

Modellbildung und strömungsmechanische Simulation der dieselmotorischen Verbrennung

Von der Fakultät für Maschinenbau der Universität Karlsruhe (TH)
zur Erlangung der Würde eines Doktors der
Ingenieurwissenschaften (Dr.-Ing.) genehmigte Abhandlung

vorgelegt von

Rüdiger Steiner

aus Pforzheim

Hauptberichter: Prof.Dr.rer.nat.habil. Ulrich Maas

Mitberichter: Prof.Dr.Ing. Ulrich Spicher

Tag der mündlichen Prüfung: 20. April 2004

Institut für Technische Thermodynamik
Universität Karlsruhe

2004

Vorwort

Die vorliegende Arbeit entstand während meiner Tätigkeit im Forschungsbereich Verbrennungsmotorische Antriebe der DaimlerChrysler AG in Stuttgart-Untertürkheim.

Herrn Prof. Dr.rer.nat. habil. U. Maas danke ich für das Ermöglichen dieser Arbeit, die wertvollen Anregungen, die stetige Unterstützung und die Übernahme des Hauptreferats. Bei Herrn Prof. Dr.-Ing. U. Spicher möchte ich mich für die bereitwillige und interessierte Übernahme des Korreferats bedanken. Herrn Prof. Dr.-Ing. habil. E. Schnack schulde ich Dank für die Übernahme des Prüfungsvorsitzes.

Besonders dankend erwähnen möchte ich die Herren Dr.-Ing. C. Krüger und Dr.rer.nat. F. Otto für die zahlreichen fruchtbaren Diskussionen und ihre guten Ideen.

Abschließend danke ich meinen Kolleginnen und Kollegen - unter Hervorhebung von Herrn Dipl.-Ing. C. Bauer und Herrn Dipl.-Ing. P. Wenzel - für die hervorragende Zusammenarbeit und Unterstützung.

Stuttgart, im April 2004

Für meine Eltern,
Gertruda und Bernhard

Inhaltsverzeichnis

Formelzeichen	iii
1 Einleitung	1
1.1 Hintergrund	1
1.2 Motivation und Aufbau der Arbeit	2
2 Strömungsmechanisches Gleichungssystem für die Gasphase	4
2.1 Problemstellung	4
2.2 Deterministische Erhaltungsgleichungen für reaktive Strömungen	4
2.2.1 Die Navier-Stokes-Gleichungen	5
2.2.2 Energie- und Speziesmassenerhaltung	6
2.3 Turbulenzbehandlung	9
2.3.1 Turbulente Zeit- und Längenskalen	10
2.3.2 Phänomenologie der Turbulenz	12
2.3.3 Statistische Turbulenzbehandlung	12
2.3.4 Large-Eddy-Simulation (LES)	19
2.4 Modellauswahl; Vorstellung des Strömungslösers	21
2.4.1 Grundgleichungssystem der Gasphase	21
2.4.2 Numerik des Strömungslösers	23
3 Modellierung der Strahlausbreitung und Gemischbildung	25
3.1 Problemstellung	25
3.2 Allgemeine Strahlmodellierung	26
3.3 Probleme des stochastischen Strahlmodells	26
3.4 Das Interactive-Cross-Section-Averaged-Spray (ICAS)-Modell	27
4 Modellierung der Zündung und Verbrennung	30
4.1 Reaktionskinetik und thermochemisches Gleichgewicht	32
4.1.1 Reaktionskinetik	32
4.1.2 Thermochemisches Gleichgewicht	34
4.2 Chemie-Turbulenz-Interaktion	35
4.2.1 Problemstellung	35
4.2.2 Zusammenfassung	38
4.3 Theorie turbulenter Diffusionsflammen	39
4.3.1 Der Mischungsbruch als konservativer Skalar	40
4.4 Das laminare Flamelet-Konzept	42

4.4.1	Flamelet-Gleichungen	43
4.4.2	Flamelet-Parameter	45
4.4.3	Gemittelte Flamelet-Parameter	46
4.4.4	“Presumed-PDF” Modellierung	48
4.5	Flamelet-Ansätze zur Simulation der dieselmotorischen Verbrennung	50
4.6	Phänomenologische Ansätze	57
5	Modellierung der Schadstoffbildung	61
5.1	Modellierung der Stickoxidbildung	61
5.2	Modellierung der Rußbildung und Rußoxidation	63
6	Progress-Ansatz zur Simulation der dieselmotorischen Verbrennung	68
6.1	Progress-Ansatz: Modellierungsphilosophie	68
6.2	Das PDF-Zündmodell	70
6.3	Das 7-Spezies-PDF-Timescale Verbrennungsmodell	74
6.3.1	Bestimmung der Referenz-Spezies-Konzentration \tilde{y}_i^*	74
6.3.2	Bestimmung der allgemeinen Zeitskala $\bar{\tau}$	76
7	Validierung der Verbrennungsmodelle unter motorischen Randbedingungen	82
7.1	Vernetzung	82
7.2	Modellauswahl und Vorgabe der Modellparameter	84
7.3	Validierungsergebnisse	88
7.3.1	Druck-, Brenn- und Summenbrennverläufe	89
7.3.2	Lokale Flammenausbreitung	91
7.3.3	Beispiel einer lokalen Strömungsanalyse	91
8	Zusammenfassung und Ausblick	99
8.1	Zusammenfassung	99
8.2	Fazit und Ausblick	102
A	Implementierung des RIF-Konzepts bei Erhaltung der thermischen inneren Energie im CFD-Code	103
B	Semi-Analytische β-PDF Integration	107
C	Berücksichtigung von Realgaseffekten bei der 3D-CFD Simulation	109
	Literaturverzeichnis	112

Formelzeichen

Lateinische Buchstaben

a_{ij}	Anzahl der Atome des Elements j in einem Mol der Spezies i
A	Fläche oder Stoßfaktor in Arrhenius-Gleichung
A_{EBU}	Modellkonstante für Eddy-Break-Up Modell
A_1, A_2	Modellkonstanten der Sutherland-Formel
b	Temperaturrexponent in Arrhenius-Gleichung
B_{EBU}	Modellkonstante für Eddy-Break-Up Modell
c	Konzentration oder Reaktionsfortschritt
c_p	Spezifische Wärmekapazität bei konstantem Druck
c_v	Spezifische Wärmekapazität bei konstantem Volumen
$c_{\epsilon_1}, c_{\epsilon_2}, c_{\epsilon_3}$	Modellkonstanten im $k - \epsilon$ Modell
c_μ	Modellkonstante zur Berechnung der Wirbelviskosität
c_χ	Modellkonstante zur Berechnung der skalaren Dissipationsrate
c^*	Modellkonstante beim Mixing-Timescale Modell
D	Diffusionskoeffizient
Da	Damköhler-Zahl
e	Spektrale Energiedichte
$\bar{\bar{E}}$	Einheitsmatrix
E_a	Aktivierungsenergie in Arrhenius-Gleichung
E_{kw}	Turbulente kinetische Energie
f_{v_s}	Rußvolumenbruch
F	Wahrscheinlichkeit für ein Ereignis
\dot{F}^s	Verdampfungsquellterm in Impulserhaltungsgleichung
g	Gravitationskonstante
G	Räumliche Filterfunktion
h	Spezifische totale Enthalpie
h_{th}	Spezifische thermische Enthalpie
i	Spezifische totale innere Energie
i_{th}	Spezifische thermische innere Energie
I	Massenbruch eines Flamelets beim Multiple-RIF Ansatz
J	Wärmestromdichte
k	Turbulente kinetische Energie
k_w	Wellenzahl
k^+	Geschwindigkeitskoeffizient Hinreaktion
k^-	Geschwindigkeitskoeffizient Rückreaktion
K_c	Thermochemische Gleichgewichtskonstante

l_{char}	Charakteristische geometrische Länge
l_0	Integrale-Längenmaß
l_k	Kolmogorov-Längenmaß
Le	Lewis-Zahl
M	Molekulargewicht
M_r^s	Statistisches Moment
n	Anzahl Gitterpunkte oder Moment
nsp	Gesamtanzahl Spezies
N	Anzahl von Strömungsmomentaufnahmen
N^s	Teilchenzahldichte
p	Druck
p_0	Referenzdruck
P	Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion
Pr	Prandtl-Zahl
\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
r	Reaktionsfortschrittsfaktor beim Mixing-Timescale Modell
Sc	Schmidt-Zahl
t	Zeit
t_k	Kolmogorov-Zeitmaß
t_z	Zündverzugszeit
t_χ	Charakteristische Diffusionszeit im Flamelet
T	Temperatur
T_0	Referenztemperatur
\vec{u}	Geschwindigkeitsvektor
V	Volumen
\dot{W}^s	Verdampfungsquellterm in Erhaltungsgleichungen für k und ϵ
\vec{x}	Ortsvektor (x,y,z)
y	Massenbruch
Z	Mischungsbruch
Z_j	Elementmassenbruch

Griechische Buchstaben

α	Wärmeübergangskoeffizient
Γ	Allgemeine Transportkonstante oder Gamma-Funktion
λ	Wärmeleitfähigkeitskoeffizient oder Luftverhältnis
μ	Dynamische Viskosität
ν	Kinematische Viskosität oder Stöchiometrikoeffizient
ϵ	Turbulente Dissipationsrate
ρ	Dichte
$\dot{\rho}^c$	Chemiequellterm in Massenerhaltungsgleichung
$\dot{\rho}^s$	Verdampfungsquellterm in Massenerhaltungsgleichung
σ	Spannungstensor
τ	Zeit im Mischungsbruchraum oder allgemeine Zeitskala
τ_{chem}	Chemische Zeitskala
τ_{turb}	Turbulente Zeitskala
ψ	Fluideigenschaft oder Moment
χ	Skalare Dissipationsrate

Sonstige Zeichen

\mathfrak{R}	Universelle Gaskonstante
(Δh_f^0)	Standardbildungsenthalpie bei T_0 und p_0
∂	Partielle Ableitung
∇	Nabla-Operator
$()_D$	Dampfdruck
$()_{eq}$	Gleichgewichtszustand
$()_{fr}$	Fragmentierung
$()_i$	Spezies- oder Skalar-Index
$()_{KS}$	Kraftstoff
$()_l$	Flamelet-Index
$()_L$	Luft
$()_{ow}$	Oberflächenwachstum
$()_{ox}$	Oxidation
$()_{pb}$	Partikelbildung
$()_q$	Flammenlöschung
$()_{st}$	Stöchiometrie
$()_t$	Transpornierung
$()^t$	Turbulente Größe
$()^w$	Wand
$()_Z$	Mischungsbruch
$()_\chi$	Skalare Dissipationsrate
$()^*$	Dimensionslose Größe

$(\cdot)'$	Turbulente Schwankungsgröße
$(\cdot)''$	Favre-Mittelung der Fluktuationen (Varianz)
$(\dot{\cdot})$	Zeitliche Ableitung
$(\bar{\cdot})$	Ensemble-Mittelung oder mittlere Eigenschaft
$(\tilde{\cdot})$	Favre-Mittelung
$(\hat{\cdot})$	Gebietsmittelwert
$\langle \cdot \rangle_G$	Räumlich gefilterte Größe

Abkürzungen

0D	Nulldimensional
3D	Dreidimensional
AGR	Abgasrückführung
AÖ	Auslass öffnet
APR	Arbeitsprozessrechnung
ALE	Arbitrary-Lagrangian-Eulerian (engl.)
CFD	Computational Fluid Dynamics (engl.)
DE	Direkt-Einspritzung
DDM	Discrete-Droplet-Model (engl.)
DNS	Direkte numerische Simulation
EBU	Eddy-Break-Up (engl.)
ES	Einlass schließt
ICAS	Interactive-Cross-Section-Averaged-Spray (engl.)
IDEA	Integrated-Diesel-European-Action (engl.)
KW	Kurbelwinkel
LES	Large-Eddy-Simulation (engl.)
nOT	Nach oberen Totpunkt
Nfz	Nutzfahrzeug
OT	Obere Totpunkt
PDF	Probability-Density-Function (engl.)
Pkw	Personenkraftwagen
QSOU	Quasi-Second-Order-Upwind (engl.)
RANS	Reynolds-Averaged-Navier-Stokes (engl.)
RSM	Reynolds-Spannungsmodell
SB	Spritzbeginn
T-PDF	Transported-Probability-Density-Function (engl.)
UT	Untere Totpunkt
vOT	Vor oberen Totpunkt

Kapitel 1

Einleitung

1.1 Hintergrund

Verkehr und Mobilität sind mitbestimmende Faktoren für die Wirtschaftskraft einer Region, gleichzeitig auch Grundbedürfnis und Bestandteil der Lebensqualität für den Einzelnen. Vor diesem Hintergrund ist das weltweit stetige Wachstum an Fahrzeugen zu erklären. Damit verbunden ist allerdings auch die zunehmende Umweltbelastung sowohl in Form von Schadstoffen (insbesondere unverbrannte Kohlenwasserstoffe (HCs), Stickoxide (NO_x) und Partikel) als auch durch das für den Treibhauseffekt mitverantwortliche Kohlendioxid CO_2 . Diese Problematik wurde bereits zu Beginn der fünfziger Jahre ausgehend von Los Angeles (USA) erkannt, mit der Konsequenz, dass im Laufe der Zeit weltweite Vorschriften zur Reinhaltung der Luft und Verminderung der Schadstoffemissionen von Kraftfahrzeugen eingeführt wurden [108]. Eine Reduktion der CO_2 -Emissionen bei gleicher Leistung ist generell nur durch eine Verbesserung des Motorwirkungsgrads oder durch einen veränderten Brennstoff zu erreichen. Für den Verbrauch einzelner Fahrzeuge gibt es keine gesetzlichen Normen, was hauptsächlich an der schwierigen Klassifizierung der unterschiedlichen Autos liegt. Dennoch hat sich der europäische Automobilverband ACEA freiwillig verpflichtet, den durchschnittlichen Verbrauch neu zugelassener Pkw und damit die CO_2 -Emission bis zum Jahr 2008 um 25 Prozent gegenüber 1995 auf 140 g/km zu verringern.

Moderne und umweltfreundliche Dieselmotoren tragen maßgeblich dazu bei, die ambitionierten Klimaschutzziele zu erreichen. Der moderne aufgeladene Dieselmotor mit Direkteinspritzung gewinnt auch im Pkw-Segment europaweit zunehmend an Beliebtheit. Sparsamkeit, Geräuschkomfort, Fahrspaß und seine große Zuverlässigkeit bei einer extrem langen Lebensdauer prägen diesen Erfolg. In der Zukunft stellen auch hier die immer weiter verschärften Emissionsziele eine große Herausforderung dar. So verlangt die europäische Gesetzgebung für Pkw-Dieselmotoren mit der Erfüllung der Euro 4-Grenzwerte ab 2005 eine Halbierung der streckenbezogenen NO_x und Partikelmassenemissionen auf 0.25 bzw. 0.025 g/km im Vergleich zur aktuellen Euro 3-Norm. Zur Einhaltung dieser Grenzwerte können im Allgemeinen innermotorische und außermotorische Maßnahmen unterschieden werden. Bevor jedoch aufwändige Verfahren der Abgasnachbehandlung zum Einsatz kommen, sollte versucht werden, die Rohemissionen so weit wie möglich zu verringern.

Auf Basis der genannten legislativen Vorschriften und zur nachhaltigen Sicherung der begrenzten Rohölreserven wird bereits seit längerer Zeit intensive Forschungsarbeit betrieben,

um den Verbrennungsmotor zu optimieren. Beim Dieselmotor konnte dabei besonders im Bezug auf die Auslegung von Einspritz- und Aufladesystemen in den letzten Jahren ein enormer Entwicklungfortschritt erzielt werden. Die damit verbundene Steigerung an innermotorischen Freiheitsgraden und die beim modernen Motorenbau angestrebte Reduktion von Kosten und Entwicklungszeiten machen es unverzichtbar, in den Entwicklungsprozess auch Simulationswerkzeuge einzubinden. Diese lassen sich allgemein klassifizieren in null- und eindimensionale Arbeitsprozess- und Ladungswechselprogramme, sowie dreidimensionale Strömungslöser. Letztere erfordern aufgrund des hohen Detaillierungsgrads den größten Rechenaufwand, bieten dafür aber auch die einzige Perspektive zur Vorausberechnung des Kraftstoffverbrauchs und der Schadstoffemissionen, um durch Parameterauswahl eine Reduktion der kostenintensiven Motorversuche zu erreichen. Gerade die Schadstoffbildung ist ein lokaler Prozess, der nur dreidimensional berechnet werden kann. Die Visualisierung der Strömungsergebnisse liefert zudem einen wichtigen Beitrag zum Verständnis motorischer Phänomene.

Bisher konzentriert sich der Einsatz der 3D-Strömungsberechnung in der Motorenentwicklung primär auf nicht-reagierende Strömungen, um bei der Optimierung der strömungsführenden Bauteile Unterstützung zu leisten [54]. Zukünftig ist es allerdings zwingend notwendig, auch reagierende Strömungen numerisch zu untersuchen, um so das Potenzial der 3D-Simulation für die Brennverfahrensentwicklung weiter auszuschöpfen. Voraussetzung dafür ist die Verfügbarkeit von vorhersagefähigen Modellen zur Beschreibung der reaktiven Prozesse Zündung, Wärmefreisetzung und Schadstoffbildung.

1.2 Motivation und Aufbau der Arbeit

Diese Arbeit behandelt die 3D-Strömungssimulation des gesamten Prozesses der dieselmotorischen Verbrennung inklusive Einspritzung, Zündung, Wärmefreisetzung und Schadstoffbildung. Die Fokussierung liegt dabei auf der Verbrennungsmodellierung und der Konsolidierung sämtlicher Teilmodelle, inklusive eines bereits entwickelten Euler-basierten Strahlmodells (ICAS-Modell [53]). Primäre Zielsetzung ist die Bereitstellung eines Simulationspakets, charakterisiert durch einen hohen Grad an Vorausberechenbarkeit bei gleichzeitig wirtschaftlichem Rechenaufwand.

Neben der numerischen Beschreibung der z.T. komplex ablaufenden chemischen Vorgänge, stellt bei der Modellbildung der dieselmotorischen Verbrennung die realitätsnahe Abbildung der Chemie-Turbulenz-Interaktion eine Hauptschwierigkeit dar. Um dieser Herausforderung gerecht zu werden, wird in dieser Arbeit ein Progress-Ansatz vorgestellt. Dieser basiert auf der Vorstellung, komplexe chemische Reaktionsabläufe mittels einer minimalen Anzahl charakteristischer Progress-Variablen abzubilden, um über deren Bilanzierungen Aussagen über globale Größen machen zu können. Dadurch ist es möglich, detaillierte chemische Reaktionsschemata bei der Simulation zu berücksichtigen. In dieser Arbeit werden Progress-Variablen zur Simulation der Teilprozesse Zündung, Vormisch- und Diffusionsverbrennung definiert. Da von einer statistischen Betrachtungsweise der Gasphasenströmung ausgegangen wird, erfolgt die Mittelung der chemischen Reaktionsterme der Bilanzgleichungen für die Progress-Variablen über einen *Probability-Density-Function* (PDF)-Ansatz.

Der Aufbau dieser Arbeit gliedert sich folgendermaßen: In Kapitel 2 werden Ansätze zur numerischen Lösung der turbulenten Gasphasenströmung vorgestellt. Das ICAS-Modell zur

Simulation der Strahlausbreitung und Gemischbildung wird in Kapitel 3 beschrieben. Aktuelle Ansätze zur Modellierung der Zündung und Verbrennung, sowie der Schadstoffbildung (NO und Ruß) werden in Kapitel 4 bzw. 5 diskutiert. Kapitel 6 stellt den Progress-Ansatz zur Simulation der dieselmotorischen Verbrennung vor, mit den Teilmodellen für die Zündung und Wärmefreisetzung. Die Validierung der Verbrennungsmodelle auf Basis des Progress-Ansatzes ist in Kapitel 7 dargestellt. Dazu werden 3D-Simulationsergebnisse Pkw-Motor-, Nfz-Motor und Schiffsmotor-Messungen gegenübergestellt. Die experimentellen Daten umfassen neben integralen Druckverläufen auch Hochgeschwindigkeitsaufnahmen des Eigenleuchtens der Flammen im Brennraum für den Nfz-Motor. Die Arbeit schließt mit der Zusammenfassung und dem Ausblick in Kapitel 8.

Kapitel 2

Strömungsmechanisches Gleichungssystem für die Gasphase

2.1 Problemstellung

Das Problemfeld der strömungsmechanischen Simulation von innermotorischen Verbrennungsprozessen ist interdisziplinär ausgerichtet. Es beinhaltet die Disziplinen Physik, Chemie, Mathematik, Numerik und Datenverarbeitung. Innermotorische Strömungen verlaufen immer instationär, kompressibel, turbulent und reaktiv. Die Komplexität der Modellbildung steigt weiter, falls - wie für Motoren mit Direkteinspritzung notwendig - Zweiphasenströmungen in Betracht gezogen werden müssen.

In diesem Kapitel wird das mathematische Grundgleichungssystem zur Lösung der Gasphasenströmung innermotorischer Verbrennungsprozesse vorgestellt. Auf eine ausführliche Abhandlung wird dabei verzichtet (siehe dazu Lehrbücher der Strömungsmechanik, z.B. [114], [41], [103], [85]). Das Kapitel beginnt mit den allgemeinen deterministischen strömungsmechanischen Grundgleichungen. Diese bilden ein nicht-lineares, gekoppeltes Differentialgleichungssystem zur Berechnung der zeitlichen und lokalen Verteilung der Strömungscharakteristika Geschwindigkeit, Druck, Temperatur und Partial-Dichten. Nach einer kurzen Einführung in die allgemeine Turbulenztheorie folgt eine Auflistung gängiger Modellierungsansätze zur Turbulenzbehandlung. Dabei wird eine statistische Betrachtungsweise eingeführt. Das Kapitel schließt mit der Modellauswahl und einer kurzen Vorstellung des in dieser Arbeit verwendeten numerischen Strömungslösers.

2.2 Deterministische Erhaltungsgleichungen für reaktive Strömungen

Der Begriff des *Determinismus*¹ bezieht sich auf eine kausale Beschreibung der Realität. Häufigkeitsverteilungen von Einzelereignissen werden statistisch beschrieben.

Dieses Kapitel stellt die deterministischen Erhaltungsgleichungen zur Lösung turbulenter, reaktiver Mehrphasenströmungen vor. Aufbauend auf dem Gleichungssystem inkompressibler,

¹von lateinisch: *determinare* bestimmen

nicht-reaktiver Einphasenströmungen werden die Gleichungen zur Berechnung von reaktiven Systemen mit variabler Dichte ergänzt. Das thermodynamische Gasverhalten wird im Folgenden grundsätzlich als ideal angenommen.²

2.2.1 Die Navier-Stokes-Gleichungen

Ausgangspunkt für die mathematische Beschreibung sind die *Navier-Stokes-Gleichungen*³. Sie bilden das Fundament der Strömungsmechanik, mit den mathematischen Formulierungen der grundlegenden physikalischen Prinzipien der Massen- und Impulserhaltung⁴. Die Strömungslehre beschäftigt sich im Allgemeinen mit deformierbaren Körpern, die in kleinste infinitesimale Volumenelemente zerlegt werden. Innerhalb dieser Elemente sind im Sinne der Kontinuumsmechanik statistische Schwankungen der Fluideigenschaften vernachlässigbar, d.h. makroskopische Eigenschaften bleiben unbeeinflusst von einzelnen Molekülen. 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* in differentieller und konservativer Form:⁵

Massenerhaltung (Kontinuität):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) = 0 \quad (2.1)$$

Impulserhaltung:

$$\frac{\partial \rho \vec{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \vec{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot \sigma + \rho g \quad (2.2)$$

Die linken Seiten der Gleichungen 2.1 und 2.2 beschreiben die zeitliche Änderung der Gesamtmasse bzw. des Impulses innerhalb des Volumens dV und den konvektiven Transport infolge der Schwerpunktbewegung 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 Fluid⁶ gilt:

$$\sigma = \mu \left[\nabla \vec{u} + (\nabla \vec{u})^t \right] + \mu_2 \nabla \cdot \vec{u} \bar{\bar{E}} \quad (2.3)$$

$\bar{\bar{E}}$ 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 [117]. Die *Sutherland-Formel* definiert für laminare Strömungen μ als:

²Ein Ansatz zur Modellierung von Realgaseffekten wird im Anhang C vorgestellt.

³Benannt 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.

⁴Historisch gesehen, werden die drei Komponenten der Impulsgleichung als *Navier-Stokes-Gleichungen* bezeichnet. In der modernen CFD-Literatur hat es sich jedoch eingebürgert, Kontinuitätsgleichung plus Impulsgleichung als *Navier-Stokes-Gleichungen* zu bezeichnen.

⁵Grundsätzlich 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.

⁶Bei Newtonschen Fluiden wird die Viskosität als unabhängig von den Schergeschwindigkeiten angenommen. Es besteht daher ein linearer Zusammenhang zwischen der Schubspannung und der Schergeschwindigkeit.

$$\mu = \frac{A_1 T^{\frac{3}{2}}}{T + A_2} \quad (\text{mit } A_1 \text{ und } A_2 \text{ als stoffspezifische Modellkonstanten}) \quad (2.4)$$

Der zweite Term in Gleichung 2.3 ist nur für kompressible Strömungen von Bedeutung, da für Dichteinvarianz $\nabla \cdot \vec{u} = 0$ gilt. Unter Vernachlässigung der Volumenviskosität⁷ wird der Viskositätskoeffizient μ_2 für Gase häufig nach der *Stokes'schen Hypothese* als Funktion der dynamischen Viskosität ausgedrückt [104]:⁸

$$\mu_2 = -\frac{2}{3}\mu \quad (2.5)$$

In der Impulsgleichung 2.2 berücksichtigt ρg die Schwerkraft mit der Gravitationskonstante g .

Für inkompressible Strömungen ($\rho = \text{konst.} \rightarrow \nabla \cdot \vec{u} = 0$) liegen jetzt vier Gleichungen für vier Unbekannte (u, v, w, p) vor, so dass das Gleichungssystem bei Kenntnis der Quell- und Senkenterme bestimmt und lösbar ist.

2.2.2 Energie- und Speziesmassenerhaltung

Bei motorischen Verbrennungsprozessen muss stets von variabler Dichte ausgegangen werden, da die Kolbenbewegung und chemische Reaktionen zu z.T. große zeitliche und lokale Temperaturgradienten führen und somit auch implizit zu erheblichen Dichteunterschieden. Da die Dichte ρ jetzt als zusätzliche Unbekannte auftritt, ist das Gleichungssystem der *Navier-Stokes-Gleichungen* unterbestimmt.

Die makroskopischen Zustandsgrößen und die mikroskopischen Fluideigenschaften sind stets Funktionen der Gemischzusammensetzung. 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 :

$$\frac{\partial \rho y_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho y_i \vec{u}) = \nabla \cdot [\rho D \nabla y_i] + \dot{\rho}_i^s + \dot{\rho}_i^c \quad (2.6)$$

Die linke Seite beschreibt die zeitliche Änderung und die Konvektion. Der erste Term auf der rechten Seite quantifiziert gemäß dem *Fickschen Gesetz* die molekulare Diffusion der Spezies i als proportional zu ihrem Konzentrationsgradienten. Dabei wird häufig ein einheitlicher Diffusionskoeffizient D angenommen, was für stark verdünnte Mischungen zulässig ist [117]. Bei Verbrennungsprozessen mit Luft als Oxidator trifft dies in der Regel zu, da Stickstoff als Überschusskomponente vorliegt. Zusätzlicher diffusiver Massentransport aufgrund von Temperatur- (*Soret-Effekt*) und Druckgradienten (*Druckdiffusion*) kann bei der Simulation von Verbrennungsprozessen in der Regel vernachlässigt werden ([42], [117]).

Die letzten beiden Terme der Gleichung 2.6 repräsentieren Quellterme zur Beschreibung der Strahlverdampfung ($\dot{\rho}_i^s$) und der chemischen Reaktion ($\dot{\rho}_i^c$). Letzterer entfällt, falls eine Element-Bilanzgleichung betrachtet wird, da Elemente weder gebildet noch verbraucht werden können (siehe Mischungsbruch in Kapitel 4.3.1).

⁷Die Volumenviskosität beschreibt Reibungskräfte, die bei der Expansion eines Fluids bedingt durch Relationseffekte zwischen inneren Freiheitsgraden und der Translation auftreten [117].

⁸Die *Stokes'schen Hypothese* gilt streng genommen nur für einatomige Gase!

Zur Schließung des gesamten Gleichungssystems wird die Thermodynamik herangezogen. Als dritte fundamentale physikalische Erhaltungsgröße wird die innere Energie eingeführt. Das physikalische Prinzip, das dabei zur Anwendung kommt, ist *der erste Hauptsatz der Thermodynamik*, der die zeitliche Änderung der inneren Energie als Summe aus Wärmestrom und Arbeit durch Oberflächen- und Volumenkräfte pro Zeiteinheit beschreibt. Für die Erhaltungsgleichung der spezifischen thermischen inneren Energie i_{th} (siehe Gleichung 2.16) gilt:

$$\frac{\partial \rho i_{th}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} i_{th}) = -p \nabla \cdot \vec{u} - \nabla \cdot J + \dot{Q}^s + \dot{Q}^c + \dot{Q}^r \quad (2.7)$$

Eine bei Verbrennungsprozessen häufig benutzte Energiegröße ist die Enthalpie. Sie korreliert per definitionem mit der inneren Energie über:

$$h = i + \frac{p}{\rho} \quad (2.8)$$

Gleichung 2.8 in 2.7 eingesetzt, führt zu einer Erhaltungsgleichung für die spezifische thermische Enthalpie:

$$\frac{\partial \rho h_{th}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} h_{th}) = \frac{\partial p}{\partial t} - \nabla \cdot J + \dot{Q}^s + \dot{Q}^c + \dot{Q}^w \quad (2.9)$$

Die linke Seite der Gleichungen 2.7 und 2.9 repräsentiert die zeitliche Änderung und die Konvektion von Energie. Die Terme auf der rechten Seite beschreiben für die innere Energie die Volumenänderungsarbeit und für die Enthalpie einen Kompressionsterm. Änderungen der inneren Energie durch Reibungskräfte können nach [57] für Strömungen mit niedrigen Machzahlen vernachlässigt werden. Dies gilt prinzipiell auch für den Druckterm $\partial p / \partial t$ [57], 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 ([42], [17]). Neben dem *Soret-Effekt* und der *Druckdiffusion* kann bei Verbrennungsprozessen auch der *Dufour-Effekt* in der Regel vernachlässigt werden ([42], [117]), so dass sich die resultierende Wärmestromdichte aus den Anteilen der Wärmeleitung nach *Fourier* und der Enthalpiediffusion nach *Fick* zusammensetzt:

$$J = -\lambda \nabla T - \rho D \sum_i h_i \nabla y_i \quad (2.10)$$

h_i entspricht 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 drei Terme der Gleichungen 2.7 und 2.9 repräsentieren Quellterme. Sie beschreiben den energetischen Einfluss der Kraftstoffverdampfung (\dot{Q}^s), von chemischen Reaktionen (\dot{Q}^c) und des Wandwärmübergangs im Zylinder (\dot{Q}^w). Sie werden später noch genauer definiert.

Durch die kalorischen Zustandsgleichungen können die massenspezifischen Energien als Funktionen der Zustandsgrößen ausgedrückt werden. Für ein kalorisch ideales Gasgemisch ist

die innere Energie und damit auch die Enthalpie nur von der Temperatur und der Gemischzusammensetzung abhängig. Die Energiegrößen können dann leicht mit Hilfe der stoffspezifischen Wärmekapazitäten $c_{v,i}$ und $c_{p,i}$ berechnet werden:

$$i = \sum_i y_i \int_{T_0}^T c_{v,i}(T) dT \quad (2.11)$$

$$h = \sum_i y_i \int_{T_0}^T c_{p,i}(T) dT \quad (2.12)$$

Für Gase sind Druck, Temperatur und Dichte durch die thermische Zustandsgleichung korreliert, die für ein ideales Gasgemisch lautet:

$$p = \rho RT \quad (2.13)$$

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

$$R = \frac{\mathfrak{R}}{\bar{M}} \quad (2.14)$$

Zudem ergibt sich R aus der Differenz der spezifischen Wärmekapazitäten:

$$R = c_p - c_v \quad (2.15)$$

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

Bei der Bilanzierung der Energie-Erhaltungsgleichung muss zwischen totaler, thermischer und chemischer Energie unterschieden werden. Aufgrund der Additivität von Energien gilt für die totale innere Energie eines idealen Gasgemisches:

$$i = \underbrace{\sum_i y_i (\Delta h_f^0)_i}_{\text{chemische Energie}} + \underbrace{\sum_i y_i \cdot \int_{T_0}^T c_v(T) dT}_{\text{thermische Energie}} \quad (2.16)$$

$(\Delta h_f^0)_i$ repräsentiert für den thermodynamischen Referenzzustand T_0 und p_0 die Standardbildungs-Enthalpie der Spezies i . Sie beschreibt die Reaktionsenthalpie bei der Bildungsreaktion der Spezies i aus den reinen Elementen.

Bei der Bilanzierung der totalen Energiegrößen entfällt in den Gleichungen 2.7 und 2.9 der chemische Quellterm \dot{Q}^c .

Die Erhaltungsgleichungen für Masse, Energie und Impuls sind zusammen mit den Bilanzgleichungen für die Speziesmassen von ihrer Charakteristik her sehr ähnlich. Sie lassen sich in einer sogenannten *allgemeinen Transportgleichung* für die Fluideigenschaft ψ zusammenfassen ([42], [57]):

$$\underbrace{\frac{\partial \rho \psi}{\partial t}}_{\text{zeitliche Änderung}} + \underbrace{\nabla \cdot (\rho \psi \vec{u})}_{\text{Konvektion}} = \underbrace{\nabla \cdot [\rho \Gamma \nabla \psi]}_{\text{Diffusion}} + \underbrace{\sum_i \dot{Q}^i}_{\text{Quellterme}} \quad (2.17)$$

Die rechte Seite der Gleichung 2.17 beschreibt die zeitliche Änderung der Fluideigenschaft und den konvektiven Transport infolge der makroskopischen Schwerpunktschwindigkeit \vec{u} . Der erste Term der rechten Seite berücksichtigt mikroskopische Transportprozesse aufgrund von Konzentrationsgradienten $\nabla \psi$. Γ entspricht einer allgemeinen Transportkonstanten. Je nach physikalischer Größe wird dabei zwischen Diffusion (Masse), Viskosität (Impuls) und Wärmeleitung (Energie) unterschieden. $\sum_i \dot{Q}^i$ fasst lokale (z.B. Verdampfung und chemische Reaktionen) und externe (z.B. Wärmestahlung, Gravitation) Quell- und Senkenterme zusammen.

2.3 Turbulenzbehandlung

Wie bei fast allen technischen Strömungserscheinungen, ist auch die Strömungsstruktur innermotorischer Verbrennungsprozesse turbulent. Bereits im 19. Jahrhundert wurde von O. Reynolds⁹ mit seinem berühmten Farbfadenversuch eindrucksvoll demonstriert, dass ab einem gewissen Strömungszustand der Umschlag von einer laminaren zu einer turbulenten Strömung stattfindet. Die Transition laminar-turbulent hängt dabei von der mittleren Strömungsgeschwindigkeit, der Geometrie und der Reibungseigenschaft eines Fluids ab. Diese Strömungscharakteristiken werden als dimensionslose Kennzahl in der Reynolds-Zahl zusammengefasst:

$$Re = \frac{u \cdot l_{char}}{\nu} \quad (2.18)$$

u entspricht der mittleren Strömungsgeschwindigkeit, l_{char} einer charakteristischen geometrischen Länge und $\nu = \mu/\rho$ der kinematischen Viskosität eines Fluids. Folglich beschreibt die Reynolds-Zahl das Verhältnis zwischen Trägheits- und Viskositätskraft. Der Einfluss der Reynolds-Zahl auf ein Strömungsfeld lässt sich mathematisch veranschaulichen, indem eine dimensionslose Darstellung der *Navier-Stokes-Gleichungen* gewählt wird (Ähnlichkeitstheorie). Durch eine Entdimensionierung der Impulsgleichung 2.2 und unter der Annahme einer inkompressiblen und quellenfreien Strömung folgt:

$$\underbrace{\frac{\partial \vec{u}^*}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{u}^* \vec{u}^*)}_{\text{“Trägheitskräfte”}} = \underbrace{-\nabla p^*}_{\text{“Druckkräfte”}} + \underbrace{\frac{1}{Re} \nabla \cdot (\nabla \vec{u}^*)}_{\text{“Reibungskräfte”}} \quad (2.19)$$

Ab der sogenannten kritischen Reynolds-Zahl überwiegen die destabilisierenden Trägheitskräfte gegenüber den stabilisierenden Reibungskräften in den Scherschichten und es findet ein Übergang zur Turbulenz statt. Fluidballen werden hin und her bewegt und bedingen dadurch einen Impuls-, Energie- und Stofftransport. Die Folge sind starke Fluktuationen der makroskopischen Zustandsgrößen. Bei großen Reynolds-Zahlen können bereits kleinste Störungen zu erheblichen Änderungen des Strömungsfeldes führen. Daher spricht man auch von der parametrischen Sensitivität [117] und der chaotischen Natur der Turbulenz. *Rotta* [103] beschreibt allgemein

⁹Britischer Physiker (*23.8.1842, †21.2.1912)

turbulente Strömungen als unregelmäßige, dreidimensionale, instationäre Wirbelströmungen. Man differenziert zwischen isotroper, anisotroper, homogener und inhomogener Turbulenz. Weiter unten werden diese Begriffe noch genauer erläutert.

2.3.1 Turbulente Zeit- und Längenskalen

Zur allgemeinen Klassifizierung von turbulenten Strömungen wurden charakteristische Zeit- und Längenskalen in die Turbulenztheorie eingeführt. Die für diese Arbeit relevanten Kennzahlen werden hier kurz vorgestellt.

In einem turbulenten Strömungsfeld treten Turbulenzelemente von sehr unterschiedlichen Größen auf. 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. der Zylinderinnenraumberandung bei motorischen Strömungsprozessen ($l_0 \sim l_{char}$). Diese Proportionalität wurde bereits mehrfach in der Literatur bestätigt [25, 40]. Aufgrund der gerichteten Hauptströmungsrichtung ist auch von ausgerichteten Makrowirbeln auszugehen, so dass eine Richtungsabhängigkeit der Turbulenz vorliegt (Anisotropie). Durch Wirbelstreckung zerfallen die "größten" Wirbelballen in immer kleiner werdende, hochfrequente Elemente, die statistisch stark schwanken. Dabei findet ein Energieaustausch 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. Die Wellenzahl k_w entspricht dem Kehrwert einer Länge ($k_w = 1/l$). Sie ist eine übliche Größe in der statistischen Turbulenztheorie. Die gesamte lokale turbulente kinetische Energie E_{k_w} ¹⁰ berechnet sich aus der Integration der spektralen Energiedichten $e(k_w)$:

$$E_{k_w} = \int_{1/l_0}^{1/l_k} e(k_w) dk_w \quad (2.20)$$

l_K entspricht hierbei dem turbulenten Mikromaß, das weiter unten spezifiziert wird. Aus E_{k_w} und der allgemeinen Definition der kinetischen Energie lässt sich unter der Annahme homogener, isotroper Turbulenz eine mittlere turbulente Schwankungsgeschwindigkeit u' bestimmen:

$$u' = \sqrt{\frac{2}{3} \cdot E_{k_w}} \quad (2.21)$$

u' und das *integrale Längenmaß* l_0 in Gleichung 2.18 eingesetzt, führt zu einem Ausdruck für die *turbulente Reynolds-Zahl* Re_t ¹¹[57]:

$$Re_t = \frac{u' \cdot l_0}{\nu} \quad (2.22)$$

Re_t eignet sich besser zur Charakterisierung von turbulenten Strömungen, da ein direkter Bezug zur Turbulenz hergestellt wird, indem die Schwankungsgeschwindigkeit und die Länge des Makrowirbels berücksichtigt werden.

¹⁰Später wird die gesamte turbulente kinetische Energie E_{k_w} als k abgekürzt. Hier soll nur das Energiespektrum im Wellenzahlraum bezeichnet werden.

¹¹Hier ist die turbulente Reynolds-Zahl für das integrale Längenmaß angegeben, da l_0 eine definierte Größe darstellt, und die größten Wirbel am energiereichsten sind.

Kolmogorov¹² hat die Vorstellung der *Energiekaskade* für voll entwickelte turbulente Strömungen eingeführt [50]. Dabei ging er von drei wesentlichen Annahmen aus, die entscheidend zur Entwicklung des weiter unten vorgestellten k - ϵ Modells beigetragen haben [83]:

1. Stationärer Energieaustausch im Inertialbereich¹³
→ 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. Für diese sogenannte turbulente Dissipationsrate ϵ gilt:

$$\epsilon \sim \frac{u'^2}{l_0/u'} \sim \frac{u'^3}{l_0} \quad (2.23)$$

l_0/u' entspricht dabei einer charakteristischen turbulenten Zeitskala. Sie berechnet sich per definitionem aus dem Verhältnis der turbulenten kinetischen Energie und der turbulenten Dissipationsrate:

$$\tau_{turb} = \frac{l_0}{u'} = \frac{E_{kw}}{\epsilon} \quad (2.24)$$

Das kleinste turbulente Längenmaß, auch Kolmogorov-Längenmaß genannt, bestimmt die Grenze, ab dem durch Reibungskräfte die Wirbelstrukturen in thermische Energie dissipieren. Generell nimmt die Richtungsabhängigkeit der Turbulenz mit kleiner werdenden Wirbelstrukturen ab, so dass man bei den kleinsten dissipativen Elementen von lokaler Isotropie ausgehen kann. Das *Kolmogorov-Längenmaß* (Mikrolänge) ist folglich eine Funktion der Zähigkeit und der Dissipationsrate [57]. Aus einer Dimensionsanalyse ergibt sich für das *Kolmogorov-Längen- und -Zeitmaß*:

$$l_k = \left(\frac{\nu^3}{\epsilon}\right)^{1/4}, t_K = \left(\frac{\nu}{\epsilon}\right)^{1/2} \quad (2.25)$$

Gleichungen 2.23, 2.22 und 2.25 korrelieren direkt die Größen Re_t , l_0 und l_k miteinander:

$$l_K = \frac{l_0}{Re_t^{3/4}} \quad (2.26)$$

Gleichung 2.26 demonstriert, dass bei konstantem integralem Längenmaß l_0 ein steigender Turbulenzgrad zur Ausbildung von kleineren Mikrowirbeln führt.

¹²Sowjetischer Mathematiker (*15.4.1903, †20.11.1987)

¹³Der Initialbereich erstreckt sich vom integralen bis zum Kolmogorov-Längenmaß.

2.3.2 Phänomenologie der Turbulenz

Die Erhaltungsgleichungen aus Kapitel 2.2 sind ohne zusätzliche Modellannahmen auch für turbulente Strömungen gültig [117]. Allerdings ist unter Berücksichtigung detaillierter Transportgesetze eine **direkte numerische Simulation (DNS)** nur dann möglich, wenn das gesamte Zeit- und Längenskalenspektrum numerisch aufgelöst wird. Beim Motor reicht die Bandbreite der relevanten Längenskalen von den geometrischen Abmessungen (dm) bis zum Mikrolängenmaß (mm) und der Dicke der Reaktionszone ($\ll mm$). Die physikalischen Zeitskalen für turbulente konvektive Transportvorgänge haben eine Größenordnung von 10^{-4} bis 10^{-2} Sekunden. Die chemischen Zeitskalen liegen im Bereich von 10^{-10} bis 10 Sekunden [117, 67]. Zur Auflösung dieser Skalen ist folglich eine extrem feine Zeit- und Raumdiskretisierung vorzunehmen. Zur DNS von turbulenten 3D-Strömungsphänomenen kann die Mindestanzahl an Gitterpunkten n nach [36] in Abhängigkeit der turbulenten Reynolds-Zahl Re_t abgeschätzt werden:

$$n > Re_t^{9/4} \quad (2.27)$$

Grundvoraussetzung zur Simulation reaktiver Strömungen ist die Verfügbarkeit von detaillierten Reaktionsmechanismen für hohe Kohlenwasserstoffverbindungen. Diese beschreiben das reaktive Verhalten von mehreren hundert von Spezies durch mehrere tausende Elementarreaktionen. Für alle Spezies muss eine Bilanzgleichung gelöst werden. Das Resultat ist ein hochdimensionales, steifes, nicht-lineares, gekoppeltes Gleichungssystem. Zusammen mit der Auflösungsproblematik der großen Bandbreite an Zeit- und Längenskalen verdeutlicht dies, dass mit den heutigen - und auch nicht auf absehbarer Zeit zukünftigen - Rechenanlagen keine DNS technischer Systeme möglich ist und sein wird. Stattdessen beschränkt sich die DNS auf sehr kleine räumliche Bereiche und wird vorwiegend als *numerisches Experiment* eingesetzt, um beispielsweise die Chemie - Turbulenz - Transport - Interaktion zu untersuchen (siehe z.B. [113]).

Ein weiteres Problem der DNS von turbulenten Strömungsvorgängen ist die Tatsache, dass jede Rechnung nur ein Einzelereignis beschreibt. Der Ingenieur in der Praxis ist allerdings in der Regel nicht an Momentaufnahmen interessiert, sondern an statistischen Aussagen über relevante makroskopische Fluideigenschaften. Statistische Aussagen sind nur dann via DNS möglich, wenn ausreichend viele Momentaufnahmen gemittelt werden. Diese erhält man durch Variation der Anfangs- und Randbedingungen. Eine geeignete Vorgabe ist allerdings diffizil. Hinzu kommt, dass mit zunehmendem Varianzspektrum der Rechenaufwand unwirtschaftlich zunimmt.

2.3.3 Statistische Turbulenzbehandlung

Die Turbulenz kann aufgrund ihres chaotischen Charakters sinnvollerweise nur statistisch erfasst werden. Die statistische Turbulenztheorie wurde von *G.I. Taylor* [112] eingeführt.

Zur statistischen Beschreibung turbulenter Strömungen sind zwei Ansätze gängig:

1. Transport einer Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion mittels Monte-Carlo-Simulation
2. Transport der statistischen Momente einer Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion¹⁴

¹⁴Auch nach der englischen Abkürzung RANS für *Reynolds-Averaged-Navier-Stokes* benannt.

Nach einer kurzen Einführung der allgemeinen Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (PDF¹⁵) wird das erste Konzept vorgestellt. Es folgt anschließend eine umfassendere Abhandlung zum Momententransport, da dieses Konzept auch die Grundlage der Turbulenzbehandlung in dieser Arbeit darstellt.

Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (PDF)

Die Wahrscheinlichkeit, dass sich eine beliebige Variable ψ mit dem Wertebereich $[-\infty, +\infty]$ zur Zeit t am Ort \vec{x} in dem Zustandsraumintervall $-\infty \leq \psi \leq \Psi$ befindet, ist gegeben durch die Verteilungsfunktion der Wahrscheinlichkeit $F(\psi \leq \Psi; \vec{x}, t)$. Für die Randbedingungen gilt folglich:

$$F(\psi \leq -\infty; \vec{x}, t) = 0, F(\psi \leq +\infty; \vec{x}, t) = 1 \quad (2.28)$$

F nach Ψ abgeleitet, führt zu einem Ausdruck für die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion:

$$P(\Psi; \vec{x}, t) = \frac{\partial F(\Psi; \vec{x}, t)}{\partial \Psi} \quad (2.29)$$

Die PDF über den gesamten Wertebereich integriert, liefert eine Normierungsbedingung:

$$\int_{-\infty}^{\infty} P(\Psi; \vec{x}, t) d\Psi = 1 \quad (2.30)$$

Die statistischen Momente der PDF ergeben sich aus:

$$\overline{\psi^n} = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^n P(\Psi; \vec{x}, t) d\Psi \quad (2.31)$$

Das erste Moment ($n = 1$) entspricht dabei dem Mittelwert der Größe Ψ :

$$\overline{\psi} = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi P(\Psi; \vec{x}, t) d\Psi \quad (2.32)$$

Die Momente der Schwankungsgrößen $\psi' = \psi - \overline{\psi}$ werden als zentrale Momente bezeichnet:

$$\overline{\psi'^n} = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi'^n P(\Psi; \vec{x}, t) d\Psi \quad (2.33)$$

Für $n = 2$ spricht man von der *Varianz* oder *Streuung*. Die statistischen Momente liefern wichtige Hinweise auf die Charakteristik von Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen. So beschreibt z.B. das zweite Moment die Breite der Verteilung. Momente mit ungeradem n geben generell Auskunft über die Symmetrieeigenschaft einer PDF [103]. Die Momente sind insbesondere auch zur Konstruktion von analytischen Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen sehr hilfreich.

Transport der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (Transported-PDF)

Die im Zustandsraum eindimensionale Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion aus dem vorherigen Abschnitt stellt die einfachste Form einer PDF dar. Zur Berechnung der statistischen Momente einer turbulenten, reaktiven Strömung nach Gleichung 2.31 muss die *gemeinsame PDF*¹⁶ als

¹⁵engl.: Probability-Density-Function

¹⁶engl.: Joint-PDF

Funktion der Geschwindigkeitskomponenten $\underline{u} = (u, v, w)$ und der Strömungsskalare $\underline{\psi} = (\psi_1, \psi_2, \dots)$ bekannt sein:

$$\overline{\psi^n} = \int_{\underline{\psi}} \int_{\underline{u}} \psi_i^n P(\underline{u}, \underline{\psi}; \vec{x}, t) d\underline{u} d\underline{\psi} \quad (2.34)$$

Basierend auf den *Navier-Stokes-Gleichungen* und den Gesetzen der Statistik kann für die gemeinsame PDF eine Transportgleichung hergeleitet werden [58, 95]. Die resultierende Gleichung nach *Pope* lautet in konservativer Darstellung (mit $\nabla_u = (\partial/\partial u, \partial/\partial v, \partial/\partial w)^t$):

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho P}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \underline{u} P) - \nabla \bar{p} \cdot \nabla_u P + \sum_{i=1}^n \nabla_{\psi_i} \cdot [\omega_i P] = \\ \nabla_u \cdot \left[\left\langle -\nabla \cdot \sigma + \nabla p' | \underline{u}, \underline{\psi} \right\rangle P \right] + \sum_{i=1}^n \nabla_{\psi_i} \cdot \left[\left\langle \vec{J} | \underline{u}, \underline{\psi} \right\rangle P \right] \end{aligned} \quad (2.35)$$

Alle Terme der linken Seite liegen in geschlossener Form vor. Sie quantifizieren sogenannte *Einpunktprozesse*. Die ersten beiden Terme beschreiben die zeitliche Änderung der PDF und den Transport im Ortsraum durch Konvektion. Der dritte Term repräsentiert den Transport im Geschwindigkeitsraum aufgrund mittlerer Druckgradienten. Eine Besonderheit der Gleichung 2.35 repräsentiert der letzte Term der linken Seite. Er beschreibt in geschlossener Form den Transport im Skalarraum durch chemische Reaktionen. Darin liegt der Hauptvorteil dieses Ansatzes, da eine Modellierung für den chemischen Quellterm vermieden wird. Die Terme der rechten Seite von Gleichung 2.35 berücksichtigen sogenannte *Zweipunktprozesse*. Der erste Term beschreibt den Transport im Geschwindigkeitsraum durch Reibung und Druckfluktuationen, der zweite Term den Transport im Skalarraum durch Mischungsprozesse. Beide Terme beinhalten bedingte Wahrscheinlichkeiten und müssen modelliert werden, da die transportierte PDF zwar die Statistik der Geschwindigkeiten und Skalare wiedergibt, jedoch nicht die der Gradienten. Diese könnten a-priori mittels DNS berechnet und tabelliert werden [95]. Für die motorische Verbrennungssimulation ist dieser Ansatz allerdings schwierig zu realisieren, wenn man sich den großen Zustandsraum vor Augen hält, der abgedeckt werden muss. Zur Beschreibung des Transports im Geschwindigkeitsraum durch Reibung und Druckfluktuationen wird meistens ein sogenanntes *Langevin Modell* verwendet [95]. Als Mischungsmodell zur Schließung des letzten Terms auf der rechten Seite in Gleichung 2.35 stehen mehrere Ansätze zur Verfügung. So beruht beispielsweise das *IEM-Modell*¹⁷ auf der Vorstellung, dass eine Relaxation der Partikeleigenschaften zu einem Mittelwert in einer charakteristischen Zeit stattfindet [19]. Einen weiteren Ansatz liefert das *Curl-Modell*, das auf einer zufälligen Auswahl von Mischungspartnern beruht, die jeweils zu ihrem gemeinsamen Mittelwert relaxieren [16].

Die direkte numerische Lösung der PDF-Transportgleichung kann aufgrund ihrer hohen Dimensionalität und der damit einhergehenden hohen Speicheranforderung nicht mit finiten Differenz-, Volumen- oder Elementenverfahren erfolgen. *Pope* [94, 95] hat als numerischen Alternativansatz die *Lagrangsche Partikelmethode* (Monte-Carlo-Verfahren) vorgeschlagen. Dabei wird die PDF durch eine große Anzahl sogenannter *stochastischer Partikel* repräsentiert, d.h. die Einpunkt- und Zweipunktprozesse werden auf Partikelebene transformiert. Jedes Partikel kann folglich als eine Realisierung des lokalen Strömungsproblems gesehen werden. Ein Vorteil der Partikelmethode ist die geringere Speicheranforderung, da sie nur noch linear von der Dimensionalität des Problems abhängt. Allerdings müssen viele Partikel eingeführt werden,

¹⁷engl.: Interaction by Exchange with the Mean

da das Verfahren nur langsam auf die richtige Lösung konvergiert [85]. Bedenkt man, dass jedes Partikel die Information aller Skalareigenschaften transportiert, ist es offensichtlich, dass aus Rechenzeitgründen keine detaillierte Reaktionskinetik verwendet werden kann. Deshalb ist man an reduzierten Mechanismen interessiert. Das *ILDM*¹⁸-Modell von *Maas* und *Pope* liefert dazu einen theoretischen Ansatz [59, 60].

Eine spezielle Variante des PDF-Modells sind sogenannte *hybride PDF/CFD-Verfahren*, die erstmals von *Pope* und *Correa* vorgeschlagen wurden [96, 15]. Dabei wird das turbulente Geschwindigkeitsfeld (Geschwindigkeitskomponenten, turbulente kinetische Energie, turbulente Dissipationsrate und Druck) über einen Momententransportansatz mit Hilfe eines CFD-Standard-Verfahrens gelöst (siehe nächstes Kapitel). Die daraus gewonnenen Informationen dienen als Input für ein *transported-PDF* Modell, das die Transportgleichung für die gemeinsame PDF der Skalare mit Hilfe eines Monte-Carlo-Verfahrens löst. Basierend auf den Eingangsgrößen können die ungeschlossenen Terme modelliert werden (z.B. über die turbulente Mischungszeit). Die Lagrangschen Partikel werden numerisch mit Hilfe eines Monte-Carlo-Verfahrens durch den physikalischen Raum transportiert. Folglich kann für jede CFD-Zelle der Mittelwert der Skalare (Temperatur und Spezieskonzentrationen) bestimmt werden. Der CFD-Code und das PDF-Modell koppeln über die Dichte miteinander. Die Berechnung erfolgt iterativ.

Abschließend bleibt zu bemerken, dass das Konzept der *transported-PDF* physikalisch fundiert und allgemein formuliert ist. Der Chemiequellterm tritt in der Erhaltungsgleichung in geschlossener Form auf und wird somit exakt behandelt. Das Konzept bietet prinzipiell die Möglichkeit, alle Verbrennungsregimes (vorgemischt, nicht-vorgemischt, teilweise-vorgemischt) zu simulieren [85]. Allerdings ist zur Lösung motorischer Fragestellungen der numerische Aufwand bisher noch ein limitierender Faktor, da sehr viele stochastische Partikel für eine konvergierende Lösung benötigt werden. Zudem liegt ein Schließungsproblem für die Zweipunktprozesse vor. Die statistische Abhängigkeit der Bewegung benachbarter Punkte des Strömungsfeldes wird über die eingeführte PDF nicht abgebildet. Die Vorhersagefähigkeit des gesamten Konzepts ist im Wesentlichen auch eine Frage der Qualität der Schließungsannahmen.

Transport der statistischen Momente einer Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (RANS)

Als gängige Alternative zum Transport der hochdimensionalen Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion beschreibt dieser Ansatz den Transport weniger statistischer Momente. Der durch Gleichung 2.32 definierte Mittelwert entspricht bei instationären Strömungsvorgängen einem sogenannten *Ensemble*-Mittelwert. Er ist als arithmetischer Mittelwert unendlich vieler Realisierungen der Strömung am Ort \vec{x} zur Zeit t bei ähnlichen makroskopischen Randbedingungen definiert:¹⁹

$$\bar{\psi}(\vec{x}, t) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \psi(\vec{x}, t) dt \quad (2.36)$$

Transportgleichungen für diese Mittelwerte können leicht hergeleitet werden. Dazu wird eine

¹⁸engl.: Intrinsic Low-Dimensional Manifold

¹⁹Aufgrund der hohen parametrischen Sensitivität turbulenter Strömungen bei großen Reynolds-Zahlen ist es experimentell unmöglich, exakt reproduzierbare Momentaufnahmen periodisch einzustellen.

Reynoldssche Zerlegung der Momentanwerte der Zustandsgrößen in Mittelwert und Fluktuation vorgenommen:

$$\psi(\vec{x}, t) = \overline{\psi}(\vec{x}, t) + \psi'(\vec{x}, t) \quad \text{mit} \quad \overline{\psi'}(\vec{x}, t) = 0 \quad (2.37)$$

Diese Zerlegung auf die deterministischen Erhaltungsgleichungen aus Kapitel 2.2 appliziert, führt zu ungeschlossenen Termen der Schwankungsgrößen-Korrelationen. Für kompressible Strömungen können die Dichtefluktuationen eliminiert werden, indem eine dichtegewichtete Mittelung (*Favre-Mittelung*) vorgenommen wird [21]:

$$\tilde{\psi}(\vec{x}, t) = \frac{\overline{\rho\psi}}{\bar{\rho}} \quad (2.38)$$

Für die Zerlegung der Momentanwerte folgt dann:

$$\psi(\vec{x}, t) = \tilde{\psi}(\vec{x}, t) + \psi''(\vec{x}, t) \quad \text{mit} \quad \overline{\psi''}(\vec{x}, t) = 0 \quad (2.39)$$

Diesen Formalismus, exemplarisch in die deterministische allgemeine Transportgleichung 2.17 eingesetzt, führt zu der statistischen allgemeinen Transportgleichung für das erste Moment einer Fluideigenschaft ψ :

$$\underbrace{\frac{\partial \tilde{\rho\psi}}{\partial t}}_{\text{zeitliche Änderung}} + \underbrace{\nabla \cdot (\tilde{\rho\psi\vec{u}})}_{\text{Konvektion}} = \underbrace{\nabla \cdot [\tilde{\rho\Gamma\nabla\psi}]}_{\text{laminarer Transport}} - \underbrace{\nabla \cdot (\tilde{\rho\psi''\vec{u}''})}_{\text{turbulenter Transport}} + \underbrace{\sum_i \tilde{Q}^i}_{\text{Quellterme}} \quad (2.40)$$

Diese sogenannte *allgemeine Favre-gemittelte* Transportgleichung ist bezüglich der beschreibenden Terme sehr ähnlich zur allgemeinen deterministischen Gleichung. Beide unterscheiden sich formal nur durch den zusätzlichen turbulenten Transportterm für Impuls, Energie und Partialdichten. Für den turbulenten Impulstransport $\tilde{\rho\vec{u}''\vec{u}''}$ ergibt sich für eine dreidimensionale Strömung der sogenannte *Reynoldsschen Spannungstensor* zu:

$$\tilde{\rho\vec{u}''\vec{u}''} = \bar{\rho} \cdot \begin{pmatrix} \widetilde{u''^2} & \widetilde{u''v''} & \widetilde{u''w''} \\ \widetilde{v''u''} & \widetilde{v''^2} & \widetilde{v''w''} \\ \widetilde{w''u''} & \widetilde{w''v''} & \widetilde{w''^2} \end{pmatrix} \quad (2.41)$$

Die Elemente der Hauptdiagonalen repräsentieren turbulente Normalspannungen. Die übrigen Elemente lassen sich als turbulente Tangentialspannungen deuten.²⁰ Die Tangentialspannungen repräsentieren den anisotropen Charakter einer Strömung.

Unter der Annahme ähnlicher Molmassen, können die Fluktuationen der mittleren Molmassen vernachlässigt werden [117, 57], so dass man näherungsweise für die ideale Gasgleichung eine Funktion ohne Schwankungsgrößen erhält:

$$\tilde{p} = \bar{\rho}\bar{R}\tilde{T} \quad (2.42)$$

²⁰Daher der Begriff des Reynoldsschen Spannungstensors.

Zur Lösung des *Favre-gemittelten* Gleichungssystems für motorische Strömungsprozesse müssen die Reynolds-Spannungen und die gemittelten Quellterme für die jeweiligen Fluideigenschaften modelliert werden. Die klassische Turbulenzmodellierung liefert Vorschläge dazu. Kriterien sind dabei Genauigkeit, Universalität, Flexibilität, Rechenaufwand, Konvergenzverhalten und Stabilität. Bevor auf die Schließung der Quellterme eingegangen wird, werden gängige Schließungsansätze für die Reynolds-Spannungen vorgestellt.

Modellierung der Reynolds-Spannungen

Ausgehend von den Grundgleichungen lassen sich Transportgleichungen für die Elemente des Reynoldsschen Spannungstensors $\bar{\rho} \widetilde{u'' u''}$ herleiten [56]. Deren Lösung ermöglicht die Abbildung anisotroper Turbulenzeigenschaften. Allerdings nehmen die Differentialgleichungen wiederum keine geschlossene Form an, da sie unbekannte Korrelationen dritter Ordnung beinhalten. Folglich lässt sich das Schließungsproblem auf diese Art nicht lösen, sondern nur auf eine höhere Korrelationsordnungsebene verschieben. Für diese sogenannten **Reynolds-Spannungsmodelle** existieren immer mehr Unbekannte als Gleichungen. Man spricht auch von dem klassischen Schließungsproblem der Turbulenz. Für den turbulenten Impulstransport müssen nach der Matrix 2.41 folglich sechs zusätzliche Transportgleichungen gelöst werden. Zur Schließung des Gleichungssystems ist es zudem notwendig, die Dissipationsraten der turbulenten kinetischen Energie zu transportieren. Folglich erhöht sich die Dimension des gesamten Gleichungssystems auf sieben Transportgleichungen, was zu erheblichen Rechenzeiten führt. Hinzu kommt, dass ein extrem eng gekoppeltes Gleichungssystem vorliegt, das numerisch sehr anspruchsvoll zu lösen ist. Bisher überwiegen noch die Nachteile der Reynolds-Spannungsmodelle, so dass sich das Konzept zur Modellierung motorischer Verbrennungsprozesse noch nicht etablieren konnte.

Grundlage fast aller klassischen Turbulenzmodelle stellt die Arbeit von Boussinesq [13] dar. In Analogie zum Newtonschen Ansatz für den viskosen Spannungstensor (siehe Gleichung 2.3), nahm Boussinesq eine Proportionalität zwischen den Reynolds-Spannungen und den Mittelwerten an:

$$\bar{\rho} \widetilde{u'' u''} = -\mu_t \left[\nabla \tilde{u} + (\nabla \tilde{u})^t - \frac{2}{3} \bar{\bar{E}} \nabla \cdot \tilde{u} \right] + \frac{2}{3} \bar{\bar{E}} \bar{\rho} \tilde{k} \quad (2.43)$$

μ_t entspricht dabei der turbulenten dynamischen Viskosität, auch Wirbelviskosität oder scheinbare Zähigkeit genannt. Im Gegensatz zur molekularen Viskosität ist μ_t keine Stoffgröße. Sie ist von lokalen Strömungsbedingungen abhängig. Als weitere Unbekannte hängt die Gleichung 2.43 von der turbulenten kinetischen Energie k ab. Gemäß der Definition für die Energiespektraldichte 2.20, berechnet sich k aus:

$$\tilde{k} = \frac{1}{2} \widetilde{u'' u''} \quad (2.44)$$

Für den turbulenten Energie- und Stofftransport wird entsprechend Gleichung 2.43 ebenfalls ein Gradientenansatz verwendet, der allerdings kontrovers diskutiert wird, da bereits mehrfach experimentell belegt werden konnte, dass turbulenter Transport auch entgegen dem Gradienten stattfinden kann [117, 105, 70]:

$$\bar{\rho} \widetilde{u'' h''} = -\frac{\mu_t}{Pr_t} \nabla \tilde{h} \quad (2.45)$$

$$\bar{\rho} \widetilde{u'' \psi''} = -\frac{\mu_t}{Sc_t} \nabla \cdot \widetilde{\psi} \quad (2.46)$$

Pr_t und Sc_t entsprechen empirischen Größen und werden meistens als konstant angenommen. Sie quantifizieren die turbulenten Transportkoeffizienten für Wärme und Stoff und sind direkt mit der Wirbelviskosität verknüpft:

$$Pr_t = \mu_t \frac{c_p}{\lambda_t} \quad \text{und} \quad Sc_t = \frac{\mu_t}{D_t} \quad (2.47)$$

Das Hauptproblem zur Lösung des vorgestellten Gleichungssystems verlagert sich nun in die Bestimmung der Wirbelviskosität μ_t . Drei Ansätze sind dazu im Wesentlichen bekannt, die sich nach der Anzahl der zu lösenden Transportgleichungen klassifizieren lassen. Sogenannte **Null-Gleichungs-Modelle** beruhen auf dem *Prandtschen Mischungswegansatz*, der die Wirbelviskosität als algebraische Funktion der Geschwindigkeitsgradienten und einem charakteristischen Mischungsweg ausdrückt. Die Mischungsweglänge ist eine empirische Größe und muss problemspezifisch angepasst werden. Da die Wirbelviskosität nur zum örtlichen Geschwindigkeitsgradienten in Beziehung gesetzt wird, wird der Transport von Turbulenzcharakteristiken nicht beschrieben, d.h. konvektive und diffusive Änderungen von Turbulenzeigenschaften erfahren keinen Einfluss. Eine allgemeinere, aber auch veraltete Formulierung liefern **Ein-Gleichungs-Modelle**. Sie beschreiben die Wirbelviskosität in Abhängigkeit der kinetischen Energie k , die transportiert wird und einer Mischungsweglänge, die wiederum empirisch vorgegeben werden muss. Falls die Mischungslänge nicht aufgrund problemspezifischer Argumentationen explizit vorgegeben werden kann, müssen außer der Transportgleichung für die turbulente kinetische Energie noch weitere Transportgleichungen zur Bestimmung der Mischungsweglänge gelöst werden. In der Praxis haben sich dabei sogenannte **Zwei-Gleichungs-Modelle** etabliert. Das am weitesten verbreitete und auch in dieser Arbeit applizierte Modell ist das von *Launder* und *Spalding* [56, 45] entwickelte $k - \epsilon$ **Modell**, das im Wesentlichen auf der Vorstellung der in Kapitel 2.3.1 beschriebenen *Energiekaskade* basiert. 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. Aus einer Dimensionsanalyse ergibt sich dann die Wirbelviskosität zu:

$$\mu_t = \bar{\rho} c_\mu \frac{\tilde{k}^2}{\tilde{\epsilon}} \quad (c_\mu \text{ entspricht einer Modellkonstante.}) \quad (2.48)$$

Die Favre-gemittelten Transportgleichungen der turbulenten kinetischen Energie und der Dissipationsrate lauten in ihrer einfachsten Form:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{k}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{u} \tilde{k}) = \nabla \cdot \left[\frac{\mu}{Pr_k} \nabla \tilde{k} \right] - \bar{\rho} \widetilde{u'' u''} : \nabla \tilde{u} - \bar{\rho} \tilde{\epsilon} \quad (2.49)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{\epsilon}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{u} \tilde{\epsilon}) = \nabla \cdot \left[\frac{\mu}{Pr_\epsilon} \nabla \tilde{\epsilon} \right] - \frac{\tilde{\epsilon}}{\tilde{k}} c_{\epsilon 1} \widetilde{u'' u''} : \nabla \tilde{u} - c_{\epsilon 2} \bar{\rho} \frac{\tilde{\epsilon}^2}{\tilde{k}} \quad (2.50)$$

Die rechte Seite repräsentiert jeweils den turbulenten Transport, die Produktion und Dissipation der jeweiligen Turbulenzgröße. In **Tabelle 2.1** sind die empirischen Standard-Modellkonstanten aufgelistet.

Im Vergleich zu den Null- und Ein-Gleichungs-Modellen ist das $k - \epsilon$ Modell zwar rechenzeit-aufwändiger, dafür aber auch bedeutend universeller. Prinzipiell müssen nur Anfangs- und

c_μ	c_{ϵ_1}	c_{ϵ_2}	Pr_k	Pr_ϵ
0.09	1.44	1.92	1.0	1.3

Tabelle 2.1: Standard-Konstantensatz des $k - \epsilon$ Modells

Randbedingungen vorgegeben werden. Die Universalität wird allerdings durch die modellinhärente Annahme begrenzt, dass die Turbulenz lokal als homogen und isotrop angesehen wird. Dieser Zustand wird nur bei sehr hohen Reynolds-Zahlen erreicht. Innermotorische Applikationen zeichnen sich meistens im großen Längenskalenbereich durch stark gekrümmte Scherströmungen in Form einer Tumble- oder Drall-Strömung aus, was zu erheblichen anisotropen Turbulenzfeldern führen kann. Ein weiterer Nachteil des $k - \epsilon$ Modells stellt der Konstantensatz dar, der keine Allgemeingültigkeit für alle Strömungsregimes aufweist, so dass die Konstanten in Abhängigkeit der Globalströmung adaptiert werden müssen.

Als Alternativansatz können Reynolds-Spannungsmodelle zwar den anisotrope Turbulenzcharakter abbilden, allerdings dies nur mit einem erheblichen Mehraufwand an Rechenzeit und der weiterhin nicht zu vermeidenden Modellannahme für die turbulente Dissipationsrate. **Algebraische Spannungsmodelle** bieten eine weitere Möglichkeit, die Anisotropie der Turbulenz zu berücksichtigen, indem versucht wird, die Reynolds-Spannungen über algebraische Funktionen in Abhängigkeit der turbulenten kinetischen Energie und der Dissipationsrate zu formulieren. Dadurch reduziert sich der Rechenaufwand im Gegensatz zu den RSM erheblich, da keine rechenzeitintensiven Transportgleichungen für die Reynolds-Spannungen gelöst werden müssen. Neben der notwendigen Modellannahmen für den Transport der Dissipationsrate, müssen zudem zusätzliche problemspezifische, empirische Konstanten eingeführt werden. Die *Algebraischen Spannungsmodelle* konnten sich unter anderem aus diesem Grund bisher nicht als Ansatz für die innermotorische Simulation durchsetzen.

Die Simplizität, die Rechenzeiteffizienz, der große Erfahrungsschatz und vor allem der Mangel an Alternativen sind wahrscheinlich die Hauptgründe, warum aktuell fast ausschließlich das $k - \epsilon$ Modell Anwendung für Praxis-relevante Strömungssimulationen findet.

2.3.4 Large-Eddy-Simulation (LES)

Die bisher vorgestellten Simulationsansätze zur Beschreibung turbulenter Strömungen basieren entweder auf einem deterministischen oder statistischen Ansatz. Die Statistik bezieht sich dabei auf eine Zeit- bzw. Ensemble-Mittelung der Strömungsgrößen. Bei der LES werden die großen, zumeist anisotropen turbulenten Skalen direkt aufgelöst und die kleineren, zunehmend isotropen Skalen durch ein geeignetes Sub-Grid-Turbulenzmodell (z.B. das $k - \epsilon$ -Modell oder Smagorinsky-Modell) simuliert. Dazu wird das Grundgleichungssystem in Abhängigkeit eines Filters räumlich gemittelt. Für die räumliche Mittelung einer beliebigen Strömungsgröße ψ folgt mit der Filterfunktion G [22]:

$$\langle \psi \rangle_G (\vec{x}) = \int G(\vec{x} - \vec{x}') \psi(\vec{x}') d\vec{x}' \quad (2.51)$$

$\langle \psi \rangle_G$ repräsentiert eine gefilterte Größe. Als Filterfunktion dient beispielsweise ein Rechteck- oder Gaußfilter. Die Filterweite bestimmt die Skalen, die direkt aufgelöst werden sollen. Sie ist explizit mit der Netzauflösung gekoppelt. Mit kleiner werdender Filterweite gewinnt das

Modell an höherer Allgemeinheit, allerdings nimmt auch der Rechenaufwand zu. Im Grenzfall unendlich kleiner Filterweite geht die LES über in die direkte numerische Simulation. Der Vorteil der LES liegt in dem hohen Grad an Universalität. Anisotrope Effekte können direkt aufgelöst werden, ohne die kleinsten Skalen direkt simulieren zu müssen, die aufgrund der Isotropieeigenschaft bei ausreichender Gitterauflösung gut modelliert werden können. Allerdings muss dies wieder über hohe Rechenzeiten erkauft werden, da eine feine Netzauflösung notwendig wird. Eine weitere Schwierigkeit bereitet wie bei der DNS die Formulierung geeigneter Anfangs- und Randbedingungen, ohne die eine Lösung nicht möglich ist. Da man an einer Statistik interessiert ist, müssen wieder mehrere Realisierungen berechnet werden, was den Rechenaufwand enorm steigert. Aufgrund der geschilderten Nachteile ist die LES zur Zeit noch nicht applikabel, um motorische Fragestellungen zu simulieren.

Zusammenfassend zeigt **Abbildung 2.1** einen exemplarischen Vergleich zwischen DNS und LES in Form der Ortsauflösung einer beliebigen Strömungsgröße ψ_i zu einem festen Zeitpunkt. Je nach Filterweite können mit der LES turbulente Fluktuationen detailliert aufgelöst werden.

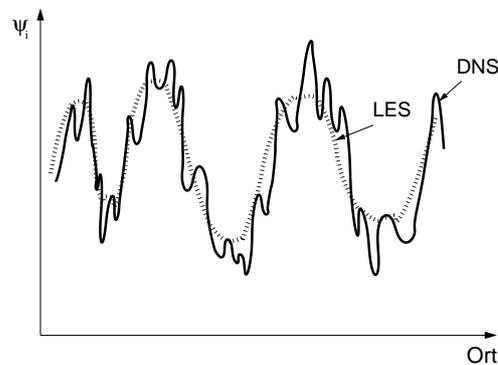


Abbildung 2.1: Exemplarische Ortsauflösung einer Strömungsgröße ψ_i berechnet mit DNS und LES.

2.4 Modellauswahl; Vorstellung des Strömungslösers

In den vorangegangenen Kapiteln wurde versucht, einen kurzen allgemeinen Abriss gängiger Möglichkeiten zur mathematischen Beschreibung turbulenter, reaktiver Strömungen zu geben. Tabelle 2.2 zeigt eine Gegenüberstellung der Ansätze, anhand von Bewertungskriterien, die insbesondere für die strömungsmechanische Simulation von motorischen Verbrennungsprozessen relevant sind.

	DNS	T-PDF	RANS	LES
Modellierungs- aufwand	keiner	Zweipunktprozesse	Reynolds-Spannungen, Quellterme	kleine Strukturen
Chemische Reaktion	exakt	exakt	Modellierung	Modellierung
Diskretisierung	extrem hohe Auflösung	hohe Auflösung bzgl. Partikelanzahl	mittlere Auflösung	sehr hohe Auflösung
Rechenaufwand	sehr hoch	hoch	akzeptabel	hoch
Statistische Information	als Rand- bedingung vorzugeben	zeitlich bzw. ensemble-gemittelt; explizit über Partikelmittlung	zeitlich bzw. ensemble-gemittelt; implizit über Transport	als Rand- bedingung vorzugeben
Motorische Applikation	keine	akademisch; als hybrides Modell	Standard	bisher nur akademisch

Tabelle 2.2: Gegenüberstellung unterschiedlicher CFD-Rechenansätze (Direkte numerische Simulation (DNS), Reynolds-Averaged-Navier-Stokes (RANS), Transported-PDF (T-PDF), Large-Eddy Simulation (LES)).

Tabelle 2.2 verdeutlicht, dass insbesondere der Rechenaufwand von DNS, T-PDF und LES zu hoch ist, um wirtschaftlich die Simulation als Tool bei der Brennverfahrensentwicklung nutzen zu können. Vor allem deshalb hat sich die RANS-Modellierung als Standard-Ansatz zur motorischen CFD-Simulation etabliert. Die RANS-Modellierung stellt auch die Grundlage zur Turbulenzmodellierung in dieser Arbeit dar.

2.4.1 Grundgleichungssystem der Gasphase

Als Basis zur numerischen Umsetzung des mathematischen Gleichungssystems dient für diese Arbeit der wissenschaftliche CFD-Code *KIVA3v*. Dieser Abschnitt fasst das Grundgleichungssystem zur Lösung der Gasphasenströmung zusammen. Anschließend wird kurz die allgemeine numerische Struktur von *KIVA* vorgestellt. Ergänzende Informationen können in den Handbüchern [3, 4, 5] nachgelesen werden.

Zur Simulation turbulenter Strömungen wird in KIVA eine dichtegewichtete Ensemble-Mittelung der Strömungsgrößen vorgenommen (RANS-Modellierung). Die Schließung der turbulenten Transportterme erfolgt über ein modifiziertes $k-\epsilon$ Modell. Die Gasphasengleichungen lauten in differentieller und konservativer Form:

Kontinuität:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}}) = \tilde{\rho}^s \quad (2.52)$$

Impulserhaltung:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \tilde{\mathbf{u}}) = -\nabla \bar{p} - \frac{2}{3} \nabla (\bar{\rho} \tilde{k}) + \nabla \cdot \tilde{\sigma} + \tilde{\mathbf{F}}^s \quad (2.53)$$

mit dem mittleren Spannungstensor $\tilde{\sigma}$ in "Newtonscher Form":

$$\tilde{\sigma} = \mu \left[\nabla \tilde{\mathbf{u}} + (\nabla \tilde{\mathbf{u}})^t \right] - \frac{2}{3} \mu \nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}} \bar{\mathbf{E}} \quad (2.54)$$

Spezies:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{y}_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \tilde{y}_i) = \nabla \cdot \left[\frac{\mu}{Sc_t} \nabla \tilde{y}_i \right] + \tilde{\rho}_i^c + \tilde{\rho}_i^s \quad (2.55)$$

Thermische innere Energie:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{i}_{th}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \tilde{i}_{th}) = -\bar{p} \nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}} - \nabla \cdot \tilde{\mathbf{J}} + \bar{\rho} \tilde{\epsilon} + \tilde{Q}^c + \tilde{Q}^s + \tilde{Q}^w \quad (2.56)$$

mit der mittleren Wärmestromdichte $\tilde{\mathbf{J}}$, die sich aus Wärmeleitung und Enthalpiediffusion zusammensetzt:

$$\tilde{\mathbf{J}} = -\frac{\mu \bar{c}_p}{Pr_t} \nabla \tilde{T} - \frac{\mu}{Sc_t} \sum_i h_i \nabla \tilde{y}_i \quad (2.57)$$

Turbulente kinetische Energie:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{k}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \tilde{k}) = -\frac{2}{3} \bar{\rho} \tilde{k} \nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}} + \tilde{\sigma} : \nabla \tilde{\mathbf{u}} + \nabla \cdot \left[\frac{\mu}{Pr_k} \nabla \tilde{k} \right] - \bar{\rho} \tilde{\epsilon} + \tilde{W}^s \quad (2.58)$$

Turbulente Dissipationsrate der kinetischen Energie:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{\epsilon}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \tilde{\epsilon}) = -\left(\frac{2}{3} c_{\epsilon_1} - c_{\epsilon_3} \right) \bar{\rho} \tilde{\epsilon} \nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}} + \nabla \cdot \left[\frac{\mu}{Pr_\epsilon} \nabla \tilde{\epsilon} \right] + \frac{\tilde{\epsilon}}{\tilde{k}} \left[c_{\epsilon_1} \sigma : \nabla \tilde{\mathbf{u}} - c_{\epsilon_2} \bar{\rho} \tilde{\epsilon} + c_s \tilde{W}^s \right] \quad (2.59)$$

μ repräsentiert die resultierende dynamische Viskosität, als Summe aus dem laminaren μ_l und turbulenten Anteil μ_t :

$$\mu = \mu_l + \mu_t \quad (2.60)$$

Die laminare Viskosität wird über die Sutherland-Formel berechnet, während die turbulente Viskosität sich aus den Turbulenzgrößen ergibt:

$$\mu_l = \frac{A_1 T^{\frac{3}{2}}}{T + A_2} \quad \mu_t = c_\mu \frac{\tilde{k}^2}{\tilde{\epsilon}} \quad (2.61)$$

c_μ	c_{ϵ_1}	c_{ϵ_2}	c_{ϵ_3}	Pr_k	Pr_ϵ	c_s
0.09	1.52	1.92	-1.0	1.0	1.3	1.5

Tabelle 2.3: Konstanten des Turbulenzmodells.

In **Tabelle 2.3** ist der in dieser Arbeit verwendete Konstantensatz für die Turbulenzgleichungen aufgelistet. *Janicka* und *Peters* [43] folgend, unterscheidet er sich vom Standard-Konstantensatz (siehe Tabelle 2.1) in dem Wert für c_{ϵ_1} .

Für Strömungen mit hohen Reynolds-Zahlen ist der turbulente Transport in der Regel viel schneller als laminare Transportprozesse, so dass $\mu \sim \mu_t$ gesetzt werden kann [117]. Näherungsweise wird weiter angenommen, dass die Transportkoeffizienten für alle Spezies gleich sind. Für die turbulente Prandtl- und Schmidt-Zahl wird jeweils der Wert 0.9 vorgegeben.

Als weitere Schließungsgleichungen werden bei KIVA die thermische Zustandsgleichung (Annahme ähnlicher molarer Massen M_i)

$$\bar{p} = \bar{\rho} \frac{\Re}{M} \tilde{T} \quad (2.62)$$

und die kalorische Zustandsgleichung

$$\tilde{i}_{th} = \sum_i \tilde{y}_i \int_{\tilde{T}_0}^{\tilde{T}} \bar{c}_{v,i}(\tilde{T}) d\tilde{T} \quad (2.63)$$

für ein ideales Gas herangezogen. \bar{M} steht für die mittlere molare Masse des Gemisches und \Re für die universelle Gaskonstante.

$\tilde{\rho}^s$, \tilde{F}^s , $\tilde{\rho}_i^s$, \tilde{Q}^s und \tilde{W}^s repräsentieren Strahlquellterme. Sie werden in Kapitel 3 behandelt. Ansätze zur Schließung der chemischen Quellterme $\tilde{\rho}_i^c$ und \tilde{Q}^c werden in Kapitel 4 und 6 vorgestellt und diskutiert. Auf die Modellierung des Wandwärmübergangs \tilde{Q}^w wird kurz in Kapitel 7 eingegangen.

2.4.2 Numerik des Strömungslösers

Wie bereits erwähnt, dient für diese Arbeit der wissenschaftliche KIVA-Code als numerischer Strömungslöser. KIVA wurde speziell zur Simulation innermotorischer Prozesse entwickelt, kann aber auch aufgrund des physikalisch fundierten Grundstocks zur Simulation anderer strömungsmechanischer Fragestellungen verwendet werden. Prinzipiell ist die Simulation instationärer, kompressibler, turbulenter und reaktiver zwei- und dreidimensionaler Zweiphasenströmungen möglich [4]. Im Gegensatz zu den meisten kommerziellen CFD-Programmen ist bei KIVA der gesamte Quellcode frei verfügbar. Dies war eine wichtige Voraussetzung für die Realisierung dieser Arbeit. Die Gasphasen-Simulation basiert auf einem finiten Volumenverfahren, d.h. die Erhaltungsgleichungen werden für jedes diskrete Volumen gelöst. Der große Vorteil dieses Verfahrens liegt in der Gewährleistung der Erhaltung der Strömungsgrößen [23]. Zur räumlichen Diskretisierung können nahezu beliebige blockstrukturierte Netze auf Basis von Hexaedern generiert werden. Die Zellecken sind frei beweglich, so dass auch bewegte Geometrien (z.B. Kolbenbewegung) abgebildet werden können. Die Berechnung der Gasphasengleichungen gliedert sich in drei Phasen, wobei in jeder Phase ein physikalischer Effekt (Quellen, Diffusion,

Konvektion) getrennt behandelt wird. Basierend auf der ALE^{21} -Methode wird zwischen einer Lagrange'schen und Eulerschen Betrachtungsweise unterschieden. Die Lagrange'sche Phase A behandelt Quellterme (z.B. Strahl- und Chemiequellterme) entkoppelt von den Transportprozessen. Basierend auf dieser Lösung erfolgt in der Lagrange'schen Phase B die implizite Diffusionsberechnung. Dazu werden die gekoppelten, impliziten Gleichungen nach einem SIMPLE²² ähnlichen Druckkorrekturverfahren mit der "Conjugate-Residual" Methode gelöst [76]. Falls möglich, findet in der Phase B eine Entkopplung der Erhaltungsgleichungen statt. So wird mit dem Druckkorrekturverfahren iterativ nur das Geschwindigkeits-, Temperatur- und Druckfeld bestimmt. Da die Spezies- und Turbulenz-Erhaltungsgleichungen in der Phase B nur schwach mit dem Strömungsfeld gekoppelt sind, werden diese vor bzw. nach dem Druckkorrekturverfahren gelöst. Dies führt zu erheblichen Rechenzeiteinsparungen, vor allem wenn man mehrere aktive und passive Spezies transportieren möchte. In der Eulerschen Phase C wird schließlich der Konvektion Rechnung getragen. Dazu wird das Strömungsfeld eingefroren, und die Gitterpunkte bewegen sich zu ihren definierten Positionen. Dies ist mit einem Massenaustausch verbunden. In dieser Arbeit wird ausschließlich ein $QSOU^{23}$ -Verfahren verwendet, da es den besten Kompromiss zwischen Genauigkeit und Rechenzeit darstellt.

Aufgrund der expliziten Konvektionsbehandlung wird basierend auf dem Courant-Stabilitätskriterium ein "Subcycling" des globalen Zeitschritts vorgenommen, um den Rechenzeitvorteil der impliziten Diffusionsbehandlung nicht zu verlieren. Die skalaren Größen werden für die Zellmittelpunkte diskretisiert. Die Geschwindigkeitskomponenten dagegen werden an den Zelleckpunkten gelöst, um dadurch unphysikalische Moden und rechenzeitaufwändige Interpolationen in der Lagrange'schen Phase zu vermeiden.

²¹engl.: Arbitrary-Lagrangian-Eulerian

²²engl.: Semi-Implicit-Method for Pressure-Linked Equations

²³engl.: Quasi-Second-Order-Upwind

Kapitel 3

Modellierung der Strahlausbreitung und Gemischbildung

Zur Simulation von innermotorischen Verbrennungsprozessen, bei denen flüssiger Kraftstoff direkt in den Brennraum eingespritzt wird, müssen zur Schließung des Gasphasen-Gleichungssystems aus Kapitel 2 die sogenannten Strahlquellterme modelliert werden. In dieser Arbeit wird dazu ein neues, von Krüger [53] vorgestelltes Konzept zur Simulation der dieselmotorischen Einspritzung verwendet, um dadurch die bekannten numerischen Defizite des konventionellen, stochastischen Strahlmodells zu vermeiden.

Nach der allgemeinen Problemstellung und Einführung in die Strahlmodellierung werden die wesentlichen numerischen Defizite des stochastischen Strahlmodells aufgezeigt. Anschließend folgt eine kurze Vorstellung des ICAS-Modells, das in dieser Arbeit Anwendung findet. Aufgrund der Themenkomplexität kann hier nur ein grober Überblick gegeben werden. Für ein vertieftes Studium der Strahlmodellierung wird auf beispielsweise [3, 53] verwiesen.

3.1 Problemstellung

Beim DE-Dieselmotor wird flüssiger Kraftstoff unter hohem Druck in den Brennraum eingespritzt. Die eingespritzte Kraftstoffmenge reguliert dabei die Last (Qualitätsregelung). Der Massen- und Impulsstrom des Strahls am Düsenaustritt wird im Wesentlichen von der Turbulenz und der Kavitation in der Düse bestimmt. Nach dem Primärzerfall in unmittelbarer Düsennähe zerfallen aufgrund von Gasphasen-Interaktionen die Flüssigkeits-Ligamente weiter stromabwärts in kleinere Tropfen. Dieser als Sekundärzerfall bezeichnete Prozess ist im Gegensatz zum Primärzerfall nahezu unabhängig von der Düsengeometrie und damit der Düsinnenströmung [111]. Neben dem Strahlzerfall können im Bereich hoher Flüssigkeitsdichten, d.h. vor allem im Düsennahbereich, Kollisions- und Koaleszenzeffekte auftreten. Je nach Einspritzparameter und Brennraumgeometrie sind Tropfen-Wandinteraktionen möglich. Parallel zu den beschriebenen Prozessen verdampft der Kraftstoff, um anschließend mit der Gasphase zu mischen. Generell findet ein Massen-, Impuls- und Energieaustausch zwischen den Phasen statt.

Die realistische Wiedergabe der Strahlausbreitung und der Gemischbildung sind Grundvoraussetzungen für die Berechnung der Zündung, Verbrennung und Schadstoffbildung. Stellt man sich einen Strahl aus vielen Millionen Tropfen vor, und berücksichtigt man die zahlreichen

meist parallel ablaufenden physikalischen Prozesse und Interaktionen (gekoppeltes, hochdimensionales Gleichungssystem!), wird deutlich, dass die Strahlmodellierung hohe Anforderungen an die physikalische Modellbildung und vor allem auch an die numerische Umsetzung darstellt.

3.2 Allgemeine Strahlmodellierung

Eine **direkte numerische Simulation** von Tropfen-Ensembles scheidet für motorische Einspritzvorgänge aus, da dazu das Strömungsfeld um jeden einzelnen Tropfen aufgelöst werden muss, was zu untragbaren Rechenzeiten führt (vgl. mit 2.3.2). Zudem verlangt aus Konsistenzgründen die statistische Beschreibung der Gasphase auch nach einer **statistischen Beschreibung** der Flüssigphase. In der Praxis wird dazu meistens die Statistik der Flüssigphase durch eine Tropfen-Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (*Tropfen-PDF*) im mindestens 8-dimensionalen Phasenraum abgebildet. Der Phasenraum wird dabei von den drei Ortskoordinaten, den drei Komponenten des Tropfen-Geschwindigkeitsvektors, dem Tropfendurchmesser und der Tropfentemperatur aufgespannt. Einen mathematischen Ansatz zur Beschreibung der Dynamik der Tropfen-PDFs hat Williams [119] mit der sogenannten "*Spray Equation*" eingeführt. Zur numerischen Lösung der "*Spray Equation*" sind zwei unterschiedliche Ansätze möglich [53]. Beim ersten Ansatz wird die Entwicklung der Tropfen-PDFs direkt im 8-dimensionalen, ortsfesten Phasenraum gelöst. Diese hochdimensionale Euler-Beschreibung, auch "**Full Spray Equation**"-**Methode** genannt, ist aus Rechenzeitgründen nicht sinnvoll zur Simulation realer Fragestellungen geeignet. Der zweite numerische Ansatz stellt derzeit den Standard zur Berechnung von motorischen Einspritzvorgängen dar. Bei diesem Ansatz wird die "*Spray Equation*" durch Einführung stochastischer Partikel, auch *Parcels* genannt, über ein Monte-Carlo-Verfahren numerisch gelöst [53, 20]. Somit werden alle Prozesse, deren deterministischer Charakter auf Partikelebene nicht aufgelöst werden können, wie z.B. die Turbulenzinteraktion oder Tropfenkollisionen, stochastisch über ein Monte-Carlo-Verfahren simuliert. Bei diesem sogenannten **stochastischen Strahlmodell** repräsentieren folglich die Partikel die Tropfen-Eigenschaften. Daher auch der Name **Discrete-Droplet-Model (DDM)**. Die Anzahl der numerischen Partikel korreliert allerdings in der Regel nicht mit der tatsächlich vorhandenen Tropfenanzahl. Ihr Anzahl bestimmt sich rein aus Überlegungen zur statistischen Konvergenz.

3.3 Probleme des stochastischen Strahlmodells

Inzwischen ist allgemein bekannt, dass bei dem momentan in kommerziellen und wissenschaftlichen CFD-Programmen integriertem stochastischem Strahlmodell *schwerwiegende numerische und physikalische Schwächen* bestehen, so dass eine Vorausberechnung der Strahlausbreitung und Gemischbildung unmöglich ist. Das stochastische Strahlmodell zeigt insbesondere unphysikalische Abhängigkeiten der Strahlstruktur von:

- Rechennetz
- Orientierung des Strahls zum Rechennetz
- Tropfengröße
- Umgebungsturbulenz

Ursache für die Netzabhängigkeit ist unter anderem die fehlende räumliche Auflösung von relevanten Längenskalen. Dies ist aus Rechenzeitgründen für motorische Applikationen nicht möglich, da eine große Bandbreite an Längenskalen (Düsenloch in μm - Hubvolumen in dm^3) vorliegt. Als Folge davon wird die Relativgeschwindigkeit zwischen Tropfen und Gasphase überschätzt. **Abbildung 3.1** zeigt dazu schematisch den Vergleich zwischen physikalisch exakter und numerisch berechneter Relativgeschwindigkeit zwischen der Gas- und Flüssigphase. Der Fehler führt zwangsläufig zur falschen Berechnung der Austauschprozesse zwischen den Phasen, so dass die Strahlstruktur stark von der Netzauflösung abhängig wird. Allerdings ist es nicht nur aus Rechenzeitgründen problematisch, eine Netzverfeinerung vorzunehmen, sondern auch aufgrund der abnehmenden statistischen Konvergenz der Tropfen-PDFs. 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 konnte Krüger [53] zeigen, dass bei applikationstypischer Anzahl an Partikeln das allgemeine Konvergenzverhalten des stochastischen Strahlmodells als schlecht zu bewerten ist.

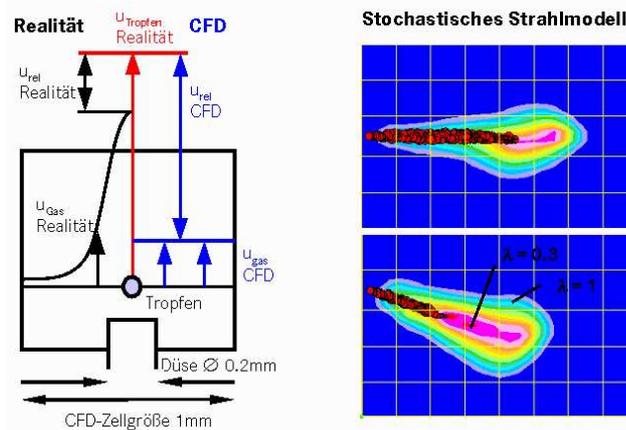
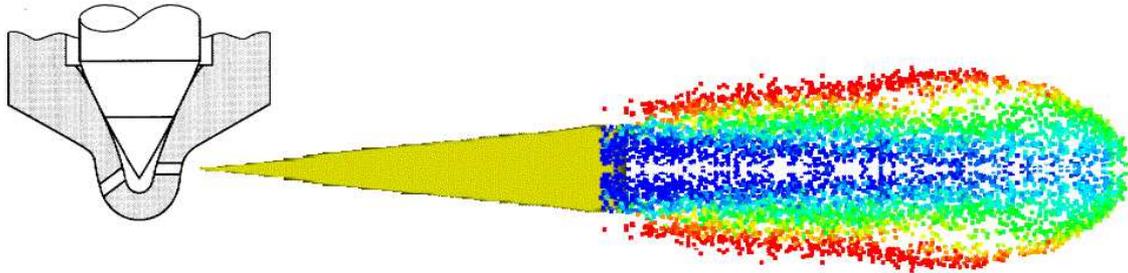


Abbildung 3.1: Vergleich zwischen physikalischer und numerischer Relativgeschwindigkeit der Gas- und Flüssigphase. Aufgrund der schlechten Auflösung des Düsenlochs wird die Relativgeschwindigkeit zwischen den Phasen überschätzt. Die Netzauflösung bestimmt die Strahlausbreitung.

3.4 Das Interactive-Cross-Section-Averaged-Spray (ICAS)-Modell

Auf Basis des ICAS-Konzepts, das von Wan und Peters [115, 116] entwickelt wurde, hat Krüger ein durchgängiges Konzept zur Simulation der dieselmotorischen Hochdruckeinspritzung vorgestellt [53] und für nicht-reaktive, motorische Strömungen validiert [53, 52, 78], das inzwischen als Standardtool bei der DC AG eingesetzt wird. **Abbildung 3.2** zeigt eine Prinzipskizze des Konzepts. Das sogenannte ICAS-Gebiet wird mit einem "Stand-Alone Code" berechnet. Die Interaktion zwischen dem 1D-Strahlmodell und dem 3D-CFD-Code erfolgt durch konservativen

Quelltermaustausch für Masse, Impuls und Energie. Wie in **Abbildung 3.2** gezeigt, wird nach einer definierten Länge stromabwärts auf das konventionelle stochastische 3D-Strahlmodell umgeschaltet, um mehrdimensionale Effekte berücksichtigen zu können.



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 3.2: Berechnungskonzept für die dieselmotorische Einspritzung nach Krüger [53].

Der wesentliche Unterschied des ICAS-Modells zum stochastischen Strahlmodell liegt in der numerischen Behandlung des Strahls im Düsenbereich. Beim ICAS-Modell werden die numerischen Probleme des stochastischen Ansatzes umgegangen, indem eine statistische Beschreibung der Momente der "Spray Equation" in Eulerscher Formulierung vorgenommen wird. Dadurch lässt sich das Konvergenzverhalten erheblich verbessern [53, 32]. Basierend auf der hochdimensionalen "Spray Equation" werden Bilanzgleichungen für gemittelte Strahleigenschaften (Momentengleichungen), wie z.B. Tropfendurchmesser und Tropfentemperatur abgeleitet. Diese in Eulerscher Beschreibung abgeleiteten Bilanzgleichungen werden über den Strahlquerschnitt integriert, so dass nur noch die Strahlachse als alleinige Raumkoordinate übrig bleibt [115]. Diese Betrachtungsweise ist im Düsenbereich erlaubt, da dort der Strahlimpuls sehr hoch ist. Die Verteilung der Strahleigenschaften über den Strahlquerschnitt kann durch Profilvorgaben berücksichtigt werden. Folglich besteht kein Auflösungsproblem des Düsenlochs. Da nur erste Momente transportiert werden, werden zur Abbildung der Korrelationen zwischen den Phasenraumdimensionen (z.B. Tropfentemperatur und -durchmesser) Tropfenklassen eingeführt, die sich in Zeit und Raum ändern können. Durch diese Art der Beschreibung wird im Ortsraum eine Euler-Formulierung verwendet, d.h. die Tropfen-PDFs sind in jeder CFD-Zelle durch eine definierte Anzahl an Tropfenklassen aufgelöst, was zu einem besseren Konvergenzverhalten führt. Der Phasenraum der Tropfeneigenschaften (Geschwindigkeit, Temperatur, Durchmesser) wird weiterhin ähnlich einem Lagrange'schen Verfahren behandelt, so dass der Rechenaufwand akzeptabel bleibt. Im ICAS-Gebiet werden Transportgleichungen für die Gas- und Flüssigphase jeweils in Euler-Formulierung gelöst. Dadurch liegt eine strenge Kopplung der Phasen vor. Dies ist ein weiterer Vorteil gegenüber dem stochastischem Ansatz, bei dem die Flüssigphase in Lagrange'scher und die Gasphase in Eulerscher Betrachtungsweise

gelöst werden.

Aufgrund numerischer Differenzen der Gleichungslöser für das 1D-Strahlmodell und dem 3D-CFD Löser muss die Gasphase für das ICAS-Gebiet auch im 3D-Code berechnet werden (Freistrah). Zur Reduktion des Auflösungsproblems der 3D-Gasphase haben Johnson et.al. [44] den Einsatz eines 'Length Scale Limiters' vorgeschlagen. Der 'Length Scale Limiter' stellt eine numerische Limitierung der turbulenten Längenskala auf den maximal möglichen physikalischen Wert dar (siehe Freistrahtheorie), nämlich dem Strahldurchmesser. In dieser Arbeit wird zudem eine strahladaptierte Vernetzung vorgenommen, um die numerische Diffusion einzuschränken (siehe auch Kapitel 7.1).

Kapitel 4

Modellierung der Zündung und Verbrennung

Mit Beginn der Kraftstoffverdampfung setzen bei angemessenen Mischungsverhältnissen und thermodynamischen Randbedingungen chemische Reaktionen ein. Die zuvor *nicht-reagierende Strömung*¹ schlägt um zur (chemisch) *reagierenden Strömung*. Verfahrensziel ist es, die chemisch gebundene Energie des Kraftstoffs über den Zwischenschritt der Verbrennung möglichst effizient, bei minimalem Schadstoffausstoß, in mechanische Energie umzuwandeln. Aufgrund der Reaktivität der Strömung müssen zusätzlich zur Strahlverdampfung auch die chemischen Prozesse zur Schließung des Grundgleichungssystems aus Kapitel 2 modelliert werden.

Turbulente reaktive Strömungen resultieren typischerweise aus der Wechselwirkung zwischen strömungsmechanischen und chemischen Vorgängen. Geschwindigkeitsbestimmend für den Reaktionsablauf ist dabei immer der langsamere von beiden Prozessen. Als Maß dafür charakterisiert die *Damköhler-Zahl* Da die Zeitskalen turbulenter reaktiver Strömungen durch das Verhältnis der turbulenten τ_{turb} zur chemischen Zeitskala τ_{chem} :

$$Da = \frac{\tau_{turb}}{\tau_{chem}} \quad (4.1)$$

Für kleine Damköhler-Zahlen ($Da \ll 1$, d.h. $\tau_{turb} \ll \tau_{chem}$), d.h. wenn die Mischung schneller erfolgt als die chemischen Reaktionen, ist die Zeitskala des gesamten Vorgangs von der Chemie bestimmt (**chemisch kontrolliert**). Umgekehrte Verhältnisse liegen für sehr hohe Damköhler-Zahlen ($Da \gg 1$, d.h. $\tau_{turb} \gg \tau_{chem}$) vor bei denen die chemischen Reaktionen um Größenordnungen schneller als die turbulenten Mischungsprozesse verlaufen (**mischungskontrolliert**).

Die Damköhler-Zahl erlaubt die grobe Charakterisierung des Verbrennungsablaufs eines Dieselmotors. Wichtige Einflussgrößen sind dabei der Turbulenzgrad und die Temperatur. Für den reaktiven Prozessablauf lassen sich folgende Zeitphasen definieren:

- Zündphase ($Da \ll 1$)
- Phase der Vormischverbrennung ($Da > 1$)
- Phase der Diffusionsverbrennung ($Da \gg 1$)

¹auch als *kalte Strömung* bezeichnet.

- Ausbrandphase ($Da > 1$)

In **Abbildung 4.1** sind für einen exemplarischen Brennverlauf eines DI-Dieselmotors schematisch die Zeitfenster der unterschiedlichen reaktiven Phasen, zusammen mit dem entsprechenden Damköhler-Zahlbereich dargestellt.

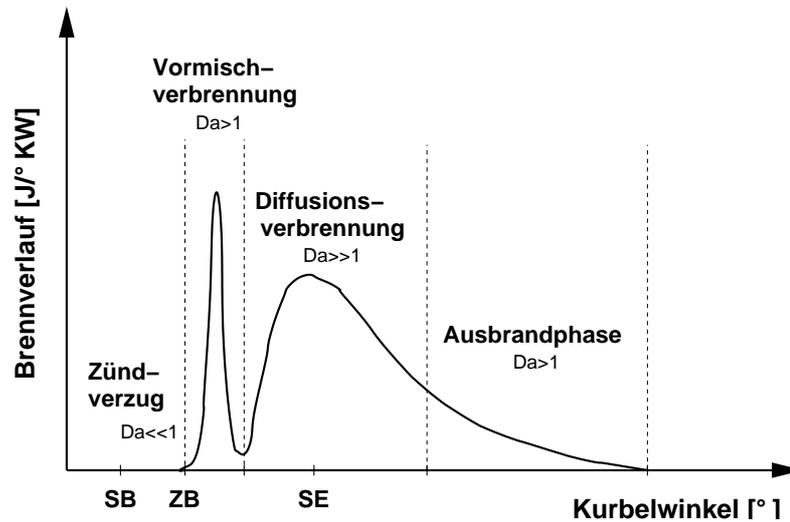


Abbildung 4.1: Exemplarischer Brennverlauf eines konventionellen Dieselmotors im Teillastbetrieb. Im Vergleich zur Diffusionsverbrennung verläuft die Vormischverbrennung in einem erheblich kleinerem Zeitfenster.

Die Zeit zwischen Einspritzbeginn und Zündung wird als Zündverzögerung bezeichnet. Dieser lässt sich in einen physikalischen und chemischen Anteil separieren [86]. Der physikalische Anteil hängt von der Gemischbildungsphase ab, d.h. von der Zerstäubung, Verdampfung und Bildung eines chemisch zündfähigen Gemisches. Der chemische Zündverzögerung ist bedingt durch die Vorreaktionen im Gemisch bis zur Selbstzündung. Mit Beginn der Selbstzündung setzt die **Vormischverbrennung**² in während des Zündverzugs gebildeten reaktionsfreudigen Gemischzonen ein. Diese in der Regel zeitlich kurze Phase zeichnet sich durch hohe Wärmefreisetzungsraten und steile Druckgradienten (Dieselschlag) aus. Die Vormischverbrennung ist aufgrund der bereits vorliegenden molekularen Kraftstoff-Luft Gemischzonen, der anfänglichen niedrigen Temperaturen und den hohen Turbulenzraten kinetisch kontrolliert. Nachdem die Verbrennung der teilweise vorgemischten Zonen abgeschlossen ist, erfolgt der Übergang zur **Diffusionsverbrennung**. Diese Phase wird bestimmt durch den Verdampfungsprozess und den Transport von Kraftstoff und Oxidator zur Reaktionszone. Der Mischungsprozess wird durch die Ladungsbewegung und die Turbulenz beherrscht. Aufgrund der hohen Temperaturen und der damit verbundenen schnellen Reaktionszeiten verläuft die Diffusionsverbrennung mischungskontrolliert. Gegen Ende der Verbrennung sind Druck und Temperatur

²Der Begriff der Vormischverbrennung beim Dieselmotor darf nicht verwechselt werden mit der Vormischverbrennung beim homogen betriebenen Ottomotor, da keine Flammenfrontausbreitung (Deflagration) ausgehend vom Zündherd vorliegt.

in der Flammenfront soweit abgesunken, dass die Chemie im Vergleich zu den simultan ablaufenden Mischungsvorgängen langsam wird. Die Diffusionsverbrennung wird daher zunehmend reaktionskinetisch kontrolliert [67].

Der zeitliche und lokale Ablauf der einzelnen Reaktionsphasen beeinflusst maßgeblich den Wirkungsgrad und die Emissionen in Form von Geräusch und Schadstoffen. Eine ausführliche Beschreibung der physikalischen und chemischen Vorgänge, sowie der Chemie-Turbulenz-Interaktion, wird in den folgenden Abschnitten gegeben.

4.1 Reaktionskinetik und thermochemisches Gleichgewicht

Chemische Reaktionen beschreiben Stoffumwandlungen, die sowohl *endotherm* (Energie wird der Umgebung entzogen) als auch *exotherm* (Wärme wird freigesetzt) ablaufen können. Thermochemische Systeme streben bei konstanten Randbedingungen zeitlich einem Gleichgewichtszustand zu, der eindeutig durch den Druck, die Temperatur und die Gemischzusammensetzung bestimmt ist. Die Zustandsänderung zwischen zwei Gleichgewichtszuständen ist zusätzlich eine Funktion der Zeit und kann nicht mit Hilfe der klassischen Thermodynamik beschrieben werden. Je nach Zeitfenster eines reaktiven Gemisches können global zwei Beschreibungsansätze differenziert werden (dt_{eq} = Reaktionszeit die erforderlich ist, um den thermochemischen Gleichgewichtszustand mit ausreichender Genauigkeit abzubilden.):

- Für $t < dt_{eq}$: Reaktionskinetik mit Zeitabhängigkeit
- Für $t \geq dt_{eq}$: Thermochemischer Gleichgewichtszustand ohne Zeitabhängigkeit

Im Folgenden werden beide Ansätze kurz vorgestellt. Ausführliche Abhandlungen zu dieser Thematik sind beispielsweise in [117, 28] gegeben.

4.1.1 Reaktionskinetik

Chemische Prozesse lassen sich separiert von Strömungseinflüssen mit Hilfe von homogenen adiabaten Reaktoren untersuchen. Für einen homogenen Reaktor reduziert sich die allgemeine Transportgleichung 2.17 zu einer reinen Quellgleichung:

$$\rho \frac{d\psi}{dt} = \dot{Q}^c \quad (\rho = \text{const.}) \quad (4.2)$$

Die zeitliche Änderung des Skalars ψ ist folglich "nur noch" eine Funktion des chemischen Quellterms \dot{Q}^c . Für die Massen-Erhaltungsgleichung einer beliebigen Spezies i ($\psi = \text{Massenbruch } y_i$) entspricht der chemische Quellterm dem Massenumsatz der Teilchensorte i pro Volumen- und Zeiteinheit $\dot{Q}^c = \rho \dot{y}_i = \dot{\rho}_i$. Die Reaktionsraten \dot{y}_i lassen sich mit Hilfe von Reaktionsmechanismen berechnen, die auf mehreren Elementarreaktionen beruhen. Eine Elementarreaktion beschreibt dabei die tatsächliche Stoffumsetzung auf molekularer Ebene von Reaktionspartnern. Die globale Reaktionsrate der Spezies i wird aus der Stöchiometrie der chemischen Elementarreaktionen berechnet. Die Geschwindigkeitskoeffizienten der einzelnen Elementarreaktionen sind allgemein druck- und temperaturabhängig, wobei die Druckabhängigkeit meist vernachlässigbar ist [61]. Die Temperaturabhängigkeit wird über eine Arrhenius-Gleichung ausgedrückt:

$$k(T) = AT^b e^{-\frac{E_a}{RT}} \quad (4.3)$$

Das Produkt $A \cdot T^b$ repräsentiert den präexponentiellen Vorfaktor mit dem Stoßfaktor A und dem Temperaturexponenten b . E_a steht für die Aktivierungsenergie einer Reaktion. Diese reaktionskinetischen Konstanten müssen für alle Geschwindigkeitskoeffizienten eines chemischen Mechanismus definiert werden.

Aus diesen reaktionskinetischen Gesetzmäßigkeiten ist ersichtlich, dass chemische Quellterme Funktionen von thermochemischen Zuständen sind:

$$\dot{Q}^c = \dot{Q}^c(p, T, y_1, y_2, \dots, y_{nsp}) \quad (4.4)$$

Beim homogenen Reaktor müssen folglich zur Berechnung der Zustandsgrößen für alle am Reaktionsmechanismus beteiligten Spezies Massen-Erhaltungsgleichungen gelöst werden. Zur Bestimmung der Temperatur ist zusätzlich die Lösung der Energie-Erhaltungsgleichung notwendig.

Grundvoraussetzung für eine reaktionskinetische Beschreibung ist die Verfügbarkeit von chemischen Reaktionsmechanismen. Dieseldraftstoffe sind Brennstoffe auf Mineralölbasis, die sich aus über 200 Komponenten zusammensetzen [67]. Aufgrund ihrer physikalischen (Viskosität, Dichte,...) und chemischen (Cetan-Zahl, Aromatenanteil,...) Komplexität ist eine reaktionskinetische Modellierung sehr schwierig. Aus diesem Grund wird auf Ersatzkraftstoffe zurückgegriffen, für die Reaktionsschemata vorliegen. Zur Simulation der chemischen Prozesse beim Dieselmotor wurde in der Vergangenheit oftmals n-Heptan, aufgrund seiner ähnlichen Eigenschaften zu realen Dieseldraftstoffen (insbesondere bzgl. der Cetan-Zahl), als Modellkraftstoff herangezogen. Reale Dieseldraftstoffe enthalten allerdings neben den aliphatischen auch aromatische Komponenten, die als Rußvorläufer gelten. Um dies zu berücksichtigen, wurde im Rahmen eines EU-Projektes der sogenannte **IDEA³-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 Standardbedingungen liegt für den IDEA-Brennstoff bei 817 kg/m³ und für Diesel bei 840 kg/m³. Die Cetan-Zahl des IDEA-Brennstoffs gleicht mit 56 beinahe dem Wert für Diesel mit ungefähr 53. Diese Ähnlichkeiten zwischen dem IDEA- und Dieseldraftstoff haben ein nahezu identisches Verhalten beider Brennstoffe hinsichtlich der Verdampfung, Zündung und Wärmefreisetzung zur Folge. Bezüglich der Schadstoffbildung ist das Verhalten ebenfalls sehr ähnlich, wobei die Dieseldraftstoffverbrennung sowohl bei den Stickoxiden als auch beim Ruß leicht höhere Werte aufweist [8, 7]. Eine detaillierte Beschreibung des chemischen Mechanismus, der neben der Nieder- und Hochtemperaturkinetik auch Schadstoffbildungsmechanismen enthält, ist beispielsweise in [8, 7] gegeben.

Die Verbrennung von Kohlenwasserstoffen kann in Abhängigkeit der Temperatur und der unterschiedlichen Reaktionsabläufe in einen Nieder-, Mittel- und Hochtemperatur-Bereich gegliedert werden. Bei Umgebungsdruck laufen die Niedertemperatur-Reaktionen unterhalb von 900 K ab. Der Übergangsbereich zur Hochtemperatur-Kinetik von 900 bis 1100 K spannt den Mitteltemperaturbereich ein. Oberhalb von 1100 K spricht man vom Hochtemperaturbereich [110].

³engl.: Integrated Diesel European Action

Selbst für einfache Modellkraftstoffe umfassen **detaillierte Reaktionsmechanismen** bereits mehrere hunderte Spezies und tausende von Elementarreaktionen [117]. Daher können diese Mechanismen zwar für homogene Reaktorrechnungen effizient appliziert werden, allerdings nicht für praxisrelevante 3D-Applikationen, bei denen zusätzliche turbulente Strömungs- und Transportvorgänge berücksichtigt werden müssen. Eine direkte Auflösung des gesamten Zeit- und Längenskalenspektrums ist aufgrund des enormen Rechenaufwands nicht möglich. Daher wird versucht, die detaillierten Mechanismen systematisch auf die reaktionsbestimmenden Gleichungen und Spezies zu reduzieren. Das Resultat sind **reduzierte Reaktionsmechanismen**, die primär auf Quasistationaritätsannahmen und Annahmen für partielle Gleichgewichte beruhen. Hilfsansätze zur Reduzierung bieten Sensitivitäts-, Reaktionsfluss- und Eigenwertanalysen (siehe [117]). Allerdings ist eine Mechanismus-Reduktion auch begrenzt. Aufgrund des großen thermodynamischen Spektrums motorischer Applikationen (z.B. unterschiedlichste Temperatur- und Druckbereiche während Zündung, Vormisch- und Diffusionsverbrennung) sind selbst reduzierte Mechanismen meist noch zu rechenintensiv.

Ein sehr schnelles Lösungsverfahren zur zeitlichen Beschreibung von chemischen Prozessen ermöglichen **phänomenologische Modelle**. Dabei wird versucht, über wenige Reaktionen (häufig nur Pseudoreaktionen) chemische Vorgänge abzubilden. Allerdings ist der Gültigkeitsbereich dieser Modelle eingeschränkt. Zudem ist stets eine problemspezifische Anpassung von Modellkonstanten erforderlich.

4.1.2 Thermochemisches Gleichgewicht

Abgeschlossene, thermodynamische Systeme streben einem Gleichgewichtszustand an, der dadurch gekennzeichnet ist, dass sich die thermodynamischen Zustandsgrößen von allein nicht mehr ändern [28]. Die Reaktionskinetik beschreibt genau dann ein thermochemisches Gleichgewicht, sobald für sämtliche Elementarreaktionen die jeweiligen Vorwärts- und Rückwärtsreaktionen gleich schnell ablaufen. Das Verhältnis der Geschwindigkeitskoeffizienten einer Elementarreaktion für die Hinreaktion k^+ und die Rückreaktion k^- entspricht dabei der jeweiligen *chemischen Gleichgewichtskonstanten* K_c , die die Gleichgewichtskonzentrationen c_i zueinander korreliert:

$$K_c(k^-, k^+) = \frac{k^+}{k^-} = \prod_i c_i^{\nu_i} \quad (\nu_i = \text{Stöchiometrikoeffizienten}) \quad (4.5)$$

Die Gleichgewichtskonstante K_c bestimmt sich auch aus einer rein energetischen Betrachtung. Basierend auf dem 1. und 2. Hauptsatz der Thermodynamik und der Gasgleichung lässt sich ein Ausdruck für die Gleichgewichtskonstante einer Reaktion als Funktion des Drucks und der Temperatur herleiten $K_c = K_c(p, T)$, indem vom minimalen Energiezustand im Gleichgewicht ausgegangen wird [28, 117]. Zusammen mit den Element-Massenbilanzen und dem *Gesetz von Dalton* für ideale Gasmischungen⁴, lässt sich ein nichtlineares Gleichungssystem zur Lösung des chemischen, mechanischen und thermischen Gleichgewichtszustandes herleiten. Folglich kann dadurch der thermochemische Gleichgewichtszustand direkt mit Hilfe der klassischen Thermodynamik über den Druck, die Temperatur und die Elementzusammensetzung bestimmt werden. Diese Methode ist sehr schnell und daher ideal geeignet für numerische

⁴Gesamtdruck = Summe aller Partialdrücke

Simulationen. Allerdings muss gewährleistet sein, dass eine thermochemische Gleichgewichtsbetrachtung erlaubt ist. Nach der Arrhenius-Gleichung 4.3 hängt der Gleichgewichtszustand stark von der Temperatur und der Aktivierungsenergie ab. Niedrige Aktivierungsenergien und hohe Temperaturen prädestinieren eine Gleichgewichtsbetrachtung.

4.2 Chemie-Turbulenz-Interaktion

4.2.1 Problemstellung

Die mathematische und numerische Beschreibung der physikalischen und chemischen Vorgänge bei der dieselmotorischen Verbrennung ist anspruchsvoll. Insbesondere die Abbildung der turbulenten Strömungsverhältnisse und der zum Teil komplexen chemischen Reaktionsabläufe erschweren eine vorhersagefähige Simulation.

Da eine deterministische Simulation der Dieselerbrennung nicht möglich ist (siehe Kapitel 2), ist ein statistischer Beschreibungsansatz zu wählen. Die allgemeine statistische Betrachtungsweise der Gasphase verlangt natürlich auch nach einer statistischen Quantifizierung der Quellterme. 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 4.3). Ersetzt man die Momentanwerte der Zustandsgrößen in der deterministischen Gleichung 4.4 durch Mittelwerte, führt dies zu großen Fehlern, da

$$\tilde{Q}^c \neq \tilde{Q}^c(\tilde{p}, \tilde{T}, \tilde{y}_i). \quad (4.6)$$

Nach dem physikalischen Zündverzug findet in der Realität im Zylinder ein hochdynamisches Wechselspiel zwischen chemischen und physikalischen Prozessen statt. Die direkte Einspritzung des Kraftstoffs in die drallbewegte, hochverdichtete Luft und die lokal inhomogene Thermodynamik führen zu einer heterogenen Gemischverteilung. Für die chemischen Reaktionen ist immer die molekulare Ebene entscheidend. Die Turbulenz intensiviert dabei durch Austauschprozesse in den Scherschichten des Wirbelspektrums die Mischung. Zusammen mit der Thermodynamik liefert die molekulare Gemischverteilung die Randbedingungen für die lokalen chemischen Reaktionen (siehe Gleichung 4.4). Durch die chemischen Reaktionen werden die Elemente umverteilt, was i.d.R. mit einer Wärmefreisetzung (exotherm) verbunden ist. Dadurch steigt die Temperatur und die Dichte nimmt ab (kompressible Strömung!). Die Wärmefreisetzung führt zudem zu großen Skalargradienten, was den molekularen Transport zusätzlich beschleunigt (vgl. Gradientenansatz). Mit abnehmender Dichte nimmt die kinematische Viskosität $\nu = \frac{\mu}{\rho} \sim T^{3/2}$ zu, und dadurch die turbulente Reynolds-Zahl nach Gleichung 2.22 ab. Dies hat wiederum zur Folge, dass bei exothermen Reaktionen sich das Kolmogorov-Längenmaß l_k vergrößert (siehe Gleichung 2.25), d.h. die untere Grenze der Energiekaskade verschiebt sich nach oben. Strömungsinduzierte Vorgänge sind diesem Phänomen überlagert, wobei eine beidseitige Verschiebung der Energiekaskade in Abhängigkeit der Strömungsverhältnisse möglich ist.

Da zur Schließung des Grundgleichungssystems Ensemble-gemittelte chemische Quellterme quantifiziert werden müssen, sind aufgrund der statistischen Betrachtungsweise folgende Aspekte bei der Modellierung je nach Relevanz zu berücksichtigen:

Heterogene Gemischverteilung

Zur numerischen Lösung der 3D-Gasphase wird das Rechengebiet räumlich diskretisiert. Da bei der RANS-Methode für gewöhnlich nur die statistischen Mittelwerte der Zustandsgrößen transportiert werden, gehen die Information über die aufgrund der Ensemble-Mittelung tatsächlich vorliegenden statistisch inhomogenen Gemischverteilung verloren. **Abbildung 4.2** versucht dies bildlich zu illustrieren. Links ist eine Momentaufnahme der Gemischverteilung dargestellt, rechts das entsprechende Ergebnis aus einer RANS-Modellierung. Es ist leicht einzusehen, dass die Berechnung der chemischen Quellterme auf Basis der reinen Mittelwertbetrachtung zu großen Fehler führen kann, da entsprechend der Beziehung 4.4, die chemischen Quellterme auch von der Gemischverteilung abhängen.

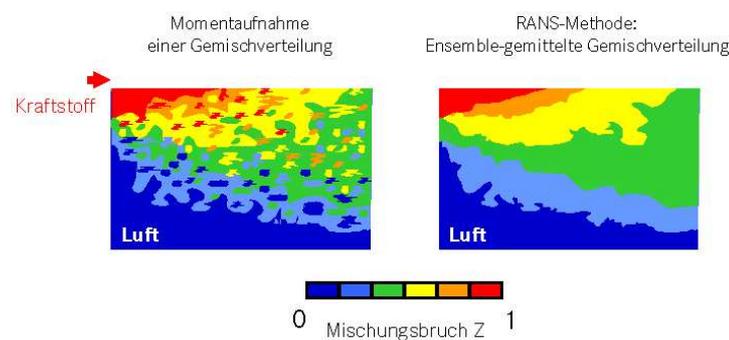


Abbildung 4.2: Exemplarischer Vergleich zwischen "tatsächlich" vorliegender und simulierter Gemischverteilung am Beispiel einer turbulenten Brennertrömung. Aufgrund der Diskretisierung und der Momentenbetrachtung gehen Gemischinformationen verloren.

Zur korrekten Berechnung der chemischen Reaktionsraten ist neben der Berücksichtigung der turbulenten Gemischverteilung auch die statistisch korrekte Abbildung der Thermodynamik wesentlich (siehe Beziehung 4.4). Lokale statistische Schwankungen des Drucks sind für kleine Machzahlen im Allgemeinen vernachlässigbar. Temperaturfluktuation gewinnen insbesondere für homogene Brennverfahren an Bedeutung.

Turbulente Zeit- und Längenskalen; Streckungseffekte

Die für diese Arbeit relevanten turbulenten Zeit- und Längenmaße wurden bereits in Kapitel 2.3.1 vorgestellt. Das chemische Zeitskalenspektrum umfasst typischerweise einen erheblich größeren Bereich. **Abbildung 4.3** zeigt eine Gegenüberstellung turbulenter und chemischer Zeitskalen.

Für turbulente konvektive Prozesse bewegen sich die physikalischen Zeitskalen in einem Bereich von 10^{-4} bis 10^{-2} Sekunden [117, 67]. Sind die physikalischen und chemischen Zeitskalen von gleicher Größenordnung, müssen beide Prozesse gekoppelt betrachtet werden. Für den Bereich schneller Chemie verläuft der Vorgang mischungskontrolliert (Diffusionsverbrennung) und für den Bereich langsamer Chemie chemisch kontrolliert (Vormischverbrennung) ab.

Turbulenz kann auch zu Löschung von Reaktionen führen. In **Abbildung 4.4** ist nach [85] die Maximal-Temperatur eines vorgemischten Rührreaktors über der Damköhler-Zahl aufgetragen. Die Damköhler-Zahl repräsentiert hier das Verhältnis aus Verweildauer und chemischer

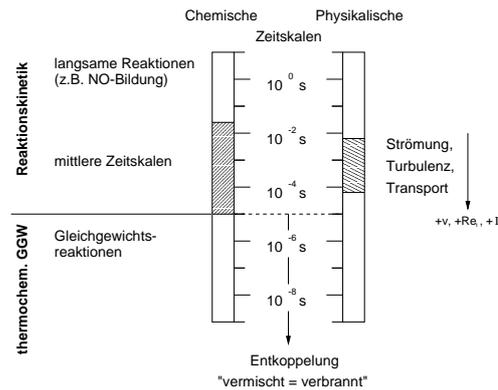


Abbildung 4.3: Zeitskalenspektrum reaktiver Strömungen (vgl. mit [117]).

Zeit der Reaktanden im Rührreaktor. Bewegt man sich auf dem unteren Ast in Richtung höherer Damköhler-Zahlen findet bis Da_Z nahezu keine Temperaturerhöhung statt, da die kurzen Verweilzeiten der Reaktanden eine thermische Zündung verhindern. Für $Da \geq Da_Z$ erfolgt ein unstetiger Übergang (Zündung) auf den oberen Ast, der sich asymptotisch der Gleichgewichtstemperatur nähert. Bewegt man sich vom oberen Ast 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, wobei allerdings der obere und der untere Ast starke Attraktoren darstellen. **Abbildung 4.4** verdeutlicht, dass zwei Szenarien für den Rührreaktor in Abhängigkeit der Damköhler-Zahl unterschieden werden können: der Bereich nahezu vernachlässigbarer Wärmefreisetzung und der Bereich maximaler Wärmefreisetzung in Nähe des chemischen Gleichgewichts. Beide Bereiche erlauben eine entkoppelte Betrachtung der chemischen und physikalischen Prozesse. Für niedrige Damköhler-Zahlen sind die chemischen Reaktionen so schwach, dass die Strömung nicht beeinflusst wird. Für hohe Damköhler-Zahlen sind die chemischen Reaktionen sehr schnell. Typischerweise finden sie in Reaktionszonen statt, die dünner als die dissipativen Wirbelstrukturen sind. Dadurch beeinflusst die Chemie die Turbulenz nur durch eine Dichteänderung.

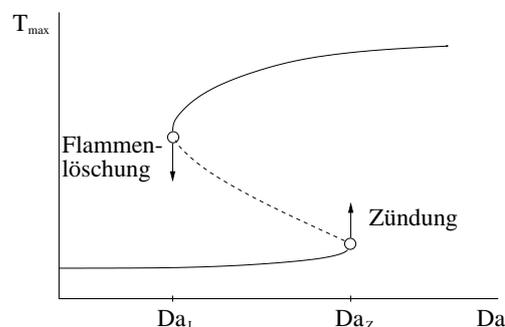


Abbildung 4.4: Maximale Temperatur in einem Mischungsreaktor in Abhängigkeit der Damköhler-Zahl (S-Kurve) [85].

Bei der Diffusionsverbrennung müssen, zusätzlich zur heterogenen Gemischverteilung, die molekularen Transportprozesse der Reaktanden zur Reaktionszone berücksichtigt werden. Im Gegensatz zu laminaren Diffusionsflammen, bei denen die Mischung ausschließlich über die laminaren Transportprozesse bestimmt wird, kontrolliert bei turbulenten Diffusionsflammen der turbulente Transport entscheidend die Mischung und somit auch den Reaktionsfortschritt. In Abhängigkeit der chemischen und turbulenten Zeit- und Längenskalen entwickeln sich unterschiedliche Flammen-Wirbel-Interaktionen. Basierend auf einem Diagramm von Peters [82] sind in **Abbildung 4.5** in Abhängigkeit der Damköhler-Zahl und der Streckungsrate unterschiedliche Flammen-Wirbel-Regimes dargestellt. Für kleine Damköhler-Zahlen interagieren die dissipativen Wirbel direkt mit der Reaktionszone, so dass keine definierte Flammenfront vorliegt. Für große Damköhler-Zahlen verlaufen die chemischen Reaktionen schnell im Vergleich zu den turbulenten Transportprozessen. Des Weiteren ist die Flammendicke kleiner als die Kolmogorov-Wirbel, so dass die Wirbel die Reaktionszone zwar falten und strecken, allerdings aber nicht aufreißen. Dieser Bereich, in dem eine klare Grenzschicht zwischen Oxidator und Kraftstoff vorliegt, wird als Flamelet-Bereich bezeichnet. Die laminare Struktur der Flammenfront wird durch die Turbulenz nicht zerstört. Für sehr große Fluktuationen verläuft der Stoff- und Wärmetransport aus der Reaktionszone schneller als die Wärmeproduktion durch chemische Reaktionen, so dass eine Flammenlöschung stattfindet. Für sehr kleine Fluktuationen liegt ein nahezu homogenes Gemisch vor. In **Abbildung 4.5** ist zusätzlich das potenzielle Verbrennungsregime für die konventionelle dieselmotorische Verbrennung schematisch skizziert. Sämtliche Bereiche werden abgedeckt, wobei der Flamelet-Bereich dominiert.

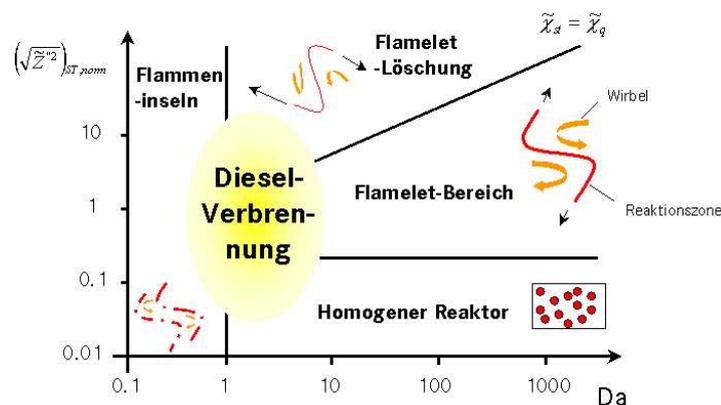


Abbildung 4.5: Schematische Darstellung von möglichen Verbrennungsszenarien für nicht-vorgemischte Flammen in Abhängigkeit der Damköhler-Zahl und der Streckungsrate (vgl. mit [82]). Zusätzlich ist der Bereich der konventionellen Dieselverbrennung skizziert, der sämtliche Szenarien einschließt.

4.2.2 Zusammenfassung

Bei der dieselmotorischen Verbrennung findet ein hochdynamisches Wechselspiel zwischen Strömung, Transport und Chemie statt. Die statistische Behandlung der Gasphase verlangt auch nach einer statistischen Behandlung der chemischen Quellterme, so dass eine Modellierung notwendig ist. Dazu kann folgender Fragenkatalog aufgestellt werden:

- Chemiebehandlung:
 - Reaktionskinetische oder thermochemische Gleichgewichtsbeschreibung?
 - Abbildung von Nieder-, Mittel- und/oder Hochtemperatur-Chemie?
 - Mechanismus-Reduktion möglich?
- Chemie-Turbulenz-Interaktion:
 - Welche Zeit- und Längenskalen sind relevant und müssen aufgelöst werden?
 - Berücksichtigung der turbulenten Gemischverteilung erforderlich?
 - Berücksichtigung turbulenter Transportprozesse (z.B. Streckungseffekte) erforderlich?
 - Ist eine Trennung von physikalischen und chemischen Prozessen möglich?
 - $\tilde{Q}^c \neq \tilde{Q}^c(\tilde{p}, \tilde{T}, \tilde{y}_i)$ berücksichtigt?

Entscheidend für die unterschiedlichen Verbrennungsregimes sind die turbulenten und chemischen Zeitskalen. Die chemischen Zeitskalen umfassen dabei ein sehr weites Spektrum. Die Damköhler-Zahl stellt zur Charakterisierung eine wichtige Größe dar. Sie korreliert turbulente zu chemische Zeitskalen.

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, Verbrennung und Schadstoffbildung. Im Gegensatz dazu, wird bei **modularen Ansätzen** für jedes Teilphänomen ein eigenes Modell herangezogen. Im anschließenden Kapitel folgt die Vorstellung von sogenannten Flamelet-Konzepten, die sowohl eine modulare als auch eine ganzheitliche Beschreibung zulassen. Anschließend wird ein kurzer Literaturüberblick gängiger modularer Modellierungsansätze gegeben.

4.3 Theorie turbulenter Diffusionsflammen

Diffusionsflammen, auch *nicht-vorgemischte Flammen* genannt, stellen eine wichtige Verbrennungserscheinung dar, die maßgeblich für die Dieselerbrennung sind. Im Gegensatz zu vorgemischten Flammen werden Kraftstoff und Oxidator erst im Brennraum durch Konvektion und Diffusion miteinander vermischt. Man spricht in diesem Fall auch von einem *Zweistromproblem*. Ein wichtiges Maß zur Beschreibung der Mischungsgeschwindigkeit von Kraftstoff und Oxidator ist die sogenannte skalare Dissipationsrate, die später genauer definiert wird. Diffusionsflammen können allgemein durch folgende Eigenschaften grob charakterisiert werden (vgl. mit [93]):

- Die Hauptreaktionszone liegt im Bereich der stöchiometrischen Mischung.
- Stationarität ist nur möglich, wenn Kraftstoff und Oxidator mit konstanter Geschwindigkeit kontinuierlich vermischt werden (konstante skalare Dissipationsrate größer Null).
- Im Gegensatz zu Vormischflammen kann keine direkte Flammengeschwindigkeit definiert werden.

- Die Flammendicke von Diffusionsflammen ist abhängig von der skalaren Dissipationsrate.

Einen geeigneten Flammentyp zur Studie von laminaren Zweistrom-Diffusionsflammen bieten **Gegenstrom-Diffusionsflammen** (siehe **Abbildung 4.6a**). Sie ermöglichen eine räumlich eindimensionale Betrachtung des Verbrennungsprozesses, indem basierend auf zwei Brennern, ein gerichteter laminarer Brennstoffstrom auf einen entgegengesetzt gerichteten laminaren Gegenstrom des Oxidationsmittels trifft [117].

Zur mathematischen Beschreibung von Diffusionsflammen müssen zwei Problemkreise behandelt werden: Zum einen die Abbildung des Mischungsprozesses und zum anderen die Abbildung der chemischen Reaktionsabläufe.

4.3.1 Der Mischungsbruch als konservativer Skalar

Eine wichtige Größe zur Beschreibung lokaler Gemischzustände nicht-vorgemischter Flammen ist der Mischungsbruch. Analog zu den Massenbrüchen y_i lässt sich ein Elementmassenbruch Z_j definieren, der den Massenanteil eines Elements j an der Gesamtmasse angibt:

$$Z_j = \sum_{i=1}^{N_s} \frac{a_{ij} M_j}{M_i} y_i \quad j = 1, \dots, N_{el} \quad (4.7)$$

Hierbei repräsentiert N_s die Anzahl der Stoffe und N_{el} die Anzahl der Elemente. Die Koeffizienten a_{ij} geben die Zahl der Atome des Elements j in einem Mol der Spezies i an. Die Molekulargewichte sind mit M bezeichnet.

Bei Betrachtung eines Zweistromproblems mit einem Kraftstoff- und Oxidatorstrom kann mit Hilfe der Elementmassenbrüche Z_j ein Mischungsbruch Z definiert werden (die Indizes 1 und 2 bezeichnen die beiden Ströme) [117]:

$$Z = \frac{Z_j - Z_{j,2}}{Z_{j,1} - Z_{j,2}} \quad (4.8)$$

Der Mischungsbruch ist somit in linearer Weise mit den Massenbrüchen verknüpft. Im Gegensatz zu den molekularen Stoffgrößen wird der Mischungsbruch aufgrund der Elementbetrachtung während einer Verbrennung erhalten, d.h. das beispielsweise bei einem homogenen Reaktor, der Mischungsbruch vor der Verbrennung gleich dem während und nach der Verbrennung entspricht. *Bilger* [10] bezeichnet den Mischungsbruch als normalisierte Größe eines konservativen Skalars⁵, so dass er für den Kraftstoffstrom den Wert 1 und für den Oxidatorstrom den Wert 0 annimmt.

Aufgrund des linearen Zusammenhangs zwischen dem Mischungsbruch und den Spezies-Massenbrüchen kann das Luftverhältnis λ als Funktion des Mischungsbruchs ausgedrückt werden:

$$\lambda = \frac{1 - Z}{Z} \frac{Z_{st}}{1 - Z_{st}} \quad (4.9)$$

Z_{st} bezeichnet den stöchiometrischen Mischungsbruch mit einem Luftverhältnis von $\lambda = 1$. In mageren Bereichen $\lambda > 1$ gilt folglich $Z < Z_{st}$, während fette Mischungen $\lambda < 1$ durch

⁵Beim DE-Dieselmotor ist strenggenommen der Mischungsbruch nicht konservativ, da aufgrund der Kraftstoffverdampfung die Elementmassenbilanz verändert wird.

$Z > Z_{st}$ charakterisiert werden. Der Mischungsbruch lässt sich mit Hilfe einer Zweistrom-Diffusionsflamme veranschaulichen. Dazu wird die räumliche Koordinate der Diffusionsflamme in den Mischungsbruchraum transformiert. Dadurch sind auch die Massenbrüche aller an der chemischen Reaktion beteiligten Spezies dem örtlichen Wert des Mischungsbruchs zugeordnet. **Abbildung 4.6** zeigt eine schematische Darstellung einer Gegenstrom-Diffusionsflammen, zusammen mit den Massenbruchverläufen der Systemspezies im Mischungsbruchraum für eine inerte und reaktive Strömung. Zur Veranschaulichung wird von einer irreversiblen unendlich schnellen Chemie mit der Bruttoreaktionsgleichung *Brennstoff+Luft* → *Produkte* ausgegangen. Für den reaktiven Fall ergibt sich die sogenannte *Burke-Schumann Lösung* [14]. Sie stellt das Limit sehr großer Damköhler-Zahlen dar. Die Burke-Schumann Lösung betrachtet die Reaktionszone unabhängig von der chemischen Reaktionskinetik als unendlich dünne Schicht, in der Kraftstoff und Oxidator zu Produkten umgewandelt werden. Aufgrund der irreversiblen unendlich schnellen Chemieannahme, beschreiben die Massenbrüche lineare Verläufe im Mischungsbruchraum, die einzigst von den Edukten und dem daraus ableitbaren stöchiometrischen Mischungsverhältnis abhängen. Eine Koexistenz von Kraftstoff und Sauerstoff ist nicht möglich, da abhängig vom Mischungsbruch, die Mangelkomponente direkt verbraucht wird.

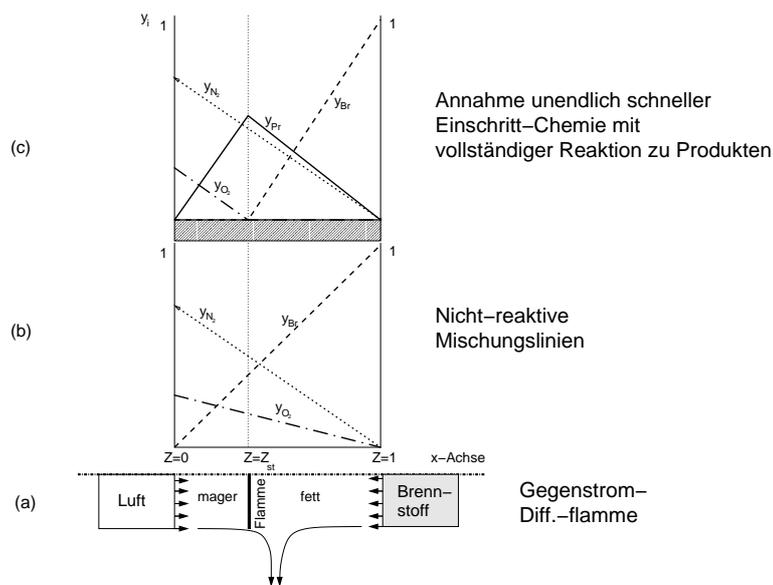


Abbildung 4.6: (a) Beispiel einer Gegenstrom-Diffusionsflamme. (b) Projektion der Massenbrüche von Kraftstoff y_{Br} , Sauerstoff y_{O_2} und Stickstoff y_{N_2} in den Mischungsbruchraum Z bei Annahme einer nicht-reaktiven Strömung. (c) Burke-Schumann Lösung der Reaktanden im Mischungsbruchraum für eine reaktive Strömung.

Unter der Annahme gleicher Diffusivität für alle Spezies (was meistens näherungsweise erfüllt ist [117]), lässt sich leicht mit Hilfe der laminaren Transportgleichungen für die Massenbrüche y_i (siehe Gleichung 2.6) eine Transportgleichung für den Mischungsbruch ableiten [85, 117]:

$$\frac{\partial \rho Z}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho Z \vec{v}) = \nabla \cdot [\rho D \nabla Z] + \dot{\rho}^s \tag{4.10}$$

$\dot{\rho}^s$ repräsentiert den Verdampfungsquellterm. Der Diffusionskoeffizient D wird gleich dem thermischen Diffusionskoeffizient D_T gesetzt, so dass $D = \lambda/(\rho c_p) = D_T$ gilt [84]. Da im Gegensatz zu den molekularen Stoffgrößen, Elemente weder durch chemische Reaktionen verbraucht noch gebildet werden, benötigt Gleichung 4.10 keinen chemischen Quellterm.

Für die Favre-gemittelte Erhaltungsgleichung des Mischungsbruchs \tilde{Z} und der Varianz des Mischungsbruchs $\widetilde{Z''^2}$ folgt unter Vernachlässigung der molekularen Diffusion:

Mischungsbruch \tilde{Z} :

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Z}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{u} \tilde{Z}) = \nabla \cdot \left[\frac{\mu}{Sc_t} \nabla \tilde{Z} \right] + \tilde{\rho}_i^s \quad (4.11)$$

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

$$\underbrace{\frac{\partial \bar{\rho} \widetilde{Z''^2}}{\partial t}}_{\text{zeitl. \u00c4nd.}} + \underbrace{\nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{u} \widetilde{Z''^2})}_{\text{Konvektion}} = \underbrace{\nabla \cdot \left[\frac{\mu}{Sc_t} \nabla \widetilde{Z''^2} \right]}_{\text{Diffusion}} + \underbrace{2 \frac{\mu}{Sc_t} (\nabla \tilde{Z})^2}_{\text{Produktion}} - \underbrace{\bar{\rho} \tilde{\chi}}_{\text{Dissipation}} + \underbrace{\tilde{\rho}^s}_{\text{Verdampfung}} \quad (4.12)$$

F\u00fcr die turbulente Viskosit\u00e4t μ und die turbulente Schmidt-Zahl Sc_t werden die gleichen Werte verwendet, wie f\u00fcr die Transportgleichungen 2.55 der chemischen Spezies. $\tilde{\chi}$ bezeichnet die turbulente mittlere skalare Dissipationsrate und wird nach Jones [46] modelliert:

$$\tilde{\chi} = c_\chi \frac{\tilde{\epsilon}}{k} \widetilde{Z''^2} \quad (4.13)$$

c_χ entspricht dem Verh\u00e4ltnis zwischen der Skalar- und Str\u00f6mungszeitskala und wird f\u00fcr dieselmotorische Verbrennungsprozesse meist zu $c_\chi = 2.0$ angenommen [85].

Besondere Aufmerksamkeit verlangt die Bilanzgleichung f\u00fcr die Varianz des Mischungsbruchs. Sie ist eine wichtige Gr\u00f6\u00dfe zur Beschreibung von Gemischinhomogenit\u00e4ten. Generell werden bei der Bilanzierung der Varianz des Mischungsbruchs neben den Termen f\u00fcr die zeitliche \u00c4nderung, Konvektion und Diffusion, zus\u00e4tzlich ein Produktions- und ein Dissipations-term ber\u00fccksichtigt. Beim DE-Dieselmotor wird fl\u00fcssiger Kraftstoff in den Brennraum eingespritzt, was als Massenquellterm $\tilde{\rho}_i^s$ in der Erhaltungsgleichung f\u00fcr den mittleren Mischungsbruch ber\u00fccksichtigt ist. Folglich handelt es sich w\u00e4hrend der Phase der Kraftstoffverdampfung beim Mischungsbruch streng genommen um ein nicht-konservativen Skalar. Bei der Herleitung der Varianzgleichung des Mischungsbruchs muss daher prinzipiell auch der Einfluss der Kraftstoffverdampfung ber\u00fccksichtigt werden. Einen Ansatz zur Schlie\u00dfung des Strahlquellterms in der Varianzgleichung liefern *Reveillon* und *Vervisch* [101], die dazu DNS Rechnungen f\u00fcr verdampfende Tropfen in einer turbulenten Str\u00f6mung durchf\u00fchren. Dieser Ansatz ist allerdings f\u00fcr die dieselmotorische Verbrennung eher ungeeignet, da der Einfluss der S\u00e4ttigung in die \u00dcberlegungen nicht miteinbezogen wurde.

4.4 Das laminare Flamelet-Konzept

Das laminare Flamelet-Konzept zur Beschreibung turbulenter Diffusionsflammen wurde erstmals von *Williams* [120] vorgestellt. Die Anwendbarkeit setzt die sogenannten *Flamelet-Annahmen* voraus:

1. $Da \gg 1$
2. Dicke der Reaktionszone $<$ Kolmogorov-Längenmaß

Sind beide Annahmen erfüllt, kann eine turbulente, nicht-vorgemischte Flamme als ein Ensemble laminarer, dünner, eindimensionaler Diffusionsflammen (*Flamelets*) angesehen werden (*Flamelet-Konzept*). Folglich führen Flamelet-Modelle komplizierte, mehrdimensionale Verbrennungsmodelle auf eindimensionale Strukturen zurück. Der Einfluss des turbulenten Strömungsfeldes beschränkt sich auf die Faltung und Dehnung der Flamelets, wobei die laminare, chemische Struktur nicht zerstört wird.

Die Reaktionszone von Diffusionsflammen wird durch die Isofläche stöchiometrischer Mischung Z_{st} lokalisiert. Unter der Annahme $Z(\vec{x}, t) = Z_{st}$ kann mit Hilfe der Transportgleichung 4.10 die zeitliche und lokale Verteilung der Reaktionszone bestimmt werden. In **Abbildung 4.7** ist exemplarisch für einen Dieselstrahl die Isolinie der Reaktionszone dargestellt. Für die Burke-Schumann Lösung ist aufgrund der irreversiblen, unendlich schnellen Chemieannahme, das Problem rein mischungskontrolliert. Da eine direkte Korrelation zwischen dem Mischungsbruch und den Spezies-Massenbrüchen besteht, müssen nicht alle Spezies transportiert werden, sondern es genügt die Bilanzierung des Mischungsbruchs.

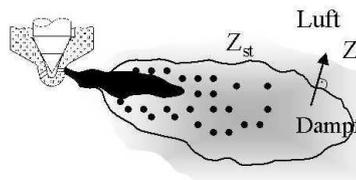


Abbildung 4.7: Schematische Schnittdarstellung eines Diesel-Einspritzstrahls. Bei der Herleitung der Flamelet-Gleichungen wird senkrecht zur Fläche stöchiometrischer Mischung der Mischungsbruch Z als unabhängige Koordinate verwendet.

4.4.1 Flamelet-Gleichungen

In diesem Abschnitt werden die sogenannten *laminaren Flamelet-Gleichungen* vorgestellt, die auch für reversible, kinetische Prozesse, die Bilanzierung der Skalare als Funktion der Zeit und des Mischungsbruchs beschreiben. Ausgangspunkt für die mathematischen Formulierungen der Gleichungen sind die laminaren Bilanzgleichungen der Gasphase für die Spezies-Massenbrüche und die Temperatur. Sie lauten für ein kartesisches Koordinatensystem:

Spezies im \vec{x} -Raum:

$$\frac{\partial \rho y_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v} y_i) = \frac{1}{Le_i} \nabla \cdot [\rho D_T \nabla y_i] + \dot{\rho}_i^c \quad (4.14)$$

Temperatur im \vec{x} -Raum:

$$\frac{\partial \rho T}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v} T) = \nabla \cdot \left[\frac{\lambda}{c_p} \nabla T \right] + \frac{\rho \lambda}{c_p^2} \left[\sum_{i=1}^{nsp} \frac{c_{p_i}}{Le_i} \nabla y_i + \nabla c_p \right] + \frac{1}{c_p} \left[\frac{\partial p}{\partial t} + \dot{Q}^c + \dot{Q}^r \right] \quad (4.15)$$

Neben den chemischen Quelltermen $\dot{\rho}_i^c$ und \dot{Q}^c ist in der Temperaturgleichung zusätzlich der Strahlungsquellterm \dot{Q}^r berücksichtigt. c_{p_i} entspricht der spezifischen Wärmekapazität und Le_i der *Lewis-Zahl* der Spezies i . Die Lewis-Zahl beschreibt das Verhältnis zwischen Stoff- und Wärmetransport [84]:

$$Le_i = \frac{D_T}{D_i} = \frac{\lambda}{\rho c_p D_i} \quad (4.16)$$

Zur Herleitung der Flamelet-Gleichungen [80, 81, 85, 84] wird ein lokal definiertes Koordinatensystem eingeführt, dessen x_2 - und x_3 -Koordinaten in der Fläche der stöchiometrischen Isofläche liegen. Die senkrecht zu dieser Fläche stehende x_1 -Koordinate wird durch den Mischungsbruch Z ersetzt (siehe **Abbildung 4.7**). Diese Transformation ist zulässig, falls die Ortskoordinate x_1 allein durch Z repräsentiert werden kann. Dies trifft für die meisten laminaren Flammenkonfigurationen zu, für turbulente Flammen allerdings nur unter der Annahme sehr dünner Reaktionszonen [92].

Mit den Transformationsregeln

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{\partial Z}{\partial t} \frac{\partial}{\partial Z} \\ \frac{\partial}{\partial x_1} &= \frac{\partial}{\partial Z} \frac{\partial}{\partial x_1} \\ \frac{\partial}{\partial x_k} &= \frac{\partial}{\partial Z_k} + \frac{\partial Z}{\partial x_k} \frac{\partial}{\partial Z} \quad (\text{mit } k = 2, 3) \end{aligned} \quad (4.17)$$

ergeben sich aus 4.14 und 4.15 nach einer asymptotischen Analyse des resultierenden Gleichungssystems⁶ die Flamelet-Gleichungen zu:

Spezies im Z-Raum:

$$\rho \frac{\partial y_i}{\partial \tau} = \rho \frac{\chi_{st}}{2} \frac{\partial^2 y_i}{\partial Z^2} + \dot{\rho}_i^c \quad (4.18)$$

Temperatur im Z-Raum:

$$\rho \frac{\partial T}{\partial \tau} = \rho \frac{\chi_{st}}{2} \frac{\partial^2 T}{\partial Z^2} + \rho \frac{\chi_{st}}{2 c_p} \frac{\partial T}{\partial Z} \frac{\partial c_p}{\partial Z} + \rho \frac{\chi_{st}}{2} \frac{c_{p_i}}{c_p} \frac{\partial y_i}{\partial Z} \frac{\partial T}{\partial Z} + \frac{1}{c_p} \left[\frac{\partial p}{\partial t} + \dot{Q}^c + \dot{Q}^r \right] \quad (4.19)$$

τ entspricht der Zeitkoordinate im Mischungsbruchraum, χ_{st} der skalaren Dissipationsrate bei stöchiometrischer Mischung (siehe unten). Da alle Skalare (Massenbrüche y_i und die Temperatur T) mit der gleichen konvektiven Geschwindigkeit wie der Mischungsbruch Z im physikalischen Raum transportiert werden, entfallen die Konvektionsterme im transformierten Gleichungssystem (Mischungsbruchraum)⁷. Folglich muss keine Impulserhaltung gelöst werden.

Die vorgestellten Flamelet-Gleichungen basieren auf der Annahme konstanter Diffusivität für alle Spezies. Wird ein einfaches, binäres Diffusionsmodell mit variablen Lewis-Zahlen verwendet, lässt sich die Bedingung, dass die Summe aller diffusiven Spezies-Flüsse Null ergeben muss, nicht mehr trivial gewährleisten [85]. Um diese Bedingung dennoch zu erfüllen, hat

⁶Unter der Annahme dünner Flammenzonen sind die Änderungen in der Stöchiometrie-Isofläche gering gegenüber denen in Z -Richtung, so dass Z als einzige unabhängige Variable übrig bleibt.

⁷Pitsch [92] spricht deshalb auch vom *Lagrange'schen Flamelet-Modell*.

Pitsch et.al. [91, 89] Flamelet-Gleichungen unter Verwendung detaillierter Transportmodelle abgeleitet, die den Effekt der **differentiellen Diffusion** als konvektiven Transport im Mischungsbruchraum abbilden. Das resultierende Gleichungssystem ist erheblich komplexer. Die numerische Lösung ist mit enormen Rechenaufwand verbunden, was unter anderem an der rechenzeitintensiven Auswertung der Diffusionskoeffizienten liegt. Für motorische Verbrennungsprobleme kann allerdings die differentielle Diffusion vernachlässigt werden, da der Effekt eher untergeordnet gegenüber Turbulenzeffekten [35, 85] und für Kohlenwasserstoff-Brennstoffe ist [39]. Daher werden in dieser Arbeit die Lewis-Zahlen für sämtliche Spezies i zu $Le_i = 1$ angenommen, so dass ein für alle Spezies einheitlicher Transportkoeffizient $D = D_T = \lambda/(\rho c_p)$ vorliegt.

4.4.2 Flamelet-Parameter

Die Flamelet-Gleichungen 4.18 und 4.19 beschreiben die eindimensionale Struktur eines laminaren Flamelets im Mischungsbruchraum. Sie liefern Informationen über kleinste Flammenskalen, die durch eine reine Mittelwertbetrachtung im Allgemeinen aus Rechenzeitgründen nicht aufgelöst werden können. Die Kopplung der Strömungsstruktur im physikalischen Raum mit den Flamelets im Z -Raum erfolgt über die sogenannten *Flamelet-Parameter*. In den Flamelet-Gleichungen sind dies der Druck p und die konditionierte skalare Dissipationsrate χ_{st} , sowie die Anfangs- und Randbedingungen für die Temperatur und die Gemischzusammensetzung. Für niedrige Machzahlen kann der Druck für gewöhnlich als räumlich konstant angenommen werden. Da die Hauptreaktionszone im Bereich stöchiometrischer Mischung liegt, wird die skalare Dissipationsrate auf diesen Bereich konditioniert. Für den laminaren Fall gilt [84]

$$\chi_{st} = 2D(\nabla Z)_{st}^2. \quad (4.20)$$

Die skalare Dissipationsrate nimmt eine zentrale Rolle innerhalb des Flamelet-Konzepts ein, da sie die Strömungseffekte auf den Mischungsbruchraum abbildet. Aufgrund der Koordinatentransformation 4.17 beschreibt die skalare Dissipationsrate implizit den Einfluss der Konvektion und Diffusion senkrecht zur stöchiometrischen Mischung [80]. In den Flamelet-Gleichungen erscheint sie als Parameter in den Diffusionstermen. χ_{st} stellt den Kehrwert einer charakteristischen Diffusionszeit dar [80], und ist ein Maß für die Zeitspanne, die ein Molekül benötigt, um mit einer mittleren Diffusionsgeschwindigkeit von einem Punkt $Z = 1$ zu einem Punkt $Z = 0$ zu gelangen [91]. Eine anschauliche Darstellung des Einflusses von χ_{st} auf stationäre, adiabate Diffusionsflammen liefert **Abbildung 4.8**. Diese sogenannte *S-Kurve* korreliert den Kehrwert der skalaren Dissipationsrate schematisch mit der Maximaltemperatur stationärer Flamelets. Unter der Annahme einer konstanten chemischen Zeitskala entspricht dies der Auftragung über der Damköhler-Zahl [91] (charakteristisch für turbulente vorgemischte Verbrennung).

Zündprozesse zeichnen sich durch selbstbeschleunigende Vorgänge aus. Der untere Ast der **Abbildung 4.8** verdeutlicht den Einfluss der skalaren Dissipationsrate auf den Zündprozess. Auf diesem Ast sind die Diffusionseffekte so stark, dass eine Zündung nicht zugelassen wird. Die lokale Radikalbildung durch kettenverzweigende Reaktionen wird durch Diffusion kompensiert. Bewegt man sich auf dieser Kurve in Richtung kleinerer skalarer Dissipationsraten, wird die Maximaltemperatur immer höher. Für Werte kleiner als χ_Z sind die Diffusionseffekte schließlich so langsam, dass Zündung auftreten kann, da die Radikale schneller gebildet als durch Diffusion abtransportiert werden. Die Maximaltemperatur springt auf den oberen Ast.

Der Einfluss der skalaren Dissipationsrate auf brennende Flamelets wird über den oberen Ast der S-Kurve demonstriert. Bewegt man sich von rechts kommend auf dem oberen Ast in Richtung größerer skalarer Dissipationsraten, nehmen die Diffusionseffekte im Flamelet zu, so dass die maximale Temperatur sinkt. Ab einem Grenzwert χ_L tritt schließlich Flammenlöschung auf.

Neben der S-Kurve sind in **Abbildung 4.8** zusätzlich die Zündverzugszeiten t_z über der inversen skalaren Dissipationsrate dargestellt. Für χ_Z ist eine Zündung zwar möglich, die Zündverzugszeit ist aber unendlich lang. Für $\chi_{st} < \chi_Z$ verkürzt sich die Zündverzugszeit, bis schließlich für $\chi_{st} \rightarrow 0$ die Zündverzugszeit eines homogenen Reaktors asymptotisch angenähert wird.

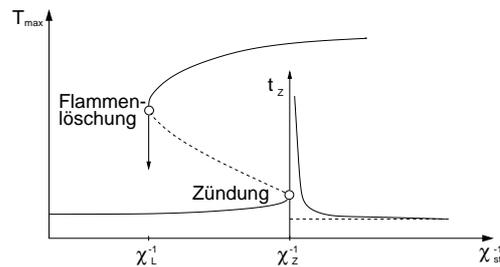


Abbildung 4.8: Schematische Darstellung des Einflusses der skalaren Dissipationsrate auf die maximale Flammentemperatur T_{max} (S-Kurve) und die Zündverzugszeit t_z eines stationären, adiabaten Diffusions-Flamelets [91].

Der Verlauf der skalaren Dissipationsrate ist im Mischungsbruchraum nicht konstant. Unter der Annahme konstanter Diffusionskoeffizienten lässt sich die skalare Dissipationsrate in laminaren, stationären Gegenstrom-Diffusionsflammen als Funktion einer inversen komplementären Fehlerfunktion quantifizieren:

Für $\rho = const.$ [80]:

$$\chi(Z) = \frac{a_\infty}{\pi} \exp\left(-2 \left[\operatorname{erfc}^{-1}(2Z)\right]^2\right) \quad (4.21)$$

Für $\rho \neq const.$ [49]:

$$\chi(Z) = \frac{a_\infty}{4\pi} \frac{3 \left(\sqrt{\rho_\infty/\rho} + 1\right)^2}{2\sqrt{\rho_\infty/\rho} + 1} \exp\left(-2 \left[\operatorname{erfc}^{-1}(2Z)\right]^2\right) \quad (4.22)$$

a_∞ entspricht dem Geschwindigkeitsgradienten einer laminaren Gegenstromflamme.

4.4.3 Gemittelte Flamelet-Parameter

Die Flamelet-Gleichungen beschreiben den chemischen Reaktionsablauf von laminaren Diffusionsflammen im Mischungsbruchraum. Für turbulente Strömungen müssen die entsprechenden statistischen Größen des turbulenten Mischungsfelds zur Kopplung als Flamelet-Parameter

konsistent in den laminaren Mischungsbruchraum transformiert werden. Da aus Rechenzeitgründen für motorische Applikationen nicht in jeder Zelle ein Flamelet gelöst werden kann, werden meist "repräsentative" Gebietsmittelwerte der Flamelet-Parameter berechnet.

Die Anfangsbedingungen für die Temperatur und die Gemischzusammensetzung ergeben sich beim DE-Dieselmotor aus dem thermodynamischen Zustand des Gemisches zum Zeitpunkt der Einspritzung. Für den Druck wird ein volumengewichteter Mittelwert verwendet:

$$\hat{p} = \frac{\int_V \bar{p} dV}{\int_V dV} \quad (4.23)$$

Die Temperatur auf der Oxidatorseite ($Z = 0$) berechnet sich auf analoger Weise als massengewichteter Mittelwert. Die Kraftstofftemperatur ($Z = 1$) wird meistens als konstant angenommen.

Die Berechnung der auf Stöchiometrie konditionierten skalaren Dissipationsrate, wie sie in den Flamelet-Gleichungen benötigt wird, gestaltet sich etwas aufwändiger. Da aus der RANS-Modellierung nur unkonditionierte Mittelwerte von $\tilde{\chi}$ bekannt sind, muss versucht werden, den Verlauf der skalaren Dissipationsrate im Mischungsbruchraum über die Information der gemittelten Werte abzubilden. Ausgangspunkt ist die Gleichung 4.21 (bzw. 4.22), die einen funktionalen Zusammenhang zwischen χ und Z herstellt. Zur Eliminierung des präexponentiellen Faktors wird für Gleichung 4.21 eine Quotientenform gewählt [85]:

$$\chi(Z) = \chi(Z_{st}) \frac{f(Z)}{f(Z_{st})} \quad (4.24)$$

Dabei entspricht $f(Z)$ dem exponentiellen Term in 4.21. Zusammen mit der allgemeinen Bestimmungsgleichung für die mittlere skalare Dissipationsrate

$$\tilde{\chi} = \int_0^1 \chi(Z) \tilde{P}(Z) dZ = \chi(Z_{st}) \int_0^1 \frac{f(Z)}{f(Z_{st})} \tilde{P}(Z) dZ \quad (4.25)$$

und der Beziehung 4.13 lässt sich der lokale Momentanwert der skalaren Dissipationsrate quantifizieren:

$$\chi(Z_{st}) = \frac{c_{\chi} \frac{\tilde{\epsilon}}{k} \widetilde{Z''^2}}{\int_0^1 \frac{f(Z)}{f(Z_{st})} \tilde{P}(Z) dZ} \quad (4.26)$$

$\tilde{P}(Z)$ repräsentiert die Favre-gemittelte Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion des Mischungsbruchs.

Zur Berechnung eines oberflächengewichteten Gebietsmittelwerts der skalaren Dissipationsrate bei stöchiometrischer Mischung hat *Pitsch* einen Ansatz geliefert [91]. Nach einer Transformation der Oberflächen- in Volumenintegrale ergibt sich dabei:

$$\chi(\widehat{Z}_{st}) = \frac{\int_V \bar{\rho}(\vec{x}) \chi(Z_{st})^{3/2}(\vec{x}) \tilde{P}(Z_{st}) dV'}{\int_V \bar{\rho}(\vec{x}) \chi(Z_{st})^{1/2}(\vec{x}) \tilde{P}(Z_{st}) dV'} \quad (4.27)$$

4.4.4 “Presumed-PDF” Modellierung

Da beim Flamelet-Konzept eine Auflösung der Reaktionszone im Mischungsbruchraum vorgenommen wird ($\psi = \psi(Z)$), im physikalischen Raum aber gemittelte Größen bilanziert werden ($\tilde{\psi}(\vec{x})$), müssen die Flamelet-Lösungen in den statistischen, physikalischen Raum transformiert werden.

Wie in Abschnitt 2.3.3 dargelegt, können die statistischen Momente einer Größe ψ mit Hilfe von Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen (PDFs) berechnet werden (siehe Gleichung 2.31). Für das RANS-Verfahren sind dabei vor allem das erste Moment (Mittelwert) und das zweite Moment (Schwankungsgröße) wichtig. Eine PDF kann theoretisch beliebig viele Formen annehmen. Zu ihrer Bestimmung können in der Praxis prinzipiell zwei Ansätze unterschieden werden:

1. PDF-Transportgleichungen (siehe Kapitel 2.3.3)
2. Presumed-PDF Modelle

Dieser Abschnitt behandelt den zweiten Ansatz. Eine “*Presumed-PDF*” ist eine vordefinierte, analytische Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion, in Abhängigkeit einer limitierten Anzahl an bekannten Momenten. Bei diesem Konzept wird allgemein die Tatsache ausgenutzt, dass die Simulationsergebnisse turbulenter Flammen meist nur wenig von der genauen Form der PDFs abhängen [117].

Zur Beschreibung der turbulenten Gemischverteilung nicht-vorgemischter Flammen hat sich die β -Funktion etabliert [85]. Sie ist durch nur zwei Momente definiert, kann aber dennoch eine große Bandbreite an unterschiedlichsten Verteilungsformen abbilden [117, 102], allerdings keine multi-modalen Verläufe, wie sie teilweise an der Strahlspitze zu beobachten sind. Mit Hilfe von DNS Rechnungen evaluierte *Girimaji* [31] die Funktionalität der β -PDF zur Beschreibung einfacher, turbulenter Diffusionsflammen. Dabei zeigte sich eine zufriedenstellende Übereinstimmung für die wesentlichen Mischungsszenarien.

Die normierte, Favre-gemittelte β -Funktion ist definiert als (siehe auch Anhang B):

$$\tilde{P}_Z(Z; \vec{x}, t) = \frac{Z^{\alpha-1} \cdot (1-Z)^{\beta-1}}{\int_{Z=0}^{Z=1} Z^{\alpha-1} \cdot (1-Z)^{\beta-1} dZ} \quad (\text{Wertebereich } [0, 1]) \quad (4.28)$$

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

$$\alpha = \tilde{Z} \cdot \gamma, \quad \beta = (1 - \tilde{Z}) \cdot \gamma, \quad (4.29)$$

$$\text{mit} \quad \gamma = \alpha + \beta = \frac{\tilde{Z} \cdot (1 - \tilde{Z})}{\widetilde{Z''^2}} - 1 \geq 0. \quad (4.30)$$

In **Abbildung 4.9** sind für verschiedene Werte von \tilde{Z} und $\widetilde{Z''^2}$ mögliche Verläufe der β -Funktion dargestellt. Für zunehmende Varianzen findet eine Entmischung statt, für sehr kleine Werte von $\widetilde{Z''^2}$ nähert sich die β -Funktion einer Delta-Funktion.

Durch die Gewichtung einer beliebigen Flamelet-Lösung $\psi(Z)$ mit der β -PDF, lässt sich jetzt gemäß der Gleichung 2.32 der statistische Mittelwert $\tilde{\psi}(\vec{x}, t)$ berechnen:

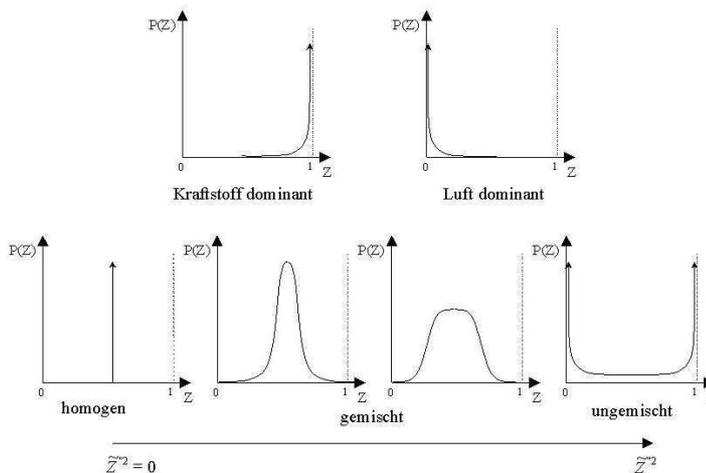


Abbildung 4.9: Beispiele möglicher β -PDF Formen.

$$\tilde{\psi}(\vec{x}, t) = \int_{Z=0}^{Z=1} \psi(Z) \tilde{P}_Z(Z; \tilde{Z}(\vec{x}, t), \tilde{Z}''^2(\vec{x}, t)) dZ \tag{4.31}$$

Die numerische Lösung dieses Integrals spielt eine zentrale Rolle innerhalb sämtlicher Flamelet-Konzepte, da dadurch entscheidend die Güte des Simulationsergebnisses bestimmt wird. Aus diesem Grund wurde für diese Arbeit ein semi-analytischer Ansatz entwickelt, der im Anhang B beschrieben ist.

Bisher wurde vorausgesetzt, dass die mittlere skalare Dissipationsrate keiner turbulenten Schwankungen unterliegt. Wird von dieser Annahme abgewichen, muss über eine *gemeinsame PDF*⁸ $\tilde{P}_{Z,\chi}$ für Z und χ integriert werden:

$$\tilde{\psi}(\vec{x}, t) = \int_{Z=0}^{Z=1} \int_{\chi=0}^{\chi=\infty} \psi(Z, \chi) \tilde{P}_{Z,\chi}(Z, \chi; \vec{x}, t) d\chi dZ \tag{4.32}$$

Wird von der Näherung ausgegangen, dass Z und χ statistisch unabhängig voneinander sind, lässt sich die gemeinsame PDF in ein Produkt eindimensionaler PDFs zerlegen, die leichter empirisch mit Hilfe von Experimenten bestimmt werden können [117]:

$$\tilde{\psi}(\vec{x}, t) = \int_{Z=0}^{Z=1} \int_{\chi=0}^{\chi=\infty} \psi(Z, \chi) \tilde{P}_\chi(\chi; \vec{x}, t) \tilde{P}_Z(Z; \vec{x}, t) d\chi dZ \tag{4.33}$$

⁸engl.: Joint-PDF

4.5 Flamelet-Ansätze zur Simulation der dieselmotorischen Verbrennung

Für dünne, nicht-vorgemischte Flammenschichten, deren chemische Zeit- und Längenskalen viel kleiner sind als die entsprechenden turbulenten Skalen, ermöglichen Flamelet-Modelle eine Separierung der numerischen Lösung des dreidimensionalen Strömungsfeldes und der eindimensionalen Flammenstruktur. In **Abbildung 4.10** ist das Prinzipschemata einer solchen allgemeinen CFD-Flamelet-Modellierung dargestellt. Typischerweise umfasst die Modellierung dabei drei Schwerpunkte:

- Modellierung der Strömungsmechanik
- Modellierung der chemischen Prozesse
- Beschreibung der Interaktion zwischen Strömung und Chemie

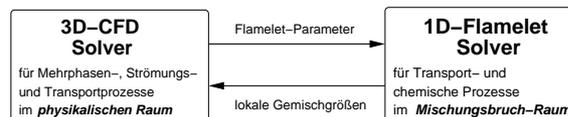


Abbildung 4.10: *Prinzipskizze einer allgemeinen Flamelet-Modellierung: 3D-Strömungsbehandlung im physikalischen Raum durch CFD-Code und 1D-Chemie-Beschreibung im Mischungsbruchraum durch Flamelet-Code.*

Im Folgenden werden die Einflussgrößen der Chemiebehandlung im Mischungsbruchraum ausführlich dargelegt und diskutiert. Anschließend werden gängige Flamelet-Konzepte zur Simulation der dieselmotorischen Verbrennung vorgestellt. Diese unterscheiden sich primär in den Interaktionsszenarien.

Einflussgrößen im Mischungsbruchraum

Bei einer CFD-Flamelet-Applikation wird die laminare Flammenstruktur im Mischungsbruchraum separiert vom Strömungs-Code gelöst. Aufgrund der eindimensionalen Betrachtungsweise ist eine detaillierte Flammenfrontauflösung unter Berücksichtigung der folgenden physikalischen und chemischen Effekte möglich:

- Instationarität
- Molekularer Transport
- Detaillierte Reaktionskinetik

Diese Effekte sind in den Spezies-Flamelet-Gleichungen durch jeweils einen Term berücksichtigt:

$$\underbrace{\rho \frac{\partial y_i}{\partial \tau}}_{\text{Instationarität}} = \underbrace{\rho \frac{\chi_{st}}{2} \frac{\partial^2 y_i}{\partial Z^2}}_{\text{Streckung}} + \underbrace{\dot{\rho}_i^c}_{\text{Reaktionskinetik}} \quad (4.34)$$

In Abhängigkeit der Modellierungstiefe können Flamelet-Konzepte nach folgenden Kriterien differenziert werden:

- **Stationäres Flamelet** $y_i = y_i(Z; \chi)$:

Die unabhängigen Variablen der Flamelet-Gleichungen reduzieren sich für stationäre Flamelets auf den Mischungsbruch. Die Spezies-Erhaltungsgleichungen vereinfachen sich zu:

$$-\rho \frac{\chi_{st}}{2} \frac{\partial^2 y_i}{\partial Z^2} = \dot{\rho}_i^c \quad (4.35)$$

Entscheidend für die zeitliche Entwicklung eines Flamelets sind die physikalischen und chemischen Zeitskalen. Geschwindigkeitsbestimmend ist dabei immer der langsamere von beiden Prozessen. Die physikalische Zeitskala ist stark vom Turbulenzgrad, die chemische von der Temperatur abhängig. Stationarität wird durch hohe und zeitlich langsam variierende skalare Dissipationsraten begünstigt, da eine schnelle Relaxation zu stationären Gleichgewichtszuständen erfolgt. *Pitsch et.al.* [90] haben eine charakteristische Flamelet-Diffusionszeit vorgeschlagen:

$$t_\chi = \frac{(\Delta Z)^2}{\tilde{\chi}_{st}} \quad (4.36)$$

t_χ repräsentiert die Zeit, die benötigt wird, um Masse und Energie über eine Distanz von ΔZ im Mischungsbruchraum auszutauschen. ΔZ entspricht typischerweise der Flammendicke im Mischungsbruchraum. Falls t_χ die physikalische Zeit unterschreitet, relaxiert das Flamelet so schnell, dass von Stationarität ausgegangen werden kann. Nach Gleichung 4.36 erhöht sich mit abnehmender skalarer Dissipationsrate die Diffusionszeit. Der Instationaritätsterm in den Flamelet-Gleichungen gewinnt an Relevanz. Aufgrund der Tatsache, dass die skalare Dissipationsrate im Expansionstakt stetig abnimmt und dadurch t_χ zunimmt, ist eine Zeitgrenze möglich, ab der Instationaritätseffekte mitberücksichtigt werden müssen. Während sich die Hauptreaktionen nahe dem chemischen Gleichgewichtszustand bewegen, werden instationäre Effekte vor allem für langsame kinetischen Prozesse wichtig, wie beispielsweise für die NO_x -Bildung [85].

- **Gleichgewichts-Flamelet** $y_i = y_i(Z)$:

Der Unterschied und der Gültigkeitsbereich einer rein thermodynamischen Beschreibung (thermochemisches Gleichgewicht) und einer reaktionskinetischen Beschreibung (Reaktionskinetik) von reaktiven Strömungsprozessen wurde bereits in Kapitel 4.1 ausführlich diskutiert. Unter der Annahme unendlich schneller Chemie vereinfachen sich die Flamelet-Lösungen zu:

- $y_i = y_i(Z)$ für irreversible Chemie mit vollständiger Reaktion $F + O \rightarrow P$
- $y_i = y_i(p, T, Z)$ für reversible Chemie $F + O \leftrightarrow P$

Die skalare Dissipationsrate χ entfällt als Einflussgröße, aufgrund der Annahme "gemischt=verbrannt". Sobald sich ein neuer Mischungszustand formiert hat, reagiert dieser unendlich schnell, so dass die Flamelet-Lösung unabhängig von der Mischungszeit und der skalaren Dissipationsrate im Mischungsbruchraum ist.

- **Nicht-diffusives Flamelet** $y_i = y_i(Z, \tau)$:

Chemische Reaktionen sind nur auf molekularer Ebene möglich, d.h. sobald Kraftstoff-Moleküle auf Oxidator-Moleküle treffen. Die skalare Dissipationsrate χ beschreibt dabei die molekulare Mischungsgeschwindigkeit und projiziert den Strömungseinfluss auf den Mischungsbruchraum. Nach **Abbildung 4.8** sind insbesondere Zündprozesse und Flammenlöschungen sehr sensitiv bezüglich der skalaren Dissipationsrate. Typischerweise beschreibt χ Instationaritätseffekte. Für den Sonderfall $\chi = 0$ liegt eine Art homogene Reaktorverteilung im Mischungsbruchraum vor, so dass die Flamelet-Gleichungen sich auf ein nulldimensionales Problem vereinfachen:

$$\rho \frac{\partial y_i}{\partial \tau} = \dot{\rho}_i^c \quad (4.37)$$

Der Einfluss der Instationarität und der Streckung auf die Entwicklung eines Flamelets im Mischungsbruchraum wird in Form des Temperaturverlaufs in der **Abbildung 4.11** exemplarisch veranschaulicht. Zum Zeitpunkt $t = 0$ bestimmt sich die Temperaturverteilung im Z-Raum alleine aus den Temperaturen auf der Luft- ($T(Z = 0)$) und Kraftstoffseite ($T(Z = 1)$)⁹. Kurz nach erfolgter Zündung in leicht fetten Gemischzonen, brennt das Flamelet schnell durch, bis es schließlich seinen Gleichgewichtszustand (Stationarität) erreicht. Es bildet sich ein Temperaturmaximum in der Nähe stöchiometrischer Mischung ($Z \approx 0.062$). Durch den Einfluss der Diffusionseffekte (Steckung) wird Wärme zu den Rändern transportiert, in denen sonst keine reaktiven Prozesse stattfinden.

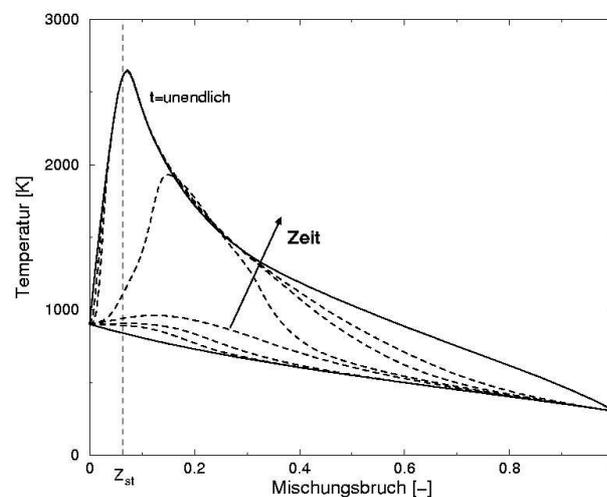


Abbildung 4.11: Zeitliche Entwicklung eines Flamelets im Mischungsbruchraum bei Annahme konstanter Streckung.

⁹Da die Anfangsbedingungen für die Enthalpie eine Gerade durch die beiden Randpunkte ist, weicht die Temperaturverteilung im Z-Raum aufgrund unterschiedlicher Mischungsverhältnisse von der Linearität ab.

Flamelet-Konzepte zur Simulation der dieselmotorischen Verbrennung

Das allgemeine Flamelet-Konzept bietet aufgrund der numerischen Entkopplung der Simulation von Strömungsmechanik und Chemie eine große Variantenvielfalt an Applikationsmöglichkeiten. Neben den oben aufgeführten chemischen Einflussgrößen kann hinsichtlich der Lokalität und der Interaktionsszenarien eine Differenzierung der Konzepte vorgenommen werden. Die Lokalität bezieht sich dabei auf die Anzahl der Flamelets und die Übergabe lokaler oder gebietsweises gemittelter Flamelet-Parameter. Bei der Interaktion kann zwischen **Post-Flamelets** und **Interaktiven Flamelets** unterschieden werden. Bei den Post-Flamelets werden die Flamelet-Ausgaben zum "Post-Processing" benutzt, um so beispielsweise Informationen über Schadstoffemissionen oder Reaktionsraten zu erhalten. Interaktive Flamelets ermöglichen eine ganzheitliche Simulation des Verbrennungsprozesses, inklusive Zündung, Wärmefreisetzung und Schadstoffbildung. Im Folgenden werden beide Möglichkeiten, zusammen mit Submodellen, näher vorgestellt:

Post-Flamelets und tabellierte Flamelets:

Bei diesem Konzept werden die stationären Flamelet-Gleichungen isoliert vom Strömungs-Code a-priori gelöst, um relevante Größen in Form von sogenannten **Flamelet-Bibliotheken** zu tabellieren. Diese beinhalten typischerweise Massenbrüche oder Reaktionsraten der interessierenden Spezies in Abhängigkeit des Mischungsbruchs und der Flamelet-Parameter. Diese Daten können dann zum reinen Post-Processing benutzt werden, um beispielsweise mittlere Schadstoffkonzentrationen zu berechnen. Liegen tabellierte Reaktionsraten vor, ist es zudem möglich, gemittelte Reaktionsraten zu bestimmen, die zur Schließung von Transportgleichungen dienen. Eine mittlere Reaktionsrate $\dot{\psi}$ ergibt sich nach Gleichung 4.31 aus:¹⁰

$$\dot{\psi}(\vec{x}, t) = \int_{Z=0}^{Z=1} \dot{\psi}(Z; p(\vec{x}, t), T_0(\vec{x}, t), \chi_{st}(\vec{x}, t)) \tilde{P}_Z(Z; \vec{x}, t) dZ \quad (4.38)$$

Der große Vorteil von Post-Flamelets liegt in der Möglichkeit, bei akzeptablem Rechenaufwand, lokal die Flamelet-Parameter zu berücksichtigen (z.B. $\chi_{st}(\vec{x}, t)$). Zusätzlich bietet das Konzept einen numerisch "einfach" umsetzbaren Weg, beliebig komplexe, detaillierte Reaktionskinetik und stationäre Diffusionsprozesse für dreidimensionale Strömungsrechnungen zu verwenden. Nachteilig ist, dass die Wärmefreisetzung alternativ modelliert werden muss. Basieren die Flamelet-Bibliotheken auf stationären Flamelet-Rechnungen, erlaubt dieses Konzept zudem keine Beschreibung von Instationaritätseffekten.

Repräsentative Interaktive Flamelets:

Mauß et.al. [63] konnten anhand einer numerischen Analyse der Flamelet-Gleichungen zeigen, dass sich nach schneller Änderung der skalaren Dissipationsrate nur langsam wieder ein stationärer Zustand einstellt. Obwohl für große Damköhler-Zahlen chemische Vorgänge sehr schnell den Störungen eines Strömungsfeldes folgen können, sind diffusive Flüsse und das Erreichen eines neuen Diffusions-Produktions-Gleichgewichts nicht unendlich schnell [91]. Speziell in der

¹⁰Hier wird von einer Gleichverteilung der skalaren Dissipationsrate ausgegangen, so dass nur über die β -PDF gewichtet wird.

Ausbrandphase nimmt die skalare Dissipationsrate so kleine Werte an, dass eine Relaxation zum stationären Gleichgewichtszustand innerhalb eines CFD-Zeitschritts nicht immer garantiert ist.

Um den Einfluss der zeitlichen Entwicklung der Flamelet-Parameter auf die Flammenstruktur zu berücksichtigen, wurde das Konzept der *repräsentativen interaktiven Flamelets (RIF)* entwickelt [87, 88, 91]. Jedes Flamelet wird dabei zeitgleich und interagierend mit dem Strömungs-Code gelöst und ist repräsentativ für ein Gebiet, bzw. für einen Bereich im Flamelet-Parameterraum, in dem die Flamelet-Parameter mit ausreichender Genauigkeit durch einen räumlichen Mittelwerte wiedergegeben werden können.

Abbildung 4.12 zeigt schematisch das konventionelle RIF-Konzept. Die Strömungsgleichungen werden mit dem CFD-Code, die Flamelet-Gleichungen mit dem Flamelet-Code gelöst. Aufgrund der numerischen Entkopplung und der Eindimensionalität im Mischungsbruchraum ermöglicht dieses Konzept ein *Subcyclen* des CFD-Zeitschritts im Flamelet-Code, um so die relevanten chemischen Zeitskalen (für Zündung circa $10^{-9}s!$) auflösen zu können. Die Kopplung zwischen CFD- und Flamelet-Code erfolgt über die Flamelet-Parameter, die durch statistische Mittelwertbildung über repräsentative Flamelet-Bereiche aus dem CFD-Code extrahiert werden. Umgekehrt koppelt der Flamelet- mit dem CFD-Code durch die Berechnung der lokal gemittelten Temperaturverteilung $\tilde{T}(\vec{x}, t)$, die zur Schließung des Gasphasengleichungssystems benötigt wird. Die Temperaturverteilung lässt sich iterativ mit Hilfe der allgemeinen Beziehung für die mittlere totale Enthalpie $\tilde{h}(\vec{x}, t)$

$$\tilde{h}(\vec{x}, t) = \sum_{i=1}^{nsp} \tilde{y}_i(\vec{x}, t) \cdot h_i(\tilde{T}(\vec{x}, t)), \tag{4.39}$$

und den mittleren Spezies-Massenbrüchen (siehe Gleichung 4.31)

$$\tilde{y}_i(\vec{x}, t) = \int_{Z=0}^{Z=1} y_i(Z) \tilde{P}_Z(Z; \tilde{Z}(\vec{x}, t), \tilde{Z}''^2(\vec{x}, t)) dZ \tag{4.40}$$

berechnen. Das konventionelle RIF-Konzept basiert folglich auf der Erhaltung der totalen Enthalpie im CFD-Code. Die totale Enthalpie ist eine chemisch invariante Größe. Daher benötigt ihre Erhaltungsgleichung keinen chemischen Quellterm.

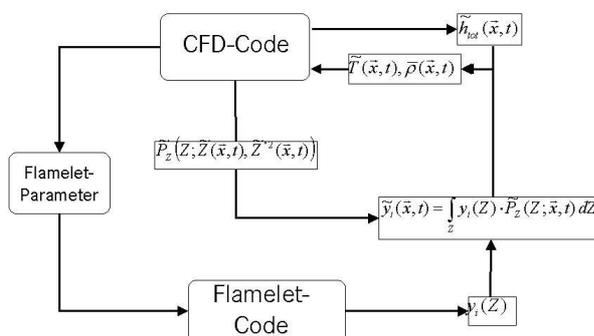


Abbildung 4.12: Lösungsstruktur des RIF-Konzepts bei Erhaltung der totalen Enthalpie im CFD-Code.

Im Rahmen dieser Arbeit wurde ein neues Konzept zur Implementierung des RIF-Modells in einen CFD-Code erarbeitet. Als Zielsetzung wurde dabei festgelegt, die Energieerhaltung nicht in Form der totalen Enthalpie sondern in Form der thermischen inneren Energie im physikalischen Raum zu lösen. Dadurch wird die KIVA-Konvention bewahrt, und die Voraussetzung geschaffen, unterschiedliche Modellansätze in einem Code zu vereinen, um so einen hohen Grad an Vergleichbarkeit der Modelle zu erreichen. Das Konzept ist im Anhang A ausführlich beschrieben.

Das RIF-Konzept, basierend auf einem repräsentativen Flamelet, wurde bereits mehrfach zur Berechnung von dieselmotorischen Verbrennungsprozessen appliziert (z.B. [88, 34, 38]). Druckindizierkurven und integrale Schadstoffkonzentrationen (NO_x - und Ruß) konnte dabei recht gut nachgerechnet werden. Allerdings erscheint eine korrekte lokale Verteilung der Konzentrationen eher als unwahrscheinlich [110]. Da nur ein interaktives Flamelet den gesamten Brennraum repräsentiert, basieren nach Gleichung 4.40 auch alle mittleren Spezies-Massenbrüche auf dieser Flamelet-Lösung. Lokale Unterschiede der mittleren Gemischverteilung im physikalischen Raum resultieren nur aus Differenzen des turbulenten Gemischzustands (β -Funktion!). Der Einfluss räumlich variierender Flamelet-Parameter, wie beispielsweise der skalaren Dissipationsraten, werden folglich vernachlässigt.

Multiple-RIFs:

Aufgrund von Inhomogenitäten der turbulenten Strömungs- und Mischungsfelder variiert beim Dieselmotor vor allem die skalare Dissipationsrate räumlich im Brennraum. Dies hat zur Folge, dass Masseteilchen mit anfänglich gleicher chemischer Zusammensetzung, unterschiedliche chemische Reaktionsverläufe erfahren. Zur Berücksichtigung dieser räumlichen Inhomogenität der skalaren Dissipationsrate und dem damit verbundenen unterschiedlichen zeitlichen Verläufen der chemischen Reaktionen von Masseteilchen, haben *Barths et.al.* [6, 8] das Multiple-Flamelet-Konzept entwickelt, das eine Erweiterung des RIF-Konzepts auf mehrere Flamelets darstellt.

Grundvorstellung des Modells ist es, die Auftrittswahrscheinlichkeit jedes Flamelets durch ein eigenes Skalarfeld \tilde{I}_l zu beschreiben. Jedes dieser Skalarfelder wird mit einem individuellen zeitlichen Verlauf für die Flamelet-Parameter und somit auch für die Flamelet-Lösung assoziiert. Die Flamelet-Parameter resultieren aus dem Pfad der Skalarfelder durch das Strömungsfeld. Um den Weg mehrerer Flamelets im turbulenten Strömungsfeld verfolgen zu können, werden Transportgleichungen für die Skalarfelder gelöst. Die Transportgleichung für die Favre-gemittelte Wahrscheinlichkeit \tilde{I}_l^{11} , zur Zeit t am Ort \vec{x} ein Flamelet l zu finden, wird durch folgende Konvektions-Diffusionsgleichung gegeben [8]:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{I}_l}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{u} \tilde{I}_l) = \nabla \cdot \left[\frac{\mu}{Sc_t} \nabla \tilde{I}_l \right] \quad (4.41)$$

Aufgrund des turbulenten Mischungsprozesses können lokal mehrere Teilchen (Flamelets) auftreten. Die Summe der Flamelet-Wahrscheinlichkeiten muss dabei folgende Trivialbedingung erfüllen:

¹¹ \tilde{I}_l kann auch als Favre-gemittelter Massenbruch des Flamelets l unter der Gesamtanzahl der Flamelets betrachtet werden.

$$\sum_{l=1}^{n_l} \tilde{I}_l(\vec{x}, t) = 1 \quad (n_l = \text{Gesamtanzahl der Flamelets}) \quad (4.42)$$

Zur Bestimmung der repräsentativen skalaren Dissipationsrate des Flamelets l , wird der konditionierte Mittelwert der skalaren Dissipationsrate nach Gleichung 4.27 zusätzlich mit der Wahrscheinlichkeit \tilde{I}_l des entsprechenden Flamelets l gewichtet [8]:

$$\hat{\chi}(Z_{st,l}) = \frac{\int_V \tilde{I}_l \bar{\rho}(\vec{x}) \chi(Z_{st})^{3/2}(\vec{x}) \tilde{P}(Z_{st}) dV'}{\int_V \tilde{I}_l \bar{\rho}(\vec{x}) \chi(Z_{st})^{1/2}(\vec{x}) \tilde{P}(Z_{st}) dV'} \quad (4.43)$$

Zur Berechnung der mittleren Spezies-Massenbrüche im physikalischen Koordinatensystem werden alle Flamelet-Anteile, gewichtet mit der Wahrscheinlichkeit zur Zeit t am Ort \vec{x} ein Flamelet l zu finden, aufsummiert:

$$\tilde{y}_i(\vec{x}, t) = \sum_{l=1}^{n_l} \tilde{I}_l(\vec{x}, t) \cdot \left(\int_{Z=0}^{Z=1} y_{i,l}(Z; \tilde{\chi}_{Z,l}) \tilde{P}_Z(Z; \tilde{Z}(\vec{x}, t), \tilde{Z}''^2(\vec{x}, t)) dZ \right) \quad (4.44)$$

Das Multiple-Flamelet-Konzept wurde ursprünglich zur verbesserten Simulation des Zündverhaltens entwickelt. Als wichtige Einflussgröße für den Zündprozess wurden Streckungseffekte identifiziert, die durch skalare Dissipationsraten repräsentiert werden (siehe **Abbildung 4.8**). Durch die Einführung mehrerer Flamelets können lokale Unterschiede der skalaren Dissipationsrate im Brennraum aufgelöst werden. *Barths* [8] schlägt eine **Aufteilung der Flamelets** basierend auf der Schwankung der konditionierten skalaren Dissipationsrate χ_{st} vor. Direkt nach Einspritzbeginn ist ein Flamelet ausreichend, da das Mischungsgebiet zwischen Luft und Kraftstoffdampf in dieser Phase klein ist. Für dieses Gebiet ist die Fluktuation der skalaren Dissipationsrate vernachlässigbar. Mit zunehmender Einspritzdauer dehnt sich das Mischungsfeld im Strömungsfeld aus. Der Wert von χ_{st} beginnt lokal um seinen Mittelwert im Flamelet-Bereich, der anfangs den ganzen Brennraum erfasst, zu schwanken. Übersteigt die Schwankung von χ_{st} einen vorgegebenen Schwellenwert, wird der Flamelet-Bereich aufgeteilt. Dem lokalen Niveau von χ_{st} entsprechend, enthält der neue Flamelet-Bereich alle Regionen, in denen χ_{st} niedriger ist als der Mittelwert von χ_{st} und umgekehrt. Die resultierenden Flamelets erben die Vorgeschichte des alten Flamelets. Allerdings erfahren sie ab diesem Zeitpunkt einen unterschiedlichen chemischen Reaktionsverlauf im Mischungsbruchraum, aufgrund der unterschiedlichen Pfade durch das turbulente Strömungsfeld. Die Flamelet-Aufteilung wird solange wiederholt, bis entweder die Varianz im Mischungsfeld homogenisiert ist¹², oder eine vordefinierte maximale Anzahl an Flamelets erreicht wurde [8]. Eine Obergrenze der Flamelet-Anzahl ist aufgrund des Rechenaufwands und der Speicheranforderung vorzugeben, was als Nachteil zu bewerten ist.

Auf Basis des Multiple-RIF Ansatzes hat *Hergart* [39] zur Berücksichtigung von Wandwärmeverlusten, einen sogenannten **Enthalpiedefekt** in das RIF-Konzept eingeführt. Der Enthalpiedefekt kann dabei als zusätzlicher Flamelet-Parameter verstanden werden. Ziel ist es, den Einfluss von Wandwärmeverlusten auf die Rußoxidation besser abzubilden, da diagnostische Ergebnisse vermuten lassen, dass speziell in Wandnähe erhöhte Rußemissionen aufgrund

¹²Sobald die Turbulenzproduktion des Strahls nachlässt, und die Mischung sich homogenisiert, reduziert sich auch die Varianz der skalaren Dissipationsrate.

von Flammenlöschungen resultieren. Der Enthalpiedefekt wird als Senkenterm in der Temperaturgleichung 4.19 des Flamelet-Codes berücksichtigt. Seine Verteilung im Mischungsbruchraum wird über den Wärmeübergangskoeffizient beschrieben, der den Link zwischen CFD- und Flamelet-Code herstellt. Die Simulationsstrategie basiert auf der Einführung mehrere Flamelets, um so den Wandwärmeeinfluss innerhalb des Brennraums zu differenzieren (z.B. wandnahe Zonen ↔ Muldeninnenbereich).

Das Multiple-Flamelet-Konzept ohne Enthalpiedefekt wurde von *Barths* [7] zur Berechnung eines PKW DE-Dieselmotors verwendet. Die Simulation mit nur einem Flamelet resultiert dabei in einer verzögerten Zündung mit anschließend starker Vormischverbrennung. Die Erklärung dafür liegt in der Verwendung nur eines repräsentativen Flamelets, das zur Beschreibung sämtlicher chemischen Prozesse im Brennraum herangezogen wird. Da die skalare Dissipationsrate überschätzt wird, kommt es zu einer verzögerten Zündung. Die anschließende starke Vormischverbrennung resultiert aus dem gleichzeitigen Zünden aller Regionen im Brennraum, mit nahezu stöchiometrischen Mischungsverhältnissen. Eine Simulation mit 9 Flamelets zeigt dagegen eine gute Übereinstimmung für den Zündverzug, sowie für die Wärmefreisetzung und die integralen Schadstoffemissionen. Hier hat jedes Flamelet seine eigene Vorgeschichte und folglich einen individuellen Verlauf der skalaren Dissipationsrate. Mehr als 9 Flamelets ergaben (zumindestens in integralen Größen) vernachlässigbare Veränderungen. *Hergart* [39] applizierte das Multiple-Flamelet-Konzept mit Enthalpiedefekt, um eine Teillastpunkt eines PKW-Dieselmotors nachzurechnen. Seine Ergebnisse legten nahe, dass der emittierende Ruß fast ausschließlich aus den wandnahen Bereichen resultiert, da dort nahezu keine Rußoxidation stattfindet. Nach *Hergart* konnten mit 8 Flamelets eine Konvergenz der Ergebnisse erreicht werden.

Das Multiple-Flamelet-Konzept bietet eine interessante Möglichkeit zur motorischen Verbrennungssimulation. Allerdings sind noch Fragen offen, was insbesondere das "*Flamelet-Management*" anbetrifft. Dazu zählen die Festlegung geeigneter Aufteilungsstrategien, Definition repräsentativer Flamelet-Parameter, das Konvergenzverhalten und der zu erwartende Rechenaufwand.

POST-Flamelets bieten eine attraktive Alternative zum RIF-Konzept. Dabei können Skalare oder Reaktionsraten tabelliert werden. Die Vorteile decken sich weitgehend mit denen des RIF-Konzepts, bis auf die fehlende Möglichkeit der ganzheitlichen Simulation der chemischen Vorgänge und der Berücksichtigung von Instationaritätseffekten. POST-Flamelets sind dem RIF-Konzept bezüglich Implementierungsaufwand, Rechenzeit, Speicheranforderung und Lokalität der Flamelet-Parameter überlegen.

Die turbulente Gemischverteilung wird typischerweise über eine β -Funktion beschrieben. Ihre Abbildungsgenauigkeit und die numerische Umsetzung des Integrals des Produktes aus PDF- und Flamelet-Lösung nehmen einen entscheidenden Stellenwert bei der Modellierung ein.

4.6 Phänomenologische Ansätze

Phänomenologische Konzepte basieren auf der Umsetzung empirischer Beobachtungen physikalischer und chemischer Zusammenhänge in einfache, mathematische Modelle. Das Spektrum der chemischen Prozesse wird meistens über simplifizierte, semi-empirische Teilmodelle

für die Zündung, Wärmefreisetzung und Schadstoffbildung abgebildet. Die physikalische und chemische Modelltiefe, sowie der Aufwand für die numerische Umsetzung und die Rechenzeit sind in der Regel erheblich geringer als für detaillierte Ansätze. Zur Beschreibung der zeitlichen und räumlichen Evolution chemischer Prozesse werden häufig instationäre Bilanzgleichungen für Spezies und sogenannte Pseudo-Spezies gelöst. Pseudo-Spezies bezeichnen nicht real existierenden Spezies. Sie repräsentieren beispielsweise eine Gruppe von Spezies mit ähnlichen Grundeigenschaften (z.B. Radikale). Bei Vernachlässigung der gemittelten laminaren Transportterme entsprechen ihre statistischen Bilanzgleichungen formal der allgemeinen Favre-gemittelten Transportgleichung 2.40. Die Hauptschwierigkeit liegt wieder in der Schließung des chemischen Quellterms. Im Folgenden sollen verschiedene Modellierungsansätze für die Zündung und Verbrennung kurz vorgestellt werden, ohne dabei zu sehr ins Detail zu gehen.

Beliebte semi-empirische Modellierungsansätze für die Selbstzündung sind das **Shell-Modell** [33], der **4-Schritt Mechanismus** [71] sowie **Eingleichungsmodelle** [2]. Das Shell-Modell und der 4-Schritt Mechanismus entsprechen stark reduzierten Mechanismen, die über wenige Reaktionsgleichungen versuchen, chemische Reaktionsszenarien zwischen den Pseudo-Spezies zu beschreiben. Der Übergang zum Verbrennungsmodell findet üblicherweise bei einer vorgegebenen Grenztemperatur statt [51]. Bei den Eingleichungsmodellen wird direkt die Zündverzugszeit mit Hilfe von nur einer Arrheniusbeziehung in Abhängigkeit der lokalen Werte für Druck, Temperatur und Gemischzusammensetzung berechnet. Zur Berücksichtigung lokaler Effekte wird eine Indikatorspezies eingeführt, die als Maß für die Radikalbildung betrachtet werden kann. Die Reaktionsrate bestimmt sich aus der Inversen der Zündverzugszeit. Die Aktivierung des Verbrennungsmodells erfolgt bei Überschreitung eines vordefinierten, empirischen Grenzwerts für die lokale Indikatorkonzentration.

Zündprozesse beim Dieselmotor sind hoch komplexe, chemische und physikalische Vorgänge (beispielsweise Mehrstufenzündung). Aufgrund der sehr reduzierten Reaktionskinetik oder der rein phänomenologischen Betrachtungsweise ist den bisher beschriebenen Modellen gemeinsam, dass sie die problemspezifische Adaption von zahlreichen Modellparametern erfordern. Meist werden diese semi-empirischen Ansätze ohne jegliche Turbulenz-Berücksichtigungen in den CFD-Code implementiert. Aus diesen Gründen sind die vorgestellten Modelle nur bedingt oder gar nicht zur Vorausberechnung von Zündprozessen geeignet. Mehrstufige Zündszenarien, wie sie beispielsweise bei homogenen Brennverfahren zu beobachten sind, können mit diesen Modellen nicht abgebildet werden.

Phänomenologische Verbrennungsmodelle werden in der Regel nach erfolgter Zündung aktiviert, um die Stoffumsetzung einer begrenzten Anzahl von Systemspezies und die damit verbundene Wärmefreisetzung zu beschreiben. Einen der ersten Ansätze lieferten die sogenannten **Eddy-Breakup-(EBU)-Modelle**. Sie basieren auf einer Einschrittkinetik bei der Kraftstoff und Sauerstoff irreversibel zu Produkten reagieren. *Spalding* [107] führte dabei die Vorstellung ein, die chemische Zeitskala durch die turbulente Zeitskala $\bar{k}/\tilde{\epsilon}$ zu ersetzen. Folglich ist die Verbrennung rein Mischungskontrolliert.¹³ Eine Erweiterung des Standard-EBU Modells stellt das von *Magnussen* entwickelte **Eddy-Dissipation-Modell** [62] dar. Dieses Modell geht von der Vorstellung aus, dass in einer Diffusionsflamme sich Brennstoff und Luft zunächst in getrennten Wirbeln befinden, die erst dissipieren müssen, bevor eine chemische Reaktion überhaupt stattfinden kann. Daher werden zwei getrennte Dissipations- bzw. Reaktionsraten für die Kraftstoff- und Sauerstoffwirbel berechnet, indem die mittlere Kraftstoff- und Sauerstoffkonzentration in

¹³Voraussetzung für diese Annahme ist entsprechend dem Flamelet-Ansatz die Bedingung $Da \gg 1$.

Betracht gezogen werden. Um zusätzlich die Vormischverbrennungsphase abbilden zu können, fügte *Magnussen* [62] noch eine dritte Reaktionsrate hinzu, die proportional zur Produktkonzentration ist. Die Produktkonzentration charakterisiert dabei den Reaktionsfortschritt. In der frühen Phase der Verbrennung ist die Produktkonzentration sehr klein, so dass die dritte Reaktionsrate geschwindigkeitsbestimmend wird. Die Reaktionsrate, d.h. die Kraftstoffumsetzrate, bestimmt sich beim *Eddy-Dissipation Modell* demnach aus folgender Beziehung:

$$\tilde{\rho}_f = A_{\text{EBU}} \bar{\rho} \frac{\epsilon}{k} \cdot \min \left[\tilde{y}_f, \frac{\tilde{y}_{\text{O}_2}}{\nu_{st}}, B_{\text{EBU}} \frac{\tilde{y}_p}{1 + \nu_{st}} \right] \quad (4.45)$$

Hier indiziert f den Kraftstoff, O_2 den Sauerstoff, p die Produkte und ν_{st} den Stöchiometrie-koeffizienten. A_{EBU} und B_{EBU} repräsentieren Modellkonstanten, die problemspezifisch adaptiert werden müssen.

Einen ähnlichen phänomenologischen Ansatz zur Simulation der Dieselerverbrennung liefert das **Mixing-Timescale Modell** [51], das aus dem **Laminar-and-Turbulent Characteristic-Time Modell** zur Berechnung der Otto-Verbrennung [1] abgeleitet wurde. Ausgangspunkt ist die auf den lokalen thermochemischen Gleichgewichtszustand bezogene Formulierung des Ensemble-gemittelten chemischen Quellterms der Spezies i :

$$\frac{d\tilde{y}_i}{dt} = -\frac{\tilde{y}_i - \tilde{y}_i^{eq}}{\tau} \quad (4.46)$$

\tilde{y}_i^{eq} entspricht dem mittleren, thermochemischen Gleichgewichtsmassenbruch der Spezies i in Abhängigkeit der Thermodynamik und der Elementenbilanz. Somit stellt \tilde{y}_i^{eq} einen Referenz-zustand dar, der einem Grenzwert gleich kommt. τ entspricht einer allgemeinen Zeitskala, die die Zeit bestimmt, bis der Referenzzustand erreicht ist. Man spricht von einer allgemeinen Zeitskala, da τ sich aus der Summe einer charakteristischen chemischen und turbulenten Zeit berechnet:

$$\tau = \tau_{\text{chem}} + f \cdot \tau_{\text{turb}} \quad (4.47)$$

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

$$\tau_{\text{chem}} = A^{-1} (y_{\text{C}_x\text{H}_y})^{0.75} (y_{\text{O}_2})^{-1.5} e^{\frac{E_a}{RT}} \quad (4.48)$$

Für die Diffusionsverbrennung ist die turbulente Zeitskala τ_{turb} relevant. Entsprechend den EBU-Modellen [107] ist sie proportional zur turbulenten Mischungszeit und kann mit Hilfe der Turbulenzgrößen berechnet werden:

$$\tau_{\text{turb}} = c^* \cdot \frac{k}{\epsilon} \quad (4.49)$$

Der in Gleichung 4.47 definierte Faktor f regelt den Übergang von der Vormisch- zur Diffusionsverbrennung:

$$f = \frac{1 - e^{-r}}{1 - e^{-1}} \quad (4.50)$$

Der Parameter r beschreibt den Reaktionsfortschritt. Er entspricht dem Massenanteil der bereits gebildeten Produkte an der Gesamtmasse aller reaktiven Spezies (d.h. ohne N_2):

$$r = \frac{y_{\text{Produkte ohne } N_2}}{1 - y_{N_2}} \quad (4.51)$$

Somit entspricht die charakteristische Zeitskala τ bei Brennbeginn der laminaren Zeitskala, da noch keine Produkte existieren ($f(r=0) = 0$) (\rightarrow Vormischverbrennung). Mit fortschreitender Verbrennung wachsen r und f an und gleichzeitig gewinnt die turbulente Zeitskala an Relevanz (\rightarrow Diffusionsverbrennung).

Zur Berechnung der Zeitskalen τ_{chem} und τ_{turb} über die Gleichungen 4.48 und 4.49 muss der Modellparameter A (und manchmal c^*) in Abhängigkeit vom Betriebspunkt angepasst werden (siehe auch Abschnitt 6.3.2 und 7.2).

Abschließend bleibt festzuhalten, dass phänomenologische Ansätze zur Simulation der dieselmotorischen Zündung und Verbrennung intuitiv einfach und sehr speicher- und rechenzeitschonend sind. Allerdings eignen sie sich nicht zur Vorausberechnung, da eine Adaption von Modellparametern bereits für kleine Applikationsvariationen notwendig wird. Dies ist unter anderem darin begründet, dass chemische Prozesse und deren Interaktion mit der turbulenten Strömung nur sehr einfach oder gar nicht abgebildet werden. So wird in keinem der beschriebenen Modelle die turbulente Gemischverteilung berücksichtigt.

Kapitel 5

Modellierung der Schadstoffbildung

Beim DE-Dieselmotor enthält das Motorabgas aufgrund der unvollständigen Verbrennung neben Kohlendioxid (CO_2) und Wasser (H_2O), zusätzliche Schadstoffkomponenten in Form von unverbrannten Kohlenwasserstoffen (HC), Kohlenmonoxid (CO), Wasserstoff (H_2), Stickoxide (NO_x) und Ruß.¹ Die Minimierung der Schadstoff-Emissionen ist ein entscheidendes Ziel bei der Brennverfahrensentwicklung, da die Emissionen unter anderem gesetzlich reguliert sind. Von zentraler Bedeutung sind dabei insbesondere die NO_x und Rußemissionen. Diese Arbeit beschränkt sich auf deren Modellierung.

5.1 Modellierung der Stickoxidbildung

Unter dem Sammelbegriff *Stickoxide* werden die Anteile von Stickstoffmonoxid (NO) und Stickstoffdioxid (NO_2) zusammengefasst. NO liefert dabei den weitaus größeren Anteil. Die NO-Bildung verläuft im Vergleich zu den strömungsmechanischen Prozessen sehr langsam (vgl. mit **Abbildung 4.3**), daher ist der Bildungsprozess im Gegensatz zur Wärmefreisetzung reaktionskinetisch kontrolliert. Bei den Bildungsmechanismen der Stickoxide unterscheidet man im Wesentlichen drei Mechanismen, nämlich die Bildung aus Luftstickstoff bei hohen Temperaturen (**Thermisches NO**), bei niedrigen Temperaturen (**Promptes NO**) und die Bildung aus brennstoffgebundenen Stickstoff [117]. Da in dieser Arbeit ausschließlich die Verbrennung von C_xH_y -Brennstoffen (d.h. ohne N-haltige Komponenten) betrachtet wird, entfällt die Modellierung der Bildung aus brennstoffgebundenen Stickstoff. Die Prompte-NO Bildung gewinnt für leicht fette Gemischzonen an Bedeutung und findet primär in der Haupt-Reaktionszone statt, da Acetylen als ein Vorläufer des CH-Radikals gilt. Dieses CH-Radikal reagiert mit Luftstickstoff zu Blausäure (HCN), welche dann schnell zu NO weiterreagiert (Einzelheiten siehe z.B. [117]). Neben den NO-Bildungsprozessen sind auch NO-Reduktionsprozesse bekannt, von denen der **Reburn-Mechanismus** wesentlich ist (Einzelheiten siehe z.B. [30]). Detaillierte Mechanismen, die sämtliche Bildungs- und Reduktionspfade der Stickoxide beschreiben, sind beispielsweise [106, 12]. Allerdings können diese aufgrund der hohen Speziesanzahl für mehrdimensionale Simulationen nicht direkt appliziert werden. Flamelet- oder Progressvariablen-Ansätze bieten eine Möglichkeit, dennoch solch detaillierte Reaktionsschemata für 3D-Probleme zu verwenden.

Bei der konventionellen dieselmotorischen Verbrennung ist der Reaktionspfad der thermischen NO-Bildung der klar dominierende Prozess. Er kontrolliert über 90-Prozent der gesamt-

¹Die im Kraftstoff enthaltenen Verunreinigungen (z.B. Schwefel) werden in dieser Arbeit vernachlässigt.

ten NO-Bildung [67]. Die kinetische Beschreibung der thermischen NO-Bildung ist weitaus einfacher als die prompte NO-Bildung. Sie ist über den erweiterten *Zeldovich-Mechanismus* definiert:



Die ersten beiden Elementarreaktionen wurden bereits 1946 von *Zeldovich* vorgeschlagen [125].² Der Ausdruck *thermisches NO* basiert auf der ersten Gleichung des Mechanismus. Aufgrund der starken Dreifachbindung des Stickstoffmoleküls beinhaltet die Reaktionsgeschwindigkeit dieser Gleichung eine hohe Aktivierungsenergie, so dass erst ab hohen Temperaturen die Reaktion ausreichend schnell abläuft. Die dritte Gleichung des Mechanismus wurde erst später ergänzt, um den Bildungsweg über das OH-Radikal zu berücksichtigen. Entsprechend der Elementargleichungen 5.1-5.3 begünstigen hohe Temperaturen und magere Gemischzonen (hoher Anteil von O₂, N₂, OH, ...) die thermische NO-Bildung. Daher findet beim Dieselmotor die Bildung auch vorzugsweise in mageren Gebieten hinter der Haupt-Reaktionszone statt.

Die globale Reaktionsrate für NO wird in dieser Arbeit unter der Annahme von Quasistationarität für den molekularen Stickstoff N, sowie der Annahme partiellen Gleichgewichts für die Radikale O, H und OH (siehe [117]) entsprechend [40] bestimmt. Der Mechanismus 5.1-5.3 benötigt zudem zur Schließung den reaktionskinetischen Konstantensatz für die Arrhenius-Gleichungen 4.3 der jeweiligen Hin- und Rückreaktionen. In der Literatur sind dazu zahlreiche unterschiedliche Vorschläge zu finden, die zum Teil erstaunlich stark differieren. Eine globale Auflistung von gängigen Konstantensätzen ist in [30] gegeben. Aufgrund dieser großen Unterschiede wurde im Rahmen dieser Arbeit eine Untersuchung durchgeführt, mit dem Ziel, den "physikalischsten Konstantensatz" zu identifizieren. Dazu wurden zwei Bewertungskriterien definiert:

1. Globale Bildungsgeschwindigkeit
2. Thermochemisches Gleichgewicht

Entscheidend für die globale Bildungsgeschwindigkeit ist wie bereits erwähnt die erste Elementarreaktion 5.1. Da die experimentelle Erfassung der globalen Reaktionsgeschwindigkeit sehr schwierig ist, wurde ein detailliertes Reaktionsschemata als Vergleichsbasis herangezogen. Da das thermochemische Gleichgewicht nur von der Elementenbilanz, der Temperatur und dem Druck abhängig ist (siehe Abschnitt 4.1.2), muss bei Applikation des *Zeldovich-Mechanismus* der errechnete Gleichgewichtswert dem des thermochemischen entsprechen.

Abbildung 5.1 zeigt eine Gegenüberstellung der zeitlichen *NO*-Verläufe, berechnet mit einem detaillierten Mechanismus (*GRI-MECH 3.0* [106]) und unterschiedlichen *Zeldovich-Mechanismen*. Die reaktionskinetischen Konstanten wurde dabei zum einem aus dem detaillierten *GRI-MECH 3.0* extrahiert und zum anderen nach *Heywood* [40] definiert. Zusätzlich ist der Gleichgewichtswert dargestellt (berechnet nach [77]). In den meisten kommerziellen CFD-Codes werden die reaktionskinetischen Konstanten nach *Heywood* appliziert [40]. Allerdings

²Daher auch die Alternativbezeichnung als *Zeldovich-NO*.

ist aus **Abbildung 5.1** ersichtlich, dass damit der Gleichgewichtswert erheblich unterschätzt wird, und die *NO*-Bildung langsam abläuft. Der extrahierte GRI-MECH Mechanismus dagegen, nähert sich asymptotisch dem Gleichgewichtswert und zeigt im Vergleich zum detaillierten Mechanismus ähnliche *NO*-Bildungsraten.

Die Untersuchungen wurden mit mehreren, aus der Literatur bekannten, reaktionskinetischen Datensätzen für den erweiterten Zeldovich-Mechanismus durchgeführt (siehe dazu [66]). Dabei offenbarte sich, dass einige reaktionskinetische Datensätze das Gleichgewichtskriterium nicht erfüllen. Der Grund ist eine thermochemische Inkonsistenz der Elementarreaktionen bzgl. der Daten für Hin- und Rückreaktionen. Grundsätzlich müssen zur eindeutigen Beschreibung eines reversiblen Reaktionsmechanismus, nur die Geschwindigkeitskoeffizienten der Hinreaktionen angegeben werden, da sich die Geschwindigkeiten der Rückreaktionen zwangsläufig aus der Gleichgewichtsbedingung 4.5 mit Hilfe der Gleichgewichtskonstanten als Funktion des Drucks und der Temperatur ergeben. Diese Zwangsbedingung ist wie bereits dargestellt, für viele reaktionskinetische Vorschläge aus der Literatur nicht erfüllt. Zu bemerken bleibt auch, dass die Thermodatenbanken reaktionskinetischer Mechanismen (z.B. Wärmekapazitäten) sich zum Teil erheblich unterscheiden, obwohl die thermodynamischen Eigenschaften von Einzelspezies eindeutig sind. Dies lässt vermuten, dass die Thermodaten teilweise als *Tuning-Parameter* 'missbraucht' werden.

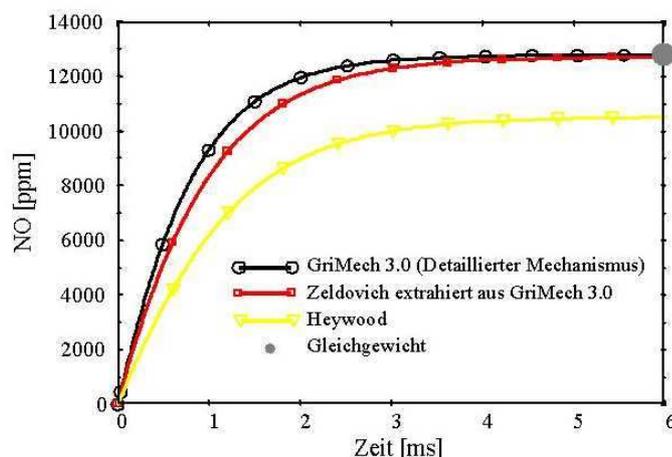


Abbildung 5.1: Gegenüberstellung: *NO*-Berechnung mit Hilfe detaillierter Reaktionskinetik (GriMech3.0) und erweitertem Zeldovich-Mechanismus. Reaktionskinetische Daten für Zeldovich-Mechanismus nach Heywood und extrahiert aus GriMech3.0 [54].

5.2 Modellierung der Rußbildung und Rußoxidation

Neben der Emission von Stickstoffoxiden stellen die Rußemissionen bei modernen DE-Dieselmotoren eine weitere Hauptproblematik dar. Aufgrund der karzinogenen und mutagenen Wirkung des Rußes ist eine Reduzierung der Rußemissionen von entscheidender Bedeutung.

Die Rußbildung ist ein sehr komplexer zweiphasiger chemischer und physikalischer Vorgang, bei dem sich während der Gasphasenverbrennung innerhalb weniger Millisekunden fe-

ste Partikeln mit einer Größenordnung von bis zu (hundert) Millionen Kohlenstoffatomen formieren können. Obwohl ein erheblicher Forschungsaufwand betrieben wird, sind die Detailvorgänge immer noch nicht zufriedenstellend verstanden [68]. Eine Problematik besteht beispielsweise in der eindeutigen Festlegung des Übergangs von der Gasphase zur (Ruß-) Partikelphase. Nach dem heutigen Wissensstand entstehen die ersten dreidimensionalen Rußpartikel durch reaktive Koagulationen³ planarer polyzyklischer aromatischer Kohlenwasserstoffe (PAH) [11, 64]. Grundsätzlich können Rußbildungs- und Rußabbauprozesse unterschieden werden, die größtenteils simultan ablaufen. *Mauß* [64] unterscheidet bei den Bildungsprozessen neben der zuvor beschriebenen Partikelbildung (Nukleation), das Oberflächenwachstum und die Koagulation. Das Oberflächenwachstum lässt sich weiter aufteilen, in die Kondensation von Molekülen aus der Gasphase an der Partikeloberfläche sowie der Anlagerung von Kohlenwasserstoffen infolge von heterogenen Oberflächenreaktionen. Die Rußabbauprozesse separieren sich in die Oxidation und Fragmentierung, wobei die Oxidation durch heterogene Reaktionen mit Sauerstoffmolekülen (O_2) 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.

Die Rußentwicklung ist wie die Stickoxid-Bildung ein reaktionskinetisch kontrollierter Prozess. Zur Rußmodellierung können wieder phänomenologische und detaillierte Ansätze differenziert werden. Letztere lassen sich entsprechend dem Detaillierungsgrad weiter unterteilen. Bei den **phänomenologischen Modellen** werden die physikalischen und chemischen Prozesse überhaupt nicht oder nur sehr eingeschränkt aufgelöst. Aufgrund ihres geringen Rechenaufwands können sie zur Simulation rechenintensiver 3D-Probleme eingesetzt werden. Man erhofft sich dadurch, Trendaussagen für beispielsweise den Ruß-NO-Trade-Off machen zu können. So beschreibt das in kommerziellen CFD-Codes häufig implementierte **Hiroyasu-Modell** [75, 123] die komplexen Prozesse der Rußbildung und -oxidation jeweils durch nur eine Gleichung in Arrhenius-Form. An Ermangelung detaillierter Information über Spezieszusammensetzung und insbesondere Radikalkonzentration wird die Rußbildung dabei proportional zur Kraftstoffkonzentration, und die Rußoxidation proportional zur Sauerstoffkonzentration angenommen. Praktisch müssen die kinetischen Konstanten der Geschwindigkeitskoeffizienten problemspezifisch adaptiert werden, so dass eine Vorausberechnung unmöglich ist. Des Weiteren liefert das Modell keine Detaillaussagen über die Teilprozesse der Rußentwicklung. Ein weiterer phänomenologischer Ansatz stammt von *Patterson* und *Reitz* [79]. Dieses Modell kombiniert das Teilmodell der Rußbildung nach *Hiroyasu* mit dem Modell für die Rußoxidation nach *Nagle* und *Stickland-Constable* [73]. Zur Modellierung der Rußoxidation wird wiederum nur die Sauerstoffkonzentration berücksichtigt, allerdings diesmal über drei globale Reaktionsgleichungen, die zwei unterschiedliche reaktive Zentren auf der Rußoberfläche in Betracht ziehen. Die Liste der phänomenologischen Modelle ließe sich beliebig erweitern, wobei die für das Hiroyasu-Modell beschriebenen Vor- und Nachteile im Wesentlichen erhalten bleiben.

Die **detaillierte Rußmodellierung** ist eine sehr anspruchsvolle Aufgabe. Es wird dabei das Ziel verfolgt, die Teilprozesse der Rußbildung und -oxidation physikalisch und chemisch exakt, abzubilden. Eine Übersicht gängiger Ansätze zur quantitativen Beschreibung der Teilprozesse ist in [11] aufgeführt. In der Praxis erfolgt die Simulation der Rußemissionen in der Regel über eine 2-Schritt-Näherung: Im ersten Schritt werden die Gasphasenspezies (Wärmefreisetzung)

³Reaktive Koagulationsprozesse beschreiben das Zusammenstoßen und Verschmelzen von Molekülketten und Partikeln.

und rußrelevante Zwischenprodukte über einen detaillierten Gasphasenmechanismus quantifiziert. Diese Spezies dienen als Anfangsbedingungen für den zweiten Schritt, bei dem die eigentliche Rußberechnung erfolgt. Demnach stellt der Rußmechanismus eine Art von "add-on" zum Gasphasenmechanismus dar. Es ist leicht einzusehen, dass die resultierende Rußmenge sehr sensitiv gegenüber den chemischen Prozessen in der reinen Gasphase ist. Daher setzt eine quantitative Berechnung der Rußemission bereits eine hohe Genauigkeit bei der Berechnung der Gasphase voraus, wie sie bis heute nur schwer erreicht wird.

Mit Hilfe der zu Beginn eingeführten Teilprozesse der Rußentwicklung kann der zeitliche Verlauf der Teilchenzahldichte N^s und des Rußvolumenanteils f_{v_s} über folgende Differentialgleichungen beschrieben werden (vgl. mit [64]):

$$\frac{dN^s}{dt} = \text{Partikelbildung} - \text{Koagulation} - \text{Oxidation} - \text{Fragmentierung} \left[\frac{\text{Teilchen}}{V_{ges} \cdot \text{Zeit}} \right] \quad (5.4)$$

$$\begin{aligned} \frac{df_{v_s}}{dt} = & \text{Partikelbildung} + \text{Kondensation} \\ & + \text{Oberflächenwachstum} - \text{Oxidation} - \text{Fragmentierung} \left[\frac{V_{Ru\beta}}{V_{ges} \cdot \text{Zeit}} \right] \end{aligned} \quad (5.5)$$

Da das theoretisch mögliche Größenspektrum der Rußpartikel unendlich groß ist, müssten zur direkten Auflösung aller Größenklassen unendlich viele Bilanzgleichungen (z.B. Gleichung 4.18 mit $y_i^s = \text{Rußmassenbruch der Größenklasse } i$) gelöst werden. Als Alternative erweist sich die Bilanzierung der statistischen Momente M_r^s der PDF der Partikelmassen [26]:

$$M_r^s = \sum_{i=1}^{\infty} i^r N_i^s, \quad (r = 0, 1, 2, \dots, \infty) \quad (5.6)$$

Dabei entspricht N_i^s der Teilchenzahldichte der Rußpartikel mit einer Masse von $m_i = i \cdot m_1$, wobei m_1 die kleinste im Ruß auftretende Masseneinheit darstellt. Da das statistische Moment M_r^s in linearer Weise mit dem Rußmassenbruch $y_i^s = \text{verknüpft}$ ist ($N_i^s = \rho y_i^s / W_i^s$, mit $W_i^s = \text{molare Rußmasse der Größenklasse } i$) lassen sich aus der Gleichung 4.18 leicht die Bilanzgleichungen für die statistischen Momente M_r^s im Mischungsbruchraum herleiten:

$$\rho \frac{\partial M_r^s / \rho}{\partial \tau} = \rho \frac{\chi_{st}}{2} \frac{\partial^2 M_r^s / \rho}{\partial Z^2} + \dot{M}_r^s \quad (5.7)$$

Die Quellterme \dot{M}_r^s müssen modelliert werden. Sie sind Funktionen der oben aufgeführten Teilprozesse. Modellierungsansätze sind u.a. in [11] beschrieben.

Die ersten beiden statistischen Momente charakterisieren globale Rußgrößen. Nach Gleichung 5.6 repräsentiert das nullte Moment ($r = 0$) die gesamte Teilchenzahldichte N^s ,

$$M_0^s = \sum_{i=1}^{\infty} N_i^s = N^s \quad (5.8)$$

und das erste Moment ($r = 1$) eine lineare Funktion zur Berechnung des Rußvolumenbruchs f_v^s

$$M_1^s = \sum_{i=1}^{\infty} i N_i^s = f_v^s \cdot \frac{\rho_s}{m_1} \quad (\text{mit der Rußdichte } \rho_s = 1800 \text{ kg/m}^3). \quad (5.9)$$

Wird für die PDF der Partikelmassen eine logarithmische Normalverteilung vorausgesetzt, lässt sich ihr funktionaler Verlauf über den Mittelwert und die Varianz ausdrücken [64]. Die mittlere Masse der Rußpartikel und damit der Mittelwert der Partikelmassen-PDF berechnet sich aus dem Verhältnis des ersten und nullten Moments ($= M_1^s/M_0^s$). Die Varianz ergibt sich ebenfalls aus diesen Größen. Der Vorteil des PDF-Ansatzes liegt darin, dass die Bilanzierung aller höheren Momente vermieden wird.

Detailliertes Rußquellterm Flamelet-Library Modell (PDF-Rußmodell)

Ebenso wie die NO_x -Bildung, ist auch die Rußentwicklung ein reaktionskinetisch kontrollierter Prozess (siehe **Abbildung 4.3**). Das PDF-Rußmodell⁴ wurde von *Mauß et.al.* [48, 18] entwickelt und basiert auf einem Post-Flamelet-Konzept.

Zur Applikation des Modells für 3D-CFD Berechnungen muss eine zusätzliche Bilanzgleichung für den Favre-gemittelten Rußmassenbruch \tilde{y}_s im physikalischen Raum (vgl. mit Gleichung 2.55) gelöst werden:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{y}_s}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{u} \tilde{y}_s) = \nabla \cdot \left[\frac{\mu}{Pr_t^s} \nabla \tilde{y}_s \right] + \rho_s \tilde{f}_v^s \quad (5.10)$$

Nach [65] kann für die turbulente Prandtl-Zahl des Rußes Pr_t^s der konstante Wert 1.4 gesetzt werden. Die Hauptschwierigkeit liegt wieder in der Modellierung des mittleren chemischen Quellterms \tilde{f}_v^s . Beim PDF-Rußmodell berechnet sich dieser aus den Reaktionsraten der jeweiligen Einzelprozesse [48, 18]:

$$\tilde{f}_v^s = \underbrace{\tilde{f}_{v,pb}^s}_{\text{Partikelbildung}} + \underbrace{\tilde{f}_{v,ow}^s}_{\text{Oberflächenwachstum}} - \underbrace{\tilde{f}_{v,ox}^s}_{\text{Oxidation}} - \underbrace{\tilde{f}_{v,fr}^s}_{\text{Fragmentierung}} \quad (5.11)$$

Zur Berechnung der mittleren chemischen Quellterme der Einzelprozesse werden der Mischungsbruch Z und die skalare Dissipationsrate χ als statistisch unabhängig angenommen. Für bekannte Wahrscheinlichkeitsdichteverteilungen für Z und χ berechnet sich die mittlere Reaktionsrate für die Partikelbildung über folgende Integration:

$$\tilde{f}_{v,pb}^s = \frac{1}{\bar{\rho}} \int_0^\infty \int_0^1 \rho(Z, \chi) \dot{f}_{v,pb}^s P(Z) P(\chi) dZ d\chi \quad (5.12)$$

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

$$\tilde{f}_{v,i}^s = \frac{1}{\bar{\rho}} \int_0^\infty \int_0^1 \rho(Z, \chi) \tilde{f}_v^s \left[\frac{\dot{f}_v^s}{f_v} \right]_i P(Z) P(\chi) dZ d\chi \quad (\text{mit } i = \text{ow, ox, fr}) \quad (5.13)$$

⁴PDF-Rußmodell wurde in dieser Arbeit als Modellbezeichnung gewählt, da das Modell auf einem PDF-Ansatz basiert.

Die turbulente Gemischverteilung kann wieder über eine β -Funktion (siehe Gleichung 4.28) angenähert werden. Zur Modellierung der PDF der skalaren Dissipationsrate $P(\chi)$ im physikalischen Raum wird typischerweise eine Lognormalverteilung angenommen [65]

$$P(\chi) = \frac{1}{\chi\sigma_\chi\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{(\ln\chi - \mu_\chi)^2}{2\sigma_\chi^2}\right], \quad (5.14)$$

mit den Momenten

$$\mu_\chi = \ln\tilde{\chi} - \frac{\sigma_\chi^2}{2}, \quad \text{mit } \tilde{\chi} = c_\chi \frac{\tilde{\epsilon}}{\tilde{k}} \tilde{Z}''^2 \quad (5.15)$$

$$\sigma_\chi^2 = 0.5 \ln\left(Re_t^{1/2}\right), \quad \text{mit } Re_t^{1/2} = \frac{\tilde{\rho}\tilde{k}^2}{\mu\tilde{\epsilon}}. \quad (5.16)$$

Zur Bestimmung der laminaren Reaktionsraten $f_{v,i}^s$ aus den Gleichungen 5.12 und 5.13 wird beim PDF-Rußmodell ein Flamelet-Ansatz appliziert. In Abhängigkeit der Flamelet-Parameter Druck, Oxidator-Temperatur, skalare Dissipationsrate und AGR-Grad werden die stationären Flamelet-Gleichungen inklusive der Bilanzgleichungen für die Rußmomente im Mischungsbruchraum a-priori gelöst, und als Ergebnis die Reaktionsraten der Einzelprozesse tabelliert. Da diese Bibliothek sehr speicheraufwändig und in der Applikation (Suchvorgang, Interpolation) sehr rechenintensiv ist, wurden analytische Funktionen der Quellterme in Abhängigkeit der Flamelet-Parameter abgeleitet [48, 18]⁵ und anhand von detaillierten Rechenergebnissen validiert.

Zur Generierung der in dieser Arbeit applizierten analytischen Library [65] wurde ein detaillierter n-Heptan-Gasphasen-Mechanismus verwendet, der um ein detailliertes Rußmodell [27, 64] ergänzt wurde. Der Bereich der Flamelet-Parameter ist in Tabelle 5.1 zusammengefasst.

Kraftstofftemperatur $T(Z=1)$	335 [K]
Oxidatortemperatur $T(Z=0)$	300 - 1200 [K]
Druck p	1 - 200 [bar]
Skalare Dissipationsrate χ	0.01 - χ_q [s^{-1}]
AGR-Rate	0 - 40 [%]

Tabelle 5.1: *Flamelet-Parameterbereich für PDF-Rußmodell (χ_q entspricht der skalaren Dissipationsrate, ab der Quenching auftritt). Bei der Berechnung der Library wurde der Mischungsbruchraum von $Z=0$ bis $Z=1$ in 200 Intervalle diskretisiert [65].*

⁵Im Wesentlichen wurden die laminaren Reaktionsraten im Mischungsbruchraum auf β -Funktionen gefittet.

Kapitel 6

Progress-Ansatz zur Simulation der dieselmotorischen Verbrennung

In diesem Kapitel wird ein durchgängiges Konzept zur Modellierung der dieselmotorischen Verbrennung vorgestellt, das insbesondere auf industrielle Anforderungen zugeschnitten ist. Primäre Zielsetzung ist die Bereitstellung eines Simulationspakets, charakterisiert durch einen hohen Grad an Vorausberechenbarkeit bei gleichzeitig wirtschaftlichem Rechenaufwand. Die Lösung dieses Zielkonflikts ist eine sehr herausfordernde Aufgabe, die Kompromisse erfordert. Auf die Modellierung übertragen, bedeutet dies, dass die relevanten Einflussparameter identifiziert werden müssen, um diese mit dem erforderlichen Detaillierungsgrad abzubilden. Eine redundante Modellierungstiefe steigert unnötig die Modellkomplexität und den Datenverarbeitungsaufwand. Beginnend mit der am schnellsten zu realisierenden, plausiblen Lösung müssen nach unbefriedigender Validierung sukzessive Modellverfeinerungen vorgenommen werden. Die Umsetzung einer allgemeinen Modellidee sollte nicht a-priori an der Modellierung von Details scheitern, die sich später als irrelevant offenbaren. Neben der numerischen Umsetzbarkeit, spielt somit auch die Erweiterungsmöglichkeit eines Modellansatzes eine wichtige Rolle.

Die Fokussierung dieser Arbeit liegt in der Verbrennungsmodellierung und der Konsolidierung sämtlicher Teilmodelle, inklusive des neuen Strahlmodells. Die theoretischen Grundlagen wurden größtenteils bereits in den Vorgänger-Kapiteln detailliert beschrieben, so dass die Ausführung in diesem Kapitel sich auf die wesentlichen Neuerungen beschränkt.

Nach einer kurzen, allgemeinen Definition der Modellierungsphilosophie von Progress-Ansätzen, werden modulare Modelle zur Simulation der Zündung, Vormischverbrennung und Diffusionsverbrennung vorgestellt. Folglich wird entsprechend der **Abbildung 4.1** für jeden Teilprozess der dieselmotorischen Verbrennung ein eigenes Modell erstellt, das auf die charakteristischen Randbedingungen abgestimmt ist.

6.1 Progress-Ansatz: Modellierungsphilosophie

Progress-Ansatz bezeichnet hier allgemein eine Modellierungsphilosophie für reaktive Strömungen.

Wie in den Kapiteln 4 und 5 dargelegt, müssen zur detaillierten Beschreibung von reaktionskinetisch kontrollierten Prozessen zum Teil sehr viele Spezies bilanziert werden. Bei der Simulation von technischen Fragestellungen sind allerdings solche Detailaussagen meistens gar

nicht gefragt. Der Brennverfahrensentwickler interessiert sich vielmehr für globale Größen, wie beispielsweise den Zündverzug, Druckverlauf, Wärmefreisetzung, Verbrennungsschwerpunkt, indizierter Mitteldruck, NO_x -, Rußemissionen usw..

Der allgemeine Progress-Ansatz versucht komplexe, chemische Reaktionsabläufe mittels einer minimalen Anzahl ausgewählter *Progressvariablen* abzubilden, um über deren Bilanzierungen Aussagen über globale Größen zu erhalten. Die Vorgehensweise zur Modellierung von Teilprozessen ist für jeden Progress-Ansatz ähnlich: Nach der Identifizierung von geeigneten Progressvariablen, wird für jede Progressvariable eine Bilanzgleichung zur Beschreibung der zeitlichen und lokalen Entwicklung im physikalischen Raum gelöst. Die Bilanzgleichung für eine beliebige Progressvariablen ψ_i lautet entsprechend der allgemeinen statistischen Transportgleichung 2.40 unter Vernachlässigung des molekularen Transports:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{\psi}_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{u} \tilde{\psi}_i) = \nabla \cdot \left[\frac{\mu}{Sc_t} \nabla \tilde{\psi}_i \right] + \tilde{\Psi}_i^c \quad (6.1)$$

Die Schwierigkeiten bei einer Progress-Modellierung liegen folglich in der **Identifizierung von geeigneten Progressvariablen**, der **Quantifizierung der mittleren, chemischen Reaktionsterme** $\tilde{\Psi}_i^c$ und teilweise der **Quantifizierung der diffusiven Transportprozesse**.

Zur Definition von Progressvariablen dienen in der Regel diagnostische Untersuchungen und reaktionskinetische Parameterstudien am homogenen Reaktor. Die Progressvariablen müssen nicht zwangsläufig immer Spezies-Konzentrationen darstellen, sondern auch Kombinationen von Spezies oder anderer systemspezifischer Eigenschaften sind möglich.

Aufgrund der statistischen Betrachtungsweise muss zur Schließung der Bilanzgleichung 6.1 der mittlere, chemische Reaktionsterm bestimmt werden. Wie in Kapitel 4 bereits diskutiert, besteht dabei die Schwierigkeit in der realitätsnahen Abbildung der Chemie-Turbulenz-Interaktion. Im Folgenden werden dazu Ansätze vorgestellt, die wieder eine Separation der numerischen Behandlung der chemischen und physikalischen Prozesse vorsieht. Die chemischen Prozesse werden dabei immer im Mischungsbruchraum aufgelöst, wobei zwischen zwei unterschiedlichen Betrachtungsweisen unterschieden wird:

- 1D-Flamelet
- 0D-Reaktorverteilung

Das Konzept der 0D-Reaktorverteilung lässt sich mathematisch aus den allgemeinen Flamelet-Gleichungen 4.18 und 4.19 ableiten, indem die Diffusionsterme zu Null angenommen werden. Das Ergebnis ist eine Verteilung von homogenen Reaktoren im Mischungsbruchraum, die in keiner Interaktion zueinander stehen. Zur Berücksichtigung der turbulenten Mischungsverteilung wird bei beiden Ansätze die Lösung im laminaren Mischungsbruchraum über eine PDF gewichtet (siehe Gleichung 4.31).

Aufgrund der numerischen Separierung der chemischen und physikalischen Prozesse müssen die physikalischen Bedingungen realistisch in den Mischungsbruchraum abgebildet werden, um so repräsentative Anfangs- bzw. Randbedingungen zu liefern. Insbesondere die Korrelation zwischen der Gemischverteilung und der Temperatur spielt eine wichtige Rolle, da beide Größen entscheidend chemische Reaktionsabläufe beeinflussen und voneinander abhängen. Umgekehrt werden die Informationen der Skalargrößen im Mischungsbruchraum benötigt, um die Bilanzgleichung 6.1 mit dem mittleren chemischen Reaktionsterm schließen zu können. Durch die

Einführung des Mischungsbruchs als Gemischcharakteristik und die Separierung der Behandlung der physikalischen und chemischen Vorgänge ist es möglich, bei der Modellierung auf detaillierte Reaktionsschemata zurückzugreifen. Hinzu kommt, dass nur wenige Progressvariablen transportiert werden müssen.

6.2 Das PDF-Zündmodell

Die Qualität eines Selbstzündungsmodells definiert sich bezüglich der chemischen und physikalischen Modellierung über die Berücksichtigung folgender Charakteristiken:

- Reaktionskinetisch kontrollierter Prozess (kleine Damköhler-Zahlen), da niedriges Temperaturniveau, daher detaillierte Reaktionskinetik für Nieder- und Mittel-Temperaturbereich
- Turbulente Gemischverteilung aufgrund der strahlinduzierten Turbulenz, daher komplexe Chemie-Turbulenz-Interaktion

Der im Folgenden aufgezeigte Progress-Ansatz zur Simulation der dieselmotorischen Selbstzündung basiert auf einer Arbeit von *Streule* [110]. Das Modell dient der Vorausberechnung von Zündorten und Zündverzügen. Die Wärmefreisetzung während der Zündphase wird mit dem Modell nicht beschrieben.¹

Modellidee

Aus diagnostischen und reaktionskinetischen Untersuchungen ist allgemein bekannt, dass chemisch reaktive Orte durch Spezies-Konzentrationsverläufe lokalisiert werden können. Der folgende Modellansatz basiert auf der Idee, solche repräsentativen chemischen Spezies als sogenannte Progressvariablen bzw. Indikatorspezies zu identifizieren, um diese über die Gleichung 6.1 im physikalischen Raum zu bilanzieren. In Abhängigkeit der Konzentrationen kann dann eine Aussage zum Zündstatus gemacht werden.

Wahl der Progressvariablen

Basierend auf reaktionskinetischen Untersuchungen hat sich für das Selbstzündungsmodell die Konzentration von Kohlenmonoxid (CO) als geeignete Progressvariable erwiesen, da CO während der Zündphase

- hinreichend gut reaktionskinetisch beschrieben werden kann,
- und einen monoton-steigenden Konzentrationsverlauf aufweist.

¹Bei konventionellen Diesel-Brennverfahren kann die Wärmefreisetzung während der Zündphase gegenüber der Hauptverbrennungsphase vernachlässigt werden. Für (teil-)homogene Brennverfahren ist dies nicht erlaubt, da in der sogenannten *Cool-Flame Phase* bis zu 10 Prozent der gesamten Brennstoffenergie umgesetzt werden kann [126].

Die erste Bedingung ist aus reaktionskinetischen und numerischen Gesichtspunkten wichtig. Der zweite Punkt bietet die Grundvoraussetzung zur Sicherstellung der eindeutigen Zuordnung von Reaktionsraten für gegebene Indikatorspezies-Konzentrationen.

Basierend auf homogenen Reaktorrechnungen zeigt die **Abbildung 6.1** einige Temperatur- und CO-Massenbruchverläufe für unterschiedliche Anfangs-Gemischzusammensetzungen, die typisch für konventionelle DE-Dieselmotoren sind. Es ist zu erkennen, dass die maximale Temperatur in Abhängigkeit der Gemischzusammensetzung stark variiert, wobei sich für Stöchiometrie ein Maximum einstellt. Die CO-Konzentration steigt für alle drei Fälle mit dem Zündbeginn rasant an. Für stöchiometrische und magere Gemische korreliert der maximale CO-Massenbruch ungefähr mit dem maximalen Temperaturgradienten. Bei fetten Gemischen steigt die CO-Konzentration auch nach Erreichen der Endtemperatur noch leicht an. Alle Fälle zeigen zumindestens in der Zündphase ein monoton steigendes Verhalten für die CO-Konzentration, was unter anderem die Wahl von CO als Progressvariable prädestiniert. Des Weiteren zeigt der Vergleich ein schnelleres Zündverhalten für fette Gemische.

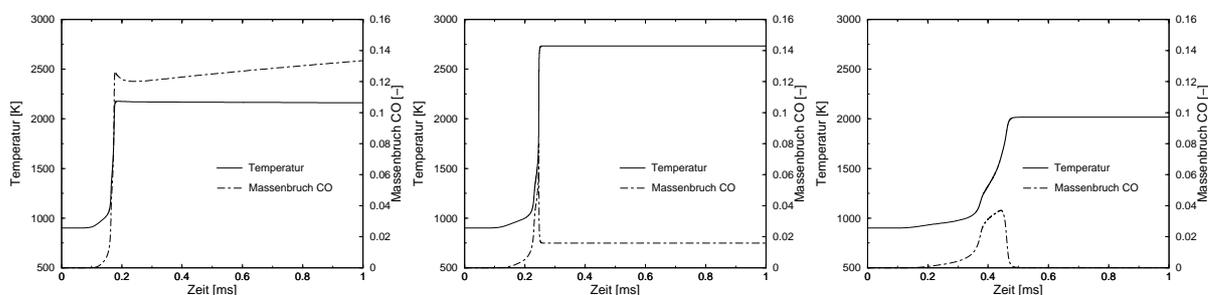


Abbildung 6.1: Temperatur und CO-Massenbruchverläufe für homogene Reaktoren mit den Anfangsbedingungen: $p_0 = 70\text{bar}$, $T_0 = 900\text{K}$ und $\lambda_0 = 0.5$ (links), $\lambda_0 = 1.0$ (mitte) und $\lambda_0 = 2.0$ (rechts).

Bestimmung des mittleren chemischen Quellterms

Zur Schließung der Massen-Bilanzgleichung 6.1 für Kohlenmonoxid $\tilde{\psi}_i = \tilde{y}_{CO}$ muss der mittlere chemische Quellterm $\tilde{\psi}_i = \tilde{\omega}_{CO}$ berechnet werden. Bei dem hier vorliegenden Zündmodell wird dazu ein "Presumed-PDF" Ansatz verwendet. Entsprechend der Gleichung 4.31 wird die Verteilung der Reaktionsraten $\dot{\omega}_{CO}$ im Mischungsbruchraum über eine β -Funktion gewichtet, um so die (turbulente) mittlere Reaktionsrate zu bestimmen:

$$\tilde{\omega}_{CO}^c(\vec{x}, t) = \int_{T=0}^{\infty} \int_{Z=0}^1 \dot{\omega}_{CO}(Z, AGR, y_{CO}, p, T) \tilde{P}_{Z,T}(\vec{x}, t) dT dZ \quad (6.2)$$

Die **Reaktionsraten** $\dot{\omega}_{CO}$ sind generell eine Funktion des Gemischzustandes und der Thermodynamik. Unter der Annahme eines Kohlenwasserstoff-Brennstoffes bestimmt sich der Gemischzustand beim PDF-Zündmodell aus der lokalen Kraftstoffkonzentration und der AGR-Rate. Zur Berücksichtigung von Instationaritätseffekten wird als zusätzliche Gemischcharakteristik die Konzentration von CO eingeführt. Diese Konzentration dient als Zeitmaß für den chemischen Reaktionsfortschritt. Der thermodynamische Zustand wird definiert durch den Druck

und die Temperatur.

Beim PDF-Zündmodell wird auf ein "Library-Konzept" zurückgegriffen. Die laminaren Reaktionsraten von Kohlenmonoxid werden in Abhängigkeit des Gemischzustandes und der thermodynamischen Zustandsvariablen a-priori mit Hilfe von isobaren² 0D-Reaktorrechnungen bestimmt und tabelliert. Aufgrund der Einführung des Mischungsbruchs und der niedrig-dimensionalen Betrachtungsweise mit nur einer Progressvariablen kann dabei auf detaillierte Reaktionsschemata zurückgegriffen werden. Im Rahmen dieser Arbeit wurde zur Generierung von beliebigen 0D-Bibliotheken eigens ein Tool entwickelt, das bezüglich der Flexibilität, Rechenzeiteffizienz und Genauigkeit eine Grundvoraussetzung zur Umsetzung des PDF-Zündmodells darstellte. Für das vorliegende PDF-Zündmodell wurde auf einen detaillierten n-Heptan Mechanismus von Nehse et.al. [74] zurückgegriffen. Der Mechanismus umfasst ca. 200 Einzelspezies, deren Reaktivitäten über ca. 1300 Elementarreaktionen beschrieben werden. Die für diese Arbeit generierte Library umfasst die für die dieselmotorische Verbrennung relevanten Bereiche der thermodynamischen Größen und des Gemisches. Auf Basis einer ausführlichen Sensitivitätsanalyse wurde die in Tabelle 6.1 aufgeführte Diskretisierung vorgenommen, die eine lineare Interpolation zwischen den Tabellenstützpunkten rechtfertigt.

Temperatur T	700 - 1500 [K]	dT = 20 [K]
Druck p	20 - 200 [bar]	dp = 20 [bar]
Lambda λ	0.2 - 10.6 [-]	d λ = 0.8 [-]
Lambda AGR	0 - 40 [-]	dAGR = 5 [-]

Tabelle 6.1: *Parameterbereich der Library des PDF-Zündmodells. Die Stützstellenweite ist so gewählt, dass eine lineare Interpolation zwischen den Stützstellen erlaubt ist.*

Die **gemeinsame Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion** $\tilde{P}_{Z,T}$ in Gleichung 6.2 ist abhängig von der Temperatur und dem Mischungsbruch. Insbesondere aufgrund der vorliegenden Zweiphasenströmung während der Zündphase korrelieren beide Größen eindeutig miteinander, was die häufig getroffene Annahme von statistischer Unabhängigkeit verbietet. Zur Bestimmung der Korrelation zwischen Temperatur und Mischungsbruch $T(Z)$ wird eine Zweistrom-Betrachtungsweise vorgenommen (siehe **Abbildung 6.2**). Dazu wird das in einer CFD-Zelle vorliegende Kraftstoff-Luftgemisch "entmischt" und in seine Ausgangszustände zerlegt. Strom 1 beschreibt den Zustand reiner Luft und ist klar definiert durch den thermodynamischen Zustand im Brennraum. Strom 2 ist charakterisiert durch den Zustand des Kraftstoffdampf-Luft-Gemisches an der Flüssigkeitsoberfläche. Wird für das Kraftstoff-Luft-Gemisch von Strom 2 der Sättigungszustand angenommen, lässt sich zur Berechnung des maximal möglichen Kraftstoffmassenbruchs y_{KS} bei gegebener Temperatur T und gegebenem Brennraumdruck p die folgende Beziehung aufstellen [110, 109]:

$$y_{KS}(T) = \frac{M_{KS}}{M_{KS} + M_L \cdot \left(\frac{p}{p_D(T)} - 1 \right)} \quad (6.3)$$

²Isobar, da von schnellen Zündprozessen ausgegangen wird.

p_D bezeichnet den Dampfdruck des Kraftstoffs, M_{KS} und M_L das Molekulargewicht des Kraftstoffs bzw. der Luft. Mittels einer adiabaten Mischung zwischen den beiden Strömen kann die Korrelation $T(Z)$ berechnet werden. In **Abbildung 6.3** sind einige Mischungsverläufe zwischen den Strömen, sowie ein exemplarischer lokaler Brennraumzustand, den die 3D-CFD Simulation liefert, dargestellt. Mittels der vorliegenden Tafel werden die entsprechenden luft- und kraftstoffseitigen "Ausgangszustände" bestimmt. Für die entsprechende Mischungslinie ist zusätzlich ein exemplarischer PDF-Verlauf dargestellt, über den die Einzelzustände gewichtet werden.

Ein Nachteil des vorgestellten Modells ist sicherlich die Annahme einer Gleichverteilung der CO-Konzentration im Mischungsbruchraum. Um dies zu umgehen, wird in [109] ein Konzept vorgestellt, das ebenfalls dem Progress-Ansatz zugeordnet werden kann.

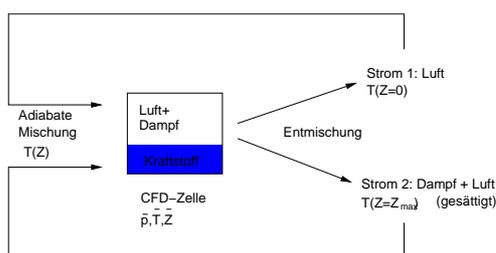


Abbildung 6.2: Schematische Darstellung der Vorgehensweise zur Bestimmung von $T(Z)$, mit den Schritten Entmischung in Strom 1 und Strom 2 und anschließender adiabater Mischung.

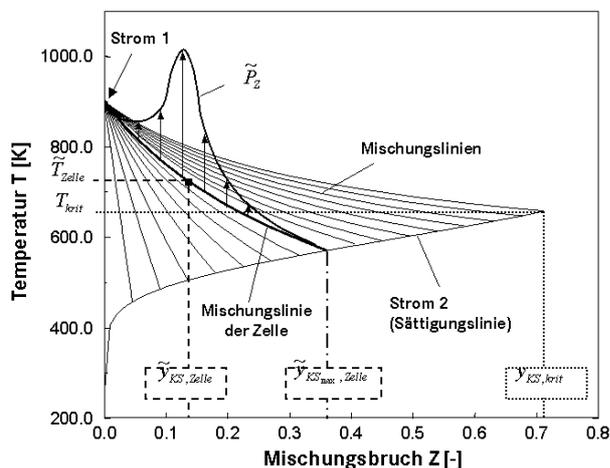


Abbildung 6.3: Exemplarische Mischungstafel zur Bestimmung der Korrelation zwischen Temperatur und Mischungsbruch $T(Z)$ für das PDF-Zündmodell. Zusätzlich ist beispielhaft für einen mit dem CFD-Code berechneten lokalen Zellzustand, die entsprechende Mischungslinie mit PDF dargestellt [109].

6.3 Das 7-Spezies-PDF-Timescale Verbrennungsmodell

Das im vorherigen Abschnitt beschriebene PDF-Zündmodell dient zur Berechnung des Zündverzugs und des Zündortes. Hier wird die Modellierung der Wärmefreisetzung behandelt, wobei die folgenden chemischen und physikalischen Effekte berücksichtigt werden müssen:

- Reaktionskinetisch kontrollierter Prozess während der Vormischverbrennung ($Da > 1$)
- Mischungskontrollierter Prozess während der Diffusionsverbrennung ($Da \gg 1$)
- Turbulente Gemischverteilung
- Komplexe Chemie-Turbulenz-Interaktion

Die Herausforderung bei der Modellierung der dieselmotorischen Verbrennung bzw. Wärmefreisetzung liegt folglich in der physikalisch-chemisch korrekten Abbildung zweier grundlegend unterschiedlicher Verbrennungsszenarien - der Vormisch- und Diffusionsverbrennung. Die in Kapitel 4 vorgestellten Modelle zur Simulation der Wärmefreisetzung sind aufgrund modellinhärenter Schwächen nur begrenzt zur Vorausberechnung geeignet. So sind Flamelet-Ansätze in der Applikation limitiert auf Zustände hoher Damköhler-Zahlen. Phänomenologische Verbrennungsmodelle erfordern stets die Adaption von Modellkonstanten aufgrund simplifizierter Modellannahmen, beispielsweise der Vernachlässigung der turbulenten Mischungsverteilung.

Basierend auf einer Idee von *Rao* und *Rutland* [98, 99] wurde im Rahmen dieser Arbeit ein hybrides Verbrennungsmodell entwickelt, umgesetzt und validiert, mit der Zielsetzung, die für die jeweiligen Verbrennungsszenarien wesentlichen Einflussgrößen abzubilden, unter gleichzeitiger Gewährleistung von hoher Rechenzeiteffizienz.

Modellidee

Das im Folgenden vorgestellte 7-Spezies-PDF-Timescale Verbrennungsmodell verbindet Eigenschaften des stationären Flamelet-Modells [80] bzw. des 0D-Reaktormodells mit dem des Mixing-Timescale Modells [1, 51]. Als Ausgangspunkt des Modells dient die Formulierung der mittleren chemischen Reaktionsrate der Spezies i als Differentialquotient (vgl. mit Gleichung 4.46):

$$\tilde{\rho}_i^c = \frac{d\tilde{y}_i}{dt} = -\frac{\tilde{y}_i - \tilde{y}_i^*}{\bar{\tau}} \quad (6.4)$$

\tilde{y}_i^* entspricht einem beliebigen Referenzzustand der Spezies-Konzentration i und $\bar{\tau}$ einer allgemeinen Zeitskala, die den Zeitraum bis zum Erreichen des Referenzzustands angibt. Zur Bestimmung von \tilde{y}_i^* und $\bar{\tau}$ werden im Folgenden unterschiedliche Ansätze diskutiert.

6.3.1 Bestimmung der Referenz-Spezies-Konzentration \tilde{y}_i^*

Nach einer chemischen Reaktion wird die resultierende Konzentration einer Spezies i stets limitiert durch den Zustand $\tilde{y}_i = 0$ (keine Reaktion) und den Zustand $\tilde{y}_i = \tilde{y}_i^{eq}$ (vollständige Reaktion), wobei \tilde{y}_i^{eq} den Gleichgewichtswert darstellt. Wie bereits in Kapitel 4 beschrieben,

ist der stationäre Zustand einer Diffusionsflamme abhängig von der Thermodynamik, der Gemischzusammensetzung und der Transportgeschwindigkeit³. Im Folgenden werden drei Ansätze zur Quantifizierung von \tilde{y}_i^* gegenübergestellt, die jeweils von einer Gleichgewichtsbetrachtung (d.h. vollständigen Reaktion) ausgehen. Die Ansätze unterscheiden sich bzgl. ihrer Modellierungstiefe und den numerischen Eigenschaften. Tabelle 6.3 fasst den Vergleich zusammen.

Beim **Mixing-Timescale Modell [1, 51]** (vgl. Abschnitt 4.6) werden für \tilde{y}_i^* thermochemische Gleichgewichtswerte angenommen. Die Berechnung der Gleichgewichtsmassenbrüche basiert auf einer reinen Mittelwertbetrachtung. Daher ist es mit diesem Modellansatz unmöglich, lokale, heterogene Mischungsverteilungen aufzulösen (vgl. 4.2). Numerisch bewertet, ist das Modell einfach umsetzbar und rechenzeiteffizient.

Beim **PDF-Timescale Modell [98, 99]** wird \tilde{y}_i^* mit Hilfe laminarer, stationärer 1D-Flamelets berechnet (vgl. Post-Flamelets in Abschnitt 4.5). Die Mittelung der laminaren Flamelet-Lösungen erfolgt über einen presumed-PDF Ansatz. Unter der Annahme statistischer Unabhängigkeit wird zur Beschreibung der PDF des Mischungsbruchs eine β -Funktion, und zur Beschreibung der PDF der skalaren Dissipationsrate eine Lognormal-Verteilung mit einer Standardabweichung von eins verwendet. Das PDF-Timescale Modell zeichnet sich durch eine hohe Modellierungstiefe aus, da detaillierte Reaktionskinetik, Streckungseffekte und heterogene Mischungsverteilungen berücksichtigt werden können. Allerdings wird dies erkauft durch einen erhöhten Rechenaufwand, da sämtliche Reaktionsspezies im 3D-Raum transportiert werden müssen. Die Umsetzung ist wesentlich aufwändiger als beim Mixing-Timescale Modell. Zudem setzt das Konzept die Verfügbarkeit von validierten Reaktionsmechanismen voraus.

Das **7-Spezies-PDF-Timescale Modell** stellt einen Kompromiss zwischen dem Mixing-Timescale und dem PDF-Timescale Modell bzgl. Modellierungstiefe und numerischem Aufwand dar. Die Gleichgewichtskonzentrationen im Mischungsbruchraum werden auf Basis unendlich schneller Chemie bestimmt. Zur Berücksichtigung der turbulenten Gemischverteilung werden die Konzentrationen über eine β -PDF gewichtet. **Abbildung 6.4** illustriert exemplarisch den Einfluss einer heterogenen Gemischverteilung auf die Bestimmung von \tilde{y}_i^* in Gleichung 6.4. Mit steigender Mischungsinhomogenität (gleichbedeutend mit hohen Varianzen des Mischungsbruchs) wird ein zunehmend breiterer Gemischzonenbereich von der PDF erfasst, was beim Mixing-Timescale Modell keine Berücksichtigung findet, da das Modell eine reine Mittelwertbetrachtung der Spezies vornimmt. Die Abbildung veranschaulicht, dass zur Bestimmung der mittleren chemischen Reaktionsrate nach Gleichung 6.4, beispielsweise der Referenzmassenbruch des Kraftstoffs beim Mixing-Timescale Modell zu Null angenommen wird, im Unterschied zum 7-Spezies-PDF-Timescale Modell, das aufgrund der PDF-Form Kraftstoffkonzentrationen berücksichtigt.

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 können aufgrund der Annahme unendlich schneller Chemie in der hier vorgestellten Modellvariante nicht berücksichtigt werden. Allerdings bleibt zu bedenken, welche Relevanz diese Effekte für die zu untersuchenden motorischen Applikationen einnehmen. Wie bereits mehrfach erwähnt, sollen die Modelle zur Simulation

³Die Transportgeschwindigkeit ist ein Maß für die maximal zur Verfügung stehende Reaktionszeit eines Gemisches. Im Grenzfall unendlich hoher Transportgeschwindigkeiten und finiter Reaktionszeiten kann niemals eine chemische Reaktion stattfinden, da die Verweildauer der Reaktionspartner unendlich kurz ist.

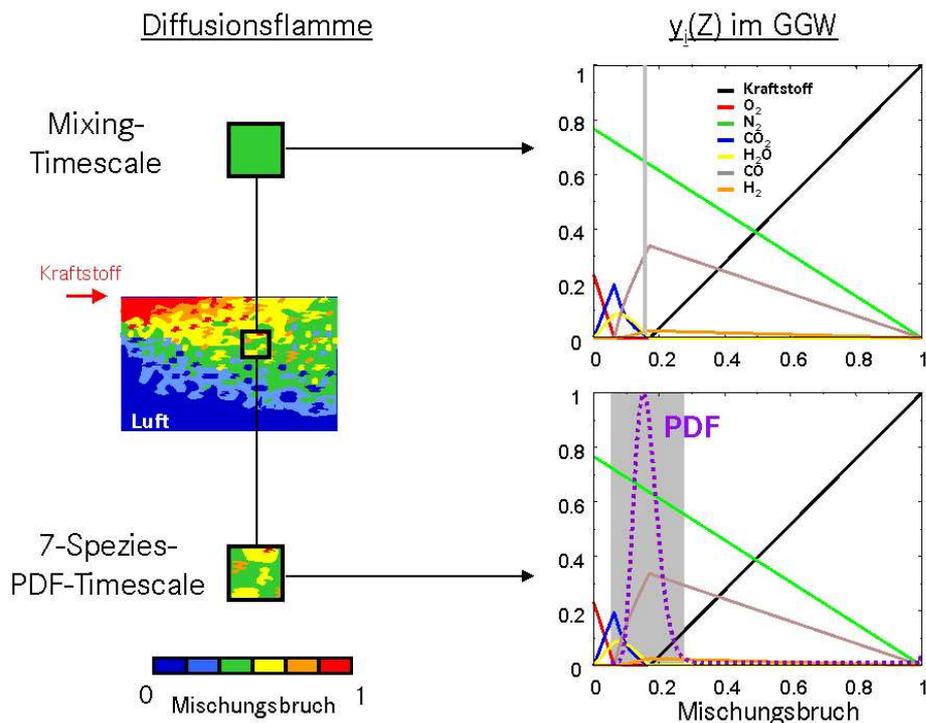


Abbildung 6.4: Gemischbehandlung beim Mixing-Timescale Modell und 7-Spezies-PDF-Timescale Modell. Links: Turbulenter Gemischzustand einer Diffusionsflamme. Rechts: Projektion des Gemischzustandes in den Mischungsbruchraum, in dem die Massenbrüche der 7-Spezies für einen exemplarischen Gleichgewichtszustand aufgetragen sind. Im Gegensatz zum Mixing-Timescale Modell, das von einer homogenen Gemischverteilung ausgeht, wird beim 7-Spezies-PDF-Timescale Modell die heterogen Gemischverteilung über eine PDF abgebildet.

industrieller Fragestellungen so genau wie nötig, aber auch so einfach wie möglich sein, um den numerischen Aufwand möglichst gering zu halten. Falls erforderlich, müssen Modellerweiterungen vorgenommen werden. Darin liegt ein weiterer Vorteil des 7-Spezies-PDF-Timescale Modells, da es ausgehend von der hier beschriebenen Grundmodellierungsstufe einfach zu erweitern ist.

6.3.2 Bestimmung der allgemeinen Zeitskala $\bar{\tau}$

Die allgemeine Zeitskala $\bar{\tau}$ aus Gleichung 6.4 entspricht der Zeit, bis die Spezies i ihren Referenzzustand \tilde{y}_i^* erreicht hat. Bei turbulenten Verbrennungsprozessen kann generell zwischen einer chemischen und turbulenten Zeitskala unterschieden werden [1]. Die chemische Zeitskala definiert dabei den Zeitraum, bis sich der Gleichgewichtswert unter homogenen Bedingungen eingestellt hat. Die turbulente Zeit repräsentiert eine turbulente Mischungszeit. Aufgrund der beim Dieselmotor vorliegenden Phasen der Vormisch- und Diffusionsverbrennung müssen bei der Modellbildung beide Zeitskalen berücksichtigt werden. Die Vernachlässigung der turbulenten Zeitskala resultiert in einer zu schnellen Produktbildung und damit auch Wärmefreisetzung.

	Mixing-Timescale	PDF-Timescale	7-PDF-Timescale
	$\tilde{y}_i^* = \tilde{y}_i^*(\bar{p}, \tilde{T}, \vec{y})$	$\tilde{y}_i^* = \int \int_{\chi Z} y_i(Z, \chi) \tilde{P}_Z \tilde{P}_\chi dZ d\chi$	$\tilde{y}_i^* = \int_Z y_i(Z) \tilde{P}_Z dZ$
Chemie	Gleichgewicht	Detailliert	Gleichgewicht
Instationarität	phänom.	phänom.	phänom.
Lokale turb.	nein	ja	ja
Gemischverteil.			
Streckung	nein	ja	nein
Komplexität	niedrig	hoch	mittel
Rechenaufwand	niedrig	hoch	mittel
Erweiterbarkeit	niedrig	niedrig	hoch

Tabelle 6.2: Gegenüberstellung unterschiedlicher Konzepte zur Berechnung von \tilde{y}_i^* für Gleichung 6.4. Der Vergleich unterscheidet zwischen der Berücksichtigung chemisch-physikalischer Phänomene und modellinhärenten numerischen Eigenschaften.

Insbesondere während der Diffusionsverbrennung ist die Turbulenz der geschwindigkeitsbestimmende Prozess. Bei der Vormischverbrennung sind die Verhältnisse genau umgekehrt. Die durch die Kraftstoffeinspritzung induzierten hohen Strömungsgeschwindigkeiten und das in der frühen Zündphase vorherrschende niedrige Temperaturniveau führen zu einer kinetisch kontrollierten Verbrennung.

Wie bereits in Abschnitt 4.6 vorgestellt, kombiniert das **Mixing-Timescale Modell [1, 51]** die Zeitskala der chemischen Reaktion mit der der turbulenten Vermischung. Die turbulente Zeitskala wird dabei als proportional zur turbulenten Mischungszeit angenommen, die sich aus den Turbulenzgrößen berechnen lässt. Für die chemische Zeitskala wird für alle Spezies eine gemeinsame, empirische Arrhenius-Beziehung formuliert. Die Gewichtung der unterschiedlichen Zeitskalen erfolgt in Abhängigkeit der gebildeten Reaktionsprodukte, so dass zu Beginn der Verbrennung die chemische Zeitskala dominiert. Mit zunehmenden Reaktionsfortschritt (Produktanstieg) verlagert sich die Relevanz in Richtung der turbulenten Zeitskala.

Das **PDF-Timescale Modell [98, 99]** unterscheidet sich von einem konventionellen Post-Flamelet-Ansatz (siehe Abschnitt 4.5) prinzipiell nur in der Formulierung der chemischen Zeitskala. Wie bereits mehrfach erwähnt wurde, verliert das laminare Flamelet-Modell seine Gültigkeit in Bereichen kleiner Damköhler-Zahlen, da unter diesen Bedingungen eine Entkopplung der chemischen und turbulenten Zeitskalen unzulässig ist. Beim PDF-Timescale Modell wird versucht, diese Bereiche durch Einführung einer zusätzlichen, chemischen Zeitskala abzubilden. Die Erweiterung des Post-Flamelet-Modells zum PDF-Timescale Modell lässt sich mathematisch veranschaulichen, indem die Gleichung 6.4 zeitlich integriert wird. Für den resultierenden, mittleren Spezies-Massenbruch $\tilde{y}_i(\Delta t)$ nach einem CFD Zeitschritt Δt folgt dann:

$$\underbrace{\tilde{y}_i(\Delta t)}_{\text{Post-Flamelet}} = \underbrace{\tilde{y}_i^*}_{\text{PDF-Timescale Modell}} + \underbrace{(\tilde{y}_i - \tilde{y}_i^*) \cdot e^{-\left(\frac{\Delta t}{\bar{\tau}_{chem}}\right)}}_{\text{Erweiterung für } Da \approx 1} \quad (6.5)$$

Der zweite Term auf der rechten Seite von Gleichung 6.5 kann als Störterm interpretiert werden, der zur stationären Flamelet-Lösung aufaddiert wird, um so für kleine Damköhler-Zahl-Bereiche die Chemie-Turbulenz-Interaktion besser abzubilden. Für hohe Damköhler-Zahlen ($\bar{\tau}_{chem} \rightarrow 0$) verliert der Störterm an Gewichtung, und der resultierende Spezies-Massenbruch nähert sich asymptotisch der stationären Flamelet-Lösung ($\tilde{y}_i = \tilde{y}_i^*$) an. Für abnehmende Damköhler-Zahlen gewinnt der Störterm immer mehr an Bedeutung, bis schließlich für $\bar{\tau}_{chem} \rightarrow \infty$ kein Stoffumsatz mehr stattfindet ($\tilde{y}_i = 0$). Im Gegensatz zum Mixing-Timescale Modell wird beim PDF-Timescale Modell die turbulente Zeitskala nicht explizit formuliert, da die Abbildung von Turbulenzeffekten über die Varianz der PDF erfolgt. Auf Basis eines Einschrittmechanismus, der die Reaktion von Kraftstoff und Luft zu Produkten beschreibt, wird aus Gründen der Vereinfachung und der Gewährleistung der Massenerhaltung in [98, 99] entsprechend dem Mixing-Timescale Modell eine globale chemische Zeitskala für alle am Reaktionssystem beteiligten Spezies vorgeschlagen. Zur Lösung der empirischen Arrhenius-Beziehung 4.48 müssen der kraftstoffspezifische präexponentielle Faktor und die Aktivierungsenergie gegeben sein. Auf Basis von Einzeltropfen-Untersuchungen von *Bergeron et.al.* [9] zum Zündverhalten unterschiedlicher Kohlenwasserstoff-Brennstoffe schlagen *Kong et.al.* [51] einen Konstantensatz für Tetradekan⁴ vor. Aufgrund der simplifizierten Beschreibung der chemischen Zeitskala $\bar{\tau}_{chem}$ handelt es sich bei diesen Werten nicht um Universalkonstanten, die eine Vorausberechnung ermöglichen. In Abhängigkeit der motorischen Fragestellung muss eine Parameteranpassung vorgenommen werden, wobei es empfehlenswert ist, nur den präexponentielle Faktor A zu variieren. Per definitionem wird durch eine Variation von A entscheidend der Zündzeitpunkt und das Vormischverbrennungsverhalten beeinflusst. So gilt beispielsweise, dass durch eine Erhöhung von A die chemische Zeitskala $\bar{\tau}_{chem}$ zunimmt, was schließlich in einer gemäßigten Kraftstoffumsetzung und damit auch verzögerten globalen Zündung resultiert (siehe Kapitel 7.2).

In der Realität besitzt jede Spezies eines Reaktionssystems ihre eigene chemische Zeitskala. Um dies beim PDF-Timescale Modell zu berücksichtigen, liefert *Rao* [98] einen Ansatz, der im Folgenden kurz aufgezeigt werden soll. Dabei wird die rechte Seite der allgemeinen Flamelet-Gleichung 4.18 für den Spezies-Massenbruch y_i um einen Term erweitert, der sich aus einer Taylorreihenentwicklung um die stationäre Flamelet-Lösung y_i^* ergibt. Mit

$$\beta_i^* = \left(\rho \frac{\chi_{st}}{2} \frac{\partial^2 y_i}{\partial Z^2} + \dot{S}_i^c \right)^* \quad (6.6)$$

folgt danach für Gleichung 4.18:

$$\frac{\partial y_i}{\partial \tau} = \beta_i^* + \sum_{j=1}^{n_{sp}} \frac{\partial \beta_i^*}{\partial y_j} (y_j - y_j^*) \quad (6.7)$$

⁴Tetradekan wird allgemein als Modellkraftstoff zur Simulation der dieselmotorischen Verbrennung herangezogen

Dabei entspricht n_{sp} der Summe aller Spezies und * kennzeichnet die stationäre Flamelet-Lösung. Da ein stationäres Flamelet betrachtet wird, muss $\beta_i^* = 0$ gelten. Der zweite Term der rechten Seite von Gleichung 6.7 kann mit Hilfe der sogenannten *Jacobi-Matrix* quantifiziert werden. Diese lässt sich numerisch bestimmen, wobei die Elemente $\partial\beta_i^*/\partial y_i$ den gesuchten reziproken, chemischen Zeitskalen der Spezies j entsprechen. Zur Berechnung der mittleren chemischen Zeitskalen können die laminaren Zeitskalen im Mischungsbruchraum über eine PDF gewichtet werden (siehe 4.33). Wird wie oben beschrieben, von nur einer globalen chemischen Zeitskala für alle Spezies ausgegangen, vereinfacht sich die Jacobi-Matrix in der Form, dass nur die Elemente der Hauptdiagonalen, besetzt mit der reziproken, globalen chemischen Zeit, Werte ungleich Null annehmen.

Progress-Ansatz zur Bestimmung der chemischen Zeitskala $\bar{\tau}_{chem}$

Die Gleichung 6.5 beschreibt einen Ansatz zur Berechnung des mittleren Spezies-Massenbruchs \tilde{y}_i . Folglich muss aus Konsistenzgründen zur Lösung dieser Gleichung eine gemittelte chemische Zeitskala $\bar{\tau}_{chem}$ bekannt sein. Um diese mittlere Zeitskala realitätsnah vorzugeben, müssen bei der Modellierung von $\bar{\tau}_{chem}$ die relevanten Einflussgrößen abgebildet werden. Für die Simulation der dieselmotorischen Vormischverbrennung sind dies insbesondere die turbulente Mischungsverteilung und komplexe, chemische Reaktionsabläufe. Zur Berücksichtigung dieser Effekte wurde im Rahmen dieser Arbeit für das **7-Spezies-PDF-Timescale Modell**, der im Folgenden aufgezeigte Ansatz erarbeitet. Grundlage des Modells ist die Einführung einer mittleren Reaktionsfortschrittvariablen \bar{c} :

$$\tilde{y}_i^{n+1} - \tilde{y}_i^0 = \bar{c} \cdot (\tilde{y}_i^* - \tilde{y}_i^0) \quad (6.8)$$

Der Index 0 kennzeichnet den Ausgangszustand. \bar{c} beschreibt nach Gleichung 6.8 folglich den mittleren, chemischen Reaktionsfortschritt. Für die Extrema gilt:

$$\begin{aligned} \bar{c} = 0 &: \tilde{y}_i^{n+1} = \tilde{y}_i^n && \text{(keine Reaktion)} \\ \bar{c} = 1 &: \tilde{y}_i^{n+1} = \tilde{y}_i^* && \text{(vollständige Reaktion)} \end{aligned} \quad (6.9)$$

Der Vergleich von Gleichung 6.5 mit 6.8 liefert einen funktionalen Ausdruck für \bar{c} :

$$\bar{c} = 1 - e^{-\left(\frac{\Delta t}{\tau_{chem}}\right)} \quad (6.10)$$

Wie bereits ausgeführt, sollen bei der Modellierung von \bar{c} die turbulente Mischungsverteilung und detaillierte Reaktionskinetik berücksichtigt werden. Um dies zu erreichen, wird wiederum auf die Modellierungsphilosophie des allgemeinen Progress-Ansatzes zurückgegriffen. Dazu wird entsprechend der Gleichung 6.10 eine Reaktionsfortschrittvariable $c(Z)$ im Mischungsbruchraum Z eingeführt:

$$c(Z) = 1 - e^{-\left(\frac{\Delta t}{\tau_{chem}(Z)}\right)} \quad (6.11)$$

Gleichung 6.11 beinhaltet zwei Unbekannte, die chemische Reaktionszeit $\tau_{chem}(Z)$ und die Reaktionsdauer Δt . Zunächst konzentrieren wir uns auf die Berechnung der chemischen Reaktionszeit. Ausgehend von einem Anfangszustand p_0, T_0 und Z_0 repräsentiert $\tau_{chem}(Z)$ die Dauer, bis zum Erreichen eines vorgegeben Reaktionsfortschritt-Kriteriums. Um den Progress

einer chemisch, reaktiven Strömung global zu beschreiben, eignet sich die zeitliche Entwicklung der Temperaturen besonders gut, da sie in integraler Form das Resultat einer komplexen Reaktionsfolge darstellt. Zur Beschränkung des Wertebereichs auf $[0, 1]$ für den Reaktionsfortschritt wird eine Normierung vorgenommen (siehe **Abbildung 6.5**):

$$c(Z) = \frac{T(Z) - T_0(Z)}{T_{eq}(Z) - T_0(Z)} \quad (6.12)$$

Generell sind alle Größen in dieser Gleichung Funktionen vom Anfangszustand (z.B. $T(Z) = T(p_0, T_0, Z_0)$). Zu Gunsten der Übersichtlichkeit wird im Folgenden auf die explizite Schreibweise verzichtet. Die Berechnung der Temperaturverläufe $T(Z)$ erfolgt auf Basis homogener Reaktorrechnungen unter Verwendung detaillierter Reaktionskinetik. Die Normierung aus Gleichung 6.12 ergibt sich dann aus der Anfangstemperatur $T_0(Z)$ und der Gleichgewichtstemperatur $T_{eq}(Z)$.

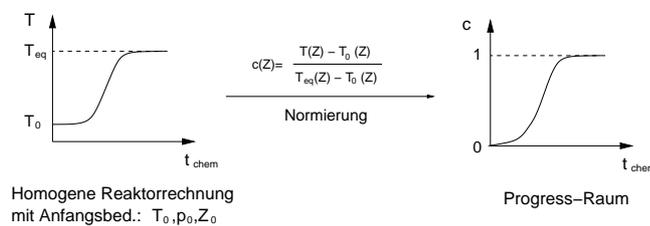


Abbildung 6.5: Schematische Darstellung der Vorgehensweise zur Transformation des Temperaturverlaufs in den Progress-Raum.

Zur Bestimmung der chemische Reaktionszeit $\tau_{chem}(Z)$ muss ein Referenz-Intervallbereich des Reaktionsfortschritts vorgegeben werden. Dieser Intervallbereich kann statisch oder adaptiv festgelegt werden:

$$\tau_{chem}(Z) = t_{chem}(c = 0.95) - t_{chem}(c = 0.05) \quad (6.13)$$

$$\tau_{chem}(Z) = t_{chem}(c = 0.95) - t_{chem}(y_{CO} = 0.02) \quad (6.14)$$

$$\tau_{chem}(Z) = t_{chem}(c = 0.95) - t_{chem}(y_{CO} = \text{adaptiv}) \quad (6.15)$$

Die ersten beiden Intervalle sind statisch, das letzte adaptiv definiert. Für das in Abschnitt 6.2 vorgestellte PDF-Zündmodell eignet sich der Massenbruch von Kohlenmonoxid y_{CO} als Kriterium für den Reaktionsbeginn. Je nach Festlegung des Zündkriteriums (statisch oder adaptiv) kann auf diese Weise ein konsistenter Übergang vom Zünd- zum Verbrennungsmodell erreicht werden.

Zur Berechnung des mittleren, chemischen Reaktionsfortschritts \bar{c} werden die Reaktionsfortschritte $c(Z)$ über eine β -Funktion gewichtet. Dadurch ist implizit die turbulente Gemischverteilung berücksichtigt. Da alle $c(Z)$ mit einer unterschiedlichen Wärmefreisetzung $\Delta H(Z)$ korrelieren, muss bei der Integration eine Normierung bzgl. $\Delta H(Z)$ vorgenommen werden. Mit Gleichung 6.11 folgt schließlich für \bar{c} :

$$\bar{c} = 1 - \frac{\int_Z e^{-\left(\frac{\Delta t}{\tau_{chem}(Z)}\right)} \Delta H(Z) \tilde{P}_Z(Z; \vec{x}, t) dZ}{\int_Z \Delta H(Z) \tilde{P}_Z(Z; \vec{x}, t) dZ} \quad (6.16)$$

Zur Quantifizierung der Reaktionsdauer Δt wird eine Transportgleichung im physikalischen Raum gelöst. Die Herausforderung liegt dabei in der Quantifizierung des Diffusions- und Spray-Quellterms.

	Mixing-Timescale	PDF-Timescale	Progress-Ansatz
Chem. Zeitskala	empirisch	empirisch	=f(PDF,det. Kinetik)
Turb. Zeitskala	$= c^* \cdot \frac{k}{\epsilon}$	über \widetilde{Z}''^2	über \widetilde{Z}''^2
Chemie	phänomenologisch	phänomenologisch	detailliert
Turbulente Gemischverteilung	für $\bar{\tau}_{chem}$: nein	für $\bar{\tau}_{chem}$: nein	für $\bar{\tau}_{chem}$: ja
Tuning	für $\bar{\tau}_{chem}$ und $\bar{\tau}_{turb}$	für $\bar{\tau}_{chem}$	-

Tabelle 6.3: Gegenüberstellung unterschiedlicher Konzepte zur Berechnung von $\bar{\tau}_{chem}$. Aufgrund der hohen Detaillierungstiefe benötigt der Progress-Ansatz keine Tuning-Faktoren.

Kapitel 7

Validierung der Verbrennungsmodelle unter motorischen Randbedingungen

Die Validierung der Verbrennungsmodelle erfolgt in dieser Arbeit am Beispiel unterschiedlicher direkteinspritzender Dieselmotoren. Der Hauptfokus liegt im Abgleich der Wärmefreisetzung. Die Schadstoffbildung wird nur qualitativ bzgl. des Ruß-NO_x-Trade-Offs betrachtet. 3D-Simulationsergebnisse werden Pkw-Motor-, Nfz-Motor- und Schiffsmotor-Messungen gegenübergestellt. Die experimentellen Daten umfassen neben integralen Druckverläufen auch Hochgeschwindigkeitsaufnahmen des Eigenleuchtens der Flammen im Brennraum für den Nfz-Motor. Auf Basis der induzierten und gerechneten Druckverläufe werden über eine Druckverlaufsanalyse die Brennverläufe bestimmt und verglichen.

7.1 Vernetzung

Das im Abschnitt 2.4.1 aufgeführte partielle Differentialgleichungssystem der Gasphase stellt ein Anfangswertproblem in der Zeit und ein Randwertproblem im Ortsraum dar. Sowohl Anfangs- als auch Randbedingungen müssen problemspezifisch definiert werden.

Zur numerischen Lösung der innermotorischen Strömungsmechanik muss der Brennraum diskretisiert werden. Die Lösung der Erhaltungsgleichungen auf einem Brennraumgitter erfolgt bei KIVA mit einem Finiten-Volumen-Verfahren, wobei blockstrukturierte, hexagonale Gitter verwendet werden.

Bei denen in dieser Arbeit untersuchten DE-Dieselmotoren erzeugt die Einlassströmung eine relativ rotationssymmetrische Drallströmung. Daher können in der 3D-Simulation folgende vereinfachende Annahmen getroffen werden:

- **Keine explizite Berechnung der Einlassströmung:** Als Berechnungsbeginn wird ein Zeitpunkt kurz nach dem Schließen der Einlassventile festgelegt. Es werden integrale Werte für Druck, Temperatur, Turbulenzgrößen, Gemischzusammensetzung und Drall vorgegeben. Die Drallzahl wird experimentell im Blasversuch bestimmt.
- **Berechnung auf einem Sektornetz:** Die Simulationen werden jeweils für ein Sektor des Brennraums durchgeführt, der nur einen Einspritzstrahl enthält. Bei der Einspritzung mit einer 6-Lochdüse wird ein 60°-Sektor, mit einer 8-Lochdüse ein 45°-Sektor betrachtet.

Beide Annahmen resultieren in einer erheblichen Reduzierung des Rechenaufwands.

Bauteilelastizität

Zur realitätsnahen Abbildung der Brennraumgeometrie muss das Gitter während der Rechnung entsprechend der Kolbenposition gestaucht bzw. gestreckt werden. Bei modernen Kolbenmotoren mit Spitzendrücken von bis zu 200 bar sind die Gaskräfte so groß, dass es zu erkennbaren Elastizitätseffekten der Bauteile kommt. Diese sind im Vergleich zu den Trägheitskräften so gross, dass das Brennraumvolumen zunimmt und damit implizit das Kompressionsverhältnis reduziert wird. Um diese Effekte bei der Simulation zu berücksichtigen, wird in dieser Arbeit die Kolbenstellung nicht nur aus dem Kurbeltriebgesetz, sondern auch aus den Gaskräften bestimmt. Zur Beschreibung der Bauteilverformung wird eine lineare Abhängigkeit dz/dp als Näherung eingeführt. Die Kolbenstellung wird folglich bei gegebener Druckdifferenz dp um die Höhe dz korrigiert.

Für den Schiffsmotor wurde mit Hilfe von Zug- und Druckversuchen für den Aufbau Kurbelwellenzapfen-Pleuelstange-Kolben ein Elastizitätswert von $dz/dp = 2.15 \mu\text{m}/\text{bar}$ gemessen. Die Druckverlaufsanalyse hat jedoch gezeigt, dass dieser Wert um circa den Faktor 2.5 bis 3.5 multipliziert werden muss, damit auch die Dehnung der Laufbuchse und des Zylinderkopfs darin berücksichtigt werden. Dabei wird von der Annahme ausgegangen, dass alle Bauteile ein ähnliches Elastizitätsmodul besitzen. **Abbildung 7.1** zeigt den Einfluss unterschiedlicher Elastizitätsfaktoren dz/dp auf den Kompressionsdruckverlauf eines Schiffsmotors bei Vollast. Eine Zunahme der Elastizität resultiert in einem kleineren Kompressionsenddruck, als Folge der Volumenzunahme.

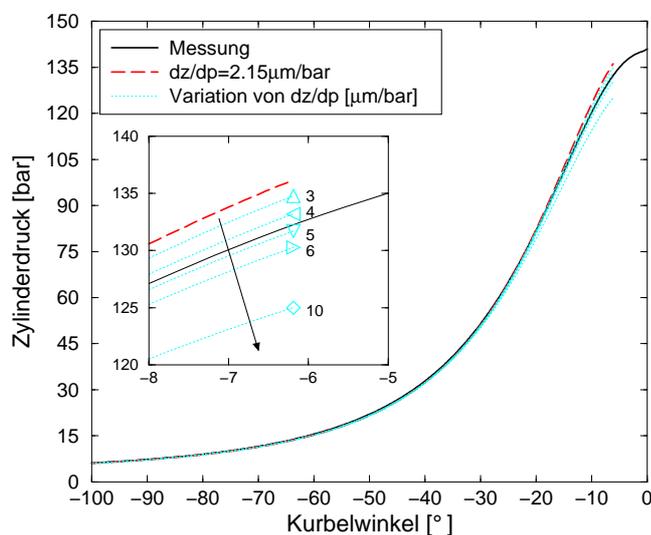


Abbildung 7.1: Einfluss der Bauteildehnung am Beispiel des Kompressionsdruckverlaufs eines Schiffsmotors bei Vollast.

Strahlangepasste Vernetzung

Die korrekte Modellierung der Einspritzung ist eine notwendige Voraussetzung für die Validierung der nachfolgenden reaktiven Prozesse wie Zündung, Verbrennung und Schadstoffbildung. Wie in Kapitel 3 ausgeführt, liegt bei der Simulation der Gemischbildung eine grundsätzliche Schwierigkeit in der Auflösung der sehr großen Bandbreite an relevanten Längenskalen. Die Verwendung von ganzheitlichen düsenlochaufgelösten Netzen ist aus Rechenzeitgründen nicht möglich. In [69] wurde gezeigt, dass mit Standardnetzen ohne Adaption keine Netzunabhängigkeit erreicht werden kann, da die Zellen im Düsennahbereich in der Regel größer als der Strahldurchmesser sind (siehe **Abbildung 3.1**). Dadurch wird das Geschwindigkeitsprofil nicht ausreichend aufgelöst was zwangsläufig zur falschen Berechnung der Turbulenzproduktion im Strahl führt. Um diesen Fehler zu umgehen, werden in dieser Arbeit ausschließlich an die Strahlströmung adaptierte Netze verwendet, die den Einspritzstrahl im Düsennahbereich richtig auflösen (siehe **Abbildung 7.2**). Das Netz ist der kegelförmigen Geometrie des Strahls angepasst und ändert während der gesamten Einspritzung seine Lage relativ zur Düse nicht. Die Zellgrößen sind an die Strömung adaptiert, so dass die Strömung im Bereich kleiner Längenskalen (Strahl) durch kleine Zellen und im Bereich großer Längenskalen durch große Zellen aufgelöst wird. In Verbindung mit dem im Kapitel 3 vorgestellten 1D-Euler-Strahlmodell kann jetzt im Gegensatz zu konventionellen Netzen eine nahezu netzunabhängige Simulation der dieselmotorischen Gemischbildung erreicht werden.

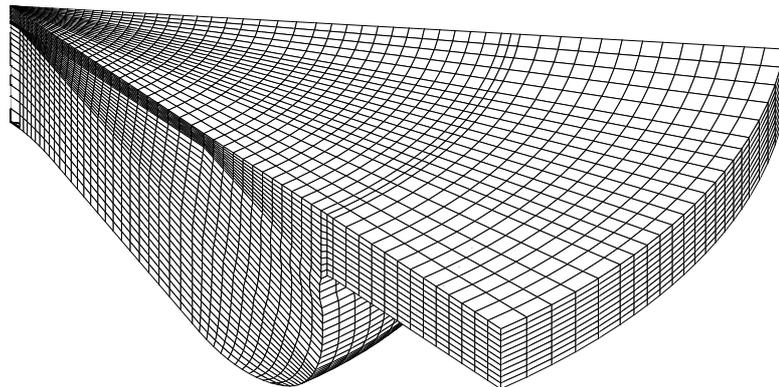


Abbildung 7.2: Beispiel für ein strahladaptiertes Rechennetz. Das Netz ist der kegelförmigen Geometrie des Strahls angepasst.

7.2 Modellauswahl und Vorgabe der Modellparameter

Als Grundlage zur Berechnung der innermotorischen Strömungsprozesse dient in dieser Arbeit der CFD-Code KIVA3v (siehe Kapitel 2.4.2). Das **Grundgleichungssystem der Gasphase** ist in Kapitel 2.4.1 zusammengefasst, wobei in dieser Arbeit **Realgaseffekte** Berücksichtigung finden (siehe Anhang C). Die Modellierung der dieselmotorischen Gemischbildung erfolgt nach dem in Kapitel 3 vorgestellten **ICAS-Konzept** auf **strahladaptiven Netzen**. Die Verbrennungsmodellierung basiert auf dem in Kapitel 6 beschriebenen Progress-Ansatz. Die Simula-

tion der Zündung erfolgt mit dem **PDF-Zündmodell**, die Simulation der Wärmefreisetzung mit dem **7-Spezies-PDF-Timescale Modell**, wobei als mittlere chemische Zeitskala $\bar{\tau}_{chem}$ die einfache empirische Arrhenius-Beziehung 4.48 verwendet wird. Zur Modellierung der NO-Emissionen wird der im Kapitel 5.1 dargestellte **erweiterte Zeldovich-Mechanismus** mit extrahierten reaktionskinetischen Daten aus dem **GriMech3.0** verwendet. Zur Simulation der Rußemissionen wird das in Kapitel 5.2 beschriebene **PDF-Rußmodell** eingesetzt. Zur Berechnung des Wandwärmeübergangs wird auf einen halbempirischen **Ansatz von Woschni** [122] zurückgegriffen. Der Einfluss von **Bauteilelastizitäten** aufgrund von Gaskräften wird über den Elastizitätsfaktor dz/dp berücksichtigt.

Mit diesem Simulationssetup wird versucht, die für die einzelnen Prozesse bekannten relevanten chemischen und physikalischen Einflussgrößen abzubilden, bei gleichzeitiger Gewährleistung wirtschaftlicher Rechenzeiten. Im Folgenden werden die zum Aufsetzen einer Rechnung notwendigen modellinhärenten wesentlichen Schritte aufgezeigt und diskutiert.

Modellierung der Gemischbildung mit ICAS

Im Folgenden werden die strahlspezifischen Modellparameter nur kurz vorgestellt. Für ein ausführliches Studium wird auf [53] verwiesen.

In dieser Arbeit beginnt die Simulation der Gemischbildung am Spritzlochaustritt mit ausgeprägten Randbedingungen durch die **Düseninnenströmung**. Diese wird in der vorliegenden Arbeit nicht explizit berechnet, stattdessen werden über das Spritzloch aufintegrierte Größen, wie der Massen- und Impulsstrom vorgegeben. Der zeitliche Verlauf des Einspritzmassenstroms muss als Messwert vorliegen oder durch die Simulation der Injektorhydraulik bestimmt werden. Der Impulsstrom wird über den Kontraktionsbeiwert modelliert. Auf die Modellierung des **Primärzerfalls** wird verzichtet, da bisher keine durchgängige mathematisch-numerische Beschreibung der Vorgänge bekannt ist. Stattdessen wird hier von einer Zerstäubung des Strahls in feine Tropfen bereits direkt am Düsenaustritt ausgegangen. Der Primärzerfall spielt sich dann, bedingt durch Kavitationseffekte und starker Turbulenz der Strömung bereits im Spritzloch ab. Für die Tropfenanzahldichte wird am Düsenaustritt eine χ -squared Verteilung angenommen, die als Modellparameter den mittleren Tropfendurchmesser benötigt. Dieser muss durch eine Gegenüberstellung mit diagnostischen Untersuchungen abgeglichen werden. Der **Sekundärzerfall** wird mit dem *wave-Modell* nach Reitz [100] simuliert. Dieses Modell basiert auf der Instabilitätsanalyse und erlaubt eine durchgängige Beschreibung über alle Zerfallsregimes. Zur Erfassung injektorspezifischer Effekte auf den aerodynamischen Zerfall muss die Zerfallszeit problemspezifisch durch experimentellen Abgleich angepasst werden. Für das ICAS-Strahlmodell ist der **Strahlwinkel** eine wichtige Eingangsgröße, da damit der Bereich definiert wird, über den die relevanten Gleichungen integriert werden. In dieser Arbeit wird der Strahlwinkel nicht aus einer experimentellen Datenbank herausgelesen, sondern iterativ durch 3D-Simulation bestimmt. Dies geschieht unter der Annahme, dass für den im 3D-Code berechneten Gasfreistrahls bzgl. der Strahlaufweitung und damit des Eindringverhaltens eine konvergente netzunabhängige Lösung existiert, was für düsenlochaufgelöste Netze der Fall ist. Ein korrekt eingestellter Strahlwinkel zeichnet sich dadurch aus, dass das Eindringverhalten der 1D-Gasphase (ICAS) und der 3D-Gasphase (CFD-Code) identisch ist (siehe **Abbildung 7.3**).

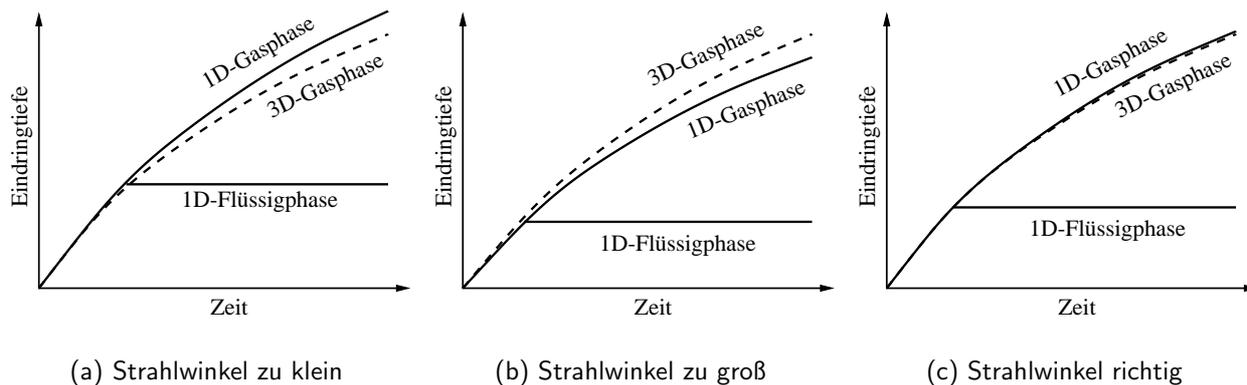


Abbildung 7.3: Iterative Bestimmung des Strahlwinkels in ICAS. Der Strahlwinkel ist dann richtig eingestellt, wenn das Eindringverhalten der Strahlspitze im 1D- und 3D-Code identisch ist [53].

Modellierung der Zündung, Wärmefreisetzung und Schadstoffemissionen

Mit dem Einsetzen der Kraftstoffverdampfung setzt die Berechnung der Verteilung des als Indikatorspezies definierten Kohlenmonoxids auf Basis des **PDF-Zündmodells** ein. Dieses Modell benötigt keine Adaption von Modellparametern. Mit Erreichen eines vordefinierten CO-Massenbruchs von 0.02 wird zur Berechnung der Wärmefreisetzung das **7-Spezies-PDF-Timescale Verbrennungsmodell** aktiviert. Die Vorgabe des kritischen CO-Massenbruchs zeigt nahezu keine Sensitivität bzgl. des reaktiven Verhaltens, da im Bereich des oberen Totpunktes die schnellen Temperaturänderungen das Zündverhalten bestimmen.

In dieser Arbeit wird vereinfachend eine globale chemische Zeitskala für alle am Reaktionssystem beteiligten Spezies angenommen. Diese bestimmt sich auf Basis eines Einschrittmechanismus, der die Reaktion von Kraftstoff und Luft zu Produkten beschreibt. Das Ergebnis ist die in Abschnitt 4.6 eingeführte und im Abschnitt 6.3.2 diskutierte empirische Arrhenius-Beziehung:

$$\tau_{chem} = A^{-1} (y_{C_xH_y})^{0.75} (y_{O_2})^{-1.5} e^{\frac{E_a}{RT}} \quad (7.1)$$

Aufgrund dieser simplifizierten Beschreibung müssen der präexponentielle Faktor A und die Aktivierungsenergie E problemspezifisch angepasst werden. In dieser Arbeit wurde E konstant gehalten und nur A variiert. In **Abbildung 7.4** ist der Einfluss von A auf die Verbrennung in Form des Druck- und Brennverlaufs für den Nfz-Motor bei Teillast dargestellt. Da A die chemische Zeit skaliert, sind insbesondere Sensitivitäten bzgl. des Ablaufs der Vormischverbrennung zu erkennen, da diese primär chemisch kontrolliert ist. Da A eine inverse Zeitskala repräsentiert, resultiert eine Erhöhung von A in einer schnelleren und damit kürzeren Vormischverbrennungsphase. In **Abbildung 7.4** ist zudem zu erkennen, dass mit zunehmenden A der Maximaldruck leicht ansteigt und dessen Lage sich etwas nach früh verschiebt. Für Vollastfälle mit kurzen Vormischverbrennungsphasen verliert die Vorgabe von A an Bedeutung, da die Verbrennung primär mischungskontrolliert abläuft.

In dieser Arbeit wurde die Anpassung von A motorspezifisch vorgenommen, d.h. A wurde für jeden Motor einmal kalibriert und anschließend konstant gehalten.

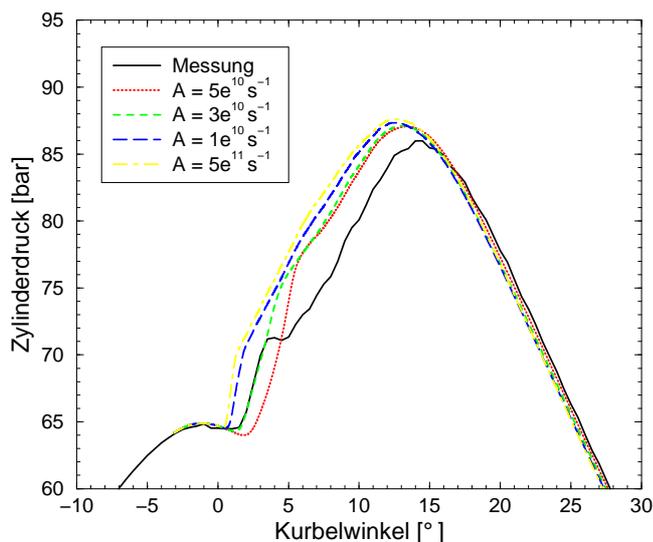


Abbildung 7.4: Sensitivität der Verbrennung bzgl. der chemischen Zeitskala $\tau_{chem} = A^{-1}(y_{C_xH_y})^{0.75}(y_{O_2}) - 1.5e^{\frac{E_a}{RT}}$.

Die Berechnung der thermischen NO-Bildung nach dem **erweiterten Zeldovich-Mechanismus** 5.1-5.3 basiert auf den reaktionskinetischen Daten des GriMech3.0 (siehe Abschnitt 5.1). Die Rußberechnung wurde mit dem **PDF-Rußmodell** durchgeführt (siehe Abschnitt 5.2). Da der Hauptfokus der vorliegenden Arbeit in der Simulation der Wärmefreisetzung liegt, wurden die NO- und Rußemissionen zwar mitgerechnet, aber nicht explizit validiert und daher auch keine Modellparameter variiert.

Modellierung des Wandwärmeeübergangs

Bei der energetischen Bilanzierung innermotorischer Verbrennungsprozesse muss auch der Wärmeübergang im Zylinder berücksichtigt werden. Dieser setzt sich aus einem konvektiven und einem Strahlungsanteil zusammen. In der vorliegenden Arbeit wird der Strahlungsanteil nicht explizit modelliert, sondern er wird dem konvektiven Wärmeübergangskoeffizienten zugeschlagen. Die Berechnung des resultierenden Wärmestroms erfolgt mit dem *Newton'schen Ansatz* für Konvektion:

$$\tilde{Q}^w = \sum_i \bar{\alpha}_i A_i (\tilde{T}_{w,i} - \tilde{T}_{gas}) \quad (7.2)$$

$\bar{\alpha}_i$, A_i , $\tilde{T}_{w,i}$ und \tilde{T}_{gas} entsprechen dem Wärmeübergangskoeffizienten, der Oberfläche, der Wand- und Gastemperatur. Der Brennraum wird in die drei Bereiche Kolben, Zylinderkopf und vom Kolben freigegebener Teil der Laufbuchse unterteilt, wobei zeitlich und örtlich konstante Temperaturen angenommen werden. Die Berechnung des Wandwärmeeübergangskoeffizienten erfolgt in dieser Arbeit mit einem halbempirischen Ansatz von Woschni [122]. Dieser Ansatz kann nur eine grobe Näherung darstellen, da der Wärmeübergangskoeffizient für den gesamten Brennraum als konstant angenommen wird.

Zur *Kalibrierung* des vorliegenden Modells wurde in dieser Arbeit der jeweilige Wärmeübergangskoeffizient in der Form angepasst, dass der zeitlich integrale Wärmeübergang im Zylinder zwischen 0D-Arbeitsprozess- und CFD-Rechnung ungefähr übereinstimmen:

$$\int dQ_{3D-CFD}^w \approx \int dQ_{0D-APR}^w \quad (7.3)$$

Bei der 0D-Arbeitsprozessrechnung ergibt sich der integrale Wärmeverlust leicht mit Hilfe des ersten Hauptsatzes der Thermodynamik:

$$\int dQ^w = \int c_v(p, T) dT - \int p dV - \int dQ^c \quad (7.4)$$

Dabei erhält man $c_v(p, T)$ aus Tabellenwerken, T aus der thermischen Zustandsgleichung, den Druck p aus der Druckindizierung, V aus dem Kurbeltriebgesetz und die gesamte chemische Energie $\int dQ^c$ aus dem Produkt der eingespritzten Kraftstoffmasse und dem unteren Heizwert des Kraftstoffs.

Modellierung des thermodynamischen Gasverhaltens

Die Beschreibung der Thermodynamik nimmt einen wichtigen Stellenwert bei der strömungsmechanischen Berechnung von Verbrennungsmotoren ein, da die thermische und kalorische Zustandsgleichung zur Schließung der kompressiblen Erhaltungsgleichungen herangezogen werden. Dabei wird meistens von idealem Gasverhalten ausgegangen. Allerdings ist diese Annahme für Verbrennungsmotoren mit hohen Spitzendrücken falsch, da in diesen Druckbereichen der Einfluss von Realgaseffekten nicht mehr vernachlässigt werden darf. Zur Verdeutlichung dieser Aussage zeigt **Abbildung 7.5-links** einen Vergleich zwischen zwei Motor-Kompressionsdruckverläufen, die auf Basis gleicher Anfangs- und Randbedingungen mit und ohne Berücksichtigung von Realgasverhalten mit einem 0D-Arbeitsprozessprogramm berechnet wurden. Dabei wurde das Idealgasverhalten mit Hilfe der *JANAF*-Tabellen und die Realgaseigenschaften mittels eines Ansatzes von Zacharias berechnet (siehe Anhang C). Der Vergleich zeigt deutlich, dass bereits in der frühen Kompressionsphase erhebliche Abweichungen zwischen den Kurven auftreten. **Abbildung 7.5-rechts** zeigt einen Konturplot des Realgasfaktors nach Zacharias (siehe Anhang C) im p, T -Zustandsraum. Im grünen Bereich ist der Realgaseinfluss gering, im roten Bereich groß (bis zu 6 Prozent Abweichung). In diesen Konturplot ist zusätzlich der Prozessverlauf eines Schiffsmotors unter Vollastbedingungen mit einem Maximaldruck von nahezu 150 *bar* in Form der über den Brennraum zeitlich gemittelten Zustandsgrößen Druck und Temperatur projiziert. Die Prozessverlaufskurve schneidet nahezu das gesamte Spektrum an Isoflächen des Realgasfaktors.

Abbildung 7.5 verdeutlicht die Relevanz von Realgaseffekten. Aus diesem Grund wird in dieser Arbeit für alle Motorrechnungen Realgasverhalten berücksichtigt. Dazu wurde das im Anhang C aufgeführte Konzept entwickelt.

7.3 Validierungsergebnisse

Um die Allgemeingültigkeit des vorgestellten Simulationspakets zu untersuchen, wurden unterschiedliche direktinspritzende Dieselmotoren bei variierenden Betriebsbedingungen gerechnet. Dabei lag der Schwerpunkt auf dem Abgleich zwischen Messung und Rechnung für

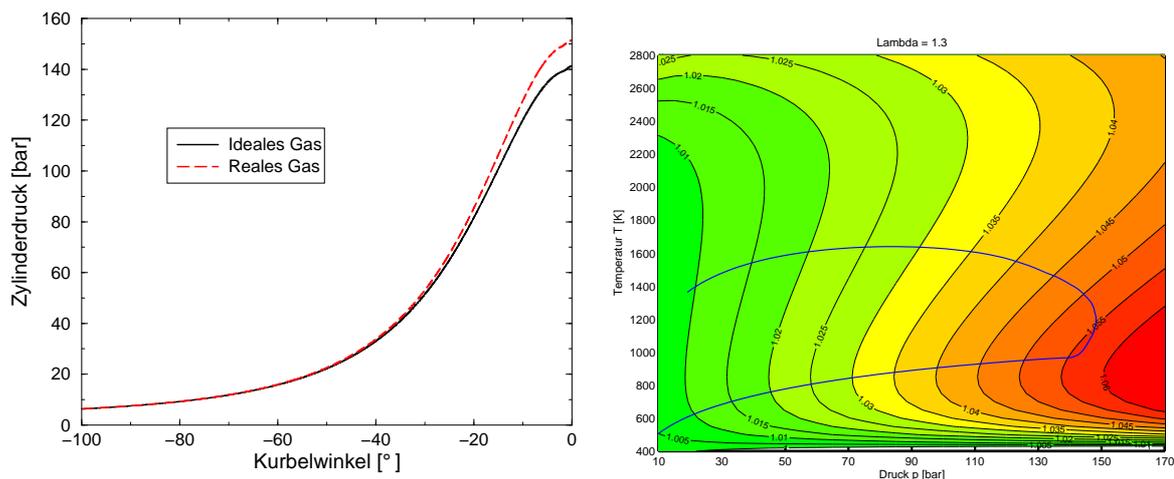


Abbildung 7.5: Links: Unterschied zwischen Realgas- und Idealgasbehandlung am Beispiel einer Kompressionsrechnung für einen Schiffsmotor. Rechts: Konturplot des Realgasfaktors Z nach Zacharias (inklusive Dissoziationen und Assoziationen \rightarrow siehe Anhang C) in Abhängigkeit von p und T für $\lambda \approx 1,3$ ($Z = 1$ repräsentiert ideales Gasverhalten). Für den Schiffsmotor ist der zeitlich-gemittelte Prozessverlauf von ES bis $A\ddot{O}$ anhand der über den Brennraum gemittelten Werten für Druck und Temperatur dargestellt.

die Zündung und Wärmefreisetzung. Neben Druckindiziermessungen von Einzylinderaggregaten standen auch Verbrennungsaufnahmen von einem optisch zugänglichen Filmmotor zur Verfügung. Als Versuchsträger dienten ein Pkw-, Nfz- und Schiffsmotor, deren wesentlichen Motor-Spezifikationen in Tabelle 7.1 zusammengefasst sind.

7.3.1 Druck-, Brenn- und Summenbrennverläufe

Die konventionelle Verbrennungsanalyse erfolgt in der Praxis primär durch die Druckindizierung im Brennraum mit nachfolgender thermodynamischer Analyse sowie durch Standard-Abgasmesstechniken. Zur Validierung von motorischen Simulationsrechnungen wird ebenfalls primär auf Druckindizier- und Abgasmessungen und falls vorhanden, lokale diagnostische Untersuchungen zurückgegriffen. Erstere können mit ausreichender Genauigkeit bestimmt werden, wogegen optische Messungen meist nur sehr schwierig und aufwändig zu realisieren sind. Nichtsdestotrotz stellen diagnostische Ergebnisse eine sehr wichtige Informationsquelle dar, da nur mit ihnen ein Abgleich berechneter lokaler Strömungseigenschaften möglich ist. Durch die thermodynamische Analyse auf Basis der Druckindizierung (Druckverlaufsanalyse) ist es möglich, den Brennverlauf zu bestimmen, der die zeitliche Energiefreisetzung im Brennraum beschreibt. Der Brennverlauf und das Integral des Brennverlaufs (Summenbrennverlauf) sind weitere wichtige Vergleichsgrößen bei der Bewertung von Simulationsmodellen.

Die **Abbildungen 7.6-7.10** zeigen den Vergleich zwischen gemessenen und gerechneten Druck-, Brenn- und Summenbrennverläufen für den Pkw-, Nfz- und Schiffsmotor. Die Brennverläufe resultieren dabei aus Druckverlaufsanalysen, die immer mit dem gleichen Analysetool durchgeführt wurden, um so eine möglichst hohe Vergleichbarkeit zu gewährleisten. Bei den Simulationen wurden lediglich der präexponentielle Vorfaktor der mittleren chemischen Zeitskala

		Pkw-Motor	Nfz-Motor	Schiffsmotor
Bohrung	[cm]	8.8	13.0	16.5
Hub	[cm]	8.84	15.0	19.0
Pleuellänge	[cm]	14.9	27.3	35.4
Kompressions- verhältnis	[-]	18.0	16.5	15.2
Einspritzsystem		CR	PLD	CR
Düsenlochanzahl		7	8	8

Tabelle 7.1: Motorspezifikationen der gerechneten Motoren.

A (siehe Gleichung 7.1) für jeden Motor an der Druckindizierung abgeglichen, wobei für die unterschiedlichen Betriebsbedingungen des Nfz-Motors A konstant gehalten wurde. Folgende Werte für A wurden gewählt:

- Pkw-Motor: $A = 1e^{10} s^{-1}$
- Nfz-Motor: $A = 3e^{10} s^{-1}$
- Schiffsmotor: $A = 2e^{10} s^{-1}$

Die allgemeine Übereinstimmung zwischen Messung und Rechnung kann als gut bewertet werden. Die wesentlichen dieselmotorischen Verbrennungscharakteristiken wie Zündzeitpunkt, Höhe und Lage des Maximaldrucks und integrale Energieumsetzung werden von der Simulation zufriedenstellend abgebildet. Lediglich die Vormischverbrennung wird überschätzt, was sich insbesondere bei den Teillastfällen zeigt. Daraus resultiert eine etwas zu geringe Wärmefreisetzung während der Diffusionsverbrennung. Die Ursache dafür ist begründet in der simplifizierten empirischen Beschreibung der chemischen Zeitskala durch den Zusammenhang 7.1. Die Umsetzung des am Ende von Abschnitt 6.3.2 vorgestellten PDF-Ansatzes zur Berechnung der chemischen Zeitskala verspricht eine bessere Abbildung der Vormischverbrennung, da dieses Konzept eine detaillierte Chemiebeschreibung erlaubt. Des Weiteren werden wahrscheinlich die Varianzen des Mischungsbruchs unterschätzt, da bei der Bilanzierung der Varianz des Mischungsbruchs der Einfluss der Kraftstoffverdampfung vernachlässigt wurde (siehe Abschnitt 4.3.1).

Die Abweichungen zwischen Messung und Rechnung können folgendermaßen zusammengefasst werden:

- Zündzeitpunkt: $\pm 1^\circ\text{KW}$
- Maximaldruck: $\pm 3\%$
- Lage Maximaldruck: $\pm 3^\circ\text{KW}$
- Energiefreisetzung: $\pm 1\%$

7.3.2 Lokale Flammenausbreitung

Zur Überprüfung der numerischen Flammenausbreitung findet exemplarisch für den Vollastfall des Nfz-Motors in **Abbildung 7.11** eine Gegenüberstellung mit experimentellen Daten statt.

In den jeweils linken Hälften der zeitlichen Bildfolge sind fünf Strahlen des in einem Filmaggregats aufgenommenen Rußleuchtens zu sehen. Das Filmaggregat entspricht weitestgehend dem identischen Prüfstands Aufbau der Nfz-Einzylindermotoren, die zur Verbrennungsabstimmung eingesetzt werden. Sämtliche Details der Brennraumgestaltung mit zugehöriger Temperaturverteilung und Ladungsbewegung werden zum einen durch Verwendung eines Serienzylinderkopfes wiedergegeben, zum anderen wird anstelle des normalen Serienkolbens ein spezieller Filmkolben mit großem Quarzglasfenster verwendet, in das brennraumseitig die Originalkolbenkontur eingeschliffen ist. Dies erlaubt nahezu verzerrungsfreie Messungen, auch im Quetschspalt [29]. Mit Hilfe des optischen Motors ist es möglich, Verbrennungsbilder in Abhängigkeit des Ortes und des Kurbelwinkels im gesamten Brennraum zu erfassen.

Die rechten Bildhälften in **Abbildung 7.11** resultieren aus Ergebnissen, die in einem 45° -Sektor durchgeführten Rechnung, die unter Ausnutzung der Symmetrieeigenschaften auf 180° erweitert wurden. Die Konturlinien der Laufbuchse und der Kolbenmulde sind grau eingefärbt. Da Ruß bekanntermaßen bereits bei 1400 K gelblich leuchtet, wird auf der Simulationsseite die 1400 K-Temperatur-Isofläche dargestellt.

Sowohl bei der Messung als auch bei der Simulation wird als Ansicht der Blick von unten durch den Kolben gewählt. Die Simulationsseiten sind dabei bzgl. der diagnostischen Verbrennungsbildern spiegelverkehrt dargestellt, um eine direkte Vergleichbarkeit an der Symmetrieachse zu erreichen. Die allgemeine Übereinstimmung zwischen Messung und Rechnung kann als gut bewertet werden. Das Flammeneindringverhalten wird bis zum Erreichen des Muldenrands sehr gut wiedergegeben. Das Vordringen der Flammenfronten in den Quetschspalt wird bei der Simulation etwas unterschätzt. Dies kann u.a. darin begründet sein, dass sämtliche Totvolumen, wie beispielsweise der Feuersteg, bei der Simulation nicht explizit abgebildet werden. Stattdessen werden ihre Anteile durch eine Vergrößerung des Quetschspaltes kompensiert, um so das vorgegebene Kompressionsverhältnis zu erreichen. Diese Überschätzung des Quetschspaltvolumens hat sicherlich Einfluss auf die Flammenfrontausbreitung, aufgrund der veränderten Strömungsverhältnisse. Bemerkenswert ist die ähnliche Abbildung des Flammenfortschritts in Richtung Düse, was aus den letzten beiden Verbrennungsbildern hervorgeht. Nachdem die Flammenfronten den Muldenrand erreicht haben, zeigen sich dunkle Zonen im Kolbenmuldenbereich. Auf der experimentellen Seite zeugt dies von sehr geringen Rußkonzentrationen. Auf der Simulationsseite resultieren diese schwarzen Löcher aus dem Kontakt der Temperaturisoflächen mit dem Zylinderkopf und dem Kolben. Abschließend bleibt zu bemerken, dass es sich bei den diagnostischen Verbrennungsbildern um Momentaufnahmen handelt, im Gegensatz zu den berechneten Bildern, die auf einer statistischen Mittelung beruhen. Daher können Detailerscheinungen von der Simulation nicht wiedergegeben werden.

7.3.3 Beispiel einer lokalen Strömungsanalyse

Der Schwerpunkt dieser Arbeit liegt in der Modellierung der Wärmefreisetzung. Nichtsdestotrotz sollen in diesem Abschnitt qualitativ die räumlichen Verteilungen der Ruß- und Stickoxidemissionen an einem exemplarischen Fall aufgezeigt und diskutiert werden. Wie bereits im vorherigen Abschnitt wurde dazu der Vollastfall des Nfz-Motors gerechnet. Zur Simulation der

Stickoxid-Bildung wurde der erweiterte Zeldovich-Mechanismus mit GriMech-Konstantensatz und für die Rußbildung und -oxidation das PDF-Rußmodell eingesetzt.

Zur räumlichen Analyse chemischer Reaktionsabläufe ist es stets hilfreich, neben den zu untersuchenden Komponenten, auch die Strömungsdynamik, sowie die Gemisch- und Temperaturverteilungen lokal im Brennraum zu betrachten. Aus diesem Grund sind zusätzlich zu den Stickoxid- und Ruß-Konzentrationsverteilungen in **Abbildung 7.13** auch die Mischungsbruch- und Temperaturfelder in **Abbildung 7.12** zu jedem Zeitpunkt in der vertikalen Schnittebene des repräsentativen Einspritzstrahls als Konturplots dargestellt.¹ Die roten Punkte kennzeichnen die Tropfenpakete. Die Bildsequenz startet 5°KW nach Einspritzbeginn.

Zunächst wird die Gemisch- und Temperaturentwicklung diskutiert (**Abbildungen 7.12**). Um eine Vorstellung über die im Brennraum vorliegende Strömungsdynamik zu erhalten, sind die Gasgeschwindigkeiten in Form eines Vektorfeldes in dem jeweiligen Konturplot des Mischungsbruchs projiziert. Die Länge der Pfeile skaliert dabei mit der Höhe der Strömungsgeschwindigkeiten. Die Vektorfelder zeigen deutlich die strahlindizierten hohen Strömungsgeschwindigkeiten während der Einspritzphase (Spritzdauer = 28°KW). Nach dem Auftreffen des Strahls auf den Muldenrand (bei 9° KW nOT) formieren sich im weiteren Verlauf ein ausgeprägter Muldenwirbel und ein kleiner Wirbel im Quetschspalt. Der Muldenwirbel führt zu einer wesentlichen Brennraumerfassung des Gemischs entlang der Muldenwand in Richtung Zylindermittelachse. Anhand der Temperaturplots ist zu erkennen, dass kurz nach Einspritzbeginn (Bild 9° KW nOT) Zündung und die damit verbundene Temperaturerhöhung im Strahlrandbereich stattfindet. Dieser Bereich korreliert mit den Zonen stöchiometrischer Mischung ($Z_{st} \approx 0.062$). Im Düsenbereich liegt ein Temperaturminimum vor, da die Verdampfung der Kraftstofftropfen zu einem Energieentzug aus der Umgebung führt (Verdampfungsenthalpie). Nach dem der Stahl den Muldenrand erreicht hat, bilden sich heiße Gemischzonen im Quetschspalt und in der Kolbenmulde. Im weiteren Verlauf erfasst die Verbrennung zunehmend den Brennraum in Richtung Laufbuchse und Zylindermittelachse.

Die lokale Darstellung der Schadstoffemissionen Ruß und NO in **Abbildung 7.13** stehen im Einklang mit den Mischungs- und Temperaturfeldern aus **Abbildung 7.12**. So ist allgemein bekannt, dass thermisches NO primär in heißen, mageren und Ruß in warmen, fetten Gemischzonen gebildet wird.² Die rechte Spalte der **Abbildung 7.13** zeigt den im Vergleich zur Rußformation deutlich langsameren NO-Bildungsprozess. Da bei der NO-Modellierung nur thermisches Stickoxid berücksichtigt wurde, findet keine NO-Reduktion statt. Im weiteren Verlauf der Expansion ist daher eine Art Homogenisierung zu beobachten, da die Prozesstemperaturen für eine NO-Bildung zu gering sind. Das PDF-Rußmodell erfasst sowohl Bildungs- als auch Oxidationsprozesse. Dies geht auch klar erkennbar aus der rechten Spalte der **Abbildung 7.13** hervor. Mit Einsetzen der Wärmefreisetzung werden hohe Rußkonzentrationen im inneren Strahlrandbereich und an der Spitze gebildet. Diese Zonen korrelieren mit der Mischungsbruchverteilung, bis auf den Düsenbereich, in dem die Temperaturen zu gering für eine Rußbildung sind. Im weiteren Verbrennungsablauf gewinnen die Rußoxidationsprozesse deutlich an Gewichtung. Der größte Teil des zuvor gebildeten Rußes wird in heißen, sauerstoffreichen Gebieten oxidiert. Lediglich am Zylinderrand und im mittleren Muldenbereich liegen noch geringe Konzentration an Ruß vor. Voraussetzung zur Rußoxidation ist der Transport

¹Da der Motor mit niedrigem Drall betrieben wird, repräsentieren diese 2D-Schnittbilder recht gut die innermotorischen Geschehnisse.

²Daher spricht man auch vom Ruß-NO_x-Trade-Off.

des Rußes in heiße, sauerstoffreiche Gebiete. Bei dem hier dargestellten Beispiel wird dies vor allem durch den ausgeprägten Muldenwirbel realisiert.

Dieses Beispiel einer lokalen Verbrennungsanalyse illustriert in Grundzügen die Unterstützung, die die 3D-Strömungssimulation bei der Brennverfahrensentwicklung leisten kann. Die Auswirkungen beispielsweise unterschiedlicher Einspritzparameter oder Muldengeometrien können in zeit- und kostensparender Weise untersucht, verstanden und bewertet werden.

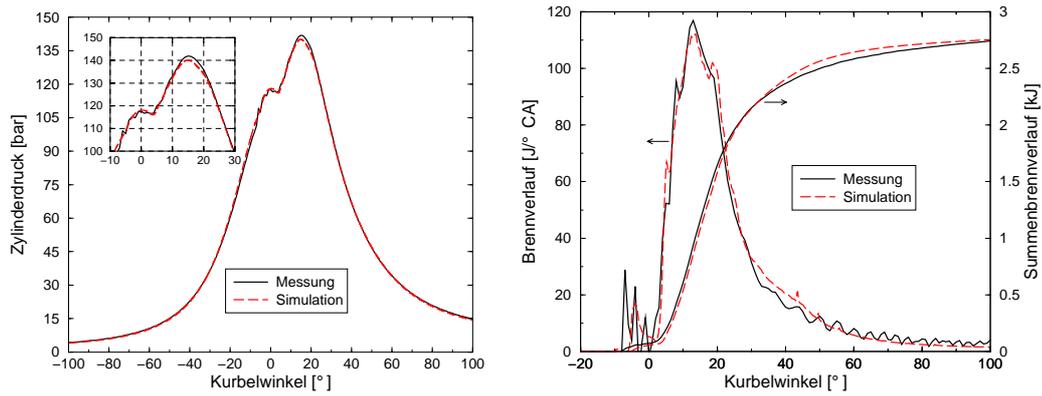


Abbildung 7.6: Pkw-Motor, 2000 min^{-1} , Vollast mit Voreinspritzung ($SB=9.8^\circ \text{ KW vOT}$): Vergleich Messung und Rechnung für Druck-, Brenn- und Summenbrennverlauf.

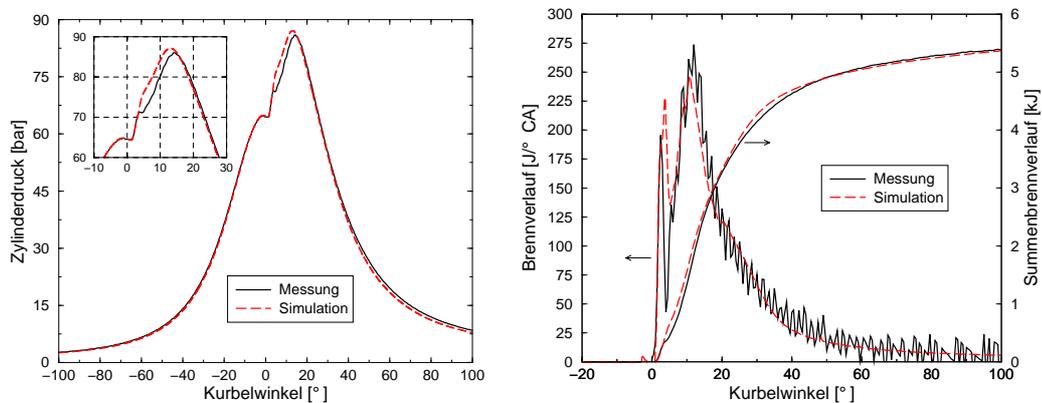


Abbildung 7.7: Nfz-Motor, 1130 min^{-1} , Teillast ($SB=3^\circ \text{ KW vOT}$): Gegenüberstellung Messung und Rechnung für Druck-, Brenn- und Summenbrennverlauf.

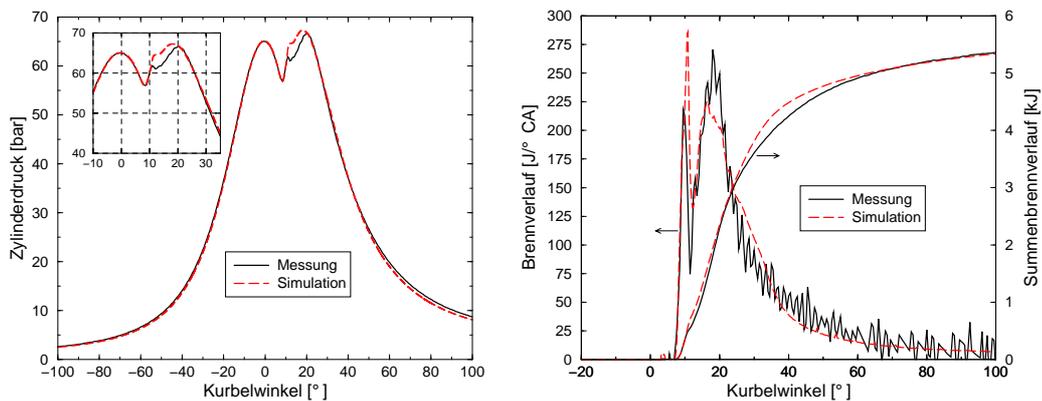


Abbildung 7.8: Nfz-Motor, 1130 min^{-1} , Teillast ($SB=3^\circ \text{ KW nOT}$): Gegenüberstellung Messung und Rechnung für Druck-, Brenn- und Summenbrennverlauf.

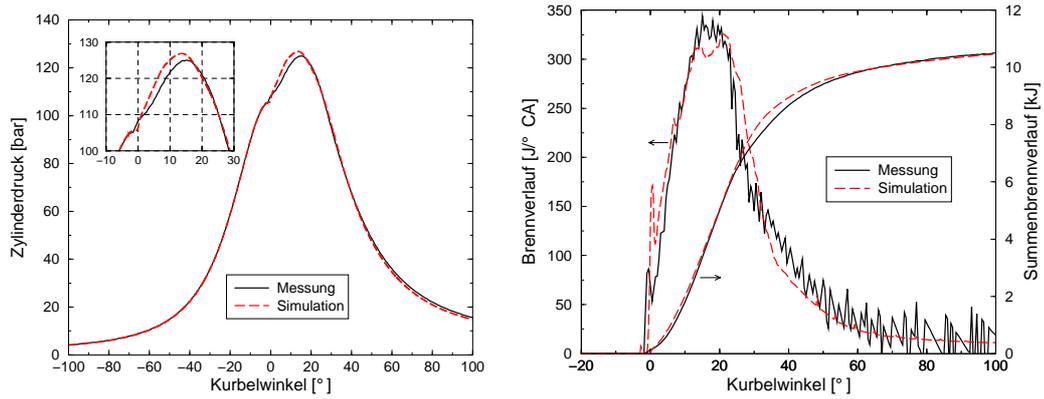


Abbildung 7.9: Nfz-Motor, 1130 min^{-1} , Vollast ($SB=3^\circ \text{ KW vOT}$): Gegenüberstellung Messung und Rechnung für Druck-, Brenn- und Summenbrennverlauf.

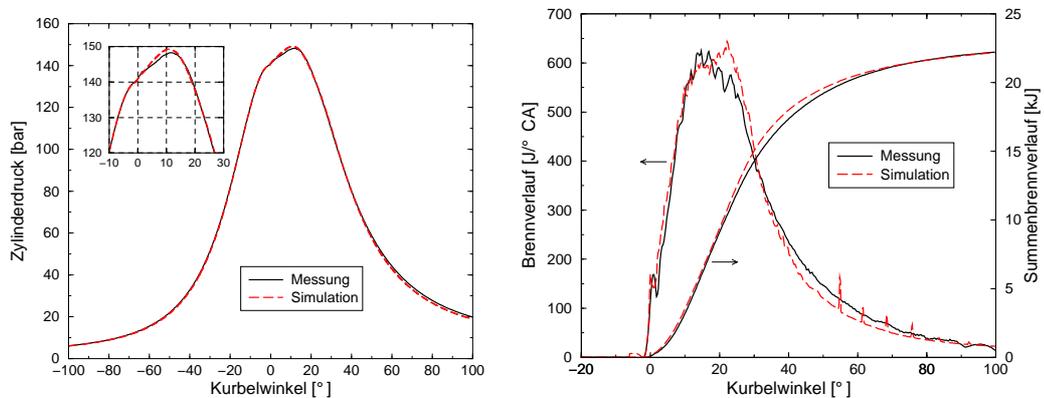
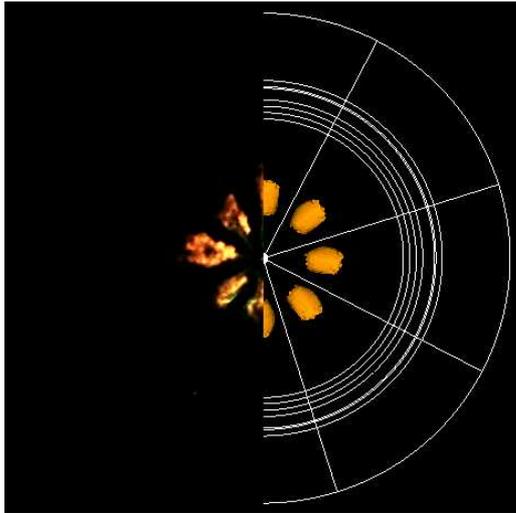
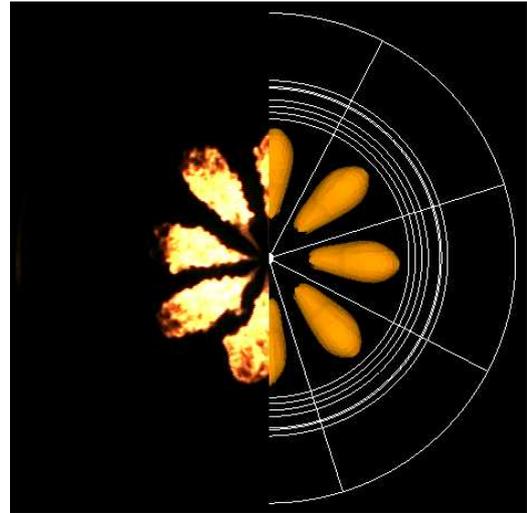


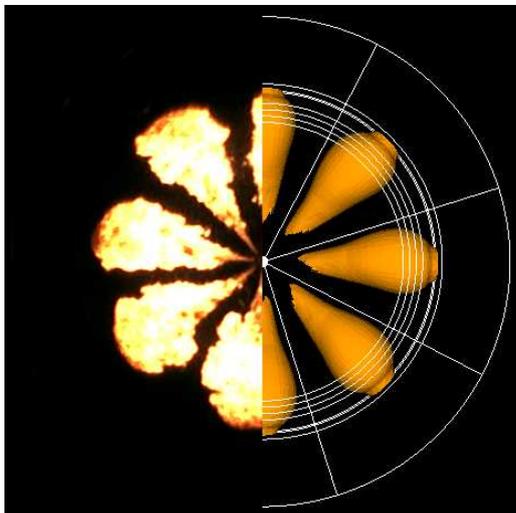
Abbildung 7.10: Schiffsmotor, 1500 min^{-1} , Teillast ($SB=6^\circ \text{ KW vOT}$): Gegenüberstellung Messung und Rechnung für Druck-, Brenn- und Summenbrennverlauf.



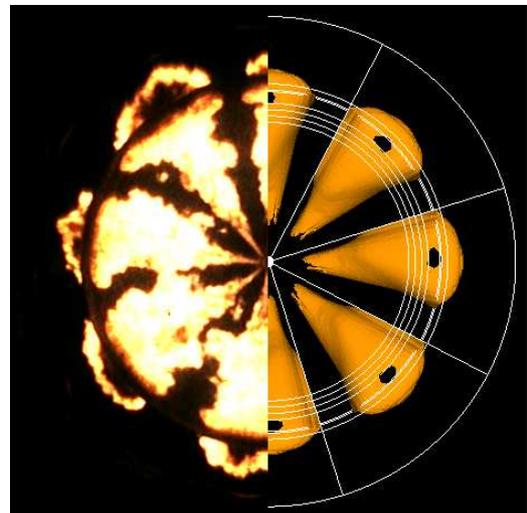
-0.1°KW nOT



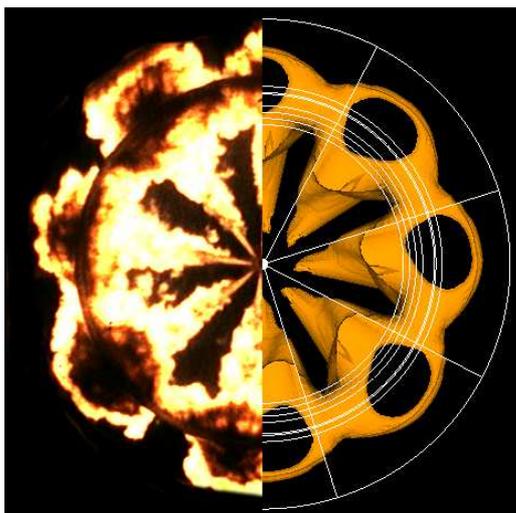
2.1°KW nOT



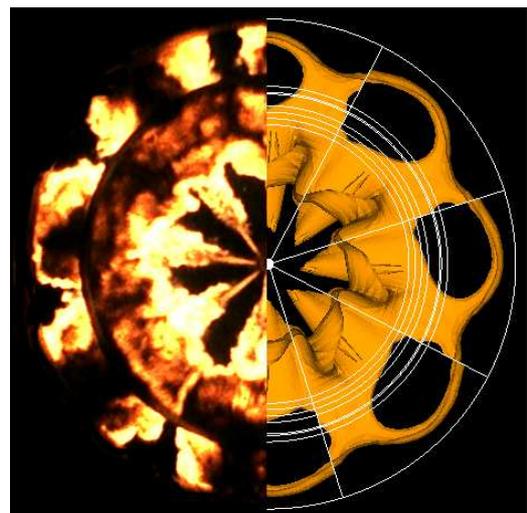
6.5°KW nOT



9.8°KW nOT



15.3°KW nOT



20.5°KW nOT

Abbildung 7.11: Nfz-Motor, 1130 min^{-1} , Volllast ($SB=3^\circ \text{vOT}$): Gegenüberstellung Ru-bleuchten (links) und 1400 K-Temperaturisofläche (rechts: spiegelbildlich).

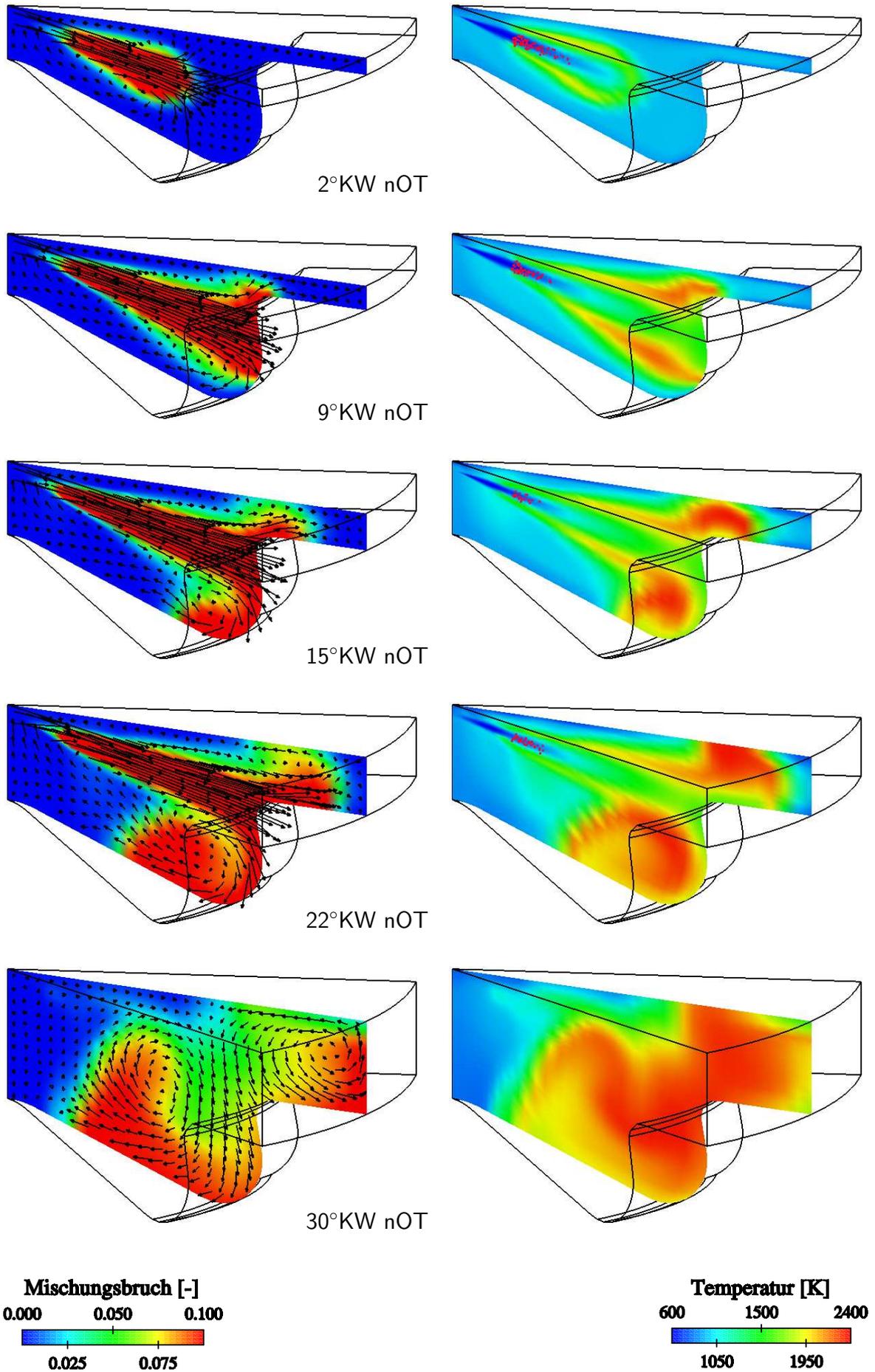


Abbildung 7.12: Nfz-Motor, 1130 min^{-1} , Volllast ($SB=3^\circ\text{vOT}$): Lokale Verteilung des Mischungsbruchs (links) und der Temperatur (rechts).

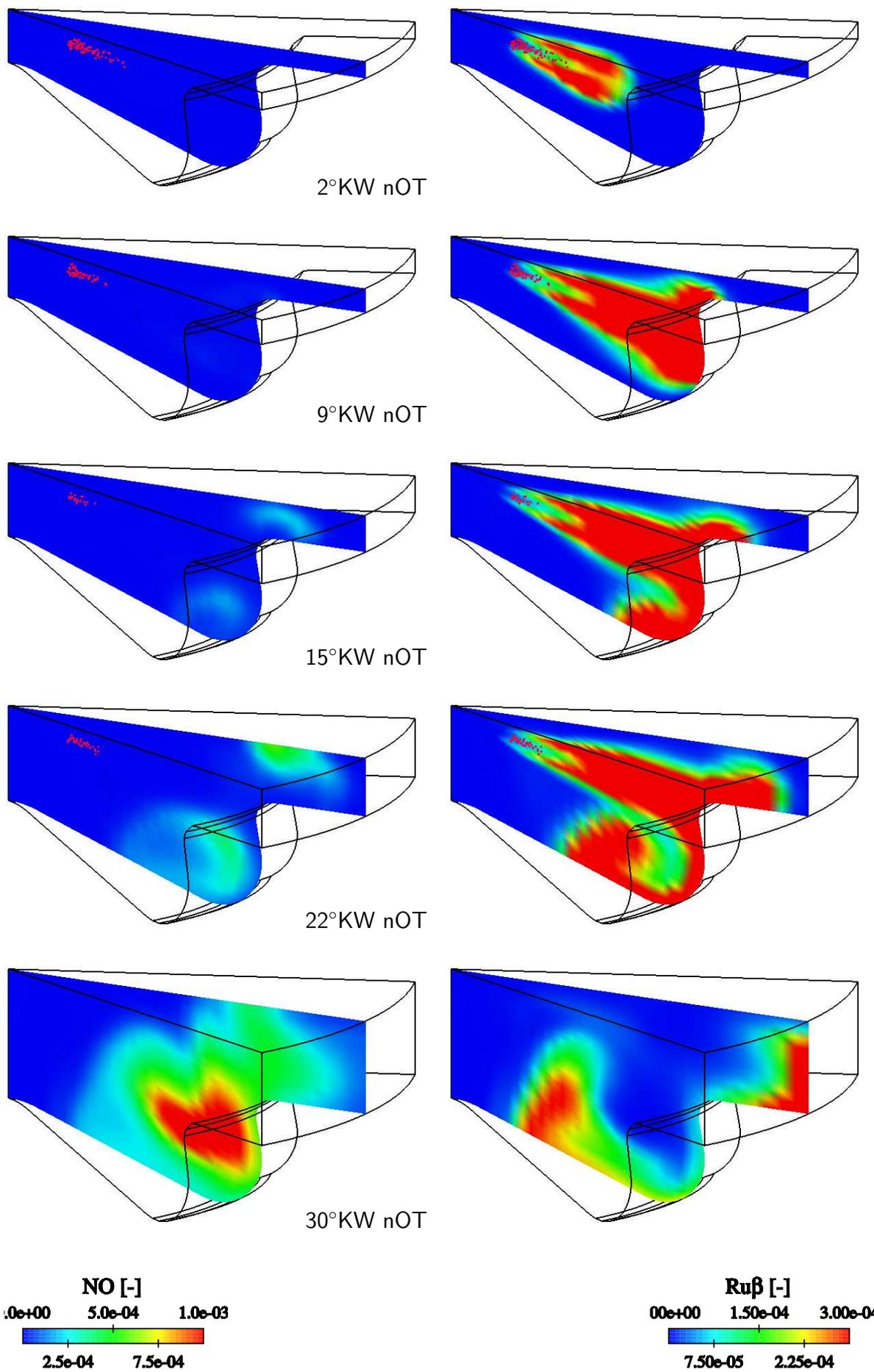


Abbildung 7.13: Nfz-Motor, 1130 min⁻¹, Volllast (SB=3°vOT): Lokale Verteilung des Stickoxid- (links) und Rußmassenbruchs (rechts).

Kapitel 8

Zusammenfassung und Ausblick

8.1 Zusammenfassung

Moderne aufgeladene, direkteinspritzende Dieselmotoren erfreuen sich auch im Pkw-Segment europaweit zunehmender Beliebtheit. Sparsamkeit, Geräuschkomfort, Fahrspaß und ihre große Zuverlässigkeit prägen diesen Trend. Die Fortsetzung dieser Erfolgsgeschichte erfordert im Zuge der kontinuierlichen Fortschreibung und Verschärfung der Abgasgesetzgebung und der beim Motorenbau angestrebten Reduktion von Kosten und Entwicklungszeiten eine stetige Optimierung der Motor-Parameter Leistung, Kraftstoffverbrauch, Geräusch- und Schadstoffemissionen. Zur Erreichung dieser anspruchsvollen Zielsetzung ist es unverzichtbar, Simulationstools noch intensiver in den Entwicklungsprozess einzubinden. Durch die zunehmende Leistungsfähigkeit moderner Rechenanlagen erweist sich dabei die 3D-Strömungssimulation als aussichtreichstes Instrument, da sie nicht nur ein verbessertes Verständnis der innermotorischen Phänomene ermöglicht, sondern auch die Perspektive bietet, bereits in der frühen Konzeptionsphase entscheidende Impulse für die Brennverfahrensentwicklung geben zu können. Voraussetzung dazu ist die Bereitstellung eines Simulationspakets, charakterisiert durch einen hohen Grad an Vorausberechenbarkeit bei gleichzeitig wirtschaftlichem Rechenaufwand. Aufgabe dieser Arbeit war es, ein durchgängiges Konzept zur Simulation der dieselmotorischen Verbrennung bereitzustellen, das dieser ambitionierten Zielsetzung näher kommt. Die Fokussierung lag dabei in der verbesserten Verbrennungsmodellierung und der Konsolidierung sämtlicher Teilmodelle zu einem operativ einsetzbaren Gesamtpaket. Als Teilmodelle werden in dieser Arbeit Ansätze zur Simulation der Strahlausbreitung und Gemischbildung, sowie der Zündung und Wärmefreisetzung unterschieden, die im Folgenden kurz zusammengefasst werden.

Strahlausbreitung und Gemischbildung

Die realistische Berechnung der Strahlausbreitung und Gemischbildung ist Grundvoraussetzung zur vorhersagefähigen Simulation der Verbrennung und Schadstoffbildung. Das meist in kommerziellen und wissenschaftlichen CFD-Programmen integrierte *stochastische Strahlmodell* zeigt in der Anwendung eine unphysikalische Abhängigkeit der Strahlstruktur (Strahlwinkel, Eindringtiefe) vom Rechnernetz, der Strahl-Orientierung im Rechnernetz, der Tropfengröße und der Umgebungsturbulenz. Die Probleme resultieren aus mangelnder numerischer Auflösung relevanter Prozesse im Düsenbereich. Eine Netzverfeinerung ist dabei nicht nur aus Rechenzeitgründen problematisch, sondern auch wegen der abnehmenden statistischen Konver-

genz der Wahrscheinlichkeitsverteilung für Tropfeneigenschaften, was an dem stochastischen Lösungscharakter des Modells liegt. Aufgrund dieser schwerwiegenden Schwächen erfolgt in der vorliegenden Arbeit die Simulation der dieselmotorischen Gemischbildung auf Basis des bereits für nicht-reagierende Strömungen validierten ICAS-Konzepts auf strahladaptiven Netzen. Bei diesem Konzept wird die Strahlausbreitung und Gemischbildung im Düsenbereich mit einem 1D-Strahlmodell (ICAS-Modell) berechnet. Dabei werden die Beschreibungsgleichungen über den Strahlquerschnitt integriert und eindimensional gelöst. Die 1D-Betrachtungsweise ist erlaubt, da im Düsenbereich der Strahl aufgrund seiner hohen Impulsstromdichte gegenüber allen anderen Umgebungseinflüssen dominiert. Das ICAS-Modell führt zu einer physikalischen Abbildung der Austauschprozesse zwischen der Flüssig- und Gasphase, und zur Vermeidung des Auflösungsproblems des stochastischen Strahlmodells. Der 1D-Strahlcode koppelt mit dem 3D-CFD-Code über konservativen Quelltermaustausch. Weiter strahlabwärts, wo die Eindimensionalität des Strahls gestört wird, erfolgt an definierter Position ein Umschalten auf das konventionelle stochastische Strahlmodell, um mögliche Interaktionen des Strahls mit der Strömung und den Wänden korrekt abzubilden. Zur besseren Auflösung der Zustände im 3D-CFD-Code werden in dieser Arbeit ausschließlich an die Strahlströmung adaptierte Netze verwendet. Diese Netze sind der kegelförmigen Geometrie des Strahls angepasst und ändern während der Einspritzphase ihre Lage relativ zur Düse nicht. In Verbindung mit dem 1D-ICAS Modell kann dadurch im Gegensatz zu konventionellen Netzen eine nahezu netzunabhängige Simulation der dieselmotorischen Gemischbildung erreicht werden.

Zündung und Wärmefreisetzung

Die dieselmotorische Verbrennung ist das Resultat komplexer, eng-gekoppelter chemischer und physikalischer Vorgänge. Zur numerischen Simulation wird in dieser Arbeit ein modularer Progress-Ansatz vorgeschlagen. Dabei wird versucht, komplexe chemische Reaktionsabläufe über eine minimale Anzahl ausgewählter Progress-Variablen abzubilden, um über deren Bilanzierungen Aussagen über globale chemische Vorgänge machen zu können. Da zur Beschreibung der chemischen Prozesse nur eine limitierte Anzahl an Bilanzgleichungen gelöst werden müssen, ist es möglich, bei der Simulation der chemischen Vorgänge detaillierte Reaktionskinetik zu berücksichtigen.

In der vorliegenden Arbeit werden Teilmodelle zur Simulation der Zündung, Vormisch- und Diffusionsverbrennung vorgestellt. Diese Aufteilung repräsentiert die typischen Phasen einer konventionellen Dieselverbrennung. Entsprechend dem Verhältnis aus turbulenter und chemischer Zeitskala (\rightarrow Damköhlerzahl) können die Zündphase und die Phase der Vormischverbrennung als chemisch kontrolliert und die Diffusionsverbrennung als Mischungskontrolliert charakterisiert werden. Entsprechend dieser Unterscheidung wird in der vorliegenden Arbeit bei der Berechnung der Zündung von detaillierter Reaktionskinetik ausgegangen, und ein Modell vorgeschlagen, das zur Berechnung der Vormischverbrennung ebenfalls die Berücksichtigung detaillierter Chemie erlaubt. Für die Zündung wird Kohlenmonoxid als Progress-Variable definiert. Diese Wahl basiert auf reaktionskinetischen Untersuchungen. Die strenge Kopplung zwischen Temperatur- und Gemischverteilung während der Zündphase wird bei der Modellbildung berücksichtigt. Zur Simulation der Wärmefreisetzung werden Bilanzgleichungen für die sieben Spezies Kraftstoff, O₂, N₂, CO₂, H₂O, CO und H₂ gelöst. Diese Spezies repräsentieren in guter Näherung die tatsächlich vorliegende Gemischzusammensetzung während aller Phasen der dieselmotorischen Verbrennung.

Entsprechend der Modellvorstellung von Flamelet-Ansätzen wird in dieser Arbeit zur Schließung der Bilanzgleichungen, d.h. zur Quantifizierung der mittleren chemischen Quellterme, eine numerische Entkopplung der Strömungs- und Chemiebehandlung vorgenommen. Dabei werden die chemischen Prozesse im Mischungsbruchraum aufgelöst. Da die Zündung ein chemisch kontrollierter Prozess ist, werden die CO-Bildungsraten in Abhängigkeit der Flamelet-Parameter a-priori berechnet und tabelliert. Dies erfolgt mit Hilfe von 0D-Reaktorrechnungen unter Berücksichtigung detaillierter Chemie. Zur Simulation der Wärmefreisetzung werden in Abhängigkeit der thermodynamischen Zustände die Gleichgewichtskonzentrationen der sieben Spezies im Mischungsbruchraum zu jedem Zeitschritt und an jedem Ort bestimmt.

Die Transformation sowohl der CO-Bildungsraten als auch der Spezies-Konzentrationen vom Mischungsbruchraum in den statistischen, physikalischen Raum erfolgt über eine Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (PDF)-Gewichtung. Eine PDF repräsentiert die lokale turbulenten Gemischverteilung im physikalischen Raum. In dieser Arbeit werden ausschließlich β -PDFs verwendet. Diese bestimmen sich analytisch aus dem mittleren Mischungsbruch und dessen Varianz. Zur numerischen Lösung der Gewichtung einer beliebigen Flamelet-Lösung mit einer β -PDF wird in dieser Arbeit ein semi-analytischer Ansatz vorgeschlagen.

Validierung des Gesamtmodells

Zur Validierung des Gesamtmodells wurden alle Teilmodelle in den wissenschaftlichen 3D-Strömungslöser KIVA3v implementiert. Weitere Änderungen bezüglich des Standard-KIVA-Codes betreffen die Implementierung eines Modells zur Berücksichtigung von Bauteilelastizitätseffekten aufgrund von Gaskräften und die Adaption eines Ansatzes zur Beschreibung von Realgaseffekten, der sich bei der Arbeitsprozessrechnung etabliert hat.

Um die Allgemeingültigkeit des vorgestellten Simulationspakets zu untersuchen, wurden unterschiedliche direkt einspritzende Dieselmotoren (Pkw-, Nfz- und Schiffsmotor) bei variierenden Betriebsbedingungen gerechnet. Neben Druckindiziermessungen von Einzylinderaggregaten standen auch Verbrennungsaufnahmen von einem optisch zugänglichen Filmmotor zur Verfügung. Die Fokussierung bei der Validierung lag auf dem Abgleich zwischen Messung und Rechnung für die Zündung und Wärmefreisetzung. Bei sämtlichen Simulationen wurde lediglich der präexponentielle Vorfaktor der mittleren chemischen Zeitskala motorspezifisch angepasst, der vor allem die Vormischverbrennung beeinflusst.

Die Gegenüberstellung zwischen Messung und Rechnung kann allgemein als gut bewertet werden. Die wesentlichen dieselmotorischen Verbrennungscharakteristiken wie Zündzeitpunkt, Höhe und Lage des Maximaldrucks und integrale Energieumsetzung werden von der Simulation gut abgebildet. Lediglich die Vormischverbrennung wird leicht überschätzt, was sich insbesondere bei den Teillastfällen zeigt. Daraus resultiert eine etwas zu geringe Wärmefreisetzung bei der Diffusionsverbrennung. Die Ursache dafür ist in der empirischen Beschreibung der chemischen Zeitskala begründet. Neben integralen Zustandsgrößen wurde auch das simulierte lokale Flammeneindringverhalten mit diagnostischen Aufnahmen des Rußeigenleuchtens verglichen. Dabei ergab sich ebenfalls eine gute Übereinstimmung.

8.2 Fazit und Ausblick

Die frühzeitige Einbindung der 3D-Strömungssimulation in den Entwicklungsprozess moderner Dieselmotoren wird immer wichtiger werden, um so den wachsenden gesellschaftlichen, legislativen und wirtschaftlichen Anforderungen genügen zu können. Voraussetzung dazu ist die Bereitstellung von Simulationswerkzeugen, die sich durch einen maximal hohen Grad an Vorausberechenbarkeit bei gleichzeitig minimalen Rechenaufwand auszeichnen.

In den letzten Jahren konnten große Fortschritte bei der Strahl- und Verbrennungsmodellierung erzielt werden, wobei noch immer Verbesserungspotenzial besteht. Die Vorhersagefähigkeit der Simulation der dieselmotorischen Gemischbildung konnte mit dem Euler-Strahlmodell gegenüber dem konventionellen stochastischen Strahlmodell erheblich verbessert werden. Zukünftige Konzepte verfolgen eine durchgängige Berechnungsstrategie von der Injektorhydraulik über die kavitierende Düseninnenströmung hin zur dreidimensionalen düsen aufgelösten Strahlmodellierung in Euler'scher Beschreibung.

Insbesondere durch die Einführung von Flamelet-Konzepten zur Simulation der dieselmotorischen Verbrennung ist es möglich geworden, auch reagierende Strömungen numerisch genauer abbilden zu können. Sie erlauben die Berücksichtigung detaillierter Reaktionskinetik bei gleichzeitig wirtschaftlichem Rechenaufwand, aufgrund der entkoppelten numerischen Behandlung der strömungsmechanischen und chemischen Prozesse. Basierend auf dieser Grundvorstellung, konnte mit dem in dieser Arbeit beschriebenen Progress-Ansatz zur Simulation der Zündung und Wärmefreisetzung, die konventionelle dieselmotorische Verbrennung unter Vollastbedingungen (gering ausgeprägte Vormischverbrennungsphase) bereits gut vorausberechnet werden. Die Umsetzung des in dieser Arbeit vorgestellten Progress-Ansatzes zur Beschreibung der Vormischverbrennung verspricht einen gesteigerten Grad an Vorausberechenbarkeit, da komplexe Chemie bei der Bestimmung der chemischen Zeitskala berücksichtigt wird. Zur Simulation zukünftiger homogener Brennverfahren muss das Mehrstufenzündverhalten (*Cool-Flame-Phase*) numerisch abgebildet werden. Grundvoraussetzung dazu ist die Verfügbarkeit von validierten detaillierten Reaktionsmechanismen. Generell ist die Definition der Zündverzugszeit als Progress-Variable zur Beschreibung der Zündung vorstellbar, da sie in direkter Weise den Zündprozess beschreibt. Weitere Untersuchungen sind zur verbesserten Beschreibung der Chemie-Turbulenz-Interaktion erforderlich, was insbesondere die Abbildung der turbulenten Gemischverteilung über Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen (PDFs) und die Transformation der turbulenten Strömungseffekte in den Mischungsbruchraum (\rightarrow skalare Dissipationsrate) betrifft.

Abschließend bleibt festzuhalten, dass das in dieser Arbeit vorgestellte Modellierungskonzept zur Simulation der konventionellen dieselmotorischen Verbrennung bereits in der frühen Konzeptionsphase gewinnbringend eingesetzt werden kann, da es sich durch einen hohen Grad an Vorausberechenbarkeit bei gleichzeitig wirtschaftlichem Rechenaufwand auszeichnet. Der entscheidende nächste Schritt muss die Fokussierung auf die Vorausberechnung von Schadstoffemissionen sein.

Anhang A

Implementierung des RIF-Konzepts bei Erhaltung der thermischen inneren Energie im CFD-Code

Das in Kapitel 4.5 vorgestellte RIF-Modell basiert auf der Erhaltung der totalen Enthalpie im physikalischen Raum. In KIVA wird standardmäßig die Erhaltung der Energie durch die zeitliche und lokale Bilanzierung der thermischen inneren Energie gelöst. Um diesen Standard auf das RIF-Konzept zu übertragen, wurde im Rahmen dieser Arbeit ein Ansatz entwickelt und umgesetzt, der weiterhin die Erhaltung der thermischen inneren Energie vorsieht. Dadurch ist gewährleistet, dass die Evaluierung unterschiedlicher Verbrennungsmodelle auf gleicher Basis erfolgt.

Die Favre-gemittelte Energieerhaltungsgleichung für die thermische innere Energie \tilde{i}_{th} lautet:

$$\frac{\partial \tilde{\rho} \tilde{i}_{th}}{\partial t} + \nabla \cdot (\tilde{\rho} \tilde{u} \tilde{i}_{th}) = -\tilde{p} \nabla \cdot \tilde{u} - \nabla \cdot \tilde{J} + \tilde{\rho} \tilde{\epsilon} + \tilde{Q}^c + \tilde{Q}^s + \tilde{Q}^w \quad (\text{A.1})$$

Im Gegensatz zur Erhaltungsgleichung der totalen inneren Energie erfordert diese Gleichung zur Schließung die Quantifizierung des mittleren chemischen Quellterms \tilde{Q}^c . Im Folgenden werden dazu zwei grundlegend unterschiedliche Konzepte vorgestellt. Abschließend wird ein Ansatz beschrieben, der eine numerisch *sinnvolle* Lösung des mittleren Wärmeflusses \tilde{J} erlaubt.

Ansatz A: Transport der chemischen Energie

Mit Hilfe der integrierten Flamelet-Lösung $\tilde{y}_i = \int_Z y_i(Z) \tilde{P}_Z(Z) dZ$ und der Standardbildungsenthalpie $(\Delta h_f^0)_i$ kann zu jedem Zeitpunkt die lokale Verteilung der chemischen Energie

$$\tilde{Q}^c = \sum_i \tilde{y}_i (\Delta h_f^0)_i \quad (\text{A.2})$$

bestimmt werden. Da aber der chemische Quellterm \tilde{Q}^c zur Schließung der Gleichung A.1 erforderlich ist, muss der transportierte Anteil der chemischen Energie berücksichtigt werden. Eine Bilanzgleichung für die chemische Energie lässt sich einfach mit Hilfe der Bilanzgleichung der Spezies i

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{y}_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{u} \tilde{y}_i) = \nabla \cdot \left[\frac{\mu}{Sc_t} \nabla \tilde{y}_i \right] + \tilde{\rho}_i^c + \tilde{\rho}_i^s \quad (\text{A.3})$$

herleiten. Dazu wird Gleichung A.3 mit der Standardbildungsenthalpie multipliziert:

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{y}_i (\Delta h_f^0)_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{u} \tilde{y}_i (\Delta h_f^0)_i) = \nabla \cdot \left[\frac{\mu}{Sc_t} \nabla \tilde{y}_i (\Delta h_f^0)_i \right] + \tilde{\rho}_i^c (\Delta h_f^0)_i + \tilde{\rho}_i^s (\Delta h_f^0)_i \quad (\text{A.4})$$

Gleichung A.4 über alle Spezies i aufsummiert und Beziehung A.2 eingesetzt, führt zu einer Transportgleichung für die chemische Energie \tilde{Q}^c :

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Q}^c}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{u} \tilde{Q}^c) = \nabla \cdot \left[\frac{\mu}{Sc_t} \nabla \tilde{Q}^c \right] + \sum_i (\tilde{\rho}_i^c (\Delta h_f^0)_i) + \sum_i (\tilde{\rho}_i^s (\Delta h_f^0)_i) \quad (\text{A.5})$$

Um die Quantifizierung des chemischen Quellterms $\sum_i (\tilde{\rho}_i^c (\Delta h_f^0)_i)$ in Gleichung A.5 zu umgehen, wird das Feld der chemischen Energien auf Basis der neuen Flamelet-Lösung und Gleichung A.2 zu Beginn jedes Zeitschritts neu initialisiert. Die aktualisierten chemischen Energien werden anschließend diffusiv und konvektiv im physikalischen Raum transportiert.

Der chemische Quellterm in Gleichung A.1 ergibt sich jetzt aus der Differenz der chemischen Energien des Gemischs vor und nach der Reaktion:

$$\tilde{Q}^c = \frac{\left(\sum_i \tilde{y}_i (\Delta h_f^0)_i \right) - \tilde{Q}_{\text{vor Reaktion}}^c}{\Delta t} \quad (\text{A.6})$$

Abbildung A.1 zeigt schematisch die numerische Umsetzung dieses Konzepts. Der CFD-Code liefert die Flamelet-Parameter für den Zeitschritt Δt . Auf Basis dieser berechnet der Flamelet-Code die Spezies-Massenbrüche im Mischungsbruchraum $y_i(Z)$. Über eine β -PDF-Gewichtung erhält man die mittleren Spezies-Massenbrüche $\tilde{y}_i(\vec{x}, t)$ und damit schließlich die mittleren chemischen Energien im physikalischen Raum $\tilde{Q}^c(\vec{x}, t)$. Die mittleren chemischen Energien vor der Reaktion $\tilde{Q}^c(\vec{x}, t)_{\text{vor Reaktion}}$ ergeben sich aus der Lösung der Transportgleichung A.5 im CFD-Code, wobei die Quantifizierung der chemischen Quellterme entfällt, da bei jedem neuen Zeitschritt eine Reinitialisierung des mittleren chemischen Energiefeldes vorgenommen wird. Abschließend werden die chemischen Energiefreisetzungen $d\tilde{Q}^c(\vec{x}, t)$, bzw. die chemischen Quellterme $\dot{Q}^c(\vec{x}, t)$ (siehe Gleichung A.6) bestimmt. Entscheidend für die erfolgreiche Umsetzung dieses Konzepts ist die Gewährleistung eines numerisch konsistenten Transports des Mischungsbruchs, dessen Varianz und der chemischen Energie, da ansonsten als Folge von numerischen Fehlern künstliche Energiequellen auftreten können (siehe Gleichung A.6).

Ansatz B: Berechnung der mittleren chemischen Reaktionsraten

Dieser Ansatz benötigt zur Schließung der Gleichung A.1 keine zusätzliche Transportgleichung für die chemische Energie. Stattdessen wird der mittlere chemische Quellterm einer Zelle \tilde{Q}^c über eine Aufsummierung aller mittleren Spezies-Reaktionsraten bestimmt, die sich wiederum aus einer PDF-Integration der Reaktionsraten der Spezies i berechnen:

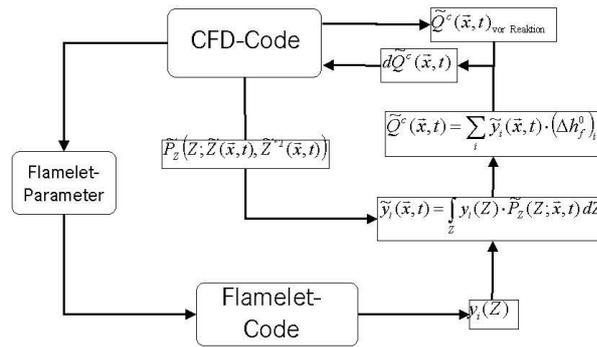


Abbildung A.1: Lösungsstruktur des RIF-Konzepts bei Erhaltung der thermischen inneren Energie im CFD-Code.

$$\tilde{Q}^c = \sum_i (\Delta h_f^0)_i \cdot \int_Z \omega_i(Z) \tilde{P}_Z(Z) dZ \quad (\text{A.7})$$

Die Reaktionsraten ω_i im Mischungsbruchraum werden mit Hilfe des Flamelet-Codes bestimmt. \tilde{P}_Z entspricht wieder einer β -Funktion.

Behandlung des Diffusionsflusses in der Energieerhaltungsgleichung

Zur Quantifizierung der mittleren Wärmestromdichte \tilde{J} in Gleichung A.1 wird im Folgenden ein Ansatz vorgestellt, der auch zur Lösung der Bilanzgleichung für die totale Energie verwendet werden kann.

Wie in Kapitel 2.2.2 ausgeführt, setzt sich die für Verbrennungsprozesse relevante Wärmestromdichte aus Anteilen der Wärmeleitung und Enthalpiediffusion zusammen:

$$J = -\lambda \nabla T - \rho D \sum_i h_i \nabla y_i \quad (\text{mit Näherung } D_i = D) \quad (\text{A.8})$$

λ und D repräsentieren den Wärmeleit- bzw. Diffusionskoeffizienten. h_i entspricht der spezifischen totalen Enthalpie der Spezies i :

$$h_i = (\Delta h_f^0)_i + \int_{T_0}^T c_{p_i}(T) dT \quad (\text{A.9})$$

Diesen Zusammenhang in Gleichung A.8 eingesetzt, führt zu:

$$J = -\lambda \nabla T - \rho D \left[\sum_i \nabla y_i (\Delta h_f^0)_i + \sum_i \left(\nabla y_i \cdot \int_{T_0}^T c_{p_i}(T) dT \right) \right] \quad (\text{A.10})$$

Der Gradient der thermischen Energie kann mit Hilfe der Produktregel zerlegt werden [57]:

$$\nabla \int_{T_0}^T c_p(T) dT = c_p(T) \cdot \nabla T + \sum_i \left(\nabla y_i \cdot \int_{T_0}^T c_{p_i}(T) dT \right) \quad (\text{A.11})$$

Diesen Zusammenhang in Gleichung A.10 eingesetzt, ergibt:

$$J = -\lambda \nabla T - \rho D \left[\sum_i \nabla y_i (\Delta h_f^0)_i + \nabla \int_{T_0}^T c_p(T) dT - c_p(T) \cdot \nabla T \right] \quad (\text{A.12})$$

Die ersten beiden Terme der Klammer in Gleichung A.12 entsprechen dem Gradienten der totalen Enthalpie des Gemisches, so dass

$$J = -\lambda \nabla T - \rho D (\nabla h_i - c_p(T) \cdot \nabla T) \quad (\text{A.13})$$

geschrieben werden kann. Die Definition der Lewis-Zahl Le

$$Le = \frac{\lambda}{\rho c_p D} \quad (\text{A.14})$$

in Gleichung A.12 eingesetzt führt zu folgendem Ausdruck:

$$J = -\rho D \nabla h + \nabla T \cdot \left(\frac{\lambda}{Le} - \lambda \right) \quad (\text{A.15})$$

Die turbulente Wärmestromdichte lässt sich bei Vernachlässigung der Varianz der Temperatur einfach aus der laminaren Wärmestromdichte herleiten:

$$\tilde{J} = -\rho D_t \nabla \tilde{h} + \nabla \tilde{T} \cdot \left(\frac{\lambda_t}{Le_t} - \lambda_t \right) \quad (\text{A.16})$$

t bezeichnet hier turbulente Strömungseigenschaften. Bei turbulenten Strömungen wird meistens von der Annahme ausgegangen, dass die Enthalpiediffusion gleich schnell erfolgt wie die Wärmeleitung, d.h. es gilt $Le_t = 1$. Für Gleichung A.1 kann dann geschrieben werden:

$$\frac{\partial \tilde{\rho} \tilde{i}_{th}}{\partial t} + \nabla \cdot (\tilde{\rho} \tilde{u} \tilde{i}_{th}) = -\tilde{p} \nabla \cdot \tilde{u} - \nabla \cdot (\tilde{\rho} D_t \nabla \tilde{h}) + \tilde{\rho} \tilde{\epsilon} + \tilde{Q}^c + \tilde{Q}^s + \tilde{Q}^w \quad (\text{A.17})$$

Diese Gleichung hat den Vorteil, dass zur Quantifizierung der turbulenten Wärmestromdichte nicht die lokale Massenverteilung aller Einzelspezies erforderlich ist.

Anhang B

Semi-Analytische β -PDF Integration

Wie im Unterkapitel 4.4.4 dargestellt, hat sich bei der Applikation von Flamelet-Ansätzen die β -PDF zur Abbildung von heterogenen Gemischverteilungen etabliert. Neben der Quantifizierung der Flamelet-Lösungen im Mischungsbruchraum $\psi(Z)$, nimmt die numerische Lösung des Integrals

$$\tilde{\psi} = \int_Z \psi(Z) \tilde{P}_Z(Z) dZ \quad (\text{B.1})$$

einen wichtigen Stellenwert ein. Aus diesem Grund wurde für diese Arbeit ein semi-analytischer Ansatz zur Lösung des Integrals B.1 entwickelt, der im Folgenden vorgestellt werden soll.

Idealerweise lässt sich das Integral B.1 über seine Stammfunktion lösen. Entsprechend dem *Hauptsatz der Integral- und Differentialrechnung* besitzt jede stetige Funktion eine Stammfunktion. Diese ist allerdings oftmals schwierig oder sogar unmöglich durch bekannte Funktionen auszudrücken. Bei dem hier vorliegenden Problem kommt erschwerend hinzu, dass die Flamelet-Lösung $\psi(Z)$ in der Regel nicht funktional sondern diskret vorliegt. Die normierte, Favre-gemittelte β -PDF

$$\tilde{P}_Z(Z) = \gamma^{-1} \left(Z^{\alpha-1} \cdot (1-Z)^{\beta-1} \right) \quad \left(\text{mit } \gamma = \int_{Z=0}^{Z=1} Z^{\alpha-1} \cdot (1-Z)^{\beta-1} dZ \right) \quad (\text{B.2})$$

weist zudem folgende Singularitäten auf:

$$\begin{aligned} \alpha < 1 &\rightarrow \tilde{P}_Z(Z) \text{ uneigentlich für } Z = 0 \\ \beta < 1 &\rightarrow \tilde{P}_Z(Z) \text{ uneigentlich für } Z = 1 \\ \alpha < 1 \text{ und } \beta < 1 &\rightarrow \tilde{P}_Z(Z) \text{ uneigentlich für } Z = 0 \text{ und } Z = 1 \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

Insbesondere diese Singularitäten erschweren die Anwendung von numerischen Integrationsverfahren. Zudem muss zur Gewährleistung ausreichender Rechengenauigkeit eine sehr feine Diskretisierung vorgenommen werden.

Für eine analytische Problemlösung wird zunächst die Flamelet-Lösung im Mischungsbruchraum $\psi(Z)$ in der Form diskretisiert, dass alle Intervallbereiche durch Linearapproximationen abgebildet werden können. Für einen beliebigen Intervallbereich $[Z_1, Z_2]$ folgt dann:

$$\psi(Z)_{[Z_1, Z_2]} = (Z \cdot m + c)_{[Z_1, Z_2]} \quad (\text{B.4})$$

Diesen Ausdruck zusammen mit der Definition der β -PDF B.2 in Gleichung B.1 eingesetzt, führt zu einem funktionalen Ausdruck des Integrals:

$$\tilde{\psi} = \gamma \cdot \sum_{n=1}^{N-1} \int_{Z_n}^{Z_{n+1}} (Z \cdot m + c)_{[Z_n, Z_{n+1}]} Z^{\alpha-1} \cdot (1-Z)^{\beta-1} dZ \quad (\text{B.5})$$

Die vollständige β -Funktion γ lässt sich analytisch mit Hilfe der Gamma-Funktion $\Gamma(x) = \int_0^\infty e^{-t} t^{x-1} dt$ berechnen:

$$B(a, b) = \gamma = \frac{\Gamma(a) \cdot \Gamma(b)}{\Gamma(a+b)} \quad (\text{B.6})$$

Zur semi-analytischen Lösung der normierten, unvollständigen β -Funktion $\bar{B}_Z(a, b)$

$$\bar{B}_Z(a, b) = \gamma^{-1} \cdot \int_0^Z Z^{\alpha-1} (1-Z)^{\beta-1} dZ \quad (\text{B.7})$$

wird in [97] ein Ansatz geliefert, der auf einer Kettenbruchentwicklung basiert.

Unter Ausnutzung der Linearität des Integrals B.5 und etwas Algebra lässt sich nun mit Hilfe der Algorithmen für B.6 und B.7 die Integration semi-analytisch durchführen.

Das hier vorgestellte Berechnungsverfahren gewährleistet eine maximale Genauigkeit zur Lösung der β -PDF Integration. Singularitäten werden direkt aufgelöst. Die Lösungsalgorithmen zeigen ein schnelles Konvergenzverhalten. Über eine adaptive Diskretisierung der Flamelet-Lösung im Mischungsbruchraum kann das Verfahren bzgl. des Rechenaufwands optimiert werden.

Anhang C

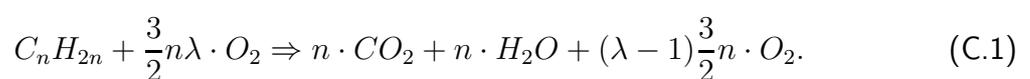
Berücksichtigung von Realgaseffekten bei der 3D-CFD Simulation

Zur Schließung der Erhaltungsgleichungen der Strömungsmechanik werden unter anderem thermodynamische Gesetzmäßigkeiten herangezogen (siehe Abschnitt 2.4.1). Dabei wird in der Regel von idealem Gasverhalten ausgegangen. Aufgrund des Trends hin zur Aufladung im Zuge des *Downsizing* steigen die Drücke jedoch immer weiter an. Bei Dieselmotoren sind heute Spitzendrücke über 200 bar keine Seltenheit mehr. Bei solch hohen Drücken (und bereits bei niedrigeren Druckniveaus) kann der Einfluss von Realgaseffekten nicht mehr vernachlässigt werden. Idealgas-charakterisierende Idealisierungen und die daraus abgeleiteten thermodynamischen Gesetze, wie die ideale Gasgleichung und die kalorische Zustandsgleichung als reine Funktion der Temperatur sind folglich für diese Zustände nicht korrekt, sondern sie stellen nur grobe Näherungen dar.

Basierend auf einem Realgasmodell von Zacharias [124], das sich bei der Arbeitsprozessrechnung etabliert hat, wurde im Rahmen dieser Arbeit ein Ansatz entwickelt, der es erlaubt, Realgaseffekte auch für 3D-CFD Rechnungen zu berücksichtigen.

Realgasansatz nach Zacharias

Bereits 1938 hat *Justi* in [47] einen empirischen Polynomansatz zur Beschreibung der spezifischen inneren Energie von Verbrennungsgasen in Abhängigkeit von Temperatur und Gemischzusammensetzung angegeben. In Anlehnung daran hat *Zacharias* in [124] Approximationsgleichungen für die geschlossene, analytische Berechnung vom thermodynamischen Verhalten von Verbrennungsgasen hergeleitet. Die thermodynamischen Gaseigenschaften beschreibt er durch die Zustandsgrößen Druck p und Temperatur T . Da die Realgaseigenschaften von Verbrennungsgasen betrachtet werden, musste noch eine dritte unabhängige Variable eingeführt werden, damit die Zusammensetzung des Gases erfasst wird. Er bedient sich hierbei dem Luftgehalt r_L , der jeweils angibt, wie viel verfügbare Luft sich nach der Verbrennung im Verbrennungsgas befindet¹. Dem zugrunde steht die Reaktionsgleichung für Alkene



¹Gemäß der Vorstellung, dass der Brennstoff mit seiner Mindestluftmenge reagiert und das entstandene Verbrennungsgas aus stöchiometrischem Gas und Luft besteht.

Man kann bei bekanntem Luftverhältnis λ die Sauerstoffkonzentration nach der Verbrennung mit

$$Y_{O_2} = \frac{(\lambda - 1) \cdot Y_{O_2}^{(0)}}{\lambda + 1/\lambda_{st}} \quad (C.2)$$

berechnen, wobei $Y_{O_2}^{(0)}$ die Sauerstoffkonzentration reiner Luft darstellt. Demnach ergibt sich der Luftgehalt aus

$$r_L = \frac{Y_{O_2}}{Y_{O_2}^{(0)}}. \quad (C.3)$$

Für die thermische Zustandsgleichung folgt dann

$$\frac{pv}{RT} = Z(p, T, r_L), \quad (C.4)$$

wobei Z den Realgasfaktor darstellt. Die kalorische Zustandsgleichung für die spezifische thermische innere Energie lautet

$$i_{th} = i_{th}(p, T, r_L). \quad (C.5)$$

Zacharias unterteilt seinen Realgasansatz in zwei Temperaturbereiche. Damit verfolgte er das Ziel, zumindest im unteren Temperaturbereich eine bessere bzw. zutreffendere Verbrennungsdarstellung zu liefern als es mit der idealen Gasgleichung möglich war²:

1. $200 \text{ K} \leq T \leq 1500 \text{ K}$: Der Realgaseinfluss wird in Abhängigkeit der Molekülgrößen und der Kohäsionskräfte durch eine modifizierte Beattie-Bridgeman-Zustandsgleichung für Gasmischungen beschrieben. Dabei ergeben sich die thermodynamischen Eigenschaften und ihre Druckabhängigkeit aus der Zustandsgleichung.
2. $1500 \text{ K} < T \leq 6000 \text{ K}$: Die chemischen Reaktionen, innermolekulare Vorgänge, Dissoziationen und Assoziationen von bis zu 20 Reaktionsprodukten werden unter Zugrundelegung der idealen Zustandsgleichung berücksichtigt.

In beiden Bereichen werden keine Ionisationen und keine Phasenänderungen beachtet.

Zacharias beschreibt mit seinem Modell die Realgaseigenschaften für Gasgemische entsprechend der Bruttoreaktion C.1. Dabei berücksichtigt er implizit die Mischungsregeln für die Virialkoeffizienten (siehe [124]). Dies ist nicht trivial, da aufgrund der Wechselwirkungen verschiedenartiger Spezies, für reale Gase die Mischungsregeln von *Avogadro* $\sum_i y_i = 1$ bzw. *Dalton* $\sum_i p_i = p$ unzulässig sind.

Einbindung in 3D-CFD Strömungslöser

Bei KIVA werden standardmäßig die thermische und kalorische Zustandsgleichung ideal behandelt. Um den Codeeingriff minimal zu halten, werden mit Hilfe des Realgasmodells von Zacharias Korrekturterme in Abhängigkeit der gemittelten Zustandsgrößen Druck \bar{p} , Temperatur \tilde{T} und Luftgehalt \tilde{r}_l formuliert. Die ideale thermische Zustandsgleichung wird um einen Realgasfaktor $\tilde{Z}(\bar{p}, \tilde{T}, \tilde{r}_l)$ erweitert, während zur idealen spezifischen inneren Energie ein Korrekturterm $\Delta \tilde{i}_{th}(\bar{p}, \tilde{T}, \tilde{r}_l)$ addiert wird.

²Es waren in der damaligen Literatur keine experimentellen Daten zu finden und er selbst hatte nicht die Möglichkeit Experimente durchzuführen, um seinen Ansatz im ganzen Temperaturbereich zu validieren.

Für die reale thermische Zustandsgleichung folgt damit³:

$$\bar{p}\bar{v} = \tilde{Z}(\bar{p}, \tilde{T}, \tilde{r}_l) \frac{\mathfrak{R}}{\bar{M}} \tilde{T} \quad (\text{C.6})$$

\bar{M} steht für die mittlere molare Masse des Gemisches und \mathfrak{R} für die universelle Gaskonstante.

Die reale spezifische innere Energie berechnet sich aus:

$$\tilde{i}_{th}(\bar{p}, \tilde{T}) = \underbrace{\sum_i \tilde{y}_i \cdot \int_{T_0}^{\tilde{T}} \bar{c}_v(\tilde{T}) d\tilde{T}}_{i_{th} \text{ ideal}} + \underbrace{\Delta \tilde{i}_{th}(\bar{p}, \tilde{T}, \tilde{r}_l)}_{\text{Korrekturterm aus Zacharias}} \quad (\text{C.7})$$

Für die reale spezifische Wärmekapazität \bar{c}_v gilt folglich:

$$\bar{c}_v(\bar{p}, \tilde{T}) = \frac{\partial \tilde{i}_{th}(\bar{p}, \tilde{T})}{\partial \tilde{T}} \quad (\text{C.8})$$

Für $\tilde{Z} = 1$ und $\Delta \tilde{i}_{th}(\bar{p}, \tilde{T}, \tilde{r}_l) = 0$ beschreiben die Zustandsgleichungen C.6 und C.7 ideales Gasverhalten.

Die Einführung von Korrekturtermen für die idealen Zustandsgleichungen ist für die Implementierung in 3D-Strömungslöser sehr vorteilhaft, da numerisch leicht umsetzbar. Der Mehraufwand an Rechenleistung für das Realgasmodell konnte in [118] durch die Applikation eines modifizierten Newton-Verfahrens zur Lösung des gekoppelten, nicht-linearen Gleichungssystems aus thermischer C.6 und kalorischer C.8 Zustandsgleichung⁴ und einer adaptiven Tabellierung der Ergebnisse der Approximationsgleichungen minimiert werden. Das Resultat ist ein Rechenmehraufwand von etwa 10 Prozent gegenüber Idealgasrechnungen.

Das Realgasmodell von Zacharias ist zur Beschreibung von mageren Gemischen mit $\lambda \geq 1$ ausgelegt und daher für dieselmotorische Verbrennungsprozesse weitgehend einsetzbar. Lediglich in der Einspritzphase liegen lokal geringe Kraftstoffkonzentrationen vor. Diese werden in der vorliegenden Arbeit als ideal behandelt. Der dadurch implizierte Fehler ist als vernachlässigbar einzustufen, da zum einen die Kraftstoffkonzentrationen meist sehr gering sind, und zum anderen der Kraftstoff durch die Reaktion mit Sauerstoff schnell zu Produkten umgesetzt wird.

³Annahme ähnlicher Molmassen (Überschusskomponente Stickstoff), so dass die Fluktuationen der mittleren Molmassen vernachlässigbar ist.

⁴Ursache dafür ist die funktionale Abhängigkeit der inneren Energie realer Gase vom Druck und der Temperatur.

Literaturverzeichnis

- [1] Abraham,J., Bracco,F., Reitz,R.D.: *Comparisons of Computed and Measured Premixed Charge Engine Combustion*, Combust. and Flame, 60:309-322, 1985
- [2] Abraham,J., Bracco,F.: *Simple Modelling of Autoignition in Diesel Engines for 3-D Computations*, SAE Paper 932656, 1993
- [3] Amsden,A.A., O'Rourke,P.J., Butler,T.D.: *KIVA-II: A Computer Program for Chemically Reactive Flows with Sprays*, Los Alamos Report LA-11560-MS, Los Alamos National Laboratory, 1989
- [4] Amsden,A.A.: *KIVA-3v: A KIVA Program with Block-Structured Mesh for Complex Geometries*, Los Alamos Report LA-12503-MS, Los Alamos National Laboratory, 1993
- [5] Amsden,A.A.: *KIVA-3v: A Block-Structured KIVA Program for Engines with Vertical or Canted Valves*, Los Alamos Report LA-13313-MS, Los Alamos National Laboratory, 1997
- [6] Barths,H., Antoni,C., Peters,N.: *Three-Dimensional Simulation of Pollutant Formation in a DI-Diesel Engine Using Multiple Interactive Flamelets*, SAE Paper 982459, 1998
- [7] Barths,H., Pitsch,H., Peters,N.: *Three-Dimensional Simulation of DI Diesel Combustion and Pollutant Formation Using a Two-Component Reference Fuel*, Oil and Gas Science and Technology, 2, Vol. 54, 1999
- [8] Barths,H.: *Simulation of Diesel Engine and Gas Turbine Combustion Using Multiple Flamelets with Detailed Chemistry*, Dissertation, Universität Aachen, 2000
- [9] Bergeron,C.A., Hallett,W.L.H.: *Ignition Characteristics of Liquid Hydrocarbon Fuels as Single Droplets*, The Canadian Journal of Chemical Engineering, V.67, p.142-149, 1989
- [10] Bilger,R.W.: *Turbulent Diffusion Flames*, Ann. Rev. Fluid Mech., 21:101-35, 1989
- [11] Bockhorn,H.: *Soot Formation in Combustion*, Springer-Verlag, Springer Series in Chemical Physics 59, Berlin, 1994
- [12] Bollig,M.: *Berechnung laminarer Kohlenwasserstoffflammen im Hinblick auf die Stickoxidbildung in Verbrennungsmotoren*, Dissertation, Universität Aachen, 1998
- [13] Boussinesq,J.: *Théorie de l'Écoulement Tourbillant*, Mem présenté par divers Savants Acad. Sci. Inst. Fr., 23, Paris, 1877
- [14] Burke,S.D., Schumann,T.E.W.: *Diffusion Flames*, Ind. Eng. Chem., 20, p.998, 1928

- [15] Correa,S.M., Pope,S.B.: *Comparison of a Monte Carlo Pdf/Finite Volume Mean Flow Model with Bluff Body Raman Date*, Twenty-Fourth Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh, S.279-285, 1992
- [16] Curl,R.L.: *Dispersed Phase Mixing: I. Theory and Effects in Simple Reactors*, Journal of the American Institute of Chemical Engineers, 9(2), S.175-181, 1963
- [17] Curtiss,C.F., Hirschfelder,J.O.: *Transport Properties of Multicomponent Gas Mixtures*, J.Chem.Phys.,Vol.17, 1979
- [18] Dederichs,A., Balthasar,M., Mauß,F.: *Modeling of NO_x and Soot Formation in Diesel Combustion*, Oil and Gas Science and Technology, 2, Vol. 54, 1999
- [19] Dopazo,C.: *Relaxation of initial probability Density Functions in Turbulent Convection of Scalar Fields*, Physics of Fluids, 22(1), S.20-30, 1979
- [20] Dukowicz,J.K.: *A Particle-Fluid Numerical Model for liquid Sprays*, J. of Comput. Phy., Band 35, Nr.2, S.229-253, 1980
- [21] Favre,A.: *Statistical equations of turbulent gases*, Problems of hydrodynamics and continuum mechanics, S.231-266, 1969
- [22] Ferziger,J.H.: *Higher Level Simulation of Turbulent Flows*, Computational Methods for Turbulent, Transonic and Viscous Flows, Hemisphere Publishing Corporation, Washington DC, 1983
- [23] Ferziger,J.H., Perić,M.: *Computational Methods for Fluid Dynamics*, Springer-Verlag, 1996
- [24] Fieweger,K.: *Selbstzündung von Kohlenwasserstoff/Luft-Gemischen unter motorischen Randbedingungen*, Dissertation, Universität Aachen, 1996
- [25] Fraser,R.A., Felton,P.G., Bracco,F.V., Santavicca,D.A.: *Preliminary Turbulence Length Scale Measurements in an I.C.Engine*, SAE Paper 860021, 1986
- [26] Frenklach,M., Harris,S.: *Aerosol Dynamics Modeling Using the Method of Moments*, J.Colloid Interface Sci.,Vol.118,No.1, 1987
- [27] Frenklach,M., Wang,H.: *Detailed Modelling of Soot Particle Nucleation and Growth*, Twenty-Third Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh, S.1559, 1990
- [28] Frohn,A.: *Einführung in die technische Thermodynamik*, 2. überarb. Aufl., Aula-Verlag, ISBN 3-89104-497-6, Wiesbaden, 1989
- [29] Gärtner,U., Oberacker,H., König,G.: *Der Einsatz moderner Verbrennungsfilmtechnik bei der Brennverfahrensabstimmung schwerer Nfz-Dieselmotoren*, Motorische Verbrennung: Aktuelle Probleme und Lösungsansätze, Haus der Technik, Essen, 1999
- [30] Gärtner,U.: *Die Simulation der Stickoxid-Bildung in Nutzfahrzeug-Dieselmotoren*, Dissertation, Universität Darmstadt, 2001

- [31] Girimaji, S.S.: *Assumed β -pdf Model for Turbulent Mixing: Validation and Extension to Multiple Scalar Mixing*, Combustion Science and Technology, 78, S.177-196, 1991
- [32] Hallmann, M., Scheurlen, M., Wittig, S.: *Computation of Turbulent Evaporating Sprays: Eulerian vs. Lagrangian Approach*, ASME Winter Annual Meeting, Cincinnati, 1993
- [33] Halstead, M., Kirsch, L., Prothero, A., Quinn, C.: *A Mathematical Model for Hydrocarbon Autoignition at High Pressures*, Proc. Roy. Soc. London, A 346, S.515-538, 1975
- [34] Hasse, C., Barths, H., Peters, N.: *Modelling the Effect of Split Injections in Diesel Engines Using Representative Interactive Flamelets*, SAE Paper 1999-01-3547, 1999
- [35] Hasse, C., Peters, N.: *Manual for RIF Fortran Version 3.7.1*, Institut für Technische Mechanik, 2002
- [36] Heel, B.: *Dreidimensionale Simulation der Strömung und Verbrennung im Zylinder eines Otto-Forschungsmotors*, Dissertation, Universität Karlsruhe, 1997
- [37] Helmholtz, H.: *Über die Integrale der hydromechanischen Gleichung*, Crelles J., 55, 25, 1858
- [38] Hergart, C.A., Barths, H., Peters, N.: *Modeling the Combustion in a Small-Bore Diesel Engine Using a Method Based on Representative Interactive Flamelets*, SAE Paper 1999-01-3550, 1999
- [39] Hergart, C.A.: *Modelling Combustion and Soot Emissions in a Small-Bore Direct-Injection Diesel Engine*, Dissertation, Universität Aachen, 2001
- [40] Heywood, J.B.: *Internal Combustion Engine Fundamentals*, McGraw-Hill, New York, 1988
- [41] Hirsch, C.: *Numerical Computation of Internal and External Flows*, Vol.1 Fundamentals of Numerical Discretisation, Wiley Sons: Chichester, New York, 1988
- [42] Hirschfelder, J.O., Curtiss, C.F., Bird, R.B.: *Molecular Theory of Gases and Liquids*, Wiley, New York, 1954
- [43] Janicka, J., Peters, N.: *Prediction of Turbulent Jet Diffusion Flame Lift-Off using a PDF Transport Equation*, 19th Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh, S.367-374, 1982
- [44] Johnson, N., Amsden, A.A., Naber, J., Siebers, D.: *Three-Dimensional Computer Modeling of Hydrogen Injection and Combustion*, 95 SMC Simulation Multiconference, Phoenix, 1995
- [45] Jones, W.P., Launder, B.E.: *The Prediction of Laminarization with a Two-Equation Model of Turbulence*, Int. J. Heat Mass Transfer, Vol.15, S.301-314, 1972
- [46] Jones, W.P., Whitelaw, J.H.: *Calculation Methods for Turbulent Flows: A Review*, Combust. and Flame, Vol.48, S.1-26, 1982

- [47] Justi,E.: *Spezifische Wärme, Enthalpie, Entropie und Dissoziation technischer Gase*, Springer-Verlag, 1938
- [48] Karlson,A., Magnusson,I., Balthasar,M., Mauß,F.: *Simulation of Soot Formation under Diesel Engine Conditions Using a Detailed Kinetic Soot Model*, SAE Paper 981022, 1998
- [49] Kim,J.S., Williams,F.A.: *Structures of Flow and Mixture Fraction Fields for Counterflow Diffusion Flames with Small Stoichiometric Mixture Fractions*, SIAM J. Appl. Math., 53, pp. 1551-1566, 1993
- [50] Kolmogorov,A.N.: *Equations of Turbulent Motions in an Incompressible Fluid*, Izv. Akad. Nauk. UDSSR, Seria Fizicheska Vi., 1942
- [51] Kong,S.C., Han,Z., Reitz,R.D.: *The Development and Application of a Diesel Ignition and Combustion Model for Multidimensional Engine Simulation*, SAE Paper 950278, 1995
- [52] Krüger,C., Otto,F., Wirbeleit,C., Willand,J., Peters,N.: *Incororation 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
- [53] Krüger,C.: *Validierung eines 1D-Spraymodells zur Simulation der Gemischbildung in direktinspritzenden Dieselmotoren*, Dissertation, Universität Aachen, 2001
- [54] Krüger,C., Steiner,R., Kraus,E., Otto,F.: *Demands on CFD models of Mixture Preparation and Combustion in IC Engines for Industrial Purposes*, Fifth World Congress on Computational Mechanics, Eds.:H.A.Mang,F.G.Rammerstorfer,J.Eberhardsteiner, 2002
- [55] Launder,B.E., Spalding,D.B.: *Mathematical Models of Turbulence*, Academic Press, New York, 1972
- [56] Launder,B.E., Reece,G.J., Rodi,W.: *Progress in the Development of a Reynoldsstress Turbulence Closure*, J.Fluid. Mech., Vol.68, Pt 3, S.537-566, 1975
- [57] Libby,P.A., Williams,F.A.: *Fundamental aspects of turbulent reacting flows. In: P.A.Libby,F.A.Williams: Turbulent reacting flows*, Springer-Verlag, 1980
- [58] Lundgren,T.S.: *Distribution Functions in the Statistical Theory of Turbulence*, Physics of Fluids, 10(5), S.969-975, 1967
- [59] Maas,U., Pope,S.: *Implementation of Simplified Chemical Kinetics based on Low-Dimensional Manifolds in Composition Space*, Twenty-Fourth Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh, S.103-112, 1992
- [60] Maas,U.: *Automatische Reduktion von Reaktionsmechanismen zur Simulation reaktiver Strömungen*, Habilitation, Universität Stuttgart, Stuttgart, 1993
- [61] Maas,U.: *Reaktionskinetik und reduzierte Mechanismen*, Vortragsdruck, Kurzlehrgang: Grundlagen und moderne Anwendungen der Verbrennungstechnik, Universität Erlangen, 2001

- [62] Magnussen, B.F., Hjertager, B.H.: *On Mathematical Modeling of Turbulent Combustion with Special Emphasis on Soot Formation and Combustion*, Sixteenth Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh, S.719-729, 1977
- [63] Mauß, F., Keller, D., Peters, N.: *A Lagrangian Simulation of Flamelet Extinction and Re-ignition in Turbulent Jet Diffusion Flames*, Twenty-Third Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh, S.693-698, 1990
- [64] Mauß, F.: *Entwicklung eines kinetischen Modells der Rußbildung mit schneller Polymerisation*, Dissertation, Universität Aachen, 1998
- [65] Mauß, F., Balthasar, M., Dederichs, A.: *The flamelet Library of Source Terms for Soot Formation Including the Effect of Exhaust Gas Recirculation*, Software Documentation
- [66] Mayer, T.: Dissertation in Bearbeitung, Universität Stuttgart
- [67] Merker, G.P., Stiesch, G.: *Technische Verbrennung Motorische Verbrennung*, Teubner Verlag, Stuttgart, 1999
- [68] Merker, G.P., Schwarz, C.: *Technische Verbrennung: Simulation verbrennungsmotorischer Prozesse*, Teubner Verlag, Stuttgart, 2001
- [69] Michels, U.: *Verbesserte 3D-Simulation der dieselmotorischen Verbrennung durch Applikation des ICAS-Modells für die Gemischbildung*, Diplomarbeit, Institut für Technische Mechanik, RWTH Aachen, 2001
- [70] Moss, J.B.: *Simultaneous Measurements of Concentration and Velocity in an Open Premixed Turbulent Flame*, Combustion Science and Technology, 55:115, 1979
- [71] Müller, U.C., Peters, N.: *Global Kinetics for n-Heptane Ignition at High Pressures*, Twenty-Fourth Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh, S.777-784, 1992
- [72] Müller, U.C.: *Reduzierte Reaktionsmechanismen für die Zündung von n-Heptan und iso-Oktan unter motorrelevanten Bedingungen*, Dissertation, Universität Aachen, 1993
- [73] Nagle, J., Strickland-Constable, R.F.: *Oxidation of Carbon between 1000 – 2000°C*, Fifth Carbon Conference, Vol.1, pp.137-145, Oxford, 1962
- [74] Nehse, N., Warnatz, J., Chevalier, C.: *Kinetic Modeling of the Oxidation of Large Aliphatic Hydrocarbons*, Twenty-Sixth Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh, S.773-780, 1996
- [75] Nishida, K., Hiroyasu, H.: *Simplified Three-Dimensional Modeling of Mixture Formation and Combustion in a DI Diesel Engine*, SAE Paper 890269, 1989
- [76] O'Rourke, P.J., Amsden, A.A.: *Implementation of a Conjugate Residual Iteration in the KIVA Computer Program*, Los Alamos Report LA-10849-MS, Los Alamos National Laboratory, 1986

- [77] Olikara,C., Borman,G.L.: *A Computer Program for Calculating Properties of Equilibrium Combustion Products with Some Applications to I.C. Engines*, SAE Paper 750465, 1975
- [78] Otto,F., Krüger,C., Wirbeleit,C., Willand,J.: *Probleme und Lösungsansätze bei der Simulation der dieselmotorischen Einspritzung*, Meß- und Versuchstechnik für die Entwicklung von Verbrennungsmotoren, Haus der Technik, Essen, 1999
- [79] Patterson,M.A., Kong,S.C., Hampson,G.J., Reitz,R.D.: *Modeling the Effects of Fuel Injection Characteristics on Diesel Engine Soot and NO_x Emissions*, SAE Paper 940523, 1994
- [80] Peters,N.: *Laminar Diffusion Flamelet Models in Non-Premixed Turbulent Combustion*, Prog. Energy Combustion Sci., 10, S.319-339, 1984
- [81] Peters,N.: *Laminar Flamelet Concepts in Turbulent Combustion*, Twenty-First Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh, S.1231-1250, 1986
- [82] Peters,N.: *Length Scales in Laminar and Turbulent Flames*, in: Progress in Astronautics and Aeronautics, Vol.135, 1991
- [83] Peters,N.: *Strömungs- und Temperaturgrenzschichten*, Vorlesungsumdruck des ITM der RWTH Aachen, Aachen, 1993
- [84] Peters,N.: *Four Lectures on Turbulent Combustion*, ERCOFTAC Summer School, Aachen, 1997
- [85] Peters,N.: *Turbulent Combustion*, Cambridge Press, 2000
- [86] Pischinger,S.: *Verbrennungsmotoren: Band 2*, Vorlesungsumdruck, Lehrstuhl für Verbrennungskraftmaschinen RWTH Aachen, 21.Auflage, 2000
- [87] Pitsch,H., Wan,Y.P., Peters,N.: *Numerical Investigation of Soot Formation and Oxidation Under Diesel Engine Conditions*, SAE Paper 952357, 1995
- [88] Pitsch,H., Barths,H., Peters,N.: *Three-Dimensional Modeling of NO_x and Soot Formation in DI-Diesel Engines Using Detailed Chemistry Based on the Interactive Flamelet Approach*, SAE Paper 962057, 1996
- [89] Pitsch,H., Peters,N.: *A Consistent Flamelet Formulation for Non-Premixed Combustion Considering Differential Diffusion Effects*, Combust. and Flame, 114:26-40, 1998
- [90] Pitsch,H., Chen,M., Peters,N.: *Unsteady Flamelet Modeling of Turbulent Hydrogen/Air Diffusion Flames*, Twenty-Seventh Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh, S.1057-1064, 1998
- [91] Pitsch,H.: *Modellierung der Zündung und Schadstoffbildung bei der dieselmotorischen Verbrennung mit Hilfe eines interaktiven Flamelet-Modells*, Dissertation, Universität Aachen, 1998

- [92] Pitsch,H.: *Extended flamelet model for LES of non-premixed combustion*, Center for Turbulence Research, Annual Research Briefs 2000 (<http://ctr.stanford.edu/ResBriefs00/Pitsch1.pdf>)
- [93] Poinsot,T., Veynante,D.: *Theoretical and Numerical Combustion*, R.T.Edwards, ISBN 1-930217-05-6, Philadelphia, 2001
- [94] Pope,S.B.: *A Monte Carlo Method for the PDF Equations of Turbulent Reactive Flows*, Combustion Science and Technology, 25, S.159-174, 1981
- [95] Pope,S.B.: *PDF Methods for Turbulent Reactive Flows*, Progress in Energy and Combustion Science, 11, S.119-192, 1985
- [96] Pope,S.B.: *Computations of Turbulent Combustion: Progress and Challenges*, Twenty-Third Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh, S.591-612, 1990
- [97] Press,W.H. et.al.: *Numerical Recipes in Fortran 77: The Art of Scientific Computing*, Cambridge Press, 1986-1992
- [98] 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
- [99] Rao,S., Rutland,C.J.: *A Flamelet Time Scale Combustion Model for Turbulent Combustion in KIVA*, 12th Int. Multidim. Engine Modeling User's Group Meeting at the SAE Congress 2002
- [100] Reitz,R.D.: *Modeling Atomization Processes in High-Pressure Vaporizing Sprays*, Atomization and Spray Technology, Band 3, S.309-337, 1987
- [101] Reveillon,J., Vervisch,L.: *Spray Vaporization in Nonpremixed Turbulent Combustion Modeling: A Single Droplet Model*, Combust. and Flame, 121:75-90, 2000
- [102] Rhodes,R.P.: *Turbulent Mixing in Non-Reactive and Reactive Flows*, Plenum Press, New York, S 235, 1979
- [103] Rotta,J.C.: *Turbulente Strömungen*, Teubner Verlag, Stuttgart, 1972
- [104] Schlichting,H.: *Boundary layer theory*, McGraw-Hill, New York, 7th ed, 1979
- [105] Shepherd,I.G., Moss,J.B., Bray,K.N.C.: *Turbulent Transport in a Confined Premixed Flame*, 19th Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh, S.423-431, 1982
- [106] 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., Qin,Z.; [http : //www.me.berkeley.edu/gri_mech/](http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/)

- [107] Spalding, D.B.: *Mixing and Chemical Reaction in Steady Confined Turbulent Flames*, Thirteenth Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh, S.649-657, 1971
- [108] Spicher, U.: *Skript zur Vorlesung Verbrennungsmotoren A*, Institut für Kolbenmaschinen, Universität Karlsruhe, 1997
- [109] Steiner, R., Bauer, C., Krüger, C., Otto, F., Maas, U.: *3D-Simulation of DI-Diesel Combustion applying a Progress Variable Approach accounting for Complex Chemistry*, SAE Paper 2004-01-0106, 2004
- [110] Streule, T.: *Dreidimensionale Simulation von Selbstzündung, Verbrennung und Schadstoffbildung in DE-Dieselmotoren*, Dissertation, Universität Karlsruhe, 2000
- [111] Tatschl, R., Künsberg Sarre, C.v., Berg, E.v.: *IC-Engine Spray Modelling - Status and Outlook*, 12th Int. Multidim. Engine Modeling User's Group Meeting at the SAE Congress 2002
- [112] Taylor, G.I.: *Statistical Theory of Turbulence*, Proc. Roy. Soc. London, A 151, S.421-478, 1935
- [113] Thévenin, D., Behdendt, F., Maas, U., Przywara, B., Warnatz, J.: *Development of a Parallel Direct Simulation Code to Investigate Reactive Flows*, Computers and Fluids 25, 5, S.485-496, 1996
- [114] Truckenbrodt, E.: *Fluidmechanik, Band 1*, Springer-Verlag, Berlin, 3.Auflage, 1992
- [115] Wan, Y.: *Numerical Study of Transient Fuel Sprays with Autoignition and Combustion under Diesel-Engine relevant Conditions*, Dissertation, Universität Aachen, 1997
- [116] Wan, Y., Peters, N.: *Scaling of Spray Penetration with Evaporation*, Atomization and Sprays, Band 9, S.111-132, 1999
- [117] Warnatz, J., Maas, U., Dibble, R.W.: *Verbrennung: Physikalisch-Chemische Grundlagen, Modellierung und Simulation, Experimente, Schadstoffentstehung*, Springer-Verlag, 1997
- [118] Wenzel, P.: *Berücksichtigung von Realgaseffekten bei der 3D-CFD Simulation innermotorischer Verbrennungsvorgänge*, Diplomarbeit, Institut für Thermodynamik der Luft- und Raumfahrttechnik, Universität Stuttgart, 2003
- [119] Williams, F.A.: *Spray Combustion and Atomization*, Phys. Fluids, Band 1, S.541-545, 1958
- [120] Williams, F.A.: *Recent Advances in Theoretical Description of Turbulent Diffusion Flames*, in Turbulent Mixing in Non-Reactive and Reactive Flows, Plenum Press, p.189, 1975
- [121] Wolfer, H.: *Der Zündverzug im Dieselmotor*, VDI Forschungsheft 392, 1938
- [122] Woschni, G.: *Die Berechnung der Wandwärmeverluste und der thermischen Belastung der Bauteile von Dieselmotoren*, MTZ 31(12), p.491-499, 1970

-
- [123] Yoshizaki,T., Nishida,K., Hiroyasu,H.: *Approach to Low NO_x and Smoke Emission by Using Phenomenological Simulation*, SAE Paper 930612, 1993
- [124] Zacharias,F.: *Analytische Darstellung der thermodynamischen Eigenschaften von Verbrennungsgasen*, Dissertation, Technische Universität Berlin, 1966
- [125] Zeldovich,J.: *The Oxidation of Nitrogen in Combustion and Explosions*, Acta Physico-chimica URSS, Vol. XXI No.4, 1946
- [126] Zhao,F., Asmus,T., Assanis,D., Dec,J., Eng,J., Najt,P.: *Homogeneous Charge Compression Ignition (HCCI) Engines: Key Research and Development Issues*, Society of Automotive Engineers, 2003
- [127] Zierep,J.: *Grundzüge der Strömungsmechanik*, G.Braun, Karlsruhe, 3.Auflage, 1987