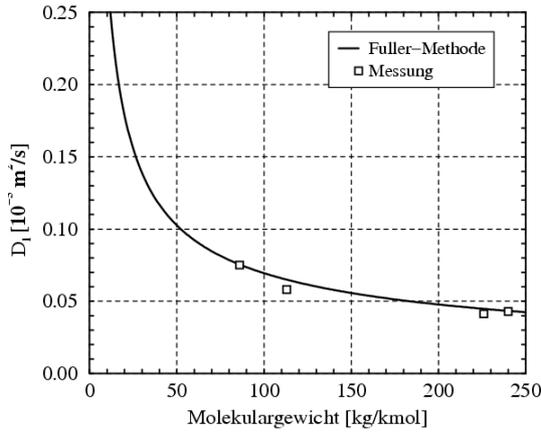


Abb. A.1: Diffusivität der Gasphase für n-Alkane bei $p = 1 \text{ bar}$ und $T = 293 \text{ K}$ nach Fuller (siehe [112]) und Vargaftik [152].

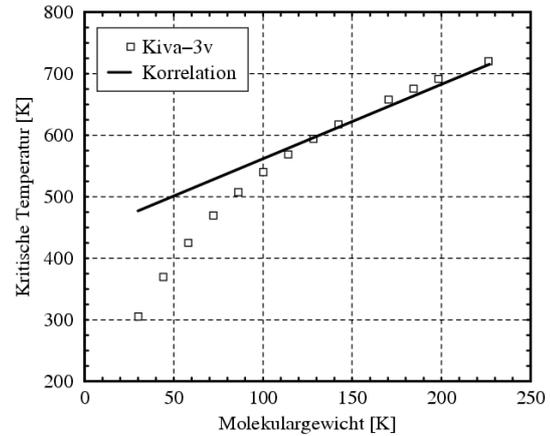


Abb. A.2: Kritische Temperatur für n-Alkane nach Tanim und Hallett [147] und Vargaftik [152].

Verdampfungsenthalpie:

Die Verdampfungsenthalpie eines Reinstoffes ist definiert als die Enthalpiedifferenz des gesättigten Dampfes und der siedenden Flüssigkeit bei derselben Temperatur. In der kontinuierlichen Thermodynamik bestimmt sie sich aus der Integration der mit dem Molenstrom \dot{N} und der zugehörigen Verteilung $f_{Mol}(M)$ gewichteten Verdampfungsenthalpie $\Delta h_v(M)$ des Reinstoffes.

$$\Delta h_v = \frac{1}{\dot{N}} \left[\int_0^\infty \dot{N} \Delta h_v(M) Y_D f_{Mol}(M) \Big|_O dM - \int_0^\infty \Delta h_v(M) c_G \bar{D} \frac{\partial (Y_D f_{Mol}(M))}{\partial r} \Big|_O dM \right] \quad (\text{A.4})$$

Für Homologe Reihen¹ approximierten Tanim und Hallett [147] die Verdampfungsenthalpie mit

$$\Delta h_v(M) = (a_H + b_H M) \left(\frac{T_{krit} - T_G}{T_{krit} - T_S} \right)^{0.38}, \quad (\text{A.5})$$

wobei die Größen $a_H = 2.07 \cdot 10^{-7} \text{ J}/\text{kmol}$, $b_H = 1.35 \cdot 10^{-5} \text{ J}/\text{kg}$ und $(T_{krit} - T_S)^{0.38} = 6.959$ als konstant betrachtet werden. Unter der Annahme konstanter Diffusivität \bar{D} ergibt sich aus der Integration von Gl. (A.4) zusammen mit Gl. (A.5) die Verdampfungsenthalpie der kontinuierlichen Mischung zu:

$$\Delta h_v = \left[a_H + b_H \left(Y_{D,O} \theta_{D,O} - \frac{1}{B_M} (Y_{D,\infty} \theta_{D,\infty} - Y_{D,O} \theta_{D,O}) \right) \right] \left(\frac{T_{krit} - T_G}{T_{krit} - T_S} \right)^{0.38} \quad (\text{A.6})$$

Spezifische Wärmeleitfähigkeit:

Die spezifische Wärmeleitfähigkeit des Gasgemisches λ_G wird nach Tanim und Hallett [147] in linearer Abhängigkeit von der mittleren Molmasse θ_D und linearer Abhängigkeit von den temperaturabhängigen Koeffizienten bestimmt.

$$\lambda_G(\theta_D, T_G) = (a_{KC} + a_{KT} T_G) + (b_{KC} + b_{KT} T_G) \theta_D \quad (\text{A.7})$$

¹Eine Reihe von Stoffen, die sich über eine allgemeine Summenformel darstellen lassen, wie z.B. n-Alkane.

a_{KC}	$\frac{W}{mK}$	a_{KT}	$\frac{W}{mK^2}$	b_{KC}	$\frac{Wkmol}{kgmK}$	b_{KT}	$\frac{Wkmol}{kgmK^2}$
$-2.37 \cdot 10^{-2}$		$1.09 \cdot 10^{-4}$		$3.47 \cdot 10^{-5}$		$-1.91 \cdot 10^{-8}$	

Tab. A.2: Konstanten für die spezifische Wärmeleitfähigkeit nach Tanim und Hallett [147]

Spezifische Wärmekapazität der Flüssig- und Dampfphase:

Die Korrelation für die spezifische Wärmekapazität des flüssigen Kraftstoffes wird nach Tanim und Hallett [147] in linearer Abhängigkeit von der mittleren Molmasse θ_{Fl} der Flüssigkeit beschrieben. Der Einfluss der Tropfentemperatur T_{Tr} fließt über ein Polynom 2. Grades ein.

$$c_{p,Fl}(\theta_{Fl}, T_{Tr}) = \theta_{Fl} (a_{Fl} + b_{Fl}T_{Tr} + c_{Fl}T_{Tr}^2) \quad (A.8)$$

a_{Fl}	$\frac{Jkmol}{kg^2K}$	b_{Fl}	$\frac{Jkmol}{kg^2K^2}$	c_{Fl}	$\frac{Jkmol}{kg^2K^3}$
2.26		$-2.94 \cdot 10^{-3}$		$9.46 \cdot 10^{-6}$	

Tab. A.3: Konstanten für die spezifische Wärmekapazität der Flüssigphase nach Tanim und Hallett [147]

Die spezifische Wärmekapazität $c_{p,D}$ bei konstantem Druck des Kraftstoffdampfes wird nach Chou und Prausnitz [25] analog zur Flüssigphase in linearer Abhängigkeit von der mittleren Molmasse θ_D des Kraftstoffdampfes beschrieben. Der Temperatureinfluss wird über ein Polynom 3. Grades erfasst.

$$c_{p,D}(\theta_D, T_G) = a_c(T_G) + b_c(T_G) \theta_D$$

mit $a_c(T_G) = a_{c,0} + a_{c,1}T_G + a_{c,2}T_G^2 + a_{c,3}T_G^3$ (A.9)

und $b_c(T_G) = b_{c,0} + b_{c,1}T_G + b_{c,2}T_G^2 + b_{c,3}T_G^3$

$a_{c,0}$	$\frac{J}{kgK}$	$b_{c,0}$	$\frac{Jkmol}{kg^2K}$	$a_{c,1}$	$\frac{J}{kgK^2}$	$b_{c,1}$	$\frac{Jkmol}{kg^2K^2}$	$a_{c,2}$	$\frac{J}{kgK^3}$	$b_{c,2}$	$\frac{Jkmol}{kg^2K^3}$	$a_{c,3}$	$\frac{J}{kgK^4}$	$b_{c,3}$	$\frac{Jkmol}{kg^2K^4}$
2.465		$-1.144 \cdot 10^{-2}$		$1.759 \cdot 10^{-5}$		$-5.972 \cdot 10^{-9}$									

Tab. A.4: Konstanten für die spezifische Wärmekapazität der Dampfphase nach Tanim und Hallett [147]

Kinematische Viskosität der Flüssigphase:

Die kinematische Viskosität der Flüssigphase lässt sich nach einer empirischen Korrelation von Lippert [82] berechnen. Die Abhängigkeit von der Molmasse ist in nicht-linearer Form über die Anzahl der Kohlenstoffatome C enthalten.

$$\mu_{Fl}(C, T_{Tr}) = \exp \left[p_1 \left(\frac{T_{krit}}{T_{Tr}} + p_2 + C^{p_4} \right) \right] + p_3 C^{p_5} \sqrt{1 - \frac{T_{Tr}}{T_{krit}}} + p_6 \left[\ln \left(1 - \frac{T_{Tr}}{T_{krit}} \right) \right] \left(1 - \frac{T_{Tr}}{T_{krit}} \right)^2 \quad (A.10)$$

Die zugehörigen Modellkonstanten gibt Lipert [82] an mit:

$$\begin{aligned} p_1 &= 3.05636 \pm 0.1695 \\ p_2 &= -3.779 \pm 0.060815 \\ p_3 &= 0.041427 \pm 0.058913 \\ p_4 &= 0.184697 \pm 0.010521 \\ p_5 &= 0.559556 \pm 0.495034 \\ p_6 &= -1.10318 \pm 0.711650 \end{aligned}$$

Den Vergleich der Korrelation nach Gl. (A.10) mit den in *Kiva-3v* [7] zugrunde liegenden experimentellen Werten für die Gruppe der n-Alkane zeigt Abb. A.3.

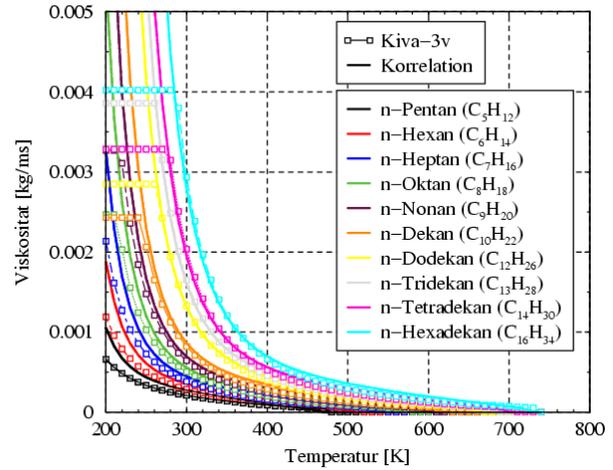


Abb. A.3: Flüssigkeitsviskosität für n-Alkane nach Gl. (A.10) und *Kiva-3v* [7].

Oberflächenspannung:

Die Oberflächenspannung σ_{Fl} lässt sich für eine Kraftstoffmischung aus einer Vielzahl an Komponenten mit Hilfe der MacLeod-Sugden-Korrelation abschätzen (siehe Reid et al. [113]).

$$\sigma_{Fl} = \left[[P] \left(\frac{\rho_{Fl}}{\theta_{Fl}} - \frac{\rho_D}{\theta_D} \right) \right]^4 \left(1 - \frac{T_{Fl}}{T_{krit}} \right)^{4n} \quad (\text{A.11})$$

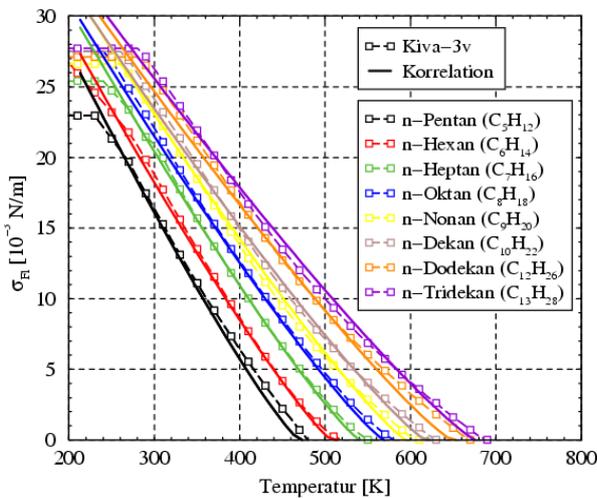


Abb. A.4: Oberflächenspannung für n-Alkane nach Gl. (A.11) und Vargaftik [152].

Darin beschreiben $c_{Fl} = \rho_{Fl}/\theta_{Fl}$ bzw. $c_D = \rho_D/\theta_D$ die molare Dichte der Flüssig- bzw. der Dampfphase, T_{Fl} die Flüssigkeitstemperatur und T_{krit} die kritische Temperatur. Den Exponenten n des temperaturabhängigen Terms geben Reid et al. [113] für Kohlenwasserstoffe mit $n = 0.29$ an. Die stoffabhängige Größe $[P]$ wird Parachor bezeichnet und dient als Maß für die Molvolumina unter Berücksichtigung der Oberflächenspannungskräfte (siehe dazu Reid et al. [113]). Eine Gegenüberstellung für die Oberflächenspannung σ_{Fl} nach der MacLeod-Sugden-Korrelation aus Gl. (A.11) mit Werten aus der Literatur nach Vargaftik [152] für die Gruppe der n-Alkane zeigt Abb. A.4.

B Integration der turbulent-gemischten Kraftstoffmenge

In dem in Kap. 6.3.2.3 beschriebenen Reaktionsmodell auf Basis einer Einschnitt-Bruttoreaktion mit drei reaktiven Spezies wird der Einfluss turbulenter Gemischfluktuationen auf den mit Luft gemischten Kraftstoffanteil über die statische Verteilung der Gemischzusammensetzung des „presumed“-PDF-Ansatzes (siehe Kap. 6.3.2.2) berücksichtigt. Der Mittelwert der gemischten Kraftstoffmenge $\bar{\rho}_m(Z)$ ergibt sich aus der Integration von $\rho_m(Z)$ über die β -Funktion $\tilde{P}(Z)$ im Mischungsbruchraum Z .

$$\bar{\rho}_m(\vec{x}, t) = \int_0^1 \rho_m(Z; \vec{x}, t) \tilde{P}(Z; \tilde{Z}(\vec{x}, t), \widetilde{Z''^2}(\vec{x}, t)) dZ \quad (\text{B.1})$$

Das Einsetzen der gemischten Kraftstoffmenge $\rho_m(Z)$ nach Gl. (6.26) und der β -Funktion $\tilde{P}(Z)$ nach Gl. (6.21) führt auf einen Ausdruck für $\bar{\rho}_m$ mit zwei unvollständigen β -Funktionen.

$$\begin{aligned} \bar{\rho}_m &= \frac{\bar{\rho}}{B(\alpha, \beta)} \int_0^{Z_{st}} Z^\alpha (1-Z)^{\beta-1} dZ \\ &+ \frac{\bar{\rho}}{B(\alpha, \beta)} \frac{Z_{st}}{1-Z_{st}} \int_{Z_{st}}^1 Z^{\alpha-1} (1-Z)^\beta dZ \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

Darin beschreiben Z_{st} den Mischungsbruch unter stöchiometrischen Bedingungen, $B(\alpha, \beta)$ den Normierungsfaktor (siehe Gl. 6.23) mit α bzw. β als Formparameter der β -Funktion. Durch einige mathematische Umformulierungen lässt sich Gl. (B.2) in eine Form

$$\begin{aligned} \bar{\rho}_m &= \frac{\bar{\rho}}{1-Z_{st}} \left[\frac{\tilde{Z} - Z_{st}}{B(\alpha+1, \beta)} \int_0^{Z_{st}} Z^\alpha (1-Z)^{\beta-1} dZ + Z_{st} \left(1 - \tilde{Z} \right) \right] \\ &- \bar{\rho} \frac{\Gamma(\alpha+\beta)}{\Gamma(\alpha+1, \beta)\Gamma(\beta)} Z_{st}^{\alpha+1} (1-Z_{st})^{\beta-1} \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

mit einer einzigen unvollständigen β -Funktion überführen. Das Integral in Gl. (B.3) lässt sich mit Hilfe der Lentz'schen Methode numerisch lösen.

Im Grenzfall von äußerst kleinen turbulenten Fluktuationen, also wenn die Varianz des Mischungsbruchs $\widetilde{Z''^2} = 0$ ($\alpha + \beta \rightarrow \infty$) ist, konvergiert Gl. (B.3) zu dem aus Gl. (6.26) bekanntem Ausdruck.

$$\bar{\rho}_m = \begin{cases} \tilde{Z} \rho & \text{für } 0 \leq \tilde{Z} \leq Z_{st} \quad (\text{mager}) \\ \frac{Z_{st}}{1-Z_{st}} (1-\tilde{Z}) \rho & \text{für } Z_{st} \leq \tilde{Z} \leq 1 \quad (\text{fett}) \end{cases} \quad (\text{B.4})$$

Umgekehrt lässt sich im Fall von maximaler Varianz $\widetilde{Z''^2}_{max} = \widetilde{Z}(1 - \widetilde{Z})$ ($\alpha \rightarrow 0, \beta \rightarrow 0$) zeigen, dass Kraftstoff und Luft vollkommen entmischt sind.

$$\bar{\rho}_m = 0 \quad (\text{B.5})$$

C Integration der gemittelten turbulenten Brenngeschwindigkeit

Die turbulente Brenngeschwindigkeit s_t ist über die laminare Brenngeschwindigkeit $s_l(\Phi)$ abhängig vom Mischungs Zustand. In heterogenen Gemischen muss daher der Einfluss der Mischung auf die Flammfrontausbreitung durch Mittelung der turbulenten Brenngeschwindigkeit über die statistische Verteilung der Gemischzusammensetzung $\tilde{P}(Z)$ berücksichtigt werden (vgl. Kap. 6.3.2.2). Unter Verwendung einer β -Funktion $\tilde{P}(Z)$ nach Gl. (6.21) lässt sich die mit dem Mischungsbruch Z gewichtete mittlere turbulente Brenngeschwindigkeit schreiben als:

$$\bar{s}_t(\vec{x}, t) = \frac{\int_0^1 s_t(\Phi; \vec{x}, t) \tilde{P}(Z; \tilde{Z}(\vec{x}, t), \widetilde{Z''^2}(\vec{x}, t)) Z(\vec{x}, t) dZ}{\int_0^1 Z(\vec{x}, t) dZ} \quad (\text{C.1})$$

Mit dem Zusammenhang von Äquivalenzverhältnis Φ und Mischungsbruch $Z = \Phi/(\Phi + L_{st})$ lässt sich Gl. (C.1) zusammen mit der β -Funktion $\tilde{P}(Z)$ aus Gl. (6.21) als reine Funktion von $\Phi(\vec{x}, t)$ darstellen.

$$\bar{s}_t(\vec{x}, t) = \frac{L_{st}^\beta}{B(\alpha, \beta)} \int_0^\infty s_t(\Phi(\vec{x}, t)) \frac{\Phi(\vec{x}, t)^\alpha}{(\Phi(\vec{x}, t) + L_{st})^{\alpha+\beta+1}} d\Phi \quad (\text{C.2})$$

Darin beschreiben L_{st} die stöchiometrische Luftzahl, $B(\alpha, \beta)$ den Normierungsfaktor (siehe Gl. 6.23) und α bzw. β die Koeffizienten der β -Funktion gemäß Gl. (6.22) bzw. Gl. (6.23). Für die numerische Integration von Gl. (C.2) wird für die turbulente Brenngeschwindigkeit nach Gl. (6.12) der Term

$$\sqrt{\frac{u'}{u' + s_l}} \approx \sum_{i=0}^{i=2} \binom{-\frac{1}{2}}{i} \left(\frac{s_l}{u'}\right)^i = 1 - \frac{1}{2} \frac{s_l}{u'} + \frac{3}{8} \left(\frac{s_l}{u'}\right)^2 \quad \text{für } u' > s_l \quad (\text{C.3})$$

durch eine binomische Reihe 2. Ordnung entwickelt, womit sich s_t formulieren lässt als:

$$s_t = A_{Fl} \sum_{i=0}^{i=2} \binom{-\frac{1}{2}}{i} u'^{-f_i+1} s_l^{f_i} + s_l^{f_3} \quad \text{mit } f_0 = \frac{1}{6}, f_1 = \frac{7}{6}, f_2 = \frac{13}{6}, f_3 = 1 \quad (\text{C.4})$$

Zusammen mit der laminaren Brenngeschwindigkeit nach Gl. (6.10) lässt sich nach einigen algebraischen Umformungen die mittlere turbulente Brenngeschwindigkeit schreiben als:

$$\bar{s}_t = \frac{L_{st}}{B(\alpha, \beta)} \left[A_{Fl} \sum_{i=0}^{i=2} \binom{-\frac{1}{2}}{i} C_{s_l}^{f_i} u'^{-f_i+1} I_i + C_{s_l}^{f_3} u'^{-f_3+1} I_3 \right] \quad (\text{C.5})$$

mit den Integralen I_i für $i = 0, 1, 2, 3$

$$I_i = \int_0^\infty \exp \left[-f_i \xi (\Phi - \Phi^*)^2 + (\alpha + f_i \eta) \ln \Phi - (\alpha + \beta + 1) \ln (\Phi + L_{st}) \right] d\Phi \quad (\text{C.6})$$

Zur näherungsweisen Lösung der Integrale I_i wird in Analogie zur Vorgehensweise in Kaube [73] die Sattelpunktmethode herangezogen. Danach werden die Integrale

$$I_i = \int_0^{\infty} e^{-F_i(\Phi)} d\Phi \quad \text{für } i = 0, 1, 2, 3 \quad (\text{C.7})$$

über eine Approximation der Funktionen $F_i(\Phi)$ durch ein Taylor-Polynom 2. Ordnung im Minimum Φ_0 mit $F'_i(\Phi_0) = 0$ bestimmt.

$$F_i(\Phi) \approx F_i(\Phi_0) + \frac{1}{2} F''_i(\Phi_0) (\Phi - \Phi_0)^2 \quad \text{für } i = 0, 1, 2, 3 \quad (\text{C.8})$$

Die zugrunde liegenden Funktionen F_i stellen im globalen Minimum Φ_0 ein Polynom 3. Ordnung dar, welches iterativ, z.B. durch ein Newton-Iterationsverfahren, ermittelt werden muss. Die gesuchten Integrale

$$I_i \approx \sqrt{\frac{2\pi}{F''_i(\Phi_0)}} e^{-F_i(\Phi_0)} \quad \text{für } i = 0, 1, 2, 3 \quad (\text{C.9})$$

können dann mit den Funktionen $F(\Phi_0)$ und $F''(\Phi_0)$ für $i = 0, 1, 2, 3$

$$F_i(\Phi_0) = f_i \xi (\Phi_0 - \Phi^*)^2 - (\alpha + f_i \eta) \ln \Phi_0 + (\alpha + \beta + 1) \ln (\Phi_0 + L_{st}) \quad (\text{C.10})$$

$$F''_i(\Phi_0) = 2f_i \xi + \frac{\alpha + f_i \eta}{\Phi_0^2} - \frac{\alpha + \beta + 1}{(\Phi_0 + L_{st})^2} \quad (\text{C.11})$$

bestimmt werden.