

Entwicklung eines Fortschrittsvariablenmodells zur 3D-CFD-Simulation dieselmotorischer Zündung und Verbrennung

Zur Erlangung des akademischen Grades
Doktor der Ingenieurwissenschaften
der Fakultät für Maschinenbau
Karlsruher Institut für Technologie (KIT)

genehmigte
Dissertation
von

Dipl.-Ing. Paul Wenzel

aus Görlitz

Tag der mündlichen Prüfung: 16. November 2017

Hauptreferent: Prof. Dr. rer. nat. habil. Ulrich Maas
Korreferent: Prof. Dr.-Ing. Fabian Mauß



Dieses Werk ist lizenziert unter einer
Creative Commons Namensnennung - Weitergabe unter gleichen Bedingungen 4.0 International Lizenz.
(CC BY-SA 4.0): <https://creativecommons.org/licenses/by-sa/4.0/deed.de>

für Lidija, Kilian und Joshua

Vorwort

Die vorliegende Dissertation wurde bei der Daimler AG in der Simulationsabteilung der Antriebsforschung / -vorentwicklung erstellt und durch Herrn Professor Dr. rer. nat. habil. Ulrich Maas vom Institut für Technische Thermodynamik des Karlsruher Instituts für Technologie (KIT) betreut.

Mein besonderer Dank gilt Herrn Professor Ulrich Maas, der das Interesse an dieser Arbeit über die vielen Jahre nicht verloren hat und mich motiviert hat, diese zu einem erfolgreichen Abschluss zu bringen.

Besonders bedanken möchte ich mich bei Herrn Professor Dr.-Ing. Fabian Mauß für sein umfassendes Engagement als Korreferent und die äußerst konstruktiven Diskussionen in Bezug auf die Fertigstellung dieser Arbeit.

Des Weiteren danke ich meinem Betreuer bei der Daimler AG, Herrn Dr.-Ing. Rüdiger Steiner, der mich von Beginn an gefördert, hilfsbereit unterstützt und immer Zeit für die Beantwortung meiner Fragen gefunden hat.

Herrn Dr.-Ing. Christian Krüger bin ich sehr dankbar dafür, dass er mir die Chance gab, meine Dissertation in seiner Gruppe anzufertigen. Ebenso bedanke ich mich bei ihm für die Anregungen bei der Strukturierung dieser Arbeit und seine konstruktive Kritik.

Herrn Dr.-Ing. Robert Schiessl vom Institut für Technische Thermodynamik des Karlsruher Instituts für Technologie danke ich für die zahlreichen inspirierenden, persönlichen Gespräche. Besonders danke ich ihm dafür, dass er die Berechnung und Tabellierung der Reaktionsraten des Fortschrittsvariablenmodells immer wieder übernommen hat.

Herzlichen Dank an Herrn Dr. rer. nat. Frank Otto für die Beantwortung aller mathematischer Fragen und die Unterstützung bei den Korrekturen der Gleichungen.

Bei den Herren Dr.-Ing. Galin Nakov und Dipl.-Ing. Alexandros Hatzipanagiotou bedanke ich mich dafür, dass sie sich stets Zeit für zahlreiche fachliche Diskussionen genommen haben.

Herrn Dr.-Ing. Harry Lehtiniemi danke ich für die jahrelange Zusammenarbeit in gemeinsamen Forschungsprojekten, aus denen durch offene Diskussionen neue Ideen für Modellansätze entstanden sind.

Herrn Dipl.-Ing. Simon Binder danke ich für die stets bereitwillige Weitergabe seines umfangreichen Wissens und seiner Erfahrung bei der Messdatenanalyse.

Bei den Herren Dr.-Ing. Gehard König, Dr.-Ing. Matthias Blessing und Dr.-Ing. Michael Wirths bedanke ich mich für ihren wertvollen Beitrag zur Validierung des Modells durch ihre diagnostischen Methoden.

Und schließlich danke ich Herrn Dipl.-Ing. Thomas Kuhn für den sprachlichen Feinschliff dieser Arbeit.

Ein großes Dankeschön möchte ich an meine liebe Frau Lidija richten, ohne deren Unterstützung, Motivation und Aufmunterung diese Arbeit wohl nicht zustande gekommen wäre. Ich danke auch meinen beiden Söhnen Kilian und Joshua für ihre Geduld und dafür, dass sie so viele Stunden meiner knappen Freizeit auf mich verzichtet haben.

Paul Wenzel, November 2017

Kurzfassung

Zukünftige Verschärfungen der Schadstoffgrenzwerte über Euro 6d bei Pkw bzw. Euro VI bei Nutzfahrzeugen hinaus oder stringentere Testprozeduren werden die Weiterentwicklung von Hubkolbenmotoren nach dem Viertaktprinzip mit oder ohne elektrische Antriebe erfordern, um verfügbare Potenziale in Bezug auf den thermodynamischen Wirkungsgrad und die Schadstoffemissionen auszuschöpfen. Zur Brennverfahrensentwicklung werden heute Analysen von 3D-CFD-Simulationen reaktiver Strömungen genutzt, um eine sinnvolle Vorauswahl von Parametern wie z. B. Kolben- und Brennraumgeometrie, Einspritzverlaufsform und -taktung für Motorversuche zu erhalten. Für vorhersagefähige 3D-CFD-Simulationen innermotorischer Verbrennungsprozesse müssen die Gemischbildung, die Wärmefreisetzung, die Schadstoffbildung und die thermischen Wandwärmeverluste realistisch abgebildet werden. Dies erfordert Modellansätze, die auf einem hohen chemischen und physikalischen Detaillierungsgrad basieren.

In dieser Arbeit wird ein Modellierungskonzept zur 3D-CFD-Simulation der dieselmotorischen Zündung und Verbrennung entwickelt. Dabei ist das übergeordnete Ziel die Relevanz der detaillierten Reaktionskinetik auf Zünd- und Verbrennungsprozesse komplexer Kohlenwasserstoffe anhand Fragestellungen aus der Brennverfahrensentwicklung moderner Dieselmotoren zu bewerten. Diese Forderung bedingt ein rechenzeiteffizientes Modellierungskonzept, das sich in die vorhandene Simulationsumgebung zur Berechnung der Direkteinspritzung des Kraftstoffs, der Gemischbildung, der Zündung und Verbrennung und letztlich der Schadstoffbildung einfügt. Ein Ziel dieser Arbeit ist insbesondere die Verbesserung der Prognosegüte der kinetisch-kontrollierten Vormisch- und teilhomogenen Verbrennung, die bspw. bei sauerstoffarmer Verbrennung zur Reduzierung der innermotorisch entstehenden Stickoxide an Relevanz gewinnt. Dabei ist die genaue Kenntnis der Reaktionsgeschwindigkeiten entscheidend. Zur Bestimmung der Reaktionsraten wird in dieser Arbeit ein Fortschrittsvariablenmodell basierend auf [48] erweitert und in den 3D-Strömungslöser StarCD [17] integriert. Dazu wird ein Modellkonzept entwickelt, welches sich in drei Teilbereiche gliedert: die Homogene-Reaktor-Rechnungen, die Tabellierung der Lösungen und die Schnittstelle zum 3D-Strömungslöser.

Die Fortschrittsvariable wird über die Bogenlänge aller Spezies des detaillierten Reaktionsmechanismus definiert. Da gezeigt werden kann, dass die detaillierten Lösungen der chemischen Kinetik homogener, isobarer und adiabater Reaktoren für verschiedene Anfangsbedingungen Mannigfaltigkeiten bilden, können für verschiedene motorisch relevante Anfangsbedingungen in Druck, Temperatur, Luft-Kraftstoffverhältnis und Inertgas a priori Berechnungen durchgeführt werden. Die Lösungen des vollen Zustandsvektors lassen sich über dem Reaktionsfortschritt tabellieren. Bei der dieselmotorischen Verbrennung handelt es sich stets um eine turbulente Verbrennung, weshalb ein Verfahren zur turbulenten Mittelung der tabellierten Größen eingeführt wird. Dabei wird zusätzlich eine Korrektur des C/H-Verhältnisses von n-Heptan auf das von Dieselmotorkraftstoff durchgeführt.

Für die Nutzung im kommerziellen Strömungslöser StarCD wird eine allgemeine Transportgleichung für die Fortschrittsvariable hergeleitet. Hierbei stellen Projektionsterme sicher, dass die im CFD-Code transportierten Speziesvektoren stets eine Funktion des reduzierten Zustandsvektors sind und somit den tabellierten Lösungen entsprechen. Da alle Größen des reduzierten Zustandsvektors bis auf die Fortschrittsvariable nicht modifiziert werden dürfen, wird eine spezielle Transportgleichung abgeleitet, deren Projektionsterme nur die Fortschrittsvariable

ändern. Diese Gleichung wird unter gewissen Annahmen Favre-gemittelt, wobei die Chemie- und Projektions-Quellterme derart separiert werden, dass sie über in StarCD vorgesehene user-subroutinen eingekoppelt werden können.

Des Weiteren wird für den Übergang von der Vormisch- zur Diffusionsverbrennung das 7-Spezies-PDF-Timescale-Modell aus [126] erweitert. Zur Bestimmung des Speziesvektors im Mischungsbruchraum für die Integration der PDF wird in dieser Arbeit eine im Mischungsbruchraum variierende Anfangstemperatur verwendet, die mithilfe eines Gleichgewichtslösers zu einer variierenden Gleichgewichtstemperatur im Mischungsbruchraum führt. Diese Erweiterung ermöglicht die Einführung einer enthalpiebasierten Reaktionsfortschrittsvariable im PDF-Timescale-Modell, die für die Kopplung mit dem Fortschrittsvariablen-Modell genutzt wird. Diese Kopplung ist notwendig, da im Expansionstrakt der Zugriff auf das Fortschrittsvariablen-Modell ohne zusätzliche Annahmen nicht möglich ist, da die zu diesem Zeitpunkt zurückgerechneten Anfangsbedingungen nicht tabelliert werden können. Die Erweiterung des 7-Spezies-PDF-Timescale-Modells ermöglicht darüber hinaus eine Verbesserung des vorliegenden Stickoxidmodells.

Die Validierung der einzelnen Teilmodelle der Simulationskette erfolgt anhand brennender Freistrahlen einer Hochdruck-/ Hochtemperaturkammer. Die Anwendung des Modellkonzepts für motorische Fragestellungen wird anhand 3D-CFD-Simulation mehrerer Betriebspunkte des Hochdruck-Arbeitsprozesses eines Pkw-Motors mit Mehrfacheinspritzung und eines schweren Nutzfahrzeugmotors mit Höchst-AGR-Brennverfahren analysiert und bewertet. Dabei werden unter anderem gemessene Druck- und Brennverläufe sowie integrale Messgrößen den Simulationsergebnissen gegenübergestellt.

Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis	v
Tabellenverzeichnis	ix
Formelzeichen	xi
1 Einleitung	1
1.1 Hintergrund	1
1.2 Motivation und Zielsetzung	5
1.3 Aufbau der Arbeit	6
2 Grundlagen der Verbrennung	7
2.1 Flammentypen	7
2.2 Chemische Reaktionen	9
2.2.1 Chemisches Gleichgewicht	10
2.2.2 Stöchiometrisches Massenverhältnis	10
2.3 Reaktionskinetik und Reaktionsmechanismen	11
2.3.1 Elementarreaktionen	12
2.3.2 Partielles Gleichgewicht und Quasi-Stationarität	14
2.3.3 Chemische Eigenschaften von Dieseldieselkraftstoffen	14
2.3.4 Reaktionsmechanismen	16
3 Dieselmotorische Verbrennung	19
3.1 Einspritzung und Gemischbildung	19
3.2 Selbstzündung	22
3.3 Verbrennung	22
3.4 Schadstoffbildung	23
3.4.1 Stickoxid	23
3.4.2 Ruß	26
4 Strömungsmechanische Grundlagen	29
4.1 Erhaltungsgleichungen für reaktive Strömungen	29
4.1.1 Navier-Stokes-Gleichungen	29
4.1.2 Speziesmassen- und Energieerhaltung	30
4.2 Turbulente Strömungen	32
4.2.1 Grundlegende Zusammenhänge	33
4.2.2 Reynolds-gemittelte Navier-Stokes-Gleichungen (RANS)	34
4.2.3 Das k - ϵ -Turbulenzmodell	35
4.2.4 Wandbehandlung	37
4.2.5 Die RANS-Gleichungen des Strömungslösers	38
5 Stand der Technik: Modellierung der innermotorischen Dieselerverbrennung	41
5.1 Strahlausbreitung und Gemischbildung	41
5.1.1 Allgemeine Strahlmodellierung	41

5.1.2	Das ICAS-Modell	43
5.1.3	Netztopologie	44
5.2	Selbstzündung und Verbrennung	45
5.2.1	Grundbegriffe und Herausforderungen reaktiver Strömungen	45
5.2.2	Mischungsbruch	48
5.2.3	Das laminare Flamelet-Konzept	51
5.2.4	PDF Modellierung	51
5.2.5	Anforderungen an die Modellierung reaktiver Strömungen	53
5.2.6	Modellierung der Selbstzündung	54
5.2.7	Verbrennungsmodellierung	56
5.3	Schadstoffe	58
5.3.1	Stickoxidmodellierung	58
5.3.2	Rußmodellierung	59
6	Modellierung der Selbstzündung und Verbrennung	61
6.1	Modellkonzept	61
6.2	Homogene-Reaktor-Rechnungen	63
6.2.1	Allgemeiner Ansatz	63
6.2.2	Reaktionstrajektorien	64
6.2.3	Definition der Fortschrittsvariable	65
6.2.4	Mittelung der Fortschrittsvariable	68
6.3	Schnittstelle: CFD-Code / Homogene-Reaktor-Rechnungen	72
6.3.1	Tabellierung der chemischen Reaktionsraten der Fortschrittsvariable	72
6.3.2	Tabellierung der 7-Hauptspezies	74
6.4	CFD-Code	76
6.4.1	Allgemeiner Ansatz für die Erhaltungsgleichung des reduzierten Zustandsvektors	77
6.4.2	Projektion der allgemeinen Transportgleichung	78
6.4.3	Erhaltungsgleichung der Fortschrittsvariable	83
6.4.4	RANS-Mittelung der Erhaltungsgleichung der Fortschrittsvariable	86
6.4.5	Spezielle gemittelte Erhaltungsgleichung der Fortschrittsvariable	92
6.5	Erweitertes 7-Spezies-PDF-Timescale Modell	96
6.6	Kopplung Fortschrittsvariablen- und 7-Spezies-PDF-Timescale Modell	98
6.7	PDF-NO-Modell	101
6.7.1	Temperaturfunktion im Mischungsbruchraum	102
6.7.2	Stickoxidverteilung im Mischungsbruchraum	102
6.8	Numerische Umsetzung	104
7	Validierung der Zünd-,Verbrennungs- und Schadstoffmodelle	105
7.1	Vernetzung, Modellauswahl und Initialisierung	105
7.2	Simulation einer Einspritzkammer	108
7.2.1	Übersicht der Betriebsparameter	108
7.2.2	Validierung der Gemischbildung	109
7.2.3	Phänomenologie und Analyse des Fortschrittsvariablenmodells	112
7.3	Motorische Simulationsergebnisse	119
7.3.1	Nutzfahrzeugmotor mit Höchst-AGR-Brennverfahren	119

7.3.2 Pkw-Motor mit Mehrfacheinspritzung	128
8 Zusammenfassung und Ausblick	143
8.1 Zusammenfassung	143
8.2 Ausblick	146
A Anhang	147
Literaturverzeichnis	149

Abbildungsverzeichnis

1.1	<i>Weltweiter Ölverbrauch von 1974 bis 2014 [51].</i>	1
1.2	<i>Anzahl der weltweit registrierten Fahrzeuge von 2005 bis 2014 [96].</i>	1
1.3	<i>Vier Abgasgrenzwerte für Schadstoffemissionen für Diesel-Pkw ab Euro 3 basierend auf Tab. 1.1 [136].</i>	2
1.4	<i>Vier Abgasgrenzwerte für Schadstoffemissionen für schwere Lkw und Busse (ab 2610 kg) ab Euro III basierend auf Tab. A.1 (ETC-Prüfung / WHTC) [137].</i>	2
2.1	<i>Darstellung der verschiedenen motorischen Verbrennungsregimes nach [97, 82].</i>	7
2.2	<i>Verschiedene Flammentypen am Bunsenbrenner in Abhängigkeit von der Luftmenge, die das Luftventil passiert: (1) Ventil geschlossen (Diffusionsflamme); (2) Ventil zur Hälfte geöffnet; (3) Ventil fast vollständig offen; (4) Ventil voll geöffnet (Vormischflamme) [147]</i>	9
3.1	<i>Teilprozesse der dieselmotorischen Gemischbildung und Verbrennung [82]</i>	20
3.2	<i>Prinzipskizze der Rußbildung nach [10].</i>	28
3.3	<i>TEM-Aufnahme (Transmissionselektronenmikroskop) von Rußpartikeln [154].</i>	28
5.1	<i>Vergleich zwischen realer und numerischer Relativgeschwindigkeit der Gas- und Flüssigphase. Schlechte Auflösung des Düsenlochs führt zu Überschätzung der Relativgeschw. zwischen den Phasen. Nach [44].</i>	42
5.2	<i>Schnitt durch ein kombiniertes Hexaeder-/Polyederberechnungsgitter eines motorischen Vollzylindernetzes im Düsennahbereich im oberen Totpunkt.</i>	42
5.3	<i>Berechnungskonzept für die dieselmotorische Einspritzung nach [65].</i>	43
5.4	<i>Zeitskalenspektrum reaktiver Strömungen nach [142, 126].</i>	47
5.5	<i>Maximale Temperatur in einem Mischungsreaktor in Abhängigkeit der Damköhler-Zahl (S-Kurve) nach [105].</i>	47
5.6	<i>(a) Beispiel einer Gegenstrom-Diffusionsflamme. (b) Projektion der Massenbrüche von Kraftstoff Y_{Kr}, Sauerstoff Y_{O_2} und Stickstoff Y_{N_2} in den Mischungsbruchraum Z bei Annahme einer nicht-reaktiven Strömung. (c) Burke-Schumann Lösung der Reaktanden im Mischungsbruchraum für eine reaktive Strömung. Nach [126].</i>	49
5.7	<i>Mögliche Formen einer mit dem Maximalwert von $\tilde{P}_Z(Z)$ normierten β-PDF. (1) Homogen. (2) Gemischt. (3) Oxidator dominant. (4) Kraftstoff dominant. (5) Ungemischt. Nach [142, 126].</i>	52
5.8	<i>Korrelation zwischen Temperatur und Mischungsbruch $T(Z_{ign})$ für $T_{ox} = 900$ K, $\bar{p} = 60$ bar inkl. drei verschiedener Mischungsszenarien mit jeweiliger PDF $P_{Z_{ign}, T}$ nach [129].</i>	55
6.1	<i>Links ist beispielhaft die Schnittebene in der Strahlachse einer 3D-CFD-Simulation auf einem Sektornetz gegen Ende der Einspritzung dargestellt. Die Ebene ist mit der Temperatur eingefärbt, wobei zur Anschauung zusätzlich eine schwarze Konturlinie für $\lambda = 1$ eingefügt wurde. Die räumliche Diskretisierung (Netz) ist ebenfalls zu erkennen. Rechts sind die tabellierten Rechnungen der Homogenen Reaktoren für unterschiedliche Anfangsbedingungen symbolisiert. Für jede CFD-Zelle werden in Abhängigkeit der Parameter $\tilde{\chi}$, \tilde{Z}, \tilde{Z}^{m^2}, T_{ox}, ξ_{egr}, \bar{p} der mittlere chemische Quellterm für die Reaktionsfortschrittsvariable $\tilde{\chi}^c$ und die sieben Spezies \tilde{Y}_i mit Hilfe der Tabelle interpoliert.</i>	62

6.2	Reaktionstrajektorie im Y_{O_2} - Y_{CO_2} - Y_{CH_2O} -Raum für Mischungsbruch Z_{st} , $T_{ox} = 1000$ K, $\xi_{egr} = 0$ %, $p = 100$ bar. Die Trajektorie ist mit der Temperatur eingefärbt [146].	67
6.3	Reaktionsrate $\dot{\chi}$ über Fortschrittsvariablen χ und Mischungsbruch Z für $T_{ox} = 1000$ K, $\xi_{egr} = 0$ %, $p = 100$ bar [146].	67
6.4	Y_{CO_2} im Mischungsbruchraum ausgehend von $\chi = 0$ bis $\chi = 1$.	69
6.5	Y_{CO_2} im χ - Z -Raum als Fläche dargestellt.	69
6.6	Mittelung der Reaktionsrate $\dot{\chi}$ über Z bei gleichem Reaktionsfortschritt [146].	70
6.7	Skizze der Mittelung der Reaktionsrate $\dot{\chi}$ über Z bei gleicher physikalischer Zeit [146].	70
6.8	Reaktionstrajektorien, die eine Mannigfaltigkeit aufspannen, im Y_{O_2} - Y_{CO} - Y_{CO_2} -Raum ausgehend von $\chi = 0$ bis $\chi = 1$ für alle Mischungsbrüche $Z_{min} \leq Z \leq Z_{max}$ ($T_{ox} = 1000$ K, $\xi_{egr} = 0$ %, $p = 100$ bar).	78
6.9	Massenbruch Y_{O_2} im χ - Z -Raum als Fläche mit Bewegungsvektor und dessen Projektion ($Z''^2 = 10^{-7}$, $T_{ox} = 1000$ K, $\xi_{egr} = 0$ %, $p = 100$ bar).	79
6.10	Massenbruch Y_{CO} im χ - Z -Raum als Fläche mit Bewegungsvektor und dessen Projektion ($Z''^2 = 10^{-7}$, $T_{ox} = 1000$ K, $\xi_{egr} = 0$ %, $p = 100$ bar).	79
6.11	Massenbruch Y_{CO_2} im χ - Z -Raum als Fläche mit Bewegungsvektor und dessen Projektion ($Z''^2 = 10^{-7}$, $T_{ox} = 1000$ K, $\xi_{egr} = 0$ %, $p = 100$ bar).	79
6.12	Reaktionstrajektorien im Y_{O_2} - Y_{CO} - Y_{CO_2} -Raum von $\chi = 0$ bis $\chi = 1$ für alle Z mit $Z_{min} \leq Z \leq Z_{max}$ ($Z''^2 = 10^{-7}$, $T_{ox} = 1000$ K, $\xi_{egr} = 0$ %, $p = 100$ bar).	79
6.13	Lokale Auswertung der Temperatur, des Mischungsbruchs und dessen Varianz, der Fortschrittsvariable, der Wärmefreisetzungsrate sowie des chemischen Quellterms und der Projektionsterme der Fortschrittsvariable bei $\rho_{ini} = 30$ kg/m ³ , $T_{ini} = 750$ °C, $X_{O_2} = 14.5$ Vol-%, $p_{rail} = 2000$ bar. Die vollständigen Randbedingungen sind in Kapitel 7.2.2 in Tab. 7.1 unter Betriebspunkt 2 aufgelistet.	91
6.14	Tabellenwert \hat{Y}_{CO_2} im χ - Z''^2 -Raum als Fläche für $Z = Z_{st}$, $T_{ox} = 1000$ K, $\xi_{egr} = 0$ %, $p = 100$ bar.	94
6.15	Tabellenwert \hat{Y}_{CO_2} im χ - η_v -Raum als Fläche für $Z = Z_{st}$, $T_{ox} = 1000$ K, $\xi_{egr} = 0$ %, $p = 100$ bar.	94
6.16	Tabellenwert \hat{Y}_{CO_2} im χ - Z -Raum als Fläche für $Z''^2 = 10^{-7}$, $T_{ox} = 1000$ K, $\xi_{egr} = 0$ %, $p = 100$ bar.	94
6.17	Tabellenwert \hat{Y}_{CO_2} im χ - T_{ox} -Raum als Fläche für $Z''^2 = 10^{-7}$, $Z = Z_{st}$, $\xi_{egr} = 0$ %, $p = 100$ bar.	94
6.18	Tabellenwert \hat{Y}_{CO_2} im χ - ξ_{egr} -Raum als Fläche für $Z''^2 = 10^{-7}$, $Z = Z_{st}$, $T_{ox} = 1000$ K, $p = 100$ bar.	94
6.19	Tabellenwert \hat{Y}_{CO_2} im χ - p -Raum als Fläche für $Z''^2 = 10^{-7}$, $Z = Z_{st}$, $T_{ox} = 1000$ K, $\xi_{egr} = 0$ %.	94
6.20	Auswertung $\partial \hat{Y}_{CO_2} / \partial \eta_v$ im χ - η_v -Raum als Fläche für $Z = Z_{st}$, $T_{ox} = 1000$ K, $\xi_{egr} = 0$ %, $p = 100$ bar.	95
6.21	Auswertung $\partial \hat{Y}_{CO_2} / \partial T_{ox}$ im χ - T_{ox} -Raum als Fläche für $Z''^2 = 10^{-7}$, $Z = Z_{st}$, $\xi_{egr} = 0$ %, $p = 100$ bar.	95
6.22	Auswertung $\partial \hat{Y}_{CO_2} / \partial \xi_{egr}$ im χ - ξ_{egr} -Raum als Fläche für $Z''^2 = 10^{-7}$, $Z = Z_{st}$, $T_{ox} = 1000$ K, $p = 100$ bar.	95
6.23	Auswertung $\partial \hat{Y}_{CO_2} / \partial p$ im χ - p -Raum als Fläche für $Z''^2 = 10^{-7}$, $Z = Z_{st}$, $T_{ox} = 1000$ K, $\xi_{egr} = 0$ %.	95

6.24	Auswertung $\partial \hat{Y}_{\text{CO}_2} / \partial Z$ im χ - Z -Raum als Fläche für $Z''^2 = 10^{-7}$, $T_{\text{ox}} = 1000 \text{ K}$, $\xi_{\text{egr}} = 0 \%$, $p = 100 \text{ bar}$	95
6.25	Gleichgewichtstemperatur $T^{(\text{eq})}$ ($\chi = 1$) im Mischungsbruchraum Z für verschiedene AGR-Raten ($Z''^2 = 10^{-7}$, $T_{\text{ox}} = 1000 \text{ K}$, $p = 100 \text{ bar}$).	97
6.26	Thermische Enthalpie über dem Mischungsbruch des Gemischs im Ausgangszustand $h_{\text{th}}^{(0)}(Z)$ und im Gleichgewichtszustand $h_{\text{th}}^{(\text{eq})}(Z)$ für verschiedene AGR-Raten ($Z''^2 = 10^{-7}$, $T_{\text{ox}} = 1000 \text{ K}$, $p = 100 \text{ bar}$).	100
6.27	Differenz der thermischen Enthalpien $h_{\text{th}}^{(\text{eq})}(Z) - h_{\text{th}}^{(0)}(Z)$ beim jeweiligem stöchiometrischen Mischungsbruch über der Ersatzfortschrittsvariable χ_h für verschiedene AGR-Raten ($Z''^2 = 10^{-7}$, $T_{\text{ox}} = 1000 \text{ K}$, $p = 100 \text{ bar}$).	100
6.28	Temperaturverläufe über dem Reaktionsfortschritt ausgehend von $\chi = 0$ bis $\chi = 1$ für 3 Mischungsbrüche ($Z''^2 = 10^{-7}$, $T_{\text{ox}} = 1000 \text{ K}$, $\xi_{\text{egr}} = 0 \%$, $p = 100 \text{ bar}$).	101
6.29	Vergleich der chemischen Zeitskala τ_{chem} aus der Bibliothek mit dem Arrhenius-Ansatz über Reaktionsfortschritt für 3 Mischungsbrüche ($Z''^2 = 10^{-7}$, $T_{\text{ox}} = 1000 \text{ K}$, $\xi_{\text{egr}} = 0 \%$, $p = 100 \text{ bar}$).	101
7.1	2D-Kammernetz mit strahlangepasstem Bereich.	106
7.2	3D-Sektornetz (ca. 51.43°) mit strahlangepasstem Bereich im OT.	106
7.3	Raildruck-Variation (bei $\rho_{\text{ini}} = 30 \text{ kg/m}^3$, $T_{\text{ini}} = 750^\circ\text{C}$, $X_{\text{O}_2} = 14.5 \text{ Vol-\%}$): Vergleich der Eindringtiefen (Flüssig- und Gasphase) zwischen Messungen und Simulationen.	112
7.4	Lokale Auswertung der Temperatur, des Mischungsbruchs und dessen Varianz, der Fortschrittsvariable sowie der Emissionen NO und Ruß mit den zugehörigen Oxidations- und Bildungsraten bei $\rho_{\text{ini}} = 30 \text{ kg/m}^3$, $T_{\text{ini}} = 750^\circ\text{C}$, $X_{\text{O}_2} = 14.5 \text{ Vol-\%}$, $p_{\text{rail}} = 2000 \text{ bar}$. (Teil 1/2)	114
7.5	Lokale Auswertung der Temperatur, des Mischungsbruchs und dessen Varianz, der Fortschrittsvariable sowie der Emissionen NO und Ruß mit den zugehörigen Oxidations- und Bildungsraten bei $\rho_{\text{ini}} = 30 \text{ kg/m}^3$, $T_{\text{ini}} = 750^\circ\text{C}$, $X_{\text{O}_2} = 14.5 \text{ Vol-\%}$, $p_{\text{rail}} = 2000 \text{ bar}$. (Teil 2/2)	115
7.6	Variation der Sauerstoffkonzentration (bei $\rho_{\text{ini}} = 30 \text{ kg/m}^3$, $T_{\text{ini}} = 750^\circ\text{C}$, $p_{\text{rail}} = 2000 \text{ bar}$): Lokaler Vergleich der Eindringtiefen (Flüssig- und Gasphase) und Lift-Off Längen.	117
7.7	Variation der Sauerstoffkonzentration (bei $\rho_{\text{ini}} = 30 \text{ kg/m}^3$, $T_{\text{ini}} = 750^\circ\text{C}$, $p_{\text{rail}} = 2000 \text{ bar}$): Vergleich der Zündverzugszeiten und Lift-Off Längen zwischen Messungen und Simulationen.	118
7.8	Kammertemperatur-Variation (bei $\rho_{\text{ini}} = 30 \text{ kg/m}^3$, $X_{\text{O}_2} = 14.5 \text{ Vol-\%}$, $p_{\text{rail}} = 2000 \text{ bar}$): Vergleich der Zündverzugszeiten und Lift-Off Längen zwischen Messungen und Simulationen.	119
7.9	Betriebspunkt 1: Vergleich von Messung (DVA) und Simulation mit dem PDF-Timescale und Fortschrittsvariablen-Modell.	122
7.10	Betriebspunkt 2: Vergleich von Messung (DVA) und Simulation mit dem PDF-Timescale und Fortschrittsvariablen-Modell.	123
7.11	Betriebspunkt 3: Vergleich von Messung (DVA) und Simulation mit dem PDF-Timescale und Fortschrittsvariablen-Modell.	124
7.12	Betriebspunkt 3: Lokaler Vergleich der Simulationen in Temperatur, Mischungsbruch, Zündvariable und Wärmefreisetzungsrate des PDF-Timescale und Fortschrittsvariablen-Modells.	126

7.13	<i>Betriebspunkt 1: Lokale Auswertung der Simulation mit dem Fortschrittsvariablen-Modell. Dargestellt ist die Temperatur im Schnitt (Strahlachse), die NO-Anteile und die Rußbildungs- und Rußoxidationsraten.</i>	127
7.14	<i>Messreihe bei 2000/min, pme=7 bar (Teillast, AGR-Variation) und pme=20 bar (Hochlast, AGR-Variation). Ausgewählte Betriebspunkte 1 & 2 sind rot und 3 & 4 blau markiert.</i>	130
7.15	<i>Messreihe bei 4000/min, pme=21 bar (Nennlast, Schwerpunkt-Variation). Ausgewählter Betriebspunkt (5) ist grün markiert.</i>	131
7.16	<i>Betriebspunkt 1: Vergleich von Messung (DVA) und Simulation mit dem PDF-Timescale und Fortschrittsvariablen-Modell.</i>	132
7.17	<i>Betriebspunkt 2: Vergleich von Messung (DVA) und Simulation mit dem PDF-Timescale und Fortschrittsvariablen-Modell.</i>	132
7.18	<i>Betriebspunkt 3: Vergleich von Messung (DVA) und Simulation mit dem PDF-Timescale und Fortschrittsvariablen-Modell.</i>	133
7.19	<i>Betriebspunkt 4: Vergleich von Messung (DVA) und Simulation mit dem PDF-Timescale und Fortschrittsvariablen-Modell.</i>	133
7.20	<i>Betriebspunkt 5: Vergleich von Messung (DVA) und Simulation mit dem PDF-Timescale und Fortschrittsvariablen-Modell.</i>	134
7.21	<i>Betriebspunkt 2: Lokale Auswertung der Simulation mit dem Fortschrittsvariablen-Modell. Dargestellt ist die Temperatur, der Mischungsbruch und die Fortschrittsvariable auf der Schnittebene der Strahlachse.</i>	137
7.22	<i>Betriebspunkt 2: Vergleich der Simulationen mit dem PDF-Timescale und Fortschrittsvariablen-Modell. Dargestellt ist jeweils die Temperatur auf der Schnittebene der Strahlachse und die Zündvariable sowie das gezündete Volumen im Brennraum. (Teil 1/2)</i>	138
7.23	<i>Betriebspunkt 2: Vergleich der Simulationen mit dem PDF-Timescale und Fortschrittsvariablen-Modell. Dargestellt ist jeweils die Temperatur auf der Schnittebene der Strahlachse und die Zündvariable sowie das gezündete Volumen im Brennraum. (Teil 2/2)</i>	139
7.24	<i>Betriebspunkt 2: Lokale Auswertung der Simulation mit dem Fortschrittsvariablen-Modell. Dargestellt ist die Temperatur auf der Schnittebene der Strahlachse, die NO-Anteile und die Rußbildungs- und Rußoxidationsraten. (Teil 1/2)</i>	140
7.25	<i>Betriebspunkt 2: Lokale Auswertung der Simulation mit dem Fortschrittsvariablen-Modell. Dargestellt ist die Temperatur auf der Schnittebene der Strahlachse, die NO-Anteile und die Rußbildungs- und Rußoxidationsraten. (Teil 2/2)</i>	141
8.1	<i>Rechenzeitenvergleich PDF-Timescale- gegenüber PDF-Progress-Modell. . . .</i>	145

Tabellenverzeichnis

1.1	Grenzwerte für Schadstoffemissionen für Pkw [136].	3
2.1	<i>n</i> -Heptan Reaktionsmechanismen unterschiedlicher Forschungsgruppen.	17
4.1	Konstantensatz des <i>k</i> - ϵ -Turbulenzmodells.	37
5.1	Flamelet-Parameterbereich für Flamelet-Library Rußmodell ($\chi_{sc,L}$ entspricht der skalaren Dissipationsrate, ab der Flammenlöschung auftritt) [90].	60
6.1	Parameterbereich der Isochron-gemittelten Fortschrittsvariablen-Bibliothek mit insgesamt 6.709.248 Gitterpunkten. $\eta_v = -7$ entspricht einem Homogene-Reaktor. Tabelliert sind die mittleren Reaktionsraten $\tilde{\chi}$ und Massenbrüche der Sieben Hauptspezies \tilde{Y}_i . Also 8 Größen in Exponentenschreibweise mit je 8 Zeichen: 429 391 872 Byte \approx 409.5 MByte.	75
7.1	Betriebspunkte 1 bis 6 der Hochdruckkammer mit deren Parametern und initialisierten Gemischzusammensetzungen der Simulationen sowie den dazugehörigen Kompositionen der Messungen.	110
7.2	Betriebspunkte 7 bis 11 der Hochdruckkammer mit deren Parametern und initialisierten Gemischzusammensetzungen der Simulationen sowie den dazugehörigen Kompositionen der Messungen.	111
7.3	Technische Daten und Bild [Daimler AG] des Nfz-Basismotors OM471 [43, 64, 153].	120
7.4	Ausgewählte Betriebspunkte des OM471 Einzylinderaggregats.	121
7.5	Technische Daten und Bild [Daimler AG] des Pkw-Basismotors OM651 [118]. .	128
7.6	Ausgewählte Betriebspunkte des OM651 Einzylinderaggregats.	129
A.1	Abgasgrenzwerte für Schadstoffemissionen für schwere Lkw und Busse (Fahrzeuge ab 2.610 kg) [137].	148

Formelzeichen

Lateinische Buchstaben

a_{ij}	Anzahl der Atome des Elements j in einem Mol der Spezies i
a_i	Reaktionsordnung
A	Vorfaktor in Arrhenius-Gleichung
A_i	Reaktanden
c_p	Spezifische Wärmekapazität bei konstantem Druck
c_v	Spezifische Wärmekapazität bei konstantem Volumen
d	Durchmesser
D	Diffusionskoeffizient
Da	Damköhler-Zahl
\bar{E}	Einheitsmatrix
E_A	Aktivierungsenergie
\dot{F}^s	Verdampfungsquellterm in Impulserhaltungsgleichung
g	Erdbeschleunigung
g_{jk}	metrischer Tensor (Dim. jk)
h	Spezifische totale Enthalpie
h_{th}	Spezifische thermische Enthalpie
i	Spezifische totale innere Energie
i_{th}	Spezifische thermische innere Energie
J	Wärmestromdichte
k	Turbulente kinetische Energie
k_b	Geschwindigkeitskoeffizienten Rückreaktion („backward“)
k_f	Geschwindigkeitskoeffizienten Hinreaktion („forward“)
K_c	Gleichgewichtskonstante in Abhängigkeit der Stoffkonzentrationen
K_p	Gleichgewichtskonstante in Abhängigkeit der Partialdrücke
l_0	Integrale-Längenmaß
l_{char}	Charakteristische geometrische Länge
l_k	Kolmogorov-Längenmaß
L	Bogenlänge
L_{st}	stöchiometrisches Massenverhältnis
Le	Lewis-Zahl
m	Masse
M	molare Masse oder Matrix
N	Anzahl von Strömungsmomentaufnahmen
N_{el}	Gesamtanzahl Elemente
N_s	Gesamtanzahl Spezies
p	Druck
\tilde{P}	Projektionsoperator
\tilde{P}_χ	Projektionsoperator im χ -Raum
P_R	Reibfaktor
P_Z	Mischungsbruch-PDF
P_χ	Fortschrittsvariablen-PDF
$P_{\chi sc}$	PDF der skalaren Dissipationsrate

Pr	Prandtl-Zahl
Q	Wärme
\dot{Q}^c	Chemiequellterm in Energieerhaltungsgleichung
\dot{Q}^r	Strahlungsquellterm in Energieerhaltungsgleichung
\dot{Q}^s	Verdampfungsquellterm in Energieerhaltungsgleichung
\dot{Q}^w	Wandwärmeübergangsquellterm in Energieerhaltungsgleichung
R	Spezifische Gaskonstante
Re	Reynolds-Zahl
S	Entropie
Sc	Schmidt-Zahl
t	Zeit
T	Temperatur
\vec{u}	Geschwindigkeitsvektor (u, v, w)
u^+	Dimensionslose Geschwindigkeit
U	innere Energie
\vec{v}_D	Diffusionsgeschwindigkeitsvektor (u_D, v_D, w_D)
V	Volumen
V_P	Rußvolumen
w_i	Gewichtungsfaktor der Spezies i
W	Arbeit
\vec{x}	Ortsvektor (x, y, z)
X	Molenbruch / Volumenanteil
y^+	Dimensionsloser Wandabstand
Y	Massenbruch / -anteil
Z	Mischungsbruch

Griechische Buchstaben

α_j	reduzierter Zustandsvektor
β_j	reduzierter Zustandsvektor der äußeren Variablen $Z, Z''^2, T_{ox}, \xi_{egr}$ und p
χ	Reaktionsfortschrittsvariable / Progress-Variable
χ_{sc}	Skalare Dissipationsrate
χ_h	Reaktionsfortschrittsvariable auf Basis der Enthalpie
ϵ	Turbulente Dissipationsrate oder Verdichtungsverhältnis
ϕ	Äquivalenzverhältnis
Γ	Allgemeine Transportkonstante oder Gamma-Funktion
Γ_{ml}^j	Christoffelsymbol
η_m	Normierter Mischungsbruch (Library-Parameter)
η_v	Normierte Varianz des Mischungsbruchs (Library-Parameter)
λ	Luftzahl / Luft-Kraftstoff-Verhältnis oder Wärmeleitkoeffizient
μ	Dynamische Viskosität
μ_t	Wirbelviskosität
ν	Kinematische Viskosität
ν_i	Stöchiometrische Koeffizienten
π	Kreiszahl oder zeitartiger Parameter

ϑ	Dimensionslose Temperatur (Library-Parameter)
ρ	Dichte
$\dot{\rho}^c$	Chemiequellterm in Massenerhaltungsgleichung
$\dot{\rho}^s$	Verdampfungsquellterm in Massenerhaltungsgleichung
σ	Spannungstensor
τ_c	Charakteristische Zeitskala
τ_{chem}	Chemische Zeitskala
τ_{turb}	Turbulente Zeitskala
τ_w	Wandschubspannung
$\dot{\omega}$	allgemeine Reaktionsrate
ω_i	chemischer Quellterm der Spezies i
Ω	chemischer Quelltermvektor
ψ	Fluideigenschaft oder Moment
Ψ	Thermo-chemischer Zustandsvektor
ξ_{egr}	Restgasrate
ζ	Konditionierter Mischungsbruch

Sonstige Zeichen

∂	Partielle Ableitung
∇	Nabla-Operator
\mathfrak{R}	Universelle Gaskonstante
$\Delta \bar{h}_{f,298}^0$	Standardbildungsenthalpie bei einem Referenzzustand $T^0 = 298$ K und $p^0 = 1.01325$ bar
$()^0$	Thermodynamischer Referenzzustand
$()^{(0)}$	Anfangszustand (unverbrannt)
$()^A$	Abgas
$()^{(det)}$	Detaillierte Homogene-Reaktor-Rechnung
$()^{(eq)}$	Equilibrium (engl.)
$()^f$	Fuel (engl.)
$()_i$	Spezies- oder Skalar-Index
$()_{ign}$	Ignition (engl.)
$()_{ini}$	Initialisierung
$()_j$	Element-Index
$()^{Kr}$	Kraftstoff
$()^{lim}$	Limit (engl.)
$()^L$	Luft
$()_s$	Ruß
$()_{sat}$	Saturation (engl.)
$()_{st}$	Stöchiometrie
$()^t$	Transponierung
$()_t$	Turbulente Größe
$()_{ox}$	Oxidator
$()_P$	Partikel
$()_{vap}$	Vapor (engl.)

$\tilde{()}$	Favre-gemittelte Größe
$\bar{()}$	Ensemble-gemittelte Größe
$\vec{()}$	Vektor
$\dot{()}$	Zeitliche Ableitung
$\hat{()}$	Größe auf Mannigfaltigkeit
$(*)$	Referenzzustand
(\prime)	Turbulente Schwankung
$(\prime\prime)$	Favre-Mittelung der Fluktuationen (Varianz)
[]	Spezies-Konzentration
$\langle \rangle$	konditionierte Größe

Abkürzungen

0D	Nulldimensional
1D	Eindimensional
2D	Zweidimensional
3D	Dreidimensional
AGR	Abgasrückführtrate
APCRS	Amplifier Piston Common Rail System
APR	Arbeitsprozessrechnung
BP	Betriebspunkt
CFD	Computational Fluid Dynamics (engl.)
CMC	Conditional Moment Closure (engl.)
DDM	Discrete-Droplet-Model (engl.)
DE	Direkt-Einspritzung
DIN	Deutsches Institut für Normung e. V.
DGS	Differentialgleichungssystem
DNS	Direkte numerische Simulation
DVA	Druckverlaufsanalyse
ESV	Einspritzverlauf
ICAS	Interactive-Cross-Section-Averaged-Spray (engl.)
IDEA	Integrated-Diesel-European-Action (engl.)
KL	Rußkonzentrationsverlauf
KW	Kurbelwinkel
LES	Large-Eddy-Simulation (engl.)
Nfz	Nutzfahrzeug
OT	Oberer Totpunkt
PAK	Polyzyklische aromatische Kohlenwasserstoffe
PDF	Probability-Density-Function (engl.)
Pkw	Personenkraftwagen
RANS	Reynolds-Averaged-Navier-Stokes (engl.)
RIF	Repräsentative Interaktive Flamelet
UT	Unterer Totpunkt

1 Einleitung

1.1 Hintergrund

Im Laufe des letzten Jahrhunderts haben sich Verbrennungskraftmaschinen als dominierende Antriebstechnologie diverser Kraftfahrzeuge etabliert. Die Möglichkeit mit Verbrennungsmotoren große Energiemengen von chemisch gebundener in mechanische Energie wandeln zu können, verhalf ihnen zum Siegeszug. Dabei setzen sich weitgehend Kohlenwasserstoffe als Brennstoff¹ durch. Am 29. Januar 1886 meldete Carl Benz seinen Motorwagen zum Patent an. Seither entwickelten sich Automobile in der Industriegesellschaft zum unverzichtbaren Bestandteil von Lebensqualität, was schließlich zu einer weltweiten Massenmotorisierung führte [151]. Laut OICA² ist die Anzahl registrierter Kraftfahrzeuge von ca. 893 Mio. Einheiten im Jahr 2005 um 38.5% auf ca. 1 236 Mio. Einheiten im Jahr 2014 gestiegen (vgl. Abb. 1.2) [96]. Die Jahresproduktion wurde im gleichen Zeitraum bei Pkw von 47.0 auf 67.8 Mio. um 44.1% und bei Nfz von 19.7 auf 22.0 Mio. Einheiten um 11.8% erhöht. Damit wurden im Jahr 2014 in Summe 89.8 Mio. Fahrzeuge gefertigt [95].

Der weltweite Ölverbrauch ist ausgehend vom Jahr 1974 von 2181 Mio. t um 71.7% auf 3744 Mio. t im Jahr 2014 gewachsen. Im Straßenverkehr wurde 1974 ein Anteil von „nur“ 31.8% (694 Mio. t) verbraucht. Abb. 1.1 zeigt, dass der Verbrauch im Straßenverkehr bis 2014 auf nahe zu 50% (1865 Mio. t) gestiegen ist. Absolut betrachtet ist das eine enorme Steigerung um einen Faktor von ca. 2.7, die letztlich in der Zunahme der Kraftfahrzeuge begründet ist [51]. Interessant ist das Wachstum des Ölverbrauchs bezogen auf die Anzahl registrierter Kraftfahrzeuge im Jahrzehnt von 2005 bis 2014. Der Ölverbrauch im Straßenverkehr erhöhte sich in diesem Zeitraum von 1569 Mio. t auf die o. g. 1865 Mio. t um 17.2%. Verglichen mit dem Anstieg der Kraftfahrzeuge um 38.5% eine erfreuliche Entwicklung, da der *relative* Ölverbrauch pro Fahrzeug und Jahr sich von 1.78 t auf 1.51 t um 15.5% reduziert hat (Abb. 1.2). Unter der Annahme, dass das Nutzungsverhalten der Fahrzeuge sich in diesem Zeitraum nicht wesentlich verändert hat, ist diese relative Verbrauchsreduktion als positiver Trend zu bewerten.

¹z. B. Diesel, Benzin, Gas

²Organisation Internationale des Constructeurs d'Automobiles: 1919 in Paris gegründete internationale Organisation von Automobilherstellern

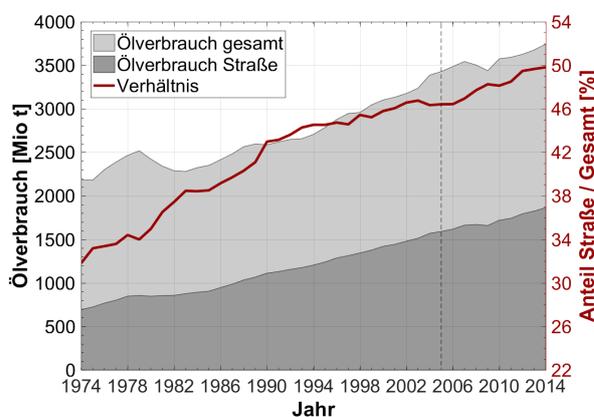


Abbildung 1.1: Weltweiter Ölverbrauch von 1974 bis 2014 [51].

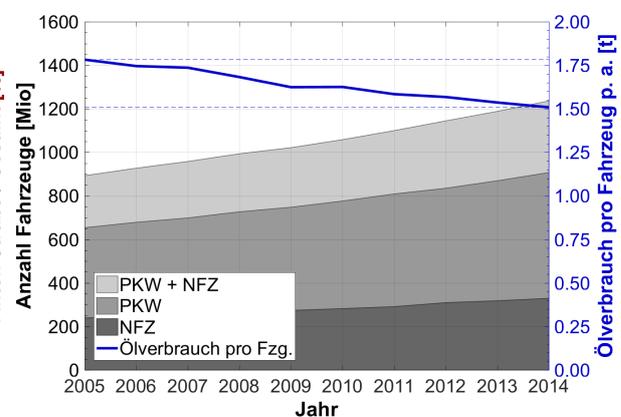


Abbildung 1.2: Anzahl der weltweit registrierten Fahrzeuge von 2005 bis 2014 [96].

Bei der Verbrennung von Kohlenwasserstoffen entsteht u. a. Kohlenstoffdioxid (CO_2) und Wasser (H_2O). Werden fossile Treibstoffe, wie Öl, Gas oder Kohle verbrannt, wird der im Kraftstoff gebundene Kohlenstoff in Form von CO_2 freigesetzt. In der Erdatmosphäre stellt CO_2 das bedeutendste anthropogene Treibhausgas dar und hat bei klarem Himmel einen Anteil von 26% am Treibhauseffekt [106, 58]. Zur Regulierung der CO_2 -Emissionen neuer Kraftfahrzeuge hat das europäische Parlament die Verordnungen EGNr. 443/2009 für Pkw-Neuwagen erlassen. Demnach müssen Automobilhersteller ab dem Jahr 2020 im Flottenmittel für Pkw einen Grenzwert³ von $95 \text{ g CO}_2/\text{km}$ einhalten. Diese Forderung basiert auf der Verpflichtung der Europäischen Union die Treibhausgasemissionen bis 2020 um mindestens 20% gegenüber dem Stand von 1990 zu reduzieren, welche einen wesentlichen Schritt zur Erreichung des langfristigen Ziels in 2050 die CO_2 -Emissionen um 80% zu senken darstellt [56].

Neben den CO_2 -Emissionen unterliegen die bei der Verbrennung entstehenden Schadstoffe wie z. B. Stickoxide (NO_x), Ruß, Kohlenmonoxid (CO) und unverbrannte Kohlenwasserstoffe (HC) Grenzwertvorgaben (Verordnungen: EG 715/2007 mit EG 692/2008 und EG 459/2012). In Abb. 1.3 ist die zeitliche Entwicklung der Grenzwerte der genannten Schadstoffe für Diesel-Pkw dargestellt. Alle gültigen Grenzwerte sind in Tab. 1.1 aufgelistet. Während in der Vergangenheit bspw. für Diesel-Pkw die Euro 4 Norm durch sukzessive Weiterentwicklung der Brennverfahren innermotorisch erfüllbar ist, können die Stickoxidgrenzwerte der Euro 5 Norm nur in Verbindung mit Abgasnachbehandlungssystemen eingehalten werden [139]. Seit Sep. 2015 (Serienprüfung) gelten für Pkw und leichte Nutzfahrzeuge die Euro 6 Grenzwerte, welche insbesondere die Limits für Stickoxidemissionen gegenüber der Euro 5 Norm um ca. 55% auf $80 \text{ mg}/\text{km}$ reduzieren. In den nächsten Jahren ist für die Euro 6 Norm geplant die Testprozeduren bei gleichbleibenden Grenzwerten realitätsnäher zu gestalten. Dazu werden bspw. Fahrzeuge mit unterschiedlichen Gewichten geprüft und der bisher verwendete Testzyklus NEFZ⁴ zunächst vom WLTC⁵, der sich im Vergleich durch eine etwas höhere Dynamik und höhere Geschwindigkeiten auszeichnet, und schließlich durch Messungen bei realen Fahrten sogenannter RDE⁶-Zyklen abgelöst [136].

³entspricht in etwa $3.6 \text{ Liter}/100 \text{ km}$ beim Diesel- und $4.1 \text{ Liter}/100 \text{ km}$ beim Ottomotor

⁴NEFZ: **N**euer **e**uropäischer **F**ahrzyklus; engl. NEDC: **N**ew **E**uropean **D**riving **C**ycle

⁵WLTC: **W**orldwide **H**armonized **L**ight-Duty **T**est **C**ycle

⁶RDE: **R**eal **D**riving **E**missions

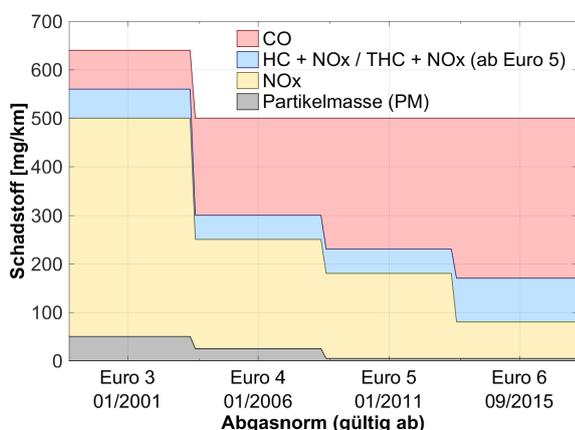


Abbildung 1.3: Vier Abgasgrenzwerte für Schadstoffemissionen für Diesel-Pkw ab Euro 3 basierend auf Tab. 1.1 [136].

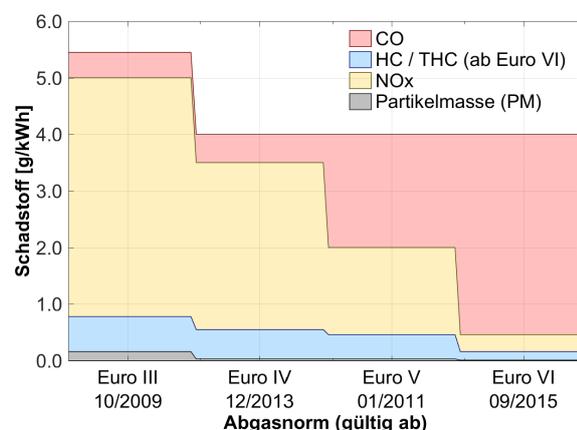


Abbildung 1.4: Vier Abgasgrenzwerte für Schadstoffemissionen für schwere Lkw und Busse (ab 2610 kg) ab Euro III basierend auf Tab. A.1 (ETC-Prüfung / WHTC) [137].

	Schadstoff	Euro 1	Euro 2*	Euro 3	Euro 4	Euro 5a	Euro 5b	Euro 6b	Euro 6c	Euro 6d-TEMP	Euro 6d
	in mg/km	ab	ab	ab	ab	ab	ab	ab	ab	ab	ab
Typprüfung		07/1992	01/1996	01/2000	01/2005	09/2009	09/2011	09/2014	09/2017	09/2017	01/2020
Serienprüfung		01/1993	01/1997	01/2001	01/2006	01/2011	01/2013	09/2015	09/2018	09/2019	01/2021
Richtlinie / Verordnung		91/441/EWG	94/12/EG	98/69/EG	98/69/EG	VO EG 715/2007** i. V. mit VO EG 692/2008 und VO EG 459/2012					
Testzyklus		NEFZ	NEFZ	NEFZ	NEFZ	NEFZ	NEFZ	NEFZ	WLTC	WLTC/RDE	WLTC/RDE
RDE (CF-Faktor)		-	-	-	-	-	-	-	-	2.1	1.5
Benzin	CO	2720	2200	2300	1000	1000	-	1000	1000	1000	1000
	HC + NO _x	970	500	-	-	-	-	-	-	-	-
	THC (NMHC)	-	-	200	100	100	-	100	100	100	100
	NO _x	-	-	150	80	60	-	60	60	60	60
	Partikelmasse (PM)	-	-	-	-	-	-	4.5 ⁽³⁾	4.5 ⁽³⁾	4.5 ⁽³⁾	4.5 ⁽³⁾
	Partikelzahl (PN) (in Anzahl/km)	-	-	-	-	-	-	6·10 ¹²	6·10 ¹¹ (4)	6·10 ¹¹ (4)	6·10 ¹¹ (4)
	NMHC	-	-	-	-	68	68	68	68	68	68
Diesel	CO	2720	1000	640	500	500	500	500	500	500	500
	HC + NO _x / THC + NO _x (ab Euro 5)	970	700/900 ⁽¹⁾	560	300	230	230	170	170	170	170
	NO _x	-	-	500	250	180	180	80	80	80	80
	Partikelmasse (PM)	140	80/100 ⁽²⁾	50	25	5	4.5	4.5	4.5	4.5	4.5
	Partikelzahl (PN) (in Anzahl/km)	-	-	-	-	-	6·10 ¹¹	6·10 ¹¹	6·10 ¹¹	6·10 ¹¹	6·10 ¹¹

Anmerkungen:

* ab Euro 2 werden die Grenzwerte nicht mehr nach Typ/Serie unterschieden.

** Die Verordnungen EG 692/2008 und EG 459/2012 setzen die Verordnung EG 715/2007 um.

(1) Bei Fahrzeugen mit direkteinspritzenden Dieselmotoren gilt bis 30.9.1999 der Grenzwert von 900 mg/km.

(2) Bei Fahrzeugen mit direkteinspritzenden Dieselmotoren gilt bis 30.9.1999 der Grenzwert von 100 mg/km.

(3) Die Grenzwerte für die Partikelmasse gelten nur für Fremdzündungsmotoren mit Benzin-Direkteinspritzung.

(4) Für Euro-6-Fahrzeuge mit fremdgezündeten Benzin-Direkteinspritzmotoren gilt nach Wahl des Herstellers für neue Typgenehmigungen bis zum 01.09.2017 bzw. für neue Fahrzeuge bis zum 01.09.2018 ein Emissionsgrenzwert für die Partikelzahl von 6.0e12 Partikel/km. Spätestens zu diesen Zeitpunkten ist ein Typgenehmigungs-Prüfverfahren einzuführen, das die wirksame Begrenzung der Partikelzahl sicherstellt.

Tabelle 1.1: Grenzwerte für Schadstoffemissionen für Pkw [136].

Für schwere Nutzfahrzeuge und Busse ist in Europa ein ähnlicher Stufenplan wie für Pkw definiert, dessen zeitliche Entwicklung in Abb. 1.4 illustriert ist. Alle gültigen Grenzwerte finden sich in Tab. A.1. Ein wesentlicher Unterschied beider Regularien sind die Messprozeduren. Bei schweren Nutzfahrzeugen werden die Emissionen auf dem Motorenprüfstand in einer definierten Folge von Betriebszuständen, bezogen auf die im Test verrichtete Arbeit des Motors, in g/kWh erfasst. Ein wesentlicher Vorteil dieser Prozedur ist, dass der Motor unabhängig vom übrigen Antriebsstrang und Fahrzeugaufbau vermessen wird, da der Antriebsstrang hier üblicherweise bedarfsgerecht konfiguriert wird und trotz des gleichen Motors sehr unterschiedlich ausfallen kann. Seit dem 31.12.2013 (Serienprüfung) gilt die Abgasnorm Euro VI. Gegenüber der Euro V

Norm wurden die Grenzwerte für Lkw bei Partikeln um ca. 67% und bei Stickstoffoxiden sogar um 80% auf 0.4 g/kWh gesenkt sowie ein Grenzwert für die Partikelanzahl eingeführt [137]. CO₂-Emissionen sind bei schweren Nutzfahrzeugen nicht reglementiert, da die Wirtschaftlichkeit des Fahrzeugs maßgeblich vom Verbrauch abhängt. Diese hat für die Nutzer eine äußerst hohe Bedeutung und ist daher wettbewerbsrelevant.

Weltweit sind die Legislativen bemüht die Luft- und damit Lebensqualität der Bevölkerung nachhaltig zu verbessern. Deshalb sind außerhalb der Europäischen Union Schadstoffemissionen ebenfalls durch entsprechende Verordnungen limitiert. Während in Industrienationen die Grenzwerte auf EU-Niveau oder darunter liegen, gelten in Schwellenländern etwas niedrigere Emissionsstandards zur finanziellen Entlastung der Wirtschaft und Bevölkerung. Insbesondere in Ballungsgebieten werden bei ungünstigen Wetterlagen, die den Luftaustausch in der Atmosphäre hemmen (z. B. Inversionswetterlage), anthropogene Emissionen als Smog⁷ sichtbar. Im Jahr 2014 hatte der Straßenverkehr in Deutschland als Quelle für luftgetragenen Feinstaub⁸ einen Anteil von etwa 15% bei PM₁₀ bzw. 23% bei PM_{2,5}. Bei den Stickoxidemissionen lag der Anteil bei 40%. Diese Werte sind für ganz Europa repräsentativ, können jedoch an stark verkehrsgeprägten Orten naheliegenderweise höher ausfallen [50, 138].

Eine Option für lokal nahezu emissionsfreie individuelle Mobilität bieten Elektrofahrzeuge mit elektrochemischem Speicher (Akku). Der volumenbezogene Energieinhalt derzeit verfügbarer Batterien und die damit im Vergleich zu verbrennungsmotorisch angetriebenen Fahrzeugen niedrigen Reichweiten stellen eine große Einschränkung dar. Das Nachladen mit Schnellladesystemen ist bisher um ein Vielfaches langsamer als das Befüllen des Kraftstofftanks. Außerdem sind die Kosten für leistungsstarke Batterien mit hohen Kapazitäten noch sehr hoch [125, 151]. Die Bundesregierung hält bspw. im Rahmen der Energiewende am optimistischen Ziel fest bis ins Jahr 2020 eine Million Elektrofahrzeuge auf die Straße zu bringen. Die Förderung erfolgt durch finanzielle Anreize in Form von Steuererleichterungen und Zuschüssen beim Kauf eines Fahrzeugs sowie durch Investitionen in den Ausbau der Infrastruktur zum Laden der Batterien [25]. In China hat die Regierung das Ziel formuliert, dass 20% aller neu-zugelassenen Fahrzeuge im Jahr 2025 rein elektrisch fahren sollen. Nachhaltig ist die Lösung in Bezug auf CO₂-Emissionen nur dann, wenn die benötigte Energie größtenteils regenerativ hergestellt wird. Bei vollelektrischen Nutzfahrzeugen ist das Platzangebot zur Unterbringung der Batterien zwar unkritischer, aber der Energiebedarf aufgrund des deutlich höheren Fahrzeuggewichts gegenüber Pkws wesentlich höher. Im urbanen Bereich werden für den Verteilerverkehr Konzepte wie bspw. der *Urban eTruck*⁹ oder *Canter-E-Cell* auf ihre Alltagstauglichkeit und Wirtschaftlichkeit geprüft [23].

Wird ein Verbrennungsmotor mit einem Elektroantrieb zum Hybridantrieb kombiniert, sinkt die Größe der Batteriespeicher gegenüber dem reinen Elektroantrieb deutlich, was einen positiven Effekt auf die Kosten und das Gewicht zur Folge hat. Die Rekuperation der Bremsenergie wird möglich. Außerdem kann der Verbrennungsmotor kleiner dimensioniert werden, da in Beschleunigungsphasen beide Antriebe gleichzeitig arbeiten und sich ihre Leistungen addieren. Beides hilft den Verbrauch und damit die CO₂-Emissionen zu senken. Je nach Anordnung von Verbrennungs- und Elektromotor können kurze Strecken rein elektrisch zurückgelegt werden [125]. Wesentliche Herausforderungen von Hybridantrieben sind die Komplexität des

⁷engl.: smoke (Rauch) und fog (Nebel)

⁸Staub mit einer Korngröße $\leq 10\mu\text{m}$ bzw. $2.5\mu\text{m}$

⁹Reichweite bis 200 km mit einem zulässigen Gesamtgewicht von bis zu 26 Tonnen.

Antriebsstrangs und die Applikation der ständigen Betriebsmodiwechsel. Eine zentrale Rolle spielen dabei das Thermomanagement des Verbrennungsmotors und der Abgasanlage, die die kontinuierliche Einhaltung der Schadstoffgrenzwerte gewährleisten müssen. Aufgrund der Systemkomplexität sind die Kosten gegenüber Fahrzeugen mit konventionellen Antrieben höher. Dennoch stellen Hybridfahrzeuge zumindest für Pkw derzeit eine attraktive Übergangslösung zum Elektrofahrzeug dar, solange für die o. g. Herausforderungen keine nachhaltigen Lösungen gefunden sind [151].

1.2 Motivation und Zielsetzung

Zukünftige Verschärfungen der Schadstoffgrenzwerte über Euro 6d bei Pkw bzw. Euro VI bei Nfz hinaus oder stringenter Testprozeduren werden die Weiterentwicklung von Hubkolbenmotoren nach dem Viertaktprinzip mit oder ohne elektrische Antriebe erfordern, um verfügbare Potenziale in Bezug auf den thermodynamischen Wirkungsgrad und die Schadstoffemissionen auszuschöpfen. Zwar können synthetische oder insbesondere im Nutzfahrzeugsbereich gasförmige Kraftstoffe (LNG, CNG) zusätzliche Möglichkeiten zur Emissions- und Verbrauchssenkung bieten, doch es besteht nach wie vor Verbesserungsbedarf der klassischen Brennverfahren für Otto- und Dieselmotoren [151].

Die komplexe Interaktion des Verbrennungsmotors, der Abgasnachbehandlung sowie ggf. des elektrischen Antriebs ist nur mit Entwicklungswerkzeugen bewertbar, die einen hohen Reifegrad besitzen. Das Maß an Freiheitsgraden sowie immer kürzere Entwicklungszeiten kombiniert mit dem Ziel kostenintensive Motor- bzw. Fahrzeugmessungen zu reduzieren, erfordern die Ausweitung von Simulationsmethoden in die gesamte Entwicklungsprozesskette. Je nach Fragestellung ist der Detaillierungsgrad unterschiedlich. Ausgehend von Gesamtsystemmodellen, die die gesamte Antriebsstrangkinematik abbilden um für diverse Testzyklen oder Fahrmanöver Fahrleistungen und Verbräuche zu berechnen, über Null- und eindimensionale Modelle, die bspw. zur Berechnung des Arbeitsprozesses dienen oder Aussagen zur Abgasnachbehandlung ermöglichen, bis hin zur 3D-CFD-Simulation zur detaillierten Analyse der Strömung, werden alle Disziplinen entsprechend der Fragestellung im Entwicklungsprozess eingesetzt [82, 125].

Zur Brennverfahrensentwicklung werden heute Analysen von 3D-CFD-Simulationen reaktiver Strömungen genutzt, um eine sinnvolle Vorauswahl von Parametern wie z. B. Kolben- und Brennraumgeometrie, Einspritzverlaufsform und -taktung, usw. für Motorversuche zu erhalten. Für vorhersagefähige 3D-CFD-Simulationen innermotorischer Verbrennungsprozesse müssen die Gemischbildung, die Wärmefreisetzung, die Schadstoffbildung und die thermischen Wandwärmeverluste realistisch abgebildet werden. Dies erfordert Modellansätze, die auf einem hohen chemischen und physikalischen Detaillierungsgrad basieren. Grundvoraussetzung für eine industrielle Anwendung ist dabei stets die Gewährleistung eines wirtschaftlichen Rechenaufwands [82, 90, 89].

Im Rahmen dieser Arbeit wird ein Modellierungskonzept zur 3D-CFD-Simulation der dieselmotorischen Zündung und Verbrennung entwickelt. Mit diesem Konzept wird die Relevanz der detaillierten Reaktionskinetik auf Zünd- und Verbrennungsprozesse langkettiger Kohlenwasserstoffe anhand Fragestellungen aus der Brennverfahrensentwicklung moderner Dieselmotoren bewertet. Ein Ziel ist insbesondere die Verbesserung der Prognosegüte der kinetisch-kontrollierten Vormisch- und teilhomogenen Verbrennung. Diese setzen die genaue Kenntnis der Reaktionsge-

schwindigkeiten voraus. Zur Bestimmung der Reaktionsraten wird in dieser Arbeit ein rechenzeiteffizientes Fortschrittsvariablenmodell basierend auf [48] erweitert und in die vorliegende Simulationsumgebung des 3D-Strömungslöser StarCD [17] zur Berechnung der Direkteinspritzung des Kraftstoffs, der Gemischbildung und Schadstoffbildung integriert. Unter der Annahme, dass der thermodynamische Zustandsraum der innermotorischen Verbrennungssimulation bekannt ist, können alle Speziesreaktionsraten mit einem detaillierten Reaktionsmechanismus a priori berechnet und die Ergebnisse aller Reaktionsverläufe tabelliert werden. Mithilfe einer im physikalischen Raum transportierten Reaktionsfortschrittsvariable kann auf die tabellierten Werte zugegriffen werden. Dazu wird eine Schnittstelle zum 3D-Strömungslöser generiert und eine RANS-Transportgleichung für die Fortschrittsvariable hergeleitet. Eine wesentliche Herausforderung ist dabei die korrekte Abbildung der Interaktion der turbulenten Strömung mit den chemischen Prozessen.

1.3 Aufbau der Arbeit

Die vorliegende Arbeit gliedert sich in acht Kapitel. Der Einleitung folgend werden in Kapitel 2 einige Grundbegriffe der Verbrennung erläutert. In Kapitel 3 wird auf die Teilprozesse der dieselmotorischen Verbrennung eingegangen und die Einspritzung, Gemischbildung, Selbstzündung und Verbrennung sowie Schadstoffbildung näher beschrieben. In Kapitel 4 werden die Grundlagen und Gleichungen zur 3D-CFD-Simulation reaktiver und turbulenter Strömungen aufgelistet. Kapitel 5 gibt einen Überblick über die verwendeten Modelle zur Simulation der Direkteinspritzung und Gemischbildung sowie den Stand der Technik bei der Modellierung der Selbstzündung, Verbrennung und Schadstoffbildung. In Kapitel 6 wird ausführlich die Modellierung der Selbstzündung und Verbrennung zur 3D-CFD-Simulation basierend auf detaillierter Chemie erläutert. Dazu wird auf das Modellkonzept, die Homogene-Reaktor-Rechnungen, die Tabellierung und die Schnittstelle zum 3D-Strömungslöser eingegangen. Danach wird zur Integration in die vorliegende Simulationsumgebung das bisherige Verbrennungsmodell erweitert, was auch eine Verbesserung des Stickoxidmodells ermöglicht. Kapitel 7 befasst sich zunächst mit der Validierung der einzelnen Modelle der Simulationskette anhand brennender Freistrahlen einer Hochdruck-/ Hochtemperaturkammer aus [152]. Danach folgt die Anwendung des Modellkonzepts für motorische Fragestellungen anhand der 3D-CFD-Simulation mehrerer Betriebspunkte des Hochdruck-Arbeitsprozesses eines Pkw-Motors mit Mehrfacheinspritzung und eines schweren Nutzfahrzeugmotors mit *Höchst-AGR-Brennverfahren* aus [153]. Hier werden unter anderem gemessene Druck- und Brennverläufe sowie integrale Messgrößen den Simulationsergebnissen gegenübergestellt. Die Arbeit schließt mit einer Zusammenfassung und einem Ausblick in Kapitel 8.

2 Grundlagen der Verbrennung

Bevor auf die physikalischen Prozesse der Zündung und Verbrennung eingegangen wird, werden anfangs einige Möglichkeiten zur Klassifizierung genannt. Diese sollen zur Einordnung der Art der Verbrennung dienen, mit der sich in dieser Arbeit auseinander gesetzt wird. Die besonderen Merkmale der Zündung und Verbrennung unter motorischen Randbedingungen stehen dabei stets im Fokus und bilden die Grundlage für die anschließende Modellvorstellung.

2.1 Flammentypen

In Verbrennungsprozessen werden Brennstoff und Oxidationsmittel gemischt und verbrannt. In [142] werden Verbrennungstypen über ihren Mischungs- und Strömungstyp charakterisiert. Die Unterscheidung hängt davon ab, ob zuerst gemischt und später verbrannt wird (*vorgemischte Verbrennung*) oder ob Mischung und Verbrennung gleichzeitig ablaufen (*nicht-vorgemischte Verbrennung*). Der Strömungstyp kann dabei *laminar* oder *turbulent*¹ sein. Turbulente Strömungen zeichnen sich durch zufällige zeitliche und räumliche Fluktuationen in einem großen Skalenbereich aus. In der Turbulenztheorie werden charakteristische Zeit- und Längenskalen zur allgemeinen Klassifizierung von turbulenten Strömungen eingeführt, wobei in einem turbulenten Strömungsfeld Turbulenzelemente von sehr unterschiedliche Größe auftreten [116].

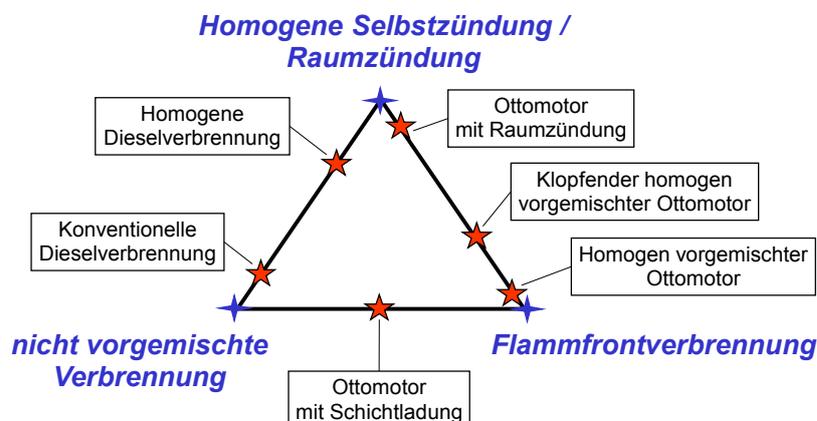


Abbildung 2.1: Darstellung der verschiedenen motorischen Verbrennungsregimes nach [97, 82].

Die innermotorische Verbrennung lässt sich im Allgemeinen in drei Verbrennungstypen klassifizieren: die turbulente Vormischflamme, die nicht vorgemischte Flamme sowie die homogene Instantanflamme. Abb. 2.1 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 Vollast 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

¹lat.: turbare = drehen, beunruhigen, verwirren

Instantanflamme wird in der Literatur oftmals als *kontrolliertes Klopfen* bezeichnet [97, 92]. Sie wird über die Kompression des Endgases durch gleichmäßig verteilte Niedertemperaturreaktionen bis hin zur druckausgeglichenen (homogenen) Selbstzündung initiiert. 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 [44]. Zusätzlich zu den Verbrennungsregimes können im Allgemeinen folgende Flammentypen unterschieden werden.

(A) Laminare Vormischflammen

Bei laminaren Vormischflammen sind Brennstoff und Oxidationsmittel vorgemischt und die Strömung verhält sich laminar. Der Fortschritt laminarer Vormischflammen lässt sich stets durch eine *laminare Flammengeschwindigkeit* beschreiben, die nur vom jeweiligen Gemisch, dem Druck und der Anfangstemperatur abhängt [142].

(B) Laminare nicht-vorgemischte Flammen

Bei *laminaren nicht-vorgemischten Flammen*² werden Brennstoff und Oxidator erst während der Verbrennung gemischt, wobei die Strömung laminar ist. Beispiele hierfür sind *laminare nicht-vorgemischte Gegenstrom-* und *Gleichstromflammen*. Die Flammenfronten von nicht-vorgemischten Flammen sind komplexer als die von Vormischflammen, da alle Gemischzustände ausgehend von reiner Luft bis hin zu reinem Brennstoff vorkommen. Dabei zeigt sich die eigentliche Flammenfront oft durch intensives Leuchten [142].

(C) Turbulente Vormischflammen

Bei diesem Flammentyp brennen Vormischflammen in einem turbulenten Geschwindigkeitsfeld. Bei hinreichend geringer Turbulenz bilden sich lokal gekrümmte und gestreckte laminare Vormischflammenfronten aus, so dass die Beschreibung der turbulenten Vormischflamme oft als Ensemble aus vielen laminaren Vormischflammen erfolgen kann. Vormischflammen zeigen meist ein charakteristisches blaues oder manchmal blaugrünes Leuchten, das von der Lichtemission von angeregtem CH und C₂ bewirkt wird [142] (vgl. Bunsenbrenner³-Flamme Nr. 4 in Abb. 2.2).

(D) Turbulente nicht-vorgemischte Flammen

Hier erfolgt nicht-vorgemischte Verbrennung in einem turbulenten Geschwindigkeitsfeld. Wenn keine aufwändigen Mischtechniken verwendet werden, leuchten nicht-vorgemischte Flammen gelb wegen der thermischen Strahlung von glühenden Rußteilchen, die in den brennstoffreichen Bereichen gebildet werden (vgl. Bunsenbrenner-Flamme Nr. 1 in Abb. 2.2). Verbrennungsvorgänge in modernen direkt einspritzenden Diesel-Motoren fallen in diese Kategorie. Im

²veraltet: *Diffusionsflammen*

³Der Bunsenbrenner ist ein kleiner Gasbrenner, bei dem das Brenngas nach dem Prinzip einer Strahlpumpe die Verbrennungsluft teilweise selbst ansaugt. Benannt nach Robert Wilhelm Bunsen (*1811 – †1899)

Gegensatz zu früheren Vorkammer-Dieselmotoren⁴ wird der Brennstoff direkt in den Brennraum eingespritzt, wodurch es zur turbulenten nicht-vorgemischten Verbrennung kommt. Die einzelnen Prozesse der Dieselverbrennung werden in Kapitel 3 detailliert erläutert.

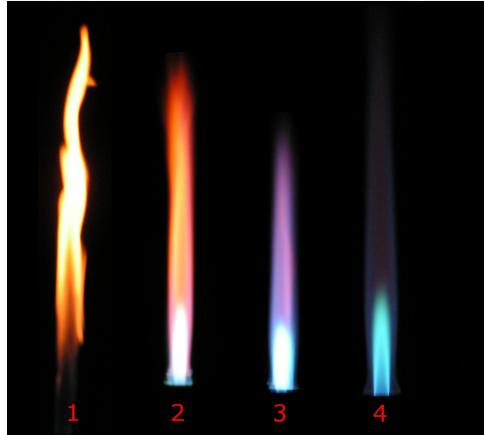
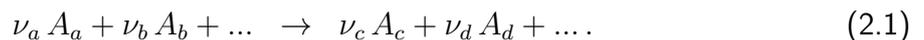


Abbildung 2.2: Verschiedene Flammentypen am Bunsenbrenner in Abhängigkeit von der Luftmenge, die das Luftventil passiert: (1) Ventil geschlossen (Diffusionsflamme); (2) Ventil zur Hälfte geöffnet; (3) Ventil fast vollständig offen; (4) Ventil voll geöffnet (Vormischflamme) [147]

2.2 Chemische Reaktionen

Im vorherigen Abschnitt wurden Verbrennungen zunächst nach verschiedenen Flammentypen kategorisiert. In diesem Teil der Arbeit werden die in einer Flamme stattfindenden chemischen Prozesse näher erläutert.

Jeder Verbrennung liegen *chemische Reaktionen* zu Grunde. Eine chemische Reaktion ist ein Vorgang, bei dem chemische Verbindungen umgewandelt werden, wobei Atome beim Zusammenstoß von Molekülen ausgetauscht werden. Im Verlauf einer chemischen Reaktion werden Atome⁵ *erhalten*, d. h. sie werden weder erzeugt noch vernichtet. Moleküle hingegen werden im Allgemeinen nicht erhalten. Chemische Reaktionen können Wärme abgeben (exotherme Reaktionen) oder aufnehmen (endotherme Reaktionen). Eine chemische Reaktion, bei der aus den Edukten⁶ A_a , A_b usw. die Produkte A_c , A_d usw. gebildet werden, kann in der folgenden Form geschrieben werden



Dabei werden die Faktoren ν_i als stöchiometrische Koeffizienten der Reaktion bezeichnet. Der Reaktionspfeil in (2.1) kann durch ein Gleichheitszeichen ersetzt werden, da jede chemische

⁴Die Vorkammereinspritzung war ein bis in die 1990er Jahre weit verbreitetes Einspritzprinzip für Dieselmotoren. Heute ist sie weitgehend von der Direkteinspritzung verdrängt und kommt nur noch in Nischenanwendungen wie z. B. kleinere Diesel-Generatoren zur Anwendung.

⁵relevant in der Verbrennung: C, H, O und N

⁶auch: Reaktanden

Reaktion theoretisch sowohl vorwärts als auch rückwärts ablaufen kann⁷. Dadurch ergibt sich die allgemeine Form der Reaktionsgleichung

$$\sum_i \nu_i A_i = 0 \quad (2.2)$$

wobei die stöchiometrischen Koeffizienten konventionsgemäß für alle Edukte negativ und für alle Produkte positiv sind [82].

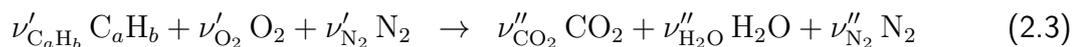
Verbrauchen sich Brennstoff⁸ und Oxidationsmittel⁹ in einer vorgemischten Flamme gegenseitig vollständig, wird eine Verbrennung als *stöchiometrisch* bezeichnet. Luft und Kohlenwasserstoffe verbrennen hierbei lediglich unter Bildung von Kohlenstoffdioxid (CO₂) und Wasser (H₂O). Bei Überschuss von Brennstoff heißt die Verbrennung *fett*, bei Überschuss von Oxidationsmittel *mager*. Anhand der Brennstoff- und Oxidatorzusammensetzung sowie der Bruttoreaktionsgleichung kann das stöchiometrische Verhältnis bestimmt werden. Zur Charakterisierung wird die *Luftzahl* λ oder deren reziproker Wert, das *Äquivalenzverhältnis* ϕ verwendet [142].

2.2.1 Chemisches Gleichgewicht

Jede chemische Reaktion strebt immer ihrem *Gleichgewichtszustand* entgegen, der unter der Voraussetzung erreicht wird, dass ausreichend¹⁰ Zeit zur Verfügung steht. Im Gleichgewichtszustand laufen sowohl Vorwärts- als auch Rückwärtsreaktionen mit identischer Geschwindigkeit ab. Makroskopisch betrachtet wird die sichtbare Reaktionsrate zu Null und die Stoffzusammensetzung ändert sich nicht mehr. Mit Hilfe des *ersten*¹¹ und *zweiten*¹² *Hauptsatzes der Thermodynamik* ist es möglich, in Abhängigkeit der Randbedingungen Temperatur und Druck, die Stoffzusammensetzung im Gleichgewichtszustand zu bestimmen. In [142, 82] wird das Vorgehen detailliert erläutert.

2.2.2 Stöchiometrisches Massenverhältnis

Ausgehend von einer Bruttoreaktionsgleichung eines *reinen*¹³ Kohlenwasserstoffs C_aH_b, der mit *trockener*¹⁴, *idealisierter*¹⁵ Luft reagiert



können die Stöchiometrie-Koeffizienten der Edukte ν'_i und Produkte ν''_i bestimmt werden, wobei das Verhältnis a/b bzw. $X_{C/H}^{Kr} = (X_C/X_H)^{Kr}$ ¹⁶ entscheidend für die Bilanz ist. Das

⁷Das gilt vorwiegend für sogenannte Elementarreaktionen (siehe Abschnitt 2.3.1)

⁸z. B. ein Kohlenwasserstoff

⁹z. B. Luft

¹⁰streng genommen unendlich

¹¹1. HS: $dU = dQ + dW$

¹²2. HS: $dS = dQ/T + dS_{irrev}$.

¹³Heutzutage ist es üblich Kraftstoffe mit Additiven zu versetzen (z. B. Ethanol), sei es der Gesetzgebung wegen oder um bspw. die Zündwilligkeit zu verbessern (Winterdiesel). Deshalb können Kraftstoffe auch Sauerstoffanteile in nicht vernachlässigbaren Mengen beinhalten.

¹⁴Luft, deren Wasseranteil gleich Null ist.

¹⁵Die in dieser Arbeit verwendete volumetrische Luftzusammensetzung ist stets 21 % O₂ und 79 % N₂. Der Anteil an Argon von ca. 0.934 % wird dem Stickstoff zugeschrieben, während der CO₂-Anteil von ca. 0.038% sowie alle weiteren Bestandteile, deren Summe < 0.002 % beträgt, vernachlässigt werden.

¹⁶Verhältnis: Anzahl C-Atome zu H-Atome

Verhältnis von Stickstoff- zu Sauerstoffatomen $X_{N/O}^L = (X_N/X_O)^L$ kann bei einer vollständigen, schadstofffreien Verbrennung als konstant angenommen werden, da sowohl Stickstoff als auch Sauerstoff nur in der Luft vorkommen und der Anteil des Kohlenwasserstoffs C_aH_b das Verhältnis $X_{N/O}^L$ nicht verändert. Für $\nu'_{C_aH_b} = 1$ und $a = 1$ ergibt sich

$$\nu''_{CO_2} = 1 \quad (2.4)$$

$$\nu''_{H_2O} = \frac{1}{2X_{C/H}^{Kr}} \quad (2.5)$$

$$\nu'_{O_2} = \nu''_{CO_2} + \frac{\nu''_{H_2O}}{2} = 1 + \frac{1}{4X_{C/H}^{Kr}} \quad (2.6)$$

$$\nu'_{N_2} = \nu''_{N_2} = X_{N/O}^L \cdot \nu'_{O_2} = X_{N/O}^L \left(1 + \frac{1}{4X_{C/H}^{Kr}} \right). \quad (2.7)$$

Das stöchiometrische Massenverhältnis L_{st} von Luft und Brennstoff ist demnach

$$L_{st} = \left(\frac{m_L}{m_{Kr}} \right)_{st} = \frac{n_{Kr} \cdot (\nu'_{O_2} + \nu'_{N_2}) \cdot X_{O_2}^L (M_O + X_{N/O}^L M_N)}{n_{Kr} \cdot (M_C + M_H/X_{C/H}^{Kr})} \quad (2.8)$$

$$= \frac{(X_{C/H}^{Kr} + 1/4) (1 + X_{N/O}^L) \cdot X_{O_2}^L (M_O + X_{N/O}^L M_N)}{M_C \cdot X_{C/H}^{Kr} + M_H} \quad (2.9)$$

und damit eine Funktion der molaren Massen der Elemente M_j , den Verhältnissen $X_{C/H}^{Kr}$ und $X_{N/O}^L$ sowie der Sauerstoffkonzentration der Luft $X_{O_2}^L$. Mit L_{st} lässt sich die im vorherigen Abschnitt erwähnte Luftzahl λ mit

$$\lambda = \frac{(m_L/m_{Kr})}{L_{st}} \quad (2.10)$$

definieren. Mit Gleichung (2.10) kann bei bekannter Luft- und Kraftstoffmasse ermittelt werden, ob ein Luft-Kraftstoff-Gemisch *vor* der Verbrennung mager, stöchiometrisch oder fett vorliegt. Während der Verbrennung ist dies mit der Luftzahl λ nicht mehr möglich. Da diese Kenntnis über den gesamten Verbrennungsvorgang hinweg von Bedeutung ist, wird in Abschnitt 5.2.2 eine *verbrennungsinvariante* Größe eingeführt.

2.3 Reaktionskinetik und Reaktionsmechanismen

Die Geschwindigkeit einer chemischen Reaktion ist bei technischen Fragestellungen in der Regel von Interesse. Eine chemische Reaktionen, wie sie z. B. in (2.1) gegeben ist, läuft dabei auf Molekularebene immer sowohl vorwärts als auch rückwärts ab. Die resultierende Reaktionsrichtung ergibt sich dann aus der einfachen Differenz zwischen Vor- und Rückreaktionen. Daher stellt das chemische Gleichgewicht lediglich einen Sonderfall dar, in dem auf Molekularebene Vor- und Rückreaktionen jeweils gleich schnell ablaufen, so dass kein resultierender sichtbarer Stoffumsatz mehr stattfindet. Um auf die Zeit, die bis zum Erreichen des Gleichgewichts notwendig ist, schließen zu können, wird die sogenannte *Reaktionskinetik* eingeführt [49].

Für die in (2.1) angegebene Reaktion kann die zeitliche Änderung einer Spezies-Konzentration, z. B. für $[A_c]$, mit dem empirischen Ansatz

$$\frac{d[A_c]}{dt} = a_c \left(\underbrace{k_f [A_a]^{a_a} [A_b]^{a_b}}_{\text{vorwärts}} - \underbrace{k_b [A_c]^{a_c} [A_d]^{a_d}}_{\text{rückwärts}} \right) \quad (2.11)$$

angegeben werden, wobei der erste Term auf der rechten Seite die Reaktionsrate der Vorwärtsreaktion und der zweite Term die Rate der Rückwärtsreaktion beschreibt. Dabei sind a_a , a_b usw. die *Reaktionsordnungen* bezüglich der Stoffe A_a , A_b usw., wobei die Summe aller Exponenten die *Gesamt-Reaktionsordnung* darstellt, und k_f und k_b die sogenannten *Geschwindigkeitskoeffizienten* der Vor- bzw. Rückreaktion. Diese müssen für jede einzelne chemische Reaktion experimentell¹⁷ ermittelt werden. Da die Geschwindigkeitskoeffizienten der meisten Reaktionen extrem temperaturabhängig sind, werden sie üblicherweise mit einem *Arrhenius*¹⁸-Ansatz der Form

$$k = A T^b \exp \left(-\frac{E_A}{RT} \right) \quad (2.12)$$

dargestellt. Der Vorfaktor A und der Exponent b sowie die Aktivierungsenergie E_A sind für viele chemische Reaktionen in umfangreichen Tabellenwerken zusammengefasst, siehe z. B. [142].

Im Sonderfall des chemischen Gleichgewichts ist die integrale Umsatzrate gleich Null. Mit Hilfe dieser Bedingung ergibt sich

$$\frac{k_f}{k_b} = \frac{k_f [A_a]^{a_a} [A_b]^{a_b}}{k_b [A_c]^{a_c} [A_d]^{a_d}} \equiv K_c, \quad (2.13)$$

wobei K_c die in Abhängigkeit der Stoffkonzentrationen definierte *Gleichgewichtskonstante* ist. Über die Beziehung

$$K_c = K_p \left(\frac{p^0}{RT} \right)^{\sum_i a_i} \quad (2.14)$$

ist K_c eindeutig an die in Abhängigkeit der Partialdrücke definierte Gleichgewichtskonstante K_p gekoppelt. Die Gleichgewichtskonstante K_p ist für eine sehr große Anzahl verschiedener Stoffe in Tabellenwerken aufgeführt [130, 57].

2.3.1 Elementarreaktionen

Eine Bruttoreaktionsgleichung weist nur die Ausgangs- und Endstoffe einer chemischen Reaktion auf. Die Umwandlung der Edukte in Produkte verläuft in der Regel über Zwischenprodukte. Um alle ablaufenden Reaktionen zu berücksichtigen, müssen bei der Verbrennung von selbst relativ kleinen Kohlenwasserstoffen sehr umfangreiche *Reaktionsmechanismen* verwendet werden. Zum Teil sind mehrere tausend *Elementarreaktionen* am Gesamtgeschehen beteiligt. Eine Elementarreaktion stellt eine Reaktion dar, die auf molekularer Ebene genau so abläuft, wie es die Reaktionsgleichung beschreibt [49]. Dabei sind folgende Typen zu unterscheiden:

¹⁷Z. B. mit Versuchen in Flussreaktoren

¹⁸*Svante August Arrhenius* (*19.02.1859, †02.10.1927) war ein schwedischer Physiker und Chemiker und Nobelpreisträger für Chemie.

- *Unimolekulare Reaktionen* beschreiben den Zerfall oder die Umlagerung eines Moleküls,



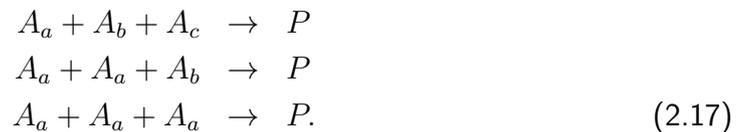
Sie besitzen ein Zeitgesetz erster Ordnung, d. h. bei Verdopplung der Ausgangskonzentration verdoppelt sich auch die Reaktionsgeschwindigkeit.

- *Bimolekulare Reaktionen* sind der am häufigsten vorkommende Reaktionstyp. Sie erfolgen gemäß den Reaktionsgleichungen



Bimolekulare Reaktionen haben immer ein Zeitgesetz zweiter Ordnung. Die Verdopplung der Konzentration jedes einzelnen Partners trägt jeweils zur Verdopplung der Reaktionsgeschwindigkeit bei.

- *Trimolekulare Reaktionen* sind meist Rekombinationsreaktionen und befolgen grundsätzlich ein Zeitgesetz dritter Ordnung



Das Wechselspiel dieser Elementarreaktionen beeinflusst den gesamten Verbrennungsvorgang. Unabhängig von den spezifischen Eigenschaften des Brennstoffs weisen alle Reaktionsmechanismen Eigenschaften auf, die für Verbrennungsprozesse charakteristisch sind. So ergibt sich z. B., dass selbst bei großen Reaktionsmechanismen nur wenige Elementarreaktionen die Gesamtgeschwindigkeit beeinflussen. In [142] werden Methoden zur Analyse sowie Grundlagen zur Vereinfachung von komplexen Reaktionsmechanismen diskutiert und Konsequenzen für die mathematische Modellierung beschrieben.

Die Oxidation von Kohlenwasserstoffen kann als verzweigter Kettenfortpflanzungsprozess aufgefasst werden, bei welchem die im Zuge des Reaktionsablaufs gebildeten Zwischenprodukte als Kettenträger agieren. Die Oxidation läuft über Hunderte von Zwischenprodukten. Der Reaktionsablauf bzw. Reaktionsweg ist stark von der Temperatur abhängig und kann in die drei nachfolgend beschriebenen Temperaturbereiche eingeteilt werden [142].

Bei hohen Temperaturen oberhalb 1100 K ist die Kettenverzweigung



dominierend. Diese Reaktion verliert bei niedrigeren Temperaturen schnell an Bedeutung. Im mittleren Temperaturbereich 900 K bis 1100 K gewinnen die zusätzlichen Verzweigungen



an Bedeutung, wobei die OH^\bullet -Radikale z. T. wieder in das ursprünglich eingesetzte HO_2^\bullet -Radikal zurückgebildet werden. Im Niedertemperaturbereich unterhalb 900 K ist der H_2O_2 -Zerfall relativ langsam und es gewinnen sogenannte *entartete Verzweigungsprozesse* an Bedeutung, die dadurch gekennzeichnet sind, dass Vorläufer der Kettenverzweigung (z. B. RO_2) bei höheren Temperaturen wieder zerfallen. Dadurch wird eine inverse Temperaturabhängigkeit der Reaktionsrate verursacht, die als 2-Schritt-Reaktionsmechanismus beschrieben werden kann [142].

2.3.2 Partielles Gleichgewicht und Quasi-Stationarität

Zwei wesentliche Aspekte für die Vereinfachung der Berechnung von Reaktionsmechanismen sind die Annahmen von *partiellen Gleichgewichten* und *Quasi-Stationaritäten*. In einem Reaktionssystem mit einer großen Anzahl von Reaktionen zwischen vielen beteiligten Spezies wird von einem *partiellen Gleichgewicht* gesprochen, wenn einige Reaktionen derart schnell ablaufen, dass die Annahme des Gleichgewichts zwischen den in diesen Reaktionen auftretenden Spezies zu jedem Zeitpunkt gerechtfertigt ist. Dies bedeutet jedoch nicht, dass die absoluten Konzentrationen der Spezies, die sich im partiellen Gleichgewicht befinden, zeitlich konstant sein müssen. Die Konzentrationsänderungen aller beteiligten Spezies sind durch die Gleichgewichtsannahme fest aneinander gekoppelt, so dass die Bestimmung der Spezieskonzentrationen wesentlich vereinfacht werden kann [142].

Eine weitere Vereinfachung ist über die Annahme der *Quasi-Stationarität* gegeben. Ein Zustand wird im Allgemeinen als *quasi-stationär* bezeichnet, wenn bei einer Folgereaktion der zweite Reaktionsschritt sehr viel schneller abläuft als der erste. In diesem Fall kann näherungsweise angenommen werden, dass die gesamte Stoffmenge, die in der ersten Teilreaktion gebildet wird, sofort durch die sehr viel schnellere zweite Teilreaktion abgebaut wird. Damit ist die zeitliche Änderungsrate der Konzentration des Zwischenprodukts näherungsweise gleich Null. Das hat zur Folge, dass die Stoffmenge quasi-stationär ist [49].

2.3.3 Chemische Eigenschaften von Dieselkraftstoffen

Dieselmotorkraftstoffe sind Brennstoffe auf Mineralölbasis, die sich aus über 200 Komponenten zusammensetzen [82]. Aufgrund ihrer physikalischen (Viskosität, Dichte, ...) und chemischen (Cetan-Zahl¹⁹, Aromatenanteil²⁰, ...) Komplexität ist eine reaktionskinetische Modellierung sehr schwierig. Des Weiteren ist zu erwähnen, dass auf dem deutschen Markt zurzeit mehrere Sorten auf Mineralöl basierender Dieselmotorkraftstoffe für Pkw angeboten werden. Obwohl alle Sorten die DIN EN 590 erfüllen, ist gerade bei den Premium-Kraftstoffen zu erkennen, dass Markenfirmen durch spezielle Zusätze²¹ bzw. Qualitätsverbesserung versuchen, sich von Mitbewerbern abzugrenzen [26, 119]. Diese Sortenvielfalt erschwert eine allgemeine reaktionskinetische Modellierung zusätzlich.

Aus diesem Grund werden Ersatzkraftstoffe²² eingeführt, die möglichst alle chemischen Eigenschaften von Dieselmotorkraftstoff abbilden sollen. Als Ersatzkraftstoffe werden Reaktionsmechanismen von bspw. n-Heptan, α -Methylnaphtalen oder Toluol verwendet. Andererseits versuchen manche Forschungsgruppen, Ersatzkraftstoffe, mit der Absicht die chemischen Eigenschaften besser abzubilden, zu mischen [72]. Diese Vorgehensweise ermöglicht die Modellierung von Biokraftstoffen, deren chemische Eigenschaften sich zum Teil drastisch von Kraftstoffen auf

¹⁹Beschreibt die Zündwilligkeit des Dieselmotorkraftstoffs gemäß DIN-51773. Hängt hauptsächlich von der Anzahl der unverzweigten Kohlenwasserstoffmoleküle ab.

²⁰Als Aromaten (aromatische Verbindungen) oder auch Arene werden in der organischen Chemie Verbindungen bezeichnet, die einen aromatischen Ring enthalten. Aromatische Ringe sind ein zyklisches Strukturmotiv aus konjugierten Doppelbindungen und/oder freien Elektronenpaaren oder unbesetzten p-Orbitalen, das der Hückel-Regel genügt. Sie zeichnen sich durch gegenüber anderen Doppelbindungssystemen stark verminderte und veränderte Reaktivität aus [14].

²¹GtL-Beimischung (Gas-to-Liquid) sowie spezielle Additive zur Erhöhung der Cetan-Zahl

²²engl.: Surrogate Fuels

Mineralölbasis unterscheiden. Besonders hervorzuheben ist, dass Biokraftstoffe²³ wenige bis keine Aromatenanteile enthalten, was die Rußbildung maßgeblich mindert. Als negativ anzusehen ist jedoch meist der niedrigere Heizwert im Vergleich zu konventionellem Dieselmotortreibstoff.

Bei der Wahl des Ersatzkraftstoffs sind für die Zündung und Verbrennung folgende Eigenschaften ausschlaggebend:

- **Brennwert:** Der Brennwert ist ein Maß für die in einem Stoff enthaltene thermische Energie und beeinflusst somit unmittelbar die Gleichgewichtstemperatur einer Verbrennung. Für die Schadstoffbildung ist die Temperatur eine entscheidende Größe, weshalb bei der Verwendung von Schadstoffbildungsmodellen die lokalen Brennraumtemperaturen möglichst exakt mit der Realität übereinstimmen müssen. Keinesfalls sind verlässliche Aussagen zur Schadstoffbildung möglich, wenn bspw. Gemischbildungsdefizite durch die Anpassung des Brennwertes zur besseren Übereinstimmung von simulierten und gemessenen Brennraumdruckkurven kompensiert werden [82].
- **C/H-Verhältnis:** In der Bruttoreaktionsgleichung (2.3) ist ersichtlich, dass die Stöchiometrie-Koeffizienten der Verbrennungsprodukte CO_2 und H_2O vom C/H-Verhältnis des Kraftstoffs abhängen. Da die Standardbildungsenthalpien von CO_2 und H_2O unterschiedlich sind [142], müssen das C/H-Verhältnis sowie die Standardbildungsenthalpie des Kraftstoffs zum Brennwert passen.
- **Chemischer Zündverzug:** Die Zeit zwischen Beginn der Vorreaktionen und der Selbstzündung wird als chemische Zündverzugszeit bezeichnet. Da diese sehr stark von den thermodynamischen Randbedingungen (insbesondere der Temperatur) abhängt, ist sie eine der wichtigsten Eigenschaften, die bei der Wahl eines Modellkraftstoffs berücksichtigt werden müssen. So führen bspw. bei der Direkteinspritzung größere Zündverzugszeiten zu einer deutlich längeren Gemischbildung vor der Selbstzündung und somit zu einer unerwünschten schlagartigeren Verbrennung des Kraftstoffs (vgl. Dieselschlag) [82].
- **Aufteilung Energiefreisetzung cool- und hot-flame:** Für eine Übereinstimmung der Zündverzugszeiten ist darauf zu achten, dass die Niedertemperaturkinetik geeignet formuliert ist. Während der Hauptverbrennung spielt die Kinetik eine untergeordnete Rolle. Stattdessen sind die Gleichgewichtskonzentrationen der einzelnen Spezies für die Wärmefreisetzung entscheidend. Es ist wichtig, dass der Ersatzkraftstoff in beiden Regimes gut mit realem Dieselmotortreibstoff übereinstimmt [82].
- **Verdampfung:** Für die Verdampfung des Kraftstoffs muss die Dampfdruckkurve des Ersatzkraftstoffs der von realem Dieselmotortreibstoff möglichst ähnlich sein. Zwar ist der Verdampfungsprozess unabhängig zur Zündung und Verbrennung zu sehen, spielt aber bei der Gemischbildung im realen Motor eine tragende Rolle, da er letztlich die lokalen Konzentrationen im Brennraum bestimmt. In dieser Arbeit werden ausschließlich die Dampfdruckkurve sowie die Eigenschaften der Flüssigphase von $\text{C}_{12}\text{H}_{26}$ genutzt [82].
- **Dichte:** Die temperaturabhängige Dichte des Kraftstoffs sollte der von Dieselmotortreibstoff entsprechen, so dass einerseits Massen- und Volumenströme bei der Einspritzung mit Messungen vergleichbar sind und andererseits der Strahlimpuls identisch ist, welcher direkt auf die Gemischbildung wirkt.

²³Ausgangsstoffe von Biokraftstoffen sind nachwachsende Rohstoffe, wie z. B. Ölpflanzen, Getreide, Zuckerrüben oder -rohr, Wald- und Restholz, Holz aus Schnellwuchsplantagen, spezielle Energiepflanzen und anderes.

2.3.4 Reaktionsmechanismen

Selbst für einfache Modellkraftstoffe umfassen *detaillierte Reaktionsmechanismen* bereits mehrere hunderte Spezies und tausende von Elementarreaktionen [142]. Für eine rechenzeit-effiziente simulatorische Analyse eines detaillierten Reaktionsmechanismus ist insbesondere eine 0D-Simulationsumgebung geeignet. Diese enthält lediglich die Thermodynamik der einzelnen Spezies und den Mechanismus. Sie ist unter dem Namen *Homogener Reaktor* bekannt. In Homogenen Reaktoren können vergleichsweise schnell komplexe Reaktionsmechanismen für verschiedene thermodynamische Randbedingungen getestet werden, da weder konvektiver noch diffusiver Transport der Spezies berücksichtigt werden müssen, sondern ausschließlich deren Massenerhaltung. Zur Bestimmung der Temperatur ist zusätzlich die Lösung der Energieerhaltungsgleichung notwendig.

Zur Simulation der chemischen Prozesse beim Dieselmotor wurde in der Vergangenheit aufgrund seiner ähnlichen Eigenschaften insbesondere bzgl. der Cetan-Zahl oftmals n-Heptan als Modellkraftstoff herangezogen. Der in dieser Arbeit verwendete n-Heptan-Mechanismus wurde im Rahmen des EU-Forschungsprojekts *NICE*²⁴ weiterentwickelt. Nach [86] bildet dieser Mechanismus die Nieder- und Hochtemperaturkinetik des realen Dieselmotorkraftstoffs in ausreichend guter Näherung ab. Somit können der chemische Zündverzug sowie die Wärmefreisetzung über den gesamten Verbrennungsprozess gut abgebildet, was für den Modellansatz dieser Arbeit ausschlaggebend ist.

Reale Dieselmotorkraftstoffe enthalten neben den aliphatischen auch aromatische Komponenten, die als Rußvorläufer gelten. Um dies zu berücksichtigen, wurde im Rahmen eines weiteren EU-Projekts der sogenannte *IDEA*²⁵-Kraftstoff als Modellbrennstoff nach eingehender Untersuchung vorgeschlagen und reaktionskinetisch modelliert. Die flüssige Mischung besteht dabei aus 70 Vol-% n-Dekan und 30 Vol-% α -Methylnaphthalin. Die Dichte bei Standardbedingungen²⁶ liegt für den IDEA-Brennstoff bei 817 kg/m^3 (Diesel: 830 kg/m^3). Die Cetan-Zahl des IDEA-Brennstoffs gleicht mit 56 beinahe dem Wert für Diesel mit ungefähr 53.

IDEA- und Dieselmotorkraftstoff haben ein nahezu identisches Verhalten hinsichtlich Zündung und Wärmefreisetzung. Eine detaillierte Beschreibung des chemischen Mechanismus, der neben der Nieder- und Hochtemperaturkinetik auch *Schadstoffbildungsmechanismen*²⁷ enthält, ist bspw. in [3, 4] gegeben. Die IDEA-Reaktionskinetik erreicht nicht die Qualität des n-Heptan Mechanismus. Diese ist insbesondere in fetten Gemischen unzureichend, was einerseits zu falschen Zündverzügen aber auch von der Realität stark abweichenden Spezieskonzentrationen führt.

Detaillierte Mechanismen können für homogene Reaktorrechnungen effizient genutzt werden. Motorische 3D-Applikationen, bei denen zusätzliche turbulente Strömungs- und Transportvorgänge berücksichtigt werden müssen (vgl. Abschnitt 4.2), scheiden jedoch aus, da eine direkte Auflösung des gesamten Zeit- und Längenskalenspektrums aufgrund des enormen Rechenaufwands nicht möglich ist. Daher wird versucht, die detaillierten Mechanismen systematisch auf die reaktionsbestimmenden Gleichungen und Spezies zu reduzieren. Das mathematische Gleichungssystem wird dadurch weniger steif und damit schneller lösbar. Das Resultat sind *reduzierte*

²⁴engl.: New Integrated Combustion System for future Passenger Car Engines

²⁵engl.: Integrated Diesel European Action

²⁶Umgebungstemperatur: 25 °C; Umgebungsdruck: 1013.25 hPa

²⁷PAK-Chemie aus [79] und eine reduzierte Version der GRI-Mech Chemie für NO aus [123]

n-Heptan Mechanismen	# Spezies	# Reaktionen	Forschungseinrichtung
NICE (EU-Projekt) <i>Mauss et. al</i> [86]	121	973	Brandenburgische Technische Universität Cottbus, Lund Combustion Engineering (LOGE)
<i>Reitz et al.</i> [99]	29	52	Engine Research Center, University of Wisconsin-Madison
<i>Golovitchev</i> [38]	57	290	Chalmers University of Technology
<i>Williams</i> [150]	44	216	University of California
<i>Westbrook et al.</i> [21]	544	2446	Lawrence Livermore National Laboratory

Tabelle 2.1: *n*-Heptan Reaktionsmechanismen unterschiedlicher Forschungsgruppen.

Reaktionsmechanismen, die primär auf Quasistationaritätsannahmen und Annahmen für partielle Gleichgewichte beruhen. Hilfsansätze zur Reduzierung bieten Sensitivitäts-, Reaktionsfluss- und Eigenwertanalysen [142]. In diesem Kontext kann die Methode der *intrinsischen niedrig dimensionalen Mannigfaltigkeiten (ILDM)* genannt werden. Sie basiert auf der Annahme, dass die thermokinetischen Zustände des Systems auf Hyperflächen im Zustandsraum relaxieren, die den ILDMs entsprechen. Dabei wird ausgenutzt, dass die sehr schnell relaxierenden chemischen Prozesse identifiziert und anschließend entkoppelt werden können [78, 77]. Aufgrund des großen thermodynamischen Spektrums motorischer Applikationen sind selbst reduzierte Mechanismen meist noch zu rechenintensiv [126].

Eine rechenzeiteffiziente Lösung bieten sogenannte *Fortschrittsvariablenmodelle* [71, 70, 146, 18, 48]. Diese können chemische Zündverzögerungen sowie die Wärmefreisetzung über den gesamten Verbrennungsprozess anhand der Kenntnis einer (oder mehrerer) *Reaktionsfortschrittsvariable(n)* vorhersagen. Diese Variable stellt den Bezug zur Reaktionskinetik her und ist die Führungsgröße für die lokal stattfindenden chemischen Prozesse. Sie bestimmt nicht nur die chemische Zeitskala und somit die Reaktionsgeschwindigkeit, sondern zeigt durch ihre Normierung auch direkt den Reaktionsfortschritt an und verleiht den Fortschrittsvariablenmodellen ihren Namen. Bei der Modellierung sind als größte Herausforderungen deren Quellterme unter Verwendung der detaillierten Reaktionsmechanismen sowie turbulente Strömungs- und Transportprozesse zu nennen. Ein Ansatz zur Simulation der dieselmotorischen Selbstzündung und Verbrennung wurde im Rahmen dieser Arbeit entwickelt und wird in Kapitel 6 vorgestellt.

3 Dieselmotorische Verbrennung

Die bisherigen allgemeinen Grundlagen sollen nun in Zusammenhang mit der dieselmotorischen Verbrennung gebracht werden. Die Relevanz der einzelnen chemischen Prozesse sowie deren Auswirkungen werden auf diese Weise ersichtlich, wobei Details insbesondere der Selbstzündungs- und Verbrennungsprozesse im Kapitel der Modellierung ausführlich beschrieben werden.

Generell kann der Verbrennungsmotor als eine Energieumwandlungsanlage gesehen werden, bei der im Brennraum die im Brennstoff gebundene chemische Energie zunächst in thermische und anschließend in mechanische Energie umgewandelt wird, wobei die Kolbenmaschinen nach ihren Bauformen¹ unterschieden werden können. Im Hinblick auf den Ladungswechsel wird beim Hubkolbenmotor zwischen dem 4-Takt- und dem 2-Takt-Verfahren unterschieden [33, 45]. Bei modernen DE-Dieselmotoren wird der Brennstoff am Ende der Kompression, in der Regel kurz vor dem oberen Totpunkt, unter hohem Druck² in den Brennraum eingespritzt. Das sich dabei bildende Brennstoffspray verdampft, vermischt sich mit der heißen Luft und entzündet sich von selbst. Im Gegensatz zum Ottomotor steht beim Dieselmotor nur eine sehr kurze Zeitspanne für die Gemischbildung zur Verfügung. Eine schnelle Einspritzung und eine möglichst gute Zerstäubung des Brennstoffs sind deshalb Voraussetzung für eine schnelle und intensive Durchmischung von Brennstoff und Luft [82, 43, 44].

In Abb. 3.1 sind die bei der dieselmotorischen Gemischbildung und Verbrennung ablaufenden Teilprozesse aufgelistet. Die einzelnen Teilprozesse laufen weitgehend simultan ab und stehen in Wechselwirkung miteinander, was die Modellierung der dieselmotorischen Verbrennung äußerst komplex gestaltet [82]. Im Folgenden sollen nun die einzelnen Teilprozesse näher erläutert werden.

3.1 Einspritzung und Gemischbildung

Im Gegensatz zur früher verwendeten Einspritzung in eine Vor- oder Wirbelkammer wird heute fast ausschließlich die direkte Einspritzung in den Brennraum eingesetzt. Dabei ist der Brennraum größtenteils als Mulde im Kolben untergebracht. Der Brennstoff wird mit einer in der Regel zentral angeordneten Mehrlochdüse eingespritzt. Die Anzahl der Düsenlöcher sowie deren Durchmesser spielen bei der Gemischbildung eine tragende Rolle [82]. Bei niedrigen Lasten werden kleine Brennstoffmengen eingespritzt. Hier sind für eine gute Gemischbildung kleine Düsenlochdurchmesser von Vorteil, da diese die Zerstäubung des Einspritzstrahls begünstigen. Bei hohen Lasten sind größere Düsenlochdurchmesser notwendig, um die gewünschte Brennstoffmenge in möglichst kurzer Zeit in den Brennraum einspritzen zu können. Somit ist klar, dass der Düsenlochdurchmesser und die Anzahl der Düsenlöcher bei einem transient betriebenen Dieselmotor letztlich immer einen Kompromiss darstellen. Weitere Parameter sind der Einspritzkegelwinkel, die Konizität des Düsenlochs und der Verrundungsgrad im Innern der Düse [9]. Des Weiteren können zwei Bauformen unterschieden werden: Minisackloch- und Sitzlochdüsen. Das Ziel dabei ist einerseits eine Ausführung zu realisieren, die die Einbringung von Kleinstmengen präzise (reproduzierbar zu einem bestimmten Zeitpunkt) zulässt und gleichzeitig bei sehr hohen

¹Heutzutage: Reihen-, V- und Boxermotoren

²Bei *Common-Rail-Einspritzsystemen* sind heutzutage Einspritzdrücke von 3000 bar möglich, welche mittlerweile auf dem Niveau von Systemen mit Druckverstärkern (APCRS) liegen.



Abbildung 3.1: Teilprozesse der dieselmotorischen Gemischbildung und Verbrennung [82]

Einspritzmengen keine Kavitation³ aufweist. Andererseits ist eine möglichst hohe Symmetrie der Einspritzstrahlen wünschenswert, deren Realisierung bei größeren Düsenlochvolumina einfacher ist. Große Düsenlochvolumina führen jedoch aufgrund des dort zunächst verbleibenden und später langsam „ausfließenden“ Kraftstoffs zur Bildung von unverbrannten Kohlenwasserstoffen (HC). Zur Auslegung der Düsen werden heutzutage Düseninnenströmungssimulationen durchgeführt [83].

Hohe Einspritzdrücke sind für die Zerstäubung des Kraftstoffs immer von Vorteil. Jedoch muss in Betracht gezogen werden, dass die Einspritzpumpen für hohe Einspritzdrücke einen nicht vernachlässigbaren Verbraucher darstellen, der den Gesamtwirkungsgrad des Motors mindert. Bei kurzen Einspritzdauern und bei gleichbleibender Einspritzmenge muss zusätzlich berücksichtigt werden, dass auch mehr Kraftstoff pro Zeit umgesetzt wird. Das führt aufgrund der ansteigenden Verbrennungstemperaturen zu höheren NO_x -Emissionen und das Verbrennungsgeräusch nimmt zu, was aus Komfortgründen ebenfalls als Einschränkung gesehen werden muss. Unter der Prämisse bei hoher Lastanforderung einen möglichst hohen Einspritzdruck zu liefern, werden Einspritzsysteme stetig weiterentwickelt. Dabei hat sich aus heutiger Sicht das *Common-Rail*-

³lat.: cavitare = aushöhlen. Die Bildung und Auflösung von Dampfblasen in Flüssigkeiten durch Druckschwankungen.

*Einspritzsystem*⁴(CR) durchgesetzt. Es zeichnet sich im Gegensatz zu dennockengetriebenen Einspritzsystemen durch die Entkopplung der Druckerzeugung von der Motordrehzahl aus. Dadurch können schon bei geringeren Motordrehzahlen hohe Einspritzdrücke realisiert werden. Insbesondere für die Voreinspritzung ist das von Vorteil, da der Einspritzzeitpunkt frei gewählt werden kann. Nockengetriebene Hochdruckeinspritzsysteme sind das *Pumpe-Leitung-Düse* (PLD) und das *Pumpe-Düse* System, deren Funktionsprinzip in [82] beschrieben ist.

Die Einspritzstrahlen treten mit hoher Geschwindigkeit aus der Einspritzdüse aus, zerfallen infolge der hohen Relativgeschwindigkeit zur umgebenden hochverdichteten Luft in kleine Tröpfchen und werden mit fortschreitendem Eindringen in den Brennraum zerstäubt. Die Strahlausbreitung und die damit verbundene Gemischbildung werden durch die Einspritzparameter und das Strömungsfeld (Drall, Turbulenz) im Brennraum bestimmt. Die kinetische Energie des Strahls ist in der Regel um mindestens eine Größenordnung höher als die der Verbrennungsluft. Bei kleinen Einspritzmengen also beispielsweise bei der Voreinspritzung wird der Strahl in kurzer Zeit sehr stark abgebremst. In diesem Fall ist die kinetische Energie des Strahls und die des Strömungsfelds im Brennraum in der gleichen Größenordnung. Hier trägt das Strömungsfeld im Brennraum somit entscheidend zur Strahlausbreitung bei [98].

Am Strahlrand vermischen sich die Brennstofftropfen mit der heißen Luft im Brennraum (*Air Entrainment*). Dadurch werden die Tropfen infolge von konvektiver Wärmeübertragung aufgeheizt, und der Brennstoff beginnt schließlich zu verdampfen. Die Evaporationsrate der Tropfen wird durch die Diffusion des Brennstoffs von der Tropfenoberfläche (hohe Dampfkonzentration⁵) in die Tropfenumgebung (niedrige Dampfkonzentration) bestimmt. Bei der konventionellen dieselmotorischen Verbrennung laufen Strahlausbreitung, Gemischbildung und Verbrennung zwar teilweise simultan ab, sind aber räumlich getrennt. Die gezielt niedrigen Sauerstoffkonzentrationen moderner Brennverfahren begünstigen diese räumliche Trennung zusätzlich. Die Eindringtiefe der Flüssigkeit ist meistens kleiner als die sogenannte *Lift-Off-Länge*, die den Abstand zwischen dem Düsenlochaustritt und dem räumlichen Zündort beschreibt [107]. Nur ein geringer Anteil des eingespritzten Brennstoffs mischt sich während des Zündverzugs nahezu homogen mit der Luft im Brennraum. Bei der Zündung verbrennt diese Menge fast schlagartig (Dieselschlag). Anschließend laufen Gemischbildung und Verbrennung simultan ab, wobei der Kraftstoff vollständig verdampft ist und die Verbrennung durch die für die Gemischbildung entscheidenden Diffusionsvorgänge kontrolliert wird [82].

Ein wichtiges Ziel moderner Brennverfahren ist die Reduktion der innermotorischen Stickoxidemissionen. Da die thermische NO-Bildung ein sehr temperaturabhängiger Prozess ist, wird zur Vermeidung von hohen lokalen Temperaturen Abgas in den Brennraum zurückgeführt. Zwar wird der gewünschte Effekt erreicht und die Stickoxidemissionen sinken um Größenordnungen, doch steht der Verbrennung dadurch verhältnismäßig wenig Sauerstoff zur Verfügung. Das begünstigt wiederum die Rußbildung. Die Abgasrückführraten sind teilweise so hoch, dass die Rußemissionen bei ungünstiger Gemischbildung sehr stark ansteigen. Deshalb lautet das erweiterte Ziel nicht nur die lokalen Temperaturen abzusenken, sondern ebenfalls die Luft im Brennraum möglichst gut auszunutzen, um Rußemissionen zu vermeiden [60, 64].

⁴engl.: gemeinsame Schiene. Beschreibt die Verwendung eines gemeinsamen Kraftstoff-Hochdruckspeichers mit entsprechenden Abgängen zu Injektoren zur Versorgung der Zylinder mit Kraftstoff.

⁵Die Dampfdruckkurve des Kraftstoffs beschreibt die Sättigung als Funktion der Temperatur.

3.2 Selbstzündung

Die Zeitspanne zwischen Einspritz- und Brennbeginn wird bei der motorischen Verbrennung als *Zündverzugszeit* bezeichnet. Die dabei ablaufenden physikalischen und chemischen Prozesse sind sehr komplex. Die wesentlichen *physikalischen Vorgänge* sind die Zerstäubung des Brennstoffs, die Verdampfung und die Mischung von Brennstoffdampf und Luft bis zur Bildung eines zündfähigen Gemisches. Die *chemischen Vorgänge* sind die bereits in Abschnitt 2.3.1 beschriebenen Vorreaktionen bis zur Selbstzündung [82].

Bei der motorischen Verbrennung sind letztlich die physikalischen Vorgänge für die Selbstzündung entscheidend. Der Einspritzstrahl bestimmt in der Zündphase die lokalen Temperaturen im Brennraum. Die Annahme einer nahezu homogenen Temperaturverteilung im Brennraum kurz vor dem Einspritzbeginn erlaubt eine starke Korrelation der lokalen Temperaturen mit den lokalen Konzentrationen des Kraftstoffdampfs während der Einspritzung. Je mehr Kraftstoff verdampft ist, desto niedriger sind die Temperaturen. Die Vorreaktionen erfolgen beim lokalen Luftverhältnis $0.7 < \lambda < 1.0$, weshalb diese Zonen heiß genug sein müssen, damit die Selbstzündung innerhalb kurzer Zeit stattfinden kann. Beim Dieselmotorkaltstart wird mit Hilfe von Glühstiften⁶ die Temperatur in diesen Zonen gezielt erhöht. Dabei ist die Position des Glühstifts bezogen auf einen oder zwei Einspritzstrahlen so zu wählen, dass die reaktivsten Gemischzonen optimal aufgeheizt werden. Des Weiteren induziert der Einspritzstrahl sehr hohe Geschwindigkeiten und Turbulenz. Diese haben einerseits in Verbindung mit dem Gegendruck direkten Einfluss auf die Aufweitung und Eindringtiefe des Strahls. Andererseits beeinflusst die Turbulenz die lokale Temperaturverteilung und den Speziestransport und dadurch wiederum die Selbstzündung wesentlich [129, 65, 9].

3.3 Verbrennung

Der Ablauf der dieselmotorischen Verbrennung lässt sich in drei Phasen unterteilen:

1. Vormischphase: Vorgemischte Verbrennung
2. Diffusionsphase: Diffusions-Verbrennung, mischungskontrolliert
3. Ausbrandphase: Diffusions-Verbrennung, reaktionskinetisch kontrolliert (Ruß-Oxidation)

(A) Vorgemischte Verbrennung

Der während der Zündverzugszeit eingespritzte Brennstoff mischt sich mit der Luft und bildet ein inhomogenes, reaktionsfähiges Gemisch. Nach der Zündverzugszeit, die physikalisch und chemisch kontrolliert ist, verbrennt dieses Gemisch sehr schnell. Das für den Dieselmotor typische Verbrennungsgeräusch wird durch die hohe Druckerhöhungsgeschwindigkeit zu Beginn der Verbrennung verursacht. Diese Druckerhöhungsgeschwindigkeit kann im Allgemeinen durch Veränderung des Einspritzzeitpunktes beeinflusst werden, wobei bei reiner Haupteinspritzung gilt: ein früher Einspritzbeginn führt zu einer „harten“ und ein später zu einer „weichen“ Verbrennung. Darüber hinaus kann das Verbrennungsgeräusch durch eine Voreinspritzung wesentlich reduziert werden. Dabei wird zunächst nur eine geringe Brennstoffmenge eingespritzt und erst nach erfolgter Selbstzündung beginnt die Haupteinspritzung. Moderne Dieselmotoren besitzen Einspritzsysteme, die mehrere Voreinspritzungen ermöglichen. Diese erlauben zwar das

⁶auch: Glühkerze. Keramik-Glühkerzen erreichen maximale Temperaturen von bis zu 1600 K

Verbrennungsgeräusch noch weiter abzusenken, erhöhen aber gleichzeitig die Partikelemissionen des Motors [82].

(B) Hauptverbrennung

Die Gemischbildungsvorgänge dauern während der Hauptverbrennung an und beeinflussen entscheidend sowohl den Verbrennungsablauf selbst als auch die Schadstoffbildung. In dieser Phase sind die chemischen Prozesse schnell und somit der Verbrennungsablauf mischungskontrolliert. Es wird deshalb auch von mischungskontrollierter Diffusionsverbrennung gesprochen [82].

(C) Nachverbrennung

Gegen Ende der Verbrennung sind Druck und Temperatur in der Flammenfront so weit abgesunken, dass die chemischen Prozesse langsam im Vergleich zu den simultan ablaufenden Mischungsvorgängen werden. Die Diffusionsverbrennung wird deshalb zunehmend reaktionskinetisch kontrolliert. Neben der zum Ende hin stark abnehmenden Umsetzung von bis dahin unverbranntem Brennstoff werden während der Nachverbrennung auch Zwischenprodukte weiteroxidiert, die während der Hauptverbrennung aufgrund von lokalem Sauerstoffmangel entstanden sind. So ist diese letzte Verbrennungsphase insbesondere für die Oxidation des zuvor gebildeten Rußes entscheidend [82].

3.4 Schadstoffbildung

Bei der Brennverfahrensentwicklung steht die (Vor-)Erfüllung der Schadstoffgrenzwerte stets im Fokus. Grundvoraussetzung für die Verbesserung von Brennverfahren ist demzufolge die genaue Kenntnis der Schadstoffbildungsprozesse. Eine wichtige Bedeutung spielen dabei die NO_x - und Rußemissionen [60].

3.4.1 Stickoxid

Die Stickoxidemissionen (NO_x) eines Motors setzen sich aus Stickstoffmonoxid NO und Stickstoffdioxid NO_2 zusammen. Diese beiden Spezies sind unter motorischen Bedingungen über schnelle Radikalreaktionen miteinander gekoppelt [35, 85]. NO_2 wird aus NO mittels



gebildet. Reaktion (3.1) ist bei Temperaturen zwischen 600 K und 1000 K von Bedeutung und spielt sich demnach üblicherweise nicht im Brennraum sondern im Abgastrakt ab. Bei höheren Temperaturen reagiert NO_2 zu NO zurück [35, 85]:



Aus den Reaktionen (3.2) bis (3.4) wird ersichtlich, dass bei der Bildung von je einem NO -Molekül ein NO_2 -Molekül verbraucht wird, während es sich bei Rückreaktionen, d. h. bei der

Rückbildung von NO_2 umgekehrt verhält. Somit bleibt die Summe aus NO und NO_2 -Molekülen bei den Umwandlungsreaktionen konstant und es ist folglich für die Gesamtstickoxidbilanz unerheblich, ob die Stickoxide in Form von Stickstoffmonoxid (NO) oder Stickstoffdioxid (NO_2) vorliegen. Bei motorischen Verbrennungen überwiegt das Stickstoffmonoxid, da die Reaktionen (3.2) bis (3.4) bei höheren Temperaturen sehr schnell ablaufen [45]. NO_2 kann somit nur im Abgas auftauchen, wenn die Reaktionen, die NO zu NO_2 umwandeln, durch eine schnelle Temperaturabsenkung eingefroren werden. Unter atmosphärischen Bedingungen erfolgt unter Mitwirkung des Luftsauerstoffs eine Umwandlung von NO zu NO_2 . Folglich ist es zweckmäßig die Stickoxide unter dem Begriff NO_x zusammenzufassen⁷ [81].

Die Bildung und der Abbau von Stickoxiden ist, verglichen mit den Zeitskalen anderer chemischer Reaktionen, ein langsamer Prozess, welcher auch unter dem Begriff *Post-Flame-Chemie* bekannt ist. Die Stickoxidkonzentrationen erreichen bei der, bei dieselmotorischen Verbrennungsvorgängen üblicherweise zur Verfügung stehenden Zeit, nicht ihre Gleichgewichtskonzentration. Das Gemisch magert zunehmend aus, was die Spezieskonzentrationen stetig ändert. Außerdem senkt die Kolbenabwärtsbewegung den Brennraumdruck und damit auch die Temperaturen bis schließlich die Reaktionen einfrieren. Die Berechnung von Stickoxiden muss daher durch reaktionskinetische Mechanismen erfolgen und nicht durch thermodynamische Gleichgewichtsbetrachtungen. In der Literatur wird zwischen vier verschiedenen Stickoxidbildungsmechanismen differenziert, begründet durch unterschiedliche Bildungspfade und Temperaturbereiche, in denen diese wirksam sind [35, 85, 142]:

1. Thermisches bzw. Zeldovich- NO
2. Promptes bzw. Fenimore- NO
3. Brennstoff- NO
4. Bildung über Distickstoffoxid N_2O

In den folgenden Abschnitten werden die unterschiedlichen Bildungsmechanismen kurz beschrieben.

(A) Thermisches bzw. Zeldovich- NO

Die Bildung und der Abbau des thermischen NO werden durch den erweiterten *Zeldovich*-Mechanismus beschrieben [35, 85]:



Reaktion (3.5) hat eine hohe Aktivierungsenergie aufgrund der starken Dreifachbindung der N_2 -Moleküle. Unter motorischen Randbedingungen bildet dieser Reaktionsmechanismus erst ab Temperaturen größer 2000 K nennenswerte Mengen an Stickoxiden, da die Reaktionen sonst zu langsam ablaufen. Bei höheren Temperaturen nimmt auch die Konzentration der

⁷Bei der sogenannten „feuchten“ Stickoxidmessung am Motorenprüfstand wird die Summe aus NO und NO_2 gemessen. Dazu wird sämtliches im Abgas auftretendes NO_2 vor der eigentlichen Messung zu NO umgewandelt. Somit ist unter dem Gesichtspunkt der Vergleichbarkeit von numerischen und experimentellen Ergebnissen ebenfalls keine Aufspaltung in NO_2 und NO notwendig [139].

Sauerstoffradikale O zu, was die NO-Bildung zusätzlich fördert. Die Bezeichnung thermisches NO ist in dieser starken Temperaturabhängigkeit begründet.

Des Weiteren wird die NO-Bildung durch hohe Sauerstoffkonzentrationen begünstigt. Allerdings haben hohe Sauerstoff- bzw. Luftanteile im Gemisch eines Motors niedrige Verbrennungstemperaturen zur Folge, was der NO-Bildung durch den Zeldovich-Mechanismus wieder entgegenwirkt. Zudem wirken sich die beiden Faktoren Temperatur und Sauerstoffkonzentration unterschiedlich auf die thermische Stickoxidbildung aus. Eine hohe Temperatur führt zu großen Stickoxidbildungsraten und folglich zu einer schnellen Bildung von NO. Hohe Sauerstoffkonzentrationen haben hingegen eine hohe Stickoxidgleichgewichtskonzentration zur Folge, die allerdings aufgrund von nicht ausreichend zur Verfügung stehender Zeit und zu geringen Bildungsraten normalerweise nicht erreicht wird. Die thermische NO-Bildung ist in einem Motor bei stöchiometrischer bis leicht magerer Verbrennung der wichtigste Stickoxidbildungsmechanismus [82].

(B) Promptes-NO

Im Gegensatz zum thermischen NO wird das prompte NO bevorzugt in brennstoffreichen bzw. fetten Gemischen und bereits bei wesentlich tieferen Temperaturen (ca. 1000 K) gebildet. Die Bezeichnung *promptes* NO rührt daher, da es zeitlich sehr früh in der Verbrennung auftaucht. Initiiert wird die Bildung des prompten NO durch die Reaktion von Stickstoff mit CH-Radikalen, die durch den Aufbruch der Kraftstoffmoleküle während der Verbrennung entstehen [35, 85]. Dabei entstehen Blausäure (HCN) und N-Radikale. Vergleiche der berechneten Reaktionsraten über diesen Reaktionspfad mit experimentellen Untersuchungen in [20] zeigen, dass die berechneten Raten um zwei Größenordnungen zu klein sind. In [87] wird deshalb ein neuer Reaktionspfad vorgeschlagen



Mittels Messungen mit laserinduzierter Fluoreszenz in Methanflammen wird die Relevanz des NCN-Pfades in [132] experimentell bestätigt. Das gebildete MCN kann mit unterschiedlichen Spezies weiterreagieren [37]:



Die Berechnung des prompten NO wird dadurch erschwert, dass es nicht wie das thermische NO von der Verbrennung weitgehend entkoppelt ist. Vielmehr muss eine detaillierte, reaktionskinetische Berechnung des Verbrennungsprozesses die Konzentration des CH-Radikals in Reaktion (3.8) liefern. Eine Möglichkeit, detaillierte Mechanismen für 3D-CFD-Simulationen zu verwenden bieten zwar Flamelet- oder Progressvariablen-Ansätze (siehe Kapitel 5.2.7), jedoch sind die absoluten Stickoxidkonzentrationen des prompten NO im Vergleich zum thermisch gebildeten NO wesentlich kleiner, weshalb dieser Bildungspfad in dieser Arbeit vernachlässigt wird.

(C) Brennstoff-NO

Brennstoff-NO tritt ausschließlich bei stickstoffhaltigen Brennstoffen wie z. B. Kohle auf. Die NO-Bildung erfolgt dabei hauptsächlich über die Zwischenprodukte Ammoniak (NH_3) und Blausäure (HCN) [35, 85]. Die Umwandlung von HCN zu NO erfolgt im Wesentlichen durch die gleichen Reaktionen, die bereits im vorhergehenden Abschnitt bei der Bildung des prompten NO aufgeführt wurden. Brennstoff-NO spielt bei der Simulation der Stickoxidbildung in einem Verbrennungsmotor keine Rolle [81].

(D) Bildung über Distickstoffoxid N_2O

Für die NO-Bildung über Distickstoffoxid sind folgende Reaktionen verantwortlich [35, 85]:



Im Gegensatz zum Zeldovich-Mechanismus kommt es in Reaktion (3.13) zu einer Stabilisierung der Produkte, wodurch nicht NO und N sondern N_2O gebildet wird, das in den Reaktionen (3.14) und (3.15) zu NO weiterreagiert. Dieser Reaktionsmechanismus trägt für gewöhnlich nur unbedeutend zur Gesamtbildung von Stickoxiden bei. Lediglich in mageren Gemischzonen, die die Bildung von NO über den prompten Mechanismus unterdrücken, und bei niedrigen Temperaturen, die die thermische NO-Bildung verhindern, verbleibt die Bildung über N_2O als einziger Mechanismus. Vor allem bei hohen Drücken gewinnt dieser Mechanismus an Bedeutung, da es sich bei Reaktion (3.13) um eine Reaktion 3. Ordnung handelt [81]. Auch dieser Bildungspfad wird aufgrund des äußerst geringen Beitrags zur Gesamtstickoxidkonzentration im Brennraum in dieser Arbeit vernachlässigt.

3.4.2 Ruß

Die Rußemissionen stellen aufgrund ihrer karzinogenen und mutagenen Wirkung bei der Brennvorfahrensentwicklung moderner DE-Dieselmotoren neben der Emission von Stickstoffoxiden eine der größten Herausforderungen dar. Zwar wurde durch die flächendeckende Einführung von Partikelfiltern die Problematik bezüglich der Einhaltung gültiger Emissionsgrenzwerte weitgehend entschärft, aus Verbrauchsgründen⁸ wird jedoch auch weiterhin eine innermotorische Reduktion der Rußemissionen angestrebt [10, 82].

(A) Phänomenologie der Rußbildung und -oxidation

Die Rußbildung ist ein sehr komplexer zweiphasiger chemischer und physikalischer Vorgang, bei dem sich während der Gasphasenverbrennung innerhalb weniger Millisekunden feste Partikel mit einer Größenordnung von bis zu (hundert) Millionen Kohlenstoffatomen formen können. Die bei der Partikelentstehung ablaufenden Prozesse sind in groben Zügen verstanden, jedoch in vielen Details nicht hinreichend gut [82]. Bspw. ist der Übergang von Gasphase zu (Ruß-)

⁸Je mehr Ruß sich im Partikelfilter befindet, desto höher der Abgasgegendruck, was sich negativ auf den Ladungswechsel und schließlich auf den Verbrauch auswirkt. Des Weiteren wird für die Partikelfilterregeneration zusätzlich Kraftstoff eingespritzt, was ebenfalls verbrauchsschädlich ist.

Partikelphase nicht eindeutig festgelegt. In [10] wird ein Rußbildungsschema vorgestellt, das die Partikelentstehung veranschaulicht. Demnach gestaltet sich der Ablauf wie folgt:

Brennstoffmoleküle werden unter sauerstoffarmen Bedingungen in fetten Gemischzonen zu kleinen Kohlenwasserstoffen reduziert und bilden die ersten Benzolringe. Diese können einerseits über einen Acetylen-Pfad [32] oder andererseits über einen Ionen-Pfad [142] entstehen. Durch *Polymerisation* von Ringen und fortschreitende *Dehydrierung* entstehen planare polyzyklische aromatische Kohlenwasserstoffe (PAK). Dabei steigt die Anzahl der C-Atome prozentual an und die polyzyklischen aromatischen Kohlenwasserstoffe wachsen durch die *Kondensation* und Bildung von Rußkernen, die sogenannte *Nukleation*, mit Abmessungen von etwa 1 bis 2 nm, zu immer größeren Gebilden an. Stellen die PAKs räumliche Strukturen dar und liegen somit nicht mehr in einer Ebene, spricht man bereits von Rußpartikeln. Es entstehen durch *Oberflächenwachstum* und *Koagulation*⁹ von Rußkernen Rußprimärteilchen mit Durchmessern von etwa 20 bis 30 nm, die sich an verschiedene Substanzen anlagern können. Zuletzt schließen sich die Rußprimärteilchen zu langen kettenförmigen Strukturen zusammen (*Agglomeration*) [10, 79, 82].

Grundsätzlich können Rußbildungs- und Rußabbauprozesse unterschieden werden, die größtenteils simultan ablaufen. Die Rußabbauprozesse separieren sich in die Oxidation und Fragmentierung, wobei die Oxidation durch heterogene Reaktionen mit Sauerstoffmolekülen (O₂) und vor allem Hydroxylradikalen (OH) erfolgt. Die Fragmentierung beschreibt das Wegbrechen von Molekülketten an der Partikeloberfläche. Koagulationseffekte beeinflussen entscheidend die Rußentwicklung, da sie zu einer Oberflächenveränderung führen [126].

Einzelne Rußpartikel in einer Flamme weisen unterschiedliche Raten des Oberflächenwachstums, der Oxidation, der Kondensation der Koagulation und der Agglomeration auf, so dass sich eine Verteilung von Partikeln mit unterschiedlichen Durchmessern ergibt, die durch eine Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion beschrieben werden kann. Das kumulierte Rußvolumen ist mit

$$V_P = \frac{\pi}{6} N_P \tilde{d}_P^3 = \frac{\pi}{6} N_P \left[\sum \frac{1}{N_P} N_{P,i} d_{P,i}^3 \right] \quad (3.16)$$

gegeben, wobei N_P die Größenverteilung der Rußpartikel bzw. das Partikelspektrum darstellt. Die Größe der Rußpartikel erstreckt sich zwischen 2 und 150 nm. Das Maximum der Rußpartikelgrößenverteilung liegt jedoch bei etwa 100 nm, wobei Partikelgrößen bis zu 10 µm möglich sind. Die Dichte der Rußpartikel liegt bei ca. 2000 kg/m³, das Oberfläche/Masse-Verhältnis zwischen 20 und 200 m²/g [82].

Der Einfluss der Temperatur auf die Rußbildung ist nicht eindeutig, da hohe Temperaturen sowohl die Rußbildung als auch die Rußoxidation begünstigen. Als kritische Temperatur für die Rußbildung gilt allerdings der Bereich zwischen 1500 K und 1900 K, da dort der Rußertrag am höchsten ist [82]. Der lokale Sauerstoffmangel insbesondere für Bereiche mit $\lambda < 0.7$ beschleunigt die Rußbildung. Bei der konventionellen dieselmotorischen Verbrennung wird in der Regel zu Beginn (Vormischphase) viel Ruß gebildet, da das Gemisch sehr inhomogen ist. Durch intensive Mischung des heißen Luft-Abgas-Gemischs während der Haupt- und Nachverbrennung wird der gebildete Ruß wieder oxidiert. Der zeitliche Verlauf der Rußkonzentration im Brennraum wurde schon oft in der Literatur anhand optischer Messverfahren bestimmt (KL-Faktoren) und bestätigt [107]. Moderne Brennverfahren mit geringen Sauerstoffkonzentrationen haben

⁹Reaktive Koagulationsprozesse beschreiben das Zusammenstoßen und Verschmelzen von Molekülketten und Partikeln.

verhältnismäßig niedrige Prozesstemperaturen zur Folge, was die Schadstoffbildungsprozesse insbesondere beim NO_x deutlich verlangsamt. Beim Ruß laufen Bilde- und Oxidationsprozesse faktisch in der gleichen Größenordnung ab. Aufgrund des Sauerstoffmangels ist die Rußoxidation während der Haupt- und Nachverbrennung deutlich gemindert. Das kann bei schlechter Luftausnutzung letztlich zu hohen Rußkonzentrationen führen. Der aus der Literatur [128] bekannte typische Rußkonzentrationsverlauf (KL) über die Verbrennung hinweg mit einer stark ausgeprägten Rußbildung und Oxidation kann bei diesen Brennverfahren nicht mehr beobachtet werden [90].

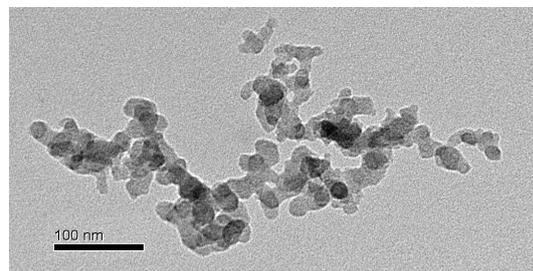
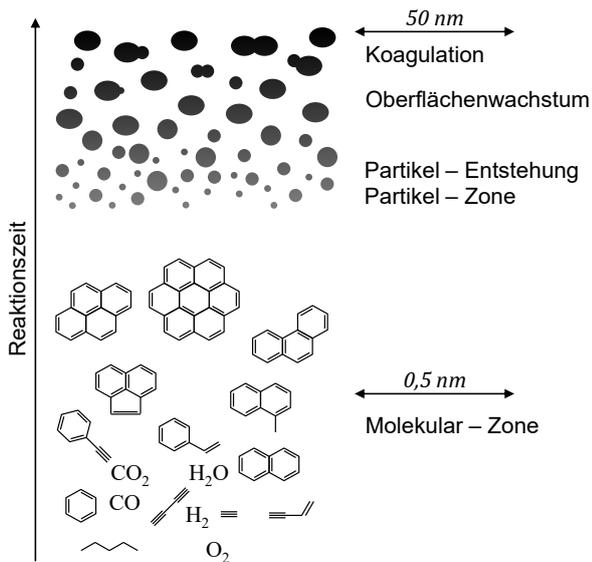


Abbildung 3.2: Prinzipskizze der Rußbildung nach [10].

Abbildung 3.3: TEM-Aufnahme (Transmissionselektronenmikroskop) von Rußpartikeln [154].

4 Strömungsmechanische Grundlagen

Die strömungsmechanische Simulation von innermotorischen Verbrennungsprozessen beinhaltet die Disziplinen Physik, Chemie, Mathematik, Numerik und Datenverarbeitung. Innermotorische Strömungen sind dabei immer instationär, kompressibel, turbulent und im Fall der Verbrennung reaktiv. Zusätzlich zur Gasphasenströmung muss bei modernen direkteinspritzenden Motoren die Modellbildung von Zweiphasenströmungen in Betracht gezogen werden.

In diesem Kapitel wird das mathematische Grundgleichungssystem zur Lösung der Gasphasenströmung innermotorischer Verbrennungsprozesse vorgestellt. Dieses bildet die Grundlage für spätere Herleitungen von Transportgleichungen für in dieser Arbeit eingeführte Größen.

4.1 Erhaltungsgleichungen für reaktive Strömungen

Die allgemeinen strömungsmechanischen Grundgleichungen bilden ein nicht-lineares, gekoppeltes Differentialgleichungssystem, welches zur Berechnung der zeitlichen und lokalen Verteilung der Strömungscharakteristika Geschwindigkeit, Druck, Temperatur und Partial-Dichten bzw. Massenbrüchen verwendet wird [135, 46, 116, 105].

Aufbauend auf dem Gleichungssystem für inkompressible, nicht-reaktive Einphasenströmungen werden die Gleichungen zur Berechnung von reaktiven Systemen mit variabler Dichte ergänzt. Dabei ist zu beachten, dass moderne Dieselmotoren bei hohen Lasten Brennraumdrücke von über 200 bar aufweisen können. Unter diesen thermodynamischen Bedingungen treten bereits Realgaseffekte¹ auf. Es existieren Ansätze [144], die eine Korrektur des Gleichungssystems basierend auf idealem Gasverhalten ermöglichen. Im Folgenden wird als Vereinfachung das thermodynamische Gasverhalten grundsätzlich als ideal angenommen.

4.1.1 Navier-Stokes-Gleichungen

Ausgehend von der *Eulerschen Betrachtungsweise* eines ortsfesten Volumenelements dV lassen sich über differentielle Bilanzierungen die Erhaltungsgleichungen herleiten. Für $dV \rightarrow 0$ lauten schließlich die *Navier-Stokes-Gleichungen*² in differentieller Form³:

Massenerhaltung (Kontinuität):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) = 0 \quad (4.1)$$

Impulserhaltung:

$$\frac{\partial \rho \vec{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \vec{u}^t) = -\nabla p + \nabla \cdot \sigma + \rho g \quad (4.2)$$

Die linken Seiten der Gleichungen (4.1) und (4.2) beschreiben die zeitliche Änderung der Gesamtmasse bzw. des Impulses und den konvektiven Transport infolge der Schwerpunktsbe-

¹Eigenvolumen der Moleküle und intermolekulare Kräfte dürfen nicht mehr vernachlässigt werden; $c_p = c_p(T, p)$

²Benannt nach den Physikern und Mathematikern C. L. M. Navier (Frankreich) und G. G. Stokes (Großbritannien), die unabhängig voneinander die Grundgleichungen im 19. Jahrhundert hergeleitet haben.

³Grundsätzlich sind die Fluideigenschaften hier Funktionen der Zeit und des Ortes $\psi_i(t, x, y, z)$ (Eulersche Darstellung). Falls nicht anders angegeben, verzichtet die Notation in dieser Arbeit zu Gunsten der Übersichtlichkeit auf die explizite Angabe.

wegung mit der lokalen Strömungsgeschwindigkeit \vec{u} . Der Impuls ist dabei eine Vektorgröße mit den drei Geschwindigkeitskomponenten u, v, w . Die ersten beiden Terme der rechten Seite der Impulsgleichung berechnen sich aus dem Druckgradienten ∇p und der Divergenz des viskosen Spannungstensors σ . Der viskose Spannungstensor repräsentiert den molekularen Impulstransport aufgrund von Viskosität. Für ein Newtonsches Fluid⁴ gilt:

Spannungstensor:

$$\sigma = \mu [\nabla \vec{u} + (\nabla \vec{u})^t] + \mu_2 \nabla \cdot \vec{u} \bar{\bar{E}} \quad (4.3)$$

$\bar{\bar{E}}$ entspricht der Einheitsmatrix. Der stoffspezifische Proportionalitätsfaktor μ wird als dynamische Viskosität bezeichnet. Er beschreibt die Beziehung zwischen Spannung und linearer Deformation. μ ist temperaturabhängig ($\mu \sim T^{1/2}$), während der Druckeinfluss vernachlässigbar ist [142]. Die *Sutherland-Formel* definiert für laminare Strömungen μ als:

$$\mu = \frac{A_1 T^{\frac{3}{2}}}{T + A_2} \quad (\text{mit } A_1 \text{ und } A_2 \text{ als stoffspezifische Modellkonstanten}) \quad (4.4)$$

Der zweite Term in Gleichung (4.3) ist nur für kompressible Strömungen von Bedeutung, da für Dichteinvarianz $\nabla \cdot \vec{u} = 0$ gilt. Unter Vernachlässigung der Volumenviskosität⁵ wird der Viskositätskoeffizient μ_2 für Gase häufig nach der *Stokesschen Hypothese* als Funktion der dynamischen Viskosität ausgedrückt [117]⁶:

$$\mu_2 = -\frac{2}{3}\mu \quad (4.5)$$

In der Impulsgleichung (4.2) berücksichtigt ρg die Schwerkraft mit der Erdbeschleunigung g . Für inkompressible Strömungen ($\rho = \text{konst.} \rightarrow \nabla \cdot \vec{u} = 0$) liegen somit vier Gleichungen für vier Unbekannte (u, v, w, p) vor, so dass das Gleichungssystem bei Kenntnis der Quell- und Senkenterme bestimmt und lösbar ist [126].

4.1.2 Speziesmassen- und Energieerhaltung

Die strömungsmechanischen Grundgleichungen für motorische Verbrennungsprozesse sind stets als kompressibel zu betrachten, da die Kolbenbewegung und chemische Reaktionen z. T. zu großen zeitlichen und lokalen Temperaturgradienten führen. Um eine zeitliche und lokale Gemischauskunft zu bekommen, müssen Transportgleichungen für Einzelspezies gelöst werden. Unter der Annahme eines mittleren Diffusionskoeffizienten D für alle Spezies ergibt sich für die Transportgleichung des Massenbruchs Y_i der Spezies i :

$$\frac{\partial \rho Y_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho Y_i \vec{u}) = \nabla \cdot (\rho D \nabla Y_i) + \dot{\rho}_i^s + \dot{\rho}_i^c \quad (4.6)$$

Die molekulare Diffusion der Spezies i wird proportional zu ihrem Konzentrationsgradienten gemäß dem *Fickschen Gesetz* quantifiziert. Zusätzlicher diffusiver Massentransport aufgrund

⁴Bei Newtonschen Fluiden wird die Viskosität als unabhängig von den Schergeschwindigkeiten angenommen. Es besteht daher ein linearer Zusammenhang zwischen der Schubspannung und der Schergeschwindigkeit.

⁵Die Volumenviskosität beschreibt Reibungskräfte, die bei der Expansion eines Fluids bedingt durch Relaxationseffekte zwischen inneren Freiheitsgraden und der Translation auftreten [142].

⁶Die *Stokessche Hypothese* gilt streng genommen nur für einatomige Gase!

von Temperatur- (*Soret-Effekt*) und Druckgradienten (*Druckdiffusion*) wird in dieser Arbeit vernachlässigt [47, 142]. Der Quellterm ρ_i^s repräsentiert die Verdampfung und $\dot{\rho}_i^c$ chemische Reaktionen.

Als dritte physikalische Erhaltungsgröße wird die spezifische Enthalpie h bzw. innere Energie i eingeführt. Letztere wird mittels Bilanzierung ihrer zeitlichen Änderung und der Summe aus Wärmestrom und Arbeit durch die Oberflächen- und Volumenkräfte pro Zeiteinheit bestimmt. Mit dem Zusammenhang

$$h = i + p/\rho \quad (4.7)$$

folgt für die Transportgleichung der spezifischen Enthalpie h [47, 142]:

$$\frac{\partial \rho h}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} h) = \frac{\partial p}{\partial t} - \nabla \cdot J + \dot{Q}^s + \dot{Q}^w \quad (4.8)$$

Die linke Seite in Gleichung (4.8) beschreibt die zeitliche Änderung und die Konvektion, während der Term $\partial p/\partial t$ einen Kompressionsterm darstellt. Nach [74] können Änderungen der spezifischen Enthalpie durch Reibungskräfte für Strömungen mit niedrigen Machzahlen vernachlässigt werden. Dies gilt prinzipiell auch für den Druckterm $\partial p/\partial t$. Dieser muss jedoch bei Kolbenmaschinen zur Beschreibung der kompressionsbedingten Temperaturerhöhung mitbilanziert werden. Die Wärmestromdichte J beschreibt die Zu- und Abfuhr von thermischer Energie über die Kontrollvolumenoberfläche. Dies kann sowohl durch einen Wärmestrom infolge lokaler Temperatur- (*Fouriersche Wärmeleitung*) oder Konzentrationsgradienten (*Dufour-Effekt*) als auch durch diffusiven Massentransport aufgrund von Konzentrations- (*Ficksche Diffusion*), Temperatur- (*Soret-Effekt*) und Druckgradienten (*Druckdiffusion*) erfolgen [47, 22]. Neben dem *Soret-Effekt* und der *Druckdiffusion* wird bei Verbrennungsprozessen auch der *Dufour-Effekt* in der Regel vernachlässigt [47, 142], so dass sich die resultierende Wärmestromdichte aus den Anteilen der Wärmeleitung nach *Fourier* und der Enthalpiediffusion nach *Fick* zusammensetzt:

$$J = -\lambda \nabla T - \rho D \sum_i h_i \nabla Y_i \quad (4.9)$$

Hier entspricht h_i der spezifischen totalen Enthalpie der Spezies i mit dem Massenbruch Y_i . Die Proportionalitätsfaktoren λ und D sind der Wärmeleit- bzw. der Diffusionskoeffizient. Die letzten zwei Terme der Gleichung (4.8) repräsentieren Quellterme. Sie beschreiben den energetischen Einfluss der Kraftstoffverdampfung (\dot{Q}^s) und des Wandwärmeübergangs im Zylinder (\dot{Q}^w). Diese Terme werden im Verlauf der Arbeit noch näher erläutert. Quellterme aufgrund von chemischen Reaktionen sind aufgrund der Bilanzierung der totalen Enthalpie implizit berücksichtigt.

Da die Dichte ρ als zusätzliche Unbekannte auftritt, ist das Gleichungssystem der *Navier-Stokes-Gleichungen* unterbestimmt, weshalb zur Schließung die thermische und kalorische Zustandsgleichung herangezogen werden. Durch die kalorische Zustandsgleichung kann die massenspezifische Enthalpie als Funktionen der Zustandsgrößen ausgedrückt werden. Für ein kalorisch ideales Gasgemisch ist die spezifische thermische Enthalpie h_{th} nur von der Temperatur und der Gemischzusammensetzung abhängig und kann mit Hilfe der stoffspezifischen Wärmekapazitäten $c_{p,i}$ berechnet werden:

$$h_{th} = \sum_i Y_i \cdot \int_{T_0}^T c_{p,i}(T) dT \quad (4.10)$$

Aufgrund der Additivität von Energien ist die totale spezifische Enthalpie h die Summe der spezifischen thermischen Enthalpie h_{th} und der Standardbildungsenthalpie $\Delta\bar{h}_{f,298}^0$:⁷

$$h = h_{th} + \Delta\bar{h}_{f,298}^0 \quad (4.11)$$

Mit den stoffspezifischen Standardbildungsenthalpien $\Delta h_{f,298,i}^0$ und obigen Zusammenhang führt das zu

$$h = \underbrace{\sum_i Y_i \cdot \int_{T_0}^T c_{p,i}(T) dT}_{\text{thermische Enthalpie}} + \underbrace{\sum_i Y_i \cdot \Delta h_{f,298,i}^0}_{\text{chemische Enthalpie}} \quad (4.12)$$

Über die thermische Zustandsgleichung hängen Druck, Temperatur und Dichte zusammen. Diese lautet für ein ideales Gasgemisch:

$$p = \rho R T \quad (4.13)$$

Die spezifische Gaskonstante R des Gemisches berechnet sich aus dem Quotienten der universellen Gaskonstante \Re und der mittleren molaren Masse \bar{M} :

$$R = \frac{\Re}{\bar{M}} \quad \text{mit} \quad \bar{M} = \frac{1}{\sum_i \frac{Y_i}{M_i}} \quad (4.14)$$

Des Weiteren ergibt sich für ideale Gase R aus der Differenz der spezifischen Wärmekapazitäten:

$$R = c_p - c_v \quad (4.15)$$

Die Navier-Stokes-Gleichungen und die Spezies-Transportgleichungen bilden mit den mathematischen Formulierungen der Gesetzmäßigkeiten aus der Thermodynamik jetzt ein geschlossen lösbares Gleichungssystem für reaktive Strömungen.

4.2 Turbulente Strömungen

Turbulente Strömungen zeichnen sich durch zeitliche und räumliche Fluktuationen in einem großen Skalenbereich aus. Durch diese Fluktuationen werden der Impuls-, die Energie- und der Speziesaustausch in der Strömung wesentlich beschleunigt. Eine Erfassung dieser Fluktuationen mittels der im vorherigen Abschnitt vorgestellten Grundgleichungen ist zwar im Prinzip möglich, erfordert allerdings eine sehr feine zeitliche und räumliche Diskretisierung, um auch die kleinsten turbulenten Skalen aufzulösen [81]. Der damit verbundene Rechenaufwand, vor allem für komplexe Geometrien wie im Fall der dreidimensionalen Strömungssimulation innermotorischer Verbrennungsprozesse, ist selbst auf derzeitigen *Computerclustern*⁸ mit mehreren hundert Prozessoren einerseits aufgrund der Rechenzeiten nicht praktikabel und andererseits aufgrund der entstehenden Datenmengen nicht bewältigbar. Im folgenden Abschnitt wird kurz auf die Phänomenologie der Turbulenz eingegangen.

⁷bei einem thermodynamischen Referenzzustand $T^0 = 298 \text{ K}$ und $p^0 = 1.01325 \text{ bar}$

⁸Ein *Computercluster*, meist einfach *Cluster* (von engl. cluster – Schwarm, Gruppe, Haufen), bezeichnet eine Anzahl von vernetzten Computern, die von außen in vielen Fällen als ein Computer gesehen werden können.

4.2.1 Grundlegende Zusammenhänge

Grundsätzlich werden isotrope und anisotrope Turbulenz differenziert. Bspw. ist die Richtungsabhängigkeit (Anisotropie) besonders in Scherschichten von Freistrahlen hoch, wo ebenfalls die Geschwindigkeitsgradienten sehr groß sind. Die lokalen Strömungsvorgänge also auch die turbulenten Fluktuationen beeinflussen somit maßgeblich die Strahlaufweitung. Des Weiteren wurden in der Turbulenztheorie charakteristische Zeit- und Längenskalen zur allgemeinen Klassifizierung von turbulenten Strömungen eingeführt. In einem turbulenten Strömungsfeld treten Turbulenzelemente sehr unterschiedlicher Größen auf [116]. Die größten Wirbelstrukturen werden durch das *integrale Längenmaß* l_0 charakterisiert. Sie induzieren niederfrequente Schwankungen. l_0 korreliert mit den geometrischen Abmessungen eines Systems, z. B. dem Zylinderinnendurchmesser bei motorischen Strömungsprozessen ($l_0 \sim l_{char}$). Diese Proportionalität wurde bereits mehrfach in der Literatur bestätigt [31, 45].

Aufgrund der gerichteten Hauptströmungsrichtung ist auch von ausgerichteten Makrowirbeln auszugehen, so dass eine Richtungsabhängigkeit der Turbulenz vorliegt. Durch Wirbelstreckung zerfallen die größten Wirbelballen in immer kleiner werdende, hochfrequente Elemente, die statistisch stark schwanken. Dabei findet eine Energieübertragung statt, d.h. die großen Strukturen übertragen durch Wirbelstreckung kinetische Energie an die kleineren Elemente. Die Verteilung der kinetischen Energie auf die verschiedenen Längenskalen lässt sich anhand des *turbulenten Energiespektrums* im Wellenzahlraum darstellen [74]. Kolmogorov⁹ hat die Vorstellung der *Energiekaskade* für voll entwickelte turbulente Strömungen eingeführt [61]. Dabei ging er von drei wesentlichen Annahmen aus, die entscheidend zur Entwicklung des später vorgestellten k - ϵ -Turbulenzmodells beigetragen haben [103]:

1. Stationärer Energieaustausch im Initialbereich¹⁰
→ Energiekaskade nur zwischen integralem und Kolmogorov-Längenmaß
2. Lokalität der Energiekaskade bezüglich der Längenskalen
→ Energietransfer nur zum jeweils nächst kleineren Turbulenzelement
→ Energietransferrate unabhängig von Längenskala
3. Vernachlässigung von Fluktuationen innerhalb der Energiekaskade
→ Betrachtung auf die mittlere Turbulenzenergie beschränkt

Aufgrund dieser Annahmen lässt sich die pro Zeit- und Masseneinheit aus der Hauptströmung zugeführte bzw. auf molekularer Ebene dissipierte kinetische Energie mit Hilfe der Makrowirbelgrößen ausdrücken. Die sogenannte turbulente Dissipationsrate ϵ lässt sich mit Hilfe der turbulenten Schwankungsgeschwindigkeit u' ausdrücken als:

$$\epsilon \sim \frac{u'^2}{l_0/u'} \sim \frac{u'^3}{l_0} \quad (4.16)$$

l_0/u' entspricht dabei einer charakteristischen turbulenten Zeitskala [74, 110]. Sie berechnet sich per definitionem aus dem Verhältnis der turbulenten kinetischen Energie k und der turbulenten Dissipationsrate ϵ

$$\tau_{turb} = \frac{l_0}{u'} \sim \frac{k}{\epsilon} \quad (4.17)$$

⁹Sowjetischer Mathematiker (*15.4.1903, †20.11.1987)

¹⁰Der Initialbereich erstreckt sich vom integralen bis zum Kolmogorov-Längenmaß.

Dabei stellen die Gleichungen (4.16) und (4.17) den Zusammenhang der Größen für das in dieser Arbeit verwendete k - ϵ -Turbulenzmodell dar. Bevor dieses näher erläutert wird, folgt eine kurze Übersicht über die Reynolds-gemittelte Turbulenzbehandlung.

4.2.2 Reynolds-gemittelte Navier-Stokes-Gleichungen (RANS)

In einer vollständig turbulenten Strömung sind alle Strömungsgrößen, wie Dichte, Geschwindigkeit, Druck oder Temperatur, zeitabhängige, stochastische Größen [143]. Dem Vorschlag von *Reynolds*¹¹ folgend, können die Momentanwerte der Strömungsgrößen in einen Mittelwert $\bar{\psi}$ und einen stochastischen Schwankungswert ψ' zerlegt werden

$$\psi(\vec{x}, t) = \bar{\psi}(\vec{x}, t) + \psi'(\vec{x}, t) \quad \text{mit} \quad \overline{\psi'}(\vec{x}, t) = 0. \quad (4.18)$$

Theoretisch wird der Mittelwert bestimmt, indem die Strömung N mal realisiert wird und am selben Ort \vec{x} und zur selben Zeit t die N Strömungsgrößen gemessen werden, um daraus den arithmetischen Mittelwert zu bilden. Dieser Mittelwert findet sich in der Literatur unter *Ensemble-Mittelwert* wieder und ist wie folgt definiert [142]:

$$\bar{\psi}(\vec{x}, t) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \psi_n(\vec{x}, t) \quad (4.19)$$

Eine bei Verbrennungsprozessen typische Eigenschaft ist das Auftreten von großen Dichteschwankungen [142]. Es ist daher zweckmäßig, eine dichtegewichtete Mittelung einzuführen, nämlich die sogenannte *Favre-Mittelung* [30]. Für eine beliebige Strömungsgröße ψ ergibt sich dann

$$\tilde{\psi}(\vec{x}, t) = \frac{\overline{\rho\psi}}{\bar{\rho}}, \quad (4.20)$$

wobei die Zerlegung der Momentanwerte zu

$$\psi(\vec{x}, t) = \tilde{\psi}(\vec{x}, t) + \psi''(\vec{x}, t) \quad \text{mit} \quad \overline{\rho\psi''}(\vec{x}, t) = 0 \quad (4.21)$$

führt. Wird Gleichung (4.21) in die allgemeine Transportgleichung (für Impuls, Energie und Spezies) aus Abschnitt 4.1.1 eingesetzt, ergibt sich die *Favre-gemittelte* Transportgleichung

$$\underbrace{\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{\psi}}{\partial t}}_{\text{zeitl. Änderung}} + \underbrace{\nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\psi} \vec{u})}_{\text{Konvektion}} = \underbrace{\nabla \cdot (\bar{\rho} \Gamma \nabla \psi)}_{\text{lam. Transport}} - \underbrace{\nabla \cdot (\bar{\rho} \psi'' \vec{u}'')}_{\text{turb. Transport}} + \underbrace{\sum_i \bar{Q}^i}_{\text{Quellterme}}. \quad (4.22)$$

Der formale Unterschied zwischen der allgemeinen und der gemittelten Form der Transportgleichung ist ein zusätzlicher Transportterm, der eine weitere Unbekannte darstellt. Des Weiteren müssen nun mittlere Quellterme quantifiziert werden. Γ entspricht hier einer allgemeinen Transportkonstanten, die je nach physikalischer Größe zwischen Diffusion, Viskosität und Wärmeleitung unterschieden wird. Bei der Impulsgleichung ($\psi = \vec{u}$) ist der Term $\bar{\rho} \vec{u}'' \vec{u}''^t$ als *Reynoldsscher Spannungstensor* bekannt. Die Glieder des Spannungstensors werden deshalb

¹¹Britischer Physiker (*23.8.1842, †21.2.1912)

auch *Reynoldssche Spannungen* bzw. *turbulente Scheinspannungen* genannt und bilden für eine dreidimensionale Strömung eine symmetrische Matrix

$$\overline{\rho \widetilde{u'' u''^t}} = \bar{\rho} \cdot \begin{pmatrix} \widetilde{u''^2} & \widetilde{u'' v''} & \widetilde{u'' w''} \\ \widetilde{v'' u''} & \widetilde{v''^2} & \widetilde{v'' w''} \\ \widetilde{w'' u''} & \widetilde{w'' v''} & \widetilde{w''^2} \end{pmatrix}, \quad (4.23)$$

wobei die Elemente auf der Hauptdiagonalen die Normal- und die übrigen Elemente Tangentialspannungen repräsentieren, die den anisotropen Charakter einer Strömung darstellen. Die Reynolds-Spannungen müssen modelliert werden, um das gemittelte Gleichungssystem lösen zu können. Aus diesem Grund gibt es zahlreiche, teilweise sehr anwendungsspezifische, Turbulenzmodelle. Das Verhältnis zwischen Detaillierungsgrad und Rechenaufwand orientiert sich dabei an der jeweiligen Fragestellung.

4.2.3 Das k - ϵ -Turbulenzmodell

In der Literatur finden sich Turbulenzmodelle unterschiedlicher Komplexität. In der motorischen Strömungssimulation hat sich das k - ϵ -Turbulenzmodell durchgesetzt, für das wiederum zahlreiche Varianten existieren. In dieser Arbeit wird ausschließlich das sogenannte Standard- k - ϵ -Modell in Verbindung mit dem kommerziellen Strömungslöser StarCD v3.26 verwendet. Das Modell gilt für hohe *Reynoldszahlen*¹² sowohl für kompressible als auch inkompressible Fluide. Es handelt sich dabei um ein *Zwei-Gleichungs-Modell*, welches von *Launder* und *Spalding* [68, 53] entwickelt wurde. Bevor die modellspezifischen Annahmen vorgestellt werden, folgen zunächst einige generelle Annahmen zur Turbulenzmodellierung. Die Basis der meisten Turbulenzmodelle bildet die Boussinesq-Annahme [12]. Bei dieser wird davon ausgegangen, dass sich die viskosen Spannungen proportional zu den Gradienten der gemittelten Größen verhalten. Es gilt

$$\overline{\rho \widetilde{u'' u''^t}} = -\mu_t \left[\nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}} + \left(\nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}} \right)^t \right] + \frac{2}{3} \mu_t \nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}} \bar{\mathbf{E}} + \frac{2}{3} \bar{\rho} \tilde{k} \bar{\mathbf{E}}. \quad (4.24)$$

μ_t entspricht dabei der turbulenten dynamischen Viskosität¹³ und ist im Gegensatz zur molekularen Viskosität keine Stoffgröße. Dabei ist μ_t ein Skalar und somit richtungsunabhängig. Turbulenzmodelle, die sich auf die Modellierung der turbulenten Viskosität beschränken, gehen so von einer isotropen Turbulenz aus. Bei speziellen Anwendungsfällen kann dies ein wesentlicher Schwachpunkt dieser Modelle sein. Eine weitere Unbekannte in Gleichung (4.24) ist die turbulente kinetische Energie k . Aus Gleichungen (4.16) und (4.17) und der Definition für die Energiespektraldichte aus [61] gilt für die gemittelte turbulente kinetische Energie \tilde{k}

$$\tilde{k} = \frac{1}{2} \overline{\widetilde{u'' u''^t}}. \quad (4.25)$$

Obwohl bereits mehrfach experimentell belegt werden konnte, dass turbulenter Transport auch entgegen dem Gradienten stattfinden kann [142, 120, 88], wird für den Energie- und

¹²Die *Reynolds-Zahl* Re ist eine nach dem Physiker Osborne Reynolds benannte dimensionslose Kennzahl. Sie stellt in der Strömungslehre das Verhältnis von Trägheits- zu Zähigkeitskräften dar (bzw. das Verhältnis von spezifischer Impulskonvektion zu Impulsdiffusion im System); $Re = \rho v l_{char} / \nu$.

¹³auch Wirbelviskosität oder scheinbare Zähigkeit

Stofftransport ebenfalls der Gradientenansatz aus Gleichung (4.24) verwendet

$$\overline{\rho \tilde{u}'' h''} = -\frac{\mu_t}{Pr_t} \nabla \tilde{h} \quad (4.26)$$

$$\overline{\rho \tilde{u}'' \psi''} = -\frac{\mu_t}{Sc_t} \nabla \tilde{\psi}. \quad (4.27)$$

Ähnlich der Prandtlzahl stellt die turbulente Prandtlzahl Pr_t den Quotienten der Impuls- und der Energieaustauschgrößen dar. Da die turbulenten Flussterme demselben Mechanismus der zeitgemittelten Konvektion zuzuschreiben sind, muss die turbulente Prandtlzahl in der Größenordnung von Eins liegen [143]. Pr_t und Sc_t sind empirische Größen und werden meistens als konstant angenommen. Sie quantifizieren die turbulenten Transportkoeffizienten für Wärme und Stoff und sind direkt mit der Wirbelviskosität verknüpft

$$Pr_t = \mu_t \frac{c_p}{\lambda_t} \quad \text{und} \quad Sc_t = \frac{\mu_t}{D_t}. \quad (4.28)$$

Die Definitionen lassen erkennen, dass die größte Schwierigkeit zur Lösung der vorgestellten Gleichungen nun die Bestimmung der Wirbelviskosität μ_t darstellt. Das k - ϵ -Modell verwendet hierzu folgenden Zusammenhang [69]

$$\mu_t = \bar{\rho} C_\mu \frac{\tilde{k}^2}{\tilde{\epsilon}}. \quad (4.29)$$

Neben einer Transportgleichung für die turbulente kinetische Energie \tilde{k} wird zusätzlich eine Transportgleichung für die Dissipation der turbulenten kinetischen Energie $\tilde{\epsilon}$ gelöst, um lokal einen Ausdruck für die Mischungsweglänge zu bekommen. Die Favre-gemittelten Transportgleichungen der turbulenten kinetischen Energie und der Dissipationsrate in StarCD v3.26 lauten

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{k}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{u} \tilde{k}) &= \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{Pr_k} \right) \nabla \tilde{k} \right] \\ &+ \mu_t \left[\nabla \tilde{u} + (\nabla \tilde{u})^t \right] : \nabla \tilde{u} - \frac{2}{3} \left(\mu_t \nabla \cdot \tilde{u} + \bar{\rho} \tilde{k} \right) \nabla \cdot \tilde{u} - \bar{\rho} \tilde{\epsilon} \end{aligned} \quad (4.30)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{\epsilon}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{u} \tilde{\epsilon}) &= \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{Pr_\epsilon} \right) \nabla \tilde{\epsilon} \right] \\ &+ C_{\epsilon_1} \frac{\tilde{\epsilon}}{\tilde{k}} \left[\mu_t \left[\nabla \tilde{u} + (\nabla \tilde{u})^t \right] : \nabla \tilde{u} - \frac{2}{3} \left(\mu_t \nabla \cdot \tilde{u} + \bar{\rho} \tilde{k} \right) \nabla \cdot \tilde{u} \right] \\ &- C_{\epsilon_2} \bar{\rho} \frac{\tilde{\epsilon}^2}{\tilde{k}} + C_{\epsilon_4} \bar{\rho} \tilde{\epsilon} \nabla \cdot \tilde{u}, \end{aligned} \quad (4.31)$$

wobei die laminare Viskosität μ über die Sutherland-Formel nach Gleichung (4.4) berechnet wird. Der zweite Term auf der rechten Seite der Gleichungen (4.30) und (4.31) steht für die Turbulenzerzeugung durch Scher- und Normalspannungen. Im dritten Term wird der Einfluss der Kompressibilität des Fluids berücksichtigt. Der vierte Term beschreibt die Umwandlung von Turbulenz in Wärme aufgrund der Viskosität des Fluids [17].

In Tab. 4.1 sind einerseits die empirischen Standard-Modellkonstanten sowie der in dieser Arbeit verwendete Konstantensatz für die Turbulenzgleichungen aufgelistet. *Janicka* und *Peters* [52] folgend, unterscheidet er sich vom Standard-Konstantensatz in dem Wert für C_{ϵ_1} , so dass der Strahlwinkel und die Strahleindringtiefe besser auf den verwendeten Rechengittern mit Experimenten übereinstimmen [65].

	C_μ	Pr_k	Pr_ϵ	C_{ϵ_1}	C_{ϵ_2}	C_{ϵ_4}	\mathcal{K}	\mathcal{E}
Standard	0.09	1.0	1.22	1.44	1.92	-0.33	0.419	9.0
Modifiziert	0.09	1.0	1.22	1.52	1.92	-0.33	0.419	9.0

Tabelle 4.1: Konstantensatz des k - ϵ -Turbulenzmodells.

4.2.4 Wandbehandlung

Das Standard- k - ϵ -Modell ist nur für turbulente Strömungen mit hohen Reynoldszahlen gültig. In Wandnähe bildet sich jedoch eine laminare Unterschicht der turbulenten Grenzschicht aus. Dort verliert das Modell seine Gültigkeit. Zudem können Grenzschichten mit den heute in der dreidimensionalen Motorsimulation üblichen Netzfeinheiten geometrisch nicht aufgelöst werden. Dies macht den Einsatz einer gesonderten Behandlung für wandnahe Regionen notwendig. Zur Berechnung der Strömungsgrößen in der wandnächsten Ebene der Fluidzellen wird deshalb das logarithmische Wandgesetz verwendet [17]. Die Geschwindigkeitsverteilung in Wandnähe stellt sich im logarithmischen Wandgesetz als Funktion des Wandabstands y wie folgt dar

$$u^+ = \begin{cases} y^+ & , \quad y^+ \leq y_m^+ \\ \frac{1}{\mathcal{K}} \ln(\mathcal{E}y^+) & , \quad y^+ > y_m^+ \end{cases} \quad (4.32)$$

mit

- $u^+ = (u - u_w)/u_\tau$: dimensionslose Geschwindigkeit
- u : Geschwindigkeitskomponente tangential zur Wand
- u_w : Geschwindigkeit der Wand
- $u_\tau = \sqrt{\tau_w/\rho}$
- τ_w : Wandschubspannung
- $y^+ = \rho C_\mu^{1/4} k^{1/2}/\mu$: dimensionsloser Wandabstand
- \mathcal{K}, \mathcal{E} : empirische Konstanten (siehe Tab. 4.1).

Die Umschaltung zwischen den beiden Geschwindigkeitsprofilen erfolgt bei

$$y_m^+ - \frac{1}{\mathcal{K}} \ln(\mathcal{E}y_m^+) = 0 \quad \rightarrow \quad y_m^+ \approx 10.9576. \quad (4.33)$$

Außerdem müssen die Temperatur- und die Speziesverteilung an die laminaren Verhältnisse in Wandnähe angepasst werden [17]. Da die Gleichungen für Temperatur und Massenbruch ähnlich sind, werden die folgenden Gleichungen mit einer Größe Φ angegeben, für die dann entweder die Temperatur T oder die Massenbrüche Y_i der Spezies i eingesetzt werden kann. Für $F_{\Phi,w}$ ist dementsprechend entweder der Wärmeübergang an der Wand oder der Massenfluss einzusetzen. Es gilt

$$\Phi^+ = \sigma_{\phi,t} (u^+ + P_R), \quad (4.34)$$

wobei P_R für den Reibfaktor der laminaren Unterschicht steht, der in StarCD v3.26 folgendermaßen berechnet wird

$$P_R = 9.24 \left[\left(\frac{\sigma_\phi}{\sigma_{\phi,t}} \right)^{3/4} - 1 \right] \left[1 + 0.28 \exp \left(\frac{-0.007 \cdot \sigma_\phi}{\sigma_{\phi,t}} \right) \right]. \quad (4.35)$$

Die weiteren Größen haben folgende Bedeutungen:

- $\Phi^+ = c_p \rho (\Phi - \Phi_w) u_\tau / F_{\Phi,w}$: Wandwärmeübergang
- $\Phi^+ = \rho (\Phi - \Phi_w) u_\tau / F_{\Phi,w}$: Massenfluss
- Φ_w : Wert für Temperatur bzw. Massenbruch an der Wand
- σ_Φ : molekulare Prandtl- bzw. Schmidt-Zahl
- $\sigma_{\Phi,t}$: turbulente Prandtl- bzw. Schmidt-Zahl

Das logarithmische Wandgesetz setzt voraus, dass der dimensionslose Wandabstand y^+ der wandnächsten Zelle zwischen 30 und 100 beträgt [17]. Vor allem während der Verbrennung wird diese Forderung bei heute üblichen Netzfeinheiten oftmals verletzt, was dazu führt, dass bei der Bestimmung des Wandwärmeüberganges zu kleine Werte berechnet werden. Um dem entgegenzuwirken wurde in dieser Arbeit bei der Vernetzung eine dünne Wandschicht hinzugefügt. Mit dieser Formulierung liefert das k - ϵ -Modell eine Schließungsbedingung für die turbulenten Transportterme auch in Wandnähe.

4.2.5 Die RANS-Gleichungen des Strömungslösers

Die *Favre-Mittelung* der allgemeinen Transportgleichung (4.22) aus Abschnitt 4.2.2 wird für die Erhaltungsgrößen Masse, Impuls und Energie durchgeführt. Dabei wird angenommen, dass der turbulente Transport für Strömungen mit hohen Reynolds-Zahlen in der Regel viel schneller als der laminare ist, so dass $\mu \sim \mu_t$ gesetzt werden kann und dass die Transportkoeffizienten für alle Spezies näherungsweise gleich sind [142]. Für die turbulente Prandtl-Zahl Pr_t und die turbulente Schmidt-Zahl Sc_t wird jeweils der Wert 0.5 vorgegeben. Die Schließung der turbulenten Transportterme erfolgt über das Standard- k - ϵ -Modell aus Abschnitt 4.2.3. Somit lauten die gemittelten Gasphasengleichungen in StarCD v3.26 in differentieller Form wie folgt:

Massenerhaltung:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}}) = \bar{\rho}^s \quad (4.36)$$

Impulserhaltung:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \tilde{\mathbf{u}}^t) = -\nabla \bar{p} + \nabla \cdot \tilde{\boldsymbol{\sigma}} + \tilde{\mathbf{F}}^s \quad (4.37)$$

mit dem mittleren Spannungstensor $\tilde{\boldsymbol{\sigma}}$ in "Newtonscher Form" und der Boussinesq-Annahme des k - ϵ -Modells aus Gleichung (4.24)

$$\tilde{\boldsymbol{\sigma}} = \mu \left[\nabla \tilde{\mathbf{u}} + (\nabla \tilde{\mathbf{u}})^t \right] - \frac{2}{3} \mu \nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}} \bar{\mathbf{E}} - \bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \tilde{\mathbf{u}}^t. \quad (4.38)$$

Spezieserhaltung mit Gleichung (4.27):

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \tilde{Y}_i) = \nabla \cdot \left(\frac{\mu_t}{Sc_t} \nabla \tilde{Y}_i \right) + \tilde{\rho}_i^c + \tilde{\rho}_i^s \quad (4.39)$$

Energieerhaltung:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{h}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \tilde{h}) = \frac{\partial \bar{p}}{\partial t} + \tilde{\mathbf{u}} \nabla p + \boldsymbol{\sigma} : \nabla \tilde{\mathbf{u}} - \nabla \cdot \tilde{\mathbf{J}} + \tilde{\mathbf{Q}}^s + \tilde{\mathbf{Q}}^w \quad (4.40)$$

mit der mittleren Wärmestromdichte \tilde{J} , die sich aus Wärmeleitung und dem Ansatz aus Gleichung (4.26) für den turbulenten Wärmestromvektor zusammensetzt

$$\tilde{J} = -\frac{\mu_t \bar{c}_p}{Pr_t} \nabla \tilde{T} - \frac{\mu_t}{Pr_t} \nabla \tilde{h} + \sum_i h_i \bar{\rho} \tilde{u}. \quad (4.41)$$

Die gemittelte thermische Zustandsgleichung für ein ideales Gas mit den stoffspezifischen molaren Massen M_i lautet näherungsweise

$$\bar{p} = \Re \bar{\rho} \sum_i \frac{\tilde{Y}_i}{M_i} \tilde{T} \quad \text{mit} \quad \overline{(\rho T'' Y_i'')} \approx 0 \quad (4.42)$$

unter der Annahme, dass Fluktuationen der mittleren Molmasse \bar{M} bei ähnlichen molaren Massen M_i vernachlässigt werden können [142, 74]. Für die kalorische Zustandsgleichung eines idealen Gases gilt als Funktion der Temperatur \tilde{T} , der Speziesmassenanteile \tilde{Y}_i und den zugehörigen stoffspezifischen Wärmekapazitäten $c_{p,i}$ bei konstantem Druck

$$\tilde{h} = \sum_i \tilde{Y}_i \left(\int_{\tilde{T}_0}^{\tilde{T}} \bar{c}_{p,i}(\tilde{T}) d\tilde{T} + \Delta h_{f,298,i}^0 \right) \quad \text{mit} \quad \overline{c_{p,i}(\tilde{T} + T'')} \approx \bar{c}_{p,i}(\tilde{T}). \quad (4.43)$$

Alle Quellterme mit dem Index $()^s$ stellen Sprayquellterme dar. Diese werden in Kapitel 5.1.1 behandelt. Ansätze zur Schließung des chemischen Quellterms $\tilde{\rho}_i^c$ werden in Kapitel 5.2.6 und Kapitel 5.2.7 vorgestellt und diskutiert. Die Modellierung des Wandwärmeübergangs \tilde{Q}^w erfolgt nach dem Ansatz von *Han* und *Reitz* [41]. Ausgehend von dieser Formulierung wird das Wandgesetz für variable Dichten abgeleitet. Damit wird den hohen Temperaturgradienten an der Wand während der Verbrennung Rechnung getragen [82].

5 Stand der Technik: Modellierung der innermotorischen Dieselerverbrennung

Im Kapitel 4 werden die Gasphasen-Gleichungen und das k - ϵ -Turbulenzmodell vorgestellt. Diese stellen die Basis zur numerischen Simulation von dreidimensionalen Strömungsvorgängen dar. Zur Simulation innermotorischer Verbrennungsprozesse von DE-Dieselmotoren müssen aufgrund der direkten Einspritzung in den Brennraum und der anschließenden Verbrennung zusätzlich Quellterme zur Schließung des Gleichungssystems modelliert werden. In diesem Kapitel werden daher die physikalischen Prozesse der innermotorischen Dieselerverbrennung näher erläutert, die jeweiligen Herausforderungen diskutiert und die verwendeten Ansätze zur Modellierung der zusätzlichen Quellterme vorgestellt.

5.1 Strahlausbreitung und Gemischbildung

5.1.1 Allgemeine Strahlmodellierung

Beim DE-Dieselmotor wird flüssiger Kraftstoff unter hohem Druck in den Brennraum eingespritzt. Die eingespritzte Kraftstoffmenge hängt dabei von der Lastanforderung und meist vom Luftverhältnis λ ab. Der Massen- und Impulsstrom des Strahls am Düsenaustritt wird von der Turbulenz und der Kavitation in der Düse beeinflusst. Nach dem Primärzerfall in unmittelbarer Düsennähe zerfallen die Flüssigkeits-Ligamente weiter stromabwärts aufgrund von Gasphasen-Interaktionen in kleinere Tropfen. Dieser als Sekundärzerfall bezeichnete Prozess ist im Gegensatz zum Primärzerfall nahezu unabhängig von der Düsengeometrie und damit der Düseninnenströmung [134]. Neben dem Strahlzerfall können im Bereich hoher Flüssigkeitsdichten, d. h. vor allem im Düsennahbereich, Kollisions- und Koaleszenzeffekte auftreten. Je nach Einspritzparameter, Brennraumgeometrie und -druck sind Tropfen-Wandinteraktionen möglich. Parallel zu den beschriebenen Prozessen verdampft der Kraftstoff und mischt mit der Gasphase, wobei generell ein Massen-, Impuls- und Energieaustausch zwischen den Phasen stattfindet [65].

Die realistische Vorhersage der Strahlausbreitung und der Gemischbildung sind Grundvoraussetzungen für die Berechnung der Zündung, Verbrennung und Schadstoffbildung. Die vom Einspritzstrahl induzierte turbulente kinetische Energie, dessen Eindringtiefe, Strahlwinkel bzw. Strahlaufweitung sowie die spätere Strahl-Wand-Interaktion bestimmen die lokalen Konzentrationen des Kraftstoffdampfes. Für Zünd- und Verbrennungsvorgänge ergeben sich daraus neben der Temperatur zwei entscheidende Größen: der lokale Mischungsbruch und dessen Varianz. Unter Berücksichtigung der zahlreichen meist parallel ablaufenden physikalischen Prozesse und Interaktionen wird deutlich, dass die Strahlmodellierung hohe Anforderungen an die physikalische Modellbildung und an die numerische Umsetzung darstellt.

Die Statistik der Flüssigphase wird durch eine Tropfen-Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion¹ (*Tropfen-PDF*) im mehrdimensionalen Phasenraum abgebildet. Der Phasenraum umfasst drei Ortskoordinaten, drei Komponenten des Tropfen-Geschwindigkeitsvektors, den Tropfendurchmesser und die Tropfentemperatur (8 Dimensionen) [126]. Die sogenannte *Spray Equation*

¹engl.: propability density function, PDF

liefert einen mathematischen Ansatz zur Beschreibung der Dynamik der Tropfen-PDF [148]. Zur numerischen Lösung der Spray Equation sind folgende Ansätze möglich [65].

Beim *Full Spray Equation* Ansatz wird die Entwicklung der Tropfen-PDF direkt im 8-dimensionalen, ortsfesten Phasenraum gelöst. Diese hochdimensionale Euler-Beschreibung ist aufgrund des großen Rechenbedarfs ineffizient. Deshalb wird die Euler-Methode meist nur für vereinfachte Problemstellungen z. B. unter Annahme von Symmetriebedingungen² auf kleinen Rechengittern, die die Rechenzeit um ein Vielfaches reduzieren, angewandt [83].

Mit dem *Discrete-Droplet-Model (DDM)* wird die Spray Equation durch Einführung stochastischer Partikel³ über ein Monte-Carlo-Verfahren numerisch gelöst [65, 28]. Somit werden alle Prozesse, die auf Partikelebene nicht aufgelöst werden können, wie z. B. die Turbulenzinteraktion oder Tropfenkollisionen, stochastisch über ein Monte-Carlo-Verfahren abgebildet. Bei diesem sogenannten *stochastischen Strahlmodell* repräsentieren folglich die Partikel die Tropfeneigenschaften. Allerdings korreliert in der Regel die Anzahl der numerischen Partikel nicht mit der tatsächlich vorhandenen Tropfenanzahl. Ihre Anzahl bestimmt sich rein aus Überlegungen zur statistischen Konvergenz [44, 126]. Die Strahlstruktur des stochastischen Strahlmodells hängt vom Rechengitter, der Orientierung des Strahls zum Rechengitter, der Tropfengröße und der Umgebungsturbulenz ab. Die Netzabhängigkeit ist u. a. in der fehlenden räumlichen Auflösung relevanter Längenskalen begründet. Für motorische Applikationen muss aus Rechenzeitgründen eine große Bandbreite an Längenskalen (Düsenloch in μm - Hubvolumen in dm^3) aufgelöst werden. Auf groben Netzen wird die Relativgeschwindigkeit zwischen Tropfen und Gasphase überschätzt. Abb. 5.1 zeigt dazu schematisch den Vergleich der physikalisch exakten und numerisch berechneten Relativgeschwindigkeit zwischen der Gas- und Flüssigphase. Der Fehler

²bspw. ein 0.5° -Sektor mit nur einer Zellschicht in Umfangsrichtung

³auch *Parcels* genannt

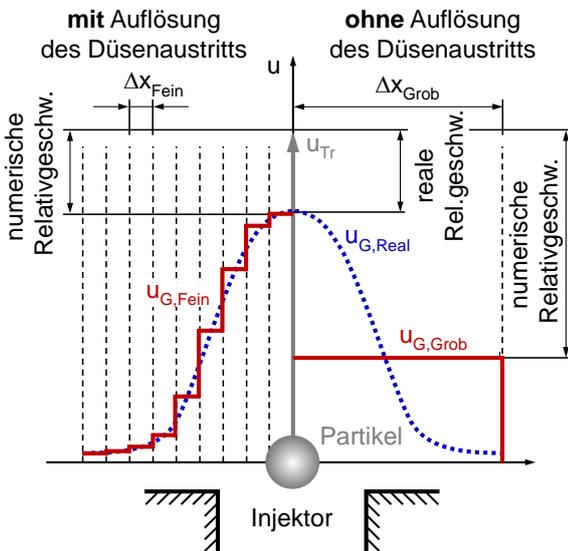


Abbildung 5.1: Vergleich zwischen realer und numerischer Relativgeschwindigkeit der Gas- und Flüssigphase. Schlechte Auflösung des Düsenlochs führt zu Überschätzung der Relativgeschw. zwischen den Phasen. Nach [44].

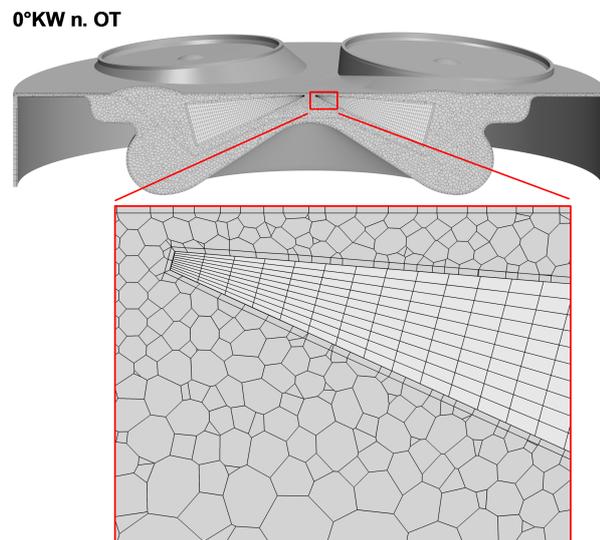


Abbildung 5.2: Schnitt durch ein kombiniertes Hexaeder- / Polyederberechnungsgitter eines motorischen Vollzylinders im Düsenbereich im oberen Totpunkt.

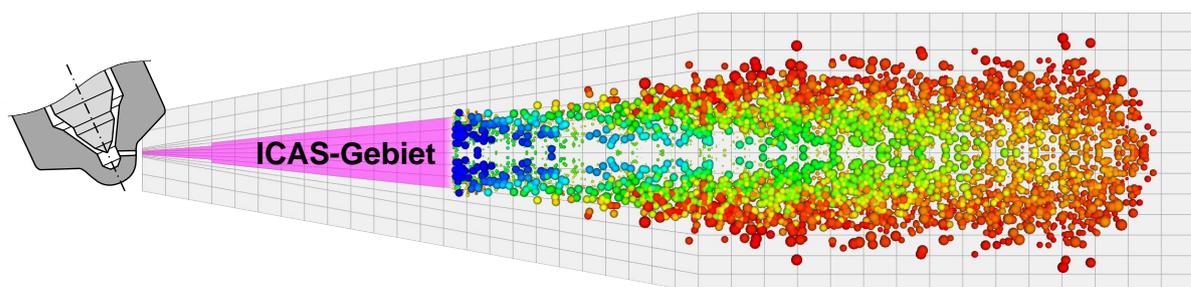
führt zwangsläufig zur falschen Berechnung der Austauschprozesse zwischen den Phasen, so dass die Strahlstruktur stark von der Netzaufösung abhängig wird [44]. Eine Netzverfeinerung ist insbesondere durch die abnehmende statistische Konvergenz der Tropfen-PDFs limitiert und mit Rechenzeitnachteilen verbunden. Die hochdimensionale Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion wird in jeder Zelle durch eine diskrete Anzahl von stochastischen Partikeln aufgelöst. Die Anzahl der Parcels pro CFD-Zelle nimmt bei konstanter Gesamtanzahl an Partikeln ab, falls das Gitter verfeinert wird. Speziell für den Düsenbereich wird in [65] gezeigt, dass bei typischer Anzahl an Partikeln, das allgemeine Konvergenzverhalten des stochastischen Strahlmodells als unzureichend zu bewerten ist. Für motorische Fragestellungen sind hybride Vernetzungsmethoden⁴, wie in Abb. 5.2 dargestellt, in Kombination mit erhöhten Partikelanzahlen in der Lage die räumliche Auflösung der Längenskalen und das Konvergenzverhalten insbesondere im Düsenbereich zu verbessern [94] und ermöglichen damit den erfolgreichen Einsatz dieses Strahlmodells.

5.1.2 Das ICAS-Modell

Die Grundidee des ICAS⁵-Konzepts stammt aus [140, 141]. In [65] wird dieses Konzept zu einer durchgängigen Modellkette zur Simulation der dieselmotorischen Hochdruckeinspritzung weiterentwickelt und für nicht-reaktive motorische Strömungen validiert [65, 66, 98]. Dessen Prinzip ist in Abb. 5.3 skizziert. Die Berechnungen im sogenannten ICAS-Gebiet werden mit einem *Stand-Alone Code* durchgeführt. Die Interaktion zwischen dem 1D-Strahlmodell und dem 3D-CFD-Code erfolgt durch konservativen Quelltermaustausch für Masse, Impuls und Energie. Um mehrdimensionale Effekte zu berücksichtigen wird nach einer definierten Länge stromabwärts auf das konventionelle stochastische 3D-Strahlmodell umgeschaltet. Das ICAS-Modell

⁴Kombination aus Hexaeder-/Polyederzellen

⁵Interactive-Cross-Section-Averaged-Spray



Düseninnenströmung:

Keine Berechnung, stattdessen Vorgabe von

- Massen- u. Impulsstrom
- Tropfenspektrum
- Anfangsbed. für turbulenten Tropfenzerfall

1D-ICAS-Modell:

Durch Vorgabe des Strahlwinkels

- Vermeidung der Probleme des 3D-Strahlmodells in Düsennähe
- numerisch richtige Berechnung der Austauschprozesse Flüssigkeit → Gas

3D-Strahlmodell (DDM):

Detaillierte Berechnung der Tropfen-Interaktion mit

- Drall
- Turbulenz der Gasphase
- Wänden

Abbildung 5.3: Berechnungskonzept für die dieselmotorische Einspritzung nach [65].

umgeht die numerischen Probleme des stochastischen Ansatzes im Düsennahbereich, indem eine statistische Beschreibung der Momente der Spray Equation in Eulerscher Formulierung vorgenommen wird, was das Konvergenzverhalten erheblich verbessert [65, 40]. Basierend auf der hochdimensionalen Spray Equation werden Bilanzgleichungen für gemittelte Strahleigenschaften (Momentengleichungen) abgeleitet. Diese werden über den Strahlquerschnitt integriert. Letztlich bleibt nur die Strahlachse als alleinige Raumkoordinate übrig [140]. Da im Düsennahbereich der Strahlimpuls sehr hoch ist, ist dort diese Betrachtungsweise zulässig. Durch Profilvorgaben kann die Verteilung der Strahleigenschaften über den Strahlquerschnitt berücksichtigt werden. Des Weiteren werden nur erste Momente transportiert. Deshalb werden zur Abbildung der Korrelationen zwischen den Phasenraumdimensionen⁶ Tropfenklassen eingeführt, die sich in Zeit und Raum ändern können. Während im Ortsraum eine Euler-Formulierung verwendet wird, d. h. die Tropfen-PDFs sind in jeder CFD-Zelle durch eine definierte Anzahl an Tropfenklassen aufgelöst, wird der Phasenraum der Tropfeneigenschaften (Geschwindigkeit, Temperatur, Durchmesser) weiterhin ähnlich einem Lagrange'schen Verfahren behandelt, um den Rechenaufwand zu minimieren. Die Euler-Formulierung der Transportgleichungen der Gas- und Flüssigphase im ICAS-Gebiet führt zu einer strengen Kopplung beider Phasen. Das stellt einen weiteren Vorteil gegenüber dem stochastischem Ansatz dar, bei dem die Flüssigphase in Lagrange'scher und die Gasphase in Eulerscher Betrachtungsweise gelöst werden. Die Strahlquellterme werden in dieser Arbeit mit dem ICAS-Modell von Krüger [65] modelliert.

5.1.3 Netztopologie

Die Auflösung des Rechengitters kann sich auf die Strahlaufweitung auswirken. Insbesondere der Bereich der freien Scherschichten am Strahlrand muss geeignet diskretisiert werden. Dabei ist die turbulente Viskosität die dominante netzabhängige Größe. Werden in den Scherschichten aufgrund von mangelnder Netzfeinheit die Geschwindigkeitsgradienten $\nabla \tilde{u}$ nicht aufgelöst, wird die Produktion der turbulenten kinetischen Energie \tilde{k} unterschätzt. Die Folge ist ein zu geringer Impulsaustausch, der schließlich zu einer geringeren Aufweitung und größeren Eindringung des Strahls führt. Dem entgegen wirkt die numerische Viskosität. 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 viel geringer sein als die physikalische. Ansonsten werden nicht-aufgelöste physikalische Prozesse durch numerische Fehler kompensiert. Dabei handelt es sich um keinen definierten Ausgleichsprozess, der unabhängig von der Ortsauflösung ein Gleichgewicht von numerischer und turbulenter Diffusion beinhaltet [65, 44].

Eine aus numerischer Sicht höhere Genauigkeit bei gleichzeitig moderater Zellanzahl ist mit adaptiven Gittern zu erzielen. Gerade bei Einspritzprozessen mit eindeutiger Vorzugsrichtung der Strömung führen strahlangepasste Rechennetze zu einer erheblichen Reduzierung des numerisch diffusiven Verhaltens [44]. In dieser Arbeit werden deshalb ausschließlich strahlangepasste Rechengitter verwendet.

⁶z. B. Tropfentemperatur und -durchmesser

5.2 Selbstzündung und Verbrennung

Kapitel 3 gibt einen Überblick über die dieselmotorische Verbrennung mit allen ihren Teilprozessen. Die folgenden Abschnitte legen den Fokus auf die physikalischen und chemischen Vorgänge turbulenter reaktiver Strömungen bei der innermotorischen Verbrennung. Dabei werden die Besonderheiten der Chemie in Verbindung mit einer turbulenten Strömung diskutiert.

5.2.1 Grundbegriffe und Herausforderungen reaktiver Strömungen

Nach und während der Selbstzündung⁷ findet im Zylinder ein hochdynamisches Wechselspiel zwischen chemischen und physikalischen Prozessen statt. Die direkte Einspritzung des Kraftstoffs in die drallbewegte, hochverdichtete Luft führt zu einer heterogenen Gemischverteilung. Die Turbulenz intensiviert dabei die Mischung durch Austauschprozesse in den Scherschichten des Wirbelspektrums. Die Gemischverteilung liefert zusammen mit der Thermodynamik die Randbedingungen für die lokalen chemischen Reaktionen. Durch die chemischen Reaktionen werden die Elemente der beteiligten Moleküle umverteilt. Bei exothermen Reaktionen ist dieser Vorgang mit einer Wärmefreisetzung verbunden. Dadurch steigt lokal die Temperatur und die Dichte nimmt ab [126].

Die Abbildung der turbulenten Strömungsverhältnisse und der zum Teil komplexen chemischen Reaktionsabläufe verlangt für vorhersagefähige Simulationen eine möglichst präzise allgemeingültige Modellierung. Eine deterministische Simulation der motorischen Dieselerbrennung ist aus Rechenzeitgründen nicht möglich, weshalb ein statistischer Beschreibungsansatz gewählt werden muss. Die allgemeine statistische Betrachtungsweise der Gasphase hat jedoch zur Folge, dass auch die Quellterme statistisch quantifiziert werden müssen. Bezogen auf die chemischen Prozesse stellt dies eine der größten Herausforderungen dar. Dies liegt primär an dem Auflösungsproblem relevanter Zeit- und Längenskalen und an der hohen Nichtlinearität der Reaktionsraten bezüglich der Spezieskonzentrationen und der Temperatur (siehe Gleichung (2.12)) [75].

Bei einem homogenen Reaktor werden zur Berechnung der Zustandsgrößen aller am Reaktionsmechanismus beteiligten Spezies Massenerhaltungsgleichungen gelöst. Die reaktionskinetischen Gesetzmäßigkeiten in Abschnitt 2.3 zeigen auf, dass die chemischen Quellterme nur Funktionen von thermochemischen Zuständen sind. Diese lauten

$$\dot{Q}^c = \dot{Q}^c(p, T, Y_1, Y_2, \dots, Y_{N_s}). \quad (5.1)$$

Werden die Momentanwerte der Zustandsgrößen durch Mittelwerte ersetzt, führt das zu großen Fehlern, da

$$\tilde{\dot{Q}}^c \neq \tilde{\dot{Q}}^c(\bar{p}, \bar{T}, \bar{Y}_i) \quad (5.2)$$

gilt. Zur Schließung des Grundgleichungssystems müssen deshalb geeignete Ensemble-gemittelte chemische Quellterme modelliert werden [75, 142, 126].

Des Weiteren ist zur korrekten Berechnung der chemischen Reaktionsraten neben der Berücksichtigung der turbulenten Gemischverteilung auch die statistisch korrekte Abbildung der Temperatur notwendig. Bei der dieselmotorischen Verbrennung korreliert die Temperatur vor der Zündung im Wesentlichen strikt mit dem Mischungsbruch. Größere lokale Temperaturunterschiede

⁷siehe Kapitel 3.2

im Brennraum sind in dieser Phase stets der Kraftstoffverdampfung zuzuordnen, wenn von der Abkühlung des Gemischs an den Brennraumwänden und der leichten Inhomogenität der eingeströmten Luft abgesehen wird. Lokale statistische Schwankungen des Drucks sind für kleine Machzahlen im Allgemeinen vernachlässigbar [129].

Die RANS-Gleichungen transportieren nur die statistischen Mittelwerte der Zustandsgrößen. Aufgrund der Ensemble-Mittelung gehen Information über die tatsächlich vorliegende inhomogene Gemischverteilung verloren. Zur Berücksichtigung der Fluktuation wird im nächsten Abschnitt ein Ansatz vorgestellt, der zusätzlich zum Favre-Mittelwert durch den Transport eines weiteren statistischen Moments die Rekonstruktion einer Verteilung ermöglicht. Zur Charakterisierung turbulenter, reaktiver Gemischzustände werden zunächst einige Begriffe und Größen aus der Verbrennungslehre eingeführt.

(A) Damköhler-Zahl

Bei turbulenten reaktiven Strömungen besteht eine Wechselwirkung zwischen strömungsmechanischen und chemischen Vorgängen. Die Reaktionsgeschwindigkeit wird dabei immer vom langsameren der beiden Prozesse bestimmt [142, 110, 105]. Die *Damköhler-Zahl* Da dient als Maß für das Verhältnis der turbulenten τ_{turb} zur chemischen Zeitskala τ_{chem} :

$$Da = \frac{\tau_{turb}}{\tau_{chem}} \quad (5.3)$$

Für kleine Damköhler-Zahlen ($Da \ll 1$, also $\tau_{turb} \ll \tau_{chem}$), d. h. wenn die Mischung schneller erfolgt als die chemischen Reaktionen, ist die Zeitskala des gesamten Vorgangs von der Chemie bestimmt (*chemisch kontrolliert*). Für sehr hohe Damköhler-Zahlen ($Da \gg 1$, also $\tau_{turb} \gg \tau_{chem}$) verhält es sich umgekehrt. Hier verlaufen die chemischen Reaktionen um Größenordnungen schneller als die turbulenten Mischungsprozesse (*mischungskontrolliert*) [142, 105].

(B) Turbulente Zeit- und Längenskalen; Streckungseffekte

Im Vergleich zum turbulenten Zeit- und Längenmaß umfasst das chemische Zeitskalenspektrum typischerweise einen erheblich größeren Bereich. Eine Gegenüberstellung turbulenter und chemischer Zeitskalen ist in Abb. 5.4 dargestellt. Für turbulente konvektive Prozesse bewegen sich die physikalischen Zeitskalen in einem Bereich von 10^{-4} bis 10^{-2} s [142, 82]. Beide Prozesse müssen gekoppelt betrachtet werden, sobald die physikalischen und chemischen Zeitskalen von gleicher Größenordnung sind.

In Abb. 5.5 ist nach [105] exemplarisch die maximale Temperatur eines vorgemischten Rührreaktors über der Damköhler-Zahl aufgetragen. Die Damköhler-Zahl repräsentiert hier das Verhältnis aus Verweildauer und chemischer Zeit der Reaktanden im Rührreaktor. Entlang des unteren Astes in Richtung höherer Damköhler-Zahlen findet bis Da_Z nahezu keine Temperaturerhöhung statt, da die kurzen Verweilzeiten der Reaktanden eine thermische Zündung verhindern. Ein un stetiger Übergang (Zündung) auf den oberen Ast, der sich asymptotisch der Gleichgewichtstemperatur nähert, erfolgt für $Da \geq Da_Z$. Entlang des oberen Astes in Richtung kleinerer Damköhler-Zahlen tritt ab Da_L Flammenlöschung auf. Der Bereich zwischen Da_Z und Da_L ist instabil und nicht eindeutig definiert. Dabei stellen der obere und der untere Ast starke Attraktoren dar. Des Weiteren verdeutlicht Abb. 5.5, dass für den Rührreaktor in Abhängigkeit

der Damköhler-Zahl ein Bereich mit nahezu vernachlässigbarer Wärmefreisetzung und ein Bereich mit maximaler Wärmefreisetzung in Nähe des chemischen Gleichgewichts existiert. Die chemischen und physikalischen Prozesse können hier entkoppelt betrachtet werden. Bei niedrigen Damköhler-Zahlen sind die chemischen Reaktionen so langsam, dass die Strömung nicht beeinflusst wird. Bei hohen Damköhler-Zahlen sind die chemischen Reaktionen sehr schnell und finden typischerweise in Reaktionszonen statt, die dünner als die dissipativen Wirbelstrukturen sind. Somit beeinflussen die chemischen Abläufe die Turbulenz nur durch eine Dichteänderung als Folge der Temperaturerhöhung [142, 126].

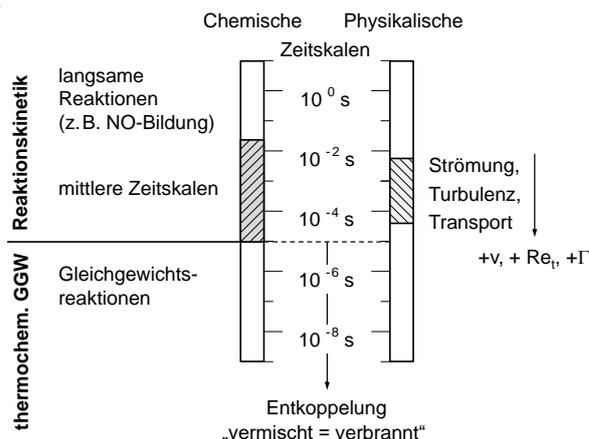


Abbildung 5.4: Zeitskalenspektrum reaktiver Strömungen nach [142, 126].

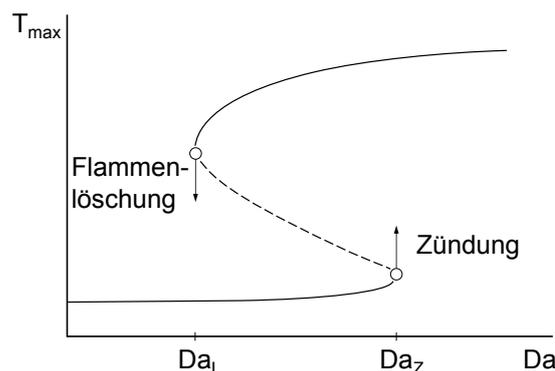


Abbildung 5.5: Maximale Temperatur in einem Mischungsreaktor in Abhängigkeit der Damköhler-Zahl (S-Kurve) nach [105].

Bei der Diffusionsverbrennung treten molekulare Transportprozesse der Reaktanden zur Reaktionszone auf. Diese müssen zusätzlich zur heterogenen Gemischverteilung berücksichtigt werden. Im Gegensatz zu laminaren Diffusionsflammen kontrolliert bei turbulenten Diffusionsflammen der turbulente Transport die Mischung und somit auch den Reaktionsfortschritt. Dadurch entwickeln sich unterschiedliche Flammen-Wirbel-Interaktionen in Abhängigkeit der chemischen und turbulenten Zeit- und Längenskalen, die über die Damköhler-Zahl und die Streckungsrate klassifiziert werden können [102]. Für kleine Damköhler-Zahlen findet eine Interaktion der dissipativen Wirbel mit der Reaktionszone statt und es gibt keine definierte Flammenfront. Für große Damköhler-Zahlen laufen die chemischen Reaktionen im Vergleich zu den turbulenten Transportprozessen sehr schnell ab. Hier ist die Flammendicke kleiner als die Kolmogorov-Wirbel, so dass die Wirbel die Reaktionszone zwar falten und strecken, jedoch nicht aufreißen. Die laminare Struktur der Flammenfront bleibt trotz der hoher Turbulenz erhalten. Dieser Bereich wird als sogenannter *Flamelet-Bereich* bezeichnet. Hierbei liegt stets eine klare Grenzschicht zwischen Oxidator und Kraftstoff vor. Bei großen Fluktuationen erlischt die Flamme (Flammenlöschung), da die chemischen Reaktionen und somit die Wärmefreisetzung im Vergleich zum Stoff- und Wärmetransport aus der Reaktionszone zu langsam ablaufen. Bei sehr kleinen Fluktuationen ist das Gemisch nahezu homogen. Konventionelle dieselmotorische Brennverfahren weisen Verbrennungsprozesse in allen Regimes auf, wobei der Flamelet-Bereich dominiert [102, 126]. Vor der Erläuterung des Flamelet-Konzepts wird zunächst eine Größe eingeführt, anhand derer lokale Gemischzustände quantifiziert werden können.

5.2.2 Mischungsbruch

(A) Definition des Mischungsbruchs

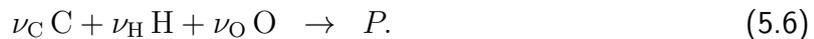
Die Definition des Mischungsbruchs ist so gewählt, dass lokale Gemischzustände nicht-vorgemischter Flammen beschrieben werden können. Analog zum Massenbruch Y_i lässt sich ein Elementmassenbruch Z_j definieren, der den Massenanteil eines Elements j an der Gesamtmasse angibt

$$Z_j = \sum_{i=1}^{N_s} \frac{a_{ij} M_j}{M_i} Y_i \quad j = 1, \dots, N_{el}. \quad (5.4)$$

Hierbei stellen N_s die Anzahl der Stoffe und N_{el} die Anzahl der Elemente im betrachteten Gemisch dar, während die Koeffizienten a_{ij} die Zahl der Atome des Elements j in einem Mol der Spezies i angeben. Die molaren Massen sind mit M bezeichnet. Sofern ein Zweistromproblem mit einem Kraftstoff- und Oxidatorstrom vorliegt, kann mit Hilfe der Elementmassenbrüche Z_j ein Mischungsbruch Z definiert werden (die Indizes 1 und 2 bezeichnen die beiden Ströme) [142]:

$$Z = \frac{Z_j - Z_{j,2}}{Z_{j,1} - Z_{j,2}} \quad (5.5)$$

Gleichung (5.5) verknüpft den Mischungsbruch in linearer Weise mit den Elementmassenbrüchen. Da stets die Bedingung der Massen- bzw. Elementerhaltung gilt, ändert sich der Mischungsbruch nur mischungsbedingt und nicht aufgrund von chemischen Reaktionen. Nach [42] kann die Reaktionsgleichung (2.3) auf Basis der Elementmassenbrüche unter Vernachlässigung von Stickstoff formuliert werden zu



Analog zu den Stöchiometrie-Koeffizienten in Reaktion (2.3) lassen sich die in Reaktion (5.6) bestimmen

$$\nu_C = a = 1 \quad (5.7)$$

$$\nu_H = b = \frac{1}{X_{C/H}^{Kr}} \quad (5.8)$$

$$\nu_O = 2 \cdot \nu'_{O_2} = 2 + \frac{1}{2X_{C/H}^{Kr}}. \quad (5.9)$$

Bilger definiert den Mischungsbruch in [7] mit

$$Z = \frac{Z_C / (\nu_C M_C) + Z_H / (\nu_H M_H) - 2Z_O / (\nu_O M_O) + 2Z_{O,2} / (\nu_O M_O)}{Z_{C,1} / (\nu_C M_C) + Z_{H,1} / (\nu_H M_H) + 2Z_{O,2} / (\nu_O M_O)}. \quad (5.10)$$

Der stöchiometrische Mischungsbruch Z_{st} leitet sich aus Gleichung (5.10) ab und lautet

$$Z_{st} = \frac{2Z_{O,2} / (\nu_O M_O)}{Z_{C,1} / (\nu_C M_C) + Z_{H,1} / (\nu_H M_H) + 2Z_{O,2} / (\nu_O M_O)}. \quad (5.11)$$

Werden die Stöchiometrie-Koeffizienten aus (5.7) bis (5.9) in Gleichung (5.11) eingesetzt, ergibt sich nach einigen Umformungen

$$Z_{st} = \left[\frac{2M_O (X_{C/H}^{Kr} + 1/4)}{Y_{O_2} (M_C X_{C/H}^{Kr} + M_H)} + 1 \right]^{-1}. \quad (5.12)$$

Mit Hilfe dieser Gleichung lässt sich der stöchiometrische Mischungsbruch sowohl für trockene als auch für feuchte Luft berechnen. Darüber hinaus kann aufgrund des linearen Zusammenhangs zwischen dem Mischungsbruch und den Spezies-Massenbrüchen das Luftverhältnis λ als Funktion des Mischungsbruchs ausgedrückt werden

$$\lambda = \frac{1 - Z}{Z} \frac{Z_{st}}{1 - Z_{st}} \tag{5.13}$$

Z_{st} entspricht nach obiger Definition einem Luftverhältnis von $\lambda = 1$. In mageren Bereichen $\lambda > 1$ gilt folglich $Z < Z_{st}$, während fette Mischungen $\lambda < 1$ durch $Z > Z_{st}$ charakterisiert werden [142].

Ist der stöchiometrische Mischungsbruch bekannt, dann lassen sich die linearen Zusammenhänge eines einfachen Reaktionssystems mit Hilfe einer Gegenstrom-Diffusionsflamme veranschaulichen. Zunächst muss die räumliche Koordinate der Diffusionsflamme in den Mischungsbruchraum transformiert werden. Dadurch sind auch die Massenbrüche aller an der chemischen Reaktion beteiligten Spezies dem örtlichen Wert des Mischungsbruchs zugeordnet [142]. In Abb. 5.6 ist eine schematische Darstellung einer Gegenstrom-Diffusionsflamme zusammen mit den Massenbruchverläufen der Spezies im Mischungsbruchraum für eine inerte und reaktive Strömung dargestellt. In dieser Illustration wird für den reaktiven Fall die sogenannte *Burke-Schumann Lösung* verwendet. Diese sieht die Reaktionszone als unendlich dünne Schicht an, in der Kraftstoff und Oxidator in unendlich schnellen chemischen Reaktion zu Produkten umgewandelt werden [15].

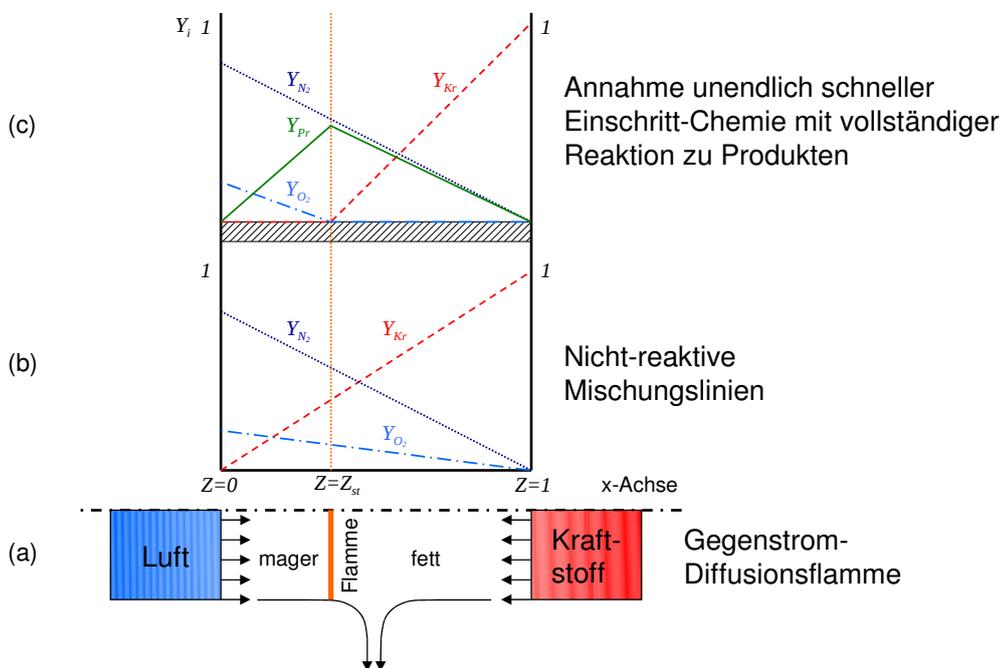


Abbildung 5.6: (a) Beispiel einer Gegenstrom-Diffusionsflamme. (b) Projektion der Massenbrüche von Kraftstoff Y_{Kr} , Sauerstoff Y_{O_2} und Stickstoff Y_{N_2} in den Mischungsbruchraum Z bei Annahme einer nicht-reaktiven Strömung. (c) Burke-Schumann Lösung der Reaktanden im Mischungsbruchraum für eine reaktive Strömung. Nach [126].

(B) Erhaltungsgleichung des Mischungsbruchs und dessen Varianz

Die Favre-gemittelten Erhaltungsgleichungen aus Abschnitt 4.2.5 dienen zur Beschreibung von turbulenten Strömungsvorgängen. Zur Simulation innermotorischer Verbrennungsprozesse werden zusätzliche Transportgleichungen für den Mischungsbruch Z und dessen Varianz $\widetilde{Z''^2}$ benötigt. Unter der Annahme gleicher Diffusivität aller Spezies (was meistens näherungsweise erfüllt ist [142]), lässt sich zunächst mit Hilfe der laminaren Transportgleichungen der Massenbrüche Y_i (siehe Gleichung (4.6)) eine Transportgleichung für den Mischungsbruch ableiten [105, 142]

$$\frac{\partial \rho Z}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho Z \vec{u}) = \nabla \cdot (\rho D \nabla Z) + \dot{\rho}_Z^s. \quad (5.14)$$

$\dot{\rho}_Z^s$ stellt den Verdampfungsquellterm dar. Da Elemente im Gegensatz zu molekularen Stoffgrößen durch chemische Reaktionen weder verbraucht noch gebildet werden, besitzt Gleichung (5.14) keinen chemischen Quellterm. Unter Vernachlässigung der molekularen Diffusion folgt mit dem Gradientenansatz zur Modellierung der turbulenten Scheinspannungen für die Favre-gemittelten Erhaltungsgleichungen des Mischungsbruchs \widetilde{Z} und der Varianz des Mischungsbruchs $\widetilde{Z''^2}$ [104]:

Mischungsbruch \widetilde{Z} :

$$\frac{\partial \widetilde{\rho Z}}{\partial t} + \nabla \cdot (\widetilde{\rho \vec{u} Z}) = \nabla \cdot \left(\frac{\mu_t}{S_{C_t}} \nabla \widetilde{Z} \right) + \widetilde{\rho}_Z^s \quad (5.15)$$

Varianz des Mischungsbruchs $\widetilde{Z''^2}$:

$$\frac{\partial \widetilde{\rho Z''^2}}{\partial t} + \nabla \cdot (\widetilde{\rho \vec{u} Z''^2}) = \nabla \cdot \left(\frac{\mu_t}{S_{C_t}} \nabla \widetilde{Z''^2} \right) + \underbrace{2 \frac{\mu_t}{S_{C_t}} (\nabla \widetilde{Z})^2}_{\text{Produktion}} - \underbrace{\widetilde{\rho \chi_{sc}}}_{\text{Dissipation}} + \underbrace{\widetilde{\rho}_Z^s}_{\text{Verdampfung}} \quad (5.16)$$

Für die turbulente Viskosität μ_t und die turbulente Schmidt-Zahl S_{C_t} werden die gleichen Werte wie für die Speziestransportgleichungen (4.39) verwendet. Die turbulente mittlere skalare Dissipationsrate $\widetilde{\chi_{sc}}$ wird nach [54] modelliert und lautet

$$\widetilde{\chi_{sc}} = C_{\chi_{sc}} \frac{\widetilde{\epsilon}}{k} \widetilde{Z''^2} \quad (5.17)$$

$C_{\chi_{sc}}$ entspricht dabei dem Verhältnis zwischen der Skalar- und Strömungszeitskala und wird für dieselmotorische Verbrennungsprozesse meist mit $C_{\chi_{sc}} = 2.0$ angenommen [105]. Strenggenommen besitzt die Erhaltungsgleichung für die Varianz des Mischungsbruchs $\widetilde{Z''^2}$ auch einen Verdampfungsquellterm. In [114] wird deshalb u. a. dieser Term mittels direkter numerischer Simulationen (DNS) verdampfender Tropfen in verdünnte turbulenten Strömungen über der Zeit quantifiziert und ein sogenanntes *Single-Droplet-Model* daraus abgeleitet. Unter diesen Randbedingungen kann eine Relevanz nachgewiesen werden. Da die dieselmotorische Verdampfung größtenteils in direkter Abhängigkeit vom Sättigungszustand mischungskontrolliert abläuft [65], scheinen diese Bedingungen nicht repräsentativ. In [131] wird u. a. der o. g. Ansatz LIEF⁸-Messungen gegenübergestellt und eine Überschätzung der Varianzzunahme durch Verdampfung nachgewiesen. Des Weiteren zeigen die Analysen, dass diese hauptsächlich in der Strahlmitte stattfindet, zum Strahlrand schnell abklingt und somit für nachfolgende Zünd- und Verbrennungsprozesse eine untergeordnete Rolle spielt. Der Verdampfungsquellterm in Gleichung (5.16) wird deshalb in dieser Arbeit nicht berücksichtigt.

⁸engl.: Laser-Induced-Exciplex- Fluorescence, LIEF

5.2.3 Das laminare Flamelet-Konzept

Das laminare *Flamelet-Konzept* dient zur Beschreibung turbulenter Diffusionsflammen und wird erstmals in [149] vorgestellt. Die Anwendbarkeit setzt zwei sogenannte *Flamelet-Annahmen* voraus:

1. $Da \gg 1$: chemische Reaktionen sind schnell im Vergleich zu Mischungsprozessen.
2. Die dicke der Reaktionszone ist kleiner als das Kolmogorov-Längenmaß: es liegt eine sehr dünne und damit quasi-eindimensionale Reaktionszone vor.

Sind beide Annahmen erfüllt, kann eine turbulente, nicht-vorgemischte Flamme als ein Ensemble

Flamelet-Modelle führen demnach komplizierte, mehrdimensionale Verbrennungsmodelle auf eindimensionale Strukturen zurück. Das turbulente Strömungsfeld hat einen Einfluss auf die Faltung und Dehnung der Flamelets, wobei die laminare, chemische Struktur nicht zerstört wird. Durch die Isofläche stöchiometrischer Mischung Z_{st} wird die Reaktionszone von Diffusionsflammen lokalisiert. Unter der Annahme $Z(\vec{x}, t) = Z_{st}$ kann mit Hilfe der Transportgleichung (5.14) die zeitliche und lokale Verteilung der Reaktionszone bestimmt werden. Das Problem ist für die Burke-Schumann Lösung aufgrund der irreversiblen, unendlich schnellen Chemieannahme rein mischungskontrolliert. Da eine direkte Korrelation zwischen dem Mischungsbruch und den Spezies-Massenbrüchen existiert, müssen nicht alle Spezies transportiert werden, sondern es genügt die Bilanzierung des Mischungsbruchs [100, 101].

5.2.4 PDF Modellierung

Statistische Momente einer Größe ψ können mit Hilfe von Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen (PDFs) berechnet werden. Für das RANS-Verfahren sind dabei vor allem das erste Moment (Mittelwert) und das zweite Moment (Schwankungsgröße oder Varianz) entscheidend. Eine PDF theoretisch beliebig viele Formen annehmen. Zur Bestimmung der Form werden die sogenannten *transported-PDF*- und *presumed-PDF*-Ansätze unterschieden [142].

(A) Transported-PDF Ansatz

Der *transported-PDF*-Ansatz stellt für einphasige Strömungen einen der vollkommensten Modellierungsansätze dar, da chemische Quellterme keinerlei Modellierung bedürfen. Hier wird der Transport im Skalarraum durch chemische Reaktionen in geschlossener Form beschrieben. Grundsätzlich können mit diesem Konzept alle Verbrennungsregimes (vorgemischt, nicht-vorgemischt, teilweise-vorgemischt) simuliert werden [105]. Der numerische Aufwand kann durch Einführung sogenannter *stochastischer Partikel* reduziert werden [108, 109]. Für eine konvergierende Lösung ist die Partikelanzahl dennoch so hoch, dass der Ansatz für motorische Fragestellungen auch mit reduzierten Reaktionsmechanismen [78, 77] nicht zur Anwendung kommt [126, 5].

(B) Presumed-PDF Ansatz

Beim *presumed-PDF*-Ansatz wird eine vordefinierte Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion in Abhängigkeit einer limitierten Anzahl an bekannten Momenten konstruiert. Dabei wird die Annahme

ausgenutzt, dass die Simulationsergebnisse turbulenter Flammen meist nur wenig von der genauen Form der PDFs abhängen [142]. Die β -PDF bzw. die β -Funktion hat sich zur Beschreibung der turbulenten Gemischverteilung nicht-vorgemischter Flammen etabliert [105]. Durch die Definition mit zwei Momenten kann eine große Bandbreite an unterschiedlichsten Verteilungsformen abgebildet [142, 115] werden, jedoch keine multi-modalen Verläufe, wie sie teilweise an der Strahlspitze zu beobachten sind. In [36] wird die Funktionalität der β -PDF zur Beschreibung einfacher, turbulenter Diffusionsflammen mit Hilfe von DNS Rechnungen bewertet und eine zufriedenstellende Übereinstimmung für die wesentlichen Mischungsszenarien festgestellt. Die normierte, Favre-gemittelte β -Funktion ist definiert als:

$$P_Z(Z; \vec{x}, t) = \frac{Z^{\alpha-1} \cdot (1-Z)^{\beta-1}}{\int_{Z=0}^{Z=1} Z^{\alpha-1} \cdot (1-Z)^{\beta-1} dZ} \quad W_{P_Z} = [0; 1] \quad (5.18)$$

Die Exponenten α und β ergeben sich aus \tilde{Z} und \tilde{Z}''^2 :

$$\alpha = \tilde{Z} \cdot \gamma, \quad (5.19)$$

$$\beta = (1 - \tilde{Z}) \cdot \gamma, \quad (5.20)$$

$$\text{mit } \gamma = \alpha + \beta = \frac{\tilde{Z} \cdot (1 - \tilde{Z})}{\tilde{Z}''^2} - 1 \geq 0. \quad (5.21)$$

Abb. 5.7 zeigt für verschiedene Wertepaare von \tilde{Z} und \tilde{Z}''^2 normierte Verläufe der β -Funktion. Für zunehmende Varianzen steigt die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion an den Randbereichen an, für sehr kleine Werte von \tilde{Z}''^2 nähert sich die β -Funktion einer Delta-Funktion. Durch die Gewichtung mit der β -PDF einer beliebigen Funktion $\psi(Z)$, lässt sich gemäß der Gleichung für statistische Momente einer PDF aus [142] der statistische Mittelwert mit

$$\tilde{\psi}(\vec{x}, t) = \int_{Z=0}^{Z=1} \psi(Z) P_Z(Z; \tilde{Z}(\vec{x}, t), \tilde{Z}''^2(\vec{x}, t)) dZ \quad (5.22)$$

berechnen. Insbesondere innerhalb sämtlicher Flamelet-Konzepte spielt die numerische Lösung dieses Integrals eine zentrale Rolle, da dadurch entscheidend die Güte des Simulationsergebnisses bestimmt wird. In [126] wird ein semi-analytischer Ansatz hergeleitet, welcher in der vorliegenden Arbeit zur Integration sämtlicher Funktionen im Mischungsbruchraum verwendet wird.

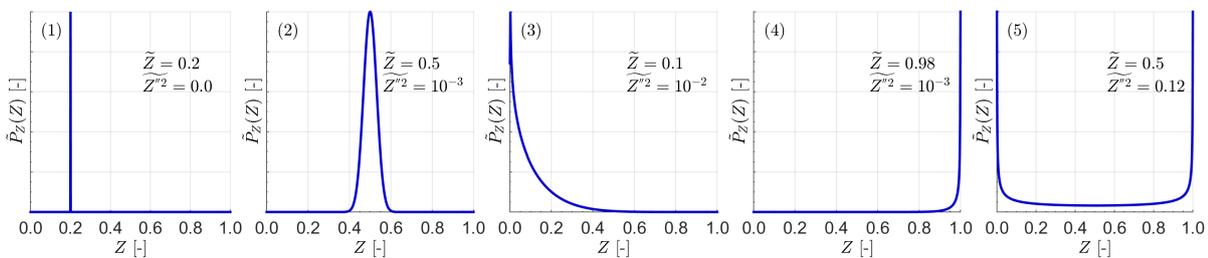


Abbildung 5.7: Mögliche Formen einer mit dem Maximalwert von $\tilde{P}_Z(Z)$ normierten β -PDF. (1) Homogen. (2) Gemischt. (3) Oxidator dominant. (4) Kraftstoff dominant. (5) Ungemischt. Nach [142, 126].

5.2.5 Anforderungen an die Modellierung reaktiver Strömungen

In den vorherigen Abschnitten werden wesentliche Eigenschaften turbulenter, reaktiver Gemischzustände für die Zünd- und Verbrennungsmodellierung charakterisiert. Die Prozesse der Gemischbildung und Chemie interagieren bei der dieselmotorischen Verbrennung sehr stark miteinander, weshalb deren Interaktion bei der Modellierung die zentrale Herausforderung darstellt.

Die dieselmotorische Verbrennung durchläuft verschiedene Phasen [82]. In der Zündphase ist die Detaillierung der chemischen Prozesse entscheidend für die korrekte Abbildung des Zündverzugs. Dabei darf die heterogene Gemischverteilung in dieser Phase nicht vernachlässigt werden, da die lokalen Temperaturunterschiede unmittelbar auf den chemischen Zündverzug wirken. Des Weiteren hat die Mischungsgeschwindigkeit von Kraftstoff und Oxidator, also die skalare Dissipationsrate, einen unmittelbaren Einfluss auf die Zündreaktionen und muss deshalb geeignet berücksichtigt werden. Für die Berechnung der Wärmefreisetzung während der späteren Diffusionsverbrennung ist die Berücksichtigung der turbulenten Transportprozesse ausschlaggebend. Während dieser Phase befinden sich die chemischen Reaktionen nahezu im Gleichgewicht und hängen nur vom lokalen Gemischzustand ab, der insbesondere durch den Mischungsbruch und die Temperatur charakterisiert wird.

Bei Brennverfahren mit hohem Restgasanteil⁹ [153] sind die chemischen Zündverzüge aufgrund der niedrigen Sauerstoffkonzentrationen verhältnismäßig lang. Hier liegt der Fokus noch stärker auf die Detaillierung der chemischen Prozesse. Durch die Dauer der Vorreaktionen gewinnt die Wärmefreisetzung während der Zünd- und Vormischphase an Bedeutung. Sowohl die Mehrstufen-Zündung oder Cool-Flame-Verbrennung¹⁰, die meist in Verbindung mit homogenen bzw. teilhomogenen Brennverfahren gebracht werden, können bei diesen Brennverfahren ebenfalls beobachtet werden [127].

Grundsätzlich können bei der Modellierung der chemischen Prozesse beim Dieselmotor *ganzheitliche* und *modulare Ansätze* unterschieden werden. Die *ganzheitlichen Ansätze* beschreiben mit nur einem Modell die Teilprozesse Zündung und Verbrennung. Im Gegensatz dazu wird bei *modularen Ansätzen* für jedes Teilphänomen ein eigenes Modell herangezogen. Ein Vorteil von modularen Ansätzen ist deren eindeutiger Gültigkeitsbereich. Ein Modell für die Selbstzündung ist bspw. für kleine Damköhler-Zahlen formuliert, während Diffusionsverbrennungsmodelle von der Annahme großer Damköhler-Zahlen profitieren und so deren Komplexität reduziert werden kann¹¹. Jedoch kann die Umschaltung von einem Zünd- auf ein Verbrennungsmodell problematisch werden und bedarf deshalb geeigneter, robuster Kriterien. Diesbezüglich sind ganzheitliche Ansätze unkritisch. Sie stellen aber an die Modellformulierung hohe Anforderungen, damit alle Phasen der dieselmotorischen Verbrennung inklusive aller relevanten chemischen Prozesse sowie der Zeit- und Längenskalen aufgelöst werden können.

Im Folgenden werden die Zünd- und Verbrennungsmodelle erläutert, die bei der Daimler AG im Einsatz sind. Diese bilden die Basis für das in dieser Arbeit entwickelte Zünd- und Verbrennungsmodell. Des Weiteren werden die Modelle bzgl. ihrer Vorhersagefähigkeit anhand der zuvor identifizierten Kriterien, wie z. B. die Detaillierung der chemischen Prozesse sowie deren Interaktion mit der Turbulenz, bewertet.

⁹auch Hoch-AGR- oder „Low-NO_x“-Brennverfahren

¹⁰vgl. Kapitel 2.3.3

¹¹siehe z. B. Flamelet-Konzept in Abschnitt 5.2.3

5.2.6 Modellierung der Selbstzündung

Zur Modellierung der dieselmotorischen Selbstzündung wird bei der Daimler AG das *PDF-CO-Zündmodell* nach [129] verwendet. Es handelt sich hierbei um einen Ansatz, der die Rückwirkung der turbulenten Gemischbildung auf die Zündprozesse mit Hilfe einer presumed-PDF berücksichtigt. In diesem Modell wird CO als Reaktionsfortschrittsvariable verwendet. Diese ist somit ein Zeitmaß für den chemischen Reaktionsfortschritt. Auswertungen homogener Reaktorrechnungen zeigen, dass CO die Zündphase hinreichend gut reaktionskinetisch beschreibt und dabei bis zur Zündung einen streng monotonen Verlauf der Konzentration aufweist [129]. Da CO nach der Zündung wieder verbraucht werden kann, ist es nur vor der Zündung als Fortschrittsvariable einsetzbar. Analysen der Homogene-Reaktorrechnungen bezüglich des größten Temperaturanstiegs und der größten CO-Reaktionsrate während der Reaktion ermöglichen die Identifikation des Zündzeitpunkts. In der Regel finden beide Ereignisse zeitgleich statt. Anhand dessen wird in [129] der empirische Grenzwert von 0.02 des CO-Massenbruchs als Zündkriterium festgelegt. Damit wird einerseits gewährleistet, dass der Verlauf der Fortschrittsvariable Y_{ign} für den Gültigkeitsbereich des Modells streng monoton ist und andererseits die Zündung unmittelbar danach erfolgt.

Die Bildung der mittleren Reaktionsfortschrittsvariable \tilde{Y}_{ign} wird mit der mittleren Reaktionsrate $\tilde{\omega}_{ign}$ auf Basis eines presumed-PDF-Ansatzes berechnet:

$$\tilde{\omega}_{ign} = \int_{Z_{ign}=0}^1 \int_{T_1}^{T_2} \dot{\omega}_{ign} \left(\bar{p}, \xi_{egr}, Z_{ign}, T^{(0)}(Z_{ign}), \tilde{Y}_{ign}, \right) \cdot P_{Z_{ign},T} dT dZ_{ign} \quad (5.23)$$

Die laminaren Reaktionsraten $\dot{\omega}_{ign}$ sind a-priori mit Hilfe von isobaren Homogene-Reaktorrechnungen in Abhängigkeit der Parameter Druck p , Restgasrate ξ_{egr} , normierten Mischungsbruch Z_{ign} , Anfangstemperatur $T^{(0)}$ berechnet und über der Fortschrittsvariable Y_{ign} tabelliert. Die spezielle Definition des Mischungsbruchs Z_{ign} lautet hier nach [129]

$$Z_{ign} = \frac{Y_f}{Y_{sat}}, \quad Z_{ign} \in [0, 1] \quad (5.24)$$

und resultiert aus der Normierung des Kraftstoffmassenbruchs einer CFD-Zelle Y_f mit dem korrelierenden Sättigungszustand Y_{sat} . Aufgrund der speziellen Definition wird Z_{ign} nicht transportiert, sondern in jeder Zelle zu jedem Zeitschritt explizit berechnet. Die gemeinsame Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion $P_{Z_{ign},T}$ in Gleichung (5.23) ist abhängig von der Temperatur und dem Mischungsbruch. Aufgrund der vorliegenden Zweiphasenströmung während der Zündphase korrelieren beide Größen eindeutig miteinander. Die häufig getroffene Annahme von statistischer Unabhängigkeit ist hier nicht zulässig. Zur Bestimmung der Korrelation zwischen Temperatur und Mischungsbruch $T^{(0)}(Z_{ign})$ wird eine Zweistrom-Betrachtungsweise vorgenommen: Strom 1 beschreibt den Zustand des Oxidators (Luft-Restgas-Gemisch), während Strom 2 den Sättigungszustand an der Tropfenoberfläche charakterisiert. Für Strom 2 lässt sich zur Berechnung des maximal möglichen Kraftstoffmassenbruchs Y_{sat} bei gegebener Temperatur \tilde{T} und gegebenem Brennraumdruck \bar{p} folgende Beziehung aufstellen:

$$Y_{sat}(\tilde{T}, \bar{p}) = \frac{M_f}{M_f + M_{ox} \cdot \left(\frac{\bar{p}}{p_{vap}(\tilde{T})} - 1 \right)} \quad (5.25)$$

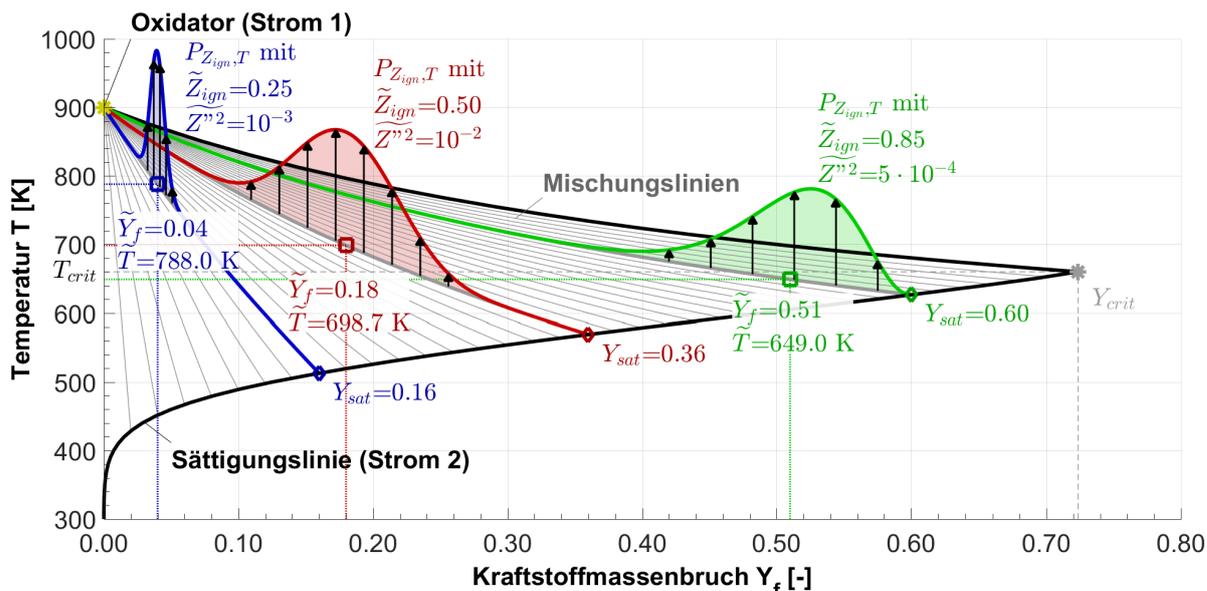


Abbildung 5.8: Korrelation zwischen Temperatur und Mischungsbruch $T(Z_{ign})$ für $T_{ox} = 900 \text{ K}$, $\bar{p} = 60 \text{ bar}$ inkl. drei verschiedener Mischungsszenarien mit jeweiliger PDF $P_{Z_{ign},T}$ nach [129].

p_{vap} bezeichnet den Dampfdruck des Kraftstoffs, M_f und M_{ox} das Molekulargewicht des Kraftstoffs bzw. des Oxidators. Mittels einer adiabaten Mischung beider Ströme kann die Korrelation $T(Z_{ign})$ bestimmt werden [129, 127]. Die Zusammenhänge sind in Abb. 5.8 für drei verschiedene Mischszenarien illustriert.

Ein Nachteil des Modells ist die Annahme einer konstanten Verteilung der Fortschrittsvariable im Mischungsbruchraum. Des Weiteren ist das Modell für Simulationen von Brennverfahren mit Cool-Flame-Zündungen (Höchst-AGR-Brennverfahren) nur bedingt anwendbar, da während der Zündphase keine Energie freigesetzt wird. Dabei ist CO als Fortschrittsvariable kritisch zu bewerten, da Kohlenmonoxid zwischen der Cool-Flame- und der Hauptzündung ein ausgeprägtes Plateau aufweist, welches die Zuweisung eines eindeutig definierten Reaktionszustands erschwert. Ein weiterer Nachteil ist das nicht transportierte Zündflag. Gilt eine CFD-Zelle als gezündet, verändert sie ihren Zustand im weiteren Verlauf der Simulation nicht mehr. In gezündeten Zellen werden keine Reaktionsraten für die Fortschrittsvariable berechnet. Dieses Verhalten erweist sich insbesondere bei Simulationen von Mehrfacheinspritzungen als problematisch, da bei der Haupteinspritzung kein chemischer Zündverzug mehr berücksichtigt wird.

Dieser gravierende Nachteil lässt sich umgehen, wenn das Zündflag nicht verwendet wird. Es ist möglich die Zündbedingung $\tilde{Y}_{ign} \geq 0.02$ auch nach erfolgter Zündung zu nutzen. Eine Quelltermberechnung für die Fortschrittsvariable erfolgt dann nur in Zellen mit $\tilde{Y}_{ign} < 0.02$, da diese als nicht gezündet gelten. Damit eine sinnvolle Auswertung der Gradienten der Fortschrittsvariable im Strömungsfeld möglich ist, muss deren Maximalwert auf $0.02 + \epsilon$ (mit bspw. $\epsilon = 10^{-3}$) begrenzt werden. Durch Konvektions- und Diffusionsprozesse kann der notwendige Schwellenwert für die Zündbedingung wieder unterschritten werden. In diesem Fall wird der Quellterm $\tilde{\omega}_{ign}$ so lange berechnet bis das Zündkriterium wieder erfüllt ist. Es ist empfehlenswert in CFD-Zellen mit mittleren Temperaturen größer bspw. 1300 K den Wert der Fortschrittsvariable auf 0.021 zu setzen, da hier davon ausgegangen werden kann, dass die Zündphase abgeschlossen ist. Somit kann die Quelltermberechnung in der Diffusions- und Ausbrandphase

vermieden werden. Für diese Phase der Verbrennung kann eine Ersatzfortschrittsvariable¹² in Verbindung mit einem Schwellenwert ebenso als Indikator genutzt werden.

Trotz der erwähnten Nachteile ist dieses Modell bei der Daimler AG seit vielen Jahren zur Berechnung der Zündverzüge konventioneller Brennverfahren erfolgreich im Einsatz [127]. Gegenüber der ursprünglichen Formulierung wird die Oxidatortemperatur nicht mehr global für den gesamten Brennraum, sondern lokal auf Basis der Zellenthalpien¹² bestimmt. Dies ermöglicht bspw. die Berechnung lokaler Heizmaßnahmen, wie sie durch einen Glühstift beim Kaltstart vorliegen, berücksichtigt aber insbesondere die lokale Abkühlung des Gemischs aufgrund der Kraftstoffverdampfung.

5.2.7 Verbrennungsmodellierung

Zur 3D-CFD-Simulation der innermotorischen Dieselerverbrennung wird bei der Daimler AG das *7-Spezies-PDF-Timescale Modell* nach [127] eingesetzt. Es findet seinen Ursprung im *Mixing-Timescale Modell* nach [62], weshalb zunächst dieses näher erläutert wird.

Das Mixing-Timescale Modell dient zur Berechnung der konventionellen Dieselerverbrennung [62]. Es stellt eine Erweiterung der Modellierungsvorschläge aus [1] dar und basiert auf dem *Laminar-and-Turbulent Characteristic-Time Modell* zur Berechnung der Otto-Verbrennung. Das thermochemische Gleichgewicht wird dabei mit einem analytischen Gleichgewichtslöser bestimmt. Für die Abbildung der Gemischzusammensetzung wird ein 7-Spezies-Modell verwendet, welches neben Kraftstoff die Spezies O_2 , N_2 , H_2O , CO_2 , CO und H_2 beinhaltet. Die Ensemble-gemittelten chemischen Quellterme der Spezies i beziehen sich hier auf die lokalen thermochemischen Gleichgewichtszustände $\tilde{Y}_i^{(eq)}$ und lauten

$$\tilde{\rho}_i^c = \bar{\rho} \left(\frac{d\tilde{Y}_i}{dt} \right)^c = -\bar{\rho} \frac{\tilde{Y}_i - \tilde{Y}_i^{(eq)}}{\tau_c}. \quad (5.26)$$

Die allgemeinen Zeitskala τ_c entspricht der Zeit bis zum Erreichen eines Referenzzustands. Sie berechnet sich aus der Summe einer charakteristischen chemischen und turbulenten Zeitskala:

$$\tau_c = \tau_{chem} + f \cdot \tau_{turb} \quad (5.27)$$

Die chemische Zeitskala τ_{chem} wird durch eine empirische Arrhenius-Beziehung beschrieben und ist vor allem in der Vormischverbrennungsphase geschwindigkeitsbestimmend ($\tau_{chem} \ll \tau_{turb}$)

$$\tau_{chem} = A^{-1} (Y_{C_nH_m})^{0.75} (Y_{O_2})^{-1.5} e^{\frac{E_a}{RT}} \quad (5.28)$$

mit $A = 1.54 \cdot 10^{10}$, der Aktivierungsenergie $E_a = 77.3$ KJ/mol und den beiden Massenbrüchen $Y_{C_nH_m}$ und Y_{O_2} . Für die Diffusionsverbrennung ist die turbulente Zeitskala τ_{turb} relevant. Entsprechend den *Eddy-BreakUp-Modellen* [124] ist sie proportional zur turbulenten Mischungszeit und kann mit Hilfe der Turbulenzgrößen berechnet werden

$$\tau_{turb} = c^* \cdot \frac{k}{\epsilon} \quad \text{mit} \quad c^* = 0.142. \quad (5.29)$$

¹²vgl. Abschnitt 6.5

Der in Gleichung (5.27) definierte Faktor f regelt den Übergang von der Vormisch- zur Diffusionsverbrennung

$$f = \frac{1 - e^{-\chi}}{1 - e^{-1}} \quad \chi \in [0, 1]. \quad (5.30)$$

Der Parameter χ beschreibt den Reaktionsfortschritt und entspricht dem Massenanteil der bereits gebildeten Produkte an der Gesamtmasse aller reaktiven Spezies:

$$\chi = \frac{Y_{\text{CO}_2} + Y_{\text{H}_2\text{O}} + Y_{\text{CO}} + Y_{\text{H}_2}}{1 - Y_{\text{N}_2}} \quad (5.31)$$

Somit entspricht die charakteristische Zeitskala τ_c bei Brennbeginn der laminaren Zeitskala, da noch keine Produkte existieren ($f(\chi = 0) = 0$) (\rightarrow Vormischverbrennung). Mit fortschreitender Verbrennung wachsen χ sowie f an und die turbulente Zeitskala gewinnt an Relevanz (\rightarrow Diffusionsverbrennung). Zur Berechnung der Zeitskalen τ_{chem} und τ_{turb} über die Gleichungen (5.28) und (5.29) muss in der Regel der Vorfaktor A angepasst werden [126]. Das Mixing-Timescale-Modell ist nach erfolgreicher Kalibrierung für die Abbildung der Diffusionsverbrennung gut geeignet.

Das 7-Spezies-PDF-Timescale Modell stellt einen Kompromiss zwischen dem Mixing-Timescale und dem PDF-Timescale Modell bzgl. Modellierungstiefe und numerischem Aufwand dar. Beim PDF-Timescale Modell nach [111, 112] werden die mittleren Gleichgewichtsmassenbrüche der Spezies $\tilde{Y}_i^{(eq)}$ mit Hilfe laminarer, stationärer 1D-Flamelets berechnet. Die Mittelung der Flamelet-Lösungen erfolgt über einen presumed-PDF Ansatz. Demgegenüber bestimmt das 7-Spezies-PDF-Timescale Modell die Gleichgewichtsmassenbrüche $Y_i^{(eq)}(Z)$ im Mischungsbruchraum auf Basis unendlich schneller Chemie. Die Berechnung des mittleren Referenzzustands $\tilde{Y}_i^{(eq)}$ erfolgt mittels einer β -PDF P_Z :

$$\tilde{Y}_i^{(eq)} = \int_0^1 Y_i^{(eq)}(Z) P_Z dZ \quad (5.32)$$

Bei der turbulenten Verbrennung ist somit die Abbildung der turbulenten Schwankungen implizit durch die Varianz der β -PDF gegeben. Im Gegensatz zum Mixing-Timescale Modell ist die explizite Berechnung einer turbulenten Zeitskala τ_{turb} demnach nicht mehr notwendig. Damit lautet der Ensemble-gemittelte chemische Sepziesquellterm

$$\tilde{\rho}_i^c = \bar{\rho} \left(\frac{d\tilde{Y}_i}{dt} \right)^c = -\bar{\rho} \frac{\tilde{Y}_i - \tilde{Y}_i^{(eq)}}{\tau_{chem}}, \quad (5.33)$$

wobei die chemische Zeitskala τ_{chem} weiterhin mit Hilfe des Arrhenius-Ansatzes aus Gleichung (5.28) bestimmt wird. Im Vergleich zum Mixing-Timescale Modell zeichnet sich das 7-Spezies-PDF-Timescale Modell durch eine erhöhte Modellierungstiefe bei vergleichbarem numerischen Aufwand aus. Detaillierte Reaktionskinetik und Streckungseffekte werden aufgrund der Annahme unendlich schneller Chemie nicht berücksichtigt. Für die korrekte Abbildung der Vormischverbrennung wird die chemische Zeitskala durch den Vorfaktor A motor- bzw. betriebspunktspezifisch angepasst [127]. Aufgrund des relativ einfachen Modellkonzepts können Modellerweiterungen verhältnismäßig einfach vorgenommen werden. Bei der Daimler AG ist dieses Modell in einer erweiterten Form seit mehreren Jahren erfolgreich im Einsatz und dient deshalb in Kombination mit dem PDF-CO-Zündmodell als Vergleichsbasis. Alle Modifikationen im Rahmen dieser Arbeit werden in Kapitel 6.5 beschrieben.

5.3 Schadstoffe

In diesem Abschnitt werden kurz die Herausforderungen bei der Modellierung der Schadstoffe Stickoxid und Ruß genannt sowie die verwendeten Modelle und deren Annahmen beschrieben. Da integrale Schadstoffwerte bei der Brennverfahrensentwicklung von großem Interesse sind, werden diese bei der Validierung der gesamten Modellkette ausgewertet und Messwerten gegenübergestellt.

5.3.1 Stickoxidmodellierung

Bei der dieselmotorischen Verbrennung mit reiner Luft überschreiten aufgrund des hohen Verdichtungsverhältnisses die Gemischtemperaturen nahe der stöchiometrischen Zonen 2000 K [39]. Bei diesen Temperaturen werden die starken Dreifachbindungen von Stickoxidmolekülen aufgebrochen und Stickoxide können entstehen¹³. Durch gezielte Hinzunahme von Restgas und damit Reduktion der Sauerstoffkonzentration im Brennraum werden die Temperaturen abgesenkt. In stöchiometrischen Bereichen sind diese in der Regel weiterhin kurzzeitig oberhalb 2000 K. Die verhältnismäßig großen chemischen Zeitskalen der thermischen NO-Bildung erweisen sich hier als vorteilhaft. Ein schnelles Ausmagern des Gemischs reduziert die lokalen Temperaturen und die Reaktionen frieren ein. Demnach müssen neben den Reaktionsgeschwindigkeiten zwei wesentliche Aspekte für die Berechnung der thermischen NO-Bildung hinreichend genau bekannt sein: die lokalen Temperaturen und der Gemischzustand.

Detaillierte Mechanismen, die sämtliche Bildungs- und Reduktionspfade der Stickoxide beinhalten, sind bspw. in [123, 11] beschrieben. Diese sind in der Lage die chemischen Prozesse und insbesondere die chemischen Zeitskalen abzubilden. Aufgrund der hohen Speziesanzahl ist eine Verwendung für 3D-CFD-Simulationen aus Rechenzeitgründen nicht praktikabel. Flamelet-Konzepte, wie der RIF- oder der Multiple-RIF-Ansatz, eignen sich zwar prinzipiell, sind jedoch nur indirekt über die brennraumgemittelte skalare Dissipationsrate an die lokalen Gemischzustände gekoppelt. Eine Alternative wird in [89] in Form eines *Flamelet-Library-Ansatzes* vorgestellt und dessen erfolgreiche Anwendung auf motorische Fälle demonstriert. Die Reaktionsraten des thermischen NO sind hier in einer Bibliothek in Abhängigkeit von Flamelet-Parametern abgespeichert. Die Kopplung erfolgt über die lokalen Größen: Druck, Oxidortemperatur, Restgasrate, Mischungsbruch und dessen Varianz sowie der skalaren Dissipationsrate.

In der vorliegenden Arbeit orientiert sich die Berechnung der Reaktionsraten des thermischen NO zunächst an der Modellierung von [126]. Diese wird unter der Annahme von Quasistationarität für den molekularen Stickstoff N sowie der Annahme partiellen Gleichgewichts für die Radikale O, H und OH (siehe [142]) entsprechend [45] bestimmt. Des Weiteren benötigen die Reaktionen (3.5) bis (3.7) den reaktionskinetischen Konstantensatz für die Arrhenius-Gleichungen der jeweiligen Hin- und Rückreaktionen. In [126] zeigt die Gegenüberstellung der NO-Bildungsraten sowie der Gleichgewichtswerte eines detaillierten Mechanismus mit den Rechenergebnissen unter Verwendung des *GRI-MECH 3.0*-Konstantensatzes aus [123] die beste Übereinstimmung. Unabhängig vom gewählten Ansatz für die Bildungs- und Reduktionsreaktionen der Stickoxide werden in kommerziellen CFD-Codes die Reaktionsgeschwindigkeiten in der Regel auf Basis von Ensemble-gemittelten Temperaturen bestimmt. Es ist davon auszugehen, dass für 3D-CFD-Simulationen der dieselmotorischen Verbrennung bei industriellen Fragestellungen die räumliche

¹³vgl. Kapitel 3.4.1 (A)

Diskretisierung nicht die notwendige Aufl6sung besitzt, um die gro6en Temperaturgradienten in der Reaktionszone abzubilden. Die starke Temperaturabh6ngigkeit der Reaktionsgeschwindigkeiten fordert jedoch bei der thermischen NO-Bildung eine m6glichst pr6zise Modellierung. Mittlere Temperaturen als wesentliche Eingangsgr66e in ein Stickoxid-Modell stellen demnach eine unzul6ssige Vereinfachung dar. Insbesondere bei der Simulation von Hoch-AGR-Brennverfahren wird dieser Modellierungsfehler aufgrund der global abgesenkten Prozesstemperaturen drastisch sichtbar. Dies begr6ndet die Notwendigkeit eines Ansatzes einer Temperaturverteilung innerhalb einer CFD-Zelle f6r das Stickoxid-Modell, welcher in Abschnitt 6.7 vorgestellt wird.

5.3.2 Ru6modellierung

Die Ru6bildung ist 6hnlich der Stickoxid-Bildung ein reaktionskinetisch kontrollierter Prozess. Bei der Modellierung k6nnen ph6nomenologische [93, 155] und detaillierte Ans6tze [10] differenziert werden. Letztere lassen sich entsprechend dem Detaillierungsgrad weiter unterteilen. Ph6nomenologische Ru6modelle bilden die physikalischen und chemischen Prozesse nur sehr eingeschr6nkt ab und m6ssen dadurch problemspezifisch angepasst werden. Sie sind ausschlie6lich f6r Trendaussagen einsetzbar und finden deshalb im Rahmen dieser Arbeit keine Anwendung.

Bei der detaillierten Ru6modellierung wird das Ziel verfolgt, die Teilprozesse der Ru6bildung und -oxidation physikalisch und chemisch m6glichst exakt abzubilden. Eine 6bersicht g6ngiger Ans6tze zur quantitativen Beschreibung der Teilprozesse ist in [10] aufgef6hrt. In der Praxis erfolgt die Simulation der Ru6emissionen in der Regel 6ber eine 2-Schritt-N6herung: Im ersten Schritt werden die Gasphasenspezies (W6rmefreisetzung) und ru6relevante Zwischenprodukte 6ber einen detaillierten Gasphasenmechanismus quantifiziert. Diese Spezies dienen als Randbedingungen f6r den zweiten Schritt, bei dem die eigentliche Ru6berechnung erfolgt. Demnach stellt der Ru6mechanismus eine Art Erweiterung des Gasphasenmechanismus dar. Die resultierende Ru6menge ist sehr sensitiv gegen6ber den chemischen Prozessen in der reinen Gasphase. Daher setzt eine quantitative Berechnung der Ru6emission bereits eine hohe Genauigkeit der Berechnung der Gasphase voraus [145, 90]. Einen rechenzeiteffizienten Vertreter stellt das *detaillierte Ru6quellterm Flamelet-Library Modell* dar, das zuerst in [79, 55, 24] vorgestellt wird. Es basiert auf einem Post-Flamelet-Konzept. In [89] wird der Einsatz f6r verschiedene motorische Fragestellungen unter Beweis gestellt.

Zur Anwendung des Modells f6r 3D-CFD-Simulation muss eine zus6tzliche Bilanzgleichung f6r den Favre-gemittelten Ru6massenbruch \tilde{Y}_s im physikalischen Raum gel6st werden:

$$\frac{\partial \tilde{\rho} \tilde{Y}_s}{\partial t} + \nabla \cdot (\tilde{\rho} \tilde{u} \tilde{Y}_s) = \nabla \cdot \left(\frac{\mu_t}{Pr_t^s} \nabla \tilde{Y}_s \right) + \rho_s \tilde{Q}_v^s \quad (5.34)$$

Nach [80] kann f6r die turbulente Prandtl-Zahl des Ru6es $Pr_t^s = 1.4$ verwendet werden. Der mittlere chemische Quellterm \tilde{Q}_v^s berechnet sich aus den Reaktionsraten der Einzelprozesse mit

$$\tilde{Q}_v^s = \underbrace{\tilde{Q}_{v,pb}^s}_{\text{Partikelbildung}} + \underbrace{\tilde{Q}_{v,ow}^s}_{\text{Oberfl6chenwachstum}} - \underbrace{\tilde{Q}_{v,ox}^s}_{\text{Oxidation}} - \underbrace{\tilde{Q}_{v,fr}^s}_{\text{Fragmentierung}} \quad (5.35)$$

nach [55, 24]. Zur Berechnung der mittleren chemischen Quellterme der Einzelprozesse werden der Mischungsbruch Z und die skalare Dissipationsrate χ_{sc} als statistisch unabh6ngig angenommen. F6r bekannte Wahrscheinlichkeitsdichteverteilungen f6r Z und χ_{sc} berechnet sich die

mittlere Reaktionsrate für die Partikelbildung mit

$$\tilde{Q}_{v,pb}^s = \frac{1}{\bar{\rho}} \int_0^\infty \int_0^1 \rho(Z, \chi_{sc}) \dot{Q}_{v,pb}^s P_Z P_{\chi_{sc}} dZ d\chi_{sc}. \quad (5.36)$$

Da das Oberflächenwachstum, die Oxidation und die Fragmentierung proportional zur Rußoberfläche bzw. dem Rußvolumenbruch X_s sind, werden ihre Reaktionsraten mit dem Rußvolumenbruch X_s skaliert

$$\tilde{Q}_{v,p}^s = \frac{1}{\bar{\rho}} \int_0^\infty \int_0^1 \rho(Z, \chi_{sc}) \tilde{Q}_v^s \left[\frac{\dot{Q}_v^s}{X_s} \right]_p P_Z P_{\chi_{sc}} dZ d\chi_{sc} \quad \text{mit } p = ow, ox, fr. \quad (5.37)$$

Die turbulente Gemischverteilung kann über eine β -Funktion angenähert werden. Zur Modellierung der PDF der skalaren Dissipationsrate $P_{\chi_{sc}}$ im physikalischen Raum wird typischerweise eine Lognormalverteilung angenommen [80]

$$P_{\chi_{sc}} = \frac{1}{\chi_{sc} \sigma_{\chi_{sc}} \sqrt{2\pi}} \exp \left[-\frac{(\ln \chi_{sc} - \mu_{\chi_{sc}})^2}{2\sigma_{\chi_{sc}}^2} \right], \quad (5.38)$$

mit den Momenten

$$\mu_{\chi_{sc}} = \ln \tilde{\chi}_{sc} - \frac{\sigma_{\chi_{sc}}^2}{2}, \quad \text{mit } \tilde{\chi}_{sc} = c_{\chi_{sc}} \frac{\tilde{\epsilon}}{\bar{k}} Z^{1/2} \quad (5.39)$$

$$\sigma_{\chi_{sc}}^2 = 0.5 \ln \left(Re_t^{1/2} \right), \quad \text{mit } Re_t^{1/2} = \frac{\bar{\rho} \bar{k}^2}{\mu \tilde{\epsilon}}. \quad (5.40)$$

Die laminaren Reaktionsraten $\dot{Q}_{v,p}^s$ aus den Gleichungen (5.36) und (5.37) werden mit einem Flamelet-Ansatz bestimmt. In Abhängigkeit der Flamelet-Parameter Druck, Oxidortemperatur, Restgasrate und skalare Dissipationsrate werden die stationären Flamelet-Gleichungen inklusive der Bilanzgleichungen für die Rußmomente im Mischungsbruchraum a-priori gelöst. Die Reaktionsraten der Einzelprozesse werden tabelliert. Zur Reduktion des Speichers und zu Zugriffs auf die Bibliothek werden analytische Funktionen (double- β -Funktionen) der Quellterme in Abhängigkeit der Flamelet-Parameter abgeleitet [55, 24]. Diese werden mit detaillierten Rechenergebnissen validiert. Zur Erstellung der in dieser Arbeit verwendeten Ruß-Quellterm-Bibliothek [80] wurde ein detaillierter n-Heptan-Gasphasen-Mechanismus verwendet, der mit dem Rußmechanismus aus [32, 79] ergänzt wurde. Der Bereich der Flamelet-Parameter sowie die Zusammensetzung der Flamelet-Ströme ist in Tab. 5.1 zusammengefasst.

Zusammensetzung			Flamelet-Parameter		
Kraftstoff	Vol. %	100 % N-C ₇ H ₁₆	Kraftstofftemperatur $T_f(Z=1)$	K	350
Luft	Vol. %	79 % N ₂ , 21 % O ₂	Oxidortemperatur $T_{ox}(Z=0)$	K	250 - 1600
Abgas	Vol. %	12.4 % CO ₂ , 14.2 % H ₂ O, 73.4 % N ₂	Druck p	bar	1 - 250
			Skalare Dissipationsrate χ_{sc}	s ⁻¹	0.01 - $\chi_{sc,L}$
			Abgasanteil ξ_{egr}	%	0 - 50

Tabelle 5.1: *Flamelet-Parameterbereich für Flamelet-Library Rußmodell ($\chi_{sc,L}$ entspricht der skalaren Dissipationsrate, ab der Flammenlöschung auftritt) [90].*

6 Modellierung der Selbstzündung und Verbrennung zur 3D-CFD-Simulation basierend auf detaillierter Chemie

Für moderne Dieselmotorenverfahren mit hohen Restgasraten spielt der chemische Zündverzug eine wichtige Rolle. Die Vorhersagefähigkeit eines Modells zur Berechnung des Zündverzugs ist nur bei einer allgemeingültigen Formulierung unter Berücksichtigung der wesentlichen Einflussparameter gewährleistet. Diese sind bei der dieselmotorischen Verbrennung: Druck, Temperatur, Luft-Kraftstoffverhältnis, Restgaskonzentration. Bei der 3D-CFD-Simulation der Selbstzündung und Verbrennung kommt hinzu, dass das Luft-Kraftstoffverhältnis und die Temperatur aufgrund der turbulenten Austauschprozesse lokal stark variieren. Diese Mischungsvorgänge haben direkten Einfluss auf die chemischen Prozesse und müssen daher Eingang in das Modell finden. Die größte Herausforderung besteht darin, unter diesen Randbedingungen realistische chemische Zeitskalen für die Selbstzündung und die darauffolgende Verbrennung vorzugeben.

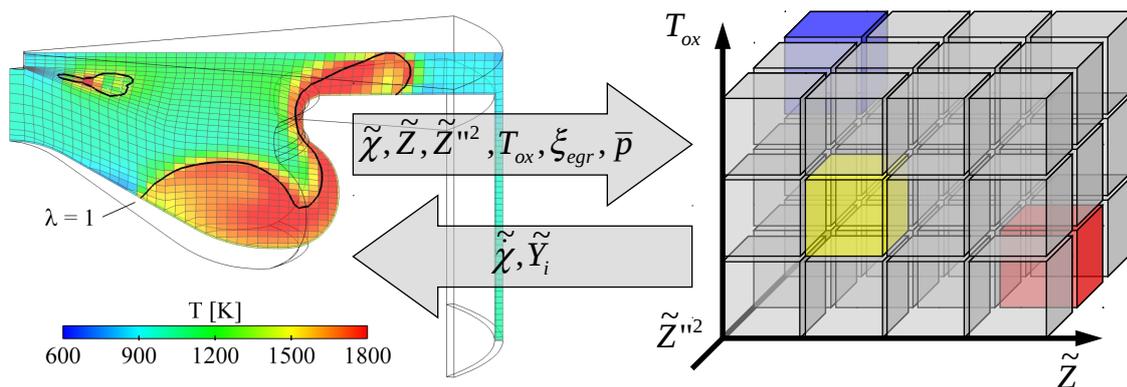
Ein detaillierter Reaktionsmechanismus liefert unter der Voraussetzung, dass er hinreichend genau ist, die gewünschten Informationen über die globale Reaktionsgeschwindigkeit. Folglich lassen sich daraus chemische Zeitskalen ableiten. Modelle, die direkt den Reaktionsmechanismus beinhalten und die Quellterme der einzelnen Spezies sowie deren Transport lösen, werden meist auf sehr groben Rechengittern verwendet, da der Rechenaufwand für die Lösung der Spezieserhaltung enorm ist [19, 63]. Selten wird erwähnt, dass damit einerseits die turbulenten Zeit- und Längenskalen im Düsenbereich nicht korrekt aufgelöst und andererseits die Gradienten der Skalare sehr grob abgebildet werden, was unmittelbar eine negative Rückwirkung auf die Gemischbildung und Verbrennung hat [83]. Im Folgenden wird ein Ansatz vorgestellt, der detaillierte Reaktionskinetik mit turbulenten Mischungsvorgängen kombiniert und auf unveränderter Netztopologie für industrielle Fragestellungen annehmbare Rechenzeiten erzielt.

6.1 Modellkonzept

Übergeordnetes Ziel des Modellkonzepts ist die sukzessive Verbesserung der Teilmodelle für die Selbstzündung, Vormisch- und Diffusionsverbrennung in der gegebenen Simulationsumgebung. Dazu werden die oben identifizierten Einflussgrößen Druck, Temperatur, Restgasrate, Luft-Kraftstoffverhältnis und dessen Varianz lokal ausgewertet und als Randbedingung zur Berechnung der mittleren chemischen Speziesquellterme verwendet [146]. Eine zellbasierte Quelltermberechnung aller Spezies mit Hilfe eines detaillierten Reaktionsmechanismus stellt aus Rechenzeitgründen keine Option dar, weshalb eine Fortschrittsvariable eingeführt wird. Unter der Voraussetzung, dass die Lewis-Zahl nahe eins ist, die Mach-Zahl klein und der lokale Zustand als adiabat betrachtet werden kann, beschreibt eine Reaktionsfortschrittsvariable vollständig den thermochemischen Systemzustand [29]. Diese Variable stellt den Bezug zur Reaktionskinetik her und ist zugleich Führungsgröße für die lokal stattfindenden chemischen Prozesse. Sie bestimmt nicht nur die chemische Zeitskala und somit die Reaktionsgeschwindigkeit, sondern zeigt durch ihre Normierung direkt den Reaktionsfortschritt an und verleiht dem Fortschrittsvariablen-Modell seinen Namen. Das Modellkonzept ist in Abb. 6.1 illustriert.

In der vorliegenden Modellumgebung erfolgt die Massen- und Energieerhaltung im CFD-Code durch Bilanzierung der sieben Hauptspezies (Kraftstoff, O_2 , N_2 , CO_2 , H_2O , CO und H_2) [126]. Die Integration des Fortschrittsvariablen-Modells zur Berechnung der Selbstzündung und Vormischverbrennung erfordert daher die Bereitstellung der entsprechenden mittleren chemischen Quellterme. Während der Diffusionsverbrennung werden die Quellterme weiterhin mit dem 7-Spezies-PDF-Timescale-Modell aus [127] berechnet. Die Kombination beider Modelle erfordert eine Erweiterung des 7-Spezies-PDF-Timescale-Modells sowie ein Umschaltkonzept, welche in Abschnitt 6.5 näher erläutert werden. Grundsätzlich lässt sich das Fortschrittsvariablen-Modell in drei Bereiche gliedern:

1. Tabellierung des thermochemischen Zustands und der Reaktionsgeschwindigkeit: Homogene-Reaktor-Rechnungen mit detailliertem n-Heptan Mechanismus aus [86], Definition der Fortschrittsvariable und Tabellierung der Ergebnisse.
2. Schnittstelle CFD-Code mit Tabelle: Zugriff auf Quellterme der Reaktionsfortschrittsvariable und Spezies in der Tabelle, Berechnung der Projektionsoperatoren.
3. CFD-Code: Transport der Fortschrittsvariable und Spezies, Einkopplung der chemischen Quellterme und Projektionsterme, Kopplung an andere Teilmodelle.



CFD-Code:

- Löst Erhaltungsgleichungen für Masse, Energie und Skalare
- benötigt chemische Quellterme zur Berechnung der Selbstzündung und Verbrennung

Homogene-Reaktor-Rechnungen:

- liefern chemische Quellterme für Fortschrittsvariable und Spezies in Abhängigkeit der thermodynamischen Randbedingungen

Abbildung 6.1: Links ist beispielhaft die Schnittebene in der Strahlachse einer 3D-CFD-Simulation auf einem Sektornetz gegen Ende der Einspritzung dargestellt. Die Ebene ist mit der Temperatur eingefärbt, wobei zur Anschauung zusätzlich eine schwarze Konturlinie für $\lambda = 1$ eingefügt wurde. Die räumliche Diskretisierung (Netz) ist ebenfalls zu erkennen. Rechts sind die tabellierten Rechnungen der Homogenen Reaktoren für unterschiedliche Anfangsbedingungen symbolisiert. Für jede CFD-Zelle werden in Abhängigkeit der Parameter $\tilde{\chi}$, \tilde{Z} , \tilde{Z}''^2 , T_{ox} , ξ_{egr} , \bar{p} der mittlere chemische Quellterm für die Reaktionsfortschrittsvariable $\tilde{\chi}^c$ und die sieben Spezies \tilde{Y}_i mit Hilfe der Tabelle interpoliert.

Die Formulierung des Modells ist möglichst allgemein gehalten. Die Wahl des detaillierten Reaktionsmechanismus schränkt die Allgemeingültigkeit jedoch ein. In [86] wird anhand der Gegenüberstellung der berechneten und gemessenen Zündverzugszeiten gezeigt, dass der darin vorgestellte n-Heptan Reaktionsmechanismus zur Berechnung der dieselmotorischen Selbstzündung gut geeignet ist. Prinzipiell ist die Tabellierung der Ergebnisse von Homogene-Reaktor-Rechnungen eines Reaktionsmechanismus zur Berechnung der otto- oder gasmotorischen Selbstzündung und Verbrennung in gleicher Weise möglich. Ändert sich das Verbrennungsregime (z. B. Flammfrontausbreitung), müssen bei diesen Brennverfahren die Annahmen überdacht und gegebenenfalls die Schnittstelle zum CFD-Code modifiziert werden. Die Identifikation der benötigten Anpassungen ist nicht Gegenstand dieser Arbeit. Im Folgenden werden die Herausforderungen des o. g. Modellkonzepts für die dieselmotorische Verbrennung erläutert.

6.2 Homogene-Reaktor-Rechnungen (Reduziertes Modell)

6.2.1 Allgemeiner Ansatz

Die zeitliche Änderung $d\Psi_i/dt$ einer Größe Ψ_i an einem beliebigen Ort im Brennraum kann als Summe von Änderungen aufgrund von chemischen Reaktionen und Änderungen aufgrund von physikalischen Vorgängen (z. B. Diffusion und Konvektion) geschrieben werden [16]

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left(\frac{\partial \Psi}{\partial t} \right)_{chem} + \left(\frac{\partial \Psi}{\partial t} \right)_{phys}. \quad (6.1)$$

Dabei symbolisiert Ψ den thermochemischen Zustandsvektor, der bspw. den Druck p , die spezifische Enthalpie h und die Massenbrüche der reagierenden Spezies Y_i (mit $i = 1, \dots, N_s$) beinhaltet. Demnach ist

$$\Psi = (p, h, Y_1, \dots, Y_{N_s}). \quad (6.2)$$

Beide Terme aus Gleichung (6.1) hängen stark und meist nichtlinear vom Zustandsvektor Ψ selbst ab. Zusammen mit den Erhaltungsgleichungen für Spezies, Energie und Impuls sowie den Kontinuitätsgleichungen entsteht ein System partieller Differentialgleichungen (DGS). Zur Vereinfachung des DGS wird zunächst ein homogener Reaktor bei konstanter Enthalpie und konstantem Druck betrachtet [48]. Damit lässt sich der volle Zustandsvektor lösen und es ergibt sich für die zeitliche Änderung

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left(\frac{\partial \Psi}{\partial t} \right)_{chem}. \quad (6.3)$$

Dies stellt ein System gewöhnlicher Differentialgleichungen dar, die verhältnismäßig einfach numerisch gelöst werden können und für gegebene Randbedingungen eine Auswertung der Reaktionsraten der Speziesmassenbrüche sowie die Temperatur ermöglichen [77]. Des Weiteren bildet diese Vereinfachung die Grundlage für die Einführung einer Reaktionsfortschrittsvariable und damit für das gesamte Modellkonzept, da die zeitliche Dynamik der chemischen Prozesse zunächst unabhängig von den physikalischen Vorgängen berechnet werden kann [146].

6.2.2 Reaktionstrajektorien

In einem homogenen, isenthalpen, isobaren, chemisch reagierendem System sind die Reaktionsraten der Speziesmassenbrüche und die Änderung der Temperatur mit

$$\left(\frac{\partial Y_i}{\partial t}\right)_{chem} = \omega_i(Y_1, \dots, Y_{N_s}, T, p) M_i/\rho \quad (6.4)$$

$$\left(\frac{\partial T}{\partial t}\right)_{chem} = -\sum_{i=1}^{N_s} h_i Y_i/c_p \quad (6.5)$$

gegeben [76]. Wobei ω_i hier den chemischen Quellterm auf molarer Basis, M_i die molare Masse und h_i die spezifische Enthalpie der Spezies i darstellen, während ρ die Dichte und c_p die spezifische Wärmekapazität bei konstantem Druck der Mischung symbolisieren. Der chemische Quellterm ω_i hängt typischerweise stark nicht-linear von der Temperatur T , dem Druck p und der Gaszusammensetzung, also den Spezies Y_i , ab [78]. Für einen späteren Zugriff des CFD-Codes auf die chemischen Quellterme wird zur Tabellierung ein isenthalpes, isobares, räumlich homogenes System gelöst:

$$dh/dt = 0 \quad (6.6)$$

$$dp/dt = 0 \quad (6.7)$$

$$dY_i/dt = \Omega(h, p, Y_i) \quad (6.8)$$

Dabei ist

$$\Omega = \omega_i(Y_i, T, p) M_i/\rho \quad (6.9)$$

der chemische Quellterm der Speziesmassenbrüche. Es handelt sich hierbei um ein sogenanntes *autonomes DGS*, da keine explizite Zeitabhängigkeit der Terme auf der rechten Seite besteht. Die Lösung der Gleichungen (6.6) bis (6.8) für eine Anfangsbedingung stellt eine *Reaktionstrajektorie* dar, die durch die Funktionen $h(t), p(t), Y_i(t)$ repräsentiert wird [78]. Die Verwendung des Zustandsvektors Ψ aus Gleichung (6.2) ermöglicht eine kompaktere Schreibweise der obigen Gleichungen:

$$d\Psi/dt = f(\Psi; \Psi^{(0)}) \quad \text{mit} \quad \Psi(t=0) = \Psi^{(0)}. \quad (6.10)$$

Wobei der Anfangszustand mit $\Psi^{(0)} = (h^{(0)}, p^{(0)}, Y_i^{(0)})$ eingeführt wurde, um zu zeigen, dass die Lösung des DGS von den Anfangsbedingungen abhängt. Eine *Trajektorie* kann als eine Kurve im Zustandsraum angesehen werden, die beim Anfangszustand $\Psi^{(0)}$ startet und im chemischen Gleichgewicht $\Psi^{(eq)}$ endet. Jeder Anfangsbedingung lässt sich eine Trajektorie zuordnen, die bei Variation einer Anfangsbedingung sogenannte *Mannigfaltigkeiten* aufspannen [78, 77]. Bei der dieselmotorischen Verbrennung durchlaufen während eines Arbeitsspiels die thermodynamischen Größen ein weites Spektrum, weshalb eine große Anzahl an Trajektorien notwendig ist, um den relevanten Zustandsraum abzudecken. Bspw. kann der Druck ausgehend von wenigen bar durch Kompression und Verbrennung auf über 200 bar ansteigen, was direkt die Gemischtemperatur und somit die Enthalpie erhöht. Des Weiteren ist die lokale Gemischzusammensetzung bei DI-Dieselmotoren aufgrund der Einspritzung sehr inhomogen und weist während der Zündphase äußerst magere ($\lambda \gg 1$) wie auch sehr fette ($\lambda < 0.5$) Bereiche auf.

6.2.3 Definition der Fortschrittsvariable

Im Folgenden werden die notwendigen Kriterien für eine Fortschrittsvariable beschrieben sowie ausführlich die Motivation für die verwendete Definition diskutiert. Die Fortschrittsvariable gilt als Maß dafür, wie weit eine Reaktion fortgeschritten ist, d. h. in wie weit chemische Reaktionen bspw. ein Luft-Kraftstoff-Gemisch (ggf. mit Restgas) in Abgas umgewandelt haben.

Für gegebene Anfangsbedingungen kann der gesamte Zustand eines chemisch reagierenden Systems auf einer Reaktionstrajektorie mit einer einzigen Variablen spezifiziert werden, die letztlich die Position auf der Trajektorie beschreibt [78]. So lassen sich die Temperatur sowie die Speziesmassenbrüche als Funktionen einer Variable in Abhängigkeit der Reaktionsfortschrittsvariable χ ausdrücken[13]:

$$\Psi = \Psi(t) \quad \rightarrow \quad \Psi = \Psi(\chi(t)) \quad (6.11)$$

Mit der zeitlichen Ableitung der Fortschrittsvariable kann die Reaktionsgeschwindigkeit ermittelt werden. Die Variable muss folgende Bedingungen erfüllen, damit stets eindeutig auf den Reaktionsfortschritt geschlossen werden kann:

- strenge Monotonie über der Zeit, d. h. $d\chi/dt > 0$.
- stets positiv und normierbar: $\chi = 0$ für eine Luft-Kraftstoff-Restgas-Mischung im Ausgangszustand und $\chi = 1$ für Abgas im chemischen Gleichgewicht.
- sensibel bei wichtigen Phasen der chemischen Reaktionen, wie z. B. der Selbstzündung. Dabei sollte die Variable hohe Reaktionsraten aufweisen, wenn wichtige Phasen der chemischen Reaktionen durchlaufen werden.

Viele Größen, die vordergründig als Fortschrittsvariable wirken, erfüllen nicht alle der o. g. Bedingungen. Bspw. sind bei der Verbrennung von Kohlenwasserstoffen während des gesamten Reaktionsverlaufs die Temperatur oder der Massenbruch von CO_2 nicht zwangsweise monoton steigend. Zumindest in fetten Bereichen können beide Größen ein lokales Maximum aufweisen, bevor die Reaktion das chemische Gleichgewicht erreicht [74]. Eine thermodynamische Variable, die für adiabate Systeme entlang einer Reaktionstrajektorie garantiert monoton steigend ist, ist die Entropie des Gemischs. Während der Selbstzündungsphase zeigt die Entropie jedoch kaum eine Veränderung. Die Abbildung leicht exothermer Reaktionen während dieser Phase wäre aufgrund der sehr kleinen Reaktionsraten der Fortschrittsvariable numerisch ungünstig. Erst während der letzten Phase der Verbrennung, wo typischerweise stark exotherme Reaktionen stattfinden, zeigt die Entropie eine wesentliche Zunahme. Die Auswirkungen auf die Entropie einer bei modernen Dieselmotoren üblichen Mehrfacheinspritzung des Kraftstoffs und die dadurch bedingte Mehrfachzündung ist nicht eindeutig, was diese Größe als Reaktionsfortschrittsvariable für diesen Anwendungsfall ausschließt.

Um die Probleme dieser „traditionellen“ Größen zu umgehen, wird eine neue Variable eingeführt: die Bogenlänge einer Reaktionstrajektorie $L(t)$ [146, 48]. Sie wird definiert als

$$L(t) \equiv \int_0^t \sqrt{\sum_{i=1}^{N_s} \dot{Y}_i^2} dt', \quad (6.12)$$

wobei für das chemische Gleichgewicht $L(t \rightarrow \infty)$ gilt. Die Grenzen $L(t = 0)$ und $L(t \rightarrow \infty)$ ermöglichen eine Normierung zwischen 0 und 1. Da die Speziesraten zum chemischen Gleichgewicht hin kaum größer Null sind, wird die Reaktionszeit $t \rightarrow \infty$ über eine vordefinierte Grenze

ϵ bestimmt, nach der die Summe der Raten sehr gering ist. Die so gewählte Reaktionszeit $t^{(eq)}$ kommt dem chemischen Gleichgewicht möglichst nahe. Mit der Bogenlänge als Fortschrittsvariable besteht jedoch weiterhin das Problem, dass die Bedingung der Sensitivität bei wichtigen Phasen der chemischen Reaktionen nicht notwendigerweise erfüllt ist. So definiert, hängt der Reaktionsfortschritt stark von den Hauptspezies ab. Diese besitzen einen großen Massenanteil und liefern deshalb auch große Beträge bei der zeitlichen Änderung ihrer Massenbrüche. Spezies wie z. B. die wichtigen Radikale OH, H und O haben nur einen schwachen Einfluss auf die Bogenlänge aufgrund ihrer geringen Mengen und der daraus resultierenden kleinen Reaktionsraten im Vergleich zu den Hauptspezies.

Durch die Einführung eines positiven Gewichtungsfaktors $1/w_i$ für jede Spezies bei der Definition der Fortschrittsvariable kann die Sensitivität gezielt modifiziert werden [48]. Dabei werden die Gewichtungsfaktoren w_i so gewählt, dass alle wichtigen Spezies einen nennenswerten Betrag zum Fortschritt der Reaktion liefern. Diese Erweiterung führt zu einer Definition von $\chi(t)$, die alle obigen Forderungen erfüllt. Sie lautet nun mit den Gewichtungsfaktoren w_i

$$\chi(t) \equiv \frac{\int_0^t \sqrt{\sum_{i=1}^{N_s} \left(\frac{\dot{Y}_i}{w_i}\right)^2} dt'}{\int_0^\infty \sqrt{\sum_{i=1}^{N_s} \left(\frac{\dot{Y}_i}{w_i}\right)^2} dt'}. \quad (6.13)$$

Die so definierte Fortschrittsvariable χ kann verhältnismäßig simpel von verfügbaren Reaktionstrajektorien abgeleitet werden, sofern die Massenbrüche aller Spezies über der Zeit vorliegen. Es lässt sich nun die Rate der Fortschrittsvariable als Funktion der Fortschrittsvariable selbst für beliebige Anfangsbedingungen (Mischungsbrüche $Z^{(0)}$, Drücke $p^{(0)}$, spezifische Enthalpien $h^{(0)}$, Restgasanteile $\xi_{egr}^{(0)}$) berechnen:

$$\dot{\chi}(t) = f(\chi; Z^{(0)}, h^{(0)}, \xi_{egr}^{(0)}, p^{(0)}). \quad (6.14)$$

Die Funktion wird a priori für dieselmotorisch-relevante Anfangsbedingungen numerisch ausgewertet, indem die Gleichungen (6.6) bis (6.8) für entsprechende homogene Reaktoren gelöst werden. Die Massenbrüche $Y_i^{(0)}$ des Initialvektors werden dabei für einen bestimmten Kraftstoff (hier: n-Heptan) gemäß der spezifizierten Werte des Mischungsbruchs $Z^{(0)}$ und des Restgasanteils $\xi_{egr}^{(0)}$ vorgegeben. Die Anfangstemperatur $T^{(0)}$ wird über die spezifischen Enthalpien h_i und die Massenbrüche $Y_i^{(0)}$ bestimmt. Es gilt

$$h^{(0)} = \sum_{i=1}^{N_s} h_i(T^{(0)}) \cdot Y_i^{(0)}. \quad (6.15)$$

Demnach ist der Zustand vor der Reaktion vollständig bestimmt, wenn $Z^{(0)}$, $p^{(0)}$, $h^{(0)}$ und $\xi_{egr}^{(0)}$ gegeben sind. Entlang einer Trajektorie eines teilweise oder vollständig reagierten Gemischs ist über den Wert der Fortschrittsvariable zusammen mit $Z^{(0)}$, $p^{(0)}$, $h^{(0)}$ und $\xi_{egr}^{(0)}$ der Zustand eines homogenen Reaktors während der Reaktion eindeutig spezifiziert.

Für den späteren Zugriff auf die Ergebnisse der Homogene-Reaktor-Rechnungen ist es von Vorteil anstatt der spezifischen Enthalpie der Mischung $h^{(0)}$ die Temperatur des Oxidators $T_{ox}^{(0)}$

als Parameter zu verwenden. Bei gegebener Kraftstofftemperatur T_f^1 und damit spezifischen Enthalpie $h_f(T_f$ bspw. gleich 330 K) gilt der Zusammenhang

$$h^{(0)} = h_{ox}^{(0)} \cdot (1 - Z) + h_f \cdot Z. \quad (6.16)$$

Die spezifische Enthalpie des Oxidators ist dabei

$$h_{ox}^{(0)} = \sum_{i=1}^{N_s} h_i(T_{ox}^{(0)}) \cdot Y_{ox,i}^{(0)}, \quad (6.17)$$

wobei der Speziesmassenbruchvektor des Oxidators $Y_{ox}^{(0)}$ stets aus einer Mischung aus reiner, idealer Luft² Y^L und stöchiometrischem Abgas Y^A bestimmt wird:

$$Y_{ox,i}^{(0)} = Y_i^L \cdot (1 - \xi_{egr}^{(0)}) + Y_i^A \cdot \xi_{egr}^{(0)} \quad (6.18)$$

Somit lässt sich die Rate der Fortschrittsvariable entlang einer Trajektorie aus Gleichung (6.14) schreiben als

$$\dot{\chi}(t) = f(\chi; Z^{(0)}, T_{ox}^{(0)}, \xi_{egr}^{(0)}, p^{(0)}). \quad (6.19)$$

Abb. 6.2 illustriert den Verlauf einer Trajektorie im Y_{CH_2O} - Y_{CO_2} - Y_{O_2} -Raum ausgehend vom Anfangszustand ($\chi = 0$) bis zum Endzustand ($\chi = 1$).

¹ f steht für *fuel* engl. für Kraftstoff
²vgl. Definition in Kapitel 2.2.2

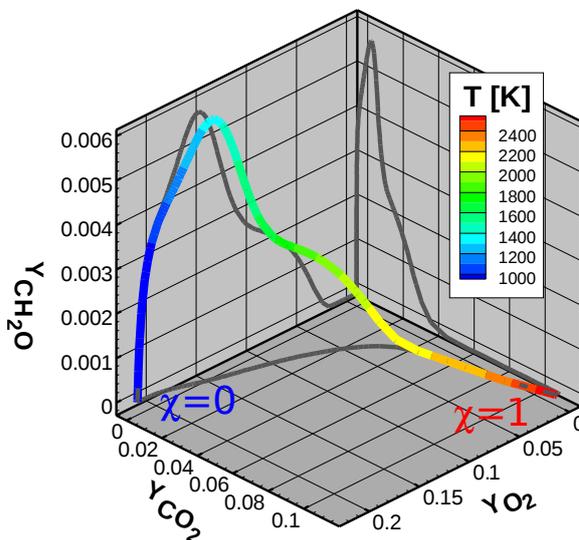


Abbildung 6.2: Reaktionstrajektorie im Y_{O_2} - Y_{CO_2} - Y_{CH_2O} -Raum für Mischungsbruch Z_{st} , $T_{ox} = 1000$ K, $\xi_{egr} = 0$ %, $p = 100$ bar. Die Trajektorie ist mit der Temperatur eingefärbt [146].

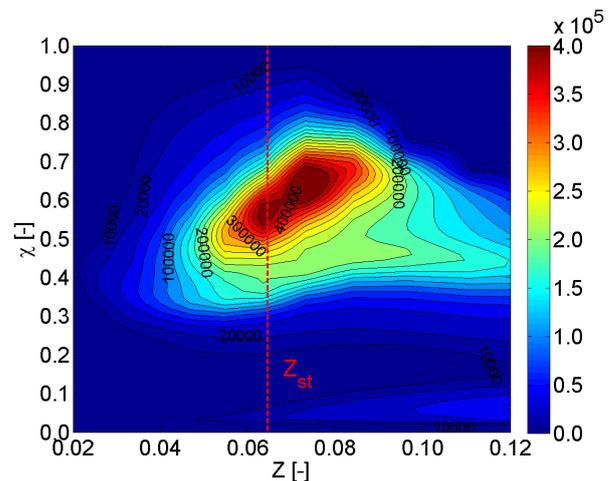


Abbildung 6.3: Reaktionsrate $\dot{\chi}$ über Fortschrittsvariablen χ und Mischungsbruch Z für $T_{ox} = 1000$ K, $\xi_{egr} = 0$ %, $p = 100$ bar [146].

6.2.4 Mittelung der Fortschrittsvariable

Der mit Gleichung (6.19) beschriebene funktionale Zusammenhang liefert in Abhängigkeit von χ , $Z^{(0)}$, $T_{ox}^{(0)}$, $\xi_{egr}^{(0)}$ und $p^{(0)}$ die Massenbrüche der Spezies Y_i und die Reaktionsrate der Fortschrittsvariable $\dot{\chi}$. Diese Formulierung behandelt nur Szenarien mit homogener Mischungsbruch- und Temperaturverteilung. Die Verwendung der RANS-Gleichungen zur Simulation innermotorischer Verbrennungsprozesse fordert implizit die turbulente Mittelung der Reaktionsrate der Fortschrittsvariable [146].

Die direkte Einspritzung des Kraftstoffs in den Brennraum induziert ein hochgradig turbulentes Gemischfeld, bei dem die Annahme einer homogenen Verteilung des Mischungsbruchs innerhalb einer CFD-Zelle nicht gilt. Die lokalen Inhomogenitäten und turbulenten Transportprozesse haben einen nicht vernachlässigbaren Einfluss auf die chemische Reaktionsrate und somit auf das Zündverhalten, die Verbrennung und letztlich auf die Schadstoffbildung [127]. Zur Berücksichtigung der kleinskaligen Fluktuationen im Mischungsbruchraum muss der oben beschriebene Ansatz erweitert werden. Sofern für den Mischungsbruch Z eine gewisse Wahrscheinlichkeitsverteilung P_Z vorliegt, soll nun der gesamte chemische Fortschritt über Z mit Hilfe der Mischungsbruch-PDF P_Z gemittelt werden. Wird von einer Korrelation $T(\chi; Z)$ ausgegangen, berücksichtigt diese Vorgehensweise implizit die Temperaturverteilung in Z [146]. Im Folgenden wird dies näher erläutert.

Um die Herleitung übersichtlicher zu gestalten (ohne die Allgemeingültigkeit zu verlieren), wird angenommen, dass der Mischungsbruch Z und die Fortschrittsvariable χ die einzigen unabhängigen Variablen sind und es wird auf die Notation mit $()^{(0)}$ verzichtet. Die zeitliche Änderung der Fortschrittsvariable $\dot{\chi} \equiv d\chi/dt$ ist dann bei Annahme von konstantem Druck, konstanter Oxidatortemperatur und konstantem Restgasanteil bekannt als Funktion f in Abhängigkeit von χ und Z

$$\dot{\chi} = f(\chi; Z). \quad (6.20)$$

Abb. 6.3 zeigt beispielhaft ein Kontur-Plot dieser Funktion im Mischungsbruch- und Fortschrittsvariablen-Raum. Das Maximum in der Nähe von $Z = 0.07$, $\chi = 0.6$ verdeutlicht den Bereich, wo die chemischen Reaktionen am schnellsten ablaufen, also die chemischen Zeitskalen am kleinsten sind. In Richtung sehr magerer und sehr fetter Bereiche nimmt die Reaktionsrate von χ ab. Das deckt sich mit der allgemeinen Vorstellung, dass chemische Prozesse in diesen Bereichen langsamer ablaufen. Im Gleichgewicht (entspricht $\chi = 1$) ist die chemische Rate gleich Null. Mit Gleichung (6.20) kann die mittlere Rate der Fortschrittsvariable als

$$\bar{\dot{\chi}} = \int_0^1 \int_0^1 f(\chi'; Z') P_{\chi, Z}(\chi', Z') d\chi' dZ' \quad (6.21)$$

geschrieben werden. $P_{\chi, Z}$ stellt dabei die gemeinsame Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (JPDF)³ [110] von χ und Z dar und $P_{\chi, Z}(\chi', Z')$ deren Wert bei der Fortschrittsvariable χ' und beim Mischungsbruch Z' . Die Definition der Fortschrittsvariable über die Bogenlänge erlaubt die Annahme statistischer Unabhängigkeit von χ und Z . Wäre die Fortschrittsvariable eine Spezies (z. B. CO_2), dann würde sie strikt mit dem Mischungsbruch Z korrelieren und die Annahme statistischer Unabhängigkeit wäre unzulässig. Abb. 6.4 und Abb. 6.5 zeigen jeweils den

³engl.: joint probability density function

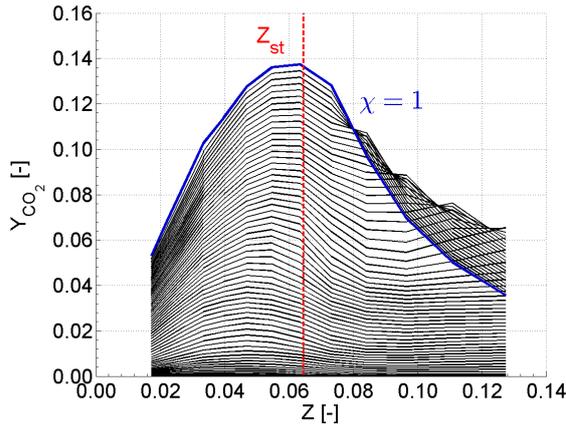


Abbildung 6.4: Y_{CO_2} im Mischungsbruchraum ausgehend von $\chi = 0$ bis $\chi = 1$.

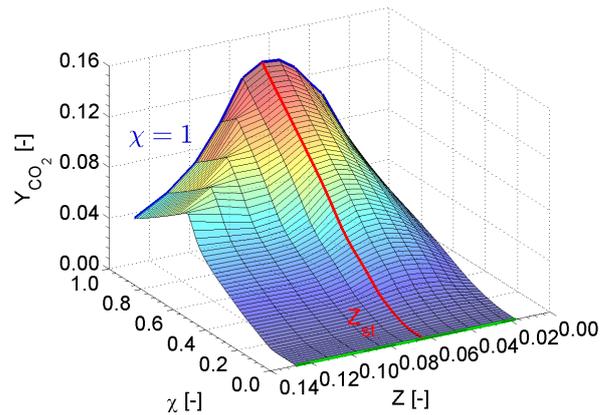


Abbildung 6.5: Y_{CO_2} im χ - Z -Raum als Fläche dargestellt.

Massenbruch von CO_2 im χ - Z -Raum und dessen Korrelation in Z über den Reaktionsverlauf hinweg. Die JPDF kann unter Annahme statistischer Unabhängigkeit von χ und Z als Produkt zweier PDFs P_χ und P_Z korrespondierend zu χ und Z ausgedrückt werden und es gilt

$$P_{\chi,Z} = P_\chi P_Z. \quad (6.22)$$

Des Weiteren erlaubt die Annahme bei einer δ -Verteilung⁴ im χ -Raum folgende Formulierung für die JPDF $P_{\chi,Z}$

$$P_{\chi,Z}(\chi', Z') = \delta(\chi' - \bar{\chi}) P_Z(Z'). \quad (6.23)$$

Für den Mittelwert von $\dot{\chi}$ gilt dann

$$\bar{\dot{\chi}} = \int_0^1 \int_0^1 f(\chi'; Z') \delta(\chi' - \bar{\chi}) P_Z(Z') d\chi' dZ' = \int_0^1 f(\bar{\chi}; Z') P_Z(Z') dZ'. \quad (6.24)$$

Dieser einfache Mittelungsansatz ist in Abb. 6.6 illustriert. Obwohl der Ansatz statistischer Unabhängigkeit als erste Näherung benutzt werden kann, ist diese Annahme nicht zwangsweise physikalisch korrekt. Typischerweise reagieren Mischungen in der Nähe der Stöchiometrie schneller als sehr mager oder sehr fette Mischungen [142], weshalb der chemische Fortschritt durchaus mit dem Mischungsbruch korreliert. Eine Folge dieser einfachen Mittelung der Reaktionsraten mit δ -Verteilung der Reaktionsfortschrittsvariable ist eine Überschätzung der Reaktionsgeschwindigkeiten in sehr mageren und sehr fetten Bereichen, da dieser Annahme eine unendlich schnelle Mischung im Mischungsbruchraum zugrunde liegt.

Einen alternativen Ansatz zur Mittelung der Reaktionsraten der Fortschrittsvariable stellt die sogenannte *isochrone Mittelung* bei *gleicher physikalischer Zeit* (anstatt bei gleichem Reaktionsfortschritt) dar [146, 48]. Somit werden die langsameren Reaktionsgeschwindigkeiten im mageren und fetten gegenüber dem stöchiometrischen Bereich implizit berücksichtigt. Diese Art der Mittelung setzt eine ideale Korrelation der JPDF zwischen χ und Z voraus und kann

⁴Die δ -Verteilung ist eine irreguläre Verteilung, das heißt, sie lässt sich nicht durch eine lokal integrierbare Funktion darstellen. Mehrdimensionale δ -Verteilungen lassen sich als Produkt von eindimensionalen δ -Verteilungen schreiben. Sie ist unendlich oft differenzierbar [67, 110].

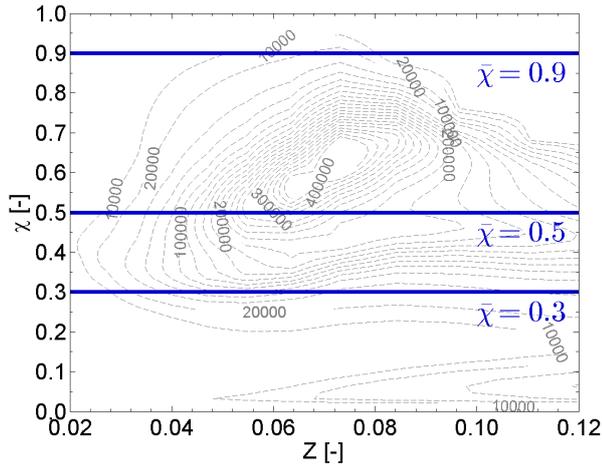


Abbildung 6.6: Mittelung der Reaktionsrate $\bar{\chi}$ über Z bei gleichem Reaktionsfortschritt [146].

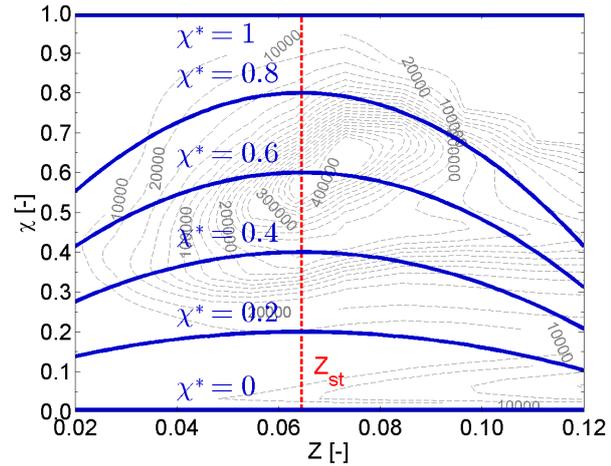


Abbildung 6.7: Skizze der Mittelung der Reaktionsrate $\bar{\chi}$ über Z bei gleicher physikalischer Zeit [146].

aus den Ergebnissen der Homogene-Reaktor-Rechnungen abgeleitet werden. Dazu wird der zeitartige Parameter π eingeführt und der davon abhängige Zusammenhang zwischen χ und Z lautet

$$\chi = f^*(Z; \pi). \quad (6.25)$$

Diese Funktion entspricht im Ausgangszustand für $t = 0$ und damit $\chi = 0$ der JPDF $P_{\chi, Z}$ aus Gleichung (6.23). Reagiert das System für verschiedene Mischungsbrüche ohne Spezies-transport zwischen den einzelnen Mischungsbruch-Klassen, kann dessen Entwicklung für $t > 0$ beobachtet werden. Die instantanen Werte der Fortschrittsvariable nehmen für verschiedene Mischungsbrüche Z mit unterschiedlichen Raten zu, da $\dot{\chi}$ mit Z variiert⁵. Der Prozess ist in Abb. 6.7 dargestellt und zeigt zudem qualitativ die zeitliche Entwicklung des Systems. Anschaulich gesprochen wird die Mittelung hier entlang durchgezogenen Linien durchgeführt, wobei diese im Mageren und Fetten langsamer ansteigen als im stöchiometrischen Bereich [146]. Dabei ist die Wahl des Parameters π beliebig. Hier wird für den Parameter π der zeitabhängige instantane Wert χ^* der Fortschrittsvariable bei $Z = Z_{st}$ eingeführt, womit sich Gleichung (6.25) zu

$$\chi = f^*(Z; \chi^*) \quad (6.26)$$

umschreiben lässt. Diese Beziehung enthält implizit die Zeitabhängigkeit über den Parameter χ^* . Die JPDF $P_{\chi, Z}$ lautet nun

$$P_{\chi, Z}(\chi', Z') = \delta(\chi' - f^*(Z'; \chi^*)) P_Z(Z'). \quad (6.27)$$

Mit dieser PDF ist der Mittelwert von χ

$$\bar{\chi} = \int_0^1 \int_0^1 \chi' \delta(\chi' - f^*(Z'; \chi^*)) P_Z(Z') d\chi' dZ' \quad (6.28)$$

⁵vgl. Gleichung (6.20)

und dessen mittlere Rate

$$\bar{\chi} = \int_0^1 \int_0^1 f(\chi'; Z') \delta(\chi' - f^*(Z'; \chi^*)) P_Z(Z') d\chi' dZ'. \quad (6.29)$$

Bei diesem Ansatz hängen sowohl $\bar{\chi}$ als auch $\bar{\dot{\chi}}$ von χ^* und P_Z ab. Wird für P_Z die β -Funktion zu Grunde gelegt, kann diese mit den im CFD-Code transportierten Favre-gemittelten Größen \tilde{Z} und $\widetilde{Z'^2}$ parametrisiert werden [146, 48]. Die δ -Verteilung gewährleistet dabei, dass der Integrand nur für Werte von $\chi' = \dot{\chi}(Z'; \chi^*)$ ausgewertet wird und die mittlere Rate als

$$\bar{\dot{\chi}} = \int_0^1 \dot{\chi}(Z'; \chi^*) \cdot P_Z(Z'; \tilde{Z}, \widetilde{Z'^2}) dZ' \quad (6.30)$$

geschrieben werden kann. Unter der Annahme, dass die Parameter Druck und Restgasanteil⁶ im Mischungsbruchraum konstant sind, entsprechen die instantanen Werte den Mittelwerten. Die Oxidatortemperatur T_{ox} (bei $Z = 0$) wird über die Favre-gemittelte spezifische Enthalpie \tilde{h} entsprechend Gleichung (6.16) bis Gleichung (6.18) bestimmt. Für die mittlere Rate der Fortschrittsvariable gilt mit dem Isochronen-Mittelungs-Ansatz schließlich

$$\tilde{\dot{\chi}} = f_t \left(\tilde{\chi}; \tilde{Z}, \widetilde{Z'^2}, T_{ox}, \xi_{egr}, \bar{p} \right). \quad (6.31)$$

Sowohl die Mittelung mit der δ -Verteilung als auch die zeitabhängige Mittelung werden unter der Annahme durchgeführt, dass konvektiver und diffusiver Speziestransport und Temperatur-austausch aufgrund der Gradienten im Mischungsbruchraum nicht explizit berücksichtigt werden müssen. Dabei wird bei der δ -Verteilung von einer unendlich schnellen Mischung und somit einer idealen Vormischflamme ausgegangen. Bei der zeitabhängigen Mittelung mit jeweils konstanter Mischungsbruchvarianz ergibt sich implizit mit Gleichung (5.17) und gegebener turbulenter kinetischer Energie \tilde{k} und Dissipation $\tilde{\epsilon}$ eine skalare Dissipationsrate. Es ist davon auszugehen, dass bei der dieselmotorischen Verbrennung typische Mischungsbruchvarianzen von 10^{-3} zu relevanten Gradienten für den Transport im Mischungsbruchraum führen würden. Als Folge können sich bspw. Reaktionen im stöchiometrischen Bereich längst im chemischen Gleichgewicht befinden, während die in sehr fetten und mageren Bereichen noch nahezu keinen Reaktionsfortschritt aufweisen. In Realität würden stöchiometrische Zonen im Gleichgewichtszustand mit hohen Temperaturen die Reaktionsraten im Mageren und Fetten drastisch erhöhen, was eine Zunahme der mittleren Reaktionsraten nach sich ziehen würde. Eine verlässliche Abschätzung des Fehlers auf den mittleren chemischen Zündverzug aufgrund der Vernachlässigung des Transports ist nicht möglich. Bei kleinen Mischungsbruchvarianzen sind die Gradienten im Mischungsbruchraum zwar groß, aber das relevante Integrationsintervall im Mischungsbruchraum sehr klein, weshalb von einem geringen Fehler auszugehen ist.

Dennoch ermöglicht obige Formulierung die Berücksichtigung einer inhomogenen Verteilung des Mischungsbruchs und aufgrund der idealen Korrelation auch die der Temperatur innerhalb einer CFD-Zelle. Durch die isochrone Mittelung der Reaktionsraten der Fortschrittsvariable wird der Einfluss der turbulenten Austauschprozesse auf die chemischen Reaktionen realisierbar. Somit sind die Reaktionsraten neben dem Druck, der Oxidatortemperatur, dem Mischungsbruch und dem Restgasanteil zusätzlich eine Funktion der Varianz des Mischungsbruchs.

⁶In dieser Arbeit wird der Restgasanteil konstant über den gesamten Brennraum angenommen.

6.3 Schnittstelle: CFD-Code / Homogene-Reaktor-Rechnungen

Im CFD-Code muss eine Schnittstelle erstellt werden, um auf die Ergebnisse der a priori durchgeführten Homogene-Reaktor-Rechnungen zugreifen zu können. Zur Schließung des Gleichungssystems im CFD-Code werden die zeitliche Änderung der Fortschrittsvariable aufgrund von chemischen Reaktionen sowie die Massenbrüche der Spezies über den Reaktionsverlauf hinweg benötigt. Diese müssen in geeigneter Form „abgelegt“ werden, so dass während der 3D-CFD-Simulation ein effizienter Zugriff möglich ist. In [29] werden unterschiedliche Tabellierungsstrategien aufgelistet und deren Vor- und Nachteile kurz beschrieben. Die Prämissen aller Strategien sind dabei sehr ähnlich: die Tabellengröße sollte möglichst klein sein, die Interpolation möglichst schnell und die interpolierten Werte sollten möglichst exakt den Ergebnissen des detaillierten Reaktionsmechanismus entsprechen. Die in dieser Arbeit verwendete Tabellierungsstrategie basiert auf den Überlegungen zu ILDM⁷ aus [78, 77, 6] sowie einer Erweiterung aus [48] und wird in den nächsten Abschnitten erläutert.

6.3.1 Tabellierung der chemischen Reaktionsraten der Fortschrittsvariable

Im Verlauf einer 3D-CFD-Simulation der dieselmotorischen Selbstzündung und Verbrennung treten sehr unterschiedliche thermochemische Zustände auf. Um für alle thermochemische Zustände einen chemischen Quellterm mit dem oben vorgestellten Ansatz zu erhalten, muss der Bereich für die Randbedingungen für Z , Z''^2 , T_{ox} , ξ_{egr} und p entsprechend gewählt werden. Für die motorisch relevanten Bereiche werden die Ergebnisse der Homogene-Reaktor-Rechnungen in Form einer Tabelle gespeichert [48]. Des Weiteren wird großer Wert auf die Rechenzeiteffizienz gelegt, da während einer 3D-CFD-Simulation zur Bestimmung des chemischen Reaktionsraten die Tabelle vom CFD-Code aus sehr oft⁸ aufgerufen wird. Als Ersatzkraftstoff für Diesel wird in dieser Arbeit n-Heptan verwendet⁹. Folglich basiert der chemische Quellterm der Homogene-Reaktor-Rechnungen auf einem detaillierten Reaktionsmechanismus für die Oxidation von n-Heptan. Dieser chemische Mechanismus besitzt sowohl eine geeignete Nieder- wie auch Hochtemperaturkinetik [86]. Prinzipiell ist es möglich andere Kraftstoffe mit dazugehörigen Reaktionsmechanismen zu verwenden.

Innerhalb des motorisch relevanten Bereichs müssen diskrete Punkte für die einzelnen Parameter (Z_i , $Z_i''^2$, $T_{ox,i}$, $\xi_{egr,i}$, p_i) festgelegt werden, um letztlich ein ausreichend dichtes Gitter zu erhalten. Jeder einzelne dieser Punkte liefert zunächst die Anfangsbedingung für die Berechnung einer Reaktionstrajektorie eines homogenen ($Z''^2 = 0$), adiabatischen Reaktors bei konstantem Druck, ausgehend von einem unverbranntem Gemisch bis hin zum chemischen Gleichgewicht¹⁰.

⁷vgl. Kapitel 2.3.4

⁸Mit durchschnittlich vier Druckkorrekturschritten pro Zeitschritt pro Zelle auf einem Rechnernetz mit $5 \cdot 10^4$ Zellen und einem Zeitschritt von $0.01 \cdot \text{KW}$ über einen Bereich von $100 \cdot \text{KW}$, also 10^4 Zeitschritten, würde die Tabelle $4 \cdot 5 \cdot 10^4 \cdot 10^4 = 2 \cdot 10^9$ Mal aufgerufen. Es kann davon ausgegangen werden, dass zu Beginn der Direkteinspritzung nur in wenigen Zellen ein Quellterm berechnet wird und gegen Ende der Rechnung in der Expansionsphase und nahezu vollständiger Durchmischung in fast allen Zellen. Deshalb halbiert sich bei Annahme linearer Ausbreitung die Anzahl der Aufrufe auf 10^9 .

⁹siehe Kapitel 2.3.3

¹⁰vgl. Gleichungen (6.6) bis (6.8)

Die Isochrone-Mittelung des Quellterms für unterschiedliche Varianzen des Mischungsbruchs wird im zweiten Schritt durchgeführt [48, 146]. Die einzelnen Reaktionsraten werden ausgewertet und an diskreten Punkten im χ -, Z -, Z''^2 -, T_{ox} -, ξ_{egr} -, p -Raum abgelegt. Die Bestimmung des chemischen Quellterms der Fortschrittsvariable $\tilde{\chi}^c$ für die entsprechenden Werte von $\tilde{\chi}$, \tilde{Z} , \tilde{Z}''^2 , T_{ox} , ξ_{egr} , \bar{p} erfolgt durch Interpolation in der Tabelle. Dabei ist die Handhabung sowie die Stützstellensuche der unabhängigen Variablen in der Tabelle auf einem äquidistanten Gitters besonders vorteilhaft.

Da die Variation von $\tilde{\chi}^c$ in Z in sehr fetten Bereichen weit weniger ausgeprägt ist als in der Nähe von Stöchiometrie, sollten die Punkte der Tabelle in der Nähe der Stöchiometrie dichter liegen, als es von einem äquidistantem Gitter vorgegeben wird. Des Weiteren steht die Temperatur bei der Berechnung der Reaktionsgeschwindigkeit im Arrhenius-Ansatz im Exponenten (siehe Gleichung (2.12)). Im niedrigen Temperaturbereich hat eine Variation der Oxidator Temperatur deshalb einen deutlich größeren Einfluss auf die Reaktionsgeschwindigkeit als in Bereichen größer 1000 K, weshalb bei niedrigen Temperaturen die Stützstellen dichter liegen müssen, als es das äquidistante Gitter erlaubt. Ebenso muss für die Varianz des Mischungsbruchs ein über mehrere Größenordnungen relevanten Bereich genügend fein auflösen. Eine simple Verkleinerung der Schrittweite in der jeweiligen Dimension stellt keine Lösung dar, da der Speicherbedarf einer 6-dimensionalen Tabelle schnell so groß wird, dass er auf heutigen Computern schlicht nicht zu bewältigen ist. Wird nicht die Größe selbst tabelliert, sondern eine geeignete Funktion der jeweiligen Größe auf einem äquidistantem Gitter, kann eine Adaption der Gitterauflösung in physikalisch relevanten Regionen realisiert werden [146, 48]. Die tabellierten Funktionen des Mischungsbruchs, dessen Varianz sowie der Temperatur und des Restgasanteils lauten wie folgt.

Mischungsbruch Z :

$$\eta_m = \frac{0.1}{0.1 + Z} \quad (6.32)$$

Varianz des Mischungsbruchs Z''^2 :

$$\eta_v = \log_{10} (Z''^2) \quad (6.33)$$

Temperatur T_{ox} :

$$\vartheta = \frac{1000 \text{ K}}{T_{ox}} \quad (6.34)$$

Restgasanteil ξ_{egr} :

$$\xi_{egr} = 1 - \frac{Y_{O_2}^{(0)}}{Y_{O_2}^L} \quad (6.35)$$

Ein äquidistantes Gitter in η_m wird somit ein dichtes Gitter in stöchiometrischen und mageren Bereichen, während der Gitterabstand für große Z zunimmt. Die Varianz des Mischungsbruchs kann mit η_v über mehrere Größenordnungen auf einem äquidistantem Gitter interpoliert werden. Um den Niedertemperaturbereich feiner aufzulösen, wird für die Temperatur die aus zahlreichen Publikationen in Zusammenhang mit Messungen von chemischen Zündverzugszeiten in Stoßrohren bekannte Funktion ϑ verwendet [86].

Die oben beschriebene Methodik lässt eine deutliche Reduktion der Gitterpunkte der Parameter Z -, Z''^2 -, T_{ox} -, ξ_{egr} -, p zu. Da chemische Reaktionen stark nichtlinear sind, werden laut [48] für eine adäquate Auflösung der Fortschrittsvariable χ bei konventioneller, äquidistanter Tabellierung mindestens 500 Stützstellen benötigt. Insbesondere die frühe Zündphase weist sehr

große chemische Zeitskalen auf und steht im Gegensatz zur Phase während der Hauptzündung, wo die Zeitskalen schlagartig um mehrere Größenordnungen kleiner werden. Wird der Abstand der Gitterpunkte zu groß, führt das zunächst zu falschen Zeitskalen und letztlich zu falschen Zündverzügen. Des Weiteren wird im Zusammenhang mit Fortschrittsvariablen-Modellen die Bestimmung des chemischen Quellterms zum Zeitpunkt $t = 0$ oft nicht näher erläutert. In der Anfangsphase des Zündprozesses liegen die Bildungsraten sehr nahe dem Wert 0 und damit in der Größenordnung der Rechengenauigkeit. Insbesondere bei niedrigen Temperaturen und Drücken können die nur unwesentlich von Null verschiedenen Raten der Fortschrittsvariable zu falschen Zündverzugszeiten führen [48].

Um die Anzahl der Gitterpunkte in χ zu reduzieren und den numerischen Fehler in der Zündphase zu minimieren, wird die Methodik aus [48] gewählt. Hierbei werden zunächst mithilfe der Homogene-Reaktor-Rechnungen die Zündverzugszeiten der Hauptzündung und der Wert der Fortschrittsvariable bei der Hauptzündung für alle Anfangsbedingungen ausgewertet. Beide Werte ermöglichen folgende Definition für die zeitliche Änderung der Fortschrittsvariable bis zum Zündzeitpunkt

$$\dot{\chi}_{ign} = \frac{\chi^{(det)}(t_{ign})}{t_{ign}}. \quad (6.36)$$

$\dot{\chi}_{ign}$ ist demnach von Beginn der Reaktion bis zur Hauptzündung konstant, was zu einem linearen Verlauf der Fortschrittsvariable χ über der Zeit führt, der sich sehr gut diskretisieren lässt. Ab der Hauptzündung werden weiterhin die zeitlichen Änderungen von χ aus den Homogene-Reaktor-Rechnungen verwendet [48]. Es gilt mit $\chi_{ign} = \chi^{(det)}(t_{ign})$:

$$\dot{\chi}(\chi) = \begin{cases} \dot{\chi}_{ign} & \text{für } 0 \leq \chi \leq \chi_{ign} \\ \dot{\chi}^{(det)}(\chi) & \text{für } \chi_{ign} < \chi \leq 1 \end{cases} \quad (6.37)$$

Diese Vorgehensweise ermöglicht die Reduktion der Gitterpunkte von 500 auf nur 64. In [48] wird gezeigt, dass die Zündverzugszeiten der Hauptzündung weiterhin korrekt berechnet werden. Ein Nachteil dieser Methodik ist, dass alle Informationen der Reaktionskinetik vor der Hauptzündung verloren gehen. Eine unter gewissen Randbedingungen mögliche 2-Stufen-Zündung kann so nicht mehr abgebildet werden. Tab. 6.1 gibt einen Überblick über den Parameterbereich und die Anzahl der Stützstellen der in dieser Arbeit verwendeten Bibliothek. In [48] wurden keine signifikanten Auswirkungen auf den Zündverzug möglicher Interpolationsfehler im Vergleich zur detaillierten Lösung festgestellt. Generell wurde die Übereinstimmung der Zündverzugszeiten bei Variation des Drucks, der Anfangstemperatur und des Mischungsbruchs als sehr gut bewertet.

6.3.2 Tabellierung der 7-Hauptspezies

Im CFD-Code werden die Massen- und Energieerhaltung über sieben Hauptspezies (Kraftstoff, O_2 , N_2 , CO_2 , H_2O , CO und H_2) berechnet [126]. Dadurch ergibt sich die Forderung, dass die Summe der Massenbrüche der sieben Spezies gleich eins ist. Der detaillierte n-Heptan-Reaktionsmechanismus beinhaltet neben den sieben Hauptspezies über hundert weitere Spezies (Zwischenprodukte, Radikale). Diese entstehen insbesondere während der Zündphase und machen einen nicht unwesentlichen Teil der Gesamtmasse ($< 5\%$) und -enthalpie aus und können daher nicht vernachlässigt werden. Deshalb muss bei der Kopplung der Ergebnisse der Homogene-Reaktor-Rechnungen mit dem n-Heptan Mechanismus an den CFD-Code eine Korrektur der Speziesmassenbrüche vorgenommen werden [146, 48]. Des Weiteren entspricht

Parameter	Homogener Reaktor					CFD-Code			
	Var.	min.	max.	Delta	Anzahl	Var.	min.	max.	Einheit
Fortschrittsvariable	χ	0	1	0.0158730	64	χ	0	1	–
Mischungsbruch	η_m	0.15225	0.83794	0.0342845	21	Z	0.01796	0.51705	–
Varianz des Misch.	η_v	-7	-2	1	6	Z''^2	10^{-7}	10^{-2}	–
Temperatur	ϑ	0.666667	1.66667	0.0833334	13	T_{ox}	600	1500	K
Restgasanteil	ξ_{egr}	0	70	10	8	ξ_{egr}	0	70	%
Druck	p	1	347.5	49.5	8	p	1	347.5	bar

Tabelle 6.1: *Parameterbereich der Isochron-gemittelten Fortschrittsvariablen-Bibliothek mit insgesamt 6.709.248 Gitterpunkten. $\eta_v = -7$ entspricht einem Homogene-Reaktor. Tabelliert sind die mittleren Reaktionsraten $\tilde{\chi}$ und Massenbrüche der Sieben Hauptspezies \tilde{Y}_i . Also 8 Größen in Exponentenschreibweise mit je 8 Zeichen: 429 391 872 Byte \approx 409.5 MByte.*

das C/H-Verhältnis von n-Heptan mit 0.4375 nicht dem von Dieselkraftstoff mit 0.53725¹¹. Vom C/H-Verhältnis hängt direkt der stöchiometrische Luftbedarf und der Heizwert eines Kohlenwasserstoffs ab [142]. Beides sind entscheidende Größen bei der Brennverfahrensentwicklung, da sie direkt auf den Luft- bzw. Kraftstoffbedarf eines Motors zur Erreichung einer vorgegebenen Last wirken. Für die Anwendung des Modells für Verbrennungssimulationen mit Dieselkraftstoff und Nutzung der Speziesvektoren der Homogene-Reaktor-Rechnungen wird in dieser Arbeit während der Spezieskorrektur im Gegensatz zu [48] das C/H-Verhältnis angepasst. Mit dieser Korrektur werden unter Verwendung der Hauptspezies die Masse und die Energie der Homogene-Reaktor-Rechnungen beim C/H-Verhältnis von Dieselkraftstoff erhalten. Das Korrekturverfahren ist in [48] ausführlich beschrieben. Hier werden ausschließlich die Bedingungen aufgeführt. Basierend auf dem Vektor der sieben Hauptspezies aus der detaillierten Rechnung

$$Y^{(det)} = (Y_1^{(det)}, \dots, Y_{N_s}^{(det)}) \quad (6.38)$$

wird ein neuer Massenbruchvektor

$$Y^{(CFD)} = (Y_1^{(CFD)}, \dots, Y_{N_s}^{(CFD)}) \quad (6.39)$$

berechnet, der folgende Bedingungen erfüllt:

1. Elementerhaltung:

$$\sum_{j=1}^{N_{el}} X_j^{(CFD)} = 1 \quad (6.40)$$

Die Elementbilanz nach der Korrektur des Speziesvektors muss über den gesamten Reaktionsverlauf obige Bedingung erfüllen.

2. C/H-Verhältnis von Dieselkraftstoff und N/O-Verhältnis von idealer, trockener Luft¹²:

$$X_C/X_H = 0.53725 \quad X_N/X_O = 3.76190 \quad (6.41)$$

Ebenso müssen die Elementverhältnisse über den gesamten Reaktionsverlauf konstant sein.

¹¹Mittels Kraftstoffanalysen lässt sich dieser Wert sehr exakt bestimmen.

¹²siehe Abschnitt 2.2.2

3. Nicht-Negativität:

$$Y_i^{(CFD)} \geq 0 \quad (i = 1, \dots, N_s) \quad (6.42)$$

Trivialerweise müssen alle Speziesmassenanteile größer bzw. gleich Null sein.

4. Energieerhaltung bei gleicher Luftzahl λ :

$$\sum_{i=1}^{N_s} h_i(T^{(det)}) \cdot Y_i^{(CFD)} = h^{(det)} \quad (6.43)$$

Durch Anpassung des C/H-Verhältnis auf 0.53725 (Diesel), ändert sich direkt der stöchiometrische Luftbedarf und der stöchiometrische Mischungsbruch Z_{st} . Da für die Berechnung der Zündverzugszeiten das Luft-Kraftstoff-Verhältnis entscheidend ist, soll dieses konstant gehalten werden. Damit ergeben sich leicht modifizierte Mischungsbrüche. Des Weiteren soll die spezifische Enthalpie $h^{(det)}$ der Homogene-Reaktor-Rechnungen trotz Anpassung der Zusammensetzung mit dem neuen Speziesvektor erhalten und die Temperatur $T^{(det)}$ übernommen werden.

5. Minimierung der Spezieskorrektur:

$$\left\| \frac{Y_i^{(CFD)} - Y_i^{(det)}}{w_i} \right\| = \min. \quad (6.44)$$

Der neue Speziesvektor wird iterativ mit einem Algorithmus für „Quadratische Programmierung“ nach [91] ermittelt. Bei diesen Gleichungen wird die Summation stets über alle Spezies durchgeführt. Dabei sollen diese Bedingung sicherstellen, dass die modifizierten Massenbrüche möglichst nah an den detaillierten Massenbrüchen liegen, so dass die Abweichung von der detaillierten Lösung durch die Korrekturprozedur so klein wie möglich wird. Für die Korrekturprozedur wird jede Spezies mit w_i gewichtet. Große Werte von w_i bedeuten, dass größere Abweichungen vom detaillierten Wert der entsprechenden Spezies zugelassen werden.

Die modifizierten Massenbrüche $Y^{(CFD)}$ lassen sich nach der Korrekturprozedur im CFD-Code für die Simulation der dieselmotorischen Selbstzündung und Verbrennung verwenden ohne die Element-, Massen- und Energieerhaltung zu verletzen. Die o. g. Bedingungen der Korrekturprozedur gewährleisten insbesondere, dass nach der Korrektur weiterhin die Temperaturen $T^{(det)}$ aus den detaillierten Rechnungen vorliegen, die für die Selbstzündung und Schadstoffbildung eine entscheidende Größe darstellen. Des Weiteren ermöglicht erst die Anpassung des C/H-Verhältnisses auf den von Dieselmotorkraftstoff den später folgenden Vergleich der Simulationen mit Messergebnissen.

6.4 CFD-Code

Der Zugriff vom CFD-Code auf die Tabelle und damit auf die Rate der Fortschrittsvariable und den Speziesvektor erfolgt in Abhängigkeit der sechs Parameter χ , Z , Z''^2 , T_{ox} , ξ_{egr} , p . Dabei wurde bisher stillschweigend davon ausgegangen, dass alle Parameter im CFD-Code bekannt sind. In dieser Arbeit wird eine homogenen Verteilung des Restgases im Brennraum angenommen. Dadurch ist der Parameter ξ_{egr} bereits durch die Wahl des Betriebspunkts

vorgeschrieben und somit bekannt. Für den mittleren Mischungsbruch \tilde{Z} und dessen Varianz $\overline{Z'^2}$ werden die Erhaltungsgleichungen (5.15) und (5.16) gelöst. Die Enthalpie \tilde{h} wird mit der Erhaltungsgleichung (4.40) berechnet. Damit lässt sich die Oxidatortemperatur T_{ox} bei bekannter Zusammensetzung des Oxidators $Y_{ox,i}$ und dem Mischungsbruch \tilde{Z} bestimmen¹³.

6.4.1 Allgemeiner Ansatz für die Erhaltungsgleichung des reduzierten Zustandsvektors

Die sieben Spezies Y_i beschreiben im physikalischen Raum den Gemischzustand und bilden somit konvektive und diffusive Mischungsvorgänge ab. Hier ist das Ziel, die Erhaltungsgleichung eines allgemeinen Speziesvektors Y_i in eine allgemeine Erhaltungsgleichung eines reduzierten Zustandsvektors α_j umzuformen, dem die Spezies eindeutig zugeordnet werden können. Die Indizes i und j verdeutlichen dabei die unterschiedlichen Dimensionen der Vektoren. Des Weiteren ist der reduzierte Zustandsvektor

$$\alpha_j \equiv (\chi, Z'^2, Z, T_{ox}, \xi_{egr}, p) \quad (6.45)$$

stets eine Funktion vom Ortsvektor \vec{x} und der Zeit t , d. h.

$$\alpha_j = \alpha_j(\vec{x}, t). \quad (6.46)$$

Übersichtshalber wird in der folgenden Herleitung diese Abhängigkeit nur in der Ausgangsfunktion dargestellt.

Eine chemische Reaktion hat in der Regel einen nichtlinearen Speziesverlauf über der Zeit [142]. Sollen nun mit Hilfe eines reduzierten Zustandsvektors α_j auf einer gekrümmten Untermannigfaltigkeit physikalische Mischungsvorgänge abgebildet werden, muss eine Koordinatentransformation durchgeführt werden. Änderungen in den reduzierten Koordinaten führen dann zwangsweise zu einer Bewegung auf der Mannigfaltigkeit. Es ergeben sich zwei Forderungen:

1. Die Speziesvektor ist stets eine Funktion des reduzierten Zustandsvektors α_j ¹⁴:

$$Y_i = Y_i(\alpha_j(\vec{x}, t)) \quad (6.47)$$

2. Aus dem CFD-Code gilt die Erhaltungsgleichung des Speziesvektors nach [17]:

$$\frac{\partial \rho Y_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} Y_i) = \nabla \cdot (\rho D \nabla Y_i) + \dot{\rho}_i^c + \dot{\rho}_i^s \quad (6.48)$$

Diese Forderungen induzieren eine Dynamik im reduzierten Zustand α_j . Wenn die Dimension von α_j jedoch kleiner ist als von Y_i , lassen sich beide Forderungen nicht mehr erfüllen, da

$$\begin{aligned} Y_i & \quad \text{für } i = 1, \dots, N_s \\ \alpha_j & \quad \text{für } j = 1, \dots, m < N_s \\ \Rightarrow & \quad Y_i = Y_i(\alpha_j) \end{aligned} \quad (6.49)$$

gilt. Bei gleicher Dimension ($m = N_s$) wären beide Forderungen prinzipiell erfüllbar. Dadurch

¹³vgl. Gleichungen (6.16) und (6.17)

¹⁴entlang einer Reaktionstrajektorie unter der Voraussetzung, dass diese streng monoton ist.

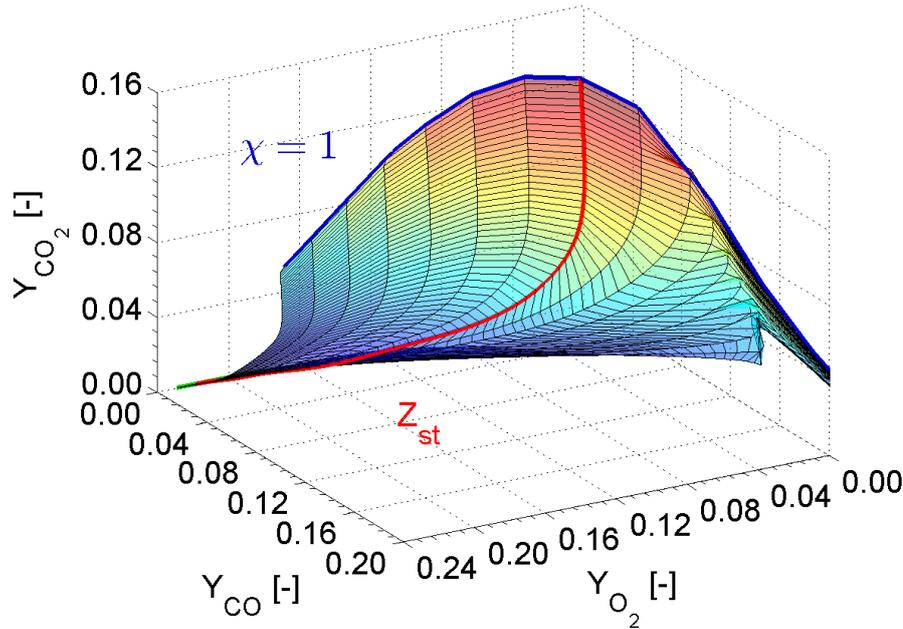


Abbildung 6.8: Reaktionstrajektorien, die eine Mannigfaltigkeit aufspannen, im Y_{O_2} - Y_{CO} - Y_{CO_2} -Raum ausgehend von $\chi = 0$ bis $\chi = 1$ für alle Mischungsbrüche $Z_{min} \leq Z \leq Z_{max}$ ($T_{ox} = 1000$ K, $\xi_{egr} = 0$ %, $p = 100$ bar).

würde jedoch eine „seltsame“ Dynamik für den reduzierten Zustandsvektor α_j entstehen und dessen Komponenten würden im allgemeinen ihre ursprüngliche physikalische Bedeutung wie Mischungsbruch, Enthalpie, Restgasanteil und Druck verlieren. Daher sind die Forderungen (1) und (2) hierarchisch zu trennen. Letztlich wird Gleichung (6.48) auf einen Ansatz von Gleichung (6.47) projiziert, wobei für die Projektion Gleichung (6.48) dann nicht mehr gilt. Die Mannigfaltigkeit des vollen Zustandsraums ist zur Anschauung in den drei Dimensionen Y_{O_2} - Y_{CO} - Y_{CO_2} in Abb. 6.8 dargestellt. Über den Reaktionsverlauf wird ausgehend vom Massenbruch Y_{O_2} zunächst überwiegend CO gebildet, welches später im Mageren zu CO_2 oxidiert wird. Für fette Mischungen verschiebt sich das Gleichgewicht hin zu CO, weshalb weniger CO_2 entsteht. In Abb. 6.12 ist ein Vektor eingezeichnet, der eine Bewegung weg von der Mannigfaltigkeit zeigt. Diese Richtung kommt zustande, indem sich bspw. durch Mischung und chemische Reaktion ausgehend von einem Zustand χ_0, Z_0 ein neuer Zustand χ_1, Z_1 ergibt. Im vollen Zustandsraum muss deshalb der Speziesvektor projiziert werden oder die Gleichungen, die diesen Mischungsprozess beschreiben, werden so formuliert, dass die Bewegung nur auf der Mannigfaltigkeit stattfindet (gestrichelte Linien).

6.4.2 Projektion der allgemeinen Transportgleichung

Zur Projektion der allgemeinen Erhaltungsgleichung wird die Tensorschreibweise gewählt, damit die Dimensionen des vollen und reduzierten Zustandsraums direkt ersichtlich werden. Die Variablen im physikalischen Raum \mathbb{R}^{N_s} werden mit dem Vektor $Y_k(\vec{x}, t)$ beschrieben während die auf der Untermannigfaltigkeit zur Unterscheidung mit $\hat{Y}_k(\alpha(\vec{x}, t))$ eingeführt werden. Es soll gelten

$$Y_k(\vec{x}, t) \in W \quad P : Y_k(\vec{x}, t) \rightarrow \hat{Y}_k(\alpha(\vec{x}, t)) \in \text{Im}V \subset W. \quad (6.50)$$

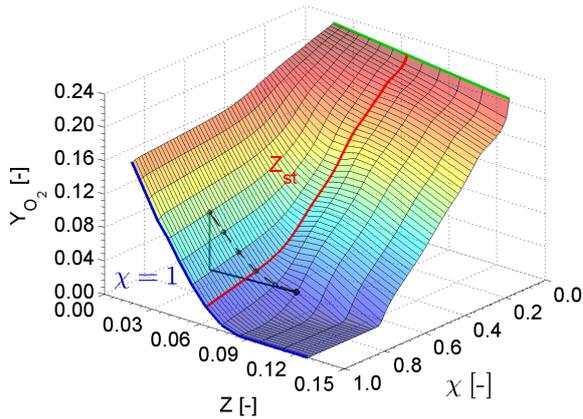


Abbildung 6.9: Massenbruch Y_{O_2} im χ - Z -Raum als Fläche mit Bewegungsvektor und dessen Projektion ($Z''^2 = 10^{-7}$, $T_{ox} = 1000$ K, $\xi_{egr} = 0$ %, $p = 100$ bar).

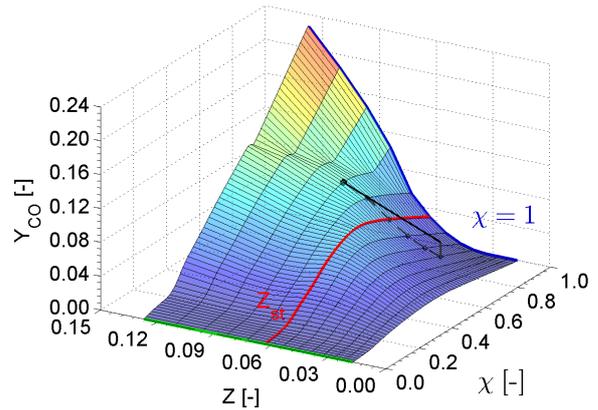


Abbildung 6.10: Massenbruch Y_{CO} im χ - Z -Raum als Fläche mit Bewegungsvektor und dessen Projektion ($Z''^2 = 10^{-7}$, $T_{ox} = 1000$ K, $\xi_{egr} = 0$ %, $p = 100$ bar).

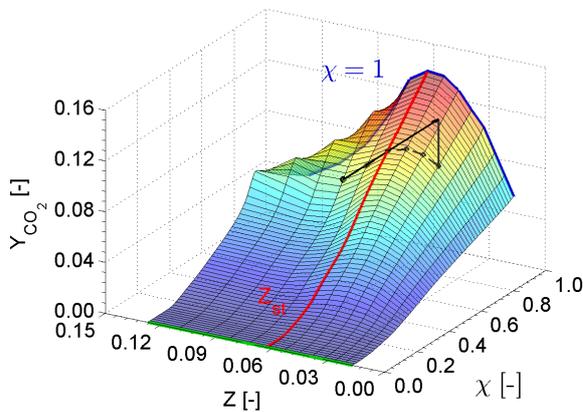


Abbildung 6.11: Massenbruch Y_{CO_2} im χ - Z -Raum als Fläche mit Bewegungsvektor und dessen Projektion ($Z''^2 = 10^{-7}$, $T_{ox} = 1000$ K, $\xi_{egr} = 0$ %, $p = 100$ bar).

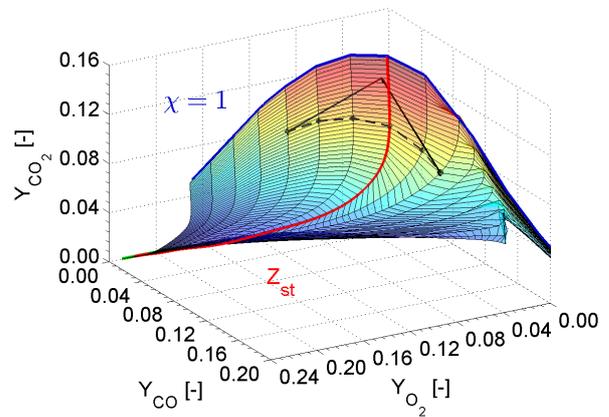


Abbildung 6.12: Reaktionstrajektorien im Y_{O_2} - Y_{CO} - Y_{CO_2} -Raum von $\chi = 0$ bis $\chi = 1$ für alle Z mit $Z_{min} \leq Z \leq Z_{max}$ ($Z''^2 = 10^{-7}$, $T_{ox} = 1000$ K, $\xi_{egr} = 0$ %, $p = 100$ bar).

Mit Hilfe des allgemeinen Projektionsoperators $\tilde{P} = (M^T \cdot M)^{-1} \cdot M^T$ lässt sich für $M_{ij} = (\partial \hat{Y}_i / \partial \alpha_j)$ für $i = 1, \dots, N_s$ und $j = 1, \dots, m$ mit $m < N_s$ der Projektor \tilde{P}_{ji} definieren

$$\tilde{P}_{ji} = \left(\frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \alpha_j} \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \alpha_k} \right)^{-1} \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \alpha_k}. \quad (6.51)$$

Mit dem metrischen Tensor

$$g_{jk} = \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \alpha_j} \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \alpha_k} \quad (6.52)$$

wobei für diesen

$$g^{jk} g_{kl} = \delta_l^j \quad (6.53)$$

gilt, kann für den Operator \tilde{P}_{ji} auch

$$\tilde{P}_{ji} = g^{jk} \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \alpha_k} \quad (6.54)$$

geschrieben werden. Dieser stellt nun eine Projektion in den Tangentialraum bei gleichzeitiger Koordinatentransformation dar. Der vollständige Projektionsoperator ohne Koordinatentransformation $\hat{P} = M \cdot (M^T \cdot M)^{-1} \cdot M^T$ lautet für diesen Fall

$$\begin{aligned} \hat{P}_{li} &= \frac{\partial \hat{Y}_l}{\partial \alpha_j} \left(\frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \alpha_j} \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \alpha_k} \right)^{-1} \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \alpha_k} \\ \hat{P}_{li} &= \frac{\partial \hat{Y}_l}{\partial \alpha_j} g^{jk} \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \alpha_k}. \end{aligned} \quad (6.55)$$

Die Gleichung zur Massenerhaltung bei konstantem Volumen $V = \text{const.}$ lautet [17]

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) = \dot{\rho}^s \quad (6.56)$$

Für den Verdampfungsquellterm $\dot{\rho}_i^s$ und den Quellterm aufgrund von chemischen Reaktionen $\dot{\rho}_i^c$ aus Gleichung (6.48) gelten

Spray:

$$\begin{aligned} \dot{\rho}_i^s &= \left(\frac{\partial \rho Y_i}{\partial t} \right)^s = \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} Y_i + \frac{\partial Y_i}{\partial t} \rho \right)^s \\ &= \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} \right)^s Y_i + \left(\frac{\partial Y_i}{\partial t} \right)^s \rho \\ &= \dot{\rho}^s Y_i + \rho \left(\frac{\partial Y_i}{\partial t} \right)^s \\ &= \dot{\rho}^s Y_i + \dot{\omega}_i^s \end{aligned} \quad (6.57)$$

*Chemie*¹⁵:

$$\dot{\rho}_i^c = \left(\frac{\partial \rho Y_i}{\partial t} \right)^c = \underbrace{\left(\frac{\partial \rho}{\partial t} \right)^c}_{=0} Y_i + \left(\frac{\partial Y_i}{\partial t} \right)^c \rho = \rho \left(\frac{\partial Y_i}{\partial t} \right)^c = \dot{\omega}_i^c \quad (6.58)$$

Somit kann Gleichung (6.48) mithilfe der Kontinuitätsgleichung umgeformt werden zu

$$\rho \frac{\partial Y_i}{\partial t} + \rho \vec{u} \nabla Y_i = \nabla \cdot (\rho D \nabla Y_i) + \dot{\omega}_i^s + \dot{\omega}_i^c. \quad (6.59)$$

Zur Projektion und Koordinatentransformation muss obige Gleichung mit dem Projektionsoperator \tilde{P}_{ji} durchmultipliziert werden. Es ergibt sich

$$\rho \tilde{P}_{ji} \frac{\partial Y_i}{\partial t} + \rho \vec{u} \tilde{P}_{ji} \nabla Y_i = \tilde{P}_{ji} \nabla \cdot (\rho D \nabla Y_i) + \tilde{P}_{ji} \dot{\omega}_i^s + \tilde{P}_{ji} \dot{\omega}_i^c. \quad (6.60)$$

Für die Ortsableitung gilt

$$\nabla Y_i = \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \alpha_k} \nabla \alpha_k. \quad (6.61)$$

¹⁵Massen- bzw. Elementerhaltung wird vorausgesetzt

Diese ist bereits ein Tangentialvektor. Das folgt aus der Tatsache, dass Y_i zum Zeitpunkt t an allen Raumpunkten \vec{x} bereits auf der Mannigfaltigkeit liegt. Formal ergibt sich das bei der Anwendung des vollen Projektors:

$$\begin{aligned}\hat{P}_{li}\nabla Y_i &= \frac{\partial \hat{Y}_l}{\partial \alpha_j} g^{jk} \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \alpha_k} \frac{\partial Y_i}{\partial \alpha_l} \nabla \alpha_l \\ &= \frac{\partial \hat{Y}_l}{\partial \alpha_l} \nabla \alpha_l \\ &= \nabla \hat{Y}_l\end{aligned}\tag{6.62}$$

Während der Konvektionsterm einen Tangentialvektor darstellt, muss das für den Diffusionsterm und die Quellterme durch die Projektion sichergestellt werden. Damit ergibt sich implizit, dass auch die zeitliche Änderung $\partial Y_i/\partial t$ ein Tangentialvektor ist. Demnach lässt sich für die projizierte Kinetik

$$\frac{\partial Y_l}{\partial t} = \frac{\partial \hat{Y}_l}{\partial \alpha_j} \frac{\partial \alpha_j}{\partial t} := \hat{P}_{li} \frac{\partial Y_i}{\partial t} = \frac{\partial \hat{Y}_l}{\partial \alpha_j} \tilde{P}_{ji} \frac{\partial Y_i}{\partial t}\tag{6.63}$$

setzen, was letztlich

$$\frac{\partial \alpha_j}{\partial t} = \tilde{P}_{ji} \frac{\partial Y_i}{\partial t}\tag{6.64}$$

ergibt und gewährleistet, dass zum Zeitpunkt $t + dt$ alle Zustandsvektoren Y_i auf der Mannigfaltigkeit liegen. Gleichung (6.60) lautet somit

$$\rho \frac{\partial \alpha_j}{\partial t} + \rho \vec{u} \nabla \alpha_j = \underbrace{\tilde{P}_{ji} \nabla \cdot (\rho D \nabla Y_i)}_{\text{Diffusion}} + \tilde{P}_{ji} \dot{\omega}_i^s + \tilde{P}_{ji} \dot{\omega}_i^c.\tag{6.65}$$

Mit Gleichung (6.54) kann der Diffusionsterm umgeformt werden in¹⁶:

$$\begin{aligned}& g_{jk} \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \alpha_k} \nabla \cdot (\rho D \nabla Y_i) \\ &= g_{jk} \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \alpha_k} \nabla \cdot \left(\rho D \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \alpha_l} \nabla \alpha_l \right) \\ &= g_{jk} \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \alpha_k} \rho D \nabla \cdot \left(\frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \alpha_l} \nabla \alpha_l \right) + g_{jk} \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \alpha_k} \nabla (\rho D) \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \alpha_l} \nabla \alpha_l \\ &= g_{jk} \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \alpha_k} \rho D \left(\frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \alpha_l} \nabla \cdot \nabla \alpha_l + \nabla \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \alpha_l} \nabla \alpha_l \right) + \nabla (\rho D) \underbrace{g_{jk} \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \alpha_k} \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \alpha_l} \nabla \alpha_l}_{\nabla \alpha_j} \\ &= \rho D g_{jk} \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \alpha_k} \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \alpha_l} \nabla \cdot \nabla \alpha_l + \nabla (\rho D) \nabla \alpha_l + g_{jk} \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \alpha_k} \nabla \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \alpha_l} \rho D \nabla \alpha_l \\ &= \nabla \cdot (\rho D \nabla \alpha_j) + g_{jk} \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \alpha_k} \nabla \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \alpha_l} \rho D \nabla \alpha_l\end{aligned}\tag{6.66}$$

¹⁶mit: $\nabla \cdot (f\vec{u}) = f\nabla \cdot \vec{u} + (\nabla f)\vec{u}$

wobei für

$$\nabla \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \alpha_l} = \frac{\partial^2 \hat{Y}_i}{\partial \alpha_l \partial \alpha_m} \nabla \alpha_m \quad (6.67)$$

gilt und sich schließlich

$$\begin{aligned} g_{jk} \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \alpha_k} \nabla \cdot (\rho D \nabla Y_i) &= \nabla \cdot (\rho D \nabla \alpha_j) + \underbrace{g_{jk} \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \alpha_k} \frac{\partial^2 \hat{Y}_i}{\partial \alpha_l \partial \alpha_m}}_{\Gamma_{ml}^j} \rho D \nabla \alpha_l \nabla \alpha_m \\ &= \nabla \cdot (\rho D \nabla \alpha_j) + \Gamma_{ml}^j \nabla \alpha_m \rho D \nabla \alpha_l \\ &= \underbrace{(\nabla \cdot \delta_l^j + \Gamma_{ml}^j \nabla \alpha_m)}_{\text{Kovariante Ableitung}} (\rho D \nabla \alpha_l) \end{aligned} \quad (6.68)$$

ergibt. Γ_{ml}^j stellt dabei ein Christoffelsymbol¹⁷ dar. Dies ist auch differentialgeometrisch verständlich, da die kovariante Ableitung aus dem Tangentialvektor ($\rho D \nabla \alpha_l$) wieder einen Tangentialvektor macht. Wird der Diffusionsterm in Gleichung (6.65) eingesetzt, erhält man

$$\rho \frac{\partial \alpha_j}{\partial t} + \rho \vec{u} \nabla \alpha_j = \nabla \cdot (\rho D \nabla \alpha_j) + \Gamma_{ml}^j \nabla \alpha_m \rho D \nabla \alpha_l + \tilde{P}_{ji} \dot{\omega}_i^s + \tilde{P}_{ji} \dot{\omega}_i^c. \quad (6.69)$$

Mit der Kontinuitätsgleichung aus (6.56) erweitert, ergibt sich

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial \alpha_j}{\partial t} + \rho \vec{u} \nabla \alpha_j + \alpha_j \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) - \dot{\rho}^s \right) &= \nabla \cdot (\rho D \nabla \alpha_j) + \Gamma_{ml}^j \nabla \alpha_m \rho D \nabla \alpha_l \\ &\quad + \tilde{P}_{ji} \dot{\omega}_i^s + \tilde{P}_{ji} \dot{\omega}_i^c \end{aligned} \quad (6.70)$$

und schließlich

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho \alpha_j}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \alpha_j) &= \nabla \cdot (\rho D \nabla \alpha_j) + \Gamma_{ml}^j \nabla \alpha_m \rho D \nabla \alpha_l \\ &\quad + \alpha_j \dot{\rho}^s + \underbrace{\tilde{P}_{ji} \dot{\omega}_i^s}_{=\dot{\omega}_j^s} + \underbrace{\tilde{P}_{ji} \dot{\omega}_i^c}_{=\dot{\omega}_j^c}. \end{aligned} \quad (6.71)$$

Diese Form der Erhaltungsgleichung mit der kovarianten Formulierung der Diffusion gilt allgemein, d. h. im Raum der sieben Spezies Y_i , wenn statt der ebenen Koordinaten Y_i die *gekrümmten* Koordinaten α_j verwendet werden. Sie beschreibt den gesamten Raum auf der gekrümmten Untermannigfaltigkeit mit Hilfe der reduzierten Koordinaten. Jedoch dürfen die reduzierten Koordinaten α_j im allgemeinen die Dynamik der ebenen Koordinaten Y_i nicht „erben“, da die Komponenten von α_j , also χ , Z , Z''^2 , T_{ox} , ξ_{egr} und p , sonst ihre physikalische Bedeutung verlieren. Das würde letztlich dazu führen, dass die *Nummerierung* der homogenen Reaktoren ihre physikalische Bedeutung verlieren würde, da

$$\alpha_j^{(\text{CFD})}(\chi, Z, Z''^2, T_{ox}, \xi_{egr}, p) \neq \alpha_j^{(\text{det})}(\chi^*, Z^*, Z''^{2*}, T_{ox}^*, \xi_{egr}^*, p^*). \quad (6.72)$$

¹⁷In der Differentialgeometrie sind die Christoffelsymbole, nach Elwin Bruno Christoffel (*1829-†1900), Hilfsgrößen zur Beschreibung der Ableitung auf riemannschen Mannigfaltigkeiten. Ihre definitorische Eigenschaft besteht in der Forderung, dass die kovariante Ableitung des metrischen Tensors verschwindet.

Der Verzicht einer physikalischen Bedeutung bei der Nummerierung der homogenen Reaktoren mit χ , Z , Z''^2 , T_{ox} , ξ_{egr} und p würde als Folge die bisherige Form der Tabellierung unbrauchbar machen. Der chemische Quellterm $\dot{\omega}_i^c$ müsste stattdessen für *alle* Kombinationen äußerer Variablen als Vektor tabelliert und projiziert werden, was einen gigantischen Aufwand nach sich ziehen würde, womit der Sinn einer Tabellierung zerstört wäre.

Soll die Erhaltungsgleichung für den reduzierten Zustandsvektor α_j in einem CFD-Code gelöst werden, müssen die Variablen Z , Z''^2 , T_{ox} , ξ_{egr} und p folgende Zwangsbedingungen erfüllen:

1. Der Druck p wird von außen aufgeprägt.
2. Die Enthalpie h muss erhalten werden, wodurch sich mit den Gleichungen (6.16) und (6.17) die Temperatur des Oxidators T_{ox} ergibt.
3. Der Mischungsbruch Z , die Varianz des Mischungsbruchs Z''^2 sowie der Restgasgehalt ξ_{egr} beschreiben den lokalen Mischungszustand.

Letztlich müssen die Variablen der homogenen Reaktoren den Variablen im CFD-Code entsprechen und es bleibt nur die Projektion auf eine eindimensionale Mannigfaltigkeit, nämlich die Reaktionsfortschrittsvariable χ .

6.4.3 Erhaltungsgleichung der Fortschrittsvariable

Basierend auf der Herleitung der allgemeinen Erhaltungsgleichung im letzten Abschnitt kann unter Einhaltung der Zwangsbedingungen eine Erhaltungsgleichung für die Reaktionsfortschrittsvariable χ hergeleitet werden. Das führt zu einer wesentlichen Vereinfachung, da die Transformation nur noch in einer Dimension stattfindet.

Die Speziesvektor Y_i ist nun eine Funktion der Fortschrittsvariable χ und der *äußeren* Variablen β_j . Zusammengenommen bilden diese den reduzierten Zustandsvektor α_j mit

$$\alpha_1 = \chi \quad \text{und} \quad \alpha_j = \beta_{j-1} \quad \text{für} \quad j = 2, \dots, m. \quad (6.73)$$

Es gilt nun

$$Y_i = \hat{Y}_i(\chi(\vec{x}, t), \beta_j(\vec{x}, t)) \quad (6.74)$$

und damit für die zeitliche Änderung

$$\frac{\partial Y_i}{\partial t} = \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \chi} \frac{\partial \chi}{\partial t} + \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \beta_j} \frac{\partial \beta_j}{\partial t} \quad (6.75)$$

und die Ortsableitung

$$\nabla Y_i = \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \chi} \nabla \chi + \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \beta_j} \nabla \beta_j. \quad (6.76)$$

Im Ausgangszustand zum Zeitpunkt t sind alle Zustände auf den jeweiligen lokalen Reaktoren projiziert. Zwischen t und $t + dt$ ändert sich aber der Zustand β_j mit $\beta_j + d\beta_j$, was zu einer Projektion auf den neuen Reaktor $\beta_j + d\beta_j$ führt. Der Projektionsoperator lautet nun

$$\tilde{P}_\chi = \left(\frac{\partial \hat{Y}_k}{\partial \chi} \frac{\partial \hat{Y}_k}{\partial \chi} \right)^{-1} \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \chi}. \quad (6.77)$$

Die mit dem obigen Projektionsoperator erweiterte Erhaltungsgleichung für den Speziesvektor nach [17] lautet unter Verwendung der Kontinuitätsgleichung (6.56) nun

$$\begin{aligned} \tilde{P}_\chi \rho \frac{\partial Y_i}{\partial t} + \tilde{P}_\chi \rho \vec{u} \nabla Y_i &= \tilde{P}_\chi \nabla \cdot (\rho D \nabla Y_i) + \tilde{P}_\chi \dot{\rho}_i^c + \tilde{P}_\chi \dot{\rho}_i^s \\ \rho \left(\frac{\partial \hat{Y}_k}{\partial \chi} \frac{\partial \hat{Y}_k}{\partial \chi} \right)^{-1} \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \chi} \frac{\partial Y_i}{\partial t} + \rho \vec{u} \left(\frac{\partial \hat{Y}_k}{\partial \chi} \frac{\partial \hat{Y}_k}{\partial \chi} \right)^{-1} \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \chi} \nabla Y_i &= \left(\frac{\partial \hat{Y}_k}{\partial \chi} \frac{\partial \hat{Y}_k}{\partial \chi} \right)^{-1} \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \chi} \nabla \cdot (\rho D \nabla Y_i) \\ &+ \left(\frac{\partial \hat{Y}_k}{\partial \chi} \frac{\partial \hat{Y}_k}{\partial \chi} \right)^{-1} \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \chi} \dot{\rho}_i^c \\ &+ \left(\frac{\partial \hat{Y}_k}{\partial \chi} \frac{\partial \hat{Y}_k}{\partial \chi} \right)^{-1} \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \chi} \dot{\rho}_i^s \end{aligned} \quad (6.78)$$

Um die weitere Umformung übersichtlicher zu gestalten, wird wiederum auf den metrischen Tensor zurückgegriffen

$$g_{\chi\chi} = \frac{\partial \hat{Y}_k}{\partial \chi} \frac{\partial \hat{Y}_k}{\partial \chi}. \quad (6.79)$$

Aufgrund der Definition aus Gleichung (6.13) der Reaktionsfortschrittsvariable χ über die Bogenlänge einer Reaktionstrajektorie lässt sich deshalb auch

$$\frac{d\chi}{dt} = \sqrt{\frac{d\hat{Y}_k}{dt} \frac{d\hat{Y}_k}{dt}} \quad (6.80)$$

schreiben. Daraus folgt

$$\frac{d\hat{Y}_i}{d\chi} = \frac{dt}{d\chi} \frac{d\hat{Y}_i}{dt} = \frac{1}{\sqrt{\frac{d\hat{Y}_k}{dt} \frac{d\hat{Y}_k}{dt}}} \frac{d\hat{Y}_i}{dt} \quad (6.81)$$

und somit für

$$\frac{d\hat{Y}_i}{d\chi} \frac{d\hat{Y}_i}{d\chi} = \frac{\frac{d\hat{Y}_i}{dt} \frac{d\hat{Y}_i}{dt}}{\frac{d\hat{Y}_k}{dt} \frac{d\hat{Y}_k}{dt}} = 1, \quad (6.82)$$

was ebenso für den metrischen Tensor $g_{\chi\chi}$ gilt, also ist

$$g_{\chi\chi} = 1. \quad (6.83)$$

Die Wahl der Reaktionsfortschrittsvariable als Bogenlänge einer Reaktionstrajektorie erweist sich hierbei als sehr vorteilhaft und vereinfacht Gleichung (6.78) zu

$$\rho \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \chi} \frac{\partial Y_i}{\partial t} + \rho \vec{u} \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \chi} \nabla Y_i = \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \chi} \nabla \cdot (\rho D \nabla Y_i) + \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \chi} \dot{\rho}_i^c + \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \chi} \dot{\rho}_i^s. \quad (6.84)$$

Jeder Term der obigen Erhaltungsgleichung lässt sich weiter mit dem in Gleichung (6.74) definierten Zusammenhang umformen. Die zeitliche Änderung wird zu

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \chi} \frac{\partial Y_i}{\partial t} &= \rho \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \chi} \left(\frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \chi} \frac{\partial \chi}{\partial t} + \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \beta_j} \frac{\partial \beta_j}{\partial t} \right) \\ &= \rho \frac{\partial \chi}{\partial t} + \rho \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \chi} \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \beta_j} \frac{\partial \beta_j}{\partial t} \end{aligned} \quad (6.85)$$

während für die Konvektion

$$\begin{aligned}
 \rho \vec{u} \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \chi} \nabla Y_i &= \rho \vec{u} \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \chi} \left(\frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \chi} \nabla \chi + \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \beta_j} \nabla \beta_j \right) \\
 &= \rho \vec{u} \nabla \chi + \rho \vec{u} \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \chi} \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \beta_j} \nabla \beta_j
 \end{aligned} \tag{6.86}$$

gilt. Der Diffusionsterm lässt sich zu

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \chi} \nabla \cdot (\rho D \nabla Y_i) &= \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \chi} \nabla \cdot \left(\rho D \left(\frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \chi} \nabla \chi + \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \beta_j} \nabla \beta_j \right) \right) \\
 &= \nabla \cdot (\rho D \nabla \chi) + \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \chi} \nabla \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \chi} \rho D \nabla \chi \\
 &\quad + \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \chi} \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \beta_j} \nabla \cdot (\rho D \nabla \beta_j) + \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \chi} \nabla \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \beta_j} \rho D \nabla \beta_j
 \end{aligned} \tag{6.87}$$

umformen. Dabei ist

$$\begin{aligned}
 \nabla \cdot (\rho D \nabla \chi) + \frac{\frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \chi} \nabla \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \chi}}{\frac{\partial \hat{Y}_k}{\partial \chi} \frac{\partial \hat{Y}_k}{\partial \chi}} \rho D \nabla \chi &= \nabla \cdot (\rho D \nabla \chi) + \frac{1}{2} \frac{\nabla g_{xx}}{g_{xx}} \rho D \nabla \chi \\
 &= \nabla \cdot (\rho D \nabla \chi) + \frac{\nabla \sqrt{g_{xx}}}{\sqrt{g_{xx}}} \rho D \nabla \chi \\
 &= \frac{1}{\sqrt{g_{xx}}} \nabla \cdot (\sqrt{g_{xx}} \rho D \nabla \chi) \\
 &= \nabla \cdot (\rho D \nabla \chi).
 \end{aligned} \tag{6.88}$$

Für den chemischen Quellterm gilt

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \chi} \dot{\rho}_i^c &= \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \chi} \rho \left(\frac{\partial Y_i}{\partial t} \right)^c \\
 &= \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \chi} \rho \left(\frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \chi} \frac{\partial \chi}{\partial t} + \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \beta_j} \frac{\partial \beta_j}{\partial t} \right)^c \\
 &= \rho \dot{\chi}^c + \rho \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \chi} \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \beta_j} \dot{\beta}_j^c
 \end{aligned} \tag{6.89}$$

Für den Verdampfungsquellterm gilt

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \chi} \dot{\rho}_i^s &= \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \chi} \left(\dot{\rho}^s Y_i + \rho \left(\frac{\partial Y_i}{\partial t} \right)^s \right) \\
 &= \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \chi} \dot{\rho}^s Y_i + \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \chi} \rho \left(\frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \chi} \frac{\partial \chi}{\partial t} + \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \beta_j} \frac{\partial \beta_j}{\partial t} \right)^s \\
 &= \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \chi} \dot{\rho}^s Y_i + \rho \dot{\chi}^s + \rho \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \chi} \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \beta_j} \dot{\beta}_j^s
 \end{aligned} \tag{6.90}$$

Werden die umgeformten Terme in die Gleichung (6.84) eingesetzt und sortiert, ergibt sich

$$\begin{aligned}
\rho \frac{\partial \chi}{\partial t} + \rho \vec{u} \nabla \chi &= \nabla \cdot (\rho D \nabla \chi) + \rho \dot{\chi}^c + \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \chi} \dot{\rho}^s Y_i + \rho \dot{\chi}^s + \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \chi} \nabla \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \beta_j} \rho D \nabla \beta_j \\
&\quad - \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \chi} \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \beta_j} \left(\rho \frac{\partial \beta_j}{\partial t} + \rho \vec{u} \nabla \beta_j - \nabla \cdot (\rho D \nabla \beta_j) - \rho \dot{\beta}_j^c - \rho \dot{\beta}_j^s \right) \\
&\quad - \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \chi} \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \beta_j} \left(\beta_j \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) - \dot{\rho}^s \right) \right) \\
\rho \frac{\partial \chi}{\partial t} + \rho \vec{u} \nabla \chi &= \nabla \cdot (\rho D \nabla \chi) + \rho \dot{\chi}^c + \rho \dot{\chi}^s + \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \chi} \dot{\rho}^s Y_i + \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \chi} \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \beta_j} \beta_j \dot{\rho}^s + \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \chi} \nabla \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \beta_j} \rho D \nabla \beta_j
\end{aligned} \tag{6.91}$$

bzw. mit der Kontinuitätsgleichung erweitert und umgeformt

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \rho \chi}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \chi) &= \nabla \cdot (\rho D \nabla \chi) + \rho \dot{\chi}^c + \rho \dot{\chi}^s + \left(\chi + \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \chi} Y_i + \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \chi} \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \beta_j} \beta_j \right) \dot{\rho}^s \\
&\quad + \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \chi} \nabla \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \beta_j} \rho D \nabla \beta_j.
\end{aligned} \tag{6.92}$$

Vor der Diskussion der zusätzlichen Terme wird obige Gleichung zunächst gemittelt.

6.4.4 RANS-Mittlung der Erhaltungsgleichung der Fortschrittsvariable

Die Erhaltungsgleichung der Fortschrittsvariable (6.92) muss für die Verwendung im CFD-Code (RANS) *Favre-gemittelt* werden. Für eine beliebige Strömungsgröße ψ gelten die Gleichungen (4.18) bis (4.21). Diese werden zur Zerlegung der instantanen Fortschrittsvariable χ in dichtegewichteten Mittel- und Schwankungswert $\tilde{\chi}$ und χ'' genutzt. Ausgehend von

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \overline{\rho \chi}}{\partial t} + \nabla \cdot (\overline{\rho \vec{u} \chi}) &= \nabla \cdot (\overline{\rho D \nabla \chi}) + \overline{\rho \dot{\chi}^c} + \overline{\rho \dot{\chi}^s} + \overline{\dot{\rho}^s \chi} + \overline{\dot{\rho}^s \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \chi} Y_i} + \overline{\dot{\rho}^s \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \chi} \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \beta_j} \beta_j} \\
&\quad + \overline{\frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \chi} \nabla \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \beta_j} \rho D \nabla \beta_j}
\end{aligned} \tag{6.93}$$

können zunächst die Terme für die zeitliche Änderung und Konvektion in die gängige Form¹⁸ überführt werden und es ergibt sich

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \overline{\rho \tilde{\chi}}}{\partial t} + \nabla \cdot (\overline{\rho \vec{u} \tilde{\chi}}) &= \nabla \cdot (\overline{\rho D \nabla \chi} - \overline{\rho \vec{u}'' \chi''}) + \overline{\rho \dot{\chi}^c} + \overline{\rho \dot{\chi}^s} + \overline{\dot{\rho}^s (\tilde{\chi} + \chi'')} \\
&\quad + \overline{\dot{\rho}^s \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \chi} Y_i} + \overline{\dot{\rho}^s \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \chi} \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \beta_j} \beta_j} + \overline{\frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \chi} \nabla \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \beta_j} \rho D \nabla \beta_j}.
\end{aligned} \tag{6.94}$$

Der mittlere chemische Quellterm der Fortschrittsvariable wird mit dem Isochronen-Mittelungsansatz aus Kapitel 6.2.4 mit Gleichung (6.31) bestimmt. Mit diesem Ansatz wird der Einfluss

¹⁸vgl. Kapitel 4.2.2

der turbulenten Transportprozesse auf den chemischen Quellterm berücksichtigt und es wird angenommen, dass auf eine Modellierung des Schwankungswerts des chemischen Quellterms der Fortschrittsvariable $\dot{\chi}^{c''}$ verzichtet werden darf. Es gilt:

$$\overline{\rho \dot{\chi}^c} = \bar{\rho} \tilde{\chi}^c \quad (6.95)$$

Laut [27] sind die Verdampfungsprozesse meist abgeschlossen bevor die ersten Zündreaktionen einen nennenswerten Fortschritt aufweisen oder sie finden räumlich getrennt statt. Selten verdampfen die Tropfen so langsam, dass sie mit den Zündreaktionen interagieren. Aufgrund der Vorstellung, dass der Kraftstoff stets mit Reaktionsfortschritt gleich Null verdampft, wird der explizite mittlere Verdampfungs-Quellterm der Fortschrittsvariable

$$\overline{\rho \dot{\chi}^s} = 0 \quad (6.96)$$

gesetzt. Ferner wird davon ausgegangen, dass bereits durch die Projektion auf die Mannigfaltigkeit der Effekt des Phasenübergangs des Kraftstoffs von Flüssig- zu Gasphase auf den Reaktionsfortschritt abgebildet wird, sofern der Reaktionsfortschritt $\tilde{\chi} > 0$ ist.

Nur unter der Annahme, dass die Reaktionsfortschrittsvariable und der Diffusionskoeffizient nicht korrelieren, kann für

$$\overline{\rho D \nabla \chi} = \bar{\rho} D \nabla \tilde{\chi} \quad \text{mit} \quad \overline{\rho D \nabla \chi''} = 0 \quad (6.97)$$

geschrieben werden. In Realität ist die Diffusion oft eine Funktion des Reaktionsfortschritts, was aber schwieriger zu modellieren ist und deshalb aufgrund der geringen Relevanz bei Strömungen mit hohen Reynoldszahlen im Vergleich zu den übrigen Termen der Transportgleichung vernachlässigt wird [29].

In turbulenten vorgemischten Flammen steigt die Reaktionsfortschrittsvariable über die Flamme hinweg von Null auf eins. Aufgrund von Turbulenz und Wärmefreisetzung treten Fluktuationen der instantanen Geschwindigkeit und des Reaktionsfortschritts auf, die statistisch korrelieren und mittels der Reynoldsspannungen abgebildet werden können. Für diesen Fall lässt sich der Standard-Gradientenansatz verwenden [29]:

$$\overline{\rho u'' \chi''} = -\frac{\mu_t}{Sc_t} \nabla \tilde{\chi} \quad (6.98)$$

Eine Einschränkung der Gültigkeit des Ansatzes entsteht beispielsweise, wenn negative Werte der Reynoldsspannungen bei positiven mittleren Gradienten der Fortschrittsvariable und umgekehrt auftreten. Für turbulente vorgemischte Flammen, wo das Phänomen des Transports entgegen des Gradienten beobachtet werden kann, ist der Standard-Gradientenansatz nicht geeignet. Dieser druckabhängige Effekt ist eine Folge der thermischen Expansion aufgrund der Wärmefreisetzung innerhalb der Flamme. Die resultierende Geschwindigkeitserhöhung durch die Flamme ist mit einem selbstinduzierten Druckgradienten assoziiert. Dieser beschleunigt die Produktgase mit niedriger Dichte zu den Reaktanden mit hoher Dichte. Der Transport der Produkte stromaufwärts entgegen des Gradienten der Reaktionsfortschrittsvariable wird so möglich und verläuft somit entgegen der Richtung des Gradientenansatzes [73]. In dieser Arbeit wird dieser Effekt nicht berücksichtigt, weshalb Gleichung (6.94) mit dem Gradientenansatz und den obigen Annahmen zu

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \overline{\rho \tilde{\chi}}}{\partial t} + \nabla \cdot (\overline{\rho \tilde{u} \tilde{\chi}}) &= \nabla \cdot \left(\overline{\rho D \nabla \tilde{\chi}} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \nabla \tilde{\chi} \right) + \overline{\rho \tilde{\chi}^c} + \overline{\bar{\rho}^s \tilde{\chi}} + \overline{\dot{\rho}^s \chi''} \\
&+ \underbrace{\overline{\dot{\rho}^s \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \chi} Y_i}}_{\text{Term 1}} + \underbrace{\overline{\dot{\rho}^s \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \chi} \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \beta_j} \beta_j}}_{\text{Term 2}} + \underbrace{\overline{\frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \chi} \nabla \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \beta_j} \rho D \nabla \beta_j}}_{\text{Term 3}} \quad (6.99)
\end{aligned}$$

wird. Die Terme 1 bis 3 aus Gleichung (6.99) lassen sich nur mit zusätzlichen Vereinfachungen in Mittel- und Schwankungswert zerlegen. Insbesondere die partiellen Ableitungen $\partial \hat{Y}_i / \partial \chi$ und $\partial \hat{Y}_i / \partial \beta_j$ der Schwankungswerte χ'' und β_j'' sind nicht verwertbar, da sie nicht separiert werden können. Die Auswertung der partiellen Ableitungen von \hat{Y}_{CO_2} (Abbildungen 6.14 bis 6.23) zeigt jedoch, dass diese bei kleinen Änderungen der reduzierten Variablen nur sehr leichte Krümmungen der Mannigfaltigkeiten aufweisen und somit näherungsweise linear sind. Für die übrigen Spezies ist das Verhalten prinzipiell ähnlich. Leichte Schwankungen der Reaktionsfortschrittsvariable χ oder des reduzierten Zustandsvektors β_j haben demnach nur sehr schwache Änderungen des vollen Zustandsvektors \hat{Y}_i zur Folge. Das ist leicht nachvollziehbar, da bspw. eine Variation des Drucks oder der Anfangstemperatur nur einen untergeordneten Einfluss auf die Spezieskomposition haben. Lediglich im Mischungsbruchraum gilt diese Annahme nur für sehr kleine Schwankungen, da die Mannigfaltigkeit (in diesem Beispiel für $\chi > 0.5$) stärkere Krümmungen aufweist (Abb. 6.24). Auch dieser Zusammenhang ist einleuchtend, da der Mischungsbruch direkten Einfluss auf die Gemischzusammensetzung hat. In Richtung der Reaktionstrajektorien sind für kleine Änderung von χ die Mannigfaltigkeiten des vollen Zustandsvektors \hat{Y}_i ebenfalls nahezu linear. Für eine sehr schwach gekrümmte, nahezu lineare Funktion F gilt näherungsweise

$$\overline{F(\tilde{\psi} + \psi'')} \approx F(\tilde{\psi}) = \bar{F}. \quad (6.100)$$

Damit lassen sich die partiellen Ableitungen $\partial \hat{Y}_i / \partial \chi$ und $\partial \hat{Y}_i / \partial \beta_j$ mit

$$\frac{\partial \hat{Y}_i(\tilde{\chi} + \chi'', \tilde{\beta}_j + \beta_j'')}{\partial \chi} \approx \frac{\partial \hat{Y}_i(\tilde{\chi}, \tilde{\beta}_j)}{\partial \chi} = \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \tilde{\chi}} \quad (6.101)$$

$$\frac{\partial \hat{Y}_i(\tilde{\chi} + \chi'', \tilde{\beta}_j + \beta_j'')}{\partial \beta_j} \approx \frac{\partial \hat{Y}_i(\tilde{\chi}, \tilde{\beta}_j)}{\partial \beta_j} = \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \tilde{\beta}_j} \quad (6.102)$$

approximieren, was die Zerlegung in Mittel- und Schwankungswert der Terme 1 bis 3 ermöglicht. Es ergeben sich für

Term 1:

$$\begin{aligned}
\overline{\dot{\rho}^s \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \chi} Y_i} &= \overline{\dot{\rho}^s \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \chi} (\tilde{Y}_i + Y_i'')} \\
&= \overline{\bar{\rho}^s \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \chi} \tilde{Y}_i} + \overline{\dot{\rho}^s \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \chi} Y_i''} \quad (6.103)
\end{aligned}$$

Term 2:

$$\begin{aligned}
\overline{\dot{\rho}^s \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \chi} \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \beta_j} \beta_j} &= \overline{\dot{\rho}^s \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \chi} \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \beta_j} (\tilde{\beta}_j + \beta_j'')} \\
&= \overline{\bar{\rho}^s \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \chi} \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \tilde{\beta}_j} \tilde{\beta}_j} + \overline{\dot{\rho}^s \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \chi} \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \beta_j} \beta_j''} \quad (6.104)
\end{aligned}$$

Term 3:

$$\begin{aligned}
 \overline{\frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \chi} \nabla \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \beta_j} \rho D \nabla \beta_j} &= \overline{\frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \chi} \nabla \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \beta_j} D \nabla (\rho \beta_j)} - \overline{\frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \chi} \nabla \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \beta_j} \beta_j D \nabla \rho} \\
 &= \overline{\frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \tilde{\chi}} \nabla \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \tilde{\beta}_j} D \nabla (\tilde{\rho} \tilde{\beta}_j)} - \overline{\frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \chi} \nabla \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \beta_j} \beta_j D \nabla \rho} \\
 &= \overline{\frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \tilde{\chi}} \nabla \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \tilde{\beta}_j} \tilde{\rho} D \nabla \tilde{\beta}_j} + \overline{\frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \chi} \nabla \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \beta_j} \rho D \nabla \beta_j''} \quad (6.105)
 \end{aligned}$$

Zunächst wird Term 3 genauer betrachtet. Es werden die Annahmen aus Gleichung (6.97) verwendet und somit der Diffusionskoeffizient und die Größen des reduzierten Zustandsvektors β_j als statistisch unabhängig betrachtet. Für diesen sogenannten Projektionsterm wird der Schwankungswert der Diffusion entgegen der üblichen Vorgehensweise nicht vernachlässigt. Der zweite Summand in Term 3 kann analog zum Fick'schen Gesetz $\vec{v}_D = -D/X \nabla X$ mit $\beta_j'' \vec{v}_D = -D \nabla \beta_j''$ zu

$$\overline{\frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \chi} \nabla \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \beta_j} \rho D \nabla \beta_j''} = - \overline{\frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \chi} \nabla \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \beta_j} \rho \beta_j'' \vec{v}_D} \quad (6.106)$$

umgeschrieben werden, wobei \vec{v}_D die Diffusionsgeschwindigkeit darstellt. Die Zerlegung der Diffusionsgeschwindigkeit in Mittel- und Schwankungswert mit $\vec{v}_D = \tilde{v}_D + \vec{v}_D''$ führt zu

$$\begin{aligned}
 - \overline{\frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \chi} \nabla \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \beta_j} \rho \beta_j'' \vec{v}_D} &= - \underbrace{\overline{\frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \chi} \nabla \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \beta_j} \rho \beta_j'' \tilde{v}_D}}_{=0 \text{ mit } (\beta_j'' \tilde{v}_D) = 0} - \overline{\frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \chi} \nabla \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \beta_j} \rho \beta_j'' \vec{v}_D''}. \quad (6.107)
 \end{aligned}$$

Mit dem Gradientenansatz

$$\overline{\rho \vec{v}_D'' \beta_j''} = - \frac{\mu_t}{S_{c_{t,D}}} \nabla \tilde{\beta}_j \quad (6.108)$$

wird obiger Ausdruck zu

$$- \overline{\frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \chi} \nabla \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \beta_j} \rho \beta_j'' \vec{v}_D''} = \overline{\frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \tilde{\chi}} \nabla \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \tilde{\beta}_j} \frac{\mu_t}{S_{c_{t,D}}} \nabla \tilde{\beta}_j}. \quad (6.109)$$

$S_{c_{t,D}}$ stellt dabei die turbulente Schmidtzahl der Diffusion dar. Anhand der Gegenüberstellung der Gradientenansätze aus Konvektion und Diffusion kann die Größenordnung von $S_{c_{t,D}}$ im Vergleich zur turbulenten Schmidtzahl der Konvektion S_{c_t} abgeschätzt werden. Die turbulenten Schmidtzahlen stehen im reziproken Verhältnis zu den Schwankungswerten:

$$\frac{S_{c_{t,D}}}{S_{c_t}} \sim \frac{\tilde{u}''}{\tilde{v}_D''} \quad (6.110)$$

Da die Schwankungswerte der Diffusionsgeschwindigkeit üblicher Weise vernachlässigt werden ($S_{c_{t,D}} = \infty$), ist davon auszugehen, dass diese im Verhältnis zu den Werten aus der Konvektion klein sind. Wird $S_{c_{t,D}} = S_{c_t}$ gesetzt, dann wird der zweite Summand aus Gleichung (6.105) nach oben abgeschätzt. Damit lässt sich Term 3 schließlich zu

$$\overline{\frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \chi} \nabla \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \beta_j} \rho D \nabla \beta_j} = \overline{\frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \tilde{\chi}} \nabla \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \tilde{\beta}_j} \left(\tilde{\rho} D \nabla \tilde{\beta}_j + \frac{\mu_t}{S_{c_t}} \nabla \tilde{\beta}_j \right)} \quad (6.111)$$

umschreiben. Abb. 6.13 zeigt ein Simulationsergebnis eines Gasfreistrahls in einer Hochdruck-Hochtemperatur-Einspritzkammer. Das Experiment und dessen Randbedingungen werden ausführlich im Zusammenhang mit der Validierung der gesamten Simulationskette in Kapitel 7.2 erläutert. Hier soll das Ergebnis nur dazu dienen die Größenordnungen des chemischen Quellterms und der Projektionsterm-Quellterme zu veranschaulichen. Die Erhaltungsgleichung der Fortschrittsvariable erfolgt mit Gleichung (6.117). Es ist ersichtlich, dass die Projektionsterme nahezu über den gesamten Zeitraum 2 bis 3 Größenordnungen kleiner als der chemische Quellterm sind. In der Reaktionszone insbesondere an der Strahlwurzel in leicht fetten Zonen, wo die chemischen Quellterme am größten sind, haben auch die Projektionsterme aus der Mischung ihre höchsten Beträge. Dort sind die Mannigfaltigkeiten im Mischungsbruchraum am stärksten gekrümmt und die Reaktions- und Mischungsprozesse weisen eine hohe Dynamik auf, weshalb dieses Ergebnis plausibel erscheint. Der relative Fehler der Reaktionsrate der Fortschrittsvariable $\tilde{\chi}$ durch die Überschätzung der Diffusionsschwankungswerte ist der Analyse nach kleiner 2%.

Die Terme 1 und 2 ergeben sich aus der Projektionsbedingung bei der Kraftstoffverdampfung. Per definitionem gilt bei der Favre-Mittelung $\overline{\rho\chi''} = 0$, $\overline{\rho Y_i''} = 0$ und $\overline{\rho\beta_j''} = 0$. Die Schwankungsterme $\overline{\rho^s\chi''}$, $\overline{\rho^s Y_i''}$ und $\overline{\rho^s\beta_j''}$ müssen jedoch modelliert werden. Der erste Summand liefert jeweils basierend auf dem mittleren vollständigen bzw. reduzierten Zustandsvektor einen Korrekturterm für die Fortschrittsvariable bei der Verdampfung, sofern sich die Zustandsvektoren von der tabellierten Mannigfaltigkeit wegbewegen. Im Idealfall verlaufen die Verdampfungsprozesse auf der Mannigfaltigkeit und die Korrekturterme sind gleich Null. Findet der Phasenübergang bspw. bei gleichem Druck statt, hat Term 2 für diese reduzierte Koordinate keinen Beitrag. Bei der Verdampfung steigt der Kraftstoffmassenbruch an, da dessen Partialdichte zunimmt. Der volle Zustandsvektor \hat{Y}_i ändert sich entsprechend. Ändert sich die Zusammensetzung im tabellierten Zustandsraum für $\tilde{\chi} \approx 0$, bewegt sich die Verdampfung entsprechend dem Mischungsbruch in der Regel auf der Mannigfaltigkeit. Für $\tilde{\chi} > 0$ reagiert der Kraftstoff schnell zu Zwischenprodukten und es existieren keine passenden tabellierten Zustandsvektoren, sofern durch die Verdampfung der Kraftstoffmassenbruch ansteigt. Das System entfernt sich somit von der tabellierten Mannigfaltigkeit und der volle Zustandsvektor sowie die Fortschrittsvariable müssen durch die Projektion korrigiert werden. Da die Projektion permanent durchgeführt wird, sind die Korrektur-Quellterme basierend auf den Mittelwerten ansatzbedingt vom Betrag her klein. Für reaktionskinetisch relevante Zustände ($Z > 0.01$) ist die Varianz des Mischungsbruchs im Verhältnis zum Mittelwert mindestens eine Größenordnungen kleiner, was ebenso für das Verhältnis der Summanden in den Gleichungen (6.103) und (6.104) gilt. Unter der Annahme, dass das Größenordnungsverhältnis der Mittel- und Schwankungswerte auf die übrigen Größen übertragen werden kann, gilt

Term 1:

$$\overline{\rho^s} \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \tilde{\chi}} \tilde{Y}_i \gg \overline{\rho^s} \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \chi} Y_i'' \quad (6.112)$$

Term 2:

$$\overline{\rho^s} \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \tilde{\chi}} \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \tilde{\beta}_j} \tilde{\beta}_j \gg \overline{\rho^s} \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \chi} \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \beta_j} \beta_j'' \quad (6.113)$$

Die Projektionsterme bei der Verdampfung basierend auf Mittelwerten $\overline{\rho^s} \tilde{\chi}$ stellen Korrekturen der Fortschrittsvariable 1. Ordnung dar, während Terme basierend auf Schwankungswerten $\overline{\rho^s \chi''}$ Korrekturen 2. Ordnung sind, so dass ebenso $\overline{\rho^s} \tilde{\chi} \gg \overline{\rho^s \chi''}$ angenommen wird. In [27]

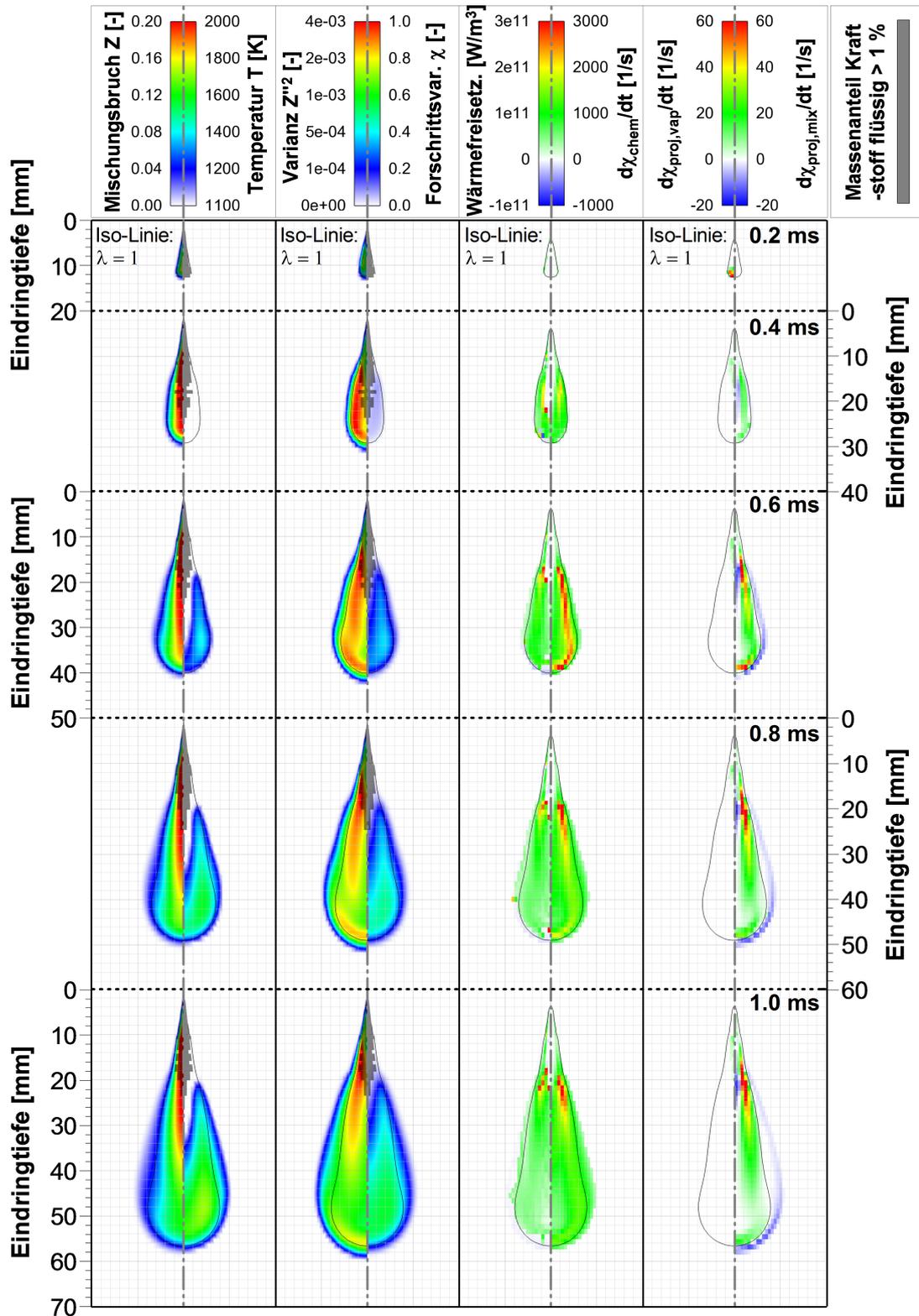


Abbildung 6.13: Lokale Auswertung der Temperatur, des Mischungsbruchs und dessen Varianz, der Fortschrittsvariable, der Wärmefreisetzungsrate sowie des chemischen Quellterms und der Projektionsterme der Fortschrittsvariable bei $\rho_{ini} = 30 \text{ kg/m}^3$, $T_{ini} = 750^\circ\text{C}$, $X_{O_2} = 14.5 \text{ Vol-\%}$, $\rho_{rail} = 2000 \text{ bar}$. Die vollständigen Randbedingungen sind in Kapitel 7.2.2 in Tab. 7.1 unter Betriebspunkt 2 aufgelistet.

wird auf die räumliche Trennung von Verdampfungs- und Zündprozessen hingewiesen. Daher weisen schon Projektionsterme basierend auf Mittelwerten kleine Beträge auf und es gilt näherungsweise $\bar{\rho}^s \chi'' \approx 0$. Die Resultate des Projektionsterms aus der Verdampfung in Abb. 6.13 bestätigen diese Annahmen.

Werden die obigen Näherungen in Gleichung (6.99) eingesetzt, kann die Favre-gemittelte Erhaltungsgleichung für die Reaktionsfortschrittsvariable schließlich als

$$\begin{aligned}
 \underbrace{\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{\chi}}{\partial t}}_{\text{zeitl. Änderung}} + \underbrace{\nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{u} \tilde{\chi})}_{\text{Konvektion}} = & \underbrace{\nabla \cdot \left(\bar{\rho} D \nabla \tilde{\chi} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \nabla \tilde{\chi} \right)}_{\text{Diffusion}} + \underbrace{\bar{\rho} \tilde{\chi}^c}_{\text{chem. Quellterm}} \\
 & + \underbrace{\left(\tilde{\chi} + \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \tilde{\chi}} \tilde{Y}_i + \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \tilde{\chi}} \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \tilde{\beta}_j} \tilde{\beta}_j \right)}_{\text{Projektionsterm: Verdampfung}} \bar{\rho}^s \\
 & + \underbrace{\frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \tilde{\chi}} \nabla \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \tilde{\beta}_j} \left(\bar{\rho} D \nabla \tilde{\beta}_j + \frac{\mu_t}{Sc_t} \nabla \tilde{\beta}_j \right)}_{\text{Projektionsterm: Mischung}}. \quad (6.114)
 \end{aligned}$$

geschrieben werden. In Gleichung (6.114) sind die Terme für zeitliche Änderung, Konvektion und Diffusion in bekannter Form dargestellt. Diese werden beim Lösen der Erhaltungsgleichung vom CFD-Code standardmäßig bilanziert. Der chemische Quellterm wird mit Hilfe der Bibliothek in Abhängigkeit der Library-Parameter bestimmt. Aufgrund von Verdampfung und Mischung müssen zusätzlich zwei Projektionsterme berechnet werden. Diese gewährleisten, dass der reduzierte und detaillierte Zustandsvektor ineinander überführbar sind und sich auf der tabellierten Mannigfaltigkeit befinden.

6.4.5 Spezielle gemittelte Erhaltungsgleichung der Fortschrittsvariable

Für die Verwendung von Gleichung (6.114) im CFD-Code müssen beide Projektionsterme berechnet werden. Hierfür werden mit Hilfe der Fortschrittsvariablen-Bibliothek die partiellen Ableitungen $\partial \hat{Y}_i / \partial \chi$ und $\partial \hat{Y}_i / \partial \beta_j$ bestimmt. Somit sind alle Größen des Verdampfungs-Projektionsterm bekannt und es gilt

$$\bar{\rho}_{\tilde{\chi}}^s = \left(\tilde{\chi} + \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \tilde{\chi}} \tilde{Y}_i + \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \tilde{\chi}} \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \tilde{\beta}_j} \tilde{\beta}_j \right) \bar{\rho}^s \quad (6.115)$$

Die Berechnung des Mischungs-Projektionsterms gestaltet sich etwas aufwendiger. Im Wesentlichen sind alle Größen bekannt, jedoch ist die Berechnung der Ortsableitung einer Größe im kommerziellen CFD-Code StarCD eine Herausforderung, da diese standardmäßig in den user-subroutinen nicht zur Verfügung steht. Beim reduzierten Zustandsvektor $\tilde{\beta}_j$ mit den Parametern \tilde{Z}''^2 , \tilde{Z} , T_{ox} , ξ_{egr} , \bar{p} sind deshalb nur $\nabla \tilde{Z}''^2$ und $\nabla \tilde{Z}$ bekannt, da für diese Skalare Erhaltungsgleichungen gelöst werden. Schwieriger wird es bei den partiellen Ableitungen $\partial \hat{Y}_i / \partial \beta_j$, weil hier für die Gradientenbestimmung jeweils zusätzlich eine Erhaltungsgleichung eingeführt werden müsste. Bei 7 Spezies und 5 Komponenten des reduzierten Zustandsvektors

wären das insgesamt 35 zusätzliche Transportgleichungen. Um den Rechenaufwand zu minimieren, werden folgende Annahmen getroffen. Für die Komponenten $\widetilde{Z}''^2, \widetilde{Z}, T_{ox}, \xi_{egr}, \bar{p}$ des reduzierten Zustandsvektors gelten näherungsweise:

- $\nabla \bar{p}$: Der Druckausgleich im Brennraum ist im Vergleich zum Speziestransport sehr schnell. Daher sind die Gradienten sehr klein und es gilt näherungsweise $\nabla \bar{p} \approx 0$.
- $\nabla \xi_{egr}$: Die Restgasverteilung wird im Rahmen dieser Arbeit stets im gesamten Brennraum als homogen vorgegeben, weshalb hier exakt $\nabla \xi_{egr} = 0$ gilt.
- Die Gradienten $\nabla \widetilde{Z}''^2, \nabla \widetilde{Z}, \nabla T_{ox}$ sind insbesondere während der Einspritzung des Dieselmotors in den Brennraum hoch, weshalb keine Vereinfachungen gemacht werden können.

Für die partiellen Ableitungen $\partial \hat{Y}_i / \partial \beta_j$ gelten nach Analyse der Abbildungen 6.20 bis 6.24 folgende Annahmen:

- $\nabla(\partial \hat{Y}_i / \partial \widetilde{Z}''^2)$: Die Varianz des Mischungsbruchs \widetilde{Z}''^2 wirkt vorwiegend auf die chemischen Zeitskalen, also auf den chemischen Quellterm der Reaktionsfortschrittsvariable $\tilde{\chi}^c$. Nur sehr hohe Varianzen ($\widetilde{Z}''^2 > 10^{-3}$) ändern auch direkt die Spezieskomposition, da hierbei die PDF-Integration über einen weiten Mischungsbruchbereich durchgeführt wird (Abbildungen 6.14 bis 6.16), d. h. $\nabla(\partial \hat{Y}_i / \partial \widetilde{Z}''^2) \approx 0$.
- $\nabla(\partial \hat{Y}_i / \partial T_{ox})$: Die Änderungen des Speziesvektors mit Variation der Oxidatortemperatur T_{ox} im Vergleich zur Variation des Mischungsbruchs \widetilde{Z} sind sehr gering und es gilt $\nabla(\partial \hat{Y}_i / \partial T_{ox}) \ll \nabla(\partial \hat{Y}_i / \partial \widetilde{Z})$ und somit $\nabla(\partial \hat{Y}_i / \partial T_{ox}) \approx 0$.
- $\nabla(\partial \hat{Y}_i / \partial \widetilde{Z})$: Abgesehen vom chemischen Fortschritt ist eine Änderung des Speziesvektors meist mit einer Änderung des Mischungsbruchs verknüpft, weshalb hier keine Vereinfachung möglich ist.

Mit diesen Annahmen lässt sich eine Näherung für die mischungsbedingte Änderung der Reaktionsfortschrittsvariable $\tilde{\chi}$ ableiten:

$$\begin{aligned}
 & \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \tilde{\chi}} \nabla \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \beta_j} \left(\bar{\rho} D \nabla \tilde{\beta}_j + \frac{\mu_t}{Sc_t} \nabla \tilde{\beta}_j \right) = \left(\bar{\rho} D + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \left[\frac{\partial \hat{Y}_1}{\partial \tilde{\chi}} \quad \dots \quad \frac{\partial \hat{Y}_{N_s}}{\partial \tilde{\chi}} \right] \cdot \dots \\
 & \dots \begin{bmatrix} \nabla \frac{\partial \hat{Y}_1}{\partial \widetilde{Z}''^2} & \nabla \frac{\partial \hat{Y}_1}{\partial \widetilde{Z}} & \nabla \frac{\partial \hat{Y}_1}{\partial T_{ox}} & \nabla \frac{\partial \hat{Y}_1}{\partial \xi_{egr}} & \nabla \frac{\partial \hat{Y}_1}{\partial \bar{p}} \\ \nabla \frac{\partial \hat{Y}_2}{\partial \widetilde{Z}''^2} & \nabla \frac{\partial \hat{Y}_2}{\partial \widetilde{Z}} & \nabla \frac{\partial \hat{Y}_2}{\partial T_{ox}} & \nabla \frac{\partial \hat{Y}_2}{\partial \xi_{egr}} & \nabla \frac{\partial \hat{Y}_2}{\partial \bar{p}} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \nabla \frac{\partial \hat{Y}_{N_s}}{\partial \widetilde{Z}''^2} & \nabla \frac{\partial \hat{Y}_{N_s}}{\partial \widetilde{Z}} & \nabla \frac{\partial \hat{Y}_{N_s}}{\partial T_{ox}} & \nabla \frac{\partial \hat{Y}_{N_s}}{\partial \xi_{egr}} & \nabla \frac{\partial \hat{Y}_{N_s}}{\partial \bar{p}} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \nabla \widetilde{Z}''^2 \\ \nabla \widetilde{Z} \\ \nabla T_{ox} \\ \nabla \xi_{egr} \\ \nabla \bar{p} \end{bmatrix} \\
 & = \left(\bar{\rho} D + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \left[\frac{\partial \hat{Y}_1}{\partial \tilde{\chi}} \quad \dots \quad \frac{\partial \hat{Y}_{N_s}}{\partial \tilde{\chi}} \right] \cdot \begin{bmatrix} 0 & \nabla \frac{\partial \hat{Y}_1}{\partial \widetilde{Z}} & \approx 0 & \nabla \frac{\partial \hat{Y}_1}{\partial \xi_{egr}} & \nabla \frac{\partial \hat{Y}_1}{\partial \bar{p}} \\ 0 & \nabla \frac{\partial \hat{Y}_2}{\partial \widetilde{Z}} & \approx 0 & \nabla \frac{\partial \hat{Y}_2}{\partial \xi_{egr}} & \nabla \frac{\partial \hat{Y}_2}{\partial \bar{p}} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \nabla \frac{\partial \hat{Y}_{N_s}}{\partial \widetilde{Z}} & \approx 0 & \nabla \frac{\partial \hat{Y}_{N_s}}{\partial \xi_{egr}} & \nabla \frac{\partial \hat{Y}_{N_s}}{\partial \bar{p}} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \nabla \widetilde{Z}''^2 \\ \nabla \widetilde{Z} \\ \nabla T_{ox} \\ 0 \\ \approx 0 \end{bmatrix} \\
 & \approx \left(\bar{\rho} D + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \left[0 \quad \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \tilde{\chi}} \nabla \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \widetilde{Z}} \quad 0 \quad \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \tilde{\chi}} \nabla \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \xi_{egr}} \quad \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \tilde{\chi}} \nabla \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \bar{p}} \right] \cdot \begin{bmatrix} \nabla \widetilde{Z}''^2 \\ \nabla \widetilde{Z} \\ \nabla T_{ox} \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}
 \end{aligned}$$

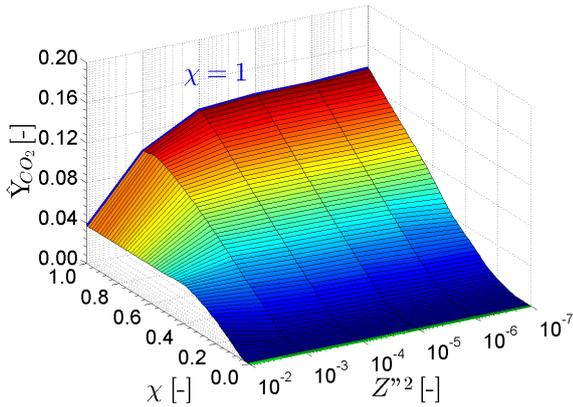


Abbildung 6.14: Tabellenwert \hat{Y}_{CO_2} im χ - Z''^2 -Raum als Fläche für $Z = Z_{st}$, $T_{ox} = 1000$ K, $\xi_{egr} = 0$ %, $p = 100$ bar.

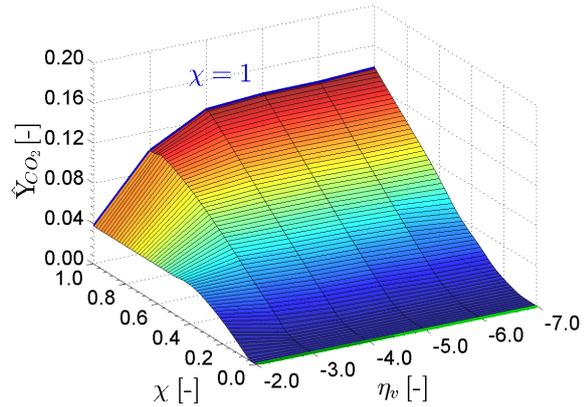


Abbildung 6.15: Tabellenwert \hat{Y}_{CO_2} im χ - η_v -Raum als Fläche für $Z = Z_{st}$, $T_{ox} = 1000$ K, $\xi_{egr} = 0$ %, $p = 100$ bar.

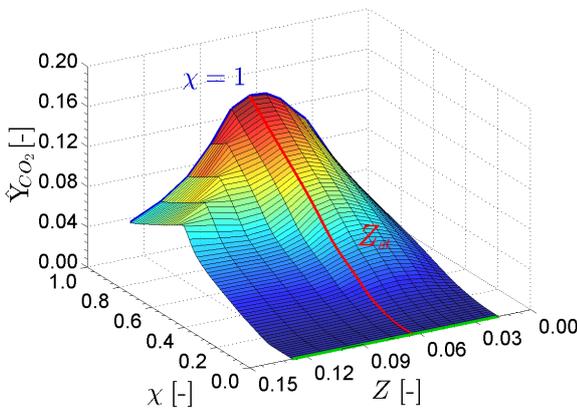


Abbildung 6.16: Tabellenwert \hat{Y}_{CO_2} im χ - Z -Raum als Fläche für $Z''^2 = 10^{-7}$, $T_{ox} = 1000$ K, $\xi_{egr} = 0$ %, $p = 100$ bar.

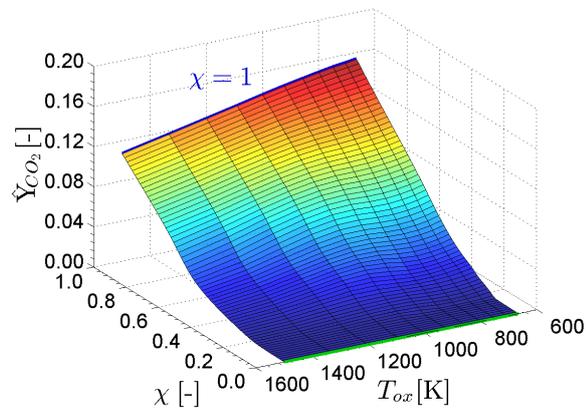


Abbildung 6.17: Tabellenwert \hat{Y}_{CO_2} im χ - T_{ox} -Raum als Fläche für $Z''^2 = 10^{-7}$, $Z = Z_{st}$, $\xi_{egr} = 0$ %, $p = 100$ bar.

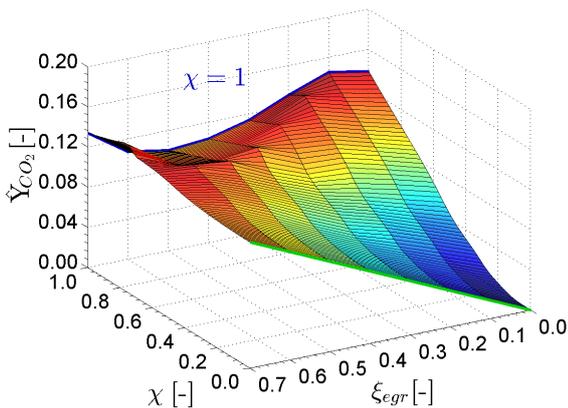


Abbildung 6.18: Tabellenwert \hat{Y}_{CO_2} im χ - ξ_{egr} -Raum als Fläche für $Z''^2 = 10^{-7}$, $Z = Z_{st}$, $T_{ox} = 1000$ K, $p = 100$ bar.

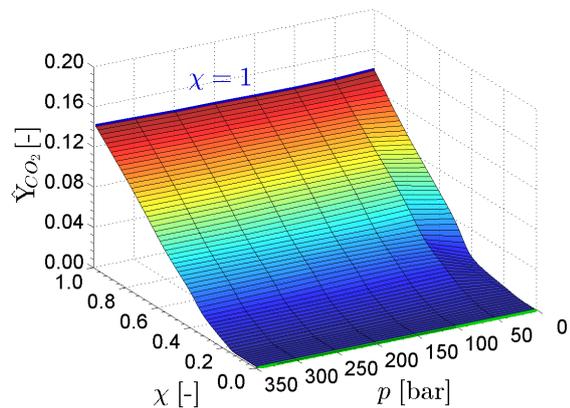


Abbildung 6.19: Tabellenwert \hat{Y}_{CO_2} im χ - p -Raum als Fläche für $Z''^2 = 10^{-7}$, $Z = Z_{st}$, $T_{ox} = 1000$ K, $\xi_{egr} = 0$ %.

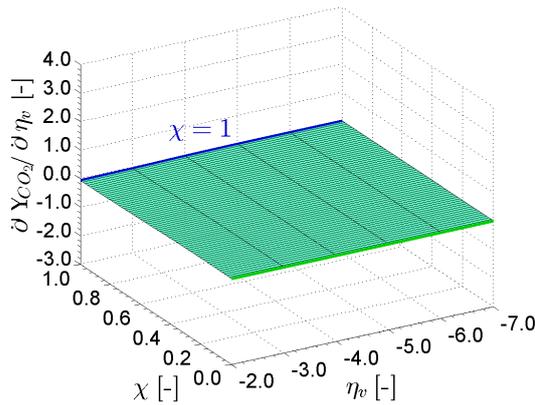


Abbildung 6.20: Auswertung $\partial \hat{Y}_{CO_2} / \partial \eta_v$ im χ - η_v -Raum als Fläche für $Z = Z_{st}$, $T_{ox} = 1000$ K, $\xi_{egr} = 0$ %, $p = 100$ bar.

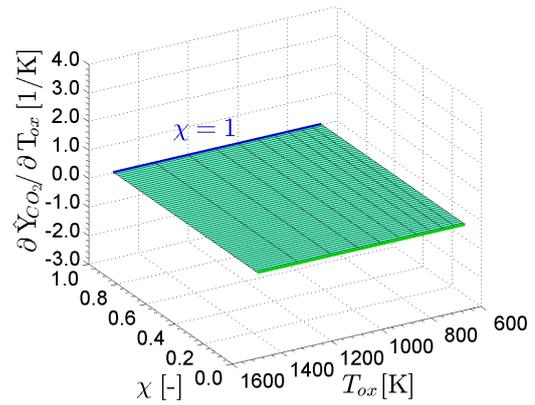


Abbildung 6.21: Auswertung $\partial \hat{Y}_{CO_2} / \partial T_{ox}$ im χ - T_{ox} -Raum als Fläche für $Z''^2 = 10^{-7}$, $Z = Z_{st}$, $\xi_{egr} = 0$ %, $p = 100$ bar.

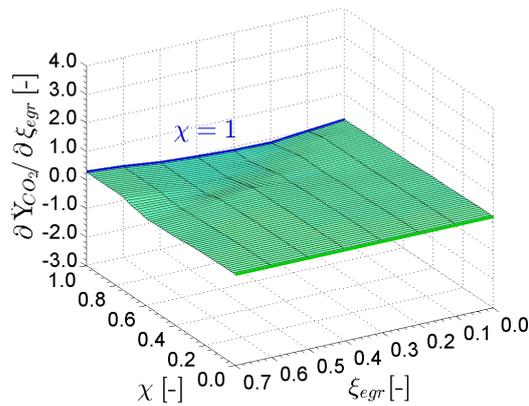


Abbildung 6.22: Auswertung $\partial \hat{Y}_{CO_2} / \partial \xi_{egr}$ im χ - ξ_{egr} -Raum als Fläche für $Z''^2 = 10^{-7}$, $Z = Z_{st}$, $T_{ox} = 1000$ K, $p = 100$ bar.

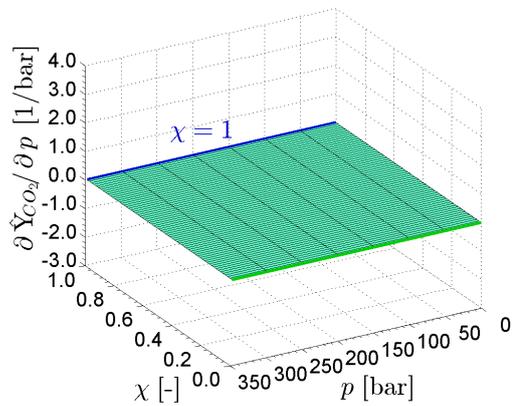


Abbildung 6.23: Auswertung $\partial \hat{Y}_{CO_2} / \partial p$ im χ - p -Raum als Fläche für $Z''^2 = 10^{-7}$, $Z = Z_{st}$, $T_{ox} = 1000$ K, $\xi_{egr} = 0$ %.

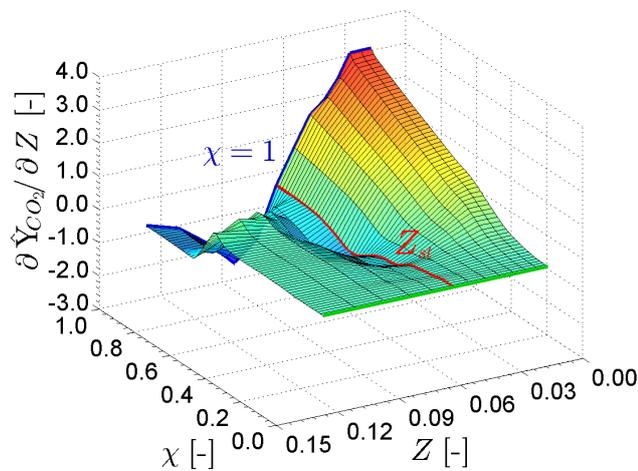


Abbildung 6.24: Auswertung $\partial \hat{Y}_{CO_2} / \partial Z$ im χ - Z -Raum als Fläche für $Z''^2 = 10^{-7}$, $T_{ox} = 1000$ K, $\xi_{egr} = 0$ %, $p = 100$ bar.

$$\Rightarrow \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \tilde{\chi}} \nabla \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \tilde{\beta}_j} \left(\bar{\rho} D \nabla \tilde{\beta}_j + \frac{\mu_t}{S_{c_t}} \nabla \tilde{\beta}_j \right) \approx \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \tilde{\chi}} \nabla \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \tilde{Z}} \left(\bar{\rho} D \nabla \tilde{Z} + \frac{\mu_t}{S_{c_t}} \nabla \tilde{Z} \right) \quad (6.116)$$

Demzufolge kann unter Vernachlässigung der molekularen Diffusion eine *spezielle* Erhaltungsgleichung der mittleren Fortschrittsvariable formuliert werden als

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{\chi}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{u} \tilde{\chi}) &= \nabla \cdot \left(\frac{\mu_t}{S_{c_t}} \nabla \tilde{\chi} \right) + \bar{\rho} \tilde{\chi}^c + \left(\tilde{\chi} + \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \tilde{\chi}} \tilde{Y}_i + \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \tilde{\chi}} \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \tilde{\beta}_j} \tilde{\beta}_j \right) \tilde{\rho}^s \\ &+ \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \tilde{\chi}} \nabla \frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial \tilde{Z}} \frac{\mu_t}{S_{c_t}} \nabla \tilde{Z}. \end{aligned} \quad (6.117)$$

Mit Gleichung (6.117) führen Änderungen der reduzierten Koordinaten $\tilde{\beta}_j$ sowie der sieben Hauptspezies \tilde{Y}_i direkt zur Korrektur der Reaktionsfortschrittsvariable. Damit ist gewährleistet, dass physikalische Vorgänge wie Mischung und Verdampfung, die in den tabellierten Trajektorien nicht enthalten sind und somit im Allgemeinen weg von der Mannigfaltigkeiten führen, durch die Projektion in Richtung der Fortschrittsvariable immer wieder auf die Mannigfaltigkeiten zurück gelangen.

6.5 Erweitertes 7-Spezies-PDF-Timescale Modell

Das 7-Spezies-PDF-Timescale Modell aus [126] wurde in Kapitel 5.2.7 vorgestellt. Den Ausgangspunkt des Modells liefert die mittlere chemische Reaktionsrate der Spezies i als Differentialquotient

$$\tilde{\rho}_i^c = \bar{\rho} \frac{d\tilde{Y}_i}{dt} = -\bar{\rho} \frac{\tilde{Y}_i - \tilde{Y}_i^*}{\bar{\tau}}. \quad (6.118)$$

\tilde{Y}_i^* entspricht einem beliebigen Referenzzustand der Spezieskonzentration i und $\bar{\tau}$ einer allgemeinen Zeitskala, die den Zeitraum bis zum Erreichen des Referenzzustands angibt. In [126] wird der Referenzzustand \tilde{Y}_i^* mit

$$\tilde{Y}_i^* = \int_Z Y_i^*(Z) P_Z dZ \quad (6.119)$$

angegeben, wobei die Gleichgewichtsmassenbrüche im Mischungsbruchraum $Y_i^*(Z)$ auf Basis unendlich schneller Chemie bei gegebenem mittlerem Druck \bar{p} und Restgasrate ξ_{egr} bestimmt werden. Für diese Berechnung wird die Favre-gemittelte Temperatur \tilde{T} verwendet:

$$Y_i^*(Z) = f_{eq}(Z, \tilde{T}) \quad (6.120)$$

Dies stellt nur eine Näherung dar, da die Temperatur im Mischungsbruchraum nicht konstant ist, was Abb. 6.25 für verschiedene Restgasraten illustriert. Der Fehler wird mit steigender Mischungsinhomogenität größer.

Zur Steigerung der Modellqualität soll anstatt der Favre-gemittelten Temperatur \tilde{T} die Gleichgewichtstemperatur im Mischungsbruchraum $T^{(eq)}(Z)$ verwendet werden, d. h.

$$Y_i^{(eq)}(Z) = f_{eq}(Z, T^{(eq)}(Z)). \quad (6.121)$$

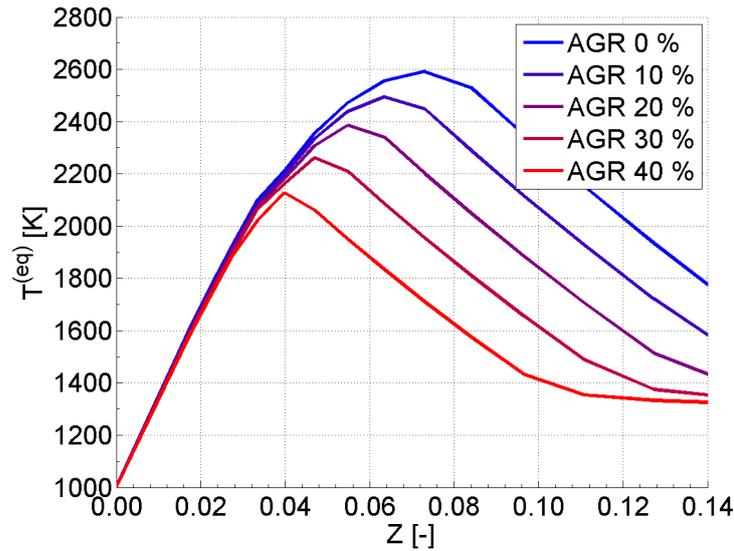


Abbildung 6.25: Gleichgewichtstemperatur $T^{(eq)}$ ($\chi = 1$) im Mischungsbruchraum Z für verschiedene AGR-Raten ($Z''^2 = 10^{-7}$, $T_{ox} = 1000$ K, $p = 100$ bar).

Folgende Modifikation der Berechnungsmethodik ist dazu notwendig. Damit die Gleichgewichtstemperatur im Mischungsbruchraum berechnet werden kann, muss der Speziesvektor $Y_i^{(0)}(Z)$ und die Temperatur $T^{(0)}(Z)$ im Unverbrannten im gesamten Mischungsbruchraum bekannt sein. Alternativ zur Anfangstemperatur und weitaus vorteilhafter ist die Verwendung der thermischen Enthalpie $h_{th}^{(0)}(Z)$ im Anfangszustand. Im CFD-Code wird die Energieerhaltung mit Gleichung (4.40) und die Erhaltungsgleichung (5.15) für den mittleren Mischungsbruch gelöst. Somit ist stets die Favre-gemittelte spezifische Enthalpie \tilde{h} beim mittleren Mischungsbruch \tilde{Z} bekannt. Unter Verwendung des Zusammenhangs einer linearen Mischung¹⁹ gilt bei gegebener Kraftstofftemperatur T_f und damit spezifischen Enthalpie h_f

$$\tilde{h} = h_{ox} \cdot (1 - \tilde{Z}) + h_f \cdot \tilde{Z}. \quad (6.122)$$

Nach der spezifischen Enthalpie des Oxidators h_{ox} aufgelöst, ergibt sich

$$h_{ox} = \frac{\tilde{h} - h_f \cdot \tilde{Z}}{1 - \tilde{Z}} \quad (6.123)$$

womit sich für den gesamten Mischungsbruchraum die spezifische Enthalpie $h(Z)$ berechnen lässt

$$h(Z) = h_{ox} \cdot (1 - Z) + h_f \cdot Z. \quad (6.124)$$

Auf gleiche Weise kann der Speziesvektor im Unverbrannten $Y_i^{(0)}(Z)$ bestimmt werden, da sowohl die Speziesmassenbrüche des Oxidators $Y_{ox,i}$ bei $Z = 0$ als auch die des Kraftstoffs $Y_{f,i}$ bei $Z = 1$ bekannt sind. Beide Speziesvektoren bleiben über die chemische Reaktion hinweg unverändert, d. h. $Y_{ox,i} = Y_{ox,i}^{(0)} = Y_{ox,i}^{(eq)}$ und $Y_{f,i} = Y_{f,i}^{(0)} = Y_{f,i}^{(eq)}$. Somit gilt

$$Y_i^{(0)}(Z) = Y_{ox,i} \cdot (1 - Z) + Y_{f,i} \cdot Z. \quad (6.125)$$

¹⁹vgl. Gleichung (6.16)

Dieser Speziesvektor wird u. a. benötigt, um die spezifische thermische Enthalpie im Unverbrannten $h_{th}^{(0)}(Z)$ mit

$$h_{th}^{(0)}(Z) = h(Z) - \sum_{i=1}^{N_s} \Delta h_{f,298,i}^0 \cdot Y_i^{(0)}(Z) \quad (6.126)$$

zu berechnen. Für die spezifische thermische Enthalpie im Gleichgewicht $h_{th}^{(eq)}(Z)$ gilt

$$h_{th}^{(eq)}(Z) = \sum_{i=1}^{N_s} h_{th,i}(T^{(eq)}(Z)) \cdot Y_i^{(eq)}(Z). \quad (6.127)$$

Die Summe der Änderung der Bildungsenthalpien muss gleich der Differenz der spezifischen thermischen Enthalpien im Gleichgewichts- und Anfangszustand sein. Das unterliegt der Vorstellung, dass die chemische gebundene Enthalpie in thermische Enthalpie umgewandelt wird. Die dazugehörige Bedingung lautet

$$\left(h_{th}^{(eq)}(Z) - h_{th}^{(0)}(Z) \right) - \sum_{i=1}^{N_s} \Delta h_{f,298,i}^0 \cdot \left(Y_i^{(0)}(Z) - Y_i^{(eq)}(Z) \right) \stackrel{!}{=} 0. \quad (6.128)$$

Das entspricht der Forderung, dass die (totale) spezifische Enthalpie über die chemische Reaktion konstant sein muss. Gleichung (6.128) wird mit Hilfe einer Newton-Iteration bei gegebenen Anfangsbedingungen $h_{th}^{(0)}(Z)$ und $Y_i^{(0)}(Z)$ gelöst. Innerhalb der Iteration wird für jeden Schritt über den gesamten Mischungsbruchraum mit einem analytischem Gleichgewichtslöser der Speziesvektor $Y_i^{(eq)}(Z)$ für die Gleichgewichtstemperatur $T^{(eq)}(Z)$ bestimmt. Die Gleichgewichtstemperatur $T^{(eq)}(Z)$ wird so lange korrigiert, bis obige Bedingung erfüllt ist. Die anschließende Integration des Speziesvektors $Y_i^{(eq)}(Z)$ mit

$$\tilde{Y}_i^{(eq)} = \int_Z Y_i^{(eq)}(Z) P_Z dZ = \int_Z f_{eq}(Z, T^{(eq)}(Z)) P_Z dZ \quad (6.129)$$

liefert den neuen Referenzzustand für das 7-Spezies-PDF-Timescale Modell. Die mittlere chemische Reaktionsrate der Spezies i als Differentialquotient lautet nun

$$\tilde{\rho}_i^c = -\bar{\rho} \frac{\tilde{Y}_i - \tilde{Y}_i^{(eq)}}{\bar{\tau}}. \quad (6.130)$$

Der neue Ansatz ermöglicht darüber hinaus eine Definition einer Ersatzfortschrittsvariable $\tilde{\chi}_h$, die für die Kopplung mit dem oben vorgestellten Fortschrittsvariablen-Modell notwendig ist.

6.6 Kopplung Fortschrittsvariablen- und erweitertes 7-Spezies-PDF-Timescale Modell

Das Fortschrittsvariablen-Modell birgt einen unvermeidbaren Nachteil, den alle Bibliotheks-Modelle teilen: der Parameterbereich, in dem sie gültig sind und einen Zugriff auf die abgelegten Werte ermöglichen, ist endlich. Die Randbedingungen bspw. einer Hochdruckeinspritzkammer²⁰

²⁰vgl. Kapitel 7.2

sind verhältnismäßig konstant, so dass durch den limitierten Parameterbereich nahezu keine Einschränkungen entstehen. Für die Simulation innermotorischer Verbrennungsprozesse von Hubkolbenmotoren kann die Bibliothek so dimensioniert werden, dass sich die Größen χ , Z , Z'^2 , ξ_{egr} und p stets innerhalb der Grenzen der Bibliothek bewegen. Für die Oxidortemperatur T_{ox} ist dies nicht möglich. Die Oxidortemperatur wird nach Gleichung (6.17) mit Hilfe der Enthalpie h_{ox} und des Speziesvektors des Oxidators $Y_{ox,i}$ bestimmt. Dabei wird die spezifische Enthalpie des Kraftstoffs $h_f(T_f = 330 \text{ K})$ entsprechend des unteren Heizwerts von zertifiziertem Diesel konstant vorgegeben. Dies unterliegt der Annahme, dass der flüssige Kraftstoff stets mit gleicher Temperatur eingespritzt wird, was näherungsweise der Fall ist.

Während der Diffusionsverbrennung in der späten Expansionsphase nachdem der eingespritzte Kraftstoff schon größtenteils umgesetzt wurde, ist es nicht mehr sinnvoll den thermodynamischen Zustand vor Beginn der Reaktionen zu berechnen, sofern die Kolbenmaschine Arbeit verrichtet hat. Physikalische Oxidortemperaturen T_{ox} lassen sich nicht mehr bestimmen. Zu diesem Zeitpunkt sind aufgrund der höheren Druckdifferenz bei jeweils gleichem Betrag des Kurbelwinkels vor und nach OT die Enthalpiedifferenzen größer. Des Weiteren geht über den Arbeitsprozess hinweg Energie über die Wand verloren, was auch einen Anteil an der größeren Enthalpiedifferenz in der Expansion hat. Vereinfacht lautet die Problematik wie folgt: Energie wird in Form von Kraftstoff in der Nähe des oberen Totpunkts in den Brennraum eingebracht. Dieser wird nahezu vollständig umgesetzt und der Expansionsprozess startet auf einem höheren Druck- und Temperaturniveau. In der Expansion reduziert sich gegenüber der Kompression aufgrund der höheren Temperatur und der Gemischzusammensetzung des Arbeitsgases der polytropen Exponent. Das Druckverhältnis wird damit in der Expansion kleiner als in der Kompression. Dennoch ist aufgrund $pV^n \approx \text{const.}$ die Druckdifferenz in der Expansion größer. Benötigt ein Bibliotheks-Modell als Parameter die Temperatur des unverbrannten Gemischs oder wie hier die des Oxidators, kann es in der Expansionsphase nicht mehr genutzt werden, da sich unphysikalische Anfangsbedingungen für die Temperatur vor der Reaktion ergeben. Eine Möglichkeit wäre die Verwendung der Werte bei der niedrigsten tabellierten Oxidortemperatur, was jedoch willkürlich erscheint.

Stattdessen wird die Kopplung des Fortschrittsvariablen-Modells mit dem erweiterten 7-Spezies-PDF-Timescale Modell vorgezogen, da sich das 7-Spezies-PDF-Timescale Modell in der Vergangenheit während der Diffusionsverbrennung bewährt hat [127]. In dieser Phase der Verbrennung sind die chemischen Zeitskalen sehr klein ($\tau_{chem} \ll \tau_{turb}$), wodurch das Fortschrittsvariablen-Modell gegenüber dem 7-Spezies-PDF-Timescale Modell keinen nennenswerten Mehrwert liefert. Hier ist die Verwendung des Arrhenius-Ansatzes für die allgemeine chemische Zeitskala weitgehend unkritisch [126]. Für die Umschaltung vom Fortschrittsvariablen-Modell auf das erweiterte 7-Spezies-PDF-Timescale Modell bietet es sich an, eine *Ersatzfortschrittsvariable* zu definieren, so dass die Information über den Reaktionsfortschritt auch bei Verwendung des PDF-Timescale Modells verfügbar ist. Die Definition der Ersatzfortschrittsvariable $\tilde{\chi}_h$ orientiert sich an [71, 29] und gilt strenggenommen nur für kleine Mach-Zahlen, Lewis-Zahl gleich eins und adiabate Flammen. Im erweiterten 7-Spezies-PDF-Timescale Modell lautet diese für eine gegebene Oxidortemperatur T_{ox}

$$\tilde{\chi}_h \equiv \frac{\tilde{h}_{th}(\tilde{Z}) - \tilde{h}_{th}^{(0)}(\tilde{Z})}{\tilde{h}_{th}^{(eq)}(\tilde{Z}) - \tilde{h}_{th}^{(0)}(\tilde{Z})}, \quad (6.131)$$

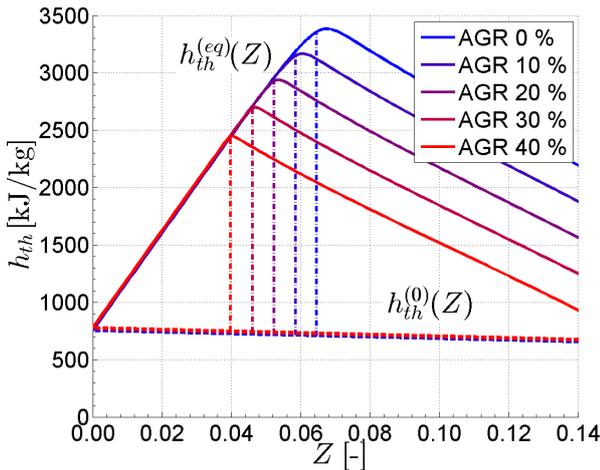


Abbildung 6.26: Thermische Enthalpie über dem Mischungsbruch des Gemischs im Ausgangszustand $h_{th}^{(0)}(Z)$ und im Gleichgewichtszustand $h_{th}^{(eq)}(Z)$ für verschiedene AGR-Raten ($Z''^2 = 10^{-7}$, $T_{ox} = 1000$ K, $p = 100$ bar).

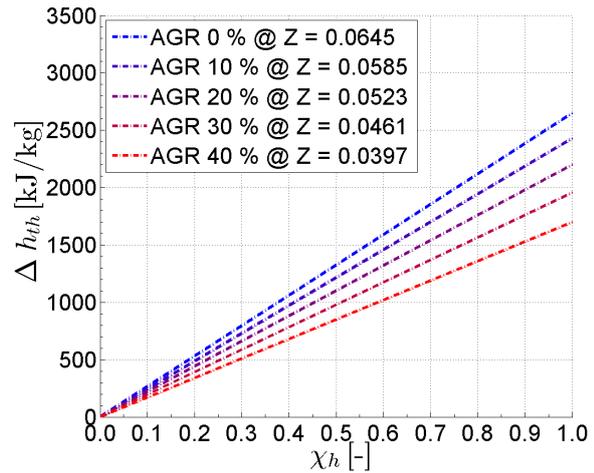


Abbildung 6.27: Differenz der thermischen Enthalpien $h_{th}^{(eq)}(Z) - h_{th}^{(0)}(Z)$ beim jeweiligen stöchiometrischen Mischungsbruch über der Ersatzfortschrittsvariable χ_h für verschiedene AGR-Raten ($Z''^2 = 10^{-7}$, $T_{ox} = 1000$ K, $p = 100$ bar).

was gleichbedeutend ist mit

$$\tilde{\chi}_h = \frac{\sum_{i=1}^{N_s} \Delta h_{f,298,i}^0 \cdot (\tilde{Y}_i - \tilde{Y}_i^{(0)})}{\sum_{i=1}^{N_s} \Delta h_{f,298,i}^0 \cdot (\tilde{Y}_i^{(eq)} - \tilde{Y}_i^{(0)})}. \quad (6.132)$$

$\tilde{\chi}_h$ ist somit ein Indikator für das Verhältnis zwischen bereits freigewordener und noch chemisch gebundener Enthalpie. Durch die direkte Bilanzierung der Speziesmassenbrüche, werden implizit alle Konvektions- und Diffusionsvorgänge sowie die Verdampfung von Kraftstoff mitberücksichtigt. Findet ein Phasenübergang von Flüssig- zur Gasphase statt, erhöht das die chemisch gebundene Energie, wodurch die Ersatzfortschrittsvariable kleiner wird. Abbildungen 6.26 und 6.27 illustrieren die Zusammenhänge dieser Definition für verschiedene Restgasraten.

Aufgrund der unterschiedlichen Definitionen des Reaktionsfortschritts ist die Fortschrittsvariable $\tilde{\chi}$ nicht in die Ersatzfortschrittsvariable $\tilde{\chi}_h$ überführbar. Daher kommt es zwangsweise zu einer Unstetigkeit bei der Umschaltung vom Fortschrittsvariablen-Modell auf das erweiterte 7-Spezies-PDF-Timescale Modell im Verlauf der Reaktion. Die Umschaltung findet kurz nach der Hauptzündung statt, wo die Reaktionsraten groß und die chemischen Zeitskalen klein sind. Als Umschaltzeitpunkt wird $\tilde{\chi} = 0.3$ gewählt. Dort liegen beide Zeitskalen in einer ähnlichen Größenordnung. Es kann jedoch nicht gewährleistet werden, dass die Reaktionsraten der Spezies beider Modelle identisch sind. Die Gleichgewichtskonzentrationen $\tilde{Y}_i^{(eq)}$ beider Modelle stimmen zwar überein, doch während die chemische Zeitskala τ_{chem} im Fortschrittsvariablen-Modell implizit in der Rate der Fortschrittsvariable enthalten ist und sich aus den Homogene-Reaktor-Rechnungen ergibt, wird diese im PDF-Timescale Modell „nur“ mit einem Arrhenius-Ansatz berechnet. Der Vergleich der Zeitskalen ist in Abb. 6.29 dargestellt und zeigt beim Umschaltzeitpunkt jeweils kleine Differenzen. Aufgrund der hohen Reaktionsraten spielen diese Abweichungen und die damit verbundene Unstetigkeit eine eher untergeordnete Rolle.

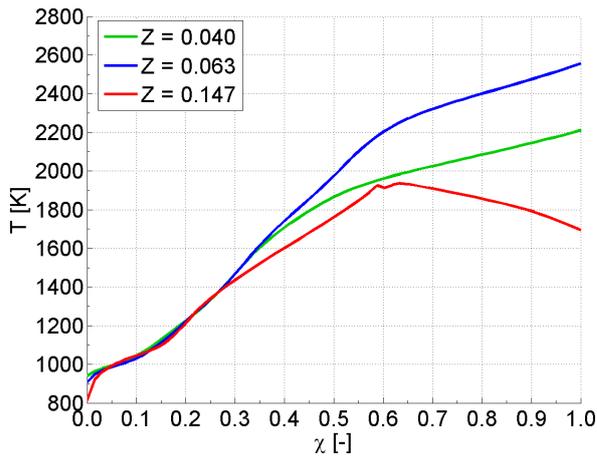


Abbildung 6.28: Temperaturverläufe über dem Reaktionsfortschritt ausgehend von $\chi = 0$ bis $\chi = 1$ für 3 Mischungsbrüche ($Z''^2 = 10^{-7}$, $T_{ox} = 1000$ K, $\xi_{egr} = 0\%$, $p = 100$ bar).

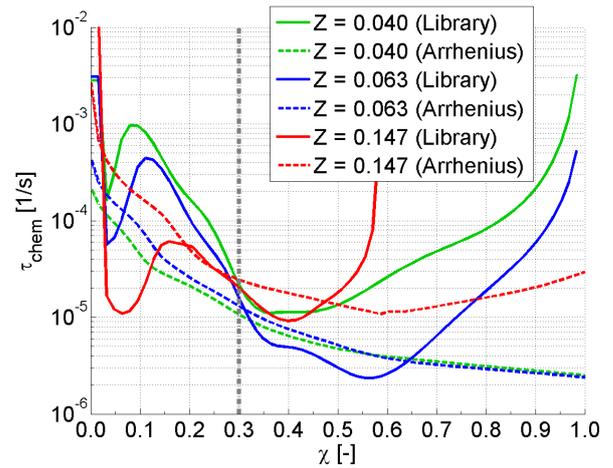


Abbildung 6.29: Vergleich der chemischen Zeitskala τ_{chem} aus der Bibliothek mit dem Arrhenius-Ansatz über Reaktionsfortschritt für 3 Mischungsbrüche ($Z''^2 = 10^{-7}$, $T_{ox} = 1000$ K, $\xi_{egr} = 0\%$, $p = 100$ bar).

Bei der Verdampfung von Kraftstoff kann der Wert der Ersatzfortschrittsvariable $\tilde{\chi}_h$ unter die Umschaltgrenze fallen. Um ein ständiges Umschalten zwischen den Modellen zu vermeiden, wird eine Art „Hysterese“ eingeführt. Die Umschaltung vom Fortschrittsvariablen-Modell auf das PDF-Timescale Modell findet bei einem höheren Wert statt als das die Umschaltung zurück. Die notwendige Differenz zwischen den Werten wurde anhand einer Sensitivitätsanalyse bestimmt und empirisch auf $\Delta\tilde{\chi}_b = 0.2$ festgelegt. Dies unterliegt der Vorstellung, dass nur dann ein Zündverzögerung nochmals berechnet werden muss, wenn durch die Verdampfung so eine große Menge Kraftstoff vorhanden ist, dass der bisherige Reaktionsverlauf nur eine untergeordnete Rolle spielt. Im anderen Fall verdampft zwar ebenfalls Kraftstoff, doch wird diese geringe Menge direkt umgesetzt, sofern genügend Sauerstoff vorhanden ist.

Erst die Umschaltung vom Fortschrittsvariablen-Modell auf das erweiterte 7-Spezies-PDF-Timescale Modell ermöglicht die 3D-CFD-Simulation einer dieselmotorische Verbrennung ausgehend von der Berechnung der Selbstzündung, über die Vormischverbrennung hin zur Diffusionsverbrennung bis in die späte Expansion hinein. Die Annahmen bei der Umschaltung vom einen auf das andere Modell sind dabei nicht kritischer zu bewerten als bspw. die Umschaltung vom PDF-Zündmodell [129] auf das 7-Spezies-PDF-Timescale Modell. Letzteres hat sich trotz ähnlicher Annahmen zur Simulation der dieselmotorischen Verbrennung bewährt [127].

6.7 PDF-NO-Modell

In Abschnitt 5.3.1 wird die starke Temperaturabhängigkeit der thermischen NO-Bildung hervorgehoben und somit die Temperatur als eine der wichtigsten Eingangsparameter in NO-Bildemodellen identifiziert. Hier wird vorausgesetzt, dass der reaktionskinetische Konstantensatz für die Arrhenius-Gleichungen aus [123] sowie die Annahme des partiellen Gleichgewichts für die Radikale O, H und OH nach [45] unter der Annahme von Quasistationarität für den molekularen Stickstoff N zulässig sind.

6.7.1 Temperaturfunktion im Mischungsbruchraum

Im erweiterten 7-Spezies-PDF-Timescale Modell wird der Referenzzustand $Y_i^{(eq)}(Z)$ für den gesamten Mischungsbruchraum mit einem analytischem Gleichgewichtslöser berechnet. Dafür wird u. a. die Gleichgewichtstemperatur $T^{(eq)}(Z)$ iterativ bestimmt, womit implizit die spezifische thermische Enthalpie im Gleichgewichtszustand $h_{th}^{(eq)}(Z)$ bekannt ist. Gleichung (6.128) ist zu entnehmen, dass dafür auch die spezifische thermische Enthalpie $h_{th}^{(0)}(Z)$ im Unverbrannten benötigt wird, welche sich leicht mit den Gleichungen (6.126) bis (6.122) berechnen lässt. Bei Verwendung der Definition der Ersatzfortschrittsvariable $\tilde{\chi}_h$ kann basierend auf den Gleichungen (6.131) und (6.132) die spezifische thermische Enthalpie $h_{th}^*(Z)$

$$h_{th}^*(Z) = \tilde{\chi}_h \cdot \left(h_{th}^{(eq)}(Z) - h_{th}^{(0)}(Z) \right) + h_{th}^{(0)}(Z) \quad (6.133)$$

und der Speziesvektor $Y_i^*(Z)$

$$Y_i^*(Z) = \tilde{\chi}_h \cdot \left(Y_i^{(eq)}(Z) - Y_i^{(0)}(Z) \right) + Y_i^{(0)}(Z) \quad (6.134)$$

bestimmt werden. Letztlich kann so die Temperatur $T^*(Z)$ mit

$$h_{th}^*(Z) = \sum_{i=1}^{N_s} h_{th,i}(T^*(Z)) \cdot Y_i^*(Z) \quad (6.135)$$

iterativ ermittelt werden. Wie in Abschnitt 6.6 beschrieben, ist es in der Expansionsphase nicht möglich im ganzen Mischungsbruchraum ausgehend von einer spezifischen thermischen Enthalpie eine physikalisch sinnvolle Temperatur zu berechnen. Daher wird zuvor eine untere Temperaturgrenze von 500 K eingeführt und entsprechend die spezifische Enthalpie

$$h_{th}^{(lim)}(Z) = \sum_{i=1}^{N_s} h_{th,i}(T = 500 \text{ K}) \cdot Y_i^*(Z) \quad (6.136)$$

limitiert. Unterhalb dieser Enthalpiegrenze wird die Iteration nicht durchgeführt. Diese Bereiche sind für die NO-Bildung ohnehin irrelevant. Unter diesen Annahmen ist somit eine Temperaturfunktion bekannt

$$T^*(Z) = f^*(h_{th}^*(Z), Y_i^*(Z)) \quad \text{mit} \quad h_{th}^*(Z) \geq h_{th}^{(lim)}(Z), \quad (6.137)$$

die als Eingangsparameter für ein Stickoxid-Modell verwendet werden kann.

6.7.2 Stickoxidverteilung im Mischungsbruchraum

Eine Verwendung der in Abschnitt 3.4.1 (A) beschriebenen NO-Reaktionspfade mit Favre-gemittelten Spezieskonzentrationen in Verbindung mit einer Temperaturfunktion im Mischungsbruchraum ist nicht sinnvoll. Ein im Mischungsbruchraum homogen verteiltes NO würde zu einer Überschätzung der NO-Bilderraten in Stöchiometrienähe führen. Dort gebildetes NO würde immer im gesamten Mischungsbruchraum verteilt und die NO-Gleichgewichtskonzentration nie bzw. sehr langsam erreicht werden. Nur eine NO-Verteilung im Mischungsbruchraum kann

dem entgegen wirken. Basierend auf den Formulierungen von CMC-Modellen²¹ [59, 29] wird ein stark vereinfachter Ansatz für die Berechnung der NO-Verteilung hergeleitet. Dazu werden zunächst im Mischungsbruchraum konditionierte Stickoxidanteile mit

$$\begin{aligned}\rho_\zeta \Psi_{\text{NO}}(\vec{x}, t; \zeta) &= \overline{\langle \rho Y_{\text{NO}}(\vec{x}, t) | Z(\vec{x}, t) = \zeta \rangle} \\ &= \overline{\langle \rho Y_{\text{NO}} | \zeta \rangle}\end{aligned}\quad (6.138)$$

eingeführt, für die Erhaltungsgleichungen im physikalischen Raum gelöst werden [70]. Im Ortsraum werden damit konvektive und diffusive Transportprozesse der konditionierten Stickoxidanteile berechnet. Die mittlere NO-Konzentration lautet

$$\bar{\rho} \tilde{Y}_{\text{NO}} = \int_Z \overline{\langle \rho Y_{\text{NO}} | \zeta \rangle} P_Z dZ = \int_Z \rho_\zeta \Psi_{\text{NO}}(\vec{x}, t; \zeta) P_Z dZ, \quad (6.139)$$

für die ebenfalls eine Transportgleichungen gelöst wird. Im Gegensatz zu CMC-Modellen werden jedoch im Mischungsbruchraum alle konvektiven und diffusiven Transportprozesse der konditionierten NO-Anteile vernachlässigt. Dadurch können die konditionierten NO-Quellterme mit

$$\frac{\partial \Psi_{\text{NO}}}{\partial t} = \langle \dot{\omega}_{\text{NO}}(\Psi_{\text{NO}}, Y_i^*(\zeta), T^*(\zeta)) | \zeta \rangle = \dot{\omega}_{\text{NO}}(\Psi_{\text{NO}}, Y_i^*(\zeta), T^*(\zeta)) \quad (6.140)$$

berechnet werden. Dabei werden der Speziesvektor $Y_i^*(\zeta)$ und die Temperatur $T^*(\zeta)$ im Mischungsbruchraum mit dem Ansatz aus dem vorherigen Abschnitt bestimmt. Die Vernachlässigung der konvektiven und diffusiven Transportprozesse im Mischungsbruchraum führt zu einer Verletzung des Zusammenhangs aus Gleichung (6.139), sofern sich die Mischungsbruch-PDF P_Z ändert. Zur Korrektur kann laut [59] die β -PDF P_Z zur „Umverteilung“ der konditionierten Größen genutzt, da diese im Mischungsbruchraum nur für $P_Z > 0$ sinnvoll definiert sind:

$$\rho_\zeta \Psi_{\text{NO}}^*(\vec{x}, t; \zeta) = \overline{\langle \rho Y_{\text{NO}}^* | \zeta \rangle} = \frac{\overline{\langle \rho Y_{\text{NO}} | \zeta \rangle}}{P_Z} \quad (6.141)$$

Mit den normierten NO-Massenanteilen werden die Quellterme entsprechend

$$\frac{\partial \Psi_{\text{NO}}^*}{\partial t} = \dot{\omega}_{\text{NO}}(\Psi_{\text{NO}}^*, Y_i^*(\zeta), T^*(\zeta)) \quad (6.142)$$

berechnet. Letztlich ergeben sich damit NO-Verteilungen, die als Eingangsgröße für ein Stickoxid-Modell verwendet werden können. Durch die Normierung mit der Mischungsbruch-PDF ist gewährleistet, dass der Wechsel zwischen Orts- und Mischungsbruchraum konservativ erfolgt und die Quellterme in geeigneter Form berücksichtigt werden. Werden die Quellterme aus Gleichung (6.142) in Gleichung (6.139) eingesetzt, lautet der der Favre-gemittelte NO-Quellterm schließlich

$$\bar{\rho} \tilde{Y}_{\text{NO}} = \int_Z \rho_\zeta \dot{\omega}_{\text{NO}}(\Psi_{\text{NO}}^*, Y_i^*(\zeta), T^*(\zeta)) P_Z dZ. \quad (6.143)$$

Dabei wird angenommen, dass die Oxidatortemperaturen für $Z = 0$ stets so niedrig sind, dass dort keine Stickoxidbildung stattfindet. Die NO-Anteile werden entsprechend der Diskretisierung der Mischungsbruch-PDF im Z -Raum konditioniert. Somit wird die NO-Verteilung im Mageren mit sechs Stützstellen zwischen $Z = 0$ und $Z = Z_{st}$ aufgelöst. Für Mischungsbrüche $Z > Z_{st}$

²¹vgl. Anhang Abschnitt (A)

wird eine weitere Stützstelle eingeführt. Dies unterliegt der Vorstellung, dass im Fetten unter Sauerstoffmangel keine nennenswerte thermische Stickoxidbildung stattfindet [81].

Der Modellansatz lässt sich insbesondere mit dem erweiterten 7-Spezies-PDF-Timescale Modell sehr gut kombinieren. Die Transportprozesse im Mischungsbruchraum sind strikt an die Mischungsbruch-PDF gekoppelt und die Konvektion und Diffusion werden nur stark vereinfacht berücksichtigt. Diese Annahmen können bei der Bestimmung der NO-Verteilung in Verbindung mit hohen Prozesstemperaturen bei Brennverfahren mit niedrigen Restgasraten dazu führen, dass die Stickoxidbildung zu früh ihr Gleichgewicht erreicht. Dennoch wird gegenüber dem zuvor verwendeten Stickoxidmodell mit Favre-gemittelten Temperaturen als Eingangsparameter die Güte durch die Verwendung der NO-Verteilung in Verbindung mit der Temperaturfunktion im Mischungsbruchraum deutlich gesteigert.

6.8 Numerische Umsetzung

Der CFD-Code StarCD v3.26 ist ein kommerzieller Berechnungscode, der die Implementierung neuer Modelle nur über sogenannte *user-subroutines* mit Standard-Schnittstellen zulässt [17]. Um die Erhaltungsgleichung für die Fortschrittsvariable (6.117) in den CFD-Code zu integrieren, muss zunächst ein neuer Skalar definiert werden. Ebenso müssen die partiellen Ableitungen $\partial \tilde{Y}_i / \partial \tilde{Z}$ als Skalare eingeführt werden, da auch deren Gradienten berechnet werden müssen. Die zeitliche Änderung, die Konvektion und Diffusion wird *Star-intern* berechnet. Die Quellterme müssen über die Standard-Schnittstellen übergeben werden. Entweder über die Routine *sorsca.f*, die innerhalb des Druckkorrekturverfahrens die Quellterme einkoppelt oder über die *posdat.f*, die zu Beginn und am Ende jedes Zeitschritts aufgerufen wird. Während es sich empfiehlt die chemischen und Verdampfungs-Quellterme innerhalb der Druckkorrektur einzukoppeln, müssen jegliche Berechnungen der Projektionsterme aufgrund von Mischung in der *posdat.f* am Ende des Zeitschritts durchgeführt werden, da die Kalkulationen verhältnismäßig viel Rechenzeit in Anspruch nehmen. Die zusätzlichen Korrekturterme werden dann für den nächsten Zeitschritt bereitgestellt und bei der Berechnung des chemischen Quellterms hinzuaddiert.

Zur Bestimmung des chemischen Quellterms der Fortschrittsvariable sowie des Speziesvektors wird mit den Momentanwerten für $\tilde{\chi}$, \tilde{Z} , \tilde{Z}''^2 , T_{ox} , ξ_{egr} und \bar{p} die Bibliothek aufgerufen. Dabei findet zunächst eine Überprüfung statt, ob die Werte innerhalb der Tabellengrenzen liegen. Liegt eine Größe außerhalb, wird der entsprechende ober oder untere Grenzwert verwendet. Beim mittleren Mischungsbruch ist eine Modifikation dieser Vorgehensweise notwendig, da der Parameterbereich „nur“ bis ca. $Z = 0.018$ reicht²². Um auch für Mischungsbrüche $Z < 0.018$ Reaktionsraten zu erhalten, wird eine kubische Extrapolation bis $Z_{min} = 10^{-4}$ eingeführt. Dazu werden die Reaktionsraten bei den ersten zwei Stützstellen ausgelesen und bei Z_{min} gleich Null definiert. Damit können chemische Zündverzögerungen auch in sehr mageren Bereichen berechnet werden. Es muss zusätzlich eine Limitierung der Rate für den Quellterm der Fortschrittsvariable eingeführt werden, da der physikalische Zeitschritt unter Umständen so groß sein kann, dass mit der Rate aus der Bibliothek der Wert der Fortschrittsvariable im nächsten Zeitschritt größer 1 wäre, was definitionsgemäß unphysikalisch ist.

²²siehe Tab. 6.1

7 Validierung der Zünd-, Verbrennungs- und Schadstoffmodelle

Die Validierung der Modelle erfolgt in dieser Arbeit einerseits anhand von Hochtemperaturkammernmessungen und andererseits anhand eines direkteinspritzenden Nfz- und Pkw-Dieselmotors. Bei der Gegenüberstellung der Simulationsergebnisse mit den Hochgeschwindigkeitsaufnahmen der Hochtemperaturkammer werden neben der Strahlaufweitung und -eindringtiefe insbesondere der Zündverzug und die Lift-Off Länge verglichen. Die Simulationen der motorischen Fälle werden jeweils mit Hilfe der Wärmefreisetzungsraten während der Zünd-, Vormisch- und Diffusionsphase verifiziert. Außerdem werden die gemessenen und simulierten Rohemissionen Ruß und NO_x verglichen. Die Gemischbildung, Zündung, Verbrennung und Schadstoffbildung werden lokal ausgewertet und ausführlich diskutiert.

7.1 Vernetzung, Modellauswahl und Initialisierung

Zur numerischen Lösung der Erhaltungsgleichungen aus Abschnitt 4.2.5 müssen Anfangs- und Randbedingungen sowie das Berechnungsgitter zur Ortsdiskretisierung problemspezifisch definiert werden. Der CFD-Code StarCD v3.26 löst die Gleichungen mittels einem Finiten-Volumen-Verfahren auf blockstrukturierten, hexagonalen Gittern [17]. Zur Reduktion des Rechenaufwands werden bei der Rechenetzherstellung Symmetriebedingungen genutzt. Bei der Simulation eines Einspritzstrahls in die Hochdruckkammer wird bspw. angenommen, dass der Strahl rotationssymmetrisch ist und deshalb nur ein 0.5° -Sektor als Rechengitter erstellt. Bei motorischen Simulationen mit zentraler Injektorlage bietet der im wesentlichen rotations-symmetrische Brennraum unter Vernachlässigung von Geometriedetails¹ die Möglichkeit das Rechenetz auf einen Sektor zu beschränken. Für Konfigurationen mit 7-Loch-Einspritzdüsen wird dazu ein 51.43° -Sektor erstellt und somit nur ein Einspritzstrahl berechnet. Die Schadvolumina des Zylinderkopfes und des Kolbens werden in diesem Fall durch eine Erhöhung der Quetschspalthöhe abgebildet. Durch die größere Quetschspalthöhe bildet sich jedoch im Vergleich zur nominellen Quetschspalthöhe mit detailliertem Zylinderkopf eine etwas andere Quetschspaltströmung aus. Um den Auftreffpunkt des Strahls auf die Muldenkante nicht zu verändern, wird der Düsenüberstand² entsprechend erhöht. Das aus der Druckverlaufsanalyse³ bekannte thermodynamische Kompressionsverhältnis wird über die Modifikation des Feuerstegvolumens eingestellt. Um das Eindringverhalten der Flüssig- und Gasphase sowie den Strahlwinkel des Einspritzstrahls abzubilden, müssen strahlangepasste Netze verwendet werden [65]. Des Weiteren wurde in [84] demonstriert, dass so insbesondere im Düsenbereich eine Netzunabhängigkeit erreicht werden kann und die relevanten turbulenten Längenskalen aufgelöst werden können. Die korrekte Vorhersage der Gemischbildung ist Grundvoraussetzung für die Validierung der nachfolgenden reaktiven Prozesse wie Zündung, Verbrennung und Schadstoffbildung. Abbildungen 7.1 und 7.2 zeigen das strahlangepasste Rechengitter der Hochdruckkammer und des Pkw-Motors mit ca. 100.000 Zellen im UT.

¹Ventilrückstände im Zylinderkopf und Ventiltaschen im Kolben

²Abstand Düsenspitze zu Zylinderkopf

³kurz: DVA

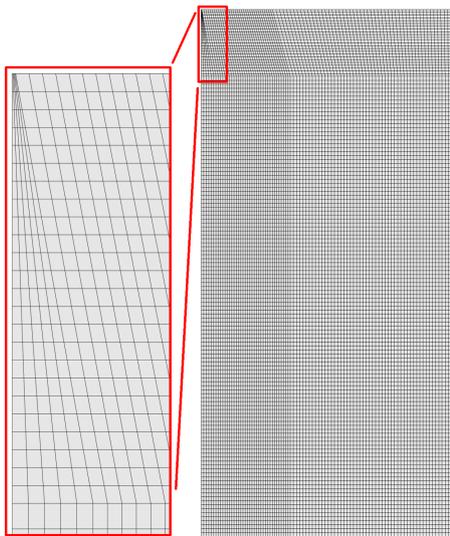


Abbildung 7.1: 2D-Kammernetz mit strahlangepasstem Bereich.

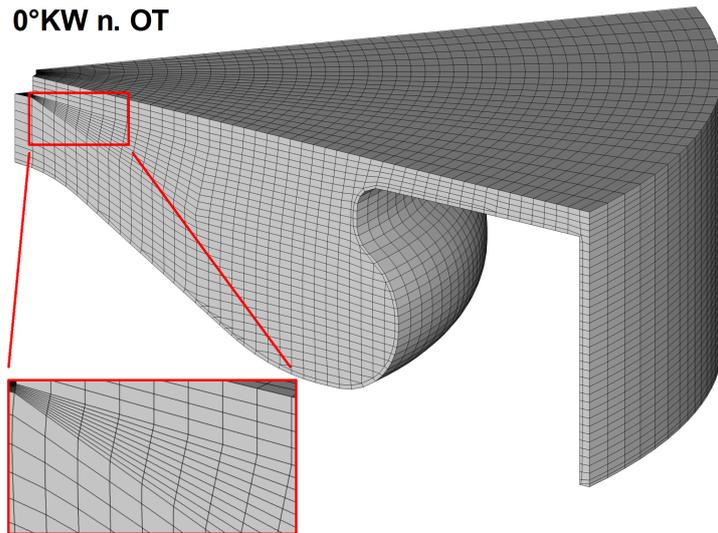


Abbildung 7.2: 3D-Sektornetz (ca. 51.43°) mit strahlangepasstem Bereich im OT.

Mit Hilfe von Ladungswechselsimulationen des jeweiligen Motors und Betriebspunkts werden zur Initialisierung des Strömungsfeldes im Brennraum in der frühen Kompressionsphase (120°KW vor OT) die mittlere Drallzahl (Blockprofil), die mittlere turbulente kinetische Energie und die mittlere Längenskala ermittelt. Durch die Initialisierung mit integralen Werten gehen Informationen über lokale Inhomogenitäten, die sich bereits während des Ladungswechsels ausbilden, verloren. In der Hochtemperaturkammer liegt keine gerichtete Strömung vor und das Gasgemisch wird mit einer Umgebungsturbulenz von $5 \text{ m}^2/\text{s}^2$ und einer Längenskala von 0.5 mm initialisiert.

Die Zusammensetzung des Brennraumgases wird über sieben repräsentative Spezies (Kraftstoffdampf, O_2 , N_2 , CO_2 , H_2O , CO , H_2) abgebildet. Die Konzentrationen der sieben Spezies werden im motorischen Fall a priori aus plausibilisierten Luft-, AGR- und Abgasmessungen der Einzylinderaggregate analytisch bestimmt und zu Beginn der Simulation homogen initialisiert. Somit ist sichergestellt, dass für die Zünd-, Verbrennungs- und insbesondere Schadstoffbildungsprozesse das Luft-Abgas-Gemisch möglichst exakt der Messung entspricht. Der Zusammenhang zwischen Druck, Volumen, Masse, Gaskonstante und Temperatur im Brennraum ist durch die ideale bzw. reale Gasgleichung gegeben [144]. Das Brennraumvolumen bei Simulationsbeginn ist durch die Volumenfunktion gegeben, die Gaskonstante ergibt sich aus der Gemischzusammensetzung der sieben Spezies und der Realgaskorrektur. Die Ladungsmasse im Brennraum ist wie der Druck ebenfalls aus der thermodynamischen Analyse der Messung bekannt und wird deshalb mittels Skalierung der Temperatur eingestellt.

Die hohen Brennraumdrücke gegen OT stauchen den Pleuel und dehnen den Brennraum. Das Brennraumvolumen wird im Vergleich zum Volumen aus dem Kurbeltriebgesetz größer und reduziert damit das effektive Kompressionsverhältnis. Zur Beschreibung der Bauteilverformung wird eine konstante Abhängigkeit dz/dp als Näherung verwendet. Die Kolbenstellung wird folglich bei gegebener Druckdifferenz dp um die Höhe dz korrigiert [144, 126].

Zur Berechnung der innermotorischen Strömungsvorgänge werden die Erhaltungsgleichungen der Gasphase aus Kapitel 4.2.5 sowie die für den Mischungsbruch und dessen Varianz aus Abschnitt 5.2.2 gelöst. 3D-CFD-Simulationen mit dem Fortschrittsvariablen-Modell beinhalten die Erweiterungen aus Kapitel 6.8. Realgaseffekte werden nach [144] berücksichtigt.

Die Modellierung der dieselmotorischen Gemischbildung erfolgt nach dem in Kapitel 5.1.2 vorgestelltem ICAS-Konzept auf strahladaptiven Netzen, wobei nur der Sekundärzerfall der Tropfen mit dem Wave-Breakup-Modell nach [113] simuliert wird. Für den Primärzerfall gilt die Annahme, dass die Zerstäubung des Strahls in feine Tropfen bereits direkt am Düsenaustritt erfolgt. Der zeitliche Verlauf des Einspritzmassenstroms wird vorgegeben. Der Impulsstrom ergibt sich über die Vorgabe des Kontraktionsbeiwerts. Die strahl- bzw. problemspezifischen Modellparameter wie z. B. Strahlwinkel oder ICAS-Länge wurden nach [65] ermittelt. Für die Tropfenanzahldichte wird am Düsenaustritt eine χ -squared Verteilung angenommen, die als Modellparameter den mittleren Tropfendurchmesser benötigt. Dieser beträgt erfahrungsgemäß $1/10$ des Düsenlochradius [65].

Als Basis für den Vergleich der Zünd- und Verbrennungsmodelle wird zur Berechnung der Zündung und Wärmefreisetzung das in Abschnitt 5.2.6 beschriebene PDF-Zündmodell aus [129] in Kombination mit dem 7-Spezies-PDF-Timescale Verbrennungsmodell aus [126] verwendet. Beide Modelle liegen in leicht modifizierter Form vor. Beim Zündmodell wird anstatt einer globalen eine lokale Oxidatortemperatur berechnet. Mit Erreichen des vordefinierten Zündkriteriums ($\tilde{Y}_{ign} = 0.02$) wird das Verbrennungsmodell aktiviert. Eine Adaption der Modellparameter ist nicht notwendig. Die Modifikation des 7-Spezies-PDF-Timescale Modells ist in Kapitel 6.5 beschrieben. Die globale chemische Zeitskala $\bar{\tau}_{chem}$ wird weiterhin mit dem empirischen Arrhenius-Ansatz aus Gleichung (5.28) bestimmt [126]. Der präexponentielle Faktor A muss zur Abbildung der Vormischverbrennung motorspezifisch angepasst werden. Diese Modellkette ist bei der Daimler AG seit Jahren erfolgreich im Einsatz [145, 94, 89]. Alternativ wird das in dieser Arbeit entwickelte Fortschrittsvariablen-Modell (PDF-Progress) zur Berechnung der Zünd- und Vormischphase genutzt. Dieses Modell enthält implizit die chemischen Zeitskalen und bedarf deshalb keine Modellparameter zur Skalierung der Reaktionsraten. Wie in Kapitel 6.6 beschrieben, wird für die Berechnung der Diffusionsverbrennung ab einem Reaktionsfortschritt von 0.3 auf das erweiterte 7-Spezies-PDF-Timescale Modell umgeschaltet. Nach der Umschaltung werden die Reaktionsraten mit der globalen chemischen Zeitskala bestimmt. Der präexponentielle Faktor A wird gegenüber der obigen Modellkette nicht modifiziert.

Zur Simulation der Rußemissionen wird das in Kapitel 5.3.2 beschriebene Flamelet Ruß-Modell aus [89] eingesetzt. Dessen Modellparameter werden nicht variiert. Die thermische NO-Bildung wird mit dem im Kapitel 5.3.1 beschriebenen erweiterten Zeldovich-Mechanismus mit GRI-MECH 3.0-Konstantensatz modelliert. Jedoch geht nicht die mittlere Zelltemperatur in das Modell ein, sondern die im erweiterten 7-Spezies-PDF-Timescale Modell berechnete Temperatur im Mischungsbruchraum. Der Ansatz des PDF-NO-Modells ist in Abschnitt 6.7 beschrieben.

Der Wandwärmeübergang im Zylinder setzt sich aus einem konvektiven und einem Strahlungsanteil zusammen. In der vorliegenden Arbeit wird der Strahlungsanteil nicht explizit modelliert, sondern dem konvektiven Wärmeübergangskoeffizienten zugeschlagen. Die Berechnung des resultierenden Wärmestroms erfolgt mit dem Newton'schen Ansatz für Konvektion [126]. Der Brennraum wird hierfür in drei Bereiche unterteilt: Kolben, Zylinderkopf und vom Kolben freigegebener Teil der Laufbuchse. Die Temperaturen werden zeitlich und örtlich konstant angenommen. Die Berechnung des Wandwärmeübergangskoeffizienten erfolgt in dieser Arbeit mit dem Ansatz von *Han* und *Reitz* [41]. Wichtig ist die Übereinstimmung des integralen Wärmeübergangs von CFD-Modell mit dem aus der DVA aus dem ersten Hauptsatz der Thermodynamik. Dazu wird in dieser Arbeit der globale Wärmeübergangskoeffizient motorspezifisch angepasst.

7.2 Simulation einer Hochdruck - Hochtemperatur- Einspritzkammer

Bei der Hochdruck-Hochtemperatur-Einspritzkammer handelt es sich um einen Druckbehälter mit optischem Zugang, in dem für definierte Atmosphären Gemischbildung und Verbrennung einzelner Einspritzvorgänge untersucht werden können. Die Analysen erfolgen an einem einzelnen Freistrahle, wodurch die Rückwirkung benachbarter Einspritzstrahlen (diese werden ab- bzw. umgelenkt), sowie die Strahl-Wand-Interaktion ausgeschlossen werden. Außerdem kann bspw. die Variation der Sauerstoffkonzentration von einer Dichteviation entkoppelt werden. Mittels einer Wasserstoff-Sauerstoff-Vorverbrennung wird eine zur Verdampfung und Zündung des Einspritzstrahles definierte Atmosphärentemperatur (wie z. B. am Einzylindermotor zum Einspritzzeitpunkt) erreicht [153]. Eine detaillierte Beschreibung der Kammer und Versuchsdurchführung findet sich unter [9, 152].

7.2.1 Übersicht der Betriebsparameter

In [152] werden die Randbedingungen Dichte, Temperatur und Sauerstoffkonzentration variiert und deren Einfluss auf den Zündverzug, die Lift-Off Länge sowie die Rußbilde- und oxidationsprozesse am brennenden Freistrahle mittels optischer Diagnostikmethoden analysiert. Vor der Diskussion der Wirkmechanismen der Parametervariation werden zunächst die Unterschiede der Randbedingungen in der Hochdruckkammer und im Einzylinderversuchsmotor verglichen und deren Einfluss auf die Modellvalidierung beschrieben.

Die Restgaszusammensetzung im Versuchsmotor hängt im wesentlichen vom C-H-Verhältnis des Kraftstoffs und globalen Luftverhältnis⁴ ab. Dabei besteht der Oxidator vor der Einspritzung je nach AGR-Rate beim 7-Spezies-Modell aus O_2 , N_2 , CO_2 , H_2O , CO und H_2 . Wie bei anderen Bibliotheksmodellen entspricht beim Fortschrittsvariablenmodell reines Restgas der Abgaszusammensetzung einer stöchiometrischen Verbrennung mit idealer Luft [89]. Somit lässt sich die Spezieskomposition des Oxidators eindeutig anhand eines Parameters, der sogenannten *Library-AGR*⁵ ξ_{egr} , bestimmen. Diese Definition erlaubt keine beliebige Spezieskomposition des Oxidators. Die Speziesvektoren bei Reaktionsfortschritt gleich Null müssen den tabellierten Werten entsprechen. Für motorische Fälle stellt dies keine Einschränkung dar, da die Gemischzusammensetzung des Oxidators stets der oben beschriebenen Logik folgt.

Durch gezielte Befüllung der Kammer ist es möglich die Sauerstoffkonzentration für das Experiment zu wählen. Dazu werden die Partialdrücke von H_2 , O_2 und N_2 so eingestellt, dass sich die gewünschte Sauerstoffkonzentration nach der Vorverbrennung ergibt, wobei hier ca. 10 Vol-% H_2O entstehen. Entsprechend der gewünschten O_2 -Konzentration, ergibt sich der Anteil von N_2 . Demnach setzt sich nach Konditionierung der Kammer durch die Wasserstoff-Sauerstoff-Vorverbrennung das Gemisch kurz vor der Einspritzung aus O_2 , N_2 , H_2O zusammen und entspricht damit nicht der Gemischzusammensetzung eines Einzylinderaggregats nach schließen des Einlassventils [152].

Entscheidend für die Gegenüberstellung der Zündverzugszeiten und Lift-Off- Längen der Kammermessungen mit den Simulationen sind letztlich die Sauerstoffkonzentration und die

⁴vgl. Kapitel 2.2.2

⁵vgl. Kapitel 6.3

Umgebungstemperaturen des Gemischs. Beide Größen haben großen Einfluss auf die chemischen Prozesse und die adiabate Flammentemperatur⁶. Daher wird die Sauerstoffkonzentration bei der Simulation mit dem Fortschrittsvariablenmodell über den Restgashalt ξ_{egr} mit der Messung gleichgestellt. Die resultierenden Gaskonstanten und spezifischen Wärmekapazitäten des jeweiligen Gemischs sind ähnlich. Die Auswirkungen dieser Differenzen können in dieser Arbeit nicht quantifiziert werden. Deshalb wird angenommen, dass die Unterschiede in den spezifischen Wärmekapazitäten einen vernachlässigbaren Einfluss auf die Transportprozesse haben. Die durch die Kraftstoffeinspritzung eingebrachte Energie ist im Vergleich zur Wärmekapazität des Gases in der Kammer so gering, dass dadurch der Fehler in der mittleren Druck- und Temperaturerhöhung durch die Verbrennung sehr klein wird. Die Temperaturen in den Reaktionszonen sind überwiegend vom lokalen Mischungsbruch und damit der Gemischzusammensetzung beim jeweiligen Reaktionsfortschritt abhängig.

Des Weiteren ist die Dichte zum Einspritzbeginn wichtig für die Strahlaufweitung und Eindringtiefe der Strahlspitze und somit für die Gemischbildung [65]. Um eine gute Übereinstimmung der Gemischbildung zu gewährleisten, muss die Dichte exakt dem Experiment entsprechen. Bei Vorgabe der Dichte, der Temperatur sowie der jeweiligen Komposition (Messung / Simulation) in der Hochdruckkammer weicht aufgrund der unterschiedlichen Gemischzusammensetzung der Initialisierungsdruck zwischen Messung und Simulation etwas ab. Für die ausgewählten Betriebspunkte sind die Betriebsparameter der Hochdruckkammer und Simulationen in Tab. 7.1 und 7.2 aufgeführt.

7.2.2 Validierung der Gemischbildung

Bevor das Fortschrittsvariablenmodell anhand der Gegenüberstellung der Zündverzugszeiten und Lift-Off Längen von Messungen und Simulationen sowie lokalen Analysen bewertet wird, muss unter der Voraussetzung, dass die Betriebsparameter hinreichend genau bekannt sind, zunächst die Gemischbildung verifiziert werden. Diese bildet die Basis für die nachfolgende Zündung und Verbrennung. Es muss sichergestellt werden, dass die in dieser Arbeit verwendeten Modelle für Primär- und Sekundärzerfall mit den jeweiligen Standardparametern benutzt werden können. Dazu werden die Eindringtiefe der Flüssig- und Gasphase ausgewertet und verglichen. Besonders geeignet sind hierfür die Betriebspunkte 1 bis 3 aus Tab. 7.1 der Raildruck-Variation. Je höher der Raildruck, desto höher der Strahlimpuls, welcher direkten Einfluss auf die Eindringtiefe der Strahlspitze zeigt. In der Hochdruckkammer werden die Eindringtiefen der Flüssigphase mittels des sogenannten *MIE-Streulicht*-Verfahrens bestimmt. Die Eindringtiefen der Gasphase werden mit Hilfe von *Schlieren*-Messungen ermittelt.

In den Simulationen werden zur Bestimmung der Eindringtiefe der Flüssigphase die Zellen mit einem Massenanteil von flüssigem Kraftstoff größer 1 % identifiziert. Anschließend wird deren Ort und Entfernung zum Düsenlochaustritt berechnet und der Maximalwert über der Zeit aufgetragen. Für die Auswertung der Penetration der Gasphase wird der Mischungsbruch beim Schwellenwert von 1 % genutzt. Die Gradienten an der Strahlspitze sind so hoch, dass die Wahl des Schwellenwerts im Bereich von 5 % bis 0.1 % keinen nennenswerten Einfluss auf das Ergebnis hat. Hier wird ebenso die maximale Entfernung zum Düsenaustritt bestimmt und der Zeitverlauf dargestellt.

Abb. 7.3 zeigt die Verläufe der Messungen und Simulationen ab Einspritzbeginn. Kurz nach

⁶vgl. Abb. 6.25

Spritzbeginn ist die Verdampfung mischungskontrolliert, weshalb die Flüssigkeitseindringtiefen nicht vom Raildruck abhängen [121, 65, 9]. Die Eindringtiefen der Strahlspitzen über der Zeit nehmen mit steigendem Raildruck sowohl in der Messung als auch in der Simulation in ähnlichem Verhältnis zu. Für den Vergleich der Messungen und Simulationen werden die Flüssigkeitseindringtiefen von 1 ms bis 2 ms gemittelt im Balkendiagramm über dem Variationsparameter Raildruck dargestellt. Die Gaseindringtiefen werden 1.5 ms nach Spritzbeginn ausgewertet und ebenso in ein Balkendiagramm eingetragen. Die Gegenüberstellungen zeigen eine sehr gute Übereinstimmung. Demnach kann das Primär- und Sekundärerfallsmodell mit den Standardparametern in Kombination mit dem gewählten Berechnungsgitter verwendet werden.

Betriebsparameter Hochdruckkammer								
Parameter	Variable	Einheit	Werte					
Betriebspunkt	BP	-	1	2	3	4	5	6
Dichte	ρ_{ini}	kg/m ³	30					
Raildruck	p_{rail}	bar	1000	2000	3000	2000		
Temperatur	T_{ini}	°C	750			650	700	750
Sauerstoffkonz.	X_{O_2}	Vol-%	14.5					
Lib.-AGR ($\lambda=1$)	ξ_{egr}	%	27.8					
Kommentar			Variation Raildruck			Variation T_{ini}		
Massenbrüche			Kammer nach H₂-Verbr. / CFD-Setup					
Kraftstoff	Y_{fuel}	%	0.00 / 0.00					
Sauerstoff	Y_{O_2}	%	16.82 / 16.82					
Stickstoff	Y_{N_2}	%	76.65 / 75.33					
Kohlenstoffdioxid	Y_{CO_2}	%	0.00 / 5.69					
Wasser	Y_{H_2O}	%	6.53 / 2.17					
Kohlenmonoxid	Y_{CO}	%	0.00 / 0.00					
Wasserstoff	Y_{H_2}	%	0.00 / 0.00					
weitere Größen			Kammer nach H₂-Verbrennung					
Gaskonstante	R	J/(kg K)	301.33					
spez. Wärmekap.	$c_p(T_{ini})$	J/(kg K)	1234.6			1234.6	1223.8	1211.2
Druck	p_{ini}	bar	92.49			83.45	87.97	92.49
weitere Größen			CFD-Setup					
Gaskonstante	R	J/(kg K)	288.01					
spez. Wärmekap.	$c_p(T_{ini})$	J/(kg K)	1188.8			1188.8	1179.1	1167.6
Druck	p_{ini}	bar	88.40			79.76	84.08	88.40

Tabelle 7.1: Betriebspunkte 1 bis 6 der Hochdruckkammer mit deren Parametern und initialisierten Gemischzusammensetzungen der Simulationen sowie den dazugehörigen Kompositionen der Messungen.

Betriebsparameter Hochdruckkammer							
Parameter	Variable	Einheit	Werte				
Betriebspunkt	BP	-	7	8	9	10	11
Dichte	ρ_{ini}	kg/m ³	30				
Raildruck	P_{rail}	bar	2000				
Temperatur	T_{ini}	°C	750				
Sauerstoffkonz.	X_{O_2}	Vol-%	20.0	18.0	16.0	14.0	12.0
Lib.-AGR ($\lambda=1$)	ξ_{egr}	%	1.2	10.8	20.5	30.2	40.0
Kommentar			Variation Sauerstoffkonzentration				
init. Massenbrüche			CFD-Setup				
Kraftstoff	Y_{fuel}	%	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Sauerstoff	Y_{O_2}	%	23.01	20.77	18.52	16.25	13.97
Stickstoff	Y_{N_2}	%	76.65	76.17	75.69	75.21	74.73
Kohlenstoffdioxid	Y_{CO_2}	%	0.25	2.21	4.19	6.18	8.19
Wasser	Y_{H_2O}	%	0.09	0.84	1.60	2.36	3.12
Kohlenmonoxid	Y_{CO}	%	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Wasserstoff	Y_{H_2}	%	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
weitere Größen							
Gaskonstante	R	J/(kg K)	288.18	288.12	288.06	288.00	287.94
spez. Wärmekap.	$c_p(T_{ini})$	J/(kg K)	1156.7	1168.3	1180.0	1191.7	1203.6
Druck	p_{ini}	bar	88.45	88.44	88.42	88.40	88.38
Massenbrüche			Kammer nach H₂-Verbrennung				
Kraftstoff	Y_{fuel}	%	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Sauerstoff	Y_{O_2}	%	23.01	20.77	18.52	16.25	13.97
Stickstoff	Y_{N_2}	%	70.51	72.73	74.97	77.22	79.48
Kohlenstoffdioxid	Y_{CO_2}	%	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Wasser	Y_{H_2O}	%	6.48	6.50	6.52	6.53	6.55
Kohlenmonoxid	Y_{CO}	%	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Wasserstoff	Y_{H_2}	%	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
weitere Größen							
Gaskonstante	R	J/(kg K)	298.96	299.82	300.68	301.55	302.42
spez. Wärmekap.	$c_p(T_{ini})$	J/(kg K)	1229.1	1231.1	1233.1	1235.1	1237.1
Druck	p_{ini}	bar	91.76	92.03	92.29	92.56	92.83

Tabelle 7.2: Betriebspunkte 7 bis 11 der Hochdruckkammer mit deren Parametern und initialisierten Gemischzusammensetzungen der Simulationen sowie den dazugehörigen Kompositionen der Messungen.

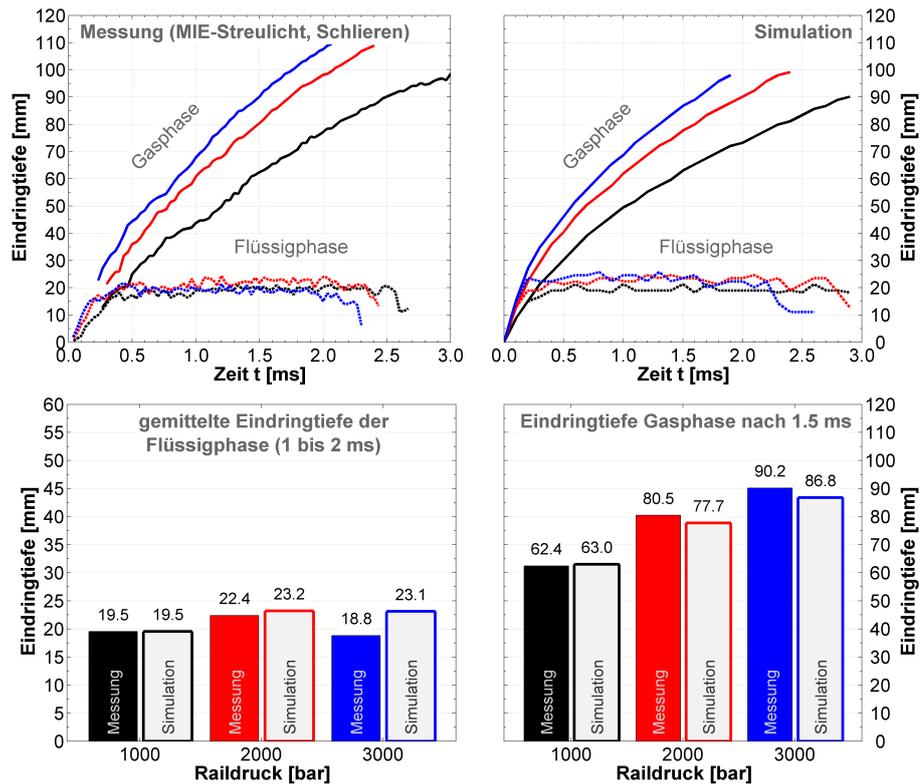


Abbildung 7.3: Raildruck-Variation (bei $\rho_{ini} = 30 \text{ kg/m}^3$, $T_{ini} = 750^\circ\text{C}$, $X_{O_2} = 14.5 \text{ Vol-\%}$): Vergleich der Eindringtiefen (Flüssig- und Gasphase) zwischen Messungen und Simulationen.

7.2.3 Phänomenologie und Analyse des Fortschrittsvariablenmodells

Die Validierung der Zünd- und Verbrennungsprozesse erfolgt anhand der Variationen der Sauerstoffkonzentration und der Umgebungstemperatur. Bei diesen Messungen beträgt der Raildruck 2000 bar (siehe Tab. 7.1 und 7.2). Deshalb wird zunächst aus der im vorherigen Abschnitt diskutierten Raildruck-Variation Betriebspunkt 2 mit Raildruck 2000 bar für eine detaillierte Analyse der relevanten Zünd- und Verbrennungsgrößen ausgewählt.

(A) Lokale Analyse des Fortschrittsvariablenmodells

Für die lokale Analyse und Bewertung der Funktionsweise des Fortschrittsvariablenmodells werden in den Abbildungen 7.4 und 7.5 die Temperatur, der Mischungsbruch und dessen Varianz sowie die Fortschrittsvariable auf einer Schnittebene durch den Einspritzstrahl alle 0.2 ms ausgewertet. Als Bezugsort in der Schnittebene dient dabei das lokale stöchiometrische Luft-Kraftstoff-Verhältnis ($\lambda = 1$ bzw. $Z = Z_{st}$), welches als schwarze Linie eingezeichnet ist. Zusätzlich ist der NO- und Ruß-Massenanteil und dessen Bilde- und Oxidationsraten dargestellt. Am Beispiel des Freistrahls können die Schadstoffbildeprozesse sehr anschaulich erklärt werden. Des Weiteren sind die Zellen mit einem Flüssigkeitsmassenanteil größer 1 % halbtransparent grau eingefärbt, um den Ort der Flüssigphase aufzuzeigen.

Der flüssige Kraftstoff wird mit einer Temperatur von 120°C eingespritzt. Die Temperatur des Gasgemischs in der Kammer beträgt $750^\circ\text{C} = 1023.15 \text{ K}$ und liegt damit etwas unterhalb

des Minimums von 1100 K der gewählten Skala, so dass nicht-reaktive Bereiche transparent erscheinen. Der Kraftstoff kühlt bei der Verdampfung die Umgebung ab. In den Abbildungen 7.4 und 7.5 ist sehr gut zu erkennen, dass sich die Eindringtiefe der Flüssigphase nach Erreichen von ca. 22 bis 24 mm im weiteren Verlauf nicht mehr ändert und Kraftstoff stromab nur noch gasförmig vorliegt. Nur leichte Fluktuationen sind zu beobachten, die in der zugrundeliegenden Stochastik des Strahlmodells begründet sind [65]. Die Gasphase dringt stetig weiter ein. Dabei verteilt sich der Impuls aufgrund des Strahlwinkels auf einen immer größer werdenden Bereich, weshalb die Eindringgeschwindigkeit der Strahlspitze immer kleiner wird.

Der Mischungsbruch Z nimmt ausgehend von der Strahlmitte (fett) nach außen hin ab (mager). Zu Beginn der Einspritzung bis zu 0.8 ms sind die meisten Bereiche mit Mischungsbruch größer Null gleichzeitig fett ($Z > Z_{st}$). Des Weiteren ist zu beobachten, dass die Varianz des Mischungsbruchs zur Strahlwurzel hin zunimmt. Besonders deutlich wird das ab 0.8 ms. Dort sind die Gradienten im Mischungsbruch über den gesamten Einspritzvorgang sehr hoch, weshalb der Produktionsterm der Varianz-Erhaltungsgleichung (5.16) durchgängig hohe Werte liefert.

Die Reaktionsfortschrittsvariable χ liefert einen direkten Zusammenhang zu den örtlich stattfindenden Reaktionen. Trivialerweise ist ihr Wert bei Simulationsbeginn in der gesamten Kammer gleich Null, da kein Kraftstoff vorhanden ist. Erst kurz nach Beginn der Einspritzung laufen in den fetten Zonen die ersten Vorreaktionen ab, welche bei 0.4 ms mit Erreichen von $\chi \approx 0.1$ sichtbar werden (hellblaue Bereiche). Im Bereich der Stöchiometrielinie sind zu diesem Zeitpunkt die Mischungsbruchvarianzen hoch. Diese führen letztlich trotz relativ hoher Temperaturen am Strahlrand zu niedrigen Reaktionsraten. Ab 0.6 ms weiten sich die Reaktionszonen aus und der Reaktionsfortschritt steigt an (blaue Bereiche). Gut zu erkennen ist der damit verbundene leichte Anstieg der Temperatur (Coolflame-Verbrennung) auf bis zu 1300 K in leicht fetten Zonen ($Z \approx 0.1$). Trotz des Reaktionsfortschritts von ca. 0.2 ist die Temperatur in der Strahlmitte aufgrund der Abkühlung durch den Kraftstoffdampf relativ niedrig. Kurz nach 0.6 ms findet die Hauptzündung statt. Die Reaktionsraten werden am Zündort ($\chi > 0.3$) sehr hoch und die Temperaturen steigen dort schlagartig an. Bei 0.8 ms kann beobachtet werden, dass die Reaktionsfortschrittsvariable im Bereich des Zündorts bei ca. 32 mm bereits nahezu den Wert 1 erreicht hat. Dort sind die Temperaturen größer 1800 K. Die umliegenden Reaktionsraten werden erhöht. Ein selbstverstärkender Effekt, der letztlich dazu führt, dass die Verbrennung ausgehend vom Zündort sich schnell in Richtung Strahlspitze ausbreitet. Gleichzeitig sorgt die hohe Temperatur, dass sich auch die Reaktionsraten *stromauf* in Richtung Strahlwurzel deutlich erhöhen. Der Bereich mit Fortschrittsvariable gleich 1 weitet sich in beide Richtungen aus. Im Bild bei 1.0 ms ist das gut zu erkennen.

Nach 1.2 ms hat sich die Zone mit $\chi = 1$ bis zur Strahlspitze ausgebreitet. Der Zündort ändert sich jetzt nicht mehr und verharrt bei ca. 24 mm. Dort sind die Geschwindigkeiten des Strahls, die Mischungsbruchgradienten und damit dessen Varianzen sehr hoch. Einerseits werden hier Zwischenprodukte der Reaktion schnell stromab transportiert und andererseits reduzieren die hohen Mischungsbruchvarianzen die Reaktionsraten. Beide Vorgänge führen letztlich dazu, dass bei konstanter Einspritzrate ein Gleichgewicht herrscht und dieser Zündort seine Position beibehält⁷. Der Abstand dieser Zone, wo die ersten Verbrennungsreaktionen mit einem hohen Temperaturanstieg stattfinden, zum Düsenlochaustritt wird in der Literatur *Lift-Off Länge* bezeichnet [122]. Diese charakteristische Länge variiert nur mit Änderung der Randbedingungen und eignet sich daher ideal um verschiedene Betriebspunkte miteinander zu vergleichen.

⁷Anmerkung: Erst bei Einspritzende brennt der Kraftstoff bis zur Strahlwurzel durch.

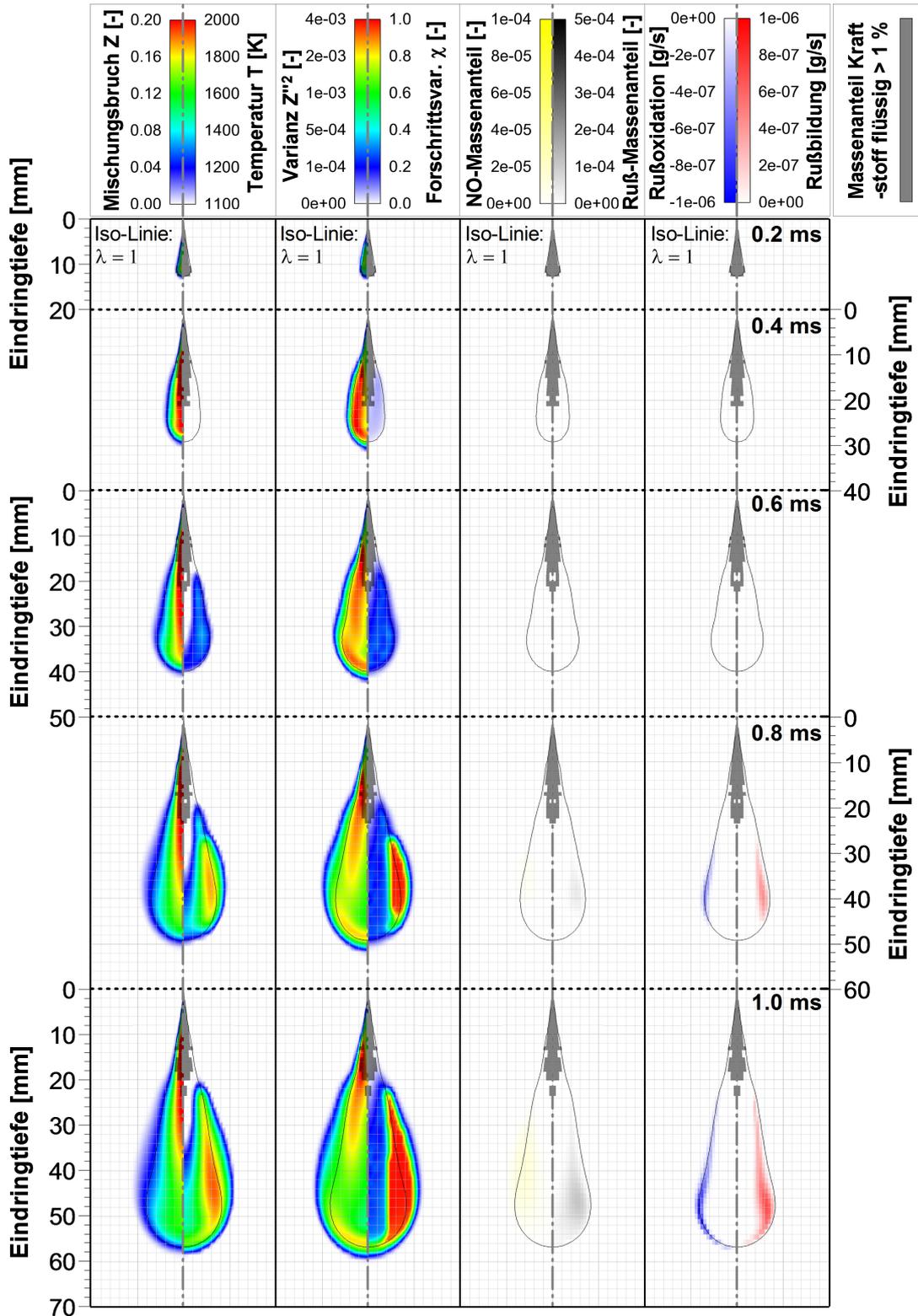


Abbildung 7.4: Lokale Auswertung der Temperatur, des Mischungsbruchs und dessen Varianz, der Fortschrittsvariable sowie der Emissionen NO und Ruß mit den zugehörigen Oxidations- und Bildungsrate bei $\rho_{ini} = 30 \text{ kg/m}^3$, $T_{ini} = 750^\circ\text{C}$, $X_{O_2} = 14.5 \text{ Vol-}\%$, $p_{rail} = 2000 \text{ bar}$. (Teil 1/2)

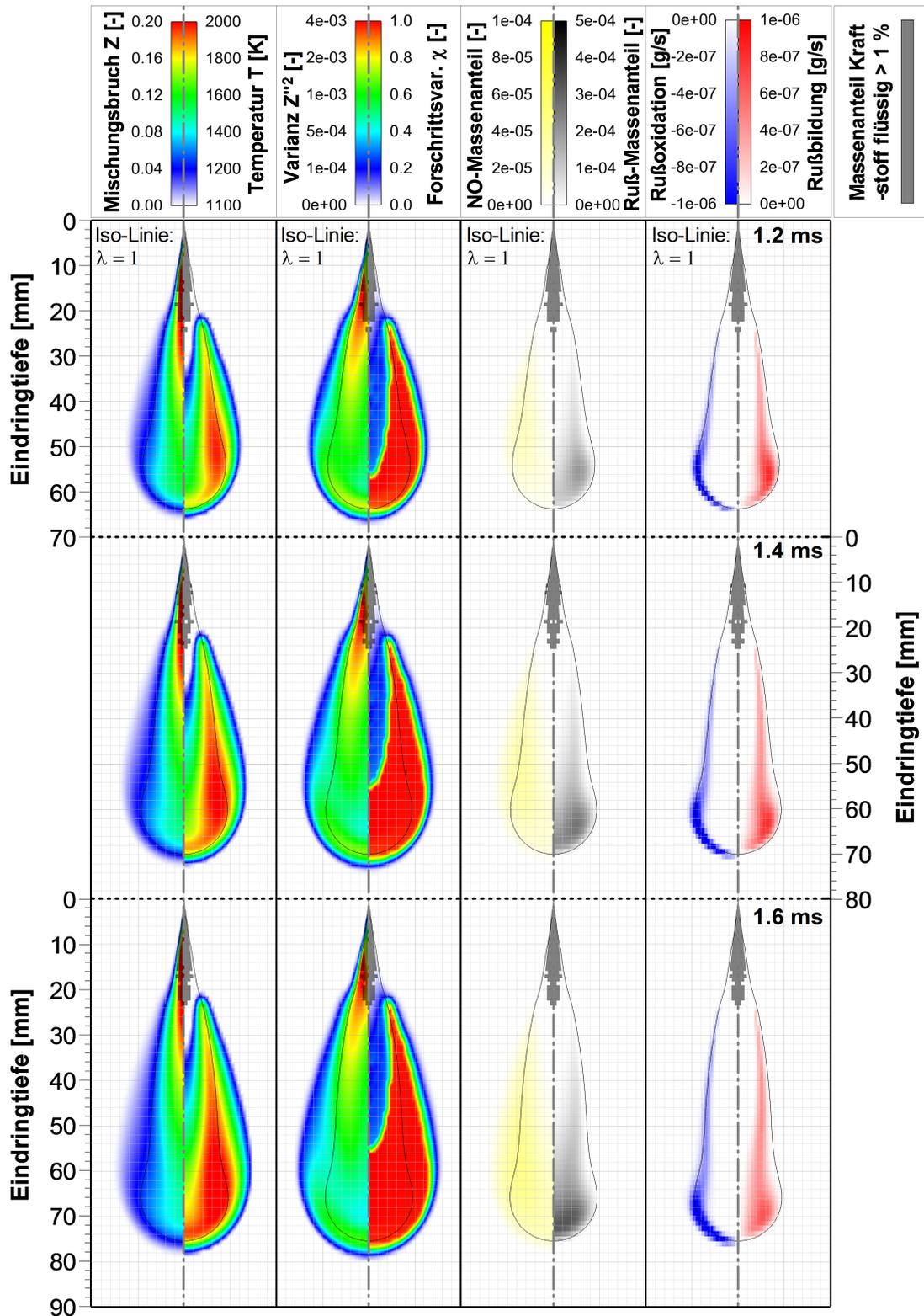


Abbildung 7.5: Lokale Auswertung der Temperatur, des Mischungsbruchs und dessen Varianz, der Fortschrittsvariable sowie der Emissionen NO und Ruß mit den zugehörigen Oxidations- und Bildungsrate bei $\rho_{ini} = 30 \text{ kg/m}^3$, $T_{ini} = 750^\circ\text{C}$, $X_{O_2} = 14.5 \text{ Vol-\%}$, $p_{rail} = 2000 \text{ bar}$. (Teil 2/2)

Die nachfolgenden Zeitpunkte 1.4 und 1.6 ms zeigen, wie der Strahl zur Spitze hin immer mehr homogenisiert und dadurch eine große, heiße Zone mit Reaktionsfortschritt gleich 1 entsteht. Die Auswertung der Rußbilde- und Oxidationsprozesse veranschaulicht, dass beide stets simultan in verschiedenen Zonen des Strahls ablaufen. Sie sind stark temperaturabhängig und deshalb der Verbrennung nachgelagert. Während die Rußbildung in fetten Bereichen mit hohen Temperaturen bis hin zur Stöchiometrie stattfindet, ist die Rußoxidation nur im leicht mageren bis stöchiometrischen Bereichen zu finden. Der resultierende Rußmassenanteil ist deshalb an der Strahlspitze bei 1.6 ms am höchsten. Zu einem späteren Zeitpunkt, der nicht dargestellt ist, überwiegt aufgrund der zunehmenden Homogenisierung des Strahls stromab die Rußoxidation. Wird der Rußmassenanteil entlang der Strahlachse ausgewertet, steigt der Wert zunächst an, erreicht ein Maximum und nimmt wieder ab [107]. Die thermische Stickoxidbildung benötigt aufgrund der Dreifachbindungen des Stickstoffs Temperaturen größer 2000 K. Die Sauerstoffkonzentration des Oxidators ist in diesem Betriebspunkt sehr gering, was die maximalen Temperaturen reduziert. Die Skala ist auf 2000 K begrenzt und damit ist direkt ersichtlich, wo die Stickoxidbildung stattfinden kann. Die maximalen Temperaturen sind unwesentlich höher, weswegen der NO-Anteil über die gesamte Verbrennung hinweg auf einem sehr niedrigen Niveau bleibt. Es ist zu erkennen, dass das thermische NO im Bereich der Stöchiometrie gebildet wird.

Zusammenfassend lässt sich festhalten, dass das Fortschrittsvariablenmodell sich unter den gegebenen Randbedingungen äußerst plausibel verhält. Zündort und -zeitpunkt sowie das Gleichgewicht der Konvektion mit den Selbstzündungsprozessen im Bereich der Strahlwurzel (Lift-Off Länge), folgen den gängigen Vorstellungen der Zündung und Verbrennung eines Freistrahls. Um die Allgemeingültigkeit des Modells zu unterstreichen sind in den folgenden Abschnitten die Randbedingungen entsprechend der vorhandenen Kammernessungen variiert und weitere Ergebnisse aus Experiment und Simulation gegenübergestellt.

(B) Variation der Sauerstoffkonzentration

Die Absenkung der O_2 -Konzentration bei konstanter Dichte und Kammertemperatur hat auf die Kraftstoffverdampfung nahezu keinen Einfluss. Trotz veränderter Zusammensetzung des Oxidators sind Flüssigkeits- und Strahleindringtiefe und daher die Gemischbildung stets sehr ähnlich. Die geringere Sauerstoffkonzentration führt zu einer niedrigeren Verbrennungstemperatur und folglich zu einer höheren Dichte im Strahlinneren. Bei gleichem Strahlimpuls führt die höhere Dichte zu einer etwas geringeren Eindringtiefe, da der eingespritzte Kraftstoff mehr abgebremst wird. Auf den Strahlwinkel hat das keinen Einfluss. Die stöchiometrische Zone findet sich aufgrund der niedriger werdenden O_2 -Konzentrationen näher an den Strahlrand. Dieser Effekt ist in der Simulation (im Schnitt durch den Strahl) sichtbar, durch die verwendeten Messmethoden aber nicht zu verifizieren. Die Reduktion der O_2 -Konzentration hat unmittelbare Auswirkungen auf die chemischen Zündvorgänge. Hier lassen sich die Auswirkungen der langsamer ablaufenden Zündreaktionen auf die Lift-Off Längen direkt miteinander vergleichen. Abb. 7.6 zeigt das Ergebnis der Simulationen nach 1.6 ms. Dargestellt sind der Mischungsbruch, die Temperatur, die Stöchiometriellinie und die Bereiche mit flüssigem Kraftstoffmassenanteil größer 1%. Die Reduktion der maximalen Temperaturen sowie die steigende Lift-Off Länge mit sinkender O_2 -Konzentration sind deutlich sichtbar. Der Vergleich der Zündverzugszeiten und Lift-Off Längen zwischen Messungen und Simulationen ist in Abb. 7.7 zu sehen. Die

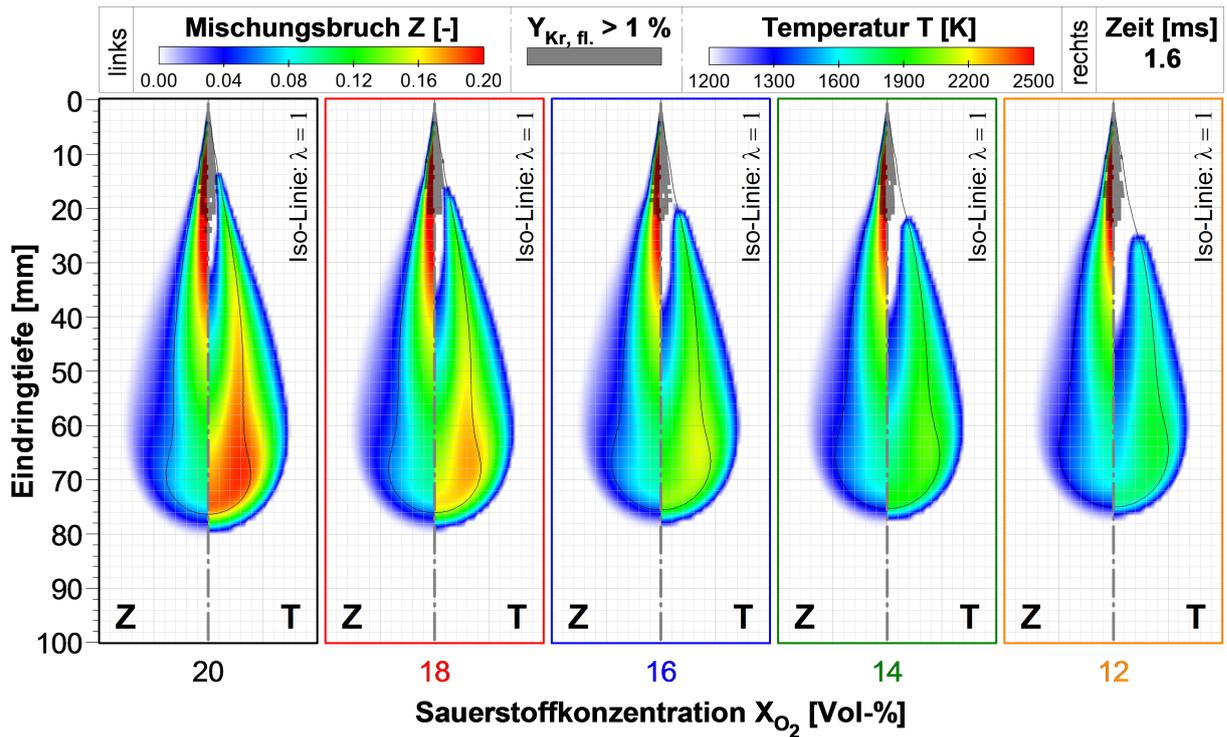


Abbildung 7.6: Variation der Sauerstoffkonzentration (bei $\rho_{ini} = 30 \text{ kg/m}^3$, $T_{ini} = 750^\circ\text{C}$, $p_{rail} = 2000 \text{ bar}$): Lokaler Vergleich der Eindringtiefen (Flüssig- und Gasphase) und Lift-Off Längen.

Auswertung der Zündverzögerungen der Messungen basieren auf der *2D-2-Farbenmethode*⁸. Als Zündverzögerungszeit wird hier der Zeitpunkt des ersten Messsignals nach Einspritzbeginn definiert [152]. In der Simulation wird der größte Gradient der chemischen Wärmefreisetzungsrates als Zündzeitpunkt definiert. Die Gegenüberstellung im Balkendiagramm zeigt, dass der Trend durch die Simulation zwar wiedergegeben wird, die Zündverzögerungszeiten bei hohen O_2 -Konzentrationen aber zu lange sind. Der Verlauf der chemischen Wärmefreisetzungsrates des Falls mit 20 % Sauerstoffkonzentration zeigt bei ca. 0.3 ms einen ähnlichen Gradienten in den Vorreaktionen, wie später bei der Hauptzündung. Möglicherweise ist dies ein Indiz für die nicht ideale Analogie der Größen.

Dahingegen stimmen Messungen und Simulationen in der Lift-Off Länge sowohl im Trend als auch in den Absolutwerten herausragend überein. Hervorzuheben ist, dass bei den O_2 -Konzentrationen von 20 % und 18 % die Lift-Off Länge nach Zündbeginn sich nicht in Richtung der Strahlwurzel bewegt. Die Zündreaktionen finden aufgrund des hohen Sauerstoffgehalts und damit auch hohen Temperaturen schon in Strahlwurzelnähe statt. Erst die zunehmende Reduktion der O_2 -Konzentration führt zu Zündverzögerungen, die weit genug von der Strahlwurzel entfernt sind, so dass sich die Reaktionszone nach Zündbeginn wieder etwas stromauf bewegt. Das Verhalten zeigt sich in den Messwerten als auch in den Simulationen. Zur Abbildung dieses Phänomens muss ein Zündmodell die lokalen Reaktionsraten realitätsnah prognostizieren. Diese Simulationsergebnisse liefern eine weitere Bestätigung der sehr guten Vorhersagefähigkeit des Fortschrittsvariablenmodells.

⁸Bei der 2D-2-Farbenmethode erfolgt nach dem in [133] vorgestellten Prinzip eine pixelaufgelöste Umrechnung der mittels der High-Speed-Kamera aufgezeichneten Verbrennungsbilder in Temperatur und Rußkonzentration. Eine ausführliche Beschreibung findet sich in [152].

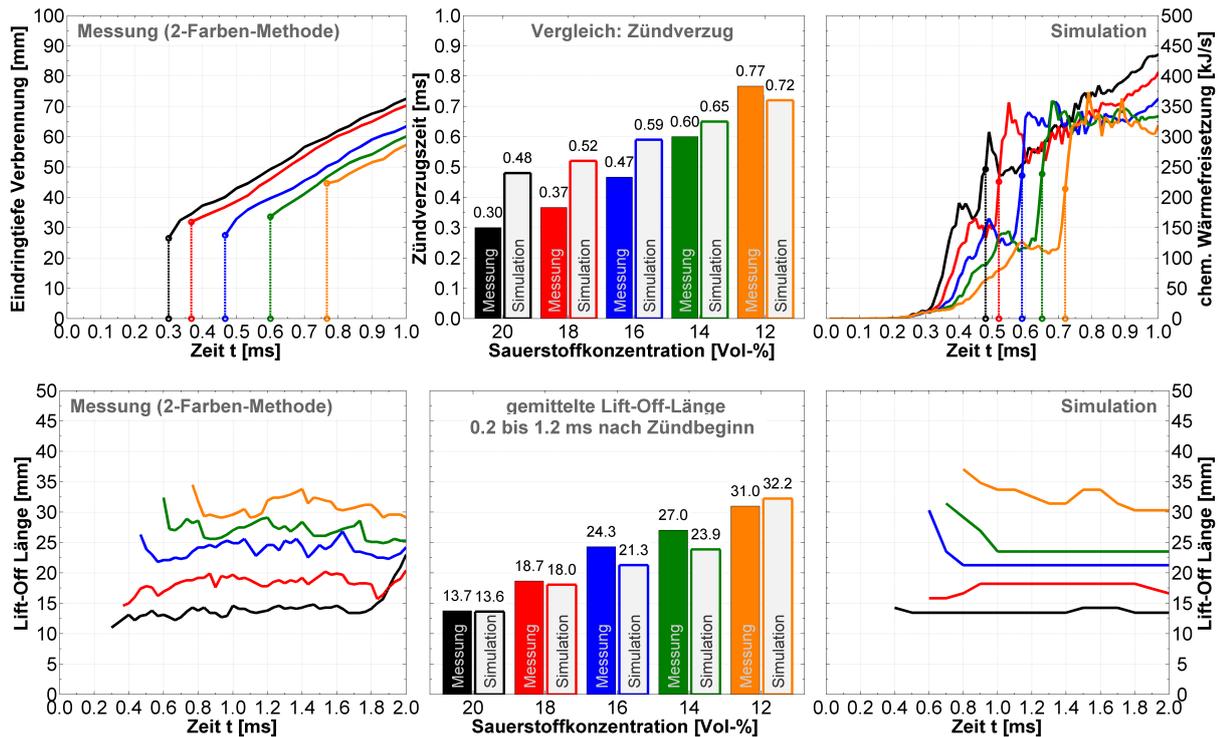


Abbildung 7.7: Variation der Sauerstoffkonzentration (bei $\rho_{ini} = 30 \text{ kg/m}^3$, $T_{ini} = 750^\circ\text{C}$, $p_{rail} = 2000 \text{ bar}$): Vergleich der Zündverzugszeiten und Lift-Off Längen zwischen Messungen und Simulationen.

(C) Variation der Umgebungstemperatur

Die Variation der Umgebungstemperatur bei konstanter Dichte hat zwei wesentliche Auswirkungen auf die Lift-Off Länge und den Zündverzug. Einerseits führt eine Reduktion der Kammertemperatur zu einer verzögerten Verdampfung des eingespritzten Kraftstoffs und damit direkt zu größeren Lift-Off Längen. Andererseits laufen Zündreaktionen bei niedrigeren Temperaturen langsamer ab. Längere Zündverzüge sind die Folge, welche indirekt die Lift-Off Längen vergrößern. Mit Hilfe der Temperaturvariation lässt sich das Fortschrittsvariablenmodell hinsichtlich der Abbildung der Zündverzüge validieren. Der kombinierte Einfluss der Temperatur auf die Lift-Off Länge lässt sich jedoch nicht trennen und erschwert daher eine Bewertung der Modellgüte bei diesen Betriebspunkten.

Die Zündverzugszeiten der Messungen und Simulationen sind analog der Variation der Sauerstoffkonzentration ausgewertet. In Abb. 7.8 ist zu sehen, dass die Zündverzugszeiten im Trend zwar übereinstimmen, aber eine zu geringe Sensitivität bezüglich der Temperatur aufweisen. Wiederum darf hier die Vergleichbarkeit der Größen angezweifelt werden. In der Gegenüberstellung der Lift-Off Längen zeigt sich ein ähnliches Bild. Die Simulationsergebnisse der Temperaturvariation zeigen zwar die vorhandene Temperaturabhängigkeit der Zündreaktionen des Fortschrittsvariablenmodells, jedoch nicht mit der notwendigen Sensitivität.

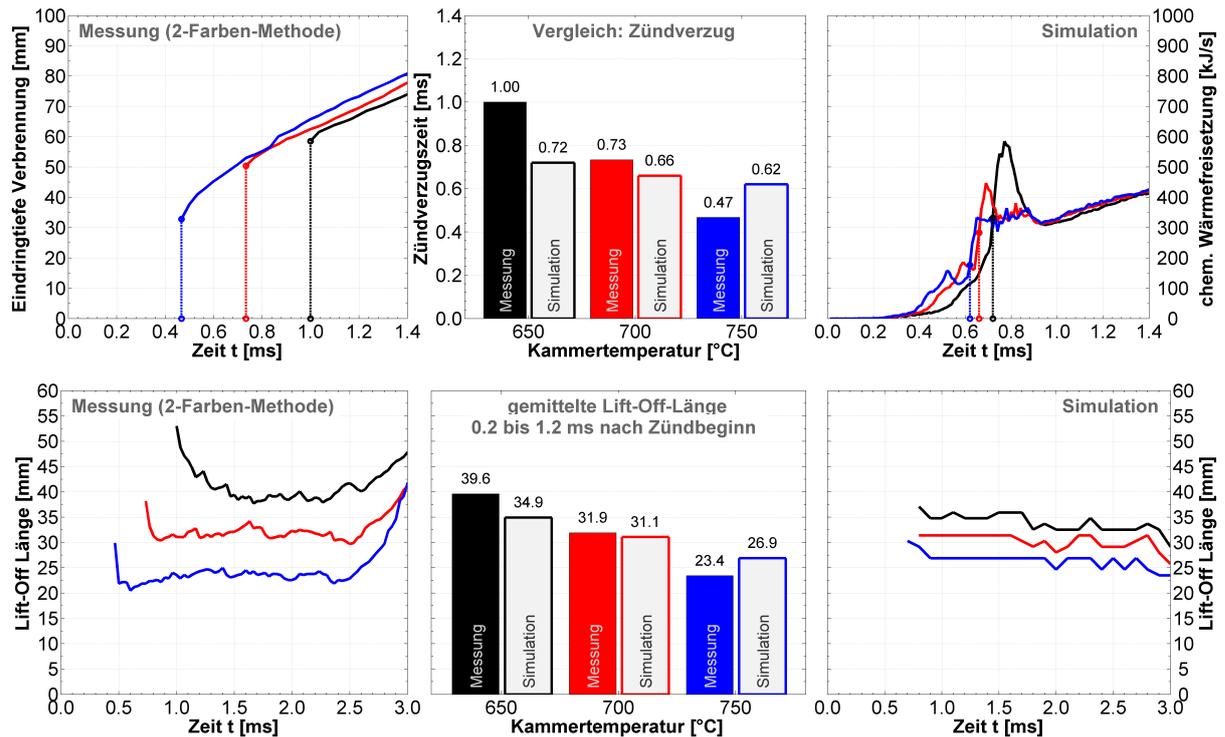


Abbildung 7.8: Kammertemperatur-Variation (bei $\rho_{ini} = 30 \text{ kg/m}^3$, $X_{O_2} = 14.5 \text{ Vol-\%}$, $p_{rail} = 2000 \text{ bar}$): Vergleich der Zündverzugszeiten und Lift-Off Längen zwischen Messungen und Simulationen.

7.3 Motorische Simulationsergebnisse

7.3.1 Nutzfahrzeugmotor mit Höchst-AGR-Brennverfahren

Im Jahr 2007 wurde von der Daimler AG die Reihenmotorenfamilie *Heavy Duty Engine Platform* (HDEP) für den weltweiten Einsatz in schweren Nutzfahrzeugen vorgestellt [43]. Nach der Einführung in Nordamerika zur Erreichung der Emissionsvorschriften *EPA'07* und *EPA'10* in der Konzernmarke Detroit Diesel, werden die neuen Sechszylindermotoren seit 2011 auch auf dem europäischen Markt im neuen Actros von Mercedes-Benz verbaut. Besonderes Merkmal dieser Motorenfamilie ist das innovative, druckübersetzte *X-Pulse Common-Rail Einspritzsystem* (APCRS) der Firma Bosch [2]. Es werden vier verschiedene Hubraumvarianten zur Abdeckung eines breiten Leistungsbereiches angeboten [64]. Die hier verwendeten Messreihen wurden an einem Einzylindermotor der 12.8 Liter Variante mit 350 kW Nennleistung gefahren. Ein Überblick über die wichtigsten technischen Daten findet sich in Tab. 7.3. Es wurde eine seriennahe Hardware bestehend aus der *Omega-Kolbenmulde* mit Verdichtungsverhältnis 17.3 und 7-Loch-Einspritzdüse verwendet.

Der Einzylindermotor mit Fremdaufladung ermöglicht die Darstellung weitgehend beliebiger Befüllungsparameter. Durch Einstellung von Ladedruck, Abgasgegendruck und AGR-Ventilstellung zur Beeinflussung der rückgeführten Abgasmenge kann die O_2 -Konzentration in der Ansaugluft eingestellt werden. Zur Darstellung von extremen AGR-Raten bis über 70 % wird ein zweistufiger AGR-Kühler zur Bewältigung der hohen Massenströme benötigt. Die verwendete

Heavy Duty Engine Platform (HDEP) - OM471			
	<i>Einheit</i>	<i>Wert / Info</i>	<i>Bild</i>
Hubvolumen	Liter	12.809	
Leistung	kW	350	
Zylinder	-	6	
Hub	mm	156	
Bohrung	mm	132	
Verdichtungsverhältnis	-	17.3	
Drall	-	0	
Mulde	-	Omega-Mulde	
Düse	cm ³ /30s	7-Loch, HD770	
<i>Bosch X-Pulse (APCRS) Einspritzsystem</i>			

Tabelle 7.3: Technische Daten und Bild [Daimler AG] des Nfz-Basismotors OM471 [43, 64, 153].

Standardmesstechnik liefert Kraftstoffverbrauch und Abgasemissionen für die untersuchten Varianten [153].

Eine wesentliche Größe zur Charakterisierung der Verbrennung liefert die Zylinderdruckindizierung [34, 8]. Mit Hilfe des Drucksignals über Gradkurbelwinkel kann unter anderem die globale Brennraumtemperatur sowie der Brennverlauf berechnet werden. Dieser ermöglicht die Identifikation der Größen wie Brennbeginn und -ende sowie die Lage des Schwerpunkts der Verbrennung⁹. Im Gegensatz zum H50-Umsatzpunkt ist in diesem Wert der Verlauf der Ausbrandphase adäquat repräsentiert, was insbesondere zur Charakterisierung von Hoch-AGR-Verbrennung bedeutsam wird [153].

Zur Validierung der Rechenergebnisse werden zunächst simulierte Druckverläufe Messungen gegenübergestellt. Um eine gute Messgenauigkeit zu gewährleisten wurden bei der Daimler AG über die Jahre Maßnahmen zur Qualitätssteigerung erarbeitet. Angefangen bei den präventiven Qualitätsmaßnahmen wie Sensorauswahl, Indizierbohrung, Kalibrier-, Aufbau und Rüstprozess, bis zur Überwachung im Betrieb durch Referenzpunktvermessung und stichpunktartiger Qualitätskontrollen im Postprocessing und der Fehlerbehebung. Weiterhin entscheidend für den Erfolg der Qualitätssicherung ist ein hoher Automatisierungsgrad [8].

In dieser Arbeit werden die Messdaten zunächst mit Hilfe von Druckverlaufsanalysen plausibilisiert. Neben der Verifikation der Größen wie Kraftstoff-, Luftmassenstrom und AGR-Rate werden so auch Aussagen zu Wandwärme- und Leckageverlusten während der Hochdruckphase möglich. Des Weiteren liefern das Drucksignal und der Volumenverlauf über Gradkurbelwinkel einen Anhaltswert über das thermodynamisch wirksame Verdichtungsverhältnis, das vom geometrischen Wert aufgrund von Pleuelstauchung und Bauteildehnung bis zu einer Einheit abweichen kann [144].

Aus den gefahrenen Messreihen wurden 3 Betriebspunkte für die Validierung des Zünd- und Vormischverbrennungsmodells ausgewählt. In Tab. 7.4 sind die plausibilisierten Werte auf-

⁹Flächenschwerpunkt des Brennverlaufs über Gradkurbelwinkel

Betriebsparameter OM471					
Parameter	Variable	Einheit	Werte		
Betriebspunkt	BP	-	1	2	3
th. Verdichtungsverhältnis	ϵ_{th}	-	17.5		
Drehzahl	n	1/min	1300		
spezifische Last	p_{me}	bar	8.3	8.0	7.7
AGR-Rate	AGR	%	30.7	68.6	72.4
Ladedruck	$p_{2,abs}$	mbar	1744	3049	3355
Saugrohr-Temperatur	T_2	°C	60.1		
Kraftstoffmasse	m_B	mg/ASP	99.87	99.86	100.05
Luftmasse	m_{LAZ}	mg/ASP	2375.9	1838.6	1779.2
Luftverhältnis	λ	-	1.63	1.26	1.22
Verbrennungsschwerpunkt	Q_S	°KW n. OT	11.9	8.4	8.4
Sauerstoffkonzentration	X_{O_2}	Vol-%	16.61	9.55	8.60
Sauerstoffmassenanteil	Y_{O_2}	%	18.42	10.61	9.58
Sauerstoffmasse	$m_{O_2,Zyl}$	mg/ASP	651.0	645.1	645.6
Library-AGR ($\lambda_{Abgas}=1$)	ξ_{egr}	%	20.9	54.4	58.8
NO_x-Emissionen	m_{NOXB}	g/kg _{fuel}	7.555	0.046	0.025
Ruß-Emissionen	m_{RUB}	g/kg _{fuel}	0.30	9.46	1.23

Tabelle 7.4: Ausgewählte Betriebspunkte des OM471 Einzylinderaggregats.

geführt. Bei der Variation der Betriebsparameter Ladedruck und AGR-Rate ist das Ziel die Sauerstoffmasse im Zylinder $m_{O_2,Zyl}$ konstant zu halten, ebenso wie die Einspritzmenge. Der Einspritzzeitpunkt ist so gewählt, dass sich ein ähnlicher Verbrennungsschwerpunkt ergibt, was im ersten Betriebspunkt nicht ganz gelungen ist. Bei dieser Variation ist insbesondere der große AGR-Bereich hervorzuheben. Während der erste Betriebspunkt dem Serien-Brennverfahren nahe kommt, sind Betriebspunkte 2 und 3 mit sehr hohen AGR-Raten gefahren worden, was zu äußerst niedrigen NO_x-Emissionen führt. Bei den Ruß-Emissionen unterscheiden sich die Punkte 2 und 3 drastisch. Bei Betriebspunkt 2 sind die Temperaturen in der Nähe des OT noch hoch genug, so dass Ruß gebildet wird. Im Verlauf der Expansionsphase, wo normalerweise nach der Strahl-Mulden-Interaktion eine starke Durchmischung und damit Oxidation des zuvor gebildeten Rußes stattfindet, sind die Temperaturen niedrig. Die Rußoxidationsreaktionen frieren ein und die Rohemission ist entsprechend hoch. Beim dritten Betriebspunkt sind dagegen die Temperaturen auch nahe des OT schon so gering, dass kaum noch Ruß gebildet wird. Die Oxidationsphase bleibt hier zwar ebenso aus, aber da viel weniger Partikel als in Betriebspunkt 2 gebildet werden, ist auch die Ruß-Rohemission gering. Dieses sogenannte *Höchst-AGR-Brennverfahren* bricht zwar aus dem bekannten NO_x-Ruß-Trade-Off aus, stellt aber derzeit schwer erfüllbare Anforderungen an die Aufladung [153]. Des Weiteren sind die CO- und HC-Emissionen so hoch und die Verbrennungsdauern so lange, dass der spezifische Hochdruckverbrauch $b_{i,HD}$ nahezu 10 % schlechter wird, weshalb es als Serien-Brennverfahren ungeeignet ist.

In den Abbildungen 7.9 bis 7.11 sind jeweils der gemessene Druckverlauf, der Brennverlauf, der Summenbrennverlauf und die mittlere Gastemperatur aus der DVA den Simulationen mit dem PDF-Timescale- und Fortschrittsvariablen-Modell (PDF-Progress) gegenübergestellt. Zusätzlich sind die berechneten Schadstoffwerte für Ruß und NO_x aufgeführt und die gemessenen Rohemissionswerte eingetragen. Bei Betriebspunkt 1 zeigt der Vergleich mit der Messung, dass die Übereinstimmung des Zündzeitpunkts und der Vormischphase durch beide Modelle sehr gut wiedergegeben werden. Erst im Übergang zur Diffusionsverbrennung unterschätzen die Simulationen die Wärmefreisetzung. In dieser Phase ist die Gemischbildung maßgeblich für die Wärmefreisetzung verantwortlich, da die Gastemperaturen noch so hoch sind, dass die chemischen Zeitskalen keinen Einfluss auf die Verbrennung haben. Die Unterschätzung der Wärmefreisetzung während der Expansionsphase ist größtenteils in der Vereinfachung der Brennraumgeometrie begründet. In einem Sektornetz werden die Totvolumina des Brennraums¹⁰ durch einen leicht vergrößerten Quetschspalt und Feuersteg abgebildet, um das thermodynamisch wirksame Verdichtungsverhältnis aus der DVA zu erhalten. Durch den vergrößerten Quetschspalt werden unter anderem die *Reverse Squish*-Strömung, damit die Durchmischung und Wärmefreisetzung unterschätzt [94]. Die Fälle mit hohen AGR-Raten unterliegen der gleichen Problematik und zeigen eine weitere Auffälligkeit. Zwar wird der Zündzeitpunkt gut wiedergegeben, doch ist schon im unterschätzten Vormischpeak und im Übergang zur Diffusionsverbrennung mit dem PDF-Timescale-Modell ein deutlicher Einbruch in der Wärmefreisetzung

¹⁰z. B. Ventiltaschen im Kolben und Ventilrückstände im Zylinderkopf

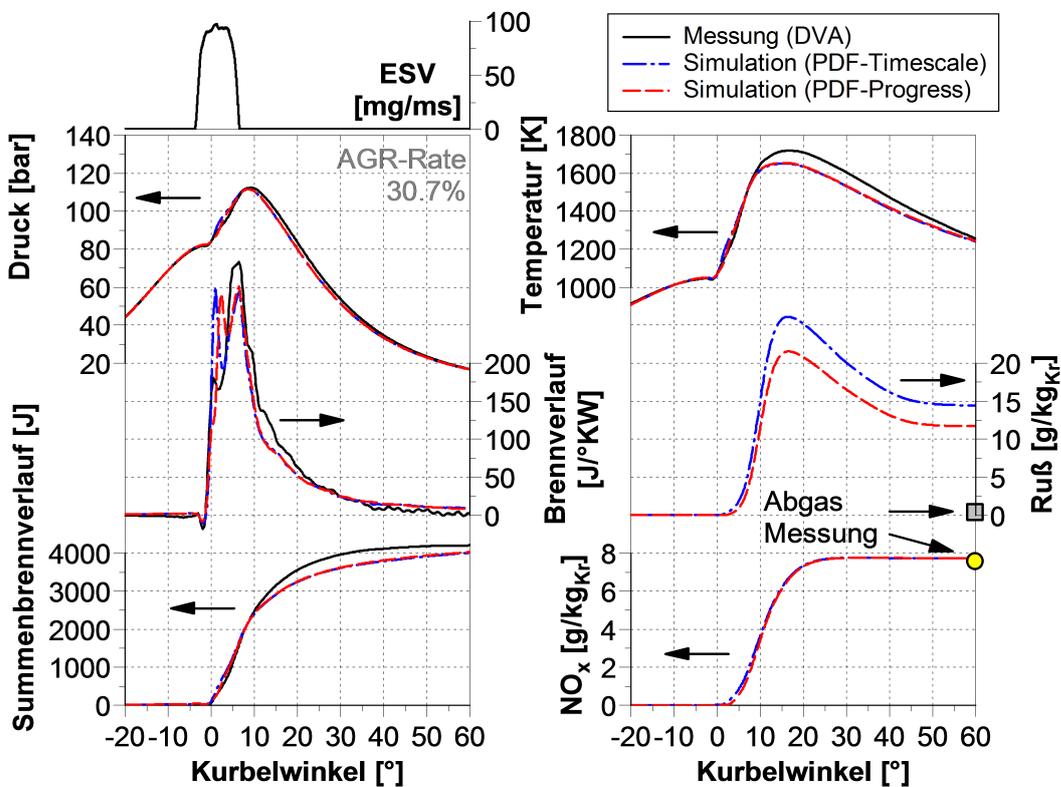


Abbildung 7.9: Betriebspunkt 1: Vergleich von Messung (DVA) und Simulation mit dem PDF-Timescale und Fortschrittsvariablen-Modell.

erkennbar. Das PDF-CO-Zündmodell rechnet zwar den Zündverzug korrekt, liefert aber im Gegensatz zum Fortschrittsvariablenmodell für die 7 Hauptspezies keine chemischen Quellterme, die zu einer Temperaturerhöhung in der Zündphase führen. Dies ist ein selbstverstärkender Effekt, der bei niedrigen Sauerstoffkonzentrationen an Bedeutung gewinnt und letztlich für den Kraftstoffumsatz in der darauffolgenden Vormisch- und Diffusionsphase verantwortlich ist. In Abb. 7.11 ist der Einfluss besonders gut sichtbar, da hier die Sauerstoffkonzentrationen des Oxidators lediglich 8.6% beträgt. Hier zeigt sich der Vorteil des ganzheitlichen Ansatzes des Fortschrittsvariablen-Modells (keine Aufteilung in Zünd- und Verbrennungsmodell).

Die lokale Auswertung von Betriebspunkt 3 ist in Abb. 7.12 dargestellt. Eine Schnittebene in der Strahlachse illustriert den lokalen Vergleich der Temperatur, des Mischungsbruchs, der Zündvariable und der Wärmefreisetzungsrates beider Modelle (blauer Rahmen: PDF-Timescale-Modell, roter Rahmen: Fortschrittsvariablenmodell) zu 4 verschiedenen Zeitpunkten:

1. Zündphase (-4°KW): Die λ -1-Isofläche zeigt durch alle Phasen hinweg, dass die Gemischausbreitung mit beiden Modellen sehr ähnlich ist. Die Schnittebenen mit den Mischungsbrüchen bestätigen das. Der Hauptunterschied in der Zündphase ist die Wärmefreisetzung beim Fortschrittsvariablenmodell.
2. Vormischphase (0°KW): Hier sind die Unterschiede in der Wärmefreisetzung größer, da die Reaktionszone beim Progress-Modell in Stöchiometrienähe deutlich breiter ist. Deshalb ist die Temperatur nahe der Muldenkante höher.

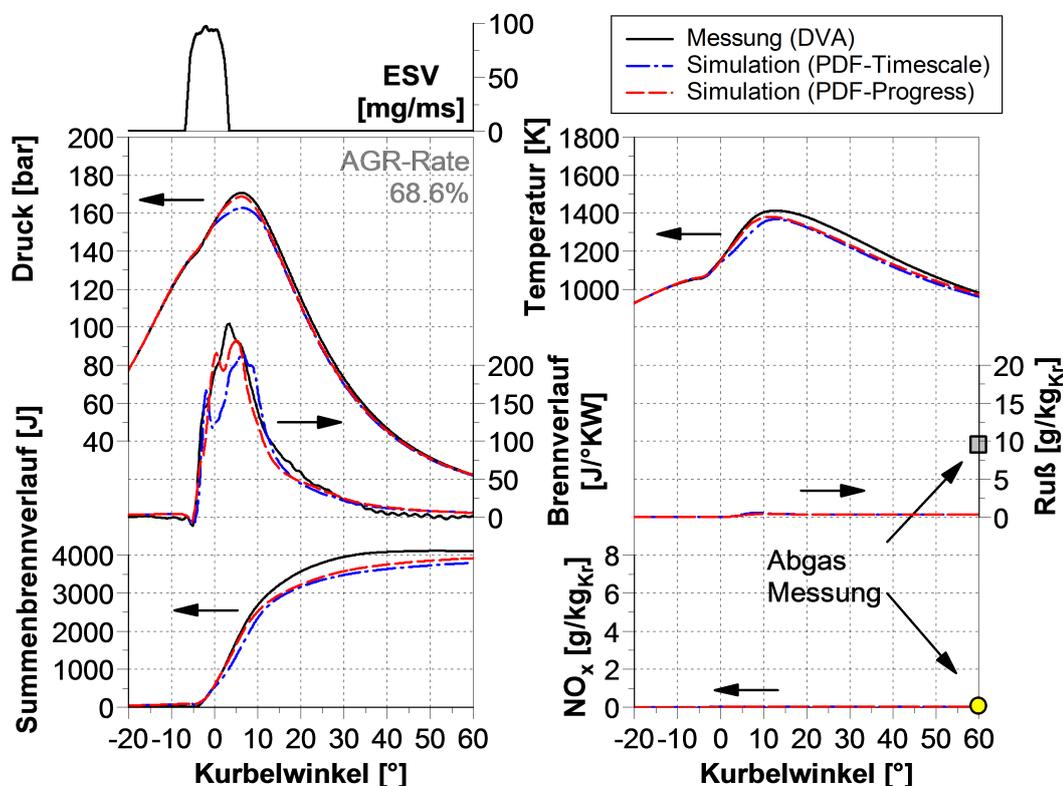


Abbildung 7.10: Betriebspunkt 2: Vergleich von Messung (DVA) und Simulation mit dem PDF-Timescale und Fortschrittsvariablen-Modell.

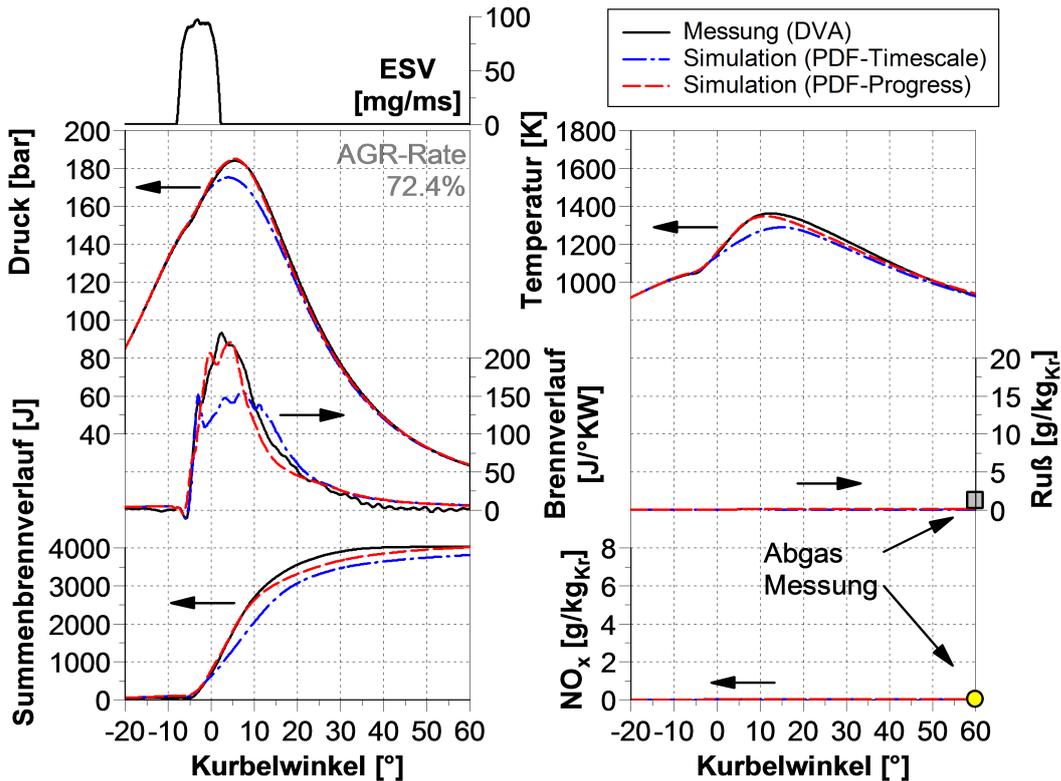


Abbildung 7.11: Betriebspunkt 3: Vergleich von Messung (DVA) und Simulation mit dem PDF-Timescale und Fortschrittsvariablen-Modell.

3. Diffusionsphase (10°KW): In dieser Phase sind die Reaktionsraten beider Modelle sehr ähnlich. Der Wert der Fortschrittsvariable in der Schnittebene ist in weiten Bereichen gleich 1. Daraus lässt sich schließen, dass die Reaktionen im Gleichgewicht sind und nur die Durchmischung von mageren und fetten Bereichen zur weiteren Energiefreisetzung führt.
4. Ausbrandphase (20°KW): Bei diesem Betriebspunkt sind 20°KW nach OT bereits 80 % des Kraftstoffs umgesetzt. Die Wärmefreisetzung ist nur noch sehr moderat. Beim PDF-Timescale-Modell existieren noch einige Bereiche, mit nennenswerten Reaktionsraten, da diese zuvor stark unterschätzt wurden.

Für die Schadstoffbildung sind die lokalen Sauerstoffkonzentrationen und Temperaturen entscheidend. In den Betriebspunkten 2 und 3 sind die AGR-Raten höher als der Parameterbereich der Rußbibliothek. Demnach ist nachvollziehbar, dass die Rußbildung in beiden Fällen stark unterschätzt wird. Die Bewertung der Rußergebnisse ist hier nicht möglich. Die thermische NO-Bildung hängt stark von der Temperatur ab. Aufgrund der niedrigen Sauerstoffkonzentrationen bei Betriebspunkt 2 und 3 sind die Gleichgewichtstemperaturen so gering, dass kaum NO_x entsteht, was am integralen Verlauf in Abbildungen 7.10 und 7.11 und am Rohemissionswert erkennbar ist. Eine lokale Analyse liefert aufgrund der niedrigen integralen Werte keinen Mehrwert.

Bei Betriebspunkt 1 mit ca. 16.6 Vol-% Sauerstoff werden beide Schadstoffe gebildet. Das thermische NO entsteht dabei nach Einsetzen der Diffusionsphase bis ca. 20°KW. In diesem

Bereich stimmt der integrale Brennverlauf von Messung und Simulation sehr gut überein. Das erlaubt die Schlussfolgerung, dass die lokalen Temperaturen sehr gut passen, die die Grundlage für korrekte Berechnung der NO-Bilderaten sind. Der NO-Rohemissionswert aus der Messung wird durch das Modell sehr gut wiedergegeben. Rußbilde- und Rußoxidationsprozesse finden simultan statt. In der Ausbrandphase während der Expansion überwiegt bei konventionellen Brennverfahren¹¹ die Rußoxidation. Am Summenbrennverlauf bei ca. 20°KW ist zu erkennen, dass in dieser Phase die Wärmefreisetzung und somit auch die Temperatur unterschätzt werden. In dieser Phase dominiert die Gemischbildung die Wärmefreisetzung, weshalb daraus auf eine unzureichende Mischung geschlossen werden kann. Die unzureichende Durchmischung sowie die zu niedrigen Temperaturen führen dazu, dass der gebildete Ruß nicht oxidiert werden kann. Abb. 7.13 zeigt die lokale Auswertung der Schadstoffgrößen. In den heißen Zonen nach der Zündung mit Temperaturen bis 2200 K wird zunächst kein NO_x gebildet, da der NO-Bildeprozess verhältnismäßig langsam ist. Erst ab 20°KW kann in Bereichen, wo die Einspritzstrahlen aufgrund der Umlenkung an der Mulde zusammen treffen, eine nennenswerte NO-Konzentration beobachtet werden. Die Rußbildeprozesse (rote Bereiche) setzen sofort nach der Zündung ein, wobei der Rußoxidationsprozess (blaue Bereiche) mangels Ruß zunächst nur kleine Beträge aufweist. Im weiteren Verlauf der Gemischbildung verschieben sich die Verhältnisse. Ab 20°KW überwiegt die Rußoxidation. Die Reaktionsraten der Oxidation werden jedoch aufgrund unzureichender Durchmischung in der Simulation unterschätzt. Dennoch vermitteln die lokalen Auswertungen, wo welche Schadstoffe ihren Ursprung haben. Erkenntnisse, die für die Brennverfahrensentwicklung von sehr großem Wert sind.

¹¹Einspritzbeginn -20°KW bis 10°KW, AGR-Raten bis 50 %, minimale λ ca. 1.2

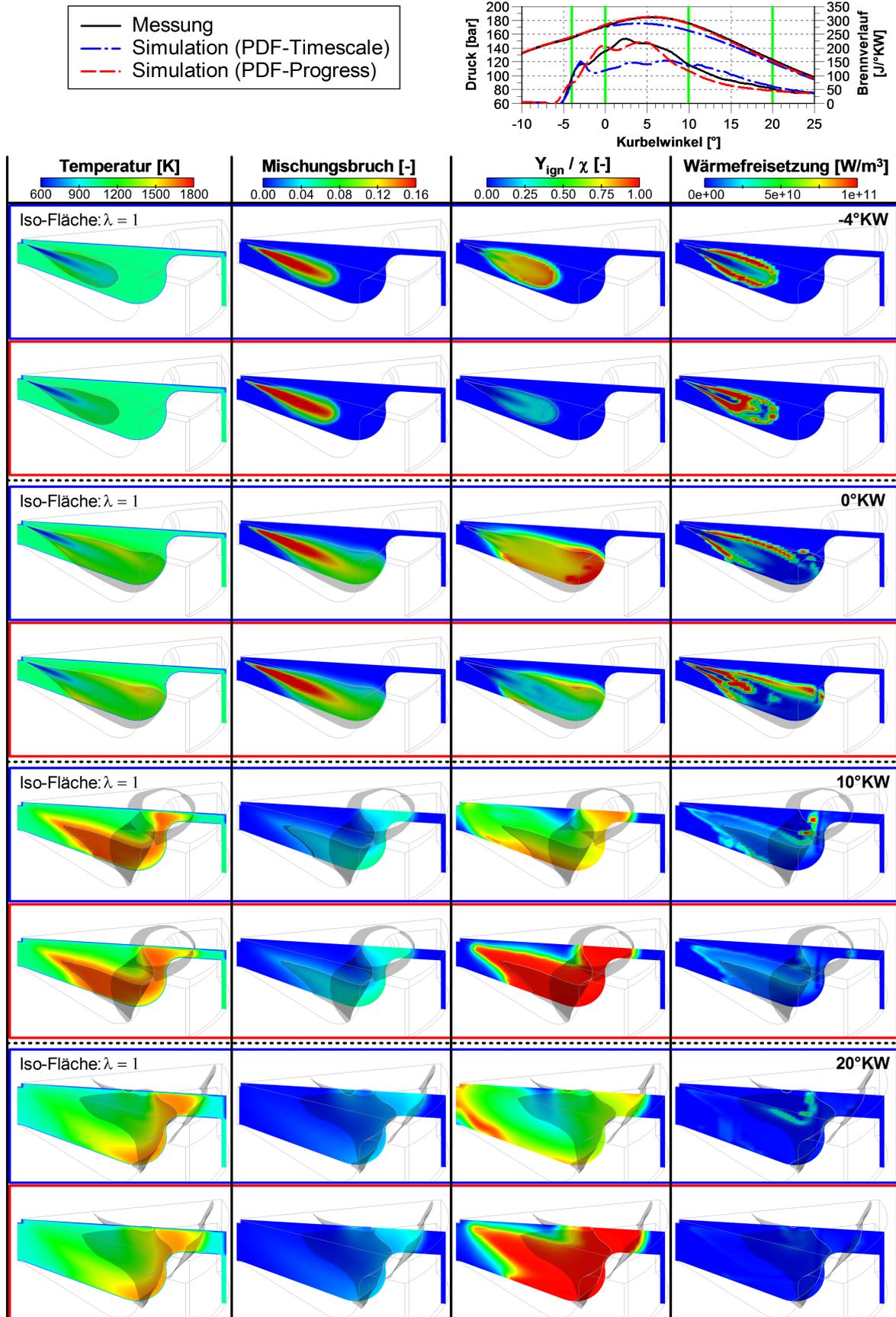


Abbildung 7.12: Betriebspunkt 3: Lokaler Vergleich der Simulationen in Temperatur, Mischungsbruch, Zündvariable und Wärmefreisetzungsrates des PDF-Timescale und Fortschrittsvariablen-Modells.

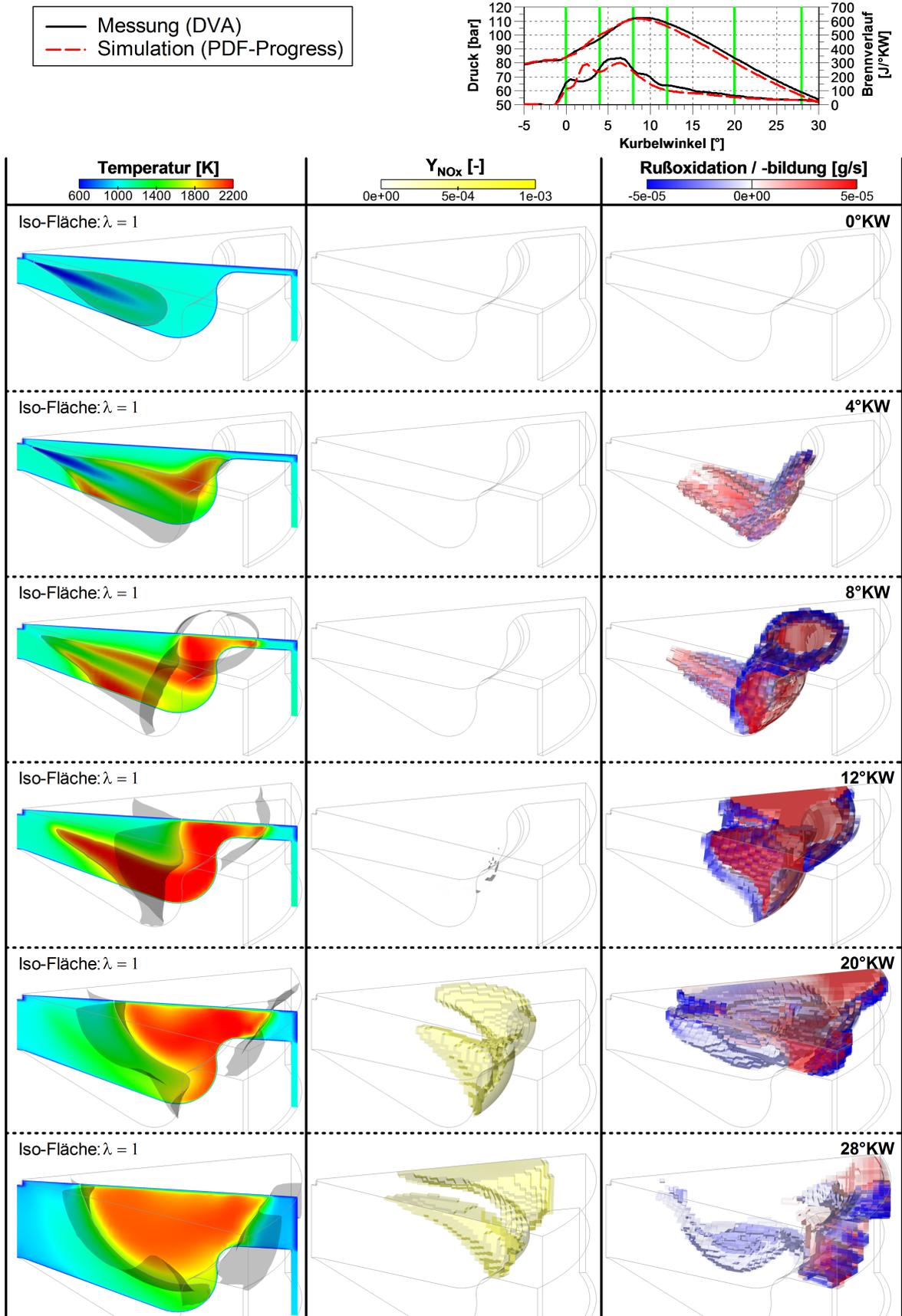


Abbildung 7.13: Betriebspunkt 1: Lokale Auswertung der Simulation mit dem Fortschrittsvariablen-Modell. Dargestellt ist die Temperatur im Schnitt (Strahlachse), die NO-Anteile und die Rußbildungs- und Rußoxidationsraten.

7.3.2 Pkw-Motor mit Mehrfacheinspritzung

2007 wurde von der Daimler AG der 2.2 Liter DE-Dieselmotor *Mercedes-Benz OM651* vorgestellt [118]. Dieser wird mittlerweile u. a. durch Variation der Aufladegruppe und des Einspritzsystems mit Spitzenleistungen bis 150 kW in nahezu alle Mercedes-Benz Baureihen und leichte Nutzfahrzeuge verbaut. Bei der Markteinführung erreichte der Motor mit Dieselpartikelfilter die Emissionsvorschrift EU5. Seit 2013 werden durch Verwendung von SCR-Abgasanlagen die Stickoxidemissionen auf EU6-Niveau abgesenkt. Der Motor zeichnet sich besonders durch sein hohes Drehmoment bei niedrigen Drehzahlen und durch einen sehr niedrigen Verbrauch aus. Die wichtigsten technischen Daten der Variante mit 150 kW Nennleistung finden sich in Tab. 7.5. Die unten aufgeführten Messreihen wurden an einem Einzylinderaggregat gefahren. Dazu wurde eine seriennahe Hardware bestehend aus der *Omega-Kolbenmulde* mit Verdichtungsverhältnis 16.2 und 7-Loch-Einspritzdüse verwendet.

Mercedes-Benz OM651			
	Einheit	Wert / Info	Bild
Hubvolumen	Liter	2.143	
Leistung	kW	150	
Zylinder	-	4	
Hub	mm	92	
Bohrung	mm	83	
Verdichtungsverhältnis	-	16.2	
Drall	-	2.1 - 3.5	
Mulde	-	Omega-Mulde	
Düse	cm ³ /60s	7-Loch, HD860	
<i>Delphi Piezo-Einspritzsystem</i>			

Tabelle 7.5: Technische Daten und Bild [Daimler AG] des Pkw-Basismotors OM651 [118].

Bei Pkw-Motoren spielt aus Sicht der Brennverfahrensentwicklung neben Leistung und Verbrauch aus Komfortgründen noch das Motorgeräusch eine wesentliche Rolle. Um die Geräuschentwicklung der (Vormisch-)Verbrennung zu reduzieren erlaubt das Einspritzsystem bis zu zwei Voreinspritzungen. Diese erhöhen die Brennraumtemperatur derart, dass die Haupteinspritzung schneller zündet und der Druckanstieg moderater ausfällt. Eine weitere Maßnahme ist die Minderung des Einspritzdrucks. Beide Maßnahmen führen letztlich zu einem etwas höheren Kraftstoffverbrauch. Eine ungünstige zeitliche Taktung der Einspritzungen kann zu überproportionaler Rußbildung führen [89].

Die Mehrfacheinspritzung stellt eine besondere Herausforderung an Fortschrittsvariablenmodelle dar. Der Reaktionsfortschritt einer Verbrennung mit Einfacheinspritzung nimmt im Mittel zu. Lokal erreichen die Reaktionen gegen Ende der Ausbrandphase ihr Gleichgewicht oder frieren auf dem Weg dahin aufgrund der Temperaturreduktion während Expansion ein. Brennverfahren mit Mehrfacheinspritzungen verhalten sich bezüglich des Reaktionsfortschritts nicht eindeutig, da mehrmals Kraftstoff eingespritzt wird und somit die Reaktionen immer wieder von neuem unter sich verändernden thermodynamischen Randbedingungen beginnen. Zündet eine Vorein-

spritzung wird die eingespritzte Menge nahezu vollständig umgesetzt. Lediglich in sehr mageren Bereichen bleibt etwas unverbrannter Kraftstoff übrig. Das globale Luft-Kraftstoff-Verhältnis ist sehr hoch. Demnach ist noch genügend Oxidator für die Hauptverbrennung vorhanden. Dennoch ist der Reaktionsfortschritt der Voreinspritzung zunächst gleich eins, da unter den gegebenen thermodynamischen Randbedingungen in der Regel das lokale Gleichgewicht erreicht wird. Beim Einsetzen der Haupteinspritzung muss der Zündverzug erneut berechnet werden. Die Fortschrittsvariable muss dann in den Bereichen, wo die Voreinspritzung das Gleichgewicht erreicht hatte, wieder geeignet zurückgesetzt werden. In diesen Bereichen spielen die Projektionsterme eine tragende Rolle. Dabei ist die oberste Prämisse, dass Masse und Energie erhalten bleiben. Die Simulationen der Betriebspunkte aus Tab. 7.6 demonstrieren das Verhalten des in dieser Arbeit vorgestellten Fortschrittsvariablenmodells.

Betriebsparameter OM651							
Parameter	Variable	Einheit	Werte				
Betriebspunkt	BP	-	1	2	3	4	5
th. Verdichtungsverh.	ϵ_{th}	-	15.8				
Drehzahl	n	1/min	2000				4000
spezifische Last	p_{me}	bar	7.2	7.0	20.0	18.6	21.1
Drall	Θ	-	3.5		2.1		
AGR-Rate	AGR	%	0.0	42.9	0.0	38.5	0.0
Ladedruck	$p_{2,abs}$	mbar	1724	1722	3811	3817	3026
Saugrohr-Temperatur	T_2	°C	40.3	73.7	39.7	104.4	55.7
Kraftstoffmasse	m_B	mg/ASP	24.88	24.92	58.24	58.06	74.65
Luftmasse	m_{LAZ}	mg/ASP	886.8	466.5	2090.7	1089.5	1398.7
Luftverhältnis	λ	-	2.44	1.28	2.46	1.29	1.28
Verbrennungsschwerp.	Q_S	°KW n. OT	19.4	21.9	16.7	18.8	18.3
Sauerstoffmassenanteil	Y_{O_2}	%	22.93	15.17	22.96	15.93	22.70
Library-AGR ($\lambda_{Abgas}=1$)	ξ_{egr}	%	1.6	34.9	1.4	31.6	2.6
NO_x-Emissionen	m_{NOxB}	g/kg _{fuel}	32.95	0.80	60.04	1.58	37.21
Ruß-Emissionen	m_{RUB}	g/kg _{fuel}	0.02	3.17	0.12	4.92	0.91

Tabelle 7.6: Ausgewählte Betriebspunkte des OM651 Einzylinderaggregats.

Die fünf Betriebspunkte stammen aus drei Messreihen. Zwei AGR-Variationen bei einer Drehzahl von 2000 U/min und einem Mitteldruck von ca. 7 bar und ca. 20 bar mit konstanter Ansteuerung der Einspritzung mit je einer Vor- und Haupteinspritzung. Eine Schwerpunktsvariation bei 4000 U/min bei Nennlast mit einem Mitteldruck von ca. 21 bar. Der Ladedruck wurde jeweils konstant gehalten und der Abgasgedruck ca. 150 mbar oberhalb von $p_{2,abs}$ eingestellt. Die übrigen Randbedingungen entsprechen dem Applikationsstand des Serienmotors. Zur Einordnung der ausgewählten Messpunkte sind die Schadstoffmesswerte Ruß und NO_x, das λ , die AGR-Rate, die Saugrohrtemperatur und die Schwerpunktslage der kompletten Messreihen in Abb. 7.14 über der Sauerstoffkonzentration des Oxidators dargestellt. Beim Nennlastfall wird kein externes

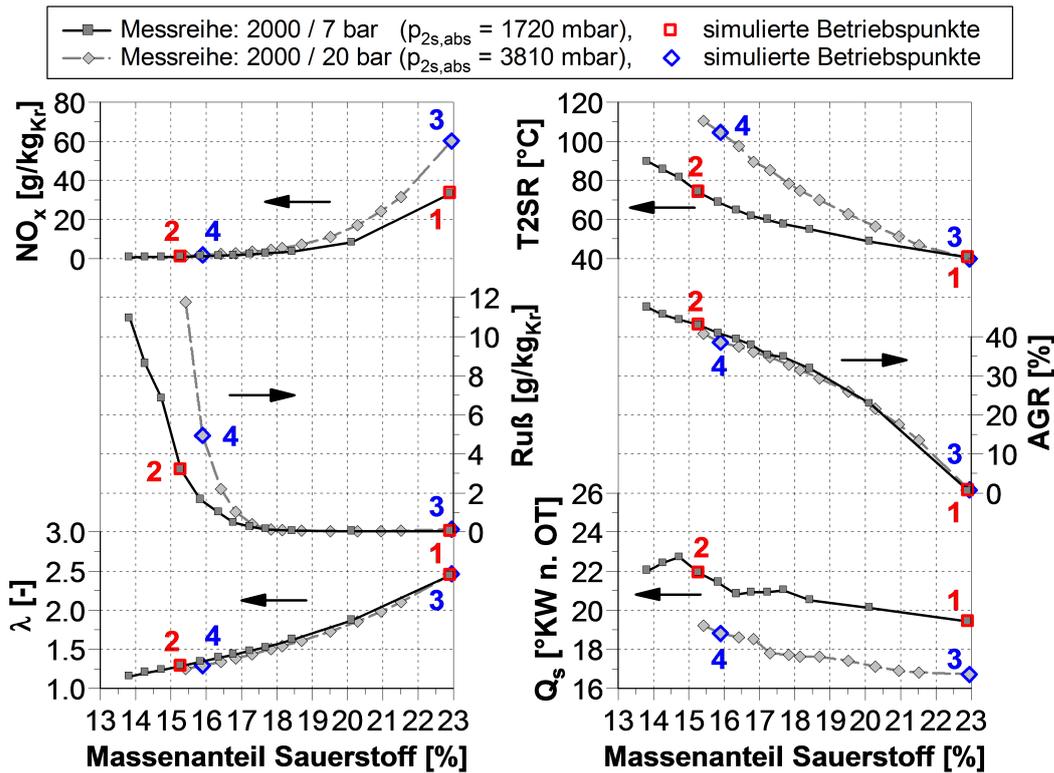


Abbildung 7.14: Messreihe bei 2000/min, p_{me}=7 bar (Teillast, AGR-Variation) und p_{me}=20 bar (Hochlast, AGR-Variation). Ausgewählte Betriebspunkte 1 & 2 sind rot und 3 & 4 blau markiert.

Restgas zurückgeführt, weshalb in Abb. 7.15 die Darstellung über dem Verbrennungsschwerpunkt erfolgt, der gleichzeitig der Variationsparameter ist.

In Abb. 7.14 ist zu erkennen, dass durch die Hinzunahme von externem Restgas die Sauerstoffkonzentration abnimmt und die Temperatur im Saugrohr steigt. Die Stickoxide nehmen mit zunehmendem Restgas ab, da die maximalen Verbrennungstemperaturen sinken. Der Verbrennungsschwerpunkt rückt etwas nach spät, da sich die Verbrennungsdauer mit zunehmender AGR-Rate verlängert. Des Weiteren ist zu sehen, dass ab einer Sauerstoffkonzentration von ca. 15 %, also einem λ von ca. 1.3, der Rußwert stark ansteigt. Während Betriebspunkt 1 den Ausgangspunkt der AGR-Variation darstellt, liegt Betriebspunkt 2 im Bereich des starken Rußgradienten. Hier leidet das Brennverfahren offensichtlich bereits an Sauerstoffmangel, der aber dem Stickoxidemissionswert zu Gute kommt. Das prinzipielle Verhalten des Brennverfahrens der Hochlast-Messreihe ist der Teillast-Messreihe sehr ähnlich. Die erhöhte Kraftstoffmenge und somit niedrigeren λ-Werte bei gleicher Sauerstoffkonzentration des Oxidators führen zu etwas höheren Absolutwerten. Das λ von ca. 1.3 ist hier bereits bei einer Sauerstoffkonzentration von 16 % erreicht. Entsprechend wurden die Betriebspunkte 3 und 4 ausgewählt. Der Nennlastfall in Abb. 7.15 erreicht seine Rußgrenze von etwa 1 g/kg_{fuel} ebenso bei einem λ von ca. 1.3, hier jedoch ohne externes Restgas aufgrund der hohen Einspritzmenge. Die Verschiebung des Verbrennungsschwerpunkts nach früh führt zu höheren Spitzendrücken, somit zu höheren maximalen Verbrennungstemperaturen und schließlich zu höheren Stickoxidwerten. Die gemessenen Rußwerte haben ein lokales Minimum bei Variation der Schwerpunktslage. Dabei wirkt folgender globaler Mechanismus: je später die Verbrennungslage desto weniger Ruß wird gebildet. Die Rußoxidationsphase ist bei fortwährend späterer Lage jedoch immer kürzer. Dies führt letztlich

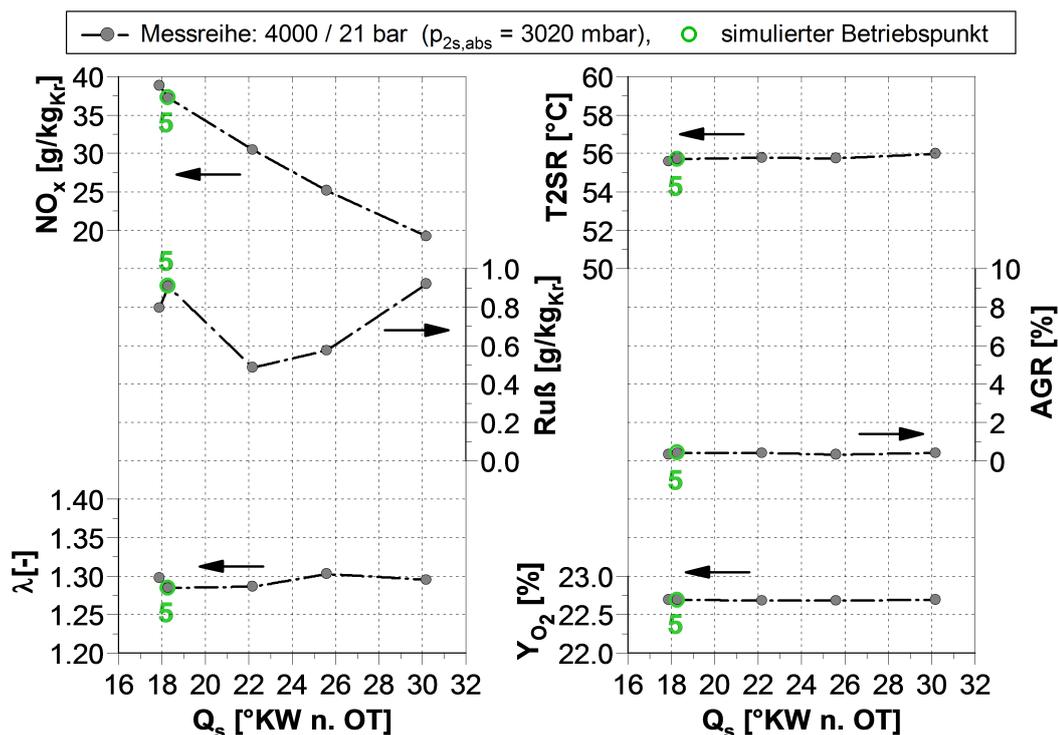


Abbildung 7.15: Messreihe bei 4000/min, $p_{me}=21$ bar (Nennlast, Schwerpunkt-Variation). Ausgewählter Betriebspunkt (5) ist grün markiert.

zu einem höheren Rußemissionswert beim Öffnen des Auslassventils. Ist die Verbrennungslage früh, dann ist zwar genügend Zeit für die Oxidation vorhanden, aber der Auftreffpunkt des Einspritzstrahls auf die Mulde wird zunehmend ungünstig. Dies wirkt schließlich nachteilig auf die Gemischbildung und somit Rußoxidation.

Die Abbildungen 7.16 und 7.17 zeigen den Vergleich der Betriebspunkte 1 und 2 des PDF-Timescale-Modells und des Fortschrittsvariablen-Modells (PDF-Progress) mit der Messung. Beide Modelle stimmen im Zündverzug der Vor- und Haupteinspritzung sehr gut überein. Im Fall ohne externes Restgas ist der Umsatz der Voreinspritzung etwas zu hoch, was erhöhte lokale Brennraumtemperaturen zur Folge hat und somit zu einem deutlich erhöhten Vormischpeak beider Modelle führt. In der massengemittelten Brennraumtemperatur ist der Effekt kaum erkennbar. Die Lage des Vormischpeaks bei der Simulation mit PDF-Timescale-Modell ist ca. 2°KW früher, was eine etwas frühere und intensivere Rußbildung gegenüber dem Fortschrittsvariablen-Modell nach sich zieht. Auf die Stickoxidbildung ist der Einfluss sehr gering. Der gebildete Ruß wird mit beiden Modellen vollständig oxidiert und der Rohemissionswert entspricht dem Messwert. Die Stickoxidwerte werden mit beiden Verbrennungsmodellen unterschätzt. Betriebspunkt 2 stimmt während der Zünd-, Vormisch- und Diffusionsphase mit beiden Modellen deutlich besser als Betriebspunkt 1 mit der Messung überein. Lediglich während der Zündphase der Haupteinspritzung überschätzt das Fortschrittsvariablen-Modell leicht die Wärmefreisetzung. Aufgrund der guten Konformität mit der Messung wird dieser Betriebspunkt in einem späteren Abschnitt lokal analysiert und ausführlich diskutiert.

Die in Abbildungen 7.18 und 7.19 dargestellten Betriebspunkte 3 und 4 mit den hohen spezifischen Lasten von ca. 20 bar bestätigen die gute Übereinstimmung der Simulationsergebnisse mit den Messungen. Am Einspritzverlauf (ESV) ist die längere Einspritzdauer gegenüber dem

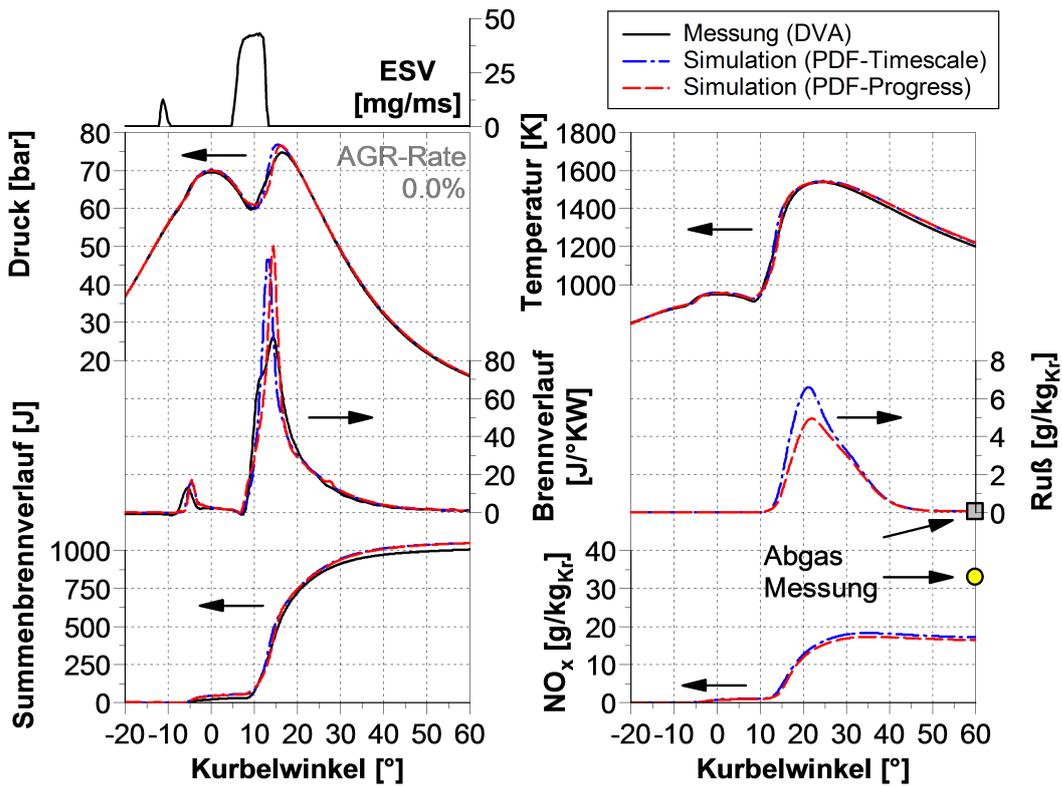


Abbildung 7.16: Betriebspunkt 1: Vergleich von Messung (DVA) und Simulation mit dem PDF-Timescale und Fortschrittsvariablen-Modell.

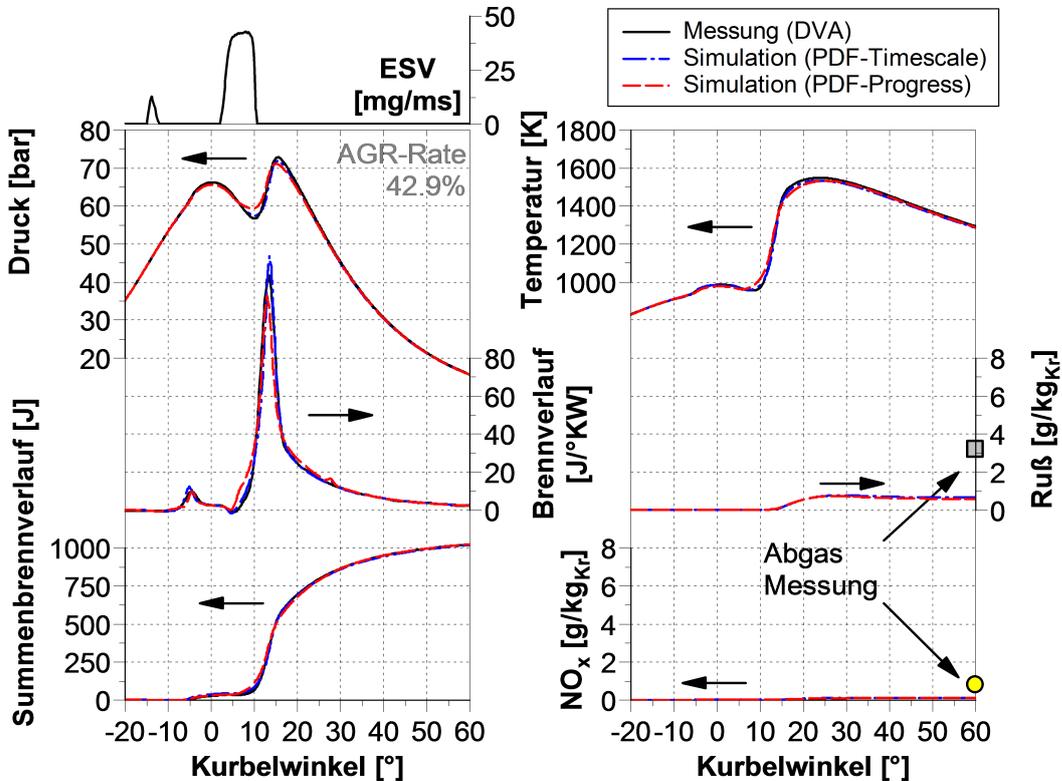


Abbildung 7.17: Betriebspunkt 2: Vergleich von Messung (DVA) und Simulation mit dem PDF-Timescale und Fortschrittsvariablen-Modell.

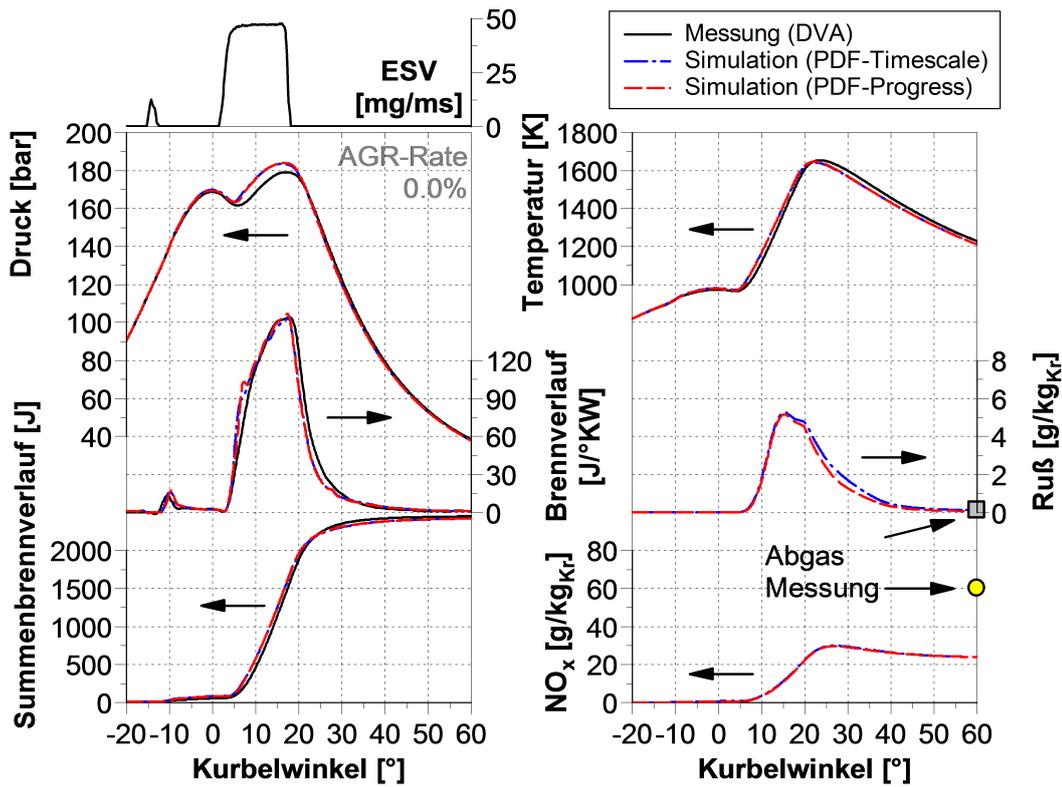


Abbildung 7.18: Betriebspunkt 3: Vergleich von Messung (DVA) und Simulation mit dem PDF-Timescale und Fortschrittsvariablen-Modell.

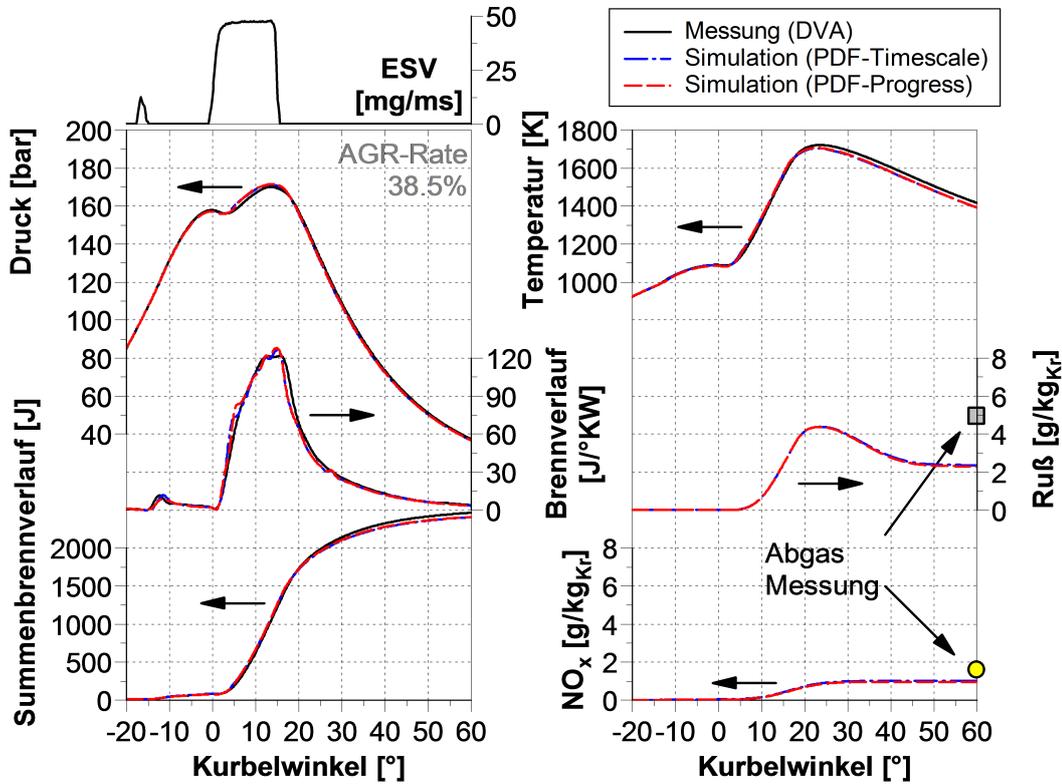


Abbildung 7.19: Betriebspunkt 4: Vergleich von Messung (DVA) und Simulation mit dem PDF-Timescale und Fortschrittsvariablen-Modell.

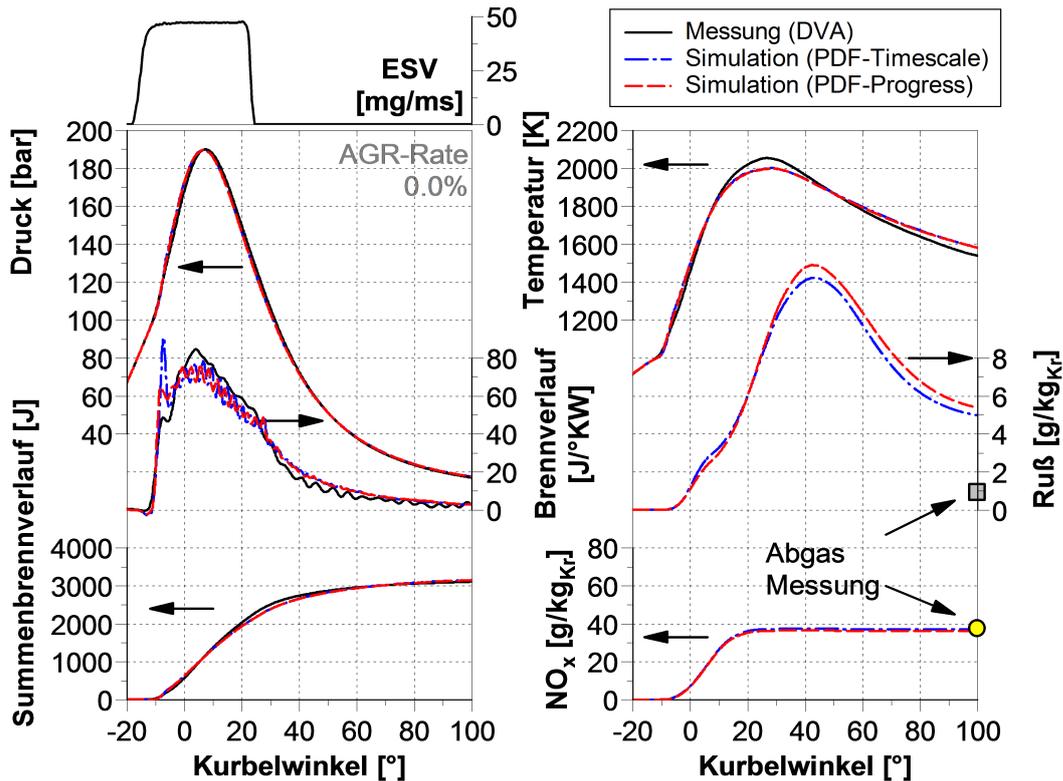


Abbildung 7.20: Betriebspunkt 5: Vergleich von Messung (DVA) und Simulation mit dem PDF-Timescale und Fortschrittsvariablen-Modell.

Teillastfall gut erkennbar. Der Vergleich der Brennverläufe zeigt, dass der Zündverzug der Vor- und Haupteinspritzung, die Vormisch-, Diffusions- und Ausbrandphase ausgezeichnet abgebildet werden. Einziger Kritikpunkt sind der erhöhte Umsatz der Vormischverbrennung und die Unterschätzung der Rohemissionen im Fall ohne externes Restgas. Hier wird zwar der Ruß gemäß der Messung vollständig oxidiert, jedoch die Stickoxidemissionen um ca. 50 % unterschätzt. Bei Betriebspunkt 4 mit einer externen Restgasrate von ca. 38 % ist die Rußoxidation zu gering, die Rohemission um ca. 50 % überschätzt. Die Übereinstimmung der Stickoxide hingegen ist akzeptabel, auch wenn der relative Fehler wieder bei ca. 50 % liegt.

Abb. 7.20 zeigt den Vergleich im Nennlastfall. In diesem Fall wird der gesamte Kraftstoff mit maximalem Einspritzdruck in Form einer Haupteinspritzung eingespritzt (Blockprofil). Wieder zeigt der Vergleich der simulierten Brennverläufe mit der DVA die hervorragende Übereinstimmung des Zündverzugs, der Vormisch-, Diffusions- und Ausbrandphase. Das Fortschrittsvariablen-Modell hat einen etwas geringeren Vormischpeak gegenüber dem PDF-Timescale-Modell und bildet damit die Messung in dieser Phase etwas besser ab. Diese Differenz hat eine Auswirkung auf den Verlauf der Rußemission über Gradkurbelwinkel. Aufgrund des niedrigen globalen λ von ca. 1.3 ist die Gemischbildung in der Ausbrandphase für die Rußoxidation entscheidend. Da die Rußemission gegen Ende der Expansion sehr stark überschätzt wird, liegt die Vermutung nahe, dass sowohl die Homogenisierung des verbrannten Gemischs und die damit verbundene Rußoxidation stark unterschätzt werden. Ein Grund dafür könnte die vereinfachte Vernetzung der Brennraumgeometrie sein. In einem Sektornetz werden alle Totvolumina des Zylinderkopfs und des Kolbens dem Quetschspalt zugeschlagen. Dies führt zu einer Erhöhung

des Quetschspalts und somit zu einer reduzierten Sogwirkung während der Expansion [89]. Auf die Stickoxidemission hat diese Vereinfachung keinen großen Einfluss. Hier sind die lokalen Prozesstemperaturen in der frühen Diffusionsphase maßgeblich, was durch die gute Übereinstimmung der Stickoxidemissionen bestätigt wird. Alle fünf Betriebspunkte werden mit beiden Verbrennungsmodellen sehr gut wiedergegeben. Beim Brennverfahren des OM651 ist der Benefit des Fortschrittsvariablen-Modells gegenüber dem PDF-Timescale-Modell anhand der *integralen* Größen wie Druck-, Temperatur und Brennverlauf schwer auszumachen. Deshalb folgen für Betriebspunkt 2, welcher die beste Übereinstimmung mit der Messung aufweist, lokale Analysen der Gemischbildung und Verbrennung.

Abb. 7.21 zeigt in der Schnittebene der Strahlachse die lokalen Temperaturen, den Mischungsbruch und die Fortschrittsvariable χ des Progress-Modells während der Zündung der Vor- und Haupteinspritzung und der Vormisch- und Diffusionsphasen der Verbrennung. Die λ -1-Isofläche ist halbtransparent in grau dargestellt. Diese vermittelt einen Eindruck über das Gemischverhalten im gesamten Brennraum und illustriert den hohen Drall. Hauptaugenmerk bei dieser Abbildung liegt auf den lokalen Werten der Fortschrittsvariable. Diese sehen über alle Phasen der Verbrennung in Korrelation mit dem lokalen Mischungsbruch und der sich ergebenden Temperatur plausibel aus. Bei 6°KW ist gut zu erkennen, wie die Haupteinspritzung die Bereiche mit Fortschrittsvariable gleich eins verdrängt und zunehmend zurücksetzt. Ein Teil des verbrannten Gemischs wird durch den Impuls der Einspritzung an den Zylinderkopf gedrückt (10°KW). Die Temperaturen der verbrannten Bereiche sinken durch die Mischung zunächst leicht ab bevor im weiteren Verlauf die Haupteinspritzung zwischen 10°KW und 14°KW zündet und in die Hauptverbrennung mündet. In der Ausbrandphase bei 18°KW ist ein Großteil des Kraftstoffs umgesetzt und der Reaktionsfortschritt nahe eins.

In den Abbildungen 7.22 und 7.23 ist der Vergleich der Simulationsmodelle (PDF-Timescale vs. PDF-Progress) nochmals aus zwei Perspektiven dargestellt. Für diesen Vergleich ist zusätzlich zur Schnittebene in der Strahlachse eine Schnittebene auf einem Zylinder kurz vor der Muldenkante eingefügt worden, die jeweils mit der Temperatur und der Zündvariablen (Y_{ign} / χ) eingefärbt ist. Die Zylinder-Schnittebenen illustrieren sehr anschaulich die Bewegung im Brennraum im Uhrzeigersinn des verbrannten Gemischs der Voreinspritzung aufgrund des hohen Dralls. Des Weiteren markieren die orangenen Iso-Volumina die gezündeten Orte im Brennraum (Zündflag = 1 bzw. $\chi > 0.5$). Hervorzuheben ist, dass beim Zündmodell des PDF-Timescale-Modells der sogenannte Zündflag nicht transportiert wird. Gerade bei der Voreinspritzung von -4°KW bis 4°KW ist gut zu erkennen, dass sich das gezündete Volumen nicht mit dem Drall weiterbewegt. In den gezündeten Zellen wird kein chemischer Zündverzug berechnet. Erreicht der Kraftstoff der Haupteinspritzung diese Zellen wird umgehend die Reaktionsrate mit dem PDF-Timescale-Modell berechnet. Gerade bei 6°KW sinkt die Temperatur in der Strahlmitte aufgrund des kalten Kraftstoffs ab, was aber beim Zündmodell des PDF-Timescale-Modells keine Auswirkung auf die Zündvariable hat. Beim Fortschrittsvariablen-Modell wird die Fortschrittsvariable transportiert. Der Ort des Volumen mit $\chi > 0.5$ ändert sich über den Verlauf der Reaktion der Voreinspritzung. Dabei stellen die Projektionsterme sicher, dass die sieben Spezies stets eine Funktion des reduzierten Zustandsvektors sind. Der größte Unterschied zum bisherigen Zündmodell ist bei 6°KW in der Strahlmitte sichtbar. Dort wird die Fortschrittsvariable entsprechend des Reaktionsfortschritts zurückgesetzt. Da in der Strahlmitte die Kraftstoffanteile sehr hoch sind, sind die Temperaturen entsprechend niedrig. In diesen sauerstoffarmen Bereichen laufen die Zündreaktionen im Vergleich zu leicht fetten ($\lambda \approx 0.7$)

und stöchiometrischen Regionen sehr langsam ab. Letztlich ist dort der Reaktionsfortschritt beim PDF-Progress-Modell über längere Zeit (bis ca. 12°KW) nahezu Null. Erst während der Expansion nach intensiver Durchmischung durch die sich umkehrende Quetschspaltströmung reagieren diese Zonen vollständig durch. Bei 16°KW ist der Wert der Fortschrittsvariable nahezu überall im Brennraum gleich eins, weshalb auch das orangene Volumen fast den gesamten Brennraum ausfüllt. Umso erstaunlicher ist die Ähnlichkeit der lokalen Temperaturen des PDF-Timescale- und des PDF-Progress-Modells. Unterschiede sind mit der gewählten Temperaturskala kaum feststellbar. Erst bei 16°KW in der Ausbrandphase im Bereich der Kolbenoberfläche sind leicht höhere Temperaturen beim PDF-Timescale-Modell zu beobachten. Diese befinden sich in noch fetten Zonen und lassen den Schluss zu, dass die Reaktionsraten bei hohen Mischungsbrüchen mit dem PDF-Timescale-Modell etwas überschätzt werden. Beim Fortschrittsvariablen-Modell ist die chemische Zeitskala implizit enthalten. Gerade in der Ausbrandphase gewinnen diese wieder an Bedeutung, da die Reaktionen langsamer ablaufen. Die Ruß- und NO-Emissionswerte werden trotz der exzellenten Abbildung der gesamten Verbrennung unterschätzt. Daher ist es für die Analyse des Brennverfahrens gewinnbringend die lokalen Vorgänge wie in Abb. 7.24 darzustellen. Abgebildet sind die Temperatur auf der Schnittebene der Einspritzstrahlachse, die lokalen NO-Werte sowie die Rußbilde- und Rußoxidationszonen, welche Anhaltspunkte für eine weitere Optimierung der Verbrennungsparameter oder der Brennraumgeometrie (z. B. Mulde) liefern. Bei diesem Brennverfahren bildet sich ein heterogenes Gemisch während der Zünd- und Vormischphase aus. Stöchiometrische und leicht magere Zonen entstehen, wo nach dem Vormischpeak die Temperaturen verhältnismäßig hoch sind. Aufgrund der dort herrschenden hohen Temperaturen können die Stickoxidemissionen nur durch globale Parameter, wie z. B. Hinzunahme von externem Restgas, Verschiebung des Verbrennungsschwerpunkts nach spät oder Reduktion der Saugrohrtemperatur reduziert werden. Andernfalls müsste das Brennverfahren so angepasst werden, dass stöchiometrische und leicht magere Regionen mit sehr hohen Temperaturen vermieden werden. Beim Ruß hingegen bietet die Modifikation der Gemischbildung durch die Wahl anderer Einspritzparameter (Einspritzstrahlwinkel, Anzahl der Düsenlöcher, usw.) oder die Anpassung der Brennraumgeometrie insbesondere der Muldenform immer ein gewisses Reduktionspotenzial. Die Ausnutzung der vorhandenen Luft im Brennraum ist dabei entscheidend. Gerade die Aufteilung des Gemischs zwischen Quetschspalt und Mulde ist der wesentliche Faktor für eine gute Reduktion des in der Vormisch- und frühen Diffusionsphase gebildeten Rußes. Zusätzlich muss darauf geachtet werden, dass alle Betriebspunkte des Motors unter verschiedensten thermodynamischen Randbedingungen die Emissionsgrenzwerte einhalten. Da die Rußbilde- und Oxidationsreaktionen stark temperaturabhängig sind, muss die Homogenisierung möglichst schnell ablaufen. In Abb. 7.25 ist sehr gut zu erkennen, wie die Intensität der Reaktionen und damit die Farbintensität (rot / blau) abnimmt bis schließlich bei 50°KW die Rußreaktionen nahezu vollständig einfrieren. Wie schon beim Stickoxid kann durch die Wahl der globalen Parameter die Bildung maßgeblich reduziert werden. Auch hier spielt die Sauerstoffkonzentration eine große Rolle. Durch externe Restgasraten von mehr als 60 % lassen sich die Prozesstemperaturen auf ein Maß reduzieren, wo weder Stickoxid noch Ruß gebildet wird [153]. Doch werden diese Randbedingungen meist durch schlechte Wirkungsgrade und damit hohe Kraftstoffverbräuche erkauft.

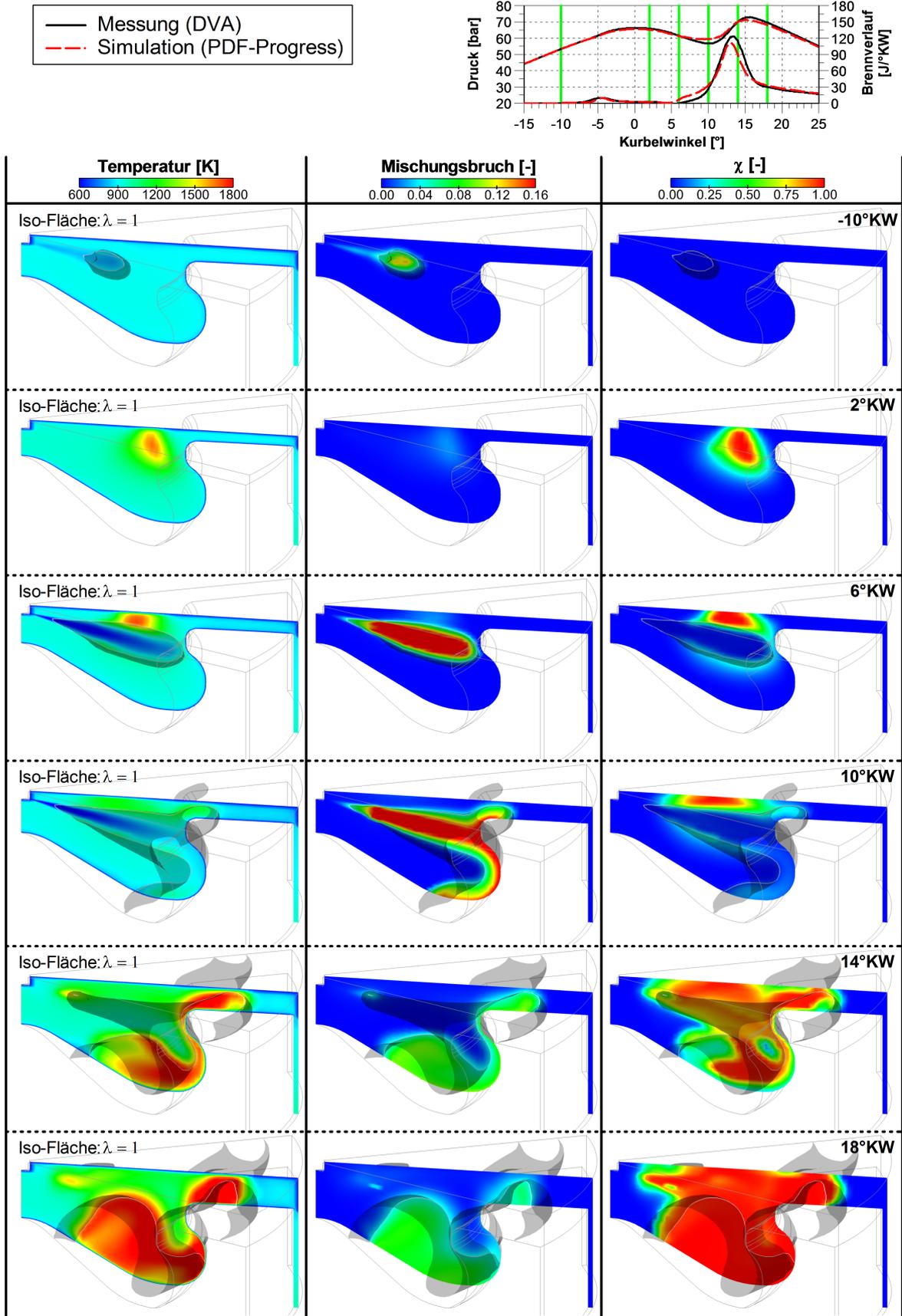


Abbildung 7.21: Betriebspunkt 2: Lokale Auswertung der Simulation mit dem Fortschrittsvariablen-Modell. Dargestellt ist die Temperatur, der Mischungsbruch und die Fortschrittsvariable auf der Schnittebene der Strahlachse.

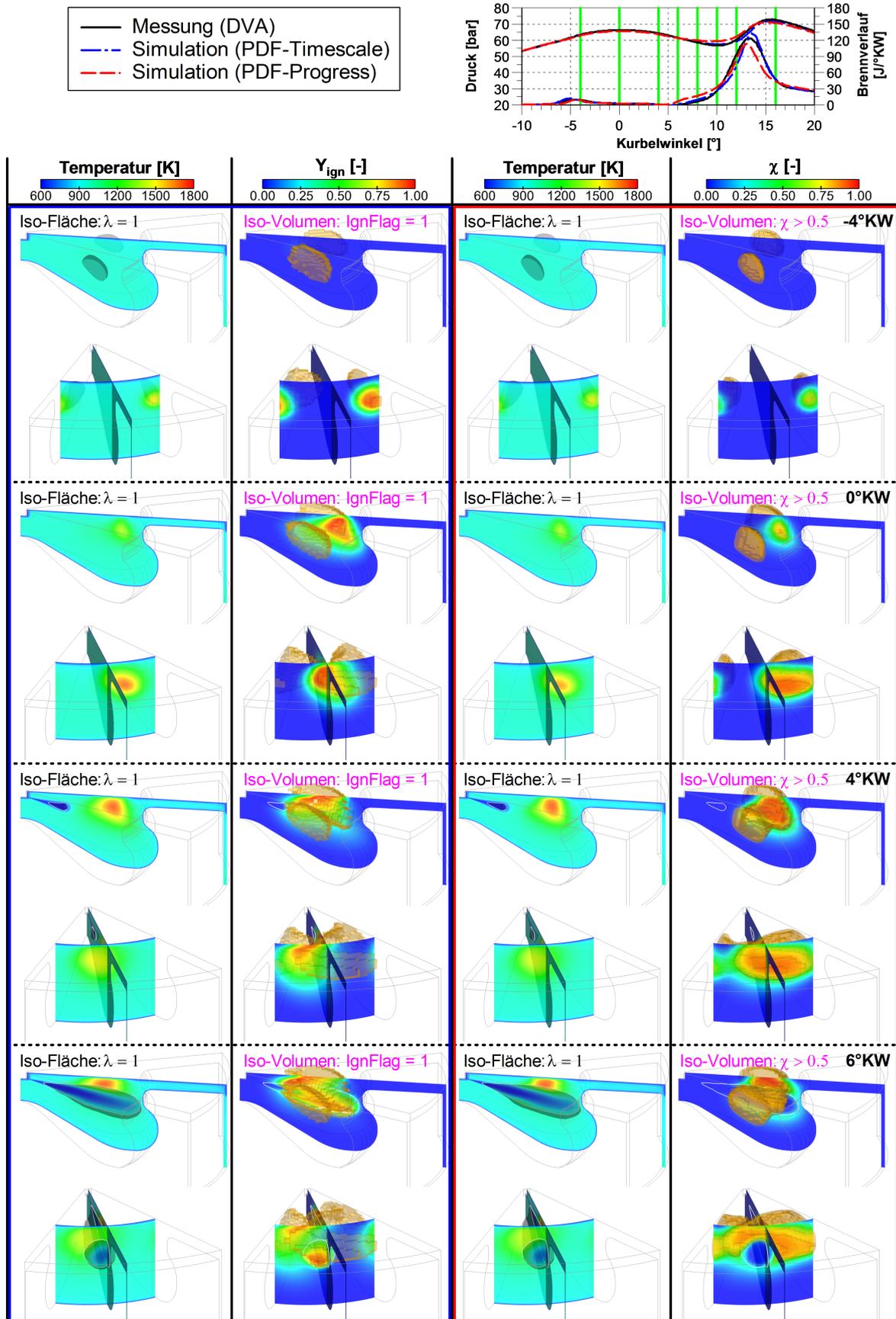


Abbildung 7.22: Betriebspunkt 2: Vergleich der Simulationen mit dem PDF-Timescale und Fortschrittsvariablen-Modell. Dargestellt ist jeweils die Temperatur auf der Schnittebene der Strahlachse und die Zündvariable sowie das gezündete Volumen im Brennraum. (Teil 1/2)

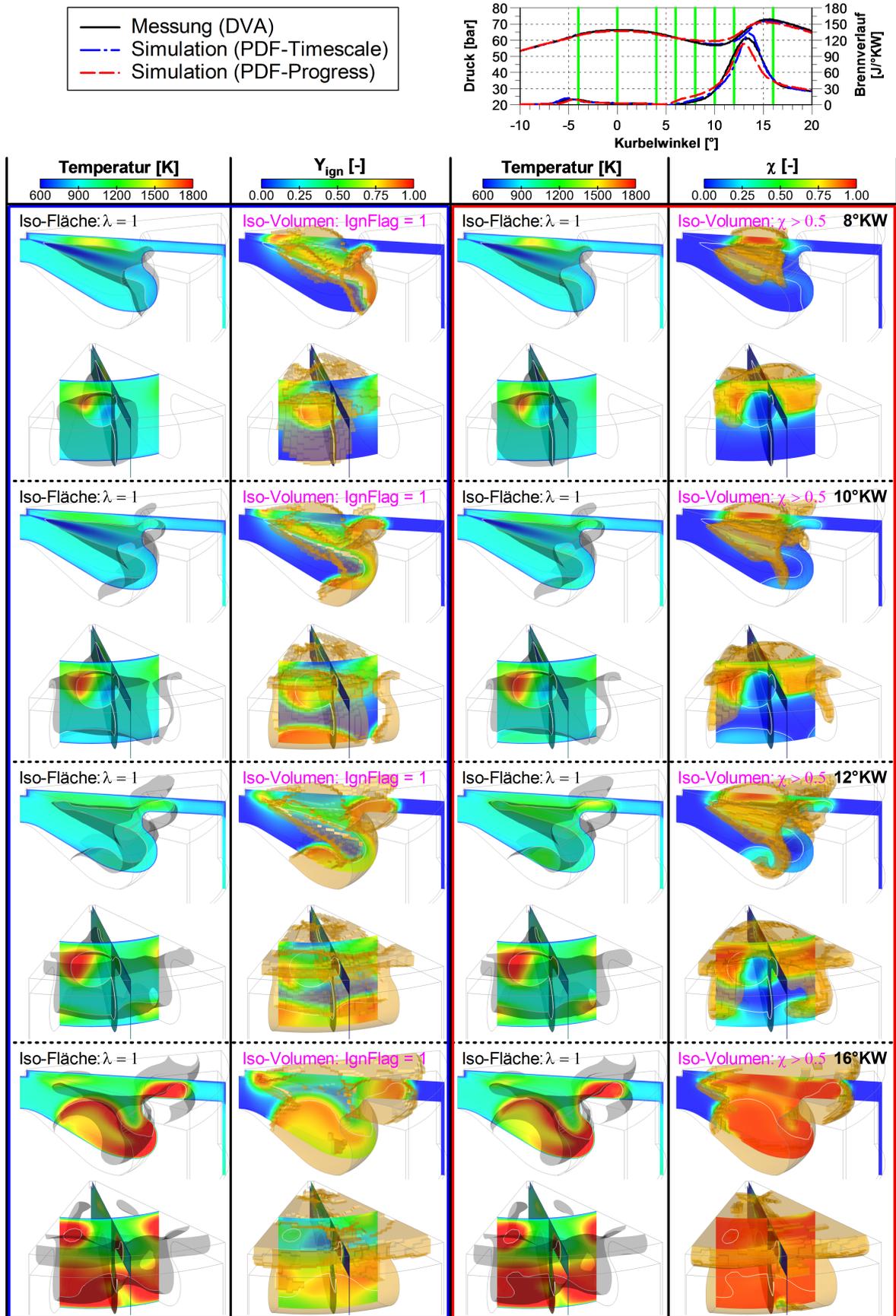


Abbildung 7.23: Betriebspunkt 2: Vergleich der Simulationen mit dem PDF-Timescale und Fortschrittsvariablen-Modell. Dargestellt ist jeweils die Temperatur auf der Schnittebene der Strahlachse und die Zündvariable sowie das gezündete Volumen im Brennraum. (Teil 2/2)

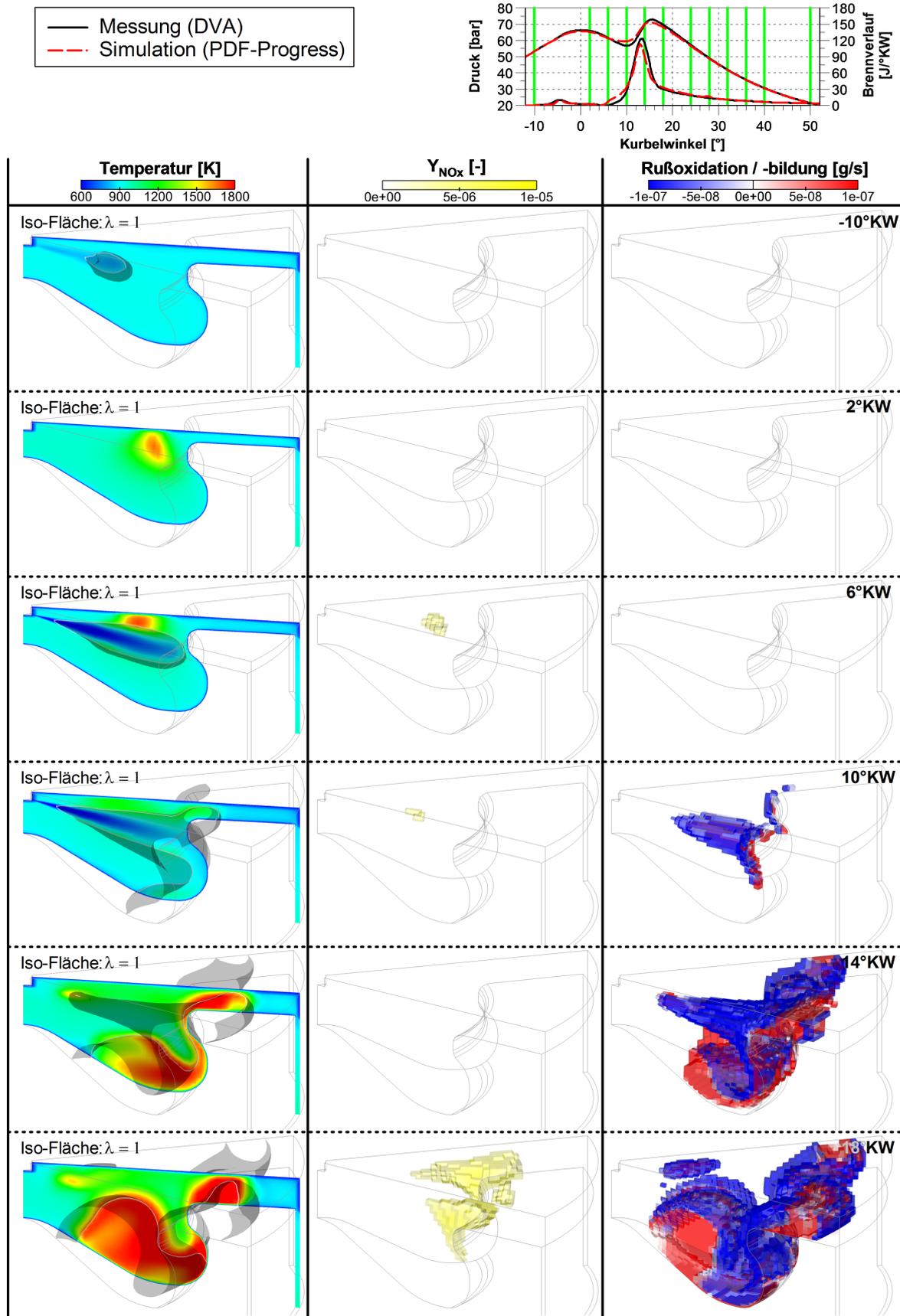


Abbildung 7.24: Betriebspunkt 2: Lokale Auswertung der Simulation mit dem Fortschrittsvariablen-Modell. Dargestellt ist die Temperatur auf der Schnittebene der Strahlachse, die NO-Anteile und die Rußbildungs- und Rußoxidationsraten. (Teil 1/2)

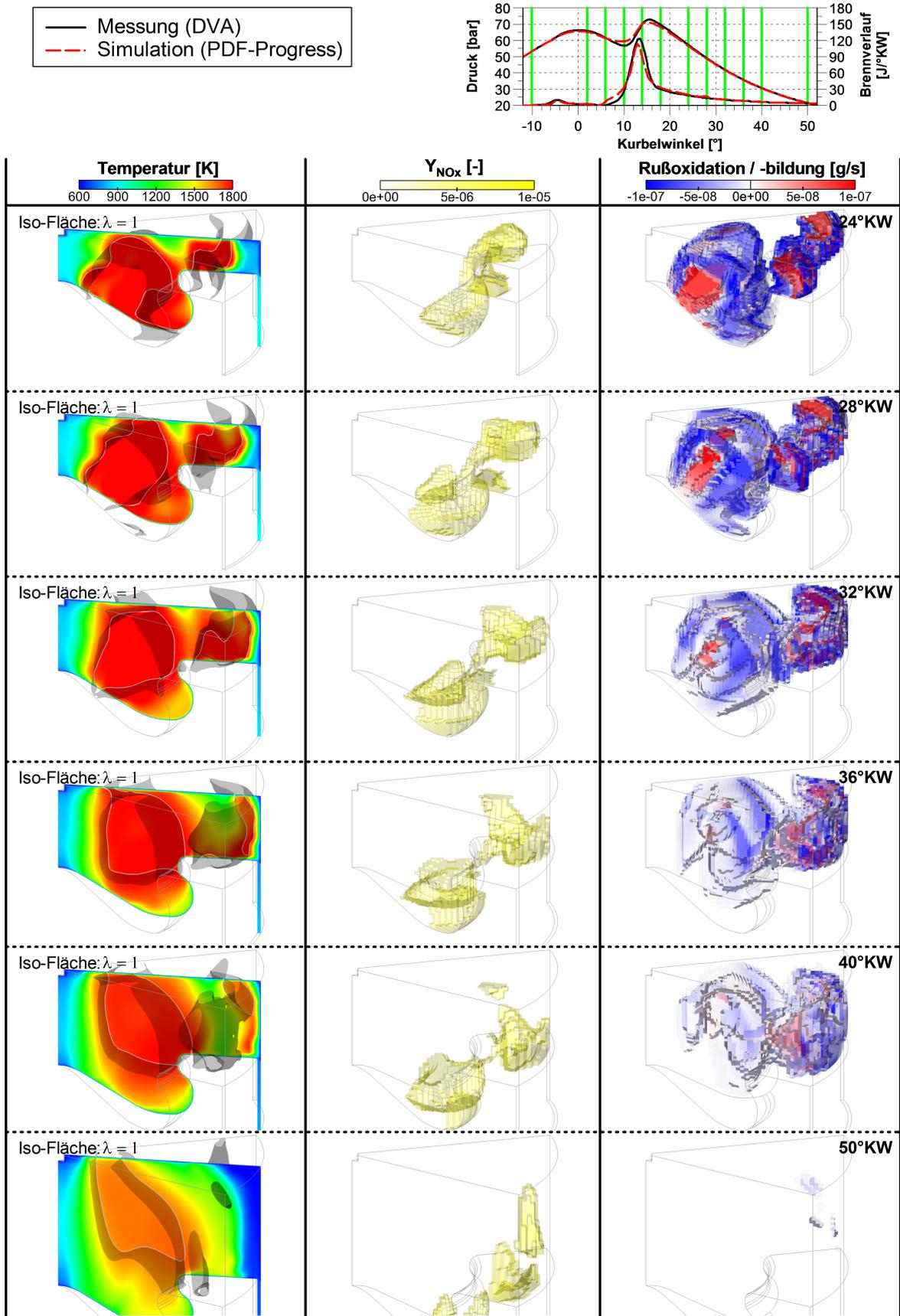


Abbildung 7.25: Betriebspunkt 2: Lokale Auswertung der Simulation mit dem Fortschrittsvariablen-Modell. Dargestellt ist die Temperatur auf der Schnittebene der Strahlachse, die NO-Anteile und die Rußbildungs- und Rußoxidationsraten. (Teil 2/2)

8 Zusammenfassung und Ausblick

8.1 Zusammenfassung

In dieser Arbeit wird ein Modellierungskonzept zur 3D-CFD-Simulation der dieselmotorischen Zündung und Verbrennung vorgestellt. Dabei ist das übergeordnete Ziel die Relevanz der detaillierten Reaktionskinetik auf Zünd- und Verbrennungsprozesse komplexer Kohlenwasserstoffe anhand Fragestellungen aus der Brennverfahrensentwicklung moderner Dieselmotoren zu bewerten. Diese Forderung bedingt ein rechenzeiteffizientes Modellierungskonzept, das sich in die vorhandene Simulationsumgebung zur Berechnung der Direkteinspritzung des Kraftstoffs, der Gemischbildung, der Zündung und Verbrennung und letztlich der Schadstoffbildung einfügt. Hierfür wurde ein Fortschrittsvariablen-Modell in den 3D-Strömungslöser StarCD implementiert. Die Fortschrittsvariable wurde über die Bogenlänge aller Spezies des detaillierten Reaktionsmechanismus definiert. Somit ist einerseits gewährleistet, dass ihr Verlauf mathematisch streng monoton ist und alle reaktionskinetisch relevanten Phasen abgebildet werden. In [48] wird gezeigt, dass die detaillierten Lösungen der chemischen Kinetik homogener, isobarer und adiabater Reaktoren für verschiedene Anfangsbedingungen Mannigfaltigkeiten bilden. Diese Eigenschaft erlaubt für verschiedene motorisch relevante Anfangsbedingungen in Druck, Temperatur, Luft-Kraftstoffverhältnis und Inertgas a priori Berechnungen durchzuführen und die Lösungen des vollen Zustandsvektors über dem Reaktionsfortschritt zu tabellieren. Diese werden verwendet, um in dieser Arbeit eine zusätzliche Schwankungsgröße für das Luft-Kraftstoffverhältnis einzuführen und somit eine im Mischungsbruchraum gemittelte Fortschrittsvariable zu erhalten. Folglich wurde die Dimension des reduzierten Zustandsvektors um die Varianz des Mischungsbruchs erweitert. Bei der Berechnung der isochronen Mittelungen wurden weitere zwingend notwendige Modifikationen der detaillierten Lösungen vorgenommen, um die chemischen Quellterme zur Simulation der dieselmotorischen Zündung und Verbrennung nutzen zu können. Hervorzuheben ist die Korrektur des C/H-Verhältnisses von n-Heptan auf das von Dieselkraftstoff. Ebenso wurden die Massenanteile der tabellierten sieben Hauptspezies so modifiziert, dass sie das gesamte Gemisch abbilden. Beide Modifikationen wurden durch Anpassung der tabellierten Lösungen der sieben Hauptspezies erreicht. Hier wurde darauf geachtet, dass die Korrekturen der Speziesvektoren möglichst klein sind, die Elementerhaltung gilt und sich insbesondere die Wärmefreisetzung während des Reaktionsverlaufs nicht ändert.

Für die Nutzung des Fortschrittsvariablen-Modells im kommerziellen Strömungslöser StarCD wurde eine allgemeine Transportgleichung für die Fortschrittsvariable hergeleitet. Hierbei stellen die Projektionsterme der Transportgleichung sicher, dass die im CFD-Code transportierten Speziesvektoren stets eine Funktion des reduzierten Zustandsvektors sind und somit den tabellierten Lösungen entsprechen. Da alle Größen des reduzierten Zustandsvektors bis auf die Fortschrittsvariable nicht modifiziert werden dürfen, wurde eine spezielle Transportgleichung abgeleitet, deren Projektionsterme nur die Fortschrittsvariable ändern. Diese Gleichung wurde unter gewissen Annahmen Favre-gemittelt und die Chemie- und Projektions-Quellterme wurden so separiert, dass sie über in StarCD vorgesehene user-subroutinen eingekoppelt werden können. Für den Übergang von der Vormisch- zur Diffusionsverbrennung wurde das 7-Spezies-PDF-Timescale-Modell aus [126] erweitert. Zur Bestimmung des Speziesvektors im Mischungsbruchraum für die Integration der PDF wird in dieser Arbeit eine im Mischungsbruchraum variierende

Anfangstemperatur verwendet, die mithilfe eines Gleichgewichtslösers zu einer variierenden Gleichgewichtstemperatur im Mischungsbruchraum führt. Diese Erweiterung ist einerseits physikalischer und ermöglicht andererseits die Einführung einer enthalpiebasierten Reaktionsfortschrittsvariable im PDF-Timescale-Modell, die für die Kopplung mit dem Fortschrittsvariablen-Modell genutzt wird. Diese Kopplung ist insofern notwendig, da im Expansionstrakt der Zugriff auf das Fortschrittsvariablen-Modell ohne weitere Annahmen nicht möglich ist, da die zu diesem Zeitpunkt zurückgerechneten Anfangsbedingungen nicht tabelliert werden können.

Zur Validierung der einzelnen Modelle der Simulationskette werden Messungen brennender Freistrahlen einer Hochdruck-/Hochtemperaturkammer aus [152] verwendet. Die ausgewählten Betriebspunkte variieren in den wichtigsten Einflussgrößen für Zündort und -zeitpunkt: Umgebungstemperatur, Sauerstoffkonzentration und Raildruck. Die Gegenüberstellung der Gemischbildung zeigt für alle untersuchten Fälle eine hervorragende Übereinstimmung der Eindringtiefen der Flüssig- und Gasphase. Erst diese Konformität ermöglicht sinnvolle Vergleiche der Zündverzugszeiten und Zündorte (Lift-Off Längen) zwischen Messung und Simulation. Während die Zündverzugszeiten bei hohen Sauerstoffkonzentrationen etwas überschätzt werden, sind bei niedrigen Umgebungstemperaturen zu kurze Zündverzugszeiten zu beobachten. Der Zündort in der Simulation stimmt in allen Fällen hervorragend mit den Messungen überein. Bemerkenswert ist insbesondere der zeitliche Verlauf des Zündorts bei den Simulationen mit dem Fortschrittsvariablen-Modell. Wie in der Messung ist besonders bei niedrigen Sauerstoffkonzentrationen aufgrund der verhältnismäßig langsam ablaufenden chemischen Reaktionen die kürzer werdende Lift-Off Länge über der Zeit nach erfolgter Zündung bis zur Stationarität des Zündortes gut sichtbar.

Die Anwendung des Modellkonzepts für motorische Fragestellungen wird anhand der 3D-CFD-Simulation mehrerer Betriebspunkte des Hochdruck-Arbeitsprozesses eines Pkw-Motors mit Mehrfacheinspritzung und eines schweren Nutzfahrzeugmotors mit *Höchst-AGR-Brennverfahren* aus [153] untersucht. Unter anderem werden gemessene Druck- und Brennverläufe sowie integrale Messgrößen den Simulationsergebnissen mit PDF-Timescale- und Fortschrittsvariablen-Modell gegenübergestellt.

Die Simulationen der in Drehzahl und Last variierenden Betriebspunkte des Pkw-Motors mit Mehrfacheinspritzung zeigen eine sehr gute Überstimmung des Zündzeitpunkts der Vor- und Haupteinspritzung im Vergleich zu den Messungen. Hervorzuheben ist, dass die Berechnung der chemischen Reaktionsraten der Hauptzündung beim Fortschrittsvariablen-Modell nur durch die Projektionsterme in der Erhaltungsgleichung der Fortschrittsvariable ermöglicht wird. Der verdampfende Kraftstoff in Zonen, wo die Voreinspritzung bereits vollständig umgesetzt wurde, bewegt den chemischen Zustand von der tabellierten Mannigfaltigkeit weg. Erst die Projektion auf eine tabellierte Mannigfaltigkeit setzt den Reaktionsfortschritt derart zurück, dass sinnvolle chemische Reaktionsraten für die Hauptzündung ausgelesen werden können. Bei hohen Sauerstoffkonzentrationen wird der Vormischpeak etwas überschätzt, wobei im Vergleich zum 7-Spezies-PDF-Timescale-Modell die Reaktionsraten des Fortschrittsvariablen-Modells generell etwas geringer ausfallen und dessen Brennverlauf besser zu den Messergebnissen passt. Das Ausbrandverhalten beider Modelle ist konzeptbedingt sehr ähnlich und die Summenbrennverläufe passen sehr gut zu den Ergebnissen der Druckverlaufsanalysen.

Die größte Herausforderung bei der 3D-CFD-Simulation der Messreihen des Nutzfahrzeugmotors mit *Höchst-AGR-Brennverfahren* ist die niedrige Sauerstoffkonzentration des Oxidators. Hier zeigt sich klar der Vorteil des ganzheitlichen Ansatzes des Fortschrittsvariablen-Modells

gegenüber dem PDF-CO-Zündmodell [129] in Kombination mit dem 7-Spezies-PDF-Timescale-Modell [126]. Zwar berechnet letzteres die Zündverzögerung korrekt, liefert aber im Gegensatz zum Fortschrittsvariablen-Modell in der Zündphase für die sieben Hauptspezies keine chemischen Quellterme, die zu einer Temperaturerhöhung führen. Dieser selbstverstärkende Effekt gewinnt bei niedrigen Sauerstoffkonzentrationen stark an Bedeutung. Nur so ist der Kraftstoffumsatz in der darauffolgenden Vormisch- und Diffusionsphase zeitlich wie in der Messung abbildbar.

Für die 3D-CFD-Simulation der dieselmotorischen Zündung und Verbrennung hat das Fortschrittsvariablen-Modell (PDF-Progress) gegenüber der bisherigen Modellkette mit dem 7-Spezies-PDF-Timescale-Modell in der Regel einen leichten Rechenzeitvorteil. Die Nutzfahrzeugfälle weisen sogar einen Vorteil von 10 % bis fast 30 % auf (vgl. Abb. 8.1), da die Zünd- und Vormischphase bei diesen Fällen ausgeprägt ist. Beim PDF-CO-Zündmodell erfolgt die numerische Integration der β -PDF der Zündvariable während der Simulation. Im Gegensatz dazu wurde die Integration der Fortschrittsvariable a priori durchgeführt, so dass im Laufe der 3D-CFD-Simulation die gemittelten Quellterme direkt aus der Fortschrittsvariablen-Tabelle ausgelesen werden können. An Bedeutung gewinnt das Fortschrittsvariablen-Modell insbesondere bei sehr niedrigen Sauerstoffkonzentrationen oder Temperaturen, die zu langsamen Zündreaktionen führen. In dieser Phase wird die präzise Berechnung der Wärmefreisetzung für den weiteren Verlauf der Verbrennung äußerst relevant. Es wird gezeigt, dass für typische thermodynamische Randbedingungen der heutigen Brennverfahrensentwicklung die bisherige Modellkette ebenso zufriedenstellende Ergebnisse liefert.

Das in dieser Arbeit vorgestellte Stickoxid-Modell berücksichtigt die im Mischungsbruchraum variierenden Temperaturen. Diese dienen als Eingangsgröße für das Stickoxid-Modell. Innerhalb eines Kontrollvolumens beeinflussen Fluktuationen des Mischungsbruchs die Bildungswahrscheinlichkeit des Stickoxids in heißen Zonen, womit die Vorhersagefähigkeit des Stickoxid-Modells erheblich verbessert wird, was die gute Übereinstimmung mit Abgasmesswerten verifiziert. Lediglich für sehr hohe Sauerstoffkonzentrationen wird die Stickoxidbildung unterschätzt, da ansatzbedingt die Diffusionsprozesse des Stickoxids im Mischungsbruchraum vernachlässigt werden. Eine Berechnung der Diffusions- und konvektiven Transportprozesse im Mischungsbruchraum würde eine Steigerung der Modellgüte bewirken und zu einem CMC-Ansatz für das Stickoxid-Modell führen.

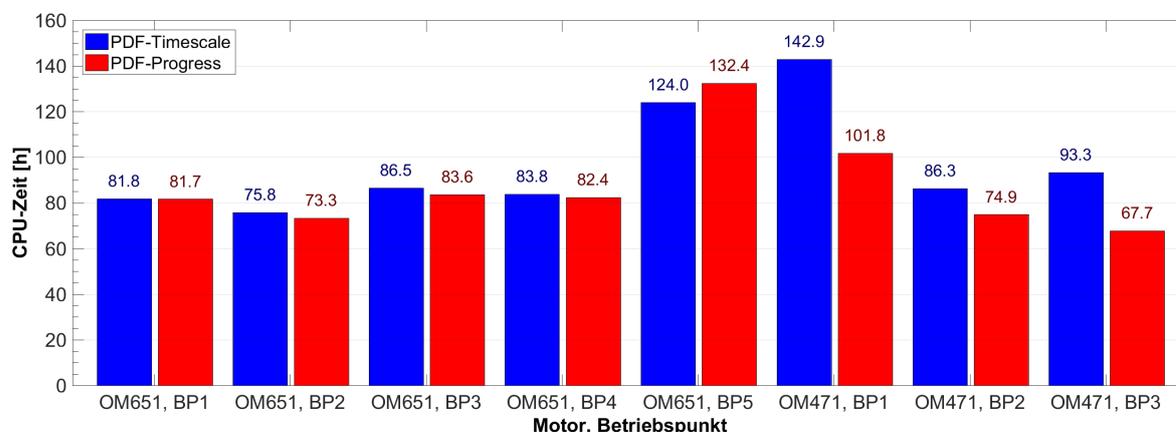


Abbildung 8.1: Rechenzeitenvergleich PDF-Timescale- gegenüber PDF-Progress-Modell.

8.2 Ausblick

Das vorliegende Fortschrittsvariablen-Modell stellt hohe Anforderungen an die einzelnen Module des Modellkonzepts. Die Weiterentwicklung des Modells kann daher an vielen Stellen angreifen, muss aber immer für die 3D-CFD-Simulation einer motorischen Verbrennung mit einem Strömungslöser koppelbar bleiben.

Die Herleitung der Transportgleichung der Fortschrittsvariable und deren Projektionsterme zeigt auf, dass hier bereits zur Reduktion der Komplexität Annahmen getroffen werden müssen. Daher scheint eine Berücksichtigung der statistischen Verteilung anderer Zustandsgrößen neben der des Mischungsbruchs zwar möglich, aber ist unter den gegebenen Einschränkungen eines kommerziellen Strömungslösers schwierig umsetzbar. Des Weiteren würde eine zusätzliche Dimension multiplikativ mit ihrer Stützstellenanzahl auf die Größe der chemischen Tabelle wirken. Die Notwendigkeit einer weiteren statistischen Verteilung einer Zustandsgröße könnte jedoch für einen reduzierten Zustandsraum bspw. bei isobaren Randbedingungen für reine Luft oder einen konstanten Restgasanteil untersucht werden.

Für eine uneingeschränkte Nutzung des Fortschrittsvariablen-Modells in der Diffusions- und Ausbrandphase im Expansionstrakt des Arbeitsprozesses müsste ein Verfahren eingeführt werden, welches zu diesem Zeitpunkt ohne zurückgerechnete Anfangsbedingungen chemische Reaktionsraten liefert.

Die Definition der Fortschrittsvariable könnte ebenso überdacht werden. Es wäre zu klären, ob eine auf Enthalpie oder gar Entropie basierende Fortschrittsvariable die relevanten chemischen Zeitskalen der Zünd- und Vormischphase abbilden kann.

Interessant wäre auch ein Konzept ohne die sieben Hauptspezies, welches nur auf den Variablen des reduzierten Zustandsraum basiert und chemische Quellterme direkt in die Energiegleichung einkoppelt. Dabei müssen die Kraftstoffeigenschaften (z. B. C/H-Verhältnis) so berücksichtigt werden, dass die Kopplung mit vorhandenen Schadstoff-Modellen auch ohne explizite Verbrennungsprodukte möglich bleibt.

Die Anwendung des Modells in Verbindung mit anderen Kohlenwasserstoffen oder Kohlenwasserstoffgemischen wie bspw. Erdgas ist denkbar, sofern die notwendige detaillierte Reaktionskinetik in der erforderlichen Güte vorliegt. Zu prüfen wäre, ob der Parameterbereich der Reaktionsfortschrittstabelle angepasst werden muss und die getroffenen Annahmen weiterhin zulässig sind.

A Anhang

(A) CMC-Gleichungen

Für einen konditionierten mittleren Skalar Ψ_k gilt

$$\begin{aligned}\rho_\zeta \Psi_k(\vec{x}, t; \zeta) &= \overline{\langle \rho \psi_k(\vec{x}, t) | Z(\vec{x}, t) = \zeta \rangle} \\ &= \overline{\langle \rho \psi_k | \zeta \rangle}\end{aligned}\quad (\text{A.1})$$

wobei

$$\tilde{\rho} \psi_k = \int_0^1 \overline{\langle \rho \psi_k | \zeta \rangle} P_Z dZ \quad (\text{A.2})$$

ist. Die allgemeine Transportgleichung im Mischungsbruchraum für eine beliebige konditionierte Strömungsgröße lautet [29]:

$$\frac{\partial \Psi_k}{\partial t} + \langle \vec{v} | \zeta \rangle \cdot \nabla \Psi_k = \frac{\langle \chi_{sc} | \zeta \rangle}{2} \frac{\partial^2 \Psi_k}{\partial \zeta^2} + e_q + e_y + \langle \dot{\omega}_k | \zeta \rangle \quad (\text{A.3})$$

Für die Terme aus Gleichung (A.3) können folgende Annahmen getroffen werden [70]. Der zweite Term auf der linken Seite in Gleichung (A.3) ist die konditionierte Konvektion, für die näherungsweise

$$\langle \vec{v} | \zeta \rangle \approx \vec{u} \quad (\text{A.4})$$

gilt. Der erste Term auf der rechten Seite in Gleichung (A.3) berücksichtigt den diffusiven Transport im Mischungsbruchraum. e_q kann für Anwendungsfälle mit hohen Reynoldszahlen vernachlässigt werden [29], sofern die Diffusionskoeffizienten speziesunabhängig angenommen werden. e_y kann mit

$$e_y \approx \nabla \cdot (\langle D_t | \zeta \rangle \nabla \Psi_k) \quad (\text{A.5})$$

approximiert werden, wobei für die konditionierte turbulente Diffusion

$$\langle D_t | \zeta \rangle \approx \frac{\mu_t}{S c_t} \quad (\text{A.6})$$

angenommen wird. Der Quellterm wird für den jeweiligen konditionierten Mischungsbruch ζ gelöst:

$$\langle \dot{\omega}_k | \zeta \rangle = \dot{\omega}_k(\Psi_k, \zeta) \quad (\text{A.7})$$

Mit diesen Annahmen kann für die konditionierte Strömungsgröße eine passive Erhaltungsgleichung in StarCD berechnet werden, für die im Mischungsbruchraum die Quellterme berechnet werden können.

Gleichung (A.3) vereinfacht sich deutlich, wenn konvektive und diffusive Transportprozesse im Mischungsbruchraum vernachlässigt werden.

$$\begin{aligned}\frac{\partial \Psi_k}{\partial t} + \underbrace{\langle \vec{v} | \zeta \rangle \cdot \nabla \Psi_k}_{=0} &= \underbrace{\frac{\langle \chi_{sc} | \zeta \rangle}{2} \frac{\partial^2 \Psi_k}{\partial \zeta^2} + e_q + e_y + \langle \dot{\omega}_k | \zeta \rangle}_{=0} \\ \frac{\partial \Psi_k}{\partial t} &= \langle \dot{\omega}_k | \zeta \rangle\end{aligned}\quad (\text{A.8})$$

(B) Schadstoffgrenzwerte für schwere Nutzfahrzeuge

Schadstoff in g/kWh	vor Euro I		Euro I		Euro II		Euro III		Euro IV		Euro V		Euro VI		Euro III		Euro IV		Euro V		Euro VI		Euro VI	
	ab	ab	ab	ab	ab	ab	ab	ab	ab	ab	ab	ab	ab	ab	ab	ab	ab	ab	ab	ab	ab	ab	ab	ab
Typprüfung	-	07/1992	-	10/1993	10/1995	10/2000	10/2005	10/2006	10/2009	10/2008	10/2009	10/2009	10/2009	10/2009	10/2008	10/2005	10/2006	10/2006	10/2009	10/2009	10/2008	10/2005	10/2013	01/2013
Serienprüfung	10/1990	-	10/1993	10/1996	10/1995	10/2000	10/2005	10/2006	10/2009	10/2008	10/2009	10/2009	10/2009	10/2009	10/2008	10/2005	10/2006	10/2006	10/2009	10/2008	10/2005	01/2013	01/2013	
Richtlinie / Verordnung	88/77/ EWG	91/542/ EWG	91/542/ EWG	91/542/ EWG	91/542/ EWG	99/96/ EG Stufe A	99/96/ EG Stufe B1	99/96/ EG Stufe B2	99/96/ EG Stufe C EEV	99/96/ EG Stufe C EEV	99/96/ EG Stufe B2	99/96/ EG Stufe B2	99/96/ EG Stufe C EEV	99/96/ EG Stufe C EEV	99/96/ EG Stufe B2	99/96/ EG Stufe B1	99/96/ EG Stufe B1	99/96/ EG Stufe C EEV	99/96/ EG Stufe B2	99/96/ EG Stufe C EEV	99/96/ EG Stufe B2	582/2011 Anh. XV Diesel	582/2011 Anh. XV Diesel	EG 582/2011 Anh. XV Otto
Testprozedur	13-Stufen-Test		ESC- und ELR-Prüfung		WHSC		ETC-Prüfung		WHTC															
CO	11.2	4.5	4.9	4	2.1	1.5	1.5	1.5	1.5	1.5	1.5	1.5	1.5	1.5	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4
HC	2.4	1.1	1.23	1.1	0.66	0.46	0.46	0.46	0.46	0.46	0.46	0.46	0.46	0.46	0.55	0.46	0.46	0.46	0.46	0.46	0.46	0.46	0.46	0.46
THC	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.16	-	-
NO _x	14.4	8	9	7	5	3.5	2	2	2	2	2	2	2	2	3.5	2	2	2	2	2	2	0.46 a)	0.46 a)	0.46 a)
CH ₄	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.5
NMHC	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.16
NH ₃ (in ppm)	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	10	10
Methan	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1.6	1.1	1.1	1.1	1.1	1.1	1.1	-	-	-
Partikelmasse c)e)	-	0.36*	0.4*	0.15	0.10; 0.13 d)	0.02	0.02	0.02	0.02	0.02	0.02	0.02	0.02	0.02	0.16; 0.21 d)	0.03	0.03	0.03	0.03	0.03	0.03	0.01	0.01	0.01
Partikelzahl e) (in Anzahl/ kWh)	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	6·10 ¹¹	f)	f)
Rauchtrübung	-	-	-	-	0.8	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

Anmerkungen:

Ab Euro II Grenzwert für alle Fzg. = Grenzwert für neue Fahrzeugtypen.

Messungen für Euro I und II erfolgen im 13-Stufen-Test.

Messungen für Euro III und IV erfolgen im ESC und ELR-Verfahren bzw. ETC-Test.

* Auf den Partikelemissionsgrenzwert wird bei Motoren mit einer Leistung von höchstens 85 kW ein Koeffizient von 1.7 angewandt.

a) Der Wert des zulässigen NO₂-Anteils am NO_x-Grenzwert kann zu einem späteren Zeitpunkt festgelegt werden.

b) Gilt nur für Fahrzeuge mit Erdgasmotoren.

c) Gilt bei der ETC-Prüfung nicht für mit Gas betriebene Motoren in den Stufen A, B1 und B2.

d) Für Motoren mit einem Hubraum von unter 0,75 dm³ je Zylinder und einer Nennleistungsdrehzahl von über 3000 U/min.

e) Bis zum 31.12.2012 wird eine Messprozedur für die Partikelzahlmessung für Otto- und Diesel-Lkw (Euro VI, WHSC- und WHTC-Zyklen) festgelegt.

f) Vor dem 31. Dezember 2012 wird ein Grenzwert für die Partikelzahl eingeführt.

EEV: Enhanced Environmentally Friendly Vehicle

ESC: European Stationary Cycle

ELR: European Load Response Test

ETC: European Transient Cycle

WHSC: World Harmonized Stationary Cycle

WHTC: World Harmonized Transient Cycle

Tabelle A.1: Abgasgrenzwerte für Schadstoffemissionen für schwere Lkw und Busse (Fahrzeuge ab 2.610 kg) [137].

Literaturverzeichnis

- [1] Abraham, J., Bracco, F. und Reitz, R. D.: *Comparisons of Computed and Measured Premixed Charge Engine Combustion*. Combust. and Flame, 60:309–322, 1985.
- [2] Albrecht, W., Dohle, U., Gombert, R., Krauss, J., Leonhard, R. und Wannewetsch, P.: *Das innovative BOSCH Common Rail System CRSN4.2 für die neue Generation von schweren DaimlerChrysler Nutzfahrzeug–Dieselmotoren*. 28. Internationales Wiener Motorensymposium, 01, 2007. Wien.
- [3] Barths, H.: *Simulation of Diesel Engine and Gas Turbine Combustion Using Multiple Flamelets with Detailed Chemistry*. Dissertation, Universität Aachen, 2000.
- [4] Barths, H., Pitsch, H. und Peters, N.: *Three-Dimensional Simulation of DI Diesel Combustion and Pollutant Formation Using a Two-Component Reference Fuel*. Oil and Gas Science and Technology, 54(2), 1999.
- [5] Bauer, C.: *Simulation homogener Diesel-Brennverfahren*. Dissertation, Gottfried Leibniz Universität Hannover, Fakultät für Maschinenbau, Juni 2008.
- [6] Bauer, J., Bykov, V. und Maas, U.: *Implementation of ILDMs based on a Representation in Generalized Coordinates*. In: P. Wesseling, E. Onate, J. Periaux (eds.) European Conference on Computational Fluid Dynamics, ECCOMAS CFD, September 5-8, 2006, Egmond aan Zee, The Netherlands, 2006.
- [7] Bilger, R. W.: *Turbulent Diffusion Flames*. Ann. Rev. Fluid Mech., 101:–35, 1989.
- [8] Binder, S., Kraus, E. und Frommelt, A.: *Qualitätssicherung von Indizierdaten bei Mercedes-Benz*. 11. Internationales Symposium für Verbrennungsdiagnostik, 2014. Baden-Baden.
- [9] Blessing, M.: *Untersuchung und Charakterisierung von Zerstäubung, Strahlausbreitung und Gemischbildung aktueller Dieseleinspritzsysteme*. Dissertation, Universität Stuttgart, Fakultät Konstruktions-, Produktions- und Fahrzeugtechnik, April 2004.
- [10] Bockhorn, H.: *Soot Formation in Combustion*. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 1. Auflage, 1994, ISBN 978-3-642-85169-8.
- [11] Bollig, M.: *Berechnung laminarer Kohlenwasserstoffflammen im Hinblick auf die Stickoxidbildung in Verbrennungsmotoren*. Dissertation, Universität Aachen, 1998.
- [12] Boussinesq, J.: *Théorie de l'Écoulement Tourbillant*. Mem présenté par divers Savants Acad. Sci. Inst. Fr., 23, Paris, 1877.
- [13] Bray, K. N. C. und Moss, J. B.: *A unified statistical model of the premixed turbulent flame*. Acta Astronautica, 4:291–319, März 1977.
- [14] Buddrus, J. und Schmidt, B.: *Grundlagen der Organischen Chemie*. De Gruyter Studium. Berlin, Boston: De Gruyter, 4. Auflage, 2011, ISBN 978-3-11-024640-7.

- [15] Burke, S. D. und Schumann, T. E. W.: *Diffusion Flames*. Ind. Eng. Chem., 20:998, 1928.
- [16] Bykov, V. und Maas, U.: *Extension of the ILDM method to the domain of slow chemistry*. Proceedings of the Combustion Institute, 31(1):465–472, 2007.
- [17] CD-adapco: *StarCD Methodology*. Computational Dynamics Limited, 2005. Star-CD Version 3.26.
- [18] Colin, O., Benkenida, A. und Angelberger, C.: *3D Modeling of Mixing, Ignition and Combustion Phenomena in Highly Stratified Gasoline Engines*. Oil & Gas Science and Technology - Rev. IFP, 58(1):47–62, 2003.
- [19] Colin, O., Cruz, A. Pires da und Jay, S.: *Detailed chemistry-based auto-ignition model including low temperature phenomena applied to 3-D engine calculations*. Proceedings of the Combustion Institute, 30:2649–2656, 2005.
- [20] Cui, Q., Morokuma, K., Bowman, J. M. und Klippenstein, S. J.: *The spin-forbidden reaction $\text{CH}(^2\pi) + \text{N}_2 \rightarrow \text{HCN} + \text{N}(^4\text{S})$ revisited. II. Nonadiabatic transition state theory and application*. J. Chem. Phys., 110(19):9469–9482, 1999.
- [21] Curran, H. J., Gaffuri, P., Pitz, W. J. und Westbrook, C. K.: *A Comprehensive Modeling Study of n-heptane Oxidation*. Combustion and Flame, 114:149–177, 1998.
- [22] Curtiss, C. F. und Hirschfelder, J. O.: *Transport Properties of Multicomponent Gas Mixtures*. J. Chem. Phys., 17, 1979.
- [23] Daimler AG: *Mercedes-Benz Urban eTruck*. <https://www.daimler.com/produkte/lkw/mercedes-benz/urban-etruck.html>, besucht: 15.04.2017.
- [24] Dederichs, A., Balthasar, M. und Mauss, F.: *Modeling of NO_x and Soot Formation in Diesel Combustion*. Oil and Gas Science and Technology, 54(2), 1999.
- [25] Die Bundesregierung: *Leitmarkt und Leitanbieter für Elektromobilität*. https://www.bundesregierung.de/Webs/Breg/DE/Themen/Energiewende/Mobilitaet/podcast/_node.html, besucht: 05.04.2017.
- [26] *DIN EN 590:2014-04: Kraftstoffe für Kraftfahrzeuge - Dieselkraftstoff - Anforderungen und Prüfverfahren*.
- [27] Domingo, P., Vervisch, L. und Reveillon, J.: *DNS analysis of partially premixed combustion in spray and gaseous turbulent flame-bases stabilized in hot air*. Combust. and Flame, 140(3):172 – 195, 2005.
- [28] Dukowicz, J. K.: *A Particle-Fluid Numerical Model for liquid Sprays*. J. of Comput. Phy., 35(2):229–253, 1980.
- [29] Echekki, T. und Mastorakos, E.: *Turbulent Combustion Modeling*. Springer, 2011, ISBN 978-94-007-0412-1.
- [30] Favre, A.: *Statistical equations of turbulent gases*. Problems of hydrodynamics and continuum mechanics, Seiten 231–266, 1969.

- [31] Fraser, R. A., Felton, P. G., Bracco, F. V. und Santavicca, D. A.: *Preliminary Turbulence Length Scale Measurements in a Motored IC Engine*. In: *SAE Tech. Paper, (860021)*. SAE International, März 1986.
- [32] Frenklach, M. und Wang, H.: *Detailed Modelling of Soot Particle Nucleation and Growth*. Technischer Bericht, Twenty-Third Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh, 1990.
- [33] Frohn, A.: *Einführung in die Technische Thermodynamik*. Verlag Konrad Wittwer Stuttgart, 3. Auflage, 1998.
- [34] Frommelt, A., Loisch, R. und Binder, S.: *15 Jahre Fortschritt in der Messtechnik - Was heißt heute 'richtig indizieren'?* 8. Internationales Symposium für Verbrennungsdiagnostik, 2008. Baden-Baden.
- [35] Gardiner, Jr. W. C.: *Gas-Phase Combustion Chemistry*. Springer, 2000.
- [36] Girimaji, S. S.: *Assumed β -pdf Model for Turbulent Mixing: Validation and Extension to Multiple Scalar Mixing*. *Combustion Science and Technology*, 78:177–196, 1991.
- [37] Glarborg, P., Alzueta, M. U., Dam-Johanson, K. und Miller, J. A.: *Kinetic Modeling of Hydrocarbon/Nitric Oxide Interactions in a Flow Reactor*. *Combustion and Flame*, 115:1–27, 1998.
- [38] Golovitchev, V. I.: *Technical report*, 2000. <http://www.tfd.chalmers.se/~valeri/mech.html>.
- [39] Gärtner, U.: *Die Simulation der Stickoxid-Bildung in Nutzfahrzeug-Dieselmotoren*. Dissertation, Universität Darmstadt, 2001.
- [40] Hallmann, M., Scheurlen, M. und Wittig, S.: *Computation of Turbulent Evaporating Sprays: Eulerian vs. Lagrangian Approach*. ASME Winter Annual Meeting, Cincinnati, 1993.
- [41] Han, Z. und Reitz, R. D.: *A temperature wall function formulation for variable-density turbulent flows with application to engine convective heat transfer modeling*. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 40(3):613 – 625, 1997, ISSN 0017-9310.
- [42] Hasse, C.: *A Two-Dimensional Flamelet Model for Multiple Injections in Diesel Engines*. Dissertation, Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen, Fakultät Maschinenwesen, Juli 2004.
- [43] Heil, B., Schmid, W., Teigeler, M., Sladek, W., Öing, H., Arndt, S. und Melcher, S.: *Die neue Dieselmotorenbaureihe für schwere Nutzfahrzeuge von Daimler*. *MTZ - Motortechnische Zeitschrift*, 01, 2009.
- [44] Hermann, A.: *Modellbildung für die 3D-Simulation der Gemischbildung und Verbrennung in Ottomotoren mit Benzin-Direkteinspritzung*. Dissertation, Universität Karlsruhe, Fakultät Maschinenbau, August 2008.

- [45] Heywood, J. B.: *Internal combustion engine fundamentals*. McGraw-Hill series in mechanical engineering, New York, 1988.
- [46] Hirsch, C.: *Numerical Computation of Internal and External Flows, Vol.1 Fundamentals of Numerical Discretisation*. Wiley Sons: Chichester, New York, 1988.
- [47] Hirschfelder, J. O., Curtiss, C. F. und Bird, R. B.: *Molecular Theory of Gases and Liquids*. John Wiley & Sons, Inc., New York, 1954.
- [48] Hofrath, C.: *Mathematische Reduktion der detaillierten chemischen Kinetik von Verbrennungsprozessen mittels eines Fortschrittsvariablen-Ansatzes*. Dissertation, Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Fakultät für Maschinenbau, November 2014.
- [49] Homann, K. H.: *Reaktionskinetik*. Steinkopf, Darmstadt, 1975.
- [50] IAASA: *Policy Scenarios for the Revision of the Thematic Strategy on Air Pollution*, März 2013.
- [51] International Energy Agency (IEA): *World Final Consumption - Sankey Diagram*. <https://www.iea.org/Sankey/>, besucht: 17.03.2017.
- [52] Janicka, J. und Peters, N.: *Prediction of Turbulent Jet Diffusion Flame Lift-Off using a PDF Transport Equation*. 19th Symposium (International) on Combustion, Seiten 367–374, August 1982. Proceedings (A84-35401 16-25).
- [53] Jones, W. P. und Launder, B. E.: *The Prediction of Laminarization with a Two-Equation Model of Turbulence*. Int. J. Heat Mass Transfer, 15:301–314, 1972.
- [54] Jones, W. P. und Whitelaw, J. H.: *Calculation Methods for Turbulent Flows: A Review*. Combust. and Flame, 48:1–26, 1982.
- [55] Karlsson, A., Magnusson, I., Balthasar, M. und Mauss, F.: *Simulation of Soot Formation Under Diesel Engine Conditions Using a Detailed Kinetic Soot Model*. In: *SAE Tech. Paper, (981022)*. SAE International, Februar 1998.
- [56] Kausch, P., Bertau, M., Gutzmer, J. und Matschullat, J.: *Energie und Rohstoffe: Gestaltung unserer nachhaltigen Zukunft*. Spektrum Akademischer Verlag, 2011, ISBN 9783827427984.
- [57] Kee, R. J., M., Rupley F. und A., Miller J.: *The CHEMKIN thermodynamic data base*. Sandia National Laboratories, Livermore CA, 1987. SANDIA Report SAND87-8215,.
- [58] Kiehl, J. T. und Trenberth, K. E.: *Earth's Annual Global Mean Energy Budget*. Bulletin of the American Meteorological Society, 78(2):197–208, August 1997.
- [59] Klimenko, A. Y. und Bilger, R. W.: *Conditional moment closure for turbulent combustion*. Prog. Energy Combust. Sci., 25:595–687, 1999.
- [60] Koch, T., König, G., Wenzel, P., Kemmner, M. und Jehle, E.: *Wirkmechanismen der Abgasrückführung und anderer Maßnahmen zur Reduzierung der NO_x-Emissionen von Nutzfahrzeugdieselmotoren*. 7. Internationales Symposium für Verbrennungsdiagnostik, 2006. Baden-Baden.

- [61] Kolmogorov, A. N.: *Equations of Turbulent Motions in an Incompressible Fluid*. Izv. Akad. Nauk. UdSSR, Seria Fizicheskaya Vi, 1942.
- [62] Kong, S. C., Han, Z. und Reitz, R. D.: *The Development and Application of a Diesel Ignition and Combustion Model for Multidimensional Engine Simulation*. In: *SAE Tech. Paper, (950278)*. SAE International, Februar 1995.
- [63] Kong, S. C., Marriott, C. D., Reitz, R. D. und Christensen, M.: *Modeling and Experiments of HCCI Engine Combustion Using Detailed Chemical Kinetics with Multidimensional CFD*. In: *SAE Tech. Paper, (2001-01-1026)*. SAE International, März 2001.
- [64] Kozuch, P., Maderthaler, K., Grill, M. und Schmid, A.: *Simulation und Schadstoffbildung bei schweren Nutzfahrzeugmotoren der Daimler AG*. 9. Internationales Symposium für Verbrennungsdiagnostik, 2010. Baden-Baden.
- [65] Krüger, C.: *Validierung eines 1D-Spraymodells zur Simulation der Gemischbildung in direkteinspritzenden Dieselmotoren*. Dissertation, Universität Aachen, 2001.
- [66] Krüger, C., Otto, F., Wirbeleit, C., Willand, J. und Peters, N.: *Incorporation of the Interactive Cross-Section Averaged Methodology for Diesel Spray Simulations into a 3D-Code*. 9th Int. Multidim. Engine Modeling User's Group Meeting at the SAE Congress, 1999.
- [67] Landers, D. und Rogge, L.: *Nichtstandard Analysis*. Springer-Lehrbuch, 1994.
- [68] Launder, B. E., Reece, G. J. und Rodi, W.: *Progress in the Development of a Reynoldsstress Turbulence Closure*. *J. Fluid. Mech.*, 68(3):537–566, 1975.
- [69] Launder, B. E. und Spalding, D. B.: *Mathematical Models of Turbulence*. Academic Press, New York, 1972.
- [70] Lehtiniemi, H., Borg, A. und Mauss, F.: *Conditional Moment Closure with a Progress Variable Approach*. Comodia, 2012.
- [71] Lehtiniemi, H., Mauss, F., Balthasar, M. und Magnussen, I.: *Modeling Diesel Spray using detailed Chemistry with a Progress Variable Approach*. *Combust. Sci. and Tech.*, 178:1977–1997, 2006.
- [72] Liang, L., Naik, C. V., Puduppakkam, K., Wang, C., Modak, A., Meeks, E., Ge, H. W., Reitz, R. D. und Rutland, C.: *Efficient Simulation of Diesel Engine Combustion Using Realistic Chemical Kinetics in CFD*. In: *SAE Tech. Paper, (2010-01-0178)*. SAE International, April 2010.
- [73] Libby, P. A. und Bray, K. N. C.: *Countergradient Diffusion in Premixed Turbulent Flames*. *AIAA Journal*, 19(2):205–213, 1981.
- [74] Libby, P. A. und Williams, F. A.: *Fundamental aspects of turbulent reacting flows*. In: *P.A. Libby, F.A. Williams: Turbulent reacting flows*. Springer-Verlag, 1980.
- [75] Libby, P. A. und Williams, F. A.: *Turbulent reacting flows*. Academic Press, New York, 1994.

- [76] Maas, U.: *Mathematische Modellierung instationärer Verbrennungsprozesse unter Verwendung detaillierter Reaktionsmechanismen*. Dissertation, Universität Heidelberg, 1988.
- [77] Maas, U.: *Automatische Reduktion von Reaktionsmechanismen zur Simulation reaktiver Strömungen*. Habilitation, Universität Stuttgart, 1993.
- [78] Maas, U. und Pope, S. B.: *Implementation of Simplified Chemical Kinetics based on Low-Dimensional Manifolds in Composition Space*. Technischer Bericht, Twenty-Fourth Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh, 1992.
- [79] Mauss, F.: *Entwicklung eines kinetischen Modells der Rußbildung mit schneller Polymerisation*. Dissertation, Universität Aachen, 1998.
- [80] Mauss, F., Balthasar, M. und Dederichs, A.: *The flamelet Library of Source Terms for Soot Formation Including the Effect of Exhaust Gas Recirculation*. Software Documentation.
- [81] Mayer, T.: *Dreidimensionale Simulation der Stickoxidbildung und der Klopfwahrscheinlichkeit in einem Ottomotor*. Dissertation, Universität Stuttgart, 2005.
- [82] Merker, G. P. und Schwarz, C.: *Grundlagen Verbrennungsmotoren: Simulation der Gemischbildung, Verbrennung, Schadstoffbildung und Aufladung*. Vieweg und Teubner Verlag, Wiesbaden, 4. Auflage, Dezember 2009.
- [83] Michels, U.: *3D-Simulation der kavitierenden Düseninnenströmung und Strahlausbreitung mit einem n-phasigen Euler-Strahlmodell*. Dissertation, Gottfried Leibniz Universität Hannover, Fakultät für Maschinenbau, Juni 2008.
- [84] Michles, U.: *Verbesserte 3D-Simulation der dieselmotorischen Verbrennung durch Applikation des ICAS-Modells für die Gemischbildung*. Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen, Institut für Technische Mechanik, 2001. Diplomarbeit.
- [85] Miller, J. A. und Bowman, C. T.: *Mechanism and Modelling of Nitrogen Chemistry in Combustion*. Prog. Energy Combust. Sci., 15:287–338, 1989.
- [86] Moreac, G., Blurock, G. und Mauss, F.: *A comprehensive and compact n-heptane oxidation model derived using chemical lumping*. Phys. Chem., 9(9):1107–1126, 2007. EU-Project NICE, Deliverable B1.2.
- [87] Moskaleva, L. V., Xia, W. S. und Lin, M. C.: *The CH+N₂ reaction over ground electronic doublet potential energy surface: a detailed transition state search*. Chem. Phys. Lett., 331:269–277, 2000.
- [88] Moss, J. B.: *Simultaneous Measurements of Concentration and Velocity in an Open Premixed Turbulent Flame*. Combustion Science and Technology, 55:115, 1979.
- [89] Nakov, G.: *Rohemissionsmodellierung auf Basis Detaillierter Chemie*. Dissertation, Brandenburgische Technische Universität Cottbus, Fakultät für Umweltwissenschaften und Verfahrenstechnik, Juni 2014.

- [90] Nakov, G., Mauss, F., Wenzel, P., Steiner, R., Krüger, C., Zhang, Y., Rawat, R., Borg, A., Perlman, C., Fröjd, K und Lehtiniemi, H.: *Soot Simulation under Diesel Engine Conditions Using a Flamelet Approach*. SAE Int. J. Engines, 2:89–104, November 2009.
- [91] Neumaier, A.: *MINQ - General Definite and Bound Constrained Indefinite Quadratic Programming*, 1998. <http://www.mat.univie.ac.at/~neum/software/minq/>, besucht: 13.04.2016.
- [92] Nieberding, R. G.: *Die Kompressionszündung magerer Gemische als motorisches Brennverfahren*. Dissertation, Universität Siegen, Fachbereich für Maschinentechnik, September 2001.
- [93] Nishida, K. und Hiroyasu, H.: *Simplified Three-Dimensional Modeling of Mixture Formation and Combustion in a D.I. Diesel Engine*. In: *SAE Tech. Paper, (890269)*. SAE International, Februar 1989.
- [94] Nording, K., Wenzel, P., Krüger, C. und Bargende, M.: *CFD-Simulation der dieselmotorischen Verbrennung und Schadstoffbildung unter Berücksichtigung lokaler Ladungswechsel- und Düseninnenströmungseffekte*. Meß- und Versuchstechnik für die Entwicklung von Verbrennungsmotoren, Haus der Technik, 2013. Stuttgart.
- [95] Organisation Internationale des Constructeurs d'Automobiles (OICA): *Production Statistics*. <http://www.oica.net/category/production-statistics/>, besucht: 17.03.2017.
- [96] Organisation Internationale des Constructeurs d'Automobiles (OICA): *Vehicles in use*. <http://www.oica.net/category/vehicles-in-use/>, besucht: 17.03.2017.
- [97] Otto, F.: *Strömungsmechanische Simulation zur Berechnung motorischer Prozesse*. Universität Hannover, Institut fuer Technische Verbrennung, 2000. Vorlesungsmanuskript.
- [98] Otto, F., Krüger, C., Wirbeleit, C. und Willand, J.: *Probleme und Lösungsansätze bei der Simulation der dieselmotorischen Einspritzung*. Meß- und Versuchstechnik für die Entwicklung von Verbrennungsmotoren, Haus der Technik, Essen, 1999.
- [99] Patel, A., Kong, S. C. und Reitz, R. D.: *Development and Validation of a Reduced Reaction Mechanism for HCCI Engine Simulations*. In: *SAE Tech. Paper, (2004-01-0558)*. SAE International, März 2004.
- [100] Peters, N.: *Laminar Diffusion Flamelet Models in Non-Premixed Turbulent Combustion*. Prog. Energy Combustion Sci., 10:319–339, 1984.
- [101] Peters, N.: *Laminar Flamelet Concepts in Turbulent Combustion*. Technischer Bericht, Twenty-First Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh, 1986.
- [102] Peters, N.: *Length Scales in Laminar and Turbulent Flames*. Progress in Astronautics and Aeronautics, 135, 1991.

- [103] Peters, N.: *Strömungs- und Temperaturgrenzschichten*. Vorlesungsumdruck des ITM der RWTH Aachen, 1993.
- [104] Peters, N.: *Four Lectures on Turbulent Combustion*. ERCOFTAC Summer School, Aachen, 1997.
- [105] Peters, N.: *Turbulent Combustion*. Cambridge Press, 2000.
- [106] Petty, G. W.: *A First Course in Atmospheric Radiation*. Sundog Pub., 2004, ISBN 9780972903301.
- [107] Pickett, L. M. und Siebers, D. L.: *Non-Sooting, Low Flame Temperature Mixing-Controlled DI Diesel Combustion*. In: *SAE Tech. Paper, (2004-01-1399)*. SAE International, März 2004.
- [108] Pope, S. B.: *A Monte Carlo Method for the PDF Equations of Turbulent Reactive Flows*. *Combustion Science and Technology*, 25:159–174, 1981.
- [109] Pope, S. B.: *PDF Methods for Turbulent Reactive Flows*. *Progress in Energy and Combustion Science*, 11:119–192, 1985.
- [110] Pope, S. B.: *Turbulent Flows*. Cambridge University Press, 2000, ISBN 0-521-59886-9.
- [111] Rao, S.: *A Probability Density Function Time-Scale Model for Combustion Using Large Eddy Simulation*. MS Degree Thesis, Department of Mechanical Engineering, University of Wisconsin, Madison, 2001.
- [112] Rao, S. und Rutland, C. J.: *A Flamelet Time Scale Combustion Model for Turbulent Combustion in KIVA*. Technischer Bericht, 12th Int. Multidim. Engine Modeling User's Group Meeting at the SAE Congress, 2002.
- [113] Reitz, R. D.: *Modeling Atomization Processes in High-Pressure Vaporizing Sprays*. *Atomization and Spray Technology*, 3:309–337, 1987.
- [114] Reveillon, J. und Vervisch, L.: *Spray Vaporization in Nonpremixed Turbulent Combustion Modeling: A Single Droplet Model*. *Combust. and Flame*, 121:75–90, 2000.
- [115] Rhodes, R. P.: *Turbulent Mixing in Non-Reactive and Reactive Flows*. Plenum Press, New York, 1979.
- [116] Rotta, J. C.: *Turbulente Strömungen*. Universitätsverlag Göttingen, 2010.
- [117] Schlichting, H. and Gersten, K.: *Grenzschicht-Theorie*. Springer, 9. Auflage, 1997.
- [118] Schommers, J., Leweux, J., Betz, T., Huter, J., Jutz, B., Knauel, P., Renner, G. und Sass, H.: *Der neue Vierzylinder-Dieselmotor für Pkw von Mercedes-Benz*. *MTZ - Motortechnische Zeitschrift*, 12, 2008.
- [119] Shell-Germany: *Shell V-Power Diesel*. <http://www.shell.de/autofahrer/shell-kraftstoffe/shell-v-power-nitro-plus/shell-vpower-diesel.html>, besucht: 17.03.2017.

- [120] Shepherd, I. G., Moss, J. B. und Bray, K. N. C.: *Turbulent Transport in a Confined Premixed Flame*. Technischer Bericht, 19th Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh, 1982.
- [121] Siebers, D. L.: *Scaling Liquid-Phase Fuel Penetration in Diesel Sprays Based on Mixing-Limited Vaporization*. In: *SAE Tech. Paper*, (1999-01-0528). SAE International, März 1999.
- [122] Siebers, D. L. und Higgins, B.: *Flame Lift-Off on Direct-Injection Diesel Sprays Under Quiescent Conditions*. In: *SAE Tech. Paper*, (2001-01-0530). SAE International, März 2001.
- [123] Smith, G. P., Golden, D. M., Frenklach, M., Moriarty, N. W., Eiteneer, B., Goldenberg, M., Bowman, C. T., Hanson, R. K., Song, S., Gardiner (Jr.), W. C., Lissianski, V. V. und Qin, Z.: *GRI-Mech*, 2000. http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/.
- [124] Spalding, D. B.: *Mixing and Chemical Reaction in Steady Confined Turbulent Flames*. Technischer Bericht, Thirteenth Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh, 1971.
- [125] Spicher, U. und Hadler, J.: *Effizienz und Emissionen von Kraftfahrzeugantrieben*. Automobiltechnische Zeitschrift ATZ-Extra, Seite 10, 2014-2015. Sonderheft für VDI-FVT.
- [126] Steiner, R.: *Modellbildung und strömungsmechanische Simulation der dieselmotorischen Verbrennung*. Dissertation, Universität Karlsruhe, Fakultät Maschinenbau, Institut für Technische Thermodynamik, April 2004.
- [127] Steiner, R., Bauer, C., Krüger, C. und Otto, F. and Maas, U.: *3D-Simulation of DI-Diesel Combustion Applying a Progress Variable Approach Accounting for Complex Chemistry*. In: *SAE Tech. Paper*, (2004-01-0106). SAE International, März 2004.
- [128] Stiesch, G.: *Modeling Engine Spray and Combustion Processes*. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 2003.
- [129] Streule, T.: *Dreidimensionale Simulation von Selbstzündung, Verbrennung und Schadstoffbildung in DE-Dieselmotoren*. Dissertation, Universität Karlsruhe, 2000.
- [130] Stull, D. R. und H., Prophet: *JANAF thermochemical tables*. U.S. department of Commerce, Washington DC, 1971.
- [131] Subramaniam, S., Colin, C., Cruz, A. Pirez da, Vervisch, L. und Bruneaux, G.: *Modeling Turbulent Mixing of an Evaporating Spray*. 20th Int. Colloquim on the Dynamicsof Explosions and Reactive Systems (ICDERS), Montreal, 2005.
- [132] Sutton, J. A., Williams, B. A. und Fleming, J. W.: *Laser-induced fluorescence measurements of NCN in low-pressure CH₄/O₂/N₂ flames and its role in prompt NO formation*. *Combustion and Flame*, 153:465–478, 2008.
- [133] Svensson, K. I., Mackrory, A. J., Richards, M. J. und Tree, D. R.: *Calibration of an RGB, CCD Camera and Interpretation of its Two-Color Images for KL and Temperature*. In: *SAE Tech. Paper*, (2005-01-0648). SAE International, April 2005.

- [134] Tatschl, R., Künsberg Sarre, C. v. und Berg, E. v.: *IC-Engine Spray Modelling - Status and Outlook*. 12th Int. Multidim. Engine Modeling User's Group Meeting at the SAE Congress 2002, 2002.
- [135] Truckenbrodt, E.: *Fluidmechanik, Band 1*. Springer-Verlag, Berlin, 3. Auflage, 1992.
- [136] Umweltbundesamt: *Grenzwerte Schadstoffemissionen Pkw und leichte Nfz*. <https://www.umweltbundesamt.de/themen/verkehr-laerm/emissionsstandards/pkw-leichte-nutzfahrzeuge>, besucht: 01.08.2016.
- [137] Umweltbundesamt: *Grenzwerte Schadstoffemissionen schwere Nfz und Busse*. <https://www.umweltbundesamt.de/themen/verkehr-laerm/emissionsstandards/schwere-nutzfahrzeuge>, besucht: 01.08.2016.
- [138] Umweltbundesamt: *Luftschadstoff-Emissionen in Deutschland*. <https://www.umweltbundesamt.de/daten/luftbelastung/luftschadstoff-emissionen-in-deutschland>, besucht: 17.03.2017.
- [139] Waldbüßer, N.: *NO_x-Minderung am Pkw-Dieselmotor mit einem Kombinationssystem zur Abgasnachbehandlung*. Dissertation, Technische Universität Kaiserslautern, April 2005.
- [140] Wan, Y.: *Numerical Study of Transient Fuel Sprays with Autoignition and Combustion under Diesel-Engine relevant Conditions*. Dissertation, Universität Aachen, 1997.
- [141] Wan, Y. und Peters, N.: *Scaling of Spray Penetration with Evaporation*. *Atomization and Sprays*, 9:111–132, 1999.
- [142] Warnatz, J., Maas, U. und Dibble, R. W.: *Verbrennung: Physikalisch-Chemische Grundlagen, Modellierung und Simulation, Experimente, Schadstoffentstehung*. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 3. Auflage, 2001.
- [143] Weigand, B.: *Spezielle Probleme der Wärmeübertragung*. Universität Stuttgart, Institut für Thermodynamik der Luft- und Raumfahrttechnik, 2002. Vorlesungsmanuskript.
- [144] Wenzel, P.: *Berücksichtigung von Realgaseffekten bei der 3D-CFD Simulation innermotorischer Verbrennungsvorgänge*. Diplomarbeit, Institut für Thermodynamik der Luft- und Raumfahrttechnik, Universität Stuttgart, November 2003.
- [145] Wenzel, P., Gezgin, A., Steiner, R., Krüger, C., Netzell, K., Lehtiniemi, H. und Mauss, F.: *Modeling of the Soot Particle Size Distribution in Diesel Engines*. Thiesel, 2006. Valencia.
- [146] Wenzel, P., Steiner, R., Krüger, C., Schießl, R., Hofrath, C. und Maas, U.: *3D-CFD Simulation of DI-Diesel Combustion Applying a Progress Variable Approach Accounting for Detailed Chemistry*. In: *SAE Tech. Paper, (2007-01-4137)*. SAE International, Oktober 2007.
- [147] Wikipedia: *Bunsenbrenner* — *Wikipedia, Die freie Enzyklopädie*. <http://de.wikipedia.org/w/index.php?title=Bunsenbrenner&oldid=55534564>, besucht: 21.09.2009.

- [148] Williams, F. A.: *Spray Combustion and Atomization*. Phys. Fluids, 1:541–545, 1958.
- [149] Williams, F. A.: *Recent Advances in Theoretical Description of Turbulent Diffusion Flames*. In: Turbulent Mixing in Non-Reactive and Reactive Flows, Plenum Press, Seiten 189–208, 1975.
- [150] Williams, F. A.: *Technical report*, 2005. <http://maemail.ucsd.edu/combustion/cermech/>.
- [151] Willmerding, G. und Haeckh, J.: *Adieu Verbrennungsmotor – oder doch nicht?* Transfer. Das Steinbeis Magazin. Zeitschrift für den konkreten Wissens- und Technologietransfer, 1(174633-2015-01):7–8, 2015, ISSN 1864-1768.
- [152] Wirths, M.: *Analyse der Erreichbarkeit niedrigster Rohemissionen im Nfz-Dieselmotor mittels optischer Diagnostikmethoden*. Dissertation, Leibniz Universität Hannover, Institut für Technische Verbrennung, Juli 2013.
- [153] Wirths, M., König, G., Wenzel, P., Nording, K. und Krüger, C.: *Analyse der Erreichbarkeit niedrigster Rohemission am Heavy-Duty-Einzyliermotor anhand experimenteller und numerischer Untersuchungen*. 10. Internationales Symposium für Verbrennungsdagnostik, 2012. Baden-Baden.
- [154] Yon, J., Lemaire, R., Therssen, E., Desgroux, P., Coppalle, A. und Ren, K. F.: *Examination of wavelength dependent soot optical properties of diesel and diesel/rapeseed methyl ester mixture by extinction spectra analysis and LII measurements*. Applied Physics B, 104(2):253–271, 2011.
- [155] Yoshizaki, T., Nishida, K. und Hiroyasu, H.: *Approach to Low NO_x and Smoke Emission Engines by Using Phenomenological Simulation*. In: SAE Tech. Paper, (930612). SAE International, März 1993.